

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

Cotas para a Soma de Autovalores de Grafos

por

Guilherme Porto

Tese submetida como requisito parcial
para a obtenção do título de
Doutor em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Vilmar Trevisan
Orientador

Porto Alegre, junho de 2019.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Porto, Guilherme

Cotas para a Soma de Autovalores de Grafos / Guilherme Porto.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2019.

101 p.: il.

Tese (doutorado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2019.

Orientador: Trevisan, Vilmar

Tese: Matemática Aplicada.

Nordhaus-Gaddum, Conjectura de Brouwer, Cotas para autovalores.

Cotas para a Soma de Autovalores de Grafos

por

Guilherme Porto

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

Doutor em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Matemática Discreta

Orientador: Prof. Dr. Vilmar Trevisan

Banca examinadora:

Prof. Dr. Leonardo de Lima
EA-UFPR

Prof^a. Dr^a. Cybele Vinagre
IME-UFF

Prof^a. Dr^a. Juliane Capaverde
IME-UFRGS

Prof^a. Dr^a. Elismar da Rosa Oliveira
IME-UFRGS

Tese defendida e aprovada em
19 de junho de 2019.

Prof. Dr. Esequia Sauter
Coordenador

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	vi
LISTA DE TABELAS	vii
LISTA DE SÍMBOLOS	viii
RESUMO	x
ABSTRACT	xi
1 INTRODUÇÃO	1
2 NOÇÕES BÁSICAS	9
2.1 Noções Básicas Sobre Grafos	9
2.1.1 Operações entre Grafos	13
2.1.2 Classes de Grafos e Subgrafos	17
2.2 Noções Básicas Sobre Matrizes	24
2.2.1 Polinômio Característico, Autovalores e Autovetores	25
2.2.2 Resultados Sobre Matrizes	27
3 REPRESENTAÇÕES MATRICIAIS	29
3.1 Matriz de Adjacência	29
3.1.1 Resultados sobre A-autovalores	31
3.2 Matriz Laplaciana	31
3.2.1 Resultados sobre L-autovalores	33
3.3 Matriz Laplaciana sem Sinal	36
3.3.1 Resultados sobre Q-autovalores	37

4	O PROBLEMA NORDHAUS-GADDUM	43
4.1	O Problema de Nordhaus-Gaddum para μ_1	44
4.2	O Problema de Nordhaus-Gaddum para μ_2	47
4.3	O Problema de Nordhaus-Gaddum para q_2	53
4.4	O Problema de Nordhaus-Gaddum para q_n	62
5	A SOMA DOS Q-AUTOVALORES	66
5.1	Cotas para $q_1 + \dots + q_k$	66
5.1.1	Generalização do Argumento	67
5.1.2	Grafos livres de $K_{2,s+1}$	70
5.1.3	Grafos Livres de Ciclos Pares/Ímpares	71
5.2	Conjectura de Brouwer	73
5.2.1	Cografos: Resultados Parciais	75
5.2.2	Grafos Threshold: Resultados Parciais	78
6	CONCLUSÕES	83
6.1	Sobre o problema de Nordhaus-Gaddum	83
6.2	Sobre cotas para $q_1 + \dots + q_k$	85
6.3	Sobre a conjectura de Brouwer	86
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	88
	ÍNDICE	99

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Exemplo de grafo.	1
Figura 2.1	Representação gráfica de G_1	10
Figura 2.2	Representação gráfica de G_1^c	11
Figura 2.3	Subgrafo e subgrafo induzido de G_1	13
Figura 2.4	Deleção e adição de uma aresta.	14
Figura 2.5	Rotação de uma aresta.	14
Figura 2.6	Junção de grafos.	15
Figura 2.7	União de grafos.	16
Figura 2.8	Conexão por uma aresta.	16
Figura 2.9	Identificação de vértices.	17
Figura 2.10	Representação gráfica de K_6 e $6K_1$	18
Figura 2.11	Representação gráfica de $G_4(1, 2, 3, 1)$ e $\mathcal{G}(3, 2)$	19
Figura 2.12	Grafo $K_{2,4}$	19
Figura 2.13	Subgrafos árvores de G_1	22
Figura 2.14	Sequência de cografos.	23
Figura 2.15	Sequência de grafos threshold.	24
Figura 3.1	Representação gráfica de G	29
Figura 4.1	Grafos G_{P_3} e G_{S_3}	63

LISTA DE TABELAS

Tabela 6.1	Cotas para $K_{1,39999}$	85
------------	------------------------------------	----

LISTA DE SÍMBOLOS

$ A $	Cardinalidade do conjunto A .
$V(G)$	Conjunto de vértices do grafo G .
$E(G)$	Conjunto de arestas do grafo G .
$e(G)$	Número de arestas do grafo G .
$d(G)$	Diâmetro do grafo G .
$\mathcal{X}(G)$	Número cromático do grafo G .
$e_{v_i v_j} = e_{ij}$	Aresta que liga o vértice v_i ao vértice v_j .
$d_G(u)$	Grau do vértice u no grafo G .
$d(v_i) = d_i$	i -ésimo maior grau de um vértice de G .
$N_G(u)$	Vizinhança do vértice u no grafo G .
G^c	Complementar do grafo G .
$G - e$	Grafo resultante da deleção da aresta e do grafo G .
$G + e$	Grafo resultante da adição da aresta e no grafo G .
$H \subseteq G$	H é subgrafo do grafo G .
$G \cup H$	União dos grafos G e H .
kG	União de k cópias do grafo G .
$G \vee H$	Junção dos grafos G e H .
$G \sim H$	Conexão dos grafos G e H por uma aresta.
$G_{(v,u)}H$	Identificação do vértice $v \in G$ com o vértice $u \in H$.
P_n	Caminho de n vértices.
C_n	Ciclo de n vértices.
K_n	Grafo completo de n vértices.
S_n	Grafo estrela de n vértices.
nK_1	Grafo vazio de n vértices.

$K_{r,s}$	Grafo bipartido completo com partições de tamanho r e s .
$S_{n,k}$	Grafo resultante da operação $K_k \vee (n - k)K_1$.
$T(s, t)$	Árvore double broom de ordem $2 + s + t$.
$G(n, d)$	Classe dos grafos de n vértices e diâmetro $d(G)$.
\mathcal{G}_g	Classe dos grafos unicíclicos com circunferência g .
\mathcal{R}_n	Conjunto das matrizes reais simétricas de ordem n .
$\det(M)$	Determinante da matriz M .
$\text{cof}(M)$	Matriz dos cofatores da matriz M .
M^T	Transposta da matriz M .
I_n	Matriz identidade de ordem n .
$\mathbf{1}_n$	Vetor de uns de ordem n .
$p_M(x)$	Polinômio característico da matriz M .
$\theta_i(M)^{(n)}$	i -ésimo maior autovalor da matriz M com multiplicidade n .
$\text{Spec}(M)$	Espectro da matriz M .
$\sigma_2(M)$	Norma ℓ_2 da matriz M .
(u, v)	Produto interno entre os vetores u e v .
$\ u\ $	Norma Euclidiana do vetor u .
$A(G)$	Matriz de adjacência do grafo G .
$\lambda_i(G)$	i -ésimo maior autovalor de $A(G)$.
$L(G)$	Matriz laplaciana do grafo G .
$\mu_i(G)$	i -ésimo maior autovalor de $L(G)$.
$L_k(G)$	Soma dos k maiores autovalores de $L(G)$.
$Q(G)$	Matriz laplaciana sem sinal do grafo G .
$q_i(G)$	i -ésimo maior autovalor de $Q(G)$.
$Q_k(G)$	Soma dos k maiores autovalores de $Q(G)$.
$D(G)$	Matriz diagonal dos graus do grafo G .
$b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r}$	Sequência binária de um grafo threshold .
p_i	Grau dos vértices do i -ésimo bloco de um grafo threshold.

RESUMO

Neste trabalho, investigamos problemas envolvendo desigualdades para os autovalores das matrizes Laplaciana e Laplaciana sem sinal. Estudamos o problema de Nordhaus-Gaddum e obtemos resultados para os dois maiores autovalores da matriz Laplaciana e para o segundo maior e menor autovalores da matriz Laplaciana sem sinal. Na maioria dos casos, garantimos que as desigualdades obtidas são os melhores possíveis.

Apresentamos uma técnica para obter uma cota superior para a soma dos k maiores autovalores da matriz Laplaciana sem sinal de classes de grafos que possuam uma cota superior específica para o maior autovalor dessa matriz.

Em 2013, F. Ashraf et al. [7] propuseram uma versão da conjectura de Brouwer para a matriz Laplaciana sem sinal. Essa conjectura foi provada para diversos casos, mas não possui uma demonstração para o caso geral. Investigamos sua validade para os cografos e grafos threshold, apresentando alguns resultados parciais.

Palavras-chaves: Nordhaus-Gaddum, Conjectura de Brouwer, Cotas para autovalores.

ABSTRACT

In this work, we investigate problems involving inequalities for the eigenvalues of the Laplacian and signless Laplacian matrices. We studied the Nordhaus-Gaddum problem and obtained results for the two largest eigenvalues of the Laplacian matrix and for the second largest and smallest eigenvalues of the signless Laplacian matrix. In most cases, we guarantee that the inequalities obtained are best possible.

We present a technique to obtain an upper bound for the sum of the k largest eigenvalues of the signless Laplacian matrix of classes of graphs that have a specific upper bound for the largest eigenvalue of that matrix.

In 2013, F. Ashraf et al. [7] proposed a version of Brouwer conjecture for the signless Laplacian matrix. This conjecture has been proved for several cases, but it does not have a proof for the general case. We investigated its validity for cographs and threshold graphs, presenting some partial results.

Keywords: Nordhaus-Gaddum, Brouwer conjecture, Eigenvalues bounds.

1 INTRODUÇÃO

Muitas situações podem ser descritas por diagramas feitos por conjuntos de pontos e linhas que ligam pares desses pontos. A abstração matemática dessas situações originou o conceito de grafo e o desenvolvimento de seu estudo.

Um grafo é constituído por um conjunto não vazio de vértices e por um conjunto de arestas, onde as arestas ligam pares de vértices, como na Figura 1.1, em que os vértices v_1 e v_2 estão ligados pela aresta e_{12} .

Grafos recebem esse nome por possuírem uma representação gráfica que auxilia na compreensão de muitas de suas propriedades. Nessa representação, cada vértice é indicado por um ponto, e cada aresta é exibida como uma linha que liga dois pontos, como é mostrado na Figura 1.1.

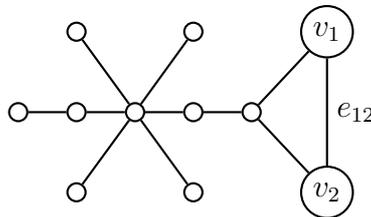


Figura 1.1 Exemplo de grafo.

Por muitos anos, o desenvolvimento da teoria de grafos foi guiado pela conjectura das quatro cores, que afirma que qualquer mapa em um plano pode ser colorido com quatro cores, de modo que as regiões que possuem uma fronteira em comum, que não seja um único ponto, não possuam a mesma cor. A solução da conjectura, dada por K. Appel e W. Haken [5] em 1976, foi um marco na história dessa área. Desde então, o assunto tem ganhado destaque e vem atuando como uma estrutura de sustentação para a matemática aplicada moderna.

A ciência da computação e a otimização combinatória, em particular, se apoiam e contribuem para o desenvolvimento da teoria de grafos. Além disso,

em um mundo onde a comunicação é primordial, a versatilidade dos grafos torna-os ferramentas indispensáveis na elaboração e análise de redes de comunicação.

A representação gráfica pode ser útil para o estudo e compreensão de algumas propriedades sobre grafos, mas não é adequada para aplicações computacionais, ou para aplicações de métodos matemáticos que auxiliem na busca de resultados. Para tais propósitos é mais vantajoso representar o grafo por meio de uma matriz que contenha informações sobre sua estrutura.

Dentre as representações matriciais de grafos mais importantes estão a Matriz de Adjacência $A(G)$, a Matriz Laplaciana $L(G)$ e a Matriz Laplaciana Sem Sinal $Q(G)$. Se $M(G)$ é uma dessas matrizes, então seus autovalores (espectro) são ditos M -autovalores (M -espectro).

Sejam $\lambda_1(G) \geq \dots \geq \lambda_n(G)$, $\mu_1(G) \geq \dots \geq \mu_n(G)$, e $q_1(G) \geq \dots \geq q_n(G)$ os A -autovalores, os L -autovalores e os Q -autovalores, respectivamente.

Com essas representações podemos tratar grafos como elementos algébricos, utilizando os recursos da teoria matricial e da álgebra linear para analisar as propriedades associadas às matrizes e seus espectros.

A teoria espectral de grafos estuda a relação entre o espectro (multi-conjunto de autovalores) de diversas matrizes associadas a grafos e características estruturais do próprio grafo como, por exemplo, número de componentes conexas e número de arestas.

A teoria espectral de grafos teve sua origem motivada pela química quântica. Em 1931, Hückel [60] estabeleceu as ideias iniciais da teoria ao representar uma molécula de hidrocarboneto por um grafo, onde os átomos de carbono eram indicados como vértices e as ligações químicas entre esses como arestas, e perceber que os autovalores da matriz de adjacência desse grafo podiam ser usados para representar os níveis de energia de certos elétrons.

O conhecido teorema da matriz árvore, que determina o número de árvores geradoras de um grafo, pode ser considerado um resultado da teoria espectral de grafos, e foi provado por Kirchhoff [63], em 1847.

Os fundamentos da teoria espectral de grafos foram estabelecidos com a tese de doutorado de Cvetković [27], em 1971 e, a partir daí, o assunto passou a aparecer com frequência na literatura. O primeiro livro sobre o tópico, chamado *Spectra of Graphs*, foi publicado em 1979, com autoria de Cvetković, Doob e Sachs [28]. Desde então, a teoria espectral de grafos tem sido documentada em várias pesquisas (veja [10, 13]).

O desenvolvimento da presente tese teve como motivação o trabalho de V. Nikiforov [77], onde cotas para os A -autovalores de um grafo, e suas somas parciais, são obtidas. Além disso, são propostos diversos problemas associados com esse tópico.

Em 1993, Yuan Hong [58] estabeleceu a questão que desencadeou o estudo de cotas para autovalores:

Quais são as melhores cotas inferiores e superiores para o k -ésimo maior A -autovalor $\lambda_k(G)$ de um grafo G de ordem n ?

Antes do trabalho de Hong, essa questão nunca tinha sido abordada com seriedade. Segundo Nikiforov [77], o problema é desafiador, sendo fácil para alguns valores de k e muito difícil para outros. Além disso, o problema de Hong não é de interesse exclusivo da teoria espectral de grafos, uma vez que está relacionado com tópicos importantes da análise combinatória e da análise, como a existência de matrizes simétricas de Hadamard, a teoria de Ramsey e as normas extremas de grafos.

A importância do problema de Hong atraiu muitos pesquisadores e, nesse sentido, foram dados vários passos para o desenvolvimento desse estudo para diversos autovalores e diversas matrizes. Além disso, esse problema foi naturalmente

estendido para diversos outros, como o problema de Nordhaus-Gaddum [80] e a conjectura de Brouwer [13].

Como exemplo do desenvolvimento desse assunto, destacamos a evolução dos resultados obtidos para cotas superiores do maior autovalor de um grafo G , também conhecido como raio espectral de G . Em 1985, R. A. Brualdi e A. J. Hoffman [14] mostraram um primeiro resultado, que foi posteriormente melhorado por R. P. Stanley [87], em 1987, e novamente por Yuan Hong [97] em 1988. Existem muitas outras cotas para esse parâmetro, para maiores detalhes recomendamos o livro de D. Stevanović [88].

Existem resultados semelhantes para outros autovalores e para outras representações matriciais de grafos. Por exemplo, D. Cvetković, P. Rowlinson e S. Simić [22] estudam cotas para os Q -autovalores, e apresentam 30 conjeturas relacionadas com o maior, o segundo maior e o menor Q -autovalores, enfatizando que são os parâmetros espectrais mais importantes dessa matriz. Essas conjeturas atraíram o interesse de vários pesquisadores e, motivados por isso, concentramos parte de nossos estudos nesses parâmetros.

Em [77, 75], Nikiforov estende o problema de Hong para tratar de problemas semelhantes, como, por exemplo, o problema de Nordhaus-Gaddum, que busca responder à seguinte questão:

*Se G é um grafo de ordem n e G^c é seu complemento,
quão grande $\lambda_k(G) + \lambda_k(G^c)$ pode ser?*

O problema surge em 1956, quando E. Nordhaus e J. Gaddum [80] apresentam cotas inferiores e superiores para a soma e para o produto do número cromático de um grafo com n vértices, denotado por $\chi(G)$, com o de seu complementar, em termos da ordem do grafo:

$$2\sqrt{n} \leq \chi(G) + \chi(G^c) \leq n + 1 \qquad n \leq \chi(G)\chi(G^c) \leq \left(\frac{n+1}{2}\right)^2$$

Desde então, qualquer cota para a soma e/ou para o produto de um invariante de um grafo G com o de seu complementar é dita **desigualdade do tipo Nordhaus-Gaddum**. Em geral, essas desigualdades são bastante elegantes, pois revelam valores extremos do parâmetro de um grafo e seu complemento. Por outro lado, podem ser difíceis de serem obtidas.

O problema de Nordhaus-Gaddum para parâmetros espectrais, especificamente para o maior A -autovalor, foi abordado em [75], e alguns progressos recentes foram relatados em [78].

Muitos resultados para o problema de Nordhaus-Gaddum lidam com os A -autovalores, L -autovalores e Q -autovalores, além dos mais diversos invariantes. Devido a isso, M. Aouchiche e P. Hansen [4] organizaram esses resultados em uma das principais obras sobre o assunto.

No Capítulo 4, estendemos o problema abordado por Nikiforov e estudamos o problema de Nordhaus-Gaddum para autovalores de outras representações matriciais. Motivados pelas conjecturas apresentadas por M. Zhai et al. [99], por Ashraf e Tayfeh-Rezaie [8], além da relevância desses parâmetros, estudamos o problema de Nordhaus-Gaddum para o maior e o segundo maior L -autovalores, e para o segundo maior e menor Q -autovalores.

Considere $M(G)$ uma representação matricial de um grafo G . Uma extensão natural do problema de Hong, que lida com a relação entre vários autovalores de uma mesma matriz, é dada pela seguinte questão:

*Quão grande (ou pequena) pode ser a soma
dos k maiores autovalores de $M(G)$?*

V. Nikiforov [77] e Mohar [73] estudaram esse problema para a soma dos k maiores A -autovalores, dada por:

$$\Lambda_k(G) = \sum_{i=1}^k \lambda_i(G), \text{ para } 1 \leq k \leq n.$$

O estudo do comportamento de $\Lambda_k(G)$ para valores grandes de k , em especial para $k = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$, é de grande interesse na química teórica. Segundo Mohar [73], os autovalores dos grafos moleculares de hidrocarbonetos (conjugados) correspondem aos níveis de energia de π -elétrons, e os correspondentes autovetores descrevem os orbitais desses elétrons. Dessa forma, a soma dos maiores A -autovalores, que correspondem aos orbitais com menores níveis de energia, determinam a energia total dos elétrons.

Devido à dificuldade de lidar analiticamente com a quantidade $\Lambda_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor}(G)$, Gutman [51] introduziu o conceito de **energia de um grafo**, dada por $\varepsilon(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|$, para aproximar $\Lambda_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor}(G)$. A investigação de cotas superiores para Λ_k está relacionada com a busca pela energia máxima que um grafo de ordem n pode assumir [54]. Hoje, existe uma vasta literatura sobre esse assunto [51, 52, 65].

Em [62], um conceito análogo ao de $\Lambda_k(G)$ foi definido para a matriz $Q(G)$, a saber

$$Q_k(G) = \sum_{i=1}^k q_i(G), \text{ para } k = 1, 2, \dots, n.$$

Na primeira seção do Capítulo 5, motivados pelos resultados de Mohar [73] e Jin et al. [62], desenvolvemos cotas superiores para a soma dos k maiores Q -autovalores de classes de grafos que possuem uma cota superior para seu maior Q -autovalor. Especificamente, lidamos com grafos livres de $K_{2,s+1}$ e grafos livres de ciclos pares/ímpares.

A conjectura de Brouwer, proposta por Haemers, Mohammadian e Tayfeh-Rezaie em [53], lida com a soma dos k maiores L -autovalores de um grafo G , definida por:

$$L_k(G) = \sum_{i=1}^k \mu_i(G), \text{ para } k = 1, 2, \dots, n.$$

Essa conjectura relaciona $L_k(G)$ com o número de arestas do grafo mais um fator combinatório que depende do valor k escolhido (quantidade de L -autovalores somados).

Conjectura 1.1. Conjectura de Brouwer

Para um grafo G de ordem n , temos que:

$$L_k(G) = \sum_{i=1}^k \mu_i(G) \leq e(G) + \binom{k+1}{2}, \text{ para } k = 1, \dots, n.$$

Apesar dessa conjectura continuar sem solução, destacamos que ela está provada para alguns valores de k e algumas classes de grafos. No Capítulo 5, listamos os casos em que a conjectura está provada.

Recentemente, Ashraf et al. [7] propuseram uma versão da conjectura de Brouwer para o caso da soma dos k maiores Q -autovalores.

Conjectura 1.2. Conjectura de Brouwer para os Q -autovalores

Para um grafo G de ordem n , temos que

$$Q_k(G) \leq e(G) + \binom{k+1}{2}, \text{ para } k = 1, \dots, n. \tag{1.1}$$

Apesar de provada para alguns valores de k , e para algumas classes de grafos, essa conjectura também continua sem solução.

Na segunda seção do Capítulo 5, estudamos a conjectura de Brouwer para a matriz Laplaciana sem sinal e apresentamos resultados parciais para as classes dos cografos e dos grafos threshold.

A organização do trabalho está disposta em seis capítulos. No Capítulo 2, abordamos noções básicas sobre grafos, suas operações e classes.

No Capítulo 3, mostramos as principais representações matriciais de grafos e alguns resultados associados com cada representação, com ênfase em cotas

para os autovalores da matriz de adjacência, da matriz Laplaciana e da matriz Laplaciana sem sinal.

No Capítulo 4, estudamos o problema de Nordhaus-Gaddum para alguns L -autovalores e Q -autovalores.

No Capítulo 5, obtemos cotas superiores para a soma dos k maiores Q -autovalores de classes de grafos que possuem uma cota superior específica para o maior Q -autovalor, além disso, estudamos a conjectura análoga à de Brouwer para matriz Laplaciana sem sinal.

No Capítulo 6, tecemos nossas considerações finais sobre o assunto, e listamos possíveis trabalhos futuros para serem desenvolvidos.

2 NOÇÕES BÁSICAS

Neste capítulo, apresentamos definições e resultados básicos da Teoria de Grafos e da Álgebra Linear, necessários para a compreensão deste trabalho.

Na primeira seção, apresentamos definições sobre grafos, suas classes e operações associadas. Em seguida, estudamos as relações entre matrizes, autovalores e autovetores, além de resultados que fornecem desigualdades entre autovalores.

2.1 Noções Básicas Sobre Grafos

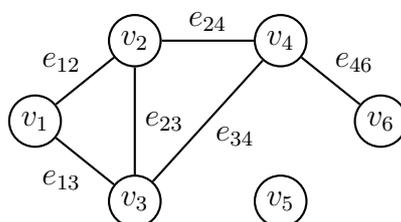
As definições e resultados básicos apresentados nesta seção estão fundamentados nos livros de Abreu et al. [2], e de Bondy et al. [11].

Definição 2.1. Um **grafo** é um par ordenado $G = (V(G), E(G))$, constituído por um conjunto finito e não vazio $V(G) = \{v_1, \dots, v_n\}$, cujos elementos são denominados **vértices**, e por um conjunto $E(G)$ de pares não ordenados de elementos distintos de $V(G)$, denominados **arestas**. Quando não houver ambiguidade, denotaremos o conjunto dos vértices e o conjunto das arestas do grafo G por V e E , respectivamente.

Grafos recebem esse nome por possuírem uma **representação gráfica**. Nessa representação cada vértice é indicado por um ponto, e cada aresta é mostrada como uma curva que conecta seu par de vértices.

Exemplo 2.1. Considere o grafo G_1 , dado por $V(G_1) = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6\}$ e $E(G_1) = \{e_{12}, e_{13}, e_{23}, e_{24}, e_{34}, e_{46}\}$, onde $e_{12} = \{v_1, v_2\}$, $e_{13} = \{v_1, v_3\}$, $e_{23} = \{v_2, v_3\}$, $e_{24} = \{v_2, v_4\}$, $e_{34} = \{v_3, v_4\}$ e $e_{46} = \{v_4, v_6\}$.

Na figura 2.1 apresentamos a representação gráfica de G_1 .



$$G_1 = (V(G_1), E(G_1)).$$

Figura 2.1 Representação gráfica de G_1 .

Dado um conjunto A , denotamos por $|A|$ a **cardinalidade do conjunto**. Logo, denotamos por $|V|$ o número de vértices de G (ou **ordem** do grafo), e por $e(G) = |E|$ o número de arestas de G (ou **tamanho** do grafo). O grafo do **Exemplo 2.1** tem ordem e tamanho 6.

A representação gráfica ilustra as ligações entre os vértices e as arestas do grafo. O desenvolvimento da teoria espectral de grafos exige que tais relações sejam adequadamente identificadas.

Definição 2.2. Se $e_{uv} = \{u, v\} \in E(G)$, dizemos que e_{uv} é **incidente** aos vértices u e v , que são ditos **pontos finais da aresta** e_{uv} . Dizemos que u e v são vértices **vizinhos** ou **adjacentes**.

Se $e_{uv} = \{u, v\} \notin E(G)$, dizemos que os vértices u e v não são adjacentes.

Quando não houver ambiguidade, denotaremos a aresta $e_{v_i v_j} = \{v_i, v_j\}$ por $e_{v_i v_j}$, ou por e_{ij} .

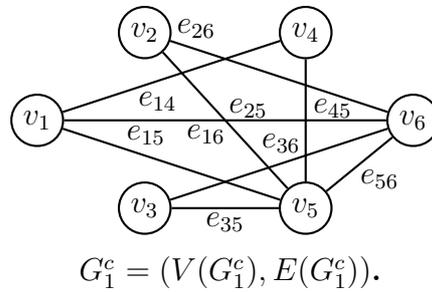
No **Exemplo 2.1**, temos que e_{12} é uma aresta incidente aos vértices v_1 e v_2 , que são os pontos finais da aresta, e portanto, são vértices adjacentes.

