

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

Valor de Perron Combinatório de Árvores

por

Lucas Gabriel Mota da Silveira

Dissertação submetida como requisito parcial para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Profa. Dra. Virgínia Maria Rodrigues

Orientadora

Porto Alegre, Outubro de 2018

Valor de Perron Combinatório de Árvores

por

Lucas Gabriel Mota da Silveira

Dissertação submetida por Lucas Gabriel Mota da Silveira¹ como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

pelo Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática e Estatística da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Professora Orientadora:

Profa. Dra. Virgínia Maria Rodrigues

Banca Examinadora:

Profa. Dra. Renata Raposo Del-Vecchio

Profa. Dra. Juliane Golubinski Capaverde

Prof. Dr. Rodrigo Orsini Braga

Prof. Dr. Vilmar Trevisan

¹Bolsista do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)

Sumário

Lista de Figuras	v
Lista de Tabelas	viii
1 INTRODUÇÃO	1
2 NOÇÕES PRELIMINARES	4
2.1 Teoria de Grafos	4
2.2 Teoria de Matrizes	11
2.3 Teoria Espectral de Grafos	20
3 VALOR DE PERRON	33
3.1 Conectividade Algébrica	33
3.2 Vetor de Fiedler	38
3.3 Valor de Perron	45
4 VALOR DE PERRON COMBINATÓRIO	56
4.1 Matriz Caminho	56
4.2 Valor de Perron Combinatório	60
4.3 Cotas para o Valor de Perron	70
4.4 Centopeias e o Valor de Perron Combinatório	85
4.5 Ordenamento de Árvores com Diâmetro 3	96

4.6	Buscas Computacionais	101
5	CONCLUSÃO	104
6	Referências	106

Lista de Figuras

1	Grafo G com 5 vértices e 5 arestas.	4
2	Grafo complementar ao grafo da Figura 1.	5
3	Grafo orientado.	6
4	Caminho P_5	6
5	Ciclo C_4	7
6	Grafo G e subgrafo G'	7
7	Grafo G e subgrafo induzido G'	8
8	Grafo G com componentes conexas P_3 e C_4	8
9	Árvore T	8
10	Floresta com componentes conexas P_2 e P_3	9
11	Grafo completo K_5	9
12	Grafo bipartido completo $K_{2,3}$	9
13	Estrela S_6	10
14	Centopeia $C(1, 3, 0, 2)$	10
15	Grafo G e sua matriz de adjacências $A(G)$	20
16	Grafo G do Exemplo 2.2.	27
17	Grafo da Figura 16 orientado.	27
18	Um grafo G , a estrela S_5 e o caminho P_5	33
19	Grafos G_1 , G_2 e $K_5 = G_1 \cup G_2$	34

20	Grafo G e subgrafos G_1 e G_2	36
21	Árvore T com numeração característica.	39
22	Árvore T do Tipo I com numeração característica.	42
23	Árvore T' do Tipo I com numeração característica.	43
24	Árvore T'' do Tipo I com numeração característica.	43
25	Árvores T e T' , respectivamente, com numerações caracterís- ticas.	43
26	Árvore do Tipo II com numeração característica.	44
27	Árvore T com numeração característica.	44
28	Árvore T e a matriz L_{10}^{-1}	48
29	Árvores T e T' , sendo T' do Tipo II.	50
30	Árvores T , T' e T'' , sendo todas do Tipo I.	52
31	Caminho P_{2n+1} com vértice característico v_{n+1}	53
32	Árvore T com vértice característico v_2	54
33	Árvore T com raiz r	57
34	Árvore T e suas matrizes N e M	62
35	Árvore T	62
36	Árvore T com vetor distância $d = (1, 2, 2, 2, 3, 3, 3, 3)$	64
37	Estrela generalizada e estrela generalizada regular $S_{3,4}$	67
38	Estrela generalizada regular $S_{3,4}$	70

39	Erros relativos de $\rho_c(P_n)$ e $\pi(P_n)$	80
40	Centopeia C_d	87
41	Árvores $T(s, t)$ e $T(s - 1, t + 1)$ de diâmetro 3.	96

Lista de Tabelas

1	Cotas do Teorema 4.3.4 de árvores aleatórias [4].	77
2	Comparação das cotas do Teorema 4.3.4 para o caminho P_n e a estrela S_n	79
3	Maiores e menores erros relativos.	101
4	Maiores e menores erros absolutos.	102

Resumo

Apresentamos o valor de Perron combinatório de árvores, definido por Andrade e Dahl [4]. Este novo parâmetro é uma cota inferior para o valor de Perron e pode ser calculado diretamente da árvore, sem a necessidade do cálculo do espectro. Exibimos resultados de Kirkland *et al.* [15] que mostram como a conectividade algébrica de uma árvore pode ser obtida através do valor de Perron. Mostramos que o valor de Perron combinatório é uma boa aproximação para o valor de Perron da estrela e do caminho, conforme afirmado em [4]. Além disso, apresentamos resultados de experimentos computacionais realizados para investigar a qualidade da aproximação do valor de Perron pelo valor de Perron combinatório para árvores com até 14 vértices. Também investigamos a possibilidade de utilizar o valor de Perron combinatório para o ordenamento de árvores de diâmetro 3.

Abstract

We present the combinatorial Perron value of trees, defined by Andrade and Dahl [4]. This new parameter is a lower bound to the Perron value and it can be computed directly from tree, without the need of spectrum calculation. We exhibit results from Kirkland *et al.* [15] that show how the algebraic connectivity of a tree can be obtained through the Perron value. We prove that the combinatorial Perron value is a good approximation to the Perron value of the star and of the path, according to [4]. Besides we present results from computational experiments executed to investigate the quality of the approximation of the Perron value by the combinatorial Perron value for trees with up to 14 vertices. We also investigate the possibility of using the combinatorial Perron value for ordering trees of diameter 3.

LISTA DE SÍMBOLOS

P_n	caminho com n vértices
C_n	ciclo com n vértices
K_n	grafo completo com n vértices
$K_{p,q}$	grafo bipartido completo de p por q vértices
S_n	estrela com n vértices
$S_{p,k}$	estrela generalizada regular com p caminhos de comprimento k
$C(n_1, \dots, n_k)$	centopeia com k vértices dorsais e $\sum_i n_i$ vértices pendentes
$M_{m,n}(\mathbb{F})$	conjunto das matrizes de ordem $m \times n$ com entradas no corpo \mathbb{F}
$\rho(A)$	raio espectral de A
$tr(A)$	traço de A
$A(G)$	matriz de adjacências de G
$p_G(x)$	polinômio característico de G
$spec(G)$	espectro de G
$L(G)$	matriz laplaciana de G
$D(G)$	matriz dos graus dos vértices de G
$a(G)$	conectividade algébrica de G
$\kappa(G)$	conectividade de vértices de G
$\kappa'(G)$	conectividade de arestas de G
$P_{r,i}$	caminho do vértice v_r ao vértice v_i
$\rho_c(T)$	valor de Perron combinatório da árvore T
$d(T, w)$	distância do vértice w até a raiz na árvore T
$T_0 \oplus_v T_1$	coalescência de T_0 e T_1 com respeito a v

1 INTRODUÇÃO

Um grafo $G = (V, E)$ é uma estrutura composta por um conjunto V cujos elementos são chamados de vértices e um conjunto E cujos elementos são chamados de arestas, onde cada aresta é um subconjunto de dois vértices. Podemos representar um grafo geometricamente utilizando pontos associados aos vértices e linhas associadas às arestas conectando tais pontos. Outra forma de representar grafos é através de matrizes, cujas propriedades espectrais dão informações a respeito da estrutura do grafo. De fato, a Teoria Espectral de Grafos, na qual esse trabalho está inserido, estuda a relação entre as propriedades estruturais de grafos e o espectro de certas matrizes a eles associadas.

Uma das matrizes frequentemente utilizadas para representar um grafo é a matriz laplaciana. Dado um grafo $G = (V, E)$ com n vértices, a matriz laplaciana de G é a matriz de ordem n denotada por $L = [l_{ij}]$ dada por

$$l_{ij} = \begin{cases} \deg(v_i), & \text{se } i = j \\ -1, & \text{se } \{v_i, v_j\} \in E \\ 0, & \text{c.c.,} \end{cases}$$

onde $\deg(v_i)$ é o grau do vértice v_i , isto é, é a quantidade de arestas incidentes no vértice v_i . Merris em [18] apresentou alguns resultados conhecidos sobre a matriz laplaciana e seu espectro, servindo como uma boa introdução para as propriedades de L . Essa matriz e, em especial, seu segundo menor autovalor, possuem papel relevante na Teoria Espectral de Grafos.

Em 1973, Fiedler [9] estudou propriedades do segundo menor autovalor da matriz laplaciana, denominando-o conectividade algébrica ao perceber sua relação com a conectividade estrutural do grafo. Fiedler mostrou que um grafo é conexo se e somente se sua conectividade algébrica é positiva, além de ser uma cota inferior para as conectividades de vértices e arestas, por exemplo.

Em [10], Fiedler utilizou as entradas do autovetor associado à conectividade algébrica de um grafo para determinar uma numeração característica em seus vértices. Tal autovetor é conhecido como vetor de Fiedler, em sua homenagem. O vetor de Fiedler tem recebido grande atenção e resultados podem ser vistos em [8], [16] e [19].

Abreu em [2] reuniu vários resultados envolvendo a conectividade algébrica e o vetor de Fiedler. O *survey* apresenta diversas cotas para a conectividade algébrica como função de outros invariantes de grafos e também exhibe aplicações do vetor de Fiedler em problemas de otimização combinatória, por exemplo. Além das diversas aplicações, um dos interesses na conectividade algébrica é o possível ordenamento de grafos a partir desse parâmetro. O *survey* de Abreu *et al.* [3] apresenta resultados acerca desse problema e destaca as dificuldades em obter uma ordem parcial através da conectividade algébrica.

No final dos anos 80, Merris em [17] explorou a numeração característica de árvores, que são grafos conexos e sem ciclos, e mostrou propriedades dos chamados vértices característicos da árvore. As árvores foram então classificadas em Tipo I e Tipo II, de acordo com a numeração característica

dada pelo vetor de Fiedler, tendo um ou dois vértices característicos, respectivamente. Já em 1996, Kirkland *et al.* mostraram em [15] que ao remover um vértice característico de uma árvore do Tipo I, o maior autovalor da matriz associada a alguma das subárvores resultantes é o inverso da conectividade algébrica da árvore original, além de um resultado semelhante para árvores do Tipo II. Esse maior autovalor é chamado de valor de Perron da árvore T , denotado por $\rho(T)$.

Recentemente, Andrade e Dahl definiram em [4] o valor de Perron combinatório da árvore T , denotado por $\rho_c(T)$, que mostram ser uma cota inferior para o valor de Perron de T , mas sendo facilmente obtido a partir da árvore, sem a necessidade de cálculo do espectro. Nosso foco principal é o estudo do valor de Perron combinatório, procurando determinar a qualidade dessa cota em relação ao valor de Perron.

Este trabalho está organizado da seguinte forma. O capítulo 2 estabelece noções básicas sobre Teoria de Grafos, Teoria de Matrizes e Teoria Espectral de Grafos, necessárias para a compreensão geral do trabalho.

O capítulo 3 exhibe algumas propriedades da conectividade algébrica e da numeração característica dada pelo vetor de Fiedler, além de mostrar a conexão entre o valor de Perron e a conectividade algébrica.

No capítulo 4, estudamos o valor de Perron combinatório e suas propriedades. Analisamos a qualidade dessa cota inferior ao valor de Perron para algumas famílias de árvores e também apresentamos cotas para o valor de Perron e resultados a respeito de centopeias. Por fim, exibimos algumas buscas computacionais e um resultado sobre árvores de diâmetro 3.

2 NOÇÕES PRELIMINARES

2.1 Teoria de Grafos

Nesta seção apresentamos algumas definições introdutórias e terminologias da Teoria de Grafos baseadas em [1] e [11], necessárias para a compreensão do tema principal. Estes conceitos também podem ser encontrados no livro de Diestel [7].

Definição 2.1.1. Um **grafo** $G = (V, E)$ é uma estrutura composta por um conjunto finito e não vazio V cujos elementos são chamados de **vértices** e um conjunto E de subconjuntos de dois vértices denominados **arestas**.

Utilizamos $|V|$ e $|E|$ para indicar, respectivamente, o número de vértices e o número de arestas de $G = (V, E)$.

Para um elemento $\{u, v\} \in E$ dizemos que os vértices u e v são **adjacentes** ou **vizinhos** e que a aresta $\{u, v\}$ **incide em** u e v . O **grau** de um vértice v é o número de arestas que incidem em v e é denotado por $\deg(v)$. Um vértice com apenas um vizinho, ou seja, de grau 1, é chamado **vértice pendente**.

Podemos ver representado da Figura 1 um grafo $G = (V, E)$ com $|V| = 5$, $|E| = 5$ e todos os vértices de grau 2.

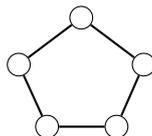


Figura 1: Grafo G com 5 vértices e 5 arestas.

De acordo com a necessidade, teremos os vértices de G denotados por v_1, v_2, \dots, v_n ou $1, 2, \dots, n$ e as arestas de G denotadas por e_1, e_2, \dots, e_m .

Definição 2.1.2. *Dado um grafo $G = (V, E)$, chamamos de **grafo complementar** de G o grafo $\overline{G} = (V, \overline{E})$ tal que $\{u, v\} \in \overline{E}$ se e somente se $\{u, v\} \notin E$.*

Vemos representado na Figura 2 o grafo complementar \overline{G} do grafo G da Figura 1, onde podemos observar que as arestas de G não estão em \overline{G} e que as arestas que pertencem a \overline{G} não estão presentes em G .

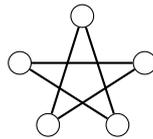


Figura 2: Grafo complementar ao grafo da Figura 1.

Definição 2.1.3. *Uma **orientação** de um grafo G é uma atribuição de direção para cada aresta de G , isto é, para cada aresta $e = (u, v)$ dizemos que e começa no vértice u e termina no vértice v ou que a aresta é orientada de u em direção a v . Um grafo é dito **orientado** se seu conjunto de arestas possui uma orientação.*

Vemos representado na Figura 3 um grafo orientado $G = (V, E)$ com conjunto de vértices $V = \{1, 2, 3, 4\}$ e conjunto de arestas $E = \{(1, 2), (1, 4), (3, 2), (3, 4)\}$, onde podemos dizer que a aresta $(3, 2)$ começa em 3 e termina em 2, por exemplo.

Definição 2.1.4. *Um grafo é dito **simples** quando não possui laços (arestas ligando um vértice nele mesmo), nem arestas múltiplas (mais de uma aresta*

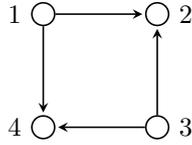


Figura 3: Grafo orientado.

incidindo no mesmo par de vértices) e sem orientação. Neste trabalho, a menos que explicitamente citado, consideraremos grafos simples, os quais são referidos a partir de agora por grafos.

Definição 2.1.5. *Seja $G = (V, E)$ um grafo. Um **caminho** de v_1 a v_k é uma sequência finita $v_1, v_2, \dots, v_k \in V$ de vértices distintos de G tal que $\{v_i, v_{i+1}\} \in E$, para $1 \leq i \leq k - 1$. Denotamos por P_n um caminho com n vértices.*

Vemos na Figura 4 o caminho P_5 .

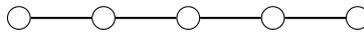


Figura 4: Caminho P_5 .

Definição 2.1.6. *Se existe um caminho entre quaisquer par de vértices, então o grafo é dito **conexo**. Caso contrário, o grafo é dito **desconexo**.*

*Um **ciclo** é um grafo conexo onde todo vértice possui exatamente dois vizinhos. Denotamos por C_n o ciclo com n vértices.*

*O **comprimento** de um caminho ou de um ciclo é o número de arestas que neles ocorre. Assim, P_n tem comprimento $n - 1$ e C_n tem comprimento n .*

*Dados dois vértices u e v de um grafo conexo G , chamamos de **distância de u a v** o mínimo dos comprimentos dos caminhos que ligam u e*

v. O máximo das distâncias entre quaisquer dois vértices de G é chamado **diâmetro** de G .

Vemos o ciclo C_4 na Figura 5, como exemplo.

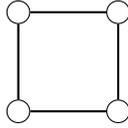


Figura 5: Ciclo C_4 .

Definição 2.1.7. Seja $G = (V, E)$ um grafo. Se $G' = (V', E')$ é um grafo que satisfaz $V' \subset V$ e $E' \subset E$, escrevemos $G' \subset G$ e dizemos que G' é um **subgrafo** de G .

Na Figura 6 temos representado o grafo $G = (V, E)$ com $V = \{v_1, \dots, v_6\}$, enquanto o subgrafo $G' = (V', E')$ não possui o vértice v_4 e suas arestas incidentes, além da ausência das arestas $\{v_1, v_3\}$ e $\{v_3, v_5\}$.

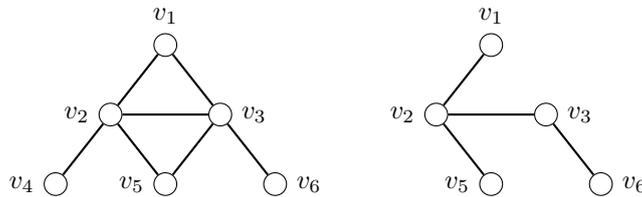


Figura 6: Grafo G e subgrafo G' .

Definição 2.1.8. Quando $G' \subset G$ é tal que dois vértices são adjacentes em G' se e somente se eles são adjacentes em G , dizemos que G' é um **subgrafo induzido** de G .

Se um grafo G for desconexo, dizemos que $G' \subset G$ é uma **componente conexa** de G quando G' é um subgrafo conexo e não existe outro grafo conexo $H \subset G$ tal que $G' \subset H$ e $G' \neq H$.

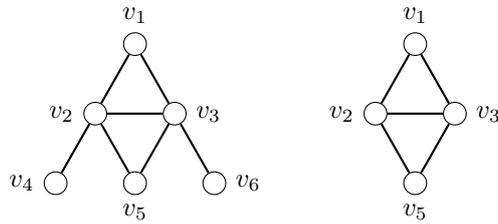


Figura 7: Grafo G e subgrafo induzido G' .

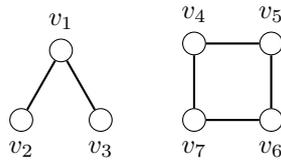


Figura 8: Grafo G com componentes conexas P_3 e C_4 .

Definição 2.1.9. Uma **árvore** é um grafo conexo e sem ciclos. Já um grafo desconexo e sem ciclos é chamado **floresta**. Vértices pendentes em árvores também são conhecidos como **folhas**.

Representamos na Figura 9 uma árvore T com 6 vértices e 5 arestas, onde notamos a ausência de ciclos e que T é conexa. Também observamos que os vértices v_4, v_5 e v_6 são folhas de T .

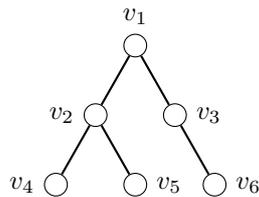


Figura 9: Árvore T .

Se removermos de T o vértice v_1 e suas arestas incidentes, teremos uma floresta com duas componentes conexas, representada na Figura 10.

Definição 2.1.10. Um grafo é dito **k -regular** se todos seus vértices têm

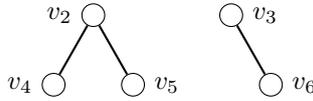


Figura 10: Floresta com componentes conexas P_2 e P_3 .

grau k .

O grafo no qual quaisquer dois vértices distintos são adjacentes é chamado de **grafo completo**. Denotamos por K_n o grafo completo com n vértices e aproveitamos para notar que K_n é $(n - 1)$ -regular. Vemos K_5 representado na Figura 11.

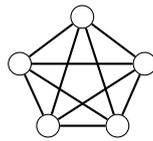


Figura 11: Grafo completo K_5 .

Definição 2.1.11. Um grafo $G = (V, E)$ é dito **bipartido** se existe uma partição do conjunto de vértices $V = V_1 \cup V_2$, com $V_1 \cap V_2 = \emptyset$, de modo que as arestas de G sejam da forma $\{i, j\}$ com $i \in V_1$ e $j \in V_2$, isto é, não há vértices adjacentes em um mesmo subconjunto da partição.

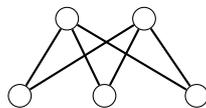


Figura 12: Grafo bipartido completo $K_{2,3}$.

Um grafo bipartido $G = (V_1 \cup V_2, E)$ é dito **bipartido completo** se cada vértice de V_1 for adjacente a todo vértice de V_2 . Se $|V_1| = p$ e $|V_2| = q$, escrevemos $G = K_{p,q}$. Vemos o grafo bipartido completo $K_{2,3}$ representado na

Figura 12, onde podemos enxergar V_1 como sendo formado pelos dois vértices de cima e V_2 pelos três vértices de baixo.

Definição 2.1.12. A *estrela* S_n , $n \geq 3$, é um grafo com n vértices onde exatamente um vértice tem grau $n - 1$ e todos os outros são pendentos. Na Figura 13 vemos representada a estrela S_6 . Notamos que a estrela S_n é o grafo bipartido completo $K_{1,n-1}$.

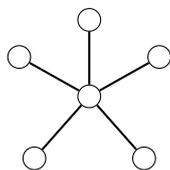


Figura 13: Estrela S_6 .

Definição 2.1.13. Uma *centopeia* é uma árvore cuja remoção das folhas a transforma em um caminho. As folhas de uma centopeia são também chamadas de **pernas** e os vértices não pendentos de vértices **dorsais**.

