

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

Decomposição de espectros de grafos e aplicações

por

Eliseu Fritscher

Tese submetida como requisito obrigatório
para obtenção do grau de
Doutor em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Vilmar Trevisan
Orientador

Prof. Dr. Carlos Hoppen
Co-orientador

Porto Alegre, novembro de 2014.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Fritscher, Eliseu

Decomposição de espectros de grafos e aplicações / Eliseu Fritscher.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2014.

195 p.: il.

Tese (doutorado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2014.

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

Tese: Matemática Aplicada

Grafos, algoritmo, decomposição de espectro, autovalores, energia laplaciana, unicíclicos equienergéticos, ordenamento de árvores

Decomposição de espectros de grafos e aplicações

por

Eliseu Fritscher

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

Doutor em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria dos Grafos e Álgebra Linear

Orientador: Prof. Dr. Vilmar Trevisan

Co-orientador: Prof. Dr. Carlos Hoppen

Banca examinadora:

Prof. Dr. David P. Jacobs
Clemson University-EUA

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

Profa. Dra. Virgínia M. Rodrigues
PPGMAp-UFRGS

Profa. Dra. Maria Cristina Varriale
Coordenador

Sumário

LISTA DE FIGURAS	VI
LISTA DE TABELAS	IX
LISTA DE SÍMBOLOS	X
RESUMO	XI
ABSTRACT	XII
AGRADECIMENTOS	XIII
1 INTRODUÇÃO	1
2 CONCEITOS BÁSICOS	9
2.1 Definições iniciais	9
2.2 Matrizes de um grafo	15
2.3 Energia laplaciana de um grafo	23
2.4 Localizando os autovalores laplacianos de árvores	26
3 GRAFOS COM PESOS GENERALIZADOS	31
3.1 Algoritmo de decomposição	40
3.2 Uma decomposição espectral	45
3.3 Demonstração da validade do Algoritmo 1	53
3.4 Variação do algoritmo	56
3.5 Aplicações	62
3.5.1 Grafos com vértices simétricos	62
3.5.2 Grafos threshold	65
3.5.3 Árvores de Bethe generalizadas	74
3.5.4 Grafos multi-leque	87

4	GRAFOS UNICÍCLICOS COM A MESMA ENERGIA LAPLACIANA	92
4.1	Operação \mathcal{E}_z	92
4.2	Grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana	101
4.3	Demonstração do Teorema 4.13	108
5	ORDENAMENTO DE ÁRVORES PELA ENERGIA LAPLACIANA	118
5.1	Soma dos maiores autovalores laplacianos de uma árvore	123
5.1.1	Demonstração do Teorema 5.5	127
5.2	Ordenamento de árvores pela energia laplaciana	133
5.3	Demonstração do Teorema 5.5 para \mathfrak{F}	143
5.3.1	Caso \mathfrak{F}_4	151
5.3.2	Caso \mathfrak{F}_5	164
5.3.3	Caso \mathfrak{F}_6	173
5.3.4	Expressões adicionais	178
6	CONCLUSÃO E OUTROS PROBLEMAS	180
6.1	Resultados obtidos em outros problemas matriciais	181
6.1.1	Trace index de uma matriz-(0,1)	181
6.1.2	Hankel e Toeplitz X-rays de permutações	183
6.1.3	Matrizes torneio	184
	ÍNDICE REMISSIVO	190
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	192

Lista de Figuras

Figura 1.1	Um grafo cujo espectro pode ser decomposto	2
Figura 1.2	GWGs associados às matrizes L_1 e L_2	3
Figura 1.3	Grafos unicíclicos com mesma energia laplaciana	6
Figura 1.4	Árvores com a segunda e terceira maior energia laplaciana	7
Figura 2.1	Representação de um grafo simples	10
Figura 2.2	Grafo K_5	11
Figura 2.3	Estrela \mathcal{S}_7 e caminho \mathcal{P}_7	12
Figura 2.4	Árvore starlike com 5 ramos: $\mathcal{P}_5, 2\mathcal{P}_4, \mathcal{P}_2$ e \mathcal{P}_1	14
Figura 2.5	Grafo e seu grafo complementar	14
Figura 2.6	Grafo da respectiva matriz de adjacência A	19
Figura 2.7	Árvore T com os valores iniciais $a(v)$ para $\alpha = 2$	28
Figura 2.8	Árvore T com os valores finais $a(v)$ para $\alpha = 2$	28
Figura 2.9	Árvore T com os valores iniciais $a(v)$ e após primeiro passo, para $\alpha = 1$	29
Figura 2.10	Árvore T com os valores finais $a(v)$, para $\alpha = 1$	30
Figura 3.1	Exemplo de um GWG	34
Figura 3.2	GWG com três conjuntos simétricos	38
Figura 3.3	GWG decomposto com o mesmo espectro	42
Figura 3.4	GWG dado pelo grafo G com dois conjuntos simétricos	43
Figura 3.5	GWG disjunto com o mesmo espectro do que G	44
Figura 3.6	GWG com dois conjuntos quase-simétricos	58
Figura 3.7	GWG decomposto com o mesmo espectro	60
Figura 3.8	Grafo G com dois conjuntos de vértices simétricos	64
Figura 3.9	GWG antes e após a aplicação da Proposição 3.29 para $k = 2$	68

Figura 3.10	GWG obtido com o Teorema 3.31	70
Figura 3.11	Componente do GWG obtido após aplicação do Teorema 3.31	72
Figura 3.12	GWG associado à matriz distância do grafo threshold T	74
Figura 3.13	GWG da árvore \mathbf{v} -ária com pesos p e ε	76
Figura 3.14	Aplicação do Lema 3.39 para $i = 2$	79
Figura 3.15	GWG dado pelo caminho, associado à matriz S	83
Figura 3.16	Árvore ternária com três níveis	84
Figura 3.17	GWG dado pela árvore \mathbf{v} -ária com conjuntos quase-simétricos	87
Figura 3.18	O grafo multi-leque $F_{(1^1, 2^3, 5^1), 2}$	88
Figura 3.19	GWG ₁ , GWG ₂ e GWG ₃ obtidos pelo Teorema 3.49 aplicado ao grafo $F_{(1^1, 2^3, 5^1), 2}$	90
Figura 3.20	GWG ₃ após caminhos terem sido reduzidos	91
Figura 4.1	Grafos \check{G} , G^* e $G = G(\check{G}, 2G^*, Y)$	94
Figura 4.2	Grafo $\mathcal{E}_z(G)$	94
Figura 4.3	Grafos \check{G} , G^* e $G(\check{G}, 3G^*, Y)$	95
Figura 4.4	Grafo $\mathcal{E}_{e_3}(G)$	95
Figura 4.5	Grafos G e $\mathcal{E}_z(G)$	97
Figura 4.6	Grafos G e $\mathcal{E}_z(G)$	101
Figura 4.7	Grafo de $\mathcal{S}_{16,2}$ e $\mathcal{S}_{16,4}$	102
Figura 4.8	Grafos G_1 e G_2 com a mesma energia laplaciana	103
Figura 4.9	Árvore G e grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana	105
Figura 4.10	Árvores geradoras de grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana	108
Figura 4.11	Grafo $G \in \mathcal{S}_{10,3}^*$	109
Figura 4.12	Grafo $\mathcal{E}_{e_1}(G)$, onde $G \in \mathcal{S}_{10,3}^*$	109
Figura 4.13	Distribuição dos valores de $a(v)$ antes e após o algoritmo de localização	113

VIII

Figura 4.14	Aplicação do algoritmo em \mathcal{P}_{2a_h+1} e G	115
Figura 5.1	Árvore de diâmetro 3, $T(a, b)$	119
Figura 5.2	GWG com os demais 4 autovalores laplacianos de $T(a, b)$	120
Figura 5.3	Disposição dos valores de $a(v)$ após aplicação do algoritmo de localização para $\alpha = 1$ e $\alpha = 2$, respectivamente	121
Figura 5.4	Tipos de ramos adjacentes ao vértice central v_0	122
Figura 5.5	Árvore T de \mathfrak{F} com diâmetro 6	123
Figura 5.6	Árvore T e floresta F	127
Figura 5.7	Árvores de 42 vértices com 1 ^a , 2 ^a e 8 ^a maior energia laplaciana	137
Figura 5.8	Árvores $F(n, k)$, com $k = \lfloor \frac{n}{3} \rfloor$	138
Figura 5.9	Árvores com 20 vértices $F(20, 6)$ e $T(17, 1)$	142
Figura 5.10	Árvore de \mathfrak{F} com três ramos do tipo 1	146
Figura 5.11	Árvore de \mathfrak{F} com ramos do tipo 0, 1 e 2	147
Figura 5.12	Árvore de \mathfrak{F}_4	152
Figura 5.13	Gráfico da cota de $a(v_0)$ em função de $0 \leq p \leq 15$ para $n = 40$	157
Figura 5.14	Localizando autovalores: passo inicial e passo final	159
Figura 5.15	Localizando autovalores: passo inicial e passo final	160
Figura 5.16	Localizando autovalores: passo inicial e passo final	161
Figura 5.17	Localizando autovalores: passo final	162
Figura 5.18	Árvore de \mathfrak{F}_5	164
Figura 5.19	Localizando autovalores: passo final	170
Figura 5.20	Localizando autovalores: passo final	171
Figura 5.21	Árvore de \mathfrak{F}_6	173

Lista de Tabelas

Tabela 4.1	Distribuição dos 2γ vértices excedentes	107
Tabela 5.1	Segunda à oitava árvore com maior energia laplaciana para $n = 42$	136
Tabela 5.2	Energia laplaciana para alguns valores de (n, k)	138
Tabela 5.3	Árvores de diâmetro 3 com energia laplaciana próxima a energia de $F(42, 14)$	142

LISTA DE SÍMBOLOS

δ_i	grau do i -ésimo vértice
$\bar{\delta}$	média dos graus dos vértices
\bar{G}	grafo complementar de G
K_n	grafo completo de n vértices
\mathcal{S}_n	estrela de n vértices
\mathcal{P}_n	caminho de n vértices
I_n	matriz identidade
J_n	matriz de 1's
$A(G)$	matriz de adjacência de G
$L(G)$	matriz laplaciana de G
$Q(G)$	matriz laplaciana sem sinal de G
$\mathcal{L}(G)$	matriz laplaciana normalizada de G
$D(G)$	matriz distância de G
$P_M(x)$	polinômio característico da matriz M
$\sigma_M(G)$	espectro da matriz M associada a G
$\lambda_i(M)$	i -ésimo maior autovalor de M
$\mathbf{1}$	vetor cujas entradas são iguais a 1
$\mathbf{0}$	vetor cujas entradas são iguais a 0
e_i	i -ésimo vetor canônico
$\mu_i(G)$	i -ésimo maior autovalor laplaciano de G
ρ	número de autovalores laplacianos de G maiores do que $\bar{\delta}$
$E_L(G)$	energia laplaciana de G
$a(v)$	valor do vértice v no algoritmo de localização de autovalores
p	função peso dos vértices
ε	função peso das arestas
$\{S_i\}$	sequência de conjuntos simétricos
$\sigma(X)$	espectro da matriz X
$X^{(q)}$	multiconjunto formado por q cópias de X
$\{q_j\}$	sequência de quantidades de uma sequência
G^* e \check{G}	blocos de construção
$\mathfrak{W}_{n,c,k}$	família de grafos gerados por (\check{G}, cG^*, Y)
\mathcal{E}_z	operação em grafos de $\mathfrak{W}_{n,c,k}$
E_Y	matriz diagonal relacionada a Y
$\mathcal{S}_{n,k}$	uma família de starlikes
$S_k(T)$	soma dos k maiores autovalores laplacianos da árvore T
$S_k(M)$	soma dos k maiores autovalores da matriz M
$T(a, b)$	árvore de diâmetro três
$F(n, k)$	uma classe de árvores de diâmetro quatro
\mathfrak{F}_i	uma família de árvores de diâmetro i

RESUMO

Neste trabalho, apresentamos um algoritmo que decompõe o espectro de uma matriz associada a um grafo em uma união de espectros de matrizes de ordem menor, se o grafo possui certas simetrias. Este método unifica técnicas usadas por vários autores. Para a execução do algoritmo, são introduzidos os grafos com pesos generalizados (GWG), estruturas que representam matrizes simétricas com componentes reais arbitrárias. Como aplicação direta do algoritmo, obtemos o espectro das matrizes de adjacências, laplaciana, laplaciana sem sinal e laplaciana normalizada de grafos threshold, árvores de Bethe generalizadas e grafos multi-leque.

Uma segunda aplicação do algoritmo consiste na análise de uma operação que adiciona arestas em partes simétricas de um grafo de modo que o espectro laplaciano do grafo se mantém controlado. Como consequência, é possível montar uma família, da ordem de $\sqrt{\frac{n}{2}}$ elementos, formada por grafos unicíclicos com n vértices que não são coespectrais, mas que possuem a mesma energia laplaciana.

O terceiro problema abordado consiste no ordenamento de árvores de acordo com sua energia laplaciana. Utilizando uma nova cota superior para a soma dos maiores autovalores laplacianos, encontramos o conjunto de $f(n)$ árvores com n vértices com maior energia laplaciana, onde $f(n)$ é aproximadamente \sqrt{n} .

ABSTRACT

In this work, we present an algorithm that partitions the spectrum of a matrix associated to a graph into a union of spectra of smaller matrices, provided that the graph has some special symmetries. This method unifies techniques used by several authors. To execute the algorithm, we introduce generalized weighted graphs (GWG), structures that represent symmetric matrices with arbitrary real components. As an application of the algorithm, we obtain the spectrum of the adjacency, Laplacian, signless Laplacian and normalized Laplacian matrices of threshold graphs, generalized Bethe trees and multi-fan graphs.

A second application of the algorithm consists of the analysis of an operation that adds edges to symmetric parts of the graph in such a way that the change in the Laplacian spectrum of the graph is controlled. As a consequence, it is possible to build a family of n -vertex noncospectral unicyclic graphs of cardinality about $\sqrt{\frac{n}{2}}$, all of them with the same Laplacian energy.

The third problem is to order trees with respect to their Laplacian energy. Using a new upper bound on the sum of the largest Laplacian eigenvalues, we are able to find the family of $f(n)$ trees with n vertices with the largest Laplacian energy, where $f(n)$ is approximately \sqrt{n} .

AGRADECIMENTOS

Agradeço em especial aos meus orientadores, Professores Vilmar Trevisan e Carlos Hoppen, pela atenção dedicada a mim durante esses anos de doutorado e mestrado. Através deles que fui introduzido à Teoria Espectral de Grafos e incentivado a continuar os estudos nessa área.

Agradeço também aos meus colegas de seminário, com os quais aprendi muito durante nossos encontros, em especial: Fernando, Israel, Rodrigo e Virgínia. Em paralelo, também estive em companhia de caros amigos: Frederico e Silas.

Durante o meu doutorado sanduíche, fui muito bem recebido pelo Professor Richard Brualdi na University of Wisconsin - Madison, com o qual passei um ano pesquisando e conversando sobre matemática em agradáveis e frutíferos encontros.

Também importante, agradeço à UFRGS e ao PPGMAp pela oportunidade de estudar esses vários anos na instituição; à CAPES pela bolsa de doutorado aqui e no exterior; aos professores com os quais tive contato; e aos demais colegas.

1 INTRODUÇÃO

Seja $G = G(V, E)$ um grafo com conjunto de vértices V e conjunto de arestas $E \subseteq \binom{V}{2}$, o conjunto de todas as combinações de dois elementos de V . Geralmente representamos os vértices de um grafo como pontos no plano e as arestas entre eles como curvas contínuas no plano, como nas Figuras 1.1, 1.3 e 1.4. Aos grafos podemos associar diversas matrizes, como a matriz de adjacências, as matrizes laplacianas perturbadas e a matriz distância. A *matriz de adjacência* $A = [a_{ij}]$ de um grafo com n vértices é uma matriz quadrada de ordem n onde o elemento a_{ij} é igual a 1 ou 0, se houver ou não uma aresta conectando os vértices i e j , respectivamente. A *matriz laplaciana* $L = [\ell_{ij}]$ do grafo tem entradas ℓ_{ii} iguais ao grau do vértice i , e $\ell_{ij} = -a_{ij}$ se $i \neq j$. A Teoria Espectral de Grafos estuda a relação entre o espectro (multiconjunto de autovalores) de diversas matrizes associadas a grafos e características estruturais do próprio grafo como, por exemplo, número de componentes conexas e número de arestas.

Um dos problemas enfrentados em Teoria Espectral é a obtenção do espectro exato do grafo, pois não possuímos um método algébrico para encontrar as raízes de polinômios de grau maior do que 5. Contudo, uma estratégia tradicional para diminuirmos a dificuldade do problema é reduzir o espectro de uma matriz à união dos espectros de matrizes menores, o que pode ser feito quando o grafo possui certas simetrias.

A matriz laplaciana L associada ao grafo G da Figura 1.1 é uma matriz bissimétrica, isto é, ela é simétrica em relação a diagonal principal e a antidiagonal. De acordo com um resultado de Cantoni e Butler [11], o espectro de L pode ser decomposto em dois conjuntos, espectros das matrizes L_1 e L_2 .

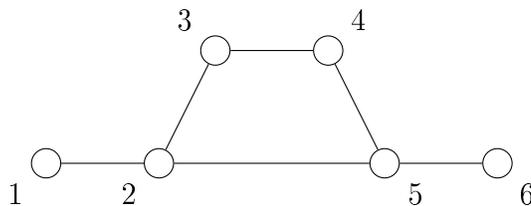


Figura 1.1: Um grafo cujo espectro pode ser decomposto

$$L = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{array} \right], \quad L_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad L_2 = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Das matrizes L_1 e L_2 , apenas L_1 é matriz laplaciana de um grafo, a saber, o caminho \mathcal{P}_3 . A matriz L_2 não possui entradas na diagonal principal que satisfaçam as propriedades necessárias para que seja a matriz laplaciana de um grafo, mas as entradas fora da diagonal principal sugerem que o grafo seja o caminho \mathcal{P}_3 . Esse é um dos motivos para introduzir o conceito de grafo com pesos generalizado (*GWG - generalized weighted graph*), um grafo com pesos atribuídos aos seus vértices e às suas arestas. Além disso, esse conceito permitirá decompor o espectro de uma ampla classe de matrizes com um único algoritmo.

O grafo de uma matriz B de ordem n é um grafo com n vértices onde os vértices i e j são adjacentes se e somente se a entrada (i, j) da matriz B é não nula. Um GWG é justamente a estrutura obtida da matriz se os valores das entradas também forem considerados. Um GWG é uma tripla (G, p, ε) , onde $p : V \rightarrow \mathbb{R}$ é a função peso dos vértices e $\varepsilon : E \rightarrow \mathbb{R}$ é a função peso das arestas. Os GWGs

associados às matrizes L_1 e L_2 citadas anteriormente estão ilustrados na Figura 1.2. Observe que os elementos da diagonal da matriz são os pesos dos vértices e o valor da entrada (i, j) é o peso da aresta entre os vértices i e j .

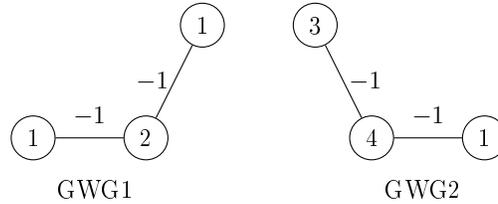


Figura 1.2: GWGs associados às matrizes L_1 e L_2

Um dos objetivos deste trabalho é apresentar um método que permite decompor o espectro de uma matriz associada a um grafo em partes menores, quando o grafo apresenta simetrias. Essa técnica já foi usada algumas vezes por Rojo [28, 29, 30, 31, 32] no estudo de árvores de Bethe generalizadas. Quando um grafo possui um tipo especial de simetria que permite que sua matriz possa ser escrita na forma

$$M = \begin{bmatrix} A & \beta & \beta & \cdots & \beta \\ \beta^T & B & C & \cdots & C \\ \beta^T & C & B & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & C \\ \beta^T & C & \cdots & C & B \end{bmatrix}, \quad (1.1)$$

onde $A \in \mathbb{R}^{t \times t}$, $\beta \in \mathbb{R}^{t \times s}$ e $B, C \in \mathbb{R}^{s \times s}$, tais que $n = t + cs$, podemos expressar seu espectro como a união do espectro de matrizes de ordem menor como afirma o teorema a seguir desenvolvido no Capítulo 3, onde $\sigma^{(q)}(X)$ indica o multiconjunto formado por q cópias do espectro de X , denotado por $\sigma(X)$.

Teorema. *Seja M uma matriz da forma dada em (1.1), com $c \geq 1$ cópias do bloco B . Então*

(i) $\sigma(B - C) \subseteq \sigma(M)$ com multiplicidade $c - 1$;

(ii) $\sigma(M) \setminus \sigma^{(c-1)}(B - C) = \sigma(M')$ é o conjunto com os $t + s$ autovalores restantes de M , onde

$$M' = \begin{bmatrix} A & \sqrt{c} \cdot \beta \\ \sqrt{c} \cdot \beta^T & B + (c - 1)C \end{bmatrix}.$$

Utilizando o teorema acima, criamos um algoritmo que atua diretamente sobre o GWG dado por (G, p, ε) , onde p e ε podem ser escolhidos de tal forma que a matriz do GWG seja uma matriz particular associada ao grafo G , como a matriz laplaciana, por exemplo. Como resposta, obtemos um GWG desconexo cujo espectro é igual ao espectro do GWG original. Dessa forma reduzimos a dificuldade de se encontrar o espectro de um GWG, através da união do espectro dos GWGs menores.

O algoritmo pode ser facilmente aplicado para três famílias de grafos: grafos threshold, árvores de Bethe generalizadas e grafos multi-leque, o que permite obter parcialmente os espectros das matrizes associadas a essas classes. Uma segunda aplicação do algoritmo é sobre os efeitos de uma transformação que adiciona arestas em vértices de conjuntos simétricos.

Um invariante relacionado ao espectro de um grafo é a energia. Baseado em resultados que relacionavam a energia total dos elétrons π de hidrocarbonetos representados por grafos com a soma dos valores absolutos dos autovalores da matriz de adjacência, Gutman [17], em 1977, definiu a energia de um grafo G por $E(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|$, onde λ_i são os autovalores da matriz de adjacência de G . Anos mais tarde, em 2006, Gutman e Zhou [18] criaram o conceito de energia laplaciana,

relacionada com os autovalores laplacianos do grafo, $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n$, e definida por

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

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

Um problema que gira em torno da energia laplaciana é saber se este é um bom parâmetro para distinguir grafos. Stevanović [34] responde negativamente a essa questão apresentando um conjunto de grafos threshold (grafos com n vértices e com muitas arestas) com aproximadamente n^2 elementos, todos com a mesma energia laplaciana. Todavia Stevanović também afirma que não foram encontrados pares de árvores distintas com o mesmo número n de vértices e a mesma energia laplaciana, testando todas as possibilidades para $n \leq 20$.

Com a operação \mathcal{E}_z , que adiciona certas arestas a um grafo, podemos construir famílias de grafos unicíclicos, isto é, com poucas arestas, de tal forma que tenham a mesma energia laplaciana. O interessante no nosso método de construção é que não precisamos conhecer totalmente o espectro laplaciano dos grafos com os quais trabalhamos, mas somente parte dele. Dado n um número par de vértices, podemos garantir a existência de um conjunto com aproximadamente $\sqrt{\frac{n}{2}}$ grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana.

Teorema. *Dado $n \geq 14$ par, há um conjunto com $\ell = \lfloor \frac{\sqrt{2n-3}-1}{2} \rfloor$ grafos unicíclicos, com n vértices, com a mesma energia laplaciana.*

Na Figura 1.3 temos dois grafos unicíclicos obtidos a partir da aplicação da operação \mathcal{E}_z sobre uma árvore starlike G , onde adicionou-se apenas uma aresta.

Os dois grafos da figura, $\mathcal{E}_{e_1^{(2)}}(G)$ e $\mathcal{E}_{e_1^{(4)}}(G)$, possuem a mesma energia laplaciana.

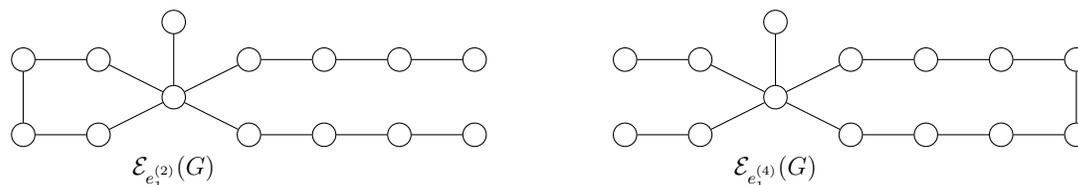


Figura 1.3: Grafos unicíclicos com mesma energia laplaciana

Recentemente Hoppen, Rocha, Trevisan e o autor deste trabalho demonstraram em [14] que, dentre todas as árvores com n vértices, a estrela \mathcal{S}_n com n vértices é a árvore com maior energia laplaciana. Dando continuidade a esse trabalho, conseguiremos agora enumerar as próximas (aproximadamente) \sqrt{n} árvores com maior energia laplaciana, respondendo afirmativamente a uma conjectura de Radenković e Gutman [27]. Para tanto, foi necessário um melhoramento de uma cota superior para a soma dos k maiores autovalores laplacianos de uma árvore, apresentada por Haemers, Mohammadian e Tayfeh-Rezaie em [19] e refinada já uma vez em [14]. Demonstraremos a validade do teorema a seguir.

Teorema. *Toda árvore T com $n \geq 6$ vértices e diâmetro maior ou igual a quatro satisfaz*

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

onde $S_K = \sum_{i=1}^k \mu_i$ é a soma dos k maiores autovalores laplacianos.

Essa cota superior tem uma forma mais geral expressa por uma conjectura de Brouwer [5]. Essa conjectura estabelece que, dado um grafo G com m arestas e n vértices, a soma $S_k(G)$ para $k \in \{1, \dots, n\}$ satisfaz

$$S_k(G) \leq m + \binom{k+1}{2}.$$

Para $k = 1, n - 1$ e n , a desigualdade segue diretamente. A conjectura também já foi verificada para $k = 2$ e para todas as árvores [19]. Du e Zhou [13] mostraram que a conjectura também é verdadeira para grafos unicíclicos e bicíclicos.

Com essa nova cota superior para S_k , somos capazes de provar que as árvores com a 2ª, 3ª, 4ª etc. maior energia laplaciana são árvores de diâmetro três. Denotamos por $T(a, b)$ uma árvore de diâmetro três com a folhas numa extremidade e b folhas na outra.

Teorema. *Seja*

$$f(n) = \begin{cases} 1 + \lfloor \sqrt{n-3} \rfloor, & \text{se } n \text{ é par;} \\ \lfloor \frac{3}{2} + \sqrt{n-3} \rfloor, & \text{se } n \text{ é ímpar e } n = p^2 - p + 3 \text{ para algum } p \in \mathbb{N}; \\ \lfloor \frac{1}{2} + \sqrt{n-3} \rfloor, & \text{se } n \text{ é ímpar e não pode ser escrito como acima.} \end{cases}$$

Entre todas as árvores com $n \geq 6$ vértices, as árvores com segunda até $(f(n) + 1)$ -ésima maior energia laplaciana são, respectivamente, as árvores $T(\lceil \frac{n-2}{2} \rceil + k, \lfloor \frac{n-2}{2} \rfloor - k)$, onde $0 \leq k \leq f(n) - 1$.

Na Figura 1.4 estão ilustradas as árvores com segunda e terceira maior energia laplaciana. À esquerda está a árvore de diâmetro três equilibrada e à direita está a árvore de diâmetro três obtida da árvore equilibrada, quando passamos uma folha do lado com menor número de folhas para o lado com maior número de folhas.

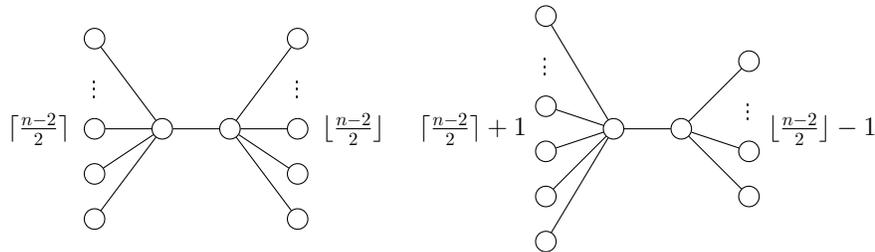


Figura 1.4: Árvores com a segunda e terceira maior energia laplaciana

A função $f(n)$ não garante que todas as $\lfloor \frac{n-2}{2} \rfloor$ árvores de diâmetro 3 tenham energia laplaciana maior do que as demais árvores de diâmetro maior ou igual a 4. Na verdade, para $n \geq 16$, existem árvores de diâmetro 4 com energia laplaciana maior do que algumas árvores de diâmetro 3.

O trabalho está dividido em seis capítulos. No segundo capítulo, são apresentadas definições básicas sobre grafos e resultados fundamentais que são importantes para o nosso trabalho. Além disso, reproduzimos um algoritmo de localização de autovalores laplacianos de árvores que será usado como ferramenta em nosso trabalho.

O terceiro capítulo dedica-se a um algoritmo que decompõe o espectro de um GWG que possui simetrias como a união dos espectros de estruturas menores. Uma seção é dedicada ao algoritmo em si e outra à demonstração de resultados matriciais. Também apresentamos uma variação do algoritmo, onde flexibilizamos a nossa exigência de simetria, impondo restrições estruturais ao grafo. Em seguida apresentamos quatro aplicações à obtenção do espectro de grafos em várias classes.

No Capítulo 4, apresentamos a construção de conjuntos de grafos unicyclicos com n vértices (n par) e com a mesma energia laplaciana. Esta construção utiliza uma operação em grafos cuja influência no espectro pode ser controlada. No quinto capítulo, mostramos a ordenação das árvores com as maiores energias laplacianas, onde usamos a cota para a soma dos maiores autovalores laplacianos mencionada anteriormente.

O sexto capítulo dedica-se a apresentar superficialmente resultados sobre outros problemas obtidos durante o período em que o autor esteve na University of Wisconsin - Madison, como parte de um estágio de doutorado no exterior sob a orientação de Richard Brualdi.

2 CONCEITOS BÁSICOS

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

2.1 Definições iniciais

Definição 2.1. *Um grafo é um par ordenado $G = G(V, E)$, onde V é um conjunto finito e E é um conjunto de pares não ordenados de elementos pertencentes a V . Os elementos de V são chamados de vértices e os elementos de E são chamados de arestas.*

Para um elemento $e = \{u, v\} \in E$, dizemos que e é *incidente* em u e v , e que u e v são vértices *adjacentes* ou *vizinhos*. Quando um valor é atribuído a arestas ou vértices, estamos lidando com um grafo com pesos. Neste trabalho vamos considerar inicialmente *grafos simples*, isto é, sem laços, sem arestas múltiplas e sem orientação.

Exemplo 2.2. 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 2.3. *O grau de um vértice v em um grafo G , indicado por $\delta_G(v)$, é o número de vértices adjacentes a v no grafo.*

Quando o grafo G estiver claro no contexto, utilizamos $\delta(v) = \delta_G(v)$. Por simplicidade, também usamos o símbolo δ_i para indicar o grau do i -ésimo vértice. 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 .

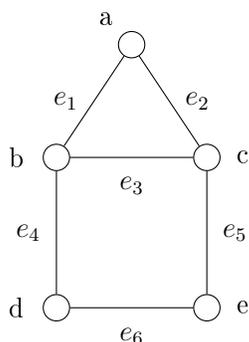


Figura 2.1: Representação de um grafo simples

Definição 2.4. *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 em um 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, vinculados às seis permutações de um conjunto de três elementos.

Definição 2.5. *Um grafo completo é aquele em que todos os vértices são adjacentes. Denotamos por K_n o grafo completo com n vértices.*

Definição 2.6. *Um grafo k -regular, ou regular de grau k , é aquele em que todos os vértices possuem grau k .*

Exemplo 2.7. Os grafos K_n são $(n - 1)$ -regulares. Na Figura 2.2 temos o grafo K_5 , que é 4-regular. △

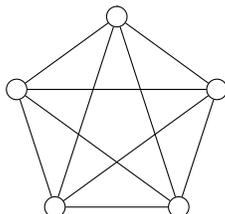


Figura 2.2: Grafo K_5

Definição 2.8. Dizemos que um grafo G é um grafo conexo se para qualquer par de vértices v_i e v_j , existe um caminho ligando v_i a v_j . Caso não exista tal caminho, dizemos que o grafo é desconexo.

Definição 2.9. Em um grafo conexo, a distância $d_{i,j}$ entre os vértices v_i e v_j é o menor comprimento de caminhos entre v_i e v_j . O diâmetro de um grafo é a maior de todas as distâncias entre vértices do grafo.

Definição 2.10. Dado um grafo $G(V, E)$, um subgrafo $G'(V', E')$ de G é um grafo tal que $V' \subseteq V$ e $E' \subseteq E$. Se para todo par de vértices $\{u, v\} \subset V'$ temos que $\{u, v\} \in E'$ sempre que $\{u, v\} \in E$ então dizemos que $G' = G|_{V'}$ é um subgrafo induzido de G .

Quando um subgrafo induzido de n vértices G' , de um grafo G , é o grafo completo K_n , dizemos que G' é uma *clique* de G . Por outro lado, se G' é o grafo trivial composto por n vértices isolados, então G' é chamado de *coclique* de G . 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 com essa propriedade, isto é, não existe subgrafo conexo $H(V^*, E^*)$ de G com $V^* \subseteq V$ e $E^* \subseteq E$ tal que $V' \subset V^*$ ou $E' \subset E^*$.

Definição 2.11. *Sejam $G_1 = G_1(V_1, E_1)$ e $G_2 = G_2(V_2, E_2)$ dois grafos. 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. Se $V_1 \cap V_2 = \emptyset$ então temos uma união disjunta.*

Definição 2.12. *Uma árvore é um grafo conexo sem ciclos. Uma união disjunta de árvores é denominada floresta. Os vértices de grau um de uma árvore são chamados de folhas.*

Duas árvores com nomes especiais são as estrelas e os caminhos. As *estrelas* \mathcal{S}_n (com n vértices) caracterizam-se por possuírem um vértice v adjacente a todos os demais vértices, e estes apenas adjacentes a v . Já o *caminho* \mathcal{P}_n (com n vértices) é uma árvore com apenas duas folhas, onde os demais vértices têm grau dois. No caso $n = 1$, a estrela \mathcal{S}_1 e o caminho \mathcal{P}_1 são o grafo dado por um vértice isolado.

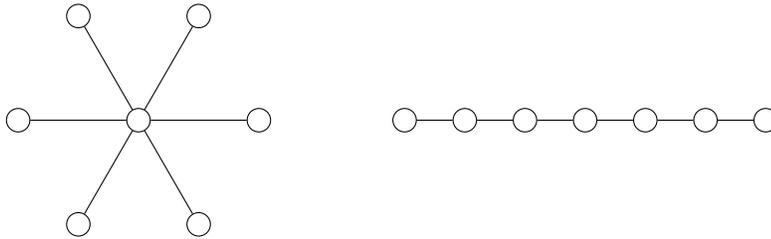


Figura 2.3: Estrela \mathcal{S}_7 e caminho \mathcal{P}_7

Lema 2.13. *Um grafo conexo de n vértices é uma árvore se, e somente se, 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 $n_0 < n$ vértices, temos $m_0 = n_0 - 1$ arestas. Tomando uma árvore com n vértices e retirando uma aresta, o caminho, que ligava o par de vértices ao qual a aresta era incidente, deixa de existir e como não há ciclos em árvores, teremos

duas componentes conexas com n_1 e n_2 vértices e com m_1 e m_2 arestas, ambas componentes árvores pois retirar aresta não cria ciclos. 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 que árvores de n vértices têm $n - 1$ arestas.

Se um grafo conexo de n vértices tem $n - 1$ arestas, então no mínimo um vértice tem grau igual a um. Caso contrário, os vértices têm grau ≥ 2 e portanto a soma dos graus é no mínimo $2n$. Como cada aresta participa com duas unidades na contagem dos graus (um para cada vértice ao qual é incidente), o número mínimo de arestas é n , uma contradição.

Suponha que é verdade que se um grafo conexo de $n_0 < n$ vértices tem $n_0 - 1$ arestas então o grafo é uma árvore. Um grafo com n vértices e $n - 1$ aresta possui um vértice de grau um. Removendo esse vértice, temos um grafo conexo com $n - 1$ vértices e $n - 2$ arestas, ou seja, uma árvore. Adicionando o vértice de grau um à árvore, temos uma árvore, esta com $n - 1$ arestas. Por indução concluímos que grafos conexos com $n - 1$ arestas são árvores. \square

Definição 2.14. *Uma árvore starlike é uma árvore com no máximo um vértice de grau maior ou igual a três.*

As árvores starlike se caracterizam por possuírem um vértice u (aquele que pode ter grau maior ou igual a três) adjacente a uma das extremidades de caminhos \mathcal{P}_{k_i} , chamados de ramos. Quando todos os caminhos adjacentes ao vértice v têm tamanho um, ou quando há apenas dois caminhos adjacentes ao vértice v , temos as estrelas e os caminhos, respectivamente.

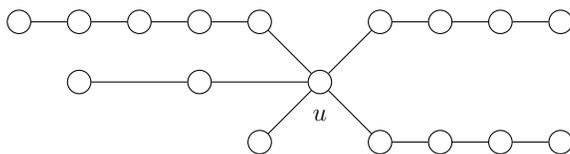


Figura 2.4: Árvore starlike com 5 ramos: $\mathcal{P}_5, 2\mathcal{P}_4, \mathcal{P}_2$ e \mathcal{P}_1

Definição 2.15. 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, a união de um grafo G e seu complementar \bar{G} forma o grafo completo K_n , onde n é o número de vértices de G e \bar{G} .

Exemplo 2.16. Na Figura 2.5 temos um par de grafos complementares. △



Figura 2.5: Grafo e seu grafo complementar

Definição 2.17. Grafos unicíclicos são grafos conexos que contêm um único ciclo.

Como consequência do Lema 2.13, sabemos que um grafo conexo com n vértices é unicíclico se, e somente se, o grafo possui n arestas. Basta observar que tomando uma árvore com n vértices ($n - 1$ arestas) e inserindo uma aresta entre dois vértices não adjacentes criamos um grafo unicíclico.

2.2 Matrizes de um grafo

Há diversas matrizes que podemos associar a um grafo. Nessa seção veremos a definição de algumas delas.

Definição 2.18. *Dado um grafo $G = (V, E)$ com n vértices e conjunto de vértices $V = \{v_1, \dots, v_n\}$, a matriz de adjacência de G , $A(G)$, 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 propriedade de que vértices são adjacentes é simétrica, assim $a_{ij} = a_{ji}$. 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).

Definição 2.19. *Seja D_G a matriz diagonal dos graus dos vértices de um grafo G , ou seja, a matriz diagonal com entradas $(D_G)_{ii} = \delta(v_i)$ e seja $A(G)$ a matriz de adjacência do grafo. A matriz laplaciana de G é definida por*

$$L(G) = D_G - A(G).$$

Portanto, os elementos da matriz $L(G)$ são

$$\ell_{ij} = \begin{cases} \delta(v_i), & \text{se } i = j; \\ -1, & \text{se } v_i \text{ e } v_j \text{ são adjacentes;} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

A matriz laplaciana é um caso especial de uma classe de matrizes mais geral, chamadas de matrizes laplacianas perturbadas, introduzida por Bapat et al. em [3].

Definição 2.20. *Seja G um grafo com n vértices. Uma matriz laplaciana perturbada L_D associada a G é uma matriz de ordem n tal que $L_D = D - A(G)$, onde D é uma matriz diagonal.*

É imediato da definição que a matriz $-A(G)$ é uma matriz laplaciana perturbada. Outro exemplo é a matriz laplaciana sem sinal com sinal oposto $-Q(G)$, definida a seguir.

Definição 2.21. *Seja D_G a matriz diagonal dos graus dos vértices de um grafo G . A matriz laplaciana sem sinal de G é definida por*

$$Q(G) = D_G + A(G).$$

Tomando D_G a matriz diagonal dos graus do grafo G , podemos normalizar a matriz laplaciana, quando não houver vértices isolados no grafo, multiplicando-a pela direita e pela esquerda por $D_G^{-\frac{1}{2}}$, a fim de que as entradas da diagonal sejam iguais a 1. No caso de haver vértices isolados, adicionamos linhas e colunas de zero para esses vértices, após a normalização.

Definição 2.22. *A matriz laplaciana normalizada $\mathcal{L}(G)$ do grafo G possui entradas*

$$\ell_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \text{ e o vértice não possui grau zero;} \\ \frac{-1}{\sqrt{\delta_i \delta_j}}, & \text{se } v_i \text{ e } v_j \text{ são adjacentes;} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Definição 2.23. A matriz distância $D(G)$ do grafo G possui entradas iguais a distância entre os vértices, $(D(G))_{ij} = d_{ij}$. No caso de não haver um caminho entre v_i e v_j , a entrada correspondente na matriz $D(G)$ é zero.

A matriz $\mathcal{L}(G)$ comporta-se como uma matriz laplaciana perturbada, embora não se encaixe na definição. De fato, o que acontece é que $\mathcal{L}(G)$ é uma matriz laplaciana perturbada de um grafo G' , que possui as mesmas arestas do que G , mas com pesos diferentes (temos $\mathcal{L}(G) = I + D_G^{-\frac{1}{2}}A(G)D_G^{-\frac{1}{2}}$, ou seja $D_G^{-\frac{1}{2}}A(G)D_G^{-\frac{1}{2}} = A(G')$). A matriz distância não é uma matriz laplaciana perturbada.

As matrizes laplacianas perturbadas, a matriz laplaciana normalizada e a matriz distância são todas simétricas. Para simplificar a notação, omitiremos o símbolo (G) quando estiver claro que as matrizes são relacionadas a um grafo determinado. Para cada matriz quadrada M associada a um grafo G , podemos calcular seu polinômio característico.

Definição 2.24. Dado um grafo G , o polinômio

$$P_M(x) = \det(xI - M)$$

é chamado de polinômio característico de G associado a M .

Vale lembrar que o polinômio característico de um grafo G associado à matriz A, L, Q, \mathcal{L} ou D é unicamente determinado, pois, apesar das matrizes dependerem da ordenação dada aos vértices de G , matrizes associadas a diferentes ordenações podem ser obtidas uma das outras através de permutações de linhas e colunas. Em outras palavras, dadas duas matrizes M_1 e M_2 associadas a G , existe uma matriz de permutação B tal que $M_1 = B^{-1}M_2B$. Assim, temos que

$$\begin{aligned}
P_{M_1}(x) &= \det(xI - M_1) = \det(xB^{-1}IB - B^{-1}M_2B) \\
&= \det(B^{-1}(xI - M_2)B) = \det(B^{-1}) \det(xI - M_2) \det(B) \\
&= \det(xI - M_2) = P_{M_2}(x).
\end{aligned}$$

Definição 2.25. O espectro de uma matriz M associada a um grafo G , denotado por $\sigma_M(G)$, é o multiconjunto das raízes do polinômio característico de M , com suas respectivas multiplicidades. Enumeramos os autovalores de M (elementos de $\sigma_M(G)$) em ordem decrescente $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$.

Independentemente da ordenação que damos aos vértices, o espectro do grafo associado a alguma das matrizes A, L, Q, \mathcal{L} ou D está bem definido, pois o polinômio característico de cada matriz é único. Decorre do Teorema 2.26, conhecido como Teorema Espectral e enunciado a seguir, que as matrizes A, L, Q, \mathcal{L} e D de um grafo possuem autovalores reais, pois são matrizes simétricas.

Teorema 2.26 ([21, Teorema 13.6]). *Para todo operador auto-adjunto em um espaço vetorial de dimensão finita munido de produto interno, existe uma base ortonormal formada por autovetores. Em particular, se A é uma matriz simétrica então todos os seus autovalores são reais.*

Exemplo 2.27. Considere o grafo da Figura 2.6. Sua matriz de adjacência $A(G)$ é

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

possui polinômio característico

$$P_A(x) = x^5 - 6x^3 - 4x^2 + 3x + 2$$

e espectro $\sigma_A = \{2,6412; 0,7237; -0,5892; -1; -1,7757\}$.

\triangle

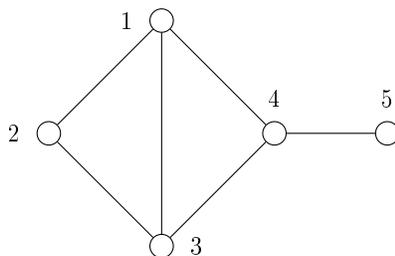


Figura 2.6: Grafo da respectiva matriz de adjacência A

Em geral, é muito difícil encontrar explicitamente o espectro de um grafo, pois é preciso encontrar as raízes de um polinômio de grau igual ao número de vértices. Podemos tentar obter aproximações para essas raízes com algum algoritmo numérico, ou, às vezes, com alguma técnica algébrica. Há alguns softwares disponíveis na internet, de forma gratuita, que auxiliam na manipulação de grafos, incluindo o cálculo dos polinômios característicos e dos espectros, como o *NewGraph* [35]. No Capítulo 3 apresentamos uma técnica para encontrar subconjuntos do espectro de grafos, quando estes possuírem propriedades especiais.

Exemplo 2.28. O grafo completo K_n possui espectro laplaciano $\sigma_L(K_n) = \{n^{(n-1)}, 0^{(1)}\}$, ou seja, n é autovalor com multiplicidade $n - 1$ e 0 é autovalor com multiplicidade 1. É fácil calcular esse espectro exibindo os autovetores. Considere $v_i = e_1 - e_i$, para $2 \leq i \leq n$, onde e_i é o i -ésimo vetor canônico de \mathbb{R}^n . Ao multiplicarmos $L(K_n)$ por v_i , obtemos o vetor $nv_i = (n, 0, \dots, 0, -n, 0, \dots, 0)$, ou seja, v_i é um autovetor associado ao autovalor n . Como os vetores v_i formam um conjunto com $n - 1$ vetores linearmente independentes, podemos criar $n - 1$ autovetores associados ao autovalor n . O último autovalor está associado ao autovetor $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)$, a saber, o autovalor zero. \triangle

Proposição 2.29. *Se um grafo G é a união disjunta de dois grafos G_1 e G_2 , e M é a matriz $L_D(G)$, $\mathcal{L}(G)$ ou $D(G)$, então $P_{M(G)}(x) = P_{M(G_1)}(x) \cdot P_{M(G_2)}(x)$.*

Como consequência, o espectro de A, L, Q, \mathcal{L} ou D da união disjunta de grafos é a união do respectivo espectro de cada grafo.

Demonstração: Seja M_i a matriz de G_i , e n_i o seu respectivo número de vértices. Assim, uma das matrizes M associada ao grafo G é

$$M = \begin{bmatrix} M_1 & 0_{n_1 \times n_2} \\ 0_{n_2 \times n_1} & M_2 \end{bmatrix},$$

onde os zeros representam matrizes bloco de entradas nulas, devido a ausência de arestas entre os vértices de G_1 e G_2 . Como $\det(M) = \det(M_1) \cdot \det(M_2)$, representando por I_s a matriz identidade de ordem s , teremos que

$$\det(xI_{n_1+n_2} - M) = \det(xI_{n_1} - M_1) \cdot \det(xI_{n_2} - M_2).$$

□

O próximo resultado de Álgebra Linear nos permite calcular a soma dos autovalores de uma matriz associada ao grafo.

Teorema 2.30. *Se M é uma matriz diagonalizável, então o traço de m é igual a soma de seus autovalores.*

Demonstração: Como M é diagonalizável, existe uma matriz P de mudança de base tal que $M = P^{-1}DP$, onde D é a matriz diagonal com os autovalores de M na diagonal. Logo, $PM = DP$. Para matrizes quadradas X e Y , temos

$$\operatorname{tr}(XY) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (X)_{ij}(Y)_{ji} = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n (Y)_{ji}(X)_{ij} = \operatorname{tr}(YX).$$

Portanto,

$$\operatorname{tr}(M) = \operatorname{tr}(P^{-1}PM) = \operatorname{tr}(PMP^{-1}) = \operatorname{tr}(DPP^{-1}) = \operatorname{tr}(D).$$

□

Proposição 2.31. *Seja G um grafo com n vértices e M uma matriz associada a G . Seja $\sigma_M(G) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$ o espectro de G associado à matriz M . Então $\sum_{i=1}^n \lambda_i$ é igual a $0, 2m, 2m, n$ ou 0 se M for a matriz A, L, Q, \mathcal{L} ou D , respectivamente, onde m é o número de arestas de G .*

Demonstração: A afirmação decorre do fato de que a soma das raízes do polinômio característico é igual ao traço da matriz. As matrizes $A(G)$ e $D(G)$ possuem o valor zero nas entradas da diagonal principal, enquanto que a matriz $\mathcal{L}(G)$ possui o valor 1 nessas entradas. As matrizes $L(G)$ e $Q(G)$ possuem o valor dos graus dos vértices na diagonal principal e como cada aresta participa duas vezes para formar os graus dos vértices (é incidente a dois vértices), temos que a soma dos graus é igual ao dobro do número de arestas. \square

Diversas propriedades estruturais de grafos podem ser obtidas a partir do espectro de alguma de suas matrizes associadas. A seguir enunciamos alguns resultados sobre o espectro laplaciano que serão utilizados nos capítulos posteriores. Um dos resultados identifica o número de componentes conexas do grafo com seu espectro laplaciano.

Proposição 2.32. *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) $\mu_i(G) = n - \mu_{n-i}(\overline{G})$, para $i \neq n$.

A demonstração desse resultado pode ser encontrada em [1] e será omitida. O resultado a seguir é consequência dos itens (ii) e (iv).

Corolário 2.33. *Se um grafo G possui n vértices então $\mu_1(G) \leq n$. Além disso, n é autovalor se e somente se \overline{G} é desconexo.*

Exemplo 2.34. O espectro laplaciano da estrela \mathcal{S}_n pode ser obtido através do cálculo direto do seu polinômio característico. Aqui vamos utilizar os resultados anteriores para obter $\sigma_L(\mathcal{S}_n)$. Inicialmente note que o grafo complementar de uma estrela de n vértices é a união disjunta de um grafo completo com $n - 1$ vértices e um vértice isolado ($\overline{\mathcal{S}_n} = K_{n-1} \cup K_1$). Portanto o espectro laplaciano de $\overline{\mathcal{S}_n}$ é a união $\{n - 1^{(n-2)}, 0^{(1)}\} \cup \{0\}$. Pelo item (iv) da Proposição 2.32, temos que o maior autovalor da estrela \mathcal{S}_n é $\mu_1 = n - 0 = n$ e os próximos $2 \leq i \leq n - 1$ autovalores são $\mu_i = n - (n - 1) = 1$. O item (i) do mesmo resultado nos informa que $\mu_n = 0$. Assim

$$\sigma_L(\mathcal{S}_n) = \{n^{(1)}, 1^{(n-2)}, 0^{(1)}\}.$$

Como \mathcal{S}_n é uma árvore, ela possui $n - 1$ arestas. A soma dos autovalores laplacianos é $2(n - 1)$, como afirmado pela Proposição 2.31. \triangle

Outra propriedade que o espectro laplaciano apresenta é um entrelaçamento entre os autovalores de um grafo G e do grafo $G' = G + e$, isto é, o grafo obtido de G após adicionarmos a aresta e . Este resultado pode ser encontrado em [12].

Teorema 2.35. *Os autovalores laplacianos de G e $G' = G + e$ se entrelaçam, isto é*

$$\mu_1(G') \geq \mu_1(G) \geq \mu_2(G') \geq \mu_2(G) \geq \cdots \geq \mu_n(G') = \mu_n(G) = 0.$$

2.3 Energia laplaciana de um grafo

Em 1977, Gutman [17] introduziu o conceito matemático de energia de um grafo, a qual definiu por $E = \sum |\lambda_i|$, usando os autovalores λ_i da matriz de adjacência. Tal conceito baseou-se em um tipo de energia associada a hidrocarbonetos, que pode ser obtido pela representação das respectivas moléculas como grafos. Mas essa definição não ficou restrita a grafos moleculares e foi estendido para grafos quaisquer e já se obteve vários resultados a respeito dessa expressão. Mais recentemente, Gutman e Zhou [18] introduziram o conceito de energia laplaciana, definida a partir dos autovalores da matriz laplaciana do grafo.

