

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

Espectro de Grafos

por

Catia Maria dos Santos Machado

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

Prof. Vilmar Trevisan
Orientador

Porto Alegre, dezembro de 1999.

Aos meus filhos

Perdoem a cara amarrada, perdoem a falta de abraço, perdoem a falta de espaço, perdoem por tantos perigos, perdoem a falta de abrigo, perdoem a falta de ar, perdoem a falta de escolha. Os dias eram assim.... E quando brotarem as flores, e quando crescerem as matas, quando colherem os frutos, digam o gosto para mim.

Ivan Lins

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, Prof. Vilmar Trevisan, pelas lições de saber, pela orientação constante, pela dedicação, paciência e carinho no decorrer do trabalho e também pelas sugestões, comentários e críticas oportunizando novos conhecimentos.

Aos professores Sebastião Gomes e Maria Cristina Varialle por permitirem que esse Mestrado acontecesse.

Aos meus colegas de curso, pelo privilégio de ter repartido experiências.

Meus agradecimentos são também extensivos às seguintes pessoas por terem colaborado para que este trabalho fosse desenvolvido: Carlos S. Scott Hood, Dinei Gonçalves, José Fanaya, Leda Acosta, Maria Alba Machado e Rosemberg da Silva.

Aos meus amigos do Departamento de Matemática da FURG.

A minha mãe, minha tia Sila, e em especial a Eliane Bernardes.

A minha irmã Marialva e Luiz Weber pela permanência em Porto Alegre.

Gostaria de agradecer a minha família, ao Gilnei pela participação em tantos momentos.

Agradecer também a Adriana, Denise, Margareth, Sonia, Tales e Victor por me fazerem lembrar que vencemos porque não estamos sós, nossa vitória cabe também a outros.

Finalmente, gostaria de agradecer a banca que foi composta pelos seguintes professores: Dr. José Plínio de Oliveira Santos, Dra. Liliane Basso Barichello e Dra. Maria Paula G. Fachin.

RESUMO

Neste trabalho estudamos o espectro de grafos, que é o conjunto de autovalores da sua matriz de adjacência. Apresentamos uma teoria baseada na função geradora do número de passeios de um grafo para obter o polinômio característico de algumas classes de grafos. Também desenvolvemos um novo método para o cálculo do polinômio característico de árvores que utiliza um algoritmo geométrico -- também por nós apresentado-- para o determinante de matrizes da forma $A+\alpha I$, onde A é a matriz de adjacências e α é um número real arbitrário. O custo computacional desse algoritmo é $O(n^2)$, que é menor do que os algoritmos previamente conhecidos. Finalmente apresentamos alguns resultados que visam determinar a estrutura de um grafo a partir de suas propriedades espectrais.

ABSTRACT

In this dissertation, we study the spectra of graphs, which is the set of the eigenvalues of its adjacency matrix. We present a theory, based on the generating function of the number of walks, in order to obtain the characteristic polynomial of certain classes of graphs. We also develop a new method to compute the characteristic polynomial of a tree's adjacency matrix that hinges on a geometric algorithm --- also introduced in this work --- to obtain the determinant of matrices $A+\alpha I$, where A is the adjacency matrix and α an arbitrary real number. The computational cost of this algorithm is $O(n^2)$, which is lower than any previously known algorithm. Finally, we present results that try to determine the structure of a graph from its spectral properties.

SUMÁRIO

RESUMO	iv
ABSTRACT	v
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Preliminares	3
1.2 Vários Espectros de Grafos	8
2 OPERAÇÕES COM GRAFOS	11
2.1 Função Geradora	11
2.1.1 Função Geradora para Grafos Regulares, Completos e Multipartidos Completos.....	16
2.2 Polinômio Característico para a Soma Direta e Produto Completo de Grafos	18
3 POLINÔMIO CARACTERÍSTICO DE CERTAS CLASSES DE GRAFOS	22
4 POLINÔMIO CARACTERÍSTICO DO GRAFO DAS LINHAS	29
4.1 Determinação do Polinômio Característico do Grafo das Linhas	29
4.2 Determinação do Polinômio Característico de outros Grafos Similares ...	33
4.2.1 Determinação do polinômio característico para o grafo SG.....	33
4.2.2 Determinação do polinômio característico para o grafo RG.....	34
4.2.3 Determinação do polinômio característico para o grafo QG.....	35
4.2.4 Determinação do polinômio característico para o grafo TG.....	38
5 POLINÔMIO CARACTERÍSTICO DE ÁRVORES	40
5.1 Métodos conhecidos para obtenção do Polinômio Característico de Árvores	40
5.2 Um Método Geométrico	43

5.3 Um novo Método para o Cálculo do Polinômio Característico de Árvores 52

6 PROPRIEDADES TOPOLÓGICAS DO GRAFO A PARTIR DE SEU ESPECTRO.....	62
6.1 Propriedades Espectrais de Certas Classes de Grafos.....	63
6.2 Caracterização de um Grafo pelo seu Espectro.....	65
7 CONCLUSÃO.....	72
8 BIBLIOGRAFIA.....	74

1 INTRODUÇÃO

Muitos matemáticos trabalham com teoria de grafos e combinatória. Físicos, químicos e engenheiros usam teoria de grafos em seus trabalhos, e até mesmo em outras áreas. O estudo de técnicas eficientes também são desenvolvidas para processar em computadores problemas que envolvam grafos.

Em química quântica a estrutura de certos hidrocarbonos não saturados são representados por grafos. Os níveis de energia dos elétrons em tal molécula são, na verdade, os autovalores do grafo correspondente. A estabilidade da molécula, assim como outros fatores quimicamente relevantes estão relacionados com espectro de grafos e com os autovetores correspondentes.

Existe também uma razão computacional para estudarmos o espectro de grafos, pois o espectro é uma seqüência finita de invariantes numéricas. Sob a hipótese de que a informação em que estamos interessados (ou parte essencial dela) está contida no espectro, podemos usar o espectro ao invés dos grafos. Uma seqüência finita de números pode mais facilmente ser colocada em um computador. Isto é razoável, somente se tivermos métodos eficientes para uma grande classe de grafos onde podemos obter seus espectros e, reciprocamente, para decompor um espectro dado, isto é, para recuperar as propriedades do grafo a partir de um espectro que foi obtido como um resultado de cálculos algébricos computacionais.

Esses fatos, juntamente com a necessidade geral na teoria de grafos de procurar e investigar invariantes de grafos, estimulam a investigação das relações entre as propriedades espectrais e estruturais de um grafo.

Nosso interesse no estudo do espectro de grafos tem como principal objetivo a obtenção do polinômio característico para uma classe especial de grafos denominada árvores. Acreditamos que a maior contribuição deste trabalho é a construção de um novo algoritmo para a determinação do polinômio característico de árvores, cujo custo computacional é o melhor até agora obtido. O procedimento utilizado para o cálculo desse polinômio característico possui dois estágios básicos. No primeiro estágio, desenvolvemos um algoritmo da $O(n)$ que opera diretamente na árvore calculando $\det(A+\alpha I)$ para qualquer

escalar α . No segundo estágio fazemos a interpolação dos valores $(-\alpha, p(-\alpha))$, para a obtenção do polinômio característico.

Uma outra contribuição indireta deste trabalho está no fato de que vários resultados obtidos nos recentes artigos [10],[14] e [15] estão baseados no procedimento que calcula $\det(A+\alpha I)$. O algoritmo sugerido neste trabalho facilita significativamente a justificativa de tais resultados, simplificando a sua demonstração. Em particular a própria justificativa do algoritmo de Jacobs e Trevisan [15] que determina o polinômio característico de árvores com tempo de execução $O(n^2 \log n)$, a mais eficiente até agora, se beneficia dessa simplificação.

Antes de descrevermos métodos para a obtenção do polinômio característico para árvores, apresentamos a teoria geral para polinômios característicos de grafos, obtendo, desse modo, a completa descrição do espectro de várias classes de grafos. É justo dizer que a maior parte do nosso trabalho trata da obtenção do espectro de um grafo supostamente conhecido, o caso mais comum em aplicações das ciências exatas. Entretanto, a direção contrária, isto é, determinar a estrutura do grafo a partir do seu espectro, ou de suas propriedades espectrais, é um assunto que tem espaço reduzido mas de grande importância no final deste trabalho.

Esta dissertação está organizada como segue. Na primeira seção deste capítulo, apresentamos a notação e as convenções usadas no decorrer do trabalho, e na segunda definimos vários espectros de grafos.

No capítulo 2, introduzimos a função geradora para o número de passeios, que pode ser expressa em função do polinômio característico de um grafo G e o seu complementar \overline{G} . Descrevemos também a relação entre o espectro de um grafo construído por operar com grafos dados e o espectro relativo a esses grafos.

No capítulo 3, determinamos os polinômios característicos de alguns tipos especiais de grafos, ao passo que no capítulo 4, determinamos o polinômio característico do grafo das linhas e outros similares.

No capítulo 5, descrevemos e comparamos métodos para determinar o polinômio característico de árvores e desenvolvemos um algoritmo elegante e eficiente que opera diretamente na árvore. Esse algoritmo é baseado em um procedimento que calcula o valor

do polinômio característico para um arbitrário número real, e num segundo estágio os pontos obtidos são interpolados para a obtenção do polinômio característico.

No capítulo 6, salientamos a importância do trabalho dos teóricos de grafos, cuja preocupação maior é tentar obter informação sobre a estrutura do grafo a partir do seu espectro. Nesse sentido, mostraremos que alguns grafos estudados podem ser caracterizados pelos seus espectros.

1.1 Preliminares

Ocorre freqüentemente que objetos estão relacionados a certas características e que necessitamos estudar determinadas relações entre eles. Uma ferramenta útil no estudo das relações é a teoria dos grafos. Nesta seção apresentamos algumas noções e convenções sobre grafos de modo que a notação e linguagem utilizada neste trabalho fica estabelecida.

Formalmente, entendemos como um *grafo* $G = (X, U)$ um conjunto finito X (cujos elementos são chamados de *vértices*) e um conjunto finito U (de *arestas*) de subconjuntos de dois elementos de X . Similarmente, um *dígrafo*, é definido como um conjunto finito X e um conjunto finito U de pares ordenados de elementos de X (esses pares são chamados de *arestas direcionadas*). Uma aresta direcionada é uma aresta que possui extremidade inicial no vértice x_i e extremidade final no vértice x_j , indicando que x_i está relacionado com x_j , mas x_j não está relacionado com x_i .

Se múltiplas arestas não direcionadas ou direcionadas são permitidas, chamamos de *multigrafos* ou *multi-dígrafos*, respectivamente. Esses dois casos incluem a possibilidade da existência de laços (um laço é uma aresta ou arco com ambos os vértices idênticos). Dois vértices são chamados *adjacentes* se eles estão unidos por uma aresta ou arco. A *matriz de adjacência* A de um multigrafo ou um multi-dígrafo G cujo conjunto de vértices é $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ é uma matriz quadrada de ordem n , cuja entrada a_{ij} de posição (i, j) é igual ao número de arestas começando no vértice x_i e terminando no vértice x_j .

Em algumas literaturas, o termo grafo é usado no sentido mais geral, isto é, podendo ser grafos não dirigidos, dígrafos ou até mesmo multigrafos ou multi-dígrafos.

Devemos salientar que, neste trabalho, o termo grafo denota um grafo não dirigido, finito, sem laços ou múltiplas arestas. Portanto a matriz de adjacência $A = [a_{ij}]$ de G é uma matriz simétrica $n \times n$ na qual $a_{ij} = 1$ se x_i é adjacente a x_j (isto é, existe uma aresta entre x_i e x_j), e $a_{ij} = 0$, caso contrário.

Para o grafo G , mostrado na figura 1.1, temos $X = \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}$ e $U = \{u_1, u_2, u_3, u_4\}$ como conjunto de vértices e arestas, respectivamente. Se dois vértices são adjacentes eles estão unidos por uma aresta não direcionada ou seja, sem extremidades inicial e final.

Assim, $u_1 \mapsto \{x_1, x_2\}$, $u_2 \mapsto \{x_1, x_3\}$, $u_3 \mapsto \{x_1, x_4\}$, $u_4 \mapsto \{x_1, x_5\}$.

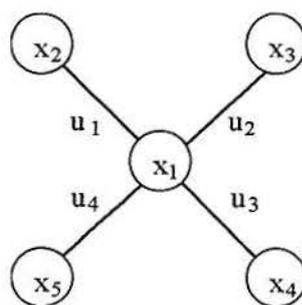


fig 1.1

Com matriz de adjacência $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$.

Em um grafo G , o número de arestas incidentes em um vértice x_i é chamado de *grau* ou *valência* de x_i . Se todos os vértices têm a mesma valência r , o grafo é chamado de *regular* de grau r . Vértices de valência nula são ditos isolados.

Denotaremos por n o número de vértices de um grafo G e o número de arestas por m . O grau de um grafo regular é denotado por r . O símbolo I significa a matriz identidade e I_n a matriz identidade de ordem n . O símbolo J denota a matriz quadrada cujas entradas são todas iguais a 1.

Em grafos, qualquer seqüência de arestas consecutivas (tendo em mente a orientação no caso direto) é chamado de *passeio*. O *comprimento* do passeio é o número de arestas deste passeio. No passeio, é permitido passar por uma mesma aresta mais de uma vez.

O caminho de comprimento $n-1$ ($n \geq 2$), denotado por P_n , é um grafo com n vértices (x_1, x_2, \dots, x_n) e com $n-1$ arestas, no qual x_i e x_{i+1} estão ligados por uma aresta com $i=1, 2, \dots, n-1$, ou seja, é um passeio sem repetição dos vértices.

Um grafo é *conexo* se quaisquer dois de seus vértices estiverem unidos por um caminho. Um grafo é *desconexo* se ele não for conexo, isto é, o grafo consiste então de duas ou mais partes chamadas de *componentes*. Dois vértices estando em diferentes componentes não podem estar unidos por um caminho. Um vértice x é chamado de *vértice-corte*, e uma aresta u é chamada de *ponte* se, a retirada de x ou u , respectivamente, causam um aumento do número de componentes.

O comprimento do menor caminho entre dois vértices é chamado de *distância* entre esses vértices. O *diâmetro* de um grafo conexo é a maior distância entre seus vértices.

Um *ciclo* C_n de comprimento n é um grafo regular conexo de grau 2 e de n vértices. Podemos dizer que C_n é um caminho fechado.

Um grafo G é chamado *bipartido* se seus vértices podem ser particionados em dois subconjuntos X e Y de tal modo que nenhuma linha seja incidente a dois vértices do mesmo subconjunto. Se U denota o conjunto de arestas de G , temos a seguinte notação

$$G = (X, Y; U)$$

com os vértices assim representados

$$X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \text{ e } Y = \{x_{m+1}, x_{m+2}, \dots, x_{m+n}\}.$$

A matriz de adjacência de G tem a seguinte forma

$$A = \begin{pmatrix} 0 & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix}, \text{ onde, } B \text{ é uma matriz } n \times m \text{ e } B^T \text{ é a transposta de } B.$$

Um grafo é chamado *semi-regular* de graus r_1, r_2 (podendo ser $r_1 = r_2$) se este é bipartido, cada vértice tem valência r_1 ou r_2 , e cada aresta liga um vértice de valência r_1 com um vértice de valência r_2 . Da mesma forma como grafos bipartidos, os grafos

multipartidos podem ser particionados em k subconjuntos de tal modo que quaisquer dois vértices do mesmo conjunto não sejam adjacentes.

Denotamos por K_n o grafo completo de n vértices, ou seja, quaisquer 2 vértices distintos de K_n são adjacentes.

Denotamos por K_{n_1, n_2} o grafo completo bipartido com $n_1 + n_2$ vértices. Em particular o grafo $K_{1, n}$ é chamado de estrela. Denotamos o grafo K_{n_1, n_2, \dots, n_k} o grafo completo multipartido com $n_1 + n_2 + \dots + n_k$ vértices.

Uma *floresta* é um grafo sem ciclos e uma *árvore* é uma floresta conexa.

O *complementar* \bar{G} do grafo G é o grafo com o mesmo conjunto de vértices de G , onde quaisquer dois vértices distintos são adjacentes, se e somente se, não são adjacentes em G .

O grafo *subdivisão* $S(G)$ de um grafo G é obtido de G ao substituir cada uma de suas arestas por um caminho de comprimento 2, ou, equivalentemente, por inserir um vértice adicional em cada aresta de G . Claramente, $S(G)$ é um grafo bipartido $(X, Y; U)$, onde X e Y são os conjuntos originais e os vértices adicionais, respectivamente.

O grafo das linhas de um grafo G , denotado $L(G)$, tem como vértices as arestas de G , sendo esses vértices adjacentes em $L(G)$ sempre que as arestas correspondentes são adjacentes em G .

O grafo $L(G)$ de um grafo G é mostrado na fig 1.2

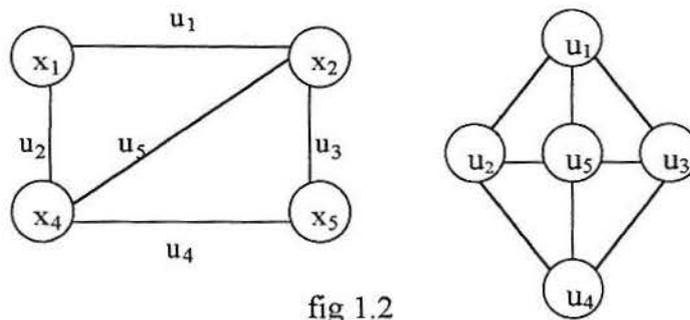


fig 1.2

A matriz de incidência *R vértice-aresta* de um grafo $G = (X, U)$ é definida como segue.

Sejam, $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ e $U = \{u_1, u_2, \dots, u_m\}$ o conjunto dos vértices e arestas, respectivamente. A matriz $n \times m$ $R = (b_{ij})$ é a matriz tal que, $(b_{ij}) = 1$ se x_i é incidente com

u_j , e $(b_{ij}) = 0$ nos outros casos. A matriz de incidência R^T *aresta-vértice* é a transposta de R .

A matriz de adjacência de um grafo G é denotada por $A = A(G)$. A matriz valência ou matriz grau D de um grafo é a matriz diagonal com valência v_i do vértice x_i na posição (i, i) .

É fácil ver que, para um grafo G , a matriz R de incidência vértice-aresta, a matriz D , e as matrizes de adjacência de G , $L(G)$, e $S(G)$ podem ser assim determinadas:

$$A(G) = RR^T - D,$$

$$A(L(G)) = R^T R - 2I,$$

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

Dados dois grafos $G = (X, U)$ e $H = (Y, V)$, um *isomorfismo* entre G e H é um mapeamento bijetivo σ de X sobre Y tal que $\{x, y\} \in U$ se, e somente se, $\{\sigma x, \sigma y\} \in V$ para todo $x, y \in X$. Obviamente G e H são isomorfos se, e somente se, seus vértices podem ser numerados de forma que as matrizes de adjacência correspondentes sejam iguais.. Se G e H são isomorfos denotamos $G \cong H$.

Os grafos G e H representados na fig1.3 são isomorfos.

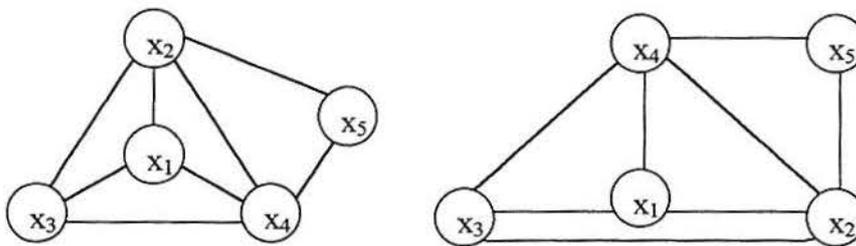


fig 1.3

O grafo $H = (Y, V)$ é dito ser um *subgrafo* do grafo $G = (X, U)$ se $Y \subset X$, e $V \subset U$. O grafo H é chamado de um *subgrafo gerador* ou um grafo parcial de G se $Y = X$. Se V consiste de todas as arestas de U que ligam os vértices de Y , então H é chamado de *subgrafo induzido*.