Denotamos por $C(n_1, \dots, n_k)$ a centopeia consistindo de um caminho $P_k = v_1v_2\dots v_k$, com $n_i \geq 0$ pernas em cada v_i , para $i = 1, 2, \dots, k$. Na Figura 14 temos a centopeia $C(1, 3, 0, 2)$ que possui quatro vértices dorsais e seis pernas ao total.

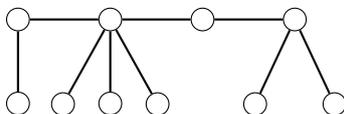


Figura 14: Centopeia $C(1, 3, 0, 2)$.

2.2 Teoria de Matrizes

Nesta sessão apresentamos conceitos de Álgebra Linear que serão utilizados ao longo deste trabalho. Os conceitos aqui apresentados podem ser encontrados no livro de Horn e Johnson [14], entre outros.

Denotamos por $M_{m,n}(\mathbb{F})$ o conjunto de todas as matrizes de ordem $m \times n$ com entradas no corpo \mathbb{F} . Sempre que $\mathbb{F} = \mathbb{R}$, usamos a forma abreviada $M_{m,n}$ no lugar de $M_{m,n}(\mathbb{R})$ e, caso $m = n$, a matriz é dita *quadrada* e o conjunto $M_{n,n}$ é denotado simplesmente por M_n . Além disso, a matriz identidade de ordem n é denotada por I .

Definição 2.2.1. *Dada uma matriz $A = [a_{ij}] \in M_n(\mathbb{C})$, o **determinante** de A , denotado por $\det A$, é o número complexo*

$$\det A = \sum_{\pi} \left(\operatorname{sgn} \pi \prod_{i=1}^n a_{i,\pi(i)} \right),$$

onde a soma é sobre todas as $n!$ permutações π de $\{1, 2, \dots, n\}$ e $\operatorname{sgn} \pi = +1$ ou -1 , dependendo se a quantidade mínima de transposições necessárias para transformar π em $\{1, 2, \dots, n\}$ for par ou ímpar, respectivamente.

Chamamos de **polinômio característico** de A , denotado por $p_A(x)$, o polinômio de grau n

$$p_A(x) = \det(xI - A) \in \mathbb{C}[x].$$

Dizemos que $\lambda \in \mathbb{C}$ é um **autovalor** de A se $Av = \lambda v$ para algum vetor não nulo $v \in \mathbb{C}^n$. Dizemos que tal vetor é um **autovetor associado**

ao autovalor λ .

O conjunto dos autovalores e respectivas multiplicidades de uma matriz A é denominado **espectro** de A e denotado por $\text{spec}(A)$.

O **raio espectral** de A , denotado por $\rho(A)$, é o maior autovalor de A em módulo, ou seja,

$$\rho(A) = \max_{\lambda \in \text{spec}(A)} |\lambda|.$$

Como o nome sugere, o raio espectral de uma matriz é o raio do menor disco com centro na origem que contém todos os seus autovalores.

Observamos que se λ é um autovalor de A , ou seja, tal que $\lambda v = Av$ para algum $v \neq 0$, então $\lambda v - Av = (\lambda I - A)v = 0$. Logo $\lambda I - A$ é não singular e, portanto, $p_A(\lambda) = \det(\lambda I - A) = 0$. Segue que o espectro de uma matriz A é o conjunto das raízes de seu polinômio característico e que uma matriz é singular se e somente se 0 é seu autovalor.

Definição 2.2.2. *Sejam $A, B \in M_n(\mathbb{C})$. Dizemos que B é **semelhante** a A se existe uma matriz inversível $S \in M_n(\mathbb{C})$ tal que $B = S^{-1}AS$.*

Definição 2.2.3. *Dada uma matriz $A = [a_{ij}] \in M_{m,n}(\mathbb{F})$, onde \mathbb{F} é um corpo qualquer, a matriz **transposta** de A , denotada por A^T , é a matriz cuja entrada i, j é a_{ji} , isto é, as linhas de A são colunas de A^T e vice-versa.*

*Dizemos que uma matriz $A = [a_{ij}] \in M_n(\mathbb{F})$ é **simétrica** se $A = A^T$, ou seja, $a_{ij} = a_{ji}$ para todos i, j , com $1 \leq i, j \leq n$.*

*A matriz **transposta conjugada** de $A \in M_{m,n}(\mathbb{C})$, denotada por A^* , é definida por $A^* = \overline{A}^T$, onde \overline{A} é a matriz conjugada de A , ou seja, a matriz*

em que cada entrada é o complexo conjugado da entrada correspondente de A .

Uma matriz $A \in M_n(\mathbb{C})$ é dita **hermitiana** se $A = A^*$.

Dados vetores $x, y \in \mathbb{C}^n$, chamamos de **produto interno euclidiano** (ou produto escalar) de x por y o escalar $\langle x, y \rangle = y^*x$.

Dado um vetor $x \in \mathbb{C}^n$, a **norma euclidiana** é dada por $\|x\| = \langle x, x \rangle^{1/2}$.

O produto interno possui algumas propriedades, duas das quais são de interesse particular. Dados os vetores $x, y \in \mathbb{C}^n$ e a matriz $A \in M_n(\mathbb{C})$, temos que $\langle Ax, y \rangle = \langle x, A^*y \rangle$ e que x e y são *ortogonais* se e somente se $\langle x, y \rangle = 0$. Notamos, também, que $\|x\|^2 \geq 0$ e $\|x\|^2 = 0$ se e somente se $x = 0$.

Além disso, observamos que, nos reais, uma matriz ser hermitiana é o mesmo que ser simétrica e o transposto conjugado de um vetor é apenas o vetor transposto, isto é, $x^* = x^T$.

Proposição 2.2.4. *Todos os autovalores de uma matriz hermitiana são reais.*

Demonstração. Seja $A \in M_n(\mathbb{C})$ uma matriz hermitiana e $\lambda \in \text{spec}(A)$, ou seja, $Ax = \lambda x$ para algum vetor não nulo $x \in \mathbb{C}^n$ tal que $x^*x = 1$. Como $A = A^*$, temos:

$$\begin{aligned} \lambda &= \lambda(x^*x) &= x^*(\lambda x) &= x^*(Ax) &= x^*(A^*x) &= (x^*A^*)x \\ &= (Ax)^*x &= (\lambda x)^*x &= (\bar{\lambda}x^*)x &= \bar{\lambda}(x^*x) &= \bar{\lambda}. \end{aligned}$$

Portanto, $\lambda \in \mathbb{R}$. □

Como os autovalores de uma matriz hermitiana $A \in M_n(\mathbb{C})$ são reais, podemos ordená-los em ordem não-decrescente:

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n. \quad (2.2.1)$$

Proposição 2.2.5. *Autovetores associados a autovalores distintos de uma matriz hermitiana são ortogonais.*

Demonstração. Seja $A \in M_n(\mathbb{C})$ uma matriz hermitiana e suponhamos que x e y sejam autovetores associados a autovalores distintos λ e μ de A , respectivamente. Então

$$\lambda \langle x, y \rangle = \langle \lambda x, y \rangle = \langle Ax, y \rangle = \langle x, A^* y \rangle = \langle x, Ay \rangle = \langle x, \mu y \rangle = \mu \langle x, y \rangle.$$

Portanto, temos que $(\lambda - \mu)\langle x, y \rangle = 0$. Como $\lambda - \mu \neq 0$, então $\langle x, y \rangle = 0$, ou seja, x e y são ortogonais. □

Teorema 2.2.6. *Para toda matriz hermitiana $A \in M_n(\mathbb{C})$ existe uma base ortonormal de \mathbb{C}^n formada por autovetores de A .*

Demonstração. Horn [14], Teorema 2.5.6. □

Definição 2.2.7. *Dada uma matriz hermitiana $A \in M_n(\mathbb{C})$ e um vetor não nulo $x \in \mathbb{C}^n$, o quociente de Rayleigh de A em x é o número real*

$$R(A, x) = \frac{x^* Ax}{x^* x}.$$

Nas condições da definição acima, podemos observar que $x^*Ax \in \mathbb{R}$ para qualquer vetor $x \in \mathbb{C}^n$, pois $\overline{x^*Ax} = (x^*Ax)^* = x^*A^*x = x^*Ax$, ou seja, x^*Ax é igual ao seu conjugado, portanto, é um número real.

O Teorema 2.2.8 a seguir será uma ferramenta útil ao tratarmos com autovalores de matrizes associadas a grafos. Em especial, o segundo menor autovalor de uma determinada matriz nos dará informações sobre propriedades estruturais do grafo.

Teorema 2.2.8 (Courant-Fischer). *Seja uma matriz hermitiana $A \in M_n(\mathbb{C})$ e $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ seus autovalores. Então, para $k \in \{1, 2, \dots, n\}$,*

$$\lambda_k = \min_{\{S: \dim S=k\}} \max_{\{x \in S: x \neq 0\}} \frac{x^*Ax}{x^*x} \quad (2.2.2)$$

e

$$\lambda_k = \max_{\{S: \dim S=n-k+1\}} \min_{\{x \in S: x \neq 0\}} \frac{x^*Ax}{x^*x}, \quad (2.2.3)$$

onde S é um subespaço de \mathbb{C}^n .

Demonstração. Horn [14], Teorema 4.2.6. □

Observamos que se $k = n$ em (2.2.2) ou $k = 1$ em (2.2.3), então $S = \mathbb{C}^n$, pois este é o único subespaço n -dimensional. Ambos os casos se reduzem a

$$\lambda_n = \max_{x \neq 0} \frac{x^*Ax}{x^*x} \quad (2.2.4)$$

e

$$\lambda_1 = \min_{x \neq 0} \frac{x^*Ax}{x^*x}. \quad (2.2.5)$$

Definição 2.2.9. Dizemos que uma matriz hermitiana $A \in M_n(\mathbb{C})$ é **positiva definida** (respectivamente, **positiva semidefinida**) se $x^*Ax > 0$ (respectivamente, $x^*Ax \geq 0$), para todo vetor não nulo $x \in \mathbb{C}^n$.

Proposição 2.2.10. Todo autovalor de uma matriz positiva definida (semidefinida) é um número real positivo (não negativo).

Demonstração. Sejam $A \in M_n(\mathbb{C})$ uma matriz positiva definida, $\lambda \in \mathbb{R}$ um autovalor de A e $x \in \mathbb{C}^n$ um autovetor associado a λ . Temos que $x^*(Ax) = x^*(\lambda x) = \lambda(x^*x)$. Então

$$\lambda = \frac{x^*Ax}{x^*x} > 0.$$

De forma análoga, demonstra-se o caso em que a matriz A é positiva semidefinida e, portanto, $\lambda \geq 0$. □

Teorema 2.2.11. Se uma matriz $A \in M_n(\mathbb{C})$ hermitiana pode ser escrita como $A = BB^*$, para alguma matriz $B \in M_{m,n}(\mathbb{C})$, então A é positiva semidefinida.

Demonstração. Dado um vetor não nulo $x \in \mathbb{C}^n$, temos

$$x^*Ax = x^*(BB^*)x = (B^*x)^*(B^*x) = \langle B^*x, B^*x \rangle \geq 0,$$

logo A é positiva semidefinida. □

Definição 2.2.12. Chamamos de **traço** de uma matriz $A = [a_{ij}] \in M_n(\mathbb{C})$, o qual denotamos por $tr(A)$, a soma das entradas de sua diagonal principal. Assim,

$$tr(A) = \sum_{i=1}^n a_{ii}.$$

Proposição 2.2.13. *O traço de uma matriz é igual a soma dos seus autovalores.*

Demonstração. Seja uma matriz $A \in M_n(\mathbb{C})$ e seja $p_A(x) = \det(xI - A) \in \mathbb{C}[x]$ o polinômio característico de A . Cada parcela do determinante é o produto de exatamente n entradas de $xI - A$, onde as entradas são de linhas e colunas diferentes, portanto, as parcelas são polinômios em x de grau no máximo n . O grau de uma parcela será n somente quando todos os fatores envolverem x , o que acontece apenas no produto dos elementos da diagonal principal, o qual vale

$$\prod_{i=1}^n (x - a_{ii}) = x^n - (a_{11} + \cdots + a_{nn})x^{n-1} + \cdots + (-1)^n a_{11} \cdots a_{nn}. \quad (2.2.6)$$

Qualquer outra parcela do determinante contém um elemento a_{ij} , onde $i \neq j$, logo as respectivas entradas diagonais $x - a_{ii}$ e $x - a_{jj}$ não são fatores dessa parcela, sendo seu grau no máximo $n - 2$. Portanto, os coeficientes de x^n e x^{n-1} no polinômio $p_A(x)$ são definidos apenas pela parcela (2.2.6), ou seja, o coeficiente de x^n é 1 e o coeficiente de x^{n-1} é $-tr(A)$.

Por outro lado, pelo Teorema Fundamental da Álgebra, $p_A(x) = (x - \lambda_1)(x - \lambda_2) \cdots (x - \lambda_n)$, onde $spec(A) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\} \subseteq \mathbb{C}$. Assim, comparando os coeficientes do polinômio característico, encontramos

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

□

Definição 2.2.14. *Seja $A = [a_{ij}] \in M_{n,m}$. Se $a_{ij} \geq 0, \forall i, j$, dizemos que A é uma matriz **não-negativa** e escrevemos por $A \geq 0$. No caso de desigualdade estrita, denotamos por $A > 0$ e dizemos que A é uma matriz **positiva**.*

*Se $B = [b_{ij}] \in M_{n,m}$, dizemos que A **domina** B , e denotamos por $A \geq B$, se $A - B \geq 0$. Definimos analogamente a desigualdade estrita.*

*Dizemos que $P \in M_n$ é uma **matriz de permutação** se exatamente uma entrada de cada linha e coluna de P é igual a 1 e todas as outras entradas são iguais a 0.*

*Uma matriz $A \in M_n$ é dita **reduzível** se existe uma matriz de permutação P tal que*

$$P^T A P = \begin{bmatrix} B & C \\ 0_{n-r,r} & D \end{bmatrix}$$

com $1 \leq r \leq n - 1$.

*Caso contrário, a matriz A é dita **irreduzível**.*

Vale notar, na definição acima, que os blocos B, C e D não têm necessariamente todas as entradas não nulas. É preciso apenas que haja um bloco de zeros de dimensão $(n - r) \times r$ no canto inferior esquerdo obtido através de permutações de linhas e colunas de A .

Teorema 2.2.15. *Se $A, B \in M_n$ são tais que $B \geq A \geq 0$, então seus raios espectrais satisfazem $\rho(B) \geq \rho(A)$. Além disso, se A é irreduzível, então $\rho(A) = \rho(B)$ se, e somente se, existe uma matriz de permutação P tal que $A = P B P^T$.*

Demonstração. Horn [14], Corolário 8.1.19. □

Definição 2.2.16. *Seja $A \in M_n(\mathbb{C})$. Uma submatriz $A_r \in M_r(\mathbb{C})$ de A , com $r < n$, é dita **submatriz principal** de A se A_r é obtida da matriz A removendo-se $n - r$ linhas e suas respectivas colunas.*

Teorema 2.2.17. *Se $A \in M_n$ é uma matriz não-negativa e A_r é uma submatriz principal de A , então $\rho(A_r) \leq \rho(A)$. Se A é irredutível, então a desigualdade é estrita.*

Demonstração. Horn [14], Corolário 8.1.20. □

Se a matriz A for não-negativa e irredutível, o resultado a seguir será de grande utilidade ao longo deste trabalho, garantindo que o raio espectral de A sempre será um autovalor simples com autovetor associado positivo.

Teorema 2.2.18 (Perron-Frobenius). *Seja $A \in M_n$, com $n \geq 2$, uma matriz irredutível não-negativa. Então*

(i) $\rho(A) > 0$.

(ii) $\rho(A)$ é um autovalor simples de A .

(iii) $\exists!$ $x \in \mathbb{R}^n$ tal que x é positivo, $Ax = \rho(A)x$ e $\sum_{i=1}^n x_i = 1$.

Demonstração. Horn [14], Teorema 8.4.4. □

Definição 2.2.19. *O único vetor normalizado caracterizado no item (iii) do Teorema 2.2.18 é chamado de **vetor de Perron** de A e o autovalor associado $\rho(A)$ é chamado de **raiz de Perron** ou **valor de Perron** de A .*

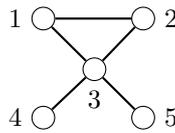
2.3 Teoria Espectral de Grafos

Uma das formas mais úteis de representar grafos é utilizando matrizes, pois assim podemos deduzir propriedades estruturais do grafo ao analisar, por exemplo, o espectro da matriz associada. As definições e resultados apresentados nesta seção estão baseados em Abreu *et al.* [1], Godsil e Royle [11], e Brouwer e Haemers [5].

Definição 2.3.1. *Seja $G = (V, E)$ um grafo com n vértices. A **matriz de adjacências** de G , denotada por $A = A(G)$, é a matriz quadrada de ordem n cujas entradas são*

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } \{v_i, v_j\} \in E \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases}$$

Exemplo 2.1. *Na Figura 15 temos um grafo G e sua matriz de adjacências $A(G)$. Podemos notar que $A(G)$ não só é simétrica, como a soma de cada linha i (ou coluna i) da matriz A é igual ao grau do vértice v_i .*



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

Figura 15: Grafo G e sua matriz de adjacências $A(G)$.

Segue da definição que $A(G)$ é uma matriz real e simétrica, e, portanto, todos os seus autovalores são reais pela Proposição 2.2.4. Como o traço de $A(G)$ é nulo ($a_{ii} = 0, \forall i$), a soma de todos os seus autovalores é nula.

Definição 2.3.2. *O polinômio característico da matriz de adjacências de um grafo G é denominado **polinômio característico de G** e denotado por $p_G(x)$. Assim, $p_G(x) = \det(xI - A(G))$.*

*Da mesma forma, chamamos de **espectro de G** o espectro de $A(G)$ e denotamos por $\text{spec}(G)$. Em particular, o raio espectral de G é o raio espectral de $A(G)$.*

Se G possui autovalores distintos $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ com multiplicidades m_1, m_2, \dots, m_k , respectivamente, escrevemos $\lambda_1^{(m_1)}, \dots, \lambda_k^{(m_k)}$ para o espectro de G .

Lembramos agora do conceito de menores principais da Álgebra Linear. Dada uma matriz $A \in M_n$, para $1 \leq r < n$, um menor principal de A de ordem r é o determinante de qualquer submatriz principal A_r de A .

Lema 2.3.3. *Seja G um grafo com n vértices, A sua matriz de adjacências e polinômio característico*

$$p_G(x) = x^n + a_1x_{n-1} + a_2x_{n-2} + \dots + a_n.$$

Então a_i é a soma dos menores principais de ordem i de A , para $i \in \{1, \dots, n\}$.

Demonstração. Começamos observando que a potência x^{n-i} ocorre apenas

nos termos do $\det(xI - A)$ que contêm precisamente $n - i$ elementos da diagonal principal. O produto desses $n - i$ elementos da diagonal na expansão do $\det(xI - A)$ é multiplicado pelo menor principal de ordem i de $xI - A$ das linhas e colunas restantes. Como essa submatriz principal de ordem i de $xI - A$ possui x na diagonal principal e tais termos aumentam o grau de x^{n-i} , utilizamos apenas os correspondentes menores principais de ordem i de A (e não de $xI - A$) como coeficiente de x^{n-i} .

Ao considerarmos todas as possíveis combinações de $n - i$ dos índices $1, 2, \dots, n$, obtemos para o coeficiente a_i de x^{n-i} a soma de todos os menores principais de ordem i de A . \square

O próximo resultado mostra que propriedades estruturais de um grafo podem ser obtidas de propriedades algébricas de uma matriz associada a ele.

Proposição 2.3.4. *Seja um grafo G com n vértices e m arestas e polinômio característico*

$$p_G(x) = x^n + a_1x_{n-1} + a_2x_{n-2} + \cdots + a_n.$$

Então os coeficientes de $p_G(x)$ satisfazem:

(i) $a_1 = 0$;

(ii) $a_2 = -m$;

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

Demonstração. Seja $A = A(G)$ a matriz de adjacências de G . Pelo Lema

2.3.3, temos que a soma de todos os menores principais de ordem i é igual a $(-1)^i a_i$. Portanto, como a diagonal de A é formada por zeros, todos seus menores principais de ordem 1 são nulos, logo $a_1 = 0$.

Qualquer menor principal de A de ordem 2 que não seja identicamente nulo será da forma

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = -1.$$

Como isso só acontece quando consideramos linhas e colunas de vértices adjacentes, cada menor principal conta uma aresta de G , logo $a_2 = -m$.

Já no caso dos menores principais de ordem 3, existem as seguintes possibilidades para submatrizes principais de A não nulas e seus determinantes:

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = 0 \quad \text{e} \quad \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 2.$$

Vemos que o único determinante não nulo é justamente o último, que representa três vértices adjacentes dois a dois, ou seja, cada um desses menores principais conta duas vezes a quantidade de triângulos em G . Logo, sendo t a quantidade de triângulos em G , temos que $(-1)^3 a_3 = 2t$, concluindo a demonstração. \square

É importante observar que o polinômio característico de um grafo G e, conseqüentemente, o seu espectro, *independe da numeração dos vértices*, pois dadas quaisquer matrizes de adjacências de G , uma pode ser obtida da outra através de operações elementares em linhas e colunas, como veremos a

seguir.

Proposição 2.3.5. *Sejam $A_1(G)$ e $A_2(G)$ matrizes de adjacências de um grafo G . Então*

(i) *existe uma matriz de permutação P tal que $A_1 = P^{-1}A_2P$;*

(ii) $p_{A_1}(x) = p_{A_2}(x)$.