Um grafo de ordem n pode possuir no máximo $\binom{n}{2}$ arestas, visto que essa é a quantidade de pares não ordenados de elementos distintos que podem ser formados com n vértices. A presença e ausência dessas arestas no grafo auxiliam na definição de seu complementar, um novo grafo estruturalmente associado ao original.

Definição 2.3. Dado um grafo $G = (V, E)$, seu **grafo complementar**, denotado por $G^c = (V^c, E^c)$, é o grafo com $V^c = V$ e tal que $e_{ij} \in E^c$ se, e somente se, $e_{ij} \notin E$. Em outras palavras, dois vértices são adjacentes em G^c se, e somente se, não são adjacentes em G .

Se $\rho = \rho(G)$ é um invariante de G , vamos denotar por $\rho^c = \rho(G^c)$ o mesmo invariante do seu complementar.

Na figura 2.2, mostramos a representação gráfica do grafo complementar de G_1 , grafo do **Exemplo 2.1**.



$$G_1^c = (V(G_1^c), E(G_1^c)).$$

Figura 2.2 Representação gráfica de G_1^c .

Em seguida, mostramos como as relações de incidência e adjacência são usadas na caracterização de elementos dos vértices.

Definição 2.4. A **vizinhança de um vértice** $v \in V(G)$ é o conjunto $\{u \in V(G) : \{u, v\} \in E(G)\}$, denotado por $N_G(v)$. Quando não houver ambiguidade, denotaremos a vizinhança do vértice $v \in G$ por $N(v)$.

O **grau de um vértice** $v_i \in V(G)$, denotado por $d_G(v_i)$, é o número de arestas que incidem em v_i no grafo G . Quando não houver ambiguidade, denotaremos o grau do vértice $v_i \in V(G)$ por $d(v_i)$, ou por $d_i = d_i(G)$.

Sempre podemos renomear os vértices de G para formar uma sequência não crescente $d_1(G) \geq d_2(G) \geq \dots \geq d_n(G)$, chamada de **sequência dos graus de G** .

Dizemos que $v \in V(G)$ é um **vértice isolado** quando nenhuma aresta incide sobre ele, ou seja, $d_G(v) = 0$.

Dizemos que $v \in V(G)$ é um **vértice pendente** quando uma única aresta incide sobre ele, ou seja, $d_G(v) = 1$.

Observação 2.1. Cada uma das possíveis arestas de um grafo de n vértices deve estar ou em E ou em E^c , e sendo assim, temos que $e(G) + e(G^c) = \binom{n}{2}$. Usando isso, podemos relacionar a sequência dos graus de um grafo com a de seu complementar:

$$d_i^c = n - 1 - d_{n+1-i} \text{ para } 1 \leq i \leq n.$$

Cada grafo possui uma única sequência de graus, porém uma mesma sequência pode estar associada a grafos distintos. Dada uma sequência de números inteiros não-negativos, podemos questionar se existe algum grafo que possui a mesma como sua sequência de graus.

Definição 2.5. Uma sequência de números inteiros não-negativos é dita **sequência gráfica** se existe um grafo com a mesma sequência de graus.

Existem muitas maneiras de caracterizar uma sequência gráfica. Para verificar se uma sequência é gráfica utilizamos o próximo resultado.

Lema 2.1. [83] Uma sequência de números inteiros não-negativos $d_1 \geq \dots \geq d_n$ é gráfica se, e somente se, a soma $d_1 + \dots + d_n$ é par e a sequência obedece à propriedade

$$\sum_{i=1}^r d_i \leq r(r-1) + \sum_{i=r+1}^n \min(r, d_i), \text{ para cada inteiro } r \leq n-1.$$

No grafo do **Exemplo 2.1**, temos que as arestas e_{13} , e_{23} e e_{34} são incidentes ao vértice v_3 , logo $d_{G_1}(v_3) = 3$ e $N_{G_1}(v_3) = \{v_1, v_2, v_4\}$, e conseqüentemente, temos que $d_{G_1^c}(v_3) = 6 - 1 - 3 = 2$. Além disso, temos que v_5 é um vértice isolado em G , pois nenhuma aresta incide nele. A sequência dos graus de G_1 é dada por $3 \geq 3 \geq 3 \geq 2 \geq 1 \geq 0$.

Muitas estruturas aparecem em subconjuntos de vértices e arestas que, por vezes, são mais simples do que o grafo como um todo.

Definição 2.6. Seja $G = (V, E)$ um grafo. O grafo $G' = (V', E')$ é dito **subgrafo** de G , denotado por $G' \subseteq G$, se $V' \subseteq V$ e $E' \subseteq E$.

Dizemos que $G' \subseteq G$ é um **subgrafo induzido** de G se dois vértices são adjacentes em G' se, e somente se, são adjacentes em G .

O grafo G é dito **grafo livre de G'** se esse não é subgrafo de G .

Exemplo 2.2. Considere os grafos apresentados na Figura 2.3.



Figura 2.3 Subgrafo e subgrafo induzido de G_1 .

Ambos os grafos são compostos por vértices e arestas do grafo G_1 , do **Exemplo 2.1**, e portanto são seus subgrafos. O grafo H_2 é um subgrafo induzido de G_1 , por preservar todas as adjacências entre os vértices do grafo original. Além disso, temos que H_2 é livre de H_1 . No entanto, H_2 pode ser visto como subgrafo de H_1 .

A análise de subgrafos é uma técnica comum na investigação das propriedades de um grafo. Alguns subgrafos estão presentes em uma enorme quantidade de grafos, facilitando algumas caracterizações e o uso de determinadas metodologias de estudo.

2.1.1 Operações entre Grafos

Operações entre grafos constroem novos grafos utilizando as informações provenientes dos originais. Algumas operações utilizam informações de dois ou mais grafos para gerar um novo.

Definição 2.7. Dado um grafo $G = (V, E)$, a **deleção de uma aresta** $e \in E$ fornece o grafo $G - e = (V, E - \{e\})$. Em outras palavras, obtemos o grafo $G - e$ deletando apenas a aresta e do grafo G .

Recursivamente, podemos definir a **deleção de um conjunto de arestas** $E' \subseteq E(G)$, denotada por $G - E'$. Em particular, se H é um subgrafo de G , então $E(H) \subseteq E(G)$, e portanto, a operação $G - E(H)$ está bem definida.

Analogamente, podemos definir a **adição de uma aresta** $e \in E$, denotada por $G + e$, e a **adição de um conjunto de arestas** E' , denotada por $G + E'$.

Vejamos um exemplo da operação de deleção (adição) de uma aresta.

Exemplo 2.3. Considere os grafos da Figura 2.4.

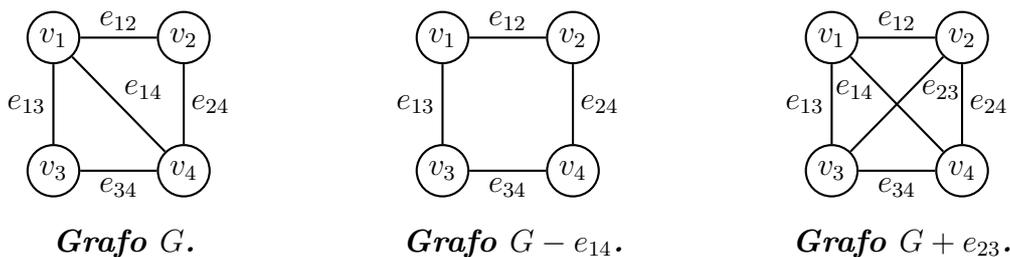


Figura 2.4 Deleção e adição de uma aresta.

Assim como podemos deletar e adicionar arestas em um grafo, também podemos substituir as arestas do grafo.

Definição 2.8. Dado um grafo $G = (V, E)$, sejam $r, s, t \in V$ tais que $e_{rs} \in E$ e $e_{rt} \notin E$. A **rotação da aresta** $e_{rs} \in E$ fornece o grafo

$$G' = (V, (E - \{e_{rs}\}) \cup \{e_{rt}\}).$$

Em outras palavras, obtemos o grafo G' deletando uma aresta de G e adicionando uma nova aresta que compartilhe um de seus pontos finais com a aresta deletada.

Vejamos um exemplo da operação de rotação de aresta.

Exemplo 2.4. Considere os grafos da Figura 2.5



Figura 2.5 Rotação de uma aresta.

A próxima operação é caracterizada pela adição de arestas entre grafos distintos, gerando um novo grafo.

Definição 2.9. *Dados os grafos $G_1 = (V_1, E_1)$ e $G_2 = (V_2, E_2)$, com $V_1 \cap V_2 = \emptyset$, ou seja, sem vértices em comum, sua **junção** é o grafo*

$$G_1 \vee G_2 = (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2 \cup \{e_{ij} : v_i \in V_1 \text{ e } v_j \in V_2\}).$$

A junção de dois grafos torna cada vértice de um dos grafos adjacente a todos os vértices do outro.

Vejamos um exemplo da operação de junção de grafos.

Exemplo 2.5. *Considere os grafos da Figura 2.6.*

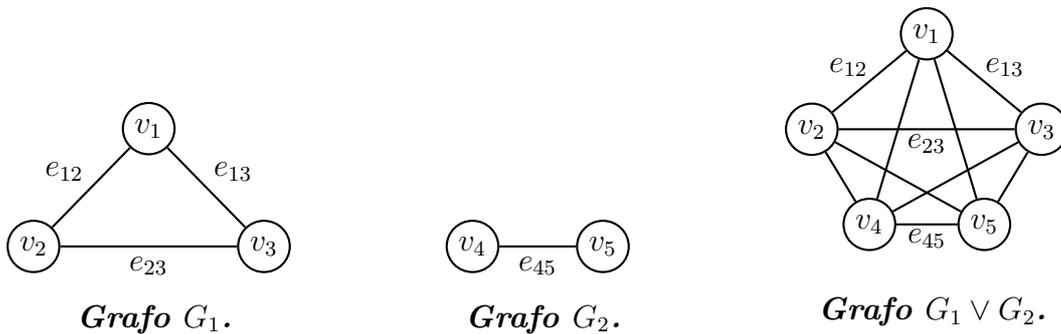


Figura 2.6 Junção de grafos.

Em seguida, mostramos como unir a informação de dois ou mais grafos.

Definição 2.10. *Dados os grafos $G_1 = (V_1, E_1)$ e $G_2 = (V_2, E_2)$, com $V_1 \cap V_2 = \emptyset$, ou seja, sem vértices em comum, sua **união** é o grafo*

$$G_1 \cup G_2 = (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2).$$

Para qualquer grafo G , denotamos por kG a **união de k cópias** de G .

A união de dois grafos representa a união de seus conjuntos de vértices e arestas.

Vejamos um exemplo da operação de união de grafos.

Exemplo 2.6. Considere os grafos da Figura 2.7.

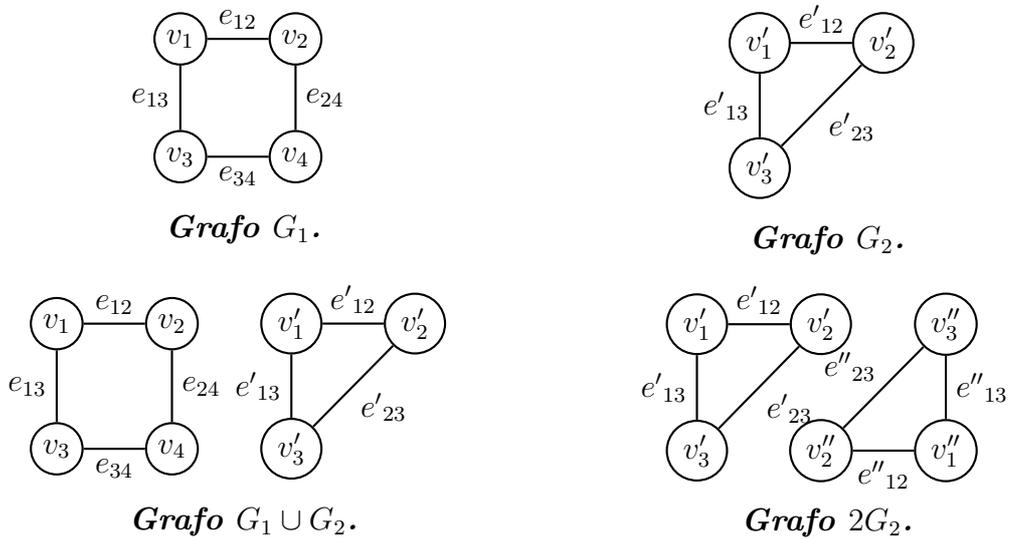


Figura 2.7 União de grafos.

Podemos reunir as informações de dois grafos por meio da adição de um aresta entre os grafos.

Definição 2.11. Dados os grafos $G_1 = (V_1, E_1)$ e $G_2 = (V_2, E_2)$, com $V_1 \cap V_2 = \emptyset$, ou seja, sem vértices em comum, sua **conexão por uma aresta** entre um vértice $v_1 \in V_1$ e um vértice $v_2 \in V_2$ é o grafo

$$G_1 \sim G_2 = (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2 \cup \{e_{12}\}).$$

Em outras palavras, é o grafo obtido pela adição da aresta e_{12} entre os grafos.

Vejamos um exemplo da operação de conexão por um aresta.

Exemplo 2.7. Considere os grafos da Figura 2.8.

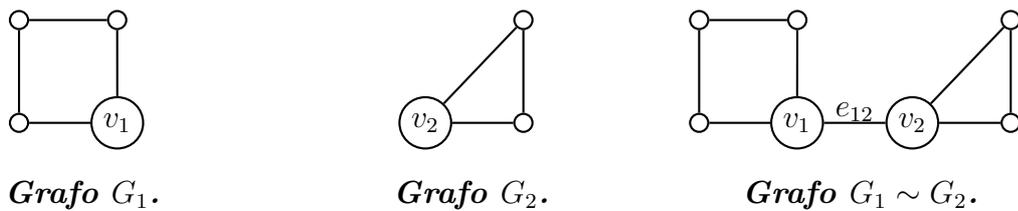


Figura 2.8 Conexão por uma aresta.

Também podemos reunir as informações de dois grafos por meio da identificação de vértices.

Definição 2.12. Dados os grafos $G_1 = (V_1, E_1)$ e $G_2 = (V_2, E_2)$, com $V_1 \cap V_2 = \emptyset$, ou seja, sem vértices em comum, a **identificação de vértices** $v_1 \in V_1$ e $v_2 \in V_2$ é o grafo $G_{1(v_1, v_2)}G_2$, com

$$V(G_{1(v_1, v_2)}G_2) = \bigcup_{i=1}^2 (V_i - \{v_i\}) \cup \{u\} \text{ e}$$

$$E(G_{1(v_1, v_2)}G_2) = \bigcup_{i=1}^2 (E_i - \{e_{ij} : v_j \in N_{G_i}(v_i)\}) \cup \{e_{uv_j} : v_j \in N_{G_1}(v_1) \cup N_{G_2}(v_2)\}.$$

Assim, u é o vértice adicionado, com $N_{G_{1(v_1, v_2)}G_2}(u) = N_{G_1}(v_1) \cup N_{G_2}(v_2)$, ou seja, u é o vértice que se tornou comum aos grafos G_1 e G_2 , e possui as adjacências de v_1 e v_2 .

A identificação de dois vértices de grafos distintos constroi o grafo $G_{(v_1, v_2)}$, onde u atua como um vértice comum entre os grafos, sem alterar as adjacências entre os vértices de G_1 , nem entre os vértices de G_2 , e nem adiciona arestas entre G_1 e G_2 .

Essa operação pode ser compreendida como uma “colagem” entre dois vértices de grafos distintos. Vejamos um exemplo da operação de identificação de vértices.

Exemplo 2.8. Considere os grafos da Figura 2.9.

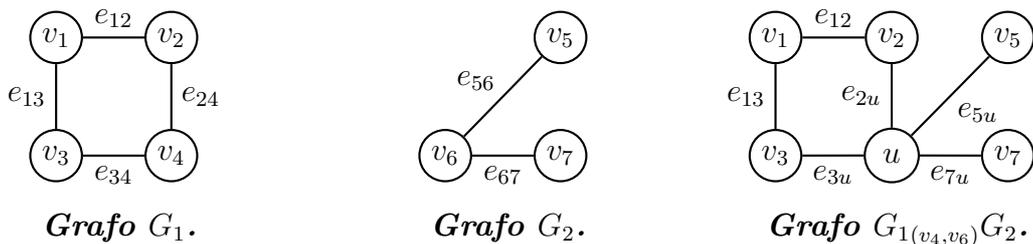


Figura 2.9 Identificação de vértices.

2.1.2 Classes de Grafos e Subgrafos

Podemos identificar estruturas definidas por padrões nos conjuntos de vértices e arestas do grafo. Tais estruturas definem classes de grafos que, por vezes, são mais fáceis de serem estudadas por meio de suas caracterizações.

Alguns grafos são caracterizados por regularidades entre seus elementos. Na próxima definição, vamos classificar os grafos que possuem todos os vértices com o mesmo grau.

Definição 2.13. Um grafo é dito ***k*-regular** se todos os seus vértices possuem grau k . Quando não houver ambiguidade, vamos dizer apenas que o grafo é regular.

O **grafo completo** de ordem n , denotado por K_n , é o grafo $(n - 1)$ -regular. Em outras palavras, é o grafo que possui todas as arestas possíveis.

O **grafo vazio** de ordem n é a união de n vértices isolados, denotado por nK_1 , ou seja, o grafo 0-regular. Em outras palavras, é o grafo sem nenhuma aresta.

Exemplo 2.9. Apresentamos na Figura 2.10 os grafos K_6 e $6K_1$.



Figura 2.10 Representação gráfica de K_6 e $6K_1$.

Observação 2.2. Se G é um grafo k -regular segue, pela **Observação 2.1**, que G^c é um grafo $(n - k - 1)$ -regular.

Além disso, note que o grafo completo possui todas as arestas possíveis, ou seja, $e(K_n) = \binom{n}{2}$. Sendo assim, para todo grafo G de ordem n temos que $E(K_n) = E(G) \cup E(G^c)$.

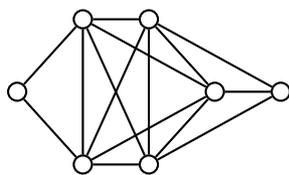
Utilizando os conceitos vistos, podemos estudar grafos completos como subgrafos de grafos maiores, permitindo a análise de estruturas mais complexas.

Definição 2.14. [92] Um subgrafo completo de G é dito um **clique** de G .

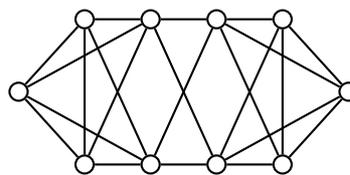
A classe de grafos $G_d(n_1, n_2, \dots, n_d, n_{d+1})$ é composta de $d+1$ cliques $K_{n_1}, K_{n_2}, \dots, K_{n_d}, K_{n_{d+1}}$. Cada clique K_{n_i} está conectado com os cliques vizinhos $K_{n_{i-1}}$ e $K_{n_{i+1}}$ por meio da operação de junção, onde $2 \leq i \leq d$.

Denotamos por $\mathcal{G}(r, s)$ o grafo obtido ao ligar todos os vértices do subgrafo sK_1 de $K_r \vee sK_1$ com todos os vértices do subgrafo sK_1 de outro $K_r \vee sK_1$.

Exemplo 2.10. Apresentamos na Figura 2.11 os grafos $G_4(1, 2, 3, 1)$ e $\mathcal{G}(3, 2)$.



Grafo $G_4(1, 2, 3, 1)$.



Grafo $\mathcal{G}(3, 2)$.

Figura 2.11 Representação gráfica de $G_4(1, 2, 3, 1)$ e $\mathcal{G}(3, 2)$.

A próxima classe também é caracterizada pela regularidade entre seus elementos. Nessa classe, os vértices do grafo são divididos em subconjuntos, onde os vértices de um mesmo subconjunto não são adjacentes.

Definição 2.15. Um grafo $G = (V, E)$ é dito **grafo bipartido** quando $V = Y_1 \cup Y_2$, onde Y_1 e Y_2 são não vazios e disjuntos ($Y_1 \cap Y_2 = \emptyset$), e as arestas de G são todas da forma $e_{v_i v_j}$, com $v_i \in Y_1$ e $v_j \in Y_2$, ou seja, não existem vértices adjacentes em um mesmo subconjunto da partição.

Se $E = Y_1 \times Y_2$, com $|Y_1| = r$ e $|Y_2| = s$, o grafo é chamado de **bipartido completo**, sendo denotado por $K_{r,s}$.

Exemplo 2.11. Apresentamos, na Figura 2.12, o grafo bipartido completo $K_{2,4}$.

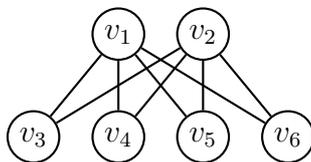


Figura 2.12 Grafo $K_{2,4}$.

Considere a partição dos vértices dada por $Y_1 = \{v_1, v_2\}$, e $Y_2 = \{v_3, v_4, v_5, v_6\}$. Temos que $V = Y_1 \cup Y_2$, e todos os vértices de Y_1 estão ligados a todos os vértices de Y_2 , e vice-versa. Além disso, vértices de um mesmo subconjunto não são adjacentes.

Em seguida, apresentamos uma classe de grafos que possui uma estrutura simples, e que aparece como subgrafo de quase todos os grafos.

Definição 2.16. *Uma sequência finita v_1, v_2, \dots, v_k de vértices de um grafo $G = (V, E)$ é dita uma **cadeia** de v_1 a v_k se $\{v_i, v_{i+1}\} \in E$, para $1 \leq i \leq k - 1$. Se $v_1 = v_k$ a cadeia é dita **fechada**.*

*Um **caminho** é uma cadeia onde todos os vértices são distintos. O caminho com n vértices é denotado por P_n . O **comprimento de um caminho** é o número de arestas que nele ocorre.*

*Um **ciclo** é um caminho fechado. O ciclo com n vértices é denotado por C_n , com $n \geq 3$. O **comprimento de um ciclo** é o número de arestas que nele ocorre.*

*A **circunferência de um grafo** é o comprimento do menor ciclo que está contido no grafo.*

No **Exemplo 2.2**, temos que $H_1 = C_4$ e $H_2 = P_3$.

O próximo resultado mostra como os ciclos podem ser utilizados na caracterizações dos grafos bipartidos.

Lema 2.2. [39] *Um grafo é bipartido se, e somente se, não possui um ciclo de comprimento ímpar como subgrafo.*

Podemos utilizar os caminhos para definir a distância entre vértices. Além disso, também podemos classificar os grafos por meio dessa distância.

Definição 2.17. *A **distância entre os vértices** v e u do grafo G é igual ao comprimento do menor caminho entre os vértices.*

*O **diâmetro do grafo** G , denotado por $d(G)$, é a distância máxima entre todos os pares de vértices de G . Quando não houver ambiguidade, denoraremos o diâmetro do grafo G por d .*

*Denotamos por $G(n, d)$, a **classe dos grafos de ordem n e diâmetro d** . Observe que a classe $G_d(n_1, n_2, \dots, n_d, n_{d+1})$ está contida na classe $G(n, d)$.*

No **Exemplo 2.1**, seja H o subgrafo induzido pelos vértices $\{v_1, v_2, v_3, v_4, v_6\}$. Temos que $H \in G(5, 3)$, visto que a distância entre v_1 e v_6 é igual a 3, e essa é a maior distância entre os vértices de H .

No próximo lema, mostramos que os grafos da classe $G(n, d)$ podem ser vistos como subgrafos de alguns grafos da classe $G_d(n_1, n_2, \dots, n_d, n_{d+1})$.

Lema 2.3. [92] *Todo grafo da classe $G(n, d)$ é subgrafo de pelo menos um grafo na classe $G_d(n_1 = 1, n_2, \dots, n_d, n_{d+1} = 1)$ com $n = \sum_{i=1}^{d+1} n_i$.*

As próximas classes são caracterizadas pela presença, ou ausência, de caminhos entre os vértices do grafo. Basicamente, todo grafo pode ser classificado como conexo ou desconexo.

Definição 2.18. *Um grafo é dito **conexo** quando existe um caminho ligando cada par de seus vértices; caso contrário, o grafo é dito **desconexo**.*

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

Todo grafo desconexo pode ser visto como a união de suas componentes conexas. Essa noção é fundamental para tratar de grafos desconexos.

O grafo G_1 , no **Exemplo 2.1**, possui duas componentes conexas: são elas o vértice isolado v_5 e o subgrafo H , induzido pelos vértices $\{v_1, v_2, v_3, v_4, v_6\}$.

Na próxima definição, classificamos os grafos de acordo com o número de seus subgrafos que são ciclos e por suas circunferências.

Definição 2.19. *Um grafo é dito **acíclico** se não possui ciclo como subgrafo.*

*Um grafo é dito **unicíclico** se possui um único ciclo como subgrafo.*

*Denotamos por \mathcal{G}_g o **conjunto dos grafos unicíclicos com circunferência g** , em outras palavras, $C_g \subseteq G$ para todo grafo $G \in \mathcal{G}_g$.*

No **Exemplo 2.2**, temos $H_1 = C_4 \in \mathcal{G}_4$.

Assim como os grafos desconexos são caracterizados pela ausência de determinados caminhos, podemos caracterizar as árvores e as florestas pela ausência de ciclos. Essas classes estão contidas em quase todos os grafos e, por isso, são constantemente estudadas.

Definição 2.20. Um grafo conexo e sem ciclos é chamado de **árvore**.

Um grafo desconexo e sem ciclos é chamado de **floresta**.

Em particular, o grafo **estrela** de ordem n , denotado por S_n , é a árvore com $d_1 = n - 1$ e $d_2 = \dots = d_n = 1$. Em outras palavras, é o grafo em que um único vértice é adjacente a todos os outros, e nenhum outro par de vértices é adjacente.

A **árvore double broom** de ordem $n = s + t + 2$, denotada por $T(s, t)$, é composta por apenas 2 vértices adjacentes com grau maior que 1, onde um deles é adjacente a s vértices pendentos, e o outro adjacente a t vértices pendentos.

Exemplo 2.12. Apresentamos, na Figura 2.13, as árvores $T(1, 2)$ e S_4 .



Figura 2.13 Subgrafos árvores de G_1 .

Os grafos $T(1, 2)$ e S_4 , do **Exemplo 2.12**, são árvores que são subgrafos do grafo G_1 , do **Exemplo 2.1**.

