

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

Propriedades espectrais de um grafo

por

Eliseu Fritscher

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

Prof. Dr. Vilmar Trevisan
Orientador

Prof. Dr. Carlos Hoppen
Co-orientador

Porto Alegre, Fevereiro de 2011.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Fritscher, Eliseu

Propriedades espectrais de um grafo / Eliseu Fritscher.—
Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2011.

?? p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio
Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática
Aplicada, Porto Alegre, 2011.

Orientador: Trevisan, Vilmar; Co-orientador: Hoppen, Carlos

Dissertação: Matemática Aplicada
Grafos, árvores, autovalores, energia laplaciana.

Propriedades espectrais de um grafo

por

Eliseu Fritscher

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

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Análise Numérica e Computação Científica

Orientador: Prof. Dr. Vilmar Trevisan

Co-orientador: Prof. Dr. Carlos Hoppen

Banca examinadora:

Profa. Dra. Nair Maria Maia de Abreu
COPPE-UFRJ

Prof. Dr. Eduardo H. de Mattos Brietzke
PPGMAT-UFRGS

Prof. Dr. Dagoberto A. Rizzotto Justo
PPGMATp-UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
18 de Fevereiro de 2011.

Profa. Dra. Maria Cristina Varriale
Coordenador

Sumário

LISTA DE FIGURAS	VI
LISTA DE ABREVIATURAS	VIII
RESUMO	IX
ABSTRACT	X
1 INTRODUÇÃO	1
2 TEORIA ESPECTRAL BÁSICA	8
2.1 Definições iniciais	8
2.2 Matriz de Adjacência	13
2.2.1 Polinômio característico	13
2.2.2 Espectro de um grafo	16
2.2.3 Espectro de grafos especiais	21
2.2.4 Isomorfismo de grafos	27
2.3 Matriz Laplaciana	36
2.3.1 Autovalores laplacianos	38
2.4 Energia	42
2.4.1 Energia de grafos	43
2.4.2 Energia laplaciana	45
3 OBTENÇÃO DO ESPECTRO DE ÁRVORES	48
3.1 Polinômio característico e laplaciano via algoritmo <i>V1</i>	48
3.2 Localizando autovalores via algoritmo <i>V2</i>	51
3.3 Árvores de Bethe	54
4 A SOMA DOS MAIORES AUTOVALORES LAPLACIANOS	63

4.1	O resultado principal	63
4.2	Demonstração do Teorema 1	66
4.2.1	Casos iniciais	68
4.2.2	Caso geral	73
4.2.3	Árvores de \mathcal{F}_4	79
4.2.4	Árvores de \mathcal{F}_5	88
4.2.5	Árvores de \mathcal{F}_6	96
4.3	Aplicação à energia laplaciana	104
5	CONCLUSÃO	106
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	108
	APÊNDICE A	111

Lista de Figuras

Figura 1.1	Exemplo de um grafo	2
Figura 1.2	Grafos $K_{3,8}$ e $K_{4,6} \cup K_1$ co-espectrais	3
Figura 2.1	Representação de um grafo	8
Figura 2.2	Grafo K_5	10
Figura 2.3	Grafo $K_{3,4}$	11
Figura 2.4	Grafo e seu grafo complementar	12
Figura 2.5	Exemplo para matriz de adjacência	14
Figura 2.6	Grafos co-espectrais e não isomorfos	28
Figura 2.7	Grafos bipartidos co-espectrais e não isomorfos	35
Figura 2.8	Exemplo para matriz laplaciana	38
Figura 3.1	Árvore organizada para aplicação do algoritmo	48
Figura 3.2	Pol. caract. via algoritmo $V1$: Passo 1	49
Figura 3.3	Pol. caract. via algoritmo $V1$: Passo 2	49
Figura 3.4	Pol. caract. via algoritmo $V1$: Passo 3	50
Figura 3.5	Pol. caract. via algoritmo $V1$: Passo 4	50
Figura 3.6	Pol. caract. Laplaciano via algoritmo $V1$: Passo 1	50
Figura 3.7	Algoritmo $V2$: Passo 1	52
Figura 3.8	Algoritmo $V2$: Passo 2	52
Figura 3.9	Algoritmo $V2$: Passo 3	53
Figura 3.10	Algoritmo $V2$: Passo 4	53
Figura 3.11	Disposição dos $a(v_i)$ após aplicação do algoritmo $V2$	53
Figura 3.12	Tipos de ramos adjacentes ao vértice central de um grafo de \mathcal{F}	54
Figura 3.13	Árvore de Bethe com cópias de ramos	58
Figura 3.14	Árvore de Bethe com ramos do tipo 1 e 2	59

Figura 4.1	Possíveis árvores de 5 vértices	64
Figura 4.2	<i>Double star</i>	68
Figura 4.3	<i>Double broom</i> de diâmetro 4	68
Figura 4.4	Algoritmo <i>V1</i> sobre <i>double broom</i> de diâmetro 4	70
Figura 4.5	Algoritmo <i>V2</i> sobre <i>double broom</i> de diâmetro 4, com $\alpha = 1$	71
Figura 4.6	Algoritmo <i>V2</i> sobre <i>double broom</i> de diâmetro 5, com $\alpha = 1$	72
Figura 4.7	Algoritmo <i>V2</i> sobre <i>double broom</i> de diâmetro 5, com $\alpha = 2$	72
Figura 4.8	Cisão: Árvore T	74
Figura 4.9	Cisão: Floresta F	74
Figura 4.10	Modelo de uma árvore de \mathcal{F}_4	80
Figura 4.11	Modelo de uma árvore de \mathcal{F}_5	89
Figura 4.12	Contra-exemplo para uso da <i>decomposição BT</i> para $r = 2$	94
Figura 4.13	Modelo de uma árvore de \mathcal{F}_6	97

LISTA DE ABREVIATURAS

$e(G)$	número de arestas do grafo G
$d(v)$	grau do vértice v
\bar{d}	média dos graus dos vértices
Δ	grau máximo do grafo
\bar{G}	grafo complementar de G
K_n	grafo completo de n vértices
K_{n_1, n_2}	grafo bipartido completo de n_1 por n_2 vértices
\mathcal{P}_n	caminho de n vértices
\mathcal{S}_n	estrela de n vértices
$A(G)$	matriz de adjacência de G
$P_G(\lambda)$	polinômio característico de G
$spect(G)$	espectro de G
$\lambda_i(A)$	i -ésimo maior autovalor da matriz ou do grafo A
$L(G)$	matriz laplaciana de G
$P_{L(G)}(\mu)$	polinômio característico laplaciano de G
$Lspect(G)$	espectro laplaciano de G
$\mu_i(G)$	i -ésimo maior autovalor laplaciano de G
$E(G)$	energia do grafo G
$E_L(G)$	energia laplaciana de G
$S_k(A)$	soma dos k maiores autovalores da matriz ou autovalores laplacianos da árvore A
$\sigma(T)$	número de autovalores laplacianos da árvore T maiores do que $\bar{d}(T)$
I	matriz identidade
J	matriz cujas entradas são iguais a 1
$\mathbf{1}$	vetor cujas entradas são iguais a 1

RESUMO

Associadas a um grafo G , temos a matriz de adjacência $A(G)$ e a matriz laplaciana $L(G)$. Este trabalho descreve algumas propriedades dessas matrizes e de seus autovalores em relação a características estruturais do grafo. Veremos que, em geral, somente o espectro de G , isto é, conjunto de autovalores de $A(G)$, não é capaz de revelar todas as informações a respeito do grafo.

Apresentaremos também uma nova cota superior para a soma dos k maiores autovalores laplacianos de uma árvore com n vértices, para $k \in \{1, \dots, n\}$. Esse limite nos permitirá demonstrar que, dentre todas as árvores de n vértices, a árvore com energia laplaciana máxima é a estrela \mathcal{S}_n , o que foi conjecturado por Radenković e Gutman [18].

ABSTRACT

Associated with a graph G , we have the adjacency matrix $A(G)$ and the Laplacian matrix $L(G)$. This work relates properties of these matrices and their eigenvalues to structural characteristics of the graph. We will see that, in general, the spectrum of G , namely the set of eigenvalues of $A(G)$, does not reveal all the information about the graph.

We will also present a new upper bound on the sum of the k largest Laplacian eigenvalues of a tree with n vertices, where $k \in \{1, \dots, n\}$. This result is used to establish that the n -vertex star \mathcal{S}_n has the highest Laplacian energy over all n -vertex trees, which answers affirmatively to a question raised by Radenković and Gutman [18].

1 INTRODUÇÃO

Seja $G = G(V, E)$ um grafo, onde V é um conjunto finito cujos elementos são denominados vértices e E é um conjunto de subconjuntos de dois elementos de V denominados arestas. Os vértices de um grafo são costumeiramente representados graficamente por pontos e as arestas por ligações entre esses pontos, como exibido na Figura 1.1. Outra maneira de representar grafos é através de matrizes. Neste trabalho, trataremos desses objetos de um ponto de vista algébrico, a partir de propriedades de matrizes associadas a ele. Por exemplo, a matriz de adjacência de um grafo G com n vértices, com conjunto de vértices $V = \{v_1, \dots, v_n\}$, é a matriz quadrada $A(G)$ de ordem n com elementos

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

Devido ao fato de que uma série de propriedades de um grafo podem ser deduzidas a partir do espectro de matrizes associadas a ele, tal ramo da Teoria dos Grafos é denominada Teoria Espectral dos Grafos.

A Teoria Espectral de Grafos teve sua motivação na Química e na Teoria Quântica. Por exemplo, pode-se representar uma molécula de hidrocarboneto por um grafo, tomando os átomos de carbono como vértices e as ligações químicas entre esses átomos como arestas. Em 1931, Hückel [10] verificou que os autovalores deste grafo estavam relacionados com a energia dos elétrons π associada à molécula. Com os artigos matemáticos de Collatz e Sinogowitz [4] e de Cvetković [5], dos anos de 1957 e 1971, respectivamente, houve a fundamentação teórica do tema.

Nesse trabalho, o nosso foco é relacionar propriedades entre o grafo e seu espectro. Veremos que há uma série de propriedades de grafos que podem ser deduzidas de seus autovalores, e vice-versa. Mas, em geral, grafos não são univocamente determinados a partir do seu espectro. Também estudaremos um problema

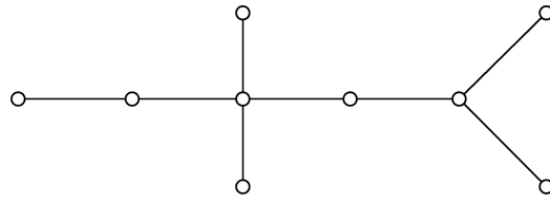


Figura 1.1: Exemplo de um grafo

específico envolvendo autovalores laplacianos de um grafo, que consiste em uma contribuição original do nosso trabalho.

O espectro de um grafo é o conjunto dos autovalores de sua matriz de adjacência. Podemos verificar várias propriedades dos grafos analisando a própria matriz de adjacência (A), o seu polinômio característico

$$P_G(\lambda) = \lambda^n + a_1\lambda^{n-1} + a_2\lambda^{n-2} + \dots + a_{n-1}\lambda + a_n$$

ou os seus autovalores como, por exemplo,

- o número de arestas é igual a $-a_2$, e também igual à metade da soma dos quadrados dos autovalores;
- o número de triângulos é igual a $-\frac{a_3}{2}$, e também igual a $\frac{1}{6}tr(A^3)$;
- o elemento ij da matriz A^t indica o número de cadeias de comprimento t entre o i -ésimo e o j -ésimo vértices do grafo;
- o maior autovalor está entre o grau médio e o grau máximo, onde o grau de um vértice é o número de vértices adjacentes a este;
- o quadrado do maior autovalor está limitado superiormente por $2m \left(1 - \frac{1}{n}\right)$, onde m o número de arestas e n o número de vértices do grafo;
- um grafo é bipartido se, e somente se, possui espectro simétrico em relação a zero.

Se há uma ligação tão íntima entre o grafo e seus autovalores, é possível obter o grafo a partir de seu espectro? Em outras palavras, é possível determinar univocamente um grafo a partir do seu espectro, a menos de isomorfismos? Em geral, não conseguimos. Apresentado um espectro de grafo, nem sempre podemos identificar o grafo que possui esse conjunto de autovalores como seu espectro. Por exemplo, os grafos bipartidos $K_{3,8}$ e $K_{4,6} \cup K_1$, embora um deles seja conexo e o outro não, possuem o mesmo espectro $\{\sqrt{24}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -\sqrt{24}\}$. Portanto, nem todas as propriedades dos grafos são alcançadas pelos autovalores, e observando a Figura 1.2, nem mesmo a conexidade pode ser verificada, no caso geral. Esse resultado será discutido no Capítulo 2, assim como as propriedades enunciadas anteriormente.

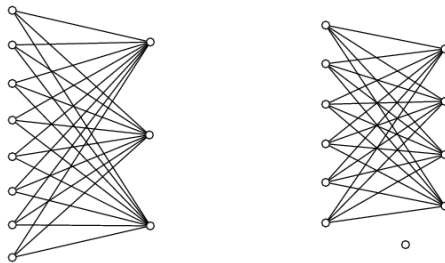


Figura 1.2: Grafos $K_{3,8}$ e $K_{4,6} \cup K_1$ co-espectrais

Por outro lado, veremos que existem famílias em que é possível caracterizar o grafo pelo seu espectro, como as estrelas \mathcal{S}_{p+1} , com p primo, por exemplo.

Uma outra matriz utilizada para estudar um grafo é sua matriz laplaciana, que será definida no Capítulo 2. O espectro laplaciano, conjunto de autovalores da matriz laplaciana do grafo, determina outras propriedades das estruturas dos grafos. Por exemplo, verificamos o número de componentes conexas do grafo simplesmente olhando para a multiplicidade do autovalor laplaciano zero.

Baseado nos resultados de Hückel, que relacionavam a energia total dos elétrons π com a soma dos valores absolutos dos autovalores, Gutman [7] definiu a energia de um grafo G por

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

onde λ_i são os autovalores de G . Naturalmente esse conceito não ficou restrito somente aos grafos moleculares (aqueles que representam moléculas) e foi estendido a qualquer grafo. Em geral não conseguimos obter o valor exato da energia de um grafo, pois não se conhece uma ferramenta para calcular exatamente todos os autovalores (raízes do polinômio característico). Contudo, é possível encontrar cotas superiores e inferiores para o valor da energia em termos das características do grafo, como o número de arestas e vértices, por exemplo.

Anos mais tarde, criou-se o conceito de energia laplaciana, relacionada com os autovalores laplacianos do grafo (μ_i), definida por

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

onde \bar{d} é a média dos graus dos vértices de G .

Um dos problemas em aberto em Teoria Espectral de Grafos é a busca pelo grafo que possui a maior energia, dentre todos os grafos com um determinado número de vértices. Esse problema foi resolvido para as árvores (grafos conexos sem ciclos) em [7], verificando-se que a energia de qualquer árvore T com n vértices está entre a energia do caminho (\mathcal{P}_n) e da estrela (\mathcal{S}_n):

$$E(\mathcal{S}_n) \leq E(T) \leq E(\mathcal{P}_n).$$

Fazendo uma analogia entre energia e energia laplaciana, ambas são a soma do valor absoluto da diferença entre o autovalor e sua média. Para grafos em geral, parece haver uma conexão entre energia e energia laplaciana. Inclusive, para grafos k -regulares, a energia é igual à energia laplaciana. Porém, Radenković e Gutman [18] calcularam a energia laplaciana de árvores com até 17 vértices e verificaram que havia uma ordem inversa nas árvores quando comparada com a

energia (usual). Com base nesses dados, presumiram a seguinte:

Conjectura: *Seja T uma árvore com n vértices. Então*

$$E_L(\mathcal{P}_n) \leq E_L(T) \leq E_L(\mathcal{S}_n).$$

O resultado principal do presente trabalho é a demonstração da cota superior dessa conjectura. Com esse intuito, vimos a necessidade de encontrar uma cota superior para a soma dos maiores autovalores laplacianos de uma árvore. Dada uma árvore T , sejam $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n$ os seus autovalores laplacianos. Haemers, Mohammadian e Tayfeh-Rezaie apresentam em [9] um limite superior para a soma dos k maiores autovalores laplacianos de T :

$$\sum_{i=1}^k \mu_i \leq e(T) + 2k - 1 = n + 2k - 2, \quad (1.1)$$

onde $e(T)$ é o número de arestas da árvore T . Para demonstrar a cota superior da conjectura, melhoraremos a cota de (1.1).

Teorema 1. *A soma dos k maiores autovalores laplacianos de uma árvore T , com n vértices, está limitada por*

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

valendo igualdade somente para $k = 1$, com T uma estrela.

Esse resultado traz como consequência a desigualdade

$$E_L(T) \leq E_L(\mathcal{S}_n),$$

para toda árvore T com n vértices.

O trabalho está dividido em quatro capítulos. No segundo capítulo apresentamos alguns resultados clássicos da Teoria Espectral acerca de polinômios característicos e de autovalores, usuais e laplacianos. Procuramos demonstrar as proposições de maneira detalhada para facilitar a leitura.

O espectro de grafos bipartidos é discutido em especial: dado um espectro de um grafo, esse é o espectro de um grafo bipartido se, e somente se, os autovalores são simétricos em relação a zero. Contudo, no conjunto dos grafos bipartidos, existem grafos diferentes, mas que têm o mesmo espectro. Isso ocorre para alguns grafos bipartidos completos $K_{s,t}$ onde $|t - s| \geq 4$. Para estrelas \mathcal{S}_{c+1} , onde c é um número composto, podemos sempre encontrar outro grafo bipartido com o mesmo espectro, mas que não é isomorfo a \mathcal{S}_{c+1} .

O objetivo das seções subsequentes é demonstrar o Teorema 1. No Capítulo 3, são apresentadas três ferramentas que vão nos auxiliar na demonstração desse teorema. Duas dessas ferramentas são algoritmos, apresentados por Jacobs, Machado e Trevisan em [11] e por Jacobs e Trevisan em [12], para o cálculo do polinômio característico (usual e laplaciano) sem a necessidade se explicitar a matriz de adjacência ou laplaciana, e para determinar o número de autovalores (usuais e laplacianos) maiores do que um certo valor dado. A terceira ferramenta é uma equivalência entre o espectro laplaciano de uma árvore e a união de espectros de matrizes de ordem menor, apresentado por Rojo em [19].

Por fim, é obtida a nova cota superior para a soma dos k maiores autovalores laplacianos de árvores. A demonstração desse resultado é mais trabalhosa do que para a cota em (1.1).

Inicialmente verificamos a validade da desigualdade para grafos simples, cujo espectro laplaciano pode ser aproximado de forma suficientemente precisa. Depois partimos para o caso geral, usando a mesma técnica da cota inicial, que consiste em retirar uma aresta não incidente a uma folha para transformar a árvore T em uma floresta F de duas árvores, sobre as quais podemos aplicar a hipótese de indução. Com o auxílio de teoremas da Álgebra Linear sobre a soma de autovalores de matrizes, bem como de lemas auxiliares, conseguimos provar os vários casos abertos

pela cisão de T , exceto para uma situação particular.

Resta-nos o caso em que T tem a propriedade de que, para toda escolha de aresta não incidente a uma folha, a floresta F é sempre formada pela união (disjunta) de uma estrela e uma árvore que não é estrela. Para esse conjunto de grafos, denotado por \mathcal{F} , é preciso uma análise mais minuciosa a fim de concluirmos a demonstração da nova cota. Dividimos o conjunto \mathcal{F} em três subconjuntos, em função do diâmetro das árvores que a eles pertencem

$$\mathcal{F}_d := \{T \in \mathcal{F} : \text{diâmetro de } T = d\}, \quad d \in \{4, 5, 6\}.$$

Para demonstrar a validade do Teorema 1 para árvores em \mathcal{F}_4 , \mathcal{F}_5 e \mathcal{F}_6 recorreremos ao uso das ferramentas do Capítulo 3.

2 TEORIA ESPECTRAL BÁSICA

As definições e os resultados iniciais da Teoria Espectral de Grafos apresentados nesse capítulo são baseados no livro de Abreu et al. [1].

2.1 Definições iniciais

Definição 1. Um grafo é um par ordenado $G = G(V, E)$, onde V é um conjunto finito cujos elementos são denominados vértices e E é um conjunto de subconjuntos de dois elementos pertencentes a V chamados de arestas.

Para um elemento $e = \{u, v\} \in E$, dizemos que e é *incidente* em u e v . E também, quando há uma aresta incidindo em dois vértices, dizemos que estes são vértices *adjacentes* ou *vizinhos*. Denotamos por $v(G) = |V|$ o número de vértices do grafo G .

Vamos considerar neste trabalho somente *grafos simples*, isto é, sem laços (arestas ligando um vértice a ele mesmo), sem arestas múltiplas (várias arestas incidentes em um mesmo par de vértices) e sem orientação.

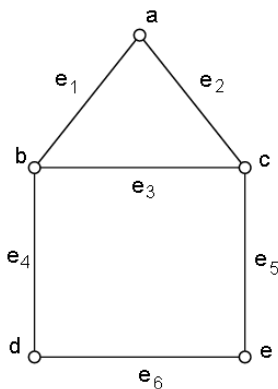


Figura 2.1: Representação de um grafo

Exemplo 1. Na Figura 2.1 temos um grafo com conjunto de vértices $V = \{a, b, c, d, e\}$, e conjunto de arestas $E = \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6\}$. Nesse caso, a aresta $e_1 = \{a, b\}$ indica que os vértices a e b são adjacentes.

Definição 2. O grau do vértice v , indicado por $d(v)$, é o número de vértices adjacentes a v no grafo.

Por exemplo, no grafo da Figura 2.1, o grau do vértice a é dois, pois somente os vértices b e c são adjacentes a a .

Definição 3. Uma cadeia de v_1 a v_k é uma sequência v_1, v_2, \dots, v_k de vértices de um grafo tal que $\{v_i, v_{i+1}\} \in E$ (v_i e v_{i+1} são adjacentes) para $1 \leq i \leq k - 1$. Um caminho é uma cadeia de vértices distintos. Cadeias onde o primeiro e o último vértices são os mesmos são denominadas cadeias fechadas. Um ciclo é um caso especial de cadeia fechada onde todos os vértices são distintos. O comprimento de uma cadeia é definido como o número de arestas que nela ocorre.

A cadeia v_1, v_2, v_4, v_5 tem a mesma representação no grafo do que a cadeia v_5, v_4, v_2, v_1 , por exemplo. Mas em alguns casos queremos considerá-las distintas, pois são definidas por sequências diferentes. Nesse caso, atribuímos o adjetivo *rotulado*. Outro exemplo, um triângulo num grafo pode ser representado por seis ciclos (rotulados) distintos.

Definição 4. Dizemos que um grafo G é um grafo conexo quando existe um caminho ligando um par qualquer de seus vértices. Caso não existir tal caminho, dizemos que o grafo é desconexo.

Em um grafo desconexo $G(V, E)$, dizemos que $G'(V', E')$ é uma *componente conexa* de G , onde $V' \subseteq V$ e $E' \subseteq E$, se G' é conexo e *subgrafo maximal* de G , isto é, não existe grafo conexo $H(V^*, E^*)$ com $V^* \subseteq V$ e $E^* \subseteq E$ tal que $V' \subset V^*$ e $E' \subset E^*$.

Definição 5. Um grafo completo é aquele em que todos os vértices são adjacentes. Usualmente esse tipo de grafo, com n vértices, é denotado por K_n .

Definição 6. Um grafo k -regular, ou regular de grau k , é aquele em que todos os vértices possuem o mesmo grau, e este igual a k .

Exemplo 2. Os grafos K_n são $(n - 1)$ -regulares. Na Figura 2.2 temos o grafo K_5 , que é 4-regular.

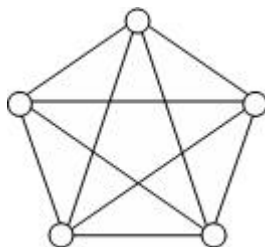


Figura 2.2: Grafo K_5

Definição 7. Dizemos que um grafo G é bipartido se pudermos expressar o conjunto V dos vértices como uma união disjunta de dois conjuntos $V = V_1 \cup V_2$, tais que não haja vértices adjacentes em cada conjunto V_i .

Indicamos por K_{n_1, n_2} o grafo bipartido completo que possui n_1 vértices no conjunto V_1 e n_2 vértices no conjunto V_2 , e que cada vértice de um conjunto é adjacente a todos os vértices do outro conjunto. Esse grafo possui $n_1 \cdot n_2$ arestas.

Lema 1. Um grafo é bipartido se e somente se não possui cadeias fechadas de tamanho ímpar.

Demonstração: Supondo que o grafo G é bipartido, podemos separar os vértices em dois subconjuntos disjuntos V_1 e V_2 . Se G possuir uma cadeia fechada de tamanho n , ele será $C_n = v_0 v_1 v_2 \dots v_{n-1} v_n$. Supondo, sem perda de generalidade, que $v_0 \in V_1$, então $v_1 \in V_2$ e novamente $v_2 \in V_1$. Temos que $v_i \in V_2$ se e somente se i é ímpar.

Para fechar a cadeia, precisamos que $v_n = v_0 \in V_1$, ou seja n é par. Portanto, as cadeias fechadas têm tamanho par.

Vamos supor agora que G , grafo conexo, não possui cadeias fechadas de tamanho ímpar. Seja v_0 um vértice do grafo, e vamos definir que $v_0 \in V_1$ e

$$\begin{cases} v \in V_1 \text{ se e somente se existe cadeia de tamanho par entre } v_0 \text{ e } v; \\ v \in V_2 \text{ se e somente se existe cadeia de tamanho ímpar entre } v_0 \text{ e } v. \end{cases}$$

Se existir $w \in V_1 \cap V_2$ então existe uma cadeia P_1 de tamanho par entre de v_0 a w , e existe uma cadeia P_2 de tamanho ímpar entre w e v_0 . Concatenando essas cadeias, temos que P_1P_2 é uma cadeia de v_0 a v_0 de tamanho ímpar, ou seja, o grafo contém uma cadeia de tamanho ímpar. Portanto $V_1 \cap V_2 = \emptyset$, o que nos dá a bipartição. No caso de G não ser conexo, basta verificar que, para cada componente conexa, o grafo é bipartido, e unir os subconjuntos de vértices das componentes conexas. □

Exemplo 3. Na Figura 2.3 temos o grafo bipartido completo $K_{3,4}$.

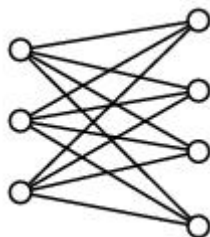


Figura 2.3: Grafo $K_{3,4}$

Definição 8. *Uma árvore é um grafo conexo sem ciclos. Uma união de árvores é denominada floresta. Os vértices de grau um são chamados de folhas.*

Lema 2. *Uma árvore de n vértices possui $m = n - 1$ arestas.*

Demonstração: É evidente que para uma árvore com um ou dois vértices teremos zero ou uma aresta, respectivamente. Vamos supor que é válido que, para uma árvore

com até $n_0 < n$ vértices, $m = n_0 - 1$.

Tomando uma árvore com n vértices e retirando uma aresta, teremos duas componentes conexas com n_1 e n_2 vértices e com m_1 e m_2 arestas. Assim, o número de arestas da árvore de n vértices é

$$m = m_1 + m_2 + 1 = (n_1 - 1) + (n_2 - 1) + 1 = n - 1.$$

E por indução concluímos a demonstração. □

Definição 9. *Sejam $G_1 = G_1(V_1, E_1)$ e $G_2 = G_2(V_2, E_2)$ dois grafos que não possuem vértices em comum, ou seja $V_1 \cap V_2 = \emptyset$. A união desses grafos é o grafo $G_1 \cup G_2$ onde $V_1 \cup V_2$ são seus vértices e $E_1 \cup E_2$ as arestas.*

Definição 10. *O grafo complementar de um grafo $G = (V, E)$ é o grafo $\bar{G} = (V, \bar{E})$, onde um par de vértices é adjacente em \bar{G} se e somente se não o for em G , ou seja $\{v_i, v_j\} \in \bar{E}$ se e somente se $\{v_i, v_j\} \notin E$.*

Note que, se tomarmos o complementar do grafo complementar, teremos novamente o grafo inicial. Além disso, se sobrepusermos as representações de um grafo G e seu complementar \bar{G} , teremos o grafo completo.