Demonstração. Começamos observando que se existem matrizes de adjacências de G distintas, então é porque cada matriz levou em consideração uma numeração diferente dos vértices de G . Assim, existe uma bijeção $\Phi : V \rightarrow V$ entre os vértices de G em que cada vértice de rótulo i recebe outro rótulo j . Logo, dadas as matrizes de adjacências $A_1(G)$ e $A_2(G)$, para cada vértice v_i , se $\Phi(i) = j$, devemos permutar as linhas i e j e colunas i e j de A_1 e chegaremos em A_2 . Portanto, existe uma matriz de permutação P tal que $A_1 = P^{-1}A_2P$.

Desta forma, temos que

$$\begin{aligned} p_{A_1}(x) &= \det(xI - A_1) \\ &= \det(xP^{-1}IP - P^{-1}A_2P) \\ &= \det(P^{-1}(xI - A_2)P) \\ &= \det(P^{-1}) \det(xI - A_2) \det(P) \\ &= \det(xI - A_2) \\ &= p_{A_2}(x). \end{aligned}$$

Portanto, concluímos que $p_G(x)$ independe da numeração dos vértices e, conseqüentemente, o espectro de G também independe. \square

Teorema 2.3.6. *G é um grafo conexo se e somente se sua matriz de adjacências é irredutível.*

Demonstração. Começamos supondo que G é desconexo, portanto podemos escrever $G = G_1 \cup G_2$, onde G_1 e G_2 não possuem arestas entre si, e conseguimos organizar a matriz de adjacências A da forma

$$A = \begin{bmatrix} A(G_1) & 0 \\ 0 & A(G_2) \end{bmatrix},$$

isto é, A é redutível.

Reciprocamente, se A for redutível, conseguimos permutá-la de tal forma que

$$\tilde{A} = P^{-1}AP = \begin{bmatrix} B & C \\ 0_{n-r,r} & D \end{bmatrix}$$

onde $B \in M_r$ e $D \in M_{n-r}$. Assim, vemos que $\tilde{a}_{ij} = 0$ sempre que $r + 1 \leq i \leq n$ e $1 \leq j \leq r$, o que significa que os primeiros r vértices não são adjacentes aos últimos $n - r$ vértices, ou seja, G é desconexo. \square

A seguir apresentamos a matriz laplaciana de um grafo, que será central no nosso estudo por possuir certas propriedades que dão informações acerca da estrutura de um grafo, em particular, do quão “conexo” o grafo é ao compararmos um de seus autovalores com certos parâmetros de conectividade.

O *survey* de Merris [18] reúne diversas propriedades da matriz laplaciana, exibindo resultados sobre seu espectro, em especial sobre seu segundo

menor autovalor, congruências e equivalências, além de aplicações em química orgânica.

Definição 2.3.7. Dado um grafo G , a **matriz laplaciana** de G é a matriz

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

onde $A(G)$ é a matriz de adjacências de G e $D(G) = [d_{ij}]$ é a **matriz diagonal dos graus dos vértices** de G , isto é,

$$d_{ij} = \begin{cases} \deg(v_i), & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases}$$

Quando não houver ambiguidade, escreveremos apenas L no lugar de $L(G)$, assim como para as matrizes $D(G)$ e $A(G)$.

Exemplo 2.2. O grafo G representado na Figura 16 possui matriz laplaciana L dada por

$$L = \begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 4 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Definição 2.3.8. Dado um grafo G , o espectro da matriz laplaciana de G é chamado de **espectro laplaciano** de G .

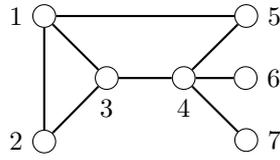


Figura 16: Grafo G do Exemplo 2.2.

A definição a seguir será útil para mostrarmos uma decomposição da matriz laplaciana que nos dará informações sobre seu espectro.

Definição 2.3.9. *Seja G um grafo com vértices v_1, \dots, v_n e arestas e_1, \dots, e_m . A matriz de incidência de G com respeito a uma orientação dada é a matriz de ordem $n \times m$, denotada por $U(G) = [u_{ij}]$, onde*

$$u_{ij} = \begin{cases} +1, & \text{se } e_j = (v_i, v_l) \text{ para algum } l \neq i \\ -1, & \text{se } e_j = (v_k, v_i) \text{ para algum } k \neq i \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases}$$

ou seja, para cada aresta e_j de G , a entrada u_{ij} será igual a $+1$ se e_j está saindo de v_i , será igual a -1 se e_j está chegando em v_i e será igual a 0 em todos os outros casos.

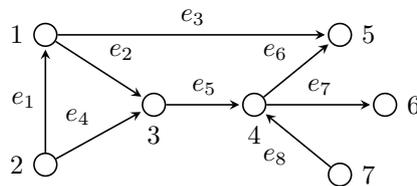


Figura 17: Grafo da Figura 16 orientado.

Exemplo 2.3. *Vemos representado na Figura 17 o grafo do Exemplo 2.2 com uma orientação nas arestas e abaixo temos sua matriz de incidência U*

com respeito à orientação dada.

$$U = \begin{bmatrix} -1 & +1 & +1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & +1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & +1 & +1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & +1 \end{bmatrix}$$

A matriz de incidência não é necessariamente quadrada, pois as linhas dependem dos vértices e as colunas dependem das arestas. No nosso exemplo, U tem 7 linhas e 8 colunas.

Podemos observar que cada linha de U representa um vértice de G , cada coluna representa uma aresta e, portanto, cada coluna possui exatamente um valor positivo e outro negativo, pois cada aresta possui exatamente duas extremidades.

Teorema 2.3.10. *Sejam G um grafo, L sua matriz laplaciana e U sua matriz de incidência com respeito a uma orientação dada. Então*

$$L = UU^T$$

e, portanto, L é positiva semidefinida e todos seus autovalores são não negativos.

Demonstração. Dado um grafo G com m arestas e matriz de incidência U

com respeito a uma orientação qualquer, começamos olhando para o produto UU^T e lembrando que a coluna j de U^T coincide com a linha j de U , logo cada entrada $[UU^T]_{ij}$ é o produto escalar das linhas i e j de U , ou seja,

$$[UU^T]_{ij} = \sum_{k=1}^m u_{ik}u_{jk}.$$

Analisando cada parcela $u_{ik}u_{jk}$, temos as seguintes possibilidades

$$u_{ik}u_{jk} = \begin{cases} +1, & \text{se } u_{ik} = u_{jk} \neq 0 \\ -1, & \text{se } u_{ik} = -u_{jk} \neq 0 \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases}$$

Como cada coluna k de U possui exatamente um valor positivo e outro negativo, a única possibilidade de $u_{ik} = u_{jk} \neq 0$ é se $i = j$. Pelo mesmo motivo, $u_{ik} = -u_{jk} \neq 0$ somente se houver aresta e_k entre v_i e v_j . Portanto,

$$[UU^T]_{ij} = \sum_{k=1}^m u_{ik}u_{jk} = \begin{cases} \deg(v_i), & \text{se } i = j \\ -1, & \text{se } e_k = (v_i, v_j) \text{ ou } e_k = (v_j, v_i) \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases}$$

Assim, nas entradas da diagonal principal temos os graus dos vértices e nas entradas ij fora da diagonal temos -1 se houver aresta entre v_i e v_j e 0 caso contrário, ou seja, de fato UU^T é a matriz laplaciana $L = D - A$.

Pelo Teorema 2.2.11, concluímos que $L = UU^T$ é positiva semidefinida e, pela Proposição 2.2.10, todos seus autovalores são não negativos. \square

Para os resultados a seguir introduziremos algumas notações. Denotamos por $0 \leq \mu_1 \leq \dots \leq \mu_n$ os autovalores de L , o vetor $(1, 1, \dots, 1)$ por e , a matriz ee^T de 1's por J e a cardinalidade de um conjunto S por $|S|$. Será conveniente também denotar por W o conjunto de todos os vetores x tais que $x^T x = 1$ e $x^T e = 0$.

Podemos observar que a soma dos elementos de qualquer linha ou coluna de L é sempre nula e isso nos permite concluir que o vetor $e = (1, \dots, 1)$ é autovetor associado ao autovalor $\mu_1 = 0$, pois $Le = 0$.

Lema 2.3.11. *O segundo menor autovalor laplaciano de um grafo G é dado por*

$$\mu_2 = \min_{x \in W} x^T Lx.$$

Demonstração. Seja G um grafo com autovalores laplacianos $0 = \mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_n$ e autovetores associados v_1, \dots, v_n , respectivamente. Pelo Teorema 2.2.6 existe uma base ortonormal de \mathbb{C}^n formada por autovetores v_1, v_2, \dots, v_n , onde v_i é associado a μ_i , respectivamente. Então, dado um vetor $x \in W$, podemos escrevê-lo como combinação linear dos autovetores na forma

$$x = \sum_{i=2}^n \alpha_i v_i,$$

com $x^T x = \sum_{i=2}^n \alpha_i^2 = 1$. Notamos que $\alpha_1 = 0$, pois

$$\alpha_1 = \langle x, v_1 \rangle = \langle x, \frac{e}{\sqrt{n}} \rangle = 0.$$

Assim, temos que

$$x^T Lx = \langle Lx, x \rangle = \left\langle \sum_{i=2}^n \alpha_i L v_i, \sum_{i=2}^n \alpha_i v_i \right\rangle = \sum_{i=2}^n \alpha_i^2 \mu_i \geq \sum_{i=2}^n \alpha_i^2 \mu_2 = \mu_2,$$

ou seja, $x^T Lx \geq \mu_2$, para todo $x \in W$. Portanto, $\min_{x \in W} x^T Lx \geq \mu_2$.

Por outro lado, tomando $x = v_2$, temos que

$$v_2^T L v_2 = v_2^T \mu_2 v_2 = \mu_2 v_2^T v_2 = \mu_2.$$

Logo, o mínimo é atingido em $x = v_2$. Ou seja, temos que

$$\min_{x \in W} x^T Lx \leq v_2^T L v_2 = \mu_2 \leq \min_{x \in W} x^T Lx,$$

como queríamos. □

O próximo resultado relaciona o espectro laplaciano com o número de componentes conexas de G ; mais precisamente, determina o número de componentes de um grafo de acordo com a multiplicidade do autovalor 0 da sua matriz laplaciana.

Teorema 2.3.12. *A multiplicidade de 0 como autovalor de $L(G)$ é igual ao número de componentes conexas de G .*

Demonstração. Seja um grafo $G = (V, E)$ e sejam $0 = \mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_n$ os autovalores laplacianos de G . Começamos notando que, pelo Lema 2.3.11,

temos a seguinte expressão para o segundo menor autovalor de L :

$$\mu_2 = \min_{x \in W} x^T L x.$$

Além disso, pelo Teorema 2.3.10, podemos concluir que

$$x^T L x = x^T U U^T x = \|U^T x\|^2 = \sum_{\{u,v\} \in E} (x_u - x_v)^2,$$

onde x_u é a componente do vetor x associada ao vértice $u \in V$. Portanto, a expressão para μ_2 se resume a

$$\mu_2 = \min_{x \in W} \sum_{\{u,v\} \in E} (x_u - x_v)^2.$$

Então $\mu_2 = 0$ se e somente se, para cada componente conexa H de G , as entradas x_u , para $u \in V(H)$, são iguais. Mas isso acontece se e somente se G tiver mais de uma componente conexa, pois x é ortogonal ao vetor e que tem todas as entradas iguais a 1, ou seja,

$$\mu_2 \neq 0 \iff G \text{ conexo.}$$

Para cada componente conexa H de G , o vetor x com entradas iguais $x_u \neq 0$, para $u \in V(H)$, e todas as outras entradas nulas é um autovetor associado ao autovalor 0. Como tais autovetores associados a diferentes componentes conexas são ortogonais, vemos que a multiplicidade do autovalor 0 é igual a quantidade de componentes conexas de G . \square

3 VALOR DE PERRON

3.1 Conectividade Algébrica

Em 1973, M. Fiedler [9] introduziu o conceito de *conectividade algébrica* de G . Este autovalor está associado a alguns invariantes do grafo como conectividade de vértices, conectividade de arestas, diâmetro, número isoperimétrico, entre outros. O *survey* [2] de Abreu é uma boa fonte para o tópico, com diversos resultados envolvendo a conectividade algébrica e o autovetor associado.

Em particular, a conectividade algébrica é de interesse para o problema de ordenamento de grafos. O *survey* de Abreu *et al.* [3] apresenta resultados de ordenamento utilizando a conectividade algébrica, enfatizando as dificuldades em obter uma ordem parcial através desse parâmetro espectral.

Definição 3.1.1. Chamamos de *conectividade algébrica* de um grafo G o segundo menor autovalor laplaciano de G . Denotamos por $a(G)$ a conectividade algébrica de G .

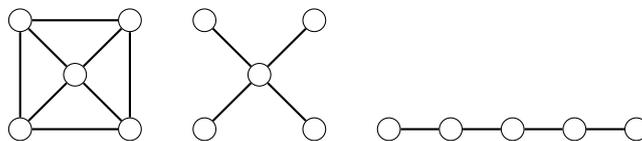


Figura 18: Um grafo G , a estrela S_5 e o caminho P_5 .

Exemplo 3.1. Vemos representados três grafos na Figura 18: um grafo G com 5 vértices, a estrela S_5 e o caminho P_5 , os quais possuem conectividades algébricas $a(G) = 3$, $a(S_5) = 1$ e $a(P_5) = \frac{3 - \sqrt{5}}{2}$.

Teorema 3.1.2. *Se G_1 e G_2 são grafos com o mesmo conjunto de vértices, mas com conjunto disjunto de arestas, então $a(G_1 \cup G_2) \geq a(G_1) + a(G_2)$.*

Demonstração. Primeiro notamos que $L(G_1 \cup G_2) = L(G_1) + L(G_2)$. Portanto

$$\begin{aligned} a(G_1 \cup G_2) &= \min_{x \in W} (x^T L(G_1)x + x^T L(G_2)x) \\ &\geq \min_{x \in W} (x^T L(G_1)x) + \min_{x \in W} (x^T L(G_2)x) \\ &= a(G_1) + a(G_2). \end{aligned}$$

□

Corolário 3.1.3. *A função que a cada grafo G associa a sua conectividade algébrica $a(G)$ é não-decrescente para grafos com o mesmo conjunto de vértices, isto é, $a(G_1) \leq a(G_2)$ se G_1 e G_2 têm o mesmo conjunto de vértices e $G_1 \subseteq G_2$.*

Exemplo 3.2. *Os grafos $G_1 = C_5$ e G_2 representados na Figura 19 possuem conectividade algébrica $a(G_1) = a(G_2) = \frac{5 - \sqrt{5}}{2} \approx 1,38197$, enquanto sua união $G = K_5$ possui conectividade algébrica $a(G) = 5 \geq 2,76394 \approx a(G_1) + a(G_2)$.*

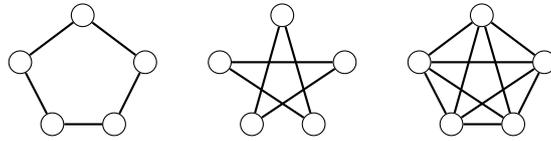


Figura 19: Grafos G_1 , G_2 e $K_5 = G_1 \cup G_2$.

O próximo resultado nos diz que ao remover-se k vértices de um grafo, sua conectividade algébrica diminui no máximo k unidades.

Proposição 3.1.4. *Seja G um grafo e considere G_1 o grafo obtido após a remoção de k vértices de G e suas arestas incidentes. Então*

$$a(G_1) \geq a(G) - k. \quad (3.1.1)$$

Demonstração. Seja G um grafo com n vértices e G_1 o grafo obtido ao remover-se, digamos, o vértice v_n . Definimos um novo grafo G' sendo uma cópia de G , mas com v_n adjacente a todos os outros vértices. Assim

$$L(G') = \begin{bmatrix} L(G_1) + I_{n-1} & -e \\ -e^T & n-1 \end{bmatrix}.$$

Seja $x \in \mathbb{R}^{n-1}$ um autovetor de $L(G_1)$ associado ao autovalor $a(G_1)$. Então

$$L(G') \begin{bmatrix} x \\ 0 \end{bmatrix} = (a(G_1) + 1) \begin{bmatrix} x \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Portanto, $a(G_1) + 1$ é um autovalor de $L(G')$ diferente de zero, isto é,

$$a(G') \leq a(G_1) + 1.$$

Pelo Corolário 3.1.3, $a(G) \leq a(G')$, o que implica (3.1.1) para $k = 1$.

O caso geral segue por indução. \square

Uma outra formulação da Proposição 3.1.4 acima nos garante o seguinte resultado:

Proposição 3.1.5. *Sejam $G = (V, E)$ um grafo, $V = V_1 \cup V_2$ uma partição*

de V e G_i o subgrafo de G induzido por V_i , para $i = 1, 2$. Então

$$a(G) \leq \min\{a(G_1) + |V_2|, a(G_2) + |V_1|\}.$$

Exemplo 3.3. Consideremos o grafo G e os subgrafos de G , G_1 e G_2 , ilustrados na Figura 20 conforme a decomposição dos vértices de G na forma $V = V_1 \cup V_2$ onde $V_1 = \{1, 2, 3, 4\}$ e $V_2 = \{5, 6\}$. Temos que $a(G_1) = 1$ e $a(G_2) = 2$, enquanto que $a(G) = 1.69722$, ou seja, de fato $a(G) = 1.69722 \leq \min\{1 + 2, 2 + 4\}$.

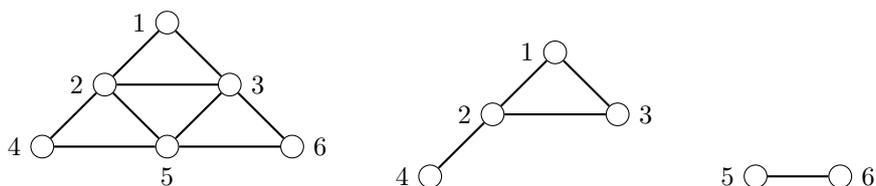


Figura 20: Grafo G e subgrafos G_1 e G_2 .

Podemos perceber também que, de acordo com a Proposição 3.1.4, ao removermos dois vértices de G , a conectividade algébrica de G não diminui mais do que duas unidades. Na realidade, pode inclusive acontecer da conectividade algébrica aumentar ao removermos alguns vértices. Por exemplo, ao remover-se quatro vértices de G , obtendo o subgrafo G_2 , a conectividade algébrica aumenta de 1.69722 para 2.

Portanto, começamos a notar que a conectividade algébrica não é necessariamente uma questão de quantidade de vértices, e sim da forma com que eles se conectam.

Definição 3.1.6. Dado um grafo G conexo, um **corte** de G é um subconjunto de vértices cuja remoção torna G desconexo.

A **conectividade de vértices** de G é o tamanho do menor corte de G e é denotada por $\kappa(G)$.

Analogamente, a **conectividade de arestas** de G é o menor número de arestas cuja remoção torna o grafo desconexo e é denotada por $\kappa'(G)$.

A proposição abaixo relaciona a conectividade algébrica com a conectividade de vértices de um grafo.

Proposição 3.1.7. *Seja $G = (V, E)$ um grafo não completo, então*

$$a(G) \leq \kappa(G).$$

Demonstração. Seja um corte qualquer $V_1 \subset V$ tal que $V - V_1 = V_2 \neq \emptyset$. Como o subgrafo G_2 induzido por V_2 em G não é conexo, então, pelo Teorema 2.3.12, $a(G_2) = 0$. Logo, pela Proposição 3.1.5:

$$a(G) \leq |V_1|.$$

□

Já o resultado a seguir permite relacionar as três conectividades discutidas.

Proposição 3.1.8. *Seja um grafo G , então*

$$\kappa(G) \leq \kappa'(G).$$

Demonstração. Seja $\kappa'(G) = k$ e $F = \{v_1w_1, v_2w_2, \dots, v_kw_k\}$ um subcon-

junto de arestas cuja remoção torna G desconexo tal que todos v_i estão na mesma componente conexa C de $G - F$.

Se $G - \{v_1, v_2, \dots, v_k\}$ é desconexo, então $\kappa(G) \leq k$. Caso contrário, $V(C) = \{v_1, v_2, \dots, v_k\}$ e, portanto, v_1 possui no máximo k vizinhos, a saber, os vértices v_i 's para $i \neq 1$ e os vértices w_i 's tais que $v_i = v_1$. Logo, a vizinhança de v_1 forma um corte de G de tamanho no máximo k , i.e., $\kappa(G) \leq \kappa'(G)$. \square

3.2 Vetor de Fiedler

Fiedler em [10] também fala sobre os autovetores associados a conectividade algébrica de um grafo e estabelece algumas propriedades estruturais do grafo através das entradas desses autovetores. Tais autovetores têm recebido certa atenção, por exemplo, por Fallat e Kirkland em [8] e Kirkland e Neumann em [16]. Alguns resultados sobre ordenamento de árvores utilizando a conectividade algébrica e o vetor de Fiedler podem ser vistos em Grone e Merris [13].

Definição 3.2.1. *Dados um grafo G com n vértices e sua matriz laplaciana L , considere $z = (z_1, \dots, z_n)$ um autovetor associado a $a(G)$. O autovetor z é chamado de **vetor de Fiedler** e a função que associa o valor z_i para o vértice v_i , para $1 \leq i \leq n$, é chamada de **numeração característica** de G .*

Exemplo 3.4. *Observemos a árvore T representada na Figura 21 com numeração característica exibida ao lado de cada vértice. Sua conectividade algébrica é $a(T) = 0.32487$ com multiplicidade 1 e seu autovetor associado*

é $z = (-0.0813, 0.2831, -0.4193, 0.4193, 0.4193, -0.6211)$, a menos de um múltiplo.

