



SOBRE A MATRIZ DISTÂNCIA E SUAS LAPLACIANAS

Celso Marques da Silva Junior

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia de Produção, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia de Produção.

Orientadores: Maria Agueiras Alvarez de
Freitas
Renata Raposo Del-Vecchio

Rio de Janeiro
Agosto de 2015

SOBRE A MATRIZ DISTÂNCIA E SUAS LAPLACIANAS

Celso Marques da Silva Junior

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA DE PRODUÇÃO.

Examinada por:

Profa. Maria Aguiéiras Alvarez de Freitas, D.Sc.

Profa. Renata Raposo Del-Vecchio, D.Sc.

Profa. Nair Maria Maia de Abreu, D.Sc.

Profa. Cybele Tavares Maia Vinagre, D.Sc.

Prof. Carlos Hoppen, Ph.D.

Prof. Fábio Protti, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

AGOSTO DE 2015

Silva Junior, Celso Marques da

Sobre a Matriz Distância e suas laplacianas/Celso Marques da Silva Junior. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2015.

XI, 128 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Maria Agueiras Alvarez de Freitas
Renata Raposo Del-Vecchio

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia de Produção, 2015.

Referências Bibliográficas: p. 118 – 128.

1. Matriz distância. 2. Matriz distância laplaciana.
3. Matriz distância laplaciana sem sinal. I. Freitas, Maria Agueiras Alvarez de *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia de Produção. III. Título.

Ao meu pai (in memoriam)
À minha mãe e irmã
À minha avó, Adelina
A meu amor, Anna Carolina.

Agradecimentos

À minha mãe, minha avó Adelina (uma segunda mãe), e minha irmã, por terem me incentivado e ajudado em todos os momentos. A presença delas tornou tudo mais fácil.

Ao meu pai (in memoriam), por tudo que me ensinou, especialmente os valores que formaram meu caráter, e por ter me transmitido toda sua paixão pela matemática. Os melhores problemas sempre serão aqueles que estudamos juntos.

A meu amor, Anna Carolina, dona das melhores gargalhadas, por ter sido uma grande companheira durante esta jornada.

À minha avó Sylla, que mesmo distante sempre torceu pelo meu sucesso.

Às minhas orientadoras, Maria Aguiéiras A. de Freitas e Renata R. Del-Vecchio, pela sugestão do tema e apoio na elaboração deste trabalho. Os diversos conselhos e conversas, nos melhores momentos e nos mais difíceis, foram fundamentais para minha formação.

À professora Nair M. Maia de Abreu, por ter me recebido e apoiado no início desta jornada.

Ao professor Vladimir Nikiforov, pelos quinze dias intensos que passei em Memphis e tudo que seguiu.

A amigos queridos que acompanharam a loucura dos últimos anos.

A todos os componentes do grupo TEG-Rio, pela colaboração e pelo companheirismo.

A todos os funcionários do PEP, pela atenção e pelo profissionalismo.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro na realização deste trabalho.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

SOBRE A MATRIZ DISTÂNCIA E SUAS LAPLACIANAS

Celso Marques da Silva Junior

Agosto/2015

Orientadores: Maria Agueiras Alvarez de Freitas
Renata Raposo Del-Vecchio

Programa: Engenharia de Produção

O objetivo deste trabalho é estudar, sob o ponto de vista da Teoria Espectral de Grafos, as matrizes distância e suas laplacianas, buscando novas propriedades, cotas e aplicações. Resolvemos duas conjecturas, envolvendo o maior autovalor da matriz distância laplaciana de um grafo conexo e sua multiplicidade, propostas por AOUCHICHE e HANSEN (*Some properties of the distance Laplacian eigenvalues of a graph*, Czechoslovak Mathematical Journal, v. 64, n. 3, pp. 751–761, 2014). Consideramos o problema de serem inteiros todos os autovalores de uma dada matriz associada a um grafo, nos casos particulares das laplacianas da matriz distância, obtendo diversos avanços. Também obtemos novas cotas para a maior e a menor entradas do autovetor principal da matriz distância laplaciana sem sinal. Por fim, discutimos possibilidades de aplicações da matriz distância de um grafo para o desenvolvimento de outras áreas da Teoria de Grafos. Particularmente, abordamos as medidas de centralidade e a teoria de convexidade. Em ambos os casos, propomos definições, de teor espectral.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

ON THE DISTANCE MATRIX AND ITS LAPLACIANS

Celso Marques da Silva Junior

August/2015

Advisors: Maria Agueiras Alvarez de Freitas

Renata Raposo Del-Vecchio

Department: Production Engineering

The goal of this work is to study, from the point of view of Spectral Graph Theory, the distance matrix and its Laplacians, looking for new properties, bounds and applications. We solve two conjectures involving the largest eigenvalue of the distance Laplacian matrix of a connected graph and its multiplicity, proposed by AOUCHICHE and HANSEN (*Some properties of the distance Laplacian eigenvalues of a graph*, Czechoslovak Mathematical Journal, v. 64, n . 3, pp. 751-761, 2014). We consider the problem of characterizing graphs such that the eigenvalues of a given matrix associated with them are integers, in the particular cases of Laplacians for the distance matrix, obtaining some new results. We also determine new bounds on the minimal and maximal entries of the principal eigenvector of the distance signless Laplacian. Finally, we discuss potential applications of the distance matrix for the development of other areas of Graph Theory. In particular, we discuss the centrality measures and the convexity theory. In both cases, we propose definitions, of spectral content.

Sumário

Lista de Figuras	x
1 Introdução	1
2 Definições e resultados preliminares	4
2.1 Conceitos básicos em Teoria de Matrizes	4
2.2 Conceitos básicos em Teoria de Grafos	8
2.3 Conceitos básicos em Teoria Espectral de Grafos	11
3 As laplacianas da matriz distância	13
3.1 Matriz distância e suas laplacianas	13
3.2 Autovalores da matriz distância sem sinal e o índice de Wiener	24
3.3 Propostas para trabalhos futuros	30
4 Sobre algumas conjecturas a respeito das laplacianas da matriz distância	31
4.1 Funções de grafos maximizadas pelo caminho	32
4.1.1 A função $F_M(G)$ e seu máximo	32
4.1.2 A função $F_M(G)$ aplicada à matriz distância e suas laplacianas	40
4.1.3 Propostas para trabalhos futuros	42
4.2 Sobre a multiplicidade de autovalores da matriz distância laplaciana .	42
4.2.1 P_4 como um subgrafo proibido e o espectro distância laplaciano	43
4.2.2 P_5 como um subgrafo proibido e o espectro distância laplaciano	45
4.2.3 Propostas para trabalhos futuros	49
5 Grafos \mathcal{D}^L-integrals e \mathcal{D}^Q-integrals	50
5.1 Alguns resultados sobre grafos \mathcal{D}^L -integrals e grafos \mathcal{D}^Q -integrals . . .	51
5.2 Famílias infinitas de grafos \mathcal{D}^Q -integrals	57
5.3 Propostas para trabalhos futuros	62
6 Sobre a maior e a menor entrada do autovetor principal da matriz distância laplaciana sem sinal	63

6.1	A correção de um teorema e a família de grafos $\mathcal{G}(n, \alpha, *)$	65
6.2	Sobre a menor entrada do autovetor principal da matriz distância laplaciana sem sinal	69
6.3	Sobre a maior entrada do autovetor principal da matriz distância laplaciana sem sinal	76
6.4	Propostas para trabalhos futuros	84
7	Medidas de centralidade e convexidade em grafos	85
7.1	Medidas de centralidade	86
7.1.1	Algumas medidas de centralidade	86
7.1.2	Uma nova medida de centralidade	89
7.1.3	Algumas propriedades da medida de proximidade espectral	94
7.1.4	Comparando as centralidades de proximidade e de proximi- dade espectral	97
7.2	Convexidade em grafos	101
7.3	Propostas para trabalhos futuros	114
8	Considerações finais	116
	Referências Bibliográficas	118

Lista de Figuras

2.1	Grafo 3-fan.	10
3.1	Grafo 14-transmissão regular apesar de não ser regular, já que $d(v_1) \neq d(v_2)$	15
3.2	Grafo regular e não transmissão regular, já que $T_r(v_1) = 26$ e $T_r(v_2) = 24$	16
3.3	Grafo de Peterson e seus espectros.	18
3.4	Árvores não isomorfas com os mesmos autovalores para a matriz adjacência: $(2, 30278; 1, 30278; 0^{(4)}; -1, 30278; -2, 30278)$	19
3.5	O menor par de árvores \mathcal{D} -coespectrais não isomorfas.	19
3.6	Árvores que possuem o mesmo índice de Wiener, igual a 306, e não são L -coespectrais, \mathcal{D}^L -coespectrais, nem \mathcal{D}^Q -coespectrais.	26
3.7	Grafos do tipo G^*	27
3.8	Grafos do tipo G^{**}	27
5.1	CS_3^2	52
5.2	$MCS_{3,2}^5$	52
5.3	ECS_3^3	53
5.4	$MECS_{1,2}^8$	53
5.5	$Sp(\mathcal{D}^Q(G) = (21, 11, 10^{(3)}, 8^{(5)})$	61
7.1	Grafo onde v_1 possui a maior centralidade de grau	87
7.2	Grafo onde apenas v_9 não admite outro vértice com mesma transmissão e apenas dois valores de excentricidade são atribuídos aos vértices.	90
7.3	Grafo onde $c_p(v_3) > c_p(v_6)$, $c_{pe}(v_3) < c_{pe}(v_6)$ e $c_e(v_3) < c_e(v_6)$	93
7.4	Grafo onde o conjunto de vértices que assumem a maior centralidade de proximidade e o conjunto de vértices que assumem o maior valor de proximidade espectral são disjuntos.	94
7.5	Grafo onde o conjunto $S = \{v_1, v_2, v_6\}$ é geodésico.	104
7.6	$Ct(G) = \{v_2, v_7, v_9\}$ e $v_{10} \notin I[Ct(G)]$	106

7.7	O contorno é geodésico? Sim para os arredondados, não necessariamente para os retângulos sólidos e está em aberto para os retângulos tracejados.	107
7.8	Grafo G cujo subgrafo induzido por $S = \{v_1, v_2, v_3\}$ tem como matriz distância uma submatriz principal de $\mathcal{D}(G)$, embora S não seja um subconjunto convexo.	108
7.9	$[Ct(G)] = [Ct_e(G)] = V(G)$	111
7.10	Grafo que possui conjunto de contorno não geodésico e conjunto de contorno espectral geodésico.	112
7.11	Grafo cujo conjunto de contorno espectral, geodésico, tem cardinalidade menor que o conjunto de contorno, também geodésico.	113

Capítulo 1

Introdução

A Teoria Espectral de Grafos estuda propriedades de um grafo por meio de suas representações matriciais e de seus respectivos espectros. Destacam-se entre as matrizes comumente estudadas a adjacência, a laplaciana, a laplaciana sem sinal e a distância.