1.2 Vários Espectros de Grafos

Consideremos o conjunto de n variáveis x_k estando em correspondência um a um com o conjunto de vértices k ($k = 1, 2, 3, \dots, n$) de um dado grafo $G = (X, U)$. Tentamos encontrar valores numéricos x_k^0 para todo x_k , não todos nulos, e tais que para cada vértice i , o número correspondente x_i^0 seja proporcional à soma s_i^0 de todos aqueles x_k^0 adjacentes ao vértice i (isto é, tal que a razão $s_i^0 : x_i^0$ é a mesma para todo i). Em outras palavras, os x_k^0 devem satisfazer, de uma maneira não trivial, o sistema linear homogêneo

$$\lambda x_i = \sum_{k.i} x_k, \quad (i \in X), \quad (1.1)$$

onde $k.i$ significa que k é adjacente a i , então a equação linear acima pode ser também da forma

$$\lambda x = Ax, \quad (1.2)$$

$A = (a_{ik})$ sendo a matriz de adjacência de G e x denotando o vetor coluna com componentes x_k ($k \in X$). A condição necessária e suficiente para a existência de uma solução não trivial de (1.1) ou de (1.2), é que:

$$|\lambda I - A| \equiv G[\lambda] = 0.$$

Naturalmente, chegamos a definição usual de autovalores, mas esta maneira de raciocinar tem a vantagem de ser particularmente intuitiva, já que as componentes de um autovetor podem ser diretamente interpretadas como *peso* dos vértices correspondentes.

O polinômio característico $|\lambda I - A|$ da matriz de adjacência A de G é chamado de *polinômio característico* de G e denotado por $G[\lambda]$.

O conjunto dos autovalores de A é o espectro de A , também chamados de autovalores ou espectro de G , respectivamente. Se $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ são os autovalores de G , o espectro é denotado por $S_p(G) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$.

Os autovalores de A podem, equivalentemente, ser definidos pelos números λ satisfazendo $Ax = \lambda x$ para um vetor não nulo x . Cada vetor x é chamado de autovetor da matriz A (ou do grafo G) associado ao autovalor λ .

Para o grafo G da fig 1.4,

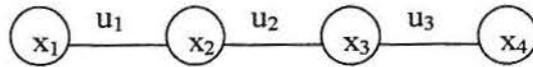


fig 1.4

temos para polinômio característico

$$G[\lambda] = \begin{vmatrix} \lambda & -1 & 0 & 0 \\ -1 & \lambda & -1 & 0 \\ 0 & -1 & \lambda & -1 \\ 0 & 0 & -1 & \lambda \end{vmatrix} = \lambda^4 - 3\lambda^2 + 1,$$

e o correspondente espectro

$$S_p(G) = \left\{ \frac{1+\sqrt{5}}{2}, \frac{-1+\sqrt{5}}{2}, \frac{1-\sqrt{5}}{2}, \frac{-1-\sqrt{5}}{2} \right\}.$$

Grafos que possuem o mesmo espectro são chamados de isoespectrais. Por algum tempo foi conjecturado que grafos não isomorfos tinham diferentes espectros, no entanto podemos encontrar grafos não isomorfos que são isoespectrais. Veremos isso no capítulo 6.

Certas aplicações necessitam da determinação dos pesos x_k^* dos vértices, de maneira que x_i^* não é proporcional à soma (1.1), mas ao valor médio de todos x_k^* adjacentes ao vértice i , isto é, os x_k^* satisfazem o sistema de equações

$$\lambda x_i = \frac{1}{d_i} \sum_{k:i} x_k, \quad (i \in X) \quad (1.3)$$

onde d_i denota o grau do vértice i , isto é, o número de arestas incidindo sobre o vértice i , onde $d_i > 0$.

A equação (1.3) pode ser substituída por :

$$\lambda D x = A x. \quad (1.4)$$

A matriz diagonal $D = (\delta_{ik} d_i)$ é chamada matriz grau de G , tendo

$$|\lambda D - A| = 0$$

como a condição necessária e suficiente para a existência de uma solução não trivial de (1.3) e (1.4). Esse desenvolvimento induz um polinômio característico modificado

$$Q_G[\lambda] = \frac{1}{|D|} |\lambda D - A| = \lambda^n + q_1 \lambda^{n-1} + \dots + q_n, \quad (1.5)$$

com correspondente espectro

$$Sp_Q(G) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}_Q. \quad (1.6)$$

Note que

$$Q_G[\lambda] = |\lambda I - D^{-1}A| = |\lambda I - AD^{-1}|. \quad (1.7)$$

Seja $D^{\frac{1}{2}} = (\delta_{ik} \sqrt{d_i})$ e $A^* = D^{\frac{1}{2}}(D^{-1}A)D^{-\frac{1}{2}}$. Então, se

$$A^* = D^{\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}} = \left(\frac{a_{ik}}{\sqrt{d_i d_k}} \right),$$

segue que $Q_G[\lambda] = |\lambda I - A^*|$.

Para um grafo não dirigido G , A^* é simétrica e, conseqüentemente, $Sp_Q(G)$ é real.

Em (1.5) D aparece de maneira multiplicativa; D pode também ser introduzida em um caminho aditivo, dessa forma:

$$\lambda x_i = d_i x_i + \sum_{k,i} x_k = \sum_{k,i} (x_i + x_k) \quad i \in X. \quad (1.8)$$

Obtemos então, outro polinômio característico

$$R_G[\lambda] = |\lambda I - D - A| = \lambda^n + r_1 \lambda^{n-1} + \dots + r_n, \quad (1.9)$$

com correspondente espectro

$$Sp_R(G) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}_R \quad (1.10)$$

Esses polinômios modificados podem ser encontrados em [6].

Neste trabalho, o interesse está no estudo de determinadas classes de grafos G , onde o polinômio característico em questão é $|\lambda I - A|$, o espectro $Sp(G) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$, onde os λ_i 's são as raízes da equação $G[\lambda] = 0$, ou seja, os autovalores de A .

2 OPERAÇÕES COM GRAFOS

Neste capítulo, a função geradora será expressa em função do polinômio característico de um grafo G e do polinômio característico de seu complementar \overline{G} . Determinaremos a função geradora de certas classes de grafos, com o objetivo de posteriormente determinar seus respectivos polinômios característicos. Mostraremos também a relação entre o espectro de um grafo, construído através de operações com grafos dados, e o espectro relativo a esses mesmos grafos.

2.1 Função Geradora

Para um grafo G , a matriz de adjacência A é simétrica, todos os seus autovalores são reais, existe uma matriz ortogonal V tal que $A=V\Lambda V^T$, onde Λ é uma matriz diagonal e, portanto, constituída pelos autovalores de A .

Sabemos que se A tem um autovalor λ com multiplicidade geométrica m , então o espaço solução do sistema linear $(\lambda I_n - A)x = 0$ (o auto-espaço de λ) tem dimensão m . Isto significa que existem m autovetores linearmente independentes de A associados ao autovalor λ . Podemos escolher uma base ortonormal para este espaço-solução, obtendo assim um conjunto de m autovetores ortonormais associados ao autovalor λ . Como os autovetores associados a autovalores distintos são ortogonais, se formarmos o conjunto de todos os autovetores obtemos um conjunto ortonormal. Assim, a matriz V cujas colunas são os autovetores é ortogonal ($V^{-1} = V^T$) e

$$A=V\Lambda V^T. \quad (2.1)$$

Podemos também determinar A^k como sendo $A^k=V\Lambda^k V^T$. O ponto de partida de nosso estudo é o número de passeios de comprimento k , pois é através do número de passeios que definiremos o que é função geradora.

Teorema 2.1.1: O número total N_k de passeios de comprimento k num grafo G é dado por

$$N_k = \sum_{v=1}^n \left(\sum_{i=1}^n v_{iv} \right)^2 \lambda_v^k \quad (k = 0,1,2,\dots).$$

Prova: Seja A a matriz de adjacência de um grafo G com vértices $1, 2, \dots, n$. Seja, $A^k = (a_{ij}^{(k)})$. Denotamos por $N_k(i, j)$ o número de passeios de comprimento k começando no vértice i e terminando no vértice j . Usando a multiplicação de matrizes,

$$N_k(i, j) = (a_{ij}^{(k)}) \quad (k = 0, 1, 2, \dots).$$

Seja G um grafo e $V = (v_{ij})$ uma matriz ortogonal de autovetores de A . Então, de acordo com (2.1),

$$a_{ij}^{(k)} = \sum_{v=1}^n v_{iv} v_{vj} \lambda_v^k.$$

Logo, o número N_k de todos os passeios de comprimento k em G é igual a

$$N_k = \sum_{i,j} N_k(i, j) = \sum_{i,j} a_{ij}^{(k)} = \sum_{v=1}^n \left(\sum_{i=1}^n v_{iv} \right)^2 \lambda_v^k, \text{ que é a soma de todos os elementos da}$$

matriz A^k . \square

Definimos, $HG[t] = \sum_{k=0}^{\infty} N_k t^k$ como sendo a função geradora para o número N_k de passeios de comprimento k .

Para o grafo da fig 2.1

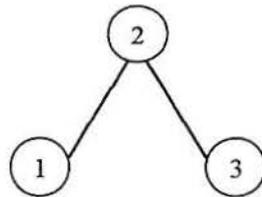


fig 2.1

com respectiva matriz de adjacência $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$, vamos determinar $A^2 = a_{ij}^{(2)}$, com $k=2$,

ou seja, todos os passeios de comprimento 2. Portanto, devemos calcular os elementos $N_2(i, j)$ correspondentes a matriz A^2 . Por exemplo, para determinarmos o elemento $N_2(2, 2)$ da matriz A^2 é necessário determinarmos os passeios de comprimento 2 começando no vértice 2 e terminando no vértice 2, então

$$N_2(2, 2) = a_{2,2}^2 = (a_{2,1}^1)(a_{1,2}^1) + (a_{2,2}^1)(a_{2,2}^1) + (a_{2,3}^1)(a_{3,2}^1) = 1 + 0 + 1 = 2.$$

Dessa maneira, calculando todos os elementos obtemos a matriz

$$A^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

onde

$$N_2 = \sum_{i,j} a_{ij}^{(2)} = 6, \text{ denota todos os passeios de comprimento dois, e}$$

$HG[t] = \sum_{k=0}^{\infty} N_k t^k = 3 + 4t + 6t^2 + \dots$, a função geradora para o número N_k de passeios de comprimento k .

No próximo teorema, a função geradora para o número de passeios de comprimento k é expressa em termos do polinômio característico de um grafo G e o seu complementar \bar{G} .

Teorema 2.1.2: Seja G um grafo cujo complementar é \bar{G} , e seja $HG[t] = \sum_{k=0}^{\infty} N_k t^k$ a função geradora do número N_k de passeios de comprimento k em G ($k = 0, 1, 2, \dots$). Então

$$HG[t] = \frac{1}{t} \left[(-1)^n \frac{\bar{G} \left[\frac{-t+1}{t} \right]}{G \left[\frac{1}{t} \right]} - 1 \right]. \quad (2.2)$$

Prova: Seja M uma matriz quadrada não singular de ordem n , onde $\{M\}$ denota a matriz (adj M), tal que $\{M\} = |M| M^{-1}$. Denotaremos também $\text{sum } M$ a soma de todos os elementos de M , e J a matriz quadrada nas quais todas as entradas são iguais a 1, então para um número arbitrário x ,

$$|M + xJ| = |M| + x \text{sum } \{M\}. \quad (2.3)$$

Se $N_k = \text{sum } A^k$, temos que

$$\sum_{k=0}^{\infty} A^k t^k = \frac{I}{I - tA} = (I - tA)^{-1} = |I - tA|^{-1} \{I - tA\}, \quad (|t| < (\max \lambda_i)^{-1}).$$

Assim obtemos

$$\sum_{k=0}^{\infty} \text{sum } A^k t^k = \sum_{k=0}^{\infty} N_k t^k = |I - tA|^{-1} \text{sum } \{I - tA\}, \text{ isto é}$$

$$HG[t] = \frac{\text{sum}\{I - tA\}}{|I - tA|}. \quad (2.4)$$

Como, $M = I - tA$, $x = t$, substituindo em (2.3), temos

$$\begin{aligned} |I - tA + tJ| &= |I - tA| + t \text{sum}\{I - tA\}, \text{ ou} \\ \text{sum}\{I - tA\} &= \frac{1}{t} \left[|I - tA + tJ| - |I - tA| \right]. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Sendo $\bar{A} = J - I - A$, a matriz de adjacência do complementar \bar{G} de G , e substituindo então, $J = \bar{A} + I + A$ em (2.5), temos:

$$\begin{aligned} \text{sum}\{I - tA\} &= \frac{1}{t} \left[|I - tA + t(\bar{A} + I + A)| - |I - tA| \right], \text{ ou} \\ \text{sum}\{I - tA\} &= \frac{1}{t} \left[|(1+t)I + t\bar{A}| - |I - tA| \right] \end{aligned} \quad (2.6)$$

Finalmente, substituindo (2.6) em (2.4), obtemos

$$\begin{aligned} HG[t] &= \frac{\frac{1}{t} \left[|(1+t)I + t\bar{A}| - |I - tA| \right]}{|I - tA|} = \frac{1}{t} \left[\frac{\left| \begin{pmatrix} 1+t \\ t \end{pmatrix} I + \bar{A} \right|}{\left| \begin{pmatrix} I \\ t \end{pmatrix} - A \right|} - 1 \right] = \\ &= \frac{1}{t} \left[(-1)^n \frac{\left| \begin{pmatrix} -t+1 \\ t \end{pmatrix} I - \bar{A} \right|}{\left| \begin{pmatrix} I \\ t \end{pmatrix} - A \right|} - 1 \right]. \end{aligned}$$

Logo,

$$HG[t] = \frac{1}{t} \left[(-1)^n \frac{\bar{G} \left[\begin{pmatrix} -t+1 \\ t \end{pmatrix} \right]}{G \left[\begin{pmatrix} I \\ t \end{pmatrix} \right]} - 1 \right]. \quad \square$$

Apartir da equação (2.2), podemos estabelecer a relação entre a função geradora de um grafo G e a função geradora de seu complementar \bar{G} . A função geradora $HG[t]$ do número de passeios de um grafo G , satisfaz

Propriedade 2.1.3
$$\overline{HG}[t] = \frac{HG\left[-\frac{t}{t+1}\right]}{t+1 - tHG\left[-\frac{t}{t+1}\right]} \quad (2.7)$$

Prova:

$$\overline{HG}[t] = \frac{1}{t} \left[(-1)^n \frac{G\left[-\frac{t+1}{t}\right]}{\overline{G}\left[\frac{1}{t}\right]} - 1 \right] \quad (2.8)$$

então, isolando $G\left[\frac{1}{t}\right]$ na equação (2.2), obtemos

$$G\left[\frac{1}{t}\right] = \frac{(-1)^n \overline{G}\left[-\frac{t+1}{t}\right]}{(tHG[t]+1)}$$

ou ainda

$$G\left[-\frac{t+1}{t}\right] = \frac{(-1)^n (t+1) \overline{G}\left[-\frac{1}{t}\right]}{-tHG\left[-\frac{t}{t+1}\right] + t+1}. \quad (2.9)$$

Substituindo (2.9) em (2.7), temos

$$\overline{HG}[t] = \frac{1}{t} \left[\frac{(t+1)}{-tHG\left[-\frac{t}{t+1}\right] + t+1} - 1 \right]$$

e, portanto,

$$\overline{HG}[t] = \frac{HG\left[-\frac{t}{t+1}\right]}{t+1 - tHG\left[-\frac{t}{t+1}\right]}. \quad \square$$

A seguir utilizaremos esses resultados para obter a função geradora de certos grafos.

Teorema 2.1.4: Se G é um grafo regular de grau r com n vértices, então

$$\overline{G}[\lambda] = (-1)^n \frac{\lambda - n + r + 1}{\lambda + r + 1} G[-\lambda - 1], \quad (2.10)$$

isto é, o espectro de G é composto por $\lambda_1 = r, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, e o espectro de \overline{G} é composto por $n-1-r, -\lambda_2-1, \dots, -\lambda_n-1$.

Prova: O número N_k de passeios de comprimento k em G é $N_k = nr^k$, sendo G regular. A função geradora $HG[t]$ é dada por

$$HG[t] = \sum_{k=0}^{\infty} N_k t^k = \sum_{k=0}^{\infty} nr^k t^k = \frac{n}{1-rt} \left(|t| < \frac{1}{r} \right)$$

e, de acordo com (2.2), temos

$$\frac{1}{t} \left[(-1)^n \frac{\overline{G} \left[-\frac{t+1}{t} \right]}{G \left[\frac{1}{t} \right]} - 1 \right] = \frac{n}{1-rt}$$

fazendo $-\frac{t+1}{t} = \lambda$ na equação acima, obtemos

$$\overline{G}[\lambda] = (-1)^n \frac{\lambda - n + r + 1}{\lambda + r + 1} G[-\lambda - 1]. \square$$

Fica estabelecida, então, uma relação entre o polinômio característico de um grafo regular G e o polinômio característico de seu complementar \overline{G} .

Da mesma maneira como determinamos a função geradora para grafos regulares, podemos também determinar a função geradora para grafos completos. Todos os vértices possuem grau $r = n-1$, e portanto a função geradora é $HG[t] = \sum_{k=0}^{\infty} N_k t^k = \frac{n}{1-(n-1)t}$.

Tendo em vista que o complementar de um grafo multipartido completo é um grafo cujas componentes são grafos completos e que a função geradora para grafos completos é conhecida, então, se utilizarmos a propriedade (2.7), teremos a função geradora para grafos multipartidos completos, como veremos a seguir.

É fácil ver que a função geradora de um grafo é a soma das funções geradoras de suas componentes conexas. Assim,

$\overline{HK}_{n_1, \dots, n_k}[t] = \sum_{i=1}^k \frac{n_i}{1 - (n_i - 1)t}$ é a função geradora para o complementar de grafos

completos multipartidos. Substituindo essa função geradora em (2.7), temos:

$$\overline{HK}_{n_1, \dots, n_k}[t] = \frac{HK_{n_1, \dots, n_k}\left[-\frac{t}{t+1}\right]}{t+1 - tHK_{n_1, \dots, n_k}\left[-\frac{t}{t+1}\right]} \text{ ou seja,}$$

$$\sum_{i=1}^k \frac{n_i}{1 - (n_i - 1)t} = \frac{HK_{n_1, \dots, n_k}\left[-\frac{t}{t+1}\right]}{t+1 - tHK_{n_1, \dots, n_k}\left[-\frac{t}{t+1}\right]},$$

$$HK_{n_1, \dots, n_k}\left[-\frac{t}{t+1}\right] = \frac{(t+1) \sum_{i=1}^k \frac{n_i}{1 - (n_i - 1)t}}{1 + t \sum_{i=1}^k \frac{n_i}{1 - (n_i - 1)t}}$$

ou, substituindo $\frac{t}{t+1}$ por $(-t)$ temos

$$\text{Teorema 2.1.5: } HK_{n_1, \dots, n_k}[t] = \frac{\sum_{i=1}^k \frac{n_i}{1 + n_i t}}{1 - t \sum_{i=1}^k \frac{n_i}{1 + n_i t}} \quad (2.11)$$

2.2 Polinômio Característico para a Soma Direta e Produto Completo de Grafos

A soma direta $(G_1 + G_2)$, do grafo $G_1 = (X_1, U_1)$ e $G_2 = (X_2, U_2)$ com $(X_1 \cap X_2 = \emptyset)$ é o grafo $G = (X, U)$ para os quais $X = X_1 \cup X_2$ e $U = U_1 \cup U_2$.

O produto completo $G_1 \nabla G_2$ dos grafos G_1 e G_2 é o grafo obtido de $(G_1 + G_2)$ pela união de cada vértice de G_1 com cada vértice de G_2 .