Os cografos podem ser caracterizados pela ausência de P_4 como subgrafo induzido. Além disso, os conceitos de união e complementar permitem gerar recursivamente esses grafos.

Definição 2.21. [13] Um grafo G é dito **cografo** se não contém P_4 como subgrafo induzido. Cografos também podem ser indutivamente caracterizados da seguinte forma:

- K_1 é um cografo.

- Se G é um cografo, então G^c é um cografo.
- Se G e H são grafos sem vértices em comum, então $G \cup H$ é um cografo.

Exemplo 2.13. Apresentamos, na Figura 2.14, uma série de grafos gerados recursivamente.

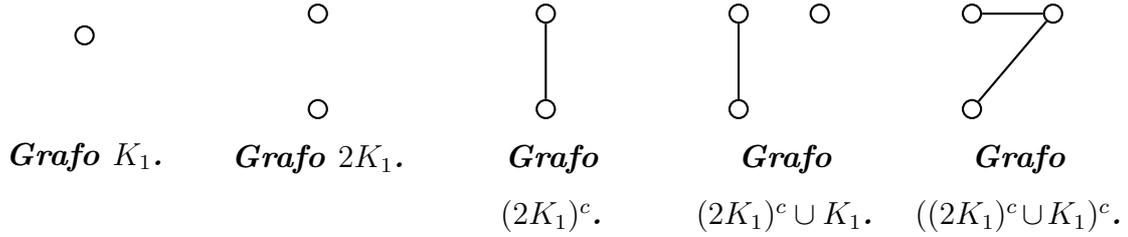


Figura 2.14 Sequência de grafos.

Em seguida, estudamos a classe dos grafos threshold. Essa classe foi apresentada de forma independente por vários autores em diferentes contextos desde 1970, e possui aplicações em diversas áreas [69].

Definição 2.22. Um **grafo threshold** G de ordem n pode ser construído por um processo iterativo que começa com um vértice isolado e a cada passo ou um novo vértice isolado é adicionado, ou um novo vértice adjacente a todos os vértices anteriores (dito **vértice dominante**) é adicionado.

Esse processo iterativo pode ser descrito por uma sequência binária $x_1 \dots x_n$ com $x_i \in \{0, 1\}$ e $x_1 = x_2$. O dígito 0 representa a adição de um vértice isolado ao grafo, enquanto que o dígito 1 representa a adição de um vértice dominante.

Utilizaremos a notação sincopada $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r}$, onde $b_i(G) = b_i \in \{0, 1\}$, $a_i(G) = a_i \in \mathbb{N}$ é a quantidade de repetições do dígito b_i e $b_i^{a_i}$ é chamado de bloco i , para $1 \leq i \leq r$. Além disso, $b_i + b_{i+1} = 1$, para $1 \leq i \leq r - 1$.

Observe que todos os vértices do bloco i possuem o mesmo grau, denotado por p_i , que é dado por:

$$p_i = \begin{cases} \sum_{j=i}^r b_j a_j, & \text{para } b_i = 0, \\ \sum_{j=1}^i a_j - 1 + \sum_{j=i+1}^r b_j a_j, & \text{para } b_i = 1, \end{cases} \quad \text{onde } 1 \leq i \leq r.$$

Exemplo 2.14. Apresentamos, na Figura 2.15, uma série de grafos threshold gerados recursivamente.

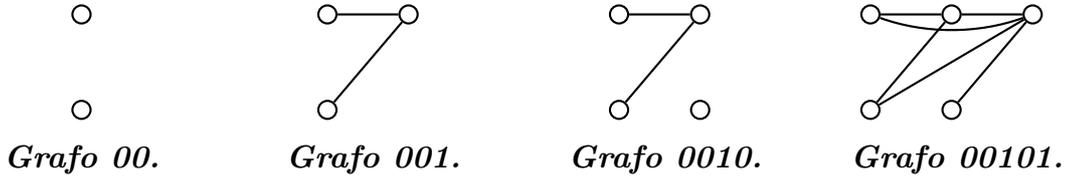


Figura 2.15 Sequência de grafos threshold.

2.2 Noções Básicas Sobre Matrizes

Nesta seção, apresentamos definições e resultados iniciais sobre teoria matricial e álgebra linear, baseados nos livros de Horn et al. [59] e Franklin [44], que serão necessários para tratar as representações matriciais de grafos.

Definição 2.23. Uma **matriz** $M = [m_{ij}]$, com $1 \leq i \leq m$ e $1 \leq j \leq n$, é um conjunto retangular de expressões com m linhas e n colunas, normalmente representada sob a forma de uma tabela.

Denotamos por I_n a **matriz identidade** de ordem n , e por 1_n o vetor de ordem n em que todo elemento é um.

Ao longo desse trabalho, temos interesse no conjunto das **matrizes reais simétricas** de ordem n , denotado por $\mathcal{R}_n = \{M \in \mathbb{R}^{n \times n} : M^t = M\}$.

Assim como ocorre na relação entre grafos e subgrafos, também podemos estudar estruturas definidas por certas linhas e colunas da matriz que, por vezes, são mais simples do que a matriz completa.

Definição 2.24. Uma matriz $M \in \mathcal{R}_m$ é uma **submatriz principal** de uma matriz $N \in \mathcal{R}_n$, com $n > m$, se M é obtida pela deleção de $n - m$ linhas e das mesmas $n - m$ colunas, de N .

Assim como ocorre na relação entre um grafo e seu complementar, também podemos definir o complemento de uma matriz em função de um vetor.

Definição 2.25. Dada uma matriz $M \in \mathcal{R}_n$, definimos seu ***u-complemento*** como sendo a matriz M' , dada por $M' = U - M$, onde $U = uu^T$ e $u \in \mathbb{R}^n$ é um vetor não nulo.

Na próxima definição, apresentamos a norma ℓ_2 de uma matriz.

Definição 2.26. Para $M \in \mathcal{R}_n$, denotamos por $\sigma_2(M)$ a norma ℓ_2 de M , dada por:

$$\sigma_2(M) = \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n m_{ij}^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Utilizando as entradas de uma matriz, podemos definir seu coronal.

Definição 2.27. [68] O coronal de uma matriz $M \in \mathcal{R}_n$, denotado por $\Gamma_M(x)$, é dado pela soma de todas as entradas da matriz $(xI_n - M)^{-1}$, ou seja,

$$\Gamma_M(x) = \mathbf{1}_n^T (xI_n - M)^{-1} \mathbf{1}_n.$$

2.2.1 Polinômio Característico, Autovalores e Autovetores

O estudo das matrizes quadradas simétricas está ligado ao estudo de polinômios característicos, autovalores e autovetores. Nesta seção, recordamos que para cada matriz quadrada podemos associar um polinômio característico, um multiconjunto de autovalores e um conjunto de autovetores.

Definição 2.28. Seja M uma matriz quadrada. Um número $\theta(M) = \theta$ é dito um ***autovalor*** de M se, e somente se, existe um vetor não nulo v que satisfaz a equação $Mv = \theta v$. Tal vetor é dito ***autovetor*** associado ao autovalor θ .

O ***polinômio característico*** da matriz M , denotado por $p_M(x)$, é dado por $p_M(x) = \det(xI - M)$.

Essas definições mostram como relacionar uma matriz quadrada com seu polinômio característico, seus autovalores, e seus autovetores. Vejamos como relacionar o polinômio característico com os autovalores e autovetores.

Teorema 2.1. [44] *O número θ é um autovalor da matriz quadrada M se, e somente se, $\det(\theta I - M) = 0$, ou seja, se θ é raiz do polinômio característico $p_M(x) = \det(xI - M)$. Além disso, se M tem ordem n , então o polinômio característico $p_M(x)$ tem grau n .*

O último teorema garante que a ordem de uma matriz indica seu número de autovalores, e que esses são dados pelas raízes do polinômio característico, logo nem sempre todos os autovalores são distintos. Indicar os autovalores que se repetem, e quantas vezes isso ocorre, é fundamental para descrevê-los.

Definição 2.29. *A **multiplicidade** do autovalor θ , de uma matriz quadrada M , é o número de vezes que este é raiz do polinômio característico $p_M(x) = \det(xI - M)$. O **espectro** da matriz M é dado pelo multiconjunto de seus autovalores, repetidos tantas vezes quanto suas multiplicidades. Denotamos por $\text{Spec}(M) = \{\theta_1(M)^{(n_1)}, \dots, \theta_k(M)^{(n_k)}\}$ o espectro da matriz M com autovalores $\theta_1, \dots, \theta_k$, e com multiplicidades n_1, \dots, n_k , respectivamente. Quando não houver ambiguidade, denotaremos o espectro da matriz M por $\text{Spec}(M) = \{\theta_1^{(n_1)}, \dots, \theta_k^{(n_k)}\}$.*

Em seguida, apresentamos propriedades específicas dos autovalores e autovetores das matrizes reais simétricas.

Teorema 2.2. [44] *Se $M \in \mathcal{R}_n$, então seus autovalores $\theta_1, \dots, \theta_n$ são reais. Além disso, M possui autovetores unitários v^1, \dots, v^n , dois a dois ortogonais, com $Mv^j = \theta_j v^j$, para $j = 1, \dots, n$. Tais autovetores podem ser escolhidos para formar uma base ortonormal do \mathbb{R}^n .*

Observação 2.3. *Como os autovalores de uma matriz real simétrica são reais podemos renomeá-los, e ordená-los, de forma que tenhamos $\theta_1 \geq \dots \geq \theta_n$. Tal relação de ordem é fundamental no desenvolvimento desse trabalho.*

No próximo resultado, apresentamos a classe das matrizes positivas semidefinidas e algumas das propriedades de seus autovalores.

Teorema 2.3. [59] *Se $M \in \mathcal{R}_n$, então as seguintes afirmações são equivalentes:*

- (1) *M é uma **matriz positiva semidefnida**, ou seja, $v^T M v \geq 0$, para todo $v \in \mathbb{R}^n$.*
- (2) *Todos os autovalores de M são reais não negativos.*
- (3) *Existe uma matriz B tal que $M = B B^T$.*

2.2.2 Resultados Sobre Matrizes

Nesta subseção, apresentamos resultados sobre matrizes reais simétricas que serão utilizados no decorrer desse trabalho. Enfocamos em resultados que auxiliam na construção de desigualdades entre autovalores.

O **Teorema do Entrelaçamento de Cauchy** afirma que o espectro de uma matriz real simétrica de ordem n está entrelaçado com o espectro de suas submatrizes.

Teorema 2.4. (Teorema do Entrelaçamento de Cauchy)[59]

Sejam $M \in \mathcal{R}_n$, $n > 1$, e N_r uma submatriz principal de ordem r de M , com $1 \leq r < n$. Então

$$\theta_{r-i+1}(M) \geq \theta_{r-i+1}(N_r) \geq \theta_{n-i+1}(M), \text{ para } 1 \leq i \leq r.$$

Existem diversas demonstrações para o **Teorema do Entrelaçamento de Cauchy** na literatura (ver [43], [61] e a página 186 de [82]). Para uma demonstração direta podemos utilizar o Teorema de Courant-Fischer, como na página 190 de [59].

A Desigualdade de Weyl estabelece uma relação entre o espectro de duas matrizes e o espectro da matriz obtida pela soma.

Lema 2.4. (Desigualdade de Weyl)[59] *Sejam $M, N \in \mathcal{R}_n$ e $1 \leq i, j \leq n$. Então*

$$\theta_i(M) + \theta_j(N) \leq \theta_{i+j-n}(M + N), \text{ se } n + 1 \leq i + j$$

$$\theta_i(M) + \theta_j(N) \geq \theta_{i+j-1}(M + N), \text{ se } n + 1 \geq i + j$$

As desigualdades a seguir são casos especiais da **Desigualdade de Weyl** aplicadas em uma matriz e seu u -complemento.

Lema 2.5. [73] *Dada matriz $M \in \mathcal{R}_n$ e $M' = U - M$, onde $U = uu^T$ e $u \in \mathbb{R}^n$ é um vetor. Sejam $\theta_1 \geq \theta_2 \geq \dots \geq \theta_n$ e $\theta'_1 \geq \theta'_2 \geq \dots \geq \theta'_n$ os autovalores de M e M' , respectivamente. Então*

$$(a) \theta_1 + \theta'_1 \geq \|u\|^2. \quad (b) \theta_i + \theta'_{n-i+2} \leq 0, \text{ para } i = 2, \dots, n.$$

Em seguida, apresentamos uma desigualdade que relaciona a soma e o produto dos autovalores de uma matriz.

Lema 2.6. (Desigualdade das Médias)[66] *Seja $\text{Spec}(M) = \{\theta_1, \dots, \theta_n\}$, com $\theta_i \geq 0$ para $1 \leq i \leq n$. A desigualdade das médias afirma que a média aritmética é maior ou igual à média geométrica. Logo*

$$\frac{\theta_1 + \dots + \theta_n}{n} \geq \sqrt[n]{\theta_1 \cdot \dots \cdot \theta_n}.$$

O próximo lema mostra como relacionar o espectro de uma matriz com sua norma ℓ_2 .

Lema 2.7. [73] *Se $M \in \mathcal{R}_n$ tem autovalores $\theta_1, \dots, \theta_n$, então*

$$\theta_1^2 + \theta_2^2 + \dots + \theta_n^2 = 2(\sigma_2(M))^2.$$

A **Desigualdade de Cauchy-Schwarz** permite relacionar o produto interno com o produto da norma de dois vetores de mesma dimensão.

Lema 2.8. (Desigualdade de Cauchy-Schwarz)[44] *Se x e y são vetores de mesma dimensão e (x, y) é o produto interno entre eles, então*

$$(x, y) \leq \|x\| \|y\|.$$

A igualdade ocorre se x e y são linearmente dependentes.

3 REPRESENTAÇÕES MATRICIAIS

A representação gráfica pode ser útil na compreensão de algumas propriedades dos grafos, mas não é adequada para aplicações computacionais, ou para aplicações de métodos matemáticos que auxiliem na busca de novos resultados. Para tais propósitos é mais vantajoso representar o grafo por meio de uma matriz.

Neste capítulo, vamos mostrar como representar um grafo utilizando a matriz de adjacência A , a matriz Laplaciana L e a matriz Laplaciana sem sinal Q . Além disso, vamos estudar alguns resultados espectrais dessas representações.

Exemplo 3.1. *Considere o grafo da Figura 3.1.*

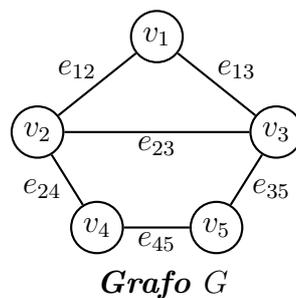


Figura 3.1 Representação gráfica de G .

Ao longo desse capítulo, vamos apresentar diferentes representações matriciais desse grafo. Tais representações são construídas extraindo as informações da estrutura do grafo.

3.1 Matriz de Adjacência

A matriz de adjacência é a matriz de zeros e uns que se constrói naturalmente a partir das relações de adjacência entre os vértices do grafo.

Definição 3.1. A **matriz de adjacência** de um grafo $G = (V, E)$ de ordem n , denotada por $A(G) = [a_{ij}]$, é a matriz cujas linhas e colunas são indexadas pelos vértices de G e tem entradas dadas por

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } e_{ij} \in E, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

$A(G)$ é uma matriz real simétrica formada por zeros e uns.

Seus autovalores (ou espectro) são chamados de **A -autovalores** (ou **A -espectro**) de G . Pelo **Teorema 2.2**, temos que esses autovalores são números reais e, portanto, podem ser organizados em ordem não crescente, e denotados por $\lambda_1(G) \geq \lambda_2(G) \geq \dots \geq \lambda_n(G)$. Quando não houver ambiguidade, denotaremos a matriz de adjacência de um grafo G de ordem n por A , e seus autovalores por $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$.

Exemplo 3.2. *Apresentamos a matriz de adjacência do Grafo G da Figura 3.1.*

$$\begin{array}{ccccc} & v_1 & v_2 & v_3 & v_4 & v_5 \\ \begin{array}{c} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \end{array} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

Observe que essa representação contém apenas as informações das adjacências entre os vértices do grafo.

Note que $A(G)$ tem ordem 5, logo seu polinômio característico tem grau 5. De fato, $p_A(x) = x^5 - 6x^3 - 2x^2 + 4x$.

Os autovalores de $A(G)$ são dados pelas raízes de $p_A(x)$, usando aproximações numéricas temos que $\text{Spec}(A) = \{2.48, 0.69, 0, -1.17, -2\}$. Note que os autovalores de A são números reais, como diz o **Teorema 2.2**.

Utilizando a forma $Av = \lambda_i v$ obtemos os respectivos autovetores associados aos autovalores de $A(G)$, que são dados por

$$\begin{pmatrix} 1.19 \\ 1.48 \\ 1.48 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -0.90 \\ -0.31 \\ -0.31 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3.70 \\ -2.17 \\ -2.17 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

3.1.1 Resultados sobre A -autovalores

Nesta seção, vamos estudar relações envolvendo o espectro da matriz de adjacência e propriedades estruturais dos grafos. Esses resultados serão utilizados no desenvolvimento dos próximos capítulos.

Vamos dar atenção especial para resultados associados com cotas para os A -autovalores. Em 1993, Yuan Hong [58] estabeleceu a questão que incentivou o estudo dessa temática:

Quais são as melhores cotas inferiores e superiores para o k -ésimo maior A -autovalor $\lambda_k(G)$ de um grafo G de ordem n ?

O próximo lema está associado com a questão proposta, mais precisamente, apresentamos uma cota superior para o menor A -autovalor. Observamos que é simples deduzir esse resultado, visto que a soma dos A -autovalores é zero e o maior A -autovalor é sempre positivo.

Lema 3.1. *Seja G um grafo conexo de ordem n . Então $\lambda_n \leq 0$.*

O próximo lema trata de uma extensão natural da questão proposta. Nikiforov e Yuan [78] estudaram cotas para $|\lambda_n(G)| + |\lambda_n(G^c)|$.

Lema 3.2. [78] *Seja G um grafo de ordem $n \geq 4$. Então*

$$|\lambda_n(G)| + |\lambda_n(G^c)| \leq \frac{\sqrt{2n}}{2} + 1.$$

3.2 Matriz Laplaciana

A matriz Laplaciana apresenta informações sobre os graus dos vértices do grafo e de suas adjacências.

Definição 3.2. *A **matriz Laplaciana** de um grafo $G = (V, E)$ de ordem n , denotada por $L(G) = [l_{ij}]$, é a matriz cujas linhas e colunas são indexadas pelos vértices de G e tem entradas dadas por*

$$l_{ij} = \begin{cases} d(v_i), & \text{se } i = j, \\ -1, & \text{se } e_{ij} \in E, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

$L(G)$ é uma matriz real simétrica de ordem n , e está relacionada com a matriz de adjacência por meio da expressão $L(G) = D(G) - A(G)$, onde $D(G)$ é a matriz diagonal que possui a sequência dos graus de G em sua diagonal principal, chamada de **matriz diagonal dos graus de G** .

Seus autovalores (ou espectro) são chamados de **L -autovalores** (ou **L -espectro**) de G . Pelo **Teorema 2.3**, temos que $L(G)$ é uma matriz positiva semidefinida, logo seus autovalores são números reais não negativos e, portanto, podem ser organizados em ordem não crescente, e denotados por $\mu_1(G) \geq \mu_2(G) \geq \dots \geq \mu_n(G) = 0$. Quando não houver ambiguidade, denotaremos a matriz Laplaciana de um grafo G de ordem n por L , e seus autovalores por $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n$.

Para todo grafo a soma dos elementos de cada linha da matriz Laplaciana é 0. Como os L -autovalores são não negativos, sempre temos que o menor L -autovalor é 0 associado ao autovetor $(1, \dots, 1)^T$.

Exemplo 3.3. *Apresentamos a matriz Laplaciana do **Grafo G** da **Figura 3.1**.*

$$\begin{array}{ccccc} & v_1 & v_2 & v_3 & v_4 & v_5 \\ \begin{array}{c} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \end{array} & \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 2 \end{pmatrix} \end{array}$$

Observe que essa representação matricial indica as relações de adjacência entre os vértices, e também informa o grau de cada vértice.

Note que $L(G)$ tem ordem 5, logo seu polinômio característico tem grau 5. De fato, $p_L(x) = x^5 - 12x^4 + 51x^3 - 90x^2 + 55x$.

Como os autovalores de $L(G)$ são dados pelas raízes de $p_L(x)$, usamos aproximações numéricas e obtemos que $\text{Spec}(L) = \{4.62, 3.62, 2.38, 1.38, 0\}$.

Utilizando a forma $Lv = \mu_i v$ obtemos os respectivos autovetores associados aos autovalores de $L(G)$, que são dados por

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1.62 \\ -1.62 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3.24 \\ -2.62 \\ -2.62 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -0.62 \\ 0.62 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1.24 \\ -0.38 \\ -0.38 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

3.2.1 Resultados sobre L-autovalores

Vamos estudar relações envolvendo o espectro da matriz Laplaciana e propriedades estruturais dos grafos. Esses resultados serão utilizados no desenvolvimento dos próximos capítulos.

A investigação do valor máximo e mínimo de cada L -autovalor é uma extensão natural do problema de Hong que vem sendo abordada por diversos pesquisadores. No próximo resultado, apresentamos cotas superiores para o maior L -autovalor.

Lema 3.3. [2, 29] *Seja G um grafo de ordem n . Então $\mu_1(G) \leq n$, com igualdade se, e somente se, G^c é desconexo. Além disso, se G é um grafo não vazio, temos*

$$\mu_1(G) \leq \max_{e_{ij} \in E(G)} \{d_i + d_j - |N_{v_i} \cap N_{v_j}|\} \leq n.$$

A classe das árvores double brooms possui uma cota superior para μ_{n-1} .

Lema 3.4. [49] *Seja $G \in T(s, t)$, então $L(G)$ possui apenas um autovalor positivo menor do que 1, que é $\mu_{n-1}(G)$. Além disso, esse autovalor se comporta como uma função estritamente decrescente de $s \leq t$, com $1 \leq s \leq \frac{n-2}{2}$.*

Seja $G \in G(n, d)$ e considere $\mu_{i_{max}}(G)$ o valor máximo que o i -ésimo maior L -autovalor assume entre todos os grafos $G \in G(n, d)$, para $1 \leq i \leq n-1$. O próximo resultado estabelece que $\mu_{i_{max}}(G)$ não cresce quando o diâmetro d aumenta.

Lema 3.5. [92] *Sejam $G \in G(n, d)$ e $H \in G(n, d + 1)$. Então*

$$\mu_{i_{max}}(H) \leq \mu_{i_{max}}(G) \text{ para } 1 \leq i \leq n - 1.$$

Em seguida, apresentamos uma série de lemas que caracterizam os grafos que possuem poucos L -autovalores distintos.

Lema 3.6. [30, 101] *Seja G um grafo conexo de ordem $n \geq 2$. Então $\mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_{n-1}$ se, e somente se, $G = K_n$.*

Lema 3.7. [95] *Seja G um grafo conexo de ordem $n \geq 3$. Então $\mu_1 = \mu_2 = \dots > \mu_{n-1}$ se, e somente se, $G = K_n - e$, onde e é uma aresta qualquer.*

Lema 3.8. [95, 30] *Seja G um grafo conexo de ordem $n \geq 3$. Então $\mu_1 > \mu_2 = \dots = \mu_{n-1}$ se, e somente se, $G = S_n$ ou $K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}}$.*

Lema 3.9. [18, 72] *Seja G um grafo conexo de ordem $n \geq 5$. Então $\mu_1 > \mu_2 = \dots > \mu_{n-1}$ se, e somente se, $G = K_{n-1} + e$, $K_1 \vee 2K_{\frac{n-1}{2}}$, $\frac{n}{3}K_1 \vee 2K_{\frac{n}{3}}$ ou $\mathcal{G}(r, \frac{n}{2} - r)$, para $1 \leq r < \frac{n}{2}$.*

A seguir, recordamos que o L -espectro e o A -espectro da classe dos grafos regulares estão relacionados.

Lema 3.10. [1] *Seja G um grafo k -regular de ordem n , então $\mu_i(G) = k - \lambda(G)_{n-i}$, para $i = 1, \dots, n - 1$.*

O próximo lema afirma que os L -autovalores de G e G^c estão relacionados.

Lema 3.11. [20, 74] *Seja G um grafo de ordem n , então $\mu_i(G^c) = n - \mu_{n-i}(G)$, para $1 \leq i \leq n - 1$, e $\mu_n(G^c) = 0$. Consequentemente, temos que*

$$\text{Spec}(L(G^c)) = \{n - \mu_{n-1}(G), n - \mu_{n-2}(G), \dots, n - \mu_1(G), 0\}.$$

Pelo **Lema 3.11**, temos que $\mu_1(G) + \mu_1(G^c) = n + \mu_1(G) - \mu_{n-1}(G) = n + \mu_1(G^c) - \mu_{n-1}(G^c)$. No próximo lema, apresentamos cotas para essas expressões.

Lema 3.12. [99] *Seja G um grafo de ordem n com $d(G) \neq 3$. Então, as seguintes desigualdades são equivalentes:*

$$\begin{array}{ll} \text{(1)} \mu_1(G) + \mu_1(G^c) \leq 2n - 1 & \text{(3)} \mu_1(G^c) - \mu_{n-1}(G^c) \leq n - 1 \\ \text{(2)} \mu_1(G) - \mu_{n-1}(G) \leq n - 1 & \text{(4)} \mu_{n-1}(G) + \mu_{n-1}(G^c) \geq 1 \end{array}$$

Além disso, se $d(G) = 2$, a igualdade ocorre se, e somente se, $G = K_1 \vee H$, onde H é um grafo desconexo de ordem $n - 1$.

Podemos relacionar os L -autovalores de dois ou mais grafos por meio das operações de união disjunta e de junção.

Lema 3.13. [74, 71] *Sejam G e H grafos de ordem n_G e n_H , respectivamente. Então*

$$\begin{aligned} \text{Spec}(L(G \cup H)) &= \{\mu_1(G), \dots, \mu_{n_G-1}(G), \mu_1(H), \dots, \mu_{n_H-1}(H), 0, 0\} \\ &= \text{Spec}(L(G)) \cup \text{Spec}(L(H)); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Spec}(L(G \vee H)) &= \{n_G + n_H, \mu_1(G) + n_H, \dots, \mu_{n_G-1}(G) + n_H, \\ &\quad \mu_1(H) + n_G, \dots, \mu_{n_H-1}(H) + n_G, 0\}. \end{aligned}$$

Além disso, considere os grafos G_1, \dots, G_n . Então

$$\text{Spec}\left(L\left(\bigcup_{i=1}^n G_i\right)\right) = \bigcup_{i=1}^n \text{Spec}(L(G_i)).$$

O próximo resultado apresenta uma relação de entrelaçamento entre o L -espectro de um grafo G e o do obtido pela deleção de uma aresta.