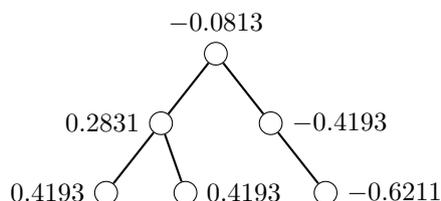


Figura 21: Árvore T com numeração característica.

Conseguimos notar que há vértices com numeração positiva, vértices com numeração negativa e que cada um desses subconjuntos de vértices induzem um subgrafo conexo. Também percebemos que há somente um par de vértices adjacentes tais que um deles possui numeração positiva e o outro numeração negativa. Por fim, ainda olhando para tais vértices adjacentes, observamos que todo caminho começando em um deles em direção às folhas possui numeração característica crescente ou decrescente, dependendo se a numeração do vértice inicial for positiva ou negativa, respectivamente. Todos esses fatos poderão ser generalizados, como veremos mais adiante.

Como o vetor $e = (1, \dots, 1)$ é autovetor associado ao autovalor $\mu_1 = 0$ da matriz laplaciana, ele é ortogonal a qualquer autovetor z associado a $\mu_2 = a(G)$, ou seja,

$$\sum_{i=1}^n z_i = 0,$$

para qualquer $z = (z_1, \dots, z_n)$ autovetor associado a $a(G)$.

Ainda sobre o autoespaço associado a $a(G)$, temos o seguinte resultado que segue diretamente da definição de autovetor.

Proposição 3.2.2. *Seja um grafo $G = (V, E)$ conexo com conectividade algébrica $a(G)$. Dado um vértice $v \in V$, então para qualquer autovetor $z = (z_1, \dots, z_n)$ associado a $a(G)$ temos*

$$\sum_{\{u,v\} \in E} z_u = (\deg(v) - a(G))z_v.$$

Demonstração. Seja L a matriz laplaciana de um grafo $G = (V, E)$ e um autovetor $z = (z_1, \dots, z_n)$ associado à conectividade algébrica $a = a(G)$, isto é, $Lz = az$. Portanto, dado um vértice $v \in V$, temos que

$$az_v = [az]_v = [Lz]_v = \deg(v)z_v - \sum_{\{u,v\} \in E} z_u,$$

onde $[x]_v = x_v$ representa a v -ésima componente do vetor x . □

Seja G um grafo com algum vértice pendente v . Seja z um vetor de Fiedler de G e seja $u \in G$ o único vértice adjacente a v . Então, pela Proposição 3.2.2, temos que $z_u = (1 - a(G))z_v$. Portanto, se $a(G) = 1$, então $z_u = 0$. Caso $z_v = 0$, então $z_u = 0$, ou seja, sempre que um vértice pendente tiver numeração característica nula, seu vizinho também terá.

Veremos agora um teorema devido a Fiedler [10] que classifica as árvores em dois tipos de acordo com sua numeração característica. No mesmo trabalho, Fiedler mostra resultado similar para grafos conexos em geral.

Teorema 3.2.3 (Teorema da Monotonicidade de Fiedler). *Seja T uma árvore com numeração característica dada por $z = (z_1, \dots, z_n)$. Então um dos dois casos ocorre:*

- (i) Todas as entradas z_i são diferentes de zero. Então T contém exatamente uma aresta $\{u, v\}$ tal que $z_u > 0$ e $z_v < 0$. A numeração característica dos vértices ao longo de qualquer caminho em T que começa em u e não contém v é crescente e a numeração característica dos vértices ao longo de qualquer caminho em T que começa em v e não contém u é decrescente.
- (ii) O conjunto $V_0 = \{i \in V : z_i = 0\}$ não é vazio. O subgrafo T_0 induzido por V_0 em T é conexo e existe exatamente um vértice $w \in V_0$ com pelo menos um vizinho que não pertence a V_0 . A numeração característica ao longo de qualquer caminho em T que começa em w é crescente, decrescente ou nula.

Apoiado nos casos anteriores, Merris em [17] estabelece as noções que veremos a seguir ao explorar os vértices que surgem da numeração característica.

Definição 3.2.4. Os vértices u e v do item (i) e o vértice w do item (ii) são chamados de **vértices característicos** de T . Se T for uma árvore com apenas um vértice característico, então T é dita do **Tipo I**, e caso T possua dois vértices característicos, então T é dita do **Tipo II**.

O próximo resultado sobre árvores do Tipo I indica quais vértices podem ser removidos sem alterar a conectividade algébrica e a numeração característica da árvore.

Teorema 3.2.5. Seja $T = (V, E)$ uma árvore com n vértices, onde $n \geq 4$, e suponha que exista uma numeração característica z e um vértice pendente

$v \in V$ tais que $z_v = 0$. Seja $u \in V$ o vértice adjacente a v . Denotando por $T' = (V', E')$ a subárvore de T obtida ao remover-se o vértice v . Então

(i) $z_u = 0$.

(ii) $a(T') = a(T)$.

(iii) z' é um vetor de Fiedler de T' , onde z' é a restrição de z a V' .

(iv) o vértice característico de T' é o mesmo vértice característico de T .

Demonstração. Merris [17], Teorema 3. □

Exemplo 3.5. Vemos na Figura 22 uma árvore T do Tipo I com conectividade algébrica $a(T) = 0.26795$ e numeração característica ao lado de cada vértice.

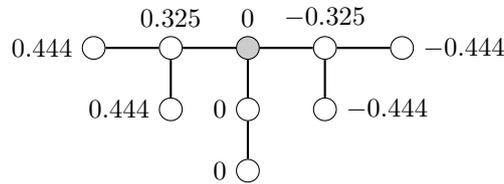


Figura 22: Árvore T do Tipo I com numeração característica.

Pelo Teorema 3.2.5, removendo-se o vértice pendente com numeração característica nula teremos a árvore T' na Figura 23, a qual possui conectividade algébrica $a(T') = a(T)$, mesma numeração característica e mesmo vértice característico de T .

Se aplicarmos mais uma vez o resultado no vértice pendente com numeração caracterísitca nula de T' , teremos outra árvore T'' , representada

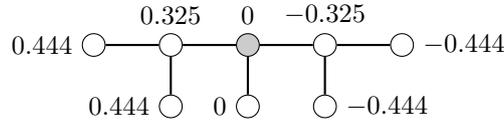


Figura 23: Árvore T' do Tipo I com numeração característica.

na Figura 24, com mesma conectividade algébrica, numeração característica e vértice característico que a árvore T .

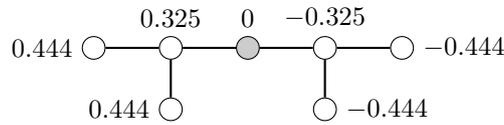


Figura 24: Árvore T'' do Tipo I com numeração característica.

A recíproca nem sempre vale, ou seja, dado um vértice pendente v com numeração característica nula, adicionar um vértice w adjacente a v não necessariamente mantém a conectividade algébrica, numeração característica e, conseqüentemente, vértice característico da árvore original.

Exemplo 3.6. Duas árvores T e T' são representadas na Figura 25. A árvore T possui conectividade algébrica $a(T) = 0.38297$ e temos um vértice pendente v com numeração característica nula. Os vértices característicos de cada árvore estão em destaque.

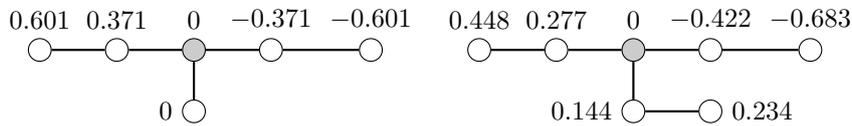


Figura 25: Árvores T e T' , respectivamente, com numerações características.

Ao adicionarmos um vértice adjacente a v , notamos que a nova árvore T' possui mesma conectividade algébrica que T , mas sua numeração

característica muda, não tendo mais vértice pendente com numeração nula.

Outro fato interessante é que se acrescentássemos em T' outro vértice adjacente a v , a árvore resultante não só teria conectividade algébrica e numeração característica diferente, como passaria a ser do Tipo II. A Figura 26 representa tal alteração, onde destacamos os vértices característicos.

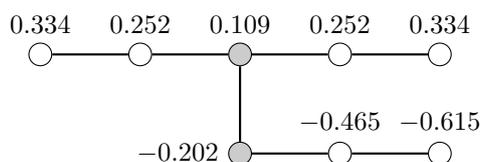


Figura 26: Árvore do Tipo II com numeração característica.

Definição 3.2.6. *Seja v um vértice de uma árvore T e denotemos por T_v o subgrafo de T obtido ao remover-se o vértice v . Um **ramo** de T em v é uma componente conexa de T_v .*

*Se B é um ramo de T em v , denotamos por $r(B)$ o vértice de B que é adjacente (em T) a v . Será conveniente ver B como uma árvore com raiz e em tal situação $r(B)$ será a **raiz** de B .*

Exemplo 3.7. *Consideremos a árvore T da Figura 27 com numeração característica ao lado dos vértices. Ao removermos o vértice característico v em destaque, teremos três ramos de T em v , isto é, há três componentes conexas em T_v .*

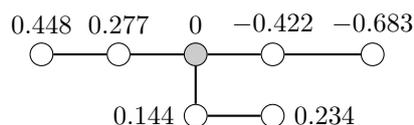


Figura 27: Árvore T com numeração característica.

Aproveitamos para observar que se T é uma árvore do Tipo I com vértice característico v e B é um ramo de T em v , então, pelo Teorema 3.2.3, a numeração característica nos vértices de B é positiva e crescente, negativa e decrescente ou identicamente nula. Além disso, como o vetor de Fiedler é ortogonal ao autovetor $e = (1, \dots, 1)$, então sempre existirá pelo menos um ramo de T em v com numeração positiva e outro ramo com numeração negativa.

3.3 Valor de Perron

Kirkland *et al.* mostram em [15] que a conectividade algébrica de uma árvore T e os vetores de Fiedler associados podem ser descritos em termos do valor de Perron de certas matrizes associadas a ramos de T em um vértice v de T .

No trabalho original, são consideradas árvores com pesos nas arestas, mas, para o nosso propósito, todas as arestas terão peso 1, logo adaptamos os resultados que seguem. As demonstrações omitidas nessa seção podem ser encontradas no trabalho original citado.

Definição 3.3.1. *Dada uma árvore T e vértices u e v de T , denotamos por $P_{u,v}$ o único caminho em T de u a v .*

Proposição 3.3.2. *Seja T uma árvore com n vértices e matriz laplaciana L e seja L_k a submatriz principal de L formada ao remover-se a k -ésima linha e coluna de L . Então a entrada (i, j) de L_k^{-1} é igual a quantidade de arestas em $P_{i,k} \cap P_{j,k}$, isto é, a quantidade de arestas em comum no caminho de v_i a*

v_k e no caminho de v_j a v_k .

Demonstração. Podemos supor, sem perda de generalidade, que $k = n$. A demonstração será feita por indução no número de vértices. Para o caso $n = 2$, temos $L_2 = [1]$ e o resultado segue. Podemos então supor que o resultado é válido para $n_0 - 1 \geq 2$ e que T é uma árvore com n_0 vértices. Novamente sem perda de generalidade, vamos considerar o vértice v_1 como sendo um vértice pendente adjacente ao vértice v_2 .

Seja M a matriz laplaciana da árvore T' induzida pelos vértices v_2, \dots, v_{n_0} e seja M_{n_0} a submatriz principal de M formada ao remover-se a última linha e a última coluna de M . Assim, temos que

$$L_{n_0} = \left[\begin{array}{c|c} 1 & -e_1^T \\ \hline -e_1 & M_{n_0} + e_1 e_1^T \end{array} \right],$$

onde $e_1 = (1, 0, \dots, 0)$. Calculando a inversa, obtemos

$$L_{n_0}^{-1} = \left[\begin{array}{c|c} 1 + e_1^T M_{n_0}^{-1} e_1 & e_1^T M_{n_0}^{-1} \\ \hline M_{n_0}^{-1} e_1 & M_{n_0}^{-1} \end{array} \right].$$

Assim, se $i, j \geq 2$, a fórmula para a entrada (i, j) de $L_{n_0}^{-1}$ segue pela hipótese de indução. Além disso, para $j \geq 2$, vemos que $P_{1,k} \cap P_{j,k} = P_{2,k} \cap P_{j,k}$, pois o vértice v_1 é pendente adjacente ao vértice v_2 . Por sua vez, $P_{2,k} \cap P_{j,k}$ é o mesmo conjunto de arestas em T e T' . Logo, as entradas $(1, j)$ e $(j, 1)$ da primeira linha e coluna de $L_{n_0}^{-1}$ podem ser calculadas.

Para calcularmos a primeira entrada da matriz $L_{n_0}^{-1}$, observamos que

como o vértice v_1 é pendente e adjacente ao vértice v_2 , temos que $P_{1,k} = P_{2,k} \cup \{e_{1,2}\}$, onde $e_{1,2}$ é a aresta incidente aos vértices v_1 e v_2 . Portanto, $|P_{1,k} \cap P_{1,k}| = 1 + |P_{2,k} \cap P_{2,k}| = 1 + e_1^T M_{n_0}^{-1} e_1$, concluindo a demonstração. \square

Assim, podemos concluir da Proposição 3.3.2 que a entrada (i, j) da matriz L_k^{-1} será positiva se e somente se os vértices v_i e v_j estiverem no mesmo ramo de T em v_k e será nula caso contrário. Isso mostra que a matriz L_k^{-1} é semelhante a uma matriz diagonal em blocos, cada bloco associado a um ramo de L em v_k , sendo a quantidade de blocos igual ao grau do vértice v_k . Tais fatos nos levam à próxima definição.

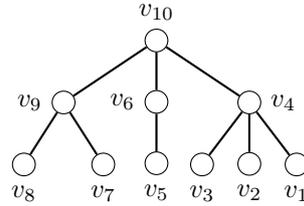
Definição 3.3.3. *Sejam uma árvore T , sua matriz laplaciana L , um vértice v de T e um ramo B de T em v . Chamamos de **matriz gargalo** de B o bloco diagonal da matriz L_k^{-1} associado ao ramo B em v .*

*Chamamos de **valor de Perron de B** o valor de Perron da matriz gargalo de B e dizemos que B é um **ramo de Perron** se seu valor de Perron é igual ao raio espectral de L_k^{-1} .*

Ao definirmos ramo de Perron, como sua matriz gargalo é positiva, garantimos pelo Teorema de Perron-Frobenius que seu raio espectral é um autovalor. Além disso, também é possível que exista mais de uma matriz gargalo que atinja o raio espectral de L_k^{-1} .

Exemplo 3.8. *Seja T a árvore representada na Figura 28 com matriz laplaciana L , onde numeramos os vértices de forma a facilitar a organização em blocos da matriz L_k^{-1} . Se considerarmos a remoção da última linha e coluna de L , formando uma nova árvore, seria como se removêssemos o vértice v_{10}*

e suas arestas incidentes, gerando três ramos de T em v_{10} , onde cada ramo pode ser associado a um bloco da matriz L_{10}^{-1} .



$$L_{10}^{-1} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Figura 28: Árvore T e a matriz L_{10}^{-1} .

De fato percebemos que a matriz L_{10}^{-1} possui três blocos B_1 , B_2 e B_3 evidenciados abaixo. Cada bloco é a matriz gargalo daquele ramo em v_{10} .

$$B_1 = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad B_2 = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad B_3 = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Observamos que o ramo com os vértices v_1 , v_2 , v_3 e v_4 associados ao bloco B_1 é o ramo de Perron de T em v_{10} , pois os blocos B_2 e B_3

são submatrizes principais de B_1 , ou seja, pelo Teorema 2.2.17, temos que $\rho(B_1) > \rho(B_3) > \rho(B_2)$.

Com base no exemplo anterior, podemos concluir que quando um ramo contém todos os outros como subgrafos, este será o ramo de Perron da árvore no vértice em questão. Mais precisamente, se B_1 e B_2 são ramos em um vértice v_k tais que B_2 é isomorfo a alguma subárvore de B_1 , então a matriz gargalo de B_2 será dominada pela devida submatriz da matriz gargalo de B_1 . Portanto, o valor de Perron de B_2 será menor que o valor de Perron de B_1 .

Exibimos a seguir resultados que relacionam a conectividade algébrica de uma árvore e o valor de Perron de certas matrizes. Começamos com um teorema que utiliza a ideia de ramo de Perron para discutir árvores do Tipo I e seu vértice característico, associando com o cálculo da conectividade algébrica.

Teorema 3.3.4. *Seja T uma árvore com matriz laplaciana L . Então T é do Tipo I com vértice característico v_k se e somente se há dois ou mais ramos de Perron em v_k . Neste caso, a conectividade algébrica de T é*

$$a(T) = \frac{1}{\rho(L_k^{-1})}.$$

Demonstração. Kirkland *et al.* [15], Teorema 2. □

Veremos agora um resultado similar para árvores do Tipo II e a seguir exibimos uma forma de criar árvores desse tipo, já sabendo quais são os vértices característicos.

Teorema 3.3.5. *Seja T uma árvore com pelo menos dois vértices. Suponha que v_i e v_j sejam vértices adjacentes de T . Então T é do Tipo II com vértices característicos v_i e v_j se e somente se existe um número real $\gamma \in (0, 1)$ tal que*

$$\rho(M_1 - \gamma J) = \rho(M_2 - (1 - \gamma)J),$$

onde M_1 é a matriz gargalo do ramo em v_j que contém v_i e M_2 é a matriz gargalo do ramo em v_i que contém v_j .

Além disso, caso a condição seja válida, a conectividade algébrica de T satisfaz

$$a(T) = \frac{1}{\rho(M_1 - \gamma J)} = \frac{1}{\rho(M_2 - (1 - \gamma)J)}.$$

Demonstração. Kirkland et al. [15], Teorema 1. □

Exemplo 3.9. *Uma forma fácil de criar uma árvore do Tipo II, sabendo quem são seus vértices característicos, será mostrada agora. Considere duas cópias de uma árvore T e crie uma nova árvore T' conectando com uma aresta um vértice da primeira cópia de T com o mesmo vértice da segunda cópia, formando uma árvore T' simétrica em relação a essa nova aresta.*

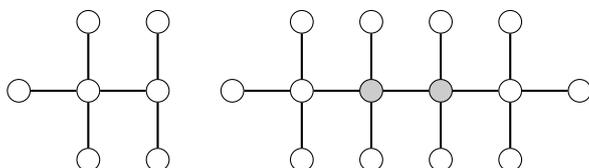


Figura 29: Árvores T e T' , sendo T' do Tipo II.

Vemos as árvores T e T' representadas na Figura 29, onde o vértice de grau 3 foi escolhido para ser conectado com sua respectiva cópia. Pelo

Teorema 3.3.5, vemos que tais vértices em destaque são os vértices característicos de T' , pois a condição do teorema é satisfeita com $\gamma = \frac{1}{2}$, já que suas matrizes gargalo M_1 e M_2 são idênticas.

Como consequência do Teorema 3.3.5, temos o seguinte corolário que garante uma forma de encontrar os vértices característicos de uma árvore.

Corolário 3.3.6. *Seja uma árvore T com vértices adjacentes v_i e v_j . Então T é do Tipo II com vértices característicos v_i e v_j se e somente se o ramo em v_i que contém v_j é o único ramo de Perron em v_i e o ramo em v_j que contém v_i é o único ramo de Perron em v_j .*

Demonstração. Kirkland *et al.* [15], Corolário 1.1. □

Unindo o Corolário 3.3.6 com o Teorema 3.3.4, temos o seguinte resultado para distinguir árvores do Tipo I e II de acordo com a quantidade de ramos de Perron nos vértices da árvore em questão. Este corolário generaliza outro resultado dado por Grone e Merris em [12], onde é provado que sempre é possível acrescentar um vértice pendente ao vértice característico de uma árvore do Tipo I sem alterar seu tipo, vértice característico e ramos de Perron.

Corolário 3.3.7. *Seja T uma árvore. Então T é do Tipo I se e somente se há exatamente um vértice v_k com dois ou mais ramos de Perron em v_k . Consequentemente, T é do Tipo II se e somente se em cada vértice existir somente um ramo de Perron.*

Dada uma árvore T do Tipo I com vértice característico v_k , veremos agora como é fácil criar outras árvores também do Tipo I a partir de T .

Para tanto, basta observarmos que uma subárvore de um ramo de T em v_k , quando unida ao vértice característico formando uma nova árvore T' , terá valor de Perron menor ou igual ao valor de Perron dos ramos de Perron de T' em v_k , sendo, portanto, T' uma árvore do Tipo I.

Exemplo 3.10. Temos representadas na Figura 30 três árvores T , T' e T'' . A primeira delas possui dois ramos de Perron no vértice de grau 4 em destaque e, portanto, T é do Tipo I e esse é seu vértice característico, digamos, v_k . Se adicionarmos no vértice característico qualquer subárvore de um ramo de T em v_k , teremos formado outra árvore ainda do Tipo I, pois tal subárvore terá valor de Perron no máximo igual ao raio espectral de algum ramo de Perron de T em v_k .

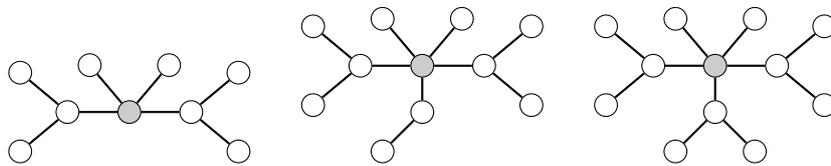


Figura 30: Árvores T , T' e T'' , sendo todas do Tipo I.