Sejam G_1 e G_2 os grafos da fig 2.2

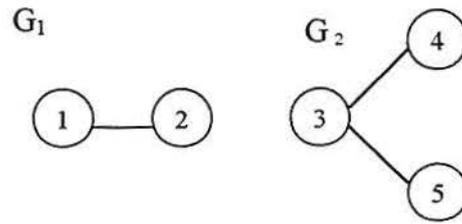


fig 2.2

A soma direta $(G_1 + G_2)$ e o produto completo $G_1 \nabla G_2$ são mostrados nas figuras abaixo

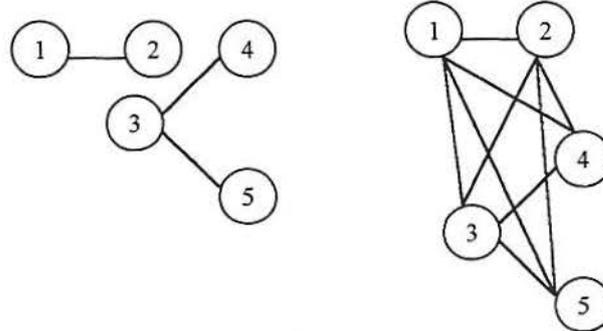


fig 2.3 (a) $(G_1 + G_2)$

(b) $G_1 \nabla G_2$

A relação $\overline{G_1 \nabla G_2} = \overline{G_1} + \overline{G_2}$, será usada nos estudos posteriores. Podemos verificar que a soma direta e o ∇ -produto são associativos e comutativos.

Vamos considerar primeiro a soma direta de dois grafos G_1 e G_2 . Seja A_i a matriz de adjacência de um grafo G_i ($i = 1, 2, \dots$). Então a matriz de adjacência A de $(G_1 + G_2)$ é da forma

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix},$$

isto é, $A = A_1 + A_2$, o sinal $+$ denota a soma direta das matrizes em questão.

Pelo desenvolvimento de Laplace no determinante, o seguinte teorema pode facilmente ser obtido

Teorema 2.2.1: $(G_1 + G_2)[\lambda] = G_1[\lambda] G_2[\lambda]$.

Dado que um grafo G é soma direta das componentes G_1, \dots, G_s , então temos

$$G[\lambda] = G_1[\lambda] \dots G_s[\lambda]. \quad (2.12)$$

Para a determinação do polinômio característico do produto completo, devemos utilizar a propriedade $H(G_1 + G_2)[t] = HG_1[t] + HG_2[t]$, e a equação (2.2). Então,

$$\frac{1}{t} \left[(-1)^{n_1+n_2} \frac{\overline{G_1 + G_2} \left[-\frac{t+1}{t} \right] - 1}{G_1 + G_2 \left[\frac{1}{t} \right]} - 1 \right] = \sum_{i=1}^2 \frac{1}{t} \left[(-1)^{n_i} \frac{\overline{G_i} \left[-\frac{t+1}{t} \right] - 1}{G_i \left[\frac{1}{t} \right]} - 1 \right]$$

Como $\overline{G_1 + G_2} = \overline{G_1} \nabla \overline{G_2}$, e fazendo $\left[-\frac{t+1}{t} \right] = \lambda$, chegamos a:

$$-(\lambda+1) \left[(-1)^{n_1+n_2} \frac{\overline{G_1 + G_2}[\lambda]}{(G_1 + G_2)[- \lambda - 1]} - 1 \right] = -(\lambda+1) \left[(-1)^{n_1} \frac{\overline{G_1}[\lambda]}{G_1[- \lambda - 1]} - 1 \right] +$$

$$-(\lambda+1) \left[(-1)^{n_2} \frac{\overline{G_2}[\lambda]}{G_2[- \lambda - 1]} - 1 \right],$$

$$\left[(-1)^{n_1+n_2} \frac{\overline{G_1} \nabla \overline{G_2}[\lambda]}{(G_1 + G_2)[- \lambda - 1]} - 1 \right] = \left[(-1)^{n_1} \frac{\overline{G_1}[\lambda]}{G_1[- \lambda - 1]} + (-1)^{n_2} \frac{\overline{G_2}[\lambda]}{G_2[- \lambda - 1]} - 2 \right]$$

$$\left[(-1)^{n_1+n_2} \frac{\overline{G_1} \nabla \overline{G_2}[\lambda]}{(G_1 + G_2)[- \lambda - 1]} - 1 \right] = \left[(-1)^{n_1} \frac{\overline{G_1}[\lambda] G_2[- \lambda - 1]}{(G_1 + G_2)[- \lambda - 1]} + (-1)^{n_2} \frac{\overline{G_2}[\lambda] G_1[- \lambda - 1]}{(G_1 + G_2)[- \lambda - 1]} - 2 \right]$$

$$\left[(-1)^{n_1+n_2} \frac{\overline{G_1} \nabla \overline{G_2}[\lambda]}{(G_1 + G_2)[- \lambda - 1]} \right] = \left[(-1)^{n_1} \frac{\overline{G_1}[\lambda] G_2[- \lambda - 1]}{(G_1 + G_2)[- \lambda - 1]} + (-1)^{n_2} \frac{\overline{G_2}[\lambda] G_1[- \lambda - 1]}{(G_1 + G_2)[- \lambda - 1]} - 1 \right]$$

$$(-1)^{n_1+n_2} \overline{G_1} \nabla \overline{G_2}[\lambda] = (-1)^{n_1} \overline{G_1}[\lambda] G_2[- \lambda - 1] + (-1)^{n_2} \overline{G_2}[\lambda] G_1[- \lambda - 1] - (G_1 + G_2)[- \lambda - 1]$$

$$\overline{G_1} \nabla \overline{G_2}[\lambda] = (-1)^{n_2} \overline{G_1}[\lambda] G_2[- \lambda - 1] + (-1)^{n_1} \overline{G_2}[\lambda] G_1[- \lambda - 1] - (-1)^{n_1+n_2} (G_1 + G_2)[- \lambda - 1]$$

Substituindo, $\overline{G_1}, \overline{G_2}$ por G_1, G_2 , isto é, G_1, G_2 por $\overline{G_1}, \overline{G_2}$, obtemos

$$G_1 \nabla G_2[\lambda] = (-1)^{n_2} G_1[\lambda] \overline{G_2}[- \lambda - 1] + (-1)^{n_1} G_2[\lambda] \overline{G_1}[- \lambda - 1] +$$

$$- (-1)^{n_1+n_2} \overline{G_1}[- \lambda - 1] \overline{G_2}[- \lambda - 1],$$

que representa o polinômio característico para o produto completo dos grafos G_1 e G_2 .

Provamos, portanto, o seguinte

Teorema 2.2.2 Sejam G_1 e G_2 grafos, então

$$G_1 \nabla G_2[\lambda] = (-1)^{n_2} G_1[\lambda] \overline{G_2}[-\lambda - 1] + (-1)^{n_1} G_2[\lambda] \overline{G_1}[-\lambda - 1] + (-1)^{n_1+n_2} \overline{G_1}[-\lambda - 1] \overline{G_2}[-\lambda - 1] \quad (2.13)$$

Teorema 2.2.3 Sejam G_1 e G_2 grafos regulares, então

$$G_1 \nabla G_2[\lambda] = \frac{G_1[\lambda] G_2[\lambda]}{(\lambda - r_1)(\lambda - r_2)} [(\lambda - r_1)(\lambda - r_2) - n_1 n_2] \quad (2.14)$$

Prova: Substituindo o resultado do teorema 2.1.4 na relação (2.13), temos

$$G_1 \nabla G_2[\lambda] = (-1)^{n_2} G_1[\lambda] \left[(-1)^{n_2} \frac{-\lambda - n_2 + r_2}{-\lambda + r_2} \right] G_2[\lambda] + (-1)^{n_1} G_2[\lambda] \left[(-1)^{n_1} \frac{-\lambda - n_1 + r_1}{-\lambda + r_1} \right] G_1[\lambda] +$$

$$G_1 \nabla G_2[\lambda] = G_1[\lambda] G_2[\lambda] \left[\frac{-\lambda - n_2 + r_2}{-\lambda + r_2} + \frac{-\lambda - n_1 + r_1}{-\lambda + r_1} - \frac{(-\lambda - n_2 + r_2)(-\lambda - n_1 + r_1)}{(-\lambda + r_2)(-\lambda + r_1)} \right]$$

Logo:

$$G_1 \nabla G_2[\lambda] = \frac{G_1[\lambda] G_2[\lambda]}{(\lambda - r_1)(\lambda - r_2)} [(\lambda - r_1)(\lambda - r_2) - n_1 n_2].$$

representa o polinômio característico do produto completo dos grafos G_1 e G_2 , com G_1 e G_2 regulares.

3 POLINÔMIO CARACTERÍSTICO DE CERTAS CLASSES DE GRAFOS

Neste capítulo, determinaremos o polinômio característico de certos tipos particulares de grafos utilizando resultados descritos no capítulo anterior.

I) *Polinômio característico para um grafo de vértices isolados.*

Para um grafo G que possui n vértices isolados, o polinômio característico é dado por

$$G[\lambda] = \lambda^n, \quad (3.1)$$

e, portanto, o espectro consiste de n números iguais a zero.

II) *Polinômio característico para um grafo completo.*

Vimos que, sendo G um grafo regular de grau r com n vértices pelo teorema (2.1.4) temos que $\bar{G}[\lambda] = (-1)^n \frac{\lambda - n + r + 1}{\lambda + r + 1} G[\lambda - 1]$. Assim, para um grafo completo K_n , temos que o grau é $r = n - 1$ e que \bar{K}_n é um grafo de vértices isolados, logo

$$\begin{aligned} \bar{K}_n[\lambda] &= (-1)^n \frac{\lambda - n + r + 1}{\lambda + r + 1} K_n[-\lambda - 1], \\ \lambda^n &= (-1)^n \frac{\lambda - n + (n - 1) + 1}{\lambda + n - 1 + 1} K_n[-\lambda - 1], \\ K_n[-\lambda - 1] &= (-1)^n \frac{\lambda^n (\lambda + n)}{\lambda}, \\ K_n[\lambda] &= (-1)^n \frac{(-\lambda - 1)^n (-\lambda - 1 + n)}{-\lambda - 1}. \end{aligned}$$

Assim, temos para polinômio característico

$$K_n[\lambda] = (\lambda + 1)^{n-1} (\lambda - n + 1). \quad (3.2)$$

Exemplo 3.1

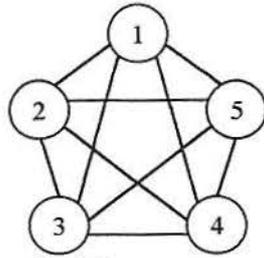


fig 3.1

$$K_5[\lambda] = (\lambda+1)^4(\lambda-4)$$

III) *Polinômio característico para um grafo regular de grau 1 com $2k$ vértices*

Podemos afirmar que cada componente de um grafo regular G de grau 1, é isomorfo ao grafo K_2 . Então, por (3.2) temos que $K_2[\lambda] = \lambda^2 - 1$. De acordo com (2.12) a relação

$$G[\lambda] = (\lambda^2 - 1)^k \quad (3.3)$$

é válida se G tem $2k$ vértices.

IV) *Polinômio característico para um grafo regular H , de grau $n-2$, com $n = 2k$ vértices.*

Se H é um grafo regular de grau r , com n vértices, temos que o polinômio característico do grafo complementar de H é dado pelo teorema 2.1.4, ou seja,

$$\bar{H}[\lambda] = (-1)^n \frac{\lambda - n + r + 1}{\lambda + r + 1} H[-\lambda - 1]. \quad (3.4)$$

Através de (3.3), podemos obter o polinômio característico de um grafo regular H , de grau $n-2$ com $n = 2k$ vértices:

Se $\bar{H}[\lambda] = (\lambda^2 - 1)^k$, então substituindo esse resultado em (3.4), temos que

$$(\lambda^2 - 1)^k = (-1)^{2k} \frac{\lambda - 1}{\lambda + 2k - 1} H[-\lambda - 1],$$

$$H[-\lambda - 1] = \frac{(\lambda + 1)^k (\lambda - 1)^k (\lambda + 2k - 1)}{(\lambda - 1)},$$

$$H[-\lambda - 1] = (\lambda + 1)^k (\lambda - 1)^{k-1} (\lambda + 2k - 1).$$

Assim,

$$H[\lambda] = (-\lambda - 1 + 1)^k (-\lambda - 1 - 1)^{k-1} (-\lambda - 1 + 2k - 1).$$

Logo,

$$H[\lambda] = (-\lambda)^k (-\lambda - 2)^{k-1} (-\lambda + 2k - 2) \text{ ou} \\ H[\lambda] = (\lambda)^k (\lambda + 2)^{k-1} (\lambda - 2k + 2). \quad (3.5)$$

Esses grafos algumas vezes são denotados por $CP(k)$.

Exemplo 3.2

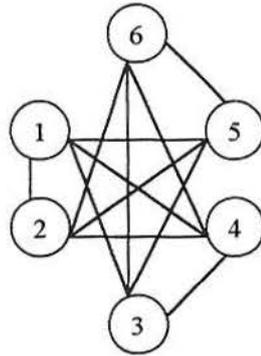


fig 3.2
 $CP(3)[\lambda] = \lambda^3 (\lambda + 2)^2 (\lambda - 4)$

V) *Polinômio característico para um grafo bipartido completo.*

O produto completo $G_1 \nabla G_2$ dos grafos G_1 e G_2 é o grafo obtido de $G_1 + G_2$ pela união de cada vértice de G_1 com cada vértice de G_2 , (ver seção 2.2). Para um grafo bipartido completo K_{n_1, n_2} a relação $K_{n_1, n_2} = G_1 \nabla G_2$ é válida, visto que G_1 e G_2 são grafos que consistem de n_1 e n_2 vértices isolados, respectivamente. Como $G_1[\lambda] = \lambda^{n_1}$ e $G_2[\lambda] = \lambda^{n_2}$, e o polinômio característico do produto completo de grafos regulares G_1 e G_2 é dado por (2.14), temos

$$K_{n_1, n_2}[\lambda] = \frac{\lambda^{n_1} \lambda^{n_2}}{\lambda^2} (\lambda^2 - n_1 n_2) = \lambda^{n_1 + n_2 - 2} (\lambda^2 - n_1 n_2), \quad (3.6)$$

isto é, o espectro do grafo K_{n_1, n_2} consiste dos números $\sqrt{n_1 n_2}$, $-\sqrt{n_1 n_2}$, e $n_1 + n_2 - 2$ números todos iguais a zero. Se $n_1 = n$ e $n_2 = 1$, obtemos a estrela com $n+1$ vértices, cujo polinômio característico é $K_{n,1}[\lambda] = (\lambda^2 - n)\lambda^{n-1}$.

Exemplo 3.3

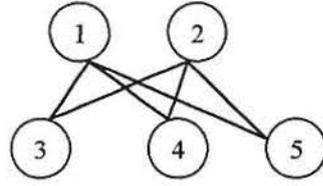


fig 3.3
 $K_{2,3}[\lambda] = (\lambda^2 - 6)\lambda^3$

VI) *Polinômio característico para um grafo bipartido completo quando retiramos uma aresta.*

Seja e uma aresta de $K_{s,t}$, então

$$K_{s,t} - e[\lambda] = \lambda^{s+t-4} [\lambda^4 - (st - 1)\lambda^2 + (s - 1)(t - 1)] \quad (3.7)$$

A demonstração para (3.7) utiliza o lema enunciado abaixo.

Lema 3.1.4 Seja $e = uv$ uma aresta de um grafo G , seja $C(e)$ a coleção de ciclos contendo a aresta e , e seja $V(Z)$ o conjunto de vértices no ciclo Z que pertence a coleção de ciclos que contém a aresta e . Então o polinômio característico

$$G[\lambda] = G - e[\lambda] - (G - u - v[\lambda]) - 2 \sum_{Z \in C(e)} (G - V(Z)[\lambda]). \quad (3.8)$$

A demonstração para esse lema se encontra em [19], aqui não é demonstrado pois requer que se estabeleçam as relações entre os coeficientes do polinômio característico do grafo e sua estrutura.

Assim, para $t > s$ pelo lema acima temos

$$K_{s,t} - e[\lambda] = K_{s,t}[\lambda] + K_{s-1,t-1}[\lambda] + 2 \sum_{Z \in C(e)} K_{s,t} - V(Z)[\lambda],$$

$$K_{s,t} - e[\lambda] = (\lambda^2 - st)\lambda^{s+t-2} + [\lambda^2 - (s - 1)(t - 1)]\lambda^{s+t-4} + 2 \sum_{i=1}^{t-1} \binom{t-1}{i} i! \binom{s-1}{i} i! \times$$

$$[\lambda^2 - (s - i - 1)(t - i - 1)]\lambda^{s+t-2i-4},$$

$$K_{s,t} - e[\lambda] = \lambda^{s+t-4} [\lambda^4 - (st - 1)\lambda^2 + (s - 1)(t - 1)].$$

Exemplo 3.4

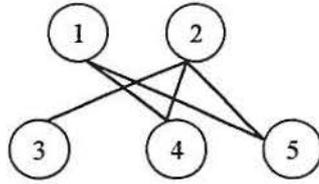


fig 3.4
 $K_{2,3-e}[\lambda] = \lambda(\lambda^4 - 5\lambda^2 + 2)$

VII) *Polinômio característico para um grafo multipartido completo regular*

Um grafo multipartido completo regular K_{n_1, \dots, n_k} , onde $n_1 = n_2 = \dots = n_k = \frac{n}{k}$ (com n sendo igual ao número de vértices), tem como complementar o grafo que é soma direta de k grafos completos cada um tendo $\frac{n}{k}$ vértices.

Por (3.2) temos que $K_n[\lambda] = (\lambda - n + 1)(\lambda + 1)^{n-1}$ e sendo o complementar a soma direta de k grafos completos contendo $\frac{n}{k}$ vértices aplicando (2.12) temos

$$\left(\overline{K}_{\frac{n}{k}}[\lambda] \right)^k = \left((\lambda - \frac{n}{k} + 1)(\lambda + 1)^{\frac{n}{k}-1} \right)^k = (\lambda - \frac{n}{k} + 1)^k (\lambda + 1)^{n-k} \quad (3.9)$$

A relação entre número de vértices(n) e o grau(r) para um grafo multipartido completo regular é $r = n - \frac{n}{k}$.