Definição 2.36. A energia laplaciana de um grafo G com n vértices é o número

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

onde μ_1, \dots, μ_n são os autovalores laplacianos de G e $\bar{\delta} = \frac{2m}{n}$ é a sua média.

A definição formal de energia laplaciana é a soma do valor absoluto das diferenças entre os autovalores laplacianos e sua média. Porém, como a soma dos autovalores laplacianos é igual a soma dos graus dos vértices, a média dos autovalores é igual ao grau médio.

De um modo mais geral, se M é uma matriz associada a um grafo G e $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ são os autovalores de M e $\bar{\lambda}$ é a sua média, então a M -energia de G é definida por

$$E_M(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i - \bar{\lambda}|.$$

Essa definição também pode ser estendida para energia de matrizes (ver o trabalho de Nikiforov [25]).

O objeto do nosso estudo nos Capítulos 4 e 5 é a energia laplaciana. Podemos reescrever a equação de E_L de modo a não serem necessários todos os autovalores.

Proposição 2.37. *Para um grafo G com n vértices, podemos expressar a energia laplaciana como*

$$E_L(G) = 2 \sum_{\mu_i > \bar{\delta}} \mu_i - 2\rho\bar{\delta}, \quad (2.1)$$

onde ρ é o número de autovalores maiores do que a média $\bar{\delta}$.

Demonstração: Vamos separar a soma em duas parcelas, ambas com termos positivos.

$$\begin{aligned} E_L(G) &= \sum_{i=1}^n |\mu_i - \bar{\delta}| = \sum_{\mu_i > \bar{\delta}} (\mu_i - \bar{\delta}) + \sum_{\mu_i \leq \bar{\delta}} (\bar{\delta} - \mu_i) \\ &= 2 \sum_{\mu_i > \bar{\delta}} (\mu_i - \bar{\delta}) + \sum_{i=1}^n (\bar{\delta} - \mu_i) \\ &= \left(2 \sum_{\mu_i > \bar{\delta}} \mu_i - 2\rho\bar{\delta} \right) + \left(n\frac{2m}{n} - \sum_{i=1}^n \mu_i \right). \end{aligned}$$

O resultado segue do fato de que $\sum_{i=1}^n \mu_i = 2m$, como afirma a Proposição 2.31. \square

Podemos também relacionar a diferença entre energia laplaciana de dois grafos em termos da Proposição 2.37.

Lema 2.38. *Sejam G e G' dois grafos de n vértices com o mesmo número de autovalores laplacianos maiores do que a média ($\rho^G = \rho^{G'} = \rho$). Se a diferença entre o número de arestas de G' e G é $\Delta e = e(G') - e(G)$, então*

$$\Delta E_L(G', G) = E_L(G') - E_L(G) = 2 \sum_{i=1}^{\rho} (\mu_i^{G'} - \mu_i^G) - \frac{4\rho\Delta e}{n}.$$

Demonstração: Como $\bar{\delta}^G = \frac{2e(G)}{n}$, a expressão para a diferença de energia laplaciana é

$$\begin{aligned} \Delta E_L &= 2 \sum_{i=1}^{\rho} \mu_i^{G'} - 2\rho\bar{\delta}^{G'} - 2 \sum_{i=1}^{\rho} \mu_i^G + 2\rho\bar{\delta}^G \\ &= 2 \sum_{i=1}^{\rho} (\mu_i^{G'} - \mu_i^G) - 2\rho \left(\frac{2e(G') - 2e(G)}{n} \right) \\ &= 2 \sum_{i=1}^{\rho} (\mu_i^{G'} - \mu_i^G) - 2\rho \left(\frac{2\Delta e}{n} \right). \end{aligned}$$

□

Exemplo 2.39. A estrela \mathcal{S}_n tem somente um autovalor laplaciano maior do que a média $\bar{\delta}$, com valor n (veja o espectro laplaciano no Exemplo 2.34). Assim,

$$E_L(\mathcal{S}_n) = 2n - 2\bar{\delta} = 2n - 4 + \frac{4}{n}. \quad (2.2)$$

△

Como a definição das energias associadas a $A(G)$ e a $L(G)$ é a soma do valor absoluto das diferenças entre os autovalores e sua média (a média dos autovalores de $A(G)$ é zero), poderíamos esperar que elas se comportassem de maneira semelhante. No artigo de Gutman e Zhou [18], mostra-se que ambas energias coincidem para os grafos k -regulares.

Mas as energias também possuem diferenças. Por exemplo, quando acrescentamos um vértice isolado a um grafo, o valor da energia $E_A(G)$ não é alterada, enquanto que a energia laplaciana sofre alteração (o valor da média dos graus é alterado). Estudando o comportamento de algumas árvores, Radenković e Gutman [27] perceberam que poderia haver uma inversão no ordenamento da energia laplaciana das árvores em relação ao ordenamento da energia usual (E_A) e lançaram uma conjectura. Esse tema será abordado no Capítulo 5.

2.4 Localizando os autovalores laplacianos de árvores

Para calcularmos a energia laplaciana, usando a relação da Proposição 2.37, é importante sabermos a quantidade de autovalores laplacianos maiores ou menores do que a média dos graus $\bar{\delta}$. Por esse motivo apresentamos aqui um algoritmo que nos permite determinar essas quantidades, sem a necessidade de conhecermos o espectro do grafo. Esse algoritmo é devido a Jacobs e Trevisan [20] e localiza os autovalores da matriz de adjacência. No trabalho original desses autores, é dito que seu algoritmo poderia ser adaptado para a matriz laplaciana, o que foi feito por Fritscher et al. em [14].

Dada uma árvore T , elegemos um vértice que chamamos de *raiz da árvore*. Os vértices da árvore adjacentes à raiz são seus *filhos*. Os vértices adjacentes a esses filhos (com exceção da raiz) serão seus filhos, e assim sucessivamente. Todos os vértices da árvore, exceto a raiz, possuem um *pai* - o vértice adjacente que não é filho - e os únicos vértices que não possuem filhos são as folhas.

Seja α um número real. Fixamos um ordenamento onde todos os filhos de um vértice têm índice menor do que o índice atribuído ao seu pai. Iniciamos o algoritmo atribuindo a cada vértice v o valor $a(v) := \delta(v) - \alpha$, onde $\delta(v)$ é o grau do vértice v . O algoritmo é aplicado seguindo o ordenamento dos vértices (isto é, das folhas em direção à raiz). Para calcular o novo valor $a(v_i)$ de um vértice v_i , considere o conjunto F_i de filhos de v_i .

1. Se $F_i = \emptyset$ então

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

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

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

3. 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 atribuímos

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

Teorema 2.40 ([14, 20]). *Após a aplicação do algoritmo, o número de vértices com valores positivos, negativos e iguais a zero é igual ao número de autovalores laplacianos da árvore que são maiores, menores e iguais a α , respectivamente.*

Esse algoritmo baseia-se na diagonalização da matriz $L(T) - \alpha I$, utilizando uma matriz inversível S tal que $D = S(L(T) - \alpha I)S^T$. Pela Lei de Inércia de Sylvester (mais detalhes em [4]), o número de entradas positivas na diagonal de D se mantém para qualquer matriz S inversível. Portanto, a quantidade de valores $a(v)$ positivos no final do algoritmo (entradas positivas na diagonal de D) é igual ao número de autovalores positivos de $L(T) - \alpha I$. Isto é, o número de valores $a(v)$ positivos é igual ao número de valores $\mu_i - \alpha$ positivos, onde μ_i são os autovalores de $L(T)$, ou seja, o número de μ_i 's maiores do que α .

Exemplo 2.41. Considere a árvore T da Figura 2.7. Vamos aplicar o algoritmo para obter o número de autovalores laplacianos de T maiores do que 2. Elegemos um vértice como raiz e seguimos aplicando o algoritmo em cada nível (conjunto de vértices a mesma distância da raiz), calculando os novos valores de $a(v)$. Nesse exemplo as folhas das árvores têm o valor $a(v) = 1 - 2 = -1$, inicialmente.

Tomando o vértice v_1 como sendo a raiz, aplicamos o algoritmo das folhas em direção a v_1 , segundo a distância dos vértices em relação a v_1 . As três

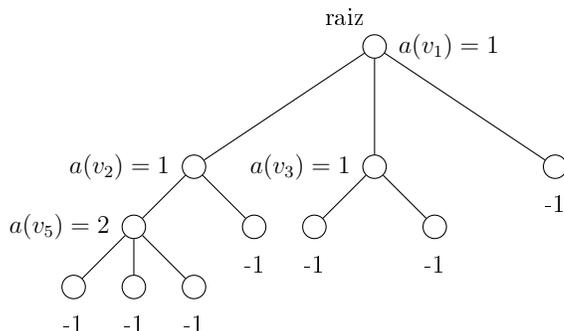


Figura 2.7: Árvore T com os valores iniciais $a(v)$ para $\alpha = 2$

folhas a distância 3 de v_1 mantém o valor de $a(v) = -1$, assim como todas as demais folhas, pois são vértices sem filhos. O vértice v_5 , à distância dois de v_1 , tem seu valor atualizado para $a(v_5) = 2 - 3\frac{1}{(-1)} = 5$. Os vértices v_2 e v_3 , a distância um de v_1 , têm seu valor atualizado para $a(v_2) = 1 - \frac{1}{(-1)} - \frac{1}{5} = \frac{9}{5}$ e $a(v_3) = 1 - 2\frac{1}{(-1)} = 3$, respectivamente. Finalmente, o vértice raiz tem seu valor atualizado para $a(v_1) = 1 - \frac{5}{9} - \frac{1}{3} - \frac{1}{(-1)} = \frac{10}{9}$.

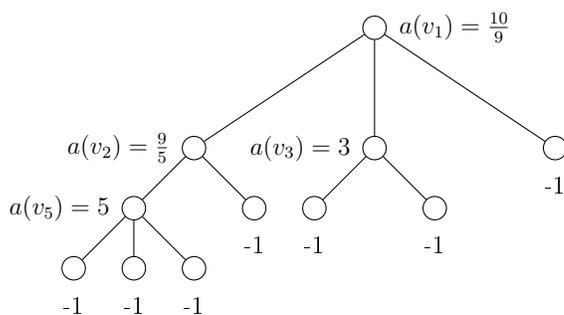


Figura 2.8: Árvore T com os valores finais $a(v)$ para $\alpha = 2$

A Figura 2.8 ilustra os valores finais $a(v)$ para os vértices de T . Para os vértices v_1, v_2, v_3 e v_5 , temos $a(v)$ positivo após a aplicação do algoritmo, e para os demais vértices, $a(v)$ é negativo. Portanto há exatamente quatro autovalores laplacianos maiores do que $\alpha = 2$. \triangle

Exemplo 2.42. Para a mesma árvore T do exemplo anterior, vamos aplicar o algoritmo de localização para $\alpha = 1$. Os valores iniciais $a(v)$ estão ilustrados na Figura 2.9 (à esquerda), onde as folhas possuem o valor zero. Seguindo os passos do algoritmo, as folhas mantêm o valor zero, enquanto que o vértice v_5 deve atualizar o seu valor. Contudo temos o caso em que um dos filhos de v_5 (no caso, todos os filhos) possuem valor zero. Desse modo substituímos $a(v_5) = -\frac{1}{2}$ e $a(u) = 2$ para um dos filhos de v_5 e eliminamos a aresta entre v_5 e v_2 , resultando na estrutura dada pela árvore da Figura 2.9 (à direita).

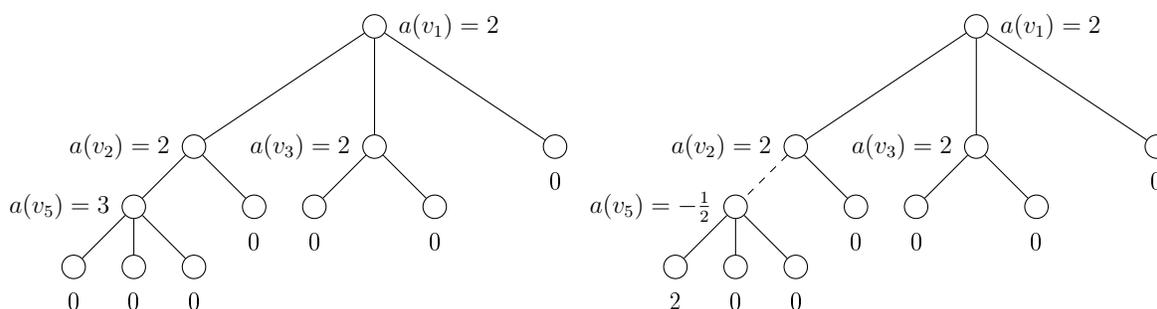


Figura 2.9: Árvore T com os valores iniciais $a(v)$ e após primeiro passo, para $\alpha = 1$

O próximo passo consiste em atribuir os novos valores para v_2 e v_3 . Ambos vértices possuem filhos com valores zero. Então temos de fazer a substituição $a(v_2) = -\frac{1}{2}$, $a(v_3) = -\frac{1}{2}$ e $a(u) = 2$ para um filho de v_2 e v_3 , além de eliminar a aresta entre v_2 e v_1 e entre v_3 e v_1 . Finalmente o vértice v_1 possui agora somente um filho, este com valor zero, portanto os novos valores são $a(v_1) = -\frac{1}{2}$ e $a(u) = 2$ para o filho de v_1 (veja distribuição final dos valores $a(v)$ na Figura 2.10).

Podemos concluir que há exatamente quatro autovalores laplacianos maiores do que 1, há quatro autovalores menores do que 1, e os demais três autovalores são iguais a 1, devido a quantidade de valores $a(v)$ positivos, negativos e

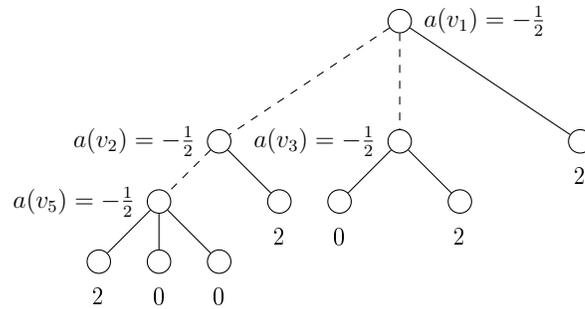


Figura 2.10: Árvore T com os valores finais $a(v)$, para $\alpha = 1$

iguais a zero, respectivamente. Além disso, usando o exemplo anterior, podemos afirmar que não há nenhum autovalor laplaciano no intervalo $(1, 2]$, pois os quatro autovalores maiores do que 1 são também maiores do que 2. \triangle

Exemplo 2.43. No caso da estrela \mathcal{S}_n , ao aplicar o algoritmo com $\alpha = 2$, e escolhendo o vértice central da estrela v_c como sendo a raiz, para todas as folhas obtemos o valor $a(v_i) = 1 - 2 = -1$, enquanto que para o vértice central obtemos o valor $a(v_c) = (n - 1) - 2 - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{-1} = 2n - 4$. Ou seja há $n - 1$ autovalores menores do que 2 e apenas um maior do que 2, se tivermos no mínimo três vértices, o que já sabíamos pelo espectro da estrela dado no Exemplo 2.34. \triangle

3 GRAFOS COM PESOS GENERALIZADOS

Aqui vamos desenvolver o conceito de um grafo com pesos generalizado (GWG) e apresentar sua relevância como ferramenta para a obtenção de parte do espectro de grafos que possuem simetrias. Através de um algoritmo, é possível decompor um GWG, gerando uma união disjunta de objetos com a propriedade de que seu espectro seja igual ao espectro do GWG original.

Rojo [28, 29, 30], Rojo e Medina [31], e Rojo e Robbiano [32] usam uma técnica especial para obter o espectro das matrizes de adjacência e laplaciana de árvores de Bethe generalizadas como a união dos espectros de matrizes de ordem menor. Esta decomposição explora a simetria das árvores de Bethe generalizadas. Motivados por essa técnica, criamos um método que decompõe a matriz associada a um grafo, desde que esta possua certas simetrias. Além disso, exibimos esta técnica em forma de um algoritmo para que a decomposição possa ser realizada diretamente no grafo, papel executado por um GWG. Com essa finalidade, introduzimos o conceito de GWG para representação de matrizes reais e simétricas.

Definição 3.1. *Um grafo com pesos generalizado (GWG - generalized weighted graph) é uma tripla (G, p, ε) , onde $G(V, E)$ é um grafo simples, p é a função peso dos vértices $p : V \rightarrow \mathbb{R}$ e ε é a função peso das arestas $\varepsilon : E \rightarrow \mathbb{R}$. Os valores associados a um vértice e a uma aresta são chamados de peso do vértice e peso da aresta, respectivamente.*

Há uma distinção entre os dois conceitos: por *grafo* nos referimos a um grafo simples; por *GWG* nos referimos a um grafo simples com pesos em seus vértices e em suas arestas. Para simplificar a notação, vamos considerar a imagens dessas funções peso como vetores e matrizes. Por exemplo $p(v_i) = p_i$ e $\varepsilon(v_i, v_j) = \varepsilon_{i,j}$.

A função peso das arestas está definida apenas para o conjunto E de arestas do grafo. Mas será conveniente definir o valor 0 para ε para os elementos de \overline{E} . Se houver a atribuição de um novo valor para $\varepsilon_{i,j}$ tornando-o 0 ou tornando-o não nulo, significa que estamos removendo $\{i, j\}$ do conjunto E ou incluindo no conjunto E , respectivamente.

Definição 3.2. A matriz $M = [m_{i,j}]$ de um GWG (G, p, ε) , dado pelo grafo G com pesos p e ε , possui entradas

$$m_{i,j} = \begin{cases} p_i = \text{peso do vértice } i, & \text{se } i = j; \\ \varepsilon_{i,j} = \text{peso da aresta } e_{i,j}, & \text{se houver uma aresta entre os vértices } i \neq j; \\ \varepsilon_{i,j} = 0, & \text{se não houver aresta entre os vértices } i \neq j. \end{cases}$$

Os GWGs e sua matriz podem ser usados em vez das bem conhecidas matrizes relacionadas a grafos, como a matriz de adjacência, laplaciana, laplaciana sem sinal (ou ainda qualquer matriz laplaciana perturbada), laplaciana normalizada e matriz distância. Precisamos apenas atribuir os pesos correspondentes ao GWG para que sua matriz seja a matriz associada ao grafo (do GWG) desejada.

1. Se todas as arestas tiverem peso 1 e o peso de cada vértices for 0, então a matriz do GWG é a matriz de adjacência A do grafo.
2. Se os vértices tiverem seu peso igual ao número de arestas incidentes e todas as arestas tiverem peso -1 (ou 1), então a matriz do GWG é a matriz laplaciana L (ou a matriz laplaciana sem sinal Q) do grafo.
3. Se todos os vértices não isolados tiverem peso 1 e a aresta entre os vértices i e j tiver peso $\frac{-1}{\sqrt{\delta_i \cdot \delta_j}}$, onde δ_i e δ_j indica o grau dos vértices i e j , então temos a matriz laplaciana normalizada do grafo como a matriz do GWG.

4. A matriz distância D de um grafo H é relacionada com um GWG (K_n, p, ε) , tal que os vértices têm peso 0 e a aresta entre os vértices i e j tem peso igual a distância entre i e j no grafo original H .

A definição de GWG e de sua matriz lembra o conceito de grafo de uma matriz. Dado uma matriz simétrica B de ordem n , o *grafo da matriz* B é um grafo com n vértices tal que os vértices i e j são adjacentes se e somente se a entrada (i, j) da matriz B é não nula. Contudo, para GWGs, o valor das entradas da matriz é importante e não somente se este valor é zero ou não. Esse é a razão para usarmos esse novo nome.

Facilmente se nota que a matriz M de um GWG é simétrica. Além disso, cada matriz simétrica pode ser a matriz de um GWG. A representação de um GWG é dada pela representação do grafo associado a ele (o grafo da matriz) e os pesos junto às arestas e no “interior” dos vértices. Surgindo a necessidade, escrevemos os rótulos dos vértices no “exterior”, junto a eles.

Exemplo 3.3. Considere a matriz M a seguir. O GWG associado a M é ilustrado na Figura 3.1. O vértice de índice 2 possui peso igual a $m_{2,2} = 3$, enquanto que a aresta entre os vértices de índice 1 e 4 possui peso $m_{1,4} = m_{4,1} = \sqrt{2}$.

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

△

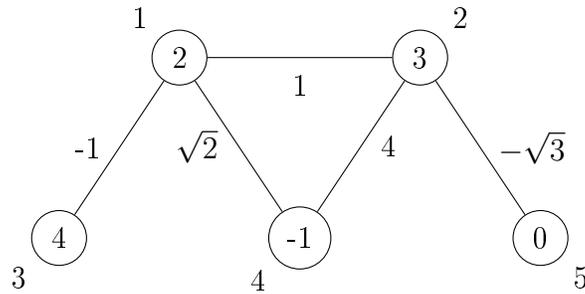


Figura 3.1: Exemplo de um GWG

Esses objetos podem ser muito úteis para encontrar subconjuntos do espectro de matrizes associadas a grafos simples (ou com pesos), sempre que há alguma simetria no conjunto de vértices do grafo, como veremos a seguir. O motivo pelo qual introduzimos GWGs é a necessidade de haver uma representação natural para matrizes simétricas após a utilização da técnica que decompõe a matriz associada a um grafo em matrizes de ordem menor, mantendo o espectro da matriz original.

O resultado principal dessa seção é o Algoritmo 1, que decompõe um GWG em uma união de GWGs de ordem menor (mas mantendo o número de vértices no total), tal que ambos o GWG original e a união disjunta têm o mesmo espectro. O algoritmo está baseado em uma técnica usada várias vezes na literatura (veja [28, 29, 30, 31, 32]) para casos específicos e que aqui será generalizada e aplicada aos GWGs.

Definição 3.4. *O espectro do GWG é o conjunto de autovalores da matriz M associada ao GWG.*

A matriz de um GWG com n vértices possui exatamente n autovalores reais (alguns deles podem ser repetidos) e podemos formar uma base ortogonal para o espaço usando autovetores (vide Proposição 2.26). Além disso, o espectro do

GWG não depende da rotulação dos vértices, pela mesma razão que o espectro de uma matriz laplaciana perturbada não depende do ordenamento. O espectro de uma união disjunta de GWGs é a união do espectro desses GWGs. Usando o Teorema 2.30, obtemos o resultado a seguir.

Proposição 3.5. *A soma dos autovalores de um GWG é igual a soma do peso dos seus vértices.*

Para que possamos aplicar a técnica de decomposição de matrizes, estamos interessados em GWGs especiais: aqueles que possuem alguma simetria. Um *automorfismo* em grafos é uma permutação σ dos rótulos dos vértices tal que os vértices $\sigma(u)$ e $\sigma(v)$ são adjacentes se, e somente se, os vértices u e v são adjacentes. Em outras palavras, um automorfismo é um novo rotulamento que preserva as arestas resultando em simetrias no grafo. No caso de GWGs, queremos que o grafo que representa o GWG tenha algum automorfismo não trivial e a propriedade adicional de que os pesos das arestas e vértices também seja preservado pelo automorfismo.

Definição 3.6. *Dois conjuntos (ordenados) de vértices S_1 e S_2 de um GWG G são ditos simétricos se eles possuírem o mesmo número de vértices, e para todos $i, j \leq |S_1|$,*

1. *o i -ésimo vértice de S_1 e S_2 têm o mesmo peso;*
2. *o i -ésimo vértice de S_1 e S_2 têm o mesmo conjunto de vizinhos em $G \setminus (S_1 \cup S_2)$ conectados com arestas de mesmo peso, isto é, um vértice $u \in G \setminus (S_1 \cup S_2)$ é adjacente ao i -ésimo vértice de S_1 através de uma aresta com peso $w_{i,j}$ se e somente se u é adjacente ao i -ésimo vértice de S_2 por uma aresta com o mesmo peso $w_{i,j}$;*

3. o i -ésimo vértice de S_1 é adjacente ao j -ésimo vértice de S_1 por uma aresta com peso $w_{i,j}$ se e somente se o i -ésimo vértice de S_2 é adjacente ao j -ésimo vértice de S_2 por uma aresta com o mesmo peso $w_{i,j}$;
4. o i -ésimo vértice de S_1 é adjacente ao j -ésimo vértice de S_2 por uma aresta com peso $w_{i,j}$ se e somente se o j -ésimo vértice de S_1 é adjacente ao i -ésimo vértice de S_2 por uma aresta com o mesmo peso $w_{i,j}$.

As arestas entre os vértices i e j de um conjunto S_k chamamos de *arestas internas*. As arestas entre os vértices i de S_1 e S_2 chamamos de *arestas diretas*. As arestas entre vértices i de S_1 e j de S_2 chamamos de *arestas cruzadas*. Para que tenhamos um par de conjuntos simétricos, é necessário S_1 e S_2 tenham as mesmas arestas internas (3); e pares de arestas cruzadas (aresta entre $i \in S_1$ e $j \in S_2$ e aresta de $j \in S_1$ e $i \in S_2$) com o mesmo peso (4).

Se considerarmos os conjuntos ordenados $S_1 = \{h_1^{(1)}, h_2^{(1)}, \dots, h_r^{(1)}\}$ e $S_2 = \{h_1^{(2)}, h_2^{(2)}, \dots, h_r^{(2)}\}$, então S_1 e S_2 são conjuntos simétricos se as quatro relações forem satisfeitas.

1. $p_{h_i^{(1)}} = p_{h_i^{(2)}}$ para todo $1 \leq i \leq r$;
2. $\varepsilon_{h_i^{(1)}, u} = \varepsilon_{h_i^{(2)}, u}$ para todo $1 \leq i \leq r$ e $u \notin S_1 \cup S_2$;
3. $\varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(1)}} = \varepsilon_{h_i^{(2)}, h_j^{(2)}}$ para todo $1 \leq i < j \leq r$;
4. $\varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(2)}} = \varepsilon_{h_j^{(1)}, h_i^{(2)}}$ para todo $1 \leq i < j \leq r$.

Testando pares de conjuntos, podemos ter uma coleção de conjuntos simétricos. Na verdade, uma coleção de conjuntos simétricos forma uma relação de equivalência. A reflexividade e a simetria são naturais. A transitividade decorre do lema seguinte.

Lema 3.7. *Consideremos uma coleção $\{S_1, \dots, S_{c-1}\}$ de $c-1$ conjuntos simétricos dois a dois, isto é, S_i e S_j são conjuntos simétricos para $1 \leq i < j \leq c-1$, e um conjunto S_c simétrico a S_i para algum $1 \leq i \leq c-1$. Então os c conjuntos S_i são conjuntos simétricos dois a dois, para $1 \leq i \leq c$.*

Demonstração: Seja S_k o conjunto simétrico a S_c , para algum $1 \leq k \leq c-1$, e seja S_h , com $1 \leq h \leq c-1$, um conjunto simétrico a S_k , com $h \neq c$. Primeiramente o peso do i -ésimo vértice de S_c é igual ao peso do i -ésimo vértice de S_k , que por sua vez é igual ao peso do i -ésimo vértice de S_h . Se o i -ésimo vértice de S_c é adjacente ao vértice $u \notin (S_c \cup S_h)$, então u também é adjacente ao i -ésimo vértice de S_k , e também ao i -ésimo vértice de S_h através de uma aresta com o mesmo peso, independente de u ser vértice de S_k ou não. Caso o i -ésimo e o j -ésimo vértices de S_c sejam adjacentes, também teremos uma adjacência correspondente em S_k , e portanto em S_h . Caso o i -ésimo vértice de S_c é adjacente ao j -ésimo vértice de S_h então o i -ésimo vértice de S_k também é adjacente ao j -ésimo vértice de S_h , o que implica que o j -ésimo vértice de S_k é adjacente ao i -ésimo vértice de S_h , e assim o j -ésimo vértice de S_c é adjacente ao i -ésimo vértice de S_h , todas as arestas com o mesmo peso. \square

Além desta propriedade, temos ainda que vértices correspondentes de diferentes conjuntos simétricos podem formar apenas duas estruturas. Se o j -ésimo vértice de S_1 é (ou não) adjacente ao j -ésimo vértice de S_2 então também haverá aresta (ou não) entre os j -ésimos vértices de cada par de conjuntos simétricos a S_1 e S_2 . Se olharmos apenas para os j -ésimos vértices de cada conjunto simétrico S_i , todos os vértices serão adjacentes entre si ou nenhum deles pode ser adjacente, o que conduz ao lema a seguir.

Lema 3.8. *Dada uma coleção de c conjuntos simétricos $\{S_i\}$, o conjunto dos j -ésimos vértices de todos S_i induz um GWG dado pelo grafo completo (K_c) ou pelo grafo trivial $(\overline{K_c})$.*

Exemplo 3.9. Considere o GWG rotulado da Figura 3.2, onde o número no interior do vértice representa o seu peso e a letra no exterior indica o seu rótulo. Os três conjuntos ordenados $S_1 = \{d, e\}$, $S_2 = \{f, g\}$ e $S_3 = \{h, i\}$ são conjuntos simétricos de vértices. Note, por exemplo, que as arestas entre os vértices a e d , a e f , e a e h têm todas o mesmo peso 2. Além disso, o subgrafo induzido pelos primeiros vértices de cada conjunto S_i , a saber os vértices d , f e h , forma o GWG dado pelo grafo completo K_3 , enquanto que o subgrafo induzido pelos vértices de índice e , g e i forma um GWG dado pelo grafo trivial $\overline{K_3}$. \triangle

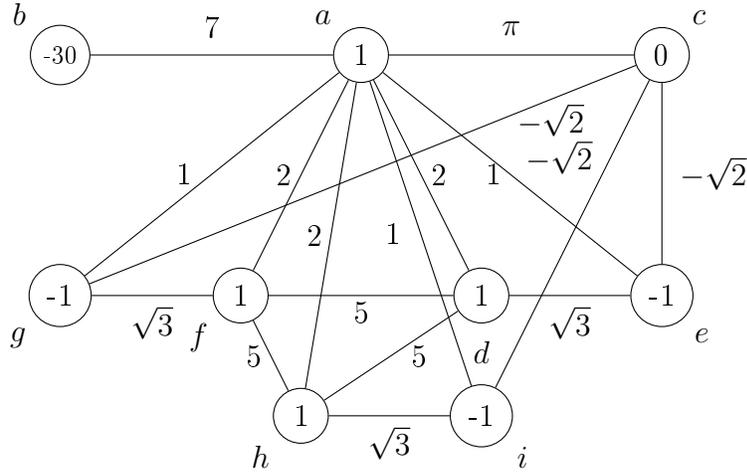


Figura 3.2: GWG com três conjuntos simétricos

Com a definição de conjuntos simétricos, é fácil notar que um GWG G com c conjuntos (disjuntos) simétricos $\{S_i\}$ pode ter seus vértices rotulados para que sua matriz tenha a estrutura

$$M = \begin{bmatrix} A & \beta & \beta & \cdots & \beta \\ \beta^T & B & C & \cdots & C \\ \beta^T & C & B & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & C \\ \beta^T & C & \cdots & C & B \end{bmatrix}. \quad (3.1)$$

O bloco A representa os vértices em $G \setminus (\cup S_i)$; cada bloco B representa um conjunto S_i , e estes possuem a mesma representação por causa dos itens (1) e (3) da definição de conjuntos simétricos. Na realidade, o bloco B é a matriz do subgrafo G_i induzido por S_i ($G|_{S_i} = G|_{S_j}$). Os blocos β representam as arestas entre um conjunto S_i e $G \setminus (\cup S_i)$ e são todos iguais por causa do item (2). O bloco C representa as arestas entre um par de conjuntos S_i e S_j , e é simétrico por causa do item (4). Além disso, independente de i e j , as arestas entre S_i e S_j são representadas pelo mesmo bloco C devido ao Lema 3.7.

Exemplo 3.10. O GWG com três conjuntos simétricos da Figura 3.2 possui a matriz M a seguir. Note que, devido a ordem dos vértices, temos a estrutura de (3.1). Se trocarmos o rótulo dos vertices de $S_1 = \{4, 5\}$ com os de $S_3 = \{8, 9\}$, por exemplo, mantendo a ordem, as relações das arestas serão mantidas e a matriz do GWG reordenado será igual à matriz do GWG original.

$$M = \left[\begin{array}{ccc|ccc|ccc} 1 & 7 & \pi & 2 & 1 & 2 & 1 & 2 & 1 \\ 7 & -30 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \pi & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ \hline 2 & 0 & 0 & 1 & \sqrt{3} & 5 & 0 & 5 & 0 \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & \sqrt{3} & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 2 & 0 & 0 & 5 & 0 & 1 & \sqrt{3} & 5 & 0 \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & \sqrt{3} & -1 & 0 & 0 \\ \hline 2 & 0 & 0 & 5 & 0 & 5 & 0 & 1 & \sqrt{3} \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & -1 \end{array} \right]$$

△

3.1 Algoritmo de decomposição

Introduzimos aqui o algoritmo que é o principal resultado desse capítulo. Isso nos permite encontrar o espectro de matrizes de grafos, ou partes dele, para classes particulares de grafos.

Vamos considerar um GWG (G, p, ε) dado por um grafo $G(V, E)$ e funções peso p e ε . Se um par de vértices v_i e v_j não possui aresta os conectando, definimos $\varepsilon_{i,j} = 0$. Seja $\{S_k\}$ uma coleção de c conjuntos simétricos (ordenados) disjuntos, onde $S_k = \{h_1^{(k)}, h_2^{(k)}, \dots, h_r^{(k)}\}$. O Algoritmo 1 é apresentado na forma de texto e em seguida na forma de pseudo-código.

O Algoritmo 1 muda os pesos de uma dada coleção de conjuntos simétricos e elimina arestas para desconectar o GWG em partes menores, sem alterar o espectro. Dado um GWG G , com c conjuntos simétricos, no primeiro passo do algoritmo, multiplica-se por \sqrt{c} o peso de todas as arestas entre S_1 e $G \setminus (\cup S_i)$. No segundo passo, caso houver arestas diretas entre vértices de S_1 e S_2 (ou qualquer par de conjuntos simétricos), o peso do vértice em S_1 é acrescido em $c - 1$ vezes o peso da aresta direta enquanto que os vértices em S_k , para $2 \leq k \leq c$, têm seu peso diminuído pelo peso da aresta. No terceiro passo, se houver aresta cruzada ligando vértices i e j (e ao mesmo tempo, entre j e i) não correspondentes de S_1 e S_2 então o peso da aresta interna (entre i e j) em S_1 será aumentada em $c - 1$ vezes o peso das arestas cruzadas, enquanto que as arestas internas (entre i e j) em S_k , para $2 \leq k \leq c$, terão seu peso diminuído em uma vez o peso das arestas cruzadas. Finalmente, no quarto passo, eliminamos todas as arestas entre S_k e $G \setminus S_k$, para $2 \leq k \leq c$, tornando o GWG desconexo.

entrada: GWG (G, p, ε) com c conjuntos simétricos $\{S_k\}$ de tamanho r

saída : GWG com o mesmo espectro

1 para toda aresta entre $h_i^{(1)} \in S_1$ e $u \notin (\cup S_k)$ **faça**

$$\varepsilon_{h_i^{(1)}, u} \leftarrow \sqrt{c} \varepsilon_{h_i^{(1)}, u};$$

2 para toda aresta direta entre $h_i^{(1)} \in S_1$ e $h_i^{(2)} \in S_2$ **faça**

$$w \leftarrow \varepsilon_{h_i^{(1)}, h_i^{(2)}} \text{ (aresta direta);}$$

$$p_{h_i^{(1)}} \leftarrow p_{h_i^{(1)}} + (c - 1)w \text{ (peso do vértice);}$$

$$p_{h_i^{(k)}} \leftarrow p_{h_i^{(k)}} - w \text{ para todo } 2 \leq k \leq c;$$

3 para todo par de arestas cruzadas $\{h_i^{(1)}, h_j^{(2)}\} \cup \{h_j^{(1)}, h_i^{(2)}\}$ **faça**

$$w \leftarrow \varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(2)}} \text{ (aresta cruzada);}$$

$$\varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(1)}} \leftarrow \varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(1)}} + (c - 1)w \text{ (aresta interna);}$$

$$\varepsilon_{h_i^{(k)}, h_j^{(k)}} \leftarrow \varepsilon_{h_i^{(k)}, h_j^{(k)}} - w \text{ para todo } 2 \leq k \leq c;$$

4 para toda aresta entre $h_i^{(k)} \in S_k$ e $u \notin S_k$ **faça**

$$\varepsilon_{h_i^{(k)}, u} \leftarrow 0 \text{ para } 2 \leq k \leq c;$$

retorne GWG;

Algoritmo 1: Decomposição de simetria

Quando um valor de ε passa de nulo para não nulo, o que pode ocorrer no passo 3, devemos incluir a aresta no conjunto E . Quando ε passa de não nulo para nulo, o que ocorre no passo 4, então devemos eliminar tal aresta do conjunto E . Os laços do algoritmo estão na forma para que se possa entender claramente o que cada passo do algoritmo realiza no GWG.

Teorema 3.11. *O Algoritmo 1 transforma um GWG com $c \geq 1$ conjuntos simétricos S_i selecionados em um outro GWG com o mesmo espectro.*

Note que a soma dos pesos dos vértices não se altera quando aplicamos o Algoritmo 1, pois este é um invariante de GWGs com o mesmo espectro, segundo a Proposição 3.5. A demonstração da validade do algoritmo será feita na Seção 3.3.

Exemplo 3.12. Considere o GWG na Figura 3.2 e os conjuntos simétricos $S_1 = \{d, e\}$, $S_2 = \{f, g\}$ e $S_3 = \{h, i\}$. Aplicando o Algoritmo 1, o primeiro passo consiste em multiplicar o peso das arestas $\{a, d\}$, $\{a, e\}$ e $\{c, e\}$ por $\sqrt{3}$. Como há uma aresta direta ligando vértices correspondentes em conjuntos simétricos distintos, como por exemplo a aresta $\{d, f\}$, o peso do vértice d é aumentado em $2 \cdot 5$, enquanto que os vértices f e h têm seus pesos diminuídos em 5. Já que não há arestas cruzadas entre vértices não correspondentes em conjuntos S_k distintos, ou mais precisamente $v_i \in S_1$ não é adjacente a $v_j \in S_2$ para $i \neq j$, o peso das arestas no interior de cada S_k não é alterado. O quarto passo remove as arestas $\{a, f\}$, $\{d, f\}$, $\{f, h\}$, $\{a, g\}$, $\{c, g\}$ e $\{a, h\}$, $\{d, h\}$, $\{a, i\}$, $\{c, i\}$. O GWG resultante na Figura 3.3 tem o mesmo espectro do que o GWG original, como afirma o Teorema 3.11.

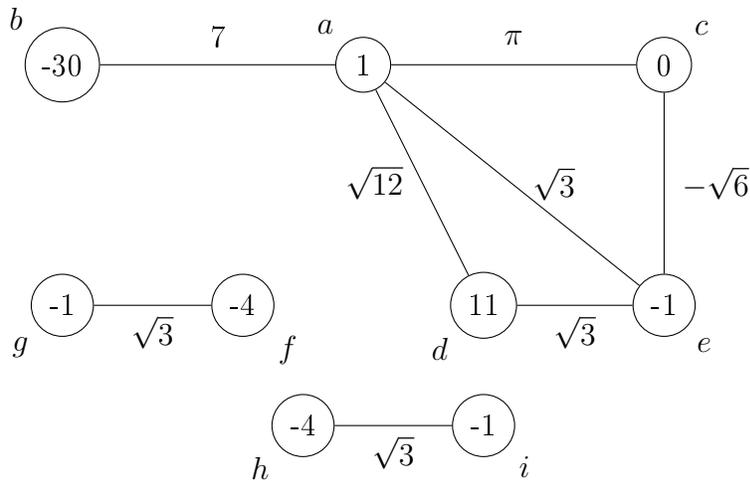


Figura 3.3: GWG decomposto com o mesmo espectro

Portanto o espectro do GWG da Figura 3.2 é a união do espectro das componentes conexas do GWG da Figura 3.3. Facilmente podemos deduzir que $-\frac{5 \pm \sqrt{21}}{2}$ são autovalores de multiplicidade (no mínimo) 2, obtidos das componentes de 2 vértices. \triangle

Exemplo 3.13. Considere o grafo G de 6 vértices da Figura 3.4. Suponha que estamos interessados em encontrar o espectro da matriz de adjacência de G , através da aplicação do Algoritmo 1. Portanto devemos tomar o GWG dado pelo grafo G , com vértices com peso 0 e arestas com peso 1 para que a matriz do GWG seja igual a matriz $A(G)$. Os conjuntos $S_1 = \{c, d\}$ e $S_2 = \{e, f\}$ formam um par de conjuntos simétricos. Seguindo os passos do Algoritmo 1, a aresta entre os vértices b e c tem seu peso multiplicada por $\sqrt{2}$; os vértices mantêm seus pesos pois não há arestas diretas entre os vértices c e e , e d e f ; devemos aumentar o peso da aresta interna entre c e d em 1 e diminuir o peso da aresta interna entre e e f em 1 pois existe uma aresta cruzada, ou seja, precisamos criar arestas com pesos 1 e -1; e, para finalizar, suprimimos a aresta entre b e e .

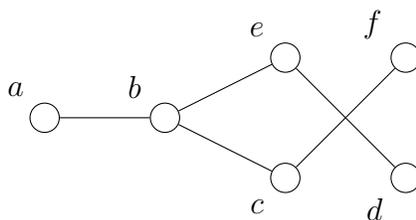


Figura 3.4: GWG dado pelo grafo G com dois conjuntos simétricos

O espectro do grafo G é igual ao espectro do GWG disjunto da Figura 3.5. Em particular, 1 e -1 são autovalores de G , obtidos da componente de tamanho dois. Poderíamos também ter escolhido os conjuntos simétricos $S_1^* = \{c, f\}$ e $S_2^* = \{e, d\}$. Nesse caso, obteríamos um GWG disjunto similar ao anterior, con-

tudo o peso da aresta na componente de tamanho dois seria 1 (e não -1), mas esta componente ainda teria os mesmos autovalores 1 e -1. \triangle

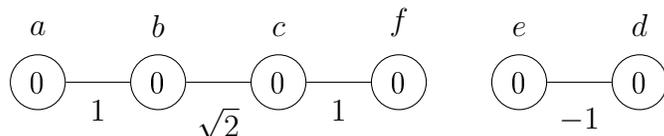


Figura 3.5: GWG disjunto com o mesmo espectro do que G

Implementar o Algoritmo 1 para encontrar o espectro de grafos (ou de matrizes simétricas) reside no problema de encontrar simetrias relacionadas a tipos especiais de automorfismos no grafo. O Problema do automorfismo de grafos consiste no problema de testar se um grafo possui automorfismos não triviais, e pertence à classe NP de complexidade computacional. Apesar de não se saber se o problema é NP-completo, também não se conhece nenhum método que resolva o problema em tempo polinomial [23]. Não bastasse a dificuldade de encontrar os automorfismos, nem todo automorfismo no grafo está relacionado com uma sequência de conjuntos simétricos. Por exemplo, o grafo formado por um ciclo de n vértices possui vários automorfismos dados por rotação dos rótulos dos vértices, porém nenhum desses automorfismos está relacionado a conjuntos simétricos.

Na próxima seção, serão mostrados alguns resultados a respeito do espectro de uma matriz da forma dada em (3.1). Nas seções subsequentes, teremos a demonstração do Teorema 3.11 e apresentamos uma variação do Algoritmo 1, onde a simetria envolvida é enfraquecida, nos casos em que a componente C são blocos de zeros.

3.2 Uma decomposição espectral

Nessa seção apresentaremos um resultado acerca do espectro de uma matriz com estrutura especial. A forma geral deste tipo de matriz está relacionada à existência de conjuntos simétricos no GWG associado à matriz.

Considere a matriz simétrica M de ordem n dada em (3.1), que por conveniência repetimos abaixo. Essa matriz consiste em um bloco $A \in \mathbb{R}^{t \times t}$, blocos $\beta \in \mathbb{R}^{t \times s}$ e blocos $B, C \in \mathbb{R}^{s \times s}$, tais que $n = t + cs$, onde c é o número de cópias do bloco B . As dimensões mínimas que os blocos devem respeitar são $t \geq 0$, ou seja o bloco A e os blocos β podem não existir, $s \geq 1$ e $c \geq 1$, isto é, há no mínimo um bloco B não nulo.

$$M = \begin{bmatrix} A & \beta & \beta & \cdots & \beta \\ \beta^T & B & C & \cdots & C \\ \beta^T & C & B & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & C \\ \beta^T & C & \cdots & C & B \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

Chamamos o bloco β de *matriz relação* entre os blocos A e B , e chamamos o bloco C de *matriz relação* entre os blocos B . Como a matriz M é simétrica, os blocos A, B e C também são simétricos.

Em seguida apresentamos o principal resultado dessa seção. Vamos utilizar $\sigma(X)$ para denotar o espectro da matriz X . Novamente, consideramos o espectro da matriz X como o multiconjunto de autovalores, isto é, os elementos são repetidos em $\sigma(X)$ de acordo com a sua multiplicidade como autovalores de X . Por $\sigma^{(q)}(X)$ denotamos o multiconjunto onde cada elemento de $\sigma(X)$ tem multiplicidade q , ou seja, a união de q cópias de $\sigma(X)$.

Teorema 3.14. *Seja M uma matriz da forma dada em (3.2), com $c \geq 1$ cópias do bloco B . Então*

(i) $\sigma(B - C) \subseteq \sigma(M)$ com multiplicidade $c - 1$;

(ii) $\sigma(M) \setminus \sigma^{(c-1)}(B - C) = \sigma(M')$ é o conjunto formado pelos $t + s$ autovalores restantes de M , onde

$$M' = \begin{bmatrix} A & \sqrt{c} \cdot \beta \\ \sqrt{c} \cdot \beta^T & B + (c - 1)C \end{bmatrix}.$$

Em outras palavras, estamos dizendo que podemos espessar o espectro de M como a união do espectro de matrizes de ordem menor:

$$\sigma(M) = \sigma^{(c-1)}(B - C) \cup \sigma(M').$$

Como já foi dito anteriormente, a motivação de tal resultado vem de uma técnica usada em vários casos, como em [28, 29, 30, 31, 32], com a finalidade de se obter alguns autovalores relacionados às matrizes de adjacências e laplaciana de árvores de Bethe generalizadas. Também, esse é um caso mais geral do fato de que $v = e_i - e_j$ é um autovetor das matrizes A, L, Q, \mathcal{L} e D de um grafo, onde i e j são vértices pendentes adjacentes ao mesmo vértice.

Em [16], Fritscher et al. mostram a existência de conjuntos de grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana. Nesse artigo, os autores notam que um vetor da forma $w = (\mathbf{0}, v, -v)$ é um autovetor do grafo G associado ao autovalor λ , onde v é um autovetor de um subgrafo H de G , e H é simétrico a outros subgrafos de G , com v associado ao mesmo autovalor λ de H . No Capítulo 4 daremos a demonstração do resultado obtido em [16], mas usaremos o Algoritmo 1 em vez da prova original, pois o método descrito aqui engloba a técnica usada no artigo.

Para demonstrar o Teorema 3.14, usaremos a proposição auxiliar a seguir, considerada o ponto principal para esse e outros resultados que seguirão.

Proposição 3.15. *Seja γ um parâmetro real e sejam A, β, B e C submatrizes de uma matriz simétrica M da forma (3.2). Para as matrizes simétricas M_1 e M_2 abaixo, de ordem $t+2s$ e $t+s$ respectivamente, temos que $\sigma(M_1) = \sigma(M_2) \cup \sigma(B-C)$.*

$$M_1 = \begin{bmatrix} A & \gamma \cdot \beta & \beta \\ \gamma \cdot \beta^T & B + (\gamma^2 - 1) \cdot C & \gamma \cdot C \\ \beta^T & \gamma \cdot C & B \end{bmatrix} \quad M_2 = \begin{bmatrix} A & \sqrt{\gamma^2 + 1} \cdot \beta \\ \sqrt{\gamma^2 + 1} \cdot \beta^T & B + \gamma^2 \cdot C \end{bmatrix}$$

O caso quando $\gamma = 1$ e a dimensão do bloco A é um ou zero já foi estudado por Cantoni e Butler [11] na procura pelo espectro de matrizes bissimétricas. Mais tarde, Nouri [26] aplicou o resultado dos dois autores anteriores às matrizes de adjacência e laplaciana de grafos. Dessa forma, tanto a Proposição 3.15 como o Teorema 3.14 generalizam o resultado obtido por esses autores.

Antes de provarmos a proposição enunciada, vamos analisar um pequeno exemplo em que os autovetores possuem propriedades que serão importantes nas nossas demonstrações.

Exemplo 3.16. Seja M_1 a primeira matriz da Proposição 3.15 com $\gamma = 1$, $B = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 3 & -2 \end{bmatrix}$ e $C = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$:

$$M_1 = \left[\begin{array}{cc|cc|cc} 3 & 0 & 1 & 2 & 1 & 2 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ \hline 1 & -1 & 2 & 3 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 3 & -2 & 1 & 0 \\ \hline 1 & -1 & 1 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 0 & 1 & 0 & 3 & -2 \end{array} \right].$$

De acordo com a proposição, o espectro de M_1 é igual a união de $\sigma(B-C) = \{2, -3\}$ e $\sigma(M_2) = \{7,145; 1,895; -1,27; -4,769\}$, onde

$$B - C = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & -2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad M_2 = \left[\begin{array}{cc|cc} 3 & 0 & \sqrt{2} & \sqrt{8} \\ 0 & -1 & -\sqrt{2} & 0 \\ \hline \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 3 & 4 \\ \sqrt{8} & 0 & 4 & -2 \end{array} \right].$$

Dois autovetores associados aos autovalores 2 e -3 de M_1 são $w_1 = (0, 0, 2, 1, -2, -1)$ e $w_2 = (0, 0, 1, -2, -1, 2)$, respectivamente, enquanto que dois autovetores associados aos autovalores 2 e -3 de $B - C$ são $v_1 = (2, 1)$ e $v_2 = (1, -2)$, respectivamente. Note que vale a relação $w_i = (\mathbf{0}, v_i, -v_i)$.

Já um autovetor associado ao autovalor 7,145 de M_1 é w_3 , enquanto que um autovetor associado a este mesmo autovalor de M_2 é w'_1 , onde

$$w_3 = (0,551; -0,188; 0,481; 0,331; 0,481; 0,331) \quad \text{e} \quad w'_1 = (0,551; -0,188; 0,680; 0,468).$$

Note que se escrevermos $w_3 = (x, y, y)$, então temos que $w'_1 = (x, \sqrt{2}y)$. △

Demonstração (Proposição 3.15): Tomando a matriz M_1 com submatrizes $A \in \mathbb{R}^{t \times t}$, $\beta \in \mathbb{R}^{t \times s}$ e $B, C \in \mathbb{R}^{s \times s}$, consideramos um autovetor $v_i \in \mathbb{R}^s$ associado ao autovalor λ_i da matriz $B - C$. Como a matriz $B - C$ é simétrica, ela possui espectro real e uma base ortogonal de autovetores v_j . Considere vetores $w \in \mathbb{R}^{t+2s}$ escritos na forma $w = (x_1, x_2, x_3)$, onde as componentes são $x_1 \in \mathbb{R}^t$ e $x_2, x_3 \in \mathbb{R}^s$. Seja $w_i = (\mathbf{0}, v_i, -\gamma v_i)$. Ao multiplicarmos M_1 por w_i obtemos

$$M_1 \cdot w_i = \begin{bmatrix} \gamma\beta \cdot v_i - \gamma\beta \cdot v_i \\ B \cdot v_i + (\gamma^2 - 1)C \cdot v_i - \gamma^2 C \cdot v_i \\ \gamma C \cdot v_i - \gamma B \cdot v_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ (B - C)v_i \\ -\gamma(B - C)v_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \lambda_i v_i \\ -\gamma \lambda_i v_i \end{bmatrix} = \lambda_i w_i. \quad (3.3)$$

Portanto o autovalor λ_i de $B - C$ também é autovalor de M_1 . Como os vetores v_i formam um conjunto linearmente independente, os vetores w_i também formam um conjunto linearmente independente e assim temos que todos os autovalores λ_i (para $1 \leq i \leq s$) são autovalores de M_1 , respeitando as multiplicidades. De fato, a única maneira de termos $\sum_i \alpha_i w_i = \mathbf{0}$ é se tivermos $\sum_i \alpha_i v_i = \mathbf{0}$. Logo $\sigma(B - C) \subset \sigma(M_1)$.