As árvores T' e T'' são dois exemplos do que podemos acrescentar em v_k e ainda permanecer com árvores do Tipo I com o mesmo vértice característico e, conseqüentemente, mesma conectividade algébrica.

Com os resultados anteriores podemos descobrir expressões para o valor de Perron de certas árvores. Em particular, como utilizaremos no próximo capítulo os valores de Perron do caminho P_n e da estrela S_n , mostraremos a seguir como obter tais expressões.

Para obtermos uma expressão para $\rho(P_n)$ vamos construir uma árvore

T do Tipo I com ramos de Perron iguais a P_n cuja conectividade algébrica $a(T)$ é conhecida.

Como uma árvore T do Tipo I possui dois ou mais ramos de Perron no vértice característico v , consideraremos duas cópias de P_n adjacentes a v para formarmos T . Dessa forma, vemos que $T = P_{2n+1}$ com vértices $v_1, v_2, \dots, v_{2n+1}$, cujo vértice característico corresponde ao vértice central v_{n+1} , em destaque na Figura 31.

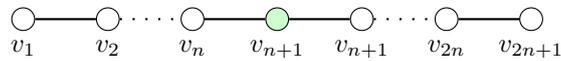


Figura 31: Caminho P_{2n+1} com vértice característico v_{n+1} .

Conforme [6], temos que $a(P_{2n+1}) = 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{2n+1} \right) \right)$ e, pelo Teorema 3.3.4, concluímos que

$$\rho(P_n) = \frac{1}{a(P_{2n+1})} = \frac{1}{2(1 - \cos(\frac{\pi}{2n+1}))}, \quad (3.3.1)$$

pois P_n é um ramo de Perron em v_{n+1} .

De maneira análoga, com intuito de obter a expressão para $\rho(S_n)$, construiremos uma árvore formada por um vértice (característico) adjacente ao vértice central de duas estrelas S_n .

Com efeito, considere o caminho P_3 com vértices v_1, v_2, v_3 onde foram adicionados $n-1$ vértices pendentes adjacentes a v_1 e $n-1$ vértices pendentes adjacentes a v_3 , com $n \geq 2$. Vemos representada na Figura 32 a árvore T obtida, com vértice característico v_2 em destaque.

Para obtermos a conectividade algébrica de T , utilizamos o polinômio

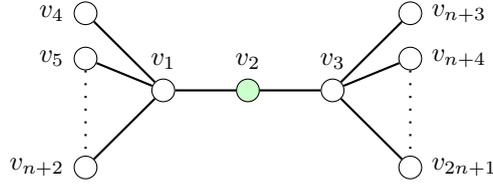


Figura 32: Árvore T com vértice característico v_2 .

característico da sua matriz laplaciana L dado por

$$\det(xI - L) = x(x - 1)^{2n-4}(x^2 - (n + 3)x + 2n + 1)(x^2 - (n + 1)x + 1),$$

conforme [20].

Os primeiros fatores do polinômio nos indicam que temos uma raiz igual a zero e $2n - 4$ raízes iguais a 1. Denotando o próximo fator por $f(x) = x^2 - (n + 3)x + 2n + 1$, observamos que $f(1) > 0$, $f(n) < 0$ e que $f(2n) > 0$, ou seja, as duas raízes de $f(x)$ são maiores que 1.

Olhando para o último fator $x^2 - (n + 1)x + 1$, notamos que o produto de suas raízes deve ser igual a 1. Ao vermos que tais raízes são diferentes, concluímos que uma delas é menor e a outra é maior do que 1. Assim concluímos que a conectividade algébrica de T é a menor raiz deste fator, isto é, $a(T) = \frac{n + 1 - \sqrt{(n + 3)(n - 1)}}{2}$.

Então, pelo Teorema 3.3.4, temos que

$$\rho(S_n) = \frac{1}{a(T)} = \frac{n + 1 + \sqrt{(n + 3)(n - 1)}}{2}, \quad (3.3.2)$$

pois S_n é um ramo de Perron em v_2 .

O próximo resultado nos ajuda a encontrar o vértice característico de uma árvore através do ramo de Perron em um vértice qualquer, além de descobrir se a árvore é do Tipo I ou II.

Proposição 3.3.8. *Sejam T uma árvore e v um vértice de T . Se T possui um único ramo de Perron em v , então este é o ramo que contém os vértices característicos de T .*

Demonstração. Começamos escolhendo um vértice v qualquer de T . Se houver dois ou mais ramos de Perron em v , pelo Corolário 3.3.7, sabemos que este é o vértice característico de T , sendo T uma árvore do Tipo I. Caso contrário, existe somente um ramo de Perron B em v . Seja v_1 o vértice adjacente a v que está em B . Para $i \geq 1$, fazemos o seguinte processo: se existe mais de um ramo de Perron em v_i , este é nosso vértice característico. Se houver somente um ramo de Perron em v_i , seja v_{i+1} o vértice adjacente a v_i que está nesse ramo de Perron, desde que $v_{i+1} \neq v_{i-1}$. Caso contrário, finalizamos o processo.

Por termos um número finito de vértices, tal construção terminará de uma das seguintes formas: ou v_i tem mais de um ramo de Perron e, neste caso, v_i é nosso vértice característico e T é do Tipo I, ou v_i tem somente um ramo de Perron que contém v_{i-1} e, portanto, v_{i-1} e v_i são nossos vértices característicos e T é do Tipo II. De qualquer forma, o caminho v_1, \dots, v_i está no ramo de Perron em v e, portanto, contém os vértices característicos. \square

4 VALOR DE PERRON COMBINATÓRIO

As definições e resultados exibidos neste capítulo, com exceção da última seção, são baseados em Andrade e Dahl [4]. Os autores afirmam que o valor de Perron combinatório aproxima o valor de Perron, sendo $\rho_c(T)$ uma cota inferior para $\rho(T)$.

4.1 Matriz Caminho

A seguinte noção é simples, mas central para a compreensão e visualização do que segue. Como vimos no capítulo anterior, ao removermos um vértice v de uma árvore T obtemos ramos de T em v .

Definição 4.1.1. *Seja T uma árvore com um vértice v . Dado um ramo B de T em v , o único vértice de B adjacente a v em T é chamado de **raiz interna** de B , ou simplesmente **raiz** de B , e o vértice v de T é chamado de **raiz externa** de B .*

As árvores a partir de agora são consideradas com raiz (interna) e, portanto, uma árvore com raiz pode ser vista como um ramo de uma outra árvore.

Definição 4.1.2. *Seja uma árvore T com vértices $\{v_1, \dots, v_n\}$ e raiz r . Chamamos de **matriz caminho** de T a matriz quadrada de ordem n , denotada por $N = [n_{ij}]$, com entrada n_{ij} igual a 1 se o vértice v_i está no caminho*

de r a v_j e igual a 0, caso contrário, ou seja,

$$n_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } v_i \in V(P_{r,j}) \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases}$$

onde $V(P_{r,j})$ é o conjunto dos vértices no caminho $P_{r,j}$.

O número de vértices no caminho $P_{r,j}$, denotado por d_j , é chamado de **distância** do vértice v_j e o vetor $d = (d_1, d_2, \dots, d_n)$ é chamado **vetor distância** da árvore T . Caso haja necessidade de explicitar a árvore T em questão, a distância d_j é denotada por $d(T, v_j)$.

Exemplo 4.1. Vemos representada na Figura 33 uma árvore T com $n = 7$ vértices e raiz $r = v_1$. T possui vetor distância $d = (1, 2, 2, 2, 3, 3, 3)$.

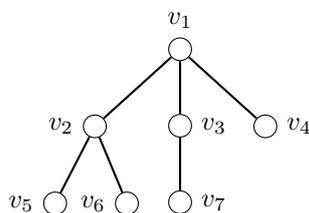


Figura 33: Árvore T com raiz r .

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

Podemos notar que a soma da j -ésima coluna equivale à distância d_j do vértice v_j até a raiz. Aproveitamos para notar, também, que as entradas não nulas em cada coluna j de N correspondem aos vértices no caminho $P_{r,j}$. Por exemplo, a quinta coluna de N mostra que o caminho da raiz até v_5 é dado por $\{v_1, v_2, v_5\}$.

Observamos que a matriz N depende da numeração dos vértices. Utilizaremos a numeração por largura (*breadth-first*): primeiro a raiz r , depois seus vizinhos, depois os vizinhos dos vizinhos e assim por diante, até chegarmos nas folhas de T .

Exemplo 4.2. *Dois tipos de árvores em particular, a estrela e o caminho, serão de interesse. A estrela S_n com raiz interna no vértice de grau $n - 1$, possui matriz caminho triangular superior com 1's na diagonal principal e na primeira linha e 0's nas outras entradas, isto é,*

$$N_{S_n} = \begin{bmatrix} 1 & e^T \\ 0 & I_{n-1} \end{bmatrix}$$

e tem vetor distância $d = (1, 2, 2, \dots, 2)$.

Já o caminho P_n com raiz interna em um vértice de grau 1 possui matriz caminho N_{P_n} com 1's em toda parte triangular superior e vetor distância $d = (1, 2, 3, \dots, n)$.

Assim vemos que a estrela e o caminho são extremais no sentido que a matriz caminho de cada um possui o mínimo e o máximo de 1's possível, respectivamente.

Lema 4.1.3. *Sejam T uma árvore com vértices $\{v_1, \dots, v_n\}$ e raiz $r = v_1$, $N = [n_{ij}]$ e $M = [m_{ij}]$ as matrizes caminho e gargalo de T , respectivamente, e $d = (d_1, d_2, \dots, d_n)$ o vetor distância de T . Então:*

(i) N é triangular superior com 1's na primeira linha e na diagonal principal.

(ii) $d = N^T e$, onde $e = (1, 1, \dots, 1)$.

(iii) $1 = d_1 \leq d_2 \leq \dots \leq d_n$.

(iv) $M = N^T N$.

(v) N é inversível e M é positiva definida.

Demonstração. Temos que $n_{ii} = 1$, para $1 \leq i \leq n$, pois o vértice v_i certamente está no caminho $P_{r,i}$. Além disso, como a raiz $r = v_1$ sempre está em todos os caminhos $P_{r,j}$, concluímos que $n_{1j} = 1$, para $1 \leq j \leq n$. Além disso, pela forma de numeração dos vértices, temos que $n_{ij} = 0$, para $i > j$, pois não é possível que o vértice v_i esteja no caminho que só vai até v_j .

Para o item (ii), observamos que a j -ésima coluna de N terá exatamente d_j entradas iguais a 1, correspondentes ao número de vértices no caminho $P_{r,j}$.

Novamente pela forma de numeração dos vértices, temos que $d_r = d_1 = 1$ e, se $i > j$, então, ou os vértices i e j estão à mesma distância em relação à raiz, isto é, $d_i = d_j$, ou o vértice v_i está em algum nível abaixo do vértice v_j , isto é, $d_i > d_j$.

Temos que a entrada (i, j) do produto $N^T N$ é

$$[N^T N]_{ij} = \sum_{k=1}^n n_{ik}^T n_{kj} = \sum_{k=1}^n n_{ki} n_{kj},$$

que é o produto escalar dos vetores cujas entradas não nulas correspondem aos vértices nos caminhos $P_{r,i}$ e $P_{r,j}$. Assim, a entrada (i, j) de $N^T N$ conta quantos vértices estão em ambos os caminhos, pois se $v_k \notin V(P_{r,i}) \cap V(P_{r,j})$, então $n_{ki} n_{kj} = 0$. Caso contrário, $n_{ki} n_{kj} = 1$. Logo $[N^T N]_{ij} = \sum_{k=1}^n n_{ki} n_{kj} = m_{ij}$.

Por fim, pelo item (i), as colunas de N são vetores linearmente independentes. Pelo item (iv), segue do Teorema 2.2.11 que M é positiva definida. \square

4.2 Valor de Perron Combinatório

Andrade e Dahl definem em [4] um novo parâmetro que pode ser calculado diretamente de uma árvore T e é uma cota inferior para o valor de Perron de T , podendo, possivelmente, ser utilizado para aproximar também

a conectividade algébrica da árvore.

Definição 4.2.1. *Dada uma árvore T com raiz, o valor de Perron combinatório de T , denotado por $\rho_c(T)$, é o número real*

$$\rho_c(T) = \frac{\|Nd\|^2}{\|d\|^2} = \frac{d^T N^T N d}{d^T d},$$

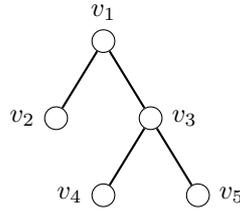
onde N é a matriz caminho de T e d é o vetor distância de T .

Notamos que o valor combinatório de uma árvore T com raiz interna r só depende de N , que, por sua vez, depende de T e da raiz r , pois o vetor distância d também depende somente de N . Além disso, como a matriz gargalo M de T é tal que $M = N^T N$, temos que $\rho_c(T) = \frac{d^T M d}{d^T d}$, logo podemos pensar no valor de Perron combinatório de T como o quociente de Rayleigh de M avaliado em d .

Exemplo 4.3. *Na Figura 34 temos uma árvore T com raiz v_1 . O vetor distância de T é $d = (1, 2, 2, 3, 3)$. A Figura também apresenta as matrizes caminho (N) e gargalo (M) de T .*

O valor de Perron de T é $\rho(T) \approx 7,829$ enquanto o valor de Perron combinatório de T é $\rho_c(T) = 7, \bar{6}$.

A seguinte notação será útil para a obtenção de uma fórmula para o valor de Perron combinatório diretamente da árvore. Dados vértices v_i e v_j de uma árvore T com raiz r , se v_j está “abaixo” de v_i em relação a r , isto é, se o caminho $P_{r,j}$ contém o caminho $P_{r,i}$ como subgrafo, escrevemos $j \preceq i$. Em particular, como $P_{r,i} \subseteq P_{r,i}$, temos que $i \preceq i, \forall v_i \in V(T)$.



$$N = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad M = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 3 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 2 & 3 \end{bmatrix}.$$

Figura 34: Árvore T e suas matrizes N e M .

Exemplo 4.4. Para a árvore T representada na Figura 35, temos que $6 \preceq 2$, $3 \preceq 1$ e $8 \preceq 1$, por exemplo. Também podemos observar que todo vértice está sempre abaixo da raiz.

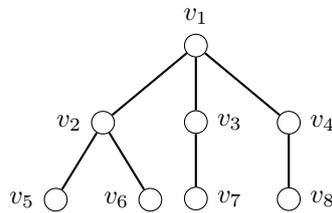


Figura 35: Árvore T .

O próximo resultado indica uma forma de calcular o valor de Perron combinatório de uma árvore diretamente da árvore, sem a necessidade da multiplicação de matrizes e vetores.

Proposição 4.2.2. O valor de Perron combinatório de T pode ser expresso da forma

$$\rho_c(T) = \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2}, \quad (4.2.1)$$

onde d é o vetor distância de T e $\sigma_i = \sum_{j \preceq i} d_j$.

Demonstração. Seja T uma árvore com raiz e vetor distância d . Temos que $\|d\|^2 = \sum_{i=1}^n d_i^2$, logo basta mostrar que $\|Nd\|^2 = \sum_{i=1}^n \sigma_i^2$, onde N é a matriz caminho de T .

Observamos que a i -ésima linha de N está associada ao vértice v_i , mais precisamente, possui 1 nas colunas j relativas aos caminhos $P_{r,j}$ que contêm o vértice v_i e 0 caso contrário. Portanto, multiplicar a i -ésima linha de N por d é o mesmo que somar todas as distâncias d_j tais que o vértice v_j está abaixo do vértice v_i , ou seja,

$$[Nd]_i = \sum_{j \preceq i} d_j.$$

Como essa é exatamente a definição de σ_i , temos que $\|Nd\|^2 = \sum_{i=1}^n \sigma_i^2$, completando a demonstração. \square

Podemos observar que σ_i é a soma de todas as distâncias dos vértices v_j tais que $P_{r,i} \subseteq P_{r,j}$, pois, por definição, σ_i é a soma das distâncias dos vértices v_j que estão abaixo do vértice v_i em relação à raiz. Assim, temos uma outra maneira de calcular $\rho_c(T)$ a partir da estrutura da árvore T .

Exemplo 4.5. Na Figura 36 representamos a árvore T com vetor distância $d = (1, 2, 2, 2, 3, 3, 3, 3)$.

Podemos ver que $\sigma_1 = 1 + 2 + 2 + 2 + 3 + 3 + 3 + 3$, pois é sempre a soma de todas as distâncias, $\sigma_2 = 2 + 3 + 3$, $\sigma_3 = \sigma_4 = 2 + 3$ e $\sigma_i = 3$ para $i \in \{5, 6, 7, 8\}$.

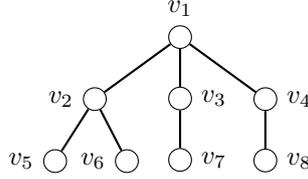


Figura 36: Árvore T com vetor distância $d = (1, 2, 2, 2, 3, 3, 3, 3)$.

Logo, podemos calcular facilmente o valor de Perron combinatório desta árvore. Com efeito,

$$\rho_c(T) = \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2} = \frac{19^2 + 8^2 + 2(5)^2 + 4(3)^2}{19^2} \approx 1,415.$$

Observamos que o valor de Perron combinatório depende da escolha da raiz. No resultado que segue sobre as fórmulas para $\rho_c(P_n)$ e $\rho_c(S_n)$, a raiz do caminho P_n é qualquer um dos vértices de grau 1, enquanto a raiz da estrela S_n será o vértice de grau $n - 1$.

Proposição 4.2.3. *Seja P_n e S_n o caminho e a estrela com n vértices, respectivamente. Então*

$$\rho_c(P_n) = \frac{2n^2 + 2n + 1}{5} \quad (4.2.2)$$

$$\rho_c(S_n) = n + \frac{3n - 3}{4n - 3}. \quad (4.2.3)$$

Demonstração. Vamos utilizar a expressão (4.2.1) para calcular o valor de Perron combinatório de cada árvore em questão, começando com o caminho P_n com raiz em algum vértice de grau 1. Como o vetor distância de P_n é

$d = (1, 2, 3, \dots, n)$, temos que

$$\sum_{i=1}^n d_i^2 = 1^2 + 2^2 + \dots + n^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} = \frac{2n^3 + 3n^2 + n}{6}.$$

Além disso, temos que $\sigma_i = \sum_{j \leq i} d_j = \sum_{j=i}^n j$ e, portanto,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 &= \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=i}^n j \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n [i + (i+1) + \dots + n]^2 \\ &= \sum_{i=1}^n [(1+2+\dots+n) - (1+2+\dots+(i-1))]^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \left[\frac{n(n+1)}{2} - \frac{i(i-1)}{2} \right]^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{n^4 + 2n^3 + i^2(-2n^2 - 2n + 1) + i(2n^2 + 2n) + n^2 + i^4 - 2i^3}{4} \\ &= \frac{4n^5 + 10n^4 + 10n^3 + 5n^2 + n}{30}, \end{aligned}$$

onde usamos que

$$\sum_{i=1}^n i = \frac{n(n+1)}{2}, \quad \sum_{i=1}^n i^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6},$$

$$\sum_{i=1}^n i^3 = \frac{n^2(n+1)^2}{4} \quad \text{e} \quad \sum_{i=1}^n i^4 = \frac{n(n+1)(2n+1)(3n^2+3n-1)}{30}.$$

Assim, dividindo os valores calculados, encontramos

$$\rho_c(P_n) = \frac{\sum \sigma_i^2}{\sum d_i^2} = \frac{2n^2 + 2n + 1}{5}.$$

Já no caso da estrela S_n com raiz no vértice de grau $n - 1$ o cálculo é mais fácil, pois seu vetor distância é $d = (1, 2, 2, \dots, 2)$, logo $\sum_{i=1}^n d_i^2 = 1^2 + 2^2(n-1) = 4n - 3$. Além disso, $\sigma_1 = (1 + 2 + \dots + 2) = 1 + 2(n-1) = 2n - 1$ e $\sigma_i = 2$, para $2 \leq i \leq n$. Sendo assim, para o numerador temos

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 &= (2n - 1)^2 + 2^2(n - 1) \\ &= 4n^2 - 3 \end{aligned}$$

e encontramos por fim

$$\rho_c(S_n) = \frac{\sum \sigma_i^2}{\sum d_i^2} = \frac{4n^2 - 3}{4n - 3} = n + \frac{3n - 3}{4n - 3}.$$

□

Exemplo 4.6. Calculando o valor de Perron combinatório do caminho P_5 , encontramos

$$\rho_c(P_5) = \frac{2(5)^2 + 2(5) + 1}{5} = 12,2$$

enquanto o valor de Perron de P_5 é $\rho(P_5) = \frac{1}{2(1 - \cos(\frac{\pi}{11}))} \approx 12,343$, utilizando (3.3.1).

Já para a estrela S_4 , temos o valor de Perron combinatório

$$\rho_c(S_4) = 4 + \frac{3(4) - 3}{4(4) - 3} \approx 4,692$$

e, por (3.3.2), temos que $\rho(S_4) = \frac{5 + \sqrt{21}}{2} \approx 4,791$ para o valor de Perron de S_4 .

Definição 4.2.4. Se uma árvore tem no máximo um vértice com grau maior que 2, a chamamos de **estrela generalizada** (*starlike*) e tal vértice é chamado de **vértice central**.

Se uma estrela generalizada tiver p caminhos partindo do vértice central, todos de comprimento k , então será chamada de **estrela generalizada regular** e denotada por $S_{p,k}$.

Notamos que o caminho e a estrela são casos particulares da estrela generalizada regular, para $p = 1$ e $k = 1$, respectivamente.