Aplicando o teorema 2.1.4 temos

$$\left(\overline{K}_{\frac{n}{k}}[\lambda] \right)^k = \frac{\lambda - n + n - \frac{n}{k} + 1}{\lambda + n - \frac{n}{k} + 1} \left(K_{\frac{n}{k}, \dots, \frac{n}{k}}[-\lambda - 1] \right) \quad (3.10)$$

Substituindo (3.9) em (3.10) temos,

$$\begin{aligned}
\left(\lambda - \frac{n}{k} + 1\right)^k (\lambda + 1)^{n-k} &= \frac{\lambda - \frac{n}{k} + 1}{\lambda + n - \frac{n}{k} + 1} \left(K_{\frac{n}{k}, \dots, \frac{n}{k}}[-\lambda - 1] \right), \\
K_{\frac{n}{k}, \dots, \frac{n}{k}}[-\lambda - 1] &= \frac{\left(\lambda - \frac{n}{k} + 1\right)^k (\lambda + 1)^{n-k} \left(\lambda + n - \frac{n}{k} + 1\right)}{\lambda - \frac{n}{k} + 1}, \\
K_{\frac{n}{k}, \dots, \frac{n}{k}}[-\lambda - 1] &= \left(\lambda - \frac{n}{k} + 1\right)^{k-1} (\lambda + 1)^{n-k} \left(\lambda + n - \frac{n}{k} + 1\right), \\
K_{\frac{n}{k}, \dots, \frac{n}{k}}[-\lambda - 1] &= \left(-\lambda - \frac{n}{k}\right)^{k-1} (-\lambda)^{n-k} \left(-\lambda + n - \frac{n}{k}\right), \\
K_{\frac{n}{k}, \dots, \frac{n}{k}}[\lambda] &= \left(\lambda + \frac{n}{k}\right)^{k-1} (\lambda)^{n-k} \left(\lambda - n + \frac{n}{k}\right). \tag{3.11}
\end{aligned}$$

Exemplo 3.5

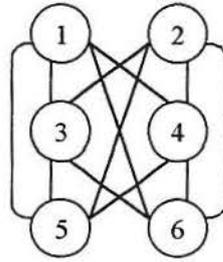


fig 3.5
 $K_{2,2,2}[\lambda] = \lambda^3(\lambda + 2)^2(\lambda - 4)$

VIII) *Polinômio característico para um grafo multipartido completo.*

Um grafo multipartido completo K_{n_1, \dots, n_k} possui os números n_1, n_2, \dots, n_k não todos iguais e tem como complementar um grafo que é soma direta de grafos completos G_1, G_2, \dots, G_k com n_1, n_2, \dots, n_k vértices não todos iguais. Por (3.2), sabemos que $G_i[\lambda] = (\lambda + 1)^{n_i - 1} (\lambda - n_i + 1)$. Aplicando (2.12), segue que

$$\begin{aligned}
\overline{K}_{n_1, \dots, n_k}[\lambda] &= [(\lambda - n_1 + 1)(\lambda + 1)^{n_1 - 1}] [(\lambda - n_2 + 1)(\lambda + 1)^{n_2 - 1}] \dots [(\lambda - n_k + 1)(\lambda + 1)^{n_k - 1}] \\
\overline{K}_{n_1, \dots, n_k}[\lambda] &= \prod_{j=1}^k (\lambda - n_j + 1)(\lambda + 1)^{n_1 + n_2 + \dots + n_k - k} = \prod_{j=1}^k (\lambda - n_j + 1)(\lambda + 1)^{n-k}. \tag{3.12}
\end{aligned}$$

O polinômio característico de K_{n_1, \dots, n_k} pode ser determinado por meio da função geradora dos números de passeios. A função geradora $HG[t]$ para grafos multipartidos completos é dada por (2.11). Assim, substituindo (2.11) e (3.12) com $\lambda = -\frac{t+1}{t}$ em (2.2) temos

$$K_{n_1, \dots, n_k} \left[\frac{1}{t} \right] = \frac{(-1)^n \bar{K}_{n_1, \dots, n_k} \left[-\frac{t+1}{t} \right]}{tHK_{n_1, \dots, n_k} [t] + 1} = \frac{(-1)^n \prod_{j=1}^k \left(-\frac{t+1}{t} - n_j + 1 \right) \left(-\frac{t+1}{t} + 1 \right)^{n-k}}{t \frac{\sum_{i=1}^k \frac{n_i}{1+n_i t}}{1 - t \sum_{i=1}^k \frac{n_i}{1+n_i t}}}$$

fazendo $\frac{1}{t} = \lambda$, temos que:

$$K_{n_1, \dots, n_k} [\lambda] = \frac{(-1)^n \prod_{j=1}^k (-\lambda - n_j) (-\lambda)^{n-k}}{1 - \sum_{i=1}^k \frac{n_i}{\lambda + n_i}}$$

$$K_{n_1, \dots, n_k} [\lambda] = (\lambda)^{n-k} \left(1 - \sum_{i=1}^k \frac{n_i}{\lambda + n_i} \right) \prod_{j=1}^k (\lambda + n_j). \quad (3.13)$$

Exemplo 3.6

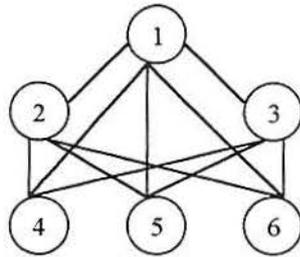


fig3.6
 $K_{1,2,3}[\lambda] = \lambda^3(\lambda^3 - 11\lambda - 12)$

4 POLINÔMIO CARACTERÍSTICO DO GRAFO DAS LINHAS

Acreditamos ser importante obter o polinômio característico do grafo das linhas, já que este tem sido intensamente investigado devido às suas propriedades espectrais. Assim, neste capítulo, mostraremos que é possível determinar o polinômio característico do grafo das linhas de um grafo regular G em função do polinômio característico relativo a esse grafo regular G . Também determinaremos o polinômio característico do grafo das linhas em função do polinômio característico do grafo G quando G é semi-regular. Outros polinômios característicos serão determinados devido à construção ser semelhante a do grafo das linhas. Quando o grafo é regular, poderemos expressar seus polinômios em função do polinômio característico de G . Um pouco da teoria geral de matrizes é utilizada para deduzirmos esses polinômios característicos.

4.1 Determinação do Polinômio Característico do Grafo das Linhas

O grafo das linhas de um grafo G , denotado por $L(G)$, tem como vértices as arestas de G , sendo esses vértices adjacentes em $L(G)$ sempre que as arestas correspondentes são adjacentes em G , ou seja, dois vértices de $L(G)$ são adjacentes se, e somente se, as arestas correspondentes em G tem um vértice em comum.

Para deduzirmos os polinômios característicos a seguir, recorreremos à teoria de matrizes, enunciando os seguintes resultados que podem ser encontrados, por exemplo, em [18].

Lema 4.1.1 Se A é uma matriz $m \times n$, e se $\chi[\lambda]$ denota o polinômio característico de uma matriz quadrada χ , então

$$\lambda^n \chi[A A^T] = \lambda^m \chi[A^T A]. \quad (4.1)$$

Lema 4.1.2 Se M é uma matriz quadrada não singular, temos

$$\begin{vmatrix} M & N \\ P & Q \end{vmatrix} = |M| \cdot |Q - P M^{-1} N|. \quad (4.2)$$

Sejam, A e B as matrizes de adjacência dos grafos G e L(G), respectivamente. A matriz de incidência vértices –arestas nxm de um grafo G é denotada por R enquanto D denota a valência da matriz G. Sabemos que

$$RR^T = A + D \quad (4.3)$$

$$R^TR = B + 2I, \quad (4.4)$$

tendo como polinômio característico,

$$RR^T[\lambda] = |\lambda I - A - D|$$

$$R^TR[\lambda] = |\lambda I - B - 2I|.$$

Como R é uma matriz nxm, aplicando o lema 4.1.1 temos

$$\lambda^m RR^T[\lambda] = \lambda^n R^TR[\lambda],$$

$$\lambda^m |\lambda I - A - D| = \lambda^n |\lambda I - B - 2I|$$

$$\lambda^{m-n} |\lambda I - A - D| = |\lambda I - B - 2I|. \text{ Como } |(\lambda-2)I - B| = L(G)[\lambda-2], \text{ temos}$$

$$L(G)[\lambda-2] = \lambda^{m-n} |\lambda I - A - D| \quad (4.5)$$

Teorema 4.1.3 Se G é um grafo regular de grau r, com n vértices e $m = \frac{1}{2}nr$, então

$$L(G)[\lambda] = (\lambda+2)^{m-n} G[\lambda-r+2]. \quad (4.6)$$

Prova: Temos por (4.5) que

$$L(G)[\lambda-2] = \lambda^{m-n} |\lambda I - A - rI|$$

$$L(G)[\lambda-2] = \lambda^{m-n} |(\lambda-r)I - A|$$

$$L(G)[\lambda-2] = \lambda^{m-n} G[\lambda-r], \text{ ou}$$

$$L(G)[\lambda] = (\lambda+2)^{m-n} G[\lambda-r+2]. \quad \square$$

Para exemplificar, tomamos G como sendo o grafo completo K_4 , então temos que $K_4[\lambda] = (\lambda+1)^3(\lambda-3)$. Portanto $L[K_4] = (\lambda+2)^2 K_4[\lambda-1] = (\lambda+2)^2 \lambda^3(\lambda-4)$. Podemos observar que o grafo $L[K_4] = CP(3)$ mostrado no capítulo 3.

Vamos mostrar agora que podemos estabelecer uma relação entre $G[\lambda]$ e $L(G)[\lambda]$ para um grafo semi-regular G.

Um grafo G é chamado de semi-regular de graus r_1 e r_2 , se é bipartido tendo uma representação $G = (X_1, X_2; U)$ com $|X_1| = n_1$, $|X_2| = n_2$, $n_1 + n_2 = n$, onde cada vértice $x \in X_i$ tem valência r_i ($i = 1, 2$).

Teorema 4.1.4 Se G é um grafo semi-regular com $n_1 \geq n_2$. Então

$$LG[\lambda] = (\lambda + 2)^\beta \left(\sqrt{\left(-\frac{\alpha_1 + 2}{\alpha_2 + 2} \right)^{n_1 - n_2} G[\sqrt{(\alpha_1 + 2)(\alpha_2 + 2)}] G[-\sqrt{(\alpha_1 + 2)(\alpha_2 + 2)}]} \right), \quad (4.7)$$

onde $\alpha_1 = \lambda - r_1$, $\alpha_2 = \lambda - r_2$ e $\beta = n_1 r_1 - n_1 - n_2$.

Prova: Seja A a matriz de adjacência do grafo G , temos que o polinômio característico

$$RR^T[\lambda] = |\lambda I - A - D| = \begin{vmatrix} (\lambda - r_1)I_{n_1} & -K^T \\ -K & (\lambda - r_2)I_{n_2} \end{vmatrix}, \text{ onde } K \text{ é uma matriz } n_2 \times n_1, \text{ já que}$$

G é bipartido (ver preliminares seção 1.2). Utilizando o lema 4.1.2, temos

$$\begin{aligned} |\lambda I - A - D| &= |(\lambda - r_1)I_{n_1}| \cdot \left| (\lambda - r_2)I_{n_2} - K \frac{I_{n_1}}{(\lambda - r_1)} K^T \right| \\ |\lambda I - A - D| &= (\lambda - r_1)^{n_1 - n_2} \cdot |(\lambda - r_1)(\lambda - r_2)I_{n_2} - KK^T| \\ |\lambda I - A - D| &= (\lambda - r_1)^{n_1 - n_2} \cdot KK^T [(\lambda - r_1) - (\lambda - r_2)]. \end{aligned} \quad (4.8)$$

O polinômio característico $KK^T[\lambda]$ da matriz KK^T pode ser expresso em termos do polinômio característico da matriz de adjacência. Temos,

$$A = \begin{bmatrix} 0 & K^T \\ K & 0 \end{bmatrix}, \quad A^2 = \begin{bmatrix} K^T K & 0 \\ 0 & K K^T \end{bmatrix}.$$

De acordo com o lema 4.1.1,

$$K^T K[\lambda] = \lambda^{n_1 - n_2} K K^T[\lambda]. \quad (4.9)$$

O polinômio característico de

$$A^2[\lambda] = K^T K[\lambda] K K^T[\lambda], \quad (4.10)$$

e como os autovalores de A^2 são os quadrados dos autovalores de A , ou seja,

$$A^2[\lambda^2] = (-1)^{n_1 + n_2} A[\lambda] A[-\lambda].$$

Através de (4.10), temos que

$$\mathbf{K}\mathbf{K}^T[\lambda] = \frac{A^2[\lambda]}{\mathbf{K}^T\mathbf{K}[\lambda]} \quad (4.11)$$

Substituindo (4.9) em (4.11), vem

$$\begin{aligned} \mathbf{K}\mathbf{K}^T[\lambda] &= \frac{A^2[\lambda]}{\lambda^{n_1-n_2}\mathbf{K}\mathbf{K}^T[\lambda]}, \\ [\mathbf{K}\mathbf{K}^T[\lambda]]^2 &= \frac{A^2[\lambda]}{\lambda^{n_1-n_2}}, \\ \mathbf{K}\mathbf{K}^T[\lambda] &= \sqrt{\frac{A^2[\lambda]}{\lambda^{n_1-n_2}}} = \sqrt{(-1)^{n_1+n_2} \lambda^{n_2-n_1} A[\sqrt{\lambda}]A[-\sqrt{\lambda}]}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Como de (4.5) temos que $L(G)[\lambda-2] = \lambda^{m-n} |\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A} - \mathbf{D}| e$,

de (4.8), temos que $|\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A} - \mathbf{D}| = (\lambda - r_1)^{n_1-n_2} \cdot \mathbf{K}\mathbf{K}^T[(\lambda - r_1) - (\lambda - r_2)]$, então

substituindo (4.8) em (4.5) temos

$$LG[\lambda - 2] = \lambda^{m-n} ((\lambda - r_1)^{n_1-n_2} \cdot \mathbf{K}\mathbf{K}^T[(\lambda - r_1) - (\lambda - r_2)]). \quad (4.13)$$

Como o polinômio característico $\mathbf{K}\mathbf{K}^T[\lambda] = \sqrt{(-1)^{n_1+n_2} \lambda^{n_2-n_1} A[\sqrt{\lambda}]A[-\sqrt{\lambda}]}$, fazendo

$\alpha_1 = \lambda - r_1$ e $\alpha_2 = \lambda - r_2$, obtemos

$$\mathbf{K}\mathbf{K}^T[\alpha_1, \alpha_2] = \sqrt{(-1)^{n_1+n_2} (\alpha_1)^{n_2-n_1} (\alpha_2)^{n_2-n_1} A[\sqrt{\alpha_1\alpha_2}]A[-\sqrt{\alpha_1\alpha_2}]}. \quad (4.14)$$

Substituindo (4.14) em (4.13), temos

$$LG[\lambda - 2] = \lambda^\beta (\alpha_1)^{n_1-n_2} \cdot \left(\sqrt{(-1)^{n_1+n_2} (\alpha_1)^{n_2-n_1} (\alpha_2)^{n_2-n_1} A[\sqrt{\alpha_1\alpha_2}]A[-\sqrt{\alpha_1\alpha_2}]} \right),$$

com $m = n_1 r_1$, $n = n_1 + n_2$, tal que $\beta = n_1 r_1 - n_1 - n_2$

$$LG[\lambda - 2] = \lambda^\beta \left(\sqrt{(-1)^{n_1+n_2} (\alpha_1)^{2n_1-2n_2} (\alpha_1)^{n_2-n_1} (\alpha_2)^{n_2-n_1} A[\sqrt{\alpha_1\alpha_2}]A[-\sqrt{\alpha_1\alpha_2}]} \right)$$

$$LG[\lambda - 2] = \lambda^\beta \left(\sqrt{(-1)^{n_1+n_2} (\alpha_1)^{n_1-n_2} (\alpha_2)^{n_2-n_1} A[\sqrt{\alpha_1\alpha_2}]A[-\sqrt{\alpha_1\alpha_2}]} \right)$$

$$LG[\lambda - 2] = \lambda^\beta \left(\sqrt{\left(-\frac{\alpha_1}{\alpha_2} \right)^{n_1-n_2} A[\sqrt{\alpha_1\alpha_2}]A[-\sqrt{\alpha_1\alpha_2}]} \right)$$

$$LG[\lambda] = (\lambda + 2)^\beta \left(\sqrt{\left(-\frac{\alpha_1 + 2}{\alpha_2 + 2} \right)^{n_1-n_2} A[\sqrt{(\alpha_1 + 2)(\alpha_2 + 2)}]A[-\sqrt{(\alpha_1 + 2)(\alpha_2 + 2)}]} \right)$$

Segue do resultado obtido que $A[\lambda] = G[\lambda]. \square$

4.2 Determinação do Polinômio Característico de outros Grafos Similares

4.2.1 Determinação do polinômio característico para o grafo SG

O grafo subdivisão denotado por SG de um grafo G, é o grafo obtido pela inserção de um novo vértice dentro de cada aresta de G.

Ilustramos os grafos G e SG na fig 4.1.

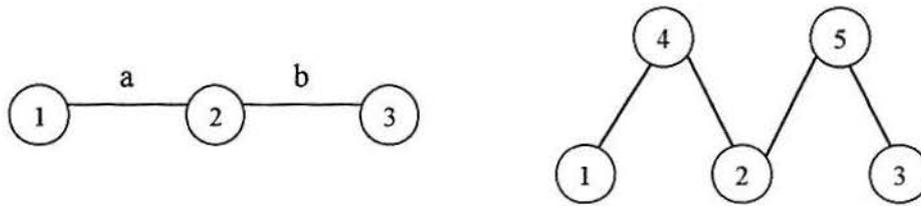


fig 4.1

Podemos dizer que o grafo subdivisão é um grafo bipartido, cuja matriz de adjacência após reordenação dos vértices é da forma

$$\begin{bmatrix} 0 & R^T \\ R & 0 \end{bmatrix}.$$

Teorema 4.2.1 Se G é regular de grau r com n vértices e $m = \frac{1}{2}nr$ arestas, então

$$SG[\lambda] = \lambda^{m-n} G[\lambda^2 - r]. \quad (4.15)$$

Prova: Pelo lema 4.1.2 e por (4.3), se G é regular de grau r temos

$$SG[\lambda] = \begin{bmatrix} \lambda I_m & -R^T \\ -R & \lambda I_n \end{bmatrix} = |\lambda I_m| \cdot \left| \lambda I_n - R \frac{I_m}{\lambda} R^T \right|$$

$$SG[\lambda] = \lambda^{m-n} \cdot |\lambda^2 I_n - RR^T|, \text{ sendo G regular, } RR^T = A + rI_n, \text{ daí,}$$

$$SG[\lambda] = \lambda^{m-n} \cdot |\lambda^2 I_n - A - rI_n| = \lambda^{m-n} \cdot |(\lambda^2 - r)I_n - A|,$$

$$SG[\lambda] = \lambda^{m-n} G[\lambda^2 - r]. \quad \square$$

Para exemplificar, tomamos o grafo regular G de grau 2 com 4 vértices, onde o grafo $S(G)$ correspondente é o grafo regular de grau 2 com 8 vértices. Como $G[\lambda] = \lambda^4 - 4\lambda^2$, temos que $S(G)[\lambda] = \lambda^0 G[\lambda^2 - 2] = (\lambda^2 - 2)^4 - 4(\lambda^2 - 2)^2 = \lambda^8 - 8\lambda^6 + 20\lambda^4 - 16\lambda^2$.

4.2.2 Determinação do polinômio característico para o grafo RG

Seja RG um grafo obtido de G pela adição de um novo vértice correspondente a cada aresta de G e pela união de cada novo vértice aos pontos finais da aresta correspondente a ele.

Os grafos G , e RG estão ilustrados na fig 4.2

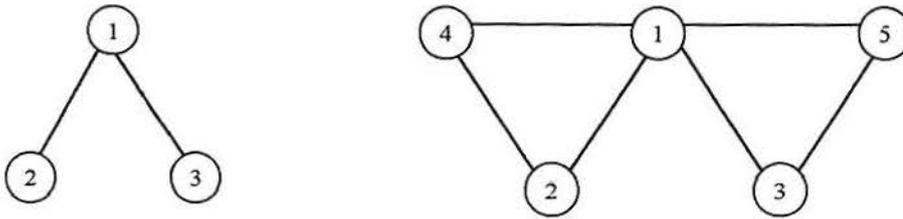


fig 4.2

A matriz de adjacência de RG , após reordenação dos vértices, pode ser escrita como

$$\begin{bmatrix} 0_m & R^T \\ R & A \end{bmatrix}.$$

Teorema 4.2.2 Se G é um grafo regular de grau r com n vértices e $m = \frac{1}{2}nr$ arestas, então

$$RG[\lambda] = \lambda^{m-n} (\lambda + 1)^n \cdot G\left[\frac{\lambda^2 - r}{\lambda + 1}\right]. \quad (4.16)$$

Prova:

$$\begin{aligned} RG[\lambda] &= \begin{vmatrix} \lambda I_m & -R^T \\ -R & \lambda I_n - A \end{vmatrix} = |\lambda I_m| \cdot \left| \lambda I_n - A - R \frac{I_m}{\lambda} R^T \right| \\ &= \lambda^m \cdot \left| \lambda I_n - A - \frac{1}{\lambda} (A + D) \right| = \lambda^m \cdot \left| \lambda I_n - A - \frac{1}{\lambda} (A + rI_n) \right| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \lambda^{m-n} \cdot \left| \lambda^2 I_n - A\lambda - A - rI_n \right| = \lambda^{m-n} \cdot \left| (\lambda^2 - r)I_n - A(\lambda + 1) \right| \\
&= \lambda^{m-n} (\lambda + 1)^n \cdot \left| \left[\frac{\lambda^2 - r}{\lambda + 1} \right] I_n - A \right|
\end{aligned}$$

Logo,

$$RG[\lambda] = \lambda^{m-n} (\lambda + 1)^n \cdot G \left[\frac{\lambda^2 - r}{\lambda + 1} \right]. \square$$

Para exemplificar, tomamos o grafo K_3 cujo polinômio característico é $K_3[\lambda] = \lambda^3 - 3\lambda - 2$, e o correspondente grafo $R(K_3)$ ilustrado na fig 4.3, cujo polinômio característico é

$$R(K_3)[\lambda] = \lambda^0 (\lambda + 1)^3 K_3 \left[\frac{\lambda^2 - 2}{\lambda + 1} \right],$$

$$R(K_3)[\lambda] = (\lambda + 1)^3 \left(\frac{(\lambda - 2)^3}{(\lambda + 1)^3} - 3 \frac{(\lambda - 2)}{(\lambda + 1)} - 2 \right) = \lambda^6 - 9\lambda^4 - 8\lambda^3 + 9\lambda^2 + 6\lambda - 4.$$

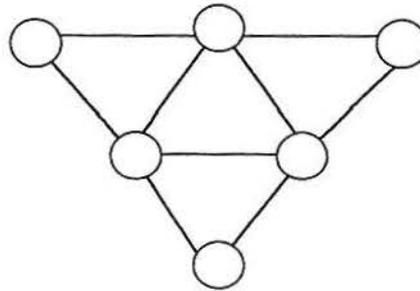


fig 4.3

4.2.3 Determinação do polinômio característico para o grafo QG

Seja QG o grafo obtido de G pela inserção de um novo vértice em cada aresta de G e pela união de arestas aos pares desses novos vértices que repousam nas arestas adjacentes de G .