Exemplo 4. Na Figura 2.4 temos um par de grafos complementares.

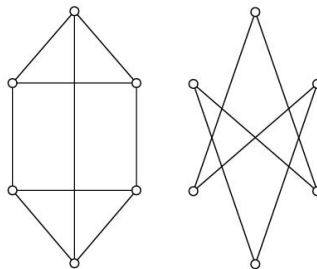


Figura 2.4: Grafo e seu grafo complementar

2.2 Matriz de Adjacência

Definição 11. *Dado um grafo $G = (V, E)$ com n vértices e conjunto de vértices $V = \{v_1, \dots, v_n\}$, a matriz de adjacência associada $A(G)$ é uma matriz quadrada de ordem n , com elementos*

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

A matriz $A(G)$ é uma matriz simétrica, pois a qualidade de vértices serem adjacentes é simétrica, assim $a_{ij} = a_{ji}$. Como sabemos, dos resultados de Álgebra Linear, essa matriz $A(G)$ tem todos os seus autovalores reais (Proposição 28 no Apêndice). Para cada ordenação dos vértices poderemos ter uma matriz de adjacência distinta.

Note que com essa definição, a soma dos valores das entradas de cada linha (ou coluna) é igual ao grau do vértice relacionado com essa linha (ou coluna).

2.2.1 Polinômio característico

Definição 12. *Associado à matriz de adjacência de um grafo G , podemos definir o polinômio característico do grafo G , que é o polinômio característico da matriz $A(G)$, definido como $P_G(\lambda) = \det(\lambda I - A(G))$.*

Vale lembrar que o polinômio característico do grafo G é unicamente determinado, pois, apesar da matriz $A(G)$ depender da ordenação dos vértices de G , essas muitas matrizes de adjacência de G podem ser obtidas uma da outra por operações elementares de matrizes, e portanto o determinante permanece inalterado. Em outras palavras, dadas duas matrizes de adjacência de G , A_1 e A_2 , existe uma matriz B de mudança de base (uma matriz de permutação) tal que $A_1 = B^{-1}A_2B$.

Assim vemos que

$$\begin{aligned}
 P_{A_1}(\lambda) &= \det(\lambda I - A_1) \\
 &= \det(\lambda B^{-1}IB - B^{-1}A_2B) \\
 &= \det(B^{-1}(\lambda I - A_2)B) \\
 &= \det(B^{-1}) \det(\lambda I - A_2) \det(B) \\
 &= \det(\lambda I - A_2) = P_{A_2}(\lambda).
 \end{aligned}$$

Exemplo 5. Considere o grafo da Figura 2.5. Sua matriz de adjacência é

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

e $P_G(\lambda) = \lambda^4 - 4\lambda^2 - 2\lambda + 1$ é o seu polinômio característico.

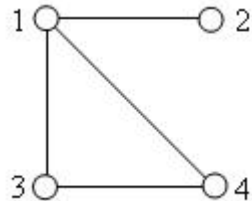


Figura 2.5: Exemplo para matriz de adjacência

Veremos agora algumas propriedades que relacionam o grafo com seu polinômio característico. O resultado a seguir é um dos primeiros que ligam elementos algébricos do grafo com a sua geometria.

Proposição 1. *Seja G um grafo com n vértices e m arestas e seja*

$$P_G(\lambda) = \lambda^n + a_1\lambda^{n-1} + a_2\lambda^{n-2} + \dots + a_{n-1}\lambda + a_n$$

o polinômio característico de G . Então os coeficientes de $P_G(\lambda)$ satisfazem:

$$(i) \ a_1 = 0;$$

$$(ii) \ a_2 = -m;$$

$$(iii) \ a_3 = -2t, \text{ onde } t \text{ é o número de triângulos do grafo};$$

$$(iv) \ a_n = (-1)^n \det(A(G)).$$

Demonstração: Da Álgebra Linear, sabemos que podemos usar menores principais para calcular o polinômio característico, assim “ $(-1)^i a_i =$ soma dos menores principais de $A(G)$ com i linhas e i colunas”. Um menor principal de $A(G)$ com i linhas e i colunas é o determinante de qualquer submatriz principal de $A(G)$ retirando $n - i$ linhas e as correspondentes $n - i$ colunas. Portanto

(i) Uma vez que a diagonal de $A(G)$ é formada por zeros, temos que todos os menores principais com uma linha e uma coluna são zero. Assim, somando-os teremos $a_1 = 0$.

(ii) Tomando os menores principais de duas linhas e duas colunas, só haverá duas opções possíveis, já que a matriz $A(G)$ é simétrica. Uma opção é a submatriz 2×2 nula cujo determinante é zero. A outra é a submatriz $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ que possui determinante -1 . Esta matriz representa justamente uma aresta entre os vértices das respectivas linhas/colunas. Somando todos teremos o número de arestas. Ou seja, $(-1)^2 a_2 = (-1) \cdot |E| = (-1)m$. Logo $a_2 = -m$.

(iii) Existem seis possibilidades para menores principais de 3 linhas e 3 colunas. Dessas, apenas uma tem determinante não nulo que é $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$. Essa situação representa três vértices mutuamente adjacentes, isto é, um triângulo. Como o valor do determinante dessa submatriz é 2, temos que $(-1)^3 a_3 = 2 \cdot t$. Logo $a_3 = -2t$.

- (iv) Basta notarmos que o menor principal com n linhas e n colunas é justamente a matriz $A(G)$. Portanto $(-1)^n a_n = \det(A(G))$. □

2.2.2 Espectro de um grafo

Definição 13. *Dado um grafo G , definimos como espectro de G ($\text{spect}(G)$) o multiconjunto das raízes do polinômio característico, lembrando de suas respectivas multiplicidades.*

Em outras palavras, o espectro do grafo G são os autovalores da matriz de adjacência. Como $A(G)$ é uma matriz simétrica, todos os seus autovalores são reais (veja Proposição 28 no Apêndice). Por conveniência, costumamos ordenar o espectro em ordem decrescente $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$. Algumas vezes, para representar o espectro, também é usada a notação de matriz de duas linhas: na primeira linha aparecem os autovalores e na segunda linha aparecem as multiplicidades desses autovalores na coluna correspondente.

O espectro de um grafo é único, independentemente da ordenação dos vértices, pois o polinômio característico é único.

Exemplo 6. Para o grafo da Figura 2.5, o espectro pode ser aproximado por $\{2,1701 ; 0,3111 ; -1 ; -1,4812\}$. Note que para esse exemplo todos os autovalores têm multiplicidade um. Na segunda notação, o espectro pode ser representado por

$$\begin{pmatrix} 2,1701 & 0,3111 & -1 & -1,4812 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Em geral, é muito difícil encontrar o espectro exato de um grafo, pois temos o trabalho de encontrar as raízes de um polinômio de grau igual ao número de vértices. Podemos tentar achar aproximações para essas raízes com algum algoritmo numérico, ou, às vezes, com alguma técnica algébrica. Mais adiante, conseguiremos explicitar o espectro de algumas classes de grafos. Há alguns softwares disponíveis na

internet de forma gratuita que auxiliam na manipulação de grafos, como o *NewGraph* [20].

Os próximos resultados mostrarão propriedades dos elementos do espectro de um grafo relacionadas às características geométricas desse grafo.

Proposição 2. *O número de cadeias de comprimento ℓ ligando os vértices v_i e v_j em um grafo G é dado pelo elemento ij da matriz A^ℓ , onde A é a matriz de adjacência de G .*

Demonstração: O resultado vale para $\ell = 1$, pois as cadeias de tamanho um entre v_i e v_j são as arestas, e a existência delas é indicada pela entrada a_{ij} da matriz de adjacência $A(G)$, por definição.

Supondo que o resultado é válido para a matriz A^ℓ , queremos encontrar o número de cadeias de tamanho $\ell + 1$ ligando v_i a v_j . Esse número pode ser calculado somando as cadeias de tamanho ℓ que vão de v_i a v_h (indicado por $(A^\ell)_{ih} = \langle e_i, A^\ell e_h \rangle$, onde e_k é o k -ésimo vetor da base canônica), para todos os vértices v_h adjacentes a v_j (qualidade indicada por a_{hj}),

$$\sum_{h=1}^n \langle e_i, A^\ell e_h \rangle a_{hj} = \langle e_i A^\ell, A e_j \rangle = (A^{\ell+1})_{ij}.$$

A igualdade pode ser confirmada observando que a soma dos produtos identifica o produto da i -ésima linha de A^ℓ com a j -ésima coluna de A . Portanto, por indução em ℓ , concluímos o resultado. □

Proposição 3. *Seja G um grafo com n vértices e m arestas, e sejam $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ os autovalores de G . Seja T_ℓ o número de cadeias fechadas (rotuladas) de comprimento ℓ em G . Então*

$$(i) \quad T_\ell = \text{tr}(A^\ell) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^\ell;$$

$$(ii) \sum_{i=1}^n \lambda_i = 0;$$

$$(iii) \operatorname{tr}(A^2) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2m;$$

$$(iv) \text{ se } G \text{ é um grafo } k\text{-regular, então } \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = kn;$$

$$(v) \operatorname{tr}(A^3) = 6t, \text{ onde } t \text{ é o número de triângulos do grafo.}$$

Demonstração: Pela Proposição 2, o número de cadeias de v_i a v_i de tamanho ℓ é igual a $(A^\ell)_{ii}$. Somando esses termos para todos os vértices do grafo, teremos a igualdade referente à definição de T_ℓ . Por outro lado, o traço de um operador linear (no nosso caso a matriz A) é invariante por mudança de coordenadas (Lema 13 no Apêndice), e sabendo que A (e suas potências) é semelhante a matriz diagonal com os seus autovalores (e suas potências), teremos a segunda igualdade do item (i).

Os demais casos são casos particulares. Em (ii) tomamos $\ell = 1$, e somamos a diagonal principal de $A(G)$ que é formada por zeros. Em (iii), note que uma cadeia fechada de comprimento dois representa uma aresta. Quando somarmos todas essas cadeias teremos o dobro do número de arestas do grafo, pois cada aresta está sendo contada duas vezes: uma $v_i \rightarrow v_j \rightarrow v_i$ e outra $v_j \rightarrow v_i \rightarrow v_j$. Em (iv) cada um dos n vértice possui k arestas incidentes, somando todas teremos duas vezes o número de arestas (cada uma contada duas vezes), logo $kn = 2m$. Para (v) as cadeias fechadas de comprimento três são os triângulos e, como cada triângulo é contado de $3! = 6$ maneiras distintas, segue o resultado. □

Com esse resultado, podemos dar uma condição para verificar se um dado grafo G é ou não conexo. Seja n o número de vértices desse grafo G . Para que G seja conexo, para qualquer par de vértices deve haver um caminho os ligando, mais precisamente uma cadeia. Essa cadeia pode ter tamanho, no máximo, igual a $n - 1$ (no caso de todos os vértices serem necessários). Considere $B = A + A^2 + \dots + A^{n-1}$. Se B tiver todas as suas entradas não nulas então G é conexo. Caso B tenha alguma

entrada nula, digamos na posição ij , é porque não há cadeia ligando os vértices v_i e v_j de qualquer tamanho, ou seja, G é desconexo.

Proposição 4. *Se G é um grafo com maior autovalor λ_1 , então*

$$\bar{d} \leq \lambda_1 \leq \Delta,$$

onde \bar{d} é a média dos graus dos vértices, e Δ é o grau máximo.

Demonstração: Assumindo que G tenha n vértices e sendo A a matriz de adjacência de G , podemos escrever (usando a Proposição 29 no Apêndice)

$$\lambda_1 = \max_{|x| \neq 0} \frac{x^T A x}{x^T x}.$$

Usando o vetor $\mathbf{1} = [1, \dots, 1]^T$, obteremos a primeira desigualdade

$$\lambda_1 \geq \frac{\mathbf{1}^T A \mathbf{1}}{\mathbf{1}^T \mathbf{1}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n a_{ij} \right) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d(v_i) = \bar{d}.$$

Para a segunda desigualdade, definimos uma função

$$N(M) = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n m_{ij},$$

para $M = (m_{ij})$ matriz de ordem n . Usando o Teorema de Perron-Frobenius na matriz A que é irredutível (veja no Apêndice, Teorema 14), associado ao autovalor λ_1 temos um autovetor com todas as entradas do mesmo sinal (escolheremos o vetor

u com entradas ≥ 0). Seja $X = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ u & u & \dots & u \\ | & | & & | \end{pmatrix}$, a matriz com n cópias de u como

vetores coluna. Como $Au = \lambda_1 u$, temos que $AX = \lambda_1 X$. Portanto

$$\lambda_1 N(X) = N(\lambda_1 X) = N(AX).$$

A maior soma de linhas da matriz AX ocorre para uma certa linha k da matriz.

Seja $H = \{j : A_{kj} = 1\}$. Assim

$$N(AX) = n \sum_{i \in H} u_i \leq n \sum_{i \in H} u_* = d(v_k) n u_* = d(v_k) N(X),$$

onde u_* é a maior entrada do vetor u . Temos que

$$\begin{aligned}\lambda_1 N(X) &= N(AX) \leq d(v_k)N(X) \\ \lambda_1 &\leq d(v_k) \leq \Delta.\end{aligned}$$

□

Proposição 5. *Se G é um grafo com n vértices, m arestas e com λ_1 o seu maior autovalor, então*

$$\lambda_1 \leq \sqrt{2m \left(1 - \frac{1}{n}\right)}.$$

Demonstração: Vamos usar a teoria de Multiplicadores de Lagrange. Queremos achar uma cota superior para λ_1 o maior autovalor. Sejam

$$\begin{aligned}f(x_1, \dots, x_n) &= x_1 \\ g(x_1, \dots, x_n) &= x_1 + \dots + x_n \\ h(x_1, \dots, x_n) &= x_1^2 + \dots + x_n^2 - 2m\end{aligned}$$

Para maximizar a função $f(x)$ restrita a $g(x) = 0$ e $h(x) = 0$ (devido à Proposição 3), temos a seguinte equação

$$\nabla f = \alpha \nabla g + \beta \nabla h,$$

onde α e β são reais e $\nabla f = (1, 0, \dots, 0)$, $\nabla g = (1, 1, \dots, 1)$ e $\nabla h = (2x_1, 2x_2, \dots, 2x_n)$ são os vetores tangentes das funções. Assim, temos

$$\begin{aligned}\nabla f &= \alpha \nabla g + \beta \nabla h \\ 1 &= \alpha \cdot 1 + \beta \cdot 2x_1 \\ 0 &= \alpha \cdot 1 + \beta \cdot 2x_i \quad 2 \leq i \leq n\end{aligned}$$

com solução $\beta \neq 0$, $x_1 = \frac{1-\alpha}{2\beta}$ e $x_i = \frac{-\alpha}{2\beta}$ onde $2 \leq i \leq n$. Aplicando na restrição $g(x) = 0$ e $h(x) = 0$ obtemos $\alpha = \frac{1}{n}$ e $\beta = \sqrt{\frac{1-\frac{1}{n}}{8m}}$. Portanto, o máximo de $f(x)$ ocorre para

$$f(x) = x_1 = \frac{1-\alpha}{2\beta} = \frac{1-\frac{1}{n}}{2} \cdot \sqrt{\frac{8m}{1-\frac{1}{n}}} = \sqrt{2m \left(1 - \frac{1}{n}\right)}.$$

□

Veremos mais adiante que esse limite superior pode ser alcançado por uma classe de grafos, os grafos completos K_n .

Proposição 6. *Se o grafo G é a união de dois grafos G_1 e G_2 disjuntos então $P_G(\lambda) = P_{G_1}(\lambda) \cdot P_{G_2}(\lambda)$.*

Demonstração: Seja A_i a matriz de adjacência de G_i e n_i o número de vértices. Assim, uma das matrizes de adjacência associada ao grafo G é

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & 0_{n_1 \times n_2} \\ 0_{n_2 \times n_1} & A_2 \end{pmatrix}$$

onde os zeros representam uma matriz bloco de entradas nulas, devido a ausência de arestas entre os vértices de G_1 e G_2 . Como $\det(A) = \det(A_1) \cdot \det(A_2)$, usando I_s para a matriz identidade de ordem s , teremos

$$\begin{aligned} \det(\lambda I_{n_1+n_2} - A) &= \det(\lambda I_{n_1} - A_1) \cdot \det(\lambda I_{n_2} - A_2) \\ P_G(\lambda) &= P_{G_1}(\lambda) \cdot P_{G_2}(\lambda). \end{aligned}$$

□

2.2.3 Espectro de grafos especiais

Apresentaremos alguns resultados sobre o espectro de grafos regulares. Esse tipo de grafo nos fornece um conjunto de informações a respeito dos seus autovalores e dos autovalores do seu grafo complementar que são úteis para determinar precisamente o espectro de alguns grafos especiais.

Proposição 7. *Seja G um grafo k -regular. Então*

- (i) k é autovalor de G ;
- (ii) G é conexo se e somente se a multiplicidade de k é um;
- (iii) qualquer autovalor λ de G satisfaz $|\lambda| \leq k$.

Demonstração: Seja A a matriz de adjacência de G (grafo com n vértices) e $\mathbf{1}$ o vetor coluna de entradas todas iguais a um. Como o grafo é regular de grau k , a soma das entradas de cada linha é k . Assim, temos

$$A\mathbf{1} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^n a_{1j} \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^n a_{nj} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k \\ \vdots \\ k \end{pmatrix} = k\mathbf{1},$$

ou seja, como $A\mathbf{1} = k\mathbf{1}$, k é autovalor de G .

Agora, para verificar a dimensão do autoespaço associado ao autovalor k , vamos tomar $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ um autovetor associado. Seja s a posição da maior entrada em módulo, isto é $|x_s| \geq |x_i|$ para todo i . Então

$$kx_s = (A\mathbf{x})_s = \sum_{j=1}^n a_{sj} \cdot x_j.$$

Desse modo

$$\begin{aligned} |x_s| + (k-1)|x_s| &= k|x_s| = \left| \sum_{j=1}^n a_{sj} \cdot x_j \right| \\ &\leq \sum_{j=1}^n a_{sj}|x_j| = a_{sr}|x_r| + \sum_{j \neq r} a_{sj}|x_j| \\ &\leq a_{sr}|x_r| + \sum_{j \neq r} a_{sj}|x_s| = a_{sr}|x_r| + (k - a_{sr})|x_s| \\ &= \begin{cases} |x_r| + (k-1)|x_s|, & \text{para todo } v_r \text{ adjacente a } v_s; \\ k|x_s|, & \text{caso contrário.} \end{cases} \end{aligned}$$

Para v_r adjacente a v_s , a entrada $a_{sr} = 1$ e portanto $|x_s| \leq |x_r|$, que nos leva a igualdade $|x_s| = |x_r|$. Supondo que o grafo G é conexo, todos os vértices estão ligados uns aos outros por algum caminho, então percorrendo esse caminho, concluímos que todos os $|x_i|$ são iguais ao valor absoluto de x_s , que não é zero. Supondo, sem perda de generalidade, que $x_1 > 0$, a equação

$$kx_1 = (A\mathbf{x})_1 = \sum_{i=1}^n a_{1i}x_i$$

garante que para todo i tal que v_i é adjacente a v_1 , a entrada x_i é positiva, pois só há k entradas de valor um na primeira (e nas demais) linha da matriz A . Seguindo esse argumento para os demais vértices, e como o grafo G é conexo, temos que todas as entradas x_i são positivas. No final temos que $\mathbf{x} = x_s \mathbf{1}$, e isso nos dá que a dimensão do autoespaço associado ao autovalor k é um.

Vamos escrever $G = \bigcup_{i=1}^r G_i$, com G_i as componentes conexas e cada uma k -regular. Assim k é autovalor de multiplicidade um para cada G_i . Pela Proposição 6, $P_G(\lambda) = \prod_{i=1}^r P_{G_i}(\lambda)$, o que nos dá que $P_G(\lambda)$ terá k como autovalor com multiplicidade r . Como queremos que a multiplicidade de k seja um, concluímos que $r = 1$, ou seja, só há uma componente conexa (G é conexo).

Em (iii), vamos tomar o vetor \mathbf{y} um autovetor associado a um autovalor λ . Seja s a posição de entrada máxima em módulo em \mathbf{y} , isto é $|y_s| \geq |y_i|$ para todo i . Procedendo de maneira semelhante ao item (ii), teremos

$$\begin{aligned} |\lambda| |y_s| &= |(A\mathbf{y})_s| = \left| \sum_{j=1}^n a_{sj} \cdot y_j \right| \\ &\leq \sum_{j=1}^n a_{sj} |y_j| \leq \sum_{j=1}^n a_{sj} |y_s| \\ &= k |y_s|. \end{aligned}$$

Portanto $|\lambda| \leq k$, qualquer que seja o autovalor λ de G . □

Proposição 8. *Seja G um grafo k -regular com n vértices e autovalores $k, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n$. Então G e seu grafo complementar \overline{G} possuem os mesmos autovetores, e os autovalores de \overline{G} são $n - k - 1, -1 - \lambda_2, -1 - \lambda_3, \dots, -1 - \lambda_n$.*

Demonstração: Primeiramente vamos montar a matriz de adjacência do grafo complementar $A(\overline{G})$. Podemos expressá-la por

$$A(\overline{G}) = J - I - A(G)$$

onde J é a matriz quadrada de ordem n com um em todas as entradas e I a matriz identidade de ordem n . Seja $\{\mathbf{1}, u_2, \dots, u_n\}$ uma base ortogonal de autovetores de

$A(G)$ associada respectivamente aos autovalores $k, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. Como $A(G)\mathbf{1} = k\mathbf{1}$, teremos

$$A(\overline{G})\mathbf{1} = (J - I - A(G))\mathbf{1} = J\mathbf{1} - I\mathbf{1} - A(G)\mathbf{1} = (n - 1 - k)\mathbf{1},$$

ou seja, $\mathbf{1}$ é autovetor associado ao autovalor $(n - k - 1)$ de \overline{G} . Tomando agora um dos demais autovetores u_i , obtemos

$$A(\overline{G})u_i = (J - I - A(G))u_i = Ju_i - Iu_i - A(G)u_i = -u_i - \lambda_i u_i = (-1 - \lambda_i)u_i$$

e portanto u_i é autovetor de \overline{G} associado ao autovalor $(-1 - \lambda_i)$. Vale lembrar que os vetores $\mathbf{1}$ e u_i são ortogonais ($\langle \mathbf{1}, u_i \rangle = 0$), por isso a parcela $J \cdot u_i$ se anula. \square

Exemplo 7. Vamos calcular o espectro da família de grafos K_n . Inicialmente consideremos G o grafo com n vértices mas sem arestas (chamado de grafo trivial). Para esse grafo, a matriz de adjacência é a matriz nula, e o seu polinômio característico é $P_G(\lambda) = \lambda^n$. Portanto seu espectro é o multiconjunto com n zeros ($\{0, 0, \dots, 0\}$).

Considere agora \overline{G} . Esse grafo é justamente K_n . Pela Proposição 8, os seus autovalores são $n - 0 - 1, -1 - 0, -1 - 0, \dots, -1 - 0$. Portanto, o espectro de K_n é o formado pelos números $n - 1$ com multiplicidade um, e -1 com multiplicidade $n - 1$ e podemos representá-lo pela matriz $\begin{pmatrix} n - 1 & -1 \\ 1 & n - 1 \end{pmatrix}$.

Para o grafo K_n , o número de arestas que ocorrem é $m = \binom{n}{2} = \frac{n(n-1)}{2}$.

Buscando o limite superior dado pela Proposição 5, temos

$$\lambda_1 \leq \sqrt{2m \left(1 - \frac{1}{n}\right)} = \sqrt{n(n-1) \frac{n-1}{n}} = n - 1$$

e é justamente esse o valor do maior autovalor de K_n .

Proposição 9. *Seja G um grafo bipartido. Então λ é autovalor de G se e somente se $-\lambda$ também é autovalor de G . Além disso, λ e $-\lambda$ têm a mesma multiplicidade.*

Demonstração: Separando os vértices em dois conjuntos disjuntos V_1 e V_2 , tais que os vértices de V_1 não são adjacentes, e nem os vértices de V_2 tenham arestas

entre si, enumeramos em primeiro lugar os n_1 vértices de V_1 e depois os n_2 vértices de V_2 . Assim, a matriz de adjacência de G terá a forma

$$A(G) = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^T & 0 \end{pmatrix}$$

onde os zeros representam matrizes com entradas iguais a zero.

Seja λ um autovalor de G associado ao autovetor $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_{n_1}, y_1, \dots, y_{n_2}]$.

Portanto

$$[\lambda x_1, \dots, \lambda x_{n_1}, \lambda y_1, \dots, \lambda y_{n_2}] = A(G)\mathbf{x} = \left[B \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_{n_2} \end{pmatrix}, B^T \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{n_1} \end{pmatrix} \right].$$

Considere o vetor $\tilde{\mathbf{x}} = [x_1, \dots, x_{n_1}, -y_1, \dots, -y_{n_2}]$. Vamos buscar um autovalor associado a esse vetor

$$\begin{aligned} A(G)\tilde{\mathbf{x}} &= \left[B \begin{pmatrix} -y_1 \\ \vdots \\ -y_{n_2} \end{pmatrix}, B^T \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{n_1} \end{pmatrix} \right] \\ &= [-\lambda x_1, \dots, -\lambda x_{n_1}, \lambda y_1, \dots, \lambda y_{n_2}] \\ &= (-\lambda)[x_1, \dots, x_{n_1}, -y_1, \dots, -y_{n_2}] = (-\lambda)\tilde{\mathbf{x}}, \end{aligned}$$

ou seja, $-\lambda$ também é autovalor de G .

Além disso, para cada autovetor $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_{n_1}, y_1, \dots, y_{n_2}]$, com algum $y_i \neq 0$, obtemos um autovetor $\tilde{\mathbf{x}} = [x_1, \dots, x_{n_1}, -y_1, \dots, -y_{n_2}]$ linearmente independente, garantindo a mesma multiplicidade dos autovalores λ e $-\lambda$. Se houver autovetores da forma $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_{n_1}, y_1, \dots, y_{n_2}]$ com $y_i = 0$ para todo i , estes devem ser autovetores do autovalor zero. □

A seguir, mais um exemplo de espectro de uma grafo. O caminho \mathcal{P}_n é uma árvore, portanto bipartido. Veremos que seus autovalores são simétricos em relação ao valor zero. Para calcularmos o seu espectro, necessitamos de técnicas

não tão básicas. Apresentaremos uma encontrada nas notas de aula de Obata [17] e outra pode ser obtida no livro de Brouwer e Haemers [2].