Segundo MIHALIC *et al.* [1], as origens da matriz distância podem ser remetidas ao trabalho inicial de CAYLEY [2], em 1841, embora a matriz tenha sido introduzida de forma rudimentar por BRUNEL [3], em 1895. Após o importante resultado obtido por GRAHAM e POLLACK [4] em 1971, verificando que o determinante da matriz distância de uma árvore, não valorada, depende apenas do seu número de vértices, esta matriz ganhou grande notoriedade, e até hoje suas propriedades espectrais são pesquisadas. Chama atenção na matriz distância de um grafo sua possibilidade de aplicações [5–10], com destaque para a Química [1] onde, por exemplo, o índice de Wiener desempenha importante papel como descritor de estruturas de moléculas.

Já em 2013, motivados pelas definições já consagradas de laplaciana e laplaciana sem sinal associadas à matriz de adjacência de um grafo, AOUCHICHE e HANSEN [11] propuseram duas laplacianas para a matriz distância de um grafo: a matriz distância laplaciana e a distância laplaciana sem sinal. Os resultados iniciais mostram que estas novas matrizes podem se comportar tão bem ou melhor quando comparadas à matriz de adjacência e suas laplacianas, além da própria matriz distância, no sentido de estarem associadas a um menor número de pares de grafos não isomorfos com o mesmo espectro. Ainda em [11] foi verificado, computacionalmente, que considerando todas as árvores com até 20 vértices, não existem árvores não isomorfas que compartilhem o mesmo espectro distância laplaciano nem o mesmo espectro distância laplaciano sem sinal. Recentemente, diversos trabalhos vem sendo publicados a respeito destas matrizes [12–22].

A proposta central deste trabalho é estudar, sob o ponto de vista da Teoria Espectral de Grafos, as matrizes distância e suas laplacianas, buscando novas propriedades, cotas e aplicações. Para isto, fazemos uma revisão de definições e resultados

já presentes na literatura, os quais, em parte, apresentamos ao longo deste texto junto a diversos avanços e resultados de nossa autoria, a respeito destas matrizes.

Organizamos o trabalho da seguinte forma: no Capítulo 2 se encontram as noções básicas de Teoria de Matrizes, de Teoria de Grafos e de Teoria Espectral de Grafos, necessárias à compreensão do texto.

O Capítulo 3 é dedicado ao estudo de propriedades espectrais das laplacianas da matriz distância. Na primeira seção, fazemos um breve apanhado histórico sobre a introdução e o desenvolvimento da matriz distância de um grafo e citamos alguns resultados relacionados a esta matriz que são necessários no seguimento do texto. Definimos então as laplacianas associadas à matriz distância de um grafo. Reproduzimos, ainda nesta seção, alguns resultados presentes em [11–13, 15] a respeito das laplacianas da distância. Optamos por citar apenas o que consideramos indispensável para que o leitor possa conhecer estas matrizes e seu comportamento. A segunda seção deste capítulo é dedicada a estudar as consequências da Proposição 3.2.4, que afirma que a soma dos autovalores, tanto da matriz distância laplaciana como da distância laplaciana sem sinal de um grafo é igual a duas vezes o seu índice de Wiener. Nela, se encontram nossas primeiras contribuições ao estudo das laplacianas da matriz distância.

O quarto capítulo tem como objetivo central apresentar as soluções, de nossa autoria, de duas conjecturas, propostas por AOUCHICHE e HANSEN [12], a respeito da matriz distância laplaciana de um grafo conexo. Em decorrência da dedicação a estes problemas, obtemos também outros avanços que são apresentados. Tais resultados estão no artigo, aceito para publicação, DA SILVA JUNIOR e NIKIFOROV [23] e submetidos em DA SILVA JUNIOR *et al.* [24].

No Capítulo 5, voltamos nossa atenção ao estudo da integralidade para as matrizes distância laplaciana e distância laplaciana sem sinal. Em ambos os casos, apresentamos condições necessárias e suficientes para que grafos pertencentes a algumas classes especiais de grafos tenham seu espectro distância laplaciano ou seu espectro distância laplaciano sem sinal compostos apenas por números inteiros. Também construímos diversas famílias infinitas de grafos \mathcal{D}^L -integrals e \mathcal{D}^Q -integrals. Os resultados que compõem este capítulo foram submetidos em DA SILVA JUNIOR *et al.* [25].

No sexto capítulo, obtemos novas cotas para a maior e menor entradas do autovetor principal da matriz distância laplaciana sem sinal, além de apresentar um contra-exemplo e corrigir um dos teoremas centrais presentes em [26]. No Corolário 6.1.6 obtemos também uma cota simples, porém inédita, para o índice da matriz distância sem sinal em função do número de vértices do grafo e seu número de independência. Os resultados deste capítulo estão publicados em DAS *et al.* [27],

No sétimo capítulo, voltamos nossa atenção a possíveis aplicações da matriz

distância de um grafo, com enfoque em dois tópicos: centralidade em grafos e convexidade em grafos. Na primeira seção, fazemos uma revisão sobre a relevância do estudo de medidas de centralidade, bem como de algumas medidas que são utilizadas durante o texto. Apesar de não termos incluído neste texto, publicamos [28] uma aplicação das centralidades de grau e autovetor ao estudo de coligações partidárias em colaboração com os professores Boaventura-Netto e Jurkiewicz. Por fim, propomos uma nova medida de centralidade, associada à matriz distância e de natureza espectral, a qual denominamos *medida de proximidade espectral*. Apresentamos diversas propriedades a respeito desta nova medida além de fazermos comparações com a medida de proximidade, já consagrada.

Na segunda seção, após uma revisão sobre teoria de convexidade e teoria de convexidade em grafos, e motivados pela definição já existente de conjunto de contorno de um grafo, introduzimos um novo subconjunto de vértices de um grafo, de natureza espectral, que chamamos *conjunto de contorno espectral*. Em ambos os casos, geramos diversos exemplos para compreender e justificar a introdução de tais conceitos. Sobre o conjunto de contorno espectral, enfatizamos o fato de não termos encontrado, na literatura, interseção entre a teoria espectral e teoria de convexidade em grafos.

Ao final dos Capítulos 3, 4, 5, 6 e 7 apresentamos propostas para trabalhos futuros, relativas ao conteúdo ali discutido. No oitavo e último capítulo trazemos nossas considerações finais, onde destacamos as contribuições inéditas contidas neste trabalho.

Capítulo 2

Definições e resultados preliminares

O objetivo deste capítulo é apresentar uma coleção de definições e resultados de Teoria de Matrizes, de Teoria de Grafos e de Teoria Espectral de Grafos que são necessários para o desenvolvimento deste trabalho. Em geral, não incluímos demonstrações, mas sempre sugerimos uma referência onde podem ser encontradas.

2.1 Conceitos básicos em Teoria de Matrizes

Nesta seção, vamos rever algumas definições e apresentar alguns resultados de Teoria de Matrizes, com ênfase em matrizes simétricas, uma vez que as matrizes que utilizamos para representar um grafo neste trabalho são todas simétricas. Portanto, fora menção em contrário, todas as matrizes consideradas são quadradas. Como referências podemos citar [29, 30].

Seja $M = [m_{i,j}]$ uma matriz quadrada de ordem n com entradas reais. A *transposta* de M é a matriz $M^T = [k_{i,j}]$ satisfazendo $k_{i,j} = m_{j,i}$, $1 \leq i, j \leq n$. Se $M^T = M$, dizemos que a matriz M é *simétrica*.

A matriz M é *invertível* se existe uma matriz N tal que $MN = NM = I$, onde I representa a matriz identidade de ordem n . Neste caso, N é dita *inversa* de M e representada por M^{-1} .

Se $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^T$ e $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^T$ são vetores de \mathbb{R}^n , então:

- O *produto interno* de \mathbf{x} e \mathbf{y} é dado por $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \sum_{k=1}^n x_k y_k = \mathbf{x}^T \mathbf{y}$;
- A *p-norma* do vetor \mathbf{x} é definida por:

$$\|\mathbf{x}\|_p = \left(|x_1|_p + |x_2|_p + \dots + |x_n|_p \right)^{1/p}, \quad \text{se } 1 \leq p < \infty.$$

Se $\|\mathbf{x}\|_p = 1$, dizemos que o vetor \mathbf{x} é *p-normalizado*, ou simplesmente *unitário*, quando não for necessário explicitar a *p*-norma utilizada.

Um subconjunto $S = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$ de \mathbb{R}^n é denominado *ortogonal* se quaisquer dois vetores distintos em S são *ortogonais*, isto é, se $\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle = 0$ para $i \neq j$. Se, além disso, $\|\mathbf{x}_i\|_2 = 1$, para $i = 1, \dots, k$, dizemos que o conjunto S é *ortonormal*.

Dizemos que a matriz M é *ortogonal* quando $M^{-1} = M^T$. Uma matriz de ordem n é ortogonal se, e somente se, suas linhas (ou colunas) formam um conjunto ortonormal de vetores em \mathbb{R}^n .

O *traço* da matriz M , $\text{traço}(M)$, é a soma dos elementos da diagonal principal de M .

O *polinômio característico* da matriz M é definido por $P_M(x) = \det(xI - M)$, e suas raízes, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, são chamadas *autovalores* de M . Se λ é um autovalor de M e $v \neq 0$ em \mathbb{R}^n é tal que $Mv = \lambda v$, dizemos que v é um *autovetor* de M *associado* ao autovalor λ . Autovetores associados a autovalores diferentes de M são linearmente independentes.

Para toda matriz M temos que $\det(M) = \lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \dots \cdot \lambda_n$ e $\text{traço}(M) = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n$.

Denotamos por $\mathbb{J}_{\alpha, \beta}$, ou, simplesmente, por \mathbb{J}_α quando $\alpha = \beta$, a matriz de ordem $\alpha \times \beta$ que possui todas as entradas iguais a 1. Por $\mathbf{1}_\alpha$ representamos um vetor que tem todas as suas α coordenadas iguais a 1 e, sempre que for evidente o número de entradas que o vetor possui, usamos apenas $\mathbf{1}$. Por $\mathbf{0}$ denotamos a matriz que possui todas as entradas nulas, com a ordem conveniente.

O resultado que apresentamos a seguir é útil no Capítulo 6.

Teorema 2.1.1. [31] *Sejam M uma matriz quadrada de ordem n e $n_1, n_2, \dots, n_k \in \mathbb{N}$ tais que $\sum_{i=1}^k n_i = n$. Suponhamos que M possa ser escrita na forma de blocos como*

$$M = \begin{bmatrix} M_{1,1} & M_{1,2} & \dots & M_{1,k} \\ M_{2,1} & M_{2,2} & \dots & M_{2,k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ M_{k,1} & M_{k,2} & \dots & M_{k,k} \end{bmatrix},$$

onde cada $M_{i,j}$, $1 \leq i, j \leq k$, é uma matriz de $n_i \times n_j$ cujas linhas têm somas constantes iguais a $c_{i,j}$. Seja $\overline{M} = [c_{i,j}]_{k \times k}$. Então, o polinômio característico de \overline{M} divide o polinômio característico de M . Além disso, se $u = [a_1, a_2, \dots, a_k]^T$ é um autovetor de \overline{M} associado a um autovalor λ , então $w_u = [a_1 \mathbf{1}_{n_1}, a_2 \mathbf{1}_{n_2}, \dots, a_k \mathbf{1}_{n_k}]^T$ é autovetor de M associado a λ .

Listamos, agora, resultados sobre matrizes simétricas e matrizes não negativas.