Exemplo 4.7. Na Figura 37 representamos uma estrela generalizada e uma estrela generalizada regular com $p = 3$ caminhos de comprimento $k = 4$, onde nos dois casos o primeiro vértice (em destaque) é o vértice central, pois seu grau é maior que 2.

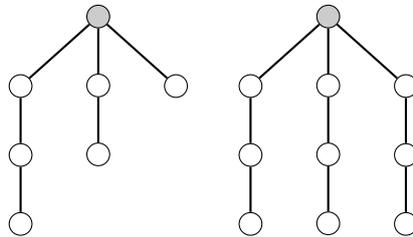


Figura 37: Estrela generalizada e estrela generalizada regular $S_{3,4}$.

Utilizando sempre a numeração dos vértices por largura e considerando o vértice central como raiz, o vetor distância da estrela generalizada é dado por $d = (1, 2, 2, 2, 3, 3, 4)$, enquanto para $S_{3,4}$ é $d = (1, 2, 2, 2, 3, 3, 3, 4, 4, 4)$.

Considerando o vértice central da estrela generalizada como sua raiz, o vetor distância de $S_{p,k}$ é dado por $d = (1, 2, \dots, 2, 3, \dots, 3, \dots, k, \dots, k)$,

onde cada número $i \in \{2, \dots, k\}$ se repete p vezes, pois em cada nível da árvore há p vértices, um de cada caminho de comprimento k . Por “nível” queremos dizer vértices que possuem a mesma distância até a raiz, ou seja, vértices i e j estão no mesmo nível se $d_i = d_j$.

Proposição 4.2.5. *Seja $S_{p,k}$ a estrela generalizada regular com p caminhos de comprimento k . Então*

$$\rho_c(S_{p,k}) = \frac{p(\eta_k - \xi_k^2) + (p\xi_k - p + 1)^2}{\frac{pk(k+1)(2k+1)}{6} - p + 1}, \quad (4.2.4)$$

$$\text{onde } \eta_k = \frac{4k^5 + 10k^4 + 10k^3 + 5k^2 + k}{30} \text{ e } \xi_k = \frac{k(k+1)}{2}.$$

Demonstração. Iniciando pelo cálculo do denominador de $\rho_c(S_{p,k})$, como o vetor distância de $S_{p,k}$ é $d = (1, 2, \dots, 2, 3, \dots, 3, \dots, k, \dots, k)$, onde cada número $i \in \{2, \dots, k\}$ se repete p vezes, temos que

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n d_i^2 &= 1^2 + 2^2 + \dots + 2^2 + 3^2 + \dots + 3^2 + \dots + k^2 + \dots + k^2 \\ &= 1^2 + p(2^2 + \dots + k^2) \\ &= 1^2 + p(1^2 + \dots + k^2) - p \\ &= 1 + \frac{pk(k+1)(2k+1)}{6} - p, \end{aligned}$$

como queríamos.

Para o cálculo do numerador, seria interessante entendermos o significado de η_k e ξ_k . Seja $\xi_k = 1 + 2 + \dots + k$, logo $2 + \dots + k = \xi_k - 1$. Além disso, lembramos que η_k apareceu na demonstração da Proposição 4.2.3 ao calcularmos o numerador $\sum_{i=1}^n (\sum_{j=i}^n j)^2 = \eta_k$ do valor de Perron combinatório

do caminho P_n .

Agora vamos olhar para as parcelas de $\sum_{i=1}^n \sigma_i^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_n^2$.

Na primeira delas, encontramos

$$\sigma_1^2 = (1+2+\cdots+2+\cdots+k+\cdots+k)^2 = (1+p(2+\cdots+k))^2 = (1+p(\xi_k-1))^2.$$

Já sobre as outras parcelas σ_i^2 com $2 \leq i \leq n$, vemos que

$$\sigma_i^2 = \begin{cases} (2+3+\cdots+k)^2, & \text{se } d_i = 2 \\ (3+4+\cdots+k)^2, & \text{se } d_i = 3 \\ \cdots \\ k^2, & \text{se } d_i = k. \end{cases}$$

Como há p vértices em cada nível, temos p parcelas σ_i^2 com $d_i = 2$, p parcelas com $d_i = 3$ e assim por diante, ou seja, se somarmos os σ_i^2 de cada caminho, teremos p expressões da forma

$$\sum_{i=2}^n \left(\sum_{j=i}^n j \right)^2 = \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=i}^n j \right)^2 - (1+2+\cdots+k)^2 = \eta_k - \xi_k^2.$$

Sendo assim, $\sigma_2^2 + \cdots + \sigma_n^2 = p(\eta_k - \xi_k^2)$ e concluímos que

$$\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_n^2 = (1+p(\xi_k-1))^2 + p(\eta_k - \xi_k^2),$$

chegando no resultado desejado. □

Exemplo 4.8. Seja $S_{3,4}$ a estrela generalizada com $p = 3$ caminhos de comprimento $k = 4$ e vetor distância $d = (1, 2, 2, 2, 3, 3, 3, 4, 4, 4)$ representada na Figura 38.

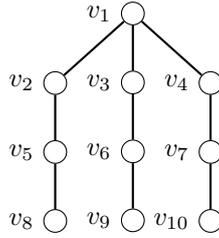


Figura 38: Estrela generalizada regular $S_{3,4}$.

Utilizando a Proposição 4.2.4, encontramos

$$\eta_4 = \frac{4(4)^5 + 10(4)^4 + 10(4)^3 + 5(4)^2 + (4)}{30} = 246$$

e

$$\xi_4 = \frac{4(4+1)}{2} = 10$$

e, portanto,

$$\rho_c(S_{3,4}) = \frac{3(246 - 10^2) + (3 \cdot 10 - 3 + 1)^2}{\frac{3 \cdot 4(4+1)(2 \cdot 4 + 1)}{6} - 3 + 1} = 13,88\overline{63},$$

enquanto seu valor de Perron é $\rho(S_{3,4}) \approx 14,45$.

4.3 Cotas para o Valor de Perron

Vamos introduzir uma notação para facilitar a escrita dos resultados desta seção. Denotamos por $\sigma(A)$ a soma de todas as entradas de uma matriz

A.

A proposição a seguir fornece uma outra expressão para o cálculo do valor de Perron combinatório.

Proposição 4.3.1. *Seja T uma árvore, N sua matriz caminho e $K = NN^T$.*

Então

$$\rho_c(T) = \frac{\sigma(K^2)}{\sigma(K)}.$$

Demonstração. Pelo segundo item do Lema 4.1.3 sabemos que $d = N^T e$, onde $e \in \mathbb{R}^n$ é o vetor com todas entradas iguais a 1. Logo, temos que

$$\begin{aligned}\|Nd\|^2 &= d^T N^T N d \\ &= (e^T N) N^T N (N^T e) \\ &= e^T (NN^T) (NN^T) e \\ &= e^T K^2 e \\ &= \sigma(K^2)\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\|d\|^2 &= d^T d \\ &= (e^T N) (N^T e) \\ &= e^T (NN^T) e \\ &= e^T K e \\ &= \sigma(K).\end{aligned}$$

Então, pela definição de valor de Perron combinatório, concluímos que

$$\rho_c(T) = \frac{\|Nd\|^2}{\|d\|^2} = \frac{\sigma(K^2)}{\sigma(K)}.$$

□

Definiremos mais alguma notação para o que segue. Dadas uma árvore T com n vértices e sua matriz caminho N , escrevemos S_i para o conjunto de vértices que estão abaixo do vértice v_i , isto é, $S_i = \{j : j \preceq i\}$, e $R_i(N) = |S_i|$, $\forall i \in T$, ou seja, $R_i(N)$ é o número de vértices abaixo do vértice v_i , que também é a soma da i -ésima linha da matriz N . Para tanto, basta lembrarmos que a linha i da matriz N representa os caminhos $P_{r,j}$ que contêm o vértice v_i .

Para entendermos o significado das entradas da matriz $K = NN^T$, começamos lembrando que a linha i da matriz N está associada ao vértice v_i da seguinte forma: a entrada n_{ij} será igual a 1 se o vértice v_i estiver no caminho $P_{r,j}$ e 0 caso contrário. Como a coluna j de N^T é o mesmo que a linha j de N , vemos que

$$n_{il}n_{jl} = \begin{cases} 1, & \text{se } n_{il} = n_{jl} = 1 \\ 0, & \text{c.c..} \end{cases}$$

para $1 \leq l \leq n$, ou seja, $n_{il}n_{jl}$ só será igual a 1 se ambos os vértices i e j estiverem no caminho $P_{r,l}$.

Portanto, como a entrada k_{ij} de K é o produto escalar das linhas i e j de N , podemos concluir que k_{ij} é a quantidade de caminhos em que ambos os vértices i e j estão, ou seja, k_{ij} é a quantidade de vértices que estão abaixo de i e j ao mesmo tempo. Assim, concluímos que $k_{ij} = |S_i \cap S_j|$.

Consequentemente, percebemos que a raiz está em todos os caminhos,

logo toda primeira linha e coluna de K será igual a n , que k_{ii} será a quantidade de vértices abaixo do vértice v_i , pois representa quantos caminhos o vértice v_i está, e que todas as folhas de T terão entrada diagonal em K igual a 1 e as entradas restantes iguais a 0.

Proposição 4.3.2. *Sejam uma árvore T com raiz e N sua matriz caminho associada. Então*

$$\rho_c(T) \leq \sigma(N).$$

Demonstração. Denotando por $r_i(N)$ a i -ésima linha da matriz N , munidos da desigualdade de Cauchy-Schwarz obtemos

$$\|Nd\|^2 = \sum_{i=1}^n (r_i(N).d)^2 \leq \sum_{i=1}^n \|r_i(N)\|^2 \|d\|^2.$$

Como $N = [n_{ij}]$ é uma matriz de 0's e 1's, vemos que

$$\sum_{i=1}^n \|r_i(N)\|^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n n_{ij}^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n n_{ij} = \sigma(N).$$

Assim, concluímos que

$$\rho_c(T) = \frac{\|Nd\|^2}{\|d\|^2} \leq \frac{\sigma(N)\|d\|^2}{\|d\|^2} = \sigma(N).$$

□

Para a cota que veremos a seguir será necessário lembrar do problema de Poisson [21]. Dada uma função u , o operador de Laplace contínuo L e

uma função f com as condições de contorno, a equação de Poisson é

$$Lu = f. \quad (4.3.1)$$

Ao discretizar o domínio da função u , o operador de Laplace contínuo é substituído pelo operador de Laplace discreto, que corresponde à matriz laplaciana $L = [l_{ij}]$ com modificações baseadas nas condições de contorno. Dada uma árvore T com raiz r , a condição de contorno nesse caso é a raiz externa \bar{r} que foi removida da árvore maior \bar{T} . Isso equivale a somar 1 na entrada l_{11} de L , pois assim l_{11} indica o grau de r em \bar{T} , antes da remoção de \bar{r} .

Ao modificar a matriz L , ela se torna equivalente à matriz laplaciana de \bar{T} após remover a linha e a coluna correspondentes à raiz externa \bar{r} , ou seja, L é inversível e a solução u do problema de Poisson discreto (4.3.1) é única.

Andrade e Dahl [4] sugerem utilizar o vetor distância d de T no lugar da função f , ou seja, considerar o problema

$$Lu = d. \quad (4.3.2)$$

A única solução é denotada por $u^*(d)$ e pode ser calculada a partir da matriz gargalo M , pois $u^*(d) = L^{-1}d = Md$, motivando a definição seguinte.

Definição 4.3.3. *Dada uma árvore T com raiz, matriz gargalo M e vetor*

distância d , a função

$$\pi(N) = \frac{\|u^*(d)\|}{\|d\|} = \frac{\|Md\|}{\|d\|}$$

pode ser vista como uma medida do tamanho da solução $u^*(d)$ de (4.3.2).

A função $\pi(N)$ possui uma conexão com o valor de Perron e o valor de Perron combinatório, como veremos no próximo resultado.

Teorema 4.3.4. *Seja T uma árvore e $M = [m_{ij}]$ sua matriz gargalo e N sua matriz caminho. Então*

$$\rho_c(T) \leq \pi(N) \leq \rho(M) \leq \|M\|_1,$$

onde $\|M\|_1 = \max_i \sum_j m_{ij}$.

Demonstração. Para a primeira desigualdade, notamos que $u^*(d) = Md = N^T Nd$ e, aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwarz, temos

$$\rho_c(T) = \frac{\|Nd\|^2}{\|d\|^2} = \frac{d^T N^T Nd}{\|d\|^2} = \frac{d^T u^*(d)}{\|d\|^2} \leq \frac{\|d\| \|u^*(d)\|}{\|d\|^2} = \frac{\|u^*(d)\|}{\|d\|} = \pi(N).$$

A segunda desigualdade segue da definição, pois

$$\pi(N) = \frac{\|u^*(d)\|}{\|d\|} = \frac{\|Md\|}{\|d\|} \leq \sup_{x \neq 0} \frac{\|Mx\|}{\|x\|} = \rho(M).$$

Por fim, toda norma matricial é uma cota superior para o raio espectral, pois se $x \neq 0$ é um autovetor associado ao autovalor λ de M , isto é, $\|Mx\| = \|\lambda x\|$,

temos que

$$|\lambda|\|x\| = \|\lambda x\| = \|Mx\| \leq \|M\|\|x\|,$$

portanto, vemos que $|\lambda| \leq \|M\|$, para qualquer norma matricial. Assim, concluímos que

$$\rho(M) \leq \|M\|_1.$$

□

O Teorema 4.3.4 mostra que tanto o valor de Perron combinatório $\rho_c(T)$ quanto a função $\pi(N)$ são cotas inferiores para o valor de Perron $\rho(M)$ da matriz gargalo M , que também possui como cota superior $\|M\|_1 = \max_i \sum_j m_{ij}$. Assim, a grande vantagem desse resultado é que nos permite calcular facilmente cotas para o valor de Perron diretamente das distâncias na árvore T . Além disso, Andrade e Dahl [4] sugerem que o vetor distância d poderia ser uma aproximação para o vetor de Perron.

A Tabela 1 apresenta as cotas do Teorema 4.3.4 utilizando árvores aleatórias com n vértices. As cotas $\rho_c(T)$ e $\pi(N)$ e o valor de Perron $\rho(M)$ são dados com uma casa decimal de precisão e o erro relativo é calculado para a função $\pi(N)$ em relação ao valor de Perron $\rho(M)$, isto é, o erro é dado por $\frac{\rho(M) - \pi(N)}{\rho(M)}$.

Motivados pela melhor aproximação para o valor de Perron que a função $\pi(N)$ oferece em comparação com valor de Perron combinatório $\rho_c(T)$, encontramos as fórmulas para $\pi(N)$ do caminho P_n e da estrela S_n . Para tanto, demonstraremos o lema seguinte a fim de facilitar os cálculos posteriores.

n	$\rho_c(T)$	$\pi(N)$	$\rho(M)$	Erro Rel. (%)	$\ M\ _1$
10	21,4	21,6	21,9	1,4	26
20	36,4	37,0	37,8	2,1	47
30	54,0	55,0	56,2	2,1	69
50	88,6	90,5	93,4	3,1	118
100	125,6	129,2	133,2	3,0	174
150	287,7	294,6	304,0	3,1	397

Tabela 1: Cotas do Teorema 4.3.4 de árvores aleatórias [4].

Lema 4.3.5. *Seja uma árvore T com raiz r , matriz gargalo M e vetor distância d . Então a i -ésima componente da solução $u^*(d)$ de (4.3.2) é*

$$u_i = \sum_{v_j \in P_{r,i}} \sigma_j.$$

Demonstração. Por definição, temos que $u^*(d) = Md = N^T Nd$, logo a componente u_i é o produto da i -ésima linha de N^T pelo vetor Nd . Como as linhas de N^T são as colunas de N , a i -ésima linha de N^T está associada aos vértices no caminho $P_{r,i}$. Portanto, u_i é a soma das componentes j de Nd tais que v_j está no caminho $P_{r,i}$.

Como cada componente j do vetor Nd é a soma das distâncias dos vértices v_k que estão “abaixo” de v_j em relação à raiz ($k \preceq j$), que é exatamente a definição de σ_j , concluímos que

$$u_i = \sum_{v_j \in P_{r,i}} \sigma_j.$$

□

Proposição 4.3.6. *Sejam P_n e S_n o caminho e a estrela com n vértices,*

respectivamente. Então

$$\pi(P_n) = \sqrt{\frac{68n^4 + 136n^3 + 133n^2 + 65n + 18}{420}} \quad (4.3.3)$$

e

$$\pi(S_n) = \sqrt{\frac{4n^3 + 4n^2 - 7n}{4n - 3}}. \quad (4.3.4)$$

Demonstração. Lembrando que $\pi(N) = \frac{\|u^*(d)\|}{\|d\|} = \frac{\sqrt{\sum u_i^2}}{\sqrt{\sum d_i^2}}$, vamos mostrar o caso do caminho P_n . Como o vetor distância de P_n é $d = (1, 2, \dots, n)$, o denominador vale

$$\sqrt{\sum_{i=1}^n d_i^2} = \sqrt{\frac{n(n+1)(2n+1)}{6}}.$$

Já para o cálculo do numerador, temos que

$$\sigma_j = \sum_{i=j}^n i = \frac{n(n+1) - j(j-1)}{2}$$

e, portanto, com auxílio do Lema 4.3.5,

$$u_i = \sum_{v_j \in P_{r,i}} \sigma_j = \sum_{j=1}^i \frac{n(n+1) - j(j-1)}{2} = \frac{-i^3 + 3i(n^2 + n + 1)}{6}.$$

Assim, temos que

$$\sqrt{\sum u_i^2} = \sqrt{\frac{n(n+1)(2n+1)(204n^4 + 408n^3 + 735n^2 + 531n + 362)}{7560}}.$$

Dividindo numerador e denominador, encontramos

$$\pi(P_n) = \sqrt{\frac{68n^4 + 136n^3 + 133n^2 + 65n + 18}{420}}. \quad (4.3.5)$$

O cálculo da expressão para $\pi(S_n)$ é análogo. □

Apresentamos na Tabela 2 as cotas $\rho_c(T)$ e $\pi(N)$ e o valor de Perron $\rho(M)$ do caminho P_n e da estrela S_n .

	$n = 4$	$n = 5$	$n = 6$	$n = 7$	$n = 8$	$n = 9$
$\rho(P_n)$	8,2909	12,3435	17,2069	22,8808	29,3653	36,6604
$\pi(P_n)$	8,2401	12,2638	17,0922	22,7254	29,1633	36,406
$\rho_c(P_n)$	8,2	12,2	17	22,6	29	36,2
$\rho(S_n)$	4,7913	5,8284	6,8541	7,873	8,8875	9,899
$\pi(S_n)$	4,7394	5,765	6,7823	7,7949	8,8044	9,8119
$\rho_c(S_n)$	4,6923	5,7059	6,7143	7,72	8,7241	9,7272

Tabela 2: Comparação das cotas do Teorema 4.3.4 para o caminho P_n e a estrela S_n .

A Figura 39 mostra o gráfico dos erros relativos do valor de Perron combinatório e da função $\pi(N)$ para o caminho P_n , quando o número de vértices n varia de 1 até 100. Notamos que o erro relativo de $\rho_c(P_n)$ tende a aproximadamente 1,3%, enquanto o erro relativo de $\pi(P_n)$ tende a aproximadamente 0,7%.

Notamos na Tabela 2 que o erro relativo do caminho P_n reduziu quase pela metade ao compararmos $\pi(P_n)$ com $\rho_c(P_n)$ como aproximações para $\rho(P_n)$. Segundo o Teorema 4.3.4, a função $\pi(N)$ é de fato uma melhor aproximação para o valor de Perron do que o valor de Perron combinatório, o que sugere investigar o uso de $\pi(N)$ no lugar de $\rho_c(T)$ para aproximar o

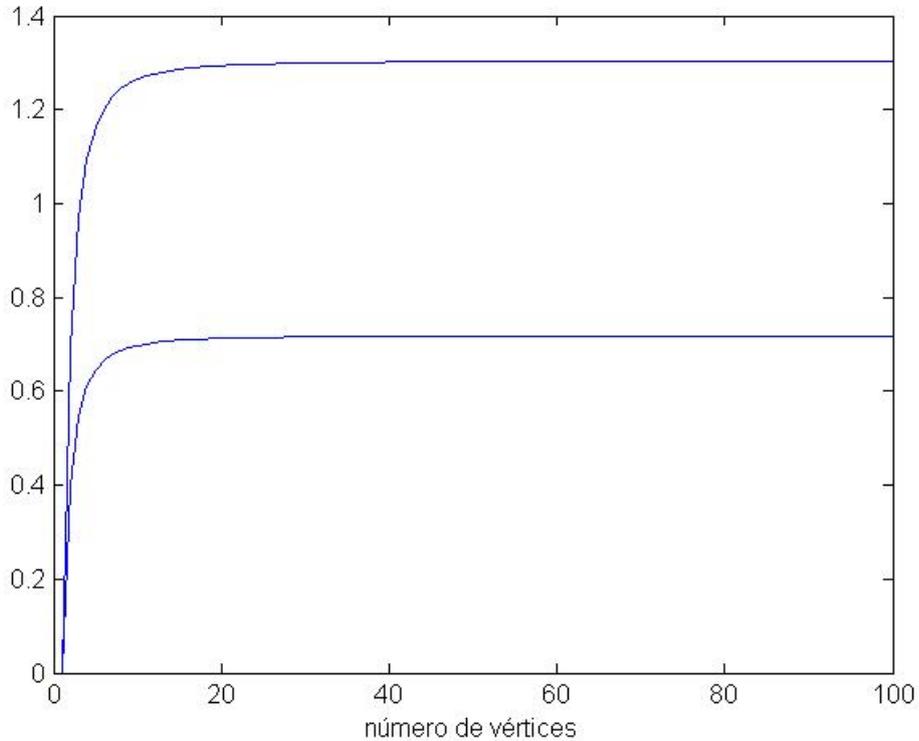


Figura 39: Erros relativos de $\rho_c(P_n)$ e $\pi(P_n)$.

valor de Perron.