Exemplo 8. A matriz de adjacência de \mathcal{P}_n pode ser escrita na forma tridiagonal. Para o cálculo do polinômio característico vamos usar a técnica de cofatores na primeira coluna e obtemos uma relação de recorrência.

$$\begin{aligned}
P_{\mathcal{P}_n}(x) &= \det(xI - A(\mathcal{P}_n)) = \begin{vmatrix} x & -1 & & & & \\ -1 & x & -1 & & & \\ & -1 & x & -1 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & -1 & x & -1 \\ & & & & & -1 & x \end{vmatrix} \\
&= x \cdot \begin{vmatrix} x & -1 & & & \\ -1 & x & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -1 & x & -1 \\ & & & & -1 & x \end{vmatrix} - (-1) \cdot \begin{vmatrix} -1 & & & & \\ -1 & x & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -1 & x & -1 \\ & & & & -1 & x \end{vmatrix} \\
&= xP_{\mathcal{P}_{n-1}}(x) - P_{\mathcal{P}_{n-2}}(x).
\end{aligned}$$

Temos também $P_{\mathcal{P}_1}(x) = x$ e $P_{\mathcal{P}_2}(x) = x^2 - 1$. Considere que para certo valor de x podemos escrever $P_{\mathcal{P}_n}(x) = \frac{\text{sen}((n+1)\theta)}{\text{sen}(\theta)}$, para $0 < \theta < \pi$. Assim

$$\begin{aligned}
P_{\mathcal{P}_n}(x) - xP_{\mathcal{P}_{n-1}}(x) + P_{\mathcal{P}_{n-2}}(x) &= 0 \\
\frac{\text{sen}(n\theta)\cos(\theta)}{\text{sen}(\theta)} + \cos(n\theta) - x\frac{\text{sen}(n\theta)}{\text{sen}(\theta)} + \frac{\text{sen}(n\theta)\cos(\theta)}{\text{sen}(\theta)} - \cos(n\theta) &= 0 \\
x &= 2\cos(\theta).
\end{aligned}$$

Como queremos as raízes do polinômio, precisamos achar θ tal que $P_{\mathcal{P}_n}(x) = 0$. Os valores de θ que zeram o $\text{sen}((n+1)\theta)$ são $\theta_k = \frac{k\pi}{n+1}$. Vale lembrar que as condições iniciais são satisfeitas

$$\begin{aligned}
P_{\mathcal{P}_1}(2\cos(\theta)) &= \frac{\text{sen}(2\theta)}{\text{sen}(\theta)} = 2\cos(\theta); \\
P_{\mathcal{P}_2}(2\cos(\theta)) &= \frac{\text{sen}(3\theta)}{\text{sen}(\theta)} = 4\cos^2(\theta) - 1.
\end{aligned}$$

Portanto, os autovalores do caminho \mathcal{P}_n são

$$\lambda_j = 2 \cos \left(\frac{j\pi}{n+1} \right), \quad j = 1, \dots, n. \quad (2.1)$$

Além disso,

$$\begin{aligned} \lambda_{n+1-j} &= 2 \cos \left(\frac{(n+1-j)\pi}{n+1} \right) = 2 \cos \left(\pi - \frac{j\pi}{n+1} \right) \\ &= -2 \cos \left(\frac{j\pi}{n+1} \right) = -\lambda_j. \end{aligned}$$

2.2.4 Isomorfismo de grafos

Nessa seção discutiremos alguns casos em que podemos extrair informação suficiente de um espectro de grafo a ponto de obtermos o próprio grafo. Primeiramente, vamos definir quando dois grafos $G_1 = (V_1, E_1)$ e $G_2 = (V_2, E_2)$, com $|V_1| = |V_2|$ e $|E_1| = |E_2|$, podem ser considerados iguais, embora possuam conjunto de arestas distintos.

Definição 14. *Dois grafos G_1 e G_2 são ditos grafos isomorfos quando existe uma bijeção entre o conjunto de seus vértices de modo que as adjacências sejam preservadas.*

Ou seja, G_1 e G_2 são isomorfos quando podemos obter um grafo a partir do outro fazendo uma nova enumeração dos vértices. Portanto, as matrizes de adjacência dos grafos são semelhantes, isto é, existe uma matriz de permutação P tal que $P^T A(G_1) P = A(G_2)$.

Definição 15. *Dois grafos G_1 e G_2 são chamados grafos co-espectrais quando têm os mesmo autovalores com suas respectivas multiplicidades, ou seja $\text{spect}(G_1) = \text{spect}(G_2)$.*

Se dois grafos forem isomorfos, então eles são co-espectrais pois matrizes semelhantes possuem o mesmo polinômio característico. Infelizmente a recíproca não

é verdadeira. Isto quer dizer que, embora grafos possam ter o mesmo espectro, não necessariamente serão isomorfos.

Exemplo 9. Os grafos na Figura 2.6 são co-espectrais mas não são isomorfos. Um deles tem um vértice de grau 5, enquanto que o grau máximo do outro grafo é 3. Ambos os grafos têm polinômio característico $P(\lambda) = \lambda^6 - 7\lambda^4 - 4\lambda^3 - 7\lambda^2 + 4\lambda - 1$, calculado diretamente usando as matrizes de adjacência.

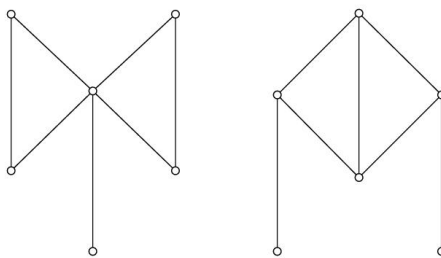


Figura 2.6: Grafos co-espectrais e não isomorfos

Com esse exemplo, percebemos que o espectro de um grafo não pode fornecer todas as informações a respeito do grafo. Em exemplos mais adiante, veremos que nem a conexidade pode ser obtida do espectro, em geral. Mas nem tudo está perdido! Para certas famílias de grafos, é possível obter o grafo diretamente do espectro de maneira única. Vamos em busca de algumas delas.

Proposição 10. *Um grafo G possui um único autovalor se e somente se G é totalmente desconexo, ou seja, G é o grafo trivial.*

Demonstração: Seja G um grafo de n vértices. Se G possui um único autovalor λ , ele possui multiplicidade n . Pela Proposição 3 temos que

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

ou seja, $\lambda = 0$. Como $A(G)$ é uma matriz tal que para qualquer vetor \mathbf{v} , temos $A(G)\mathbf{v} = 0$, $A(G)$ só pode ser a matriz nula (com todas as entradas iguais a zero),

pois a única matriz semelhante a matriz nula é ela mesma. Assim, $a_{ij} = 0$ para $1 \leq i, j \leq n$. Portanto, não há arestas no grafo G .

Por outro lado, se G é um grafo totalmente desconexo, então sua matriz de adjacência é a matriz nula, e todos seus autovalores são zero. □

Proposição 11. *Se um grafo G tem exatamente dois autovalores distintos $\lambda_1 > \lambda_2$, com multiplicidades m_1 e m_2 , respectivamente, então G é o grafo regular de grau λ_1 formado por m_1 cópias de K_{λ_1+1} . Além disso, $\lambda_2 = -1$ e $m_2 = m_1\lambda_1$.*

Demonstração: Seja $A = A(G)$ a matriz de adjacência de G , grafo com n vértices. Como A é diagonalizável, possui polinômio mínimo $h(x) = (x - \lambda_1)(x - \lambda_2)$. Aplicando esse polinômio para a matriz A , obtemos

$$A^2 - (\lambda_1 + \lambda_2)A + \lambda_1\lambda_2I = 0.$$

Tomando os elementos da diagonal, temos a relação $(A^2)_{kk} + \lambda_1\lambda_2 = 0$ para todo $1 \leq k \leq n$, pois as entradas da diagonal de A são nulas. Pela Proposição 2, $(A^2)_{kk}$ indica o número de cadeias de comprimento dois de v_k a v_k , portanto G é um grafo regular de grau $-\lambda_1\lambda_2$, pois todos os vértices têm o mesmo número de arestas. Usando a Proposição 7, $-\lambda_1\lambda_2 = \lambda_1$ (o grau é o maior autovalor). Pela Proposição 3 se $\lambda_1 = 0$, então λ_2 também se anula, o que contradiz o fato de serem distintos. Portanto $\lambda_2 = -1$ e G é regular de grau λ_1 .

Usando a equação acima, para uma entrada ij da matriz fora da diagonal, obtemos $(A^2)_{ij} = (\lambda_1 + \lambda_2)(A)_{ij}$. Se v_i e v_j são vértices de G que não são adjacentes, então não há caminhos de comprimento dois os ligando. Tomando o vértice v_i , ele é adjacente a λ_1 vértices e esses são adjacentes entre si (pois não pode haver um vértice adjacente a esses fora do conjunto de vértices adjacentes a v_i). Esses vértices formam uma componente conexa de G com a propriedade de ser λ_1 regular, ou seja, formam o K_{λ_1+1} . As demais componentes também serão iguais a K_{λ_1+1} .

Como o autovalor λ_1 tem multiplicidade um em K_{λ_1+1} , e λ_1 tem multiplicidade m_1 em G , é necessário que G seja formado por m_1 cópias de K_{λ_1+1} . Com o mesmo raciocínio, o autovalor -1 tem multiplicidade λ_1 em K_{λ_1+1} , e como possuímos m_1 cópias, segue que $m_2 = \lambda_1 m_1$. \square

Definição 16. Dizemos que o grafo G é caracterizado pelo seu espectro se todos os grafos co-espectrais a G são isomorfos a G .

Exemplo 10. Os grafos triviais são caracterizados pelo seu espectro. Os grafos completos, ou uniões de grafos completos de mesmo grau também são caracterizados por seus espectros, basta verificar o espectro usando a Proposição 6 e notar que grafos completos só são isomorfos a eles mesmos.

Vamos analisar a família dos grafos bipartidos e partir em busca da caracterização desse conjunto de grafos. Vimos na Proposição 9 que os grafos bipartidos têm espectro simétrico em relação a zero. A questão agora é: dado um espectro simétrico em relação a zero, que grafos podem tê-lo como seu espectro? Para responder a essa pergunta enunciamos o próximo resultado.

Proposição 12. Seja C um multiconjunto de números reais não vazio tais que, se $x \in C$ então $-x \in C$. Além disso, a multiplicidade de x é igual a de $-x$. Se C é espectro de algum grafo, então este grafo é bipartido.

Demonstração: Seja $n = |C|$. Supondo que C é espectro de um grafo G , então os elementos de C são os autovalores da matriz de adjacência $A(G)$. Pela Proposição 3, o número total de cadeias fechadas (rotuladas) de tamanho t com início (e fim) no vértice v_i é dado pela entrada ii da matriz A^t . Seja z o número de autovalores iguais a zero e escolha $t = 2k + 1$ um número ímpar. Temos que o número de cadeias fechadas (rotuladas) de tamanho t é igual a

$$\text{tr}(A^{2k+1}) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^{2k+1} = \sum_{i=1}^{\frac{n-z}{2}} (\lambda_i^{2k+1} + \lambda_{n+1-i}^{2k+1}) = \sum_{i=1}^{\frac{n-z}{2}} (\lambda_i^{2k+1} - \lambda_i^{2k+1}) = 0.$$

Portanto, o grafo não possui cadeias fechadas de tamanho ímpar, ou seja, é bipartido (Lema 1). □

Com esse resultado, temos que a classe dos grafos bipartidos é caracterizada pelo seu espectro. Mas isso não implica que cada grafo dessa família seja univocamente determinado pelo espectro. Veremos em seguida que é possível encontrar dois (ou mais) grafos bipartidos não isomorfos, mas com o mesmo espectro.

Proposição 13. *O grafo bipartido completo $K_{s,t}$ possui espectro $\{\lambda, 0, 0, \dots, 0, -\lambda\}$, onde $\lambda = \sqrt{st}$.*

Demonstração: Separando os vértices em dois subconjuntos, V_1 com s vértices e V_2 com t vértices ($s + t = n$), obtemos a matriz de adjacência da forma

$$A = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^T & 0 \end{pmatrix}$$

onde B é a matriz de ordem $s \times t$ com 1 em todas as entradas (todos os vértices de V_1 são adjacentes a todos os vértices de V_2). Tomando $e_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ o i -ésimo vetor canônico, temos que $e_1 - e_i$ para $2 \leq i \leq s$ é autovetor de A , associado ao autovalor 0. E $e_{s+1} - e_i$ para $s + 2 \leq i \leq n$ também é autovetor associado ao autovalor 0. Assim temos que 0 é autovalor com multiplicidade $n - 2$.

Restam dois autovalores para serem encontrados, e eles satisfazem a propriedade de somarem zero, portanto são da forma λ e $-\lambda$. Há duas possibilidades: se $\lambda = 0$, isso implicaria que o grafo é o grafo sem arestas (com n vértices isolados) o que não queremos; então $\lambda \neq 0$.

Fazendo o cálculo para encontrar esse autovalor, seja $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_n)$ $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ e $\lambda > 0$. Obtemos um sistema de n equações e $n + 1$ variáveis

$$\begin{cases} \lambda v_i = \sum_{j=s+1}^t v_j, & \text{para } 1 \leq i \leq s; \\ \lambda v_i = \sum_{j=1}^s v_j, & \text{para } s + 1 \leq i \leq n; \end{cases}$$

e teremos que \mathbf{v} é da forma $(1, \dots, 1, \frac{s}{\lambda}, \dots, \frac{s}{\lambda})$. E quando comparamos com a equação $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$, encontramos $\lambda = \frac{st}{\lambda}$ o que nos dá o resultado. \square

Exemplo 11. As árvores são grafos bipartidos, pois não possuem ciclos. Em particular, as estrelas (\mathcal{S}_n) são bipartidos completos com polinômio característico $[\lambda^2 - (n-1)] \cdot \lambda^{n-2}$ (facilmente calculado por determinantes de $\lambda I - A(\mathcal{S}_n)$) e espectro

$$\text{spect}(\mathcal{S}_n) = \begin{pmatrix} \sqrt{n-1} & 0 & -\sqrt{n-1} \\ 1 & n-2 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

No entanto, os grafos bipartidos completos não são, em geral, caracterizados pelo seu espectro. Para a maior parte dos casos é possível construir um grafo não isomorfo mas com o mesmo espectro de $K_{s,t}$, se não exigirmos que tal grafo seja conexo.

Proposição 14. *Seja G um grafo com n vértices e espectro $\{\lambda, 0, \dots, 0, -\lambda\}$. Então*

- (i) *se $\lambda^2 = p$ primo, então $G = K_{1,p} \cup (n-p-1)K_1$ (grafo estrela e vértices isolados), para $p \leq n-1$;*
- (ii) *se $\lambda^2 = c$ é composto, então G é bipartido e há no mínimo um par de grafos não isomorfos mas com o mesmo espectro de G , para $c \leq n-1$;*
- (iii) *se λ é inteiro e $n = 2\lambda$, então $G = K_{\lambda,\lambda}$.*

Demonstração: Pela Proposição 12, o grafo G é bipartido. Além disso, como $\sum_i \lambda_i^2 = 2m$, temos que $\lambda^2 = m$ é um número inteiro.

Com uma enumeração adequada dos vértices, temos a matriz de adjacência do tipo

$$A = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^T & 0 \end{pmatrix},$$

onde B é matriz de ordem $s \times t$, com $s + t = n$. Se o posto de B for zero, então teremos que B é a matriz nula e G terá todos seus autovalores iguais a zero. Assim, tanto B como B^T devem ter posto positivo. Como só temos 2 autovalores não nulos para G , é necessário que o posto de B e de B^T seja um. Como B tem posto um, todas as linhas de B são linearmente dependentes, e portanto iguais (pois a matriz B é formada só por zeros e uns). Caso haja uma entrada nula nas linhas de B , toda a coluna será de zeros e portanto essa coluna representa um vértice isolado. Retirando esses vértices isolados, teremos um grafo bipartido completo (pois a linha de B será formada por uns).

Resta-nos encontrar o grafo. Por ser bipartido completo $K_{s,t}$, com σ pontos isolados, temos que $s.t = \lambda^2$ e $s + t + \sigma = n$.

- (i) Se $\lambda^2 = p$ é primo, então só há uma solução para $s.t = p$ que é $s = 1$ e $t = p$ (ou vice-versa). Assim, encontramos que G deve ser o grafo $K_{1,p}$ (isomorfo a $K_{p,1}$) unido com $\sigma = n - p - 1$ vértices isolados (que correspondem a mais σ autovalores iguais a zero). Caso $p \geq n$ então não há grafo que possui o espectro apresentado, pois G possui no mínimo $p + 1$ vértices (os vértices de $K_{1,p}$).
- (ii) Se $\lambda^2 = c$ é número composto, então há no mínimo duas possibilidades distintas de encontrarmos s e t . Assim, G poderia ser o grafo $K_{s_1,t_1} \cup (n - s_1 - t_1)K_1$ ou o grafo $K_{s_2,t_2} \cup (n - s_2 - t_2)K_1$. As duas opções são garantidas uma vez que temos $c + 1 \leq n$ ($\max\{s_i + t_i\} = c + 1$).
- (iii) Se λ é inteiro e $n = 2\lambda$ teremos o sistema para resolver

$$\begin{cases} s.t = \lambda^2 \\ s + t + \sigma = 2\lambda \end{cases}$$

do qual obtemos a equação

$$t^2 + (\sigma - 2\lambda)t + \lambda^2 = 0$$

que possui solução real se e somente se $\sigma(\sigma - 4\lambda) \geq 0$. Como o número de vértices isolados não pode ultrapassar 2λ , a única solução é $\sigma = 0$. Assim, $s = t = \lambda$, e o grafo é o bipartido completo de ordem λ ($K_{\lambda,\lambda}$). \square

Os espectros da forma $\{\lambda, 0, \dots, 0, -\lambda\}$, dependendo do número de autovalores, podem não caracterizar grafos, ou ainda podem não representar grafos. Uma observação importante é que o número de autovalores não deve ser menor do que o $\min\{s + t\}$, para $s \cdot t = \lambda^2$. Para cada espectro desse tipo, podemos procurar qual o maior número de autovalores no espectro para que o grafo seja caracterizado por esse espectro.

Quando considerarmos a condição de que o grafo é conexo ($\sigma = 0$), então teremos a caracterização pelo espectro pois a solução do sistema

$$\begin{cases} s \cdot t = \lambda^2 \\ s + t = n \end{cases},$$

quando existir (s e t inteiros e positivos), é única.

Exemplo 12. Se o número de autovalores n for grande o suficiente para admitir duas somas distintas $s + t \leq n$ tais que $s \cdot t = \lambda^2$, teremos a não caracterização. Veja na Figura 2.7 os grafos $K_{3,4} \cup K_1$ e $K_{2,6}$, que possuem espectro

$$\{\sqrt{12}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -\sqrt{12}\}.$$

Podemos concluir que os grafos $K_{s,t}$ tais que

$$s + t = \min\{x + y : x \cdot y = s \cdot t\}$$

são caracterizados pelo seu espectro. O grafo $K_{3,4}$ é caracterizado pelo seu espectro que possui sete elementos ($\min\{s + t\} = 7$ onde $s \cdot t = 12$).

Um problema interessante é buscar, para cada valor de λ , qual o maior

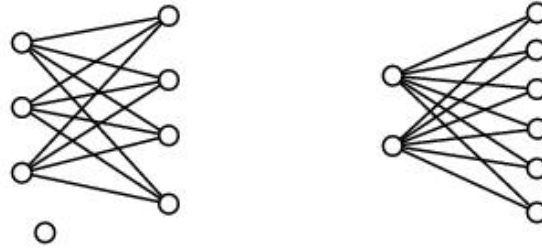


Figura 2.7: Grafos bipartidos co-espectrais e não isomorfos

número de vértices admissível para que tenhamos a caracterização pelo espectro. Para $\lambda = \sqrt{12}$ sabemos que é 7, pois para 8 vértices já temos no exemplo que há um par de grafos não isomorfos mas co-espectrais. Esse número deve ser menor do que a segunda menor soma de $s+t$, onde $st = \lambda^2$, forçando assim uma única decomposição de λ^2 . Para $\lambda = 5$, de 10 até 25 vértices temos a caracterização: $K_{5,5} \cup \sigma K_1$, onde $\sigma = n - 10$. Com 26 vértices, poderíamos ter os grafos $K_{5,5} \cup 16K_1$ ou $K_{1,25}$.

Podemos afirmar que uma estrela $\mathcal{S}_{p+1} = K_{1,p}$ é caracterizada pelo seu espectro se e somente se p é primo. As estrelas cujo número de vértices é igual ao sucessor de um número composto (c) têm seu espectro igual ao de um grafo $K_{c_1,c_2} \cup \sigma K_1$, onde $c_1 \cdot c_2 = c$ e $\sigma = c + 1 - c_1 - c_2$. No exemplo anterior, vimos que \mathcal{S}_{26} não é caracterizado pelo espectro.

Os grafos bipartidos completos do tipo $K_{a,a+k}$, com $a \geq 2$ e $0 \leq k \leq 3$ são todos caracterizados pelo seu espectro. Basta notar que não é possível obter o produto $a(a+k)$ com fatores do tipo $a+i$ e $a+k-j$, para $i < j$ e $a \geq 2$. Com $k = 4$ ou $k = 5$, temos a não caracterização somente em dois casos: $K_{2,6}$ (vimos no exemplo que é co-espectral a $K_{3,4} \cup K_1$) e $K_{3,8}$ (co-espectral a $K_{4,6} \cup K_1$). Para grafos bipartidos completos $K_{s,t}$, onde a diferença $|s-t| = k \geq 6$, há no mínimo $\lfloor \frac{k-1}{2} \rfloor$ exceções de grafos que possuem um co-espectral não isomorfo.

2.3 Matriz Laplaciana

Introduzimos aqui o conceito de matriz laplaciana de um grafo. Vimos anteriormente que o espectro do grafo não consegue identificar se o grafo é ou não conexo, em geral. Com os autovalores da matriz laplacianas poderemos identificar o número de componentes conexas de um grafo.

Definição 17. *Seja D a matriz diagonal dos graus dos vértices de um grafo G , ou seja, a matriz com entradas $D_{ii} = d(v_i)$ e seja A a matriz de adjacência do grafo. Definimos a matriz*

$$L = D - A$$

como matriz laplaciana de G .

De maneira semelhante à feita com a matriz de adjacência, podemos definir o polinômio característico laplaciano e o espectro laplaciano de um grafo (*Lespect*).

Definição 18. *Dado um grafo G , definimos*

$$P_L(\mu) = \det(\mu I - L(G))$$

o polinômio característico laplaciano de G . Para simplificar, vamos chamá-lo simplesmente de polinômio laplaciano.

Definição 19. *O espectro laplaciano é o multiconjunto das raízes do polinômio laplaciano, com suas respectivas multiplicidades. Usualmente, enumeramos os valores em ordem decrescente $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n$.*

O polinômio laplaciano e o espectro laplaciano estão bem definidos, independente da ordenação que damos aos vértices.

A matriz laplaciana é também simétrica, e portanto possui todos seus autovalores reais. Além disso, esses autovalores são todos não negativos. Isso decorre do seguinte fato.

Proposição 15. *Dado um grafo G , a matriz laplaciana $L(G)$ pode ser escrita como o produto de uma matriz por sua transposta. Segue que L é uma matriz positiva semidefinida.*

Demonstração: Sejam n o número de vértices do grafo e $e(G)$ o número de arestas. Seja β a matriz de incidência com respeito a uma ordenação. Ou seja, β é uma matriz de ordem $n \times e(G)$ e definimos as entradas por

$$b_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } e_j \text{ é incidente a } v_i \text{ e } v_k \text{ e } i < k; \\ -1, & \text{se } e_j \text{ é incidente a } v_i \text{ e } v_k \text{ e } i > k; \\ 0, & \text{caso } e_j \text{ não seja incidente a } v_i. \end{cases}$$

Seja $H = \beta \cdot \beta^T$. A linha i da matriz β possui exatamente $d(v_i)$ elementos não nulos. Ao multiplicarmos as matrizes teremos que os elementos h_{ij} são o produto interno entre a linha i e a linha j de β .

No caso $i = j$ teremos que $h_{ii} = d(v_i)$, pois o número 1 é somado $d(v_i)$ vezes. Para $i \neq j$, ao fazermos o produto interno, teremos duas situações: ou v_i e v_j são adjacentes, o que nos fornece apenas uma posição de ambos os vetores não nula e resulta em $h_{ij} = -1$; ou v_i e v_j não são adjacentes, e quando multiplicarmos as linhas correspondentes de β teremos para cada posição no mínimo um valor nulo resultando em $h_{ij} = 0$. Portanto H , de ordem $n \times n$, é exatamente igual a matriz L .

A matriz L é matriz positiva semidefinida pois pode ser escrita como produto de uma matriz por sua transposta e portanto possui todos seus autovalores reais e não negativos. Ver resultados de Álgebra Linear no Apêndice (Proposições 30 e 31).

□

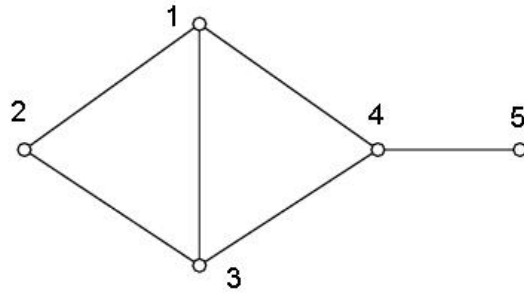


Figura 2.8: Exemplo para matriz laplaciana

Exemplo 13. Considere o grafo Figura 2.8. Sua matriz laplaciana é

$$L(G) = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix},$$

possui polinômio laplaciano

$$P_L(\mu) = \mu^5 - 12\mu^4 + 50\mu^3 - 82\mu^2 + 40\mu$$

e espectro laplaciano $Lspect = \{4,481; 4; 2,689; 0,830; 0\}$.

Como no caso da matriz de adjacência, o polinômio laplaciano de um grafo com várias componentes conexas é o produto dos polinômios laplacianos de cada componente. O espectro laplaciano é a união do espectro de cada componente.

2.3.1 Autovalores laplacianos

Nesta seção o objetivo é determinar propriedades de grafos a partir de seu espectro laplaciano. Um dos principais resultados identifica o número de componentes conexas do grafo somente com a visualização do seu espectro laplaciano.

Proposição 16. *Seja G um grafo com n vértices e sejam $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n$ os autovalores de $L(G)$. Então*

(i) $\mu_n = 0$;

(ii) G é conexo se e somente se $\mu_{n-1} > 0$;

(iii) a multiplicidade do autovalor 0 é igual ao número de componentes conexas de G ;

(iv) se G é regular de grau k , $\mu_i = k - \lambda_{n-i+1}$, onde λ_i autovalor da matriz $A(G)$.

Demonstração: Primeiramente note que para cada linha de L , temos uma entrada igual ao grau do vértice representado por essa linha e a mesma quantidade de entradas com valor -1 , cuja soma é igual a zero. Ou seja $L \cdot \mathbf{1} = \mathbf{0} = 0 \cdot \mathbf{1}$. O número zero é autovalor e como todos eles são maiores ou iguais a zero, temos $\mu_n = 0$.

Vamos supor que G é conexo. Seja β a matriz de incidência definida na demonstração da Proposição 16. Seja \mathbf{z} um vetor tal que $\beta^T \mathbf{z} = \mathbf{0}$. Como cada linha de β^T tem somente duas entradas não nulas com valor 1 e -1 , precisamos que $z_i = z_j$ nas respectivas posições. Essas posições decorrem do fato de v_i e v_j serem adjacentes. Mas como o grafo é conexo obteremos $\mathbf{z} = z_1 \cdot \mathbf{1}$. Ou seja, a dimensão do espaço nulo de β^T é 1. Segue de um resultado de Álgebra Linear que o posto de β^T é $n - 1$ (veja no Apêndice: Teorema 13). Portanto, como o posto de L é igual ao posto de β^T (Lema 14 no Apêndice) temos que a nulidade de L é 1. Logo, como só há um autovalor zero, os demais são positivos.

No caso de G não ser conexo, aplicamos o resultado para cada componente conexa de G . Cada uma delas terá um autovalor zero, e G possui a união desses autovalores, ou seja, espectro de G possui tantos zeros quanto o número de componentes conexas.

Usando a definição da matriz laplaciana e o fato que o grafo é regular,

podemos escrever

$$L = k \cdot I - A$$

onde I é a matriz identidade de ordem n . Seja μ um autovalor e \mathbf{z} o autovetor associado, assim

$$L\mathbf{z} = (k \cdot I - A)\mathbf{z}$$

$$\mu\mathbf{z} = k\mathbf{z} - A\mathbf{z}$$

$$\mu\mathbf{z} = (k - \lambda_j)\mathbf{z}.$$

Quanto maior queremos μ , menor deve ser o valor de λ_j . Portanto $\mu_i = k - \lambda_{n-i+1}$.

□

Proposição 17. *Seja G um grafo com n vértices e m arestas, e sejam*

$\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n$ os seus autovalores laplacianos. Então

$$\sum_{i=1}^n \mu_i = 2m.$$

Em particular, caso G seja uma árvore conexa, então $\sum_{i=1}^n \mu_i = 2(n - 1)$.

Demonstração: A primeira afirmação decorre do fato de que a soma das raízes do polinômio característico é igual ao traço da matriz, e para cada aresta teremos duas unidades sendo contadas na soma dos graus: uma para cada vértice ao qual a aresta é incidente, ou seja, $\sum d(v_i) = 2m$.

Pelo Lema 2, as árvores possuem $m = n - 1$ arestas.

□

Com isso, concluímos que a média dos autovalores laplacianos é igual a média dos graus dos vértices ($\bar{d} = \frac{2m}{n}$). Daqui em diante, iremos assumir esse fato como definição.