Se a matriz M é simétrica, então todos os seus autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ são reais e ela é diagonalizável. Neste caso, existe uma matriz ortogonal P tal que $P^T M P = \text{Diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, onde $\text{Diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ é a matriz diagonal cujas entradas são os autovalores de M , ou seja, as colunas de P formam uma base ortonormal de \mathbb{R}^n constituída de autovetores de M .

Uma matriz simétrica M de ordem n é denominada *positiva semidefinida* se $\mathbf{x}^T M \mathbf{x} \geq 0$, para todo $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Equivalentemente, uma matriz simétrica M de ordem n é positiva semidefinida se, e somente se, todos os seus autovalores são maiores ou iguais a 0.

Uma matriz $M = [m_{i,j}]$ é dita ser *diagonalmente dominante* se

$$|m_{i,i}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |m_{i,j}| \quad \forall \quad i = 1, \dots, n.$$

No caso de M ser uma matriz simétrica, diagonalmente dominante e ter as entradas da diagonal principal não negativas, então todos os autovalores de M também são não negativos (M é positiva semidefinida).

Em geral, para uma matriz M não simétrica, a única caracterização possível para seus autovalores é o fato de serem raízes de seu polinômio característico. No caso particular das matrizes simétricas, os autovalores também podem ser caracterizados como soluções de problemas de otimização, como mostram os Teoremas de Rayleigh-Ritz e de Courant-Fischer.

Teorema 2.1.2 (Teorema de Rayleigh-Ritz). *Seja M uma matriz simétrica e sejam λ_{max} e λ_{min} o maior e o menor autovalores de M , respectivamente. Então, $\lambda_{min} \leq \mathbf{x}^T M \mathbf{x} \leq \lambda_{max}$, para qualquer vetor unitário $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, com a igualdade na desigualdade da direita (respectivamente, da esquerda) ocorrendo se e somente se $M \mathbf{x} = \lambda_{max} \mathbf{x}$ (respectivamente, $M \mathbf{x} = \lambda_{min} \mathbf{x}$); mais ainda,*

$$\lambda_{max} = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\mathbf{x}^T M \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} \quad e \quad \lambda_{min} = \min_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\mathbf{x}^T M \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}.$$

Teorema 2.1.3 (Teorema de Courant-Fischer). *Seja M uma matriz simétrica com autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{n-1} \geq \lambda_n$, e seja k um dado inteiro com $1 \leq k \leq n$. Então*

$$\lambda_k = \min_{\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_{k-1} \in \mathbb{R}^n} \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x} \neq 0, \mathbf{x} \perp \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_{k-1}} \frac{\mathbf{x}^T M \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$$

e

$$\lambda_k = \max_{\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_{n-k} \in \mathbb{R}^n} \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x} \neq 0, \mathbf{x} \perp \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_{n-k}} \frac{\mathbf{x}^T M \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$$

Dentre as muitas aplicações do Teorema de Courant-Fischer, uma das mais comuns é a comparação entre os autovalores de $M + N$, M e N , onde M e N são duas matrizes simétricas dadas.

Teorema 2.1.4 (Desigualdade de Courant-Weyl). *Sejam M, N matrizes simétricas com autovalores $\lambda_i(M)$, $\lambda_i(N)$ e $\lambda_i(M+N)$ dispostos em ordem não crescente. Para cada $i = 1, 2, \dots, n$ temos*

$$\lambda_i(M) + \lambda_1(N) \geq \lambda_i(M+N) \geq \lambda_i(M) + \lambda_n(N).$$

Uma matriz P de ordem m é dita uma *submatriz principal* de uma matriz M de ordem n se for obtida a partir da remoção de $n - m$ linhas e das mesmas $n - m$ colunas da matriz M .

Teorema 2.1.5 (Teorema do Entrelaçamento). *Sejam M uma matriz simétrica de ordem n e N uma de submatriz principal de ordem k de M com autovalores, respectivamente dados por, $\lambda_i(M)$ e $\lambda_i(N)$, ambos dispostos em ordem não crescente. Então $\lambda_{n-k+i}(M) \leq \lambda_i(N) \leq \lambda_i(M)$, onde $i = 1, \dots, m$.*

É imediato do Teorema do Entrelaçamento o seguinte resultado:

Corolário 2.1.6. *Sejam M uma matriz simétrica de ordem n e N uma submatriz principal de M de ordem $n - 1$, com autovalores respectivamente dados por $\lambda_i(M)$ e $\lambda_i(N)$, dispostos em ordem não crescente. Então*

$$\lambda_1(M) \geq \lambda_1(N) \geq \lambda_2(M) \geq \lambda_2(N) \geq \dots \geq \lambda_{n-1}(M) \geq \lambda_{n-1}(N) \geq \lambda_n(M),$$

Se φ é uma permutação de $\{1, 2, \dots, n\}$, representamos por M_φ a matriz $[m'_{i,j}]$ tal que $m'_{i,j} = m_{\varphi(i)\varphi(j)}$, $1 \leq i, j \leq n$.

Dizemos que uma matriz M de ordem n é *reduzível* se uma das seguintes condições é satisfeita:

- i) $n = 1$ e $M = 0$;
- ii) $n \geq 2$ e existe permutação φ tal que

$$M_\varphi = \begin{bmatrix} B & C \\ \mathbf{0} & D \end{bmatrix},$$

com B e D matrizes quadradas.

Caso contrário, dizemos que a matriz M é *irreduzível*.

Uma matriz M é denominada *não negativa (positiva)* se suas entradas são números reais não negativos (positivos). Neste caso, escrevemos $M \geq 0$ ($M > 0$).

Teorema 2.1.7 (Teorema de Perron-Frobenius). *Seja $M \geq 0$ uma matriz simétrica, irreduzível e com autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$. Então:*

- i) $\lambda_1 > 0$ e associado a esse autovalor existe um autovetor positivo;

ii) $\lambda_1 > \lambda_2$;

iii) $|\lambda_i| \leq \lambda_1$ para todo $i \in \{1, 2, \dots, n\}$;

iv) $\lambda_1 = -\lambda_n$ se, e só se, existe permutação φ tal que $M_\varphi = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & B \\ B^T & \mathbf{0} \end{bmatrix}$, com as matrizes nulas sendo quadradas.

Dada uma matriz M como nas hipóteses do Teorema 2.1.7, seu maior autovalor é denominado *raio espectral* ou *índice* da matriz M .

Proposição 2.1.8. *Seja $M \geq 0$ uma matriz irredutível ordem n . Então, para toda matriz $R \geq 0$ de ordem n , $M + R$ é irredutível e, além disso, $\lambda_{\max}(M + R) > \lambda_{\max}(M)$, se $R \neq 0$.*

Por fim, do próximo lema é possível obter cotas para o raio espectral de algumas matrizes.

Lema 2.1.9. [32] *Seja $M \geq 0$ uma matriz com raio espectral $\rho(M)$, cujas somas das linhas valem r_1, r_2, \dots, r_n . Então, $\min_{1 \leq i \leq n} r_i \leq \rho(M) \leq \max_{1 \leq i \leq n} r_i$. Mais ainda, se M é irredutível então cada uma das igualdades ocorre se, e somente se, as somas de todas as linhas de M são iguais.*

2.2 Conceitos básicos em Teoria de Grafos

Como referência para os tópicos abordados nesta seção podemos citar os livros [33, 34]. Durante todo o texto, vamos considerar $G = (V, E)$ um grafo simples, finito e não orientado em que V é um conjunto de n vértices e E é um conjunto de m arestas. Quando necessário denotamos $V = V(G)$ e $E = E(G)$. A ordem de um grafo G é o número de vértices de G , usualmente dada por $|V| = n$. Representamos a aresta que une dois vértices adjacentes u e w de G por uw . Utilizamos $G - e$ para denotar o grafo obtido a partir de G pela remoção de uma aresta e .

O *complementar* \overline{G} de um grafo G é o grafo tal que $V(\overline{G}) = V(G)$ e dois vértices são adjacentes em \overline{G} se, e somente se, eles não são adjacentes em G .

Um grafo G é um *grafo completo*, denotado por $G = K_n$, se quaisquer dois vértices de G são adjacentes.

Um grafo H é *subgrafo* de um grafo G se $V(H) \subseteq V(G)$ e $E(H) \subseteq E(G)$. Um subgrafo H de G é dito ser um *subgrafo induzido* de G quando, para $v, w \in V(H)$, $vw \in E(G)$ implica $vw \in E(H)$. Neste caso, denotamos $H = G \langle V(H) \rangle$. Se o grafo $H = G \langle V(H) \rangle$ é completo, dizemos que $V(H)$ é uma *clique*. O *número de independência* de G , denotado por $\alpha(G)$, é o tamanho da maior clique de \overline{G} .

Um *coloração de vértices* de um grafo $G = (V, E)$ é uma função $c : V \rightarrow S$ tal que $c(u) \neq c(w)$ sempre que u e w são adjacentes. A cardinalidade do menor conjunto S tal que $c : V \rightarrow S$ é uma coloração de vértices de G é denominado número cromático de G , e denotado por $\chi(G)$.

O *grau* de um vértice v_i , $d(v_i)$ ou $\text{deg}_G(v_i)$, é o número de vértices adjacentes a v_i em G ; o grau máximo de G é $\Delta(G) = \max_{i=1, \dots, n} d(v_i)$ e o grau mínimo de G é $\delta(G) = \min_{i=1, \dots, n} d(v_i)$.

Um grafo G é dito *r-regular*, ou *regular de grau r*, se $d(v) = r$, para todo $v \in V(G)$. Se $d(v) = 0$ então v é um vértice *isolado*. No caso em que $d(v) = n - 1$, v é dito um vértice *universal*. O *grafo trivial* é aquele que possui apenas um vértice.

Um grafo $G(V, E)$ é *r-partido* quando o seu conjunto de vértices V pode ser particionado em r subconjuntos não vazios V_1, \dots, V_r , tais que toda aresta de G une vértices de subconjuntos distintos. Se $r = 2$, G é dito *bipartido*. Um grafo *r-partido* é dito *completo* se quaisquer dois vértices de subconjuntos diferentes da partição são adjacentes. Sendo $|V_i| = p_i$, $1 \leq i \leq r$, um grafo *r-partido* completo é denotado por K_{p_1, p_2, \dots, p_r} .

Uma *cadeia* em um grafo G é uma sequência de vértices $v_1 v_2 \dots v_k$ de G tais que $v_i v_{i+1} \in E(G)$, $1 \leq i \leq k - 1$. Uma cadeia $v_1 v_2 \dots v_k$ de G é dita *fechada* quando $v_1 = v_k$.

Um *caminho simples*, ou apenas, *caminho*, em um grafo G é um subgrafo P tal que $V(P) = \{v_1, v_2, \dots, v_k\}$ e $E(P) = \{v_1 v_2, v_2 v_3, \dots, v_{k-1} v_k\}$, onde os v_i são todos distintos. Neste caso, escrevemos $P = v_1 v_2 \dots v_k$. Caso G seja ele próprio um caminho com n vértices, denotamos G por P_n .

Se $P = v_1 v_2 \dots v_k$, $k \geq 3$, é um caminho em G e $v_1 v_k \in E(G)$, o grafo $P + v_1 v_k$ é dito um *ciclo* de G . Quando G é ele próprio um ciclo, denotamos G por C_n .