Lema 3.14. [91] *Sejam G um grafo de ordem n e $G - e$ o grafo obtido pela deleção da aresta $e \in E(G)$. Então os L -espectros de G e de $G - e$ se entrelaçam, ou seja,*

$$\mu_1(G) \geq \mu_1(G - e) \geq \mu_2(G) \geq \mu_2(G - e) \geq \dots \geq \mu_n(G) \geq \mu_n(G - e).$$

Por fim, listamos o L -espectro de algumas classes de grafos que serão constantemente utilizadas ao longo desse trabalho.

Lema 3.15.

- | | |
|---|--|
| (1) $\text{Spec}(L(nK_1)) = \{0^n\}$. | (4) $\text{Spec}(L(K_{r,s})) = \{r+s, r^{s-1}, s^{r-1}, 0\}$. |
| (2) $\text{Spec}(L(K_n)) = \{n^{n-1}, 0\}$. | (5) $\text{Spec}(L(P_2)) = \{2, 0\}$. |
| (3) $\text{Spec}(L(S_n)) = \{n, 1^{n-2}, 0\}$. | (6) $\text{Spec}(L(P_4)) = \{3.42, 2, 0.58, 0\}$. |

3.3 Matriz Laplaciana sem Sinal

A matriz Laplaciana sem sinal só despertou o interesse dos pesquisadores mais recentemente [21, 23, 55, 24, 25, 26]. Essa representação traz as mesmas informações da matriz Laplaciana, mas com outra identificação para a adjacência entre vértices.

Definição 3.3. A *matriz Laplaciana sem sinal* de um grafo $G = (V, E)$ de ordem n , denotada por $Q(G) = [q_{ij}]$, é a matriz cujas linhas e colunas são indexadas pelos vértices de G e tem entradas dadas por

$$q_{ij} = \begin{cases} d(v_i), & \text{se } i = j, \\ 1, & \text{se } e_{ij} \in E, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

$Q(G)$ é uma matriz real simétrica de ordem n e está relacionada com a matriz de adjacência por meio da expressão $Q(G) = D(G) + A(G)$.

Seus autovalores (ou espectro) são chamados de **Q -autovalores** (ou **Q -espectro**) de G . Pelo **Teorema 2.3**, temos que $Q(G)$ é uma matriz positiva semidefinida, logo seus autovalores são números reais não negativos e, portanto, podem ser organizados em ordem não crescente, e denotados por $q_1(G) \geq q_2(G) \geq \dots \geq q_n(G)$. Quando não houver ambiguidade, denotaremos a matriz Laplaciana sem sinal de um grafo G de ordem n por Q , e seus autovalores por $q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$.

O maior, o segundo maior e o menor Q -autovalores têm despertado o interesse dos pesquisadores como pode ser visto pelas conjecturas propostas em [22].

Exemplo 3.4. Apresentamos a matriz Laplaciana sem sinal do **Grafo G** da **Figura 3.1**.

$$\begin{array}{ccccc}
& v_1 & v_2 & v_3 & v_4 & v_5 \\
v_1 & \left(\begin{array}{c} 2 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right. & \left(\begin{array}{c} 1 \\ 3 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right. & \left(\begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 3 \\ 0 \\ 1 \end{array} \right. & \left(\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 2 \\ 1 \end{array} \right. & \left. \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 2 \end{array} \right)
\end{array}$$

Observe que essa representação matricial fornece, praticamente, as mesmas informações que a matriz Laplaciana.

Note que $Q(G)$ tem ordem 5, logo seu polinômio característico tem grau 5. De fato, $p_Q(x) = x^5 - 12x^4 + 51x^3 - 94x^2 + 71x - 16$.

Como os autovalores de $Q(G)$ são dados pelas raízes de $p_Q(x)$, usamos aproximações numéricas e obtemos que $\text{Spec}(Q) = \{5.11, 2.75, 2.62, 1.14, 0.38\}$.

Utilizando a forma $Qv = q_i v$ obtemos os respectivos autovetores associados aos autovalores de $Q(G)$, que são dados por

$$\begin{pmatrix} 1.36 \\ 2.11 \\ 2.11 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -0.68 \\ -0.25 \\ -0.25 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1.13 \\ -1.62 \\ 1.62 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 4.32 \\ -1.86 \\ -1.86 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -2.40 \\ 0.62 \\ -0.62 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

3.3.1 Resultados sobre Q-autovalores

Vamos estudar relações envolvendo o espectro da matriz Laplaciana sem sinal e propriedades estruturais dos grafos. Esses resultados serão utilizados no desenvolvimento dos próximos capítulos.

Vamos dar atenção para resultados sobre cotas para Q -autovalores, com ênfase para q_2 e q_n . Primeiramente, apresentamos uma cota superior para o maior Q -autovalor. Esse resultado pode ser deduzido do fato que $q_1(K_n) = 2n - 2$.

Lema 3.16. *Seja G um grafo de ordem n . Então $q_1(G) \leq 2n - 2$.*

Os artigos de K. Das [31, 32], e de L. Lima e V. Nikiforov [37] são referências essenciais para o estudo de q_2 . A seguir, apresentamos algumas cotas para esse parâmetro.

Lema 3.17. [31] *Seja G um grafo de ordem n . Então $q_2 \geq d_2 - 1$.*

Lema 3.18. [31] *Seja G um grafo de ordem n . Então $q_2 \leq n - 2$.*

Lema 3.19. [31] *Seja G um grafo de ordem n . Se $d_2 = n - 1$, então $q_2 = n - 2$.*

A seguir, vamos apresentar cotas para q_n . Esses resultados são baseados nos trabalhos de K. Das [31] e L. Lima et al. [38].

Lema 3.20. [31] *Seja G um grafo conexo de ordem n . Então $q_n(G) < d_n$.*

Lema 3.21. [38] *Seja G um grafo de ordem n e $d_n > 0$. Então*

$$q_n(G) \leq \frac{d_n + n - 1 - \sqrt{(n - 1 - d_n)^2 + 4}}{2} < d_n.$$

Lema 3.22. [31] *Seja G um grafo conexo r -regular. Então $q_n(G) \leq r - 1$.*

Destacamos que o estudo do menor Q -autovalor esta intimamente ligado ao estudo dos grafos bipartidos. Para explicar isso, mostramos um resultado que relaciona o Q -espectro, o L -espectro e os grafos bipartidos.

Lema 3.23. [1] *Se G é um grafo bipartido, então $\text{Spec}(Q(G)) = \text{Spec}(L(G))$.*

Sabemos que, para todo grafo G , temos $\mu_n(G) = 0$. Se G é bipartido, então $q_n(G) = \mu_n(G) = 0$, pelo **Lema 3.23**. Por meio dessa observação é possível caracterizar os grafos com $q_n = 0$.

Lema 3.24. [22] *Seja G um grafo conexo de ordem n . Temos que $q_n(G) = 0$ se, e somente se, G é um grafo bipartido. Nesse caso, temos que 0 tem multiplicidade 1. Para qualquer grafo G , temos que a multiplicidade de 0 como autovalor de $Q(G)$ é igual ao número de componentes conexas bipartidas de G .*

De acordo com o lema acima, para investigar o valor mínimo que o menor Q -autovalor pode assumir resta considerar os grafos não bipartidos. Esse problema foi originalmente proposto por D. Cvetković et al. [22], e atraiu o interesse de muitos pesquisadores, veja [42, 67, 41, 50, 102]. A solução dessa questão foi obtida por D. Cardoso et al., em [16], e utiliza a operação de rotação de aresta, juntamente com o próximo lema.

Lema 3.25. [22] *Sejam $r, s, t \in V(G)$ tal que $e_{rs} \in E(G)$ e $e_{rt} \notin E(G)$. Seja G' o grafo obtido de G substituindo a aresta e_{rs} pela aresta e_{rt} , ou seja, $E(G') = (E(G) - \{e_{rs}\}) \cup \{e_{rt}\}$, e seja $x = \{x_1, \dots, x_n\}$ o autovetor de $Q(G)$ associado ao autovalor $q_n(G)$. Se $(x_t - x_s)(2x_r + x_s + x_t) \leq 0$, então $q_n(G') \leq q_n(G)$, com igualdade se, e somente se, $x_r = -x_s = -x_t$.*

Os autores mostram que, dado um grafo unicíclico e não bipartido G , sempre é possível obter um grafo unicíclico e não bipartido G' , com $q_n(G) \geq q_n(G')$, rotacionando uma aresta. Por meio de sucessivas aplicações dessa operação é possível transformar G no grafo que resolve o problema, denotado por \widehat{G} .

O próximo lema é obtido durante a transformação de G e caracteriza grafos com valores baixos de q_n .

Lema 3.26. [22]

- (1) *A circunferência de \widehat{G} é 3.*
- (2) *Dois dos vértices do ciclo $C_3 \subseteq \widehat{G}$ possuem grau 2.*

Este lema garante que sempre é possível transformar um grafo G em um grafo G' com essas características, e com $q_n(G) \geq q_n(G')$.

Podemos relacionar os Q -autovalores de dois ou mais grafos por meio da operação de união disjunta.

Lema 3.27. [1] *Sejam G e H grafos de ordem n_G e n_H , respectivamente. Então*

$$\begin{aligned} \text{Spec}(Q(G \cup H)) &= \{q_1(G), \dots, q_{n_G-1}(G), q_1(H), \dots, q_{n_H-1}(H), 0, 0\} \\ &= \text{Spec}(Q(G)) \cup \text{Spec}(Q(H)) \end{aligned}$$

Além disso, considere os grafos G_1, \dots, G_n . Então

$$\text{Spec} \left(Q \left(\bigcup_{i=1}^n G_i \right) \right) = \bigcup_{i=1}^n \text{Spec}(Q(G_i)).$$

Em seguida, mostramos como o Q -espectro de um grafo pode ser relacionado com o de seu complemento.

Lema 3.28. [57] *Seja G um grafo de ordem n . Então o Q -espectro de G e de G^c estão relacionados da seguinte forma*

$$q_i(G^c) \leq n - 2 - q_{n+2-i}(G), \text{ para } 2 \leq i \leq n.$$

Demonstração. Observe que $Q(G) + Q(G^c) = Q(K_n)$. Usando o **Lema 2.4 (Desigualdade de Weyl)** com $j = n + 2 - i$ obtemos o resultado. \square

Utilizando o conceito de coronal, é possível caracterizar o polinômio característico da junção de dois grafos, como mostra o próximo resultado.

Lema 3.29. [68] *Sejam G_1 e G_2 grafos de ordem n_1 e n_2 , respectivamente. Então*

$$p_{Q(G_1 \vee G_2)}(x) = p_{Q(G_1)}(x - n_2) \cdot p_{Q(G_2)}(x - n_1) \cdot (1 - \Gamma_{Q(G_1)}(x - n_2) \cdot \Gamma_{Q(G_2)}(x - n_1)).$$

O próximo resultado apresenta uma relação de entrelaçamento entre o Q -espectro de um grafo G e o do obtido pela deleção de uma aresta.

Lema 3.30. [91] *Sejam G um grafo de ordem n , e $G - e$ o grafo obtido pela deleção da aresta $e \in E(G)$. Então os Q -espectros de G e de $G - e$ se entrelaçam, ou seja,*

$$q_1(G) \geq q_1(G - e) \geq q_2(G) \geq q_2(G - e) \geq \dots \geq q_n(G) \geq q_n(G - e).$$

Destacamos que esse resultado pode ser aplicado para operação de adição de arestas, basta observar que G é obtido pela adição da aresta e no grafo $G - e$.

A seguir, apresentamos o Q -espectro dos grafos threshold.

Lema 3.31. [22, 46] *Seja G um grafo threshold de ordem n representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r}$. Então $p_i - b_i$ é um Q -autovalor de G com multiplicidade $a_i - 1$, para $1 \leq i \leq r$. Os r Q -autovalores restantes são os mesmos da seguinte matriz Laplaciana sem sinal condensada de ordem $r \times r$:*

$$C(G) = \begin{pmatrix} p_1 + b_1(a_1 - 1) & b_2\sqrt{a_1a_2} & b_3\sqrt{a_1a_3} & \dots & b_r\sqrt{a_1a_r} \\ b_2\sqrt{a_1a_2} & p_2 + b_2(a_2 - 1) & b_3\sqrt{a_2a_3} & \dots & b_r\sqrt{a_2a_r} \\ b_3\sqrt{a_1a_3} & b_3\sqrt{a_2a_3} & p_3 + b_3(a_3 - 1) & \dots & b_r\sqrt{a_3a_r} \\ \vdots & & & & \vdots \\ b_r\sqrt{a_1a_r} & b_r\sqrt{a_2a_r} & b_r\sqrt{a_3a_r} & \dots & p_r + b_r(a_r - 1) \end{pmatrix}$$

O próximo resultado investiga o comportamento dos Q -autovalores de um grafo threshold quando é adicionado o número 1 ao final da sequência binária.

Lema 3.32. [57] *Se G é o grafo threshold de ordem n representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r}$ e G' o grafo threshold representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r} 1$. Então*

$$q_i(G') \geq q_i(G) + 1 \geq q_{i+1}(G'), \text{ para } 1 \leq i \leq n.$$

Além disso, $q_1(G') \geq \max\{n + 1, q_1(G) + 2\}$.

Por fim, apresentamos um resultado de entrelaçamento para os Q -autovalores de um grafo threshold.

Lema 3.33. [57] *Seja G um grafo threshold de ordem n representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r}$. Sejam $\underline{r} = \frac{r-b_r-b_1+1}{2}$, $\underline{n}_k = \sum_{j=1}^k a_{r-b_r+2-2j}$, para $1 \leq k \leq \underline{r}$, e $\underline{n}_k = \underline{n}_{\underline{r}} + \sum_{j=1}^{k-\underline{r}} a_{2-b_1+2j-2}$, para $\underline{r} + 1 \leq k \leq r$. Então os Q -autovalores de G satisfazem*

$$\begin{aligned} q_1(G) &\geq p_{r-(1-b_r)} - 1 = q_2(G) = \dots = q_{a_{r-b_r}}(G) \geq \\ q_{\underline{n}_1+1}(G) &\geq p_{r-2-(1-b_r)} - 1 = q_{\underline{n}_1+2}(G) = \dots = q_{\underline{n}_1+a_{r-b_r-2}}(G) \geq \\ &\vdots \\ q_{\underline{n}_{\underline{r}-1}+1}(G) &\geq p_{2-b_1} - 1 = q_{\underline{n}_{\underline{r}-1}+2}(G) = \dots = q_{\underline{n}_{\underline{r}-1}+a_1+b_1}(G) \geq p_{1+b_1} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
p_{1+b_1} &= q_{\underline{n}_x+1}(G) = \cdots = q_{\underline{n}_x+a_2-b_1-1}(G) \geq q_{\underline{n}_x+a_2-b_1}(G) \\
p_{1+b_1+2} &= q_{\underline{n}_x+1+1}(G) = \cdots = q_{\underline{n}_x+1+a_2-b_1+2-1}(G) \geq q_{\underline{n}_x+1+a_2-b_1+2}(G) \\
&\vdots \\
p_{r-b_r} &= q_{\underline{n}_{r-1}+1}(G) = \cdots = q_{\underline{n}_{r-1}+a_{r-(1-b_r)}-1}(G) \geq q_{\underline{n}_{r-1}+a_{r-(1-b_r)}}(G) \geq 0.
\end{aligned}$$

Em seguida, listamos o Q -espectro de algumas classes de grafos constantemente utilizadas ao longo desse trabalho.

Lema 3.34.

- (1) $Spec(Q(nK_1)) = \{0^n\}$. (4) $Spec(Q(K_{r,s})) = \{r+s, r^{s-1}, s^{r-1}, 0\}$.
(2) $Spec(Q(K_n)) = \{2n-2, (n-2)^{n-1}\}$. (5) $Spec(Q(P_2)) = \{2, 0\}$.
(3) $Spec(Q(S_n)) = \{n, 1^{n-2}, 0\}$. (6) $Spec(Q(P_4)) = \{3.42, 2, 0.58, 0\}$.

Ao longo desse trabalho, vamos utilizar as representações matriciais vistas no tratamento de grafos como elementos algébricos, visando aplicar recursos da teoria matricial para analisar as propriedades das matrizes associadas e, conseqüentemente, investigar invariantes dos grafos.

4 O PROBLEMA NORDHAUS-GADDUM

Em 1956, E. Nordhaus e J. Gaddum [80] apresentaram as seguintes cotas inferiores e superiores para a soma, e para o produto, do número cromático de um grafo, denotado por $\chi(G)$, com o de seu complementar, em termos da ordem do grafo:

$$2\sqrt{n} \leq \chi(G) + \chi(G^c) \leq n + 1 \qquad n \leq \chi(G)\chi(G^c) \leq \left(\frac{n+1}{2}\right)^2$$

Desde então, qualquer cota para a soma, e/ou para o produto, de um invariante de um grafo G com o de seu complementar é dita **desigualdade do tipo Nordhaus-Gaddum**. Denotando esse invariante por ρ , temos que essas desigualdades apresentam a seguinte forma

$$l_+(G) \leq \rho(G) + \rho(G^c) \leq U_+(G) \qquad l_\times(G) \leq \rho(G)\rho(G^c) \leq U_\times(G),$$

onde $l_+(G)$, $l_\times(G)$, $U_+(G)$ e $U_\times(G)$ são funções das invariantes do grafo G .

O **problema de Nordhaus-Gaddum** consiste em encontrar essas cotas. Na literatura, muitas desigualdades do tipo Nordhaus-Gaddum envolvem os autovalores da matriz de adjacência, da matriz Laplaciana e da matriz Laplaciana sem sinal. Vamos estudar esse problema para os autovalores μ_1 , μ_2 , q_2 e q_n .

Geralmente essas desigualdades são elegantes, visto que dependem apenas da ordem do grafo, e revelam valores extremos de um invariante do grafo e de seu complemento. Por outro lado, é difícil obter esse tipo de resultado.

Em 2007, V. Nikiforov [75] propôs o estudo das desigualdades do tipo Nordhaus-Gaddum para todos os autovalores de um grafo, e em [77] introduziu a função

$$\max_{|V(G)|=n} \lambda_i(G) + \lambda_i(G^c), \text{ para } i = 1, \dots, n.$$

O primeiro resultado do problema de Nordhaus-Gaddum, para $i = 1$, foi apresentado por E. Nosal [81], e por A. Amim e S. Hakimi [3], onde mostram que, para todo grafo G de ordem n , temos que

$$\lambda_1(G) + \lambda_1(G^c) \leq \sqrt{2}(n-1).$$

Inspirado pela conjectura proposta por P. Csivárik [19], T. Terpai [89] mostrou a seguinte cota superior:

$$\lambda_1(G) + \lambda_1(G^c) \leq \frac{4}{3}n - 1.$$

V. Nikiforov e X. Yuan [78] estudaram o problema para $i = 2$, obtendo o seguinte resultado:

$$\lambda_2(G) + \lambda_2(G^c) \leq -1 + \frac{n}{\sqrt{2}}.$$

M. Aouchiche e P. Hansen [4] apresentaram conjecturas para desigualdades do tipo Nordhaus-Gaddum do maior Q -autovalor

$$q_1(G) + q_1(G^c) \leq 3n - 4 \quad \text{e} \quad q_1(G)q_1(G^c) \leq 2n(n - 2).$$

F. Ashraf e B. Tayfeh-Rezaie [8] investigaram a conjectura, demonstrando que a primeira é válida, mas que a segunda é falsa.

Em 2013, M. Aouchiche e P. Hansen [4] organizaram as desigualdades do tipo Nordhaus-Gaddum para diversos parâmetros de um grafo em um único artigo. Esse trabalho constitui uma referência fundamental para o estudo desse problema.

Na próxima seção, apresentamos uma solução parcial do problema de Nordhaus-Gaddum para o maior L -autovalor. Em seguida, lidamos com o mesmo para μ_2 . Esses estudos foram realizados em parceria com Rodrigo Grijó (Departamento de Engenharia de Produção, CEFET/RJ), Leonardo de Lima (Departamento de Engenharia de Produção, CEFET/RJ) e Carla Oliveira (Departamento de Matemática, ENCE), e foram publicados em [48].

Por fim, tratamos do problema de Nordhaus-Gaddum para q_2 , apresentado em um artigo já submetido [84], e para q_n (artigo em desenvolvimento [85]).

4.1 O Problema de Nordhaus-Gaddum para μ_1

Nesta seção, estudamos o problema Nordhaus-Gaddum para a soma e produto do maior L -autovalor. A maioria dos trabalhos que tratam desse problema

foram motivados pela conjectura proposta por M. Zhai et al. [99], que apareceu como questão em [95].

Conjectura 4.1. *Seja G um grafo de ordem n . Então $\mu_1(G) + \mu_1(G^c) \leq 2n - 1$. A igualdade ocorre se, e somente se, G , ou G^c , é isomorfo à junção de K_1 com um grafo desconexo de ordem $n - 1$.*

Além disso, Ashraf e Tayfeh-Rezaie [8] apresentam uma conjectura para a desigualdade associada com o produto.

Conjectura 4.2. *Seja G um grafo de ordem n . Então $\mu_1(G)\mu_1(G^c) \leq n(n - 1)$. A igualdade ocorre se, e somente se, G ou G^c , é isomorfo à junção de K_1 com um grafo desconexo de ordem $n - 1$.*

Em 2006, Chen e Das [18] provaram que a **Conjectura 4.1** é verdadeira quando $d_1 - d_n \leq \sqrt{n - 3 + \frac{2}{n}}$. No próximo teorema, vamos melhorar esse resultado, mais precisamente, vamos inserir uma hipótese que faz o resultado ser válido para uma quantidade maior de grafos do que na hipótese de Chen e Das [18].

Teorema 4.1. *Seja G um grafo de ordem $n \geq 4$ e $d_1 - d_n \leq \left(\frac{2-\sqrt{2}}{2}\right)n - 1$. Então,*

$$\mu_1(G) + \mu_1(G^c) \leq 2n - 1.$$

Demonstração. Aplicando o **Lema 2.4 (Desigualdade de Weyl)** para $L(G)$ e $L(G^c)$, obtemos

$$\begin{aligned}\mu_1(G) &\leq d_1(G) + \theta_1(-A(G)) = d_1(G) - \lambda_n(G), \\ \mu_1(G^c) &\leq d_1(G^c) + \theta_1(-A(G^c)) = d_1(G^c) - \lambda_n(G^c).\end{aligned}$$

Pelo **Lema 3.1**, sabemos que $\lambda_n(G) < 0$ para todos os grafos, e temos

$$\mu_1(G) + \mu_1(G^c) \leq n - 1 + (d_1 - d_n) + |\lambda_n(G)| + |\lambda_n(G^c)|. \quad (4.1)$$

Aplicando o **Lema 3.2** na desigualdade (4.1), temos que

$$\mu_1(G) + \mu_1(G^c) \leq n - 1 + (d_1 - d_n) + \frac{n}{\sqrt{2}} + 1 = \left(\frac{2 + \sqrt{2}}{2} \right) n + (d_1 - d_n).$$

Pela hipótese $d_1 - d_n \leq \left(\frac{2 - \sqrt{2}}{2} \right) n - 1$, concluímos que

$$\mu_1(G) + \mu_1(G^c) \leq \left(\frac{2 + \sqrt{2}}{2} \right) n + (d_1 - d_n) \leq 2n - 1,$$

e o resultado segue. \square

Se G é regular temos que $d_1 - d_n = 0$, e segue pelo **Teorema 4.1** que $\mu_1(G) + \mu_1(G^c) \leq 2n - 1$, como observado por Chen e Das [18]. Em seguida, mostramos que a **Conjectura 4.2** é válida para grafos regulares.

Teorema 4.2. *Seja G um grafo regular de ordem n . Então, $\mu_1(G)\mu_1(G^c) \leq n(n-1)$.*

Demonstração. Se G é um grafo regular de ordem $n \leq 3$, é fácil verificar todos os casos para garantir que o resultado segue.

Se $n \geq 4$, usamos o **Teorema 4.1** e obtemos que

$$\mu_1(G) + \mu_1(G^c) \leq n - 1 + \frac{\sqrt{2}}{2}n + 1 = \left(\frac{2 + \sqrt{2}}{2} \right) n. \quad (4.2)$$

Pelo **Lema 2.6 (Desigualdade das Médias)**, sabemos que

$$\mu_1(G)\mu_1(G^c) \leq \left(\frac{\mu_1(G) + \mu_1(G^c)}{2} \right)^2. \quad (4.3)$$

Por (4.2) e (4.3), temos que

$$\mu_1(G)\mu_1(G^c) \leq \left(\frac{2 + \sqrt{2}}{4} \right)^2 n^2 = \left(\frac{3 + 2\sqrt{2}}{8} \right) n^2.$$

Observe que $\left(\frac{3 + 2\sqrt{2}}{8} \right) n^2 \leq n(n - 1)$, quando $n \geq 4$, e assim concluímos o resultado. \square

4.2 O Problema de Nordhaus-Gaddum para μ_2

Nesta seção, estudamos o problema de Nordhaus-Gaddum para a soma do segundo maior L -autovalor.

No próximo teorema, apresentamos uma cota inferior da desigualdade de Nordhaus-Gaddum para $\mu_2(G) + \mu_2(G^c)$, e caracterizamos os grafos que satisfazem a igualdade, demonstrando que esse é o melhor resultado possível.

Teorema 4.3. *Seja G um grafo de ordem $n \geq 2$. Então, $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \geq n$.*

A igualdade ocorre se, e somente se, G ou G^c são iguais a um dos seguintes grafos: K_n , $K_n - e$, S_n , $K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}}$, $K_{n-1} + e$, $K_1 \vee 2K_{\frac{n-1}{2}}$, $\frac{n}{3}K_1 \vee 2K_{\frac{n}{3}}$ ou $\mathcal{G}(r, \frac{n}{2} - r)$, para $1 \leq r < \frac{n}{2}$.

Demonstração. Para $2 \leq n \leq 3$ é fácil ver que $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \geq n$, e a igualdade ocorre se $G = K_n$.