Os demais $t + s$ autovalores são associados a autovetores ortogonais aos vetores w_i descritos anteriormente. Para que tenhamos $w \cdot w_i = 0$, onde $w = (x_1, x_2, x_3)$, precisamos que as componentes satisfaçam $x_2 = \gamma x_3$. Considere a matriz M_2 dada no enunciado e tome $w'_k \in \mathbb{R}^{s+t}$ um autovetor associado ao autovalor μ_k de M_2 . Podemos escrever este autovetor na forma $w'_k = \begin{bmatrix} x'_k \\ \sqrt{\gamma^2 + 1} y'_k \end{bmatrix}$, onde $x'_k \in \mathbb{R}^t$ e $y'_k \in \mathbb{R}^s$. Então, a equação autovetor-autovalor nos dá

$$\begin{bmatrix} A \cdot x'_k + (\gamma^2 + 1)\beta \cdot y'_k \\ \sqrt{\gamma^2 + 1}(\beta^T \cdot x'_k + B \cdot y'_k + \gamma^2 C \cdot y'_k) \end{bmatrix} = M_2 \cdot w'_k = \mu_k w'_k = \begin{bmatrix} \mu_k x'_k \\ \sqrt{\gamma^2 + 1} \mu_k y'_k \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

Usando esse vetor w'_k , construímos o vetor $w_{k+s} \in \mathbb{R}^{t+2s}$ com a forma

$$w_{k+s} = (x'_k, \gamma y'_k, y'_k).$$

Note que este vetor é ortogonal aos autovetores w_i , para $i \leq s$. Ao multiplicarmos a matriz M_1 por w_{k+s} obtemos

$$M_1 \cdot w_{k+s} = \begin{bmatrix} A \cdot x'_k + \gamma^2 \beta \cdot y'_k + \beta \cdot y'_k \\ \gamma \beta^T \cdot x'_k + \gamma B \cdot y'_k + \gamma^3 C \cdot y'_k \\ \beta^T \cdot x'_k + \gamma^2 C \cdot y'_k + B \cdot y'_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_k x'_k \\ \gamma \mu_k y'_k \\ \mu_k y'_k \end{bmatrix} = \mu_k w_{k+s},$$

para qualquer $1 \leq k \leq t + s$, utilizando as identidades obtidas em (3.4). Uma vez que os vetores w'_k são linearmente independentes, os vetores w_{k+s} também o são e portanto o espectro de M_2 é um subconjunto do espectro de M_1 . Assim, $\sigma(M_2)$ é o conjunto de autovalores que faltava para completar $\sigma(M_1)$, isto é, o conjunto $\sigma(M_2) = \sigma(M_1) \setminus \sigma(B - C)$. \square

Agora podemos usar a Proposição 3.15 recursivamente para provar o Teorema 3.14 ou, de modo equivalente, usar este resultado no passo de indução.

Demonstração (Teorema 3.14): Provaremos o teorema por indução em c , o número de cópias de blocos B . Caso $c = 1$, o resultado segue trivialmente pois (i) não ocorre e a matriz M' em (ii) é a própria matriz M . O caso $c = 2$ segue da Proposição 3.15, usando $\gamma = 1$.

Suponha que o resultado seja verdadeiro para $c - 1 \geq 1$ cópias do bloco B . Seja A_* a matriz simétrica de ordem $s + t$ tal que $A_* = \begin{bmatrix} A & \beta \\ \beta^T & B \end{bmatrix}$. Agora aplicamos a hipótese de indução em M com $c - 1$ cópias do bloco B , onde $\begin{bmatrix} \beta \\ C \end{bmatrix}$ é a matriz relação entre os blocos A_* e B .

$$M = \left[\begin{array}{cc|cc|c} A & \beta & \beta & \cdots & \beta \\ \beta^T & B & C & \cdots & C \\ \hline \beta^T & C & B & \ddots & \vdots \\ \hline \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & C \\ \hline \beta^T & C & \cdots & C & B \end{array} \right]$$

Assim o espectro de M é a união do espectro de $c - 2$ cópias de $\sigma(B - C)$ e o espectro de

$$M_* = \left[\begin{array}{cc|c} A & \beta & \sqrt{c-1}\beta \\ \beta^T & B & \sqrt{c-1}C \\ \hline \sqrt{c-1}\beta^T & \sqrt{c-1}C & B + (c-2)C \end{array} \right].$$

Seja P a matriz de permutação que troca a coluna $t + i$ pela coluna $t + s + i$, para todos $1 \leq i \leq s$. Também, seja $M^* = P^{-1}M_*P$, que possui o mesmo

espectro do que a matriz M_* . Agora temos a matriz na forma

$$M^* = \begin{bmatrix} A & \sqrt{c-1}\beta & \beta \\ \sqrt{c-1}\beta^T & B + (c-2)C & \sqrt{c-1}C \\ \beta^T & \sqrt{c-1}C & B \end{bmatrix}.$$

Aplicando a Proposição 3.15 com $\gamma = \sqrt{c-1}$, obtemos que M^* (e também M_*) tem espectro igual a $\sigma(M') \cup \sigma(B-C)$, pois $\sqrt{c} = \sqrt{\gamma^2 + 1}$. Agora precisamos apenas incluir este conjunto $\sigma(B-C)$ junto com as demais $c-2$ cópias. \square

A matriz M dada em (3.2) tem uma propriedade especial quanto à forma de seus autovetores. Tomando um vetor de \mathbb{R}^{t+cs} e separando as entradas em um bloco de t entradas e c blocos de s entradas, temos que os autovalores λ_i de M que são também autovalores de $B-C$ estão associados a autovetores da forma

$$w = (\mathbf{0}, v_i, \mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}, -v_i, \mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}),$$

onde v_i é um autovetor de $B-C$, associado ao autovalor λ_i . Com zero nas primeiras t posições de w e apenas dois dos c blocos restantes preenchidos com v_i e $-v_i$, há exatamente $c-1$ possibilidades de se construir vetores w_i linearmente independentes e, portanto, a multiplicidade (mínima) de λ_i como autovalor de M é $c-1$. Lembremos que em [16], onde lidamos com apenas $c=2$ blocos, encontramos autovetores na forma $w = (\mathbf{0}, v, -v)$.

Exemplo 3.17. Seja M a matriz simétrica de ordem 7 abaixo, que possui a estrutura da matriz dada em (3.2). Pelo Teorema 3.14, o espectro de M contém o conjunto $\sigma(B-C) = \{6, -7\}$ como subconjunto de multiplicidade $c-1 = 2$. Os demais autovalores de M pertencem ao conjunto $\sigma(M') = \{13, 3, -4\}$.

$$M = \left[\begin{array}{ccc|cc} 1 & 0 & \sqrt{10} & 0 & \sqrt{10} \\ 0 & 3 & 6 & 1 & 0 \\ \sqrt{10} & 6 & 0 & 0 & 3 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 3 & 6 \\ \sqrt{10} & 0 & 3 & 6 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ \sqrt{10} & 0 & 3 & 0 & 3 \end{array} \right] \quad B - C = \begin{bmatrix} 2 & 6 \\ 6 & -3 \end{bmatrix}$$

$$M' = \left[\begin{array}{ccc|cc} 1 & 0 & \sqrt{30} \\ \hline 0 & 5 & 6 \\ \sqrt{30} & 6 & 6 \end{array} \right]$$

Pelo fato de que $\lambda = 6$ é um autovalor de multiplicidade 2, deve haver dois autovetores linearmente independentes e ortogonais associados a esse autovalor. O vetor $v = (3, 2)$ é autovetor associado ao autovalor 6 de $B - C$. Os dois vetores $w(1) = (0, 3, 2, -3, -2, 0, 0)$ e $w(2) = (0, 3, 2, 0, 0, -3, -2)$ são autovetores linearmente independentes associados ao autovalor $\lambda = 6$ de M , porém se tomarmos um terceiro autovetor $w(3) = (0, 0, 0, 3, 2, -3, -2)$ teremos um conjunto linearmente dependente. No máximo dois vetores entre $w(1) = (\mathbf{0}, v, -v, \mathbf{0})$, $w(2) = (\mathbf{0}, v, \mathbf{0}, -v)$ e $w(3) = (\mathbf{0}, \mathbf{0}, v, -v)$ formam um conjunto linearmente independente. \triangle

Podemos encontrar matrizes não simétricas com o mesmo espectro de M' , a matriz dada no Teorema 3.14, multiplicando o bloco β por um valor $\alpha \neq 0$ e β^T por $\frac{1}{\alpha} \neq 0$. Em particular, se usarmos $\alpha = \sqrt{c}$, a matriz

$$M'_{\sqrt{c}} = \begin{bmatrix} A & c \cdot \beta \\ \beta^T & B + (c - 1)C \end{bmatrix}$$

tem os mesmos $s + t$ autovalores do que a matriz M' da parte (ii) do Teorema 3.14. Esse resultado é uma consequência do lema técnico a seguir.

Lema 3.18. *As matrizes $M_1 = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$ e $M_2 = \begin{bmatrix} A & \alpha B \\ \frac{1}{\alpha} C & D \end{bmatrix}$ têm o mesmo espectro.*

Demonstração: Seja $v_i = (x, y)$ um autovetor associado ao autovalor λ_i de M_1 . Pela equação autovetor-autovalor, obtemos $\lambda_i x = Ax + By$ e $\lambda_i y = Cx + Dy$. Considere o vetor $v'_i = (x, \frac{1}{\alpha}y)$. Ao multiplicarmos M_2 pelo vetor v'_i obtemos

$$M_2 \cdot v'_i = \begin{bmatrix} Ax + By \\ \frac{1}{\alpha}Cx + \frac{1}{\alpha}Dy \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_i x \\ \frac{1}{\alpha}\lambda_i y \end{bmatrix} = \lambda_i v'_i.$$

Portanto λ_i também é um autovalor de M_2 . Para finalizar, note que o espaço gerado por todos os vetores v'_i é o mesmo que o espaço gerado por todos os vetores v_i (todo o espaço), pois $\alpha^{|D|} \det[v'_1, \dots, v'_n] = \det[v_1, \dots, v_n] \neq 0$. \square

Na próxima seção daremos a demonstração do Algoritmo 1 aplicando o resultado obtido aqui, mostrando que o método realmente decompõe um GWG em uma união disjunta de GWGs menores, esta união com o mesmo espectro do GWG original, como enunciado pelo Teorema 3.11.

3.3 Demonstração da validade do Algoritmo 1

Nessa seção, vamos demonstrar o Teorema 3.11.

Seja G um GWG com n vértices. Seja $\{S_k\}$ uma sequência de $c \geq 1$ conjuntos simétricos (ordenados) de vértices de G . Vamos considerar uma ordem especial para os vértices de G . Primeiramente rotulamos todos os vértices do conjunto $G \setminus \cup_{k=1}^c S_k$. Os próximos vértices são aqueles de S_1 na ordem informada no conjunto ordenado. Em seguida os vértices de S_2 , então os vértices de S_3 , até finalizarmos com os vértices de S_c . A matriz M de G assume a forma

$$M = \begin{bmatrix} A & \beta & \beta & \cdots & \beta \\ \beta^T & B & C & \cdots & C \\ \beta^T & C & B & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & C \\ \beta^T & C & \cdots & C & B \end{bmatrix},$$

onde o subconjunto de vértices que não pertence a $\cup_{i=1}^c S_i$ é representado pelo bloco A ; os conjuntos S_k são representados pelos blocos B e as relações entre os conjuntos S_k , isto é, as arestas entre os vértices de conjuntos S_k distintos, são representadas pelos blocos C ; e as relações de adjacência entre os vértices nos conjuntos S_k e os vértices que não estão em $\cup_{i=1}^c S_i$ são representadas pelos blocos β .

Seja G^* o GWG obtido após aplicarmos o Algoritmo 1 a G . Queremos obter a matriz de G^* .

No passo 1, precisamos multiplicar por \sqrt{c} o peso das arestas de qualquer vértice $h_i \in S_1$ adjacente a vértices fora de $\cup_{k=1}^c S_k$ ($\varepsilon_{h_i^{(1)},u} \leftarrow \sqrt{c}\varepsilon_{h_i^{(1)},u}$). Isto significa que os blocos β e β^T , nas posições cruzadas entre o bloco A e o primeiro bloco B , precisam ser multiplicados pelo valor \sqrt{c} .

O passo 2 muda o peso dos vértices de S_k , para todo k . Para S_1 , o peso do vértice $h_i \in S_1$ é aumentado por $c - 1$ vezes o valor do peso da aresta direta entre $h_i \in S_1$ e $h_i \in S_2$ ($p_{h_i^{(1)}} \leftarrow p_{h_i^{(1)}} + (c - 1)\varepsilon_{h_i^{(1)},h_i^{(2)}}$). Para S_k com $k \geq 2$, o peso do vértice $h_i \in S_k$ é diminuído pelo valor do peso da aresta direta entre $h_i \in S_1$ e $h_i \in S_2$ ($p_{h_i^{(k)}} \leftarrow p_{h_i^{(k)}} - \varepsilon_{h_i^{(1)},h_i^{(2)}}$). Como $C_{i,i} = \varepsilon_{h_i^{(1)},h_i^{(2)}}$ é o peso da aresta entre os i -ésimos vértices de conjuntos simétricos distintos, nesse passo estamos trocando $B_{i,i}$ por $B_{i,i} + (c - 1)C_{i,i}$ para o primeiro bloco B ; e por $B_{i,i} - C_{i,i}$ para os demais blocos B .

O passo 3 altera o peso das arestas internas de S_k , para todo k . Para S_1 , o peso da aresta entre h_i e h_j (onde $i < j$) é aumentado em $c - 1$ vezes o valor da aresta cruzada entre $h_i \in S_1$ e $h_j \in S_2$ ($\varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(1)}} \leftarrow \varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(1)}} + (c - 1)\varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(2)}}$). Para S_k com $k \geq 2$, o peso da aresta interna entre os vértices h_i e h_j é diminuído pelo valor do peso da aresta cruzada entre $h_i \in S_1$ e $h_j \in S_2$ ($\varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(1)}} \leftarrow \varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(1)}} - \varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(2)}}$). Em outras palavras, estamos substituindo as entradas $B_{i,j}$ por $B_{i,j} + (c - 1)C_{i,j}$ e $B_{j,i}$ por $B_{j,i} + (c - 1)C_{j,i}$ para o primeiro bloco B ; e por $B_{i,j} - C_{i,j}$ e $B_{j,i} - C_{j,i}$, respectivamente, para os demais blocos B .

Portanto, temos as substituições $B \leftarrow B + (c - 1)C$ para o primeiro bloco e $B \leftarrow B - C$ para os demais $c - 1$ blocos.

Finalmente, no passo 4, são eliminadas as arestas de vértices $h_i \in S_k$ para vértices $u \notin S_k$, para todo $k \geq 2$ ($\varepsilon_{h_i^{(k)}, u} \leftarrow 0$). Isto é, $\beta \leftarrow 0$ e $C \leftarrow 0$ nas linhas e colunas dos blocos B relacionados aos conjuntos S_k , para $k \geq 2$.

O espectro de G^* é o espectro de sua matriz M^* , que possui a forma

$$M^* = \left[\begin{array}{cc|ccc} A & \sqrt{c}\beta & 0 & \cdots & 0 \\ \sqrt{c}\beta^T & B + (c - 1)C & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 0 & B - C & 0 & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & B - C \end{array} \right].$$

Quando aplicamos o Teorema 3.14 a M , obtemos que o espectro da matriz M é a união de $c - 1$ cópias do espectro do bloco $B - C$ e o espectro da matriz M' , onde

$$M' = \left[\begin{array}{cc} A & \sqrt{c} \cdot \beta \\ \sqrt{c} \cdot \beta^T & B + (c - 1)C \end{array} \right].$$

Como a matriz M^* é uma matriz diagonal em blocos, seu espectro é a união do espectro dos seus blocos. E isso é exatamente a união descrita anteriormente. Portanto G e G^* têm o mesmo espectro. \square

3.4 Variação do algoritmo

Podemos modificar um pouco o Algoritmo 1 e obter a decomposição de GWGs com outras propriedades. Com isso em mente, definimos a propriedade de quase-simetria.

Definição 3.19. *Dois conjuntos (ordenados) de vértices de um GWG G , nomeados S_1 e S_2 , são chamados de quase-simétricos se possuem o mesmo número de vértices e se, para todo $i, j \leq |S_1|$,*

1. *o i -ésimo vértice de S_1 e S_2 têm o mesmo peso;*
2. *existe um valor γ tal que, se $u \in G \setminus (S_1 \cup S_2)$ é adjacente ao i -ésimo vértice de S_1 com uma aresta de peso $w_{i,u}$ então u é adjacente ao i -ésimo vértice de S_2 com uma aresta de peso $\gamma w_{i,u}$;*
3. *o i -ésimo vértice de S_1 é adjacente ao j -ésimo vértice de S_1 com uma aresta de peso $w_{i,j}$ se e somente se o i -ésimo vértice de S_2 é adjacente ao j -ésimo vértice de S_2 com uma aresta com o mesmo peso $w_{i,j}$;*
4. *não há arestas entre S_1 e S_2 .*

É necessário que S_1 e S_2 tenham as mesmas arestas internas e que não haja arestas diretas e cruzadas.

Se considerarmos os conjuntos ordenados $S_1 = \{h_1^{(1)}, h_2^{(1)}, \dots, h_r^{(1)}\}$ e $S_2 = \{h_1^{(2)}, h_2^{(2)}, \dots, h_r^{(2)}\}$, então S_1 e S_2 são conjuntos de vértices quase-simétricos se as quatro relações forem satisfeitas.

1. $p_{h_i^{(1)}} = p_{h_i^{(2)}}$ para todo $1 \leq i \leq r$;
2. $\varepsilon_{h_i^{(1)}, u} = \gamma \varepsilon_{h_i^{(2)}, u}$ para todo $1 \leq i \leq r$ e $u \notin S_1 \cup S_2$;
3. $\varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(1)}} = \varepsilon_{h_i^{(2)}, h_j^{(2)}}$ para todo $1 \leq i < j \leq r$;
4. $\varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(2)}} = 0$ para todo $1 \leq i < j \leq r$.

Se tivermos c conjuntos quase-simétricos S_k , fixamos uma matriz relação β de tal forma que, dado um vértice $u \in G \setminus (\cup S_k)$ adjacente ao i -ésimo vértice de S_j , a aresta que os liga tem peso $\gamma_j \beta_{u,i}$. A matriz M de um GWG com conjuntos quase-simétricos pode ser escrita na forma de (3.5).

$$M = \begin{bmatrix} A & \gamma_1 \beta & \gamma_2 \beta & \cdots & \gamma_c \beta \\ \gamma_1 \beta^T & B & 0 & \cdots & 0 \\ \gamma_2 \beta^T & 0 & B & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ \gamma_c \beta^T & 0 & \cdots & 0 & B \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

Exemplo 3.20. No GWG G da Figura 3.6 temos dois conjuntos quase-simétricos $S_1 = \{d, e, f\}$ e $S_2 = \{g, h, i\}$. Note que os vértices correspondentes a esses dois conjuntos não se ligam aos vértices de $G \setminus (S_1 \cup S_2)$ através de arestas com os mesmos pesos, mas sim através de arestas com pesos proporcionais. O vértice d é adjacente aos vértices b e c através de arestas com pesos $-\sqrt{2}$ e 1 , respectivamente, enquanto que o vértice g é adjacente a esses dois vértices através de arestas com pesos 2 e $-\sqrt{2}$, respectivamente. Portanto os fatores relativos entre os blocos β são $\gamma_1 = 1$ e

$\gamma_2 = -\sqrt{2}$, para

$$\beta = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

△

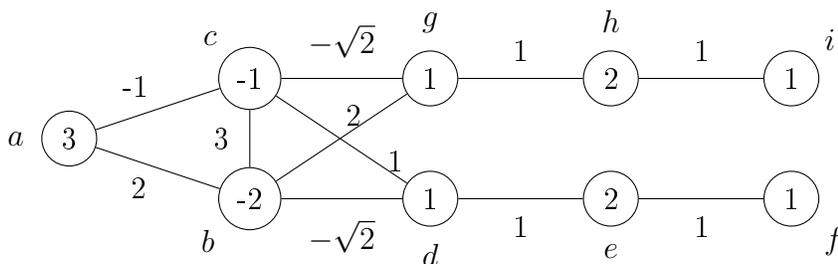


Figura 3.6: GWG com dois conjuntos quase-simétricos

Vamos considerar um GWG (G, p, ε) dado por um grafo $G(V, E)$ e funções peso p e ε . Se um par de vértices v_i e v_j não possui aresta os conectando, definimos $\varepsilon_{i,j} = 0$. Seja $\{S_k\}$ uma coleção de c conjuntos quasi-simétricos (ordenados) disjuntos, onde $S_k = \{h_1^{(k)}, h_2^{(k)}, \dots, h_r^{(k)}\}$ e $\gamma_k = \gamma_1 \frac{\varepsilon_{h_i^{(1)}, u}}{\varepsilon_{h_i^{(k)}, u}}$ para vértices $u \notin \cup S_k$ adjacentes a vértices de S_k (a escolha de $\gamma_1 \neq 0$ é arbitrária).

O Algoritmo 2 é apresentado em forma de pseudo-código e também em forma de texto. A demonstração da validade do algoritmo será dada no final dessa seção.

entrada: GWG (G, p, ε) com c conjuntos quase-simétricos $\{S_k\}$ de tamanho r

saída : GWG com o mesmo espectro

$\xi \leftarrow \sum_{i=1}^c \gamma_i^2;$

1 para toda aresta entre $h_i^{(1)} \in S_1$ e $u \notin (\cup S_k)$ **faça**

$\varepsilon_{h_i^{(1)},u} \leftarrow \frac{\sqrt{\xi}}{\gamma_1} \varepsilon_{h_i^{(1)},u};$

2 para toda aresta entre $h_i^{(k)} \in S_k$ e $u \notin S_k$ **faça**

$\varepsilon_{h_i^{(k)},u} \leftarrow 0$ para $2 \leq k \leq c;$

retorne GWG;

Algoritmo 2: Decomposição de quase-simetria

Quando um valor de ε passa de nulo para não nulo, ou vice-versa, devemos incluir a aresta correspondente no conjunto E , ou eliminá-la, respectivamente.

Dado um GWG G com c conjuntos quase-simétricos, no primeiro passo do Algoritmo 2, multiplica-se por $\frac{\sqrt{\xi}}{\gamma_1}$ o peso de todas as arestas entre S_1 e $G \setminus (\cup S_i)$. No segundo passo, eliminamos todas as arestas entre S_k e $G \setminus S_k$, para $2 \leq k \leq c$, desconectando G . Se todos os fatores relativos entre os blocos β forem iguais, ou seja, $\gamma_i = \gamma_j$, então teremos $\frac{\sqrt{\xi}}{\gamma_1} = \sqrt{c}$ (o fator do primeiro passo do Algoritmo 1).

Teorema 3.21. *O Algoritmo 2 transforma um GWG com $c \geq 1$ conjuntos quase-simétricos $\{S_k\}$ selecionados em um outro GWG com o mesmo espectro.*

Os Algoritmos 1 e 2 não são casos particulares um do outro, mas possuem uma interseção. Se um GWG com c conjuntos quase-simétricos $\{S_i\}$ for tal que: não há arestas diretas e cruzadas entre conjuntos S_i (bloco $C = 0$); e os fatores dos blocos β são todos iguais ($\gamma_i = \gamma_j$), então não haverá diferença na aplicação dos Algoritmos 1 e 2.

Exemplo 3.22. Ao aplicarmos o Algoritmo 2, para o GWG da Figura 3.6, os pesos das arestas entre S_1 e $G \setminus (S_1 \cup S_2)$ são multiplicados por $\frac{\sqrt{\xi}}{\gamma_1} = \frac{\sqrt{1+2}}{1} = \sqrt{3}$, enquanto que as arestas incidentes a apenas um vértice de S_2 são suprimidas. Além disso, não há alteração no peso dos vértices. O resultado final está esboçado na Figura 3.7. Podemos concluir que o espectro de G contém o conjunto $\sigma(B) = \{0, 1, 3\}$, proveniente do GWG de 3 vértices. \triangle

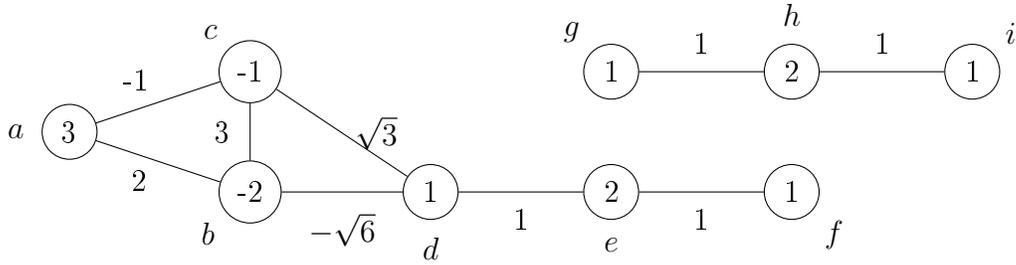


Figura 3.7: GWG decomposto com o mesmo espectro

A demonstração do Teorema 3.21 é consequência do resultado a seguir sobre autovalores de matrizes da forma (3.5). Nesse caso especial, restringimos a matriz relação entre os blocos B a um bloco de zeros ($C = 0$), mas relaxamos a condição de que os blocos A e B tenham sempre a mesma matriz relação.

Teorema 3.23. *Seja M uma matriz com a forma dada em (3.5), com $c \geq 1$ cópias do bloco B . Então*

- (i) $\sigma(B) \subseteq \sigma(M)$ com multiplicidade $c - 1$;
- (ii) $\sigma(M) \setminus \sigma^{(c-1)}(B) = \sigma(M')$ é o conjunto formado pelos $t + s$ autovalores restantes de M , onde $M' = \begin{bmatrix} A & \sqrt{\xi}\beta \\ \sqrt{\xi}\beta^T & B \end{bmatrix}$ e $\xi = \sum_{i=1}^c \gamma_i^2$.

Demonstração: A prova desse resultado é similar à demonstração do Teorema 3.14, por indução em c . Facilmente notamos que o resultado é verdadeiro para

$c = 1$. Supondo que ele também é verdadeiro para $c - 1$ cópias do bloco B , obtemos que $\sigma(M)$ é a união de $c - 2$ cópias de $\sigma(B)$ e o espectro da matriz

$$M^* = \begin{bmatrix} A & \gamma_1 \beta & \sqrt{\xi^*} \beta \\ \gamma_1 \beta^T & B & 0 \\ \sqrt{\xi^*} \beta^T & 0 & B \end{bmatrix},$$

onde $\xi^* = \sum_{i=2}^c \gamma_i^2$. Aplicando a Proposição 3.15 com $\gamma = \frac{\gamma_1}{\sqrt{\xi^*}}$, e fazendo com que $\sqrt{\xi^*} \beta$ faça o papel de matriz relativa entre os blocos A e B , obtemos que M^* possui espectro igual a $\sigma(M^{**}) \cup \sigma(B)$, onde

$$M^{**} = \begin{bmatrix} A & \sqrt{\gamma^2 + 1} \sqrt{\xi^*} \beta \\ \sqrt{\gamma^2 + 1} \sqrt{\xi^*} \beta^T & B \end{bmatrix}.$$

Como $\sqrt{\gamma^2 + 1} \sqrt{\xi^*} = \sqrt{\gamma_1^2 + \xi^*} = \sqrt{\xi}$, temos que $M^{**} = M'$. Somando o conjunto $\sigma(B)$ junto com as demais $c - 2$ cópias, concluimos o resultado. \square

Note que quando aplicamos o Teorema 3.14 para o caso $C = 0$, temos o caso particular do Teorema 3.23 para $\gamma_i = 1$. Em geral não podemos aplicar o resultado para matrizes com múltiplos de um bloco β e não matrizes relação C

nulas. Por exemplo, tome a matriz $\begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{bmatrix}$, onde $A = 0, B = 3, C = 1$ e as componentes múltiplas β são os números 1 e 2. O polinômio característico dessa matriz é $x^3 - 6x^2 + 3x + 11$, o qual não possui fatores inteiros, e nenhum dos seus autovetores atende a propriedade de ser da forma $(0, x, y)$.

Demonstração (Teorema 3.21): A prova desse resultado segue de maneira muito similar à demonstração do Teorema 3.11. A matriz M do GWG G com $c \geq 1$ conjuntos quase-simétricos tem a estrutura da matriz dada em (3.5). Aplicando o Algoritmo 2 em G , obtemos um GWG (disjunto) G^* cuja matriz tem a forma

$$M^* = \left[\begin{array}{cc|ccc} A & \sqrt{\xi}\beta & 0 & \cdots & 0 \\ \sqrt{\xi}\beta^T & B & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 0 & B & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & B \end{array} \right].$$

O espectro de G^* é $\sigma(M^*) = \sigma(M') \cup \sigma^{(c-1)}(B)$ onde $M' = \begin{bmatrix} A & \sqrt{\xi}\beta \\ \sqrt{\xi}\beta^T & B \end{bmatrix}$, e pelo Teorema 3.23, este também é o espectro de G . \square

A seguir seguem algumas aplicações dos Algoritmos 1 e 2 a certas famílias de grafos.

3.5 Aplicações

Nessa seção, vamos aplicar os Algoritmos 1 e 2 a fim de obter resultados a respeito do espectro de algumas classes de grafos.

3.5.1 Grafos com vértices simétricos

Aqui veremos uma propriedade do espectro de grafos que contêm uma clique ou coclique, tal que os vértices desse conjunto tenham vizinhança idêntica.

Um conjunto S com $c \geq 2$ vértices v_i é um conjunto de vértices simétricos se todos os vértices têm a mesma vizinhança fora do conjunto S e se o subgrafo induzido pelos vértices de S é o grafo completo (então S é uma clique) ou é o grafo trivial (então S é uma coclique). Mais especificamente, qualquer permutação dos rótulos dos vértices de S gera um automorfismo no grafo. Em particular, todos os vértices de S têm o mesmo grau.

Proposição 3.24. *Seja G um grafo e S um conjunto com c vértices simétricos de grau $\delta \geq 1$. Então os números λ dados na tabela abaixo são autovalores da respectiva matriz de G com multiplicidade pelo menos $c - 1$.*

Matriz	$G _S = K_c$	$G _S = \overline{K}_c$
$A(G)$	$\lambda = -1$	$\lambda = 0$
$L(G)$	$\lambda = \delta + 1$	$\lambda = \delta$
$Q(G)$	$\lambda = \delta - 1$	$\lambda = \delta$
$\mathcal{L}(G)$	$\lambda = 1 + \frac{1}{\delta}$	$\lambda = 1$
$D(G)$	$\lambda = -1$	$\lambda = -2$

Demonstração: Vamos considerar o GWG dado pelo grafo G , onde um vértice v_i tem peso p_i e uma aresta entre v_i e v_j tem peso $\varepsilon_{i,j}$. Para que tenhamos as matrizes A, L, Q, \mathcal{L} ou D como a matriz do GWG, precisamos definir os pesos adequadamente. Assim p_i é $0, \delta_i, \delta_i, 1$ ou 0 , respectivamente, onde δ_i é o número de vizinhos do vértice v_i , e $\varepsilon_{i,j}$ é igual a $1, -1, 1, \frac{1}{\sqrt{\delta_i \delta_j}}$ (quando existir uma aresta correspondente em G) ou a distância entre v_i e v_j , respectivamente, para que tenhamos as matrizes A, L, Q, \mathcal{L} ou D .

Como S é um conjunto com c vértices simétricos, cada um desses vértices forma um conjunto unitário S_i , o que, por sua vez, gera uma sequência de c conjuntos simétricos. Quando aplicamos o Algoritmo 1, o passo 2 altera o peso de $c - 1$ vértices para $p_i - \varepsilon_{i,j}$ e o passo 4 transforma esses vértices em vértices isolados. Portanto a matriz L , por exemplo, tem autovalores $\lambda = \delta - (-1) = \delta + 1$ ou $\lambda = \delta - 0 = \delta$ com multiplicidade (no mínimo) $c - 1$ se os vértices simétricos forem ou não adjacentes entre si, respectivamente. Obtemos o resultado de maneira similar para as matrizes A, Q e \mathcal{L} . Para a matriz distância D , a distância entre dois vértices simétricos é 1 ou 2, se eles forem ou não adjacentes, respectivamente. \square

O seguinte corolário é um resultado bem conhecido sobre a multiplicidade de certos autovalores de acordo com o número de vértices pendentes.

Corolário 3.25. *Um grafo G com p vértices pendentes adjacentes a um conjunto de s vizinhos tem (no mínimo) $p - s$ autovalores iguais a $0, 1, 1, 1$ ou -2 , em relação às matrizes A, L, Q, \mathcal{L} ou D , respectivamente.*

Exemplo 3.26. Considere o grafo G da Figura 3.8, construído a partir de um grafo completo K_5 e um grafo trivial $\overline{K_3}$, cujos vértices são todos adjacentes a um novo vértice v , exceto por um vértice do grafo completo K_5 . Como é fácil de perceber, os três vértices pendentes de G são vértices simétricos que formam uma coclique. Também, temos uma clique de tamanho 5, porém esses cinco vértices não formam um conjunto de 5 vértices simétricos pois a vizinhança não é igual para todos os vértices. O que de fato ocorre é que os quatro vértices da clique que são adjacentes a v formam um conjunto de vértices simétricos.

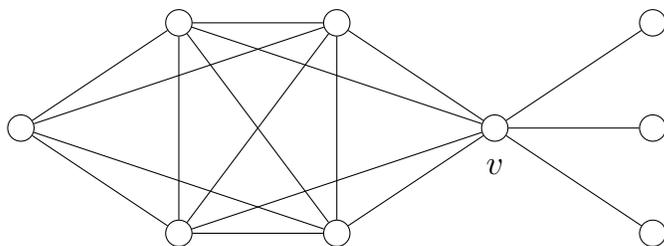


Figura 3.8: Grafo G com dois conjuntos de vértices simétricos

Para as diversas matrizes associadas ao grafo G , usando a Proposição 3.24 podemos concluir que $\{0^{(2)}, -1^{(3)}\} \subset \sigma_A(G)$, $\{6^{(3)}, 1^{(2)}\} \subset \sigma_L(G)$, $\{4^{(3)}, 1^{(2)}\} \subset \sigma_Q(G)$, $\{1, 2^{(3)}; 1^{(2)}\} \subset \sigma_{\mathcal{L}}(G)$ e $\{-1^{(3)}, -2^{(2)}\} \subset \sigma_D(G)$. Nesse caso temos três pendentes e apenas um vértice vizinho de pendentes, assim podemos garantir a existência de no mínimo dois autovalores relacionados a pendentes, como exposto no Corolário 3.25. \triangle

3.5.2 Grafos threshold

Grafos Threshold são uma família de grafos que podem possuir muitos vértices simétricos, e portanto são candidatos a gerarem GWGs com conjuntos simétricos de vértices para a aplicação do Algoritmo 1. Há muitas maneiras equivalentes de se definir um grafo threshold (veja o livro de Mahadev e Peled [24] para mais detalhes), mas utilizaremos aquela dada por uma sequência binária.

Definição 3.27. *Dada uma sequência finita com n elementos $\{a_i\}$, tal que $a_i = 0$ ou 1 , o grafo threshold associado a $\{a_i\}$ é o grafo de n vértices construído recursivamente, iniciando-se com um grafo vazio e adicionando-se:*

1. *um vértice isolado rotulado de i , se $a_i = 0$;*
2. *um vértice rotulado de i , adjacente a todos os vértices com rótulo menor que i , se $a_i = 1$.*

Se o vértice i é tal que $a_i = 1$, chamamos esse vértice de vértice do tipo 1; caso contrário, se $a_i = 0$, chamamos de vértice do tipo 0. Geralmente estamos interessados em grafos conexos, assim a sequência associada ao grafo threshold deve finalizar com $a_n = 1$. Além disso, não há distinção entre a_1 ser 0 ou 1, embora o valor 0 é usualmente escolhido para iniciar a sequência. Para o nosso propósito de encontrar vértices simétricos, a escolha $a_1 = a_2$ é a mais conveniente.

Uma propriedade interessante de grafos threshold é que podemos obter o grau do vértice i (δ_i) apenas olhando para a sequência binária. Se o vértice i é do tipo 1, então ele é adjacente a todos os vértices j , para $j < i$, e a todos os vértices k do tipo 1, para $k > i$. Mas, se o vértice i é um vértice do tipo 0, então ele é

adjacente apenas aos vértices do tipo 1 com rótulo $k > i$. Portanto temos que

$$\delta_i = (i - 1)a_i + \sum_{j=i+1}^n a_j.$$

Como estamos interessados no espectro do grafo, vamos considerar o GWG dado por um grafo threshold e uma escolha de pesos correspondente a uma das matrizes relativas a grafos em questão: A, L, Q ou \mathcal{L} (ou mais geralmente, uma matriz laplaciana perturbada).

Dada uma sequência $\{a_i\}$ com n elementos, seja B_j o conjunto de vértices representados pelo j -ésimo bloco com o mesmo valor na sequência binária. Mais especificamente, B_1 é o conjunto de vértices representados pelo primeiro bloco com o mesmo símbolo binário; B_2 é o conjunto de vértices do segundo bloco; B_r é o conjunto do último bloco, onde $r - 1$ é o número de encontros 01 ou 10 na sequência $\{a_i\}$. Dizemos que $\{B_j\}$ é a *partição em blocos (equitable partition)* da sequência $\{a_i\}$. Seja $\{q_j\}$ a *sequência de quantidades* de elementos de cada bloco de 0's e 1's, isto é $q_j = |B_j|$. Assim, podemos escrever a sequência $\{a_i\}$ na forma mais compacta $\{b_i^{q_i}\}$. Por exemplo, a sequência binária 001110011 pode ser escrita como $0^21^30^21^2$.

A partir desse momento, vamos considerar a seguinte distribuição de pesos para um GWG $G = (T, p, \varepsilon)$ dado por um grafo threshold T :

- (A) todos os vértices no conjunto B_i têm peso p_i ;
- (B) todas as arestas entre um vértice de B_i e um vértice de B_j têm peso $\varepsilon_{i,j}$, para $i \leq j$.

No caso de $b_j = 0$, temos que $\varepsilon_{i,j} = 0$ para todo índice $i \leq j$, pois os vértices em B_j não são adjacentes a nenhum vértice de blocos B_i , com $i < j$,

inclusive para $i = j$. Com esses pesos atribuídos, somos capazes de estabelecer o seguinte resultado sobre vértices simétricos no GWG.

Lema 3.28. *Se $u, v \in B_i$, então u é simétrico a v . Além disso, cada vértice de B_i determina um conjunto simétrico unitário.*

Demonstração: Como u e v têm o mesmo peso, precisamos apenas verificar se eles possuem os mesmos vizinhos. Com efeito, se $w \in B_j$, então ambas arestas, aquela entre w e u e aquela entre w e v , têm o mesmo peso $\varepsilon_{i,j}$ (ou $\varepsilon_{j,i}$) se $i \leq j$ (ou $j \leq i$). \square

Agora temos todas as condições satisfeitas para aplicar o Algoritmo 1: os conjuntos simétricos. A ideia é aplicar o algoritmo r vezes no GWG, cada vez em um conjunto B_i . Assim, reduzimos o conjunto B_i para apenas um representante, tal como uma contração, produzindo vértices isolados, e sem mudar o espectro.

Proposição 3.29. *Seja $G = (T, p, \varepsilon)$ o GWG dado pelo grafo threshold T com n vértices associado à sequência $\{b_i^{q_i}\}$, e pesos dados por p e ε , satisfazendo (A) e (B). Então, para qualquer $1 \leq k \leq r$, G tem o mesmo espectro do que o GWG que é uma união disjunta de:*

1. um GWG dado pelo grafo threshold com $n - q_k + 1$ vértices associado à sequência binária $\{b_i^{q'_i}\}$ e pesos dados por p' e ε' tais que:

$$(a) \quad q'_k = 1 \text{ e } q'_j = q_j \text{ para } j \neq k;$$

$$(b) \quad p'_k = p_k + (q_k - 1) \cdot \varepsilon_{k,k} \text{ e } p'_j = p_j \text{ para } j \neq k;$$

$$(c) \quad \varepsilon'_{i,j} = \sqrt{q_k} \cdot \varepsilon_{i,j} \text{ se } i = k \text{ ou } j = k; \text{ e } \varepsilon'_{i,j} = \varepsilon_{i,j} \text{ se } i, j \neq k.$$

2. $q_k - 1$ vértices isolados com peso $p_k - \varepsilon_{k,k}$.

Note que se $q_k = 1$ então a Proposição 3.29 não nos dá qualquer informação a respeito do espectro do GWG pois a união disjunta nos dá o próprio GWG G . Além disso, o peso dos vértices da união disjunta é diferente do seu peso no GWG original se, e somente se, estivermos aplicando a proposição para um valor de k tal que $b_k = 1$ e $q_k > 1$.

Exemplo 3.30. Considere o GWG dado pelo grafo threshold com sequência binária $0^21^30^21^2$ onde todos as arestas têm peso 1 e os vértices têm peso igual ao seu grau. Quando aplicamos a Proposição 3.29 com $k = 2$, obtemos um GWG desconexo que é a união de: um GWG dado por um grafo threshold com sequência binária $0^21^10^21^2$ cujas arestas têm peso igual ao peso das arestas do GWG original, exceto aquelas arestas incidentes ao vértice de rótulo 3; e dois vértices isolados com peso 5. Na Figura 3.9 temos a representação do GWG original e da união disjunta após a aplicação da proposição, ambos com o mesmo espectro (as arestas sem indicação de peso devem ser consideradas com peso 1). \triangle

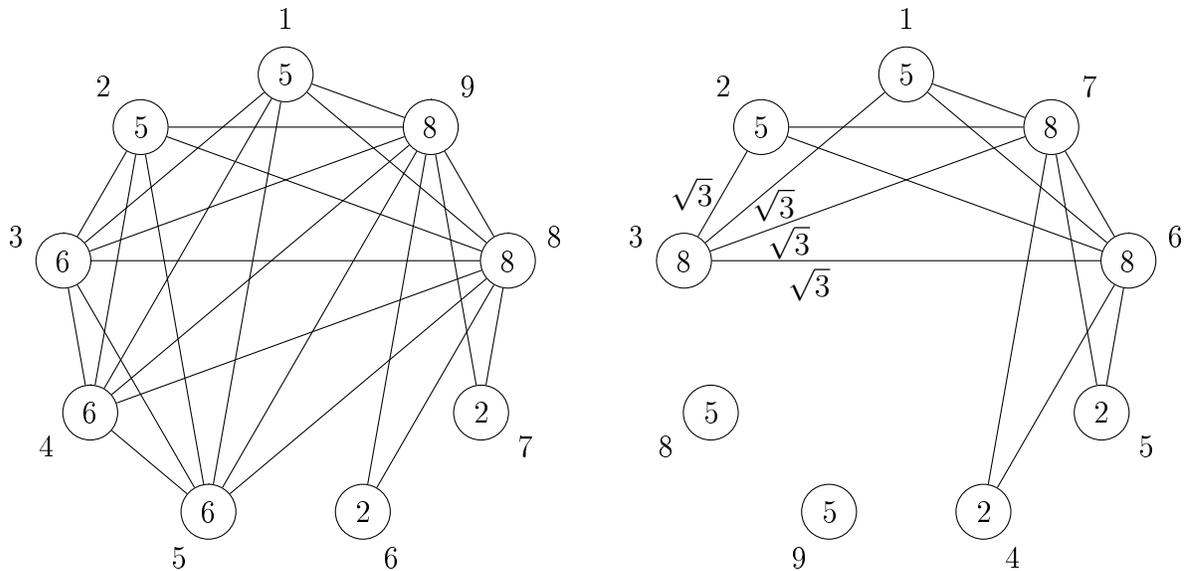


Figura 3.9: GWG antes e após a aplicação da Proposição 3.29 para $k = 2$

Demonstração (Proposição 3.29): Como o conjunto de vértices B_k consiste em q_k vértices simétricos, podemos aplicar o Algoritmo 1 considerando que cada vértice é um conjunto simétrico unitário. Escolhemos um vértice v em B_k e multiplicamos o peso de todas as arestas entre v e vértices que não pertencem a B_k por $\sqrt{q_k}$. O segundo passo consiste em alterar o peso dos vértices se e somente se $b_k = 1$, ou seja, quando há arestas diretas entre os vértices de B_k . Em caso afirmativo, o peso do vértice v deve ser acrescido de $(q_k - 1) \cdot \varepsilon_{k,k}$ enquanto que os pesos dos outros vértices de B_k devem ser decrescidos de $\varepsilon_{k,k}$. No quarto passo, suprimimos as arestas incidentes aos $q_k - 1$ vértices de B_k diferentes de v , se houver. Portanto, além dos vértices isolados, finalizamos com um GWG dado por um grafo threshold com sequência similar ao GWG original, exceto pelo k -ésimo bloco, que agora possui só um elemento. \square

Agora aplicamos a Proposição 3.29 para todos os índices $1 \leq k \leq r$, a fim de obter o resultado enunciado a seguir.

Teorema 3.31. *O GWG (T, p, ε) dado por um grafo threshold T com n vértices associado à sequência binária $\{b_i^{q_i}\}$ de tamanho r , e pesos p e ε satisfazendo (A) e (B), tem o mesmo espectro do que a união disjunta de:*

1. *um GWG dado por um grafo threshold com r vértices associado à sequência $\{b_i^1\}$ e pesos dados por p' e ε' , tal que:*
 - (a) *o vértice i tem peso $p'_i = p_i + (q_i - 1)\varepsilon_{i,i}$;*
 - (b) *a aresta entre vértices $i < j$ tem peso $\varepsilon'_{i,j} = \sqrt{q_i \cdot q_j}\varepsilon_{i,j}$;*
2. *uma coleção de $n - r$ vértices isolados que, para $1 \leq i \leq r$, consiste em uma união de: $(q_i - 1)$ vértices isolados com peso $p_i - \varepsilon_{i,i}$.*

Demonstração: Para cada índice $1 \leq i \leq r$ aplicamos a Proposição 3.29 se $q_i \geq 2$. Assim a cada passo, removemos $q_i - 1$ vértices de B_i alterando q_i para 1, tornando esses demais $q_i - 1$ vértices em vértices isolados com peso p_i se $b_i = 0$, ou peso $p_i - \varepsilon_{i,i}$ se $b_i = 1$. O peso do vértice restante em B_i é acrescido em $(q_i - 1) \cdot \varepsilon_{i,i}$ se, e somente se, $b_i = 1$. Durante o passo i , o peso das arestas é alterado somente para índices i : o valor de $\varepsilon_{i,j}$ (ou $\varepsilon_{j,i}$) é multiplicado por $\sqrt{q_i}$, se $i < j$ (ou se $j < i$). Ao final, após os r passos, qualquer aresta restante incidente a vértices de índice $i < j$ teve seu peso alterado exatamente duas vezes, a saber nos passos i e j , e portanto o peso dessa aresta agora é $\sqrt{q_i \cdot q_j} \varepsilon_{i,j}$. \square

Exemplo 3.32. Para o GWG dado pelo grafo threshold com sequência binária $0^21^30^21^2$ (Exemplo 3.30) e todas as arestas com peso 1 e vértices com peso igual ao seu grau, podemos obter o seu espectro através do GWG com 4 vértices dado pelo grafo threshold com sequência 0101 e 5 vértices isolados, cujos pesos estão ilustrados na Figura 3.10.

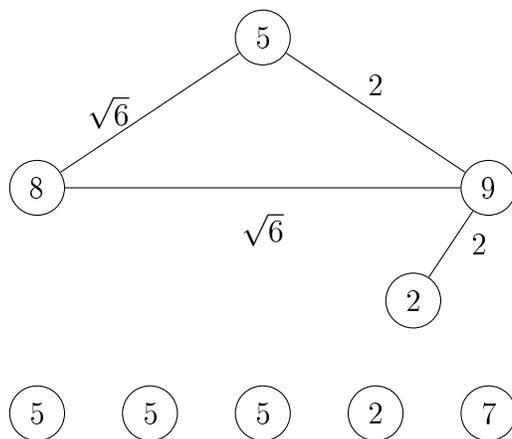


Figura 3.10: GWG obtido com o Teorema 3.31

Note que o peso dos vértices isolados são autovalores do GWG original e também autovalores da matriz laplaciana sem sinal (Q) do grafo threshold $0^21^30^21^2$.

Os 4 autovalores restantes da matriz laplaciana sem sinal são autovalores da matriz (M') da componente de 4 vértices do GWG:

$$M' = \begin{bmatrix} 5 & \sqrt{6} & 2 & 0 \\ \sqrt{6} & 8 & \sqrt{6} & 0 \\ 2 & \sqrt{6} & 9 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}.$$

△

Os autovalores das matrizes A , Q , L (ou qualquer matriz laplaciana perturbada) e \mathcal{L} de um grafo threshold, além dos autovalores triviais (aqueles obtidos pelas cliques e cocliques), podem ser obtidos da matriz de um GWG dado por um grafo threshold com apenas r vértices, onde r é o número de blocos na sequência do threshold. Agora só precisamos aplicar o Teorema 3.31 para os pesos correspondentes a fim de que a matriz do GWG seja a matriz desejada associada ao grafo. No caso da matriz de adjacência, por exemplo, o espectro é a união do espectro da matriz do GWG cujos vértices têm peso 0 se forem vértices do tipo 0, ou peso $q_i - 1$ se forem vértices do tipo 1, e as arestas incidentes a vértices do tipo 1 têm peso $\sqrt{q_i \cdot q_j}$; além de um multiconjunto com elementos -1 e 0, os autovalores triviais.

Exemplo 3.33. Considere o grafo threshold T associado à sequência $1^2 0^3 1^4 0^1 1^2$. Estamos interessados em encontrar o espectro das matrizes A , L , Q e \mathcal{L} de T . Usando a distribuição de pesos p e ε satisfazendo (A) e (B), o Teorema 3.31 nos informa que o espectro do GWG (T, p, ε) é igual à união do espectro de: 7 vértices isolados dos quais um tem peso $p_1 - \varepsilon_{1,1}$, dois têm peso p_2 , três têm $p_3 - \varepsilon_{3,3}$ e o último tem peso $p_5 - \varepsilon_{5,5}$; e um GWG de 5 vértices dado pelo grafo threshold associado à sequência 10101 representado na Figura 3.11.