Um grafo G é *conexo* quando existe um caminho entre quaisquer dois vértices de G . Caso contrário, G é dito *desconexo*. Um subgrafo maximal conexo de G é chamado *uma componente conexa* ou, simplesmente, *uma componente* de G .

O *comprimento* de um caminho é o número de arestas que o compõem. Um caminho de comprimento mínimo entre dois vértices v_i e v_j é chamado uma *geodésica* entre v_i e v_j . Se $G = (V, E)$ é um grafo conexo, a *distância* entre dois vértices v_i e v_j de G , denotada por $d_G(i, j)$ ou $d_G(v_i, v_j)$ (omitimos o grafo G da notação quando não causar prejuízo à compreensão), é o comprimento de uma geodésica entre v_i e v_j . Consideramos $d(v_i, v_i) = 0$. Dado um vértice $v_i \in V$, a *excentricidade* $e(v_i)$ é a maior distância entre v_i e qualquer outro vértice de G . O *diâmetro* de G , denotado por $\text{diam}(G)$, é a maior das excentricidades existentes no grafo, isto é, a maior distância entre todos os pares de vértices $v_i, v_j \in V(G)$.

Uma *árvore* é um grafo conexo e acíclico. Em uma árvore, todo vértice v tal que $d(v) = 1$ é chamado *folha* e uma árvore com $n - 1$ folhas é chamada *estrela* e denotada

por S_n . Uma árvore é chamada *starlike* se exatamente um de seus vértices tem grau maior ou igual a três. Por $S(n_1, n_2, \dots, n_k)$ denotamos a árvore starlike que possui um vértice v_1 de grau $k \geq 3$ e que possui a propriedade $S(n_1, n_2, \dots, n_k) - v_1 = P_{n_1} \cup P_{n_2} \cup \dots \cup P_{n_k}$. Assumimos que $n_1 \geq n_2 \geq \dots \geq n_k \geq 1$. Logo, a árvore starlike $S(n_1, n_2, \dots, n_k)$ possui k ramos, cujos comprimentos são $n_1 \geq n_2 \geq \dots \geq n_k$.

Uma *corda* de um caminho P em um grafo G é uma aresta entre dois vértices não consecutivos de P . Um caminho induzido de $G = (V, E)$ é aquele que não possui cordas ou, equivalentemente, é aquele que também é um subgrafo induzido de G . Um grafo é chamado *paridade* quando quaisquer dois caminhos induzidos ligando o mesmo par de vértices têm comprimentos de mesma paridade, par ou ímpar. Um grafo é *cordal* se todo ciclo de tamanho pelo menos quatro possui uma corda, isto é, se o grafo não contém ciclos induzidos de ordem maior ou igual a três. Denominamos *cocordal* o grafo cujo complementar for cordal. Um grafo *Ptolemaico* é um grafo cordal que não contém um *3-fan* (Figura 2.1) como subgrafo induzido. HOWORKA [35] definiu como grafo *distância hereditária* um grafo conexo G com a propriedade de que para todo subgrafo conexo induzido H de G e quaisquer pares de vértices $v_i, v_j \in H$, $d_H(v_i, v_j) = d_G(v_i, v_j)$, e provou que um grafo é Ptolemaico se, e somente se, é cordal e distância-hereditária. É conhecido o fato de que todas estas famílias de grafos estão contidas na família dos grafos *perfeitos*: grafos tais que o número cromático de todo subgrafo induzido é igual à ordem da maior clique deste subgrafo.

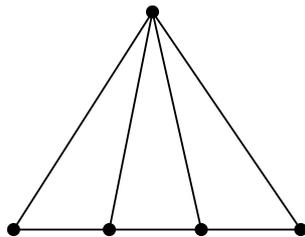


Figura 2.1: Grafo 3-fan.

Uma função $f : V(G_1) \rightarrow V(G_2)$ é dita um *homomorfismo* de G_1 em G_2 se $vw \in E(G_1)$ implica $f(v)f(w) \in E(G_2)$. G_1 e G_2 são *isomorfos*, o que é denotado por $G_1 \cong G_2$, quando existe um homomorfismo bijetor ou *isomorfismo* de G_1 em G_2 . Se G_1 e G_2 não são isomorfos, denotamos $G_1 \not\cong G_2$. Um *automorfismo* de G é um isomorfismo de G em si mesmo. Dois vértices $v_1, v_2 \in V(G)$ são chamados *transitivos* se existe um automorfismo f em G tal que $f(v_1) = v_2$. Um grafo G é dito *vértice-transitivo* quando quaisquer dois vértices distintos são transitivos.

Se $G_1 = (V_1, E_1)$ e $G_2 = (V_2, E_2)$ são grafos com n_1 e n_2 vértices, respectivamente,

seja $V = V_1 \times V_2$. Consideremos, também, que u_1 e v_1 são vértices de G_1 e u_2 e v_2 são vértices de G_2 . Temos que:

- o *produto cartesiano* de G_1 e G_2 é o grafo $G_1 \times G_2$, cujo conjunto de vértices é V e no qual dois vértices (u_1, u_2) e (v_1, v_2) são adjacentes se, e somente se, u_1 é adjacente a v_1 em G_1 e $u_2 = v_2$ ou $u_1 = v_1$ e u_2 é adjacente a v_2 em G_2 ;
- a *união* de G_1 e G_2 é o grafo $G_1 \cup G_2$, cujo conjunto de vértices é $V_1 \cup V_2$ e cujo conjunto de arestas é $E_1 \cup E_2$. Esta operação também é chamada de *soma* de G_1 e G_2 e pode ser representada por $G_1 + G_2$;
- a *junção (join)* de G_1 e G_2 é o grafo $G_1 \vee G_2$, cujo conjunto de vértices é $V(G_1) \cup V(G_2)$ e cujo conjunto de arestas é $E(G_1) \cup E(G_2) \cup \{v_i v_j : v_i \in G_1 \text{ e } v_j \in G_2\}$.

2.3 Conceitos básicos em Teoria Espectral de Grafos

Passamos agora a apresentar alguns conceitos de Teoria Espectral de Grafos que podem ser encontrados em [36].

A *matriz de adjacência* de um grafo G , $A(G) = [a_{i,j}]$, é a matriz quadrada de ordem n , tal que $a_{i,j} = 1$, se os vértices v_i e v_j são adjacentes e, em caso contrário, $a_{i,j} = 0$. O polinômio característico desta matriz, denotado por $P_A^G(x)$, é chamado *polinômio característico do grafo G* . Os autovalores de $A(G)$ são chamados *autovalores* de G . O *espectro* de G é o espectro de $A(G)$, ou seja, é o multiconjunto dos autovalores de $A(G)$ e o denotamos por $Sp(A(G)) = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, onde os autovalores estão dispostos em ordem não crescente. Em geral, nos referimos ao maior autovalor de $A(G)$ como *índice adjacência* e o denotamos apenas por λ .

A *matriz laplaciana* de um grafo G é a matriz $L(G) = \text{Diag}(\text{Deg}) - A(G)$, onde $\text{Diag}(\text{Deg})$ é a matriz diagonal dos graus dos vértices de G . O polinômio característico desta matriz, denotado por $P_L^G(x)$, é chamado *polinômio característico laplaciano do grafo G* . Os autovalores de $L(G)$ são chamados *autovalores laplacianos* de G . O *espectro laplaciano* de G é o espectro de $L(G)$, ou seja, é o multiconjunto dos autovalores de $L(G)$ e o denotamos por $Sp(L(G)) = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)$, onde os autovalores estão dispostos em ordem não crescente. Em geral, nos referimos ao maior autovalor de $L(G)$ como *índice laplaciano* e o denotamos apenas por μ . É fato conhecido que $L(G)$ é uma matriz positiva semidefinida e, portanto, que seus autovalores são todos não negativos. Além disso, dado que $L(G)$ é uma matriz singular, tem-se $\mu_n = 0$. Um grafo G é desconexo se, e somente se, $\mu_{n-1} = 0$.

Similarmente à matriz anterior temos a *matriz laplaciana sem sinal* de um grafo G dada por $Q(G) = \text{Diag}(\text{Deg}) + A(G)$. O polinômio característico desta matriz,

denotado por $P_Q^G(x)$, é chamado *polinômio característico laplaciano sem sinal do grafo G* . Os autovalores de $Q(G)$ são chamados *autovalores laplacianos sem sinal de G* . O *espectro laplaciano sem sinal* de G é o espectro de $Q(G)$, ou seja, é o multiconjunto dos autovalores de $Q(G)$ e o denotamos por $Sp(Q(G)) = (q_1, q_2, \dots, q_n)$, onde os autovalores estão dispostos em ordem não crescente. No geral, nos referimos ao maior autovalor de $Q(G)$ como *índice laplaciano sem sinal* e o denotamos apenas por q . Assim como ocorre com a matriz laplaciana, é possível provar que a matriz $Q(G)$ é positiva semidefinida e, portanto, que seus autovalores são todos não negativos.

Se o grafo G é conexo então sua matriz de adjacência $A(G)$ é irredutível. Pela Proposição 2.1.8, temos que sua matriz laplaciana sem sinal também é irredutível, pois $A(G) \geq 0$, $Diag(Deg) \geq 0$ e $Q(G) = A(G) + Diag(Deg)$. Assim, o Teorema (Perron-Frobenius) 2.1.7 se aplica a essas duas matrizes quando o grafo G é conexo. Se G é um grafo r -regular, então r é um autovalor de $A(G)$ com autovetor associado $\mathbf{1}$.

No próximo capítulo vamos introduzir outras duas matrizes simétricas associadas a um grafo conexo. No geral, se dois grafos não isomorfos possuem o mesmo espectro com respeito a uma matriz M , dizemos que são grafos *M -coespectrais*. Destacamos que neste trabalho as matrizes sempre são reais e simétricas e, portanto, todos os autovalores são ou números inteiros ou números irracionais. Desta forma, sempre que autovalores racionais não inteiros forem apresentados eles representam, na verdade, uma aproximação do valor irracional correspondente.

Capítulo 3

As laplacianas da matriz distância

O objetivo deste capítulo é apresentar ao leitor as duas laplacianas para a matriz distância, propostas por AOUCHICHE e HANSEN [11], em 2013. Além de fazeremos uma revisão de resultados já conhecidos para estas matrizes recém definidas, apresentamos nossas contribuições iniciais ao seu estudo.

3.1 Matriz distância e suas laplacianas

A *matriz distância* de um grafo conexo G , $\mathcal{D}(G) = [d_{i,j}]$, é a matriz quadrada de ordem n , tal que $d_{i,j} = d(v_i, v_j)$. Como $d(v_i, v_i) = 0$, tal matriz tem sua diagonal principal nula. O polinômio característico desta matriz, denotado por $P_{\mathcal{D}}^G(x)$, é chamado *polinômio característico distância do grafo G* . Os autovalores de $\mathcal{D}(G)$ são chamados *autovalores distância* de G . O *espectro distância* de G é o espectro de $\mathcal{D}(G)$, ou seja, é o multiconjunto dos autovalores de $\mathcal{D}(G)$ e o denotamos por $Sp(\mathcal{D}(G)) = (\partial_1, \partial_2, \dots, \partial_n)$, onde os autovalores estão dispostos em ordem não crescente. Em geral, nos referimos ao maior autovalor de $\mathcal{D}(G)$ como *índice distância* e o denotamos apenas por ∂ . É imediato que a matriz distância de um grafo conexo é irredutível e, portanto, o Teorema de Perron-Frobenius (Teorema 2.1.7) se aplica a ela.