Suponha que $n \geq 4$. Usando o **Lema 2.4 (Desigualdade de Weyl)** com $i = j = 2$ temos

$$\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \geq \mu_3(K_n) = n.$$

Sabemos que G e G^c não podem ser ambos desconexos, então vamos assumir, sem perda de generalidade, que G é conexo.

Suponha que $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) = n$. Pelo **Lema 3.11**, obtemos que $\mu_2(G^c) = n - \mu_{n-2}(G)$, logo temos $\mu_2(G) = \mu_{n-2}(G)$. Sendo assim, precisamos considerar apenas os grafos com no máximo 4 L -autovalores distintos.

- (1) Seja $\mu_1(G) = \mu_2(G)$ e $\mu_{n-2}(G) = \mu_{n-1}(G) > 0$. Pelo **Lema 3.6**, temos que $G = K_n$.
- (2) Seja $\mu_1(G) = \mu_2(G)$ e $\mu_{n-2}(G) > \mu_{n-1}(G) > 0$. Pelo **Lema 3.7**, temos que $G = K_n - e$.
- (3) Seja $\mu_1(G) > \mu_2(G)$ e $\mu_{n-2}(G) = \mu_{n-1}(G) > 0$. Pelo **Lema 3.8**, temos que G é

um dos seguintes grafos: K_n , S_n ou $K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}}$.

(4) Seja $\mu_1(G) > \mu_2(G)$ e $\mu_{n-2}(G) > \mu_{n-1}(G) > 0$. Pelo **Lema 3.9**, temos que G é um dos seguintes grafos: $K_{n-1} + e$, $K_1 \vee 2K_{\frac{n-1}{2}}$, $\frac{n}{3}K_1 \vee 2K_{\frac{n}{3}}$ ou $\mathcal{G}(r, \frac{n}{2} - r)$, para $1 \leq r < \frac{n}{2}$.

Assim concluimos o resultado. \square

Em seguida, estudamos a cota superior da desigualdade de Nordhaus-Gaddum para $\mu_2(G) + \mu_2(G^c)$.

Primeiramente, tratamos do caso trivial dessa desigualdade. Pelo **Lema 3.14**, temos que $\mu_2(G) \leq \mu_2(K_n) = n$, e concluimos que $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n$. No próximo teorema, apresentamos uma melhoria para essa cota.

Teorema 4.4. *Seja G um grafo de ordem $n \geq 3$. Então, $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 1$.*

Demonstração. Suponha que $d(G) \neq 3$. Pelo **Lema 3.12**, temos que $\mu_{n-1}(G) + \mu_{n-1}(G^c) \geq 1$. Assim obtemos

$$\mu_2(G) + \mu_2(G^c) = n - \mu_{n-2}(G) + n - \mu_{n-2}(G^c) \leq 2n - (\mu_{n-1}(G) + \mu_{n-1}(G^c)) \leq 2n - 1.$$

Suponha que $d(G) = 3$, ou seja, $G \in G(n, 3)$. Pelo **Lema 2.3**, existe um grafo $H \in G_3(1, n_2, n_3, 1)$ com $n = 2 + n_2 + n_3$, tal que $G \subseteq H$. Pelo **Lema 3.14**, temos que $\mu_2(G) \leq \mu_2(H)$.

Note que $H^c = T(n_2, n_3)$. O **Lema 3.4** garante que $\mu_{n-1}(T(n_2, n_3))$ é o único L -autovalor de $T(n_2, n_3)$ menor que 1, conseqüentemente, temos que $\mu_{n-2}(T(n_2, n_3)) \geq 1$. Então

$$\mu_2(G) \leq \mu_2(H) = n - \mu_{n-2}(T(n_2, n_3)) \leq n - 1.$$

Como $\mu_2(G^c) \leq n$, concluimos que $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 1$. \square

No próximo resultado, provamos que $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 2$ quando G , ou G^c , é desconexo. Também garantimos que essa é a melhor cota possível, mostrando que existem grafos que satisfazem a igualdade.

Teorema 4.5. *Seja G um grafo desconexo de ordem n . Então,*

$$\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 2.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, $G = 2K_1 \cup H$, onde H^c é um grafo desconexo de ordem $n - 2$ que possui pelo menos 3 componentes conexas.

Demonstração. Seja $G = G_1 \cup G_2 \cup \dots \cup G_s$, $s \geq 2$, onde cada G_i é uma componente conexa de G de ordem n_i , para $1 \leq i \leq s$. Assumimos que $n_1 \leq n_2 \leq \dots \leq n_s$. Em seguida, vamos analisar $\mu_2(G)$ e $\mu_2(G^c)$ de acordo com o número de componentes conexas de G .

Caso 1: Suponha $s = 2$. Neste caso, $G = G_1 \cup G_2$ e $G^c = G_1^c \vee G_2^c$.

$$\text{Se } 2 \leq n_1 \leq n_2, \text{ então } \mu_2(G) \leq \max\{n_1, n_2\} \leq n - 2.$$

Pelo **Lema 3.13**, temos que $\mu_2(G^c) \leq \max\{n_1 + \mu_1(G_2^c), n_2 + \mu_1(G_1^c)\}$. Como G_1 e G_2 são conexos, o **Lema 3.3** garante que $\mu_2(G^c) < n$. Assim obtemos $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) < 2n - 2$.

Se $1 = n_1 \leq n_2$, temos que $G = K_1 \cup G_2$ e $G^c = K_1 \vee G_2^c$, logo $\mu_2(G) = \mu_2(G_2)$. Considere os seguintes subcasos:

Subcaso 1.1: Suponha $d(G_2) = 1$, então $G = K_1 \cup K_{n_2}$ e $G^c = K_1 \vee n_2 K_1$. Assim temos $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq n$.

Subcaso 1.2: Suponha $d(G_2) = 2$, então todo par de vértices não adjacentes $v_i, v_j \in V(G_2)$ possuem vizinhos em comum, ou seja, $|N_{G_2}(v_i) \cap N_{G_2}(v_j)| \geq 1$. Isso implica que para todo par de vértices adjacentes $v_i, v_j \in V(G_2^c)$ temos que

$|N_{G_2^c}(v_i) \cup N_{G_2^c}(v_j)| \leq n_2 - 1$. Usando o **Lema 3.3**, temos que

$$\mu_2(G_2^c) \leq \mu_1(G_2^c) \leq \max_{e_{ij} \in E(G_2^c)} \{|N_{G_2^c}(v_i) \cup N_{G_2^c}(v_j)|\} \leq n_2 - 1 = n - 2.$$

Pelo **Lema 3.13**, temos que $\mu_2(G^c) = \mu_2(G_2^c) + 1 \leq n - 1$.

Como $\mu_2(G) = \mu_2(G_2) \leq n_2 = n - 1$, concluímos que

$$\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 2.$$

Subcaso 1.3: Pelo **Lema 3.13**, $\mu_2(G^c) \leq 1 + \mu_1(G_2^c)$. Como G_2 é conexo, segue que $\mu_1(G_2^c) < n_2 = n - 1$ e, conseqüentemente, $\mu_2(G^c) < n$.

Suponha $d(G_2) = 3$. Neste caso, $G_2 \in G(n_2, 3)$. Sendo assim, pelo mesmo argumento do **Teorema 4.4**, obtemos que $\mu_2(G) = \mu_2(G_2) \leq n_2 - 1 = n - 2$. Logo, concluímos que $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) < n - 2 + n = 2n - 2$.

Suponha $d(G_2) \geq 4$. O **Lema 3.5** garante que o máximo de $\mu_2(G_2)$ não cresce quando o diâmetro cresce. Seja $H' \in G(n_2, d)$ e $H \in G(n_2, 3)$. Assim,

$$\mu_2(G) = \mu_2(G_2) \leq \mu_{2_{max}}(H') \leq \mu_{2_{max}}(H) \leq n_2 - 1 = n - 2.$$

Com isso, concluímos que $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) < n - 2 + n = 2n - 2$.

Caso 2: Suponha $s = 3$. Como G possui 3 componentes conexas, então 0 é L -autovalor de multiplicidade 3, logo $\mu_{n-2}(G) = 0$, e isso implica que $\mu_2(G^c) = n$, pelo **Lema 3.11**.

Se $n_1 \geq 2$ ou $n_2 \geq 2$, então $\mu_2(G) \leq \max_{1 \leq i \leq 3} \{n_i\} \leq n - 3$. Assim concluímos que $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 3$.

Se $n_1 = n_2 = 1$, então $G = 2K_1 \cup H$ e, portanto, $\mu_2(G) = \mu_2(H) \leq n - 2$. Assim concluímos que $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 2$.

A igualdade ocorre se, e somente se, $\mu_1(H) = \mu_2(H) = n - 2$, e isso implica que H^c deve ser um grafo desconexo com pelo menos 3 componentes conexas.

Caso 3: Suponha $s \geq 4$. Sendo assim, $\mu_2(G) \leq \max_{1 \leq i \leq s} \{n_s\} \leq n - 3$. Como $\mu_2(G^c) \leq n$, concluímos que $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 3$.

Isso completa a prova. \square

Devido ao resultado anterior, resta considerar os casos em que G e G^c são ambos conexos. No entanto, a prova do resultado principal está associada com o diâmetro dos grafos, ao invés de suas conexidades.

Teorema 4.6. *Seja G um grafo de ordem n . Se $d(G) \neq 2$ e $d(G^c) \neq 2$, então*

$$\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 2.$$

Demonstração. Se G é desconexo, o resultado segue pelo **Teorema 4.5**. Sendo assim, suponha que G é conexo.

Se $d(G) = 1$, então $G = K_n$, e concluímos que $\mu_2(K_n) + \mu_2(K_n^c) = n$.

Se $d(G) = 3$, então $G \in G(n, 3)$ e, pelo **Lema 2.3**, G é subgrafo de pelo menos um grafo, digamos H , da classe $G_3(1, n_2, n_3, 1)$, com $n = 2 + n_2 + n_3$. Pelo mesmo argumento do **Teorema 4.4**, obtemos

$$\mu_2(G) \leq \mu_2(H) = n - \mu_{n-2}(T(n_2, n_3)) \leq n - 1.$$

Como $d(G) = 3$, sabemos que $2 \leq d(G^c) \leq 3$. Se $d(G^c) = 3$, então G^c também é subgrafo de pelo menos um grafo da classe $G_3(1, n_2, n_3, 1)$, e segue, pelo mesmo argumento, que $\mu_2(G^c) \leq n - 1$. Assim concluímos que

$$\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 2.$$

Se $d(G) \geq 4$, segue pelo **Lema 3.5** que existe um grafo $H' \in G(n, d)$ e um $H \in G(n, 3)$ tal que

$$\mu_2(G) \leq \mu_{2_{max}}(H') \leq \mu_{2_{max}}(H) \leq n - 1.$$

Pelos argumentos anteriores, se $d(G^c) \neq 2$, então $\mu_2(G^c) \leq n - 1$. Assim temos que $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 2$. Isso conclui a prova. \square

Nos próximos resultados, mostramos que $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 2$ quando G é um grafo bipartido, ou quando G é um grafo regular.

Teorema 4.7. *Seja G um grafo bipartido de ordem n . Então*

$$\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 2.$$

Demonstração. Se G é bipartido, segue pelo **Lema 3.30** para adição de arestas que

$$\mu_2(G) \leq \mu_2(K_{r,s}) \leq n - 2,$$

com $r, s \geq 1$ e $n = r + s$. Como $\mu_2(G^c) \leq n$ o resultado segue. \square

Teorema 4.8. *Seja G um grafo k -regular de ordem n . Então*

$$\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 2.$$

Demonstração. Se $n \leq 6$, então o resultado segue pela análise particular de cada caso.

Se $n \geq 7$, aplicamos o **Lema 2.4 (Desigualdade de Weyl)** para o segundo maior L -autovalor, assim obtemos

$$\begin{aligned} \mu_2(G) &\leq k + \lambda_1(-A(G)) = k - \lambda_n(G) \\ \mu_2(G^c) &\leq n - 1 - k + \lambda_1(-A(G^c)) = n - 1 - k - \lambda_n(G^c). \end{aligned}$$

Como $\lambda_n(G) \leq 0$ para todo grafo, temos que

$$\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq n - 1 + |\lambda_n(G)| + |\lambda_n(G^c)|.$$

Aplicando o **Lema 3.2**, segue que

$$\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq n - 1 + \frac{n}{\sqrt{2}} + 1 = \left(\frac{2 + \sqrt{2}}{2} \right) n.$$

É fácil ver que $\left(\frac{2 + \sqrt{2}}{2}\right)n - 2n - 2 \leq 0$ para $n \geq 7$.

Assim concluimos que $\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 2$. □

Para finalizar, apresentamos uma conjectura sobre a possível melhor cota superior para o problema de Nordhaus-Gaddum associado com a soma do segundo maior L -autovalor.

Conjectura 4.3. *Seja G um grafo de ordem $n \geq 2$. Então,*

$$\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 2.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, G , ou G^c , é igual a $K_2 \vee H$, onde H é um grafo desconexo de ordem $n - 2$ com pelo menos 3 componentes conexas.

4.3 O Problema de Nordhaus-Gaddum para q_2

Nesta seção, apresentamos desigualdades do tipo Nordhaus-Gaddum para a soma e produto do segundo maior Q -autovalor. Além disso, mostramos exemplos que garantem que esses resultados são os melhores possíveis.

Para começar, apresentamos um resultado que decorre diretamente do **Lema 3.17**, e que ajuda no tratamento do problema de Nordhaus-Gaddum para q_2 de um grande número de grafos.

Lema 4.1. *Seja G um grafo de ordem $n \geq 2$. Então*

$$n - 3 + (d_2 - d_{n-1}) \leq q_2(G) + q_2(G^c) \quad e \quad (d_2 - 1)(n - 2 - d_{n-1}) \leq q_2(G)q_2(G^c).$$

Demonstração. Aplicando o **Lema 3.17** e a **Observação 2.1**, temos que

$$d_2 - 1 \leq q_2(G) \quad e \quad n - 2 - d_{n-1} \leq q_2(G^c).$$

Com isso obtemos o resultado. □

A seguir, tratamos da demonstração das desigualdades associadas com $q_2(G) + q_2(G^c)$.

Teorema 4.9. *Seja G um grafo de ordem $n \geq 2$. Então*

$$n - 2 \leq q_2(G) + q_2(G^c) \leq 2(n - 2).$$

A igualdade da cota inferior ocorre quando G é conexo e isomorfo a K_n e S_n .

Demonstração. A **cota superior** segue da aplicação do **Lema 3.18** para G e G^c , assim temos

$$q_2(G) + q_2(G^c) \leq 2(n - 2).$$

Vamos dividir a prova da **cota inferior** em diversos casos.

Se $d_2 \neq d_{n-1}$, então $d_2 - d_{n-1} \geq 1$, e a cota inferior segue pelo **Lema 4.1**. Observe que isso trata da maior parte dos grafos.

Resta considerar os grafos com $d_2 = d_{n-1}$, ou seja, grafos com um vértice de grau $d_1 \geq d_2$, um vértice de grau $d_n \leq d_2$, e $n - 2$ vértices de grau d_2 .

Caso 1: $d_2 = 0$ ou $d_2 = n - 1$.

Se $d_2 = 0$, então, como $0 \leq d_n \leq d_2$, temos que $d_n = 0$. O **Lema 2.1** garante que essa sequência é gráfica se, e somente se, $d_1 = 0$. Dessa forma, temos que $G = nK_1$ e $G^c = K_n$ e, pelo **Lema 3.34**, segue que

$$q_2(nK_1) + q_2(K_n) = n - 2.$$

Se $d_2 = n - 1$, então $d_n^c = 0$, e o resultado segue pelo mesmo argumento, usando G^c no lugar de G .

Caso 2: $d_2 = 1$ ou $d_2 = n - 2$.

Se $d_2 = 1$, temos que $d_1 \geq 1$ e $N(v_1) \neq \emptyset$.

Suponha que $v_i \in N(v_1)$, então $1 \leq d(v_i) \leq d_2$, e segue que $d(v_i) = 1$. Isso garante que o subgrafo induzido por $\{v_1\} \cup N(v_1)$ é a estrela S_{d_1+1} .

Se $v_i \notin N(v_1)$ e $d(v_i) = 1$, então v_i é adjacente a algum vértice v_j , com $d(v_j) = 1$. Isso implica que o subgrafo induzido por $\{v_i, v_j\}$ é o caminho P_2 .

Se $d_n = 1$, então $G = S_n$ ou $G = S_{n-2k} \cup kP_2$, onde $k \in \mathbb{Z}_+^*$ tal que $n - 2k \geq 2$. Se $d_n = 0$, então $G = S_{n-1} \cup K_1$ ou $G = S_{n-2k-1} \cup kP_2 \cup K_1$, onde $k \in \mathbb{Z}_+^*$ tal que $n - 2k - 1 \geq 2$.

Quando $G = S_n$, usamos o **Lema 3.34** e obtemos

$$q_2(G) + q_2(G^c) = q_2(S_n) + q_2(K_{n-1} \cup K_1) = n - 2.$$

Quando $G = S_{n-1} \cup K_1$, usamos o **Lema 3.34** e obtemos

$$q_2(G) + q_2(G^c) = q_2(S_{n-1} \cup K_1) + q_2(K_{n-1} + e) = n - 1.$$

Quando $G = S_{n-2k} \cup kP_2$, ou $G = S_{n-2k-1} \cup kP_2 \cup K_1$, o grafo tem pelo menos dois vértices adjacentes de grau d_2 (em kP_2), e dois vértices não adjacentes de grau d_2 (duas das componentes conexas possuem vértices de grau d_2). Assim, $Q(G)$ e $Q(G^c)$ possuem as respectivas submatrizes

$$\begin{bmatrix} d_2 & 0 \\ 0 & d_2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \begin{bmatrix} n-1-d_2 & 0 \\ 0 & n-1-d_2 \end{bmatrix}. \quad (4.4)$$

Pelo **Teorema 2.4**, temos $q_2(G) \geq d_2$ e $q_2(G^c) \geq n-1-d_2$, e disso segue o resultado.

Se $d_2 = n-2$, então $d_2^c = 1$, e o resultado segue pelo mesmo argumento, usando G^c no lugar de G .

Caso 3: $d_2 = 2$ ou $d_2 = n-3$.

Para $n = 4$, temos que $d_2 = 2 = 4 - 2 = n - 2$, logo essa condição foi considerada no caso anterior, e o mesmo ocorre com $n = 3$. Sendo assim, vamos assumir que $n \geq 5$.

Suponha $d_2 = 2$ e $n \geq 5$, isso implica que o grafo tem pelo menos três vértices de grau d_2 . Como $d_1 \geq 2$, existe um vértice $v_i \in N(v_1)$, com $d(v_i) = d_2$, que não é adjacente a pelo menos um vértice de grau d_2 . Além disso, como $d_n \leq 2$, existe um vértice $v_j \notin N(v_n)$, com $d(v_j) = d_2$, que é adjacente a algum vértice de grau d_2 .

Isso implica que $Q(G)$ e $Q(G^c)$ possuem submatrizes como em (4.4), e o resultado segue pelo mesmo argumento do caso anterior.

Se $d_2 = n - 3$, então $d_2^c = 2$, e o resultado segue pelo mesmo argumento, usando G^c no lugar de G .

Caso 4: $3 \leq d_2 \leq n - 4$ e $n \geq 7$.

Se $3 \leq d_2 \leq n - 4$, então o grafo possui pelo menos dois vértices não adjacentes de grau d_2 , e dois vértices adjacentes de grau d_2 . O resultado segue por argumento análogo ao do **Caso 2**.

Os grafos com $5 \leq n \leq 6$ e $d_2 \geq 3$ são similares ao caso com $n = 4$ e $d_2 = 2$, e foram considerados nos casos anteriores.

Assim concluímos a demonstração. □

Destacamos que a cota inferior $q_2(G) + q_2(G^c) \geq n - 3$ é fácil de ser obtida. De fato, pelo **Lema 4.1**, temos que

$$q_2(G) + q_2(G^c) \geq n - 3 + (d_2 - d_{n-1}) \geq n - 3,$$

pois $d_{n-1} \leq d_2$ para qualquer grafo. No teorema anterior, melhoramos essa cota.

Em seguida, apresentamos os exemplos que asseguram que as desigualdades obtidas são as melhores possíveis.

Proposição 4.1. *As desigualdades do **Teorema 4.9** são as melhores possíveis.*

Demonstração. A igualdade da cota superior é alcançada quando $G = G^c = P_4$. De fato, nesse caso temos que $q_2(P_4) + q_2(P_4) = 4 = 2(n - 2)$, uma vez que $q_2(P_4) = 2$.

A igualdade da cota inferior é alcançada quando $G = K_n$ e $G^c = nK_1$. De fato, nesse caso temos que $q_2(K_n) + q_2(nK_1) = n - 2$. A demonstração da cota inferior também mostra que a igualdade ocorre quando $G = S_n$. \square

Destacamos que é razoavelmente simples construir exemplos em que a cota inferior é alcançada, mas que o mesmo não ocorre para cota superior.

Na demonstração do **Teorema 4.9**, mostramos que se $d_2 = d_{n-1}$, então $q_2(G) + q_2(G^c) = n - 2$ se, e somente se, $G = K_n, S_n$. Além disso, garantimos que $q_2(G) + q_2(G^c) \geq n - 1$ para os demais grafos e, portanto, não atingem a cota.

Se $d_2 \neq d_{n-1}$ e $d_2 = n - 1$, então $q_2(G) = n - 2$, pelo **Lema 3.19**. Para atingir a cota inferior do **Teorema 4.9** devemos ter $q_2(G^c) = 0$, e isso ocorre apenas quando $G^c = P_2 \cup (n - 2)K_1$ (basta notar que se $e(G^c) \geq 2$ então $q_2(G^c) \neq 0$). Sendo assim, resta investigar quais grafos com $d_{n-1} \neq d_2 \leq n - 2$ atingem a cota inferior.

Em seguida, vamos abordar a desigualdade de Nordhaus-Gaddum para o produto do segundo maior Q -autovalor. Iniciamos tratando do caso trivial da cota inferior.

Teorema 4.10. *Seja G um grafo de ordem $n \geq 2$. Então $0 \leq q_2(G)q_2(G^c)$. A igualdade ocorre se, e somente se, $e(G) \leq 1$ ou $e(G) \geq \binom{n}{2} - 1$.*

Demonstração. Como $Q(G)$ e $Q(G^c)$ são matrizes positivas semidefinidas temos que $q_2(G) \geq 0$ e $q_2(G^c) > 0$, pelo **Lema 2.3**. A igualdade ocorre quando $e(G) \leq 1$,

que garante $q_2(G) = 0$, ou quando $e(G) \geq \binom{n}{2} - 1$, que garante $q_2(G^c) = 0$. Assim obtemos o resultado. \square

Como exemplo de grafo que satisfaz a igualdade do **Teorema 4.10**, considere $G = K_n$ e $G^c = nK_1$, assim temos $q_2(K_n)q_2(nK_1) = 0$.

No próximo teorema, apresentamos a demonstração da principal desigualdade associada ao produto.

Teorema 4.11. *Seja G um grafo de ordem $n \geq 4$, com $2 \leq e(G) \leq \binom{n}{2} - 2$. Então*

$$n - 3 \leq q_2(G)q_2(G^c) \leq (n - 2)^2.$$

Demonstração. A **cota superior** segue da aplicação do **Lema 3.18** para os grafos G e G^c .

Vamos dividir a demonstração da **cota inferior** em diversos casos.

Se $d_2 \neq d_{n-1}$, então $d_2 - 1 \geq d_{n-1}$. O **Lema 4.1**, junto com o estudo da expressão $d_{n-1}(n - 2 - d_{n-1})$, garante que o resultado é válido para $1 \leq d_{n-1} \leq n - 3$. Esse argumento trata da maioria dos grafos, restando considerar alguns casos particulares.

Caso 1.1: $d_{n-1} = n - 1$ e $d_2 \neq d_{n-1}$.

Como $d_{n-1} \leq d_2 \leq n - 1$, temos que $d_2 = n - 1$. Uma contradição com $d_2 \neq d_{n-1}$.

Caso 1.2: $d_{n-1} = n - 2$ e $d_2 \neq d_{n-1}$.

Como $1 + d_{n-1} \leq d_2 \leq n - 1$, temos que $d_2 = n - 1$. Pelo **Lema 3.19**, temos que $q_2(G) = n - 2$.

Se v_{n-1} é adjacente a v_n , então $Q(G^c)$ possui a submatriz

$$\begin{bmatrix} n-1-d_n & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Como $e(G) \leq \binom{n}{2} - 2$, temos que o grafo tem pelo menos três vértices de grau menor que $n-1$. Se v_{n-1} não é adjacente a v_n , então v_{n-1} é adjacente a algum vértice de grau $n-2$, e $Q(G^c)$ possui a submatriz

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

Usando o **Teorema 2.4**, temos que $q_2(G^c) \geq 1$, em ambos os casos, e isso garante o resultado.

Caso 1.3: $d_{n-1} = 0$ e $d_2 \neq d_{n-1}$.

Se $d_{n-1} = 0$, então $d_2^c = n-1$. Pelo **Lema 3.19**, temos que $q_2(G^c) = n-2$, e o resultado segue por argumento análogo ao do caso anterior, usando G^c no lugar de G .

Resta considerar os grafos com $d_2 = d_{n-1}$, ou seja, grafos com um vértice de grau $d_1 \geq d_2$, um vértice de grau $d_n \leq d_2$, e $n-2$ vértices de grau d_2 .

Caso 2.1: $d_2 = 0$ ou $d_2 = n-1$.

Se $d_2 = 0$, então, como $0 \leq d_n \leq d_2$, temos que $d_n = 0$. O **Lema 2.1** garante que essa sequência é gráfica se, e somente se, $d_1 = 0$. Dessa forma, temos que $G = nK_1$, uma contradição com $2 \leq e(G)$.

Se $d_2 = n-1$, então $d_2^c = 0$, e o resultado segue pelo mesmo argumento, usando G^c no lugar de G .

Caso 2.2: $d_2 = 1$ ou $d_2 = n-2$.

Se $d_2 = 1$, temos que $d_1 \geq 1$ e $N(v_1) \neq \emptyset$.

Suponha que $v_i \in N(v_1)$, então $1 \leq d(v_i) \leq d_2$, e segue que $d(v_i) = 1$. Isso garante que o subgrafo induzido por $\{v_1\} \cup N(v_1)$ é a estrela S_{d_1+1} .