Dessa forma podemos afirmar que $\sigma_A(T) = \{0^{(2)}, -1^{(5)}\} \cup \sigma(M_A)$,
 $\sigma_L(T) = \{12, 11^{(3)}, 8, 6^{(2)}\} \cup \sigma(M_L)$, $\sigma_Q(T) = \{10, 9^{(3)}, 6^{(3)}\} \cup \sigma(M_Q)$ e
 $\sigma_{\mathcal{L}}(T) = \{\frac{8}{7}, \frac{11}{10}^{(3)}, \frac{12}{11}, 1^{(2)}\} \cup \sigma(M_{\mathcal{L}})$, onde

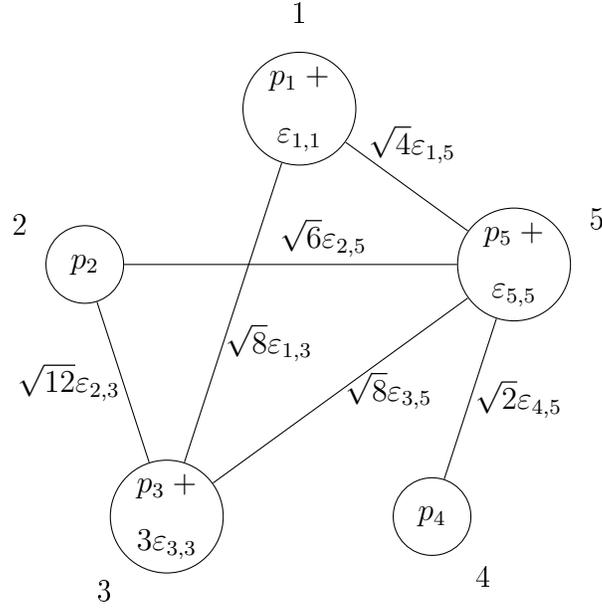


Figura 3.11: Componente do GWG obtido após aplicação do Teorema 3.31

$$M_A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \sqrt{8} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & \sqrt{12} & 0 & \sqrt{6} \\ \sqrt{8} & \sqrt{12} & 3 & 0 & \sqrt{8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 2 & \sqrt{6} & \sqrt{8} & \sqrt{2} & 1 \end{bmatrix}, \quad M_L = \begin{bmatrix} 6 & 0 & -\sqrt{8} & 0 & -2 \\ 0 & 6 & -\sqrt{12} & 0 & -\sqrt{6} \\ -\sqrt{8} & -\sqrt{12} & 7 & 0 & -\sqrt{8} \\ 0 & 0 & 0 & 2 & -\sqrt{2} \\ -2 & -\sqrt{6} & -\sqrt{8} & -\sqrt{2} & 10 \end{bmatrix},$$

$$M_Q = \begin{bmatrix} 8 & 0 & \sqrt{8} & 0 & 2 \\ 0 & 6 & \sqrt{12} & 0 & \sqrt{6} \\ \sqrt{8} & \sqrt{12} & 13 & 0 & \sqrt{8} \\ 0 & 0 & 0 & 2 & \sqrt{2} \\ 2 & \sqrt{6} & \sqrt{8} & \sqrt{2} & 12 \end{bmatrix}, \quad M_{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} \frac{6}{7} & 0 & -\sqrt{\frac{4}{35}} & 0 & -\sqrt{\frac{4}{77}} \\ 0 & 1 & -\sqrt{\frac{1}{5}} & 0 & -\sqrt{\frac{1}{11}} \\ -\sqrt{\frac{4}{35}} & -\sqrt{\frac{1}{5}} & \frac{7}{10} & 0 & -\sqrt{\frac{4}{55}} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -\sqrt{\frac{1}{11}} \\ -\sqrt{\frac{4}{77}} & -\sqrt{\frac{1}{11}} & -\sqrt{\frac{4}{55}} & -\sqrt{\frac{1}{11}} & \frac{10}{11} \end{bmatrix}.$$

△

O caso do espectro (da matriz de adjacência) de grafos threshold já possui alguns resultados. Em [33](Lema 7.7) Sciriha e Farrugia encontram indiretamente uma matriz Q com entradas inteiras tal que seu espectro é igual ao espectro do grafo, exceto pelos autovalores -1 e 0 . Esta matriz Q satisfaz $AX = XQ$, onde A é a matriz de adjacência e X é a matriz cujas colunas são vetores característicos dos conjuntos B_j (partição de blocos). A matriz do GWG obtida pelo Teorema 3.31 tem a mesma ordem de Q , mas suas entradas podem não ser inteiras.

Matriz distância

A matriz distância D de um grafo é igual à matriz de um GWG dado por um grafo completo. No caso dos grafos threshold, o GWG associado à matriz distância pode ser vista como um GWG dado por um grafo threshold onde todos os vértices são do tipo 1, porém há blocos de 1 com propriedades distintas.

Dado um grafo threshold conexo associado à sequência $\{b_i^{q_i}\}$ (o último elemento deve ser 1) com partição de blocos $\{B_i\}$, o GWG associado a matriz distância satisfaz (A) e (B), contudo $\varepsilon_{i,j} = 2$ (e não 0) se $i \leq j$ e $b_j = 0$. A Proposição 3.29 e o Teorema 3.31 continuam válidos, com a ressalva de que há arestas entre vértices do tipo 0 no grafo threshold, formando um grafo completo.

Exemplo 3.34. O espectro da matriz distância D do grafo threshold T associado à sequência $0^3 1^4 0^1 1^2$ pode ser calculado usando o Teorema 3.31. Na Figura 3.12 (à esquerda), temos o GWG associado a D . As arestas tracejadas são as arestas adicionadas a T para torná-lo um grafo completo, todas estas com peso igual a 2. As arestas do próprio threshold têm peso igual a 1. À direita na Figura 3.12, temos o GWG desconexo cujo espectro é igual ao espectro de D . Se M' denota a matriz do GWG de quatro vértices, então $\sigma_D(T) = \{-1^{(4)}, -2^{(2)}\} \cup \sigma(M')$. \triangle

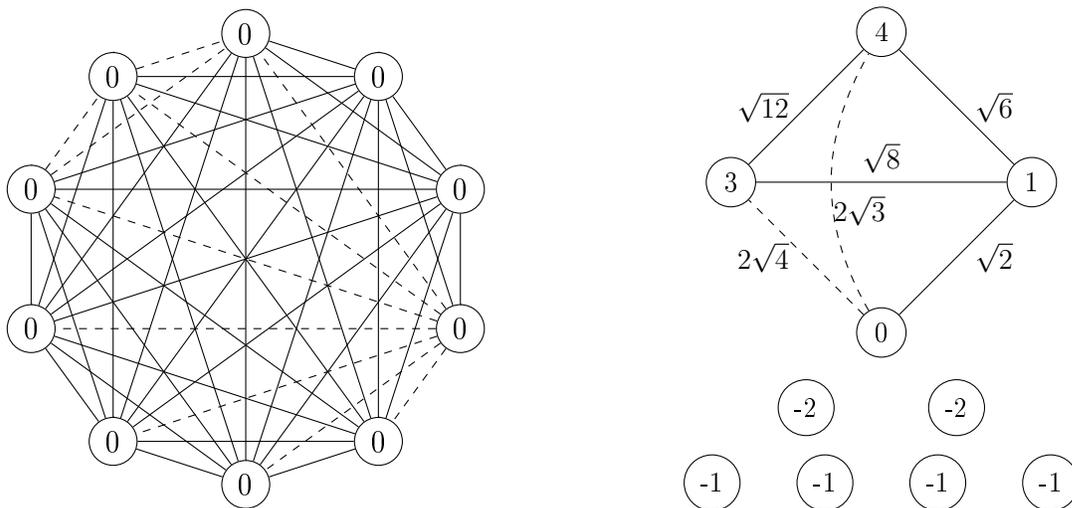


Figura 3.12: GWG associado à matriz distância do grafo threshold T

3.5.3 Árvores de Bethe generalizadas

As árvores binárias tem sido usadas extensivamente em Ciência da Computação como estrutura de dados. Um grafo de uma árvore binária consiste em um vértice raiz e na condição de que cada vértice da árvore tenha no máximo dois filhos. Em [28], Rojo estudou o espectro laplaciano de árvores binárias perfeitas, decompondo o conjunto de autovalores em uma união de conjuntos menores. Por outro lado, há o conceito mais geral de árvore k -árias, onde cada vértice pode ter no máximo k filhos. Casos especiais ocorrem quando $k = 1, 2$ e 3 , que nos dão caminhos, árvores binárias e árvores ternárias, respectivamente.

Uma árvore \mathbf{v} -ária, onde \mathbf{v} é um vetor de h posições com entradas inteiras e positivas, é uma outra maneira de se ver árvores k -árias. Nesse caso, os vértices de cada nível podem ter no máximo v_i filhos. Se $k = \max\{v_i\}$ então a árvore \mathbf{v} -ária é uma árvore k -ária com restrições no número de filhos para cada nível.

Definição 3.35. *Seja \mathbf{v} um vetor de \mathbb{N}^{*h} , com $h \geq 0$. Uma árvore \mathbf{v} -ária perfeita com h níveis satisfaz:*

1. *há um vértice (a raiz) no nível 0;*
2. *cada vértice do nível $1 \leq i \leq h - 1$ é adjacente a exatamente um vértice no nível $i - 1$ (seu pai) e a exatamente v_i vértices no nível $i + 1$ (seus filhos);*
3. *um vértice no nível h é adjacente somente a seu pai.*

Estas árvores \mathbf{v} -árias perfeitas são conhecidas com *árvores de Bethe generalizadas* (*generalized Bethe trees*). Nessa seção, optamos por usar o nome \mathbf{v} -ária para que a estrutura da árvore seja facilmente visível e seja fácil diferenciá-las por seus vetores. Vamos considerar o caso especial quando $h = 0$ e $\mathbf{v} = ()$ como o grafo com apenas um vértice, a árvore \mathbf{v} -ária de 0 níveis. Facilmente nota-se que a quantidade de vértices de uma árvore \mathbf{v} -ária perfeita com h níveis é $n = 1 + \sum_{i=1}^h \prod_{j=1}^i v_j$.

Uma árvore \mathbf{v} -ária perfeita tal que $\mathbf{v} = k(1, 1, \dots, 1)$ também é uma árvore k -ária perfeita. Rojo e Robbiano [32] encontraram o espectro da matriz de adjacência e laplaciana de tais grafos, e, mais tarde, Rojo e Medina [31] resolveram o problema para árvores de Bethe generalizadas com pesos nas arestas, novamente para o espectro das matrizes A e L . Os resultados dos teoremas a seguir generalizam o resultados desses autores.

Para que possamos construir o GWG dado por uma árvore \mathbf{v} -ária perfeita, tal que ela possa nos dar alguma informação a respeito do espectro das matrizes associadas ao grafo (em particular algumas matrizes laplacianas perturbadas), é preciso uma distribuição de pesos muito particular satisfeita por A, L, Q e \mathcal{L} .

Dado um vetor \mathbf{v} em \mathbb{N}^{*h} , vamos considerar os pesos do GWG dado pela árvore \mathbf{v} -ária perfeita da seguinte maneira, onde o vetor $p \in \mathbb{R}^{h+1}$ é indexado de 0 até h e o vetor $\varepsilon \in \mathbb{R}^h$ é indexado de 1 a h :

- (A) cada vértice do nível i tem peso p_i ;
- (B) cada aresta entre vértices dos níveis $i - 1$ e i tem peso ε_i .

No caso de árvores \mathbf{v} -árias perfeitas e a distribuição de pesos conveniente mencionada, podemos facilmente encontrar conjuntos simétricos que podem ser utilizados pelo Algoritmo 1 para decompor o GWG sem alterar o seu espectro. Dado vértices irmãos no nível i , isto é, vértices adjacentes ao mesmo vértice no nível $i - 1$, as componentes conexas contendo um desses vértices irmãos após removermos o vértice no nível $i - 1$ são conjuntos simétricos de vértices, se uma ordem conveniente for escolhida para os vértices.

Exemplo 3.36. O GWG associado com a árvore \mathbf{v} -ária perfeita com $\mathbf{v} = (4, 2, 3)$, $p = (-2, 1, 4, 1)$ e $\varepsilon = (\pi, -1, 2)$ está ilustrada na Figura 3.13. Note que cada conjunto (ordenado) com 4 vértices composto por um vértice u do nível 2 e seus três filhos é simétrico ao conjunto similar composto pelo irmão do vértice u e seus três filhos. △

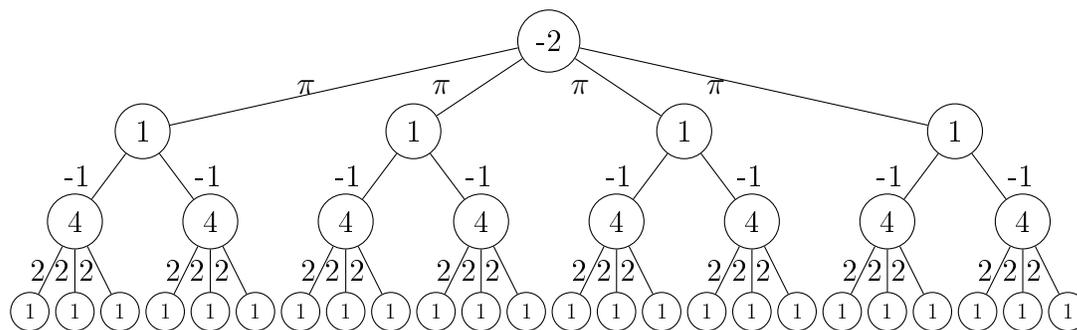


Figura 3.13: GWG da árvore \mathbf{v} -ária com pesos p e ε

Em particular, p_h é autovalor do GWG com multiplicidade no mínimo $q_h = (v_h - 1) \prod_{j=1}^{h-1} v_j$.

Antes de demonstrarmos o Teorema 3.37, um lema a respeito das árvores \mathbf{v} -árias perfeitas será de grande ajuda. Ele permite dividir uma árvore \mathbf{v} -ária em partes menores, uma com a mesma altura (número de níveis) e outras com altura menor, tudo isso sem alterar o espectro.

Lema 3.39. *Sejam $\mathbf{v} \in \mathbb{N}^{*h}$ e T a árvore \mathbf{v} -ária perfeita com h níveis. O espectro do GWG (T, p, ε) com pesos p e ε satisfazendo (A) e (B), para qualquer índice $1 \leq i \leq h$, é a união do espectro de:*

1. o GWG dado pela árvore \mathbf{v}' -ária perfeita, com $\mathbf{v}' \in \mathbb{N}^{*h}$ e pesos p e ε' , onde $\mathbf{v}' = (v_1, \dots, v_{i-1}, 1, v_{i+1}, \dots, v_h)$ e $\varepsilon' = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_{i-1}, \sqrt{v_i} \varepsilon_i, \varepsilon_{i+1}, \dots, \varepsilon_h)$;
2. $(v_i - 1) \cdot \prod_{j=1}^{i-1} v_j$ (ou $(v_1 - 1)$ se $i = 1$) cópias do GWG dado pela árvore \mathbf{w} -ária perfeita com pesos $(p_i, p_{i+1}, \dots, p_h) \in \mathbb{R}^{h-i+1}$ e $(\varepsilon_{i+1}, \varepsilon_{i+2}, \dots, \varepsilon_h) \in \mathbb{R}^{h-i}$, onde $\mathbf{w} = (v_{i+1}, v_{i+2}, \dots, v_h) \in \mathbb{N}^{*h-i}$.

Exemplo 3.40. Considere o GWG do Exemplo 3.36. Ao aplicar o Lema 3.39 para $i = 2$, obtemos $\mathbf{v}' = (4, 1, 3)$, $p = (-2, 1, 4, 1)$ e $\varepsilon = (\pi, -\sqrt{2}, 2)$, e que o espectro do GWG original é igual ao espectro da união de cinco GWGs menores, um deles com o mesmo número de níveis (três), mas os vértices no nível $i - 1 = 1$ têm somente $v'_2 = 1$ filho, cada um conectado ao seu pai com uma aresta cujo peso é $\sqrt{v_2} \varepsilon_2 = -\sqrt{2}$.

Os demais $(2 - 1) \cdot 4 = 4$ GWGs são cópias do GWG dado pela árvore \mathbf{w} -ária com um nível cujos pesos dos vértices são dados pelo vetor $(4, 1) \in \mathbb{R}^2$ e cujos pesos das arestas são dados pelo vetor $(2) \in \mathbb{R}^1$, onde $\mathbf{w} = (3) \in \mathbb{N}^{*1}$. Este GWG menor é um subGWG induzido do GWG original. A união de GWGs está ilustrada na Figura 3.14. △

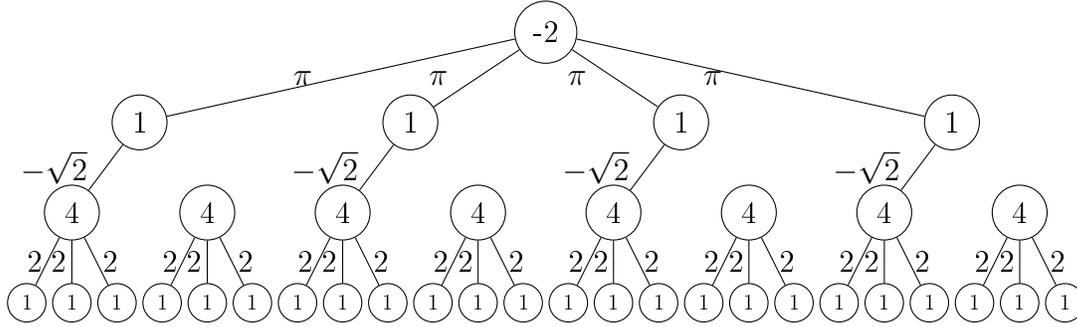


Figura 3.14: Aplicação do Lema 3.39 para $i = 2$

Demonstração (Lema 3.39): Vamos fixar um índice i , com $1 \leq i \leq h$. No nível $i - 1$ temos exatamente $\prod_{j=1}^{i-1} v_j$ vértices (ou 1 se $i = 1$) no GWG dado pela árvore \mathbf{v} -ária, e cada um desses vértices tem exatamente v_i filhos no nível i . Considere u um vértice no nível $i - 1$ e u_j , para $1 \leq j \leq v_i$, os filhos de u . Seja S_j o conjunto de vértices das componentes conexas do GWG contendo o vértice u_j obtido ao removermos o vértice u do GWG. Estes conjuntos S_j são conjuntos simétricos (se escolhermos um ordenamento adequado) devido a distribuição dos pesos, e como não há arestas ligando conjuntos S_j distintos, estes também são conjuntos quase-simétricos. Assim podemos aplicar tanto o Algoritmo 1 como o Algoritmo 2. Pelo método, o peso da aresta entre u e u_1 é multiplicada por $\sqrt{v_i}$, enquanto que as arestas entre u e u_j , para $2 \leq j \leq v_i$, são suprimidas. Todos os vértices permanecem com o mesmo peso, pois não há arestas entre os conjuntos simétricos.

Repetimos este processo para todos os vértices do nível $i - 1$ e assim obtemos um GWG decomposto, que possui o mesmo espectro do que o GWG original. Cada vez que aplicamos um dos algoritmos, produzimos $v_i - 1$ GWGs dados pela árvore \mathbf{w} -ária perfeita com pesos $(p_i, p_{i+1}, \dots, p_h) \in \mathbb{R}^{h-i+1}$ e $(\varepsilon_{i+1}, \varepsilon_{i+2}, \dots, \varepsilon_h) \in \mathbb{R}^{h-i}$, onde $\mathbf{w} = (v_{i+1}, v_{i+2}, \dots, v_h) \in \mathbb{N}^{*h-i}$; além de diminuir para 1 o número de filhos dos vértices no nível $i - 1$.

Após todo o processo, temos $(v_i - 1) \cdot \prod_{j=1}^{i-1} v_j$ (ou $(v_1 - 1)$ se $i = 1$) cópias do GWG dado pela árvore \mathbf{w} -ária perfeita e um GWG dado pela árvore \mathbf{v} -ária perfeita, similar ao GWG original onde v_i e ε_i são substituídos por 1 e $\sqrt{v_i}\varepsilon_i$, respectivamente. \square

Agora estamos prontos para provar o Teorema 3.37.

Demonstração (Teorema 3.37): A prova é por indução em h , o número de níveis. Se $h = 0$ então o GWG é um único vértice com peso p_0 e o resultado é trivial. Se $h = 1$, pelo Lema 3.39 usando $i = 1$, obtemos o resultado.

Suponha que o resultado seja verdadeiro para qualquer valor menor do que h . Dado um GWG associado a uma árvore \mathbf{v} -ária perfeita de h níveis e pesos $p \in \mathbb{R}^{h+1}$ e $\varepsilon \in \mathbb{R}^h$, aplicamos o Lema 3.39 com $i = 1$ e assim obtemos: um GWG dado por uma árvore \mathbf{u} -ária perfeita onde $\mathbf{u} = (1, v_2, \dots, v_h) \in \mathbb{N}^{*h}$ e pesos p e $(\sqrt{v_1}\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_h)$; e $(v_1 - 1)$ cópias do GWG dado pela árvore $\mathbf{w}^{(2)}$ -ária, onde $\mathbf{w}^{(2)} = (v_2, \dots, v_h) \in \mathbb{N}^{*h-1}$, e pesos $(p_1, \dots, p_h) \in \mathbb{R}^h$ e $(\varepsilon_2, \dots, \varepsilon_h) \in \mathbb{R}^{h-1}$. Podemos aplicar o Lema 3.39 repetidamente no GWG de h níveis variando i entre 2 e h para obter, ao final:

1. um GWG dado pela árvore $\mathbf{1}$ -ária com h níveis, vértices com pesos p e arestas com peso $(\sqrt{v_1}\varepsilon_1, \sqrt{v_2}\varepsilon_2, \dots, \sqrt{v_h}\varepsilon_h)$, cuja matriz é $S = S_0$;
2. $(v_i - 1)$ cópias do GWG dado pela árvore $\mathbf{w}^{(i+1)}$ -ária perfeita com pesos $(p_i, \dots, p_h) \in \mathbb{R}^{h-i+1}$ e $(\varepsilon_{i+1}, \dots, \varepsilon_h) \in \mathbb{R}^{h-i}$, onde $\mathbf{w}^{(i+1)} = (v_{i+1}, \dots, v_h) \in \mathbb{N}^{*h-i}$, para cada índice $1 \leq i \leq h$, cuja matriz é S_i .

Para estes GWGs com menos de h níveis podemos usar a hipótese de indução. Para $1 \leq i \leq h$ um GWG associado a $\mathbf{w}^{(i+1)}$ tem o mesmo espectro do que a união de:

$q_j^{(i+1)}$ cópias do GWG dado pela árvore $\mathbf{1}$ -ária perfeita, com $h - i - j$ níveis, e pesos $p' = (p_{i+j}, p_{i+j+1}, \dots, p_h)$ e $\varepsilon' = (\sqrt{v_{i+j+1}}\varepsilon_{i+j+1}, \dots, \sqrt{v_h}\varepsilon_h)$, onde

$$q_0^{(i+1)} = 1, \quad q_1^{(i+1)} = v_{i+1} - 1, \quad q_j^{(i+1)} = (v_{j+i} - 1) \cdot \prod_{k=i+1}^{i+j} v_k, \quad \text{para } 1 \leq j \leq h - i.$$

Agora precisamos apenas somar a quantidade total de cada caminho ($\mathbf{1}$ -ária) com o mesmo comprimento. Há apenas uma ocorrência de caminho com comprimento h e assim $q_0 = 1$. O valor $q_j^{(i+1)}$ está associado com o caminho de comprimento $h - k = h - i - j$. Usando o fato de que a árvore $\mathbf{w}^{(i+1)}$ -ária aparece $v_i - 1$ vezes na decomposição da árvore \mathbf{v} -ária com h níveis, temos que

$$q_k = \sum_{i=1}^k (v_i - 1) \cdot q_{k-i}^{(i+1)}.$$

Assim

$$q_1 = (v_1 - 1) \cdot q_0^{(2)} = (v_1 - 1),$$

$$\begin{aligned} q_k &= \sum_{i=1}^k (v_i - 1) \cdot q_{k-i}^{(i+1)} = (v_k - 1) \cdot q_0^{(k+1)} + (v_{k-1} - 1) \cdot q_1^{(k)} + \sum_{i=1}^{k-2} (v_i - 1) \cdot q_{k-i}^{(i+1)} \\ &= (v_k - 1) + (v_{k-1} - 1)(v_k - 1) + \sum_{i=1}^{k-2} (v_i - 1)(v_k - 1) \prod_{\ell=i+1}^{k-1} v_\ell \\ &= (v_k - 1) \left[v_{k-1} + \sum_{i=1}^{k-2} (v_i - 1) \prod_{\ell=i+1}^{k-1} v_\ell \right] \\ &= (v_k - 1) \left[v_{k-1} + \sum_{i=1}^{k-2} \left(\prod_{\ell=i}^{k-1} v_\ell - \prod_{\ell=i+1}^{k-1} v_\ell \right) \right] \\ &= (v_k - 1) \left[v_{k-1} + \prod_{\ell=1}^{k-1} v_\ell - v_{k-1} \right] = (v_k - 1) \prod_{\ell=1}^{k-1} v_\ell, \end{aligned}$$

para $2 \leq k \leq h$. Portanto o resultado também é válido para h . \square

Exemplo 3.41. Usando os pesos correspondentes podemos obter informações sobre o espectro das matrizes A, L, Q e \mathcal{L} de uma árvore \mathbf{v} -ária. Por exemplo, para a matriz laplaciana sem sinal de uma árvore binária devemos escolher $\mathbf{v} = (2, 2, \dots, 2)$, $p = (2, 3, 3, \dots, 3, 1)$ e $\varepsilon = (1, 1, \dots, 1)$. Neste caso, a matriz S do Teorema 3.38 será

$$S = \begin{bmatrix} 2 & \sqrt{2} & & & & \\ \sqrt{2} & 3 & \sqrt{2} & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \sqrt{2} & 3 & \sqrt{2} & \\ & & & \sqrt{2} & 1 & \end{bmatrix}.$$

No caso da matriz laplaciana, teremos as arestas com peso $-\varepsilon$, contudo os autovalores de L e Q são os mesmos (aplicar Lema 3.18 com $\alpha = -1$). Assim, podemos usar a mesma matriz S ou apenas trocar o sinal nas posições fora da diagonal principal da matriz S . As multiplicidades dos conjuntos $\sigma(S_i)$ são $q_0 = 1$ e $q_i = 2^{i-1}$ para $1 \leq i \leq h$. Este caso especial coincide com o resultado obtido por Rojo em [28].

Por exemplo, uma árvore binária perfeita com três níveis, e portanto com quinze vértices, possui espectro laplaciano dado por

$$\sigma(S_0)^{(1)} \cup \sigma(S_1)^{(1)} \cup \sigma(S_2)^{(2)} \cup \sigma(S_3)^{(4)}$$

onde

$$S_0 = \begin{bmatrix} 2 & \sqrt{2} & & & \\ \sqrt{2} & 3 & \sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & 3 & \sqrt{2} & \\ & & \sqrt{2} & 1 & \end{bmatrix}, \quad S_1 = \begin{bmatrix} 3 & \sqrt{2} & \\ \sqrt{2} & 3 & \sqrt{2} \\ & \sqrt{2} & 1 \end{bmatrix}, \quad S_2 = \begin{bmatrix} 3 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 1 \end{bmatrix} \text{ e } S_3 = [1].$$

△

Exemplo 3.42. Para o GWG do Exemplo 3.36, temos a matriz S de ordem 4 tal que

$$S = \begin{bmatrix} -2 & 2\pi & & \\ 2\pi & 1 & -\sqrt{2} & \\ & -\sqrt{2} & 4 & 2\sqrt{3} \\ & & 2\sqrt{3} & 1 \end{bmatrix}.$$

O espectro do GWG é dado por

$$\sigma(M) = \sigma(S_0)^{(1)} \cup \sigma(S_1)^{(3)} \cup \sigma(S_2)^{(4)} \cup \sigma(S_3)^{(16)}.$$

Em particular, podemos afirmar que 1 é autovalor com multiplicidade (no mínimo) 16, pois $S_3 = [1]$, e também $\frac{5 \pm \sqrt{57}}{2}$ são autovalores com multiplicidade (no mínimo) 4. Além disso, $\sigma(S_1) = \{1, \frac{5 \pm \sqrt{65}}{2}\}$ e cada um desses valores contribui como um autovalor do GWG com multiplicidade 3. Como S_0 não possui 1 como autovalor, podemos concluir que 1 é autovalor com multiplicidade (exatamente) 19. Também, S_i é submatriz principal da matriz do GWG dado na Figura 3.15 (árvore **1**-ária de três níveis - caminho de comprimento quatro). \triangle

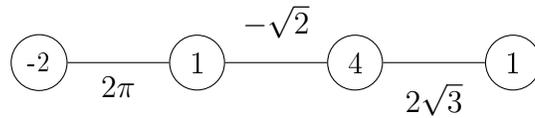


Figura 3.15: GWG dado pelo caminho, associado à matriz S

Exemplo 3.43. O espectro da matriz laplaciana normalizada da árvore ternária de três níveis, ilustrada na Figura 3.16, pode ser obtido através de principais da matriz S com multiplicidades dadas por $q_0 = 1$ e $q_i = 2 \cdot 3^{i-1}$, para $1 \leq i \leq 3$, onde

$$S = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & & \\ -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{\sqrt{3}}{4} & \\ & -\frac{\sqrt{3}}{4} & 1 & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ & & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 1 \end{bmatrix}.$$

Utilizando o Lema 3.18 sobre S , com α igual aos valores da diagonal secundária, obtemos que o espectro da matriz laplaciana normalizada do grafo é $\sigma(R_0)^{(1)} \cup \sigma(R_1)^{(2)} \cup \sigma(R_2)^{(6)} \cup \sigma(R_3)^{(18)}$, onde

$$R_0 = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{4} & & \\ 1 & 1 & \frac{3}{16} & \\ & 1 & 1 & \frac{3}{4} \\ & & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad R_1 = \begin{bmatrix} 1 & \frac{3}{16} & \\ 1 & 1 & \frac{3}{4} \\ & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad R_2 = \begin{bmatrix} 1 & \frac{3}{4} \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \text{ e } R_3 = [1].$$

No caso do espectro da matriz de adjacência, podemos tomar o espectro dos principais da matriz T abaixo, à qual também foi aplicado o Lema 3.18 com $\alpha = \sqrt{3}$. As multiplicidades q_i dos principais T_i são as mesmas multiplicidades citadas anteriormente para R_i .

$$T = \begin{bmatrix} 0 & 3 & & \\ 1 & 0 & 3 & \\ & 1 & 0 & 3 \\ & & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

△

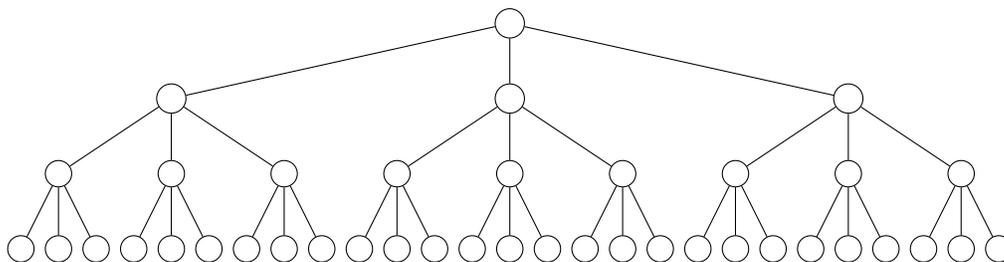


Figura 3.16: Árvore ternária com três níveis

tal que $\sigma(M) = \sigma(S_0)^{(1)} \cup \sigma(S_1)^{(2)} \cup \sigma(S_2)^{(3)}$, onde $\sigma(S_0) = \{\frac{7 \pm \sqrt{13}}{2}, -3\}$, $\sigma(S_1) = \{3, -2\}$ e $\sigma(S_2) = \{1\}$. \triangle

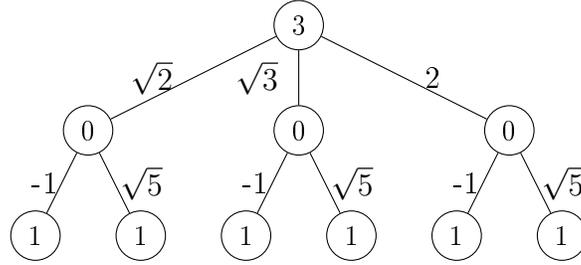


Figura 3.17: GWG dado pela árvore \mathbf{v} -ária com conjuntos quase-simétricos

3.5.4 Grafos multi-leque

Mais uma família de grafos que possuem vértices simétricos são os grafos leque. Aqui discutiremos como obter os autovalores de grafos multi-leque (veja [22] para mais detalhes). A operação *join* entre dois grafos G_1 e G_2 é um grafo obtido através da união de G_1 e G_2 com a inclusão das arestas $\{u_1, u_2\}$, onde $u_1 \in G_1$ e $u_2 \in G_2$.

Definição 3.47. *Seja $\{a_i\}$ uma sequência de $k \geq 0$ números inteiros positivos e seja c um número inteiro não negativo. O grafo multi-leque $F_{\{a_i\},c}$ é o grafo obtido através da operação *join* entre c vértices isolados com a união disjunta de k caminhos de comprimento a_i .*

Os casos especiais degenerados $F_{\{a_i\},0}$ ou $F_{(),c}$ correspondem a uma união disjunta de caminhos ou c vértices isolados, respectivamente. Além disso o grafo $F_{a,1}$ denota o grafo leque usual, onde há apenas um vértice adjacente a todos os vértices de um caminho \mathcal{P}_a . Podemos perceber facilmente que os c vértices de $F_{\{a_i\},c}$, antes isolados, agora conectados a todos os demais vértices, são vértices simétricos e formam uma coclique. Além disso, se $a_i = a_j$, então os conjuntos formados

pelos vértices de \mathcal{P}_{a_i} e \mathcal{P}_{a_j} são conjuntos simétricos (quando considerado o GWG dado por $F_{\{a_i\},c}$ tal que sua matriz seja a matriz de adjacência, por exemplo). Por questão de simplicidade, vamos reescrever a sequência $\{a_i\}$ na forma $\{b_i^{q_i}\}$, significando que b_i aparece q_i vezes na sequência $\{a_i\}$, de modo similar ao que foi feito para os grafos threshold.

Exemplo 3.48. O grafo multi-leque $F_{\{a_i\},2}$, onde $\{a_i\} = (1, 2, 5, 2, 2)$, está representado na Figura 3.18. Note que os dois vértices centrais são simétricos. E também, os três caminhos \mathcal{P}_2 são conjuntos simétricos, quando consideramos o GWG dado por $F_{\{a\},2}$ com uma escolha de pesos apropriada. \triangle

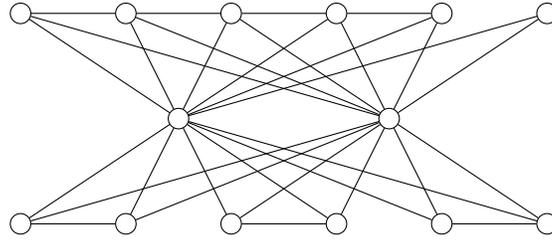


Figura 3.18: O grafo multi-leque $F_{(1^1, 2^3, 5^1), 2}$

Para que possamos obter o espectro das matrizes A, L, Q e \mathcal{L} de um grafo multi-leque, vamos considerar o GWG dado por $F_{\{b_i^{q_i}\},c}$ com os pesos correspondentes. Como é de se esperar, vamos aplicar o Algoritmo 2 (que é equivalente ao Algoritmo 1 nesse caso) ao GWG dado por $F_{\{b_i^{q_i}\},c}$ no conjunto de vértices simétricos que formam a coclique \overline{K}_c e ao conjunto de caminhos com o mesmo comprimento. Como ilustração do método, vamos escolher os pesos dos vértices e arestas de tal modo que a matriz do GWG seja a matriz de adjacência $A(F_{\{b_i^{q_i}\},c})$, mas o mesmo também pode ser repetido para as matrizes L, Q e \mathcal{L} .

Teorema 3.49. *O grafo multi-leque $F_{\{b_i^{q_i}\},c}$ tem o mesmo espectro (da matriz de adjacência) do que a união disjunta de:*

1. um GWG dado por $F_{(),c-1}$, onde cada vértice tem peso 0 (que consiste em $c - 1$ vértices isolados);
2. um GWG dado por $F_{\{b_i^{q_i-1}\},0}$, onde cada vértice tem peso 0 e cada aresta tem peso 1 (que consiste em $\bigcup_{i=1}^k (q_i - 1)\mathcal{P}_{b_i}$);
3. um GWG dado pelo grafo multi-leque $F_{\{b_i^1\},1}$, onde cada vértice tem peso 0, as arestas entre vértices do caminho \mathcal{P}_{b_i} e o vértice central têm peso $\sqrt{cq_i}$, e as demais arestas têm peso 1.

Demonstração: De acordo com a distribuição de pesos utilizada, todos os c vértices centrais são simétricos. Aplicando o Algoritmo 2 obtemos $c - 1$ vértices isolados com peso 0, e o peso das arestas entre o vértice central remanescente e os demais vértices do GWG é multiplicado por \sqrt{c} . O próximo passo consiste em aplicar o Algoritmo 2 para as q_i cópias de \mathcal{P}_{b_i} . O algoritmo multiplica por $\sqrt{q_i}$ o peso das arestas entre vértices de um \mathcal{P}_{b_i} e o vértice central, como também desconecta os demais $q_i - 1$ caminhos \mathcal{P}_{b_i} do GWG. \square

Exemplo 3.50. Considere o GWG dado pelo grafo multi-leque $F_{(1^1,2^3,5^1),2}$, ilustrado na Figura 3.18. Vamos considerar os vértices com peso 0 e as arestas com peso 1. O Teorema 3.49 afirma que o espectro da matriz de adjacência de $F_{(1^1,2^3,5^1),2}$ é igual à união do espectro dos seguintes grafos: GWG_1 dado por $F_{(),1}$ com vértices com peso 0, isto é, um vértice isolado; GWG_2 dado por $F_{(2^2),0}$ cujos vértices têm peso 0 e arestas têm peso 1, isto é, dois caminhos isolados \mathcal{P}_2 ; e GWG_3 dado pelo grafo multi-leque $F_{(1,2,5),1}$ onde cada vértice tem peso 0, as arestas entre o vértice central e o caminho \mathcal{P}_{b_i} têm peso $\sqrt{2}$ ou $\sqrt{6}$ se $i = 1, 3$ ou $i = 2$, respectivamente, e as demais arestas têm peso 1. A união desses GWGs está ilustrada na Figura 3.19. Facilmente podemos afirmar que $\{-1^{(2)}, 0, 1^{(2)}\} \subset \sigma(A(F_{(1^1,2^3,5^1),2}))$, devido aos autovalores de GWG_1 e GWG_2 . \triangle

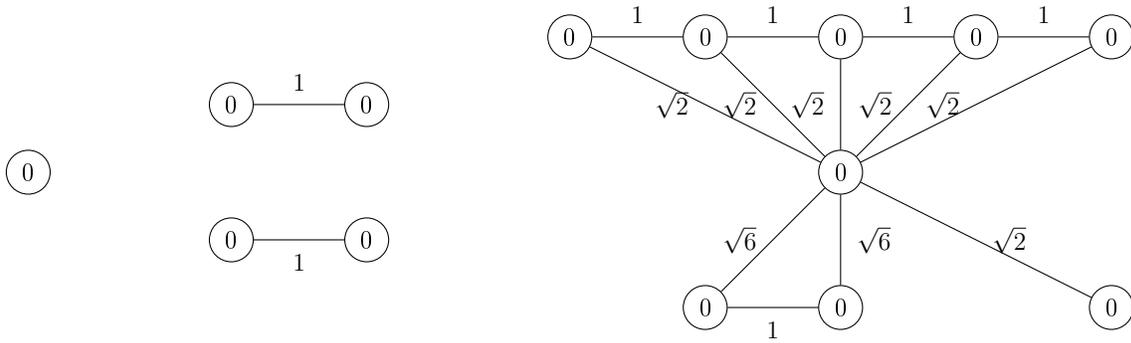


Figura 3.19: GWG_1 , GWG_2 e GWG_3 obtidos pelo Teorema 3.49 aplicado ao grafo $F_{(1^1, 2^3, 5^1), 2}$

Os GWGs obtidos pelo Teorema 3.49 ainda possuem alguns conjuntos simétricos de vértices e poderíamos aplicar Algoritmo 1 ou 2 novamente. Um caminho de comprimento a pode ser reduzido a dois caminhos, com comprimentos $\lfloor \frac{a}{2} \rfloor$ e $\lceil \frac{a}{2} \rceil$, pois o conjunto com os primeiros $\lfloor \frac{a}{2} \rfloor$ vértices é simétrico ao conjunto com os últimos $\lfloor \frac{a}{2} \rfloor$ vértices. Se temos um caminho com comprimento par no grafo multileque, então aplicamos o Algoritmo 1, devido a aresta entre os conjuntos simétricos (a aresta central no caminho), alterando o peso de dois vértices. Se o caminho tem comprimento ímpar, então podemos aplicar o Algoritmo 2 (ou 1), que mantém o peso dos vértices, e o conjunto de vizinhos dos conjuntos simétricos será o vértice central do caminho e o vértice central do grafo.

Exemplo 3.51. O GWG_3 do exemplo anterior (ilustrado na Figura 3.19) pode ser reduzido ao GWG dado por $F_{(1, 1, 3), 1}$ e dois GWGs dados por caminhos \mathcal{P}_1 e \mathcal{P}_2 . Esta decomposição está ilustrada na Figura 3.20 com os respectivos pesos. O espectro (da matriz de adjacências) do grafo $F_{(1^1, 2^3, 5^1), 2}$ é igual à união de $\{1^{(2)}, 0, -1^{(2)}\}$ (espectro de caminhos e vértices removidos pelo Teorema 3.49), $\{1^{(1)}, -1^{(2)}\}$ (metade

dos caminhos removidos do GWG_3) e $\sigma(M_{3b})$ (do GWG_3 reduzido), onde

$$M_{3b} = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & \sqrt{12} & \sqrt{2} & \sqrt{4} & \sqrt{4} \\ \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{12} & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{4} & 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 1 \\ \sqrt{4} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

△

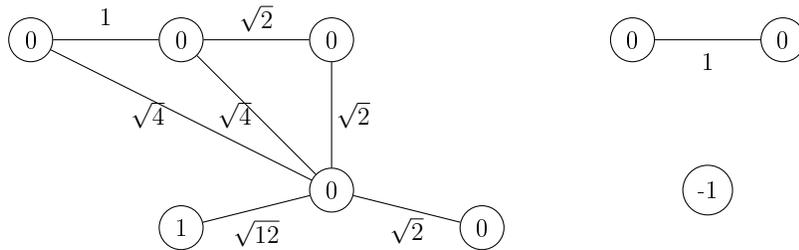


Figura 3.20: GWG_3 após caminhos terem sido reduzidos

Podemos repetir este método para as matrizes L , Q e \mathcal{L} tomando o devido cuidado com o grau dos vértices. Por exemplo, a primeira parte do Teorema 3.49 para L nos daria $c - 1$ vértices isolados cujo peso é igual ao grau desses vértices no multi-leque original, e não ao grau zero de vértices isolados.

4 GRAFOS UNICÍCLICOS COM A MESMA ENERGIA LAPLACIANA

Não são conhecidos pares de árvores distintas com o mesmo número n de vértices e a mesma energia laplaciana, mas sabe-se que não existe tal par, para $n \leq 20$ [34]. Nesse capítulo, vamos mostrar como é possível construir famílias de grafos unicíclicos, isto é, com apenas uma aresta a mais do que as árvores, e com a mesma energia laplaciana, para um número par de vértices maior ou igual a catorze. O resultado segue como uma aplicação do Capítulo 3, na forma de operação.

A família equienergética produzida será formada por grafos não coespectrais, ou seja, que não possuem o mesmo espectro laplaciano. Essa propriedade torna o conjunto mais interessante, pois segue trivialmente que grafos com o mesmo espectro têm também a mesma energia.

4.1 Operação \mathcal{E}_z

Dado um grafo G com espectro laplaciano desconhecido, muitas vezes gostaríamos de relacioná-lo (grafo e espectro) com um grafo G' , semelhante a G quanto à configuração dos vértices e arestas, com espectro μ_i conhecido. Que relações pode haver entre os espectros de G e G' ?

Vamos introduzir nesta seção uma operação em grafos de uma família especial que permitirá responder a essa pergunta parcialmente, isto é, dado um grafo G e seu espectro, criaremos um grafo G' através de uma operação de tal modo que os espectros de G e G' estarão relacionados.

Iniciamos definindo o conjunto de grafos com os quais trabalharemos. Considere dois grafos, o primeiro $\check{G}(\check{V}, \check{E})$ com h vértices, onde $\check{V} = \{u_1, \dots, u_h\}$, e o segundo $G^* = (V^*, E^*)$ com k vértices, onde $V^* = \{v_1, \dots, v_k\}$. Seja Y uma matriz de ordem $h \times k$ com entradas 0 e 1. Dados uma cópia de \check{G} e $c \geq 2$ cópias de G^* , vamos construir o grafo $G = G(\check{G}, cG^*, Y)$ de $n = h + ck$ vértices da seguinte maneira: adicionamos arestas entre o vértice u_i de \check{G} e todas as cópias do vértice v_j de G^* em G se, e somente se, $Y_{i,j} = 1$.

Chamamos de $\mathfrak{W}_{n,c,k}$ a família de todos os grafos que podem ser construídos dessa maneira, com $n = h + ck$ fixos. Note que alguns grafos $G \in \mathfrak{W}_{n,c,k}$ podem ser construídos de mais de uma maneira. Por exemplo, se $G \in \mathfrak{W}_{n,c,k}$, então $G \in \mathfrak{W}_{n,b,k}$ para qualquer valor $2 \leq b \leq c$, pois podemos considerar algumas das cópias de G^* como parte de \check{G} . Para um grafo $G = G(\check{G}, cG^*, Y) \in \mathfrak{W}_{n,c,k}$ chamamos os grafos \check{G} e G^* de *blocos de construção de G* , que podem não ser únicos, e a matriz Y de *matriz de adjacência da construção de G* , associada aos blocos de construção escolhidos.

Exemplo 4.1. Considere os grafos \check{G} e G^* com suas respectivas enumerações, ilustrados na Figura 4.1. Tomando $c = 2$ cópias de G^* , construímos o grafo $G = G(\check{G}, 2G^*, Y) \in \mathfrak{W}_{16,2,5}$ de 16 vértices, onde foi escolhida a matriz de adjacência da construção Y satisfazendo $Y_{2,1} = Y_{4,1} = Y_{4,2} = 1$ e $Y_{i,j} = 0$ para os demais índices. △

Se $G \in \mathfrak{W}_{n,c,k}$, então o GWG dado por $G = G(\check{G}, cG^*, Y)$, com os respectivos pesos para que a matriz do GWG seja a matriz laplaciana (ou de adjacências) de G , possui c conjuntos simétricos dados pelas cópias de G^* .

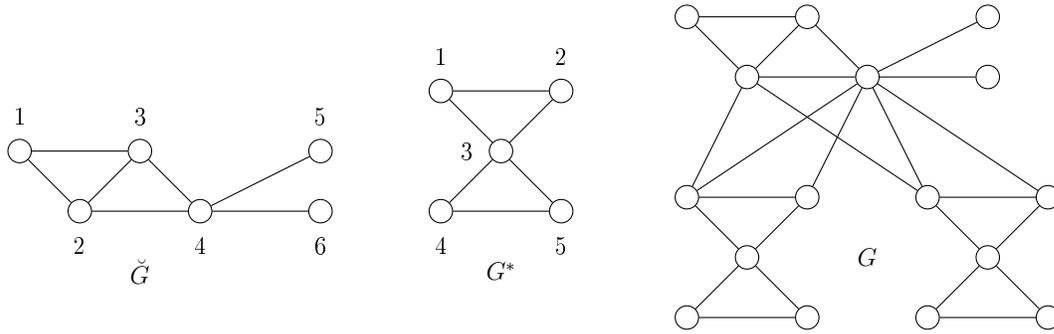


Figura 4.1: Grafos \check{G} , G^* e $G = G(\check{G}, 2G^*, Y)$

Definição 4.2 (Operação \mathcal{E}_z). Dado um vetor $z \in \{0, 1\}^k$, a operação \mathcal{E}_z é definida para um grafo $G(\check{G}, cG^*, Y) \in \mathfrak{W}_{n,c,k}$, inserindo arestas entre os vértices i das c cópias de G^* sempre que $z_i = 1$, para $1 \leq i \leq k$.

Por exemplo, \mathcal{E}_z torna o subgrafo induzido pelo conjunto formado pelos vértices i das c cópias de G^* em uma clique se $z_i = 1$, para $1 \leq i \leq k$.

Exemplo 4.3. Considere os grafos G^* e $G(\check{G}, 2G^*, Y)$ da Figura 4.1. Tomando $z = (1, 0, 1, 0, 0)$ como vetor característico da operação, obtemos o grafo $\mathcal{E}_z(G)$ ilustrado na Figura 4.2, cuja diferença é o acréscimo de duas novas arestas em G : entre os vértices de índice 1 e entre os vértices de índice 3 de G^* . \triangle

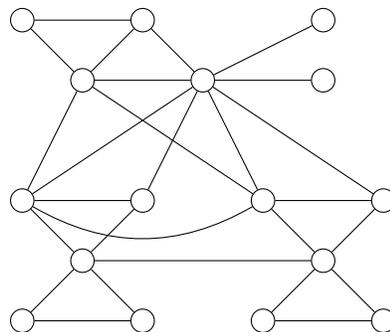


Figura 4.2: Grafo $\mathcal{E}_z(G)$

Chamamos o vetor z de *vetor característico* da operação \mathcal{E}_z . Contudo, o domínio da operação $\mathcal{E}_z(G)$ não é o conjunto de grafos, mas o conjunto de decom-

posições $G(\check{G}, cG^*, Y)$. Se for possível construir o grafo G de maneiras diferentes, então devemos especificar G^* e c .

Exemplo 4.4. Considerando $c = 3$, os grafos na Figura 4.3 e $Y_{i,j} = 1$ somente se $i = 1$ e $j = 1, 2$, a operação \mathcal{E}_{e_3} adiciona arestas entre os vértices de índice 3 das componentes G^* , gerando o grafo $\mathcal{E}_{e_3}(G)$ da Figura 4.4. \triangle

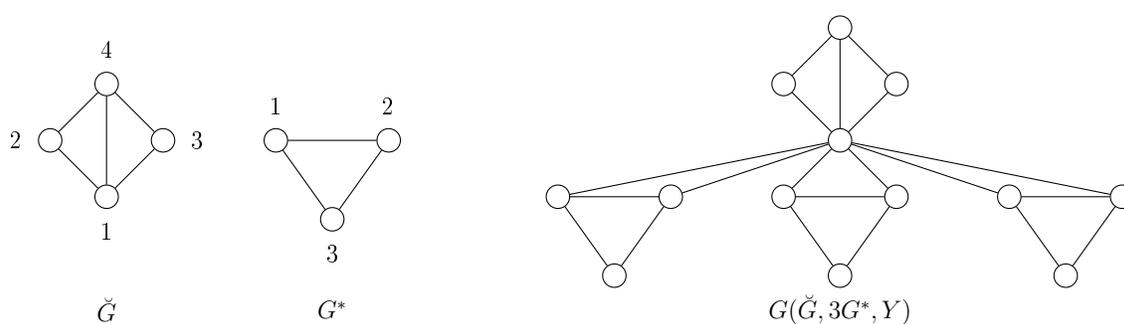


Figura 4.3: Grafos \check{G} , G^* e $G(\check{G}, 3G^*, Y)$

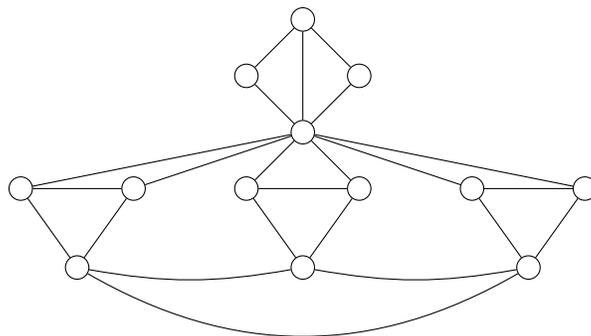


Figura 4.4: Grafo $\mathcal{E}_{e_3}(G)$

O próximo resultado estabelece a relação entre o espectro laplaciano (denotado por $\sigma_L(\cdot)$) de $G \in \mathfrak{W}_{n,c,k}$ e $\mathcal{E}_z(G)$. Lembramos que $\sigma(X)$ é o multiconjunto dos autovalores da matriz X e por $\sigma^{(q)}(X)$ denotamos o multiconjunto onde cada elemento de $\sigma(X)$ tem multiplicidade q , ou seja, a união de q cópias de $\sigma(X)$. Se Y é uma matriz de ordem $h \times k$ então definimos a matriz quadrada E_Y de ordem

k como uma matriz diagonal cuja j -ésima entrada é igual à soma dos elementos de Y na j -ésima coluna, isto é $E_Y(j, j) = \sum_{i=1}^h Y_{i,j}$. Se z é um vetor de k posições, definimos E_z como a matriz diagonal cuja i -ésima entrada é z_i .