Entre os primeiros resultados associados à matriz distância, temos o notável teorema de GRAHAM e POLLACK [4], obtido em 1971, que fornece a expressão do determinante da matriz distância de uma árvore, não valorada, dependendo apenas do número de vértices n ,

$$\det(\mathcal{D}) = (-1)^{n-1}(n-1)2^{n-2}.$$

Uma consequência do resultado acima é que o espectro da matriz distância de qualquer árvore com n vértices contém um autovalor positivo e $n - 1$ autovalores negativos.

Após o importante resultado de Graham e Pollack, a matriz distância ganhou maior evidência na área da Teoria Espectral de Grafos de forma que outros trabalhos o seguiram. Em 1978, GRAHAM e LOVÁSZ [37] determinaram a inversa da matriz distância de uma árvore.

Teorema 3.1.1. [37] *Se T é uma árvore com $n \geq 2$ vértices, matriz distância $\mathcal{D} = [d_{i,j}]$ e matriz adjacência $A = [a_{i,j}]$, então a matriz inversa $\mathcal{D}^{-1} = [d_{i,j}^{-1}]$ é determinada por*

$$d_{i,j}^{-1} = \frac{(2 - d_i)(2 - d_j)}{2(n - 1)} + \begin{cases} -\frac{d_i}{2} & \text{se } i = j, \\ \frac{a_{i,j}}{2} & \text{se } i \neq j, \end{cases}$$

onde d_i denota o grau do vértice v_i .

Observação 3.1.2. *Se $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ é um vetor definido de forma que $x_i = 2 - d_i$ para todo $1 \leq i \leq n$, então a matriz inversa \mathcal{D}^{-1} pode ser expressa como*

$$\mathcal{D}^{-1} = \frac{1}{2(n - 1)} \mathbf{xx}^T - \frac{1}{2} L,$$

onde L denota a matriz laplaciana de G . Tal fato explicita uma relação entre a inversa da matriz distância de uma árvore e sua matriz laplaciana.

Ainda na década de setenta, EDELBERG *et al.* [38], GRAHAM e LOVÁSZ [37] e HOSOYA *et al.* [39] estudaram o polinômio característico da matriz distância determinando, em casos particulares, os seus coeficientes. Até o presente momento, diversos outros avanços foram obtidos com respeito ao espectro da matriz distância e para mais detalhes sugerimos [10].

Paralelamente ao estudo puramente espectral da matriz distância, também deve-se enfatizar a relevância desta matriz para o desenvolvimento da Química, inclusive através do índice de Wiener. MIHALIC *et al.* [1] fazem uma revisão sobre o uso da matriz distância em Química.

Algumas novas matrizes já foram definidas a partir do conceito de matriz distância. Uma das mais naturais, quando pensamos em aplicações da matriz distância a problemas de logística, por exemplo, é a extensão da definição a grafos valorados. Grande parte dos resultados válidos para a matriz distância de árvores não valoradas também puderam ser estendidos ao caso valorado em BAPAT [40] e BAPAT *et al.* [41]. Outras definições foram introduzidas: uma q-análoga para a matriz distância e a matriz distância exponencial, em BAPAT *et al.* [42], e a matriz distância resistência, em KLEIN e RANDIC [43].

Em 2013, AOUCHICHE e HANSEN [11] propuseram, baseados nos conceitos de matriz laplaciana e laplaciana sem sinal associadas à matriz adjacência de um grafo,

duas laplacianas associadas à matriz distância de um grafo: a *matriz distância laplaciana* e a *matriz distância laplaciana sem sinal* de um grafo conexo . Para apresentá-las, precisamos introduzir o conceito de transmissão de um vértice.

Definição 3.1.3. Se $G = (V, E)$ é um grafo conexo então a transmissão $Tr(v_i)$ de um vértice $v_i \in V(G)$ é definida como a soma das distâncias de v_i a todos os demais vértices de G , isto é,

$$Tr(v_i) = \sum_{v_j \in V} d_{v_i, v_j}.$$

Denotamos a transmissão mínima do grafo por t_G e sua transmissão máxima por T_G . Sempre que o contexto deixar claro a qual grafo estamos nos referindo, escrevemos apenas t e T . No caso de todos os vértices do grafo possuírem a mesma transmissão k , isto é, $Tr(v_i) = k$ para todo vértice $v_i \in V$, dizemos que este grafo é k -transmissão regular ou apenas transmissão regular, caso não seja necessário explicitar o valor de k .

Observação 3.1.4. Os grafos transmissão regulares também são conhecidos como grafos distância balanceada [44] e como grafos self-median [45].

É importante ressaltar que um grafo ser regular não é uma condição necessária nem suficiente para que ele seja transmissão regular, como mostram as Figuras 3.1 e 3.2. Na verdade, uma condição suficiente seria o grafo ser vértice transitivo já que neste caso, para qualquer par de vértices distintos de G , existe um automorfismo em G , que preserva distâncias, associando um vértice ao outro [11].

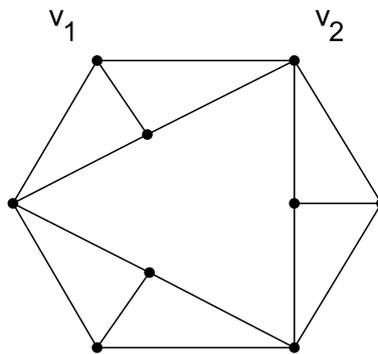


Figura 3.1: Grafo 14-transmissão regular apesar de não ser regular, já que $d(v_1) \neq d(v_2)$.

Como uma primeira contribuição apresentamos as seguintes cotas para as transmissões mínima e máxima de um grafo:

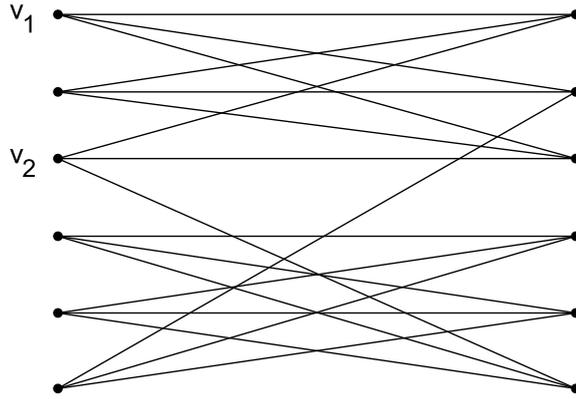


Figura 3.2: Grafo regular e não transmissão regular, já que $T_r(v_1) = 26$ e $T_r(v_2) = 24$.

Proposição 3.1.5. *Se $G = (V, E)$ é um grafo conexo então $t \geq n - 1$ e $T \leq \text{diam}(G)(n - 1)$. No primeiro caso, a igualdade ocorre se, e somente se, o grafo possui um vértice universal e no segundo caso se, e somente se, $G \cong K_n$.*

Demonstração. Quanto à cota apresentada para transmissão mínima, basta observar que a soma das distâncias de um vértice fixado aos demais vértices do grafo é mínima se, e somente se, ele é adjacente a todos os demais, isto é, quando é universal. Para a cota relativa à transmissão máxima, temos que a maior distância entre dois vértices de G é exatamente o diâmetro de G . Logo, é evidente que $\text{diam}(G)(n - 1)$ é uma cota superior para a transmissão máxima. A cota é atingida se, e somente se, existir vértice v_i que diste $\text{diam}(G)$ de todos os outros vértices do grafo. Como existe vértice adjacente a v_i , que portanto dista 1 de v_i , temos $\text{diam}(G) = 1$, o que implica em $G \cong K_n$. Reciprocamente, se $G \cong K_n$ então $T = n - 1 = \text{diam}(G)(n - 1)$. \square

Definição 3.1.6. *A matriz distância laplaciana de um grafo conexo G , que denotamos por $\mathcal{D}^L(G)$, é a matriz definida por*

$$\mathcal{D}^L(G) = \text{Tr}(G) - \mathcal{D}(G),$$

onde $\text{Tr}(G)$ denota a matriz diagonal das transmissões dos vértices de G .

O polinômio característico desta matriz, que denotamos por $P_{\mathcal{D}^L}^G(x)$, é chamado polinômio característico distância laplaciano do grafo G . Os autovalores de $\mathcal{D}^L(G)$ são chamados autovalores distância laplacianos de G . O espectro distância laplaciano de G é o espectro de $\mathcal{D}^L(G)$, ou seja, é o multiconjunto dos autovalores de $\mathcal{D}^L(G)$, e o denotamos por $\text{Sp}(\mathcal{D}^L(G)) = (\partial_1^L, \partial_2^L, \dots, \partial_{n-1}^L, \partial_n^L)$, onde os autovalores estão dispostos em ordem não crescente. Em geral, nos referimos ao maior autovalor

de $\mathcal{D}^L(G)$ como *índice distância laplaciano* e o denotamos apenas por ∂^L . Sempre que estiver claro a qual grafo nos referimos, omitimos o G das nomenclaturas.

Analogamente, temos a definição de matriz distância laplaciana sem sinal.

Definição 3.1.7. *A matriz distância laplaciana sem sinal de um grafo conexo G , que denotamos por $\mathcal{D}^Q(G)$, é a matriz definida por*

$$\mathcal{D}^Q(G) = Tr(G) + \mathcal{D}(G),$$

onde $Tr(G)$ denota a matriz diagonal das transmissões dos vértices de G .

O polinômio característico desta matriz, que denotamos por $P_{\mathcal{D}^Q}^G(x)$, é chamado polinômio característico distância laplaciano sem sinal do grafo G . Os autovalores de $\mathcal{D}^Q(G)$ são chamados autovalores distância laplacianos sem sinal de G . O espectro distância laplaciano de G é o espectro de $\mathcal{D}^Q(G)$, ou seja, é o multiconjunto dos autovalores de $\mathcal{D}^Q(G)$, e o denotamos por $Sp(\mathcal{D}^Q(G)) = (\partial_1^Q, \partial_2^Q, \dots, \partial_{n-1}^Q, \partial_n^Q)$, onde os autovalores estão dispostos em ordem não crescente. Em geral, nos referimos ao maior autovalor de $\mathcal{D}^Q(G)$ como *índice distância laplaciano sem sinal* e o denotamos apenas por ∂^Q . Sempre que estiver claro a qual grafo nos referimos, omitimos o G das nomenclaturas.

Note que a soma dos elementos de cada linha da matriz distância laplaciana é nula. Logo, todo grafo tem o zero como autovalor distância laplaciano, associado ao autovetor $\mathbf{1}$. Também é fácil ver que, se um grafo for k -transmissão regular, então a soma dos elementos de cada linha da matriz distância laplaciana sem sinal é constante, igual a $2k$. Neste caso, seu índice distância laplaciano sem sinal vale $\partial^Q = 2k$, estando associado ao autovetor $\mathbf{1}$. Além disto, assim como ocorrem com as matrizes $A(G)$, $Q(G)$ e $\mathcal{D}(G)$, a matriz $\mathcal{D}^Q(G)$ também é irredutível pela Proposição 2.1.8, já que é a soma de uma matriz irredutível com uma matriz não negativa. Portanto, o Teorema de Perron-Frobenius (Teorema 2.1.7) também se aplica a esta matriz.