Se $v_i \notin N(v_1)$ e $d(v_i) = 1$, então v_i é adjacente a algum vértice v_j , com $d(v_j) = 1$. Isso implica que o subgrafo induzido por $\{v_i, v_j\}$ é o caminho P_2 .

Se $d_n = 1$, então $G = S_n$ ou $G = S_{n-2k} \cup kP_2$, onde $k \in \mathbb{Z}_+^*$ tal que $n - 2k \geq 2$. Se $d_n = 0$, então $G = S_{n-1} \cup K_1$ ou $G = S_{n-2k-1} \cup kP_2 \cup K_1$, onde $k \in \mathbb{Z}_+^*$ tal que $n - 2k - 1 \geq 2$.

Quando $G = S_n$, usamos o **Lema 3.34** e obtemos

$$q_2(G)q_2(G^c) = q_2(S_n)q_2(K_{n-1} \cup K_1) = n - 3.$$

Quando $G = S_{n-1} \cup K_1$, usamos o **Lema 3.34** e obtemos

$$q_2(G)q_2(G^c) = q_2(S_{n-1} \cup K_1)q_2(K_{n-1} + e) = n - 2.$$

Quando $G = S_{n-2k} \cup kP_2$, ou $G = S_{n-2k-1} \cup kP_2 \cup K_1$, o grafo tem pelo menos dois vértices adjacentes de grau d_2 (em kP_2), e dois vértices não adjacentes de grau d_2 (duas das componentes conexas possuem vértices de grau d_2). Assim, $Q(G)$ e $Q(G^c)$ possuem as respectivas submatrizes

$$\begin{bmatrix} d_2 & 0 \\ 0 & d_2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \begin{bmatrix} n-1-d_2 & 0 \\ 0 & n-1-d_2 \end{bmatrix}. \quad (4.5)$$

Pelo **Teorema 2.4**, temos $q_2(G) \geq d_2$ e $q_2(G^c) \geq n - 1 - d_2$, e isso implica que $q_2(G)q_2(G^c) \geq d_2(n - 1 - d_2)$. Um cálculo simples mostra que

$$q_2(G)q_2(G^c) \geq n - 2.$$

Se $d_2 = n - 2$, então $d_2^c = 1$, e o resultado segue pelo mesmo argumento, usando G^c no lugar de G .

Caso 2.3: $d_2 = 2$ ou $d_2 = n - 3$.

Para $n = 4$, temos que $d_2 = 2 = 4 - 2 = n - 2$, logo essa condição foi considerada no caso anterior. Sendo assim, vamos assumir que $n \geq 5$.

Suponha $d_2 = 2$ e $n \geq 5$, isso implica que o grafo tem pelo menos três vértices de grau d_2 . Como $d_1 \geq 2$, existe um vértice $v_i \in N(v_1)$, com $d(v_i) = d_2$, que não é adjacente a pelo menos um vértice de grau d_2 . Além disso, como $d_n \leq 2$, existe um vértice $v_j \notin N(v_n)$, com $d(v_j) = d_2$, que é adjacente a algum vértice de grau d_2 .

Isso implica que $Q(G)$ e $Q(G^c)$ possuem submatrizes como em (4.5), e o resultado segue pelo mesmo argumento do caso anterior.

Se $d_2 = n - 3$, então $d_2^c = 2$, e o resultado segue pelo mesmo argumento, usando G^c no lugar de G .

Caso 2.4: $3 \leq d_2 \leq n - 4$ e $n \geq 7$.

Se $3 \leq d_2 \leq n - 4$, então o grafo possui pelo menos dois vértices não adjacentes de grau d_2 , e dois vértices adjacentes de grau d_2 . O resultado segue por argumento análogo ao do **Caso 2.2**.

Os grafos com $5 \leq n \leq 6$ e $d_2 \geq 3$ são similares ao caso com $n = 4$ e $d_2 = 2$, e foram considerados nos casos anteriores.

Assim concluímos a demonstração. □

Em seguida, apresentamos os exemplos que asseguram que as desigualdades obtidas são as melhores possíveis.

Proposição 4.2. *As desigualdades do **Teorema 4.11** são as melhores possíveis.*

Demonstração. A igualdade da cota superior é alcançada quando $G = G^c = P_4$. De fato, nesse caso temos que $q_2(P_4)q_2(P_4) = 4 = (n - 2)^2$, uma vez que $q_2(P_4) = 2$.

A igualdade da cota inferior ocorre quando $G = S_n$ e $G^c = K_{n-1} \cup K_1$, como aparece na demonstração do teorema. De fato, temos que $q_2(S_n) = 1$ e $q_2(K_{n-1} \cup K_1) = n - 3$, logo $q_2(S_n)q_2(K_{n-1} \cup K_1) = n - 3$. \square

Assim como no problema de Nordhaus-Gaddum para $q_2(G) + q_2(G^c)$, é razoavelmente simples construir exemplos que atingem a cota inferior de $q_2(G)q_2(G^c)$, mas o mesmo não ocorre para a cota superior.

4.4 O Problema de Nordhaus-Gaddum para q_n

Nesta seção, resolvemos o problema de Nordhaus-Gaddum para a soma do menor Q -autovalor. Além disso, garantimos que as desigualdades obtidas são as melhores possíveis.

No próximo teorema, tratamos da cota superior de $q_n(G) + q_n(G^c)$.

Teorema 4.12. *Seja G um grafo de ordem $n \geq 2$. Então $q_n(G) + q_n(G^c) \leq n - 2$. A igualdade ocorre se, e somente se, $G = K_n$ e $G^c = nK_1$.*

Demonstração. Suponha que $d_1 = n - 1$. Então G é conexo e segue, pelo **Lema 3.20**, que $q_n(G) < d_n$. Além disso, $d_1 = n - 1$ garante que $d_n^c = 0$, logo $G^c = H \cup K_1$, onde H é um grafo de ordem $n - 1$. Pelos **Lemas 3.34** e **3.27**, temos que $q_n(G^c) = 0$. Assim, concluímos que

$$q_n(G) + q_n(G^c) \leq d_n.$$

Se $d_n = d_1 = n - 1$, então $G = K_n$, e temos $q_n(K_n) + q_n(nK_1) = n - 2$.

Se $d_n \leq n - 2$, então obtemos o resultado.

Suponha que $d_1 \leq n - 2$, isso implica que $d_n^c > 0$, e segue, pelo **Lema 3.21**, que $q_n(G^c) < d_n^c = n - 1 - d_1$.

Se $d_n = 0$ então $d_1^c = n - 1$, e o resultado segue pelo mesmo argumento do caso anterior com G^c no papel de G .

Se $d_n > 0$ segue, pelo **Lema 3.21**, que $q_n(G) < d_n$. Assim temos

$$q_n(G) + q_n(G^c) \leq n - 1 + (d_n - d_1).$$

Se $d_1 \neq d_n$, então $q_n(G) + q_n(G^c) < n - 2$.

Se $d_1 = d_n$, então G é um grafo d_1 -regular e G^c é um grafo $(n - 1 - d_1)$ -regular, e segue, pelo **Lema 3.22** e pela **Observação 2.2**, que $q_n(G) \leq d_1 - 1$ e $q_n(G^c) \leq n - 2 - d_1$. Isso garante que $q_n(G) + q_n(G^c) \leq n - 3$.

A igualdade ocorre apenas quando $G = K_n$ e $G^c = nK_1$. Para todos os outros grafos garantimos que $q_n(G) + q_n(G^c) < n - 2$. \square

Em seguida, tratamos do caso trivial da cota inferior de $q_n(G) + q_n(G^c)$.

Teorema 4.13. *Seja G um grafo de ordem $n \geq 2$. Então $q_n(G) + q_n(G^c) \geq 0$.*

A igualdade ocorre se, e somente se, G e G^c possuem pelo menos uma componente bipartida.

Demonstração. Como $Q(G)$ e $Q(G^c)$ são matrizes positivas semidefinidas temos que $q_n(G) \geq 0$ e $q_n(G^c) \geq 0$, pelo **Lema 2.3**. Com isso obtemos o resultado. A igualdade segue do **Lema 3.24**. \square

Como exemplo de um grafo que atinge a igualdade proposta, considere $G = G^c = P_4$.

Observe que resta considerar o estudo do problema de Nordhaus-Gaddum de $q_n(G) + q_n(G^c)$ para grafos não bipartidos. Para isso, apresentamos os grafos G_{S_3} e G_{P_3} , dados pela Figura 4.1, que serão utilizados no resultado.



Figura 4.1 Grafos G_{P_3} e G_{S_3} .

Usando um argumento semelhante ao que foi utilizada para encontrar o valor mínimo que o menor Q -autovalor de um grafo não bipartido pode assumir, em [16], vamos demonstrar a cota inferior do problema.

Teorema 4.14. *Seja G um grafo não bipartido de ordem n . Então*

(i) *Se $n = 5$ temos que*

$$q_n(G) + q_n(G^c) \geq q_n(G_{P_3}) + q_n(G_{P_3}^c).$$

(ii) *Se $n \geq 6$ temos que*

$$q_n(G) + q_n(G^c) \geq q_n(S_n + e) + q_n((K_{n-1} - e) \cup K_1).$$

Demonstração. Vamos supor que $G \in \mathcal{G}_c$, para algum ímpar c . De fato, se $G \notin \mathcal{G}_c$ então, como G é não bipartido, segue pelo **Lema 2.2** que ele possui pelo menos um ciclo de comprimento c . Por meio da deleção de arestas de G é possível obter um grafo não bipartido $G_c \in \mathcal{G}_c$. Pelo **Lema 3.30**, temos $q_n(G) \geq q_n(G_c)$. Se necessário, usamos G_c no papel de G no próximo parágrafo.

Seja $G \in \mathcal{G}_c$. O **Lema 3.26**, item (1), garante que existe um grafo $G_3 \in \mathcal{G}_3$ com $q_n(G_c) \geq q_n(G_3)$. O grafo G_3 é obtido pela rotação de uma aresta no ciclo de G_c . Se necessário, usamos G_3 no papel de G no próximo parágrafo.

Seja $G \in \mathcal{G}_3$. O **Lema 3.26**, item (2), garante que existe um grafo $G'_3 \in \mathcal{G}_3$, onde dois dos vértices do $C_3 \subseteq G'_3$ possuem grau 2, e $q_n(G) \geq q_n(G'_3)$. Obtemos o grafo G'_3 movendo as árvores pendentes de dois vértices de C_3 para a árvore pendente no vértice restante usando rotações de arestas. Note que G'_3 é um triângulo anexado a algum vértice de uma árvore. Se necessário, usamos G'_3 no papel de G no próximo parágrafo.

Denotamos por G_T o grafo de $G \in \mathcal{G}_3$ dado pelo triângulo identificado com algum vértice da árvore T , como descrito acima. Note que para cada vértice de T em que o triângulo for anexado podemos obter um grafo G_T distinto, sendo assim, vamos especificar o vértice utilizado. Resta estudar a árvore T anexada.

Se $|V(T)| = 3$, então $T = P_3$.

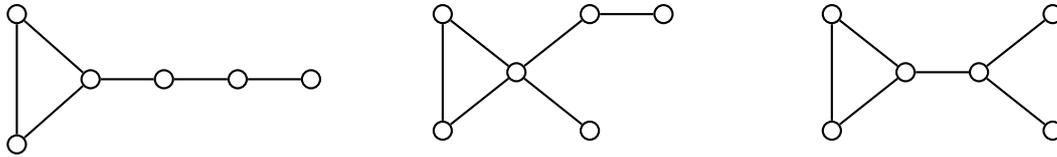
Denotamos por G_{P_3} o grafo em que o triângulo é anexado a um vértice de grau 1, e por G_{S_3} o grafo em que o triângulo é anexado ao vértice de grau 2. Assim, concluímos que

$$q_n(G) + q_n(G^c) \geq q_n(G_{S_3}) + q_n(G_{S_3}^c) \geq q_n(G_{P_3}) + q_n(G_{P_3}^c).$$

Suponha que $|V(T)| \geq 4$.

Denotamos por $G_{S_{n-2}}$ o grafo em que o triângulo é anexado ao vértice de maior grau de S_{n-2} . Note que $G_{S_{n-2}} = S_n + e$ e $(S_n + e)^c = (K_{n-1} - e) \cup K_1$, e que $q_n((S_n + e)^c) = 0$.

Se o triângulo for anexado a um vértice de grau 1 de S_{n-2} , ou se $T \neq S_{n-2}$, então G_T possui um dos seguintes grafos como subgrafo



Consequentemente, temos que G_T^c é um grafo multicíclico com pelo menos um ciclo de tamanho ímpar e, consequentemente, $q_n(G_T^c) \geq q_n(S_n + e)$.

Se $q_n(G_T) \geq q_n(S_n + e)$, então

$$q_n(G_T) + q_n(G_T^c) \geq q_n(S_n + e) + q_n((S_n + e)^c).$$

Caso contrário, temos que $q_n(G_T) \geq q_n((S_n + e)^c) = 0$ e $q_n(G_T^c) \geq q_n(S_n + e)$, visto que G_T^c é um grafo multicíclico com pelo menos um ciclo de tamanho ímpar, e obtemos o resultado. \square

5 A SOMA DOS Q -AUTOVALORES

Neste capítulo, estudamos a seguinte questão;

“Quão grande (ou pequena) pode ser a soma dos k maiores Q -autovalores de um grafo G ?”

Para isso, formalizamos a definição da soma dos k maiores Q -autovalores.

Definição 5.1. *Para um grafo G de ordem $n \geq k$, considere a **soma dos k maiores Q -autovalores** dada por*

$$Q_k(G) = \sum_{i=1}^k q_i(G), \text{ para } k = 1, 2, \dots, n.$$

Quando não houver ambiguidade, denotaremos a soma dos k maiores Q -autovalores por Q_k .

Na próxima seção, vamos apresentar cotas superiores de $Q_k(G)$ para algumas classes de grafos. Depois, vamos estudar a versão da conjectura de Brouwer para os Q -autovalores, e apresentar resultados parciais para cografos e grafos threshold.

5.1 Cotas para $q_1 + \dots + q_k$

Em 2009, Mohar [73] estudou a soma dos k maiores A -autovalores de um grafo G , apresentando o próximo teorema.

Teorema 5.1. [73] *Seja G um grafo conexo de ordem n . Então*

$$\lambda_1 + \dots + \lambda_k \leq \frac{n}{2} (1 + \sqrt{k}), \text{ para } 1 \leq k \leq n.$$

Motivados por esse estudo, Jin et al. [62] investigaram a soma dos k maiores Q -autovalores de um grafo. Como resultado, os autores apresentam uma cota superior para Q_k que depende da sequência de graus do grafo.

Teorema 5.2. [62] *Seja G um grafo conexo de ordem n . Então*

$$Q_k(G) \leq n + \sqrt{k \left(n^2 + \sum_{i=1}^n d_i^2 - 3 \sum_{i=1}^n d_i \right)} \text{ para } k > 1 + \frac{1}{n^2} \left(\sum_{i=1}^n d_i^2 - 3 \sum_{i=1}^n d_i \right);$$

$$Q_k(G) < 2n + \sqrt{(k-1) \left(\sum_{i=1}^n d_i^2 - 3 \sum_{i=1}^n d_i \right)} \text{ para } 2 \leq k \leq 1 + \frac{1}{n^2} \left(\sum_{i=1}^n d_i^2 - 3 \sum_{i=1}^n d_i \right).$$

Nesta seção, vamos generalizar o resultado obtido por Jin et al. para classes de grafos que possuem uma cota superior específica para o maior Q -autovalor. Como contribuição original, vamos apresentar cotas superiores de Q_k para grafos livres de $K_{2,s+1}$, para grafos livres de ciclos de tamanho par, e para grafos livres de ciclos de tamanho ímpar.

5.1.1 Generalização do Argumento

A seguir, apresentamos a generalização do argumento utilizado por Jin et al. e tal procedimento será utilizado para obter os demais resultados dessa seção.

Seja $a \in \mathbb{R}$, utilizando o vetor $u = (\sqrt{a}, \dots, \sqrt{a})^T$, definimos a matriz $Q' = uu^T - Q(G)$. Sejam $q'_1 \geq \dots \geq q'_n$ os autovalores de Q' .

Usando a definição de norma ℓ_2 , temos

$$\begin{aligned} 2(\sigma_2(Q))^2 + 2(\sigma_2(Q'))^2 &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [q_{ij}^2 + (a - q_{ij})^2] \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [(d_{ij} + a_{ij})^2 + (a - d_{ij} - a_{ij})^2] \\ &= \sum_{i=1}^n d_i^2 + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 + \sum_{i=1}^n (a - d_i)^2 + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (a - a_{ij})^2 - a^2 n \\ &= 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (2 - 4a) \sum_{i=1}^n d_i + a^2 n^2. \end{aligned}$$

Pelo **Lema 2.7**, temos

$$2 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (2 - 4a) \sum_{i=1}^n d_i + a^2 n^2 = \sum_{i=1}^n q_i^2 + \sum_{i=1}^n q_i'^2. \quad (5.1)$$

Pelo item **(b)** do **Lema 2.5**, temos que $q_i + q'_{n-i+2} \leq 0$, para $i = 2, \dots, n$. Logo, $q_i \leq -q'_{n-i+2}$, e como $q_i \geq 0$, temos que $q_i^2 \leq q_{n-i+2}'^2$. Com isso temos

$$\sum_{i=1}^n q_i^2 + \sum_{i=1}^n q_i'^2 \geq q_1^2 + q_1'^2 + \sum_{i=2}^k q_i^2 + \sum_{i=2}^k q_{n-i+2}^2 \geq q_1^2 + q_1'^2 + 2 \sum_{i=2}^k q_i^2. \quad (5.2)$$

Usando as expressões (5.1) e (5.2), obtemos

$$q_1^2 + q_1'^2 + 2 \sum_{i=2}^k q_i^2 \leq 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (2 - 4a) \sum_{i=1}^n d_i + a^2 n^2. \quad (5.3)$$

Seja α_1 uma cota superior de q_1 para uma classe de grafos \mathcal{F} , ou seja, se $G \in \mathcal{F}$, então $q_1(G) \leq \alpha_1$. Como G é conexo, temos $0 < q_1 \leq \alpha_1$. Dessa forma, podemos parametrizar q_1 da forma $q_1 = \alpha t$, onde $0 < t < \beta$, e $\alpha\beta = \alpha_1$.

Pelo item **(a)** do **Lema 2.5**, temos que $q_1 + q_1' \geq \|u\|^2 = an$, logo $q_1' \geq an - q_1 = an - \alpha t$. Escolhendo a de forma que $an - \alpha t > 0$, obtemos $q_1'^2 \geq (an - \alpha t)^2$.

Aplicando a parametrização de q_1 e a estimativa de $q_1'^2$, na equação (5.3), obtemos

$$\begin{aligned} (\alpha t)^2 + (an - \alpha t)^2 + 2 \sum_{i=2}^k q_i^2 &\leq 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (2 - 4a) \sum_{i=1}^n d_i + a^2 n^2 \\ \sum_{i=2}^k q_i^2 &\leq \frac{-(\alpha t)^2 - (an - \alpha t)^2 + 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (2 - 4a) \sum_{i=1}^n d_i + a^2 n^2}{2}. \end{aligned}$$

Utilizando o **Lema 2.8 (Desigualdade de Cauchy-Schwarz)** com os vetores $(1, \dots, 1)$ e (q_2, \dots, q_k) de \mathbb{R}^{k-1} , temos

$$\begin{aligned} \sum_{i=2}^k q_i &\leq \sqrt{(k-1) \left(\sum_{i=2}^k q_i^2 \right)} \\ &\leq \sqrt{(k-1) \left(\frac{-(\alpha t)^2 - (an - \alpha t)^2 + 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (2 - 4a) \sum_{i=1}^n d_i + a^2 n^2}{2} \right)}. \end{aligned}$$

Adicionando $q_1 = \alpha t$ em ambos os lados da expressão anterior, obtemos

$$Q_k \leq \alpha t + \sqrt{(k-1) \left(\frac{-(\alpha t)^2 - (an - \alpha t)^2 + 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (2 - 4a) \sum_{i=1}^n d_i + a^2 n^2}{2} \right)}.$$

Dividindo ambos os lados por α , temos

$$\begin{aligned} \frac{Q_k}{\alpha} &\leq \frac{\alpha t + \sqrt{(k-1) \left[\frac{-(\alpha t)^2 - (an - \alpha t)^2 + 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (2-4a) \sum_{i=1}^n d_i + a^2 n^2}{2} \right]}}{\alpha} \\ &\leq t + \sqrt{(k-1) \left[-t^2 + \left(\frac{an}{\alpha} \right) t + \frac{\sum_{i=1}^n d_i^2 + (1-2a) \sum_{i=1}^n d_i}{\alpha^2} \right]}. \end{aligned}$$

Observe que, para obter uma cota superior de Q_k , devemos determinar o valor máximo da função

$$f(t) = t + \sqrt{(k-1)(-t^2 + yt + x)}$$

no intervalo $(0, \beta)$, onde $y = \frac{an}{\alpha}$, e $x = \frac{\sum_{i=1}^n d_i^2 + (1-2a) \sum_{i=1}^n d_i}{\alpha^2}$.

Derivando $f(t)$, e igualando a zero, temos

$$f'(t) = 1 + \sqrt{k-1} \left(\frac{y-2t}{2\sqrt{-t^2 + yt + x}} \right) = 0.$$

Assim, obtemos $t = \frac{y}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{y^2 + 4x}{k}}$ como pontos críticos de $f(t)$. Além disso, temos que $f'(t) \geq 0$ no intervalo $I = \left[\frac{y}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{y^2 + 4x}{k}}, \frac{y}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{y^2 + 4x}{k}} \right]$.

Como buscamos o valor máximo de $f(t)$ no intervalo $(0, \beta)$, devemos avaliar como esse intervalo se relaciona com I .

Observe que se $\frac{y}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{y^2 + 4x}{k}} < \beta$, então

$$k > \frac{y^2 + 4x}{(2\beta - y)^2} = \frac{a^2 n^2 + 4 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (4-8a) \sum_{i=1}^n d_i}{(2\beta\alpha - an)^2}.$$

Nesse caso, temos que $f(t)$ assume seu máximo em $t = \frac{y}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{y^2 + 4x}{k}}$.

Assim, obtemos que

$$Q_k(G) \leq \frac{1}{2} \left(an + \sqrt{k \left(a^2 n^2 + 4 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (4-8a) \sum_{i=1}^n d_i \right)} \right),$$

para $n \geq k > \frac{a^2 n^2 + 4 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (4 - 8a) \sum_{i=1}^n d_i}{(2\beta\alpha - an)^2}$.

Por outro lado, se $\frac{y}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{y^2 + 4x}{k}} \geq \beta$, então

$$k \leq \frac{y^2 + 4x}{(2\beta - y)^2} = \frac{a^2 n^2 + 4 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (4 - 8a) \sum_{i=1}^n d_i}{(2\beta\alpha - an)^2}.$$

Nesse caso, temos que $f(t) < f(\beta) = \beta + \sqrt{(k-1)(-\beta^2 + u\beta + x)}$, para todo $t \in (0, \beta)$. Assim, obtemos que

$$Q_k(G) < \alpha\beta + \sqrt{(k-1) \left(-\alpha^2\beta^2 + an\alpha\beta + \sum_{i=1}^n d_i^2 + (1-2a) \sum_{i=1}^n d_i \right)}$$

para $2 \leq k \leq \frac{a^2 n^2 + 4 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (4 - 8a) \sum_{i=1}^n d_i}{(2\beta\alpha - an)^2}$.

Com isso concluímos a generalização do argumento de Jin et al. Logo, para obtermos uma cota superior de $Q_k(G)$, para diferentes classes de grafos, devemos aplicar valores específicos para os parâmetros a , α_1 e β , mostrados na generalização do argumento.

5.1.2 Grafos livres de $K_{2,s+1}$

O problema “Qual é o valor máximo de $q_1(G)$ para um grafo G de ordem n , livre de $K_{t,s}$?” é a versão espectral do famoso problema de Zarankiewicz, um dos mais difíceis da matemática discreta moderna. Em [36], de Freitas et al. investigam esse tópico, e obtêm o seguinte resultado:

Lema 5.1. [36] *Seja $s \geq 1$, e G um grafo de ordem n , com $d_1 = n - 1$. Se G é um grafo livre de $K_{2,s+1}$, então*

$$q_1(G) \leq \frac{n + 2s + \sqrt{(n - 2s)^2 + 8s}}{2}.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, $G = K_1 \vee H$ e H é um grafo s -regular.

Usando a cota superior dada pelo **Lema 5.1** como parâmetro $\alpha_1, \beta = \frac{1}{2}$, e $a = 2$, obtemos o próximo resultado.

Teorema 5.3. *Seja $s \geq 1$, e G um grafo de ordem n com $d_1 = n - 1$. Se G é um grafo livre de $K_{2,s+1}$, então*

$$Q_k(G) \leq n + \sqrt{k \left(n^2 + \sum_{i=1}^n d_i^2 - 3 \sum_{i=1}^n d_i \right)}, \text{ para } k > \theta$$

e

$$Q_k(G) \leq \frac{n + 2s + \sqrt{(n - 2s)^2 + 8s}}{2} + \frac{\sqrt{2(k - 1) \left[n^2 + 4s(n - s - 1) + (n - 2s)\sqrt{(n - 2s)^2 + 8s} + 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 - 6 \sum_{i=1}^n d_i \right]}}{2},$$

$$\text{para } k \leq \theta, \text{ onde } \theta = \frac{4n^2 + 4 \sum_{i=1}^n d_i^2 - 12 \sum_{i=1}^n d_i}{\left(2s - n + \sqrt{(n - 2s)^2 + 8s} \right)^2}.$$

5.1.3 Grafos Livres de Ciclos Pares/Ímpares

O problema geral “Dado um grafo H , qual o valor máximo de $q_1(G)$ para um grafo G de ordem n que não possui H como subgrafo?” foi estudado para diversos casos. Em [35], de Freitas et al. estudaram os grafos que não possuem ciclos de tamanho 4 e 5, e duas conjecturas foram formuladas sobre o valor máximo de $q_1(G)$ para grafos sem ciclos de tamanho par/ímpar.

Yuan [98] estudou quão grande pode ser o valor de $q_1(G)$, se G é um grafo de ordem n que não possui um ciclo de tamanho ímpar e apresentou o seguinte resultado:

Lema 5.2. [98] *Seja $s \geq 3$, $n \geq 110s^2$ e G um grafo de ordem n . Se G não possui ciclo de tamanho $2s + 1$, então*

$$q_1(G) < q_1(K_s \vee (n - s)K_1) = \frac{n + 2s - 2 + \sqrt{(n - 2)^2 + 4s(n - s)}}{2},$$

a menos que $G = K_s \vee (n - s)K_1$.