Teorema 4.5. *Seja $G = G(\check{G}, cG^*, Y)$ um grafo de $\mathfrak{W}_{n,c,k}$ com blocos construtores \check{G} e G^* , e matriz de adjacência da construção Y . Seja $z \in \{0, 1\}^k$. Para $D = L(G^*) + E_Y$ e $F = L(G^*) + E_Y + cE_z$, temos*

1. $\sigma^{(c-1)}(D) \subset \sigma_L(G)$;
2. $\sigma^{(c-1)}(F) \subset \sigma_L(\mathcal{E}_z(G))$;
3. $\sigma_L(G) \setminus \sigma^{(c-1)}(D) = \sigma_L(\mathcal{E}_z(G)) \setminus \sigma^{(c-1)}(F)$.

Em particular, G e $\mathcal{E}_z(G)$ têm no mínimo $n - (c - 1)k$ autovalores laplacianos em comum.

Exemplo 4.6. Considere o grafo $G \in \mathfrak{W}_{15,3,3}$ da Figura 4.5 construído a partir de $\check{G} = \mathcal{C}_6$, três cópias de $G^* = \mathcal{P}_3$, e com matriz de adjacência da construção tal que $Y_{1,1} = Y_{2,3} = 1$ e $Y_{i,j} = 0$ para os demais índices. O conjunto $\sigma(D)$ do Teorema 4.5 é dado pelo espectro da matriz $(L(G^*) + E_Y)$ ou seja $\sigma(D) = \{2 - \sqrt{2}, 2, 2 + \sqrt{2}\}$.

$$D = L(\mathcal{P}_3) + E_Y = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Se escolhermos $z = (0, 1, 0)$ como vetor característico da operação, o conjunto $\sigma(D)$ será substituído por $\sigma(F) = \{\frac{7-\sqrt{17}}{2}, 2, \frac{7+\sqrt{17}}{2}\}$ no espectro laplaciano de $\mathcal{E}_z(G)$, pois $F = L(G^*) + E_Y + 3E_z$.

$$F = L(\mathcal{P}_3) + E_Y + 3E_z = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 5 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Os elementos do conjunto $\sigma(D)$ aparecem no mínimo $c - 1 = 2$ vezes em $\sigma_L(G)$, enquanto que os elementos de $\sigma(F)$ aparecem no mínimo duas vezes em $\sigma_L(\mathcal{E}_z(G))$. Podemos visualizar que G e $\mathcal{E}_z(G)$ têm no mínimo nove autovalores laplacianos em comum (nesse caso são onze, pois D e F possuem o elemento 2 em comum nos seus respectivos espectros).

$$\begin{aligned}\sigma_L(G) &= \{0; 0,424; 0,586; 0,586; 1; 1,602; 2; 2; 2,187; 3; 3,414; 3,414; \\ &\quad 3,559; 5,388; 6,838\}, \\ \sigma_L(\mathcal{E}_z(G)) &= \{0; 0,424; 1; 1,438; 1,438; 1,602; 2; 2; 2,187; 3; 3,559; 5,388; \\ &\quad 5,562; 5,562; 6,838\}.\end{aligned}$$

△

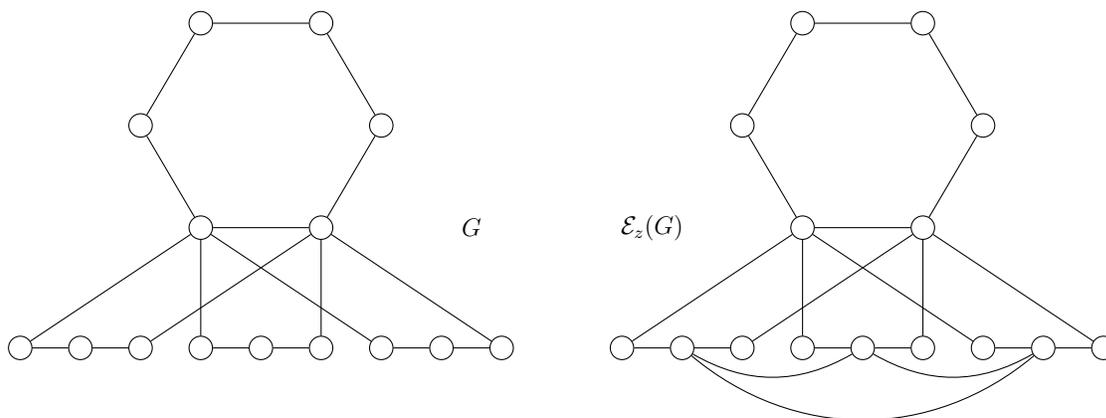


Figura 4.5: Grafos G e $\mathcal{E}_z(G)$

Exemplo 4.7. O grafo $G(\check{G}, 3K_3, Y)$ da Figura 4.3 tem $\sigma(D) = \{4, 2 + \sqrt{2}, 2 - \sqrt{2}\}$ como subconjunto de multiplicidade 2 do seu espectro laplaciano. Quando aplicamos \mathcal{E}_{e_3} sobre G , o conjunto $\sigma^{(2)}(D)$ é substituído por $\sigma^{(2)}(F)$ em $\sigma_L(G)$, onde $\sigma(F) = \{\frac{7+\sqrt{17}}{2}, 4, \frac{7-\sqrt{17}}{2}\}$, formando assim $\sigma_L(\mathcal{E}_{e_3}(G))$. Concluímos que os espectros laplacianos de G e $\mathcal{E}_{e_3}(G)$ têm nove elementos em comum. △

Demonstração (Teorema 4.5): Seja $G = G(\check{G}, cG^*, Y)$ um grafo de $\mathfrak{W}_{n,c,k}$ com blocos construtores \check{G} e G^* , e matriz de adjacência da construção Y de ordem $h \times k$.

O GWG dado pelo grafo G , com vértices com peso igual ao seu grau e arestas com peso igual a -1, tem espectro igual ao espectro laplaciano do grafo G . O grau de um vértice v_i de G , denotado por $\delta_G(v_i)$, que pertence ao bloco construtor \check{G} é igual ao grau de v_i em \check{G} , denotado por $\delta_{\check{G}}(v_i)$, mais o número de arestas que ligam v_i a vértices de G^* , que é dado pela soma dos elementos da i -ésima linha de Y . Dessa forma

$$\delta_G(v_i) = \delta_{\check{G}}(v_i) + cE_{YT}(i, i).$$

Para um vértice u_i em G^* temos que

$$\delta_G(u_i) = \delta_{G^*}(u_i) + E_Y(i, i).$$

Assim a matriz laplaciana de G pode ser escrita na forma

$$L(G) = \left[\begin{array}{c|cccc} L(\check{G}) + cE_{YT} & -Y & -Y & \cdots & -Y \\ \hline -Y^T & L(G^*) + E_Y & 0 & \cdots & 0 \\ -Y^T & 0 & L(G^*) + E_Y & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ -Y^T & 0 & \cdots & 0 & L(G^*) + E_Y \end{array} \right]$$

Aplicando o Algoritmo 1 (ou Algoritmo 2) ou, equivalentemente, o Teorema 3.14, temos que o espectro laplaciano de G é igual à união de: $c - 1$ cópias do espectro do GWG dado pelo grafo G^* com pesos acrescidos por E_Y , isto é, $c - 1$ cópias do espectro da matriz $B - C = D = L(G^*) + E_Y$; e do espectro do GWG cuja matriz é

$$M' = \begin{bmatrix} L(\check{G}) + cE_{YT} & -\sqrt{c}Y \\ -\sqrt{c}Y^T & L(G^*) + E_Y \end{bmatrix}. \quad (4.1)$$

Para que o GWG dado por $\mathcal{E}_z(G)$ tenha matriz igual à matriz laplaciana de $\mathcal{E}_z(G)$, os vértices devem ter peso igual ao seu grau e as arestas devem ter peso

igual a -1, como anteriormente. Com a inserção das arestas pela operação \mathcal{E}_z , o peso dos vértices u_i em G^* deve ser acrescido de $c - 1$ unidades se $z_i = 1$. Dessa forma,

$$\delta_G(u_i) = \delta_{G^*}(u_i) + E_Y(i, i) + (c - 1)z_i.$$

Assim, a matriz laplaciana de $\mathcal{E}_z(G)$ pode ser escrita na forma

$$L(\mathcal{E}_z(G)) = \left[\begin{array}{c|ccc} L(\check{G}) + cE_{Y^T} & -Y & -Y & \dots & -Y \\ \hline -Y^T & \ddots & -E_z & \dots & -E_z \\ -Y^T & -E_z & L(G^*) + E_Y + (c - 1)E_z & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -E_z \\ -Y^T & -E_z & \dots & -E_z & \ddots \end{array} \right]$$

Aplicando o Algoritmo 1 ou, equivalentemente, o Teorema 3.14, obtemos que o espectro laplaciano de $\mathcal{E}_z(G)$ é igual à união de $c - 1$ cópias do espectro de $B - C = F = L(G^*) + E_Y + cE_z$, além do espectro da matriz M' (a componente $B + (c - 1)C$ do Teorema 3.14 se torna $L(G^*) + E_Y$), a matriz em (4.1) obtida por $\sigma_L(G)$. Chegamos a conclusão de que

$$\begin{aligned} \sigma_L(G) &= \sigma(M') \cup \sigma^{(c-1)}(D), \\ \sigma_L(\mathcal{E}_z(G)) &= \sigma(M') \cup \sigma^{(c-1)}(F). \end{aligned}$$

□

Corolário 4.8 (Teorema 4.5). *Os grafos G e $\mathcal{E}_z(G)$ possuem $\sigma(H)$ como subconjunto de seus espectros laplacianos, onde*

$$H = \begin{bmatrix} L(\check{G}) + cE_{Y^T} & -\sqrt{c}Y \\ -\sqrt{c}Y^T & L(G^*) + E_Y \end{bmatrix}.$$

Em outras palavras, a operação \mathcal{E}_z modifica um conjunto de até $(c - 1)k$ autovalores, onde k é o número de vértices do bloco construtor G^* . Removemos de $\sigma_L(G)$ o conjunto $\sigma(D)$ e inserimos o conjunto $\sigma(F)$ para formar $\sigma_L(\mathcal{E}_z(G))$. A seguir, alguns resultados para casos especiais de Y e z .

Corolário 4.9. *Seja $G = G(\check{G}, cG^*, Y) \in \mathfrak{W}_{n,c,k}$. Se cada vértice das componentes G^* for vizinho de exatamente t vértices em \check{G} , isto é $E_Y = tI$, então os possíveis $(c-1)k$ autovalores laplacianos de G que podem não pertencer ao espectro laplaciano de $\mathcal{E}_z(G)$ são da forma $\alpha + t$, onde α é autovalor de G^* .*

Além disso, se o vetor característico da operação for $z = \mathbf{1}$, então a operação \mathcal{E}_z substitui $c-1$ autovalores laplacianos $\alpha+t$ de $\sigma_L(G)$ por $c-1$ autovalores laplacianos $\alpha+t+c$, formando $\sigma_L(\mathcal{E}_z(G))$, respeitando as multiplicidades de α como autovalor laplaciano de G^ .*

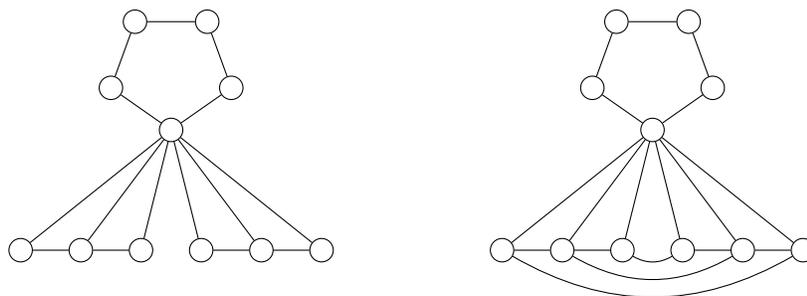
Demonstração: A operação \mathcal{E}_z retira um multiconjunto $\sigma(D)$ com multiplicidade $c-1$ do espectro laplaciano de G e o substitui por um multiconjunto $\sigma(F)$ também com multiplicidade $c-1$, ambos com k elementos. O conjunto a ser retirado é tal que $D = L(G^*) + tI$. Se w é um autovetor de $L(G^*)$ associado ao autovalor α , então w também é autovetor de $L(G^*) + tI$ associado ao autovalor $\alpha + t$. A multiplicidade dos autovalores é preservada devido ao fato de que continuamos com o mesmo número de autovetores ortogonais e linearmente independentes.

No caso de $z = \mathbf{1}$, o conjunto $\sigma(F) = \sigma(L(G^*) + tI + cI)$ que substituirá $\sigma(D)$ é formado por elementos do tipo $\alpha + t + c$, pois um autovetor de $L(G^*)$ também é autovetor de $L(G^*) + tI + cI$. \square

Exemplo 4.10. Considere o grafo $G \in \mathfrak{W}_{11,2,3}$ da Figura 4.6 construído a partir de $\check{G} = \mathcal{C}_5$, duas cópias de $G^* = \mathcal{P}_3$, e com matriz de adjacência da construção tal que $Y_{1,j} = 1$ e $Y_{i,j} = 0$ para $i = 2, 3, 4, 5$ e $j = 1, 2, 3$. O grafo G^* possui espectro laplaciano $\sigma_L(\mathcal{P}_3) = \{0, 1, 3\}$, portanto o conjunto $\sigma(D)$ do Teorema 4.5 é tal que $\sigma(D) = \{1, 2, 4\}$, e se escolhermos $z = \mathbf{1}$ como vetor característico da operação, o conjunto $\sigma(D)$ será substituído por $\sigma(F) = \{3, 4, 6\}$ no espectro laplaciano de $\mathcal{E}_z(G)$ (estamos aplicando o Corolário 4.9 com $t = 1$ e $c = 2$).

$$\begin{aligned}\sigma_L(G) &= \{0; 0,49257; 1; 1,38197; 2; 2; 2,47142; 3,61803; 4; 4; 9,03601\}, \\ \sigma_L(\mathcal{E}_z(G)) &= \{0; 0,49257; 1,38197; 2; 2,47142; 3; 3,61803; 4; 4; 6; 9,03601\}.\end{aligned}$$

△

Figura 4.6: Grafos G e $\mathcal{E}_z(G)$

Utilizaremos essa operação numa família especial de árvores, subconjunto de $\mathfrak{W}_{n,c,k}$. Essa aplicação permitirá deduzir um interessante resultado a respeito da energia laplaciana de grafos com um ciclo, apresentado na próxima seção.

4.2 Grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana

Esta é uma aplicação particular da operação \mathcal{E}_z apresentada na seção anterior. A partir de árvores de um subconjunto da família $\mathfrak{W}_{n,2,k}$ vamos criar grafos unicíclicos cuja energia laplaciana se mantém inalterada. O nosso conjunto de interesse é uma família de árvores starlike onde o tamanho dos ramos está controlado.

Definição 4.11 (Família $\mathcal{S}_{n,k}$). *Um grafo G com n vértices está em $\mathcal{S}_{n,k}$, $n \geq 2k+2$, se e somente se for uma árvore starlike cujo vértice u é adjacente a uma folha de cada um dos $h \geq 3$ caminhos pendentos \mathcal{P}_{a_i} , onde a_i é par para $1 \leq i \leq h-1$, $a_1 = a_2 = k \geq 2$ (par) e $a_h < \frac{n}{2}$ é ímpar.*

Os caminhos \mathcal{P}_{a_i} são chamados de *ramos* da starlike $G \in \mathcal{S}_{n,k}$. Em particular, o caminho \mathcal{P}_{a_h} , com número ímpar de vértices, é o *ramo ímpar* de G . Vale ressaltar que um grafo de $\mathcal{S}_{n,k}$ possui um número par de vértices e a família está definida apenas para k par.

Um grafo $G \in \mathcal{S}_{n,k}$ de fato pertence ao conjunto $\mathfrak{W}_{n,2,k}$, considerando os blocos construtores $G^* = \mathcal{P}_k, \check{G}$ a starlike dada pela árvore G sem os dois ramos \mathcal{P}_k , e a matriz de adjacência da construção $Y_{1,k} = 1$ e $Y_{i,j} = 0$ para os demais índices, onde o vértice de índice 1 de \check{G} é o vértice u da starlike. Observe que uma mesma árvore G pode pertencer a $\mathcal{S}_{n,k}$ para diferentes valores de k .

Exemplo 4.12. O grafo G da Figura 4.7 é uma starlike com dois ramos \mathcal{P}_2 , dois ramos \mathcal{P}_4 e um ramo \mathcal{P}_3 . Portanto podemos considerar G tanto em $\mathcal{S}_{16,2}$ quanto em $\mathcal{S}_{16,4}$. Dependendo se o bloco construtor G^* for \mathcal{P}_2 ou \mathcal{P}_4 , o grafo G pode ser visto como elemento de $\mathfrak{W}_{16,2,2}$ ou $\mathfrak{W}_{16,2,4}$, respectivamente. \triangle

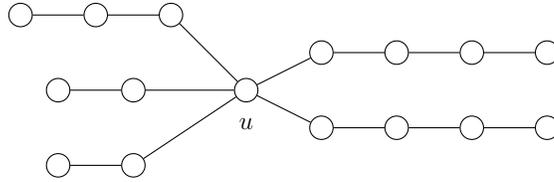


Figura 4.7: Grafo de $\mathcal{S}_{16,2}$ e $\mathcal{S}_{16,4}$

O teorema a seguir, demonstrado na próxima seção, apresenta o resultado da aplicação da operação \mathcal{E}_z nas árvores de $\mathcal{S}_{n,k}$. Vamos considerar que a folha do caminho \mathcal{P}_k é o vértice de índice 1 do bloco construtor G^* .

Teorema 4.13. *Se $G = G(\check{G}, 2\mathcal{P}_k, Y) \in \mathcal{S}_{n,k} \subset \mathfrak{W}_{n,2,k}$, então*

$$E_L(G) = E_L(\mathcal{E}_{e_1}(G)).$$

Isso quer dizer que, quando adicionamos uma aresta entre as folhas dos dois ramos \mathcal{P}_k da árvore starlike $G \in \mathcal{S}_{n,k}$, a energia laplaciana permanece a mesma.

Exemplo 4.14. Quando aplicamos a operação \mathcal{E}_{e_1} ao grafo G da Figura 4.7, visto como uma starlike de $\mathcal{S}_{16,2}$, obtemos o grafo unicíclico G_1 (à esquerda na Figura 4.8), que, por sua vez, possui a mesma energia laplaciana do que G . Por outro lado, quando aplicamos a operação \mathcal{E}_{e_1} no grafo G , visto agora como uma starlike de $\mathcal{S}_{16,4}$, obtemos o grafo unicíclico G_2 (à direita na Figura 4.8), também com a mesma energia laplaciana do que G . De fato, temos

$$E_L(G) = E_L(G_1) = E_L(G_2) = 21,739.$$

△



Figura 4.8: Grafos G_1 e G_2 com a mesma energia laplaciana

A partir do Teorema 4.13, temos como criar pares de grafos com a mesma energia laplaciana. Tomando um grafo especial de $\mathcal{S}_{n,k}$, podemos produzir conjuntos da ordem de \sqrt{n} elementos com o mesmo valor de energia laplaciana, onde n é o número de vértices do grafo.

Teorema 4.15. *Seja $\ell \geq 2$ inteiro. Existe uma família de ℓ grafos unicíclicos com $n = 2\ell^2 + 2\ell + 2$ vértices e com a mesma energia laplaciana. Em particular, se $G \in \bigcap_{i=1}^{\ell} \mathcal{S}_{2\ell^2+2\ell+2, 2i}$ então $\{\mathcal{E}_{e_1^{(2)}}(G), \mathcal{E}_{e_1^{(4)}}(G), \dots, \mathcal{E}_{e_1^{(2\ell)}}(G)\}$ forma um conjunto com ℓ grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana, onde $e_1^{(2i)}$ é o primeiro vetor canônico de \mathbb{R}^{2i} .*

Demonstração: Considere um grafo $G \in \mathcal{S}_{n,2} \cap \mathcal{S}_{n,4} \cap \cdots \cap \mathcal{S}_{n,2\ell}$ dado por um vértice u adjacente a duas cópias de \mathcal{P}_{2i} para cada $1 \leq i \leq \ell$ e a uma cópia de \mathcal{P}_1 . Este grafo tem $n = 2 + 2 \sum_{i=1}^{\ell} 2i = 2(\ell^2 + \ell + 1)$ vértices.

Considerando G como um grafo de $\mathcal{S}_{n,2i}$, para $1 \leq i \leq \ell$, podemos construir o grafo unicíclico $G_i = \mathcal{E}_{e_1^{(2i)}}(G)$, onde $e_1^{(2i)}$ é o vetor canônico e_1 visto como vetor de \mathbb{R}^{2i} . Em particular, cada grafo G_i contém o ciclo \mathcal{C}_{2i+1} como subgrafo induzido. Os ℓ grafos G_i construídos dessa forma têm a mesma energia laplaciana de G pelo Teorema 4.13. \square

Queremos construir grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana para todos os valores pares de n . Portanto definimos um parâmetro γ inteiro não negativo. Se adicionarmos 2γ vértices ao grafo G indicado no Teorema 4.15, pertencente a $\bigcap_{i=1}^{\ell} \mathcal{S}_{2\ell^2+2\ell+2,2i}$, distribuídos em novos caminhos de tamanho par ou aumentando o comprimento do caminho ímpar de forma de que este não tenha mais do que a metade dos vértices do grafo ($a_h < \frac{n}{2}$), então $\{\mathcal{E}_{e_1^{(2)}}(G), \mathcal{E}_{e_1^{(4)}}(G), \dots, \mathcal{E}_{e_1^{(2\ell)}}(G)\}$ continua formando um conjunto com ℓ grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana.

Exemplo 4.16. Vamos construir uma família com $\ell = 4$ grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana. Para tanto são suficientes $n = 42$ vértices, como afirma o Teorema 4.15. Vamos escolher $\gamma = 1$ e tomar um grafo G com 44 vértices na interseção das famílias $\mathcal{S}_{44,k}$, para $k = 1, 2, 3, 4$, ou seja, G é uma starlike com vértice u adjacente a dois caminhos \mathcal{P}_2 , dois caminhos \mathcal{P}_4 , dois caminhos \mathcal{P}_6 , dois caminhos \mathcal{P}_8 , um caminho (de comprimento ímpar) \mathcal{P}_1 . Temos mais $2\gamma = 2$ vértices excedentes à nossa escolha: podemos adicionar um novo caminho par \mathcal{P}_2 ou alongar o caminho de comprimento ímpar para \mathcal{P}_3 .

Escolhendo um novo caminho \mathcal{P}_2 para completar G , obtemos os grafos unicíclicos apresentados na Figura 4.9, todos com $E_L = 60,707$, tal como o próprio grafo G . Se escolhêssemos os dois vértices excedentes para alongar o caminho ímpar em \mathcal{P}_3 , teríamos um outro conjunto de quatro grafos unicíclicos, todos com $E_L = 59,979$. \triangle

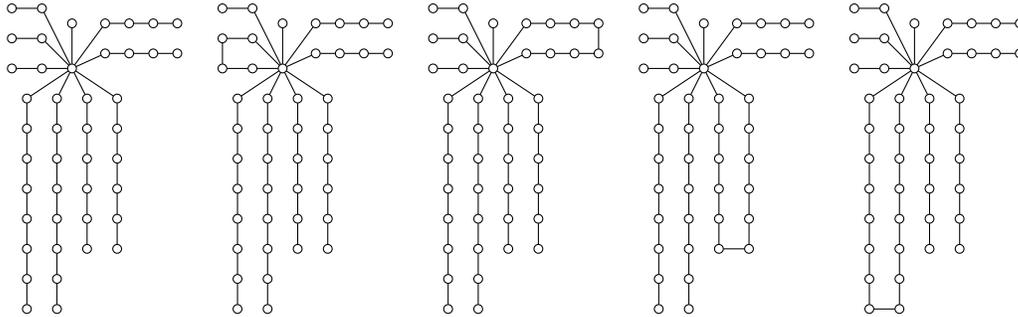


Figura 4.9: Árvore G e grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana

O número de conjuntos distintos com ℓ elementos cada que podemos formar, estes elementos sendo grafos unicíclicos com n vértices e com a mesma energia laplaciana, está relacionado com o número $\gamma = \frac{n-2\ell-2\ell^2-2}{2}$. Para cada unidade de γ são adicionados 2 vértices no grafo starlike G gerador do conjunto de unicíclicos, em forma de novos caminhos pendentes de comprimento par ou alongamento do caminho ímpar, sempre tomando o cuidado para que seu comprimento seja menor do que $\frac{n}{2}$.

O número de maneiras que podemos fazer essa distribuição está relacionada com a partição dos inteiros, isto é, maneiras de expressar um número inteiro positivo como soma de números inteiros positivos. Escolhemos inicialmente $\tau \leq \gamma$ pares de vértices para aumentar o ramo ímpar, e os $\gamma - \tau$ pares de vértices restantes distribuimos em novos ramos de tamanho par, o que nos dá a quantidade $p(\gamma - \tau)$ de maneiras distintas de fazermos isso, onde $p(k)$ é o número de partições do inteiro k (veja [2] para mais informações). Isso nos dá o número $q(\gamma) = \sum_{\tau=0}^{\gamma} p(\tau)$,

a quantidade de conjuntos distintos, se $\gamma < \ell(\ell + 1)$ (condição necessária para que $a_h < \frac{n}{2}$ para qualquer valor de τ). Por exemplo, se $\gamma = 2$, podemos transformar o caminho ímpar em \mathcal{P}_5 , \mathcal{P}_3 ou mantê-lo \mathcal{P}_1 . Dessa forma não adicionamos novos caminhos pendentes pares, adicionamos somente \mathcal{P}_2 , ou temos a possibilidade de adicionar um caminho \mathcal{P}_4 ou dois \mathcal{P}_2 , respectivamente. Assim $q(2) = 1 + 1 + 2 = 4$. No Exemplo 4.16, obtivemos $q(1) = 1 + 1 = 2$: adicionar um novo caminho \mathcal{P}_2 ou tornar o caminho ímpar em \mathcal{P}_3 .

Exemplo 4.17. Para formar um conjunto com $\ell = 4$ grafos unicíclicos e escolhendo $\gamma = 4$, temos $q(4) = 12$ conjuntos distintos que podemos formar, cada um com 4 grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana. A Tabela 4.1 a seguir apresenta as possíveis configurações dos 8 vértices extras do grafo $G \in \bigcap_{i=1}^4 \mathcal{S}_{50,2i}$. A coluna τ indica a quantidade de pares de vértices adicionados no ramo ímpar e a_h o tamanho desse ramo. A coluna $\gamma - \tau$ indica a quantidade de pares de vértices restantes para distribuir em ramos pares adicionais e as colunas \mathcal{P}_{2i} indicam a quantidade de caminhos \mathcal{P}_{2i} adicionais.

Se uma partição tem k elementos x na soma, então adicionaremos k ramos \mathcal{P}_{2x} extras. No Exemplo 4.16, escolhemos $\gamma = 1$ e devíamos escolher onde colocar os $2\gamma = 2$ vértices excedentes. As possibilidades eram: adicionar dois vértices no ramo ímpar ($\tau = 1$, $\gamma - \tau = 0$ e partição de (0)) ou adicionar um ramo par de tamanho dois ($\tau = 0$, $\gamma - \tau = 1$ e partição (1)). \triangle

Dado um número par n de vértices, para que possamos formar um conjunto com grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana com base no Teorema 4.15 precisamos resolver a equação $n \geq 2\ell^2 + 2\ell + 2$ para ℓ . Para que tenhamos no mínimo 2 grafos com a mesma energia laplaciana precisamos ter $n \geq 14$. O número de conjuntos que podemos formar com ℓ grafos está relacionado com $\gamma = \frac{n-2\ell^2-2\ell-2}{2}$, como comentado anteriormente.

τ	a_h	$\gamma - \tau$	Partição	\mathcal{P}_2	\mathcal{P}_4	\mathcal{P}_6	\mathcal{P}_8
4	9	0	0	0	0	0	0
3	7	1	1	1	0	0	0
2	5	2	1+1	2	0	0	0
2	5	2	2	0	1	0	0
1	3	3	1+1+1	3	0	0	0
1	3	3	1+2	1	1	0	0
1	3	3	3	0	0	1	0
0	1	4	1+1+1+1	4	0	0	0
0	1	4	1+1+2	1	2	0	0
0	1	4	1+3	1	0	1	0
0	1	4	2+2	0	2	0	0
0	1	4	4	0	0	0	1

Tabela 4.1: Distribuição dos 2γ vértices excedentes

Teorema 4.18. *Dado $n \geq 14$ par, há um conjunto com $\ell = \lfloor \frac{\sqrt{2n-3}-1}{2} \rfloor$ grafos unicíclicos, com n vértices, com a mesma energia laplaciana.*

Exemplo 4.19. Queremos formar um conjunto de grafos unicíclicos com $n = 32$ vértices e com a mesma energia laplaciana. Pelo Teorema 4.18, podemos formar um conjunto com $\ell = \lfloor \frac{\sqrt{61}-1}{2} \rfloor = 3$ grafos unicíclicos. O grafo gerador G do conjunto é indicado pelo Teorema 4.15 e é uma starlike com dois caminhos \mathcal{P}_2 , dois caminhos \mathcal{P}_4 , dois caminhos \mathcal{P}_6 e um caminho ímpar \mathcal{P}_1 , mas precisamos completá-lo com $2\gamma = 6$ vértices adicionais. Há $q(3) = 7$ maneiras de adicionar esses vértices como caminhos pares extras ou alongando o caminho ímpar. Na Figura 4.10 temos os sete grafos G que geram $\{\mathcal{E}_{e_1^{(2)}}(G), \mathcal{E}_{e_1^{(4)}}(G), \mathcal{E}_{e_1^{(6)}}(G)\}$, conjunto com três grafos unicíclicos com 32 vértices e com a mesma energia laplaciana. \triangle

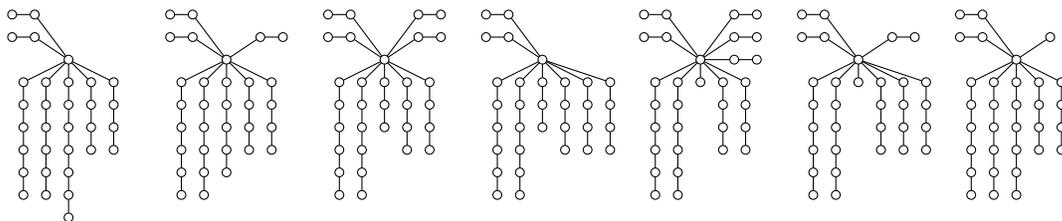


Figura 4.10: Árvore geradoras de grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana

Na próxima seção será dada a demonstração do Teorema 4.13 a partir de uma sequência de resultados, alguns técnicos e outros acerca de subconjuntos do espectro laplaciano de G e $\mathcal{E}_{e_1}(G)$.

4.3 Demonstração do Teorema 4.13

Para demonstrar o Teorema 4.13 precisamos saber o que acontece com os autovalores laplacianos de um grafo de $\mathcal{S}_{n,k}$ durante a aplicação da operação \mathcal{E}_{e_1} .

A operação \mathcal{E}_{e_1} , na qual estamos interessados, pode ser vista num contexto um pouco mais amplo do que somente aplicada à família $\mathcal{S}_{n,k}$. Seja $\mathcal{S}_{n,k}^* \subset \mathfrak{W}_{n,2,k}$ o conjunto de todos os grafos que possuem duas cópias de $G^* = \mathcal{P}_k$ como um dos seus blocos construtores (\check{G} é um grafo qualquer) e matriz de adjacência da construção satisfazendo $Y_{1,k} = 1$ e $Y_{i,j} = 0$ para os demais índices (um vértice de \check{G} adjacente a uma folha dos caminhos \mathcal{P}_k). A família $\mathcal{S}_{n,k}^*$ está definida para índices pares ou ímpares e claramente $\mathcal{S}_{n,k} \subset \mathcal{S}_{n,k}^*$.

Exemplo 4.20. O grafo $G = G(\check{G}, 2\mathcal{P}_3, Y)$ da Figura 4.11 pertence a família $\mathcal{S}_{10,3}^*$, pois é formado por um grafo $\check{G} = K_4$ onde apenas um de seus vértices é adjacente a dois caminhos \mathcal{P}_3 . △

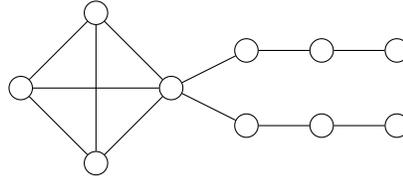


Figura 4.11: Grafo $G \in \mathcal{S}_{10,3}^*$

Proposição 4.21. *Se $G \in \mathcal{S}_{n,k}^*$ então $D_k \subset \sigma_L(G)$. Além disso*

$$\sigma_L(\mathcal{E}_{e_1}(G)) = (\sigma_L(G) \setminus D_k) \cup F_k,$$

onde

$$D_k = \left\{ 2 + 2 \cos \frac{2j\pi}{2k+1} : j = 1, \dots, k \right\} \text{ e}$$

$$F_k = \left\{ 2 - 2 \cos \frac{2j\pi}{2k+1} : j = 1, \dots, k \right\}.$$

Exemplo 4.22. Considere o grafo G da Figura 4.11 com bloco construtor $G^* = \mathcal{P}_3$. A operação \mathcal{E}_{e_1} adiciona uma aresta entre as folhas dos dois caminhos pendentes \mathcal{P}_3 , resultando no grafo ilustrado na Figura 4.12. Portanto a diferença do espectro laplaciano de G e $\mathcal{E}_{e_1}(G)$ consiste na substituição do conjunto $D_3 = \{0,198; 1,555; 3,247\}$ pelo conjunto $F_3 = \{0,753; 2,445; 3,802\}$ em $\sigma_L(G)$. \triangle

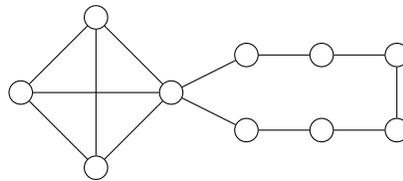


Figura 4.12: Grafo $\mathcal{E}_{e_1}(G)$, onde $G \in \mathcal{S}_{10,3}^*$

Para a prova da Proposição 4.21, o seguinte lema terá um papel muito útil. Uma demonstração dele pode ser encontrada em [38], trabalho de Yueh sobre matrizes tridiagonais.

Lema 4.23 ([38], Teoremas 1, 2 e 4). *Seja B_n a matriz tridiagonal*

$$B_n(a, b, c, \alpha, \beta) = \begin{bmatrix} b - \alpha & c & & & \\ & a & b & c & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & a & b & c \\ & & & & a & b - \beta \end{bmatrix}_{n \times n}. \quad (4.2)$$

Se $\alpha = \pm\sqrt{ac}$ e $\beta = 0$ então $\sigma(B_n) = \{b + 2\alpha \cos \frac{2j\pi}{2n+1} : j = 1, 2, \dots, n\}$.

Se $\alpha = \beta = \sqrt{ac}$ então $\sigma(B_n) = \{b + 2\alpha \cos \frac{j\pi}{n} : j = 1, 2, \dots, n\}$.

Facilmente obtemos que o espectro laplaciano do caminho \mathcal{P}_n , após usarmos a igualdade $\cos(\theta) = -\cos(\pi - \theta)$, é o conjunto

$$\sigma_L(\mathcal{P}_n) = \sigma(B_n(-1, 2, -1, 1, 1)) = \left\{ 2 - 2 \cos \frac{j\pi}{n} : j = 0, 1, 2, \dots, n-1 \right\}. \quad (4.3)$$

Demonstração (Proposição 4.21): Pelo Teorema 4.5, o espectro laplaciano do grafo $G = G(\check{G}, 2\mathcal{P}_k, Y) \in \mathcal{S}_{n,k}^*$ possui um subconjunto $\sigma(D)$ de autovalores dado pelo espectro da matriz quadrada $D = L(\mathcal{P}_k) + E_Y$ de ordem k , onde E_Y é uma matriz diagonal com todas as entradas iguais a zero exceto pela entrada (k, k) igual a 1. Assim

$$D = L(\mathcal{P}_k) + E_Y = B_k(-1, 2, -1, +1, 0) = \begin{bmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & -1 & \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

e portanto $\sigma(D) = \sigma(B_k(-1, 2, -1, +1, 0)) = D_k$, pois $\alpha = \sqrt{(-1)(-1)} = 1$ no Lema 4.23.

Ao aplicarmos \mathcal{E}_{e_1} sobre o grafo G , o Teorema 4.5 afirma que estamos substituindo o conjunto de autovalores contido no conjunto $\sigma(D) = D_k$ pelo conjunto

de autovalores contidos em $\sigma(F)$, onde $F = L(\mathcal{P}_k) + E_Y + 2E_{e_1}$. Assim

$$F = L(\mathcal{P}_k) + E_Y + 2E_{e_1} = B_k(-1, 2, -1, -1, 0) = \begin{bmatrix} 3 & -1 & & & \\ -1 & 2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & -1 & \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

e portanto $\sigma(F) = \sigma(B_k(-1, 2, -1, -1, 0)) = F_k$, pois $\alpha = -\sqrt{(-1)(-1)} = -1$ no Lema 4.23. \square

Já conhecemos um pouco sobre o espectro laplaciano de $G \in \mathcal{S}_{n,k}$ e $\mathcal{E}_{e_1}(G)$, mas precisamos ainda conhecer o número de autovalores laplacianos acima da média para podermos usar o Lema 2.38 sobre diferença da energia laplaciana. Nesse caso especial, vamos considerar σ o número de autovalores laplacianos *maiores ou iguais* a média, lembrando que a média dos autovalores é diferente para G e $\mathcal{E}_{e_1}(G)$. Seguem três lemas, dois técnicos e outro a respeito da quantidade de autovalores laplacianos.

Lema 4.24. *Dado um inteiro positivo k par, há exatamente $\frac{k}{2}$ elementos de F_k maiores ou iguais a 2 e $\frac{k}{2}$ elementos de D_k maiores ou iguais a $2 - \frac{2}{2k+2}$ (e nenhum elemento entre $2 - \frac{2}{2k+2}$ e 2).*

Demonstração: Um elemento de F_k é maior ou igual a 2 se e somente se $2 - 2 \cos \frac{2j\pi}{2k+1} \geq 2$, ou seja, j deve ser maior ou igual a $\frac{k+1}{2}$. Para tal, há exatamente $\frac{k}{2}$ índices que satisfazem a condição, a saber, $j = \frac{k}{2} + 1, \dots, n$.

Para a afirmação sobre o conjunto D_k , primeiramente notamos que para $j = 1, \dots, \frac{k}{2}$ os elementos de D_k são todos maiores do que 2, e portanto maiores do

que $2 - \frac{2}{2k+2}$. Se tomarmos $j = \frac{k}{2} + 1$ teremos

$$\begin{aligned} -\cos\left(\frac{(k+2)\pi}{2k+1}\right) &= \sin\left(\frac{3\pi}{4k+2}\right) > \frac{3\pi}{4k+2} - \frac{1}{3!}\left(\frac{3\pi}{4k+2}\right)^3 \\ &> \frac{3\pi}{4k+4} - \frac{1}{6}\left(\frac{3\pi}{4k}\right)^3 = \frac{3\pi-2}{4k+4} - \frac{9\pi^3}{128k^3} + \frac{1}{2k+2} \\ &> \frac{237k^3 - 280k - 280}{128k^3(k+1)} + \frac{1}{2k+2} > \frac{1}{2k+2}, \end{aligned}$$

para $k \geq 2$, assim

$$2 + 2\cos\left(\frac{(k+2)\pi}{2k+1}\right) < 2 - \frac{2}{2k+2} \leq 2 - \frac{2}{n}.$$

Portanto, para $j = \frac{k}{2}$, o elemento de D_k é menor do que $2 - \frac{2}{2k+2}$. O mesmo ocorre para índices $j = \frac{k}{2} + 2, \dots, n$, pois cosseno é uma função decrescente no intervalo $(0, \pi)$. Logo há exatamente $\frac{k}{2}$ elementos de D_k maiores ou iguais a $2 - \frac{2}{2k+2}$. \square

Lema 4.25. *Para k inteiro positivo,*

$$\sum_{j=1}^k \cos \frac{2j\pi}{2k+1} = -\frac{1}{2}.$$

Demonstração: Da Proposição 2.31 temos que $\sum \mu_i = 2m$, ou seja, a soma dos autovalores laplacianos é igual ao dobro do número de arestas. Como \mathcal{E}_{e_1} adiciona somente uma aresta em G , a diferença da soma dos autovalores de $G' = \mathcal{E}_{e_1}(G)$ e G é 2. Assim,

$$\begin{aligned} 2 &= \sum_{i=1}^n \mu_i^{G'} - \sum_{i=1}^n \mu_i^G \\ &= \sum_{\mu_i^{G'} \in F_k} \mu_i^{G'} + \sum_{\mu_i^{G'} \in \sigma_L(G') \setminus F_k} \mu_i^{G'} - \sum_{\mu_i^G \in D_k} \mu_i^G - \sum_{\mu_i^G \in \sigma_L(G) \setminus D_k} \mu_i^G \\ &= \sum_{i=1}^k \left(2 - 2\cos \frac{2i\pi}{2k+1}\right) - \sum_{i=1}^k \left(2 + 2\cos \frac{2i\pi}{2k+1}\right) + 0 \\ &= -4 \sum_{i=1}^k \cos \frac{2i\pi}{2k+1} \end{aligned}$$

e segue o resultado. Aqui usamos a Proposição 4.21 que diz que há $n - k$ autovalores laplacianos iguais entre G e G' , isto é $\sigma_L(G) \setminus D_k = \sigma_L(G') \setminus F_k$. \square

Lema 4.26. *Todo grafo $G \in \mathcal{S}_{n,k}$ (com n e k pares) satisfaz $\rho^G = \rho^{\mathcal{E}_{e_1}(G)} = \frac{n}{2}$.*

Demonstração: Seja $G \in \mathcal{S}_{n,k}$. Vamos aplicar o algoritmo de localização de autovalores da Seção 2.4 na árvore G , escolhendo o vértice u como raiz e $\alpha = 2$. A Figura 4.13 apresenta os valores de $a(v)$ no início e após a aplicação do algoritmo. Ao final do algoritmo, os vértices folha terão valor $a(v) = -1$, os vértices em um ramo a uma distância ímpar da folha terão valor $a(v) = 1$ enquanto que aqueles a uma distância par terão valor $a(v) = -1$. E o vértice u terminará com valor $a(u) = r - 2 - (r - 1) + 1 = 0$, onde r é o número de ramos de G . Portanto o número de autovalores laplacianos maiores ou iguais a $\alpha = 2$ em G é $\frac{n}{2}$, o número de valores $a(v)$ maiores ou iguais a zero.

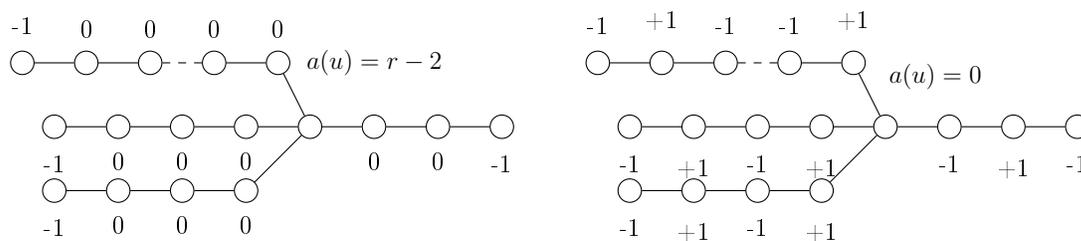


Figura 4.13: Distribuição dos valores de $a(v)$ antes e após o algoritmo de localização

Pelo Lema 4.24, dos $\frac{n}{2}$ autovalores laplacianos de G maiores ou iguais a 2, há exatamente $\frac{k}{2}$ elementos de D_k . Agora o grafo $\mathcal{E}_{e_1}(G)$ tem os mesmos $\frac{n-k}{2}$ autovalores laplacianos maiores ou iguais a 2 que G , além de mais $\frac{k}{2}$ elementos de F_k (que substituem os de D_k), também maiores ou iguais a 2 (Lema 4.24). Portanto $\mathcal{E}_{e_1}(G)$ tem $\frac{n}{2}$ autovalores laplacianos maiores ou iguais a 2.

Para calcular ρ^G , vamos aplicar o algoritmo de localização para G com $\alpha = \bar{\delta}^G = 2 - \frac{2}{n}$. Inicialmente a cada vértice folha associamos o valor $a(v) = -1 + \frac{2}{n}$, os vértices de grau dois têm valor $a(v) = \frac{2}{n}$, e $a(u) = r - 2 + \frac{2}{n}$. Prestando atenção no decorrer do algoritmo em cada ramo \mathcal{P}_{a_i} de G , queremos mostrar que o número de entradas positivas de $a(v)$ em \mathcal{P}_{a_i} ao final do algoritmo é no máximo $\lfloor \frac{a_i}{2} \rfloor$. Observe que isso leva ao nosso resultado pois o número de entradas positivas do algoritmo, exceto pela contribuição de u , é $\sum_{i=1}^{h-1} \frac{a_i}{2} + \frac{a_{h-1}}{2} = \frac{n-2}{2}$. A raiz u pode contribuir com mais um valor positivo, dando-nos $\rho^G \leq \frac{n}{2}$. Por outro lado, já sabemos que há $\frac{n}{2}$ autovalores laplacianos de G maiores ou iguais a 2 ($\rho^G \geq \frac{n}{2}$), assim $\rho^G = \frac{n}{2}$.

Como resultado auxiliar, vamos usar o fato de que há precisamente $\lfloor \frac{t}{2} \rfloor$ autovalores laplacianos maiores ou iguais a média $\bar{\delta} = 2 - \frac{2}{t}$ para o caminho \mathcal{P}_t . Os autovalores laplacianos de \mathcal{P}_t são $\alpha_j = 2 - 2 \cos \frac{j\pi}{t}$ para $j = 0, \dots, t-1$ (conforme (4.3)). Para t par, sabemos que $\alpha_j > 2$ para $\frac{t}{2} \leq j \leq t-1$. Para $j = \frac{t}{2} - 1$ teremos

$$\cos \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{t} \right) = \operatorname{sen} \frac{\pi}{t} > \frac{\pi}{t} - \frac{\pi^3}{6t^3} > \frac{1}{t}$$

para $t \geq 2$, ou seja

$$2 - 2 \cos \frac{\left(\frac{t}{2} - 1\right)\pi}{t} < 2 - \frac{2}{t},$$

assim $\alpha_{\frac{t}{2}-1} < 2 - \frac{2}{t}$ resultando em $\frac{t}{2}$ autovalores maiores do que a média. Para t ímpar procedemos de maneira semelhante e provamos que $\alpha_{\frac{t-1}{2}} < 2 - \frac{2}{t}$.

Primeiro estudaremos o caso a_i par. Considere a aplicação do algoritmo de localização no grafo $G^* = \mathcal{P}_{a_i+1}$ (com a raiz em uma de suas folhas) com $\alpha^* = 2 - \frac{2}{a_i+1}$. O resultado auxiliar nos diz que exatamente $\frac{a_i}{2}$ entradas de $a(v)$ serão negativas. Observe que, se o algoritmo fosse aplicado a G com o mesmo valor α^* , os valores obtidos no ramo \mathcal{P}_{a_i} seriam os mesmos. Como $a_i + 1 < n$ (e temos que $\alpha > \alpha^*$), o número de entradas positivas não pode aumentar se substituímos α^* por α (se haviam r autovalores maiores do que x , não pode haver mais de r autovalores maiores do que $x' > x$), o que nos leva a cota superior de $\frac{a_i}{2}$ para o ramo.

Para a_h ímpar, vamos considerar a aplicação do algoritmo de localização no grafo $G^{**} = \mathcal{P}_{2a_h+1}$ (com raiz no vértice w) com $\alpha^{**} = 2 - \frac{2}{2a_h+1}$. O resultado auxiliar nos dá que há exatamente a_h entradas não negativas no final do processo. Por simetria, o número de entradas não negativas de $a(v)$ em cada componente de $G^{**} - w$ deve ser igual, a saber igual a $\lfloor \frac{a_h}{2} \rfloor$. Isso implica que o número de entradas não negativas em \mathcal{P}_{a_h} quando aplicamos o algoritmo de localização em G (com raiz em u) com α^{**} é $\lfloor \frac{a_h}{2} \rfloor$ (veja a disposição dos valores na Figura 4.14 como ilustração).

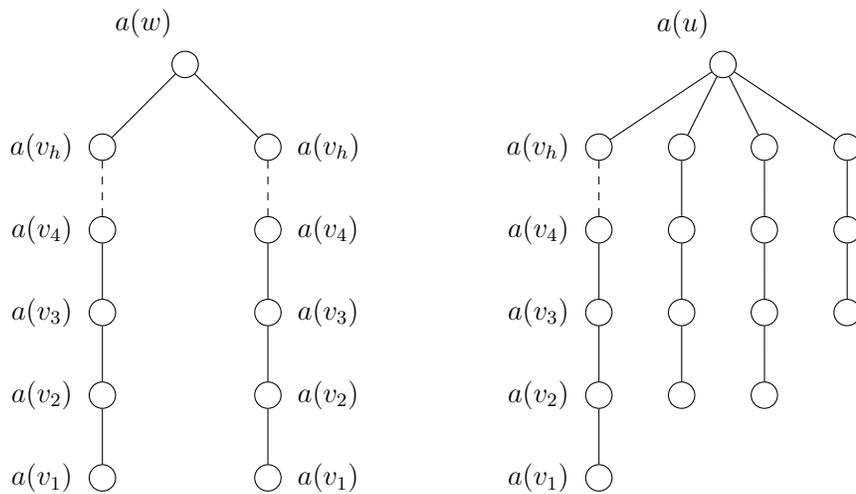


Figura 4.14: Aplicação do algoritmo em \mathcal{P}_{2a_h+1} e G

Pela definição do conjunto $\mathcal{S}_{n,k}$, temos que $a_h < \frac{n}{2}$, ou seja $\alpha = 2 - \frac{2}{n} \geq \alpha^{**}$. Portanto o número de entradas não negativas no ramo ímpar \mathcal{P}_{a_h} quando aplicamos o algoritmo em G com $\alpha = 2 - \frac{2}{n}$ é limitado superiormente por $\lfloor \frac{a_h}{2} \rfloor$, como queríamos. \square

Demonstração (Teorema 4.13): Seja $G \in \mathcal{S}_{n,k}$, com n e k pares. Pelo Lema 4.26, tanto G quanto $\mathcal{E}_{e_1}(G)$ têm $\frac{n}{2}$ autovalores laplacianos maiores ou iguais as suas respectivas médias. Assim podemos aplicar o Lema 2.38 para G e $G' = \mathcal{E}_{e_1}(G)$, obtendo

$$\Delta E_L = \Delta E_L(G', G) = 2 \sum_{i=1}^{\rho} (\mu_i^{G'} - \mu_i^G) - \frac{4\rho\Delta e}{n} = 2 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} (\mu_i^{G'} - \mu_i^G) - 2,$$

pois $\Delta e = 1$ e $\rho = \frac{n}{2}$.