As duas próximas proposições são úteis para apresentarmos cotas simples para os autovalores das laplacianas da matriz distância.

Proposição 3.1.8. *[11] Para o grafo completo temos $A(K_n) = \mathcal{D}(K_n)$ e portanto também valem as igualdades $L(K_n) = \mathcal{D}^L(K_n)$ e $Q(K_n) = \mathcal{D}^Q(K_n)$. Sendo assim, a matriz distância e suas laplacianas possuem os seguintes polinômios característicos e espectros:*

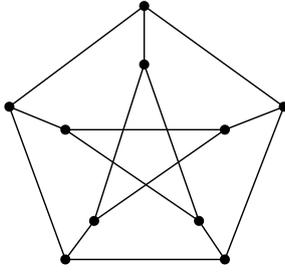
- i) $P_{\mathcal{D}}^{K_n}(x) = (x - n + 1)(x + 1)^{n-1}$ e $Sp(\mathcal{D}(K_n)) = (n - 1, -1^{(n-1)})$;
- ii) $P_{\mathcal{D}^L}^{K_n}(x) = x(x - n)^{n-1}$ e $Sp(\mathcal{D}^L(K_n)) = (n^{(n-1)}, 0)$;
- iii) $P_{\mathcal{D}^Q}^{K_n}(x) = (x - 2n + 2)(x - n + 2)^{n-1}$ e $Sp(\mathcal{D}^Q(K_n)) = (2n - 2, (n - 2)^{(n-1)})$;

Proposição 3.1.9. [11] Se $G \cong K_n - e$ onde e denota uma aresta qualquer do grafo completo então

$$i) P_{\mathcal{D}^L}^{K_n - e}(x) = x(x - n + 2)(x - n)^{n-2};$$

$$ii) P_{\mathcal{D}^Q}^{K_n - e}(x) = \left(x - \frac{3n - 2 + \sqrt{n^2 - 4n + 20}}{2} \right) \left(x - \frac{3n - 2 - \sqrt{n^2 - 4n + 20}}{2} \right) (x - n + 2)^{n-2}.$$

Exemplo 3.1.10. A Figura 3.3 traz o grafo de Petersen e os espectros associados às matrizes $A(G)$, $L(G)$, $Q(G)$, $\mathcal{D}(G)$, $\mathcal{D}^L(G)$ e $\mathcal{D}^Q(G)$, onde o expoente entre parênteses denota a multiplicidade de cada autovalor. Todos os espectros são compostos apenas por números inteiros e apresentam exatamente 3 autovalores distintos.



A -espectro	$3^{(1)}$	$1^{(5)}$	$-2^{(4)}$
L -espectro	$5^{(4)}$	$2^{(5)}$	$0^{(1)}$
Q -espectro	$4^{(5)}$	$2^{(1)}$	$1^{(4)}$
\mathcal{D} -espectro	$15^{(1)}$	$0^{(4)}$	$-3^{(5)}$
\mathcal{D}^L -espectro	$18^{(5)}$	$15^{(4)}$	$0^{(1)}$
\mathcal{D}^Q -espectro	$30^{(1)}$	$15^{(4)}$	$12^{(5)}$

Figura 3.3: Grafo de Peterson e seus espectros.

Com a introdução de novas matrizes torna-se natural o estudo a respeito da existência ou não de grafos não isomorfos que possuam o mesmo espectro com respeito a estas matrizes. De fato, o estudo de coespectralidade possui grande relevância no contexto da Teoria Espectral de Grafos. Já em 1956, GUNTARD e PRIMAS [46] propuseram a questão: “Quais grafos são determinados pelo seu A -espectro?”. Neste mesmo artigo foi conjecturado que não existem grafos A -coespectrais. Tal conjectura foi refutada um ano depois por COLLATZ e SINGOWITZ [47], que exibiram duas árvores A -coespectrais que são, de fato, as menores árvores com tal propriedade (Figura 3.4). Em 1973, SCHWENK [48] exibiu não só uma família infinita de árvores A -coespectrais como também provou que, assintoticamente, toda árvore admite outra árvore, não isomorfa, A -coespectral, isto é, a proporção de árvores, quando consideramos apenas a classe das árvores, que possuem par coespectral tende a 1 quando a ordem n tende a infinito.

A coespectralidade com respeito a outras matrizes também vem sendo estudada. A L -coespectralidade foi estudada em [49–53] e a Q -coespectralidade foi estudada em [49, 54]. Em ambos os casos, não é possível determinar completamente as árvores pelos seus espectros. MCKAY [55] estudou a \mathcal{D} -coespectralidade obtendo um resultado

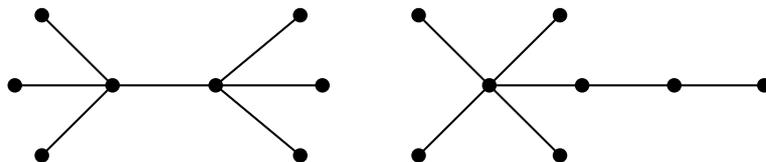


Figura 3.4: Árvores não isomorfas com os mesmos autovalores para a matriz adjacência: $(2, 30278; 1, 30278; 0^{(4)}; -1, 30278; -2, 30278)$.

análogo ao de Schwenk com respeito ao comportamento das árvores A -coespectrais quando o número de vértices n tende a infinito. A Figura 3.5 traz o menor par de árvores \mathcal{D} -coespectrais [11].

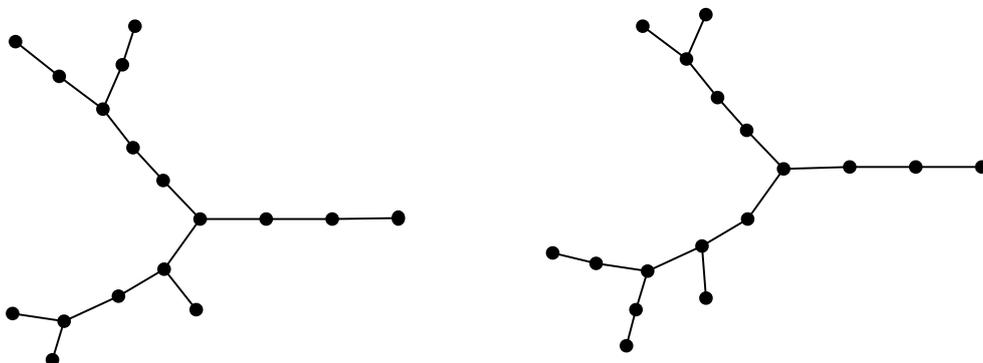


Figura 3.5: O menor par de árvores \mathcal{D} -coespectrais não isomorfas.

Com respeito às matrizes distância laplaciana e distância laplaciana sem sinal, AOUCHICHE e HANSEN [11] verificaram computacionalmente que na classe das árvores com até 20 vértices, abrangendo um total de 1346023 árvores, não existem grafos \mathcal{D}^L -coespectrais nem \mathcal{D}^Q -coespectrais. Com isto, conjecturaram que toda árvore é determinada pelo seu espectro distância laplaciano bem como pelo espectro distância laplaciano sem sinal. Evidentemente, da coespectrabilidade poderia ser estendida a outras famílias de grafos ou até mesmo a todos os grafos conexos. Para responder a estas questões é necessário compreender melhor o comportamento do es-

pectro destas matrizes. Na sequência, trazemos alguns dos resultados já presentes na literatura. É interessante observar que, em algumas situações, as matrizes distância laplaciana e distância laplaciana sem sinal apresentam comportamento semelhante aos das matrizes laplaciana e laplaciana sem sinal, respectivamente. Destacamos mais uma vez [11] como nossa referência principal, além de [12, 13], que trazem outros resultados interessantes.

Num primeiro momento, observemos que, para grafos transmissão regulares os espectros relativos às matrizes distância laplaciana e distância laplaciana sem sinal são obtidos de forma simples a partir do espectro da matriz distância. Com efeito, se G é um grafo k -transmissão regular então o polinômio característico da matriz distância laplaciana é dado por

$$P_{\mathcal{D}^L}(x) = \det(\mathcal{D}^L - xI) = (-1)^n \det(\mathcal{D} - (k - x)I) = (-1)^n P_{\mathcal{D}}(k - x)$$

e o da matriz distância laplaciana sem sinal por

$$P_{\mathcal{D}^Q}(x) = \det(\mathcal{D}^Q - xI) = \det(\mathcal{D} + (k - x)I) = \det(\mathcal{D} - (x - k)I) = P_{\mathcal{D}}(x - k).$$

Portanto, se $\partial_1 \geq \partial_2 \geq \dots \geq \partial_n$ são os autovalores associados à matriz distância de G então

- i) $k - \partial_n \geq k - \partial_{n-1} \geq \dots \geq k - \partial_1$ são os autovalores distância laplacianos de G ;
- ii) $k + \partial_1 \geq k + \partial_2 \geq \dots \geq k + \partial_n$ são os autovalores distância laplacianos sem sinal de G .

São conhecidas as seguintes cotas para o índice da matriz distância e da matriz distância laplaciana sem sinal, consequências do Lema 2.1.9.

Proposição 3.1.11. [15] *Se G é um grafo conexo com n vértices com T e t denotando as suas transmissões máxima e mínima, respectivamente, então $t \leq \partial \leq T$. Mais ainda, cada uma das igualdades ocorre se, e somente se, G é transmissão regular.*

Proposição 3.1.12. [15] *Se G é um grafo conexo com n vértices com T e t denotando as suas transmissões máxima e mínima, respectivamente, então $2t \leq \partial^Q \leq 2T$. Mais ainda, cada uma das igualdades ocorre se, e somente se, G é transmissão regular.*

Utilizando as Proposições 3.1.5 e 3.1.11, podemos enunciar:

Corolário 3.1.13. *Se G é um grafo conexo com n vértices então $\partial \geq n - 1$. A igualdade ocorre se e somente se $G \cong K_n$.*

Exemplo 3.1.14. [15] Em particular, a Proposição 3.1.12 nos dá uma forma simples de determinar o índice distância laplaciano sem sinal de grafos transmissão regulares bastando, para isso, determinar sua transmissões:

$$i) \partial^Q(K_n) = 2(n-1);$$

$$ii) \partial^Q(K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}}) = 3n-4;$$

$$iii) \partial^Q(C_n) = \begin{cases} \frac{n^2-1}{2}, & \text{se } n \text{ é ímpar,} \\ \frac{n^2}{2}, & \text{se } n \text{ é par.} \end{cases}$$

Também é possível estabelecer uma relação entre os autovalores laplacianos e distância laplacianos de um grafo de diâmetro menor ou igual a dois, como mostra o próximo teorema.

Teorema 3.1.15. [11] Seja G um grafo conexo com n vértices e $\text{diam}(G) \leq 2$. Sejam $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_{n-1} \geq \mu_n = 0$ os autovalores laplacianos de G . Então os autovalores da matriz distância laplaciana de G são $2n - \mu_{n-1} \geq 2n - \mu_{n-2} \geq \dots \geq 2n - \mu_1 > \partial_n^L = 0$. Mais ainda, para todo $i \in \{1, 2, \dots, n-1\}$, os autoespaços correspondentes a μ_i e a $2n - \mu_{n-i}$ são os mesmos.