Proposição 18. *Sejam G um grafo com n vértices, μ_i os autovalores laplacianos e $d(v_i)$ os graus dos vértices. Então vale a igualdade*

$$\sum_{i=1}^n \mu_i^2 = \sum_{i=1}^n [d(v_i)^2 + d(v_i)].$$

Esse número é inteiro par.

Demonstração: Por definição, $L = D - A$. Vamos aplicar o traço na matriz L^2 .

$$\begin{aligned} L^2 &= D^2 - DA - AD + A^2 \\ \text{tr}(L^2) &= \text{tr}(D^2) - 2\text{tr}(AD) + \text{tr}(A^2) \end{aligned}$$

Lembrando que o traço de L^2 é igual a soma do quadrado dos autovalores laplacianos (Lema 13 no Apêndice), pela Proposição 3 e verificando que $(AD)_{ii} = a_{ii} \cdot d_{ii} = 0$ obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \mu_i^2 &= \sum_{i=1}^n d(v_i)^2 + 2m \\ &= \sum_{i=1}^n d(v_i)^2 + \sum_{i=1}^n d(v_i) \\ &= \sum_{i=1}^n [d(v_i)^2 + d(v_i)]. \end{aligned}$$

Como $d \cdot (d + 1)$ é par, segue a afirmação. □

Exemplo 14. As estrelas têm seu espectro laplaciano facilmente calculado. A sua matriz $L(\mathcal{S}_n)$ tem a forma

$$\begin{pmatrix} n-1 & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -1 & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Expandindo o determinante

$$\det \begin{pmatrix} \mu - (n - 1) & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \mu - 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 1 & & & \mu - 1 \end{pmatrix}$$

segundo a primeira coluna, obtemos o polinômio característico laplaciano

$(\mu - n) \cdot (\mu - 1)^{n-2} \cdot \mu$ e o espectro

$$Lespect(\mathcal{S}_n) = \begin{pmatrix} n & 1 & 0 \\ 1 & n - 2 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Já para encontrar o espectro laplaciano do caminho são necessárias técnicas mais sofisticadas. Uma delas pode ser encontrada em [2]. Os autovalores laplacianos têm a forma

$$\mu_j(\mathcal{P}_n) = 2 - 2 \cos \left(\frac{(n - j)\pi}{n} \right), \quad j = 1, \dots, n. \quad (2.4)$$

2.4 Energia

Em 1977, Ivan Gutman introduziu o conceito matemático de energia de um grafo baseado na representação dos hidrocarbonetos. Mas essa definição não ficou restrita a grafos moleculares (representações de moléculas) e foi estendido para grafos quaisquer. Mais recentemente, criou-se o conceito de energia laplaciana, definido a partir dos autovalores da matriz laplaciana do grafo. Esse é o objeto que motivou a busca pelo resultado apresentado no Capítulo 4.

2.4.1 Energia de grafos

Definição 20. A energia de um grafo G com n vértices é o número

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

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

Exemplo 15. Para o grafo completo K_n , conhecemos todos os autovalores e a energia é $E(K_n) = 2(n-1)$.

Para a maioria dos grafos não é possível determinar com exatidão a energia, pois seria necessário conhecermos todos os autovalores do grafo, isto é, precisaríamos encontrar todas as raízes do polinômio característico do grafo. O que muitas vezes se faz são estimativas para a grandeza do valor da energia.

Vimos que a soma dos autovalores do grafo é zero (Proposição 3). Portanto o valor da soma dos autovalores positivos é igual à soma dos negativos, a menos de um sinal. Podemos escrever a energia como

$$E(G) = 2 \sum_{\lambda_i > 0} \lambda_i. \quad (2.5)$$

Proposição 19. Se G é um grafo com n vértices e m arestas então

$$E(G) \leq \sqrt{2mn}.$$

Demonstração: Sejam $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ os autovalores de G . Então, usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz para o produto interno e a Proposição 3, obtemos

$$\begin{aligned} E(G)^2 &= \left(\sum_{i=1}^n |\lambda_i| \right)^2 = \langle (|\lambda_1|, \dots, |\lambda_n|), (1, \dots, 1) \rangle^2 \\ &\leq \|(|\lambda_1|, \dots, |\lambda_n|)\|^2 \cdot \|(1, \dots, 1)\|^2 \\ &= \left(\sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^n 1 \right) \\ &= \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 \right) \cdot n = 2m \cdot n. \end{aligned}$$

Portanto, como as variáveis são positivas, temos $E(G) \leq \sqrt{2mn}$. \square

Exemplo 16. A igualdade $E(G) = \sqrt{2mn}$ vale se e somente se todos os autovalores de G são iguais em módulo. Acompanhando a demonstração da Proposição 19, teremos a igualdade no passo em que aplicamos a desigualdade de Cauchy-Schwarz se e somente se o vetor $(|\lambda_1|, \dots, |\lambda_n|)$ for colinear com o vetor de entradas todas iguais a um, ou seja, $|\lambda_i| = \lambda$ para todo i . Quando isso ocorrer, haverá dois casos:

- (i) todos os autovalores são iguais e pela Proposição 10 o grafo não tem arestas ($m = 0$). Os autovalores são todos zeros e $E(G) = 0$;
- (ii) há dois autovalores, λ e $-\lambda$ com a mesma multiplicidade s , devido à Proposição 3. Portanto, pela Proposição 11, o grafo é uma união de grafos completos. Contudo sabemos que um dos autovalores deve ser -1 , o que resta para o outro ser 1. Temos que $n = 2s$, o que nos dá que esse grafo é formado por $\frac{n}{2}$ cópias de K_2 .

Proposição 20. *Se G é um grafo com m arestas então*

$$2\sqrt{m} \leq E(G) \leq 2m.$$

Demonstração: Seja G um grafo com n vértices e m arestas, e sejam $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ os seus autovalores. Temos que $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 0$. Assim

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i \right)^2 = \sum_{1 \leq i, j \leq n} \lambda_i \lambda_j \\ &= \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 + \sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j \\ &= 2m + \sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j, \end{aligned}$$

ou seja, $\sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j = -2m$. Agora, calculando a energia do grafo e usando a desigualdade triangular obtemos

$$\begin{aligned} E(G)^2 &= \left(\sum_{i=1}^n |\lambda_i| \right)^2 = \sum_{1 \leq i, j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j| \\ &= \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 + \sum_{i \neq j} |\lambda_i| |\lambda_j| \\ &\geq 2m + \left| \sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j \right| \\ &= 2m + |-2m| = 4m, \end{aligned}$$

o que nos dá a desigualdade $E(G) \geq 2\sqrt{m}$.

Para a segunda desigualdade, precisamos encontrar uma cota superior para o número de vértices em função do número de arestas. Cada aresta é incidente a dois vértices, o caso extremo ocorre quando para cada aresta temos dois vértices distintos dos demais. Para um grafo que não possua vértices isolados, $n \leq 2m$. E usando a Proposição 19

$$E(G) \leq \sqrt{2mn} \leq \sqrt{4m^2} = 2m.$$

No caso geral, um grafo que tenha z vértices isolados tem a mesma energia que o subgrafo sem tais vértices isolados, pois esses vértices contribuem com autovalores zero ao espectro, inalterando o valor da energia. □

2.4.2 Energia laplaciana

Definição 21. A energia laplaciana do grafo G com n vértices é o número

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

onde μ_1, \dots, μ_n são os autovalores laplacianos de G e \bar{d} a sua média.

A definição formal de energia laplaciana é a soma do valor absoluto da diferença entre os autovalores laplacianos e sua média. Mas como a soma dos autovalores laplacianos é soma dos graus dos vértices (o traço das matrizes é invariante

por mudança de coordenadas), a média é igual ao grau médio.

Proposição 21. *Para um grafo G com n vértices, podemos expressar a energia laplaciana como*

$$E_L(G) = 2t\bar{d} - 2 \sum_{\mu_i < \bar{d}} \mu_i \quad (2.6)$$

ou

$$= 2 \sum_{\mu_i > \bar{d}} \mu_i - 2s\bar{d}, \quad (2.7)$$

onde t e s são o número de autovalores menores e maiores a \bar{d} , respectivamente.

Demonstração: Vamos separar a soma em duas parcelas, ambas com termos positivos. Vamos achar a relação somente para t , pois para s é semelhante.

$$\begin{aligned} E_L(T) &= \sum_{i=1}^n |\mu_i - \bar{d}| \\ &= \sum_{\mu_i < \bar{d}} (\bar{d} - \mu_i) + \sum_{\mu_i \geq \bar{d}} (\mu_i - \bar{d}) \\ &= 2 \sum_{\mu_i < \bar{d}} (\bar{d} - \mu_i) + \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{d}) \\ &= 2t\bar{d} - 2 \sum_{\mu_i < \bar{d}} \mu_i + 0. \end{aligned} \quad \square$$

Exemplo 17. A estrela \mathcal{S}_n tem somente um autovalor laplaciano maior que a média \bar{d} , com valor n (veja o espectro laplaciano em (2.2)). Assim,

$$E_L(\mathcal{S}_n) = 2n - 2\bar{d} = 2n - 4 + \frac{4}{n}. \quad (2.8)$$

Há algumas relações que correspondem a energia tradicional com a energia laplaciana. Segue uma delas apresentada no artigo de Gutman e Zhou [8].

Proposição 22. *Para um grafo G k -regular,*

$$E(G) = E_L(G).$$

Demonstração: Vamos calcular a energia laplaciana de G , usando a Proposição 16. E como G é k -regular, $\bar{d} = k$.

$$\begin{aligned} E_L(G) &= \sum_{i=1}^n |\mu_i - \bar{d}| \\ &= \sum_{i=1}^n |k - \lambda_{n-i+1} - k| \\ &= \sum_{i=1}^n |\lambda_{n-i+1}| = E(G). \end{aligned}$$

□

Como a definição de ambas energias pode ser reescrita como a soma do valor absoluto da diferença entre os autovalores e sua média, poderíamos esperar que elas se comportassem de maneira semelhante. Pelo resultado anterior, temos até uma igualdade entre as duas energias.

Mas elas também possuem diferenças. Por exemplo, quando acrescentamos um vértice isolado em um grafo, o valor da energia não muda, pois houve um incremento de zero, enquanto que a energia laplaciana sofre alteração (o valor da média dos graus é alterada).

Estudando o comportamento de algumas árvores, Radenković e Gutman [18] perceberam que poderia haver uma inversão no ordenamento da energia laplaciana das árvores em relação ao ordenamento da energia (usual) e lançaram uma conjectura. Esse tema será abordado no Capítulo 4.

3 OBTENÇÃO DO ESPECTRO DE ÁRVORES

Nesse capítulo apresentaremos dois algoritmos para o cálculo dos polinômios característicos (usual e laplaciano) de árvores, sem a necessidade de explicitar as matrizes de adjacência e laplaciana. Por fim, temos uma estrutura simplificada de uma matriz cujos autovalores estão contidos no espectro laplaciano para um grupo de árvores: as árvores de Bethe. Mais especificamente, introduziremos uma família especial de árvores que terá um papel muito importante no próximo capítulo.

3.1 Polinômio característico e laplaciano via algoritmo *V1*

Em [11], Jacobs, Machado e Trevisan apresentam um algoritmo para o cálculo do polinômio característico (tradicional) de uma árvore. Esse algoritmo está baseado na triangularização da matriz $\lambda I - A$. Dada uma árvore, elegemos um vértice como raiz e aqueles a quem é adjacente serão seus filhos. Os adjacentes a esses filhos (exceto a raiz) serão seus filhos, e assim sucessivamente. A árvore terá a forma da Figura 3.1.

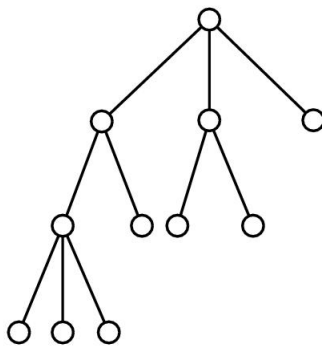


Figura 3.1: Árvore organizada para aplicação do algoritmo

O valor x é atribuído a todos os vértices. Começando das folhas em

direção a raiz, vamos calcular o valor $a(v_i)$ da seguinte maneira

$$a(v_i) \leftarrow a(v_i) - \sum_{v \in F_i} \frac{1}{a(v)} \quad (3.1)$$

onde F_i é o conjunto de filhos de v_i . No caso das folhas (que não possuem filhos), $a(v_i) = x$.

Finalizado o processo, temos a matriz $xI - A$ triangularizada, com entradas $a(v_i)$ nas diagonais. Por fim, multiplicamos todos os valores de $a(v_i)$ (equivalente a aplicar o determinante), obtendo o polinômio característico da árvore.

Exemplo 18. Vamos calcular o polinômio característico da árvore da Figura 3.1 usando o algoritmo apresentado. A cada passo, calculamos $a(v_i)$ de todos os vértices do nível. Veja os passos, da Figura 3.2 à Figura 3.5.

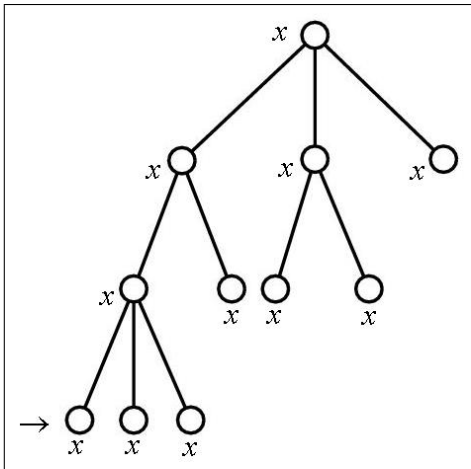


Figura 3.2: Pol. caract. via algoritmo *V1*: Passo 1

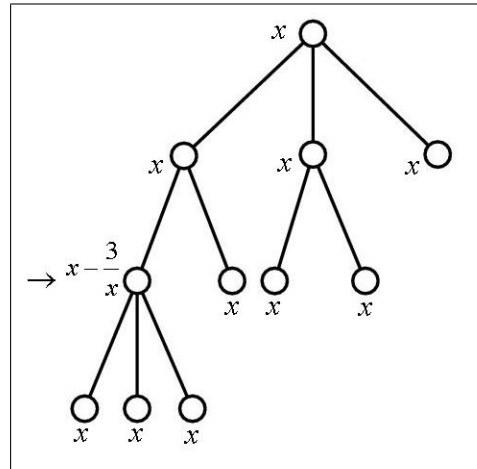


Figura 3.3: Pol. caract. via algoritmo *V1*: Passo 2

Ao efetuarmos o produto de todos os termos, obtemos o polinômio característico

$$(x^8 - 10x^6 + 30x^4 - 28x^2 + 6) \cdot x^3.$$

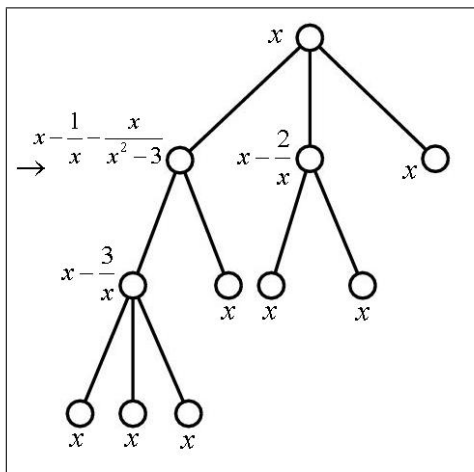


Figura 3.4: Pol. caract. via algoritmo *V1*: Passo 3

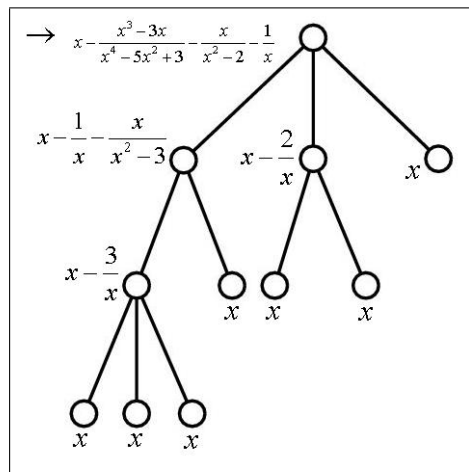


Figura 3.5: Pol. caract. via algoritmo *V1*: Passo 4

Para calcularmos o polinômio característico laplaciano, podemos usar o mesmo algoritmo fazendo uma modificação no valor inicial. Na matriz de adjacência, os termos da diagonal são zero, enquanto que na matriz laplaciana são o grau do vértice. Dessa forma, atribuímos o valor $x - d(v_i)$ para cada vértice e aplicamos (3.1). Esse processo é semelhante a triangularização da matriz $\lambda I - L$.

Exemplo 19. Vamos calcular o polinômio característico laplaciano da árvore da Figura 3.1. Os valores iniciais para cada vértice estão dispostos na Figura 3.6.

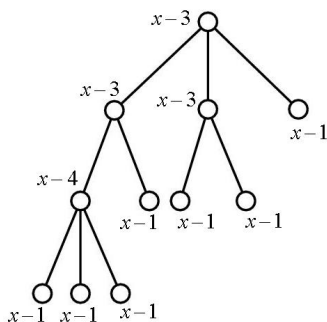


Figura 3.6: Pol. caract. Laplaciano via algoritmo *V1*: Passo 1

Aplicando o algoritmo, nível a nível, e efetuando o produto de todos $a(v_i)$ encontramos o polinômio

$$(x^7 - 17x^6 + 111x^5 - 349x^4 + 543x^3 - 391x^2 + 119x - 11) \cdot (x - 1)^3 \cdot x.$$

3.2 Localizando autovalores via algoritmo V2

Para calcularmos a soma de autovalores maiores que certo valor, algumas vezes teremos a necessidade de sabermos quantos termos temos de somar. Para isso, apresentamos um algoritmo semelhante ao anterior, publicado por Jacobs e Trevisan [12], em que é demonstrado o seguinte resultado para a matriz de adjacência de árvores.

Seja α um número real. Organizando a árvore da mesma maneira àquela feita para aplicação do algoritmo V1 (Figura 3.1), atribuímos o valor inicial $-\alpha$ para todos os vértices. O algoritmo é aplicado das folhas em direção à raiz. Para calcular o valor de $a(v)$ da cada vértice, considere o conjunto F_i de filhos de v_i , para os quais já se deve ter calculado o valor $a(v)$.

Se $F_i = \emptyset$ então

$$a(v_i) \leftarrow a(v_i);$$

Se $0 \notin \{a(v) : v \in F_i\}$ então

$$a(v_i) \leftarrow a(v_i) - \sum_{v \in F_i} \frac{1}{a(v)};$$

Se $0 \in \{a(v) : v \in F_i\}$, elegemos algum v_k de F_i tal que $a(v_k) = 0$, suprimimos a aresta entre v_i e o vértice que não é seu filho (cortamos a relação entre v_i e seu pai) e fazemos a substituição

$$a(v_i) = -\frac{1}{2}; \quad a(v_k) = 2.$$

Teorema 2. [12] *Após a aplicação do algoritmo para $-\alpha$, o número de $a(v)$ negativos, positivos e iguais a zero é igual ao número de autovalores da árvore que são maiores, menores e iguais a α .*

Na demonstração desse resultado, não há hipóteses sobre a matriz ser de adjacência. Portanto, como apontado pelos autores, podemos estender para as matrizes laplacianas tomando cuidado no valor atribuído inicialmente. No cálculo do polinômio característico de $xI - A$, temos o elemento x na diagonal principal. Se queremos saber sobre a disposição dos autovalores em torno de α , executamos o algoritmo atribuindo $-\alpha$ como valor inicial. Para o polinômio característico laplaciano, usamos a matriz $xI - L$ com entradas na diagonal principal igual a $x - d(v_i)$. Se quisermos obter a distribuição dos autovalores laplacianos em torno de α , é razoável pensar que precisamos executar o algoritmo com o valor inicial $d(v_i) - \alpha$, o que de fato ocorre.

Exemplo 20. Vamos executar o algoritmo para a árvore da Figura 3.1. Aplicando para o valor $\alpha = 0$, vamos procurar o número de autovalores positivos. Seguindo passo a passo o algoritmo, obtemos as quatro figuras seguintes:

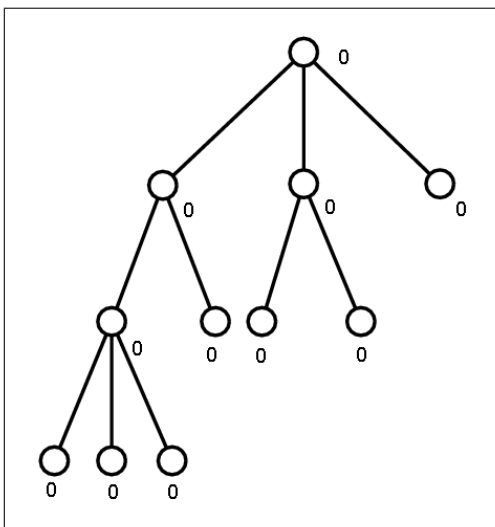


Figura 3.7: Algoritmo $V2$: Passo 1

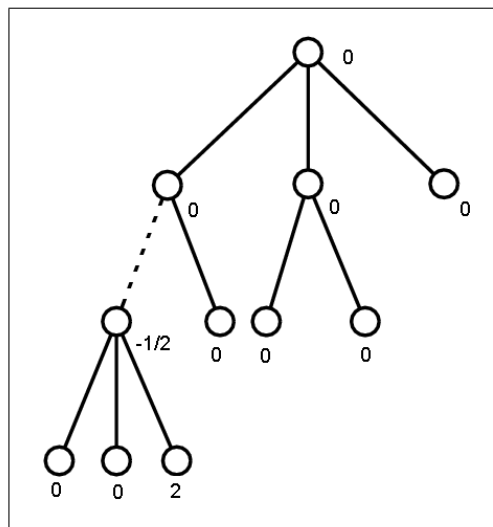
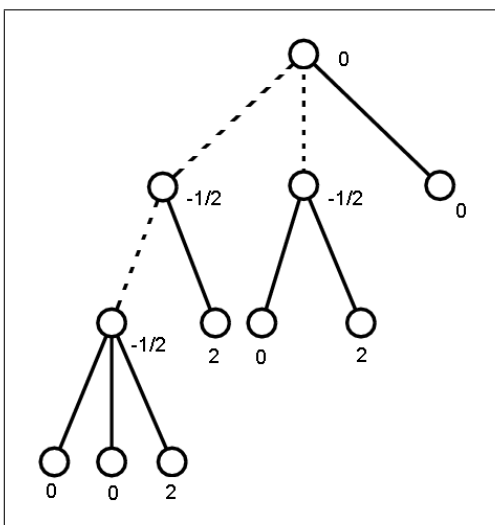
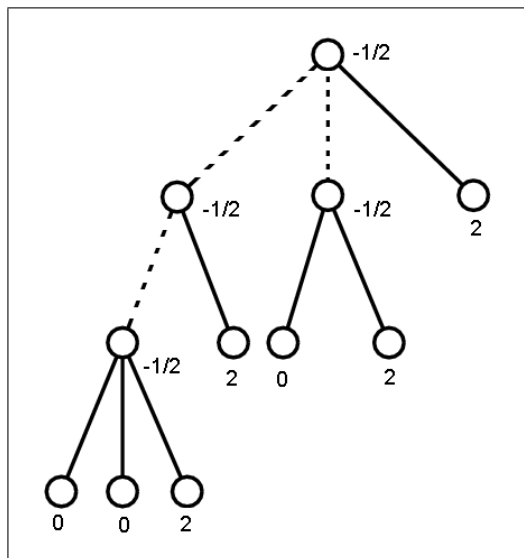


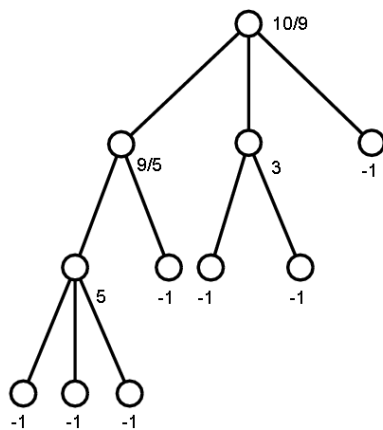
Figura 3.8: Algoritmo $V2$: Passo 2

Como resultaram quatro valores positivos, quatro negativos e três nulos (Figura 3.10), concluímos que há exatamente quatro autovalores positivos, quatro

Figura 3.9: Algoritmo $V2$: Passo 3Figura 3.10: Algoritmo $V2$: Passo 4

autovalores negativos e três autovalores iguais a 0.

Agora, para encontrarmos o número de autovalores laplacianos maiores que 2, vamos aplicar o algoritmo para o valor inicial $d(v_i) - 2$. Depois de executá-lo, obtemos os valores a seguir para cada vértice e concluimos que há exatamente quatro autovalores laplacianos maiores do que 2.

Figura 3.11: Disposição dos $a(v_i)$ após aplicação do algoritmo $V2$

3.3 Árvores de Bethe

Definição 22. Uma árvore de Bethe (Bethe tree) é uma árvore de k níveis, onde o vértice raiz (no nível 1) tem grau d , cada um dos vértices dos níveis 2 a $k-1$ tem grau $d+1$, e os vértices do nível k (as folhas) tem grau 1.

Uma árvore de Bethe generalizada é uma árvore cujos vértices a uma mesma distância da raiz, têm o mesmo grau.

Em [19], Rojo descreve uma equivalência entre os autovalores da matriz laplaciana de um grafo que é união de árvores de Bethe sob uma mesma raiz, e de uma união de espectros de matrizes de menor ordem relacionados à estrutura dessa árvore. Adaptaremos o resultado desse autor a um caso específico: árvores sem peso e árvores de Bethe com até 3 níveis.

Estamos interessados numa família particular de árvores que podem ser vistas como união de árvores de Bethe cujas raízes são adjacentes a um vértice central, a raiz da árvore. Considere árvores caracterizadas por terem um vértice central e , adjacentes a este, vértices pendentes e ramos de dois tipos (tipo 1 e tipo 2). Mais adiante (Figuras 3.13 e 3.14) apresentaremos dois exemplos.

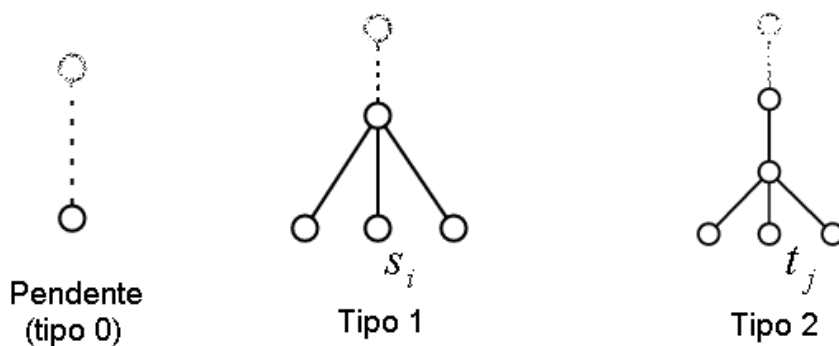


Figura 3.12: Tipos de ramos adjacentes ao vértice central de um grafo de \mathcal{F}

Considere o conjunto de árvores \mathcal{F} , cujos elementos são árvores que, após tirada qualquer aresta que não é adjacente a nenhuma folha, são sempre a união (disjunta) de uma estrela e uma árvore que não é estrela. Uma árvore de \mathcal{F} deve possuir no mínimo dois ramos, e quando só possuir dois ramos e ambos não forem do tipo 2 deve também possuir pendentes no vértice central. A existência de vários, só um, ou nenhum ramo do tipo 2 indica o diâmetro da árvore: 6, 5 ou 4, respectivamente.

Vamos definir agora as matrizes T_i e Q_j , de ordem 2×2 e 3×3 , que serão associadas aos ramos do tipo 1 e 2, respectivamente. Elas têm a forma

$$T_i = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{s_i} \\ \sqrt{s_i} & s_i + 1 \end{pmatrix}, \quad Q_j = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{t_j} & 0 \\ \sqrt{t_j} & t_j + 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix},$$

onde s_i é o número de folhas do i -ésimo ramo do tipo 1 e t_j é o número de folhas do j -ésimo ramo do tipo 2. Considere $U_k = \begin{pmatrix} 1 \end{pmatrix}$ a matriz que representa os vértices pendentes na raiz, $1 \leq k \leq p$, caso houver pendentes.