Ilustramos os grafos G e QG na fig 4.4.

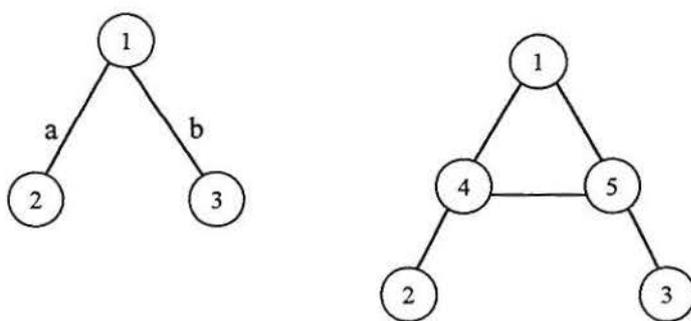


fig 4.4

A matriz de adjacência QG, após reordenação dos vértices, pode ser escrita como

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} & \mathbf{R}^T \\ \mathbf{R} & \mathbf{0}_n \end{bmatrix}.$$

Teorema 4.2.3 Se G é um grafo com n vértices e m arestas, então

$$QG[\lambda] = (\lambda)^{n-m} (\lambda + 1)^m LG \left[\frac{\lambda^2 - 2}{\lambda + 1} \right] \quad (4.17)$$

Prova:

$$\begin{aligned} QG[\lambda] &= \begin{vmatrix} \lambda \mathbf{I}_m - \mathbf{B} & -\mathbf{R}^T \\ -\mathbf{R} & \lambda \mathbf{I}_n \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} \lambda \mathbf{I}_m - \mathbf{B} + \mathbf{R}^T \mathbf{R} & -(\lambda + 1) \mathbf{R}^T \\ -\mathbf{R} & \lambda \mathbf{I}_n \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} \lambda \mathbf{I}_m - \mathbf{R}^T \mathbf{R} + 2\mathbf{I}_m + \mathbf{R}^T \mathbf{R} & -(\lambda + 1) \mathbf{R}^T \\ -\mathbf{R} & \lambda \mathbf{I}_n \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} (\lambda + 2) \mathbf{I}_m & -(\lambda + 1) \mathbf{R}^T \\ -\mathbf{R} & \lambda \mathbf{I}_n \end{vmatrix} \\ &= |(\lambda + 2) \mathbf{I}_m| \cdot \left| \lambda \mathbf{I}_n - \mathbf{R} \frac{\mathbf{I}_m}{(\lambda + 2)} \mathbf{R}^T (\lambda + 1) \right| \\ &= (\lambda + 2)^m \cdot \left| \lambda \mathbf{I}_n - \frac{1}{(\lambda + 2)} \mathbf{R} \mathbf{R}^T (\lambda + 1) \right| \\ &= (\lambda + 2)^{m-n} \cdot \left| (\lambda^2 + 2\lambda) \mathbf{I}_n - \mathbf{R} \mathbf{R}^T (\lambda + 1) \right| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= (\lambda + 2)^{m-n} (\lambda + 1)^n \cdot \left| \left(\frac{\lambda^2 + 2\lambda}{\lambda + 1} \right) I_n - A - D \right| \\
&= (\lambda + 2)^{m-n} (\lambda + 1)^n \left(\frac{\lambda^2 + 2\lambda}{\lambda + 1} \right)^{n-m} \text{LG} \left[\frac{\lambda^2 - 2}{\lambda + 1} \right] \text{ ou ainda sob a forma} \\
\text{QG}[\lambda] &= (\lambda + 1)^n (\lambda + 2)^{m-n} \text{LG} \left[\frac{\lambda^2 - 2}{\lambda + 1} \right].
\end{aligned}$$

Corolário 4.2.4 Se G é regular de grau r , então

$$\text{QG}[\lambda] = (\lambda + 1)^n (\lambda + 2)^{m-n} G \left[\frac{\lambda^2 - (r-2)\lambda - r}{\lambda + 1} \right]. \quad (4.18)$$

Prova: Substituindo (4.6) em (4.17), temos

$$\begin{aligned}
\text{QG}[\lambda] &= \lambda^{n-m} (\lambda + 1)^m \left(\frac{\lambda^2 - 2}{\lambda + 1} + 2 \right)^{m-n} G \left[\frac{\lambda^2 - 2}{\lambda + 1} - r + 2 \right] \\
&= \lambda^{n-m} (\lambda + 1)^m \left(\frac{\lambda^2 - 2 + 2\lambda + 2}{\lambda + 1} \right)^{m-n} G \left[\frac{\lambda^2 - 2 - \lambda r - r + 2\lambda + 2}{\lambda + 1} \right] \\
&= \lambda^{n-m} (\lambda + 1)^m \frac{\lambda^{m-n} (\lambda + 2)^{m-n}}{(\lambda + 1)^{m-n}} G \left[\frac{\lambda^2 - 2 - \lambda r - r + 2\lambda + 2}{\lambda + 1} \right] \\
&= (\lambda + 1)^n (\lambda + 2)^{m-n} G \left[\frac{\lambda^2 - (r-2)\lambda - r}{\lambda + 1} \right]. \quad \square
\end{aligned}$$

Ilustramos o grafo regular de grau 2 com 4 vértices e o correspondente grafo QG na fig 4.5, cujo polinômio característico é

$$\begin{aligned}
\text{QG}[\lambda] &= (\lambda + 1)^4 (\lambda + 2)^0 G \left[\frac{\lambda^2 - 2}{\lambda + 1} \right] = (\lambda + 1)^4 \left[\frac{(\lambda^2 - 2)^4}{(\lambda + 1)^4} - 4 \frac{(\lambda^2 - 2)^2}{(\lambda + 1)^2} \right] = \\
&= \lambda^8 - 12\lambda^6 - 8\lambda^5 + 36\lambda^4 + 32\lambda^3 - 32\lambda^2 - 32\lambda.
\end{aligned}$$

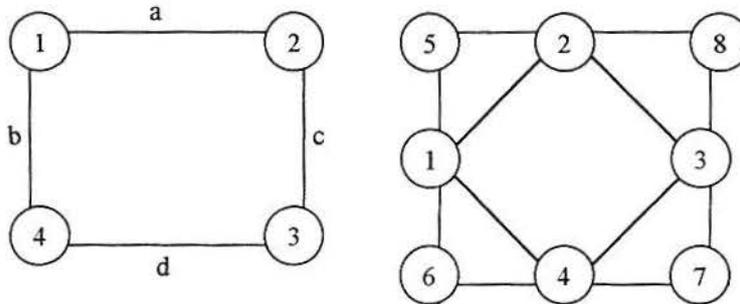


fig 4.5

4.2.4 Determinação do polinômio característico para o grafo TG

O grafo total de um grafo G denotado por TG, é o grafo cujo conjunto de vértices é a união do conjunto de vértices com o conjunto de arestas de G, com dois vértices de TG sendo adjacentes se, e somente se, os correspondentes elementos de G são adjacentes ou incidentes.

É fácil verificar, que se ordenarmos os vértices convenientemente, a matriz de adjacência de TG pode ser representada da seguinte forma

$$\begin{bmatrix} A & R \\ R^T & B \end{bmatrix}.$$

Ilustramos os grafos G, LG e TG, respectivamente na fig 4.6

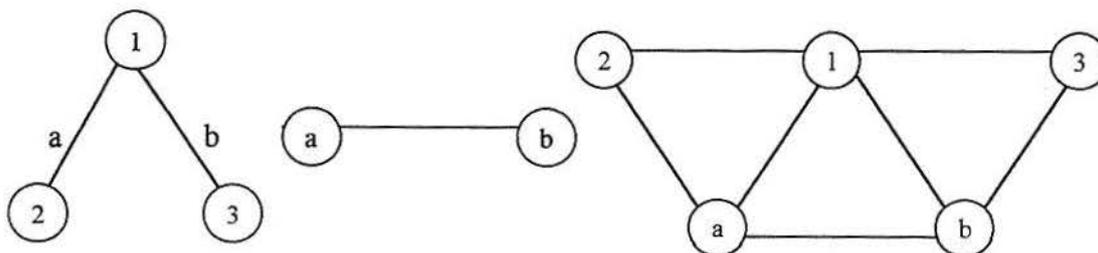


fig 4.6

Teorema 4.2.5 Se G é regular de grau r e possui n vértices e m arestas, então

$$TG[\lambda] = (\lambda + 2)^{m-n} \prod_{i=1}^n (\lambda^2 - (2\lambda_i + r - 2)\lambda + \lambda_i^2 + (r - 3)\lambda_i - r). \quad (4.19)$$

Prova:

$$\begin{aligned} TG[\lambda] &= \begin{vmatrix} \lambda I - A & -R \\ -R^T & \lambda I - B \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \lambda I + rI - RR^T & -R \\ -R^T & \lambda I + 2I - R^T R \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} (\lambda + r)I - RR^T & -R \\ -(\lambda + r + 1)R^T + R^T RR^T & (\lambda + 2)I \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} (\lambda + r)I - RR^T + \frac{R}{\lambda + 2}(-(\lambda + r + 1)R^T + R^T RR^T) & 0 \\ -(\lambda + r + 1)R^T + R^T RR^T & (\lambda + 2)I \end{vmatrix} \\ &= \left| (\lambda + r)I - RR^T + \frac{R}{\lambda + 2}(-(\lambda + r + 1)R^T + R^T RR^T) \right| \cdot |(\lambda + 2)I_m| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left| \left(\lambda I + rI - RR^T \frac{1}{\lambda + 2} (-(\lambda + r + 1)RR^T + RR^T RR^T) \right) \cdot |(\lambda + 2)I_m| \right| \\
&= \left| \left(\lambda I - A + \frac{1}{\lambda + 2} (-(\lambda + r + 1)(A + rI) + (A + rI)(A + rI)) \right) \cdot |(\lambda + 2)I_m| \right| \\
&= \left| \left(\lambda I - A + \frac{1}{\lambda + 2} ((A + rI)(-\lambda - r - 1)I + (A + rI)) \right) \cdot |(\lambda + 2)I_m| \right| \\
&= (\lambda + 2)^{m-n} \left| A^2 - (2\lambda - r + 3)A + (\lambda^2 - (r - 2)\lambda - r)I \right| \\
&= (\lambda + 2)^{m-n} \prod_{i=1}^n (\lambda_i^2 - (2\lambda - r + 3)\lambda_i + \lambda^2 - (r - 2)\lambda - r) \\
&= (\lambda + 2)^{m-n} \prod_{i=1}^n (\lambda^2 - (2\lambda_i + r - 2)\lambda + \lambda_i^2 + (r - 3)\lambda_i - r);
\end{aligned}$$

λ_i ($i = 1, \dots, n$) sendo os autovalores de A . Assim, se G é grafo regular de grau r ($r > 1$) e tendo n vértices e m arestas, então TG possui $m-n$ autovalores iguais a -2 e os seguintes autovalores

$$\frac{1}{2} \left(2\lambda_i + r - 2 \pm \sqrt{4\lambda_i + r^2 + 4} \right) \quad (i = 1, \dots, n). \quad \square$$

Podemos verificar facilmente que o grafo $T(K_3)$ é isomorfo ao grafo $L[K_4]$ e portanto possuem o mesmo polinômio característico.

5 POLINÔMIO CARACTERÍSTICO DE ÁRVORES

Neste capítulo determinamos o polinômio característico de árvores, que são grafos conexos e acíclicos. Apresentamos alguns procedimentos conhecidos para esse cálculo e comparamos esses algoritmos estimando o tempo computacional de cada um. Finalmente, apresentamos um algoritmo eficiente e elegante que determina o polinômio característico de árvores utilizando a interpolação polinomial.

5.1 Métodos conhecidos para obtenção do Polinômio Característico de Árvores.

Balasubramanian em [2], desenvolveu um método para obter o espectro de árvores químicas, e também a possibilidade de determinar se duas árvores são isoespectrais, pois um dos desafios da teoria de grafos é o reconhecimento de grafos isoespectrais. Grafos isoespectrais são grafos que podem ser topologicamente não equivalentes mas ainda assim, possuir espectros idênticos. Portanto moléculas isoespectrais terão propriedades termodinâmicas similares.

O método desenvolvido está baseado no fato de que qualquer árvore pode ser podada nos galhos sucessivamente até que se possa obter uma árvore sem galhos, esta árvore pode ser decomposta mais adiante por um produto enraizado. O polinômio característico da árvore é obtido em termos do polinômio característico dos galhos e da árvore sem galhos. Este produto enraizado foi apresentado por Balasubramanian em [3] semelhante ao produto enraizado definido por Godsil e McKay [11], onde é definida uma nova matriz de adjacência A . O polinômio característico do produto enraizado é o determinante da nova matriz de adjacência A . Embora, o procedimento utilizado para o cálculo do polinômio característico diminui a ordem do determinante, ainda assim, o procedimento está baseado em calcular determinantes, o que é menos eficiente do que se usarmos operações elementares sobre as linhas para reduzir a matriz A a forma triangular. De qualquer maneira o número de determinantes a ser calculado depende do número de galhos da raiz ao passo que a profundidade da árvore determina o tamanho dos

determinantes a serem calculados. Essas considerações nos levam a supor que o algoritmo baseado nesse procedimento possui comportamento exponencial.

O teorema enunciado abaixo aparece em [6] como uma forma de redução do cálculo do polinômio característico.

Teorema 5.1.1: Seja v_1 um vértice de grau 1 de um grafo G e seja v_2 o vértice adjacente a v_1 . Seja G_1 um subgrafo induzido obtido de G pela retirada do vértice v_1 , sendo o subgrafo induzido G_2 pela retirada dos vértices v_1 e v_2 . Então:

$$G[\lambda] = \lambda G_1[\lambda] - G_2[\lambda] \quad (5.1)$$

Prova: Podemos assumir que os vértices estão ordenados v_1, v_2, \dots, v_n de tal modo que $v_{n-1} = w$ e $v_n = v$. Então $\lambda I - A$ tem a seguinte forma

$$\begin{bmatrix} \lambda & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & & & 0 \\ \vdots & & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & \lambda & -1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & \lambda \end{bmatrix}$$

fazendo o desenvolvimento de Laplace na n -ésima linha de $\lambda I - A$, temos,

$$\begin{aligned} \det(\lambda I - A) &= \lambda(-1)^{n+n} \begin{vmatrix} \lambda & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \lambda \end{vmatrix} + (-1) \cdot (-1)^{n-1+n} \begin{vmatrix} \lambda & & 0 \\ \vdots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \lambda & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & -1 \end{vmatrix} \\ &= \lambda \begin{vmatrix} \lambda & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \lambda \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} \lambda & \dots & \dots \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & \lambda \end{vmatrix} = \lambda G_1[\lambda] - G_2[\lambda]. \square \end{aligned}$$

Assim, pela recursão do teorema acima, o polinômio característico de uma árvore pode ser determinado. Vamos então, mostrar o seguinte algoritmo:

Algoritmo 1 Este algoritmo possibilita calcular o determinante $\det A$, onde A é a matriz de adjacência de uma árvore e n o número de vértices.

$\det(A,n)$

1. Se $n=1$

então retorne λ

2. $B := A$ menos a linha e coluna correspondentes ao vértice de grau 1 de maior índice

3. $C := B$ menos a da linha e coluna correspondente ao vértice adjacente ao vértice anterior

4. Retorne $\lambda \det(B,n-1) - \det(C,n-2)$.

Mais especificamente, se fizermos $T(n)$ a complexidade do algoritmo, a relação de recorrência $T(n) = T(n-1) + T(n-2)$ nos conduz a $T(n) > \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^n$, pois $T(n)$ satisfaz a relação de Fibonacci. Embora simples a maneira de determinar o polinômio característico, transforma um problema de tamanho n , em problemas de tamanho $n-1$ e $n-2$, sendo este método em tempo exponencial.

Se aplicarmos recursivamente o teorema na árvore da fig 5.1

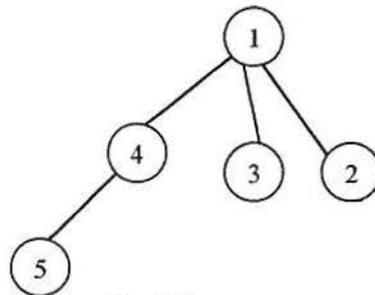


fig 5.1

temos

$$\det(\lambda I - A) = \begin{vmatrix} \lambda & -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & \lambda & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \lambda & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & \lambda \end{vmatrix} = \lambda \begin{vmatrix} \lambda & -1 & -1 & -1 \\ -1 & \lambda & 0 & 0 \\ -1 & 0 & \lambda & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \lambda \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} \lambda & -1 & -1 \\ -1 & \lambda & 0 \\ - & 0 & \lambda \end{vmatrix} = \lambda \begin{vmatrix} \lambda & -1 & -1 & -1 \\ -1 & \lambda & 0 & 0 \\ -1 & 0 & \lambda & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \lambda \end{vmatrix} +$$

$$- \left\{ \begin{vmatrix} \lambda & -1 \\ -1 & \lambda \end{vmatrix} - |\lambda| \right\} = \lambda^5 - 4\lambda^3 + 2\lambda.$$

Wilkinson mostra ([21] p.411) que para uma matriz A , $\det(\lambda I - A)$ pode ser constituído em $O(n^3)$ multiplicações. O polinômio é obtido por fórmula de recorrência em que é determinado sucessivamente o polinômio característico de cada submatriz principal H_r ($r = 1, \dots, n$) de H . Denotaremos por $p_r(\lambda)$ o polinômio característico da submatriz de ordem r , assim, expandindo $\det(\lambda I - H_r)$ em termos das r -ésimas colunas temos:

$$\begin{aligned} p_0(\lambda) &= 1 \\ p_1(\lambda) &= h_{11} - \lambda \\ p_2(\lambda) &= (h_{22} - \lambda)p_1(\lambda) - h_{12}K_2 \\ &\dots\dots\dots \\ p_r(\lambda) &= (h_{rr} - \lambda)p_{r-1}(\lambda) - h_{r-1,r}K_r p_{r-2}(\lambda) + \dots\dots\dots + (-1)^{r-1}h_{1r}K_r K_{r-1}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Para obter os coeficientes de $p_r(\lambda)$ devemos guardar os $p_i(\lambda)$ ($i = 1, \dots, r-1$).

Existem $\frac{r^2}{2}$ multiplicações para calcular $p_r(\lambda)$ e o cálculo completo do polinômio característico envolve $\frac{n^3}{6}$ operações, ou seja, $O(n^3)$.

5.2 Um Método Geométrico

Jacobs e Trevisan em [15], desenvolveram um algoritmo simples da $O(n^2 \log n)$ para encontrar o polinômio característico da matriz de adjacência de uma árvore T , onde associamos a cada vértice v , a função racional $a(v) = \frac{r}{s}$, onde r e s pertencem ao anel $Q[\lambda]$.

A validade do algoritmo para encontrar o polinômio característico de árvores está baseada em dois teoremas bem conhecidos da Álgebra Linear.