Sabemos que os autovalores laplacianos desses dois grafos satisfazem

$$\sigma_L(G) \setminus D_k = \sigma_L(\mathcal{E}_{e_1}(G)) \setminus F_k,$$

resultado do Teorema 4.5. Portanto pelo Lema 4.24 a diferença entre os autovalores laplacianos maiores do que as respectivas médias se dá pela diferença entre os $\frac{k}{2}$ maiores autovalores de D_k e F_k . Denotando por S o conjunto dos $\frac{n-k}{2}$ autovalores laplacianos maiores ou iguais a média compartilhado por ambos os grafos, temos que

$$\begin{aligned} \Delta E_L &= 2 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} (\mu_i^{G'} - \mu_i^G) - 2 \\ &= 2 \sum_{\mu_i^{G'} = \mu_j^G \in S} (\mu_i^{G'} - \mu_j^G) \\ &\quad + 2 \sum_{j=1}^{\frac{k}{2}} \left[\left(2 - 2 \cos \frac{2(j + \frac{k}{2})\pi}{2k+1} \right) - \left(2 + 2 \cos \frac{2j\pi}{2k+1} \right) \right] - 2 \\ &= 0 - 4 \sum_{j=1}^{\frac{k}{2}} \left(\cos \frac{2(j + \frac{k}{2})\pi}{2k+1} + \cos \frac{2j\pi}{2k+1} \right) - 2 \\ &= -4 \sum_{j=1}^k \cos \frac{2j\pi}{2k+1} - 2 = 0. \end{aligned}$$

Para concluir, usamos o Lema 4.25 e portanto a energia laplaciana é igual para os dois grafos. \square

Corolário 4.27 (Teorema 4.15). *A família de ℓ grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana é não coespectral.*

Demonstração: Seja $G \in \mathcal{S}_{n,k}$ o grafo starlike indicado na demonstração do Teorema 4.15. Se $G_i = \mathcal{E}_{e_1^{(2i)}}(G)$ e $G_j = \mathcal{E}_{e_1^{(2j)}}(G)$ onde $1 \leq i < j \leq \lfloor \frac{\sqrt{2n-3}-1}{2} \rfloor$, então

$$\sigma_L(G) = M \cup D_{2i} \cup D_{2j}, \quad \sigma_L(G_i) = M \cup F_{2i} \cup D_{2j}, \quad \sigma_L(G_j) = M \cup D_{2i} \cup F_{2j}.$$

Vamos supor por absurdo que G_i e G_j são coespectrais. O número $\alpha_j = 2 + 2 \cos\left(\frac{2\pi}{4j+1}\right) \in D_{2j}$ é um autovalor laplaciano de G_i e portanto deve ser um elemento de $D_{2i} \cup F_{2j}$ com multiplicidade no mínimo 1. Como $\alpha_j \notin F_{2j}$, devemos ter $\alpha_j \in D_{2i}$. Ou seja, existe $1 \leq k \leq i$ inteiro tal que $\frac{2\pi}{4j+1} = \frac{2k\pi}{4i+1}$. Isso nos dá que $k = \frac{4i+1}{4j+1} < 1$, uma contradição. \square

5 ORDENAMENTO DE ÁRVORES PELA ENERGIA LAPLACIANA

Um problema em Teoria Espectral de Grafos é identificar os grafos maximais (ou minimais) com relação a um certo invariante. Um dos problemas estudados é descobrir qual grafo de uma certa família possui a maior energia laplaciana. Quando tratamos somente de árvores, já temos a resposta para a pergunta. Em 2011, foi provado por Fritscher et. al. [14] que, dentre todas as árvores com n vértices, a estrela \mathcal{S}_n é a árvore com maior energia laplaciana. Mas quais são as árvores com a 2ª, 3ª, i -ésima maior energia laplaciana?

A Proposição 2.37 estabelece que podemos obter a energia laplaciana de um grafo G através do número de autovalores laplacianos maiores do que a média dos graus $\bar{\delta}$, denotado aqui por ρ , e a soma desses ρ maiores autovalores laplacianos.

$$E_L(G) = 2 \sum_{\mu_i > \bar{\delta}} \mu_i - 2\rho\bar{\delta}$$

Definição 5.1. *Dado um grafo G , seja S_k a soma dos k maiores autovalores laplacianos de G . Isto é, se $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n$ são os autovalores laplacianos de G , então*

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

No caso particular de $k = 1$, temos $S_1 = \mu_1 \leq n$ para qualquer árvore, ocorrendo igualdade se e somente se a árvore é uma estrela. Para árvores que não são estrelas, temos o resultado a seguir, demonstrado em [14].

Teorema 5.2 ([14]). *Se T é uma árvore com n vértices diferente da estrela então*

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

Radenković e Gutman [27] conjecturam que as árvores com maior energia laplaciana, além da estrela, são as árvores de diâmetro três com número de folhas equilibrado nos dois nós. Vejamos qual a forma de uma árvore de diâmetro 3.

Denotamos por $T(a, b)$ uma árvore com dois vértices centrais adjacentes, um deles com $a \geq 1$ folhas e o outro com $b \geq 1$ folhas (veja Figura 5.1). Para qualquer árvore T de diâmetro 3, existem $a \geq b \geq 1$ tais que $T = T(a, b)$. Essas árvores já foram estudadas por Trevisan, Carvalho, Del-Vecchio e Vinagre em [36]. O próximo resultado é devido a esses autores, mas também daremos uma demonstração aqui.

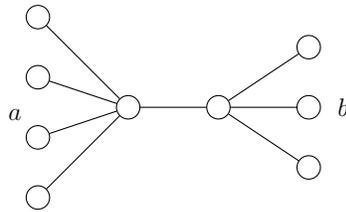


Figura 5.1: Árvore de diâmetro 3, $T(a, b)$

Teorema 5.3 ([36]). *Para inteiros $a \geq b \geq 1$ fixos, temos $\rho(T(a, b)) = 2$ e $S_k(T(a, b)) < n + k - \frac{2}{n}$. Além disso, a energia laplaciana de $T(a + k, b - k)$ é uma função decrescente de k , para $k = 0, \dots, b - 1$.*

Demonstração: A árvore $T(a, b)$ tem $n = a + b + 2$ vértices. Pelo Corolário 3.25, $T(a, b)$ tem $n - 4$ autovalores laplacianos iguais a 1, e os demais 4 autovalores laplacianos são os autovalores do GWG dado pelo caminho \mathcal{P}_4 da Figura 5.2 obtido após duas aplicações do Algoritmo 1 no GWG dado por $T(a, b)$, com vértices com peso igual ao grau do vértice e arestas com peso igual a -1 (a matriz do GWG é a matriz laplaciana de $T(a, b)$). A matriz desse GWG é dado por

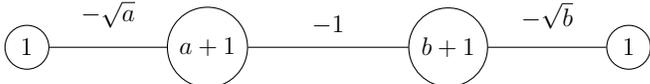
$$M' = \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{a} & & & \\ -\sqrt{a} & a+1 & -1 & & \\ & -1 & b+1 & -\sqrt{b} & \\ & & -\sqrt{b} & 1 & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}.$$


Figura 5.2: GWG com os demais 4 autovalores laplacianos de $T(a, b)$

O polinômio característico da matriz laplaciana de $T(a, b)$ tem a forma

$$P_{L(T(a,b))}(x) = q_{a,b}(x) \cdot (x-1)^{n-4} \cdot (x)$$

onde

$$q_{a,b}(x) = x^3 - bx^2 - ax^2 - 4x^2 + abx + 2bx + 2ax + 5x - b - a - 2.$$

Aplicando o algoritmo de localização de autovalores nessa árvore, com $\alpha = 2$ e $\alpha = 1$ (veja a Figura 5.3 para a disposição dos valores de $a(v)$ após a aplicação do algoritmo), obtemos dois autovalores maiores do que 2 e dois autovalores maiores do que 1 (dois valores positivos de $a(v)$ em cada situação). Portanto, como $1 < \bar{\delta} < 2$, há exatamente $\rho = 2$ autovalores maiores do que $\bar{\delta}$ e esses dois autovalores são raízes de $q_{a,b}(x)$. Além disso, as três raízes $y_1 \geq y_2 \geq y_3$ de $q_{a,b}(x)$ somam $a+b+4 = n+2$.

Pelo Lema 2.38, como $G = T(a, b)$ e $G' = T(a+k, b-k)$ têm o mesmo número de arestas e $\rho^G = \rho^{G'} = 2$, a diferença entre as energias laplacianas $\Delta E_L = E_L(G') - E_L(G)$ é

$$\Delta E_L = 2(\mu_1^{G'} + \mu_2^{G'}) - 2(\mu_1^G + \mu_2^G) = 2(n+2 - y_3^{G'}) - 2(n+2 - y_3^G) = 2(y_3^G - y_3^{G'}),$$

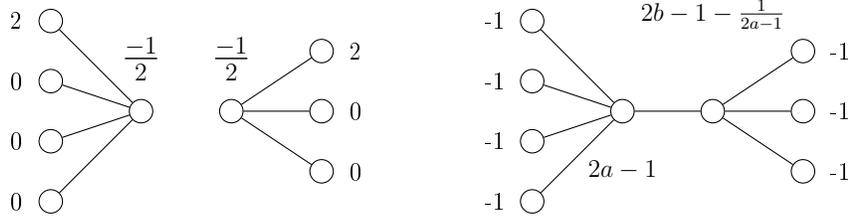


Figura 5.3: Disposição dos valores de $a(v)$ após aplicação do algoritmo de localização para $\alpha = 1$ e $\alpha = 2$, respectivamente

onde y_3^G e $y_3^{G'}$ são a terceira raiz de $q_{a,b}(x)$ e $q_{a+k,b-k}(x)$, respectivamente. Calculando a diferença entre os polinômios q obtemos

$$q_{a,b}(x) - q_{a+k,b-k}(x) = k(k+a-b)x$$

que é positivo para qualquer valor de $x > 0$. Assim, quando $q_{a+k,b-k}(x)$ atingir a primeira raiz $y_3^{G'}$, o polinômio $q_{a,b}(x)$ avaliado neste ponto será positivo. Como $q_{a,b}(0) < 0$ e $q_{a,b}(y_3^{G'}) > 0$, temos que $q_{a,b}$ já atingiu a sua primeira raiz antes de $q_{a+k,b-k}$. Dessa forma $y_3^G < y_3^{G'}$ e concluímos que $\Delta E_L = 2(y_3^{G'} - y_3^G) < 0$ para qualquer $k > 0$.

O maior valor de y_3 ocorre para $b = 1$, ou seja, em $T(n-3, 1)$. Aplicando o valor $x = \frac{2}{n}$ em $p_{n-3,1}(x)$ obtemos uma função em n que é negativa para todo $n \geq 4$. Além disso, $q_{a,b}(1) = ab > 0$. Isso quer dizer que $\frac{2}{n} < y_3 < 1$. Temos

$$\begin{aligned} S_1 &= \mu_1 \leq n, \\ S_2 &= \mu_1 + \mu_2 = n + 2 - y_3 < n + 2 - \frac{2}{n}, \\ S_{2+(k-2)} &= S_2 + (k-2) \cdot 1 < n + k - \frac{2}{n}, \end{aligned}$$

que são equações válidas para $k \leq n-2$. Para $n-1 \leq k \leq n$ obtemos a mesma cota pois $0 = \mu_n < y_3 < 1$. \square

Outro conjunto de árvores que possui um papel importante nesse capítulo é um caso especial de árvores de Bethe generalizadas, ou como foram denominadas no Seção 3.5.3, árvores \mathbf{v} -árias.

Em [30], Rojo descreve uma correspondência 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. Vamos usar os resultados obtidos na Seção 3.5.3, que são equivalentes aos obtidos por Rojo, para as árvores \mathbf{v} -árias com até três níveis.

As árvores \mathbf{v} -árias nas quais estamos interessados são formados por um vértice central v_0 (a raiz da árvore) adjacente a vértices de uma estrela, chamados de ramos. Um ramo do tipo 0 é um vértice pendente adjacente ao vértice central; um ramo do tipo 1 é um vértice que possui pendentes, adjacente ao vértice central (v_0 adjacente ao centro de uma estrela); um ramo do tipo 2 é um vértice que possui no mínimo dois pendentes onde um deles é adjacente ao vértice central (v_0 adjacente a uma folha de uma estrela). Veja a Figura 5.4 com ilustração dos ramos.

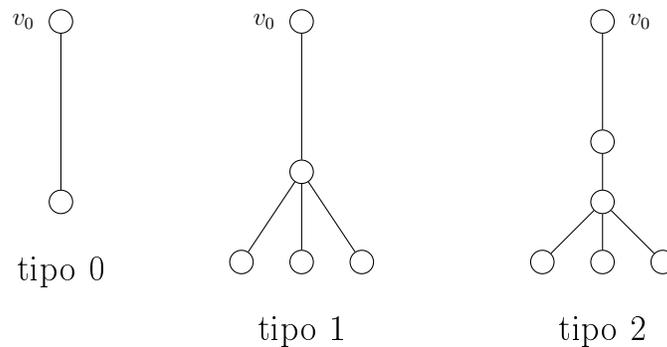


Figura 5.4: Tipos de ramos adjacentes ao vértice central v_0

Considere o conjunto \mathfrak{F} , cujos elementos são árvores de diâmetro entre 4 e 6 tais que, após retirada qualquer aresta não adjacente a nenhuma folha, são sempre a união (disjunta) de uma estrela e uma árvore (que pode ser uma estrela também). Uma árvore de \mathfrak{F} deve possuir no mínimo dois ramos de tipo 1 ou 2 para que o seu diâmetro seja no mínimo 4. A existência de mais de um, somente um, ou nenhum ramo do tipo 2 determina o diâmetro da árvore: 6, 5 ou 4, respectivamente.

Exemplo 5.4. A árvore T da Figura 5.5 é uma árvore de \mathfrak{F} com diâmetro 6 com: três ramos do tipo 0 (pendentes); três ramos do tipo 1 dos quais dois possuem dois pendentes e o outro possui quatro pendentes; dois ramos do tipo 2 dos quais um possui dois pendentes e o outro possui três pendentes. \triangle

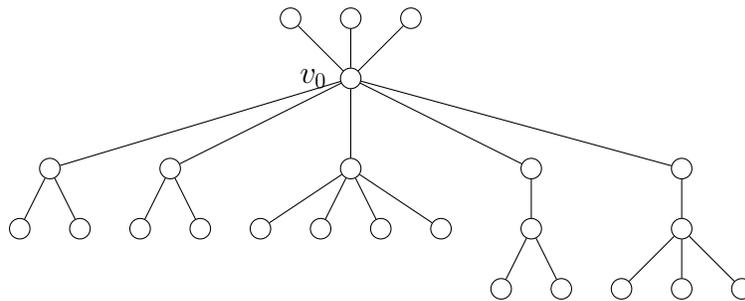


Figura 5.5: Árvore T de \mathfrak{F} com diâmetro 6

5.1 Soma dos maiores autovalores laplacianos de uma árvore

Veremos aqui um refinamento de uma cota para a soma dos maiores autovalores laplacianos de uma árvore. A estimativa desse número é importante para obtermos um limite superior para a energia laplaciana de árvores, pois esta pode ser escrita em função dessa soma, como apresentado na Proposição 2.37.

Quando tratamos de árvores, já possuímos uma cota superior para o valor de S_k , provada por Haemers, Mohammadian e Tayfeh-Rezaie [19] dada por $S_k(T) \leq n - 2 + 2k$. Essa cota foi refinada por Fritscher et al. [14] para

$$S_k(T) \leq n - 2 + 2k - \frac{2k - 2}{n} \quad (5.1)$$

e é justa para a estrela \mathcal{S}_n e $k = 1$. Considerando as demais árvores, não é possível melhorar (5.1) por um fator de $\frac{1}{n}$.

Essa cota superior tem uma forma mais geral expressa por uma conjectura de Brouwer [5]. Essa conjectura estabelece que, dado um grafo G com m arestas e n vértices, a soma $S_k(G)$ para $k \in \{1, \dots, n\}$ satisfaz

$$S_k(G) \leq m + \binom{k+1}{2}.$$

Para $k = 1, n - 1$ e n a desigualdade segue diretamente do fato de que $\mu_1 \leq n$ (propriedade obtida do item (iv) da Proposição 2.32) e de que $S_n = 2m$ (Proposição 2.31). A conjectura também já foi verificada para $k = 2$ e para todas as árvores em [19].

A intenção nessa seção é demonstrar um melhoramento da cota (5.1), usando técnicas semelhantes mas trabalhando com desigualdades mais precisas. Embora esse refinamento possa parecer muito pequeno à primeira vista, ele será essencial para a demonstração do resultado da próxima seção.

Teorema 5.5. *Toda árvore T com $n \geq 6$ vértices e diâmetro maior ou igual a quatro satisfaz*

$$S_k(T) \leq n - 2 + 2k - \frac{2k}{n}, \quad (5.2)$$

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

Se relaxássemos a hipótese do Teorema 5.5 para $n \geq 5$, o resultado falharia apenas para o caminho \mathcal{P}_5 , quando $k = 2$. Para essa árvore, temos que $S_2(\mathcal{P}_5) = (2 + 2 \cos \frac{\pi}{5}) + (2 + 2 \cos \frac{2\pi}{5}) = 6,236$, levando à falha da cota pois $\frac{31}{5} < S_2(\mathcal{P}_5)$.

A estrutura da demonstração do Teorema 5.5 é semelhante à apresentada em [14] e [19]. A ideia central baseia-se num processo indutivo. Ao retirar uma aresta da árvore T , espera-se que as duas árvores obtidas satisfaçam a desigualdade do Teorema 5.5 caso enquadrem-se nas hipóteses. Para as demais árvores investigamos diretamente a sua forma e partimos em busca dos seus autovalores laplacianos. Esse processo ficará mais claro ao longo do texto.

Um modo de facilitar a prova do Teorema é perceber que basta que (5.2) seja válida para um valor especial de k , para que valha para todos os outros valores de k .

Lema 5.6. *Dada uma árvore T com ρ autovalores maiores que a média $\bar{\delta}$, se a desigualdade*

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

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

O que acontece é que, justamente no valor $k = \rho$, a diferença entre a cota e o valor real de S_k é menor.

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

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

Além disso, como $\mu_{k_2} \leq \mu_{\rho+1} \leq 2 - \frac{2}{n}$,

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

□

Primeiramente vamos enunciar um resultado importante de Wielandt [37] que usaremos várias vezes no decorrer da demonstração do Teorema 5.5.

Teorema 5.7 ([37]). *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*

$$\sum_{i \in I} \lambda_i(A) \leq \sum_{i=1}^k \lambda_i(B) + \sum_{i \in I} \lambda_i(C). \quad (5.3)$$

O Teorema 5.7 nos permite escolher quais autovalores da matriz queremos somar. Se tomarmos $I = \{1, \dots, k\}$ em (5.3) obtemos a conhecida desigualdade

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

5.1.1 Demonstração do Teorema 5.5

Vamos supor que a desigualdade do Teorema 5.5 é falsa para alguma árvore e seja T uma árvore com o menor número de vértices (contraexemplo minimal) tal que a desigualdade (5.2) falha. Lembramos que, pelas hipóteses do Teorema, T é uma árvore com no mínimo seis vértices e diâmetro no mínimo quatro. Assim, 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, onde $n_1 + n_2 = n$, sendo n o número de vértices de T . Podemos supor, sem perda de generalidade, que o diâmetro de T_1 é maior ou igual ao diâmetro de T_2 .

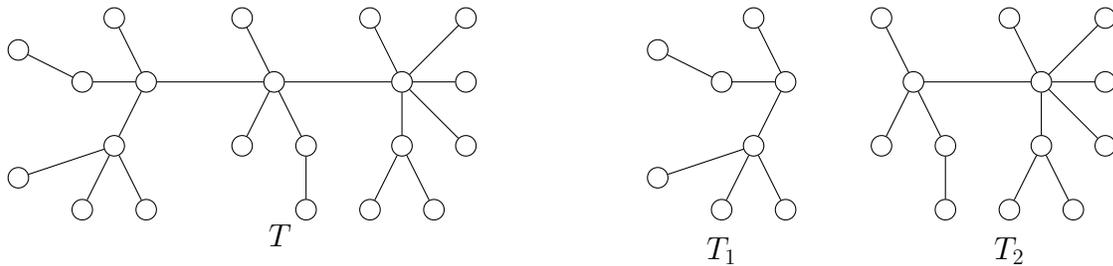


Figura 5.6: Árvore T e floresta F

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

$$L(T) = L(F) + \overline{M^*} = L(F) + \begin{bmatrix} M^* & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

para uma certa ordenação dos vértices, onde $M^* = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$. Como o espectro da matriz M^* é $\{0, 2\}$, então o espectro da matriz $\overline{M^*}$ de 5.4 possui um elemento igual a 2 e os demais são 0.

Dessa forma, utilizando o Teorema 5.7 com o conjunto $I = \{1, 2, \dots, k\}$, a equação matricial (5.4) dá lugar a seguinte relação entre os autovalores

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i(L(T)) \leq \sum_{i=1}^k \lambda_i(L(F)) + \sum_{i=1}^k \lambda_i(\overline{M^*}),$$

isto é,

$$S_k(T) \leq S_k(F) + 2.$$

Como F é uma união disjunta de T_1 e T_2 , seus autovalores são a união dos 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 $k_1 + k_2 = k$. Assim, obtemos a desigualdade

$$S_k(T) \leq S_{k_1}(T_1) + S_{k_2}(T_2) + 2. \quad (5.5)$$

Nesse ponto dividiremos a demonstração em casos, pois, dependendo da estrutura das árvores T_i , precisamos atacar o problema com uma técnica diferente. As árvores da floresta F podem ser estrelas, árvores de diâmetro três, árvores que satisfazem as hipóteses do Teorema 5.5 (diâmetro quatro) ou ainda caminhos \mathcal{P}_5 .

O caso em que uma das árvores T_i é uma estrela é o mais trabalhoso, por esse motivo vamos tentar fugir dessa situação. Se T possui diâmetro maior ou igual a sete, podemos escolher a aresta e a ser removida de tal forma que o diâmetro de cada T_i seja no mínimo três. Se T possui diâmetro entre quatro e seis, devemos escolher a aresta de corte e de tal forma que nenhuma das árvores T_i criada seja uma estrela.

Resta-nos o caso em que qualquer aresta (não adjacente a uma folha) a ser removida de T gera uma estrela. As árvores com essa propriedade são os elementos da família \mathfrak{F} .

Já foi relatado que a desigualdade (5.2) não vale para o caminho \mathcal{P}_5 quando $k = 2$. Desse modo, quando necessário, usaremos a cota superior

$$S_2(\mathcal{P}_5) = 6,236 < \frac{25}{4}.$$

A nossa demonstração será dividida em quatro casos:

1. T_1 e T_2 têm diâmetro 3;
2. T_1 e T_2 têm diâmetro ≥ 4 ;
3. T_1 tem diâmetro ≥ 4 e T_2 tem diâmetro 3;
4. T_2 tem diâmetro 2.

Caso 1: Se as duas componentes T_1 e T_2 têm diâmetro três, usaremos o Teorema 5.3 aplicado à desigualdade (5.5). Cada T_i possui exatamente dois autovalores maiores que a média. Assim, $\rho(F) = 4$ pois $F = T_1 \cup T_2$. Usando o Teorema 2.35 de entrelaçamento entre os autovalores laplacianos ($\mu_i(T) \geq \mu_i(F)$) concluímos que $\rho(T) \geq 4$. Assim, para $k = 4$, teremos dois autovalores de cada T_i e

$$\begin{aligned} S_4(T) &\leq \left(n_1 + 2 - \frac{2}{n_1}\right) + \left(n_2 + 2 - \frac{2}{n_1}\right) + 2 \\ &= n + 6 - \frac{2}{n_1} - \frac{2}{n_2} < n + 6 - \frac{2}{n_1} - \frac{2}{n_2} + \frac{2(n_1 - n_2)^2}{n_1 n_2 n} \\ &= n + 6 - \frac{8}{n}. \end{aligned}$$

Para $k \geq 5$ (lembrando que $k_1, k_2 \geq 2$) teremos

$$\begin{aligned} S_k(T) &\leq n_1 + k_1 - \frac{2}{n_1} + n_2 + k_2 - \frac{2}{n_2} + 2 \\ &= n + k + 2 - \frac{2}{n_1} - \frac{2}{n_2} < n - 2 + 2k - (k - 4) \\ &< n - 2 + 2k - \frac{2k}{n}, \end{aligned}$$

pois $n \geq 6 \geq \frac{2k-4}{k-4}$. Como a desigualdade é válida para os possíveis valores de ρ , então também é válida para qualquer valor de k (Lema 5.6). Desse modo, como T é um contraexemplo, T não pode ser decomposta como no Caso 1.

Caso 2: Se T_1 e T_2 têm diâmetro maior ou igual a quatro, sabemos que ambas árvores satisfazem o Teorema 5.5 pois T é o contraexemplo mínimo. O único cuidado que devemos ter é quando $T_i = \mathcal{P}_5$ e $k_i = 2$. Aplicando a expressão (5.2) à desigualdade (5.5) obtemos

$$\begin{aligned} S_k(T) &\leq \left(n_1 - 2 + 2k_1 - \frac{2k_1}{n_1} \right) + \left(n_2 - 2 + 2k_2 - \frac{2k_2}{n_2} \right) + 2 \\ &= n - 2 + 2k - \frac{2k_1}{n_1} - \frac{2k_2}{n_2} \\ &< n - 2 + 2k - \frac{2k_1}{n_1} - \frac{2k_2}{n_2} + \frac{2(k_1n_2^2 + k_2n_1^2)}{n_1n_2n} \\ &= n - 2 + 2k - \frac{2k}{n}, \end{aligned}$$

pois $n = n_1 + n_2$ e $k = k_1 + k_2$.

Caso uma das árvores é \mathcal{P}_5 , usaremos a cota $S_2(\mathcal{P}_5) < \frac{25}{4}$ quando forem necessários dois autovalores (quando precisarmos de um outro número de autovalores do caminho, usamos o caso anterior).

Seja $k = k_1 + 2$ e $n = n_1 + 5$. Então

$$\begin{aligned}
S_k(T) &= S_{k_1+2}(T) \leq \left(n_1 - 2 + 2k_1 - \frac{2k_1}{n_1} \right) + S_2(\mathcal{P}_5) + 2 \\
&< n_1 + 2k_1 - \frac{2k_1}{n_1} + \frac{25}{4} = (n_1 + 5) - 2 + 2(k_1 + 2) - \frac{2k_1}{n_1} - \frac{3}{4} \\
&= n - 2 + 2k - \frac{2k_1}{n_1} - \frac{3}{4} < n - 2 + 2k - \frac{2k_1}{n} - \frac{4}{n} \\
&= n - 2 + 2k - \frac{2k}{n},
\end{aligned}$$

pois nesse caso $n = n_1 + 5 \geq 10$.

E se as duas árvores são \mathcal{P}_5 , usamos os casos anteriores quando $k_1 \neq 2 \neq k_2$ ou $k_1 \neq 2 = k_2$. Resta-nos confirmar a validade da desigualdade quando $k_1 = k_2 = 2$.

$$\begin{aligned}
S_4(T) &\leq S_2(\mathcal{P}_5) + S_2(\mathcal{P}_5) + 2 < \frac{25}{4} + \frac{25}{4} + 2 = \frac{29}{2} \\
&< \frac{76}{5} = 10 - 2 + 8 - \frac{8}{10}.
\end{aligned}$$

Confirmado a validade da cota superior para os possíveis valores de ρ , pelo Lema 5.6 é válida a desigualdade (5.2) para qualquer k . Portanto T também não é uma árvore que pode ser decomposta como no Caso 2.

Caso 3: Considerando agora que T_1 tem diâmetro maior ou igual a quatro e T_2 tem diâmetro três, podemos usar a desigualdade (5.2) para T_1 e alguma cota para T_2 (dependendo do valor de k_2) sobre a desigualdade (5.5). Temos sempre duas situações: caso geral e $k_1 = 2$ para $T_1 = \mathcal{P}_5$. Lembre-se que $n \geq n_1 + 4 \geq 9$.

Se $k_2 = 0$.

$$\begin{aligned}
S_k(T) &\leq S_k(T_1) + 2 < \left(n_1 - 2 + 2k - \frac{2k}{n_1} \right) + 2 \\
&= (n_1 + 4) - 2 + 2k - \frac{2k}{n_1} < n - 2 + 2k - \frac{2k}{n}, \\
S_2(T) &\leq S_2(\mathcal{P}_5) + 2 < \frac{25}{4} + 2 < \frac{95}{9} \leq n + 2 - \frac{4}{n}.
\end{aligned}$$

Se $k_2 = 1$. Usaremos a cota do Teorema 5.2 para T_2 .

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

$$\begin{aligned} S_3(T) &\leq S_2(\mathcal{P}_5) + S_1(T_2) + 2 < \frac{25}{4} + \left(n_2 - \frac{1}{2} \right) + 2 \\ &= \frac{31}{4} + n_2 = (n_2 + 5) + 4 - \frac{5}{4} \leq n + 4 - \frac{6}{n}. \end{aligned}$$

Se $k_2 \geq 2$. Usaremos a cota do Teorema 5.3 para T_2 , obtendo

$$\begin{aligned} S_k(T) &\leq \left(n_1 - 2 + 2k_1 - \frac{2k_1}{n_1} \right) + \left(n_2 + k_2 - \frac{2}{n_2} \right) + 2 \\ &= n - 2 + 2k - (k_2 - 2) - \frac{2k_1}{n_1} - \frac{2}{n_2} \end{aligned}$$

e para concluir que a desigualdade (5.2) vale, chamamos a atenção para o fato de que $\frac{2k_1}{n_1} + \frac{2}{n_2} > \frac{2k}{n}$, pois

$$\frac{2k_1}{n_1} + \frac{2}{n_2} - \frac{2k}{n} = \frac{1}{n_1 n_2 n} \left((k_2 - 2)n_1 n_2 (n - 2) + (2k_1 - 1)n_2^2 + n_1^2 + (n_1 - n_2)^2 \right) > 0.$$

Finalizando, se $k_1 = 2$ e $T_1 = \mathcal{P}_5$ temos

$$\begin{aligned} S_k(T) &\leq S_2(\mathcal{P}_5) + S_{k-2}(T_2) + 2 < \frac{25}{4} + \left(n_2 + k - 2 - \frac{2}{n_2} \right) + 2 \\ &= (n_2 + 5) - 2 + 2k + \frac{13}{4} - \frac{2}{n_2} - k < n - 2 + 2k - \frac{2k}{n} \end{aligned}$$

pois $n_2 < n$ e $n \geq 9 > \frac{8(k-1)}{4k-13}$ para $k \geq 4$. Assim, T também não pode ser uma árvore do Caso 3.

Portanto, o contraexemplo T deve ser uma árvore do Caso 4, com a propriedade de que a remoção de qualquer aresta, não incidente a uma folha, gera uma estrela. Estas árvores são elementos de \mathfrak{F} , pois nas demais situações T satisfaria o Teorema 5.5. Todavia T não pode pertencer a família \mathfrak{F} , conforme será demonstrado na Seção 5.3. Dessa forma temos uma contradição e concluímos que não existe tal árvore T nas hipóteses do Teorema 5.5 que não satisfaça (5.2). \square

5.2 Ordenamento de árvores pela energia laplaciana

Aqui aplicamos o resultado anterior para obter o ordenamento de árvores pela energia laplaciana, publicado em [15].

Teorema 5.8 ([15]). *Seja*

$$f(n) = \begin{cases} 1 + \lfloor \sqrt{n-3} \rfloor, & \text{se } n \text{ é par;} \\ \lfloor \frac{3}{2} + \sqrt{n-3} \rfloor, & \text{se } n \text{ é ímpar e } n = p^2 - p + 3 \text{ para algum } p \in \mathbb{N}; \\ \lfloor \frac{1}{2} + \sqrt{n-3} \rfloor, & \text{se } n \text{ é ímpar e não pode ser escrito como acima.} \end{cases} \quad (5.6)$$

Entre todas as árvores com $n \geq 6$ vértices, as árvores com segunda até $(f(n) + 1)$ -ésima maior energia laplaciana são, respectivamente, as árvores $T(\lceil \frac{n-2}{2} \rceil + k, \lfloor \frac{n-2}{2} \rfloor - k)$, onde $0 \leq k \leq f(n) - 1$.

A principal ferramenta para esse resultado é a cota superior para a soma dos maiores autovalores laplacianos de árvores com diâmetro maior ou igual a quatro, apresentada na Seção 5.1: se uma árvore T com no mínimo seis vértices tem diâmetro no mínimo quatro, então

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

O lema técnico a seguir tem uma função estética para o Teorema 5.8. Através dele podemos transformar certas expressões em outras mais simples.

Lema 5.9. (i) $\lfloor \sqrt{n - 2 - \frac{8}{n} + \frac{16}{n^2}} \rfloor = \lfloor \sqrt{n-3} \rfloor$ para n par;
(ii) $\lfloor \sqrt{n - 2 - \frac{8}{n} + \frac{16}{n^2} - \frac{1}{2}} \rfloor = \lfloor \sqrt{n-3} + \frac{1}{2} \rfloor$ para n ímpar da forma $n = p^2 - p + 3$;
(iii) $\lfloor \sqrt{n - 2 - \frac{8}{n} + \frac{16}{n^2} - \frac{1}{2}} \rfloor = \lfloor \sqrt{n-3} - \frac{1}{2} \rfloor$ para outra forma de n ímpar.

Demonstração: No item (i) claramente $\lfloor \sqrt{n-3} \rfloor \leq \left\lfloor \sqrt{n-2-\frac{8}{n}+\frac{16}{n^2}} \right\rfloor \leq \lfloor \sqrt{n-2} \rfloor$, pois $n-3 \leq n-2-\frac{8}{n}+\frac{16}{n^2} \leq n-2$ para $n \geq 4$. Para q e m inteiros não negativos tais que $n = q^2 + m$ e q é o maior número com essa propriedade (teremos, $m \leq 2q$), é fácil ver que $\lfloor \sqrt{n-3} \rfloor = \lfloor \sqrt{n-2} \rfloor = q-1$ se $m \in \{0, 1\}$ e que $\lfloor \sqrt{n-3} \rfloor = \lfloor \sqrt{n-2} \rfloor = q$ se $m \in \{3, \dots, 2q\}$. Vamos agora supor que $m = 2$, que nos dá

$$q-1 = \lfloor \sqrt{q^2-1} \rfloor \leq \left\lfloor \sqrt{q^2 - \frac{8}{q^2+2} + \frac{16}{(q^2+2)^2}} \right\rfloor.$$

Seja $h = \frac{8}{q^2+2} - \frac{16}{(q^2+2)^2}$, que satisfaz $0 < h < 1 < q^2$ se $n \geq 6$. A expansão em série de Taylor de $\sqrt{q^2-h}$ nos dá

$$\begin{aligned} \sqrt{q^2-h} &= \sqrt{q^2} + \frac{1(-h)}{1!2\sqrt{q^2}} - \frac{1(-h)^2}{2!4\sqrt{q^2}^3} + \frac{3(-h)^3}{3!8\sqrt{q^2}^5} - \frac{3 \cdot 5(-h)^4}{4!16\sqrt{q^2}^7} + \dots \\ &= q - \frac{h}{2q} - \sum_{i=2}^{\infty} \frac{(2i-3)!h^i}{(i-2)!i!2^{2i-2}q^{2i-1}} < q - \frac{h}{2q}. \end{aligned}$$

Portanto $\lfloor \sqrt{q^2-h} \rfloor \leq \lfloor q - \frac{h}{2q} \rfloor < q$, o que implica em $\left\lfloor \sqrt{n-2-\frac{8}{n}+\frac{16}{n^2}} \right\rfloor = q-1$. No caso (ii) de n ímpar, quando $n = p^2 - p + 3$, temos que $\lfloor \sqrt{n-3} + \frac{1}{2} \rfloor = p$, enquanto que $\sqrt{p^2-p+1-\frac{8}{p^2-p+3}+\frac{16}{p^2-p+3}} > \sqrt{p^2-p+\frac{1}{4}} = p - \frac{1}{2}$, ou seja $\left\lfloor \sqrt{n-2-\frac{8}{n}+\frac{16}{n^2}} - \frac{1}{2} \right\rfloor \geq p$, mas não superior a p .

Nos outros casos de n ímpar ($n = p^2 - p + m$) se $0 \leq m \leq 2$ os dois solos $\left\lfloor \sqrt{n-2-\frac{8}{n}+\frac{16}{n^2}} - \frac{1}{2} \right\rfloor$ e $\lfloor \sqrt{n-3} - \frac{1}{2} \rfloor$ coincidem em $p-1$ ou se $4 \leq m \leq 2p-1$ os solos coincidem em p (quando $m = 3$ os solos não coincidem, por isso adicionamos um na fórmula). \square

Demonstração (Teorema 5.8): Para $n \geq 6$, considere uma árvore de n vértices $T(a, b)$ com diâmetro três, onde $a \geq b \geq 1$, e uma árvore com n vértices T com diâmetro maior ou igual a quatro. Seja ρ o número de autovalores de T maiores do que a média $\bar{\delta}$. Pela Proposição 2.37 e Teorema 5.3 a diferença entre a energia laplaciana de $T(a, b)$ e a de T é dada por

$$\begin{aligned}
E_L(T(a, b)) - E_L(T) &= 2(n + 2 - y_3) - 4\bar{\delta} - 2S_\rho(T) + 2\rho\bar{\delta} \\
&> (2n + 4 - 2y_3) - 8 + \frac{8}{n} - 2\left(n - 2 + 2\rho - \frac{2\rho}{n}\right) + 4\rho - \frac{4\rho}{n} \quad (5.7) \\
&= -2y_3 + \frac{8}{n}.
\end{aligned}$$

Observe que usamos o Teorema 5.5 para obter (5.7). Em particular, para mostrar que $E_L(T(a, b)) - E_L(T) \geq 0$, é suficiente que $y_3 \leq \frac{4}{n}$, onde y_3 é o menor autovalor não nulo de $T(a, b)$, ou seja, a menor raiz do polinômio

$$q_{a,b}(x) = x^3 - bx^2 - ax^2 - 4x^2 + abx + 2bx + 2ax + 5x - b - a - 2,$$

fator do polinômio característico de $T(a, b)$.

Na demonstração do Teorema 5.3, vimos que se $x < y_3$ então $q_{a,b}(x) < 0$. Portanto basta mostrar que $q_{a,b}\left(\frac{4}{n}\right) > 0$ para que $\frac{4}{n} > y_3$. Seja $a = \lceil \frac{n-2}{2} \rceil + k$ e $b = \lfloor \frac{n-2}{2} \rfloor - k$, onde $k \in \{0, \dots, \lfloor \frac{n-2}{2} \rfloor - 1\}$. Vamos separar nos casos n ímpar e n par.

Se n é par, teremos

$$q_{a,b}\left(\frac{4}{n}\right) = \frac{4(n^3 - k^2n^2 - 2n^2 - 8n + 16)}{n^3},$$

que é positivo, para k não negativo, se e somente se

$$k \leq \left\lfloor \sqrt{n - 2 - \frac{8}{n} + \frac{16}{n^2}} \right\rfloor.$$

Para concluir o resultado nesse caso, usamos o item (i) do Lema 5.9 que nos dá $\left\lfloor \sqrt{n - 2 - \frac{8}{n} + \frac{16}{n^2}} \right\rfloor = \lfloor \sqrt{n - 3} \rfloor$. Portanto, para $0 \leq k \leq \lfloor \sqrt{n - 3} \rfloor$ a árvore $T\left(\frac{n}{2} - 1 + k, \frac{n}{2} - 1 - k\right)$ tem energia laplaciana maior do que qualquer árvore T de diâmetro maior ou igual a quatro (no total são $\lfloor \sqrt{n - 3} \rfloor + 1$ árvores). A ordem da energia laplaciana é dada pelo Teorema 5.3 que decresce a medida que k aumenta.

Se n é ímpar, temos $a = (n - 1)/2 + k$ e $b = (n - 3)/2 - k$, assim

$$q_{a,b} \left(\frac{4}{n} \right) = \frac{4(n^3 - k^2n^2 - n^2k - 8n + 16) - 9n^2}{n^3},$$

que é positivo se e somente se

$$k \leq \left\lfloor \sqrt{n - 2 - \frac{8}{n} + \frac{16}{n^2}} - \frac{1}{2} \right\rfloor.$$

O resultado segue do fato de que se $n = p^2 - p + 3$ para algum inteiro $p \geq 3$ então $\left\lfloor \sqrt{n - 2 - \frac{8}{n} + \frac{16}{n^2}} - \frac{1}{2} \right\rfloor = \left\lfloor \sqrt{n - 3} + \frac{1}{2} \right\rfloor$, e de que $\left\lfloor \sqrt{n - 2 - \frac{8}{n} + \frac{16}{n^2}} - \frac{1}{2} \right\rfloor = \left\lfloor \sqrt{n - 3} - \frac{1}{2} \right\rfloor$ para outro ímpar $n \geq 7$, conforme igualdades (ii) e (iii) do Lema 5.9. Como $k = 0$ conta como um valor utilizável, a quantidade total é acrescida em um. A ordem segue tal como no caso par. \square

Exemplo 5.10. Para $n = 42$ vértices, além da estrela \mathcal{S}_{42} , as demais $f(42) = 1 + \lfloor \sqrt{42 - 3} \rfloor = 7$ árvores com maior energia laplaciana são as árvores de diâmetro três $T(20 + k, 20 - k)$, para $0 \leq k \leq 6$, que estão listadas na Tabela 5.1.

posição	árvore	$a - b$	E_L
1	\mathcal{S}_{42}		80,0952
2	$T(20, 20)$	0	80,0159
3	$T(21, 19)$	2	80,0155
4	$T(22, 18)$	4	80,0144
5	$T(23, 17)$	6	80,0125
6	$T(24, 16)$	8	80,0098
7	$T(25, 15)$	10	80,0062
8	$T(26, 14)$	12	80,0016

Tabela 5.1: Segunda à oitava árvore com maior energia laplaciana para $n = 42$

Três das 8 árvores com maior energia laplaciana estão representadas na Figura 5.7.

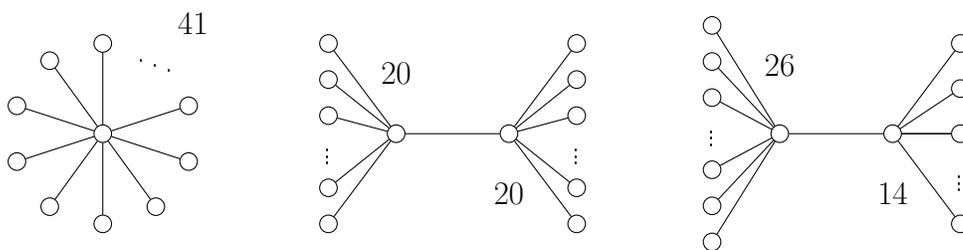


Figura 5.7: Árvores de 42 vértices com 1^a, 2^a e 8^a maior energia laplaciana

Utilizando a cota do Teorema 5.5, usada para demonstrar o Teorema 5.8, obtemos que a energia laplaciana, calculada pela expressão da Proposição 2.37, de qualquer árvore T de diâmetro maior ou igual a 4 satisfaz

$$E_L(T) = 2S_\rho - 2\rho\bar{\delta} < 2 \left(n - 2 + 2\rho - \frac{2\rho}{n} \right) - 2\rho \frac{2n-2}{n} \leq 2n - 4 = 80.$$

A próxima árvore da lista seria $T(27, 13)$ com energia 79,9959, mas este valor é inferior a cota superior de referência. Assim não podemos concluir se $T(27, 13)$ é ou não a árvore com a nona maior energia laplaciana.

Para $n = 43$, além da estrela \mathcal{S}_{43} , podemos garantir quem são as próximas $f(43) = \lfloor \sqrt{43-3} + \frac{1}{2} \rfloor = 6$ árvores com maior energia laplaciana. Para $n = 45$, teremos $f(45) = \lfloor \sqrt{45-3} + \frac{3}{2} \rfloor = 7$, pois 45 é um ímpar do tipo $p^2 - p + 3$, com $p = 7$. △

Conseguimos enumerar aproximadamente \sqrt{n} árvores de diâmetro três com as maiores energias laplacianas. Naturalmente alguém poderia perguntar se todas as $\lfloor \frac{n-2}{2} \rfloor$ árvores $T(a, b)$ de diâmetro três têm energia laplaciana maior do que todas as árvores T de diâmetro maior ou igual a quatro. Para $n \leq 15$ isso é verdade. Mas para as árvores com no mínimo 16 vértices, podemos encontrar árvores de diâmetro quatro com energia laplaciana maior do que uma árvore de diâmetro três.

Seja $F(n, k)$ uma árvore de n vértices com diâmetro quatro caracterizada por ter um vértice central adjacente a $n - 2k - 1$ folhas e a dois vértices de grau k , cada um com $k - 1$ folhas ($F(n, k)$ é uma árvore de \mathfrak{F} com dois ramos do tipo 1, definida no início desse capítulo). Estamos interessados quando todas as folhas estão equilibradamente distribuídas nos três vértices da árvore, ou seja, quando $k = \lfloor \frac{n}{3} \rfloor$. A Figura 5.8 ilustra uma árvore $F(n, \lfloor \frac{n}{3} \rfloor)$.

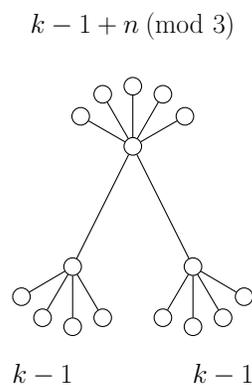


Figura 5.8: Árvores $F(n, k)$, com $k = \lfloor \frac{n}{3} \rfloor$

A ideia é comparar o valor da energia laplaciana da árvore de diâmetro quatro $F(n, k)$, com $k = \lfloor \frac{n}{3} \rfloor$, com o valor da árvore $T(n - 3, 1)$, que possui energia laplaciana mínima dentre todas as árvores de diâmetro três. Na Tabela 5.2 podemos perceber que $E_L(F(n, \lfloor \frac{n}{3} \rfloor)) > E_L(T(n - 3, 1))$ para alguns casos particulares de n .

(n, k)	$E_L(F(n, k))$	$E_L(T(n - 3, 1))$
(16, 5)	27,6803	27,6739
(17, 5)	29,6830	29,6485
(18, 6)	31,6815	31,6259
(21, 7)	37,6982	37,5709

Tabela 5.2: Energia laplaciana para alguns valores de (n, k)

Proposição 5.11. *Seja $n \geq 16$ e $k = \lfloor \frac{n}{3} \rfloor$. Então $E_L(F(n, k)) > E_L(T(n - 3, 1))$.*

Demonstração: De acordo com o Teorema 5.3 e sua demonstração, o polinômio característico de $T(n - 3, 1)$ é dado por

$$P_{L(T(n-3,1))}(x) = q_{n-3,1}(x) \cdot (x - 1)^{n-4} \cdot x,$$

onde

$$q_{n-3,1}(x) = x^3 - nx^2 - 2x^2 + 3nx - 2x - n.$$

Além disso, há exatamente dois autovalores maiores do que a média $\bar{\delta} = 2 - \frac{2}{n}$, que são as duas maiores raízes do polinômio de grau 3, $q_{n-3,1}(x)$. Pela forma de $q_{n-3,1}(x)$, a soma das duas maiores raízes é $n + 2 - x_3$, onde $0 < x_3 < 1$ é a menor raiz do polinômio. Se $0 < \ell < 1$ então $p_{n-3,1}(\ell) < 0$ se e somente se $x_3 > \ell$. Tomando $\ell_n = \frac{3-\sqrt{5}}{2} + \frac{2}{5n}$, podemos verificar facilmente que $q_{n-3,1}(\ell_n) < 0$, o que nos dá a cota inferior $x_3 > \ell_n$.

O polinômio característico laplaciano de $F(n, k)$ pode ser obtido facilmente usando-se um GWG dado por $F(n, k)$ e o Algoritmo 1, pois temos dois ramos do tipo 1 que formam um par de conjuntos simétricos, além dos vértices pendentes em cada vértice. Assim, o polinômio característico é igual ao produto do polinômio de cada GWG da união disjunta: $n - 6$ vértices isolados, um caminho de tamanho dois e um caminho de tamanho quatro. O polinômio do caminho de tamanho 4 depende do resto da divisão de n por três, e a forma geral de $p_{L(F(n,k))}(x)$ é

$$p_{L(F(n,k))}(x) = q_{n \pmod{3}}(x) \cdot (x^2 - (k + 1)x + 1) \cdot (x - 1)^{n-6} \cdot x,$$

onde

$$q_0(x) = (x^2 - (k + 3)x + 3) \cdot (x - k),$$

$$q_1(x) = x^3 - (2k + 4)x^2 + (k + 2)^2x - 3k - 1,$$

$$q_2(x) = x^3 - (2k + 5)x^2 + (k^2 + 5k + 5)x - 3k - 2.$$

Aqui, o fator $q_i(x) \cdot x$ de ordem quatro é o polinômio característico do GWG dado pelo caminho de tamanho quatro.

Vamos calcular a diferença entre as energias laplacianas de $F(n, k)$ e $T(n - 3, 1)$. Considere $\Delta E_L = E_L(F(n, k)) - E_L(T(n - 3, 1))$. O número de autovalores maiores do que a média dos graus $\bar{\delta} = 2 - \frac{2}{n}$ de $F(n, k)$ é três (afirmação da Proposição 5.20 da próxima seção para $F(n, k) \in \mathfrak{F}_4$ com $r = 2$ ramos e pendentes no vértice central).

Para $n = 3k$, usando a Proposição 2.37, temos

$$\begin{aligned}
\Delta E_L &= 2 \left[k + \left(\frac{k + 3 + \sqrt{k^2 + 6k - 3}}{2} \right) + \left(\frac{k + 1 + \sqrt{k^2 + 2k - 3}}{2} \right) \right] - 6\bar{\delta} \\
&\quad - [2(n + 2 - x_3) - 4\bar{\delta}] \\
&> 2 \left[k + \left(k + 3 - \frac{5}{2k} - \frac{1}{100} \right) + \left(k + 1 - \frac{1}{k} \right) \right] \\
&\quad - 2 \left[3k + 2 - \left(\frac{3 - \sqrt{5}}{2} + \frac{2}{15k} \right) \right] - 2\bar{\delta} \\
&= 4 - \frac{1}{50} - \frac{7}{k} + 3 - \sqrt{5} + \frac{4}{15k} - 2 \left(2 - \frac{2}{3k} \right) \\
&= -\frac{27}{5k} + 3 - \sqrt{5} - \frac{1}{50} > 0,
\end{aligned}$$

para $k \geq 8$. Para $k = 6, 7$, podemos verificar as linhas (18,6) e (21,7) na Tabela 5.2 que o resultado também é verdadeiro.

Para $n = 3k + 1$, vamos considerar y_3 a menor raiz do polinômio $q_1(x)$, pertencente ao intervalo $(0, \frac{1}{2})$ se $k \geq 5$. Assim, dois dos três maiores autovalores de

$F(n, k)$ somam $2k + 4 - y_3$. A diferença entre as energias é

$$\begin{aligned}
\Delta E_L &= 2 \left[(2k + 4 - y_3) + \left(\frac{k + 1 + \sqrt{k^2 + 2k - 3}}{2} \right) \right] - 6\bar{\delta} - 2(n + 2 - x_3) + 4\bar{\delta} \\
&> 2 \left[2k + 4 - y_3 + \left(k + 1 - \frac{1}{k} \right) \right] - 2 \left(2 - \frac{2}{3k + 1} \right) \\
&\quad - 2 \left[3k + 1 + 2 - \left(\frac{3 - \sqrt{5}}{2} + \frac{2}{5(3k + 1)} \right) \right] \\
&= -2y_3 - \frac{2}{k} + 3 - \sqrt{5} + \frac{24}{5(3k + 1)}.
\end{aligned}$$

Para que $\Delta E_L > 0$, é suficiente termos $y_3 < \frac{3 - \sqrt{5}}{2} + \frac{12}{5(3k + 1)} - \frac{1}{k}$. De fato, quando avaliamos $q_1(x)$ nesse valor, obtemos um valor positivo para $k \geq 6$ (ou seja, o valor é maior do que a raiz y_3). Para $k = 5$ verificamos diretamente a linha (16,5) na Tabela 5.2 que o resultado também é verdadeiro.

Para $n = 3k + 2$, a soma das duas maiores raízes de $q_2(x)$ é $2k + 5 - y_3$.