Tome a matriz

$$T = \begin{pmatrix} U_1 & & & & & & & & & 1 \\ & \ddots & & & & & & & & \vdots \\ & & U_p & & & & & & & 1 \\ & & & T_1 & & & & & & u_1^T \\ & & & & \ddots & & & & & \vdots \\ & & & & & T_{r_1} & & & & u_{r_1}^T \\ & & & & & & Q_1 & & & v_1^T \\ & & & & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & & & & Q_{r_2} & v_{r_2}^T \\ 1 & \dots & 1 & u_1 & \dots & u_{r_1} & v_1 & \dots & v_{r_2} & \delta \end{pmatrix},$$

onde δ é o grau do vértice central, u_i é o bloco $\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}$ e v_i o bloco $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, e p , r_1 e r_2 são a quantidade de ramos dos tipos 0, 1 e 2 respectivamente.

Segue um resultado que é caso particular do Teorema principal em [19].

Teorema 3. *O espectro laplaciano de uma árvore de \mathcal{F} é igual ao espectro da matriz T unido com um multiconjunto cujos elementos são 1.*

Quando temos cópias de ramos de um tipo, por exemplo c_i ramos do tipo 1 com s_i folhas, eles são considerados juntos, no texto de [19]. Em vez de repetirmos os blocos na matriz T , usamos só uma vez o bloco T_i com $u_i = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{c_i} \end{pmatrix}$ onde c_i é o número de cópias desse ramo e no espectro final se deve incluir $c_i - 1$ vezes o espectro de T_i . Para os nossos propósitos, vamos só aglutinar os vértices pendentes na raiz e trocar os p blocos U_k por apenas um (quando houver pendentes) e usar \sqrt{p} no lugar de 1 na última coluna e linha de T na respectiva entrada. Desse modo teremos

$$T = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \sqrt{p} \\ & T_1 & & & & & & u_1^T \\ & & \ddots & & & & & \vdots \\ & & & T_{r_1} & & & & u_{r_1}^T \\ & & & & Q_1 & & & v_1^T \\ & & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & & Q_{r_2} & v_{r_2}^T \\ \sqrt{p} & u_1 & \dots & u_{r_1} & v_1 & \dots & v_{r_2} & \delta \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

se houver pendentes na raiz central, ou

$$T = \begin{pmatrix} T_1 & & & & & & & u_1^T \\ & \ddots & & & & & & \vdots \\ & & T_{r_1} & & & & & u_{r_1}^T \\ & & & Q_1 & & & & v_1^T \\ & & & & \ddots & & & \vdots \\ & & & & & Q_{r_2} & & v_{r_2}^T \\ u_1 & \dots & u_{r_1} & v_1 & \dots & v_{r_2} & \delta \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

caso contrário. Como diminuimos a ordem de T , o espectro laplaciano total da árvore será o espectro de T mais um multiconjunto cujos elementos são 1, e mais $p-1$ cópias do espectro de U_k , que é exatamente 1. Portanto, temos novamente o mesmo resultado, mas agora com uma simplificação de uma das matrizes. Para referências futuras, vamos chamar essa manipulação de matrizes (equivalência em relação aos autovalores) de *decomposição BT*.

Vamos ver dois exemplos para entendermos melhor o resultado.

Exemplo 21. Observe a árvore da Figura 3.13 com três ramos do tipo 1. Dois ramos são iguais, ou seja, devemos ter, como elementos do espectro laplaciano, o espectro do bloco 2×2 proveniente dessa cópia. Vamos calcular o espectro laplaciano da árvore de duas formas: uma delas como o modelo descrito anteriormente e outra usando a técnica de suprimir as cópias de ramos, mas lembrando de incluir (uma vez) o espectro do bloco suprimido no final.

Unindo esse(s) conjunto(s) com um multiconjunto cujos elementos são 1, teremos o espectro da árvore.

Exemplo 22. A árvore da Figura 3.14 possui um ramo do tipo 1, um do tipo 2 e três pendentos.

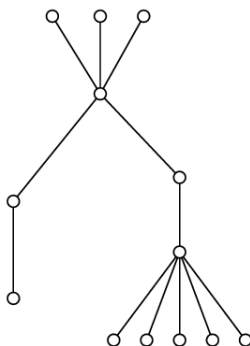


Figura 3.14: Árvore de Bethe com ramos do tipo 1 e 2

A matriz cujos autovalores compõem o espectro laplaciano da árvore, exceto por um certo número de elementos iguais a 1, tem a forma

$$T = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \sqrt{3} \\ & 1 & 1 & & & & \\ & 1 & 2 & & & & 1 \\ & & & 1 & \sqrt{5} & & \\ & & & \sqrt{5} & 6 & 1 & \\ & & & & 1 & 2 & 1 \\ \sqrt{3} & & & & & & 1 & 5 \end{pmatrix}.$$

O espectro de T é $\{7,0570; 6,0494; 2,5008; 1,7558; 0,4976; 0,1394; 0\}$, exatamente o espectro laplaciano da árvore sem os seis elementos iguais a 1.

Observação: Como a matriz T tem como autovalores todos os autovalores laplacianos da árvore exceto por uma quantidade de elementos iguais a 1, o autovalor zero é o menor autovalor da matriz T .

Em seguida, apresentaremos resultados acerca dos autovalores das matrizes T_i e Q_j . Essas matrizes são importantes pois delas podem ser obtidos autovalores laplacianos da árvore, quando temos cópias de ramos. Mas o papel fundamental que as aproximações que serão exibidas executarão será em um método do próximo capítulo em que necessitaremos diretamente os autovalores dessas matrizes, ou seus valores aproximados.

Lema 3. *A matriz*

$$T_i = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{s} \\ \sqrt{s} & s+1 \end{pmatrix}$$

possui, para $s \geq 1$, as seguintes propriedades a respeito de seus autovalores $x_1 > x_2$:

$$\begin{aligned} 2 < x_1 < s+2 - \frac{1}{s+2} < s+2, \\ 0 < x_2 < 1. \end{aligned}$$

Demonstração: O polinômio característico da matriz T_i é $p(x) = x^2 - (s+2)x + 1$.

As raízes desse polinômio são

$$\frac{s+2 \pm \sqrt{s^2+4s}}{2}.$$

Agora observe que, para $a \geq 2$,

$$\begin{aligned} a^4 - 4a^2 &< a^4 - 4a^2 + 4 \\ a^2(a^2 - 4) &< (a^2 - 2)^2 \\ a\sqrt{a^2 - 4} &< a^2 - 2 \\ \sqrt{a^2 - 4} &< a - \frac{2}{a} \\ \frac{a + \sqrt{a^2 - 4}}{2} &< a - \frac{1}{a}. \end{aligned}$$

Substituindo a por $s+2$, obtemos o resultado. Além disso, como $p(0) = 1$ e $p(1) = -s$, há uma raiz entre 0 e 1.

□

Lema 4. *A matriz*

$$Q_j = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{t} & 0 \\ \sqrt{t} & t+1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

possui autovalores $y_1 > y_2 > y_3$ com as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} t+2 &< y_1 < t+2 + \frac{1}{4t}, \\ \frac{3}{2} &< y_2 < 2, \\ 1 &> y_3 > \begin{cases} 0,19 & \text{para } t = 1 \\ \frac{1}{4t} & \text{para } t \geq 2 \end{cases}, \\ y_1 + y_2 &= t+4 - y_3. \end{aligned}$$

Além disso, podemos dizer que o segundo autovalor é crescente em função de t .

Demonstração: O polinômio característico da matriz Q_j é

$$p_t(x) = x^3 - (t+4)x^2 + (2t+4)x - 1.$$

Vamos procurar pontos onde a polinômio troca de sinal. Como a matriz é simétrica, seus autovalores são reais. Vejamos as seguintes observações:

$$\begin{aligned} p_t\left(\frac{1}{4t}\right) &< 0, \text{ para } t \geq 2 \\ p_t(1) &= t \\ p_t\left(\frac{3}{2}\right) &= \frac{6(t-1)+1}{8} > 0 \\ p_t(2) &= -1 \\ p_t(t+2) &= -1 \\ p_t\left(t+2 + \frac{1}{4t}\right) &= \frac{(4t^2 - 4t - 1)^2}{64t^3} > 0. \end{aligned}$$

Portanto, há uma raiz entre $\frac{1}{4t}$ e 1, outra entre $\frac{3}{2}$ e 2, e uma terceira entre $t+2$ e $t+2 + \frac{1}{4t}$. Para $t = 1$, verificamos diretamente que a primeira raiz é maior que 0,19.

Para a última desigualdade, é só lembrar que a soma das raízes de um polinômio mônico de grau n é dado pelo coeficiente que multiplica o termo $(-x^{n-1})$.

A diferença entre os polinômios característicos $p_{t+k}(x)$ e $p_t(x)$ é $kx(2-x)$. No intervalo $(\frac{3}{2}, 2)$, $p_{t+k}(x) > p_t(x)$. Como $p(\frac{3}{2}) > 0$ e $p(2) < 0$, $p_t(x)$ intercepta a reta $x = 0$ antes de $p_{t+1}(x)$. □

4 A SOMA DOS MAIORES AUTOVALORES LAPLACIANOS

4.1 O resultado principal

Logo após a formalização do conceito de energia, Gutman [7] demonstrou que, fixado o número de vértices n , a energia de uma árvore T está entre a energia do caminho (\mathcal{P}_n) e da estrela (\mathcal{S}_n).

$$E(\mathcal{S}_n) \leq E(T) \leq E(\mathcal{P}_n) \quad (4.1)$$

Assim, temos limites para a energia de qualquer árvore em função do número de vértices. Usando o espectro exato da estrela (2.2) e do caminho (2.1), e somente os autovalores positivos do caminho (equação (2.5)), obtemos

$$2\sqrt{n-1} \leq E(T) \leq 4 \sum_{i=1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \cos\left(\frac{i\pi}{n+1}\right). \quad (4.2)$$

A cota inferior é a mesma já obtida pela Proposição 20, o número de arestas de árvores é $n-1$. Considerando árvores com um número par de vértices, $n=2k$, e utilizando série de potências para o $\cos(x)$ até o terceiro termo não nulo, obtemos uma cota superior para a soma, em função de n , que pode ser aproximada numericamente por

$$E(T) < 1,279(n+1) - 2 + \frac{0,484}{n+1}.$$

Essa cota é melhor do que a cota $2m = 2n - 2$, para qualquer $n \geq 2$.

Gostaríamos de encontrar uma desigualdade semelhante para a energia laplaciana. Para $n=5$, temos três possibilidades de árvores: estrela, Y e caminho. Calculando as energias laplacianas, temos

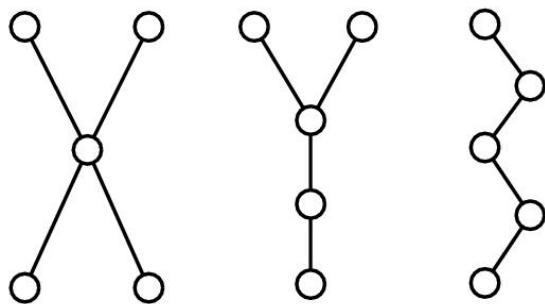


Figura 4.1: Possíveis árvores de 5 vértices

$$E_L(\mathcal{S}_5) = 6,8$$

$$E_L(Y) \approx 6,5624$$

$$E_L(\mathcal{P}_5) \approx 6,0721.$$

Com esse exemplo, percebemos que há uma relação de energia laplaciana inversa à relação da energia. Radenković e Gutman [18] calcularam a energia laplaciana para uma série de árvores de até 17 vértices, que representavam moléculas, e enunciaram a seguinte:

Conjectura: *Seja T uma árvore com n vértices. Então*

$$E_L(\mathcal{P}_n) \leq E_L(T) \leq E_L(\mathcal{S}_n).$$

Nesse trabalho vamos demonstrar a validade da cota superior, ou seja, a energia laplaciana de qualquer árvore é inferior à energia da estrela. A prova é baseada numa cota superior para a soma dos maiores autovalores de $L(T)$ (a matriz laplaciana da árvore T).

Em [9], Haemers, Mohammadian e Tayfeh-Rezaie apresentam uma cota para essa soma dos k maiores autovalores laplacianos de uma árvore T

$$S_k(T) = \sum_{i=1}^k \mu_i(T) \leq e(T) + 2k - 1 = n + 2k - 2. \quad (4.3)$$

Quando se faz a diferença da energia laplaciana entre uma estrela e uma árvore T genérica (ambas de n vértices), usando a Proposição 21 e supondo que T tenha exatamente σ autovalores maiores do que a média \bar{d} , obtemos

$$\begin{aligned} E_L(\mathcal{S}_n) - E_L(T) &\geq 2n - 2\bar{d} - 2(n + 2\sigma - 2) + 2\sigma\bar{d} \\ &= 2n - 4 + \frac{4}{n} - (2n - 4 + 4\sigma) + 4\sigma - \frac{4\sigma}{n} \\ &= -4 \left(\frac{\sigma - 1}{n} \right). \end{aligned} \quad (4.4)$$

O seguinte resultado, que usaremos durante a demonstração, é enunciado por Brouwer e Haemers [3].

Lema 5. *Seja G um grafo conexo com sequência de graus $d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_n$ e autovalores laplacianos $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n$. Então*

$$\mu_i \geq d_i - i + 2.$$

Temos que o segundo autovalor laplaciano é maior ou igual a 2, para árvores que não são estrela ($\mu_2 \geq d_2 \geq 2$), ou seja, $\sigma \geq 2$. Portanto, a diferença de energia é maior que uma quantidade negativa (4.4) e assim não podemos afirmar (ainda) que a estrela tem energia laplaciana máxima entre as árvores.

Motivados por isso, queremos melhorar a cota superior para essa soma dos maiores autovalores laplacianos. Segue o resultado principal que vamos demonstrar.

Teorema 1. *A soma dos k maiores autovalores laplacianos de uma árvore T , com n vértices, está limitada por*

$$S_k(T) = \sum_{i=1}^k \mu_i \leq n + 2k - 2 - \frac{2k - 2}{n}, \quad (4.5)$$

valendo igualdade somente quando $T = \mathcal{S}_n$ e $k = 1$.

A prova do Teorema 1 é feita por indução no número de vértices, e com argumentação semelhante a [9]. Contudo há situações especiais a considerar,

e em algumas delas serão necessários alguns lemas técnicos e verificações de casos particulares.

No tratamento dessas situações peculiares, são calculados polinômios característicos laplacianos e buscadas cotas para algumas de suas raízes via software de manipulação algébrica (no nosso caso wxMaxima). Os polinômios foram obtidos via algoritmo *V1*, pois este é eficiente para os casos que serão analisados de perto. Também é utilizado uma caracterização da família \mathcal{F} de grafos, introduzida na Seção 3.3, e desigualdades acerca da soma de autovalores de matrizes (Teorema 15, no Apêndice). Ademais é largamente utilizado o algoritmo *V2* que informa a quantidade de autovalores maiores, menores ou iguais a um certo valor.

Durante este capítulo, sempre que nos referirmos aos algoritmos *V1* e *V2*, os estamos aplicando na forma laplaciana.

Para indicar a relevância dos lemas e proposições auxiliares, estes serão apresentados à medida que forem necessários. Provaremos o teorema primeiramente para casos mais simples e mais tarde para o caso geral, seguindo uma ótica histórica, tal como fora demonstrado inicialmente: à medida que novos entraves eram encontrados, eles eram solucionados.

4.2 Demonstração do Teorema 1

É intuitivo verificar a validade do teorema primeiramente para as árvores das quais conhecemos o espectro ou das quais o espectro é facilmente calculado. Assim, vamos começar pelas árvores de diâmetro menor ou igual a três, e um caso especial de diâmetro quatro e cinco. Após, apresentaremos a técnica para o caso geral e concluímos com três casos peculiares não resolvidos pelo método, e que serão tratados separadamente.

Para a demonstração do Teorema 1, não há a necessidade de verificarmos a desigualdade para todos os valores de k . Basta conferir para $k = \sigma$, o número de autovalores maior que a média \bar{d} .

Lema 6. *Dada uma árvore T com σ autovalores maiores que a média \bar{d} , se a desigualdade*

$$S_k \leq n + 2k - 2 - \frac{2k - 2}{n}$$

for satisfeita para $k = \sigma$, então ela é válida para todo k .

Demonstração: Seja $k_1 < \sigma < k_2$. Vamos mostrar que a desigualdade vale para k_1 e k_2 . Sejam $\mu_1 \geq \dots \geq \mu_n$, e lembre que $\mu_\sigma > 2 - \frac{2}{n}$.

$$\begin{aligned} S_{k_1} &= S_\sigma - \sum_{i=k_1+1}^{\sigma} \mu_i(T) \\ &\leq S_\sigma - (\sigma - k_1)\mu_\sigma(T) \\ &< S_\sigma - (\sigma - k_1) \left(2 - \frac{2}{n}\right) \\ &\leq n + 2\sigma - 2 - \frac{2\sigma - 2}{n} - 2(\sigma - k_1) + \frac{2\sigma - 2k_1}{n} \\ &= n + 2k_1 - 2 - \frac{2k_1 - 2}{n}. \end{aligned} \tag{4.6}$$

Além disso, como $\mu_{\sigma+1} \leq 2 - \frac{2}{n}$,

$$\begin{aligned} S_{k_2} &= S_\sigma + \sum_{i=\sigma+1}^{k_2} \mu_i(T) \\ &\leq S_\sigma + (k_2 - \sigma)\mu_{\sigma+1}(T) \\ &\leq S_\sigma + (k_2 - \sigma) \left(2 - \frac{2}{n}\right) \\ &\leq n + 2\sigma - 2 - \frac{2\sigma - 2}{n} + 2(k_2 - \sigma) + \frac{2\sigma - 2k_2}{n} \\ &= n + 2k_2 - 2 - \frac{2k_2 - 2}{n}. \end{aligned} \tag{4.7}$$

□

4.2.1 Casos iniciais

Uma árvore de diâmetro inferior a quatro está limitada a ser um ponto isolado, uma estrela (diâmetro 2, quando há mais de 2 vértices) ou um par de estrelas cujos centros são adjacentes, às vezes chamada de *double star* (diâmetro 3). O caso particular de diâmetro 4 e 5 que trataremos é uma árvore caracterizada por ser um par de estrelas cujos centros são ligados por um caminho de tamanho dois ou três, conhecida por *double broom* de diâmetro 4 ou 5, respectivamente. Seguem suas representações.

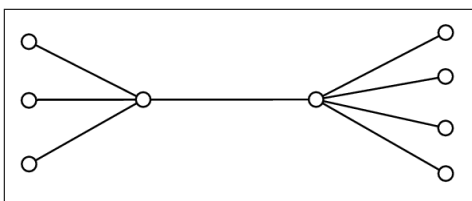


Figura 4.2: *Double star*

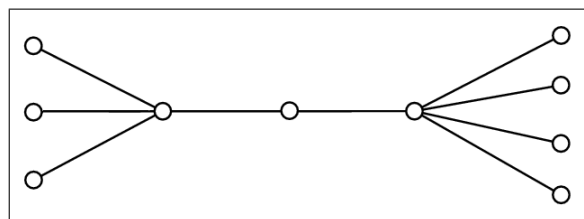


Figura 4.3: *Double broom* de diâmetro 4

Se a árvore tiver somente um vértice, o autovalor laplaciano é zero, e cumpre a desigualdade (4.5).

Para uma estrela de n vértices, conhecemos os seus autovalores laplacianos (em (2.3)). Há somente um autovalor maior que a média \bar{d} , a saber n , e cumpre a desigualdade para $k = 1$, aliás com igualdade. Como a desigualdade é válida para $\sigma = 1$, então, pelo Lema 6, vale para qualquer k . Além disso, para $k \geq 2$, a desigualdade é estrita, pois $\mu_{\sigma+1} = \mu_2 = 1 < \bar{d}$.

As árvores de diâmetro três (*double star*) já foram estudadas por Trevisan et al. em [21], onde é feita uma análise detalhada colocando a energia laplaciana dessa classe de árvores entre a energia laplaciana da estrela e do caminho. Usando alguns resultados obtidos nesse artigo, damos atenção ao polinômio carac-

terístico laplaciano e a cota inferior para a conectividade algébrica.

Considere uma *double star* com a e b folhas adjacentes aos dois centros. O número total de vértices é $n = a + b + 2$. Aplicando o algoritmo *V1*, obtemos o polinômio característico laplaciano

$$P_L(x) = (x^3 - (n + 2)x^2 + (2n + ab + 1)x - n)(x - 1)^{n-4}x.$$

Para encontrarmos o valor de σ , o número de autovalores maiores que a média \bar{d} , aplicamos o algoritmo *V2* para $\alpha = 2$, lembrando que os valores iniciais são $d(v_i) - 2$. Com isso, verifica-se que há dois autovalores maiores que 2, ou seja, $\sigma \geq 2$. Aplicando o algoritmo *V2* agora para $\alpha = 1$, temos que há dois autovalores maiores que 1. Como $1 < \bar{d} < 2$, $\sigma = 2$.

Dos n autovalores, já identificamos $n - 3$ deles, a saber 1 e 0 com suas multiplicidades. Portanto os dois maiores autovalores são raízes do polinômio de grau 3, e a terceira raiz desse polinômio é a conectividade algébrica pertencente ao intervalo $(\frac{2}{n}, 1)$ (isso pode ser comprovado percebendo que o fator de grau três de $P_L(x)$ troca de sinal nesse intervalo). Denote por μ_i o i -ésimo maior autovalor laplaciano e note que a soma das três raízes do fator de grau três é igual a $n + 2$. Assim, vale que

$$S_2(T) = \mu_1 + \mu_2 = n + 2 - \mu_{n-1} < n + 2 - \frac{2}{n},$$

que satisfaz a desigualdade

$$S_2(T) < n + 2 \cdot 2 - 2 - \frac{2}{n}. \quad (4.8)$$

Portanto, a desigualdade (4.5) vale para todo k (Lema 6), sem ocorrer igualdade.

Para o próximo caso, e os que vêm a seguir, usaremos um resultado de McKay apresentado em um artigo de Mohar [16] sobre uma cota inferior da conectividade algébrica de um grafo.

Lema 7. *Seja G um grafo conexo de n vértices e com diâmetro D . A conectividade algébrica de G (μ_{n-1}) satisfaz*

$$\mu_{n-1} \geq \frac{4}{Dn}.$$

Para uma *double broom* de diâmetro 4, considere a e b o número de folhas adjacentes aos extremos de um caminho de comprimento 2. Desse modo, $n = a + b + 3$. Usando o mesmo método do caso da *double star*, aplicamos o algoritmo *V1* para encontrarmos o polinômio característico laplaciano, veja a Figura 4.4.

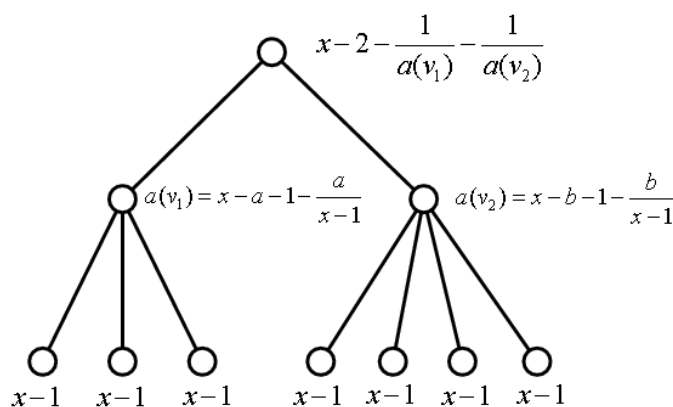


Figura 4.4: Algoritmo *V1* sobre *double broom* de diâmetro 4

Obtemos

$$P_L(x) = p_{a,b}(x) \cdot (x-1)^{n-5} \cdot x,$$

$$p_{a,b}(x) = x^4 - (n+3)x^3 + (ab+4n)x^2 - (2ab+4n-2)x + n.$$

Queremos estimar o número de autovalores laplacianos maiores do que a média \bar{d} . Já sabemos que há $n-4$ autovalores menores. Aplicando o algoritmo *V2* com $\alpha = 1$, temos os valores da Figura 4.5 e podemos concluir que apenas uma das raízes do polinômio $p_{a,b}(x)$ é menor do que 1 (há dois autovalores menores do que 1: uma raiz de $p_{a,b}(x)$ e o zero).

Há três autovalores maiores do que 1, todos raízes de $p_{a,b}(x)$. Aplicando

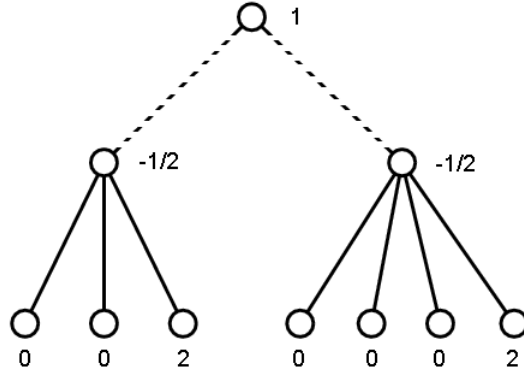


Figura 4.5: Algoritmo $V2$ sobre *double broom* de diâmetro 4, com $\alpha = 1$

novamente o algoritmo $V2$ agora com $\alpha = 2$, concluímos que há dois autovalores maiores que 2. Portanto, σ está entre 2 ou 3. Ao invés de verificarmos o verdadeiro valor de σ , vamos encontrar cotas superiores para as somas S_2 e S_3 . Note que a soma das quatro raízes de $p_{a,b}(x)$ é $n + 3$. Ainda precisamos de uma cota inferior para x_3 (a terceira maior raiz), lembre-se que $a, b \geq 1$, o que nos dá

$$\begin{aligned} p_{a,b}\left(\frac{4}{3}\right) &= -\frac{72(a-1)(b-1) + 39(a+b-2) + 11}{81} < 0, \\ p_{a,b}(2) &= a + b - 1 > 0. \end{aligned}$$

Como $p_{a,b}(x)$ troca de sinal no intervalo em $(\frac{4}{3}, 2)$, concluímos que $x_3 > \frac{4}{3}$. Usando o resultado sobre conectividade algébrica do Lema 7, temos que

$$\mu_{n-1} = x_4 > \frac{4}{Dn} = \frac{1}{n}.$$

Usando esses resultados, obtemos

$$\begin{aligned} S_2(T) &= \mu_1 + \mu_2 = n + 3 - \mu_3 - \mu_{n-1} \\ &< n + 3 - \frac{4}{3} - \frac{1}{n} = n + 2 - \frac{1}{3} - \frac{1}{n} \\ &< n + 2 \cdot 2 - 2 - \frac{2}{n}, \end{aligned} \tag{4.9}$$

$$\begin{aligned}
S_3(T) &= \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 = n + 3 - \mu_{n-1} \\
&< n + 3 - \frac{1}{n} = n + 4 - \frac{1}{n} - 1 \\
&< n + 2 \cdot 3 - 2 - \frac{4}{n}.
\end{aligned} \tag{4.10}$$

As duas estimativas são verdadeiras porque $1 > \frac{3}{n}$, já que $n \geq 5$ para essas árvores. Assim, demonstrado para os possíveis valores de σ , pelo Lema 6, a desigualdade (4.5) vale para todo k , sem possibilidade de ocorrer igualdade.

A *double broom* de diâmetro 5, embora aparentemente maior, tem suas contas simplificadas por uma coincidência numérica. Primeiro vamos encontrar o valor de σ . Aplicando o algoritmo *V2* com $\alpha = 1$ e $\alpha = 2$, obtemos que $\sigma = 3$ (há três autovalores laplacianos maiores do que 1 e esses mesmos são maiores ou iguais a 2 que é maior que \bar{d}). Tome $n = a + b + 4$ e $a, b \geq 1$.