Teorema 5.1.2 Se $B = [b_{ij}]$ for obtido de $A = [a_{ij}]$ adicionando a cada elemento da r -ésima linha (coluna) de A c vezes o elemento correspondente da s -ésima linha (coluna) $r \neq s$ de A , então, $|B| = |A|$.

Teorema 5.1.3 Se uma matriz $A[a_{ij}]$ é triangular inferior (superior), então

$$|A| = a_{11}a_{22}\dots a_{nn};$$

ou seja, o determinante de uma matriz triangular é o produto dos elementos sobre a diagonal principal.

As demonstrações dos teorema 5.1.2 e 5.1.3 podem ser vista com detalhes em [16].

Seja T uma árvore enraizada, com n vértices e matriz de adjacência denotada por A . Sempre é possível ordenar os vértices de tal forma que os pais (vértices que possuem crianças), tenham ordem superior a de suas crianças. O objetivo é levar a matriz $\lambda I - A$ à forma triangularizada, e então aplicar o teorema 5.1.3.

Ao fazermos as operações elementares para eliminarmos os elementos abaixo da diagonal, o termo sobre a diagonal terá valor

$$a(v) = \lambda - \sum_{c \in C} \frac{1}{a(c)}, \quad (5.3)$$

onde C representa o conjunto das crianças. A justificativa de que esse processo de eliminação Gaussiana de fato não produz outros efeitos pode ser visto em [10] e [14]. O método descrito será utilizado na próxima seção a fim de se obter uma demonstração mais simplificada para aquele procedimento.

Após todos os vértices serem processados, o polinômio característico é então calculado através do produto de todas as funções $a(v)$, tal que:

$$p[\lambda] = \prod_{v \in V} a(v) \quad (5.4)$$

O método proposto opera diretamente na árvore. Para exemplificar faremos o cálculo do polinômio da árvore da fig (5.2).

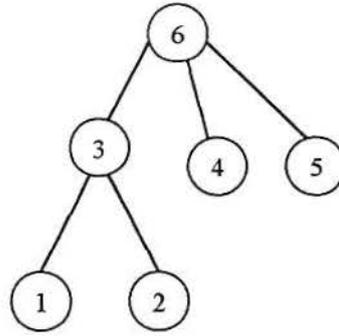
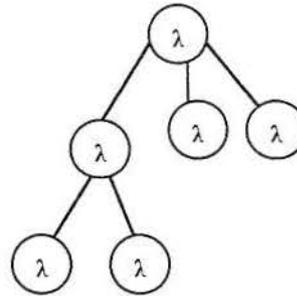


fig 5.2

Com respectiva matriz de adjacência A e a árvore correspondente

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



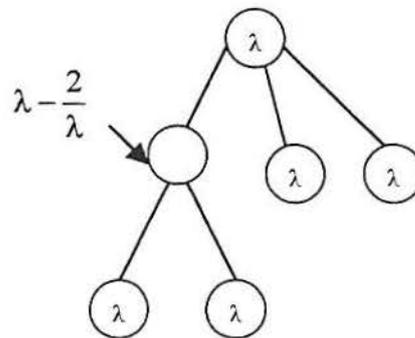
A cada vértice da árvore assinalamos a variável λ , que é representado na matriz de adjacência pelos elementos sobre a diagonal principal. Começamos pelas folhas e notamos que a submatriz correspondente já está triangularizada. Em seguida, subimos, um nível e aplicamos a equação (5.3). Temos, então

$$v_1 = v_2 = \lambda, \text{ e}$$

$$v_3 = \lambda - \left[\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda} \right] = \lambda - \frac{2}{\lambda}.$$

A matriz e a árvore correspondente são

$$\begin{bmatrix} \lambda & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda - \frac{2}{\lambda} & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & \lambda \end{bmatrix}$$



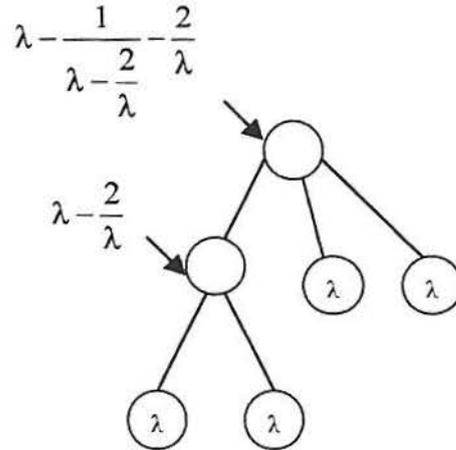
Continuamos processando os vértices de forma que

$$v_4 = v_5 = \lambda,$$

$$v_6 = \lambda - \left[\frac{1}{\lambda - \frac{2}{\lambda}} + \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda} \right] = \lambda - \frac{1}{\lambda - \frac{2}{\lambda}} - \frac{2}{\lambda}$$

onde a matriz equivalente a matriz A, ou a matriz triangularizada é

$$\begin{bmatrix} \lambda & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda - \frac{2}{\lambda} & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda - \frac{1}{\lambda - \frac{2}{\lambda}} - \frac{2}{\lambda} \end{bmatrix}$$



Efetuada o produto de todas as seis funções racionais da fig(5.2), obtemos

$$p[\lambda] = \lambda^6 - 5\lambda^4 + 4\lambda^2.$$

Uma desvantagem deste método é que as expressões aritméticas vão aumentando, tornando a dificuldade maior com o aumento da profundidade da árvore. Por exemplo, se outro vértice estivesse ligado sobre a raiz da fig(5.1), precisaríamos calcular:

$$\lambda - \frac{1}{\lambda - \frac{1}{\lambda - \frac{2}{\lambda}} - \frac{2}{\lambda}}$$

A idéia então é refinar esse método para simplificar as expressões aritméticas e obter um algoritmo na $O(n^2 \log n)$.

Para exemplificar como funciona o método vamos novamente determinar o polinômio característico da árvore da fig(5.2).

A idéia é transformar a matriz de adjacência A em uma matriz triangularizada de maneira que as expressões aritméticas dos vértices que possuem crianças são simplificadas.

Assim, temos

$$\lambda I - A = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & \lambda & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & \lambda \end{bmatrix}$$

sendo equivalente a matriz

$$B = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda - \frac{2}{\lambda} & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & \lambda \end{bmatrix}$$

Como queremos diminuir as expressões aritméticas, vamos multiplicar a linha 3 da matriz B por λ^2 , ou seja, pelo produto do polinômio característico das crianças correspondente aos vértices 1 e 2. Para que o determinante da matriz B não altere devemos dividir a linha 1 e a linha 2 por (λ) . Nesse estágio a matriz é da forma

$$B_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\frac{1}{\lambda} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{1}{\lambda} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda^3 - 2\lambda & 0 & 0 & -\lambda^2 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & \lambda \end{bmatrix}$$

Podemos observar que o elemento a_{33} da matriz B_1 corresponde ao polinômio característico da subárvore enraizada pelo vértice 3. Finalmente, a linha 6 (correspondente ao vértice 6) através de operações elementares com as linhas correspondentes as suas crianças transforma a matriz B_1 em

$$B_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\frac{1}{\lambda} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{1}{\lambda} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda^3 - 2\lambda & 0 & 0 & -\lambda^2 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda - \frac{\lambda^2}{\lambda^3 - 2\lambda} - \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda} \end{bmatrix}$$

ou ainda

$$B_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\frac{1}{\lambda} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{1}{\lambda} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -\frac{\lambda^2}{\lambda^3 - 2\lambda} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -\frac{1}{\lambda} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -\frac{1}{\lambda} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda^2(\lambda^3 - 2\lambda) \left[\lambda - \frac{\lambda^2}{\lambda^3 - 2\lambda} - \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda} \right] \end{bmatrix}$$

Logo o determinante, é o produto $(\lambda^3 - 2\lambda)\lambda^2 \left[\lambda - \frac{\lambda^2}{\lambda^3 - 2\lambda} - \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda} \right] = \lambda^6 - 5\lambda^4 + 4\lambda^2$. Se

houvesse outro vértice ligado sobre a raiz procederíamos da mesma maneira.

Assim, vamos usar a seguinte notação. Para algum vértice v , consideramos d_v o polinômio característico correspondente à subárvore T_v enraizada por v e d'_v representa o produto do polinômio característico das árvores enraizadas pelas crianças de v . Então, se v é uma folha, definimos $d'_v = 1$.

Particionamos os vértices T_v nos seguintes conjunto disjuntos: $\{v\}$ e as subárvores enraizadas por suas crianças. Então a equação (5.4) implica em:

$$d_v = d'_v a(v). \quad (5.5)$$

Consideramos agora para melhor compreendermos o método, um vértice v contendo três crianças c_1 , c_2 e c_3 . Seja r a função racional $a(v)$ em (5.3). Sejam r_1 , r_2 e r_3 denotados por $a(c_1)$, $a(c_2)$ e $a(c_3)$, respectivamente. Por definição temos

$$d'_v = d_{c_1} d_{c_2} d_{c_3} \quad (5.6)$$

por (5.5),

$$d_{c_i} = d'_{c_i} r_i, \quad (5.7)$$

para cada i . Usando (5.5), (5.3) e (5.7), temos

$$\begin{aligned} d_v &= d'_v r \\ &= d'_v \left(\lambda - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_3} \right) \\ &= \lambda d'_v - \frac{d'_v d'_{c_1}}{d_{c_1}} - \frac{d'_v d'_{c_2}}{d_{c_2}} - \frac{d'_v d'_{c_3}}{d_{c_3}}. \end{aligned}$$

Generalizando temos:

$$d'_v = \begin{cases} 1 & \text{se } v \text{ é uma folha,} \\ d_{c_1} \dots d_{c_k} & \text{se } v \text{ possui crianças } c_1, \dots, c_k, \end{cases} \quad (5.8)$$

$$d_v = \begin{cases} \lambda & \text{se } v \text{ é uma folha,} \\ \lambda d'_v - \sum_{i=1}^k \frac{d'_v d'_{c_i}}{d_{c_i}} & \text{se } v \text{ possui crianças } c_1, \dots, c_k. \end{cases} \quad (5.9)$$

Então, o algoritmo processa a árvore de baixo para cima; antes que um vértice v seja processado, suas crianças deverão ser processadas. O objetivo é calcular d_w , onde w é a raiz. Fazemos isso calculando sucessivamente d'_v (utilizando 5.8) e d_v (utilizando 5.9), para todos os vértices v . Note que os fatores do lado direito de (5.8) já foram calculados pois a ordenação é feita de baixo para cima. Esse algoritmo envolve dois tipos de cálculos, dados pelas equações (5.8) e (5.9).

Um ponto importante é que em (5.9) o cálculo de $\frac{d'_v d'_{c_i}}{d_{c_i}}$ é obtido primeiro dividindo d'_v por d_{c_i} por se obter uma divisão exata e produzir um polinômio. Então, multiplicamos este resultado por d'_{c_i} o qual já foi calculado num estágio anterior. É

tentador calcular $\frac{d'_v}{d_{c_i}}$ como um produto

$$d_{c_1} \dots d_{c_{i-1}} d_{c_{i+1}} \dots d_{c_k},$$

e apesar de que isto possa simplificar certos cálculos pequenos, o problema é que k pode ser tão grande quanto n . Isto adiciona uma ordem extra de magnitude à complexidade no pior caso do algoritmo.

Para exemplificar, vamos considerar a árvore mostrada na figura (5.3), cujos vértices identificamos com os números inteiros. Os vértices numerados de 1 a 8 são folhas, então por (5.8) e (5.9) obtemos

$$\begin{aligned} d'_i &= 1, & \text{para } 1 \leq i \leq 8 \\ d_i &= \lambda, & \text{para } 1 \leq i \leq 8. \end{aligned}$$

Aplicando (5.8) e (5.9) nos vértices restantes, temos

$$\begin{aligned} d'_9 &= d_1 d_2 d_3 d_4 = \lambda^4 \\ d_9 &= \lambda d'_9 - \frac{d'_9}{d_1} - \frac{d'_9}{d_2} - \frac{d'_9}{d_3} - \frac{d'_9}{d_4} = \lambda^5 - 4\lambda^3 \\ d'_{10} &= \lambda^2 \\ d_{10} &= \lambda^3 - 2\lambda \\ d'_{11} &= d_9 = \lambda^5 - 4\lambda^3 \\ d_{11} &= \lambda d'_{11} - \frac{d'_{11}}{d_9} d'_9 = \lambda^6 - 5\lambda^4 \\ d'_{12} &= d_{10} d_7 d_8 = \lambda^5 - 2\lambda^3 \\ d_{12} &= \lambda d'_{12} - \frac{d'_{12}}{d_7} d'_7 - \frac{d'_{12}}{d_8} d'_8 - \frac{d'_{12}}{d_{10}} d'_{10} = \lambda^6 - 5\lambda^4 + 4\lambda^2 \\ d'_{13} &= d_{11} d_{12} = \lambda^{12} - 10\lambda^{10} + 29\lambda^8 - 20\lambda^6 \\ d_{13} &= \lambda d'_{13} - \frac{d'_{13}}{d_{11}} d'_{11} - \frac{d'_{13}}{d_{12}} d'_{12}. \end{aligned}$$

Desenvolvendo esta última expressão, obtemos o polinômio característico simplificado:

$$\lambda^{13} - 12\lambda^{11} + 45\lambda^9 - 54\lambda^7 + 16\lambda^5$$

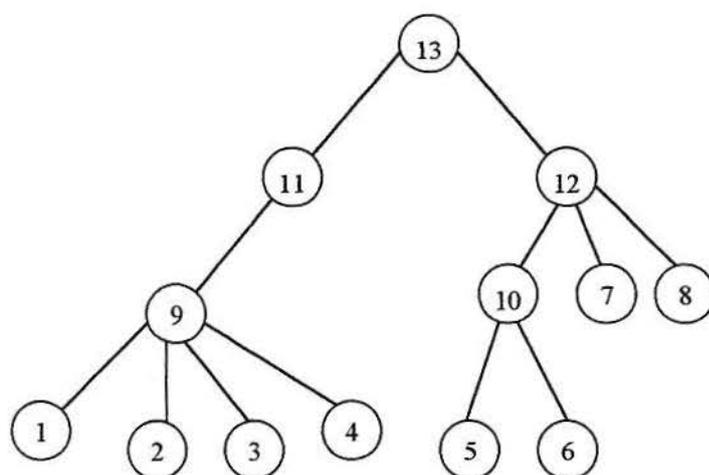


fig 5.3

Examinemos o conjunto de equações dadas por (5.8) e (5.9) nas v variáveis. Calculemos o número de divisões e multiplicações polinomiais. Quando uma equação simples é vista isoladamente, o número de operações depende de k (número de crianças). Se na análise presumirmos sempre o pior para k , somos levados a um limite superior desnecessariamente grande. Ao invés disso, consideramos todas as $2n$ equações de uma vez.

Podemos observar que cada vértice (exceto a raiz) aparece no lado direito da equação da forma (5.8). Portanto os lados direitos de (5.8) envolvem no máximo $n-2$ multiplicações polinomiais tendo o grau no máximo n .

Depois, consideramos o lado direito de (5.9). O produto $\lambda d'_v$ é trivial, então consideramos as expressões $\frac{d'_v}{d_{c_i}}$, que são obtidas através de uma divisão e multiplicação polinomial.

Vamos então questionar qual o tempo total sobre todas as equações. Qual o custo de fazer essas operações? Novamente, observamos que cada vértice (exceto a raiz) aparece exatamente uma vez, assim como alguns c_i . Portanto, coletivamente, realizamos $n-1$ multiplicações polinomiais e $n-1$ divisões polinomiais, cujos graus são menores ou iguais a n .

A matriz acima, possui a última linha e coluna correspondente a v_n , raiz da árvore. Os vértices $v_1, v_2, v_3, \dots, v_n$ deverão ser ordenados de tal forma que cada pai tenha ordem superior à de suas crianças. Levaremos a matriz M à forma triangularizada e então aplicamos o teorema 5.1.3. Os blocos na diagonal são submatrizes correspondentes às subárvores.

Assim, representaremos a submatriz

$$\begin{matrix} & & i & & j & & \\ & & & & & & \\ & i & & & & & \\ & & \alpha & & 1 & & \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & & \\ & j & & & 1 & & \alpha \end{matrix} \quad \text{de } M, \text{ onde } v_j$$

corresponde ao vértice pai, e v_i ao vértice que corresponde sua criança. De acordo com o processo de triangularização v_j deverá ter seus elementos anteriores ao elemento a_{jj} todos nulos. Se fizermos a operação elementar $L_j \leftarrow L_j - \frac{1}{\alpha}L_i$, ou seja, o algoritmo processa o vértice pai, efetuando operações elementares com as linhas correspondentes às suas crianças tendo seu elemento $a_{ji} = \alpha - \frac{1}{\alpha}$. Podemos observar que a submatriz correspondente às folhas já se encontra na forma triangularizada.

Quando houver uma criança de valor zero, ou seja, $a_{ii} = 0$, teremos a submatriz de

representação

$$\begin{matrix} & & i & & j & & \\ & & & & & & \\ & i & & & & & \\ & & 0 & & 1 & & \\ & & 1 & & \alpha & & \\ & m & & & & & \\ & & 1 & & & & \alpha \end{matrix}, \text{ onde a operação elementar efetuada passa a ser}$$

$L_i \leftarrow L_i + L_j$, ou seja, o elemento $a_{ii} = 0$ passa a ser $a_{ii} = 1$, o que é garantido pelo elemento $a_{ji} = 1$. Ao efetuar a operação acima, o elemento a_{ij} passa a ter valor $1 + \alpha$, pois originalmente o elemento $a_{ij} = 1$ e $a_{jj} = \alpha$. Embora nesta etapa do processo os elementos anteriores ao elemento da diagonal principal da linha i não sejam mais todos nulos, ou

então, que a matriz nesse estágio não se encontra mais na forma triangularizada, afirmamos que o elemento a_{ij} terá sempre valor igual a 1. Isto ocorre, porque se $a_{ik}=1$ para algum $k < i$, estes vértices v_k são irmãos do vértice v_i e, portanto, não são adjacentes, significando que $a_{ki} = 0$, para todo k nessas condições. Logo, podemos fazer operações elementares para anular tais elementos sem que o elemento sobre a diagonal da linha i se altere. Assim, o determinante não se altera, não havendo a necessidade de fazer as operações elementares para anular tais colunas na linha i .

Continuamos a triangularizar a matriz fazendo uma nova operação $L_j \leftarrow L_j - L_i$ e portanto $a_{jj} = a_{jj} - a_{ij} = \alpha - (1 + \alpha) = -1$.

A linha j passa a ter o elemento $a_{jj} = -1$ e todos os outros nulos. A linha j cujo elemento $a_{jj} = -1$ é então utilizada, através de uma operação elementar, para anular o elemento a_{mi} , onde o vértice m é o pai do vértice i (se houver) o que não altera o elemento a_{mm} , já que a linha j possui todos seus elementos nulos com exceção do elemento $a_{jj} = -1$. Podemos concluir que, a criança com valor zero passará ter valor 1 e o pai, valor -1 . A operação correspondente na árvore significa que o vértice pai cujo valor é -1 deixa de ser adjacente às suas crianças, assim a linha j não se liga mais com as crianças, ou seja, as arestas são rompidas. No momento em que as arestas são rompidas passamos a ter uma floresta.

Vamos exemplificar o caso em que a árvore possui uma criança com valor zero para um determinado escalar α . Note que o procedimento pode ser executado diretamente na árvore sem a necessidade de armazenar a matriz de adjacência. Ilustramos o procedimento com a árvore da fig 5.4.

Seja a árvore da figura 5.4.