Assim temos

$$\begin{aligned}
\Delta E_L &= 2 \left[(2k + 5 - y_3) + \left(\frac{k + 1 + \sqrt{k^2 + 2k - 3}}{2} \right) \right] - 6\bar{\delta} - 2(n + 2 - x_3) + 4\bar{\delta} \\
&> 2 \left[2k + 5 - y_3 + \left(k + 1 - \frac{1}{k} \right) \right] - 2 \left(2 - \frac{2}{3k + 2} \right) \\
&\quad - 2 \left[3k + 2 + 2 - \left(\frac{3 - \sqrt{5}}{2} + \frac{2}{5(3k + 2)} \right) \right] \\
&= -2y_3 - \frac{2}{k} + 3 - \sqrt{5} + \frac{24}{5(3k + 2)}.
\end{aligned}$$

Para que $\Delta E_L > 0$, é suficiente verificar que $y_3 < \frac{3 - \sqrt{5}}{2} + \frac{12}{5(3k + 2)} - \frac{1}{k}$. Avaliando o polinômio $q_2(x)$ nesse valor, obtemos um valor positivo para $k \geq 6$. Como já sabemos que o resultado também é verdadeiro para o caso $k = 5$, (linha (17,5) na Tabela 5.2), concluímos o resultado. \square

Exemplo 5.12. Para $n = 20$ temos que a energia laplaciana de $F(20, 6)$ é maior do que a energia de $T(17, 1)$. As árvores estão representados na Figura 5.9. \triangle

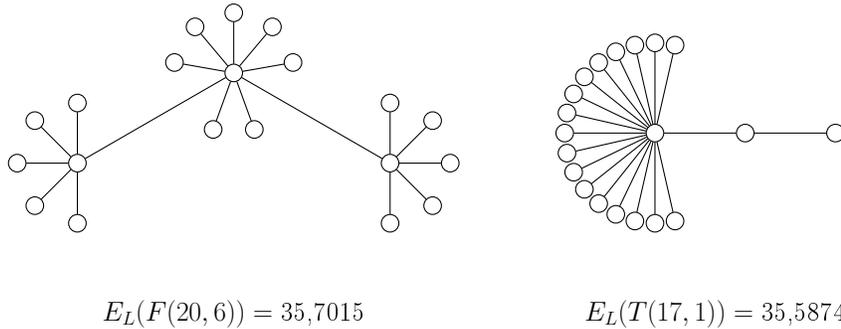


Figura 5.9: Árvores com 20 vértices $F(20, 6)$ e $T(17, 1)$

Exemplo 5.13. Para $n = 42$, temos que $E_L(F(42, 14)) = \sqrt{277} + \sqrt{221} + \frac{338}{7} = 79,7951$, enquanto que $E_L(T(39, 1)) = 79,4044$, ou seja, a árvore de diâmetro quatro $F(42, 14)$ tem energia laplaciana maior do que a árvore de diâmetro três $T(39, 1)$, como afirma a Proposição 5.11. Mas não é só da árvore de diâmetro três com menor energia laplaciana que a árvore $F(42, 14)$ tem energia superior, e sim das 3 árvores $T(a, b)$ com menores energias laplacianas, como mostra a Tabela 5.3 \triangle

Árvore	Energia laplaciana
T(36,4)	79,8098
F(42,14)	79,7951
T(37,3)	79,7392
T(38,2)	79,6258
T(39,1)	79,4044

Tabela 5.3: Árvores de diâmetro 3 com energia laplaciana próxima a energia de $F(42, 14)$

Com esses exemplos podemos deduzir que será muito difícil, dadas duas árvores quaisquer, decidir qual delas têm maior energia laplaciana. Pelo menos o ordenamento não depende somente do diâmetro.

5.3 Demonstração do Teorema 5.5 para \mathfrak{F}

Começamos essa seção com alguns resultados sobre os autovalores laplacianos das árvores de \mathfrak{F} .

Dada uma árvore T de \mathfrak{F} com algum ramo do tipo 1, este com s_i vértices pendentes, podemos aplicar o Algoritmo 1 no GWG dado por T e com pesos tais que a matriz do GWG seja $L(T)$, pois os s_i (ou t_j) vértices pendentes em um ramo do tipo 1 (ou ramo do tipo 2) são simétricos. Assim, multiplicamos o peso da aresta entre um vértice pendente e seu vizinho por $\sqrt{s_i}$; não alteramos os pesos dos vértices; e tornamos os demais $s_i - 1$ pendentes em vértices isolados. Dessa forma, o espectro laplaciano da árvore T é igual ao espectro da matriz M' unido com $\{1^{(s_i-1)}\}$, onde

$$M' = \begin{bmatrix} A & u_i^* \\ u_i^{*T} & T_i \end{bmatrix}, \quad T_i = \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{s_i} \\ \sqrt{s_i} & s_i + 1 \end{bmatrix},$$

u_i^* é um bloco com entrada 1 somente na posição referente ao vértice central de T (linha de A) e ao vértice não pendente do ramo (segunda coluna de T_i), e o bloco A representa os demais vértices de T que não estão no ramo do tipo 1. Em M' e em T_i aplicamos o Lema 3.18, com $\alpha = -1$.

Para um ramo do tipo 2, obtemos um resultado similar. Quando aplicamos o Algoritmo 1 nos t_j vértices pendentes do ramo do tipo 2, obtemos que o espectro laplaciano de T é igual a união do espectro de M' e de $\{1^{(t_j-1)}\}$, onde

$$M' = \begin{bmatrix} A & v_j^* \\ v_j^{*T} & Q_j \end{bmatrix}, \quad Q_j = \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{t_j} & 0 \\ \sqrt{t_j} & t_j + 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix},$$

v_j^* é um bloco com entrada 1 somente na posição referente ao vértice central de T (linha de A) e ao vértice não adjacente aos pendentes do ramo (terceira coluna

de Q_j), e o bloco A representa os demais vértices de T que não estão no ramo do tipo 2. Novamente aplicamos o Lema 3.18 com $\alpha = -1$.

Para os ramos do tipo 0, os p vértices pendentes da raiz central, obtemos que a matriz M' obtida pelo Algoritmo 1, após aplicação do Lema 3.18, é

$$M' = \begin{bmatrix} A & \sqrt{p} \\ \sqrt{p} & 1 \end{bmatrix}.$$

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

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

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, para alguma ordem imposta.

Considere uma árvore em \mathfrak{F} , com p pendentes na raiz central, r_1 e r_2 ramos do tipo 1 e tipo 2, respectivamente, cada um com s_i e t_j folhas. Tome a matriz M_p se houver pendentes na raiz central,

$$M_p = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \sqrt{p} \\ & T_1 & & & & & & u_1 \\ & & \ddots & & & & & \vdots \\ & & & T_{r_1} & & & & u_{r_1} \\ & & & & Q_1 & & & v_1 \\ & & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & & Q_{r_2} & v_{r_2} \\ \sqrt{p} & u_1^T & \dots & u_{r_1}^T & v_1^T & \dots & v_{r_2}^T & \delta \end{pmatrix}, \quad (5.8)$$

ou, se $p = 0$, a matriz

$$M_0 = \begin{pmatrix} T_1 & & & & & & u_1 \\ & \ddots & & & & & \vdots \\ & & T_{r_1} & & & & u_{r_1} \\ & & & Q_1 & & & v_1 \\ & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & Q_{r_2} & v_{r_2} \\ u_1^T & \dots & u_{r_1}^T & v_1^T & \dots & v_{r_2}^T & \delta \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

Nessas matrizes, δ é o grau do vértice central, u_i é o vetor $(0, 1)$ e v_i o vetor $(0, 0, 1)$.

Segue da aplicação do Algoritmo 1 o próximo resultado, que também é um caso particular do teorema principal em [30].

Teorema 5.14. *O espectro laplaciano de uma árvore de \mathfrak{F} é igual ao espectro da matriz M_p (ou M_0) unido com um multiconjunto cujos elementos são 1.*

Para referências futuras, vamos chamar essa matriz M_p (ou M_0) associada a árvore de \mathfrak{F} , cujos autovalores são os autovalores laplacianos da árvore com exceção de autovalores iguais a 1, de *decomposição BT*.

Vejamos dois exemplos para entendermos melhor o resultado.

Exemplo 5.15. Observe a árvore da Figura 5.10. Essa é uma árvore sem pendentes na raiz central e com três ramos do tipo 1, dois deles com duas folhas e o terceiro com quatro folhas. Fazendo a decomposição BT, montamos a matriz

$$M_0 = \left[\begin{array}{cc|cc|cc|c} 1 & \sqrt{2} & & & & & 0 \\ \sqrt{2} & 3 & & & & & 1 \\ \hline & & 1 & \sqrt{2} & & & 0 \\ & & \sqrt{2} & 3 & & & 1 \\ \hline & & & & 1 & 2 & 0 \\ & & & & 2 & 5 & 1 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 3 \end{array} \right]$$

cujo espectro é $\{6,1785; 4,5109; 3,7321; 2,1062; 0,2679; 0,2044; 0\}$. Unindo esse conjunto a um multiconjunto cujos elementos são 1 para completar 12 elementos no espectro, teremos o espectro laplaciano da árvore. \triangle

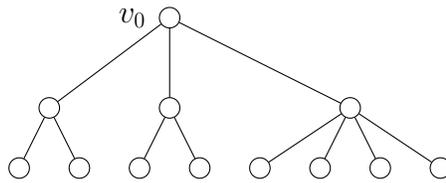


Figura 5.10: Árvore de \mathfrak{F} com três ramos do tipo 1

Exemplo 5.16. A árvore da Figura 5.11 possui um ramo do tipo 1, um do tipo 2 e três pendentes. A matriz M_3 cujos autovalores compõem o espectro laplaciano da árvore, exceto por um certo número de elementos iguais a 1, tem a forma

$$M_3 = \left[\begin{array}{c|cc|cc|c} 1 & & & & \sqrt{3} \\ \hline & 1 & 1 & & 0 \\ & 1 & 2 & & 1 \\ \hline & & & 1 & \sqrt{5} & 0 \\ & & & \sqrt{5} & 6 & 1 & 0 \\ & & & & 1 & 2 & 1 \\ \hline \sqrt{3} & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 5 \end{array} \right] .$$

O espectro de M_3 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 (dois provenientes

dos três vértices pendentes da raiz central, e mais quatro referente aos cinco vértices pendentes do ramo do tipo 2). \triangle

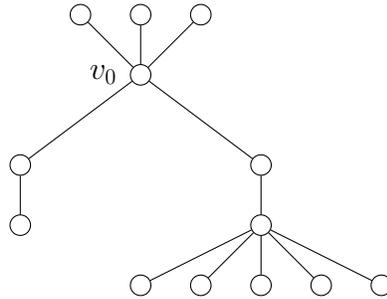


Figura 5.11: Árvore de \mathfrak{F} com ramos do tipo 0, 1 e 2

Observação: Como a matriz M_p 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 M_p .

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. Quando temos c ramos do mesmo tipo e com o mesmo número de pendentes, podemos tomar cada ramo como um conjunto simétrico S_i e aplicar o Algoritmo 1: os autovalores do bloco T_i (ou Q_j) referente a esses ramos são autovalores laplacianos da árvore, com multiplicidade $c - 1$. No Exemplo 5.15 há dois ramos com duas folhas cada, assim o espectro de $T_i = \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 3 \end{bmatrix}$ aparece com multiplicidade um no espectro laplaciano da árvore, a saber o subconjunto $\{3,7321; 0,2679\}$.

As aproximações que serão exibidas a seguir terão um papel fundamental no método usado para demonstrarmos o Teorema 5.5 para as árvores de \mathfrak{F} , para o qual necessitaremos diretamente dos autovalores dessas matrizes, ou de seus valores aproximados.

Lema 5.17. *A matriz*

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

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

$$2 < x_1 < s+2 - \frac{1}{s+2} < s+2 \text{ e}$$

$$0 < x_2 < \frac{1}{2}.$$

Lema 5.18. *A matriz*

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

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

$$t+2 < y_1 < t+2 + \frac{1}{4t},$$

$$\frac{3}{2} < y_2 < 2,$$

$$1 > y_3 > \begin{cases} 0,19 & \text{para } t = 1 \\ \frac{1}{4t} & \text{para } t \geq 2 \end{cases},$$

$$y_1 + y_2 = t+4 - y_3.$$

Além disso, podemos dizer que o segundo autovalor, y_2 , é crescente em função de t .

Demonstração (Lema 5.17): 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 $a \geq 2$,

$$a^4 - 4a^2 < a^4 - 4a^2 + 4$$

$$\iff a\sqrt{a^2-4} < a^2 - 2$$

$$\iff \sqrt{a^2-4} < a - \frac{2}{a}$$

$$\iff \frac{a + \sqrt{a^2-4}}{2} < a - \frac{1}{a}.$$

Substituindo a por $s + 2$, obtemos o resultado para a raiz x_1 . Além disso, como $p(0) = 1$ e $p(\frac{1}{2}) = \frac{1-2s}{4} < 0$, há uma raiz entre 0 e $\frac{1}{2}$. \square

Demonstração (Lema 5.18): 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 o 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 $(\frac{3}{2}, 2)$, temos que $p_{t+k}(x) > p_t(x)$. Como $p(\frac{3}{2}) > 0$ e $p(2) < 0$, $p_t(x)$ intercepta a reta $x=0$ antes de $p_{t+k}(x)$, portanto a raiz y_2 , como função de t , é crescente no intervalo ao qual ela pertence. \square

Quando utilizamos a decomposição BT em uma árvore de \mathfrak{F} , podemos obter os autovalores laplacianos diferentes de 1 através de uma matriz de ordem menor do que a matriz laplaciana como afirma o Teorema 5.14. Podemos decompor essas matrizes M_p da equação (5.8) (e M_0 da equação (5.9)) como soma de duas matrizes simétricas A_p e B_p de forma

$$\begin{aligned}
M_p &= A_p + B_p & (5.10) \\
&= \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & T_1 & & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & & \\ & & & T_{r_1} & & & & & \\ & & & & Q_1 & & & & \\ & & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & Q_{r_2} & & \\ & & & & & & & \delta & \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \sqrt{p} & & & & & & & & \\ & u_1 & & & & & & & \\ & & \vdots & & & & & & \\ & & & u_{r_1} & & & & & \\ & & & & \bar{u}_1 & & & & \\ & & & & & \vdots & & & \\ & & & & & & \bar{u}_{r_2} & & \\ & & & & & & & \delta & 0 \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

As matrizes A_0 e B_0 são semelhantes a A_p e B_p , eliminando a primeira linha e coluna da ambas. Podemos expressar a soma de autovalores de M_p via soma de autovalores de A_p e B_p , mas para isso é necessário que os conheçamos. Os autovalores de A_p são facilmente obtidos pois esta é uma matriz diagonal em blocos e os seus autovalores são os autovalores das matrizes T_i e Q_j apresentados nos Lemas 5.17 e 5.18.

Já uma matriz simétrica cuja última linha (e coluna) tem entradas $(\sqrt{b_1}, \sqrt{b_2}, \dots, \sqrt{b_{n-1}}, 0)$ possui espectro $\{\sqrt{\delta}, 0, 0, \dots, 0, -\sqrt{\delta}\}$, onde $\delta = \sum_{i=1}^{n-1} b_i$. Este resultado pode ser facilmente obtido expandindo-se o determinante de $xI - B$ e pode ser encontrado em [14] (Lema 4.2). Para as nossas matrizes B_p , temos δ sendo o grau do vértice central da árvore, ou seja, $\delta = p + r_1 + r_2$.

Utilizando o Teorema 5.7 e escolhendo o conjunto $I = \{1, \dots, k, |M_p|\}$, obtemos o seguinte resultado, onde $S_i(A)$ é a soma dos i maiores autovalores de A , quando A é uma matriz.

Lema 5.19. *Seja $T \in \mathfrak{F}$ uma árvore com n vértices e com ρ autovalores laplacianos maiores do que a média $\bar{\delta}$. Seja $M_p = A_p + B_p$ a decomposição de matrizes em (5.10). Então, para $1 \leq k \leq \rho$ temos*

$$S_k(T) \leq S_{k+1}(A_p). \quad (5.11)$$

Demonstração: A soma dos k maiores autovalores laplacianos de T é a soma dos k maiores autovalores laplacianos de M_p se $k \leq \rho$, pois os autovalores laplacianos de T que não são autovalores de M_p são todos iguais a 1, valor menor do que a média $\bar{\delta} = 2 - \frac{2}{2}$. Como 0 é um autovalor de M_p , ele é de fato o $|M_p|$ -ésimo autovalor de M_p .

$$\begin{aligned} S_k(T) = S_k(M_p) + 0 &= \sum_{i \in I} \lambda_i(M_p) \leq \sum_{i=1}^{k+1} \lambda_i(A_p) + \sum_{i \in I} \lambda_i(B_p) \\ &= S_{k+1}(A_p) + (\sqrt{\delta} + 0 + \dots + 0 - \sqrt{\delta}) = S_{k+1}(A_p). \end{aligned}$$

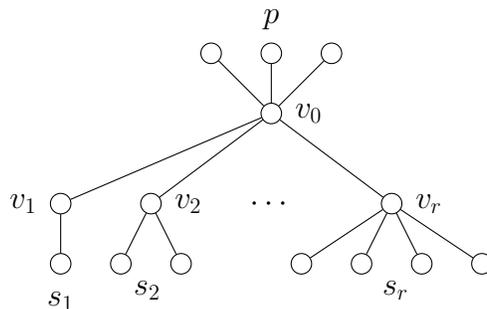
□

Outro invariante das árvores da família \mathfrak{F} necessário para cálculos da energia laplaciana é o número de autovalores laplacianos maiores do que a média dos graus $\bar{\delta}$, denotado por ρ . Vamos apresentar o intervalo a que esse parâmetro ρ pode pertencer para as árvores de \mathfrak{F} . Seja \mathfrak{F}_i o conjunto formado pelas árvores de \mathfrak{F} de diâmetro i , para $4 \leq i \leq 6$. Para cada \mathfrak{F}_i , encontramos os possíveis valores de ρ e demonstramos que a cota superior em (5.2) para S_ρ é válida, concluindo que ela também é verdadeira para todo $1 \leq k \leq n$ (Lema 5.6).

5.3.1 Caso \mathfrak{F}_4

Considere uma árvore de \mathfrak{F}_4 com $r \geq 2$ ramos do tipo 1 e p vértices pendentes na raiz central como ilustrado na Figura 5.12. Observe que não podemos ter ramos do tipo 2 para árvores de \mathfrak{F}_4 e o número de ramos do tipo 1 deve ser no mínimo dois, pois caso contrário teríamos uma estrela ou árvore de diâmetro três. Denotamos s_i o número de folhas do i -ésimo ramo do tipo 1, estes ordenados de maneira crescente tal que $s_1 \leq s_2 \leq \dots \leq s_r$.

Proposição 5.20. *Uma árvore $T \in \mathfrak{F}_4$, com $r \geq 2$ ramos do tipo 1 satisfaz $r \leq \rho \leq r + 1$. Além disso, (i) se T possui pendentes na raiz central ou (ii) se T possui no mínimo três ramos com duas ou mais folhas em cada, então $\rho = r + 1$.*

Figura 5.12: Árvore de \mathfrak{F}_4

Demonstração: Usando o algoritmo de localização de autovalores da Seção 2.4 e calculando $a(v)$ para $\alpha = \bar{\delta}$ obtemos, para cada tipo de vértice (u vértices pendentes, v_i vértices dos ramos do tipo 1, v_0 vértice central), as seguintes relações, onde s_i representa o número de folhas do i -ésimo ramo:

$$a(u) = 1 - \left(2 - \frac{2}{n}\right) = -\frac{n-2}{n} < 0 \quad (5.12)$$

$$a(v_i) = s_i + 1 - \left(2 - \frac{2}{n}\right) - \frac{s_i}{a(u)} = 2s_i + \frac{2s_i}{n-2} + \frac{2}{n} - 1 > 1. \quad (5.13)$$

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 $\bar{\delta}$, e no máximo $r + 1$. A definição exata desse número depende do sinal de $a(v_0)$.

No caso (i), se houver $p \geq 1$ pendentes no vértice v_0 , o algoritmo de localização fornece o valor

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

Como $a(v_i) > 1$ para qualquer s_i (5.13), cada parcela $1 - \frac{1}{a(v_i)}$ é limitada inferiormente por zero. Assim

$$a(v_0) > 2p + \frac{2p}{n-2} - 2 + \frac{2}{n} + r \cdot 0 > 0,$$

ou seja, $\rho = r + 1$.

Para (ii), se $s_i \geq 2$ para $r - 2 \leq i \leq r$, temos que $a(v_i) > 2s_i - 1 \geq 3$.

Assim $1 - \frac{1}{a(v_i)} > \frac{2}{3}$ o que leva a

$$a(v_0) > 2p + \frac{2p}{n-2} - 2 + \frac{2}{n} + \left[(r-3) \cdot 0 + 3 \cdot \frac{2}{3} \right] > \frac{2}{n},$$

ou seja, $\rho = r + 1$ também. □

Demonstraremos a validade do Teorema 5.5 para árvores de \mathfrak{F}_4 separando-as em dois casos: $\rho = r + 1$ e $\rho = r$.

Caso 1.1 ($\rho = r + 1$ e $r \geq 3$): Nessa situação, vamos aplicar o Lema 5.19 para árvore T com $k = r + 1$. Assim $S_{r+1}(T) \leq S_{r+2}(A_p)$ onde A_p é a matriz definida em (5.10). Usaremos a seguinte desigualdade auxiliar, que é um caso particular de média harmônica.

Lema 5.21. *Para $a_i \geq 1$, $1 \leq i \leq r$, tais que $\sum_{i=1}^r a_i = c$, temos*

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

Pelo Lema 5.17 sabemos que os $r + 1$ maiores autovalores de A_p são o grau δ de v_0 e os maiores autovalores de T_1, \dots, T_r . O $r + 2$ -ésimo autovalor de A_p é 1 se houver pendentes na raiz central, ou então o maior entre todos os menores autovalores de T_i , este menor do que $\frac{1}{2}$, no caso de não haver pendentes.

Se tivermos no mínimo um pendente, obtemos

$$S_{r+1}(T) \leq \delta + \sum_{i=1}^r \left(\frac{s_i + 2 + \sqrt{s_i^2 + 4s_i}}{2} \right) + 1 \quad (5.14)$$

$$< \delta + 1 + \sum_{i=1}^r \left(s_i + 2 - \frac{1}{s_i + 2} \right) \quad (5.15)$$

$$= \delta + 1 + 2r + \sum_{i=1}^r s_i - \sum_{i=1}^r \frac{1}{s_i + 2} \\ = n + 2r - \sum_{i=1}^r \frac{1}{s_i + 2} \quad (5.16)$$

$$\leq n - 1 + 2(r + 1) - 1 - \frac{r^2}{\sum_{i=1}^r s_i + 2r} \quad (5.17)$$

$$= n - 1 + 2(r + 1) - 1 - \frac{r^2}{n + r - p - 1}. \quad (5.18)$$

Para (5.15) usamos o Lema 5.17, para (5.16) e (5.18), usamos a relação $n = 1 + p + r + \sum_{i=1}^r s_i$, enquanto que para (5.17) usamos a desigualdade do Lema 5.21. Para concluir basta provarmos que

$$\frac{r^2}{n + r - p - 1} \geq \frac{2(r + 1)}{n}.$$

Este fato é verdadeiro porque

$$\frac{r^2}{n+r-p-1} \geq \frac{2r+2}{n} \quad (5.19)$$

$$\iff r^2 n \geq 2rn + 2r^2 - 2rp + 2n - 2p - 2$$

$$\iff n(r^2 - 2r - 2) \geq 2(r^2 - rp - p - 1)$$

$$\iff n(r^2 - 2r - 2) \geq 2(r^2 - r - 2)$$

$$\iff n \geq 2 \frac{r^2 - r - 2}{r^2 - 2r - 2} = 2 + \frac{2r}{r^2 - 2r - 2}$$

$$\iff n \geq 2 + 2 \cdot 3 = 8,$$

pois $n = 1 + p + r + \sum s_i \geq 1 + p + 2r \geq 8$.

Se não tivermos pendentes na raiz central, podemos substituir o termo $+1$ por $+\frac{1}{2}$ em (5.14). Dessa forma, em vez de (5.19), será suficiente mostrarmos que

$$\begin{aligned}
& \frac{r^2}{n+r-p-1} + \frac{1}{2} \geq \frac{2r+2}{n} \\
\iff & \frac{2r+2}{n} - \frac{r^2}{n+r-p-1} \leq \frac{1}{2} \\
\iff & \frac{n(2+2r-r^2)+2r^2}{n(n+r-1)} \leq \frac{1}{2}.
\end{aligned}$$

Sabemos que $2 + 2r - r^2 < 0$, para $r \geq 3$ e que $r < \frac{n}{2}$. Assim segue que

$$\frac{n(2 + 2r - r^2) + 2r^2}{n(n + r - 1)} < \frac{2r^2}{n(n + 2)} < \frac{1}{2}.$$

Caso 1.2 ($\rho = r + 1$ e $r = 2$): Para esse caso não podemos usar a decomposição BT e o Lema 5.19. Para esse caso vamos analisar diretamente o polinômio característico. Seja $s_2 = a \geq s_1 = b \geq 1$ o número de folhas em cada ramo do tipo 1. A árvore T tem $n = p + a + b + 3$ vértices e polinômio laplaciano dado por

$$P_L(x) = q_{p,a,b}(x) \cdot (x - 1)^{n-6} \cdot x,$$

onde

$$\begin{aligned}
q_{p,a,b}(x) &= x^5 - (p + b + a + 7)x^4 + (bp + ap + 4p + ab + 5b + 5a + 18)x^3 \\
&\quad - (abp + 2bp + 2ap + 6p + 3ab + 8b + 8a + 22)x^2 \\
&\quad + (bp + ap + 4p + 2ab + 5b + 5a + 13)x - p - b - a - 3.
\end{aligned}$$

Todos os autovalores maiores do que a média $\bar{\delta}$ são raízes de $q_{p,a,b}(x)$. Se denotarmos por $x_1 \geq \dots \geq x_5 > 0$ as raízes do polinômio $q_{p,a,b}(x)$, sabemos que $S_3(T) = x_1 + x_2 + x_3 = n + 4 - x_4 - x_5$. Portanto é suficiente obter cotas inferiores para as duas menores raízes de $q_{p,a,b}(x)$. Primeiramente assumiremos que $p \geq 1$. Vamos aplicar o algoritmo de localização de autovalores da Seção 2.4 à árvore, com $\alpha = \frac{2}{n}$. Os valores $a(v)$ para os vértices folhas u e nós dos ramos v_1 e v_2 são

$$\begin{aligned}
a(u) &= \frac{n-2}{n} > 0, \\
a(v_1) &= 1 - \frac{2a}{n-2} - \frac{2}{n}, \\
a(v_2) &= 1 - \frac{2b}{n-2} - \frac{2}{n}.
\end{aligned}$$

Note que $a(v_1)$ e $a(v_2)$ não podem ser ambos negativos, pois caso contrário teríamos $a, b > \frac{n}{2} - 2$ que nos levam a uma contradição

$$n = a + b + p + 3 > \frac{n}{2} - 2 + \frac{n}{2} - 2 + p + 3 = n + p - 1 \geq n.$$

Agora considere o vértice central v_0 e seja

$$f(p, a, b, n) = a(v_0) = p + 2 - \frac{2}{n} - \frac{pn}{n-2} - \frac{1}{a(v_1)} - \frac{1}{a(v_2)}.$$

Com a mudança de variáveis $p = \varrho + 1$, $b = \beta + 1$ and $a = s + \beta + 1$, podemos ver que

$$n^3(n-2)^3 a(v_1) a(v_2) f(\varrho + 1, s + \beta + 1, \beta + 1, \varrho + 2\beta + s + 6) \quad (5.20)$$

é um polinômio multivariado de variáveis ϱ, β, s cujos coeficientes são negativos (veja a equação (5.36) no final do capítulo). No nosso caso, as variáveis são não negativas, implicando que $a(v_1)a(v_2)a(v_0) < 0$. Além disso, já que $a(v_1)$ e $a(v_2)$ não podem ser ambos negativos, há apenas um termo entre $a(v_1), a(v_2), a(v_0)$ negativo. Ou seja há apenas um autovalor menor do que o valor $\alpha = \frac{2}{n}$, a saber, o autovalor zero. Portanto $x_5 > \frac{2}{n}$.

Agora mostraremos que $x_4 \geq \frac{4}{n}$. Aplicando o algoritmo de localização para $\alpha = \frac{4}{n}$ obtemos

$$\begin{aligned} a(u) &= \frac{n-4}{n} > 0, \\ a(v_1) &= 1 - \frac{4}{n} - \frac{4a}{n-4}, \\ a(v_2) &= 1 - \frac{4}{n} - \frac{4b}{n-4}. \end{aligned}$$

Suponha que $a(v_1), a(v_2) < 0$. Assim, temos que ter $a, b > \frac{(n-4)^2}{4n}$. Mas note que o número de pendentes p e a está limitado por certo valor

$$p = n - a - b - 3 < n - 2\frac{(n-4)^2}{4n} - 3 = \frac{n}{2} + 1 - \frac{8}{n}. \quad (5.21)$$

$$a = n - b - p - 3 < n - \frac{(n-4)^2}{4n} - p - 3, \quad (5.22)$$

Inserindo essa informação para expressão de $a(v_i)$ obtemos

$$\begin{aligned} a(v_1) &= 1 - \frac{4}{n} - \frac{4a}{n-4} > 1 - \frac{4}{n} - \frac{4n}{n-4} + \frac{n-4}{n} + \frac{4(p+3)}{n-4} \\ &= -2 - \frac{8}{n} + \frac{4(p-1)}{n-4} = -\frac{2(n^2 + 2n - 2np - 16)}{n(n-4)}, \end{aligned}$$

e $a(v_2)$ satisfaz a mesma cota. Quando inserimos essa desigualdade em $a(v_0)$ chegamos a

$$\begin{aligned} a(v_0) &= p + 2 - \frac{4}{n} - \frac{pn}{n-4} - \frac{1}{a(v_1)} - \frac{1}{a(v_2)} \\ &> 2 - \frac{4}{n} - \frac{4p}{n-4} + \frac{n(n-4)}{n^2 + 2n - 2np - 16}. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Para um $n \geq 8$ fixo, a expressão (5.23) de $a(v_0)$ possui dois extremos relativos, vista como uma função de p . Um mínimo relativo entre 2 e $\frac{n}{2}$ e um máximo relativo maior do que $\frac{n}{2} + 1$, como indica o exemplo da Figura 5.13.

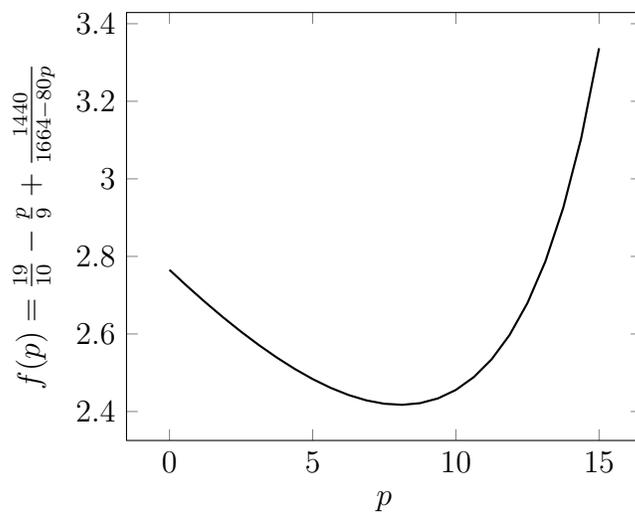


Figura 5.13: Gráfico da cota de $a(v_0)$ em função de $0 \leq p \leq 15$ para $n = 40$

Pela expressão (5.21), o valor que minimiza $a(v_0)$ o faz para qualquer p válido. Usando Cálculo, encontramos que o ponto de mínimo é

$$j_1(n) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right) n - \frac{8}{n} + \sqrt{2} + 1$$

e substituindo $p = j_1(n)$ obtemos

$$a(v_0) \geq \frac{4(n^2 - 4\sqrt{2}n - 4n + 12\sqrt{2})}{\sqrt{2}(n-4)n} \geq 2\sqrt{2} - \frac{5}{2} > 0.$$

Dessa forma, no máximo dois dos três valores $a(v_0), a(v_1), a(v_1)$ podem ser negativo, o que leva a no máximo dois autovalores menores do que $\frac{4}{n}$, a saber, 0 e x_5 . Assim $x_4 > \frac{4}{n}$.

No caso de $p = 0$, uma das raízes pequenas de $q_{0,a,b}(x)$ é 1 e assim $x_4 + x_5 \geq 1 + x_5 > \frac{6}{n}$, se $n \geq 6$. Em qualquer caso,

$$S_3(T) = n + 4 - x_4 - x_5 < n + 4 - \frac{6}{n}.$$

Case 2 ($\rho = r$): Pelo Lema 5.20 é necessário que não haja pendentes na raiz central e que no máximo dois ramos do tipo 1 tenham duas ou mais folhas. Seja \tilde{r} o número de ramos do tipo 1 tais que $s_i \geq 2$. Vamos separar nos possíveis casos de \tilde{r} .

Case 2.1 ($\tilde{r} = 2$): Sejam $a = s_r$ e $b = s_{r-1}$ o número de folhas dos ramos com o maior número de folhas, enquanto que $s_i = 1$ para os demais $r - 2$ ramos se houver. Assim $n = a + b + 2r - 1$ e o polinômio característico laplaciano de T pode ser obtido através das componentes disjuntas do GWG obtido após aplicação do Algoritmo 1 no GWG dado por T . Então

$$P_L(x) = p_{a,b,r}(x)(x^2 - 3x + 1)^{r-3}(x - 1)^{a+b-2}x, \quad (5.24)$$

onde

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

Os autovalores laplacianos de T são $\frac{3 \pm \sqrt{5}}{2}$ com multiplicidade $r - 3$, 0, 1 (com multiplicidade $a + b - 2$) e as seis raízes $x_1 \geq x_2 \geq \dots \geq x_6 > 0$ de $p_{a,b,r}(x)$. Como $\rho = r$, as r maiores raízes de $P_L(x)$ são $\frac{3 + \sqrt{5}}{2} > 2$, com multiplicidade $r - 3$, e as três maiores raízes de $p_{a,b,r}(x)$. Vamos aplicar o algoritmo de localização de autovalores para T com $\alpha = \frac{9}{5}$ obtendo os valores de $a(v)$ ilustrados na Figura 5.14, onde

$$a(v_0) = r - \frac{9}{5} - (r - 2) \frac{20}{29} - \frac{20}{45a - 16} - \frac{20}{45b - 16} \geq \frac{9r}{29} - \frac{61}{145} - 2 \frac{20}{74} = \frac{9r}{29} - \frac{5157}{5365}.$$

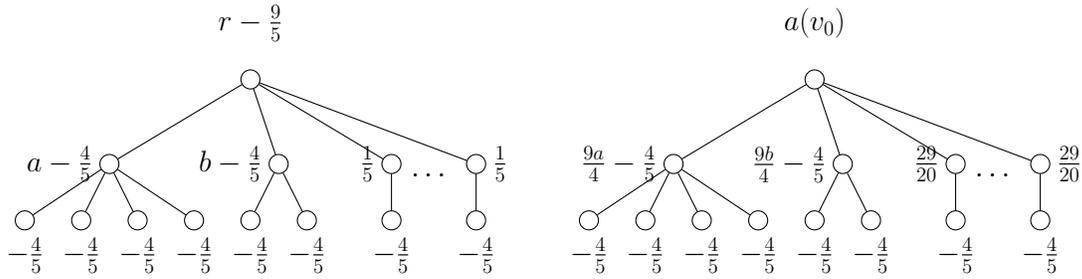


Figura 5.14: Localizando autovalores: passo inicial e passo final

Ou seja, $a(v_0) > 0$ para $r \geq 4$. Assim, como há $r + 1$ valores positivos de $a(v)$, obtemos que existem $r + 1$ autovalores maiores do que $\frac{9}{5}$ e portanto $x_4 > \frac{9}{5}$ (os outros autovalores são menores ou iguais a 1). Assim, para $r \geq 4$ temos

$$\begin{aligned} S_r(T) &= (r - 3) \frac{3 + \sqrt{5}}{2} + (x_1 + x_2 + x_3) \\ &< (r - 3) \frac{3 + \sqrt{5}}{2} + (a + b + r + 7 - x_4) \\ &< \frac{5 + \sqrt{5}}{2} r + a + b + \frac{5 - 3\sqrt{5}}{2} - \frac{9}{5} \\ &= \frac{5 + \sqrt{5}}{2} r + a + b - \frac{15\sqrt{5} - 7}{10} < 4r + a + b - 4 \quad (5.25) \\ &= n + 2r - 3 < n - 2 + 2r - \frac{2r}{n}. \end{aligned}$$

A última desigualdade segue de $n \geq 2r + 3$, enquanto que (5.25) é devido a $r \geq 4$.

Se $r = 3$, usamos um argumento semelhante. Aplicamos o algoritmo de localização com $\alpha = 1 + \frac{6}{n}$ (veja na Figura 5.15 os valores de $a(v)$). Os vértices v_i terão valor positivo limitado inferiormente ($a(v_1) > \frac{3}{2}$, $a(v_2) > 2b$ e $a(v_3) > 2a$), as folhas terão valor negativo e o vértice central valor positivo, pois $a \geq b \geq 2$ e $n \geq 9$.

$$a(v_0) = 3 - \left(1 + \frac{6}{n}\right) - \sum \frac{1}{a(v_i)} > 2 - \frac{6}{n} - \left(\frac{2}{3} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4}\right) > \frac{1}{6}$$

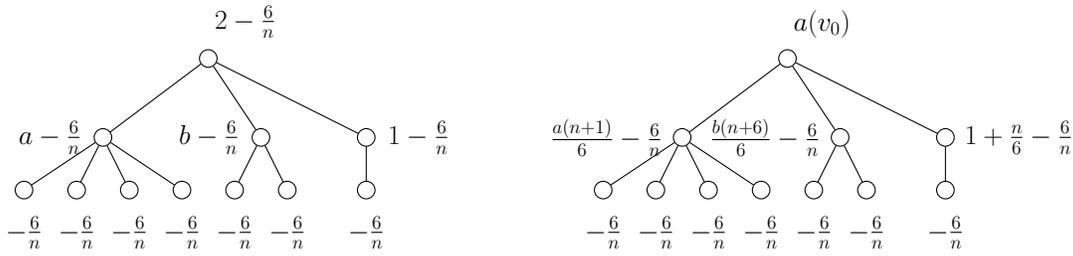


Figura 5.15: Localizando autovalores: passo inicial e passo final

Portanto $x_4 \geq 1 + \frac{6}{n}$ pois há quatro autovalores maiores do que o valor $\alpha = 1 + \frac{6}{n}$. Isso nos leva a

$$\begin{aligned} S_3(T) &= x_1 + x_2 + x_3 < a + b + 10 - x_4 < a + b + 9 - \frac{6}{n} \\ &= n + 4 - \frac{6}{n} = n - 2 + 2\dot{3} - \frac{2\dot{3}}{n}. \end{aligned}$$

E finalmente para o caso $r = 2$, o polinômio $p_{a,b,2}(x)$ pode ser fatorado como $q_{a,b}(x)(x^2 - 3x + 1)$. Esse fator de grau dois se cancela com o fator de grau -1 em $P_L(x)$. Aplicando o algoritmo de localização para $\alpha = 1 + \frac{4}{n}$ obtemos os valores de $a(v)$ indicados na Figura 5.16. Os valores de $a(v_i)$ são limitados inferiormente por $\frac{69}{14}$ pois $a, b \geq 2$ e $n \geq 7$, e assim

$$a(v_0) = 2 - 1 - \frac{4}{n} - \sum \frac{1}{a(v_i)} > \frac{11}{483}.$$

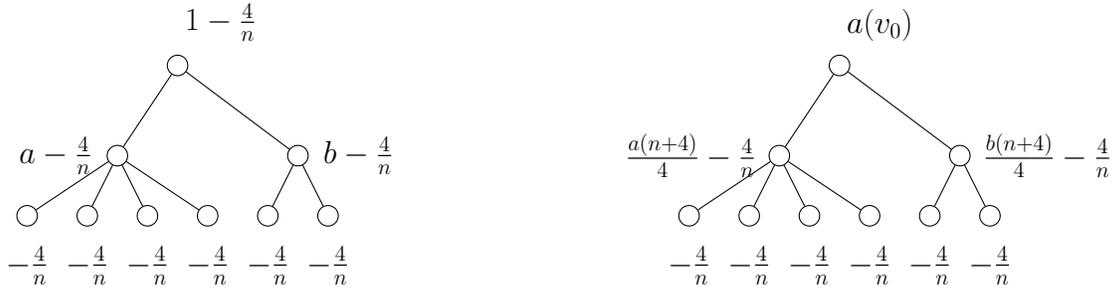


Figura 5.16: Localizando autovalores: passo inicial e passo final

Portanto, há três autovalores maiores do que $1 + \frac{4}{n}$, estes raízes de $q_{a,b}(x)$. Como a soma de todos os autovalores é $2n - 2$ e sabemos que há (no mínimo) $a + b - 2 = n - 5$ autovalores iguais a 1, obtemos

$$\begin{aligned} S_2(T) &= \mu_1 + \mu_2 = (2n - 2) - (n - 5) \cdot 1 - \mu_3 < n + 3 - \left(1 + \frac{4}{n}\right) \\ &= n - 2 + 2 \cdot 2 - \frac{2 \cdot 2}{n}. \end{aligned}$$

Caso 2.2 ($\tilde{r} = 1$): Seja T a árvore de \mathfrak{F}_4 com r ramos tais que $s_r = a \geq 2$, enquanto que $s_i = 1$ para $1 \leq i \leq r - 1$. O polinômio característico pode ser obtido de (5.24) tomando $b = 1$. Assim,

$$P_L(x) = p_{a,r}(x)(x^2 - 3x + 1)^{r-2}(x - 1)^{s-1}x,$$

onde

$$p_{a,r}(x) = x^4 - (a + r + 5)x^3 + (ar + 3a + 4r + 8)x^2 - (2ar + 2a + 5r + 4)x + a + 2r.$$

Os maiores autovalores de T são $\frac{3+\sqrt{5}}{2}$ com multiplicidade $r - 2$ e as duas maiores raízes $x_1 \geq x_2$ de $p_{a,r}(x)$.

Note que $p_{a,r}(0) = a + 2r$ e $p_{a,r}(1) = -(r - 1)a$, ou seja há uma raiz no intervalo $(0, 1)$. Por outro lado, $p_{a,r}(2) = a$, dessa forma há outra raiz de $p_{a,r}(x)$

no intervalo $(1, 2)$. Aplicando o algoritmo de localização para $\alpha = \frac{33}{20}$, obtemos os valores de $a(v)$ indicados na Figura 5.17.

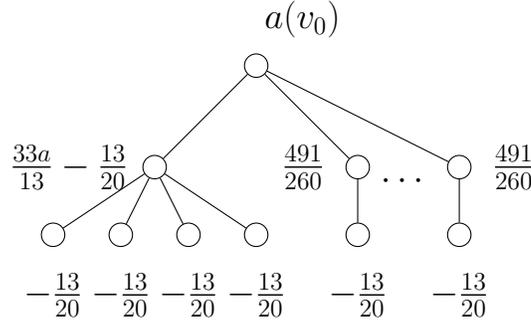


Figura 5.17: Localizando autovalores: passo final

Temos $r + 1$ autovalores maiores do que $\frac{33}{20}$, pois $a(v_0)$ contribui com valor positivo, a saber

$$\begin{aligned} a(v_r) &= a + 1 - \frac{33}{20} + a \frac{20}{13} = \frac{33a}{13} - \frac{13}{20}, \\ a(v_0) &= r - \frac{33}{20} - (r-1) \frac{260}{491} - \frac{260}{660a - 169} > 0 \end{aligned}$$

para $a \geq 2$ e $r \geq 3$. Assim, $x_3 > \frac{33}{20}$ quando $r \geq 3$. No caso particular de $r = 2$ obteremos a cota $x_3 > 1 + \frac{5}{2n}$ usando o mesmo argumento, mas não será suficiente. Para $r = 2$ devemos também procurar um limite inferior para x_4 . Aplicando o algoritmo de localização com $\alpha = \frac{3}{2n}$, ao final do processo, as folhas têm valor $a(u) = \frac{2n-3}{2n}$ e o nó v_1 tem valor $a(v_1) = \frac{2(n-3)}{2n-3} \geq \frac{2}{3}$. Se $a(v_2) > 0$ então teremos no máximo um autovalor menor do que $\frac{3}{2n}$ (exatamente um autovalor, a saber, o autovalor zero). Se $a(v_2) < 0$ então a raiz central terá valor

$$a(v_0) = 2 - \frac{3}{2n} - \sum \frac{1}{a(v_i)} > 2 - \frac{3}{12} - \frac{2n-3}{2n-6} > \frac{7}{4} - \frac{9}{6} = \frac{1}{4},$$

ou seja também apenas um autovalor maior do que $\frac{3}{2n}$.

Se $r = 2$ temos $n = s + 4$ vértices. Assim

$$\begin{aligned} S_2(T) &= x_1 + x_2 = s + 7 - (x_3 + x_4) \\ &< s + 7 - \left(1 + \frac{4}{n}\right) = n + 2 - \frac{4}{n}. \end{aligned}$$

Se $r \geq 3$ temos $n = 2r + s$, portanto

$$\begin{aligned} S_r(T) &= x_1 + x_2 + (r-2)\frac{3+\sqrt{5}}{2} = s + r + 5 - x_3 - x_4 + (r-2)\frac{3+\sqrt{5}}{2} \\ &< \frac{5+\sqrt{5}}{2}r + s + 2 - \frac{33}{20} - \sqrt{5} \\ &< 4r + s - 3 = n + 2r - 3 < n - 2 + 2r - \frac{2r}{n}. \end{aligned}$$

Caso 2.3 ($\tilde{r} = 0$): O polinômio característico tem a forma

$$P_L(x) = (x^2 - (r+3)x + 2r+1)(x^2 - 3x + 1)^{r-1}x.$$

Os r autovalores maiores do que a média $\bar{\delta}$ são $\frac{3+\sqrt{5}}{2}$ com multiplicidade $r-1$ e $\frac{r+3+\sqrt{r^2-2r+5}}{2}$, que é limitado superiormente por $r+1 + \frac{1}{r-1}$. Temos

$$\begin{aligned} S_r(T) &< r + 1 + \frac{1}{r-1} + (r-1)\frac{3+\sqrt{5}}{2} \\ &= \frac{5+\sqrt{5}}{2}r - \frac{1+\sqrt{5}}{2} + \frac{1}{r-1} \\ &\leq \frac{5+\sqrt{5}}{2}r - \frac{1+\sqrt{5}}{2} + \frac{1}{2} \\ &= \frac{5+\sqrt{5}}{2}r - \frac{\sqrt{5}}{2} < 4r - 2 \end{aligned}$$

para $r > \frac{4-\sqrt{5}}{3-\sqrt{5}} = 2,309$. Podemos supor que $r \geq 3$, pois não queremos $T = \mathcal{P}_5$.

Usando $n = 2r + 1$ obtemos

$$\begin{aligned} S_r(T) &< 4r - 2 = 2r - 1 + 2r - 1 = n - 2 + 2r - 1 \\ &< n - 2 + 2r - \frac{2r}{2r+1} = n - 2 + 2r - \frac{2r}{n}. \end{aligned}$$

Isto conclui a prova do Teorema 5.5 para \mathfrak{F}_4 . □

5.3.2 Caso \mathfrak{F}_5

Para que uma árvore T pertença a \mathfrak{F}_5 , ela deve possuir apenas um ramo do tipo 2, e $r_1 \geq 1$ ramos do tipo 1. Vamos considerar $r = r_1 + 1$ o número total de ramos da árvore, além dos p vértices pendentes da raiz central v_0 . Sejam s_i e t o número de folhas do i -ésimo ramo do tipo 1 e do ramo do tipo 2, respectivamente, como ilustrado na Figura 5.18. A quantidade de vértices de T é $n = p + r + 2 + t + \sum_{i=1}^{r-1} s_i$.

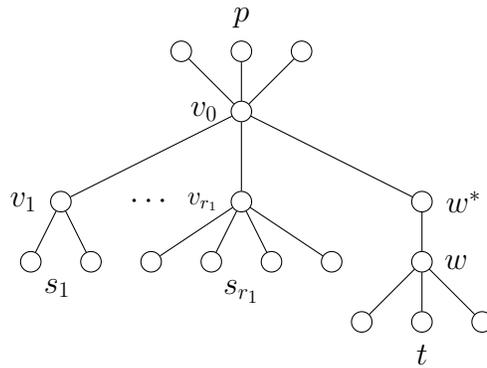


Figura 5.18: Árvore de \mathfrak{F}_5

Proposição 5.22. *Uma árvore da família \mathfrak{F}_5 , com r ramos e p pendentes satisfaz $r + 1 \leq \rho \leq r + 2$.*

Demonstração: Usando o algoritmo de localização de autovalores e calculando $a(v)$ para $\alpha = \bar{\delta}$ obtemos, para cada tipo de vértice (u vértices pendentes, 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 adjacentes a v_i e t o número de folhas adjacentes a w , conforme ilustrado na Figura 5.18. As expressões de $a(u)$ e $a(v_i)$ são as mesmas de (5.12) e (5.13),

$$a(w) = 2t + \frac{2t}{n-2} + \frac{2}{n} - 1 > 1 \quad (5.26)$$

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 vértice do tipo 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 $\bar{\delta}$, e no máximo $r + 2$.

Vamos supor que $\rho = r$, assim tanto $a(v_0)$ quanto $a(w^*)$ devem ser negativos. Sejam

$$\begin{aligned} h(n, t) &:= a(w^*) = \frac{2}{n} - \frac{1}{a(w)} \\ &= \frac{-n^3 + 4(nt + 2)(n - 1)}{n(n^2(2t - 1) - 2n(t - 2) - 4)}, \\ a(v_0) &= r + p - \left(2 - \frac{2}{n}\right) + p \frac{n}{n - 2} - \sum_{r_1} \frac{1}{a(v_i)} - \frac{1}{a(w^*)}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

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 termos 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.

$$h(n, t) \geq \lim_{n \rightarrow \infty} h(n, t) = -\frac{1}{2t - 1}. \quad (5.28)$$

Já que $1 - \frac{1}{a(v_i)} > 0$, podemos reescrever a expressão (5.27) 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 $\bar{\delta}$. Logo, $r + 1 \leq \rho \leq r + 2$. \square

Vamos separar a demonstração em casos de acordo com o número de ramos. Uma vez provado que desigualdade (5.2) vale para o número de autovalores laplacianos maiores do que a média, teremos que ela vale também para qualquer outro número de autovalores (Lema 5.6).

Caso 1 ($r \geq 4$): Se T tiver no mínimo 4 ramos, poderemos usar a decomposição BT e o Lema 5.19 na matriz M_p com $r + 1 \leq k \leq r + 2$ obtendo

$$S_k(T) \leq S_{k+1}(A_p),$$

onde A_p é a matriz diagonal em blocos definida em (5.10). Se $p = 0$, a matriz A_0 não possui a primeira linha e coluna de (5.10). Os $r + 2$ maiores autovalores laplacianos de A_p são: o grau da raiz $\delta = r + p$, os maiores autovalores dos blocos T_i e os dois maiores autovalores do bloco Q associado ao ramo do tipo 2. Pelo Lema 5.18 esses dois últimos valores são maiores do que 1. O $r + 3$ -ésimo maior autovalor de A_p é 1 se $p \geq 1$ ou um dos menores autovalores de T_1 ou Q se $p = 0$, todavia $\lambda_{r+3}(A_p) \leq 1$. Seja y_3 o menor autovalor de Q .

No caso de $k = r + 1$ teremos

$$\begin{aligned} S_{r+1}(T) &< \delta + \sum_{i=1}^{r-1} \left(s_i + 2 - \frac{1}{s_i + 2} \right) + t + 4 - y_3 \\ &= r + p + \sum_{i=1}^{r-1} s_i + t + 4 + 2(r - 1) - \sum_{i=1}^{r-1} \frac{1}{s_i + 2} - y_3 \\ &= n + 2r - \sum_{i=1}^{r-1} \frac{1}{s_i + 2} - y_3. \end{aligned} \tag{5.29}$$

Resta apenas, para concluir, mostrar que

$$\sum_{i=1}^{r-1} \frac{1}{s_i + 2} + y_3 \geq \frac{2r + 2}{n}. \tag{5.30}$$

Para isso, vamos definir $S = \max\{s_i : i = 1 \dots, r-1\}$. Assim, temos dois limites inferiores para a soma

$$\sum_{i=1}^{r-1} \frac{1}{s_i + 2} \geq \max \left\{ \frac{r-1}{S+2}, \frac{(r-1)^2}{n+r-t-4} \right\}.$$

O primeiro deles é obtido pela escolha de S e o segundo vem da aplicação do Lema 5.21 com $\sum s_i = n - r - t - p - 2$.