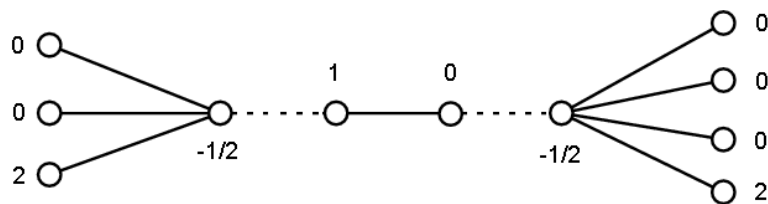


Figura 4.6: Algoritmo *V2* sobre *double broom* de diâmetro 5, com $\alpha = 1$

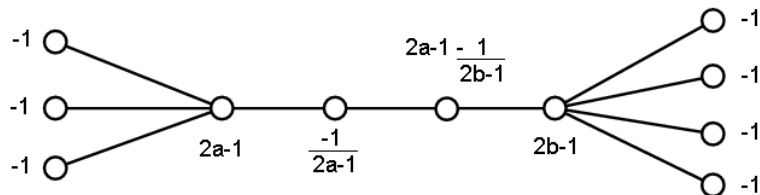


Figura 4.7: Algoritmo *V2* sobre *double broom* de diâmetro 5, com $\alpha = 2$

O seu polinômio característico laplaciano (encontrado via algoritmo *V1*) tem a forma

$$\begin{aligned} P_L(x) &= p_{a,b}(x) \cdot (x-1)^{n-5} \cdot x, \\ p_{a,b}(x) &= x^4 - (n+3)x^3 + (ab+5n-4)x^2 - (3ab+6n-10)x + n. \end{aligned}$$

Em princípio, $p_{a,b}(x)$ deveria ter grau 5, mas ocorre que, para quaisquer valores de a e b , o número 1 é sempre raiz do polinômio. Por isso, o grau do fator é 4. Queremos os três maiores autovalores do grafo. Como são maiores que 1, esses autovalores são raízes do fator $p_{a,b}(x)$, cuja soma de raízes é $n+3$. A quarta raiz desse polinômio é positiva, pois é autovalor da árvore e não é o autovalor zero, já separado no polinômio $P_L(x)$ (de fato, essa quarta raiz é a conectividade algébrica do grafo, basta notar que $p_{a,b}(x)$ troca de sinal no intervalo $(0,1)$). Assim

$$\begin{aligned} S_3 &= \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 \\ &= n+3 - \mu_{n-1} < n+3 \\ &< n+2 \cdot 3 - 2 - \frac{4}{n}, \end{aligned} \tag{4.11}$$

pois $n \geq 6$. Como a desigualdade (4.5) é válida para $k = \sigma$, ela é válida para qualquer k (de maneira estrita) pelo Lema 6.

4.2.2 Caso geral

Para as árvores T que não são estrelas, vamos demonstrar o Teorema 1 por indução no número de vértices. Essa demonstração é semelhante à demonstração da desigualdade (4.3) em [9], mas mais trabalhosa, pois estamos refinando a cota superior para a soma dos primeiros autovalores.

Em nossa demonstração, seja T uma árvore com n vértices. Como o resultado já é válido para estrelas, a árvore T tem diâmetro maior ou igual a três, e no mínimo quatro vértices.

Hipótese de indução: vamos supor que a desigualdade 4.5 é válida para toda árvore T^* com $n^* \leq n - 1$ vértices.

Para uma árvore T que não é uma estrela, há no mínimo uma aresta e que não é incidente a folhas. Ao retirarmos a aresta e , teremos um grafo desconexo F que é união de duas árvores conexas T_1 e T_2 , cada uma com n_1 e n_2 vértices, respectivamente. Note que $n_1 + n_2 = n$.

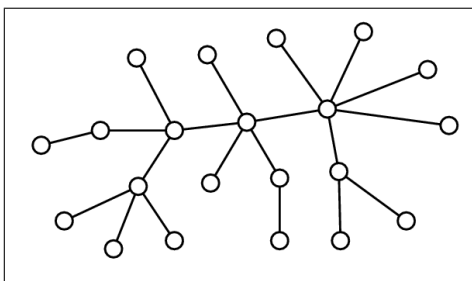


Figura 4.8: Cisão: Árvore T

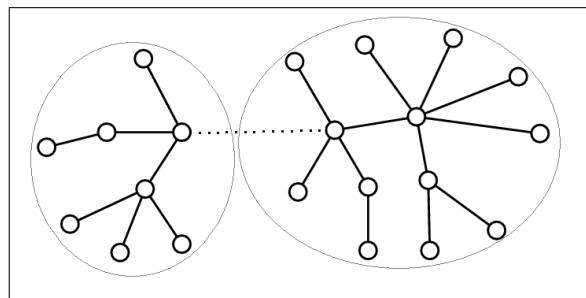


Figura 4.9: Cisão: Floresta F

Com a eliminação da aresta, teremos que as matrizes laplacianas cumprem

$$M_T = M_F + \begin{pmatrix} M_* & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

para uma certa ordenação dos vértices, onde $M_* = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$. O espectro da última matriz da equação (4.12) possui um elemento igual a 2 e os demais são 0. Pelo Teorema 15 (no Apêndice) obtemos a relação

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k \lambda_i(M_T) &\leq \sum_{i=1}^k \lambda_i(M_F) + \sum_{i=1}^k \lambda_i(M_*) \\ S_k(T) &\leq S_k(F) + 2. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Como F é união disjunta, seus autovalores são autovalores de T_1 e T_2 . Dos k maiores autovalores laplacianos de F , temos k_1 autovalores de T_1 e k_2 de T_2 , com $k_1 + k_2 = k$. Podemos supor, sem perda de generalidade, que $k_1 \geq k_2$. A

equação fica

$$S_k(T) \leq S_{k_1}(T_1) + S_{k_2}(T_2) + 2. \quad (4.14)$$

Vamos separar a demonstração em casos em função dos possíveis valores de k_1 e k_2 . Quando $k_2 \neq 1$, conseguimos resolver diretamente, como veremos a seguir.

Considere $k_2 = 0$, ou seja, todos os k maiores autovalores vêm da árvore T_1 . Após a retirada da aresta e , T_2 possui no mínimo uma aresta (dois vértices). Assim, como

$$n = n_1 + n_2 \geq n_1 + 2,$$

e aplicando a hipótese de indução à relação (4.14), encontramos

$$\begin{aligned} S_k(T) &\leq S_k(T_1) + 2 \\ &\leq n_1 + 2k - 2 - \frac{2k - 2}{n_1} + 2 \\ &\leq n + 2k - 2 - \frac{2k - 2}{n_1} \\ &< n + 2k - 2 - \frac{2k - 2}{n}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

pois $n > n_1$ (obtemos desigualdade estrita).

Para $k_1 \geq k_2 \geq 2$, vamos usar a hipótese de indução na equação (4.14) para ambas componentes de F , T_1 e T_2 .

$$\begin{aligned} S_k(T) &\leq S_{k_1}(T_1) + S_{k_2}(T_2) + 2 \\ &\leq n_1 + 2k_1 - 2 - \frac{2k_1 - 2}{n_1} + n_2 + 2k_2 - 2 - \frac{2k_2 - 2}{n_2} + 2 \\ &= n + 2k - 2 - \frac{2k_1 - 2}{n_1} - \frac{2k_2 - 2}{n_2}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Tome

$$D = \frac{2k_1 - 2}{n_1} + \frac{2k_2 - 2}{n_2}$$

e faça a substituição $k_i = c_i + 1$. Então

$$D = \frac{2c_1}{n_1} + \frac{2c_2}{n_2}.$$

Lema 8. *Para números reais positivos a, b, c e d positivas tais que $ab > 1$, temos a desigualdade*

$$\frac{a}{c} + \frac{b}{d} > \frac{a+b+2}{c+d}. \quad (4.17)$$

Demonstração: Inicialmente, temos que

$$(\sqrt{ad} - \sqrt{bc})^2 \geq 0$$

para quaisquer valores das variáveis. Assim, usando o fato de que $ab > 1$, obtemos

$$\begin{aligned} ad^2 + bc^2 - 2\sqrt{abcd} &\geq 0 \\ ad^2 + bc^2 &\geq 2\sqrt{abcd} > 2cd \\ (c+d)ad + (c+d)bc &> 2cd + cad + dbc \\ (c+d)(ad+bc) &> cd(a+b+2) \\ \frac{ad+bc}{cd} &> \frac{a+b+2}{c+d}. \end{aligned} \quad \square$$

Aplicando o Lema 8, uma vez que $ab = 4c_1c_2 \geq 4$, obtemos

$$D > \frac{2c_1 + 2c_2 + 2}{n_1 + n_2} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{2k_1 - 2 + 2k_2 - 2 + 2}{n_1 + n_2} \\ &= \frac{2k - 2}{n}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Substituindo em (4.16), encontramos

$$S_k(T) < n + 2k - 2 - \frac{2k - 2}{n}. \quad (4.20)$$

Resta analisar o caso $k_1 \geq k_2 = 1$. Vamos separar em uma série de casos conforme a estrutura de T_1 e T_2 .

Se T_2 for uma árvore que não é estrela, temos uma cota superior para seu maior autovalor laplaciano melhor que n_2 , o número de vértices de T_2 .

Lema 9. *Se T é uma árvore diferente da estrela e μ_1 é o maior autovalor laplaciano de T , então*

$$\mu_1 < n - \frac{1}{2}.$$

Demonstração: Em [13](Teorema 3.2), Li e Zhang obtêm uma cota para o maior autovalor laplaciano

$$\mu_1 \leq 2 + \sqrt{(d_1 + d_2 - 2)(d_1 + d_3 - 2)}, \quad (4.21)$$

onde d_i é o i -ésimo maior grau de vértice da árvore. Já que a árvore não é uma estrela, há no mínimo 4 vértices. Inicialmente $\sum_i d_i = 2(n - 1)$. Como $d_i \geq 1, \forall i$, temos que

$$d_1 + d_2 + d_3 \leq 2(n - 1) - (n - 3) = n + 1.$$

Como $d_2 \geq 2$, pois caso contrário teríamos uma estrela, e $d_3 \geq 1$ temos

$$d_1 + d_2 \leq n$$

$$d_1 + d_3 \leq n - 1.$$

Então

$$\begin{aligned} \mu_1 &\leq 2 + \sqrt{(n - 2)(n - 3)} \\ &= 2 + \sqrt{\left(n - \frac{5}{2}\right)^2 - \frac{1}{4}} \\ &< 2 + n - \frac{5}{2} = n - \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

□

Usando essa cota para T_2 e a hipótese de indução para T_1 , vamos considerar duas situações a respeito de k_1 . Como T_2 não é estrela, $n_2 \geq 2$, e portanto

$n \geq 6$. Se $k_1 = 1$, teremos a equação (4.14) na forma

$$\begin{aligned} S_2(T) &\leq S_1(T_1) + S_1(T_2) + 2 \\ &< n_1 + n_2 - \frac{1}{2} + 2 \\ &= n + 4 - 2 - \frac{1}{2} \\ &< n + 4 - 2 - \frac{2}{n}, \end{aligned}$$

garantindo a desigualdade (4.5).

Se $k_1 \geq 2$, sabemos que, entre os maiores autovalores da floresta F , foi encolhido $\mu_2(T_1)$ ao invés de $\mu_2(T_2)$. Já que T_2 não é estrela, seu segundo maior grau de vértice é no mínimo 2 e, pelo Lema 5, $\mu_2(T_2) \geq 2$. Portanto $\mu_2(T_1) \geq 2$. Ou seja, T_1 não é uma estrela pois conhecemos o espectro desse tipo de árvore ($\mu_2 = 1$ ou 0), o que nos dá $n_1 \geq 4$.

$$\begin{aligned} S_k(T) &\leq S_{k-1}(T_1) + S_1(T_2) + 2 \\ &< n_1 + 2(k-1) - 2 - \frac{2k-4}{n_1} + n_2 - \frac{1}{2} + 2 \\ &= n_1 + n_2 + 2k - 2 - \frac{2k-4}{n_1} - \frac{1}{2} \\ &= n + 2k - 2 - \frac{2k-2}{n_1} - \frac{n_1-4}{2n_1} \\ &\leq n + 2k - 2 - \frac{2k-2}{n_1} \end{aligned} \tag{4.22}$$

e já que $n_1 < n$, a desigualdade procurada é válida (de forma estrita).

Agora vamos supor que T_2 é uma estrela (lembre que $k_2 = 1$). Há duas situações: T_1 é uma estrela ou não. Se T_1 for uma estrela, não podemos usar a hipótese de indução sobre as duas partes pois, para $k = 2$, teríamos $S_2 \leq n + 2$, que está $\frac{2}{n}$ unidades acima da cota que procuramos. Esse é o motivo pelo qual precisamos estudar essas árvores em mais detalhes.

As árvores que se caracterizam por serem separadas em duas estrelas são as *double broom* de diâmetro 3, 4 e 5. Pode-se verificar essa afirmação, tomando

duas estrelas e unindo-as através de uma aresta de três possíveis maneiras, tornando adjacentes: os centros das estrelas (*double star*); um centro e um raio das estrelas (*double broom* de diâmetro 4); ou dois raios das estrelas (*double broom* de diâmetro 5). Para essas três árvores já verificamos a validade da desigualdade (4.5) nos Casos Iniciais (note que a *double star* é uma *double broom* de diâmetro 3).

Agora, se T_1 não for uma estrela, não teremos sucesso ao aplicar a hipótese de indução, pois só conseguiríamos garantir que a soma dos maiores k autovalores laplacianos é menor que a cota se tivéssemos uma certa característica em relação à densidade da quantidade de vértices da parte que é uma estrela sobre a total, em função de k .

Ao invés disso, vamos nos aprofundar na busca dessas árvores que restam para concluir a demonstração. Se a árvore T puder ser dividida, após retirada da aresta, como união de duas árvores em que ambas não são estrelas ou ambas são estrelas então o problema está resolvido. Mas, se tivermos uma árvore tal que a retirada de *qualquer* aresta não ligada a uma folha resulta na união de uma estrela com uma não estrela, diremos que pertence à família \mathcal{F} .

As árvores da família \mathcal{F} devem ter diâmetro entre 4 e 6. Se uma árvore tiver diâmetro 7 ou maior, poderemos fazer a cisão de forma a obtermos duas árvores não estrelas. Se o diâmetro for 3, teremos uma *double star* cuja cisão resulta na união disjunta de duas estrelas.

Vamos verificar a validade da equação (4.5) para as árvores da família \mathcal{F} e assim concluir a demonstração do Teorema 1.

4.2.3 Árvores de \mathcal{F}_4

Seja \mathcal{F}_4 o subconjunto de \mathcal{F} onde se encontram as árvores de diâmetro 4. A estrutura dessa família de árvores é a seguinte: há um vértice que é a raiz (vértice central); ligados a essa raiz há ramos do tipo 0 (pendentes) e ramos do tipo

O valor de $a(v_0)$ pode tanto ser negativo quanto positivo, dependendo da configuração da árvore.

Dos n vértices do grafo, há exatamente r vértices do tipo v_i e um do tipo v_0 , e os demais são do tipo u . Portanto, podemos afirmar que há no mínimo r autovalores maiores que a média \bar{d} , e no máximo $r + 1$. A definição exata desse número depende do sinal de $a(v_0)$. □

Vamos procurar agora algumas condições necessárias para termos $\sigma = r$ nessa família de árvores. Ou seja, queremos que $a(v_0)$ seja negativo.

$$a(v_0) = r + p - \left(2 - \frac{2}{n}\right) + p \frac{n}{n-2} - \sum_{i=1}^r \frac{1}{a(v_i)} \quad (4.25)$$

Lema 10. *Se uma árvore com r ramos do tipo 1 possuir pendentess na raiz central, então $\sigma = r + 1$.*

Demonstração: Vamos supor que temos uma árvore com $p \geq 1$ vértices pendentess na raiz, um número $r \geq 2$ de ramos do tipo 1, com uma certa distribuição de folhannesses ramos. Podemos expressar a equação (4.25) como:

$$a(v_0) = 2p + \frac{2p}{n-2} - 2 + \frac{2}{n} + \sum_{i=1}^r \left(1 - \frac{1}{a(v_i)}\right).$$

Como $a(v_i) > 1$ para qualquer s_i , cada parcela $1 - \frac{1}{a(v_i)}$ é limitada inferiormente por zero. Assim

$$\begin{aligned} a(v_0) &> 2p + \frac{2p}{n-2} - 2 + \frac{2}{n} + r \cdot 0 \\ &= \frac{2(np - n + 2)(n-1)}{n(n-2)} > \frac{4(n-1)}{n(n-2)} > 0. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Ou seja, se tivermos um pendente (ou mais), $a(v_0)$ será positivo. Portanto $\sigma = r + 1$. □

Lema 11. *Se a árvore possui três ou mais ramos do tipo 1 com duas ou mais folhannesses ramos, então $\sigma = r + 1$.*

Demonstração: Temos de ver qual é o sinal de $a(v_0)$ para decidirmos se $\sigma = r$ ou $r + 1$.

$$a(v_0) = r - 2 + \frac{2}{n} - \sum_{i=1}^r \frac{1}{a(v_i)}, \quad (4.27)$$

onde, para $n \geq 3$

$$a(v_i) = s_i - 1 + \frac{2}{n} + s_i \frac{n}{n-2} > 2s_i - 1.$$

Note que

$$1 - \frac{1}{a(v_i)} > 1 - \frac{1}{2s_i - 1} \geq \begin{cases} 0, & \text{se } s_i \geq 1, \\ \frac{2}{3}, & \text{se } s_i \geq 2. \end{cases} \quad (4.28)$$

Aplicando em $a(v_0)$ e usando que $s_r, s_{r-1}, s_{r-2} \geq 2$ obtemos

$$\begin{aligned} a(v_0) &= -2 + \frac{2}{n} + \sum_{i=1}^r \left(1 - \frac{1}{a(v_i)}\right) \\ &\geq -2 + \frac{2}{n} + 3 \cdot \frac{2}{3} + (r-3) \cdot 0 \\ &= \frac{2}{n} > 0. \end{aligned}$$

Portanto $a(v_0)$ é positivo, ou seja, $\sigma = r + 1$. □

Teorema 4. *Se uma árvore T da família \mathcal{F}_4 com n vértices, que possui $r \geq 2$ ramos do tipo 1 ligados à raiz central, tem $\sigma = r$, então a desigualdade*

$$S_\sigma(T) \leq n + 2\sigma - 2 - \frac{2\sigma - 2}{n}$$

é satisfeita.

Demonstração: Pelos Lemas 10 e 11, T possui no máximo dois ramos com duas ou mais folhas e não possui pendentos. Os demais ramos, se houver, possuem uma folha cada. Para não sobrecarregar a notação, sejam a e b os dois maiores números de folhas dos ramos, $a \geq b$. Para os demais, $s_i = 1$. Temos que $n = a + b + 2r - 1$. Usando o algoritmo VI para o cálculo do polinômio característico laplaciano, inicialmente para $r \geq 3$, obtemos

$$P_L(x) = p_{a,b,r}(x) \cdot (x^2 - 3x + 1)^{r-3} \cdot (x-1)^{n-2r-1} \cdot x, \quad (4.29)$$

onde

$$\begin{aligned}
p_{a,b,r}(x) &= x^6 - (a + b + r + 7)x^5 + (ab + ar + br + 5a + 5b + 6r + 19)x^4 \\
&- (abr + 3ab + 4ar + 4br + 9a + 9b + 14r + 24)x^3 \\
&+ (2abr + 3ab + 5ar + 5br + 7a + 7b + 16r + 13)x^2 \\
&- (2ab + 2ar + 2br + 3a + 3b + 9r + 1)x + a + b + 2r - 1.
\end{aligned}$$

Caso $r = 2$, o polinômio $p_{a,b,2}(x)$ possui um fator $(x^2 - 3x + 1)$ que se cancela com o fator em falta de $P_L(x)$.

Das r maiores raízes de $P_L(x)$, $r - 3$ raízes são conhecidas, faltando-nos ainda as outras três raízes provenientes de $p_{a,b,r}(x)$.

Pelo algoritmo $V2$, com $\alpha = 1$, identificamos que há exatamente r autovalores menores que 1. Já são conhecidas $r - 2$ raízes de $P_L(x)$ que são menores do que 1, a saber 0 e $\frac{3-\sqrt{5}}{2}$. Vamos procurar cotas inferiores para as três menores raízes de $p_{a,b,r}(x)$, lembrando que essas raízes são positivas e duas delas são menores do que 1. Por outro lado, como temos r raízes de $P_L(x)$ maiores do que a média, e conhecemos $r - 3$ delas, a saber $\frac{3+\sqrt{5}}{2}$. As outras três são as maiores raízes de $p_{a,b,r}(x)$ e a quarta raiz desse polinômio está entre 1 e \bar{d} .

Note que

$$\begin{aligned}
p_{a,b,r}\left(\frac{1}{n}\right) &> 0 \\
p_{a,b,r}(1) &= ab(r - 1) > 0 \\
p_{a,b,r}\left(\frac{4}{3}\right) &> 0 \\
p_{a,b,r}(2) &= 1 - a - b < 0.
\end{aligned} \tag{4.30}$$

Para verificar (4.30) basta efetuar a mudança de variáveis $a' = a + 1$, $b' = b + 1$, $r' = r + 2$ e verificar que é soma de termos da forma $a^{p_1} b^{p_2} r^{p_3}$ com coeficientes positivos. O mesmo argumento serve para o valor $\frac{1}{n}$. Pelo Lema 7, $\mu_{n-1} \geq \frac{4}{Dn} = \frac{1}{n}$. Assim, as duas raízes menores do que 1 têm uma limite inferior. Portanto temos as seguintes cotas:

$$x_5 \geq x_6 > \frac{1}{n}, \quad x_4 > \frac{4}{3}. \tag{4.31}$$

Note que a soma das seis raízes de $p_{a,b,r}(x)$ vale $a + b + r + 7$. Com isso, vamos somar as r maiores raízes de $P_L(x)$, para $r \geq 3$:

$$\begin{aligned}
S_r &= x_1 + x_2 + x_3 + (r-3) \left(\frac{3 + \sqrt{5}}{2} \right) \\
&= a + b + r + 7 - x_4 - x_5 - x_6 + 3(r-3) - (r-3) \left(\frac{3 - \sqrt{5}}{2} \right) \\
&< a + b + 2r - 2 + 2r - \frac{4}{3} - \frac{2}{n} - (r-3) \left(\frac{3 - \sqrt{5}}{2} \right) \\
&= n + 2r - 2 - (r-3) \left(\frac{3 - \sqrt{5}}{2} \right) - \frac{2}{n} - \frac{1}{3}. \tag{4.32}
\end{aligned}$$

Observe que

$$\begin{aligned}
n \geq 6 &> \frac{2r-4}{(r-3)\left(\frac{3-\sqrt{5}}{2}\right) + \frac{1}{3}} \\
(r-3) \left(\frac{3-\sqrt{5}}{2} \right) + \frac{1}{3} &> \frac{2r-4}{n} \\
(r-3) \left(\frac{3-\sqrt{5}}{2} \right) + \frac{1}{3} + \frac{2}{n} &> \frac{2r-2}{n}.
\end{aligned}$$

Aplicando essa desigualdade em (4.32), obtemos a desigualdade (4.5) procurada.

No caso de $r = 2$, vamos proceder de maneira semelhante, lembrando que duas raízes (que somam 3) de $p_{a,b,2}(x)$ se cancelam com o fator $(x^2 - 3x + 1)^{-1}$ e portanto não contam na soma ($p_{a,b,2}(x)$ tem um fator de $(x^2 - 3x + 1)$). A soma das 4 demais raízes é $a + b + 2 + 7 - 3 = a + b + 6$.

$$\begin{aligned}
S_2 &= x_1 + x_2 \\
&= a + b + 6 - x_4 - x_6 \\
&< n + 3 - \frac{4}{3} - \frac{1}{n} \\
&= n + 2 - \frac{1}{3} - \frac{1}{n}. \tag{4.33}
\end{aligned}$$

Se $n \geq 6$ então $\frac{1}{3} \geq \frac{2}{n}$. Se $n = 5$ então $\frac{1}{3} + \frac{1}{5} > \frac{2}{5}$. Portanto, para $n \geq 5$ temos $S_2 < n + 2 - \frac{2}{n}$, concluindo a demonstração. \square

Veremos agora os casos em que o número de autovalores maiores que a média \bar{d} é $r + 1$.

Teorema 5. *Toda árvore da família \mathcal{F}_4 , com r ramos do tipo 1, que não tenha pendentes e que possua exatamente $\sigma = r + 1$ autovalores maiores do que a média \bar{d} cumpre a desigualdade*

$$S_\sigma \leq n + 2\sigma - 2 - \frac{2\sigma - 2}{n}.$$

Demonstração: Vamos supor que a árvore sem pendentes tenha $\sigma = r + 1$, com $r \geq 2$. Usando a *decomposição BT* descrita no capítulo anterior, os autovalores da árvore são os autovalores da matriz T unidos com um multiconjunto de elementos iguais a 1. Portanto, os σ maiores autovalores da árvore são os σ maiores autovalores de T . Organizando os ramos de maneira crescente segundo o número de folhas s_i , temos

$$T = \begin{pmatrix} T_1 & & & u_1^T \\ & \ddots & & \vdots \\ & & T_r & u_r^T \\ u_1 & \dots & u_r & \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & T_r & \\ & & & \delta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} & & & u_1^T \\ & & & \vdots \\ & & & u_r^T \\ u_1 & \dots & u_r & 0 \end{pmatrix} = A + B, \quad (4.34)$$

onde u_i é o bloco $\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}$, $\delta = r$ é o grau da raiz e T_i é um bloco 2×2 referente ao i -ésimo ramo

$$T_i = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{s_i} \\ \sqrt{s_i} & s_i + 1 \end{pmatrix}. \quad (4.35)$$

Usando o Teorema 15 e escolhendo $I = \{1, 2, \dots, r + 1, 2r + 1\}$, obtemos a relação

$$\begin{aligned} \sum_{i \in I} \lambda_i(T) &\leq \sum_{i=1}^{r+2} \lambda_i(A) + \sum_{i \in I} \lambda_i(B) \\ S_{r+1}(T) + \lambda_{2r+1}(T) &\leq S_{r+2}(A) + \sum_{i \in I} \lambda_i(B) \\ S_{r+1}(T) &\leq S_{r+2}(A), \end{aligned} \quad (4.36)$$

pois o menor autovalor de T (matriz $(2r + 1) \times (2r + 1)$) é o menor autovalor da árvore (que é igual a zero) e a soma dos autovalores selecionados de B é zero (Lema 15). Os $r + 1$ maiores autovalores de A são δ e os maiores autovalores de T_i , pelo Lema 3. Já o autovalor de posição $r + 2$ de A é o maior dos menores autovalores de T_i . Já que supomos $s_1 \leq s_i$,

$$\begin{aligned}
S_{r+2} &= \delta + \sum_{i=1}^r \frac{s_i + 2 + \sqrt{s_i^2 + 4s_i}}{2} + \frac{s_1 + 2 - \sqrt{s_1^2 + 4s_1}}{2} \\
&= \delta + \sum_{i=2}^r \frac{s_i + 2 + \sqrt{s_i^2 + 4s_i}}{2} + s_1 + 2 \\
&< \delta + \sum_{i=2}^r (s_i + 2) + s_1 + 2 \\
&= \delta + \sum_{i=1}^r s_i + 2r \\
&= n - 1 + 2r \tag{4.37}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= n + 2(r + 1) - 2 - 1 \\
&< n + 2(r + 1) - 2 - \frac{2r}{n}. \tag{4.38}
\end{aligned}$$

Para chegar em (4.37) usamos o fato de que $n = 1 + r + \sum s_i$ e assim $n \geq 1 + 2r$, sustentando (4.38). Substituindo $r + 1$ por σ , encontramos a relação procurada. □

Lema 12. *Para $a_i \geq 1$, $1 \leq i \leq r$, tal que $\sum a_i = c$, temos*

$$\sum_{i=1}^r \frac{1}{a_i + 2} \geq \frac{r^2}{c + 2r}.$$

Demonstração: Por indução em r . Para $r = 2$, queremos minimizar a função $f(a_1, a_2) = \frac{1}{a_1+2} + \frac{1}{a_2+2}$ com $a_1 + a_2 = c$. O ponto de mínimo ocorre para $a_1 = a_2$. Supondo agora que vale o resultado para $r^* \leq r - 1$, tomamos uma sequência com r entradas e, usando a técnica dos multiplicadores de Lagrange, obtemos que um extremo ocorre quando $a_i = a_1$ para todo i . Comparando o valor da soma nesse extremo com os valores da soma para $a_r = 1$ e os demais $a_i = a_1 = \frac{c-1}{r-1}$, ou

$a_r = c - r + 1$ e os demais $a_i = 1$ (estamos usando a hipótese de indução para sequência de $r - 1$ entradas) que são fronteiras, concluímos que $a_i = \frac{c}{r}$ minimiza a soma. □

Teorema 6. *Toda árvore da família \mathcal{F}_4 , com r ramos do tipo 1, que tenha no mínimo um pendente na raiz, cumpre a desigualdade*

$$S_\sigma \leq n + 2\sigma - 2 - \frac{2\sigma - 2}{n}.$$

Demonstração: Como a árvore possui $p \geq 1$ pendentes, isso implica que possua exatamente $\sigma = r + 1$ autovalores maiores que a média \bar{d} (Lema 10). Para possuir a família, $r \geq 2$. Usando a *decomposição BT* e sabendo que os σ maiores autovalores da árvore são os mesmos σ maiores autovalores da matriz T de ordem $(2r + 2)$

$$T = \begin{pmatrix} 1 & & & & \sqrt{p} \\ & T_1 & & & u_1^T \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & T_r & u_r^T \\ \sqrt{p} & u_1 & \dots & u_r & \delta \end{pmatrix}. \quad (4.39)$$

Usando a decomposição da matriz T semelhante a realizada em (4.34), com $\delta = r + p$ o grau da raiz, u_i é o bloco $\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}$ e T_i são os blocos 2×2 em (4.35), obtemos a relação

$$S_\sigma \leq S_{r+2}(A),$$

onde A é a matriz diagonal em blocos.