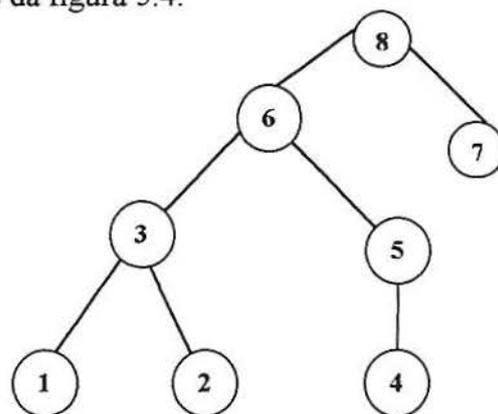
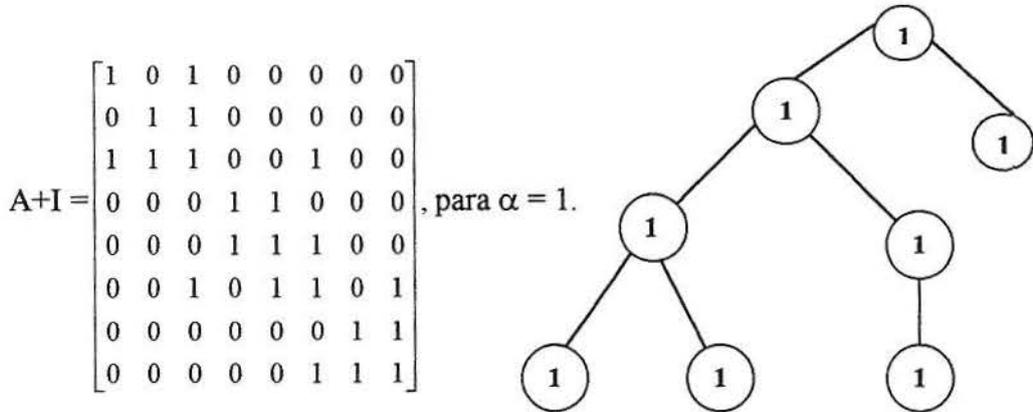


fig 5.4

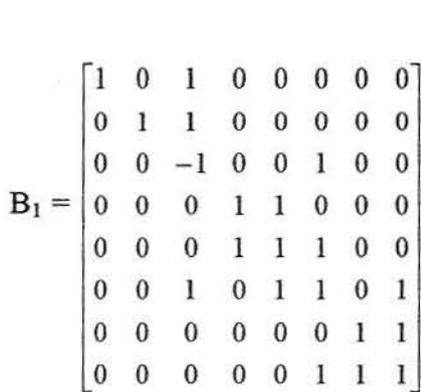
com respectiva matriz $A+I$ e a árvore correspondente. Os elementos da diagonal da matriz são representados pelo valor no vértice do grafo, todos são inicializados com o valor α .



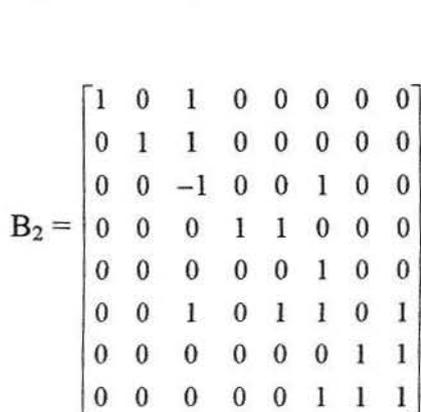
Transformando a matriz $A+I$ através de operações elementares, obtemos

$$L_3 \leftarrow L_3 - L_1$$

$$L_3 \leftarrow L_3 - L_2$$

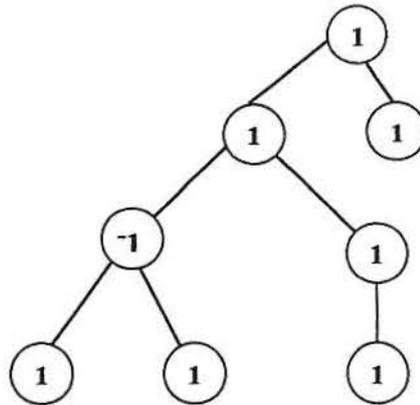


$$L_5 \leftarrow L_5 - L_4$$



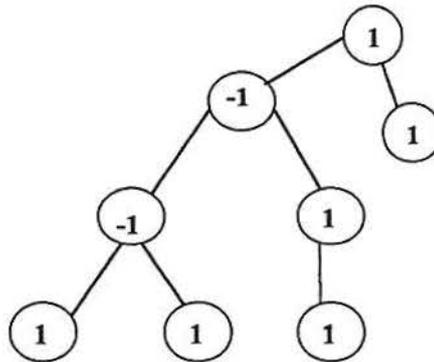
$$L_5 \leftarrow L_5 + L_6$$

$$B_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$



$$L_6 \leftarrow L_6 - L_5$$

$$B_4 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

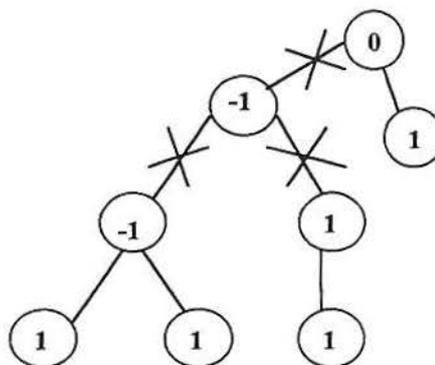


Finalmente, obtemos a matriz B_5 triangularizada e a árvore correspondente, cujo determinante é igual a zero. Podemos observar também o rompimento das arestas adjacentes ao vértice 6. Assim, temos

$$L_8 \leftarrow L_8 - L_6$$

$$L_8 \leftarrow L_8 - L_7$$

$$B_5 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$



Quando houver mais de uma criança com valor zero, procedemos do mesmo modo, a primeira criança nula opera com a linha pai e passa ter valor igual a 1 ficando somente ligada ao pai, ou seja, anteriormente ao elemento sobre a diagonal principal os vértices já foram processados de forma que são todos nulos e os outros elementos após o elemento sobre a diagonal principal serão nulos pois não há adjacência entre vértices irmãos, assim o único vínculo é o vértice pai. Da mesma maneira, a segunda criança ao se anular também opera com a linha pai ficando somente ligada ao pai e assim teremos um determinante que possui duas linhas iguais e portanto igual a zero. Concluimos então que se houverem duas crianças com valor zero o determinante é nulo.

Vamos exemplificar o caso em que a árvore possui mais de uma criança com valor zero para um determinado escalar α .

Seja a árvore da figura 5.5.

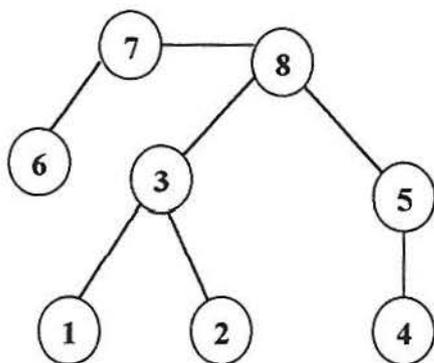
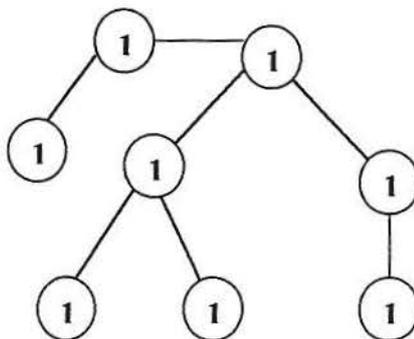


fig 5.5

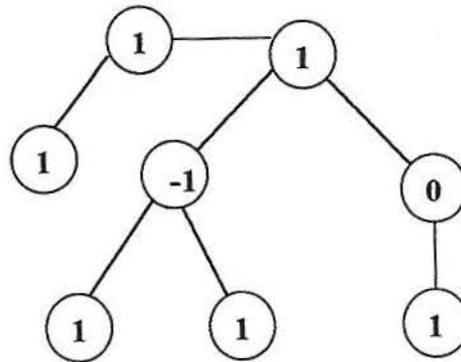
Com respectiva matriz $A+I$, $\alpha = 1$ e a árvore correspondente

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



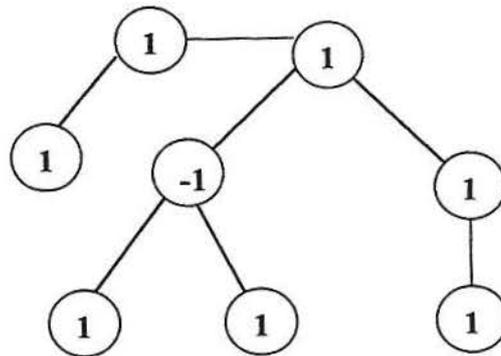
Processamos o vértice 3 e o vértice 5 obtendo

$$B_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$



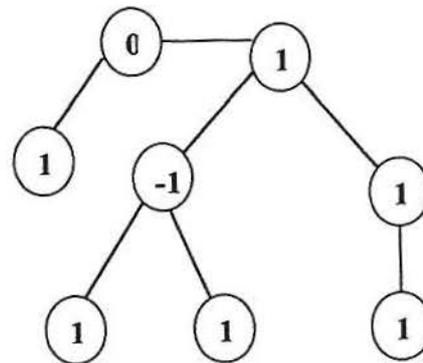
$$L_5 \leftarrow L_5 + L_8$$

$$B_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$



Processamos o vértice 7 e obtemos

$$B_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$



$$L_7 \leftarrow L_7 + L_8$$

$$B_4 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Nesse caso, vértice 8 não é processado pois a matriz correspondente possui duas linhas iguais e portanto o determinante é zero. Logo, se houver duas crianças com valor zero o determinante retorna zero.

Vamos, então construir o algoritmo que opera diretamente na árvore, baseado no método explicado acima.

Algoritmo 2 Dada uma árvore T , ordenada de tal forma que os pais tenham ordem superior a de suas crianças, o algoritmo calcula o determinante $\det(A + \alpha I)$ para qualquer $\alpha \in \mathbb{R}$.

1 Atribua $a(v) := \alpha \in \mathbb{R}$ para cada vértice v .

Processe os vértices como segue:

se v é uma criança **então**

não faça nada.

se todas as crianças possuem valor diferente de zero, **então**

$$a(v) = 1 - \sum_{c \in C} \frac{1}{a(c)} \text{ onde } c \text{ são as crianças de } v.$$

senão se v tem mais do que uma criança com valor zero, **então**

retorne zero

senão se v tem exatamente uma criança (w) com valor zero, **então**

$$a(v) = -1$$

$$a(w) = 1$$

Eliminar todas as arestas incidentes a v .

2 **Retorne** $\prod a(v)$.

Teorema 5.2.1 O algoritmo calcula o $\det(A + \alpha I)$ com $\alpha \in \mathbb{R}$, em tempo de $O(n)$.

Prova: A correção do algoritmo ficou determinada anteriormente. Como o algoritmo processa n vértices passando uma única vez em cada vértice e o processamento de cada vértice é dado por um número constante de operações, segue que o tempo é $O(n)$. \square

Através do algoritmo, podemos determinar $p[\lambda]$ para exatamente $n+1$ valores distintos de α , e num segundo estágio a interpolação dos pontos $(p[-\alpha])$ para obter $p[\lambda] = a_0 + a_1\lambda + \dots + a_n\lambda^n$.

Para exemplificar, vamos obter o $\det(A + \alpha I)$ para 7 valores distintos de α , onde A é a matriz de adjacência da árvore da fig(5.2) de 6 vértices.

Aplicando o algoritmo 2 obtemos os seguintes resultados

$$p(-3) = 360, p(-\sqrt{2}) = -4, p(1) = p(-2) = p(-1) = 0, \quad p\left(\frac{1}{2}\right) = p\left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{45}{64}.$$

A seguir devemos fazer uma interpolação dos pontos obtidos. Assim, o seguinte algoritmo sintetiza as idéias aqui apresentadas.

Algoritmo 3 Este algoritmo determina o polinômio característico de uma árvore através da interpolação polinomial.

1. Escolha os escalares $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$.
2. Chame o algoritmo 2
3. Chame interpolação ($[-\alpha_0, -\alpha_1, -\alpha_2, \dots, -\alpha_n], [p(-\alpha_0), p(-\alpha_1), \dots, p(-\alpha_n)]$)

No exemplo acima, interpolando os 7 pontos, obtemos

$$p(\lambda) = \lambda^6 - 5\lambda^4 + 4\lambda^2.$$

Esse procedimento para determinar o polinômio característico também possibilita determinar se duas árvores são isoespectrais.

A eficiência do procedimento se baseia no fato de que o cálculo do valor do polinômio para um arbitrário escalar α , pode ser feito utilizando o algoritmo acima, cujo tempo computacional é $O(n)$. Como necessitamos de $n+1$ valores α , o custo total da

avaliação é $O(n^2)$. Como a interpolação simultânea dos $n+1$ pontos $(-\alpha, p[-\alpha])$ pode ser feita em $O(n \log^2 n)$ (ver [1], p.299), o custo total do algoritmo é $O(n^2)$, ou seja, provamos o seguinte

Teorema 5.2.2 O polinômio característico de uma árvore com n vértices pode ser calculado em tempo $O(n^2)$.

6 PROPRIEDADES TOPOLÓGICAS DO GRAFO A PARTIR DE SEU ESPECTRO

Este capítulo final surgiu na tentativa de mostrar o quão importante é o trabalho dos teóricos de grafos onde a preocupação é buscar conhecer a estrutura do grafo a partir de seu espectro. O trabalho até aqui teve a seguinte característica: conhecida a estrutura do grafo e sua matriz de adjacência A , o polinômio característico e o espectro correspondente são obtidos. Claramente, podemos dizer que G está determinado por A , isto é, uma matriz de adjacência determina um único grafo. Mas a recíproca não é verdadeira, pois dado um grafo G , a matriz de adjacência de G depende da ordenação de seus vértices. Se G tem uma ordenação de vértices dada com correspondente matriz de adjacência A , então uma reordenação corresponde a uma matriz semelhante $B = PAP^{-1}$, onde P é uma matriz de permutação. Grafos que só diferem por uma reordenação de vértices são chamados isomorfos. Obviamente grafos isomorfos possuem o mesmo espectro.

A questão que surge naturalmente é se podemos determinar uma classe de grafos isomorfos correspondente a um dado espectro. Isto é equivalente a encontrarmos uma matriz (a menos de semelhança) que tenha um conjunto dado de autovalores. Por algum tempo se pensou ser esse problema unicamente determinado, ou seja, que autovalores determinavam unicamente uma classe de grafos isomorfos. Entretanto, existem grafos que possuem o mesmo polinômio característico e, portanto o mesmo espectro, embora tenham estruturas topológicas diferentes, isto é, não são isomorfos. Nesse sentido é que apresentamos alguns resultados obtidos que caracterizam certos grafos estudados, onde dado o espectro S podemos identificar qual o único grafo cujo espectro é S . Alguns resultados não serão demonstrados pois requer que se estabeleçam relações entre os coeficientes do polinômio característico do grafo e sua estrutura, o que está fora do escopo deste trabalho.

6.1 Propriedades Espectrais de Certas Classes de Grafos

Nesta seção assumimos que são conhecidos o espectro de um grafo e que G pertence a uma determinada classe de grafos. Buscamos determinar G .

Teorema 6.1.1 Se G é um grafo com polinômio característico $\lambda^n + a_1\lambda^{n-1} + a_2\lambda^{n-2} + \dots + a_n$. O comprimento f do menor ciclo ímpar em G é igual ao índice do primeiro coeficiente não nulo a_1, a_3, a_5, \dots . O número de ciclos ímpares de comprimento f em G é igual a $-\frac{1}{2}a_f$.

O próximo teorema faz uma conexão entre a estrutura e o espectro do grafo. Parte do teorema foi primeiramente registrado na literatura química por C.A.Coulson, G. S. Rushbrooke. Ver ([6], p.87). O teorema inteiro foi provado por H. Sachs.

Teorema 6.1.2 Um grafo contendo pelo menos uma aresta é bipartido se e somente se seu espectro, considerado como um conjunto de pontos da reta real, é simétrico com relação ao ponto zero.

Prova: Em um grafo bipartido não existem ciclos ímpares, então pelo teorema 6.1.1, o polinômio característico é da forma $\lambda^n + a_2\lambda^{n-2} + a_4\lambda^{n-4} + \dots + a_n$, e, portanto, seu espectro considerado como um conjunto de pontos da reta real, é simétrico em relação ao ponto zero. \square

A validade do teorema fica evidente para grafos bipartidos completos e também para grafos bipartidos $K_{n_1, n_2} - e[\lambda]$, ao examinarmos os polinômios característicos obtidos no capítulo 3.

Teorema 6.1.3 Seja \bar{d} o valor médio da valência e r o maior autovalor de um grafo G . Então, $\bar{d} \leq r$, onde a igualdade é válida se, e somente se G é regular de grau r .

Prova: Por definição, o quociente de Rayleigh correspondente a uma matriz hermitiana A é a expressão $R = \frac{(x, Ax)}{(x, x)}$, onde x denota um vetor. O quociente de Rayleigh fornece ainda uma cota superior e inferior para os autovalores de A . Ver [18].

Como a matriz de adjacência $A = (a_{ij})_1^n$ de G é hermitiana, o problema para encontrar o máximo valor para o quociente de Rayleigh

$$R = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j}{\sum_{i=1}^n x_i^2} \quad (6.1)$$

(x_i , são números reais arbitrários não todos nulos) tem a solução $R = r$. O máximo é atingido se e somente se x_i ($i = 1, \dots, n$) são as componentes de um autovetor de A associado a r .

Se substituirmos $x_i = 1$ ($i = 1, \dots, n$) em (6.1), temos

$$R = \bar{d} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i,$$

onde $d_i = \sum_{j=1}^n a_{ij}$ é a valência do vértice i . Então, \bar{d} é um valor particular do quociente de Rayleigh e, portanto, $\bar{d} \leq r$. Para grafos regulares a igualdade é válida, pois pelo teorema 2.1.4, o maior autovalor de G é igual ao grau de G .

Reciprocamente, consideremos válida a igualdade $\bar{d} = r = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}$. Se tomarmos $x_i = 1$ ($i = 1, \dots, n$), temos $\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = r x_i$ ($i = 1, \dots, n$), ou seja, $x_i = 1$ ($i = 1, \dots, n$) é um autovetor de A associado ao autovalor r . Assim, $d_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} = r$ e, portanto, G é regular. \square

Teorema 6.1.4 Seja $\lambda_1 = r, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ o espectro de G , r é o maior autovalor de G . Então G

é regular de grau r se e somente se $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = r$.

Prova: O número de passeios fechados de comprimento 2 é igual duas vezes o número m de arestas, portanto, $m = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \lambda_i^2$. Temos que o valor médio $\bar{d} = \frac{2m}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \lambda_i^2$, e pelo teorema anterior, $\bar{d} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = r$ se, e somente se G é regular de grau r . \square

O índice de um grafo G é o maior autovalor de um grafo. O próximo teorema relaciona o número de componentes de um grafo regular com seu índice.

Teorema 6.1.5 O número de componentes de um grafo regular G é igual à multiplicidade de seu índice.

Prova: Sendo G regular de grau r , pelo teorema 2.1.4, seu maior autovalor é igual a r e possui multiplicidade 1 quando conexo. Como o polinômio característico de grafos desconexos é o produto dos polinômios característicos de suas componentes o número de componentes de um grafo regular G é a multiplicidade de seu índice. \square

6.2 Caracterização de um Grafo pelo seu Espectro

Nesta seção, enunciaremos alguns resultados para mostrar propriedades topológicas do grafo a partir do seu espectro. Mais especificamente, tentamos buscar classes de grafos que possuem as propriedades espectrais dadas. Em particular a possibilidade de identificação do grafo é investigada, isto é, procuramos caracterizar grafos com um número pequeno de autovalores distintos e que são determinados unicamente pelo seu espectro. Finalmente enunciaremos alguns resultados que mostram a existência de grandes famílias de grafos isoespectrais.

O próximo resultado mostra que, para um grafo regular conexo G , o espectro fica completamente determinado conhecendo apenas seus autovalores distintos, desde que o número de autovalores distintos seja menor que cinco.

Lema 6.2.1 Seja G um grafo regular conexo com n vértices cujo espectro é S e cujo conjunto de autovalores distintos é τ . Vamos supor que $|\tau| \leq 4$. Então as seguintes afirmações são equivalentes.

(i) H é isoespectral a G .

(ii) H é regular, conexo, tem n vértices e τ é o conjunto de seus autovalores distintos.