Usando a cota superior dada pelo **Lema 5.2** como parâmetro $\alpha_1, \beta = \frac{1}{2}$, e $a = 2$, obtemos o próximo resultado.

Teorema 5.4. *Seja $s \geq 3$, $n \geq 110s^2$, e G um grafo de ordem n . Se G não possui ciclo de tamanho $2s + 1$, então*

$$Q_k(G) \leq n + \sqrt{k \left(n^2 + \sum_{i=1}^n d_i^2 - 3 \sum_{i=1}^n d_i \right)}, \text{ para } k > \theta$$

e

$$Q_k(G) \leq \frac{n + 2s - 2 + \sqrt{(n-2)^2 + 4s(n-s)}}{2} + \frac{\sqrt{2(k-1) \left[n^2 + 4s - 4 + (n-2s+2)\sqrt{(n-2)^2 + 4s(n-s)} + 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 - 6 \sum_{i=1}^n d_i \right]}}{2},$$

$$\text{para } k \leq \theta, \text{ onde } \theta = \frac{4n^2 + 4 \sum_{i=1}^n d_i^2 - 12 \sum_{i=1}^n d_i}{\left(2s - 2 - n + \sqrt{(n-2)^2 + 4s(n-s)} \right)^2}.$$

Em [79], Nikiforov e Yuan estudaram quão grande pode ser o valor de $q_1(G)$, se G é um grafo de ordem n que não possui um ciclo de tamanho par, e apresentaram o seguinte resultado:

Lema 5.3. [79] *Sejam $s \geq 2$, $n \geq 400s^2$ e G um grafo de ordem n . Se G não possui ciclo de tamanho $2s + 2$, então*

$$q_1(G) < q((K_s \vee (n - s)K_1) + e) \leq n + 2s - 2 - \frac{2s(s-1)}{n + 2s + 2},$$

a menos que $G = (K_s \vee (n - s)K_1) + e$.

Usando a cota superior dada pelo **Lema 5.3** como parâmetro $\alpha, \beta = \frac{1}{2}$, e $a = 2$, obtemos o próximo resultado.

Teorema 5.5. *Seja $s \geq 2$, $n \geq 400s^2$, e G um grafo de ordem n . Se G não possui ciclo de tamanho $2s + 2$, então*

$$Q_k(G) \leq n + \sqrt{k \left(n^2 + \sum_{i=1}^n d_i^2 - 3 \sum_{i=1}^n d_i \right)}, \text{ para } k > \theta$$

e

$$Q_k(G) \leq n + 2s - 2 - \frac{2s(s-1)}{n+2s+2} + \sqrt{(k-1) \left[\left(n + 2s - 2 - \frac{2s(s-1)}{n+2s+2} \right) \left(n - 2s + 2 + \frac{2s(s-1)}{n+2s+2} \right) + \sum_{i=1}^n d_i^2 - 3 \sum_{i=1}^n d_i \right]}$$

para $k \leq \theta$, onde $\theta = \frac{(n^2 + \sum_{i=1}^n d_i^2 - 3 \sum_{i=1}^n d_i) (n + 2s + 2)^2}{(2ns - 2n + 4s^2 - 4)^2}$.

5.2 Conjectura de Brouwer

Em 2010, Haemers, Mohammadian e Tayfeh-Rezaie [53], apresentaram a versão da Conjectura de Brouwer [13] para a soma dos k maiores L -autovalores.

Conjectura 5.1. Conjectura de Brouwer

Para um grafo G de ordem n , temos que:

$$L_k(G) = \sum_{i=1}^k \mu_i(G) \leq e(G) + \binom{k+1}{2}, \text{ para } k = 1, \dots, n.$$

Essa conjectura atraiu muitos pesquisadores. Haemers et al. [53] mostraram que a conjectura é verdadeira para $k = 2$, e conseguiram um cota superior para $L_k(T)$, onde T é uma árvore com n vértices,

$$L_k(T) \leq e(T) + 2k - 1 \leq e(T) + \binom{k+1}{2}, \text{ para } k = 1, \dots, n, \quad (5.4)$$

provando que a conjectura é válida para qualquer árvore T . Destacamos que o resultado (5.4) foi melhorado em [45], por meio da desigualdade

$$L_k(T) = \sum_{i=1}^k \mu_i(T) \leq e(T) + 2k - 1 - \frac{2k-2}{n}, \text{ para } k = 1, \dots, n.$$

A **Conjectura 5.1** já está provada para os seguintes casos:

(L1) $k = n - 1, n$;

(L2) Para $k = 1$ é bem conhecido que $\mu_1(G) \leq n$ (**Lema 3.3**);

- (L3) $k = 2$ [53];
- (L4) Árvores [53];
- (L5) Grafos threshold [53];
- (L6) Grafos unicíclicos e bicíclicos [40, 93];
- (L7) Grafos regulares [9, 70];
- (L8) Grafos split [9, 70];
- (L9) Cografos [9, 70];
- (L10) Grafos com no máximo 10 vértices [9, 70].

Motivados pela definição de $L_k(G)$ e pela **Conjectura de Brouwer**, Ashraf et al. [7] adaptaram a conjectura para a soma dos k maiores Q -autovalores de um grafo G .

Conjectura 5.2. Conjectura de Brouwer para os Q -autovalores

Para um grafo G de ordem n , temos que

$$Q_k(G) \leq e(G) + \binom{k+1}{2}, \text{ para } k = 1, \dots, n. \quad (5.5)$$

Para fornecer suporte para a **Conjectura 5.2**, destacamos que ela já está provada para os seguintes casos:

- (Q1) $k = 1, 2, n - 1, n$ [7];
- (Q2) Grafos com no máximo 10 vértices [7];
- (Q3) Grafos regulares [7];
- (Q4) Árvores [53];
- (Q5) Grafos conexos, para k suficientemente grande [94];
- (Q6) Grafos unicíclicos e bicíclicos [94];
- (Q7) Grafos tricíclicos, com $k \neq 3$ [94].

Ao longo desta seção, vamos estudar a **Conjectura 5.2** para os cografos e para os grafos threshold, apresentando resultados parciais.

5.2.1 Cografos: Resultados Parciais

Vamos apresentar uma contribuição original no estudo da **Conjectura 5.2** para a família dos Cografos.

Sabemos por [13] que cografos podem ser indutivamente caracterizados da seguinte forma:

- (1) K_1 é um cografo.
- (2) Se G é um cografo, então G^c é um cografo.
- (3) Se G e H são cografos sem vértices em comum, então $G \cup H$ é um cografo.

Dessa forma, podemos provar a **Conjectura 5.2** para os cografos de maneira indutiva. Para isso, basta demonstrar as próximas proposições.

Proposição 5.1. *O grafo K_1 satisfaz a **Conjectura 5.2**.*

Demonstração. Observe que $q_1(K_1) = 0 \leq 1 = 0 + 1 = e(K_1) + \binom{2}{2}$. Logo, a conjectura é válida para K_1 . □

Em 2014, Yang e You [94] provaram que se dois grafos satisfazem a **Conjectura 5.2**, então a união desses grafos também satisfaz.

Lema 5.4. [94] *Os grafos G e H satisfazem a desigualdade (5.5) para algum k se, e somente se, o grafo $G \cup H$ também satisfaz (5.5) para o mesmo k .*

Esse lema é de grande utilidade no estudo da **Conjectura 5.2** para grafos desconexos.

Resta mostrar que, se um grafo satisfaz a **Conjectura 5.2**, então seu complementar também satisfaz. No sentido de contribuir com esta investigação, apresentamos o teorema abaixo.

Teorema 5.6. *Se G é um grafo que satisfaz a **Conjectura 5.2**, então G^c satisfaz a desigualdade (5.5) para $k \leq \frac{n-5}{4}$.*

Demonstração. Pelo **Lema 3.28**, temos que $q_i(G^c) \leq n-2-q_{n+2-i}(G)$, para $2 \leq i \leq n$. Considere que

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n-k-1} q_i(G^c) &\leq (n-2)(n-k-2) - \sum_{i=k+3}^n q_i(G) + q_1(G^c) \\
&= (n-2)(n-k-2) - 2e(G) + \sum_{i=1}^{k+2} q_i(G) + q_1(G^c) \\
&= (n-2)(n-k-2) - e(G) - \binom{n}{2} + e(G^c) + \sum_{i=1}^{k+2} q_i(G) + q_1(G^c) \\
&\leq (n-2)(n-k-2) - \binom{n}{2} + e(G^c) + \binom{k+3}{2} + q_1(G^c)
\end{aligned}$$

Pelo **Lema 3.16**, temos que $q_1(G^c) \leq 2n-2$. Sendo assim:

$$\sum_{i=1}^{n-k-1} q_i(G^c) \leq (n-2)(n-k-2) - \binom{n}{2} + e(G^c) + \binom{k+3}{2} + 2n-2$$

Um simples cálculo mostra que G^c satisfaz a desigualdade (5.5) quando $k \leq \frac{n-5}{4}$. Com isso, concluímos a demonstração. \square

Destacamos que o item **(2)** da caracterização indutiva de cografos pode ser substituída pela seguinte condição:

(2') Se G e H são cografos sem vértices em comum, então $G \vee H$ é um cografo.

Para demonstrar isso perceba que $(G \vee H)^c = G^c \cup H^c$.

Sendo assim, mostrar que se dois grafos satisfazem a **Conjectura 5.2**, então a junção deles também satisfaz é suficiente para mostrar que a **Conjectura 5.2** é válida para cografos.

Considere os grafos G_1 e G_2 de ordem n_1 e n_2 , respectivamente. Usando o **Lema 3.29**, podemos investigar os Q -autovalores de $G_1 \vee G_2$ por meio dos polinômios característicos e coronais de $Q(G_1)$ e $Q(G_2)$.

Note que $(1 - \Gamma_{Q(G_1)}(x - n_2) \cdot \Gamma_{Q(G_2)}(x - n_1))$ fornece uma função racional. Logo, o conjunto dos Q -autovalores de $G_1 \vee G_2$ é composto por alguns dos Q -autovalores de G_1 e G_2 , e por algumas das raízes do numerador de $(1 - \Gamma_{Q(G_1)}(x - n_2) \cdot \Gamma_{Q(G_2)}(x - n_1))$. Levando em consideração essas observações apresentamos o próximo resultado.

Teorema 5.7. *Sejam G_1 e G_2 dois grafos que satisfazem a **Conjectura 5.2**, e t a quantidade dos maiores Q -autovalores de $G_1 \vee G_2$ que também são Q -autovalores ou de G_1 , ou de G_2 . Então $G_1 \vee G_2$ satisfaz a **Conjectura 5.2** para $1 \leq k \leq t$.*

Demonstração. Suponha que $k = k_1 + k_2$, onde k_j são os maiores Q -autovalores de G_j que estão entre os k maiores Q -autovalores de $G_1 \vee G_2$, para $j = 1, 2$.

Como G_j satisfaz a **Conjectura 5.2**, para $j = 1, 2$, temos

$$\sum_{i=1}^{k_1} q_i(G_1) \leq e(G_1) + \binom{k_1 + 1}{2} \quad e \quad \sum_{i=1}^{k_2} q_i(G_2) \leq e(G_2) + \binom{k_2 + 1}{2}.$$

Assim obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{k=k_1+k_2} q_i(G_1 \vee G_2) &\leq e(G_1) + e(G_2) + \binom{k_1 + 1}{2} + \binom{k_2 + 1}{2} \\ &\leq e(G_1 \vee G_2) + \frac{k_1^2 + k_2^2 + k_1 + k_2}{2} \\ &\leq e(G_1 \vee G_2) + \binom{k + 1}{2}. \end{aligned}$$

Com isso concluímos a demonstração. □

Observando que $(xI - M)^{-1} = \frac{\text{cof}(xI - M)}{p_M(x)}$, onde $\text{cof}(xI - M)$ é a matriz de cofatores de $xI - M$, e $p_M(x)$ é o polinômio característico de M , temos que $\Gamma_M(x) = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (\text{cof}(xI - M))_{ij}}{p_M(x)}$.

Por meio dessa observação, podemos utilizar o **Lema 3.29** para reescrever o polinômio característico da junção de dois grafos. Sejam

$$\alpha_1 = \sum_{i,j=1}^n (\text{cof}((x - n_1)I - Q(G_2)))_{ij} \quad \alpha_2 = \sum_{i,j=1}^n (\text{cof}((x - n_2)I - Q(G_1)))_{ij},$$

logo temos

$$\begin{aligned} p_{Q(G_1 \vee G_2)}(x) &= p_{Q(G_1)}(x - n_2) \cdot p_{Q(G_2)}(x - n_1) \cdot (1 - \Gamma_{Q(G_1)}(x - n_2) \cdot \Gamma_{Q(G_2)}(x - n_1)) \\ &= p_{Q(G_1)}(x - n_2) \cdot p_{Q(G_2)}(x - n_1) \cdot \left(1 - \frac{\alpha_1}{p_{Q(G_1)}(x - n_2)} \cdot \frac{\alpha_2}{p_{Q(G_2)}(x - n_1)}\right) \\ &= \frac{p_{Q(G_1)}(x - n_2)^2 \cdot p_{Q(G_2)}(x - n_1)^2 - \alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot p_{Q(G_2)}(x - n_1) \cdot p_{Q(G_1)}(x - n_2)}{p_{Q(G_1)}(x - n_2) \cdot p_{Q(G_2)}(x - n_1)} \\ &= p_{Q(G_1)}(x - n_2) \cdot p_{Q(G_2)}(x - n_1) - \alpha_1 \cdot \alpha_2 \end{aligned}$$

Utilizando essa observação, apresentamos o próximo resultado.

Teorema 5.8. *Sejam G_1 e G_2 dois grafos, e $q(x) = \alpha_1 \cdot \alpha_2$, onde α_1 e α_2 são como definidos anteriormente. Se r é um autovalor de $Q(G_1 \vee G_2)$, então*

- (1) *ou r é raiz de $p_{Q(G_1)}(x - n_2)$ e de $q(x)$,*
- (2) *ou r é raiz de $p_{Q(G_2)}(x - n_1)$ e de $q(x)$,*
- (3) *ou $p_{Q(G_1)}(r - n_2)p_{Q(G_2)}(r - n_1) = q(r)$.*

Para avançar nesse estudo é necessário entender o comportamento do coronal, principalmente das raízes de seu denominador, além disso, precisamos compreender como se comportam as raízes de $p_{Q(G_1)}(x - n_2) \cdot p_{Q(G_2)}(x - n_1) - \alpha_1 \cdot \alpha_2$.

5.2.2 Grafos Threshold: Resultados Parciais

Nessa subseção, vamos apresentar um estudo da **Conjectura 5.2** para a família dos grafos threshold.

Sabemos que os grafos threshold podem ser representados por sequências binárias, e são construídos por um processo iterativo que começa com um vértice isolado e, em cada passo, procedemos da seguinte forma:

- Se o próximo elemento da sequência binária é 0, então adicionamos um vértice isolado.
- Se o próximo elemento da sequência binária é 1, então adicionamos um vértice adjacente a todos os vértices anteriores.

Dessa forma, podemos mostrar a **Conjectura 5.2** para os grafos threshold de maneira indutiva.

Como o processo iterativo começa com um vértice isolado, é necessário mostrar que K_1 satisfaz a **Conjectura 5.2**, resultado dado pela **Proposição 5.1**.

A próxima proposição trata da adição de um 0 na sequência binária.

Proposição 5.2. *Seja G um grafo threshold de ordem n , representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r}$, que satisfaz a **Conjectura 5.2**. Então o grafo threshold G' , representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r} 0$, satisfaz a **Conjectura 5.2**.*

Demonstração. Observe que $G' = G \cup K_1$. O resultado segue pelo **Lema 5.4**. \square

Resta provar que, se um grafo threshold satisfaz a **Conjectura 5.2**, então o grafo threshold obtido ao adicionar 1 no final da sequência binária também satisfaz.

Primeiramente, vamos mostrar que basta considerar o caso em que $b_r = 1$, para isso, apresentamos o seguinte lema.

Lema 5.5. [94] *Sejam G_1 e G_2 grafos de ordem n_1 e n_2 , respectivamente. Se $Q_{k_i}(G_i) \leq e(G_i) + \binom{k_i + 1}{2}$, para $k_i = 1, 2, \dots, n_i$, e $i = 1, 2$. Então*

$$Q_k(G_1 \sim G_2) \leq e(G_1 \sim G_2) + \binom{k + 1}{2}, \text{ para } 1 \leq k \leq n_1 + n_2.$$

Em seguida, apresentamos um resultado da **Conjectura 5.2** para os grafos threshold com $b_r = 0$.

Teorema 5.9. *Suponha que, se um grafo threshold com último dígito igual a 1 satisfaz **Conjectura 5.2**, então o grafo threshold obtido ao adicionar 1 ao final de sua sequência binária também satisfaz a **Conjectura 5.2**.*

*Sejam G um grafo threshold desconexo ($b_r = 0$) de ordem n representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r}$ e G' o grafo threshold representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r} 1$. Se G satisfaz a **Conjectura 5.2**, então G' também satisfaz.*

Demonstração. Como $b_r = 0$, temos que $G = G_1 \cup_{a_r} K_1$, onde G_1 é o grafo threshold conexo representado pela sequência $b_1^{a_1} \dots b_{r-1}^{a_{r-1}}$. Pelo **Lema 5.4**, temos que G_1 satisfaz a **Conjectura 5.2**, segue pela hipótese, que o grafo $G_1 \vee K_1$, representado pela sequência $b_1^{a_1} \dots b_{r-1}^{a_{r-1}} 1$, também satisfaz.

Observe que, ao adicionar uma aresta entre o grafo K_1 e o último vértice do grafo $G_1 \vee K_1$, obtemos o grafo threshold G_2 , dado pela sequência $b_1^{a_1} \dots b_{r-1}^{a_{r-1}} 01$. Pelo **Lema 5.5**, temos que G_2 satisfaz a **Conjectura 5.2**. Repetindo esse processo $a_r - 1$ vezes, concluímos que G' satisfaz a **Conjectura 5.2**. \square

Pelo teorema acima, resta considerar os grafos threshold conexos ($b_r = 1$). Para isso, apresentamos algumas notações.

Sejam G o grafo threshold de ordem n representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r}$ e G' o grafo threshold representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r} 1$. Pelo **Lema 3.31**, sabemos que os Q -autovalores de G ou são da forma $p_i - b_i$, ou são os autovalores da matriz $C(G)$. Na próxima observação, tratamos dos Q -autovalores de G'

Observação 5.1. *Se $p_i - b_i$ é Q -autovalor de G com multiplicidade pelo menos $a_i - 1$, então $p_i - b_i + 1$ é Q -autovalor de G' com multiplicidade pelo menos $a_i - 1$,*

visto que $G' = G \vee K_1$. Os demais Q -autovalores de G' são os autovalores da matriz $C(G')$.

Dado $k \in \mathbb{N}$, denotamos por $q'_1(G) \geq \dots \geq q'_{k'}(G)$ os Q -autovalores de G da forma $p_i - b_i$ que estão entre os k maiores Q -autovalores de G , e por $q^*_1(G) \geq \dots \geq q^*_{k^*}(G)$ os Q -autovalores de G provenientes de $C(G)$ que estão entre os k maiores Q -autovalores de G , onde $k' + k^* = k$. As mesmas notações podem ser usada para G' .

No próximo lema, comparamos os Q -autovalores $q^*_1(G) \geq \dots \geq q^*_r(G)$ e $q^*_1(G') \geq \dots \geq q^*_r(G')$.

Lema 5.6. *Seja G um grafo threshold conexo ($b_r = 1$) de ordem n representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r}$ e G' o grafo threshold representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r} 1$. Considerando as notações anteriores, temos que*

$$q^*_i(G') - q^*_i(G) \leq 1, \text{ para } 2 \leq i \leq r.$$

Demonstração. Pelo **Lema 3.33**, temos que $q^*_1(G) = q_1(G)$ e $q^*_1(G') = q_1(G')$.

Se $a_r(G) - 1 = 0$, então $q_2(G) = q^*_2(G)$, pelo **Lema 3.33**. Logo $a_r(G') - 1 = 1$, e segue que $q_2(G') = n - 1$ e $q_3(G') = q^*_2(G')$, pelo **Lema 3.33**.

Se $a_r(G) - 1 > 0$, então $q_2(G) = \dots = q_{a_r}(G) = n - 2$ e $q_{a_r+1}(G) = q^*_2(G)$, pelo **Lema 3.33**. Logo $a_r(G') - 1 > 1$, e segue que $q_2(G') = \dots = q_{a_r+1}(G') = n - 1$ e $q_{a_r+2}(G') = q^*_2(G')$, pelo **Lema 3.33**.

Usando a **Observação 5.1** temos que, se $q^*_i(G') = q_j(G')$, para algum $j \in \{1, \dots, n\}$, então $q^*_i(G) = q_{j-1}(G)$, para $2 \leq i \leq r$. Aplicando o **Lema 3.32** obtemos $q^*_i(G') - q^*_i(G) = q_j(G') - q_{j-1}(G) \leq 1$, para $2 \leq i \leq r$. \square

Em seguida, apresentamos uma solução parcial da **Conjectura 5.2** para os grafos threshold.

Teorema 5.10. *Sejam G um grafo threshold conexo ($b_r = 1$) de ordem n representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r}$ e G' o grafo threshold representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r} 1$. Se G satisfaz a **Conjectura 5.2** e $q_1^*(G') - q_1^*(G) \leq 3$, então G' satisfaz a **Conjectura 5.2**.*

Demonstração. Sabemos que o resultado está provado para $k = 1, 2, n, n + 1$, sendo assim, suponha que $3 \leq k \leq n - 1$.

Como G é conexo temos que $a_r(G') = a_r(G) + 1 \geq 2$, logo G' possui um Q -autovalor da forma $p_r - b_r + 1$ a mais do que G , obviamente, este Q -autovalor é $n - 1$. Usando a **Observação 5.1**, temos que

$$\begin{aligned} Q_k(G') &= q_1'(G') + \dots + q_{k'}'(G') + q_1^*(G') + \dots + q_{k^*}^*(G') \\ &= (n - 1) + (k' - 1) + q_1'(G) + \dots + q_{k'}'(G) + q_1^*(G') + \dots + q_{k^*}^*(G') \end{aligned}$$

Usando o **Lema 5.6** e as hipóteses, obtemos

$$\begin{aligned} Q_k(G') &= (n - 1) + (k' - 1) + q_1'(G) + \dots + q_{k'}'(G) + q_1^*(G') + \dots + q_{k^*}^*(G') \\ &\leq q_1'(G) + \dots + q_{k'}'(G) + q_1^*(G) + \dots + q_{k^*}^*(G) + (n - 1) + (k' - 1) + (k^* + 2) \\ &\leq e(G) + \binom{k}{2} + n + k = e(G \vee K_1) + \binom{k + 1}{2}. \end{aligned}$$

Como $G' = G \vee K_1$, temos que o resultado segue. \square

Observamos que a hipótese $q_1^*(G') - q_1^*(G) \leq 3$ não é válida para todos os grafos, no entanto, acreditamos que seja válida para grande maioria. Baseados nos testes realizados, apresentamos uma conjectura cuja validade garante que a **Conjectura 5.2** também é válida para grafos threshold.

Conjectura 5.3. *Sejam G um grafo threshold conexo ($b_r = 1$) de ordem n representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r}$ e G' o grafo threshold representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r} 1$. Então, temos que $q_1^*(G') + q_2^*(G') - q_1^*(G) - q_2^*(G) \leq 4$.*

6 CONCLUSÕES

Nesta tese de doutorado, motivados pelos trabalhos de V. Nikiforov [77, 75], trabalhamos com temas da teoria espectral de grafos vinculados ao problema de Hong, com ênfase no problema de Nordhaus-Gaddum e no estudo de cotas superiores para a soma dos k maiores Q -autovalores de um grafo.

Primeiramente, estudamos cotas para os autovalores associados com diferentes representações matriciais de grafos e, usando isso, obtemos resultados para o problema de Nordhaus-Gaddum de alguns desses parâmetros espectrais. Além disso, desenvolvemos resultados parciais para a adaptação da Conjectura de Brouwer para a matriz Laplaciana sem sinal.

Nesta capítulo, tecemos comentários sobre os resultados obtidos, e apresentamos alguns dos problemas que ainda podem ser investigados.

6.1 Sobre o problema de Nordhaus-Gaddum

No Capítulo 4, motivados pelas conjecturas de M. Zhai et al. [99] e de Ashraf e Tayfeh-Rezaie [8], estudamos o problema de Nordhaus-Gaddum para o maior e segundo maior L -autovalores.

Para o maior L -autovalor, obtemos uma melhoria do resultado obtido por Chen e Das [18]. No entanto, não provamos que a **Conjectura 4.1** é válida em todos os casos. Devido à relevância desse parâmetro dentro da teoria espectral de grafos pretendemos continuar investigando esse problema.

Obtemos uma solução do problema de Nordhaus-Gaddum para o segundo maior L -autovalor. Nesse resultado, conseguimos garantir que a cota inferior obtida é a melhor possível, e caracterizamos todos os grafos que satisfazem a igual-

dade. No entanto, a cota superior obtida $(2n - 1)$ não é a melhor possível. Sendo assim, apresentamos uma conjectura para a cota superior:

Conjectura 4.3. *Seja G um grafo de ordem $n \geq 2$. Então,*

$$\mu_2(G) + \mu_2(G^c) \leq 2n - 2.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, G , ou G^c , é igual a $K_2 \vee H$, onde H é um grafo desconexo de ordem $n - 2$ com pelo menos 3 componentes conexas.

Demonstramos essa conjectura para grafos com $d(G) \neq 2$ e $d(G^c) \neq 2$, grafos bipartidos, grafos desconexos e grafos regulares, além disso, caracterizamos os grafos que satisfazem a igualdade da cota.

Observe que, para demonstrar a conjectura resta considerar os grafos com $d(G) = 2$. Nesse sentido, realizamos progresso para alguns casos particulares. No entanto, o problema é desafiador e constitui um passo importante para conclusão do resultado.

Motivados pelas conjecturas de M. Aouchiche e P. Hansen [4], obtemos uma solução do problema de Nordhaus-Gaddum para o segundo maior Q -autovalor. Além disso, apresentamos grafos que satisfazem as igualdades das cotas e com isso garantimos que esses resultados são os melhores possíveis para o caso geral.