Os maiores autovalores de A são as maiores raízes dos blocos T_i , δ e 1.

Assim

$$\begin{aligned}
S_{r+2} &= \delta + \sum_{i=1}^r \frac{s_i + 2 + \sqrt{s_i^2 + 4s_i}}{2} + 1 \\
&< \delta + 1 + \sum_{i=1}^r \left(s_i + 2 - \frac{1}{s_i + 2} \right) & (4.40) \\
&= \delta + 1 + \sum_{i=1}^r s_i + 2r - \sum_{i=1}^r \frac{1}{s_i + 2} \\
&= n + 2r - \sum_{i=1}^r \frac{1}{s_i + 2} \\
&\leq n + 2(r + 1) - 2 - \frac{r^2}{\sum s_i + 2r} \\
&= n + 2(r + 1) - 2 - \frac{r^2}{n + r - p - 1}, & (4.41)
\end{aligned}$$

pois $n = 1 + p + r + \sum s_i$ e pelos Lemas 3 e 12.

Usando as condições $r \geq 2$, $p \geq 1$ e $n \geq 6$ temos

$$\begin{aligned}
n(r - 2) &\geq 2(r - 2) \geq 2(r - p - 1) \\
nr &\geq 2(n + r - p - 1) \\
\frac{r}{n + r - p - 1} &\geq \frac{2}{n}
\end{aligned}$$

e substituindo em (4.41), tomando $\sigma = r + 1$, concluímos o resultado. \square

4.2.4 Árvores de \mathcal{F}_5

Vamos tratar de um caso especial de árvores de diâmetro 5. Queremos as árvores que, quando retirada qualquer aresta não ligada a uma folha, são a união de uma estrela com uma árvore que não é estrela (essas árvores pertencem ao conjunto \mathcal{F}). Seja \mathcal{F}_5 o subconjunto de \mathcal{F} que contém as árvores de diâmetro 5. A estrutura dessa família de árvores é a seguinte: há um vértice que é a raiz (vértice central); ligados a essa raiz há ramos do tipo 0 (pendentes), um ramo do tipo 2 e pelo menos um do tipo 1.

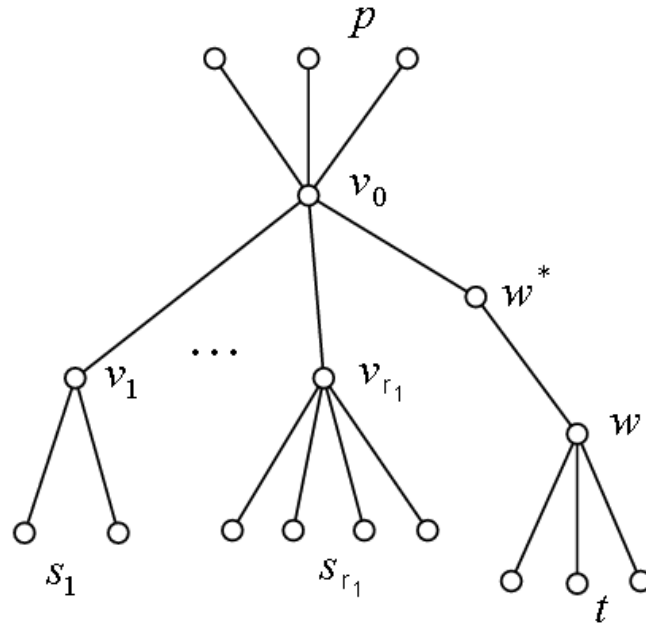


Figura 4.11: Modelo de uma árvore de \mathcal{F}_5

As árvores com menor número de vértices dessa família possuem: 1 ramo do tipo 2, 1 ramo do tipo 1 e um pendente; ou 1 ramos do tipo 2 e dois ramos do tipo 1. Assim, $n \geq 7$.

Nessa subseção considere $r = r_1 + 1$ o número de ramos totais (não pendentos).

Proposição 24. *Uma árvore da família \mathcal{F}_5 , com $r_1 \geq 1$ ramos do tipo 1 e p pendentos, possui $r + 1$ ou $r + 2$ autovalores maiores que a média \bar{d} .*

Demonstração: Usando o algoritmo *V1* e calculando $a(v)$ para $\alpha = \bar{d}$ obtemos, para cada tipo de vértice (u_i vértices pendentos, v_i vértices nós dos ramos do tipo 1, w vértice nó do ramo do tipo 2, w^* vértice ligando a raiz ao nó do ramo do tipo 2, v_0 vértice central), as seguintes relações, onde s_i representa o número de folhas

de v_i e t o número de folhas de w , conforme ilustrado na Figura 4.11.

$$a(u) = 1 - \left(2 - \frac{2}{n}\right) = -\frac{n-2}{n} < 0 \quad (4.42)$$

$$a(v_i) = s_i + 1 - \left(2 - \frac{2}{n}\right) - \frac{s_i}{a(u)} = 2s_i + \frac{2s_i}{n-2} + \frac{2}{n} - 1 > 2s_i - 1 \quad (4.43)$$

$$a(w) = 2t + \frac{2t}{n-2} + \frac{2}{n} - 1 > 0 \quad (4.44)$$

e $a(v_0)$ e $a(w^*)$ podem tanto ser negativo quanto positivo, dependendo da configuração da árvore.

Dos n vértices do grafo, há exatamente r_1 vértices do tipo v_i , um w , um do tipo w^* e um do tipo v_0 , e os demais são do tipo u . Portanto, contando o número de $a(v)$ positivos, podemos afirmar que há no mínimo r autovalores maiores que a média \bar{d} , e no máximo $r + 2$.

Supondo que $\sigma = r$, $a(v_0)$ e $a(w^*)$ devem ser negativos. Sejam

$$\begin{aligned} h(n, t) &:= a(w^*) = \frac{2}{n} - \frac{1}{a(w)} \\ &= \frac{-n^3 + 4(nt + 2)(n - 1)}{n(n^2(2t - 1) - 2n(t - 2) - 4)}, \\ a(v_0) &= r + p - \left(2 - \frac{2}{n}\right) + p\frac{n}{n-2} - \sum_{r_1} \frac{1}{a(v_i)} - \frac{1}{a(w^*)}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Note que, para t fixo, $\frac{\partial h}{\partial n}(n, t) < 0$ para $n \geq 2$ e $t \geq 1$. Essa afirmação pode ser comprovada calculando a derivada parcial de h e, usando a substituição de variáveis ($n' = n + 2$ e $t' = t + 1$), verificando que a expressão é uma soma de termo da forma $n'^{p_1}t'^{p_2}$ com coeficientes negativos. Ou seja, h é decrescente quando n cresce. Uma cota inferior para $h(n, t)$ pode ser obtida se tomando o limite.

$$h(n, t) \geq \lim_{n \rightarrow \infty} h(n, t) = -\frac{1}{2t - 1}. \quad (4.46)$$

Para encontrar uma cota inferior para $1 - \frac{1}{a(v_i)}$, basta usar (4.43) e notar que $a(v_i) \geq 1$. Portanto

$$1 - \frac{1}{a(v_i)} \geq 0. \quad (4.47)$$

Então, podemos reescrever a expressão (4.45) como

$$\begin{aligned} a(v_0) &> 2p \frac{n-1}{n-2} - 1 + \frac{2}{n} + r_1 \cdot 0 + 2t - 1 \\ &> 2p + 2t - 2 + \frac{2}{n} \end{aligned}$$

que é positiva, pois $t \geq 1$. Portanto $a(v_0)$ é positivo, contrariando a suposição de que havia somente r autovalores maiores que a média \bar{d} . Logo, $\sigma \geq r + 1$. \square

Teorema 7. *Uma árvore da família \mathcal{F}_5 , com $r_1 \geq 2$ ramos do tipo 1, e com σ autovalores maiores que a média \bar{d} satisfaz a desigualdade*

$$S_\sigma \leq n + 2\sigma - 2 - \frac{2\sigma - 2}{n}.$$

Demonstração: Essa árvore possui um ramo do tipo 2, $r_1 \geq 2$ ramos do tipo 1 e $p \geq 0$ pendentes. O número σ pode ser $r + 1$ ou $r + 2$. Usando a *decomposição BT*, a matriz T possui todos os autovalores da árvore, exceto por um multconjunto cujos elementos são 1. Ou seja, os autovalores maiores que a média \bar{d} são autovalores de T .

Há duas possíveis matrizes T : T^0 (árvore sem pendentes) e T^1 (árvore com pendentes).

$$T^1 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \sqrt{p} \\ & T_1 & & & u_1^T \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & T_{r_1} & u_{r_1}^T \\ & & & & Q \\ \sqrt{p} & u_1 & \dots & u_{r_1} & v & \delta \end{pmatrix} \quad T^0 = \begin{pmatrix} T_1 & & & & u_1^T \\ & \ddots & & & \vdots \\ & & T_{r_1} & & u_{r_1}^T \\ & & & Q & v^T \\ u_1 & \dots & u_{r_1} & v & \delta \end{pmatrix} \quad (4.48)$$

onde $\delta = r + p$ é o grau da raiz, u_i é o bloco $\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}$ e v o bloco $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$. O bloco Q é um bloco 3×3 , enquanto que os demais são blocos 2×2 .

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{t} & 0 \\ \sqrt{t} & t+1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad T_i = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{s_i} \\ \sqrt{s_i} & s_i + 1 \end{pmatrix}. \quad (4.49)$$

Usando a decomposição feita em (4.34) e pelo Teorema 15, escolhendo $I = \{1, 2, \dots, r+1, \text{ordem}(T)\}$, obtemos a mesma relação que em (4.36),

$$S_{r+1}(T) \leq S_{r+2}(A),$$

onde A é a matriz diagonal em blocos.

Os $r+2$ maiores autovalores de A são: os maiores autovalores dos blocos T_i (Lema 3), os dois maiores autovalores de Q (Lema 4) e δ . Lembrando que a soma dos três autovalores de Q é $t+4$ e usando y_3 para o menor autovalor de Q , temos

$$\begin{aligned} S_{r+2}(A) &< \delta + t + 4 - y_3 + \sum_{i=1}^{r_1} \left(s_i + 2 - \frac{1}{s_i + 2} \right) \\ &= \delta + t + \sum_i s_i + 4 - y_3 + 2r_1 - \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2}. \end{aligned}$$

Usando $n = r + p + 2 + t + \sum s_i$, e Lema 12, obtemos

$$S_{r+2}(A) < n - 2 + 4 - y_3 + 2r_1 - \frac{(r-1)^2}{n+r-p-4-t} \quad (4.50)$$

$$\leq n + 2(r+1) - 2 - y_3 - \frac{(r-1)^2}{n+r-5}. \quad (4.51)$$

Vamos separar em dois casos. Se $r_1 \geq 3$, ou seja, $r \geq 4$, temos

$$\begin{aligned} n > 2 > 2 - \frac{2r+2}{r^2-4r+1} &= \frac{2r(r-5)}{r^2-4r+1} \\ nr^2 - 4rn + n &> 2r(r-5) \\ n(r^2 - 2r + 1) &> 2r(n+r-5) \\ \frac{(r-1)^2}{n+r-5} &> \frac{2r}{n} \end{aligned}$$

e por (4.51), por y_3 ser positivo e substituindo $\sigma = r+1$ temos o resultado.

Se $r_1 = 2$, a equação (4.50) fica

$$S_{r+2}(A) < n + 6 - \frac{4}{n-1-t} - y_3. \quad (4.52)$$

Usando o Lema 4, se $t = 1$, teremos

$$\begin{aligned} 0, 19n^2 - 2, 38n + 12 &> 0 \\ 4n + 0, 19(n^2 - 2n) &> 6n - 12 \\ \frac{4}{n-2} + 0, 19 &> \frac{6}{n} \end{aligned} \quad (4.53)$$

e substituindo em (4.52) encontramos a desigualdade. Por outro lado, se $t \geq 2$ teremos

$$\begin{aligned}
& \left[n - \left(\frac{9t+1}{2} \right) \right]^2 + \left(24 - \frac{81}{4} \right) t^2 + \left(24 - \frac{9}{2} \right) t - \frac{1}{4} > 0 \\
& n^2 - (9t+1)n + 24t(t+1) > 0 \\
& 4(4t)n + n(n-t-1) > 6(4t)(n-t-1) \\
& \frac{4}{n-t-1} + \frac{1}{4t} > \frac{6}{n} \tag{4.54}
\end{aligned}$$

e substituindo em (4.52), sendo $y_3 > \frac{1}{4t}$, encontramos a desigualdade procurada, para $\sigma = r+1$.

Caso $\sigma = r+2$, procedemos de maneira semelhante. Escolhendo $I = \{1, 2, \dots, r+1, r+2, \text{ordem}(T)\}$, obtemos a partir do Teorema 15 e Lema 15 a relação

$$S_{r+2}(T) \leq S_{r+3}(A),$$

onde A é a matriz diagonal em blocos. O autovalor de posição $r+3$ da matriz A pode ser: 1, um autovalor pequeno das matrizes T_i ou o menor autovalor de Q . Note que

$$\lambda_{r+3}(A) = \begin{cases} 1, & \text{se houver pendentes} \\ \frac{s_1+2-\sqrt{s_1^2-4s_1}}{2}, & \text{se não houver pendentes e } x_2 > y_3 \\ y_3, & \text{se não houver pendentes e } y_3 \geq x_2 \end{cases} \tag{4.55}$$

ou seja, $\lambda_{r+3}(A) \leq 1$. Portanto, usando o caso $\sigma = r+1$, teremos

$$\begin{aligned}
S_{r+3}(A) &= S_{r+2}(A) + \lambda_{r+3}(A) \\
&\leq n + 2(r+1) - 2 - \frac{2r}{n} + 1 \\
&= n + 2(r+2) - 2 - \frac{2r}{n} - 1 \\
&< n + 2(r+2) - 2 - \frac{2r+2}{n},
\end{aligned}$$

pois $n \geq 2$, o que conclui a demonstração. \square

Teorema 8. *Uma árvore da família \mathcal{F}_5 , com apenas dois ramos (um do tipo 1 e um do tipo 2) e σ autovalores maiores que a média \bar{d} satisfaz*

$$S_\sigma \leq n + 2\sigma - 2 - \frac{2\sigma - 2}{n}.$$

Para esses grafos não podemos usar a *decomposição BT* na forma da equação de matrizes (4.34) ($T = A + B$) usada nos outros casos, pois, fazendo isso, extrapolamos a cota superior almejada para alguns grafos da família. Por exemplo, para a árvore da Figura 4.12 que pertence a \mathcal{F}_5 , a soma dos quatro maiores autovalores da matriz A (matriz de blocos após a decomposição da matriz T usando a *decomposição BT*) é maior do que a cota superior que procuramos, para $k = 3$.

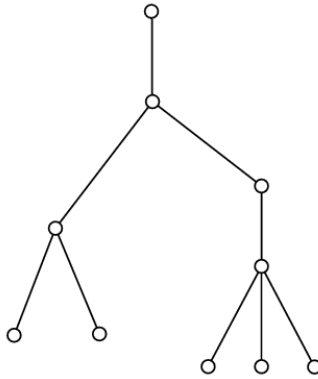


Figura 4.12: Contra-exemplo para uso da *decomposição BT* para $r = 2$

Temos os blocos

$$T_1 = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 3 \end{pmatrix} \quad Q = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} & \\ \sqrt{3} & 4 & 1 \\ & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

cuja soma dos três maiores autovalores, mais o valor de $\delta = 3$ (os quatro maiores autovalores de A) resulta em $S_4(A) \geq 13,623$. Enquanto que, para a cota que buscamos, devemos ter $S_3(T) \leq 13,6$, mostrando que a *decomposição BT* aplicada na equação (4.34) não é útil nesse caso.

Demonstração: (Teorema 8) Para uma árvore com esse perfil pertencer a família, é necessário que $p \geq 1$. Caso contrário, seria possível dividir o grafo em uma união de duas estrelas. Vamos em busca do próprio polinômio característico laplaciano. Seja s e t o número de folhas dos ramos do tipo 1 e 2, respectivamente. Temos $n = p + 4 + s + t$ e $n \geq 7$. Usando o algoritmo *V1*, obtemos

$$P_L(x) = p_{p,s,t}(x) \cdot (x - 1)^{n-7} \cdot x,$$

onde

$$\begin{aligned} p_{p,s,t}(x) &= x^6 - (s + t + p + 9)x^5 + (st + pt + ps + 7t + 7s + 6p + 31)x^4 \\ &\quad - (pst + 5st + 4pt + 4ps + 17t + 17s + 13p + 53)x^3 \\ &\quad + (2pst + 7st + 5pt + 4ps + 18t + 18s + 13p + 48)x^2 \\ &\quad - (3st + 2pt + ps + 8t + 8s + 6p + 22)x + (p + s + t + 4). \end{aligned}$$

Aplicando o algoritmo *V2* para $\alpha = 1$, verifica-se que há três autovalores menores do que 1, quatro maiores do que 1 e $n - 7$ iguais a 1. Aplicando o algoritmo para $\alpha = 2$, observa-se que somente três autovalores são maiores do que 2. Confrontando com a forma de $P_L(x)$, conclui-se que $p_{p,s,t}(x)$ possui: três raízes maiores que 2; uma raiz entre 1 e 2; e duas raízes menores que 1.

Analisando o polinômio $p_{p,s,t}(x)$ em certos pontos, encontramos

$$\begin{aligned} p_{p,s,t}(1) &= pst > 0 \\ p_{p,s,t}\left(\frac{7}{5}\right) &> 0 \\ p_{p,s,t}(2) &= -[(2s - 1)(t + p) + s] < 0. \end{aligned}$$

A segunda afirmação é válida pois é soma de termos positivos (após substituição de variáveis $p' = p + 1$, $s' = s + 1$ e $t' = t + 1$). Como $p_{p,s,t}(x)$ troca de sinal no intervalo $(\frac{7}{5}, 2)$, podemos dizer que há uma raiz desse polinômio nesse intervalo. A soma das seis raízes é $n + 5$. Também podemos afirmar que as menores raízes são maiores ou iguais a conectividade algébrica da árvore. Pelo Lema 7, temos

$$\frac{4}{5n} \leq x_6, x_5 < 1, \quad \frac{7}{5} < x_4.$$

Supondo que $\sigma = r + 1 = 3$, os três maiores autovalores da árvore são as três maiores raízes de $p_{p,s,t}(x)$.

$$\begin{aligned}
 S_3 &= n + 5 - x_4 - x_5 - x_6 \\
 &< n + 5 - \frac{8}{5n} - \frac{7}{5} \\
 &= n + 4 - \frac{8}{5n} - 0,4 \\
 &< n + 4 - \frac{8}{5n} - \frac{12}{5n} \\
 &= n + 4 - \frac{4}{n},
 \end{aligned}$$

pois $n \geq 7$, satisfazendo a desigualdade procurada.

Supondo que a árvore tenha $\sigma = r + 2 = 4$, procedemos de maneira similar e obtemos

$$\begin{aligned}
 S_4 &= n + 5 - x_5 - x_6 < n + 5 \\
 &= n + 8 - 2 - 1 \\
 &< n + 2 \cdot 4 - 2 - \frac{6}{n},
 \end{aligned}$$

satisfazendo a desigualdade. □

4.2.5 Árvores de \mathcal{F}_6

Seja \mathcal{F}_6 o subconjunto de \mathcal{F} com as árvores de diâmetro 6. A esse subconjunto pertencem as árvores que, após a retirada de qualquer aresta não incidente a alguma folha, são a união (disjunta) de uma estrela e uma não estrela. A característica dessas árvores é possuírem: um vértice central; ligados a este, dois ou mais ramos do tipo 2; alguns possíveis ramos do tipo 1 e vértices pendentes.

A árvore com menor número de vértices é aquela que só possui raiz central e dois ramos do tipo 2, ambos com uma folha (o caminho \mathcal{P}_7). Assim $n \geq 7$.

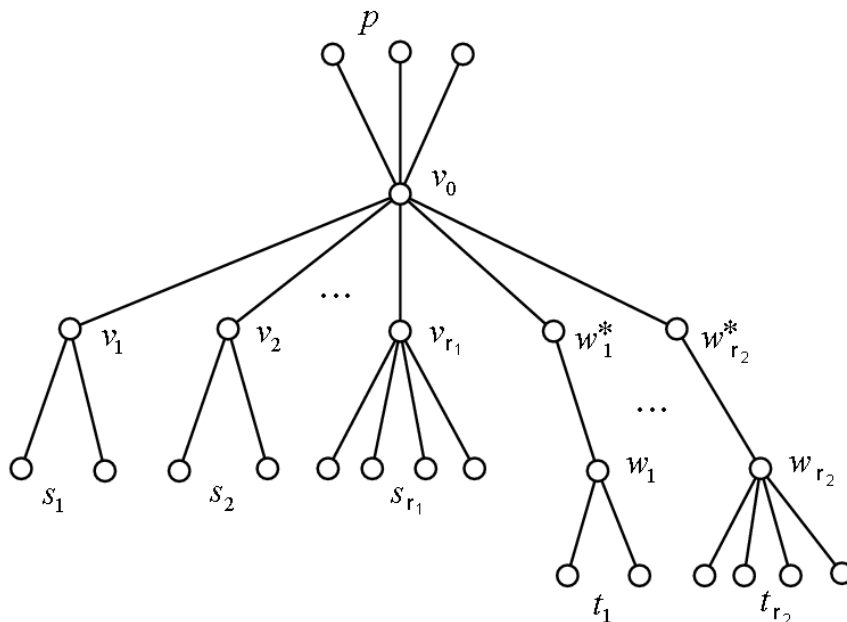


Figura 4.13: Modelo de uma árvore de \mathcal{F}_6

Proposição 25. *As árvores da família \mathcal{F}_6 possuem entre $r + 1$ e $r + 4$ autovalores maiores que a média \bar{d} , onde r é a soma do número de ramos dos tipos 1 e 2.*

Demonstração: Usando o algoritmo *V2* e calculando $a(v)$ para $\alpha = \bar{d}$ obtemos, para cada tipo de vértice (u vértices pendentes, v_i vértices nós dos ramos do tipo 1, w_j vértice nó do ramo do tipo 2, w_j^* vértice ligando a raiz ao nó do ramo do tipo 2, v_0 vértice central), as relações em (4.42) e (4.43), onde s_i representa o número de folhas de v_i , e adaptação de (4.44), onde t_j é o número de folhas de w_j ,

$$a(w_j) = 2t_j + \frac{2t_j}{n-2} + \frac{2}{n} - 1 > 0.$$

Em um grafo com r_1 ramos do tipo 1 e r_2 do tipo 2, podemos afirmar que há no mínimo $r = r_1 + r_2$ autovalores maiores que a média. O número exato depende dos sinais dos r_2 $a(w_j^*)$ e de $a(v_0)$.

Vamos supor que possa existir uma árvore dessa família com exatamente $\sigma = r$. Então todos $a(w_i^*)$ são negativos.

Vimos em (4.46) que

$$-\frac{1}{a(w_j^*)} \geq 2t_j - 1$$

e em (4.47) que

$$1 - \frac{1}{a(v_i)} \geq 0.$$

Assim,

$$\begin{aligned} a(v_0) &= r + p - \left(2 - \frac{2}{n}\right) + p \frac{n}{n-2} - \sum_{r_1} \frac{1}{a(v_i)} - \sum_{r_2} \frac{1}{a(w_j^*)} \\ &= 2p + \frac{2p}{n-2} + \frac{2}{n} + r_2 - 2 + \sum_{r_1} \left(1 - \frac{1}{a(v_i)}\right) - \sum_{r_2} \frac{1}{a(w_j^*)} \\ &> 2p + \frac{2}{n} + r_2 - 2 + r_1 \cdot (0) + \sum_{r_2} (2t_j - 1) \\ &= 2p + \frac{2}{n} - 2 + \sum_{r_2} 2t_j. \end{aligned}$$

E como há no mínimo dois ramos do tipo 2, $a(v_0) > 0$, contrariando nossa suposição. Ou seja, $\sigma \geq r + 1$.

Analizando a expressão de $a(w_j^*)$ associada ao ramo do tipo 2 com t_j folhas

$$a(w_j^*) = \frac{2}{n} - \frac{1}{a(w_j)},$$

observamos que para este ser positivo, é necessário e suficiente que

$$t_j \geq \frac{n^3 - 8n + 8}{4n^2 - 4n}.$$

Assim, temos

$$t_j \geq \frac{n^2}{4(n-1)} - \frac{2}{n} > \frac{n}{4} - \frac{1}{3}, \quad (4.56)$$

ou seja, para que $a(w_j^*) > 0$ é necessário que $t_j > \frac{n}{4} - \frac{1}{3}$, pois $n > 7$. Vamos supor que temos uma árvore de \mathcal{F}_6 com $\sigma \geq r + 5$. Podemos afirmar que no mínimo há quatro $a(w_j^*)$ positivos. Portanto, para esses quatro t_j temos uma cota inferior. Somando o número de folhas desses quatro ramos do tipo 2 e mais seus oito vértices

dos ramos e o vértice central, temos que a árvore possui no mínimo $n + 8$ vértices: uma contradição, pois a árvore tem n vértices. Logo, não há árvore da família com mais de $r + 4$ autovalores maiores que a média \bar{d} . □

Vamos primeiramente mostrar a validade da cota superior (4.5) para os valores de σ superiores, e depois para $\sigma = r + 1$. Este último caso será tratado separadamente pois exige um tratamento diferente para situações particulares.

Teorema 9. *Uma árvore da família \mathcal{F}_6 com $r + 2 \leq \sigma \leq r + 4$ autovalores maiores que a média \bar{d} satisfaz*

$$S_\sigma \leq n + 2\sigma - 2 - \frac{2\sigma - 2}{n}.$$

Demonstração: Tome uma árvore de \mathcal{F}_6 , com r_1 ramos do tipo 1, $r_2 \geq 2$ ramos do tipo 2 e p pendentes. E sejam s_i e t_j o número de folhas dos ramos do tipo 1 e 2, respectivamente, cada sequência organizada de modo crescente. Portanto, $n = 1 + p + r_1 + 2r_2 + \sum_{r_1} s_i + \sum_{r_2} t_j$. Usando a *decomposição BT*, temos que a matriz T (T^0 se $p = 0$ e T^1 se $p \geq 1$) cujo espectro é igual ao espectro laplaciano da árvore, exceto por um multiconjunto de elementos iguais a 1, tem a forma

$$T^0 = \begin{pmatrix} T_1 & & & & & & u_1^T \\ & \ddots & & & & & \vdots \\ & & T_{r_1} & & & & u_{r_1}^T \\ & & & Q_1 & & & v_1^T \\ & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & Q_{r_2} & v_{r_2}^T \\ u_1 & \dots & u_{r_1} & v_1 & \dots & v_{r_2} & \delta \end{pmatrix}$$

ou

$$T^1 = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \sqrt{p} \\ & T_1 & & & & & & u_1^T \\ & & \ddots & & & & & \vdots \\ & & & T_{r_1} & & & & u_{r_1}^T \\ & & & & Q_1 & & & v_1^T \\ & & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & & Q_{r_2} & v_{r_2}^T \\ \sqrt{p} & u_1 & \dots & u_{r_1} & v_1 & \dots & v_{r_2} & \delta \end{pmatrix},$$

onde u_i é o bloco $\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}$ e v_i o bloco $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, $\delta = r_1 + r_2 + p$ é o grau do vértice central, e os blocos T_i e Q_j são matrizes 2×2 e 3×3 referentes aos ramos dos tipos 1 e 2, respectivamente, com s_i e t_j folhas. Uma estimativa para os autovalores desses blocos encontra-se no capítulo anterior (Lemas 3 e 4).