Na Observação 3.1.2 mostramos que a inversa da matriz distância de uma árvore pode ser escrita em função de sua matriz laplaciana. Temos um resultado análogo para a matriz distância laplaciana, no caso de diâmetro dois.

Proposição 3.1.16. [11] Seja G um grafo conexo com $n \geq 2$ vértices e diâmetro 2. Então

$$\mathcal{D}^L = 2nI - PR^T LRP^T$$

onde $P = [P_1, P_2, \dots, P_{n-1}, P_n]$ e $R = [P_{n-1}, P_{n-2}, \dots, P_1, P_n]$ são matrizes ortogonais tais que P_1, P_2, \dots, P_n denotam, respectivamente, os autovetores de \mathcal{D}^L associados a $\partial_1^L, \partial_2^L, \dots, \partial_n^L$.

As matrizes laplaciana e laplaciana sem sinal possuem a propriedade do entrelaçamento de autovalores quando retiramos uma aresta do grafo, isto é: se G é um grafo qualquer e \tilde{G} é o grafo obtido após a retirada de uma aresta de G , então valem as relações

$$\mu_1(G) \geq \mu_1(\tilde{G}) \geq \mu_2(G) \geq \mu_2(\tilde{G}) \geq \dots \geq \mu_{n-1}(G) \geq \mu_{n-1}(\tilde{G}) \geq \mu_n(G) \quad e$$

$$q_1(G) \geq q_1(\tilde{G}) \geq q_2(G) \geq q_2(\tilde{G}) \geq \dots \geq q_{n-1}(G) \geq q_{n-1}(\tilde{G}) \geq q_n(G).$$

As matrizes distância laplaciana e distância laplaciana sem sinal não possuem a propriedade de entrelaçarem seus autovalores no caso de remoção de uma aresta, como mostra o próximo exemplo.

Exemplo 3.1.17. *Considere o grafo C_5 e o grafo P_5 , obtido de C_5 pela remoção de uma aresta. Temos os seguintes espectros relativos às matrizes distância, distância laplaciana e distância laplaciana sem sinal, que não se entrelaçam:*

- $Sp(\mathcal{D}(C_5)) = (6; -0,38197; -0,38197; -2,61803; -2,61803),$
 $Sp(\mathcal{D}(P_5)) = (8,28822; -0,55780; -0,76393; -1,73042; -5,23607);$
- $Sp(\mathcal{D}^L(C_5)) = (8,61803; 8,61803; 6,38197; 6,38197; 0),$
 $Sp(\mathcal{D}^L(P_5)) = (14,70156; 10; 8,29844; 7; 0);$
- $Sp(\mathcal{D}^Q(C_5)) = (12; 5,61803; 5,61803; 3,38197; 3,38197),$
 $Sp(\mathcal{D}^Q(P_5)) = (17,11518; 7,56155; 6,79273; 5,09208; 3,43845).$

De qualquer forma, é conhecida a seguinte propriedade correspondente para estas matrizes:

Teorema 3.1.18. [11] *Considere o grafo conexo \tilde{G} obtido pela remoção de uma aresta do grafo G . Então $\partial_i^L(\tilde{G}) \geq \partial_i^L(G)$ e $\partial_i^Q(\tilde{G}) \geq \partial_i^Q(G)$ para todo $i = 1, \dots, n$.*

Demonstração. Vamos demonstrar o resultado apenas no caso da matriz distância laplaciana, visto que o caso da matriz distância laplaciana sem sinal segue analogamente. Podemos escrever a matriz distância laplaciana de \tilde{G} por $\mathcal{D}^L(\tilde{G}) = \mathcal{D}^L(G) + M$, onde a matriz M expressa as mudanças geradas em $\mathcal{D}^L(G)$ pela retirada de uma aresta de G . Denotando os autovalores de M por $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n$, segue das desigualdades de Courant-Weyl (Teorema 2.1.4) que

$$\partial_i^L(\tilde{G}) \geq \partial_i^L(G) + \sigma_i.$$

Como a matriz M é positiva semidefinida, já que é diagonalmente dominante com entradas da diagonal principal não negativas, todos os seus autovalores são não negativos e temos o resultado. \square

Como consequência imediata temos as seguintes cotas:

Corolário 3.1.19. [11] *Seja G um grafo conexo com $n \geq 3$ vértices. Então*

- i) $\partial_i^L(G) \geq \partial_i^L(K_n) = n$, para todo $1 \leq i \leq n-1$, e $\partial_n^L(G) = \partial_n^L(K_n) = 0$;
- ii) $\partial_1^Q(G) \geq \partial_1^Q(K_n) = 2n-2$ e $\partial_i^Q(G) \geq \partial_i^Q(K_n) = n-2$, para todo $2 \leq i \leq n$.
 Mais ainda, $\partial_2^Q(G) = \partial_2^Q(K_n) = n-2$ se, e somente se, G é o grafo completo K_n .

Demonstração. As desigualdades seguem diretamente do Teorema 3.1.18 e das Proposições 3.1.8 e 3.1.9, já que qualquer grafo de n vértices é obtido através da remoção de arestas de K_n . Para provar que $\partial_2^Q(G) = \partial_2^Q(K_n) = n - 2$ se, e somente se, G é o grafo completo K_n é suficiente observar que $G \not\cong K_n$ então

$$\partial_2^Q(G) \geq \partial_2^Q(K_n - e) = \frac{3n - 2 - \sqrt{n^2 - 4n + 20}}{2} > n - 2.$$

□

São amplamente conhecidos os seguintes resultados a respeito da matriz laplaciana e laplaciana sem sinal de um grafo:

Teorema 3.1.20. [56] *Em qualquer grafo, a multiplicidade do autovalor zero da matriz laplaciana é igual ao número de componentes conexas.*

Teorema 3.1.21. [57] *Em qualquer grafo a multiplicidade do autovalor zero da matriz laplaciana sem sinal é igual ao número de componentes bipartidas.*

Os próximos resultados mostram que, em certo sentido, as matrizes distância laplaciana e distância laplaciana sem sinal apresentam comportamento semelhante ao das matrizes laplaciana e laplaciana sem sinal, respectivamente, mas indicando propriedades a respeito do complemento do grafo, no lugar do grafo em questão.

Teorema 3.1.22. [12] *Seja G um grafo conexo com n vértices. Então $\partial_{n-1}^L = n$ se, e somente se, \overline{G} é desconexo. Além disso, a multiplicidade do n como um autovalor de \mathcal{D}^L é um a menos do que o número de componentes conexas de \overline{G} .*

Teorema 3.1.23. [13] *Seja G um grafo conexo com $n \geq 3$ vértices e diâmetro d . Sejam $\partial_1^Q \geq \partial_2^Q \geq \dots \geq \partial_n^Q$ e $\overline{q}_1 \geq \overline{q}_2 \geq \dots \geq \overline{q}_n$ os espectros distância laplaciano sem sinal de G e laplaciano sem sinal de seu complemento, \overline{G} .*

i) *Se $d = 2$, então*

$$\begin{aligned} n - 2 + \overline{q}_i &\leq \partial_i^Q \leq 2n - 2 + \overline{q}_i \quad \forall \quad 1 \leq i \leq n; \\ n - 2 + \overline{q}_n &\leq \partial_i^Q \leq n - 2 + \overline{q}_1 \quad \forall \quad 1 \leq i \leq n - 1; \\ 2n - 2 + \overline{q}_n &\leq \partial_1^Q \leq 2n - 2 + \overline{q}_1. \end{aligned} \tag{3.1}$$

ii) *Se $d \geq 3$, então*

$$\partial_i^Q \geq n - 2 + \overline{q}_i \quad \forall \quad 1 \leq i \leq n. \tag{3.2}$$

Corolário 3.1.24. [13] *Seja G um grafo conexo com n vértices. Se $\partial_n^Q = n - 2$ é um autovalor distância laplaciano sem sinal com multiplicidade η , então o complemento \overline{G} de G contém pelo menos η componentes, cada uma delas sendo bipartida.*

Demonstração. Das Equações (3.1) e (3.2) do teorema anterior segue que se $\partial_n^Q = n - 2$ é um autovalor distância laplaciano sem sinal de G com multiplicidade η então seu complementar \overline{G} tem o autovalor zero com multiplicidade pelo menos η para a matriz laplaciana sem sinal. O resultado segue do Teorema 3.1.21. \square

Vale ressaltar que a condição apresentada no Corolário 3.1.24 é suficiente mas não é necessária, já que existem grafos cujo complemento é bipartido e tais que $\partial_n^Q > n - 2$. De fato, se $G \cong \overline{P}_7$, então $\partial_7^Q(\overline{P}_7) \cong 5,04282 > 5$ enquanto $\overline{G} = P_7$ é bipartido.

3.2 Autovalores da matriz distância sem sinal e o índice de Wiener

O índice de Wiener é um dos descritores da estrutura de uma molécula baseados na Teoria dos Grafos mais antigos e utilizados. Um grande número de aplicações deste índice em Química já são conhecidas, assim como muito já se sabe a respeito de suas propriedades matemáticas. Para mais detalhes a respeito destes fatos, citamos [1, 58, 59] e as diversas referências contidas nestes trabalhos.

Definição 3.2.1. *O índice de Wiener de um grafo conexo G , denotado por $W(G)$, é definido pela soma de todas as distâncias em G , isto é,*

$$W(G) = \frac{1}{2} \sum_{i,j \in V} d_{i,j}.$$

Por simplicidade, sempre que o contexto deixar claro a qual grafo se refere o índice de Wiener, utilizamos apenas W . É imediato que podemos escrever o índice de Wiener de um grafo em função das transmissões de seus vértices:

$$W(G) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n Tr(v_i).$$

As duas próximas proposições mostram que é possível relacionar o índice de Wiener de um grafo com o índice da matriz distância bem como, no caso das árvores, com a soma dos inversos dos seus autovalores laplacianos não nulos. Neste sentido, é natural nos perguntarmos sobre a existência de relação entre o índice de Wiener e os autovalores das laplacianas da matriz distância. Como vemos na sequência, a resposta é positiva e, portanto, podemos ter no índice de Wiener uma ferramenta para estudar o espectro das laplacianas da matriz distância.

Proposição 3.2.2. [60] *Seja G um grafo conexo simples com índice de Wiener W .*

Então

$$\partial \geq \frac{2W}{n},$$

com a igualdade ocorrendo se, e somente se, o grafo é transmissão regular.

Proposição 3.2.3. [61] *Seja G uma árvore. Então*

$$W(G) = n \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{\mu_i}$$

Com respeito às laplacianas da matriz distância, apresentamos a seguinte contribuição:

Proposição 3.2.4. *Se G é um grafo conexo simples com índice de Wiener W então*

$$2W = \sum_{i=1}^n \partial_i^Q = \sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L$$

Demonstração. Basta observar que

$$\sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L = \sum_{i=1}^n \partial_i^Q = \text{traço}(\mathcal{D}^Q) = \sum_{i=1}^n \text{Tr}(v_i) = 2W.$$

□

As Proposições 3.2.3 e 3.2.4 nos permitem relacionar os autovalores laplacianos com os autovalores associados às laplacianas da matriz distância de uma árvore.