Prova:

(i) \Rightarrow (ii) Pelo teorema 6.1.5 o número de componentes de um grafo regular G igual a multiplicidade de seu maior autovalor. A regularidade de G implica na regularidade de H , e como o maior autovalor tem multiplicidade 1, H é conexo.

(ii) \Rightarrow (i) Sejam $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 > \lambda_4$ autovalores distintos de H com respectivas multiplicidades algébricas m_1, m_2, m_3, m_4 . Então:

(a) $m_1 = 1$, pois H é conexo.

(b) $m_1 + m_2 + m_3 + m_4 = n$, onde n é o número de vértices.

(c) $m_1\lambda_1 + m_2\lambda_2 + m_3\lambda_3 + m_4\lambda_4 = 0$, pois $\sum_{i=1}^n \lambda_i = \sum_{i=1}^n a_{ii} = \text{tr}A = 0$.

(d) $m_1\lambda_1^2 + m_2\lambda_2^2 + m_3\lambda_3^2 + m_4\lambda_4^2 = n\lambda_1$, pois $\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = \sum_{i=1}^n a_{ii}^2 = \text{tr}A^2 = nr = n\lambda_1$, pois H é regular e $\lambda_1 = r$

As equações de (a)-(d) determinam m_1, m_2, m_3 e m_4 unicamente, pois o sistema é bem determinado. Assim, o espectro fica determinado. O mesmo argumento pode ser utilizado quando $|\tau| < 4$. \square

O resultado seguinte caracteriza grafos cujo espectro contém 1 ou 2 autovalores distintos.

Teorema 6.2.2 Um grafo G possui um único autovalor se, e somente se G é totalmente desconexo. Um grafo G possui dois autovalores distintos $\lambda_1 > \lambda_2$ com multiplicidade m_1 e m_2 se e somente se G é soma direta de m_1 grafos completos de ordem $\lambda_1 + 1$. Neste caso, $\lambda_2 = -1$ e $m_2 = m_1\lambda_1$.

Prova: Vamos supor um grafo G com respectiva matriz de adjacência A possuindo um autovalor distinto λ com multiplicidade m . Como o $\text{tr } A = 0$, devemos ter $\lambda = 0$. Sabemos que se a matriz A é simétrica, também é diagonalizável e, portanto, o polinômio minimal é da forma $m(x) = x - \lambda$, e $A = 0$, logo G consiste de m vértices isolados.

Reciprocamente, se G é um grafo que não possui arestas, o polinômio característico é $\lambda^n = 0$ e, portanto, G possui um autovalor.

Se G possui dois autovalores distintos $\lambda_1 > \lambda_2$, com multiplicidade m_1 e m_2 , então o polinômio minimal é da forma $m(x) = (x - \lambda_1)(x - \lambda_2)$, pois A é simétrica e diagonalizável. Temos então, $A^2 - (\lambda_1 + \lambda_2)A + \lambda_1\lambda_2I = 0$. Como $a_{kk} = 0$, temos que $a_{kk}^{(2)} = -\lambda_1\lambda_2$ para todo k e, portanto, G é regular de grau $-\lambda_1\lambda_2$. Como o grau de G é o maior autovalor, temos que $\lambda_1 = -\lambda_1\lambda_2$, logo $\lambda_2 = -1$. Além disso, se dois vértices não são adjacentes, então eles não estão unidos por um caminho de comprimento 2, já que $a_{ij} = 0$. Logo, G é soma direta de m_1 grafos completos de ordem $\lambda_1 + 1$. Também podemos concluir isso observando que

$$G[\lambda] = (\lambda + 1)^{m_2} (\lambda - \lambda_1)^{m_1} = \left[(\lambda + 1)^{\frac{m_2}{m_1}} (\lambda - \lambda_1) \right]^{m_1}, \text{ com } \lambda_1 = \frac{m_2}{m_1}.$$

Reciprocamente, se G é soma direta de m_1 grafos completos de ordem $\lambda_1 + 1$, pelo teorema 2.1.4 temos que $G[\lambda] = (K_{\lambda_1+1}[\lambda])^{m_1}$. O polinômio característico para um grafo completo é dado por (3.2) e, então $G[\lambda] = ((\lambda + 1)^{\lambda_1} (\lambda - \lambda_1))^{m_1} = (\lambda + 1)^{m_1\lambda_1} (\lambda - \lambda_1)^{m_1}$. Assim, G possui $m_1\lambda_1$ autovalores iguais a -1 e m_1 autovalores iguais a λ_1 . \square

Para exemplificar, tomamos G como sendo a soma direta de 3 grafos completos de ordem 3, teremos como autovalores distintos $\{2, -1, -1\}$, e portanto 6 autovalores iguais a -1 e 3 autovalores iguais a 2.

Vimos que o polinômio característico para grafos completos é dado por $(\lambda - n + 1)(\lambda + 1)^{n-1}$, assim, podemos dizer que G possui um autovalor $\lambda_1 = n-1$ com multiplicidade 1 e λ_1 autovalores iguais a -1 . Logo, G é regular, conexo e possui dois autovalores distintos.

Pelo resultado do teorema 6.2.2, decorre que grafos completos são caracterizados pelo seus espectros.

Para caracterizarmos o caso de três autovalores distintos é bem mais difícil, de qualquer modo, os teoremas enunciados são interessantes pois caracterizam alguns grafos.

Teorema 6.2.3 Seja G um grafo bipartido cujos autovalores $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3$ com respectivas multiplicidades m_1, m_2, m_3 . Então, se $\lambda_1 = -\lambda_3, m_1 = m_3$ e $\lambda_2 = 0$, G é a soma direta de m_1 grafos completos bipartidos K_{r_i, s_i} onde $r_i s_i = \lambda_i^2, i = 1, \dots, m_1$ e $m_2 = \sum_{i=1}^{m_1} (r_i + s_i - 2)$ vértices isolados.

A prova da parte "se" do teorema pode ser encontrado em [9]. A recíproca é facilmente verificada, pois se G é soma direta de m_1 grafos completos bipartidos, cujo polinômio característico é $[(\lambda^2 - r_i s_i) \lambda^{r_i + s_i - 2}]^{m_1}$, segue que G possui um autovalor $\lambda_1 = \sqrt{r_i s_i}$ com multiplicidade $m_1, \lambda_3 = -\sqrt{r_i s_i}$ com multiplicidade m_1 , e $\lambda_2 = 0$ com multiplicidade m_2 . Caso o grafo G seja soma direta de m_1 grafos completos bipartidos sem vértices isolados, então $m_2 = \sum_{i=1}^{m_1} (r_i + s_i - 2)$. Caso contrário, G possui vértices isolados e então, $m_2 = \sum_{i=1}^{m_1} (r_i + s_i - 2) +$ número de vértices isolados.

Corolário 6.2.4 Se G satisfaz o teorema 6.2.3, e $\lambda_1^2 = r_i s_i = p$, é um inteiro primo, então G é caracterizado pelo seu espectro.

Prova: O polinômio característico para um grafo completo bipartido é da forma $[(\lambda^2 - r_i s_i) \lambda^{r_i + s_i - 2}]$. Se $\lambda_1^2 = r_i s_i$ com $r_i s_i$ primo, então os únicos divisores de $r_i s_i$ são ± 1 ou $\pm r_i s_i$, assim $r_i s_i = \pm 1 \cdot \pm (r_i s_i)$. Logo existe um único K_{r_i, s_i} tal que o conjunto de autovalores distintos seja $\{-r_i s_i, 0, r_i s_i\}$. Entretanto, se o produto $r_i s_i$ for um número composto, existe algum α diferente de ± 1 e \pm que divide $r_i s_i$, então $r_i s_i = \alpha \cdot \beta$ ($\alpha, \beta \in \mathbb{N}$). Logo existe mais do que um K_{r_i, s_i} que possui o mesmo conjunto de autovalores distintos $\{-r_i s_i, 0, r_i s_i\}$. \square

Para exemplificar tomamos G bipartido com $\lambda_1 = \sqrt{3}, \lambda_2 = 0$ e $\lambda_3 = -\sqrt{3}$ com respectivas multiplicidades $m_1 = m_3 = 2$ e $m_2 = 5$, com polinômio característico igual a

$(\lambda^2 - 3)^2 \lambda^5 = (\lambda^2 - 3)^2 \lambda^4 \cdot \lambda$, assim, G é soma direta de dois grafos completos $K_{1,3} + 1$ vértice isolado, e portanto caracterizado pelo seu espectro. Entretanto se tomarmos G bipartido com $\lambda_1 = 4$, $\lambda_2 = 0$, $\lambda_3 = -4$, com $m_1 = m_3 = 1$ e $m_2 = 15$, temos para polinômio característico $(\lambda^2 - 16)\lambda^{15} = (\lambda^2 - 16)\lambda^6 \cdot \lambda^9 = (\lambda^2 - 16)\lambda^8 \cdot \lambda^7$, onde $K_{1,16}$ tem para polinômio característico $(\lambda^2 - 16)\lambda^{15}$, $K_{4,4} + 9$ vértices isolados tem para polinômio característico $(\lambda^2 - 16)\lambda^6 \cdot \lambda^9$ e $K_{2,8} + 7$ vértices isolados tem para polinômio característico $(\lambda^2 - 16)\lambda^8 \cdot \lambda^7$, portanto não são caracterizados pelo seus espectros.

Teorema 6.2.5 Um grafo regular G possui autovalores r , 0 e λ_3 se, e somente se, o complementar de G é soma direta de $-\frac{r}{\lambda_3} + 1$ grafos completos de ordem $-\lambda_3$.

A prova da parte "se" do teorema pode ser encontrado em [6]. A recíproca é facilmente verificada, pois se o complementar de G é soma direta de $-\frac{r}{\lambda_3} + 1$ grafos completos de ordem $-\lambda_3$, temos pelo teorema 2.1.4 que

$$\left[\overline{K}_{(-\lambda_3)}[-\lambda - 1] \right]^\beta = (-1)^n \frac{-\lambda - n + r}{-\lambda + r} G[\lambda] \quad (6.2)$$

$$\text{e, por (3.2), temos que } \overline{K}_{(-\lambda_3)}[-\lambda - 1] = (-\lambda)^{-\lambda_3 - 1} (-\lambda + \lambda_3). \quad (6.3)$$

Substituindo (6.3) em (6.2) vem

$$\left[(-\lambda)^{-\lambda_3 - 1} (-\lambda + \lambda_3) \right]^\beta = (-1)^n \frac{-\lambda - n + r}{-\lambda + r} G[\lambda], \quad \text{com } \beta = -\frac{r}{\lambda_3} + 1,$$

$$G[\lambda] = (-1)^n \frac{(-\lambda + r)(-\lambda)^{(-\lambda_3 - 1)\beta} (-\lambda + \lambda_3)^\beta}{(-\lambda - n + r)}, \quad \text{substituindo } \beta \text{ e } -n+r \text{ por } \lambda_3, \text{ temos}$$

$$G[\lambda] = (-1)^n \frac{(-\lambda + r)(-\lambda)^{\frac{n+r}{\lambda_3} - 1} (-\lambda + \lambda_3)^{\frac{r}{\lambda_3} + 1}}{(-\lambda + \lambda_3)},$$

$$G[\lambda] = (-1)^n (-\lambda + r)(-\lambda)^{\frac{n+r}{\lambda_3} - 1} (-\lambda + \lambda_3)^{\frac{r}{\lambda_3}}. \quad \text{Assim, temos um autovalor igual a } r,$$

$(n + \frac{r}{\lambda_3} - 1)$ autovalores iguais a zero e $-\frac{r}{\lambda_3}$ autovalores iguais a λ_3 .

O grafo regular de grau 2 possuindo 4 vértices satisfaz as condições do teorema 6.2.5. Ainda assim, é fácil ver que possui o mesmo espectro que o grafo bipartido completo regular $K_{2,2}$. Portanto, um grafo regular G com autovalores $r, 0, \lambda_3$ não é caracterizado pelo seu espectro.

Corolário 6.2.6 Grafos multipartidos completos regulares são caracterizados pelos seus espectros.

O polinômio característico para um grafo multipartido completo regular é dado por $\lambda^{n-k} \left(\lambda + \frac{n}{k} - n \right) \left(\lambda + \frac{n}{k} \right)^{k-1} = \lambda^{n-k} (\lambda - r) \left(\lambda + \frac{n}{k} \right)^{k-1}$, onde $r = n - \frac{n}{k}$. Logo, $\lambda_1 = r, \lambda_2 = 0$ e $\lambda_3 = -\frac{n}{k}$.

Por exemplo, seja G o grafo regular cujo conjunto de autovalores distintos é dado por $\{4, 0, -2\}$. Um grafo completo possui dois autovalores distintos, um bipartido possui seu espectro simétrico em relação ao autovalor zero. Utilizando o teorema 6.2.5, vimos que o grafo é multipartido completo regular com $n = r - \lambda_3 = 6$ e $k = 3$.

A.K.Kelmans provou que existem alguns grafos multipartidos que são caracterizados pelo seu espectro. J.H.Smith generalizou o teorema 6.2.5 e enunciou o teorema abaixo. Ver [6].

Teorema 6.2.7 Um grafo tem exatamente um autovalor positivo se e somente se, seus vértices não isolados formam um grafo multipartido completo.

Em geral, grafos multipartidos completos não são caracterizados pelo seu espectro.

Por exemplo $K_{18,3,3}$, tem para polinômio $\lambda^{21}(\lambda+3)(\lambda^2-3\lambda-108)$ e $K_{9,9,2} + 4K_1$ tem para polinômio $\lambda^{21}(\lambda+9)(\lambda^2-9\lambda-36)$, tal que o conjunto de autovalores distintos correspondente a esses dois grafos é $\{-9, -3, 0, 12\}$. Esses grafos são chamados de PING, e existem uma infinidade de PINGs similares a esses.

Finalmente enunciaremos um teorema sobre o quanto de informação relacionada à estrutura de um grafo poderia estar contida em seu espectro e onde tal caracterização se torna difícil na medida que existem muitos grafos isoespectrais.

Teorema 6.2.8 Dado um grafo G e um inteiro n , existe uma família isoespectral de grafos $\{G_i / i = 1, \dots, n\}$ tal que todo G_i contém uma cópia de G e todos os circuitos em G_i estão contidos em G .

Corolário 6.2.9 Existe uma grande família de árvores isoespectrais.

Esse teorema foi provado por A. J. Schwenk [6], o qual mostrou que se o número de vértices de um árvore for grande, então a probabilidade de que uma árvore seja caracterizada pelo seu espectro é aproximadamente zero.

7 CONCLUSÃO

Vimos a importância da obtenção de um método que determine o espectro de árvores, e também o quanto importante é que esse método seja eficiente. A construção do polinômio característico de uma matriz genérica pode ser obtida em $O(n^3)$, mas Jacobs e Trevisan [15] obtiveram um método para a construção do polinômio característico para matrizes de adjacência de árvores na $O(n^2 \log n)$, ou seja, um método mais eficiente.

No desenvolvimento desta dissertação, obtivemos um algoritmo para o cálculo do polinômio característico de árvores. O procedimento sugerido utiliza a interpolação polinomial depois que os valores do polinômio característico são obtidos através do cálculo do determinante da matriz $(A + \alpha I)$, onde A é a matriz de adjacência e α um número real arbitrário. O cálculo do determinante é executado diretamente na árvore, conduzindo a um algoritmo elegante e eficiente, permitindo a prova de que o polinômio característico de árvores pode ser construído em $O(n^2)$.

No decorrer do trabalho, observamos que a teoria do espectro é extremamente útil nas aplicações químicas, onde as propriedades termodinâmicas das moléculas podem ser correlacionadas com a sua topologia, assim como a topologia molecular pode ser caracterizada pelo grafo associado. Podemos dizer então que, os trabalhos de Balasubramanian [2] e [3] foram o elo entre a teoria e a aplicação, um incentivo ao estudo da teoria do espectro principalmente no que diz respeito a determinação do espectro de árvores químicas.

Uma outra contribuição para o trabalho foi a apresentação detalhada do método desenvolvido por Jacobs e Trevisan [15] para encontrar o polinômio característico da matriz de adjacência de uma árvore utilizando os (teoremas 5.1.2 e 5.1.3), bem como o refinamento para esse método.

Finalmente, podemos dizer que cada vez mais aplicações são propostas para esse tema. A investigação de propriedades existentes a partir do espectro de um grafo também é muito importante, pois existe um grande número de árvores isoespectrais e, portanto a probabilidade de que uma árvore seja caracterizada pelo seu espectro é quase nula quando o número de vértices é muito grande. Por outro lado existem muitos grafos que podem ser caracterizados através de seu espectro. Salientamos também que, o novo algoritmo

desenvolvido determina se duas árvores são isoespectrais, e uma possível extensão desse trabalho é o estudo dessas árvores isoespectrais. Mais especificamente a determinação de classes de árvores que são isoespectrais é um desafio, ainda mais desafiante é a determinação de todas as árvores (a menos de isomorfismo) que têm um espectro dado.

BIBLIOGRAFIA

- [1] AHO, A., HOPCROFT, J. and ULLMAN, J. *The Design and Analysis of Computer Algorithms*. Reading, Addison-Wesley, MA, 1974.
- [2] BALASUBRAMANIAN, K. Spectra of Chemical Trees, Int. J. Quantum Chem, Vol.XXI, 581-590, 1982.
- [3] BALASUBRAMANIAN, K. Generalized Wreath Product Method for the Enumeration of Stereo and Position Isomers of Polysubstituted Organic Compounds, Theor. Chim. Acta:51,37,1979.
- [4] BRASSARD, G. and BRATLEY, P. *Algorithmics-Theory and Practice*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1988.
- [5] CAO, D. and YUAN, H. The Distribution of Eigenvalues of Graphs, Linear Algebra and its Applications 216, 211-224, 1995.
- [6] CVETKOVIC', D., DOOB, M. and SACHS, H. *Spectra of Graphs*. New York, Academic Press, 1980.
- [7] CVETKOVIC', D., DOOB, M., GUTMAN, I., TORĀSEV, A., *Recent Results in the Theory of Graph Spectra.*, Annals of Discrete Mathematics 36, 1988.
- [8] DOOB, M. Graphs with a small number of distinct eigenvalue, Ann. New York, Acad. Sci. 175, No.1, 104-110, 1970.
- [9] DOOB, M. and CVETKOVIC', D. On Spectral Characterizations and Embeddings of Graphs, Linear Algebra and its Applications, 27, 17-26, 1979.

- [10] FRICKE, G. H., HEDETNIEMI, S. T., JACOBS, D. P., TREVISAN, V. Reducing the Adjacency Matrix of a Tree, The Eletronic Journal of Linear Algebra 1, 32-33,1996.
- [11] GODSIL,C.D. and MACKAY, B.D. A new graph product and its spectrum, Bull. Aust.Math.Soc.18,21,1978.
- [12] HARARY, F., KING, C., MOWSHOWITS and READ, R. Cospectral graphs and digraphs, Bull. London Math. Soc.3, 321-328,1971.
- [13] HERNSTEIN, I. N. *Tópicos de Álgebra*. São Paulo, Polígono,1970.
- [14] JACOBS, D. P., TREVISAN, V. The Determinant of a Tree's Neighborhood Matrix, Linear Algebra and its Applications 256,235-250,1997.
- [15] JACOBS, D. P., TREVISAN, V. How to Construct the Characteristic Polynomial of a Tree's Adjacency Matrix, Congressus Numerantium 134,135-145,1998.
- [16] KOLMAN, B. *Álgebra Linear*. 3 ed, São Paulo, Guanabara, 1978.
- [17] MAYEDA, W. *Graph Theory*.. New York, Wiley-Interscience,588,1981.
- [18] NOBLE, D., DANIEL, J. *Applied Linear Algebra*. Envlewood Cliffs, Nova Jersey,1977.
- [19] SCHWENK,A.J. Computing the Characteristic Polinomial of a Graph, Lecture Notes Math. 406,153-172, 1973.
- [20] SHEARER, J. On the Distribution of the Maximum Eigenvalue of Graphs, Linear Algebra and its Applications, 113/114: 17-21,1989.

- [21] WILKINSON, J. H. *The Algebraic Eigenvalue Problem*. London, Oxford University Press, 1965.

UNIVERSITY OF MICHIGAN
LIBRARY OF MATHEMATICS