Expressamos a matriz T como soma de duas matrizes A (matriz diagonal em blocos) e B (entradas somente na última linha e coluna) semelhante a equação (4.34). Por exemplo, para T^1

$$A^1 = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & T_i & & & & & \\ & & & \ddots & & & & \\ & & & & Q_j & & & \\ & & & & & \ddots & & \\ & & & & & & \delta & \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad B^1 = \begin{pmatrix} & & & & & & & \sqrt{p} \\ & & & & & & & \vdots \\ & & & & & & & u_i^T \\ & & & & & & & \vdots \\ & & & & & & & v_j^T \\ & & & & & & & \vdots \\ \sqrt{p} & \dots & u_i & \dots & v_j & \dots & & 0 \end{pmatrix}$$

e para T^0 basta suprimir a primeira linha e coluna de cada matriz. Temos

$$n = 1 + \delta + r_2 + \sum_{r_1} s_i + \sum_{r_2} t_j.$$

Usando o Teorema 15 com $I = \{1, \dots, r, r+1, \dots, r+\ell, \text{ordem}(T)\}$ ($|I| = r + \ell + 1$) temos

$$\begin{aligned} \sum_{i \in I} \lambda_i(T) &\leq \sum_{i=1}^k \lambda_i(A) + \sum_{i \in I} \lambda_i(B) \\ \sum_{i=1}^{r+\ell} \mu_i(T) + \mu_{\text{ordem}(T)} &\leq \sum_{i=1}^{r+\ell+1} \lambda_i(A) + \sum_{i=1}^{r+\ell} \lambda_i(B) + \lambda_{\text{ordem}(B)} \\ S_{r+\ell}(T) &\leq S_{r+\ell+1}(A), \end{aligned} \quad (4.57)$$

pois $\mu_{\text{ordem}(T)} = 0$ (o menor autovalor laplaciano da árvore) e a soma dos autovalores selecionados de B é zero (Lema 15).

Considere $2 \leq \ell \leq 4$. Os maiores autovalores de A são: δ , o maior autovalor de cada bloco T_i (Lema 3), o maior autovalor de cada bloco Q_j (Lema 4). Já temos $r+1$ autovalores, todos esses maiores que 2. Os de posição $r+2$ e $r+3$ são exatamente os segundo maiores autovalores de Q_{r_2} e Q_{r_2-1} (há no mínimo dois blocos Q_j), que pertencem ao intervalo $(\frac{3}{2}, 2)$. Os demais $\ell-2$ autovalores de A são todos menores a 2 (menor autovalor de T_i , menor ou segundo autovalor de Q_j , 1 ou 0). Temos

$$\begin{aligned} S_{r+\ell}(T) &\leq S_{r+\ell+1}(A) \\ &< \delta + \sum_{i=1}^{r_1} (s_i + 2) + \sum_{j=1}^{r_2-2} \left(t_j + 2 + \frac{1}{4t_j} \right) + (t_{r_2} + 4) + (t_{r_2-1} + 4) + 2(\ell - 2) \\ &= \delta + \sum_{i=1}^{r_1} s_i + \sum_{j=1}^{r_2} t_j + 2r_1 + 2(r_2 - 2) + 4 + 2\ell + \sum_{j=1}^{r_2-2} \frac{1}{4t_j} \\ &= n - 1 + 2r_1 + r_2 + 2\ell + \sum_{j=1}^{r_2-2} \frac{1}{4t_j} \\ &= n - 1 + 2(r + \ell) - r_2 + \sum_{j=1}^{r_2-2} \frac{1}{4t_j} \\ &= n + 2(r + \ell) - 2 - 1 - \sum_{j=1}^{r_2-2} \left(1 - \frac{1}{4t_j} \right) \\ &\leq n + 2(r + \ell) - 2 - 1 - (r_2 - 2) \cdot \frac{3}{4}. \end{aligned}$$

Como $r_2 \geq 2$ e $\ell \geq 2$, usando a notação da demonstração da Proposição 25, temos que ter no mínimo $\ell - 1$ ramos do tipo 2 tais que $a(w_j^*) > 0$, e isso nos dá

que $t_j > \frac{n}{4} - \frac{1}{3}$ para esses ramos do tipo 2.

$$\begin{aligned}
n &= 1 + p + r + r_2 + \sum_{r_1} s_i + \sum_{r_2} t_j \\
&\geq 1 + r + r_2 + r_1 + \sum_{j=1}^{r_2 - (\ell - 1)} t_j + \sum_{j=r_2 - \ell + 2}^{r_2} t_j \\
&\geq 1 + 2r + r_2 + \sum_{j=r_2 - \ell + 2}^{r_2} (t_j - 1)
\end{aligned}$$

Assim

$$1 \geq \frac{1 + 2r + r_2 + \sum_{j=r_2 - \ell + 2}^{r_2} (t_j - 1)}{n}.$$

Basta mostrar que

$$1 + r_2 + \sum_{j=r_2 - \ell + 2}^{r_2} (t_j - 1) \geq 2\ell - 2, \quad (4.58)$$

para que se cumpra a desigualdade

$$S_{r+\ell}(T) \leq S_{r+\ell+1}(A) < n + 2(r + \ell) - 2 - \frac{2r + 2\ell - 2}{n}. \quad (4.59)$$

Caso $\ell = 2$, facilmente se vê que $1 + r_2 \geq 3 > 2\ell - 2$.

Caso $\ell = 3$ ou 4, cada t_j referente ao ramo com $a(w_j^*) > 0$ deve satisfazer $t_j > \frac{n}{4} - \frac{1}{3}$. Para o menor número de vértices possível ($n = 7$), já temos que ter $t_j \geq 2$. Assim

$$1 + r_2 + (\ell - 1) \geq 2 + \ell \geq (\ell + 4) - 2 \geq 2\ell - 2. \quad \square$$

Teorema 10. *Uma árvore de \mathcal{F}_6 com $\sigma = r + 1$ autovalores maiores do que a média \bar{d} satisfaz*

$$S_\sigma \leq n + 2\sigma - 2 - \frac{2\sigma - 2}{n}.$$

Demonstração: Com a mesma notação da demonstração do Teorema anterior, obtemos da *decomposição BT* a relação (4.57) para $\ell = 1$

$$S_{r+1}(T) \leq S_{r+2}(A),$$

onde A é a matriz diagonal em blocos. Os maiores autovalores da matriz A são: δ , o maior autovalor de cada bloco e o maior dos segundo maior autovalores correspondentes aos blocos referentes aos ramos do tipo 2 (y_2 de Q_{r_2}). Portanto temos

$$\begin{aligned}
S_{r+2}(A) &\leq \delta + \sum_{i=1}^{r_1} \left(s_i + 2 - \frac{1}{s_i + 2} \right) + \sum_{j=1}^{r_2-1} \left(t_j + 2 + \frac{1}{4t_j} \right) + t_{r+2} + 4 \\
&= \delta + \sum s_i + \sum t_j + 2r_1 + 2r_2 + 2 + \sum_{i=1}^{r_2-1} \frac{1}{4t_j} - \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2} \\
&= n - 1 + 2(r+1) - 1 - \sum_{i=1}^{r_2-1} \left(1 - \frac{1}{4t_j} \right) - \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2} \\
&\leq n + 2(r+1) - 2 - \frac{3}{4}(r_2 - 1) - \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2}. \tag{4.60}
\end{aligned}$$

Se $r_1 = 0$, teremos $r = r_2$. Como $n \geq 7$ temos que

$$n > \frac{8r}{3r-3},$$

ou seja

$$\frac{3r-3}{4} > \frac{2r}{n}$$

garantindo a validade da desigualdade.

Se $r_1 \geq 1$, seja $s_* = \max_{1 \leq i \leq r_1} \{s_i\}$. Agora precisamos fazer um pequeno esforço algébrico. Primeiramente note que

$$\begin{aligned}
n &= 1 + p + r_1 + 2r_2 + \sum s_i + \sum t_j \\
&\geq 1 + 2r_1 - 1 + s_* + 3r_2 \\
&\geq 6 + 2r_1 + s_*.
\end{aligned}$$

Acompanhe, como

$$r_1 \left(\frac{4s_* + 20}{s_* + 2} - 2 \right) + 3s_* - 1 + \frac{8r_1^2}{s_* + 2} > 0,$$

temos que

$$(2r_1 + s_*) \left(3 + \frac{4r_1}{s_* + 2} \right) > 8r_1 + 1 - \frac{20r_1}{s_* + 2},$$

o que nos leva a

$$2r_1 + s_* > \frac{8r_1 + 1 - \frac{20r_1}{s_*+2}}{3 + \frac{4r_1}{s_*+2}}.$$

Assim

$$\begin{aligned} n \geq 6 + 2r_1 + s_* &> 6 + \frac{8r_1 + 1 - \frac{20r_1}{s_*+2}}{3 + \frac{4r_1}{s_*+2}} \\ &= 1 + 8 \frac{2 + r_1}{3 + \frac{4r_1}{s_*+2}} \\ &> 8 \left[1 + \frac{r_1 - 1 - \frac{4r_1}{s_*+2}}{3 + \frac{4r_1}{s_*+2}} \right] \\ &\geq 8 \left[1 + \frac{r_1 - 2r_2 + 3 - \frac{4r_1}{s_*+2}}{3r_2 - 3 + \frac{4r_1}{s_*+2}} \right] \\ &= \frac{8r_1 + 8r_2}{3r_2 - 3 + \frac{4r_1}{s_*+2}}. \end{aligned}$$

Portanto

$$\frac{3r_2 - 3}{4} + \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2} \geq \frac{3r_2 - 3}{4} + \frac{r_1}{s_* + 2} > \frac{2r}{n}$$

e aplicando em (4.60) obtemos a desigualdade procurada (de forma estrita). \square

Assim, concluímos a demonstração do Teorema 1 para as árvores da família \mathcal{F} , o caso remanescente. Portanto, o Teorema 1 está provado.

4.3 Aplicação à energia laplaciana

Para concluirmos esse trabalho, segue a confirmação da cota superior da conjectura exposta no início deste capítulo, $E_L(T) \leq E_L(\mathcal{S}_n)$.

Teorema 11. *Toda árvore T de n vértices distinta da estrela possui energia laplaciana inferior a da estrela \mathcal{S}_n ,*

$$E_L(T) < 2n - 4 + \frac{4}{n}.$$

Demonstração: Vamos calcular a diferença da energia laplaciana entre a estrela e uma árvore T , ambos com n vértices). Note que \bar{d} é constante para todas as árvores de n vértices, com valor igual a $2 - \frac{2}{n}$. Já sabemos qual é a energia laplaciana da estrela (equação (2.8)). Aplicando a Proposição 21 e o Teorema 1 sobre T e considerando que T tenha exatamente σ autovalores maiores que \bar{d} , temos

$$\begin{aligned}
 E_L(\mathcal{S}_n) - E_L(T) &= 2n - 4 + \frac{4}{n} - \left[2 \sum_{\mu_i > \bar{d}} \mu_i(T) - 2\sigma\bar{d} \right] \\
 &> 2n - 4 + \frac{4}{n} - 2 \left[n + 2\sigma - 2 - \frac{2\sigma - 2}{n} \right] + 2\sigma\bar{d} \\
 &= 2n - 4 + \frac{4}{n} - \left[2n - 4 + 4\sigma - \frac{4\sigma}{n} + \frac{4}{n} \right] + 4\sigma - \frac{4\sigma}{n} \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

□

5 CONCLUSÃO

Como vimos, muitas propriedades estruturais dos grafos estão ligadas aos seus autovalores. Contudo não podemos distinguir alguns grafos olhando somente para o seu espectro. Uma das propriedades que escapam dos autovalores é a conexidade. Fornecemos exemplos de grafos bipartidos completos unidos com pontos isolados que possuem o mesmo espectro, embora possuíssem número de componentes conexas diferentes. Por outro lado, também existem aqueles grafos, como as estrelas \mathcal{S}_{p+1} , p primo, que podem ser unicamente determinados pelo seu espectro.

Do espectro laplaciano tiramos o número exato de componentes conexas apenas contando a multiplicidade do autovalor laplaciano zero. Esse conceito traz novas propriedades para grafos.

A partir de um resultado conhecido sobre a energia de árvores, investigamos uma conjectura que relacionava a energia laplaciana de árvores e pudemos demonstrar a validade da cota superior

$$E_L(T) \leq E_L(\mathcal{S}_n),$$

para árvores T de n vértices. Influenciados pela cota de Haemers et al. [9], a comprovação do fato acima foi possível graças à nova cota

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

que deu origem a um artigo [6].

Agora que conhecemos a árvore com maior energia laplaciana, é natural nos perguntarmos qual a energia laplaciana mínima. Acredita-se que tal valor seja alcançado pelo caminho, mas esse problema oferece uma dificuldade adicional, que é a própria expressão para a energia laplaciana do caminho, envolvendo soma de cossenos.

Outra questão seria ordenar precisamente as árvores com n vértices

com relação à sua energia laplaciana, isto é, determinar quais árvores assumem a segunda, terceira, k -ésima posição no ordenamento por energia laplaciana. Baseado em experimentos com árvores com até 16 vértices, estima-se que a árvore de diâmetro 3 (*double star*) equilibrada, onde o número de folhas é igual ou aproximadamente igual (caso ímpar), ocupe a posição de número dois, com energia laplaciana menor só quando comparada com uma estrela.

Fazendo um pequeno ajuste no Teorema 1, cálculos preliminares apontam que, para árvores com diâmetro maior ou igual a quatro e com no mínimo seis vértices, vale a seguinte desigualdade para os k maiores autovalores laplacianos

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

Com esse resultado será possível obter da segunda à quarta árvore com maior energia laplaciana.

Referências Bibliográficas

- [1] ABREU, N. M. M., DEL-VECCHIO, R. R., VINAGRE, C. T. M., AND STEVANOVIĆ, D. *Introdução à Teoria Espectral de Grafos com Aplicações*, vol. 27 of *Notas em Matemática Aplicada*. SBMAC, 2007.
- [2] BROUWER, A. E., AND HAEMERS, W. H. *Spectra of graphs*. <http://homepages.cwi.nl/~aeb/math/ipm.pdf>.
- [3] BROUWER, A. E., AND HAEMERS, W. H. A lower bound for the laplacian eigenvalues of a graph: Proof of a conjecture by guo. *Linear Algebra and its Applications* 429 (2008), 2131–2135.
- [4] COLLATZ, L., AND SINOGOWITZ, U. Spektren endlicher grafen. *Abhandlung aus dem Mathematischen Seminar der Universitat Hamburg* 21 (1957), 63–77.
- [5] CVETKOVIĆ, D. M. *Graphs and their spectra*. PhD thesis, Univ. Beograd. Publ. Elektrotehn.Fak. Ser. Mat. Fiz., 1971.
- [6] 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 (2011), 371–399.
- [7] GUTMAN, I. Acyclic systems with extremal hückel π -electron energy. *Theoretica Chimica Acta* 45 (1977), 79–87.
- [8] GUTMAN, I., AND ZHOU, B. Laplacian energy of a graph. *Linear Algebra and its Applications* 414 (2006), 29–37.
- [9] HAEMERS, W., MOHAMMADIAN, A., AND TAYFEH-REZAIE, B. On the sum of laplacian eigenvalues of graphs. *Linear Algebra and its Applications* 432 (2010), 2214–2221.

- [10] HÜCKEL, E. Quantentheoretische beiträge zum benzolproblem. *Zeitschrift für Physik* 70 (1931), 204–286.
- [11] JACOBS, D. P., MACHADO, C. M. S., AND TREVISAN, V. An $o(n^2)$ algorithm for the characteristic polynomial of a tree. *Journal of Combinatorial Mathematics and Combinatorial Computing* 54 (2005), 213–221.
- [12] JACOBS, D. P., AND TREVISAN, V. Locating the eigenvalues of trees. *Linear Algebra and its Applications* 434 (2011), 81–88.
- [13] LI, J. S., AND ZHANG, X. D. A new upper bound for eigenvalues of the laplacian matrix of a graph. *Linear Algebra and its Applications* 265 (1997), 93–100.
- [14] LIMA, E. L. *Álgebra Linear*, 7 ed. Coleção Matemática Universitária. IMPA, 2006.
- [15] MEYER, C. D. *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*, 1 ed. SIAM, 2000, ch. 8.
- [16] MOHAR, B. Eigenvalues, diameter, and mean distance in graphs. *Graphs and Combinatorics* 7 (1991), 53–64.
- [17] OBATA, N. Quantum probability and applications to complex networks, lectures 1-7. *Notas de aula de curso em Tohoku University* (2008). [http://www.math.uni.wroc.pl/analiza/obata/2008Wroclaw\(Obata\)Part1\(1-7\).pdf](http://www.math.uni.wroc.pl/analiza/obata/2008Wroclaw(Obata)Part1(1-7).pdf).
- [18] RADENKOVIĆ, S., AND GUTMAN, I. Total π -electron energy and laplacian energy: how far the analogy goes? *Journal of the Serbian Chemical Society* 73 (2007), 1343–1350.
- [19] ROJO, O. Spectra of weighted generalized bethe trees joined at the root. *Linear Algebra and its Applications* 428 (2008), 2961–2979.

- [20] STEVANOVIĆ, D., BRANKOV, V., CVETKOVIĆ, D., AND SIMIC, S. Newgraph. *Freeware* (2005). <http://www.mi.sanu.ac.rs/newgraph/>.
- [21] TREVISAN, V., CARVALHO, J. B., DEL-VECCHIO, R., AND VINAGRE, C. Laplacian energy of diameter 3 trees. *Applied Mathematics Letters* 24 (2011), 918–923.
- [22] WIELANDT, H. An extremum property of sums of eigenvalues. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 6 (1955), 106–110.

Apêndice A

Seguem algumas definições clássicas da Álgebra Linear, usadas como base para a teoria espectral de grafos. Também são enunciados teoremas usados como ferramentas no texto.

Definição 23. *O polinômio característico $P(x)$ de uma matriz A é definido por*

$$P(x) = \det(xI - A)$$

Definição 24. *Dada uma matriz A , os autovalores de A são números λ tais que $Av = \lambda v$, para algum vetor v não nulo. Dizemos que tal vetor é um autovetor associado ao autovalor λ .*

Definição 25. *O conjunto dos autovalores de uma matriz A é denominado espectro de A .*

Ao buscarmos os autovalores de uma matriz, recorreremos a seguinte técnica: se λ é tal que $Av = \lambda v$, para algum v , temos que $Av - \lambda v = \mathbf{0}$ e portanto $(A - \lambda I)v = \mathbf{0}$. Para que tal fato ocorra, a matriz $A - \lambda I$ não pode ser inversível e daí segue que o determinante deve ser zero.

Proposição 26. *O espectro de uma matriz A é o conjunto das raízes de seu polinômio característico.*

Definição 26. *Uma matriz A de ordem $n \times n$ é dita simétrica se, para todo $1 \leq i, j \leq n$, tivermos a propriedade $a_{ij} = a_{ji}$.*

Definição 27. *Um operador $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ é dito auto-adjunto se, para quaisquer vetores $u, v \in \mathbb{R}^n$ temos a seguinte propriedade de produto interno:*

$$\langle u, Av \rangle = \langle v, Au \rangle.$$

Proposição 27. $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ é um operador auto-adjunto se, e somente se, sua representação matricial $A = [a_{ij}]$ é matriz simétrica em relação a uma base ortonormal.

Demonstração: Seja $B = \{u_1, \dots, u_n\}$ base ortonormal de \mathbb{R}^n em relação a qual A é simétrica. Temos que

$$\langle u_i, Au_j \rangle = a_{ij} = a_{ji} = \langle u_j, Au_i \rangle.$$

Dado $u = \alpha_1 u_1 + \dots + \alpha_n u_n$ e $v = \beta_1 u_1 + \dots + \beta_n u_n$ obtemos

$$\begin{aligned} \langle u, Av \rangle &= \langle \alpha_1 u_1 + \dots + \alpha_n u_n, A(\beta_1 u_1 + \dots + \beta_n u_n) \rangle \\ &= \alpha_1 \beta_1 \langle u_1, Au_1 \rangle + \dots + \alpha_i \beta_j \langle u_i, Au_j \rangle + \dots + \alpha_n \beta_n \langle u_n, Au_n \rangle \\ &= \beta_1 \alpha_1 \langle u_1, Au_1 \rangle + \dots + \beta_j \alpha_i \langle u_j, Au_i \rangle + \dots + \beta_n \alpha_n \langle u_n, Au_n \rangle \\ &= \langle \beta_1 u_1 + \dots + \beta_n u_n, A(\alpha_1 u_1 + \dots + \alpha_n u_n) \rangle \\ &= \langle v, Au \rangle, \end{aligned}$$

ou seja, A é auto-adjunto.

Supondo agora que A é auto-adjunto, aplicamos tal fato para $\langle u_i, Au_j \rangle = \langle u_j, Au_i \rangle$ e obtemos a simetria de A .

□

Teorema 12. (*Teorema Espectral*) Para todo operador auto-adjunto num espaço vetorial de dimensão finita munido de produto interno, existe uma base ortonormal formada por autovetores.

Proposição 28. Se A é uma matriz simétrica então todas as raízes de seu polinômio característico são reais.

Demonstração: Como A é simétrica, o operador A é auto-adjunto, então, pelo teorema anterior, possui base de autovetores. Assim A pode ser expressado por uma matriz diagonal nessa base de autovetores.

Lema 13. *Se A é uma matriz diagonalizável, então o traço de A é igual a soma de seus autovalores.*

Demonstração: Como A é diagonalizável, existe uma matriz P de mudança de base tal que $A = P^{-1}DP$, onde D é a matriz diagonal com entradas iguais aos autovalores de A . Logo, $PA = DP$.

Para matrizes quadradas X e Y , temos

$$\begin{aligned}\operatorname{tr}(XY) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (X)_{ij}(Y)_{ji} \\ &= \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n (Y)_{ji}(X)_{ij} = \operatorname{tr}(YX).\end{aligned}$$

Portanto,

$$\operatorname{tr}(A) = \operatorname{tr}(P^{-1}PA) = \operatorname{tr}(PAP^{-1}) = \operatorname{tr}(DPP^{-1}) = \operatorname{tr}(D).$$

□

Proposição 29. *Seja A uma matriz real simétrica de ordem n e x um vetor. Podemos expressar o maior autovalor de A pelo quociente de Rayleigh*

$$\lambda_1 = \max_{|x| \neq 0} \frac{x^T Ax}{x^T x}.$$

Definição 28. *Uma matriz M é chamada positiva semidefinida se a forma quadrática associada $x^T Mx \geq 0$, para todo vetor x não nulo.*

Proposição 30. *Se uma matriz M pode ser escrita como $M = B \cdot B^T$, então M é positiva semidefinida.*

Demonstração: Aplicando a definição de matriz positiva semidefinida, escolhemos um vetor x e verificamos que

$$x^T Mx = x^T BB^T x = (B^T x)^T (B^T x).$$

Seja $a_i = (B^T x)_i$ a i -ésima entrada do vetor $B^T x$. Assim, $x^T Mx = \sum_i a_i^2 \geq 0$.

□

Proposição 31. *Os autovalores de matrizes positivas semidefinidas são todos não-negativos.*

Teorema 13. *(Teorema do Núcleo e Imagem) Sejam E e F espaços vetoriais de dimensão finita. Para toda transformação linear $A : E \rightarrow F$ temos*

$$\dim(E) = \dim N(A) + \text{posto}(A),$$

onde $N(A)$ é o espaço nulo (núcleo) de A .

Para mais detalhes, consulte Lima [14].

O próximo resultado data de 1912 e pode ser encontrado em Meyer [15], onde é feita uma clara exposição sobre o tema.

Definição 29. *Uma matriz M é dita irredutível se, para qualquer matriz de permutação P , a matriz $P^T M P$ não é similar a uma matriz triangular superior de dois blocos $\begin{pmatrix} A & B \\ 0 & C \end{pmatrix}$.*

Proposição 32. *Seja A uma matriz de ordem n cujos elementos são todos não negativos. Então A é irredutível se e somente se $(I + A)^{n-1}$ é uma matriz cujos elementos são todos positivos ou, equivalentemente, $I + A + A^2 + \dots + A^{n-1}$ é uma matriz cujos elementos são positivos.*

A matriz de adjacência de um grafo conexo G é irredutível. O elemento ij de $A(G)^t$ indica o número de cadeias de comprimento t ligando v_i a v_j (Proposição 2). Como G é conexo, para cada par de vértices existe no mínimo uma cadeia de comprimento igual ou inferior a $n - 1$. Portanto todas as entradas da matriz $A + A^2 + \dots + A^{n-1}$ são positivas.

Teorema 14. *(Perron-Frobenius) Seja A uma matriz irredutível cujos elementos são não negativos. Então associado a λ_1 , o maior autovalor de A , podemos tomar um autovetor v com todas as entradas não negativas. A dimensão do autoespaço associado a λ_1 é 1.*

Lema 14. *Dadas as matrizes A e B , tais que $A = B \cdot B^T$, então o posto de A é igual ao posto de B^T .*

Demonstração: Usando as propriedades de matrizes

$$\text{posto}(M) = \text{posto}(M^T)$$

$$\text{posto}(M) = \text{posto}(M \cdot M^T)$$

temos que

$$\text{posto}(A) = \text{posto}(B \cdot B^T) = \text{posto}(B) = \text{posto}(B^T).$$

□

O próximo resultado é devido a Wielandt [22].

Teorema 15. *(Autovalores de Matrizes) Sejam A, B e C matrizes hermitianas de ordem n tais que $A = B + C$. E sejam $\lambda_i(X)$ seus autovalores ordenados de modo decrescente. Seja I um subconjunto de $\{1, \dots, n\}$ com k elementos. Então*

$$\sum_{i \in I} \lambda_i(A) \leq \sum_{i=1}^k \lambda_i(B) + \sum_{i \in I} \lambda_i(C) \quad (\text{A.1})$$

Este Teorema nos permite escolher quais autovalores da matriz queremos somar. Se tomarmos $I = \{1, \dots, k\}$ teremos como corolário um Teorema muito conhecido.

Teorema 16. *Sejam A, B e C matrizes hermitianas de ordem n tais que $A = B + C$ e $\lambda_i(X)$ seus autovalores em ordem decrescente, então*

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i(A) \leq \sum_{i=1}^k \lambda_i(B) + \sum_{i=1}^k \lambda_i(C) \quad (\text{A.2})$$

Lema 15. *A matriz simétrica B de ordem $n \times n$ com entradas somente na última linha (e coluna) $(\sqrt{a_1}, \sqrt{a_2}, \dots, \sqrt{a_{n-1}}, 0)$, com $a_i \geq 0$, possui espectro $\{\sqrt{\gamma}, 0, 0, \dots, 0, -\sqrt{\gamma}\}$, onde $\gamma = \sum_{i=1}^{n-1} a_i$.*

Demonstração: Vamos considerar a matriz $\lambda I - B$. Essa matriz só não está diagonalizada por causa da última linha. Devemos substituir a linha L_n por $L_n - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\sqrt{a_i}}{\lambda} L_i$. Assim ficamos com a matriz diagonalizada e o último elemento da última linha fica $\lambda - \frac{\gamma}{\lambda}$. Efetuando o determinante, obtemos o polinômio característico $p_B(\lambda) = \lambda^{n-2}(\lambda^2 - \gamma)$. E concluímos que os autovalores são $\pm\sqrt{\gamma}$ e 0. \square