A seguir, mostramos que, de fato, o erro relativo entre o valor de Perron combinatório e o valor de Perron do caminho P_n tende para 1,3% quando o número de vértices tende ao infinito. Também mostramos resultado análogo para o erro relativo entre $\pi(P_n)$ e $\rho(P_n)$, que tende para 0,7% conforme o número de vértices aumenta.

Proposição 4.3.7. *Seja P_n o caminho com n vértices. Então*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\rho(P_n) - \rho_c(P_n)}{\rho(P_n)} = 1 - \frac{\pi^2}{10} \approx 0,013$$

e

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\rho(P_n) - \pi(P_n)}{\rho(P_n)} = 1 - \frac{\pi^2}{4} \sqrt{\frac{17}{105}} \approx 0,007.$$

Demonstração. Inicialmente, lembramos que, por (3.3.1),

$$\rho(P_n) = \frac{1}{2(1 - \cos(\frac{\pi}{2n+1}))}$$

e

$$\rho_c(P_n) = \frac{2n^2 + 2n + 1}{5},$$

e reescrevemos o limite da seguinte forma:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} 1 - \frac{\rho_c(P_n)}{\rho(P_n)} = 1 - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2(2n^2 + 2n + 1)}{5} \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{2n+1} \right) \right).$$

Expandindo a função cosseno pela fórmula de Taylor, encontramos

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2} + r(x),$$

onde $\frac{|r(x)|}{x^2} \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow 0$.

Portanto, temos que

$$\cos \left(\frac{\pi}{2n+1} \right) = 1 - \frac{\pi^2}{2(2n+1)^2} + r \left(\frac{\pi}{2n+1} \right),$$

onde $r \left(\frac{\pi}{2n+1} \right) \cdot \left(\frac{2n+1}{\pi} \right)^2 \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$, ou seja, a função $r \left(\frac{\pi}{2n+1} \right)$ tende a zero se multiplicada por qualquer polinômio em n de grau 2 ou inferior, quando n tende ao infinito.

Logo

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2(2n^2 + 2n + 1)}{5} \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{2n + 1} \right) \right) = \\ & \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2(2n^2 + 2n + 1)}{5} \left(1 - 1 + \frac{\pi^2}{2(2n + 1)^2} - r \left(\frac{\pi}{2n + 1} \right) \right) = \\ & \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2(2n^2 + 2n + 1)}{10(4n^2 + 4n + 1)} \pi^2 - \frac{2(2n^2 + 2n + 1)}{5} r \left(\frac{\pi}{2n + 1} \right) = \\ & \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2(2 + 2/n + 1/n^2)}{10(4 + 4/n + 1/n^2)} \pi^2 - \frac{2(2n^2 + 2n + 1)}{5} r \left(\frac{\pi}{2n + 1} \right) = \frac{\pi^2}{10}, \end{aligned}$$

pois, na última igualdade, a segunda parcela do limite tende a zero.

Assim, temos que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\rho(P_n) - \rho_c(P_n)}{\rho(P_n)} = 1 - \frac{\pi^2}{10} \approx 0,013.$$

Lembrando da fórmula (4.3.5) para $\pi(P_n)$ e utilizando a mesma expansão da função cosseno pela fórmula de Taylor, vemos que o $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\pi(P_n)}{\rho(P_n)}$ é

igual a

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} 2\sqrt{\frac{68n^4 + 136n^3 + 133n^2 + 65n + 18}{420}} \left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{2n+1}\right)\right) = \\ & \lim_{n \rightarrow \infty} 2\sqrt{\frac{n^4(68 + 136/n + 133/n^2 + 65/n^3 + 18/n^4)}{420}} \\ & \quad \left(1 - 1 + \frac{\pi^2}{2(2n+1)^2} - r\left(\frac{\pi}{2n+1}\right)\right) = \\ & \lim_{n \rightarrow \infty} 2n^2\sqrt{\frac{68 + 136/n + 133/n^2 + 65/n^3 + 18/n^4}{420}} \\ & \quad \left(\frac{\pi^2}{2(4n^2 + 4n + 1)} - r\left(\frac{\pi}{2n+1}\right)\right) = \\ & \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\pi^2 n^2}{4n^2 + 4n + 1} \sqrt{\frac{68 + 136/n + 133/n^2 + 65/n^3 + 18/n^4}{420}} \\ & \quad - 2n^2 \sqrt{\frac{68 + 136/n + 133/n^2 + 65/n^3 + 18/n^4}{420}} r\left(\frac{\pi}{2n+1}\right) = \\ & \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\pi^2}{4 + 4/n + 1/n^2} \sqrt{\frac{68 + 136/n + 133/n^2 + 65/n^3 + 18/n^4}{420}} = \frac{\pi^2}{4} \sqrt{\frac{17}{105}}. \end{aligned}$$

Portanto, concluimos que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} 1 - \frac{\pi(P_n)}{\rho(P_n)} = 1 - \frac{\pi^2}{4} \sqrt{\frac{17}{105}} \approx 0,007.$$

□

Melhor ainda, mostramos a seguir que o erro relativo entre o valor de Perron combinatório e o valor de Perron da estrela S_n tende a zero conforme o número de vértices aumenta.

Proposição 4.3.8. *Seja S_n a estrela com n vértices. Então*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\rho(S_n) - \rho_c(S_n)}{\rho(S_n)} = 0.$$

Demonstração. Começamos lembrando que, por (3.3.2),

$$\rho(S_n) = \frac{1}{2}(n + 1 + \sqrt{n^2 + 2n - 3})$$

e

$$\rho_c(S_n) = n + \frac{3n - 3}{4n - 3} = \frac{4n^2 - 3}{4n - 3},$$

e aproveitamos para reescrever o limite da seguinte forma:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} 1 - \frac{\rho_c(S_n)}{\rho(S_n)} = 1 - 2 \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{4n^2 - 3}{(4n - 3)(n + 1 + \sqrt{n^2 + 2n - 3})}. \quad (4.3.6)$$

Sendo assim, temos que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{4n^2 - 3}{(4n - 3)(n + 1 + \sqrt{n^2 + 2n - 3})} =$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{4n^2 - 3}{4n^2 + 4n(1 + \sqrt{n^2 + 2n - 3}) - 3n - 3(1 + \sqrt{n^2 + 2n - 3})} =$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{4 - \frac{3}{n^2}}{4 + \frac{4}{n}(1 + n\sqrt{1 + \frac{2}{n} - \frac{3}{n^2}}) - \frac{3}{n} - \frac{3}{n^2}(1 + n\sqrt{1 + \frac{2}{n} - \frac{3}{n^2}})} = \frac{1}{2}.$$

Substituindo em (4.3.6), obtemos

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\rho(S_n) - \rho_c(S_n)}{\rho(S_n)} = 0.$$

□

Munidos do Teorema 4.3.4, segue da Proposição 4.3.8 que o erro relativo entre $\pi(S_n)$ e o valor de Perron $\rho(S_n)$ também tende a zero quando o número de vértices tende ao infinito.

4.4 Centopeias e o Valor de Perron Combinatório

Começamos lembrando que a centopeia $C = C(n_1, n_2, \dots, n_k)$ consiste de um caminho $P_k = v_1 v_2 \dots v_k$ com $n_i \geq 0$ pernas em cada vértice dorsal v_i , com $i = 1, 2, \dots, k$. O caminho P_k é chamado de *caminho central* e v_1 é considerado a raiz dessa árvore.

Seguindo a exigência de Andrade e Dahl [4], vamos considerar sempre $n_k = 0$, isto é, o último vértice dorsal será pendente.

O resultado a seguir nos permite associar a qualquer árvore com vetor distância fixo, uma única centopeia (a menos da numeração dos vértices) com mesmo vetor distância e será importante para o resultado de majoração que segue.

Proposição 4.4.1. *Qualquer árvore T com vetor distância d possui uma única centopeia C_d com mesmo vetor distância.*

Demonstração. Seja T uma árvore com vetor distância $d = (d_1, d_2, \dots, d_n)$,

onde $1 = d_1 < d_2 \leq \dots \leq d_n$. Vamos construir a (única) centopeia $C_d = C_d(n_1, \dots, n_k)$ com o mesmo vetor distância d . Começamos notando que o vetor distância é sempre da forma $d = (1, 2, \dots, 2, 3, \dots, 3, \dots, d_n, \dots, d_n)$, ou seja, possui apenas a primeira entrada $d_1 = 1$ e a seguir possui m_i entradas iguais a $i \in \{2, 3, \dots, d_n\}$, onde $1 \leq m_i \leq n - 1$. Então m_i é a quantidade de vértices com distância i até a raiz.

Sendo assim, definimos o primeiro vértice v_1 como raiz da centopeia C_d , o vértice v_2 será um vértice dorsal adjacente a v_1 e v_1 terá $m_2 - 1$ vizinhos pendentes, isto é, $n_1 = m_2 - 1$. Se $d_n = 2$, a construção da centopeia acabou. Caso contrário, teremos mais um vértice dorsal adjacente a v_2 , digamos v_3 , e v_2 terá $m_3 - 1$ vizinhos pendentes, ou seja, $n_2 = m_3 - 1$. Repetimos o processo até o vértice dorsal $v_{k-1} = v_{d_n}$ que terá $m_{d_n} - 1$ vizinhos pendentes e mais um vértice dorsal adjacente $v_k = v_{d_n+1}$, onde $n_k = 0$, como exigido. \square

Exemplo 4.9. *Para determinarmos a centopeia C_d , a única informação necessária é o vetor distância d , então, sem perda de generalidade, dada qualquer árvore com vetor distância $d = (1, 2, 2, 2, 3, 3, 4, 4, 4, 4)$, vamos construir a única centopeia com mesmo vetor distância.*

Neste caso, temos $m_2 = 3$ vértices com distância 2 até a raiz, $m_3 = 2$ vértices com distância 3 até a raiz e $m_4 = 4$ vértices com distância 4 até a raiz. Portanto, definimos o vértice dorsal v_1 como raiz da centopeia C_d com vértice dorsal v_2 adjacente e mais 2 vizinhos pendentes. Da mesma forma, v_2 será adjacente a um vértice dorsal v_3 e mais um vértice pendente. Por fim, v_3 será adjacente ao vértice dorsal $v_4 = v_k$ e mais 3 vértices pendentes, como podemos verificar na Figura 40.

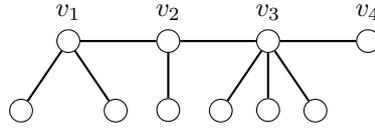


Figura 40: Centopeia C_d .

Será útil para o teorema que segue estabelecermos alguma notação. Dados $x, y \in \mathbb{R}^n$, usamos \preceq^{maj} para denotar a ordem de majoração e escrevemos $x \preceq^{maj} y$ quando

$$\sum_{j=1}^k x_{[j]} \leq \sum_{j=1}^k y_{[j]} \quad \text{para } k < n$$

e

$$\sum_{j=1}^n x_j \leq \sum_{j=1}^n y_j,$$

onde $x_{[j]}$ é a j -ésima maior componente de x , o mesmo valendo para $y_{[j]}$. Aproveitamos para lembrar que $R_i(N)$ representa a soma da i -ésima linha da matriz N e denotamos por $R(N)$ o vetor com esses valores como componentes, isto é, $R(N) = (R_1(N), R_2(N), \dots, R_n(N))$.

Agora veremos que a matriz caminho de uma centopeia C_d sempre majora a matriz caminho de qualquer árvore com mesmo vetor distância, no sentido que será esclarecido a seguir.

Teorema 4.4.2. *Seja T uma árvore com n vértices, vetor distância d e matriz caminho N_T . Então*

$$R(N_T) \preceq^{maj} R(N_{C_d}).$$

Demonstração. Sejam uma árvore T com vetor distância $d = (d_1, \dots, d_n)$, a única centopeia C_d com mesmo vetor distância e suas matrizes caminho $N_T = [a_{ij}]$ e N_{C_d} , respectivamente. Para simplificar a notação, seja $R(N_T) = (R_1^T, \dots, R_n^T)$ e $R(N_{C_d}) = (R_1^C, \dots, R_n^C)$. Como a soma de cada coluna j das matrizes caminho é igual a d_j , temos que

$$\sum_{i=1}^n R_i^T = \sum_{i=1}^n d_i = \sum_{i=1}^n R_i^C.$$

Ao fixar o vetor distância, observamos que a centopeia possui a melhor distribuição de vértices se queremos o máximo de caminhos até a raiz em comum entre os vértices da árvore, pois todo vértice que estiver abaixo (em relação à raiz) de um vértice dorsal, também estará abaixo de todo vértice dorsal anterior a este, maximizando a quantidade de 1's na respectiva linha da matriz caminho. Logo, fixado $k < n$, como todo vértice na centopeia ou é dorsal ou é pendente, podemos concluir que se a distância do vértice v_j até a raiz for maior que k , isto é, se $d_j > k$, então há pelo menos k vértices dorsais no caminho $P_{r,j}$ e, portanto, as entradas na j -ésima coluna de N_{C_d} que correspondem aos vértices dorsais em $P_{r,j}$ serão todas iguais a 1.

Com isso em mente, sejam $k < n$ e i_1, \dots, i_k tais que $R_{i_t}^T = R_{[t]}^T$, a

t -ésima maior componente em $R(N_T)$. Então

$$\begin{aligned}
\sum_{t=1}^k R_{[t]}^T &= \sum_{t=1}^k R_{i_t}^T \\
&= \sum_{t=1}^k \sum_{j=1}^n a_{i_t j} \\
&= \sum_{t=1}^k \left(1 + \sum_{j=i_t+1}^n a_{i_t j} \right) \\
&= k + \sum_{t=1}^k \sum_{j=i_t+1}^n a_{i_t j} \\
&= k + \sum_{j=1}^n \sum_{t:t \leq k, i_t < j} a_{i_t j} \\
&\leq k + \sum_{j=1}^n \min\{k, d_j - 1\} \\
&= \sum_{t=1}^k R_{[t]}^C.
\end{aligned}$$

As duas primeiras igualdades são diretas da definição de $R_{i_t}^T$. A terceira igualdade é devido ao fato de que a matriz N é triangular superior com 1's na diagonal principal e, a seguir, o somatório é aplicado em cada parcela. Já o somatório $\sum_{t:t \leq k, i_t < j} a_{i_t j}$ significa que estamos considerando apenas os elementos das linhas associadas às k maiores componentes de $R(N_T)$ da parte triangular superior de cada coluna, que são justamente as linhas associadas aos vértices dorsais.

Para cada vértice v_j , se a distância d_j for menor k , então existem d_j vértices dorsais no caminho $P_{r,j}$, ou seja, a soma dos k maiores elementos da coluna j será menor ou igual a $d_j - 1$ (pois está sendo somado apenas a parte triangular superior de N). Analogamente, se $d_j > k$, então a soma será

menor ou igual a k , explicando a desigualdade.

Por fim, a última igualdade se dá pela observação inicial, onde vimos que a matriz caminho da centopeia possui 1 nas entradas da coluna j relativas aos vértices dorsais em $P_{r,j}$. \square

Para um vértice w de uma árvore com raiz T , escrevemos $d(T, w)$ para a distância de w até a raiz r em T .

Teorema 4.4.3. *Seja T uma árvore com raiz r e w um vértice de T e seja T' a árvore obtida a partir de T ao adicionar um vértice w' e uma aresta $\{w, w'\}$. Seja $k = d(T, w) + 1$ e suponha*

$$\frac{2}{k} \sum_{v \in P_{r,w}} \sigma_v + k > \|M_T\|_1.$$

Então

$$\rho_c(T') > \rho_c(T).$$

Demonstração. Seja $\sigma_v = \sigma(T, v)$ para cada vértice $v \in V(T)$ e $\sigma'_v = \sigma(T', v)$ para cada vértice $v \in V(T')$ e considere $n = |V(T)|$. Assim, a árvore T' possui $n + 1$ vértices e $d(T', w') = k$. Como σ_v é a soma das distâncias dos vértices abaixo de v em relação à raiz, vemos que $\sigma'_v = \sigma_v + k$ para $v \in P_{r,w}$, isto é, para os vértices que estão no caminho de w até a raiz, e $\sigma'_v = \sigma_v$ para os outros vértices, ou seja, para $v \in V(T) \setminus P_{r,w}$. Portanto,

$$\rho_c(T') = \frac{\sum_{v \in V} \sigma_v^2 + \Delta}{\sum_{v \in V} d_v^2 + k^2},$$

onde

$$\begin{aligned}
\Delta &= \sum_{v \in V(T')} \sigma_v'^2 - \sum_{v \in V(T)} \sigma_v^2 \\
&= k^2 + \sum_{v \in P_{r,w}} (\sigma_v'^2 - \sigma_v^2) \\
&= k^2 + \sum_{v \in P_{r,w}} ((\sigma_v + k)^2 - \sigma_v^2) \\
&= k^2 + \sum_{v \in P_{r,w}} k(2\sigma_v + k) \\
&= k^2 + 2k \sum_{v \in P_{r,w}} \sigma_v + \sum_{v \in P_{r,w}} k^2 \\
&= 2k \sum_{v \in P_{r,w}} \sigma_v + k^3,
\end{aligned}$$

pois $P_{r,w}$ contém $k - 1$ vértices. Além disso, pelo Teorema 4.3.4, temos que

$$\frac{\sum_{v \in V} \sigma_v^2}{\sum_{v \in V} d_v^2} = \rho_c(T) \leq \|M_T\|_1 < \frac{2}{k} \sum_{v \in P_{r,w}} \sigma_v + k,$$

onde a última desigualdade é por hipótese.

Observamos agora que, para números reais positivos a_1, a_2, b_1, b_2 , se $\frac{a_1}{b_1} < \frac{a_2}{b_2}$, então $\frac{a_1}{b_1} < \frac{a_1 + a_2}{b_1 + b_2}$. De fato,

$$a_1 b_2 < a_2 b_1$$

$$a_1 b_1 + a_1 b_2 < a_1 b_1 + a_2 b_1$$

$$a_1(b_1 + b_2) < b_1(a_1 + a_2).$$

No nosso caso, $a_1 = \sum_{v \in V} \sigma_v^2$, $b_1 = \sum_{v \in V} d_v^2$, $a_2 = \Delta$ e $b_2 = k^2$ e, portanto,

$$\rho_c(T) = \frac{a_1}{b_1} < \frac{a_2}{b_2} = \frac{2}{k} \sum_{v \in P_{r,w}} \sigma_v + k.$$

Assim, concluímos que

$$\rho_c(T) < \frac{a_1 + a_2}{b_1 + b_2} = \rho_c(T').$$

□

Definição 4.4.4. *Sejam T_0 e T_1 duas árvores com conjuntos disjuntos de vértices e com raízes internas r_0 e r_1 , respectivamente. Seja v um vértice de T_0 . A **coalescência** de T_0 e T_1 com respeito a v , denotada por $T_0 \oplus_v T_1$, é a árvore obtida da união de T_0 e T_1 onde a raiz r_1 de T_1 é identificada com v . Dessa forma, vemos que $|V(T_0 \oplus_v T_1)| = |V(T_0)| + |V(T_1)| - 1$.*

Para o resultado que segue, seja $k = d(T_0, v)$ e

$$\delta_{T_1} = \sum_{w \in V(T_1) \setminus \{r_1\}} d(T_1, w) + (k-1)(|V(T_1)| - 1),$$

que só depende de T_0 e k . Para simplificar a notação, definimos $T_p = T_0 \oplus_p T_1$, $T_q = T_0 \oplus_q T_1$ e $V = V(T_0 \oplus_v T_1)$.