Se $t = 1$ usamos a cota $y_3 > 0,19 > \frac{1}{n}$ pois $n \geq 10$ para chegar na validade de (5.30) porque

$$\begin{aligned} & \frac{(r-1)^2}{n+r-t-4} + y_3 \geq \frac{2r+2}{n} \\ \iff & \frac{(r-1)^2}{n+r-t-4} \geq \frac{2r+1}{n} \\ \iff & (n-2)r^2 - (4n-2t-7)r + t + 4 \geq 0. \end{aligned}$$

Como as duas raízes de $p(r) = (n-2)r^2 - (4n-2t-7)r + t + 4$ são menores do que $\frac{4n-2t-7}{n-2} < 4$, temos o resultado. Para $t \geq 2$, podemos usar o mesmo argumento se $t \leq \frac{n}{4}$, para que tenhamos $y_3 > \frac{1}{4t} \geq \frac{1}{n}$. Caso contrário, se $t > \frac{n}{4}$, vamos provar a validade de (5.30) mostrando que

$$\frac{r-1}{S+2} \geq \frac{2r+2}{n}.$$

Note que, se $r \geq 4$ então

$$S \leq \frac{1}{3}(n-r-t-2) < \frac{1}{3}\left(n-r-\frac{n}{4}-2\right) = \frac{n}{4} - \frac{r+2}{3}.$$

Assim

$$\frac{r-1}{S+2} > \frac{r-1}{n/4 - (r+2)/3 + 2} \geq \frac{4(r-1)}{n} \geq \frac{2r+2}{n},$$

como queríamos. Portanto o Teorema 5.5 é verdadeiro para $k = r + 1$.

Para $k = r + 2$, vamos usar que o $(r+3)$ -ésimo maior autovalor de A_p é no máximo 1, assim obtemos

$$\begin{aligned} S_{r+2}(T) & \leq S_{r+1}(T) + 1 < n + 2r - \frac{2(r+1)}{n} + 1 \\ & = n + 2(r+1) - \frac{2(r+2)}{n} - \left(1 - \frac{2}{n}\right) < n - 2 + 2(r+2) - \frac{2(r+2)}{n}. \end{aligned}$$

Caso 2 ($r = 2$): Vamos investigar os autovalores da árvore $T \in \mathfrak{F}_5$ com dois ramos, com s e t folhas cada. O polinômio característico de T tem a forma $P_T(x) = q_{s,t,p}(x) \cdot (x - 1)^{n-7} \cdot x$, onde $q_{s,t,p}(x)$ é um polinômio de grau 6. Pelo Lema 5.22 temos que $3 \leq \rho \leq 4$. Usando o algoritmo de localização podemos deduzir que há três autovalores maiores do que 2 e um autovalor no intervalo $(1, 2)$. Além disso, há no máximo três autovalores menores do que 1, sendo um deles o autovalor zero. Todos os autovalores maiores do que a média $\bar{\delta}$ são raízes de $q_{s,t,p}(x)$, denotadas por $x_1 \geq x_2 \geq \dots \geq x_6$. Vamos mostrar que $x_6 \geq \frac{1}{n}$, $x_5 \geq \frac{2}{n}$ and $x_4 \geq \frac{7}{5}$.

Vamos tratar o caso com $p \geq 1$ pendentes. Aplicando o algoritmo de localização com $\alpha = \frac{1}{n}$, obtemos $a(u) = 1 - \frac{1}{n} > 0$ para todas as folhas u . Como $n = p + s + t + 4$, o maior valor para s e t é $n - 5$. Para os demais quatro vértices o algoritmo nos dá

$$\begin{aligned} a(v_1) &= s + 1 - \frac{1}{n} - \frac{ns}{n-1} \geq \frac{4}{n-1} - \frac{1}{n} > 0, \\ a(w) &= t + 1 - \frac{1}{n} - \frac{nt}{n-1} > 0, \\ a(w^*) &= 2 - \frac{1}{n} - \frac{1}{a(w)}, \\ a(v_0) &= p + 2 - \frac{1}{n} - \frac{pn}{n-1} - \frac{1}{a(v)} - \frac{1}{a(w^*)}. \end{aligned}$$

Para analisar o sinal de $a(w^*)$ e $a(v_0)$, calculamos

$$n^3(n-1)^3 a(v_1) a(w) a(w^*) a(v_0), \quad (5.31)$$

que, ao substituir n por $p + s + t + 4$, resulta em um polinômio multivariado com variáveis p, s, t e coeficientes negativos (veja equação (5.37) no final do capítulo). Portanto apenas um valor entre $a(w^*)$ e $a(v_0)$ é negativo, o que nos leva a apenas um autovalor menor do que $\frac{1}{n}$, que já sabemos que é o 0. Isso implica que $x_6 \geq \frac{1}{n}$.

Aplicando o algoritmo para $\alpha = \frac{2}{n}$ obtemos $a(u) > 0$ para todas as folhas. Semelhante ao argumento do Caso 1.2 de \mathfrak{F}_4 , $a(v_1)$ e $a(w)$ não podem ambos

ser negativos, pois caso contrário $a(v_1) < 0$ implica em $s > \frac{n}{2} + \frac{2}{n} - 2$ (como também $a(w) < 0$ implica em $t > \frac{n}{2} + \frac{2}{n} - 2$). Assim chegamos a uma contradição

$$n = p + s + t + 4 > p + n + \frac{4}{n}.$$

Para os outros dois vértices w^* e v_0 obtemos

$$\begin{aligned} a(w^*) &= 2 - \frac{2}{n} - \frac{1}{a(w)} \\ a(v_0) &= p + 2 - \frac{2}{n} - \frac{pn}{n-2} - \frac{1}{a(v_1)} - \frac{1}{a(w^*)}. \end{aligned}$$

Vamos mostrar que no máximo dois valores de $a(v_0), a(v_1), a(w), a(w^*)$ serão negativos, que nos leva a $x_5 > \frac{2}{n}$. Se $a(v_1)$ e $a(w)$ são ambos positivos, chegamos ao objetivo. Se não, se $a(w) < 0$ (então $a(v_1)$ deve ser positivo), então $a(w^*)$ será positivo e chegamos no resultado. Finalmente, supomos que $a(v_1) < 0$ (então $a(w)$ é positivo). Se $a(w^*) \geq 0$, atingimos o resultado, enquanto que $a(w^*) < 0$ nos leva a

$$a(v_0) > p + 2 - \frac{2}{n} - \frac{pn}{n-2} = 2 - \frac{2}{n} - \frac{2p}{n-2} \geq \frac{4}{n-2} - \frac{2}{n} > 0$$

pois $p \leq n - 6$, e assim concluimos a afirmação.

Por fim, aplicamos o algoritmo de localização com $\alpha = \frac{7}{5}$. Obtemos os valores $a(u) = -\frac{2}{5}$ para as folhas da árvore. Para v_1 e w obtemos $a(v_1) = s + 1 - \frac{7}{5} + \frac{5s}{2}$, ou seja $a(v_1) = \frac{35s-4}{10} > 0$ e $a(w) = \frac{35t-4}{10} > 0$, enquanto que para w^* temos $a(w^*) = 2 - \frac{7}{5} - \frac{10}{35t-4} = \frac{105t-62}{5(35t-4)} > 0$. Além disso,

$$\begin{aligned} a(v_0) &= p + 2 - \frac{7}{5} + \frac{5p}{2} - \frac{1}{a(v_1)} - \frac{1}{a(w^*)} \\ &= \frac{7(18375\rho\tau\varsigma + 12775\tau\varsigma + 7525\rho\varsigma + 1065\varsigma + 16275\rho\tau + 9815\tau + 6665\rho + 329)}{10(105\tau + 43)(35\varsigma + 31)} \end{aligned}$$

onde $\rho = p + 1$, $\varsigma = s + 1$ e $\tau = t + 1$. Como consequência, verificamos que há quatro autovalores maiores do que $\frac{7}{5}$, o que implica em $x_4 > \frac{7}{5}$.

Como $\rho \in \{3, 4\}$, usando a relação $\sum_{i=1}^6 x_i = 2n - 2 - (n - 7) = n + 5$, temos

$$\begin{aligned} S_3(T) &= x_1 + x_2 + x_3 = (2n - 2) - (n - 7) - x_4 - x_5 - x_6 \\ &< n + 5 - \left(\frac{7}{5} + \frac{2}{n} + \frac{1}{n} \right) < n + 4 - \frac{6}{n} \end{aligned}$$

para $n \geq 8$. No caso particular $n = 7$, verificamos diretamente que $S_3(T) < 10 < 11 - \frac{6}{7}$ para a única árvore T in \mathfrak{F}_5 com sete vértices e um pendente na raiz central. Para $\rho = 4$ temos

$$\begin{aligned} S_4(T) &= x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = n + 5 - x_5 - x_6 \\ &< n + 5 - \frac{3}{n} < n + 6 - \frac{8}{n}. \end{aligned}$$

No caso em que $p = 0$, o resultado segue facilmente pois $x_4 = x_5 = 1$. Aplicando o algoritmo de localização para $\alpha = 1$ obtemos a configuração da Figura 5.19. Há três autovalores maiores do que 1 (que são maiores do que 2 também) e dois autovalores menores do que 1 (um deles é o zero). Desse modo, para $n \geq 6$,

$$S_3(T) = 2n - 2 - (n - 5) \cdot 1 - x_6 < n + 3 \leq n - 2 + 2 \cdot 3 - \frac{6}{n}.$$

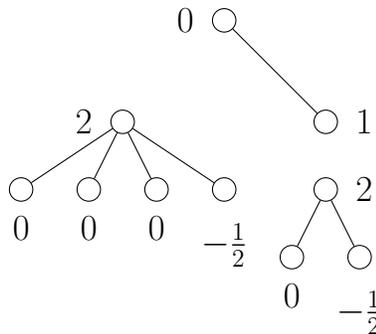


Figura 5.19: Localizando autovalores: passo final

Caso 3 ($r = 3$): Semelhante ao Caso 2, vamos investigar os autovalores utilizando o algoritmo de localização de autovalores laplacianos. Primeiramente escolhendo $\alpha = \frac{1}{n}$ obtemos $a(v_1), a(v_2), a(w) > 0$ e $a(u) > 0$ para as folhas. Para decidir o sinal de $a(w^*)$ e $a(v_0)$ calculamos o produto

$$n^5(n-1)^4 a(v_1)a(v_2)a(w)a(w^*)a(v_0).$$

Essa expressão é um polinômio multivariado com coeficientes negativos, assim apenas um entre $a(w^*)$ e $a(v_0)$ é negativo, o que nos leva a concluir que há apenas um autovalor menor do que $\frac{1}{n}$. Tomando agora $\alpha = \frac{2}{n}$, todas as folhas possuem $a(u) = \frac{n-2}{n} > 0$ e no máximo um entre $a(v_1), a(v_2), a(w)$ pode ser negativo (pelo mesmo argumento usado no Caso 2). Resta o sinal de $a(w^*)$ e $a(v_0)$, mas de qualquer forma, haverá no máximo três vértices com sinal negativo, do que deduzimos que $\mu_{n-3} > \frac{2}{n}$.

Para $\alpha = \frac{7}{5}$ obtemos os valores de $a(v)$ ilustrados na Figura 5.20 onde $a(w^*) = \frac{105t-62}{5(35t-4)} > 0$.

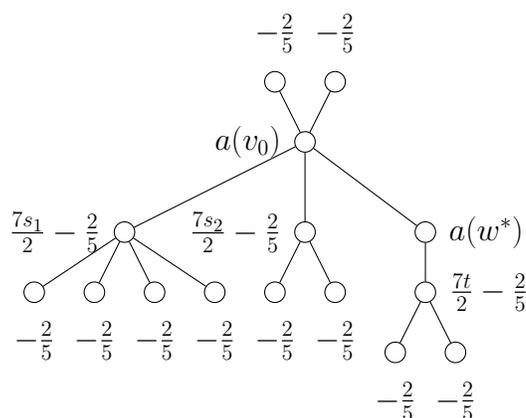


Figura 5.20: Localizando autovalores: passo final

Para o vértice central v_0 temos a expressão

$$\begin{aligned} & \frac{10}{7} (105\tau + 43) (35\varsigma_1 + 31) (35\varsigma_2 + 31) a(v_0) = \\ = & (643125 \rho \tau \varsigma_1 \varsigma_2 + 630875 \tau \varsigma_1 \varsigma_2 + 263375 \rho \varsigma_1 \varsigma_2 + 112525 \varsigma_1 \varsigma_2 + 569625 \rho \tau \varsigma_2 \\ & + 506275 \tau \varsigma_2 + 233275 \rho \varsigma_2 + 78165 \varsigma_2 + 569625 \rho \tau \varsigma_1 + 506275 \tau \varsigma_1 + 233275 \rho \varsigma_1 \\ & + 78165 \varsigma_1 + 504525 \rho \tau + 401915 \tau + 206615 \rho + 50189), \end{aligned}$$

onde $p = \rho + 1$, $s_i = \varsigma_i + 1$ e $t = \tau + 1$. Portanto $a(v_0) > 0$ o que nos dá cinco vértices com $a(v) > 0$, ou seja $\mu_5 > \frac{7}{5}$, para árvores com $p \geq 1$.

O espectro laplaciano de T contém o autovalor zero, $n - 9$ autovalores 1, três autovalores em $(0, 1)$, um em $(1, 2)$ e quatro (no mínimo) maiores do que a média (exatamente quatro maiores do que 2). Como $\sum_{i=1}^n \mu_i = 2n - 2$, temos

$$\begin{aligned} S_4(T) &= \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \mu_4 = 2n - 2 - (n - 9) \cdot 1 - \mu_5 - \mu_{n-3} - \mu_{n-2} - \mu_{n-1} \\ &< n + 7 - \frac{7}{5} - \frac{2}{n} - \frac{1}{n} - \frac{1}{n} \leq n + 6 - \frac{8}{n} \end{aligned}$$

para $n \geq 10$. Se $n = 9$, verificamos diretamente que a única árvore, com um pendente em cada ramo e na raiz central, satisfaz $S_4(T) < 14 < 15 - \frac{8}{9}$. Para $k = 5$ temos

$$\begin{aligned} S_5(T) &= \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \mu_4 + \mu_5 \\ &= 2n - 2 - (n - 9) \cdot 1 - \mu_{n-3} - \mu_{n-2} - \mu_{n-1} \\ &< n + 7 - \frac{4}{n} < n + 8 - \frac{10}{n}. \end{aligned}$$

Para finalizar, se $p = 0$, temos

$$\begin{aligned} S_4(T) &= \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \mu_4 = 2n - 2 - (n - 9) \cdot 1 - \mu_5 - \mu_{n-3} - \mu_{n-2} - \mu_{n-1} \\ &< n + 7 - 1 - 1 - \frac{2}{n} < n + 6 - \frac{8}{n} \end{aligned}$$

para $n \geq 8$, pois $\mu_5 = \mu_{n-3} = 1$ nesse caso.

Assim concluímos a prova do Teorema 5.5 para \mathfrak{F}_5 . □

5.3.3 Caso \mathfrak{F}_6

Vamos considerar as árvores $T \in \mathfrak{F}_6$ (com diâmetro seis) caracterizadas por possuírem um vértice central adjacente a $r_1 \geq 0$ ramos do tipo 1 com s_i folhas, $r_2 \geq 2$ ramos do tipo 2 com t_j folhas cada e p vértices pendentes. Na Figura 5.21 segue a forma geral de uma árvore dessa família. Seja $r = r_1 + r_2$ o número total de ramos que não são pendentes.

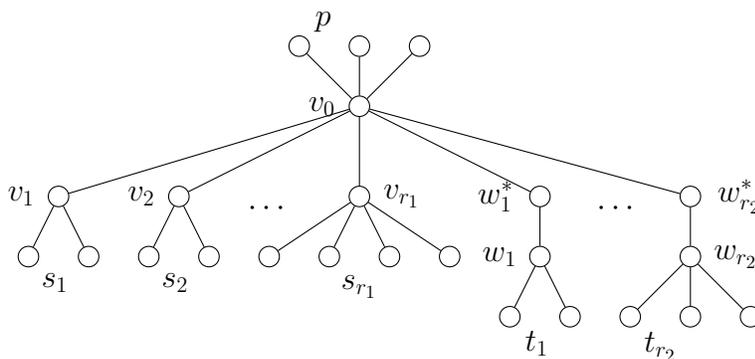


Figura 5.21: Árvore de \mathfrak{F}_6

Proposição 5.23. *As árvores de \mathfrak{F}_6 com r ramos satisfazem $r + 1 \leq \rho \leq r + 4$.*

Demonstração: Usando o algoritmo de localização para $\alpha = \bar{\delta}$, obtemos as relações (5.12), (5.13), (5.26) onde t_j é o número de folhas de w_j .

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, pois $a(v_i)$ e $a(w_j)$ são positivos para todo i e j . 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 $\rho = r$. Então todos $a(w_i^*)$ devem ser negativos. Vimos em (5.28) que $-\frac{1}{a(w_j^*)} \geq 2t_j - 1$

e sabemos 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, $\rho \geq r + 1$.

Analizando a expressão de $a(w_j^*)$ associada ao ramo do tipo 2 com t_j folhas, observamos que para este ser positivo, é necessário e suficiente que

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

Assim, temos

$$t_j \geq \frac{n^2}{4(n-1)} - \frac{2}{n} > \frac{n}{4} - \frac{1}{3}, \quad (5.32)$$

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 $\rho \geq r + 5$. 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 $\rho > r + 4$. \square

A estratégia aqui é usar a decomposição BT e obter uma cota para $S_k(T)$ através da relação do Lema 5.19. Precisamos demonstrar a desigualdade (5.2) para os possíveis valores de ρ para que o Teorema 5.5 valha para qualquer k .

$$\begin{aligned}
S_{r+\ell}(T) &\leq \delta + \sum_{i=1}^{r_1} \left(s_i + 2 - \frac{1}{s_i + 2} \right) + \sum_{j=1}^{r_2} \left(t_j + 2 + \frac{1}{4t_j} \right) + \sum_{j=1}^{\ell} \left(2 - \frac{1}{4t_{r_2-j+1}} \right) \\
&= \delta + \sum_{i=1}^{r_1} s_i + \sum_{j=1}^{r_2} t_j + 2r_1 + 2r_2 + 2\ell + \sum_{j=1}^{r_2-\ell} \frac{1}{4t_j} - \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2}. \quad (5.33)
\end{aligned}$$

Vamos considerar os casos $k = r + 1$ e $k \geq r + 2$ separadamente.

Primeiro, para $k = r + 1$ e tomando $s_1 \leq s_i$, temos

$$\begin{aligned}
S_{r+1}(T) &< \delta + \sum_{i=1}^{r_1} s_i + \sum_{i=1}^{r_2} t_j + 2r_1 + 2r_2 + 2 - \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2} + \sum_{j=1}^{r_2-1} \frac{1}{4t_j} \\
&\leq (n - 1 - r_2) + 2r + 2 - \frac{r_1}{s_1 + 2} - \sum_{j=1}^{r_2-1} \left(1 - \frac{1}{4t_j} \right) + r_2 - 1 \\
&\leq n - 2 + 2(r + 1) - \frac{r_1}{s_1 + 2} - (r_2 - 1) \frac{3}{4}.
\end{aligned}$$

Para completar, precisamos mostrar que

$$\frac{r_1}{s_1 + 2} + \frac{3r_2 - 3}{4} \geq \frac{2r + 2}{n}.$$

Se $r_1 = 0$, é fácil ver que, se $r_2 \geq 2$, a desigualdade é satisfeita para $n \geq 8 \geq \frac{8}{3} \frac{r_2+1}{r_2-1}$.

Há apenas uma árvore em \mathfrak{F}_6 com menos de oito vértices, a saber o caminho \mathcal{P}_7 , que satisfaz o Teorema 5.5. De fato, $\rho = 3$ para essa árvore e $S_3(\mathcal{P}_7) < 10$, que é menor do que a desigualdade dada em (5.2).

Se $r_1 \geq 1$, temos $n \geq 3r_2 + (s_1 + 1)r_1 + 1$. Com um pouco de manipulação algébrica podemos confirmar que

$$(3r_2 + (s_1 + 1)r_1 + 1)(4r_1 + (3r_2 - 3)(s_1 + 2)) \geq 8(r_1 + r_2 + 1)(s_1 + 2)$$

para $r_1 \geq 1$, $r_2 \geq 2$ and $s_1 \geq 1$. Portanto o resultado segue de

$$\begin{aligned}
n(4r_1 + (3r_2 - 3)(s_1 + 2)) &\geq 8(r_1 + r_2 + 1)(s_1 + 2) \\
\iff \frac{4r_1 + (3r_2 - 3)(s_1 + 2)}{4(s_1 + 2)} &\geq \frac{2(r_1 + r_2 + 1)}{n} \\
\iff \frac{r_1}{s_1 + 2} + \frac{3r_2 - 3}{4} &\geq \frac{2r + 2}{n}.
\end{aligned}$$

Seguimos para o caso $k = r + \ell > r + 1$. Da equação (5.33), para $\ell \leq r_2$, obtemos que

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

Além disso, se $r_2 < \ell$, e tomando a diferença $\ell^* = \ell - r_2$, podemos obter a cota superior dos ℓ^* autovalores que são menores do que 1 (e não mais o autovalor intermediário de Q_j)

$$S_{r+\ell}(T) \leq n - 1 + (2(r + \ell) - 1) - (2\ell - \ell^* - 1).$$

Entretanto note que

$$2\ell - \ell^* \geq \frac{3r_2}{4} + \frac{\ell}{4} = \ell - \frac{3\ell^*}{4},$$

pois trivialmente $\ell \geq \frac{\ell^*}{4}$. Dessa forma é suficiente mostrar que

$$\frac{3r_2}{4} + \frac{\ell}{4} - 1 + \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2} > \frac{2(r + \ell)}{n}, \quad (5.34)$$

que é equivalente a

$$n > \frac{8(r + \ell)}{3r_2 + \ell - 4 + \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2}} = 8 \left(1 + \frac{r_1 - 2r_2 + 4 - \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2}}{3r_2 + \ell - 4 + \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2}} \right).$$

Como $r_2 \geq 2$, temos

$$\frac{r_1 - 2r_2 + 4 - \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2}}{3r_2 + \ell - 4 + \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2}} \leq \frac{r_1 - \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2}}{4 + \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i + 2}}.$$

Em particular

$$8 \left(1 + \frac{r_1 - 2r_2 + 4 - \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i+2}}{3r_2 + \ell - 4 + \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i+2}} \right) \leq 8 + \frac{8r_1 - \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i+2}}{4 + \sum_{i=1}^{r_1} \frac{1}{s_i+2}} \leq 8 + 2r_1. \quad (5.35)$$

Essa última desigualdade deve ser substituída por desigualdade estrita a não ser que $r_1 = 0$. Como T contém r_1 ramos do tipo 1 (cada um com no mínimo dois vértices) e $r_2 \geq 2$ ramos do tipo 2 (cada um com no mínimo três vértices), podemos escrever $n \geq p+1+2r_1+3r_2 \geq 7+2r_1$, que, usando (5.35), verifica (5.34) para todos os casos exceto $T = \mathcal{P}_7$, que possui $r_2 = 2, r_1 = 0, p = 0, t_1 = t_2 = 1$. Entretanto, já sabemos que \mathcal{P}_7 satisfaz o Teorema 5.5. □

5.3.4 Expressões adicionais

O polinômio definido na equação (5.20) é tal que

$$\begin{aligned} \frac{-1}{2} n^3 (n-2)^3 a(v_1) a(v_2) f(\varrho+1, s+\beta+1, \beta+1, \varrho+2\beta+s+6) = & 2080 + 1792s + 4672\varrho \\ & + 3584\beta + 3336\varrho^2 + 8256\varrho\beta + 4128\varrho s + 2304\beta^2 + 2304\beta s + 1080s^2 + 2664\varrho^2\beta s \\ & + 3312\varrho\beta^2 s + 2024\varrho\beta s^2 + 5984\varrho\beta s + 1256\varrho^3\beta + 704\varrho^2 s^2 + 2392\varrho^2 s + 2664\varrho^2\beta^2 \\ & + 4784\varrho^2\beta + 628\varrho^3 s + 460\varrho s^3 + 1736\varrho s^2 + 2208\beta^3\varrho + 5984\beta^2\varrho + 128\beta^3 s + 680\beta^2 s^2 \\ & + 1392\beta s^2 + 8\varrho^5\beta + 28\varrho^4\beta^2 + 160\varrho^4\beta + 80\varrho^4 s + 116\varrho^3 s^2 + 108\varrho^2 s^3 + 56\varrho^3\beta^3 \\ & + 456\varrho^3\beta^2 + 4\varrho^5 s + 7\varrho^4 s^2 + 234\varrho^4 + 1192\varrho^3 + 150s^4 + 536s^3 + \varrho^6 + 24\varrho^5 + s^6 \\ & + 20s^5 + 28\varrho^4\beta s + 84\varrho^3\beta^2 s + 44\varrho^3\beta s^2 + 456\varrho^3\beta s + 108\varrho^2\beta^2 s^2 + 44\varrho^2\beta s^3 \\ & + 552\varrho^2\beta s^2 + 76\varrho\beta^2 s^3 + 28\varrho\beta s^4 + 376\varrho\beta s^3 + 128\varrho^2\beta^3 s + 80\beta^4\varrho s + 104\beta^3\varrho s^2 \\ & + 792\beta^2\varrho s^2 + 1008\varrho^2\beta^2 s + 832\beta^3\varrho s + 8\varrho^3 s^3 + 7\varrho^2 s^4 + 4\varrho s^5 + 68\varrho s^4 + 64\beta^4\varrho^2 \\ & + 672\beta^3\varrho^2 + 16\beta^4 s^2 + 32\beta^3 s^3 + 160\beta^3 s^2 + 24\beta^2 s^4 + 240\beta^2 s^3 + 8\beta s^5 + 120\beta s^4 \\ & + 64\beta^4 + 640\beta^3 + 32\beta^5\varrho + 416\beta^4\varrho + 960\beta^2 s + 616\beta s^3. \end{aligned} \quad (5.36)$$

O polinômio definido na equação (5.31) é dado por

$$\begin{aligned}
& n^3(n-1)^3 a(v)a(w)a(v')a(v_0) = \\
& - (t^7 + 4st^6 + 5pt^6 + 20t^6 + 6s^2t^5 + 18pst^5 + 67st^5 + 11p^2t^5 + 87pt^5 + 172t^5 \\
& + 5s^3t^4 + 28ps^2t^4 + 88s^2t^4 + 38p^2st^4 + 273pst^4 + 487st^4 + 15p^3t^4 + 170p^2t^4 \\
& + 651pt^4 + 839t^4 + 5s^4t^3 + 32ps^3t^3 + 82s^3t^3 + 64p^2s^2t^3 + 403ps^2t^3 + 601s^2t^3 \\
& + 52p^3st^3 + 531p^2st^3 + 1809pst^3 + 2049st^3 + 15p^4t^3 + 210p^3t^3 + 1128p^2t^3 + 2753pt^3 \\
& + 2566t^3 + 6s^5t^2 + 33ps^4t^2 + 88s^4t^2 + 74p^2s^3t^2 + 441ps^3t^2 + 601s^3t^2 + 84p^3s^2t^2 \\
& + 798p^2s^2t^2 + 2460ps^2t^2 + 2420s^2t^2 + 48p^4st^2 + 625p^3st^2 + 3057p^2st^2 + 6653pst^2 \\
& + 5418st^2 + 11p^5t^2 + 180p^4t^2 + 1198p^3t^2 + 4072p^2t^2 + 7081pt^2 + 5034t^2 + 4s^6t \\
& + 22ps^5t + 67s^5t + 53p^2s^4t + 330ps^4t + 487s^4t + 72p^3s^3t + 683p^2s^3t + 2097ps^3t \\
& + 2049s^3t + 58p^4s^2t + 739p^3s^2t + 3489p^2s^2t + 7197ps^2t + 5418s^2t + 26p^5st \\
& + 414p^4st + 2635p^3st + 8389p^2st + 13354pst + 8484st + 5p^6t + 95p^5t + 756p^4t \\
& + 3241p^3t + 7928p^2t + 10524pt + 5931t + s^7 + 6ps^6 + 20s^6 + 16p^2s^5 + 106ps^5 + 172s^5 \\
& + 25p^3s^4 + 246p^2s^4 + 795ps^4 + 839s^4 + 25p^4s^3 + 324p^3s^3 + 1560p^2s^3 + 3297ps^3 \\
& + 2566s^3 + 16p^5s^2 + 256p^4s^2 + 1630p^3s^2 + 5160p^2s^2 + 8105ps^2 + 5034s^2 + 6p^6s \\
& + 114p^5s + 900p^4s + 3785p^3s + 8952p^2s + 11292ps + 5931s + p^7 + 22p^6 + 207p^5 \\
& + 1083p^4 + 3413p^3 + 6498p^2 + 6939p + 3213).
\end{aligned}$$

(5.37)

6 CONCLUSÃO E OUTROS PROBLEMAS

O algoritmo de decomposição apresentado nesse texto unifica a técnica e resultados de diversos autores sobre decomposição e expressão simplificada do espectro de certos grafos. Este método pode ser uma poderosa ferramenta e de grande ajuda para encontrar propriedades dos espectros relacionados a algumas famílias de grafos que não possuem expressões analíticas.

Os Algoritmos 1 e 2 estão baseados na existência de conjuntos simétricos e quase-simétricos no grafo. Diferentes formas de simetria, como as que ocorrem em produtos de grafos, podem originar novas decomposições espectrais e novos algoritmos.

A energia laplaciana ainda não é totalmente compreendida do ponto de vista de ordenamento. Fomos capazes de determinar as árvores com os maiores valores desse parâmetro até uma certa posição, mas ainda não se conhece o que ocorre na outra extremidade. Conjectura-se que o caminho seja a árvore com menor energia laplaciana, mas não há um candidato determinado para ocupar a segunda posição do extremo inferior.

Conseguimos encontrar famílias com $\sqrt{\frac{n}{2}}$ grafos unicíclicos com a mesma energia laplaciana, para quantidade par de vértices. Contudo, não se conhece um método para criar, ou até mesmo a existência, de famílias de unicíclicos com quantidade ímpar de vértices, nem de árvores com mais de 20 vértices.

Os resultados apresentados nesse trabalho deram origem a dois artigos já publicados ([15] e [16]) e um terceiro em preparação relacionado ao Capítulo 3.

6.1 Resultados obtidos em outros problemas matriciais

Os resultados dessa seção foram obtidos durante o período em que o autor esteve na University of Wisconsin - Madison, como parte de um estágio de doutorado no exterior, sob orientação do prof. Dr. Richard Brualdi. O objeto principal de estudo são as matrizes-(0,1), isto é, matrizes quadradas cujas entradas admitem somente valores 0 ou 1. Aqui, faremos um breve relato dos resultados apresentados em [6, 7, 8, 9, 10].

6.1.1 Trace index de uma matriz-(0,1)

Dada uma matriz-(0,1) A , quadrada de ordem n , definimos o conjunto *trace index* de A por

$$Tr(A) = \{\text{tr}(PA) : P \text{ é uma matriz de permutação}\},$$

onde $\text{tr}(X)$ denota o traço de X . O conjunto $Tr(A)$ consiste em todas as possíveis somas quando são tomados um elemento de cada linha e coluna da matriz A , ou seja, $Tr(A) \subseteq \{0, 1, 2, \dots, n\}$. Estamos interessados em saber quais conjuntos podem ser *trace index* de matrizes-(0,1). Por exemplo, considerando o conjunto $F = \{0, 3\}$, não existe nenhuma matriz de ordem 3 ou superior cujo *trace index* seja F . Considerando $A^c = J_n - A$ a matriz complementar de A , onde J_n é a matriz com todas as entradas iguais a 1, temos que $Tr(A)$ é *trace index* se e somente se o conjunto $Tr(A^c) = \{n - k : k \in Tr(A)\}$ também é *trace index*.

Caso a matriz A ou A^c não seja soma direta de matrizes J_{n_i} , então podemos garantir que o trace index de A é um conjunto de elementos consecutivos.

Teorema 6.1 ([9]). *Seja $n \geq 3$ um inteiro e seja A uma matriz-(0,1) de ordem n . O conjunto $Tr(A)$ é um dos seguintes conjuntos:*

- (i) $\{c, c+1, c+2, \dots, n\} \setminus \{n-1\}$, se e somente se, além de permutação de linhas e colunas, $A = \bigoplus_{i=1}^k J_{n_i}$ onde $k \geq 3$, $n_1 \geq n_2 \geq \dots \geq n_k \geq 1$, e $c = \max\{0, 2n_1 - n\}$;
- (ii) $\{0, 1, 2, \dots, d\} \setminus \{1\}$, se e somente se, além de permutação de linhas e colunas, $A = \left(\bigoplus_{i=1}^k J_{n_i}\right)^c$ onde $k \geq 3$, $n_1 \geq n_2 \geq \dots \geq n_k \geq 1$, e $d = \min\{n, 2(n - n_1)\}$;
- (iii) $\{c, c+2, \dots, c+2k\}$ onde $c \geq 0$ e $c+2k \leq n$, se e somente se, além de permutação de linhas e colunas, $A = J_{k, n-(c+k)} \oplus J_{n-k, c+k}$ ou $A = J_{c+k, n-k} \oplus J_{n-(c+k), k}$;
- (iv) $\{c, c+1, c+2, \dots, c+d\}$ onde $c, d \geq 0$ e $c+d \leq n$, se e somente se, A não é uma matriz descrita em (i), (ii), e (iii).

No caso particular de haver $1 \leq p \leq n$ elementos iguais a 1 em cada linha e coluna de A , temos que $Tr(A) = \{0, 1, 2, \dots, n\}$ se e somente se A ou A^c não é uma soma direta de matrizes J_p .

Exemplo 6.2. A matriz A a seguir possui dois elementos iguais a 1 em cada linha e coluna.

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

Como não é possível transformar A em uma soma direta de J_2 (ou o complementar) por permutação de linhas e colunas, temos que o trace index de A é igual a $\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. \triangle

6.1.2 Hankel e Toeplitz X-rays de permutações

Dada uma matriz de permutação P de ordem n , estamos interessados nos vetores com $2n - 1$ posições $h(P)$ e $t(P)$, onde $h_k = \sum_{i+j=k+1} p_{ij}$ e $t_k = \sum_{i-j=n-k} p_{ij}$. Em outras palavras, h_k é a soma dos elementos de P da k -ésima diagonal de P no sentido nordeste-sudoeste, e t_k é a soma dos elementos de P da k -ésima diagonal de P no sentido noroeste-sudeste. Por exemplo, para a matrix A a seguir, temos $h(A) = (1, 0, 0, 2, 0)$ e $t(A) = (0, 1, 1, 1, 0)$.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & & \\ & & 1 \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

Em [7], investigamos algumas propriedades e conexões com outros temas que os X-rays podem ter, como com sequências de Skolen, o problema das n rainhas em um tabuleiro, vetor de pontuação de uma matriz torneio, e transversal em uma matriz associada. Também investigamos quando pode existir matrizes de permutações tais que seus X-rays sejam iguais, palindrômicos, skew-palindrômicos ou binários.

Exemplo 6.3. A matriz de permutação B a seguir satisfaz $h(B) = t(B) = (0, 1, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 0)$.

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

△

Teorema 6.4 ([7]). *Se $n \geq 4$, então existe uma matriz de permutação de ordem n cujo Hankel X-Ray seja igual ao Toeplitz X-Ray se e somente se $n \not\equiv 2 \pmod{4}$.*

Para $n = 2, 3$ não existe tal permutação, e para $n = 1$, a matriz [1] satisfaz a condição trivialmente.

6.1.3 Matrizes torneio

Loopy, Hankel e skew-Hankel

Investigamos as matrizes do tipo torneio, com vetor de pontuação especificado, com propriedades especiais adicionais, como permissão de laços, simetria em relação a anti-diagonal ou anti-simetria em relação a anti-diagonal.

Uma matriz do tipo torneio T é uma matriz-(0,1) que satisfaz $T + T^t = J_n - I_n$, onde J_n é a matriz com todas as entradas iguais a 1. Este tipo de matriz caracteriza-se por descrever as vitórias de um campeonato entre n times, onde cada um joga contra todos os outros times exatamente uma vez. O vetor de pontuação

R da matriz T é o vetor cuja i -ésima entrada é igual ao número de vitórias do time i , ou seja, a soma dos elementos da i -ésima linha de T .

Para os três casos estudados em [8], encontramos condições necessárias e suficientes para a existência, algoritmos para a construção e movimentos simples que permitem ir de uma matriz para outra, sempre se mantendo dentro do conjunto de torneios com a mesma propriedade.

No caso de uma matriz torneio com a propriedade de ser Hankel simétrica, isto é, uma matriz $(0,1)$ T satisfazendo $t_{i,j} + t_{j,i} = 1$ se $i \neq j$, $t_{i,i} = 0$ e $t_{i,j} = t_{n+1-j,n+1-i}$, temos o seguinte resultado.

Teorema 6.5 ([8]). *Seja $R = (r_1, r_2, \dots, r_n)$ um vetor com inteiros não negativos $r_1 \leq r_2 \leq \dots \leq r_n$. Então existe uma matriz torneio Hankel simétrica com vetor de pontuação R se e somente se*

$$r_i + r_{n+1-i} = n - 1, \quad (i = 1, 2, \dots, n) \text{ e}$$

$$\sum_{i=1}^k r_i \geq \binom{k}{2}, \quad (k = 1, 2, \dots, n), \text{ com igualdade se } k = n.$$

Exemplo 6.6. Para o vetor de pontuação $R = (1, 2, 2, 3, 4, 4, 5)$, temos a garantia de que existe um torneio Hankel simétrico.

$$T = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{array} \right]$$

△

Ordem Bruhat

Em [6], extendemos o conceito de ordem Bruhat de matrizes de permutações para matrizes torneio. Das duas possíveis ordens, é possível verificar que uma é um refinamento da outra.

Seja $T = [t_{ij}]$ uma matriz torneio de ordem n . Definimos a matriz triangular superior com as somas parciais principais de T como

$$\Sigma^\circ(T) = [\sigma_{ij}] \text{ onde } \sigma_{ij} = \sigma_{ij}(T) = \sum_{1 \leq k \leq i, 1 \leq l \leq j} t_{kl}, \quad (1 \leq i \leq j \leq n).$$

Note que $\sigma_{kk} = \binom{k}{2}$ para qualquer $1 \leq k \leq n$. Se T e T' são matrizes torneio com o mesmo vetor de pontuação R , então dizemos que T precede T' na ordem Bruhat, ($T \preceq_B T'$), se

$$\Sigma^\circ(T) \geq \Sigma^\circ(T') \quad (\text{para cada entrada}).$$

Exemplo 6.7. Seja $R = (1, 1, 2, 3, 4, 4)$ e considere as matrizes T e T' a seguir, ambas com vetor de pontuação R . Como $T \neq T'$, temos também que $\Sigma^\circ(T) \neq \Sigma^\circ(T')$.

$$T = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad T' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\Sigma^\circ(T) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 3 & 4 & 4 & 4 & 4 & 4 \\ 6 & 7 & 7 & 7 & 7 & 7 \\ 10 & 11 & 11 & 11 & 11 & 11 \\ 15 & 15 & 15 & 15 & 15 & 15 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \Sigma^\circ(T') = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 2 \\ 3 & 3 & 3 & 3 & 3 & 4 \\ 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 7 \\ 10 & 10 & 10 & 10 & 10 & 11 \\ 15 & 15 & 15 & 15 & 15 & 15 \end{bmatrix}.$$

Como $\Sigma^\circ(T) \geq \Sigma^\circ(T')$, concluímos que $T \preceq_B T'$.

△

Um Δ -*interchange* é uma permuta de valores em uma submatriz principal de ordem 3 como ilustrado:

$$C = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = C',$$

e um dos dois tipos de *double-interchange* que permuta valores em uma submatriz principal de ordem 4 é:

$$D_1 = \left[\begin{array}{cc|cc} 0 & a & 1 & 0 \\ 1-a & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 1 & 0 & b \\ 1 & 0 & 1-b & 0 \end{array} \right] \leftrightarrow \left[\begin{array}{cc|cc} 0 & a & 0 & 1 \\ 1-a & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & b \\ 0 & 1 & 1-b & 0 \end{array} \right] = D'_1.$$

Chamamos a permuta $C \rightarrow C'$ de Δ -*interchange do tipo 1* e $D_1 \rightarrow D'_1$ de *double-interchange do tipo 1*. Definimos a ordem Bruhat secundária por $T \preceq_{B^*} T'$ se existir uma sequência de Δ -interchanges do tipo 1 ou *double-interchanges* do tipo 1 que transformam T em T' . Temos que, se $T \preceq_{B^*} T'$, então $T \preceq_B T'$. Mas a recíproca não é verdadeira.

Para a família especial de vetores de pontuação $\hat{R}_n = (1, 1, 2, 3, \dots, n-3, n-2, n-2)$, as duas ordens Bruhat são equivalentes ao conjunto parcialmente ordenado de todos os subconjuntos de um conjunto de n elementos.

Proposição 6.8 ([6]). *Sejam T e T' matrizes torneio com o mesmo vetor de pontuação. Sejam X^t e X^h a transposição da matriz X em respeito a diagonal principal e a anti-diagonal, respectivamente. Temos que*

1. $(T')^t \preceq_B T^t \Leftrightarrow T \preceq_B T' \Leftrightarrow T^h \preceq_B (T')^h$;
2. $(T')^t \preceq_{B^*} T^t \Leftrightarrow T \preceq_{B^*} T' \Leftrightarrow T^h \preceq_{B^*} (T')^h$.

Torneio associado a multigrafos

Um multigrafo é um grafo onde são permitidas arestas múltiplas entre um par de vértices. No artigo [10], estamos em busca de uma matriz torneio especial. Em vez de todos os times jogarem uns contra os outros exatamente uma vez, agora possuímos quantidades de jogos diferentes. Dada uma matriz simétrica C , estamos interessados em formar um C -torneio de tal forma que $T + T^t = C$ sem restrição de que as entradas de T sejam apenas 0 e 1.

Condições necessárias e suficientes já foram encontradas para o problema por Hakimi em 1965. Nosso objetivo é apresentar uma demonstração mais simples e um algoritmo que não necessite de backtracking.

Teorema 6.9 ([10]). *Sejam $C = [c_{ij}]$ uma matriz simétrica com diagonal principal de zeros e $R = (r_1, r_2, \dots, r_n)$ um vetor, ambos de entradas inteiras não negativas. Sejam $r(J) = \sum_{i \in J} r_i$ e $c(J) = \sum_{i, j \in J, i < j} c_{ij}$, para $J \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$. Temos que R é vetor de pontuação de um C -torneio se e somente se*

$$r(J) \geq c(J), \quad (J \subseteq \{1, 2, \dots, n\}), \quad \text{com igualdade se } J = \{1, 2, \dots, n\}.$$

O teorema afirma que a condição necessária e suficiente é que os pontos dos times de J somados deve ser maior ou igual ao número de jogos disputados pelos times de J entre si, para qualquer conjunto J de jogadores. O C -torneio obtido será um dígrafo que representa uma escolha para orientação das arestas do multigrafo cuja matriz de adjacência é C .

Exemplo 6.10. Seja $R = (5, 4, 2, 4, 3)$ e seja C a matriz abaixo. O vetor R satisfaz as condições necessárias para que exista um C -torneio. Por exemplo, tomando o conjunto $J = \{2, 3, 5\}$, temos $r(J) = 4 + 2 + 3 = 9 \geq 5 = 1 + 4 + 0 = c(J)$. Abaixo segue também o C -torneio T construído pelo algoritmo proposto no artigo.

$$C = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 3 & 1 & 2 \\ 2 & 0 & 1 & 1 & 4 \\ 3 & 1 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 2 & 0 & 2 \\ 2 & 4 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix} \quad T = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

△

Índice Remissivo

- árvore, 12
 - k -ária, 74
 - \mathbf{v} -ária perfeita, 75
 - Bethe generalizada, 75, 122
 - binária, 82
 - caminho, 12
 - conjunto \mathfrak{F} , 122, 144
 - diâmetro quatro $F(n, k)$, 137
 - diâmetro três, 119
 - estrela, 12
 - folhas, 12
 - starlike, 13, 101
 - ternária, 83
- algoritmo
 - decomposição de quase-simetria, 58
 - decomposição de simetria, 40
 - localização de autovalores, 26
- automorfismo, 35
 - Problema, 44
- autovalores laplacianos
 - soma dos maiores, 118, 124
- comprimento, 10
- conjuntos
 - quase-simétricos, 56
 - simétricos, 35
- decomposição BT, 145
- energia laplaciana, 23
 - ordenamento de árvores, 133
- entrelaçamento, 22
- família $\mathcal{S}_{n,k}$, 101
- família $\mathcal{S}_{n,k}^*$, 108
- família $\mathfrak{W}_{n,c,k}$, 93
- grafo, 9
 - M -energia, 23
 - autovalores, 18
 - ciclo, 10
 - clique, coclique, 11
 - completo, 10
 - conexo, 11
 - diâmetro, 11
 - espectro, 18
 - multi-leque, 87
 - polinômio característico, 17
 - simples, 9
 - threshold, 65
 - partição em blocos, 66
 - sequência de quantidades, 66
 - traço, 21
 - união, 12
 - unicíclico, 14, 103
- grafo da matriz, 33
- GWG, 31
 - aresta interna, direta, cruzada, 36

- espectro, 34
 - matriz, 32
 - matriz relação β , 45
 - matriz relação C , 45
 - peso da aresta, 31
 - peso do vértice, 31
- matriz
- adjacência, 15
 - distância, 17
 - laplaciana, 15
 - laplaciana normalizada, 17
 - laplaciana perturbada, 16
 - laplaciana sem sinal, 16
- operação \mathcal{E}_z , 94
- rótulo, 10
- soma de autovalores, 126
- subgrafo, 11
- união, 12
- disjunta, 19
- vértices
- adjacentes, vizinhos, 9
 - distância, 11
 - grau, 9
 - simétricos, 62

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] ANDREWS, G. E. *The theory of Partitions*. Cambridge University Press, 1976.
- [3] BAPAT, R. B., KIRKLAND, S. J., AND PATI, S. The perturbed Laplacian matrix of a graph. *Linear and Multilinear Algebra* 49, 3 (2001), 219–242.
- [4] BRADLEY, G. L. *A primer of Linear Algebra*. Prentice-Hall, 1975.
- [5] BROUWER, A. E., AND HAEMERS, W. H. *Spectra of graphs*. Springer, 2012.
- [6] BRUALDI, R., AND FRITSCHER, E. Bruhat order of tournaments. *Linear Algebra and its Applications* 458 (2014), 261–279.
- [7] BRUALDI, R., AND FRITSCHER, E. Hankel and Toeplitz X-rays of permutations. *Linear Algebra and its Applications* 449 (2014), 350–380.
- [8] BRUALDI, R., AND FRITSCHER, E. Loopy, Hankel and combinatorially skew-Hankel tournaments. *Discrete Applied Mathematics* (2014), Submitted.
- [9] BRUALDI, R., AND FRITSCHER, E. Trace index of a $(0,1)$ -matrix. *Linear and Multilinear Algebra* DOI:10.1080/03081087.2014.922964 (2014).
- [10] BRUALDI, R., AND FRITSCHER, E. Tournaments associated with multi-graphs and a theorem of Hakimi. *Discrete Mathematics* 338 (2015), 229–235.

- [11] CANTONI, A., AND BUTLER, P. Eigenvalues and eigenvectors of symmetric centrosymmetric matrices. *Linear Algebra and its Applications* 13, 3 (1976), 275–288.
- [12] CVETKOVIC, D. M., DOOB, M., AND SACHS, H. *Spectra of graphs - Theory and applications*. VEB Deutscher Verlag der Wiss, Berlin / Academic Press, New York, 1979.
- [13] DU, Z., AND ZHOU, B. Upper bounds for the sum of Laplacian eigenvalues of graphs. *Linear Algebra and its Applications* 436 (2012), 3672–3683.
- [14] 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.
- [15] FRITSCHER, E., HOPPEN, C., ROCHA, I., AND TREVISAN, V. Characterizing trees with large Laplacian energy. *Linear Algebra and its Applications* 442 (2014), 20–49.
- [16] FRITSCHER, E., HOPPEN, C., AND TREVISAN, V. Unicyclic graphs with equal Laplacian energy. *Linear and Multilinear Algebra* DOI:10.1080/03081087.2013.766395 (2013), 1–15.
- [17] GUTMAN, I. Acyclic systems with extremal Hückel π -electron energy. *Theoretica Chimica Acta* 45 (1977), 79–87.
- [18] GUTMAN, I., AND ZHOU, B. Laplacian energy of a graph. *Linear Algebra and its Applications* 414 (2006), 29–37.
- [19] 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.
- [20] JACOBS, D. P., AND TREVISAN, V. Locating the eigenvalues of trees. *Linear Algebra and its Applications* 434 (2011), 81–88.

- [21] LIMA, E. L. *Álgebra Linear*, 7 ed. Coleção Matemática Universitária. IMPA, 2006.
- [22] LIU, X., ZHANG, Y., AND GUI, X. The multi-fan graphs are determined by their Laplacian spectra. *Discrete Mathematics* 308, 18 (2008), 4267–4271.
- [23] LUBIW, A. Some NP-complete problems similar to graph isomorphism. *SIAM Journal on Computing* 10, 1 (1981), 11–21.
- [24] MAHADEV, N., AND PELED, U. *Threshold Graphs and Related Topics*, 1st ed. 1995.
- [25] NIKIFOROV, V. The energy of graphs and matrices. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 326 (2007), 1472–1475.
- [26] NOURI, M. Bisymmetric, persymmetric matrices and its applications in eigen-decomposition of adjacency and Laplacian matrices. *World Academy of Science, Engineering and Technology* 67, 1 (2012), 1155 – 1158.
- [27] 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.
- [28] ROJO, O. The spectrum of the Laplacian matrix of a balanced binary tree. *Linear Algebra and its Applications* 349, 1-3 (July 2002), 203–219.
- [29] ROJO, O. On the spectra of certain rooted trees. *Linear Algebra and its Applications* 414, 1 (April 2006), 218–243.
- [30] ROJO, O. Spectra of weighted generalized Bethe trees joined at the root. *Linear Algebra and its Applications* 428 (2008), 2961–2979.

- [31] ROJO, O., AND MEDINA, L. Spectra of weighted compound graphs of generalized Bethe trees. *Electronic Journal of Linear Algebra* 18 (2009), 30–57.
- [32] ROJO, O., AND ROBBIANO, M. An explicit formula for eigenvalues of Bethe trees and upper bounds on the largest eigenvalue of any tree. *Linear Algebra and its Applications* 427, 1 (November 2007), 138–150.
- [33] SCIRIHA, I., AND FARRUGIA, S. On the spectrum of threshold graphs. *ISRN Discrete Mathematics 2011* (November 2011).
- [34] STEVANOVIĆ, D. Large sets of noncospectral graphs with equal Laplacian energy. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 61, 2 (2009), 463–470.
- [35] STEVANOVIĆ, D., BRANKOV, V., CVETKOVIĆ, D., AND SIMIC, S. New-Graph. *Freeware* (2005). <http://www.mi.sanu.ac.rs/newgraph/>.
- [36] TREVISAN, V., CARVALHO, J. B., DEL-VECCHIO, R., AND VINAGRE, C. Laplacian energy of diameter 3 trees. *Applied Mathematics Letters* 24 (2011), 918–923.
- [37] WIELANDT, H. An extremum property of sums of eigenvalues. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 6 (1955), 106–110.
- [38] YUEH, W. C. Eigenvalues of several tridiagonal matrices. *Applied Mathematics E-notes* 5 (2005), 66–74.