Destacamos que é problemático encontrar grafos de ordem $n \geq 5$ que satisfazem a igualdade da cota superior, sendo assim, é provável que essa cota possa ser melhorada. No entanto, existem grafos que se aproximam da cota superior obtida e, portanto, realizar essa melhoria pode ser razoavelmente complicado.

Motivados pelas conjecturas de D. Cvetković et al. [22], obtemos uma solução do problema de Nordhaus-Gaddum para a soma do menor Q -autovalor. O resultado obtido é o melhor possível, visto que caracterizamos todos os grafos que satisfazem a igualdade da cota superior e encontramos o grafo que assume o valor mínimo de $q_n(G) + q_n(G^c)$.

Por fim, observamos que o problema de Nordhaus-Gaddum para parâmetros espectrais de digrafos foi pouco discutido [6, 56, 17]. No entanto, existem muitas cotas para o maior A -autovalor de um digrafo [15, 100, 12, 47], visto que esse é um parâmetro amplamente estudado. Como muitas dessas cotas estão relacionadas com a sequência dos graus do digrafo, acreditamos que seja viável estender esse estudo para obter uma solução do problema de Nordhaus-Gaddum.

6.2 Sobre cotas para $q_1 + \dots + q_k$

Inspirados pelos trabalhos de Mohar [73] e Jin et al. [62], construímos cotas superiores para a soma dos k maiores Q -autovalores.

Utilizando a técnica apresentada na **Seção 5.1**, podemos criar uma cota superior para $Q_k(G)$ de qualquer classe que possua uma cota superior específica para q_1 . Para mais classes que possuem tal cota veja [33, 76, 96].

Considere o grafo $G = K_{1,39999}$ e $s = 10$. Note que G é um grafo que não contém ciclos de tamanho $2s + 1$ ou $2s + 2$, nem o grafo $K_{2,s+2}$, como subgrafos. A tabela a seguir exhibe uma comparação entre as cotas apresentadas nesse trabalho.

	$k = 10$	$k = 10000$	$k = 20000$	$k = 30000$	$k = 40000$
Jin et al.	218877,61	5696606,76	8039650,00	9837530,31	11353213,52
Livre de $K_{2,11}$	209698,20	5696323,92	8039450,00	9837367,01	11353072,11
Livre de C_{21}	209716,18	5696341,63	8039467,59	9837384,51	11353089,54
Livre de C_{22}	209716,18	5696421,63	8039497,59	9837386,51	11353093,54
$Q_k(K_{1,39999})$	80008	89997	99997	109997	119997

Tabela 6.1 Cotas para $K_{1,39999}$.

Observe que as cotas obtidas são levemente melhores do que a obtida por Jin et al. Isso ocorre devido ao uso de uma cota melhor para o maior Q -autovalor, e pela escolha dos parâmetros apresentados na generalização.

No entanto, como $\text{Spec}(Q(K_{1,39999})) = \{79998, 1^{39999}\}$, temos que todas as cotas para a soma dos k maiores Q -autovalores não estão próximas.

Destacamos que a maior parte da soma dos Q -autovalores se concentra no maior Q -autovalor, visto que ele é muito maior que os outros e apresenta grande variação ($0 \leq q_1 \leq 2n - 2$). Esse comportamento acontece em todos os grafos, e representa um grande problema para elaboração de boas cotas, tanto para o maior Q -autovalor, quanto para soma dos Q -autovalores. Além disso, essa patologia também dificulta o tratamento da Conjectura de Brouwer para a matriz Laplaciana sem sinal.

Investigar se existem grafos que se aproximam das cotas obtidas no trabalho é um tópico que pode ser desenvolvido. Além disso, podemos investigar qual a melhor escolha para os parâmetros a e β da generalização apresentada na **Subseção 5.1.1**, visando obter cotas mais justas.

Além disso, podemos pesquisar novas técnicas para o desenvolvimento de cotas, que possam depender de outros parâmetros, e que sejam mais justas do que as apresentadas.

6.3 Sobre a conjectura de Brouwer

Durante o Capítulo 5, apresentamos a extensão da conjectura de Brouwer para a matriz Laplaciana sem sinal, proposta por Ashraf et al. [7], e os casos em que ela é válida.

Motivados pelos trabalhos de Haemers [53] e Mayank [70], investigamos a validade da adaptação da conjectura de Brouwer para a classe dos cografos e dos grafos threshold e obtivemos resultados parciais.

O resultado obtido para a classe dos cografos lida com, aproximadamente, $\frac{1}{4}$ dos valores de k , ou seja, ainda resta grande parte do problema para

ser estudado. Sendo assim, investigar técnicas para solucionar o problema é uma questão interessante.

Para a classe dos grafos threshold resta provar que, se um grafo threshold satisfaz a **Conjectura 5.2**, então o grafo threshold obtido ao adicionar 1 no final da sequência binária também satisfaz. Obtemos uma solução parcial para esse caso, no entanto, sabemos que ela não é válida para todos os grafos. Por fim, apresentamos a seguinte conjectura:

Conjectura 5.3. *Sejam G um grafo threshold conexo ($b_r = 1$) de ordem n representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r}$ e G' o grafo threshold representado pela sequência binária $b_1^{a_1} \dots b_r^{a_r} 1$. Então, temos que $q_1^*(G') + q_2^*(G') - q_1^*(G) - q_2^*(G) \leq 4$.*

Se provada, essa conjectura garante que os grafos threshold satisfazem a extensão da conjectura de Brouwer, e a demonstração segue pelo mesmo argumento utilizado no **Teorema 5.10**.

Além das famílias citadas, pretendemos estudar a extensão da conjectura de Brouwer para os grafos que possuem Q -espectro inteiro [34] e L -espectro inteiro [90], e para operações que fornecem uma variação inteira do L -espectro [64, 86].

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ABREU, N., DEL-VECCHIO, R., TREVISAN, V., AND VINAGRE, C. Teoria espectral de grafos - uma introdução. *Notas do IIIº Colóquio de Matemática da Região Sul, SBM* (2014).
- [2] ABREU, N., DEL-VECCHIO, R., VINAGRE, C., AND STEVANOVIC, D. Introdução à teoria espectral de grafos com aplicações. *Notas em Matemática Aplicada* 27 (2007).
- [3] AMIN, A., AND HAKIMI, S. Upper bounds on the order of a clique of a graph. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 22, 4 (1972), 569–573.
- [4] AOUCHICHE, M., AND HANSEN, P. A survey of Nordhaus–Gaddum type relations. *Discrete Applied Mathematics* 161, 4-5 (2013), 466–546.
- [5] APPEL, K. I., AND HAKEN, W. *Every planar map is four colorable*, vol. 98. American mathematical society Providence, 1989.
- [6] ARAUJO-PARDO, G., MONTELLANO-BALLESTEROS, J. J., OLSEN, M., AND RUBIO-MONTIEL, C. The diachromatic number of digraphs. *arXiv preprint arXiv:1712.00495* (2017).
- [7] ASHRAF, F., OMIDI, G., AND TAYFEH-REZAIE, B. On the sum of signless Laplacian eigenvalues of a graph. *Linear Algebra and its Applications* 438, 11 (2013), 4539–4546.
- [8] ASHRAF, F., AND TAYFEH-REZAIE, B. Nordhaus–Gaddum type inequalities for Laplacian and signless Laplacian eigenvalues. *arXiv preprint arXiv:1402.2995* (2014).
- [9] BERNDSEN, J. Three problems in algebraic combinatorics. *Master’s thesis, Eindhoven University of Technology* (2012).

- [10] BIGGS, N. *Algebraic graph theory*. Cambridge university press, 1993.
- [11] BONDY, J. A., AND MURTY, U. Graph theory, volume 244 of. *Graduate texts in mathematics* (2008).
- [12] BOZKURT, B., AND MADEN, A. Improved bounds for the spectral radius of digraphs. *Hacettepe Journal of Mathematics and Statistics* 39 (01 2010).
- [13] BROUWER, A. E., AND HAEMERS, W. H. *Spectra of graphs*. Springer Science & Business Media, 2011.
- [14] BRUALDI, R. A., AND HOFFMAN, A. J. On the spectral radius of $(0, 1)$ -matrices. *Linear Algebra and its Applications* 65 (1985), 133–146.
- [15] BUTLER, B., AND SIEGEL, P. Generalized sharp bounds on the spectral radius of digraphs.
- [16] CARDOSO, D. M., CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., AND SIMIĆ, S. K. A sharp lower bound for the least eigenvalue of the signless Laplacian of a non-bipartite graph. *Linear Algebra and its Applications* 429, 11-12 (2008), 2770–2780.
- [17] CHARTRAND, G., LESNIAK, L., AND ZHANG, P. *Graphs & digraphs*. Chapman and Hall/CRC, 2010.
- [18] CHEN, X., AND DAS, K. C. Some results on the Laplacian spread of a graph. *Linear Algebra and its Applications* 505 (2016), 245–260.
- [19] CSIKVÁRI, P. On a conjecture of V. Nikiforov. *Discrete Mathematics* 309, 13 (2009), 4522–4526.
- [20] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., AND SIMIĆ, S. *An Introduction to the Theory of Graph Spectra*. London Mathematical Society Student Texts. Cambridge University Press, 2009.

- [21] CVETKOVIĆ, D. Signless Laplacians and line graphs. *Bulletin (Académie serbe des sciences et des arts. Classe des sciences mathématiques et naturelles. Sciences mathématiques)* (2005), 85–92.
- [22] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., AND SIMIĆ, S. K. Eigenvalue bounds for the signless Laplacian. *Publ. Inst. Math.(Beograd)* 81, 95 (2007), 11–27.
- [23] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., AND SIMIĆ, S. K. Signless Laplacians of finite graphs. *Linear Algebra and its applications* 423, 1 (2007), 155–171.
- [24] CVETKOVIĆ, D., AND SIMIĆ, S. K. Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian, i. *Publ. Inst. Math.(Beograd)* 85, 99 (2009), 19–33.
- [25] CVETKOVIĆ, D., AND SIMIĆ, S. K. Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian, ii. *Linear Algebra and its Applications* 432, 9 (2010), 2257–2272.
- [26] CVETKOVIĆ, D., AND SIMIĆ, S. K. Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian, iii. *Applicable Analysis and Discrete Mathematics* 4, 1 (2010), 156–166.
- [27] CVETKOVIĆ, D. M. *Grafovi i Njihovi Spektri... Graphs and Their Spectra*. 1971.
- [28] CVETKOVIĆ, D. M., DOOB, M., AND SACHS, H. *Spectra of graphs: theory and application*, vol. 87. Academic Pr, 1980.
- [29] DAS, K. C. An improved upper bound for Laplacian graph eigenvalues. *Linear algebra and its applications* 368 (2003), 269–278.
- [30] DAS, K. C. A sharp upper bound for the number of spanning trees of a graph. *Graphs and Combinatorics* 23, 6 (2007), 625–632.

- [31] DAS, K. C. On conjectures involving second largest signless Laplacian eigenvalue of graphs. *Linear Algebra and its Applications* 432, 11 (2010), 3018–3029.
- [32] DAS, K. C. Proof of conjecture involving the second largest signless Laplacian eigenvalue and the index of graphs. *Linear Algebra and its Applications* 435, 10 (2011), 2420–2424.
- [33] DE ABREU, N. M. M., AND NIKIFOROV, V. Maxima of the Q-index: graphs with bounded clique number. *arXiv preprint arXiv:1308.1653* (2013).
- [34] DE FREITAS, M. A. A., DE ABREU, N. M., DEL-VECCHIO, R. R., AND JURKIEWICZ, S. Infinite families of Q-integral graphs. *Linear Algebra and its Applications* 432, 9 (2010), 2352–2360.
- [35] DE FREITAS, M. A. A., NIKIFOROV, V., AND PATUZZI, L. Maxima of the Q-index: forbidden 4-cycle and 5-cycle. *arXiv preprint arXiv:1308.1652* (2013).
- [36] DE FREITAS, M. A. A., NIKIFOROV, V., AND PATUZZI, L. Maxima of the Q-index: Graphs with no $K_{s,t}$. *Linear Algebra and its Applications* 496 (2016), 381–391.
- [37] DE LIMA, L. S., AND NIKIFOROV, V. On the second largest eigenvalue of the signless Laplacian. *Linear Algebra and its Applications* 438, 3 (2013), 1215–1222.
- [38] DE LIMA, L. S., OLIVEIRA, C. S., DE ABREU, N. M. M., AND NIKIFOROV, V. The smallest eigenvalue of the signless Laplacian. *Linear Algebra and its Applications* 435, 10 (2011), 2570–2584.
- [39] DIESTEL, R. *Graduate texts in mathematics*. Springer-Verlag New York, Incorporated, 2000.

- [40] DU, Z., AND ZHOU, B. Upper bounds for the sum of Laplacian eigenvalues of graphs. *Linear Algebra and its Applications* 436, 9 (2012), 3672–3683.
- [41] FAN, Y.-Z., AND TAN, Y.-Y. The least eigenvalue of signless Laplacian of non-bipartite graphs with given domination number. *Discrete Mathematics* 334 (2014), 20–25.
- [42] FAN, Y.-Z., WANG, Y., AND GUO, H. The least eigenvalues of the signless Laplacian of non-bipartite graphs with pendant vertices. *Discrete Mathematics* 313, 7 (2013), 903–909.
- [43] FISK, S. A very short proof of Cauchy’s interlace theorem for eigenvalues of Hermitian matrices. *arXiv preprint math/0502408* (2005).
- [44] FRANKLIN, J. N. *Matrix theory*. Courier Corporation, 2012.
- [45] FRITSCHER, E., HOPPEN, C., ROCHA, I., AND TREVISAN, V. On the sum of the Laplacian eigenvalues of a tree. *Linear Algebra and its Applications* 435, 2 (2011), 371–399.
- [46] FRITSCHER, E., AND TREVISAN, V. Exploring symmetries to decompose matrices and graphs preserving the spectrum. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications* 37, 1 (2016), 260–289.
- [47] GÜNGÖR, A. D., AND DAS, K. C. Improved upper and lower bounds for the spectral radius of digraphs. *Applied Mathematics and Computation* 216, 3 (2010), 791 – 799.
- [48] GRIJÓ, R., DE LIMA, L., OLIVEIRA, C., PORTO, G., AND TREVISAN, V. Nordhaus–Gaddum type inequalities for the two largest Laplacian eigenvalues. *Discrete Applied Mathematics Preprint* (2019). <https://doi.org/10.1016/j.dam.2019.04.005>.

- [49] GRONE, R., AND MERRIS, R. Ordering trees by algebraic connectivity. *Graphs and Combinatorics* 6, 3 (1990), 229–237.
- [50] GUO, S.-G., AND ZHANG, R. On the least signless Laplacian eigenvalue of a non-bipartite connected graph with fixed maximum degree. *Journal of inequalities and applications* 2017, 1 (2017), 120.
- [51] GUTMAN, I. The energy of a graph: old and new results. *Algebraic combinatorics and applications* (2001), 196–211.
- [52] GUTMAN, I., AND POLANSKY, O. E. *Mathematical concepts in organic chemistry*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [53] HAEMERS, W., MOHAMMADIAN, A., AND TAYFEH-REZAIE, B. On the sum of Laplacian eigenvalues of graphs. *Linear Algebra and its Applications* 432, 9 (2010), 2214–2221.
- [54] HAEMERS, W. H. Strongly regular graphs with maximal energy. *Linear Algebra and its Applications* 429, 11-12 (2008), 2719–2723.
- [55] HAEMERS, W. H., AND SPENCE, E. Enumeration of cospectral graphs. *European Journal of Combinatorics* 25, 2 (2004), 199–211.
- [56] HAO, G., CHEN, X., AND VOLKMANN, L. Double roman domination in digraphs. *Bulletin of the Malaysian Mathematical Sciences Society* (11 2017).
- [57] HELMBERG, C., AND TREVISAN, V. Spectral properties of the signless Laplacian of threshold graphs. *Artigo em preparação*.
- [58] HONG, Y. Bounds of eigenvalues of graphs. *Discrete Mathematics* 123, 1-3 (1993), 65–74.
- [59] HORN, R. A., AND JOHNSON, C. R. *Matrix analysis*. Cambridge university press, 2012.

- [60] HÜCKEL, E. Quantentheoretische beiträge zum benzolproblem. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 70, 3 (1931), 204–286.
- [61] HWANG, S.-G. Cauchy’s interlace theorem for eigenvalues of Hermitian matrices. *American Mathematical Monthly* (2004), 157–159.
- [62] JIN, G.-Q., ZUO, L.-C., YAN, T.-T., AND LIU, Z.-K. An upper bound on the sum of the k largest eigenvalues of the signless Laplacian matrix of a graph. *Journal of Shandong University (Natural Science)* 8 (2013), 001.
- [63] KIRCHHOFF, G. Ueber die auflösung der gleichungen, auf welche man bei der untersuchung der linearen vertheilung galvanischer ströme geführt wird. *Annalen der Physik* 148, 12 (1847), 497–508.
- [64] KIRKLAND, S. A characterization of spectral integral variation in two places for Laplacian matrices. *Linear and Multilinear Algebra* 52, 2 (2004), 79–98.
- [65] LI, X., SHI, Y., AND GUTMAN, I. *Graph energy*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [66] LIMA, E. L. *Análise real*, vol. 12. Impa, 2004.
- [67] LIU, R., WAN, H., YUAN, J., AND JIA, H. The least eigenvalue of the signless Laplacian of non-bipartite unicyclic graphs with k pendant vertices. *Electronic Journal of Linear Algebra* 26, 1 (2013), 22.
- [68] LIU, X., AND LU, P. Signless Laplacian spectral characterization of some joins. *Electronic Journal of Linear Algebra* 30, 1 (2015), 30.
- [69] MAHADEV, N. V., AND PELED, U. N. *Threshold graphs and related topics*, vol. 56. Elsevier, 1995.

- [70] MAYANK. *On variants of the Grone-Merris conjecture*. PhD thesis, Master's thesis, Eindhoven University of Technology, 2010.
- [71] MERRIS, R. Laplacian graph eigenvectors. *Linear algebra and its applications* 278, 1-3 (1998), 221–236.
- [72] MOHAMMADIAN, A., AND TAYFEH-REZAIE, B. Graphs with four distinct Laplacian eigenvalues. *Journal of Algebraic Combinatorics* 34, 4 (2011), 671–682.
- [73] MOHAR, B. On the sum of k largest eigenvalues of graphs and symmetric matrices. *Journal of Combinatorial Theory, Series B* 99, 2 (2009), 306 – 313.
- [74] MOHAR, B., ALAVI, Y., CHARTRAND, G., AND OELLERMANN, O. The Laplacian spectrum of graphs. *Graph theory, combinatorics, and applications* 2, 871-898 (1991), 12.
- [75] NIKIFOROV, V. Eigenvalue problems of Nordhaus–Gaddum type. *Discrete Mathematics* 307, 6 (2007), 774–780.
- [76] NIKIFOROV, V. Maxima of the Q -index: degenerate graphs. *arXiv preprint arXiv:1309.4837* (2013).
- [77] NIKIFOROV, V. Extrema of graph eigenvalues. *Linear Algebra and its Applications* 482 (2015), 158–190.
- [78] NIKIFOROV, V., AND YUAN, X. More eigenvalue problems of Nordhaus–Gaddum type. *Linear Algebra and its Applications* 451 (2014), 231–245.
- [79] NIKIFOROV, V., AND YUAN, X. Maxima of the Q -index: forbidden even cycles. *Linear Algebra and its Applications* 471 (2015), 636–653.
- [80] NORDHAUS, E. A., AND GADDUM, J. W. On complementary graphs. *Mathematical Association of America* 63, 3 (1956), 175–177.

- [81] NOSAL, E. Eigenvalues of graphs. Master's thesis, Calgary, 1970.
- [82] PARLETT, B. N. *The symmetric eigenvalue problem*, vol. 7. SIAM, 1980.
- [83] PEMMARAJU, S., AND SKIENA, S. *Computational Discrete Mathematics: Combinatorics and Graph Theory with Mathematica®*. Cambridge university press, 2003.
- [84] PORTO, G., AND TREVISAN, V. Nordhaus-Gaddum inequalities for q_2 . *Artigo submetido para publicação no Linear Algebra and its Applications em 2019*.
- [85] PORTO, G., AND TREVISAN, V. Nordhaus-Gaddum inequalities for q_n . *Artigo em preparação*.
- [86] SO, W. Rank one perturbation and its application to the Laplacian spectrum of a graph. *Linear and Multilinear Algebra* 46, 3 (1999), 193–198.
- [87] STANLEY, R. P. A bound on the spectral radius of graphs with e edges. *Linear Algebra and its Applications* 87 (1987), 267–269.
- [88] STEVANOVIC, D. *Spectral radius of graphs*. Academic Press, 2014.
- [89] TERPAI, T. Proof of a conjecture of V. Nikiforov. *Combinatorica* 31, 6 (2011), 739–754.
- [90] VAN DAM, E. R., AND HAEMERS, W. H. Which graphs are determined by their spectrum? *Linear Algebra and its applications* 373 (2003), 241–272.
- [91] VAN DEN HEUVEL, J. Hamilton cycles and eigenvalues of graphs. *Linear algebra and its applications* 226 (1995), 723–730.

- [92] WANG, H., KOUIJ, R., AND VAN MIEGHEM, P. Graphs with given diameter maximizing the algebraic connectivity. *Linear Algebra and its Applications* 433, 11-12 (2010), 1889–1908.
- [93] WANG, S., HUANG, Y., AND LIU, B. On a conjecture for the sum of Laplacian eigenvalues. *Mathematical and Computer Modelling* 56, 3 (2012), 60–68.
- [94] YANG, J., AND YOU, L. On a conjecture for the signless Laplacian eigenvalues. *Linear Algebra and its Applications* 446 (2014), 115–132.
- [95] YOU, Z., AND LIU, B. The Laplacian spread of graphs. *Czechoslovak mathematical journal* 62, 1 (2012), 155–168.
- [96] YU, G., GUO, S.-G., AND WU, Y. Maxima of the Q-index for outer-planar graphs. *Linear and Multilinear Algebra* 63, 9 (2015), 1837–1848.
- [97] YUAN, H. A bound on the spectral radius of graphs. *Linear Algebra and its Applications* 108 (1988), 135–139.
- [98] YUAN, X. Maxima of the Q-index: forbidden odd cycles. *Linear Algebra and its Applications* 458 (2014), 207–216.
- [99] ZHAI, M., SHU, J., AND HONG, Y. On the Laplacian spread of graphs. *Applied Mathematics Letters* 24, 12 (2011), 2097–2101.
- [100] ZHANG, X.-D., AND LI, J. Spectral radius of non-negative matrices and digraphs. *Acta Mathematica Sinica, English Series* 18 (04 2002), 293–300.
- [101] ZHOU, B. On sum of powers of the Laplacian eigenvalues of graphs. *Linear Algebra and its Applications* 429, 8-9 (2008), 2239–2246.
- [102] ZUO, M., GUO, Y., TIAN, F., AND LU, L. The least eigenvalues of the signless Laplacian of non-bipartite graphs with fixed diameter. *Inter-*

national Journal of Mathematical Engineering and Science 2, 6 (2014),
1–12.

ÍNDICE

- Árvore, 22
 - double broom, 22
 - estrela, 22
 - floresta, 22
- Adição
 - aresta, 14
 - conjunto de arestas, 14
- Aresta, 9
 - adição, 14
 - adição de um conjunto, 14
 - deleção, 13
 - deleção de um conjunto, 13
 - incidente, 10
 - pontos finais, 10
 - rotação, 14
- Autovalor, 25
 - A -autovalor, 30
 - L -autovalor, 32
 - Q -autovalor, 36
 - multiplicidade, 26
- Autovetor, 25
- Cadeia, 20
 - fechada, 20
- Caminho, 20
 - comprimento, 20
- Ciclo, 20
 - comprimento, 20
- Clique, 18
- Cografo, 22
- Componente conexa, 21
- Conexão por uma aresta, 16
- Conjectura
 - de Brouwer, 73
 - de Brouwer para Q , 74
- Deleção
 - aresta, 13
 - conjunto de arestas, 13
- Desigualdade
 - de Cauchy-Schwarz, 28
 - de Weyl, 27
 - tipo Nordhaus-Gaddum, 5, 43
- Distância entre vértices, 20
- Espectro, 26
 - A -espectro, 30
 - L -espectro, 32
 - Q -espectro, 36
- Estrela, 22
- Floresta, 22
- Grafo, 9
 - $G(n, d)$, 20
 - $G_d(n_1, n_2, \dots, n_d, n_{d+1})$, 18

G_{P_3} , 63
 G_{S_3} , 63
 $\mathcal{G}(r, s)$, 19
 árvore, 22
 acíclico, 21
 aresta, 9
 bipartido, 19
 bipartido completo, 19
 circunferência, 20
 clique, 18
 cografo, 22
 complementar, 11
 completo, 18
 componente conexa, 21
 conexo, 21
 desconexo, 21
 diâmetro, 20
 estrela, 22
 floresta, 22
 k-regular, 18
 livre, 13
 operações, 13
 ordem, 10
 tamanho, 10
 threshold, 23
 unicíclico, 21
 vértice, 9
 vazio, 18

Junção, 15

Matriz, 24

- u -complemento, 25
- identidade, 24
- autovalor, 25
- autovetor, 25
- coronal, 25
- de adjacência, 29
- diagonal dos graus, 32
- espectro, 26
- Laplaciana, 31
- Laplaciana sem sinal, 36
- norma ℓ_2 , 25
- polinômio característico, 25
- positiva semidefinida, 27
- real simétrica, 24

Nordhaus-Gaddum, 4, 43

- desigualdade, 43
- problema, 43

Operações entre grafos, 13

- adição de aresta, 14
- conexão por uma aresta, 16
- deleção de aresta, 13
- identificação de vértices, 17
- junção, 15
- rotação de aresta, 14
- união, 15

Polinômio característico, 25

Representação

gráfica, 9
matricial, 29

Sequência
dos graus, 11
gráfica, 12

Soma dos k maiores
 A -autovalores, 66
 L -autovalores, 73
 Q -autovalores, 66

Subgrafo, 12
induzido, 13

Submatriz principal, 24

Teorema
do entrelaçamento de Cauchy
generalizado, 27

Teoria espectral de grafos, 2

Vértice, 9
adjacentes, 10
distância, 20
dominante, 23
grau, 11
identificação, 17
isolado, 11
pendente, 11
vizinhança, 11
vizinhos, 10

Vetor de uns, 24