Teorema 4.4.5. *Sejam T_0 e T_1 como acima e p e q vértices distintos de T_0 com $d(T_0, p) = d(T_0, q) = k$. Então*

$$\rho_c(T_p) = \rho_c(T_q) + \frac{\Delta}{\sum_{v \in V} d_v^2},$$

onde

$$\Delta = 2\delta_{T_1} \left(\sum_{v \in P_{r,p} \setminus P_{r,q}} \sigma(T_0, v) - \sum_{v \in P_{r,q} \setminus P_{r,p}} \sigma(T_0, v) \right).$$

Em particular,

$$\rho_c(T_p) > \rho_c(T_q)$$

se e somente se

$$\sum_{v \in P_{r,p} \setminus P_{r,q}} \sigma(T_0, v) > \sum_{v \in P_{r,q} \setminus P_{r,p}} \sigma(T_0, v).$$

Demonstração. Começamos observando que o fato de $d(T_0, p) = d(T_0, q)$, ou seja, os vértices p e q terem a mesma distância até a raiz, implica que as distâncias em T_p e T_q também serão as mesmas. Em particular, para cada vértice $v \in V(T_1)$ temos

$$d(T_p, v) = d(T_q, v) = k + d(T_1, v) - 1$$

e, portanto,

$$\sum_{v \in V(T_1) \setminus \{r_1\}} d(T_p, v) = \sum_{v \in V(T_1) \setminus \{r_1\}} (k + d(T_1, v) - 1) = \delta_{T_1}.$$

Notamos agora que para todo vértice $v \notin P_{r_1,p} \Delta P_{r_1,q} = (P_{r_1,p} \setminus P_{r_1,q}) \cup (P_{r_1,q} \setminus P_{r_1,p})$, temos que $\sigma(T_p, v) = \sigma(T_q, v)$, pois para tais vértices v , as subárvores formadas pelos vértices $w \preceq v$ são as mesmas em T_p e T_q . Além disso, para todo vértice $v \in P_{r_1,p} \setminus P_{r_1,q}$, temos que $\sigma(T_p, v) = \sigma(T_0, v) + \delta_{T_1} = \sigma(T_q, v) + \delta_{T_1}$ e, simetricamente, para todo vértice $v \in P_{r_1,q} \setminus P_{r_1,p}$, temos que

$$\sigma(T_q, v) = \sigma(T_0, v) + \delta_{T_1} = \sigma(T_p, v) + \delta_{T_1}.$$

Somando sobre todos os vértices $v \in V$, temos

$$\begin{aligned} & \sum_{v \in V} \sigma(T_p, v)^2 - \sum_{v \in V} \sigma(T_q, v)^2 \\ &= \sum_{v \in P_{r_1, p} \Delta P_{r_1, q}} (\sigma(T_p, v)^2 - \sigma(T_q, v)^2) \\ &= \sum_{v \in P_{r_1, p} \Delta P_{r_1, q}} (\sigma(T_p, v) - \sigma(T_q, v))(\sigma(T_p, v) + \sigma(T_q, v)) \\ &= \sum_{v \in P_{r_1, p} \setminus P_{r_1, q}} \delta_{T_1} (2\sigma(T_0, v) + \delta_{T_1}) + \sum_{v \in P_{r_1, q} \setminus P_{r_1, p}} (-\delta_{T_1}) (2\sigma(T_0, v) + \delta_{T_1}) \\ &= 2\delta_{T_1} \sum_{v \in P_{r_1, p} \setminus P_{r_1, q}} \sigma(T_0, v) - 2\delta_{T_1} \sum_{v \in P_{r_1, q} \setminus P_{r_1, p}} \sigma(T_0, v) \\ &\quad + \delta_{T_1}^2 (|P_{r_1, p} \setminus P_{r_1, q}| - |P_{r_1, q} \setminus P_{r_1, p}|) \\ &= 2\delta_{T_1} \left(\sum_{v \in P_{r_1, p} \setminus P_{r_1, q}} \sigma(T_0, v) - \sum_{v \in P_{r_1, q} \setminus P_{r_1, p}} \sigma(T_0, v) \right) \\ &= \Delta, \end{aligned}$$

pois $|P_{r_1, p} \setminus P_{r_1, q}| = |P_{r_1, q} \setminus P_{r_1, p}|$, já que $d(T_0, p) = d(T_0, q)$. \square

Seguindo a ideia (e notação) do teorema anterior, definimos uma operação em árvores que se mostrará útil para o resultado que segue.

Definição 4.4.6. Dadas árvores $T_p = T_0 \oplus_p T_1$ e $T_q = T_0 \oplus_q T_1$, chamamos de **switching** a operação que troca a árvore T_p pela árvore T_q , ou seja, é a operação que “move” a subárvore T_1 do vértice p para o vértice q .

Percebemos que um *switching* preserva o vetor de distâncias, afinal $d(T_0, p) = d(T_0, q)$, e as mudanças no valor de Perron combinatório são dadas pelo Teorema 4.4.5. Para o próximo teorema, utilizamos a operação de

switching e denotamos por \mathcal{D}_n o conjunto de todos os vetores distâncias de árvores com n vértices com raiz.

Teorema 4.4.7. *Seja $d \in \mathcal{D}_n$. O maior valor de Perron combinatório $\rho_c(T)$ sobre todas as árvores com vetor distância d é atingido pela centopeia C_d e nenhuma outra árvore atinge esse máximo.*

Demonstração. Começamos supondo que T não é uma centopeia. Assim, organizamos a árvore T em $k > 1$ níveis, onde cada nível l consiste dos vértices v_j à distância l da raiz, isto é, com $d_j = l$. Se houver, consideramos dois vértices v_s e v_t no nível 2, ambos adjacentes a pelo menos outro vértice no nível 3. Assim é possível fazer um *switching* de todos os vértices no nível 3 de v_t para v_s (ou de v_s para v_t).

Em qualquer um dos casos, pelo Teorema 4.4.5, o valor de Perron combinatório $\rho_c(T)$ aumenta. Então, sem perda de generalidade, escolhemos o *switching* para v_s e, enquanto houver dois vértices no nível 2 como descritos acima, aplicamos o *switching* para o mesmo vértice v_s .

Em algum momento, haverá apenas um vértice no nível 2 com vértices adjacentes no nível 3 e, portanto, temos uma centopeia da raiz até o nível 2 (sem contar os vértices do nível 4 em diante). Se aplicarmos o mesmo procedimento para os k níveis da árvore, teremos por fim a única centopeia C_d com mesmo vetor distância d de T . □

4.5 Ordenamento de Árvores com Diâmetro 3

Inspirados pelo ordenamento de árvores de diâmetro 3 de Grone e Merris [13] através da conectividade algébrica, analisamos o que acontece com o valor de Perron combinatório de uma árvore de diâmetro 3 ao movermos um vértice pendente, aproximando-o da raiz. Começamos observando que qualquer árvore de diâmetro 3 é uma centopeia e pode ser vista como duas estrelas com uma aresta ligando seus centros, também conhecida como *double broom* de diâmetro 3.

Denotamos por $T(s, t)$ a árvore com $n = s + t + 2$ vértices obtida a partir de um caminho com 2 vértices, acrescentando s vértices pendentes adjacentes a um dos vértices do caminho e t vértices pendentes adjacentes ao outro vértice do caminho, onde supomos $1 \leq s \leq t$.

Fixamos a raiz de $T(s, t)$ no vértice dorsal adjacente aos t vértices. Vamos estudar a mudança no valor de Perron combinatório ao mover um dos s vértices, deixando-o adjacente a raiz e formando a árvore $T(s - 1, t + 1)$. Para facilitar a notação, escrevemos aqui $T := T(s, t)$ e $T' := T(s - 1, t + 1)$, as quais vemos representadas na Figura 41.

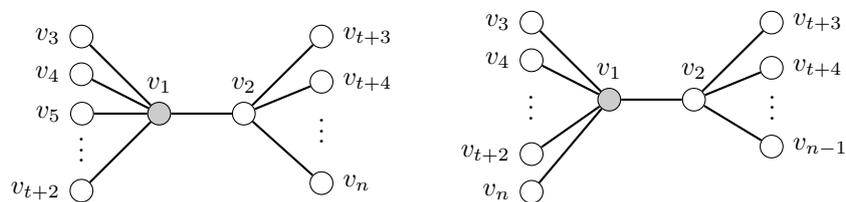


Figura 41: Árvores $T(s, t)$ e $T(s - 1, t + 1)$ de diâmetro 3.

É utilizada a numeração por largura da seguinte forma: os vértices

dorsais são numerados v_1 e v_2 , onde v_1 é a raiz, a seguir numeramos de v_3, \dots, v_{t+2} os t vértices adjacentes a v_1 e, por fim, os s vértices adjacentes a v_2 são numerados v_{t+3}, \dots, v_n . Assim, o vetor distância de T é dado por $d = (1, 2, \dots, 2, 3, \dots, 3)$, onde temos $t+1$ vértices com distância 2 e s vértices com distância 3.

Ao movermos um dos s vértices de v_2 para v_1 , o vetor distância da árvore T' obtida é $d' = (1, 2, \dots, 2, 3, \dots, 3)$, onde temos $t+2$ vértices com distância 2 e $s-1$ vértices com distância 3. Sem perda de generalidade, vamos supor que estamos movendo o vértice v_n . Portanto, lembrando que $\sigma_i = \sum_{j \preceq i} d_j$, para a árvore T temos que

$$\sigma_i = \begin{cases} 2t + 3s + 3, & \text{se } i = 1 \\ 3s + 2, & \text{se } i = 2 \\ 2, & \text{se } i \in \{3, \dots, t+2\} \\ 3, & \text{se } i \in \{t+3, \dots, n\} \end{cases}$$

e para a árvore T' vale

$$\sigma'_i = \begin{cases} 2t + 3s + 2, & \text{se } i = 1 \\ 3s - 1, & \text{se } i = 2 \\ 2, & \text{se } i \in \{3, \dots, t+2\} \cup \{n\} \\ 3, & \text{se } i \in \{t+3, \dots, n-1\} \end{cases}.$$

Além disso, temos que

$$\sum_{i=1}^n d_i^2 = 4t + 9s + 5$$

e

$$\sum_{i=1}^n (d'_i)^2 = 4t + 9s.$$

Logo, temos uma expressão para o valor de Perron combinatório de cada árvore:

$$\begin{aligned} \rho_c(T) &= \frac{(2t + 3s + 3)^2 + 2^2t + (3s + 2)^2 + 3^2s}{4t + 9s + 5} \\ &= \frac{4t^2 + 18s^2 + 12ts + 16t + 39s + 13}{4t + 9s + 5} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \rho_c(T') &= \frac{(2t + 3s + 2)^2 + 2^2(t + 1) + (3s - 1)^2 + 3^2(s - 1)}{4t + 9s} \\ &= \frac{4t^2 + 18s^2 + 12ts + 12t + 15s}{4t + 9s}. \end{aligned}$$

Para descobrir se o valor de Perron combinatório aumenta, por exemplo, queremos saber quando que $\rho_c(T) < \rho_c(T')$, ou seja, para quais valores de t e s é válido

$$\frac{4t^2 + 18s^2 + 12ts + 16t + 39s + 13}{4t + 9s + 5} < \frac{4t^2 + 18s^2 + 12ts + 12t + 15s}{4t + 9s},$$

que é equivalente a

$$4t^2 - 126s^2 - 72ts + 8t - 42s > 0. \quad (4.5.1)$$

Escrevendo a expressão do lado esquerdo de (4.5.1) em função de t , temos

$$4t^2 + t(8 - 72s) + (-126s^2 - 42s) > 0.$$

As raízes do polinômio do lado esquerdo da desigualdade são dadas por

$$t = \frac{-8 + 72s \pm \sqrt{7200s^2 - 480s + 64}}{8}, \quad (4.5.2)$$

onde a expressão dentro da raiz é positiva e crescente para $s \geq 1$.

Portanto, concluímos que ao mover um vértice de v_2 a v_1 o valor de Perron combinatório pode aumentar ou diminuir, dependendo dos valores de t e s . Ou seja, se t for maior ou igual que a maior raiz em (4.5.2), temos que $\rho_c(T') > \rho_c(T)$, e quando t for menor que a raiz, então $\rho_c(T') < \rho_c(T)$. Portanto, não conseguimos uma ordenação para todas as árvores de diâmetro 3, pois o ordenamento depende dos valores de s e t .

Exemplo 4.10. *Se fixarmos $s = 1$, utilizando a equação (4.5.2) obtemos*

$$t = \frac{64 + 82,365}{8} \approx 18,3,$$

ou seja, a partir $t = 19$ vértices o valor de Perron combinatório vai aumentar ao movermos um dos s vértices adjacentes a v_2 para v_1 . Caso contrário, isto é, se $t < 19$, então o valor de Perron combinatório diminui ao fazermos essa

mudança.

A dependência linear de t em função de s nos levou ao próximo resultado que estabelece qual o valor mínimo de vértices t , dado que sabemos a quantidade de vértices s , para que $\rho_c(T) < \rho_c(T')$.

Proposição 4.5.1. *Sejam $T = T(s, t, 3)$ e $T' = T(s - 1, t + 1, 3)$ double brooms de diâmetro 3 e $n = s + t + 2$ vértices. Então*

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \frac{-8 + 72s + \sqrt{7200s^2 - 480s + 64}}{8s} \approx 19,6.$$

Demonstração. Basta notarmos que

$$\begin{aligned} & \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{-8 + 72s + \sqrt{7200s^2 - 480s + 64}}{8s} = \\ &= \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{-8 + 72s + s\sqrt{7200 - 480/s + 64/s^2}}{8s} \\ &= \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{-1}{s} + 9 + \frac{\sqrt{7200 - 480/s + 64/s^2}}{8} \\ &= 9 + \frac{\sqrt{7200}}{8} \\ &\approx 19,6. \end{aligned}$$

□

Portanto, temos que a razão $\frac{t}{s}$ tende a uma constante, indicando que se t for 19 vezes maior do que s , o valor de Perron combinatório aumenta ao movermos um s vértice para perto da raiz, ou seja, temos que $\rho_c(T(s - 1, t + 1)) > \rho_c(T(s, t))$, para $t > 19s$.

4.6 Buscas Computacionais

Com o objetivo de analisar a qualidade da aproximação do valor de Perron combinatório em relação ao valor de Perron, apresentamos os resultados de uma busca computacional realizada pelo aluno de graduação Rodrigo Loro Schuller, onde listamos todas as árvores com até $n = 14$ vértices e analisamos o erro relativo e o erro absoluto dessa aproximação. Como o valor de Perron combinatório depende de qual vértice é a raiz, para cada árvore variamos a raiz em todos os vértices e consideramos sempre o caso com maior erro.

Notamos que para $n = 2$ e $n = 3$ vértices só existe uma árvore em cada caso, a saber, o caminho $P_n = S_n$. Portanto, comparamos os erros a partir de $n = 4$ vértices, com resultados exibidos nas tabelas a seguir. Apresentamos na Tabela 3 o maior e o menor erro relativo entre o valor de Perron combinatório e o valor de Perron das árvores, enquanto a Tabela 4 contém as informações referentes ao erro absoluto.

Núm. de vértices	Maior erro rel.	Menor erro rel.
4	0,0206	0,0201
5	0,0256	0,0210
6	0,0289	0,0203
7	0,0329	0,0194
8	0,0324	0,0183
9	0,0389	0,0173
10	0,0420	0,0163
11	0,0443	0,0154
12	0,0488	0,0146
13	0,0514	0,0138
14	0,0542	0,0132

Tabela 3: Maiores e menores erros relativos.

Analisando inicialmente o erro relativo $\frac{\rho(T) - \rho_c(T)}{\rho(T)}$, percebemos que apenas no caso $n = 4$, a estrela com raiz no vértice central apresenta maior erro relativo do que o caminho com raiz em algum vértice não pendente. A partir de $n = 5$, a estrela com raiz no vértice central apresenta o menor erro relativo dentre todas as outras árvores. Já o caminho (com raiz em algum vértice não pendente) nem sempre tem o maior erro relativo, acontecendo apenas nos casos onde $n = 5, 9, 11, 14$.

Núm. de vértices	Maior erro abs.	Menor erro abs.
4	0,1167	0,0989
5	0,1842	0,1303
6	0,2805	0,1535
7	0,4095	0,1704
8	0,5253	0,1834
9	0,7270	0,1935
10	0,9553	0,2017
11	1,1353	0,2085
12	1,4844	0,2141
13	1,7936	0,2189
14	2,0858	0,2230

Tabela 4: Maiores e menores erros absolutos.

Quando olhamos para o erro absoluto $\rho(T) - \rho_c(T)$ descobrimos que, em todos os casos, a estrela com raiz em algum vértice pendente possui sempre o menor erro absoluto e o caminho com raiz em algum vértice não pendente possui o maior erro absoluto. O erro absoluto aumenta conforme o número de vértices aumenta, mas não passa de 2,09 no pior caso, isto é, para P_{14} , onde $\rho_c(P_{14}) \approx 36,328$ e $\rho(P_{14}) \approx 38,41$, e para a estrela S_{14} o erro absoluto é aproximadamente apenas 0,22.

Como o erro relativo do caminho é o maior dentre as árvores com até

14 vértices e vimos na Proposição 4.3.7 que o erro relativo do caminho tende a aproximadamente 1,3%, o valor de Perron combinatório parece realmente ser uma boa aproximação para o valor de Perron, como sugerido por Andrade e Dahl [4].

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho apresentamos o valor de Perron combinatório de uma árvore T , $\rho_c(T)$, definido por Dahl e Andrade [4], que vimos ser uma cota inferior para o valor de Perron de T . Mostramos que o valor de Perron combinatório é uma boa aproximação para o valor de Perron nos casos do caminho e da estrela. Também vimos que dentre todas as árvores com o mesmo vetor distância, a centopeia é a que possui o maior valor de Perron combinatório e que nenhuma outra árvore atinge esse máximo.

Apoiados em Kirkland *et. al* [15], exibimos a relação entre a conectividade algébrica de uma árvore T e o valor de Perron dos ramos de Perron de T , onde um pode ser obtido através do outro. Sendo assim, o valor de Perron combinatório de um ramo de Perron de T poderia ser utilizado para aproximar a conectividade algébrica da árvore.

Baseados em Andrade e Dahl [4], investigamos os erros relativos entre o valor de Perron combinatório e o valor de Perron do caminho e da estrela e mostramos que, conforme o número de vértices aumenta, no caso do caminho o erro tende a aproximadamente 1,3% e no caso da estrela o erro tende a zero. Portanto, o valor de Perron combinatório pode ser considerado uma boa aproximação para o valor de Perron de tais árvores.

Estudamos os erros relativo e absoluto entre o valor de Perron combinatório e o valor de Perron de todas as árvores com até 14 vértices e observamos que, em todos os casos, a estrela possui o menor erro absoluto, enquanto o caminho possui o maior. Ao analisar o erro relativo, vimos que

nem sempre o caminho possui o pior erro, mas, a partir de 5 vértices, a estrela apresenta o menor erro relativo.

Nossas buscas computacionais, ainda que restritas, nos levam a crer que os erros entre o valor de Perron combinatório e o valor de Perron do caminho e da estrela tendem a ser extremas, isto é, o erro entre o valor de Perron combinatório e o valor de Perron de uma árvore com n vértices tende a ser maior que o erro da aproximação para a estrela S_n e menor que o erro para o caminho P_n .

Também mostramos um resultado envolvendo as árvores $T(s, t)$ de diâmetro 3, onde vimos que o valor de Perron combinatório da árvore varia ao movermos um vértice pendente em direção à raiz e estimamos a razão entre o número de vértices pendentes s e t que determina se o valor de Perron combinatório aumenta ou diminui nessa troca.

Tendo em vista que mostramos que o valor de Perron combinatório é uma boa aproximação para o valor de Perron nos casos da estrela e do caminho, e que o caminho parece ter o pior erro relativo dentre todas as árvores, acreditamos que o inverso do valor de Perron combinatório poderia ser utilizado como aproximação para a conectividade algébrica nos casos em que a árvore em questão é um ramo de Perron.

6 Referências

- [1] ABREU, N. M. M., DEL-VECCHIO, R. R., TREVISAN, V. E VINAGRE, C. T. M., *Teoria Espectral de Grafos - Uma Introdução - III Colóquio de Matemática da Região Sul*, 2014.
- [2] ABREU, N. M. M., *Old and New Results on Algebraic Connectivity of Graphs*, *Linear Algebra and Its Applications* (2007), 423: 53-73.
- [3] ABREU, N. M. M., JUSTEL, C. M., ROJO, O. E TREVISAN, V., *Ordering Tress and Graphs with Few Cycles by Algebraic Connectivity*, *Linear Algebra and Its Applications* (2014), 458: 429-453.
- [4] ANDRADE, E. E DAHL, G., *Combinatorial Perron Values of Trees and Bottleneck Matrices*, *Linear and Multilinear Algebra*, (2017).
- [5] BROUWER, A. E HAEMERS, W., *Spectra of Graphs*, Springer, (2010).
- [6] CVETKOVIC, D., ROWLINSON, P. E SIMIC, S., *An Introduction to the Theory of Graph Spectra*, London Mathematical Society, (2010).
- [7] DIESTEL, R., *Graph Theory*, Springer, (2000).
- [8] FALLAT, S. E KIRKLAND, S., *Extremizing Algebraic Connectivity Subject to Graph Theoretic Constraints*, *Electronic Journal of Linear Algebra* (1998), 3: 48-74.
- [9] FIEDLER, M., *Algebraic Connectivity of Graphs*, *Czechoslovak Mathematical Journal* (1973), 23: 298-305.

- [10] FIEDLER, M., *A Property of Eigenvectors of Nonnegative Symmetric Matrices and its Application to Graph Theory*, Czechoslovak Mathematical Journal (1975), 25: 619–633.
- [11] GODSIL, C. E ROYLE, G., *Algebraic Graph Theory*, Springer, (2001).
- [12] GRONE, R. E MERRIS, R., *Algebraic Connectivity of Trees*, Czechoslovak Mathematical Journal (1987), 4: 660-670.
- [13] GRONE, R. E MERRIS, R., *Ordering Trees by Algebraic Connectivity*, Graphs and Combinatorics (1990), 6: 229-237.
- [14] HORN, R. E JOHNSON, C., *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, (1985).
- [15] KIRKLAND, S., NEUMANN, M. E SHADER, B. L., *Characteristic Vertices of Weighted Trees via Perron Values*, Linear and Multilinear Algebra (1996), 40: 311-325.
- [16] KIRKLAND, S. E NEUMANN, M., *Algebraic Connectivity of Weighted Trees under Perturbation*, Linear and Multilinear Algebra (1996), 42: 187-203.
- [17] MERRIS, R., *Characteristic Vertices of Trees*, Linear and Multilinear Algebra (1987), 22: 115-131.
- [18] MERRIS, R., *Laplacian Matrices of Graphs: A Survey*, Linear Algebra and its Applications (1994), 197: 143-176.
- [19] MERRIS, R., *Laplacian Graph Eigenvectors*, Linear Algebra and its Applications (1998), 278: 221-236.

- [20] ROJO, O., SOTO, R., *The Spectra of the Adjacency Matrix and Laplacian Matrix for some Balanced Trees*, *Linear Algebra and its Applications* (2005), 403: 97-117.
- [21] TVEITO, A. E WINTER, R., *Introduction to Partial Differential Equations: A Computational Approach*, Springer (2005).