Corolário 3.2.5. *Se G é uma árvore com n vértices então*

$$\sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L = \sum_{i=1}^n \partial_i^Q = 2n \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{\mu_i}.$$

Corolário 3.2.6. *Sejam G um grafo conexo e $\overline{\partial}^L$ e $\overline{\partial}^Q$ a média dos autovalores das matrizes distância laplaciana e distância laplaciana sem sinal, respectivamente. Então*

$$\partial \geq \overline{\partial}^L = \overline{\partial}^Q.$$

com a igualdade valendo se, e somente se, o grafo é transmissão regular.

Na Seção 3.1 deste texto, discutimos brevemente a relevância do estudo da coespectralidade na Teoria de Grafos. Os Corolários 3.2.4 e 3.2.5 nos permitem pensar no índice de Wiener como ferramenta para o estudo de coespectralidade com respeito às laplacianas da matriz distância. Neste sentido enunciamos os dois próximos resultados:

Corolário 3.2.7. *Se G_1 e G_2 são grafos conexos que possuem índice de Wiener distintos, então estes grafos não são \mathcal{D}^Q -coespectrais e não são \mathcal{D}^L -coespectrais.*

Demonstração. Do Corolário 3.2.4, o fato de dois grafos possuírem índices de Wiener distintos implica em somas dos autovalores da matriz distância laplaciana e distância laplaciana sem sinal distintas e, portanto, ao menos um autovalor não é comum aos espectros. \square

Corolário 3.2.8. *Se T_1 e T_2 são árvores que possuem índice de Wiener distintos então estes grafos não são L -coespectrais.*

Observação 3.2.9. *As recíprocas dos Corolários 3.2.7 e 3.2.8 não são verdadeiras. Basta observar as árvores apresentadas na Figura 3.6 possuem o mesmo índice de Wiener, apesar de não serem L -coespectrais, \mathcal{D}^L -coespectrais, nem \mathcal{D}^Q -coespectrais.*

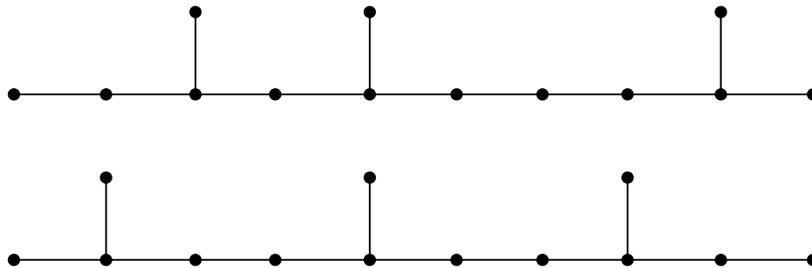


Figura 3.6: Árvores que possuem o mesmo índice de Wiener, igual a 306, e não são L -coespectrais, \mathcal{D}^L -coespectrais, nem \mathcal{D}^Q -coespectrais.

Em ENTRINGER *et al.* [62] é apresentado o seguinte teorema a respeito do índice de Wiener de árvores:

Teorema 3.2.10. [62] *Se G é uma árvore de ordem n não isomorfa a P_n nem a S_n então $W(S_n) < W(G) < W(P_n)$. Mais ainda,*

$$W(P_n) = \frac{1}{6}(n-1)n(n+1) \quad e \quad W(S_n) = (n-1)^2.$$

Corolário 3.2.11. *Na classe das árvores, P_n e S_n são totalmente determinadas tanto pelo seu espectro distância laplaciano como pelo seu espectro distância laplaciano sem sinal.*

Demonstração. Segue imediatamente dos Corolários 3.2.7 e 3.2.8, respectivamente. \square

Em DAS e GUTMAN [58] é determinado o índice de Wiener para grafos de diâmetro 2, em função do número de vértices e arestas. Também são apresentadas cotas superiores e inferiores para este índice em função do número de vértices, arestas e diâmetro do grafo. Uma releitura destes resultados, a partir da Proposição 3.2.4, nos permite enunciar a próxima proposição.

Denotamos por G^* um grafo de diâmetro d ($3 \leq d \leq 4$) e $|V(G^*)| \geq d + 2$, tendo a seguinte propriedade: Seja P_{d+1} um caminho com $(d + 1)$ vértices contido em G^* . Então, para qualquer vértice $v_i \in V(G^*) - V(P_{d+1})$ e para quaisquer vértices $v_j \in V(G^*), j \neq i$, devemos ter $d(v_i, v_j) = 1$ ou 2 . A Figura 3.7 traz dois exemplos de grafos G^* . Por G^{**} denotamos um grafo que não tenha como subgrafo induzido C_3 nem C_4 , com diâmetro $d = 4$ e $|V(G^{**})| \geq d + 2$, tal que para qualquer vértice $v_i \in V(G^{**}) - V(P_{d+1})$ e para qualquer vértice $v_j \in V(G^{**}), j \neq i$, $d(v_i, v_j) = 1, 2$ ou 3 . A Figura 3.8 traz dois exemplos de grafos G^{**} . Apesar de citarmos os grafos de Moore na próxima proposição, optamos por não os definir aqui. Citamos, apenas, o fato de existirem no máximo quatro grafos de Moore com diâmetro 2 (o pentágono, grafo de Peterson, o grafo de Hoffman–Singleton, e possivelmente um grafo 57-regular com 3250 vértices) e citamos CVETKOVIĆ *et al.* [36] para maiores detalhes.

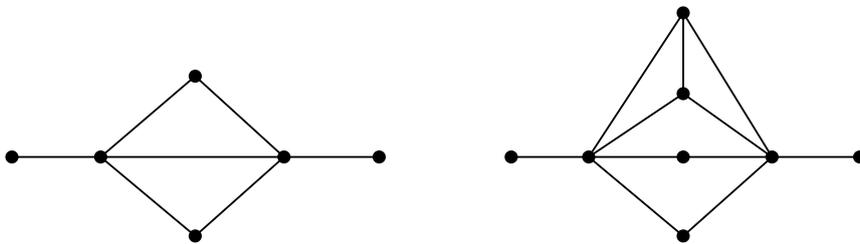


Figura 3.7: Grafos do tipo G^* .

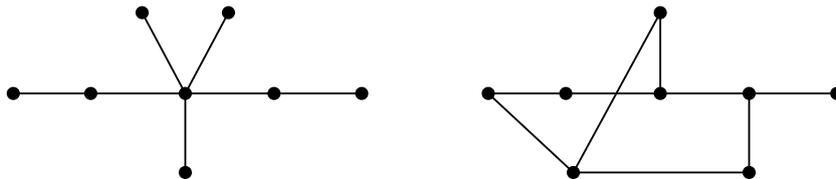


Figura 3.8: Grafos do tipo G^{**} .

Através de uma releitura dos resultados presentes em DAS e GUTMAN [58] e da Proposição 3.2.4 obtemos:

Proposição 3.2.12. *A respeito da soma dos autovalores das laplacianas da matriz distância de um grafo valem os seguintes resultados:*

i) Se $G \cong P_n$ então $\sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L = \sum_{i=1}^n \partial_i^Q = \frac{1}{3}(n-1)n(n+1)$;

ii) Se G é um grafo de diâmetro 2 então $\sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L = \sum_{i=1}^n \partial_i^Q = 2n(n-1) - 2m$;

iii) Se G é um grafo com $n \geq 2$ vértices e diâmetro d então

$$\sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L = \sum_{i=1}^n \partial_i^Q \geq \frac{1}{3}(d-2)(d-1)d + 2n(n-1) - 2m,$$

com a igualdade ocorrendo se, e somente se, o grafo possui diâmetro no máximo dois ou $G \cong P_n$ ou G é isomorfo a algum grafo do tipo G^* ;

iv) Se G é um grafo com $n \geq 2$ vértices e diâmetro d então

$$\sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L = \sum_{i=1}^n \partial_i^Q \leq n(n-1)d - \frac{2}{3}(d-2)(d-1)d - 2(d-1)m,$$

com a igualdade ocorrendo se, e somente se, o grafo possui diâmetro no máximo dois ou se $G \cong P_n$;

v) Seja G um grafo com $n \geq 2$ vértices, diâmetro d e que não possui como subgrafo induzido C_3 e C_4 . Se $M_1(G)$ denota a soma dos quadrados dos graus dos vértices de G , então

$$\sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L = \sum_{i=1}^n \partial_i^Q \geq 3n(n-1) + \frac{1}{3}d(d^2 - 6d + 11) - M_1(G) - 2(m+1),$$

com a igualdade ocorrendo se, e somente se, G é um grafo do tipo G^{**} ou G é um grafo de diâmetro no máximo 3 ou $G \cong P_n$;

vi) Se G é um grafo com $n \geq 2$ vértices, diâmetro d e que não possui como subgrafo induzido C_3 e C_4 então

$$\sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L = \sum_{i=1}^n \partial_i^Q \leq n(n-1)d - (d-2)M_1(G) - 2m - \frac{2}{3}(d-3)(d-2)(d-1),$$

com a igualdade ocorrendo se, e somente se, G é um grafo de diâmetro no máximo 3 ou $G \cong P_n$;

vii) Se G é um grafo com $n \geq 2$ vértices, diâmetro d e que não possui como subgrafo induzido C_3 e C_4 então

$$\sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L = \sum_{i=1}^n \partial_i^Q \geq 2n(n-1) + \frac{1}{3}d(d^2 - 6d + 11) - 2(m+1),$$

com a igualdade ocorrendo se, e somente se, $G \cong S_n$ ou G é um grafo de Moore de diâmetro 2.

Em 1956, ZHANG e WU [63] exibiram o seguinte teorema envolvendo o número cromático de um grafo, $\chi(G)$, e o de seu complementar:

Teorema 3.2.13. *Sejam G um grafo conexo de ordem n e \overline{G} seu complementar. Então $2\sqrt{n} \leq \chi(G) + \chi(\overline{G}) \leq n + 1$.*

Motivado por este problema, ZHANG e WU [63] obtiveram desigualdades do tipo Nordhaus-Gaddum (isto é, que envolvem a soma de índices de um grafo e de seu complementar) para alguns índices químicos associados a grafos, entre eles, o índice de Wiener. Motivados por este trabalho, DAS e GUTMAN [58] obtiveram novas cotas deste tipo para o índice de Wiener. Uma consequência imediata das cotas ali apresentadas é exibida pelo próprio DAS [26]:

Teorema 3.2.14. [26] *Seja G um grafo conexo com $n \geq 4$ vértices, diâmetro d , e com um complemento conexo \overline{G} . Então*

$$\mu(G) + \mu(\overline{G}) \geq 3(n-1) + \frac{1}{3n}(d-2)(d-1)d$$

com a igualdade ocorrendo se, e somente se, G e \overline{G} são ambos grafos regulares de diâmetro 2.

Para o caso das laplacianas associadas à matriz distância de um grafo, uma releitura das cotas apresentadas em DAS e GUTMAN [58] e ZHANG e WU [63], através da Proposição 3.2.4, também nos fornece cotas do tipo Nordhaus-Gaddum para a soma dos seus autovalores, apresentadas nas próximas três proposições.

Proposição 3.2.15. [58] *Se G é um grafo conexo com $n \geq 2$ vértices, diâmetro d e com complemento conexo \overline{G} então*

$$\sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L(G) + \sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L(\overline{G}) = \sum_{i=1}^n \partial_i^Q(G) + \sum_{i=1}^n \partial_i^Q(\overline{G}) \geq 3n(n-1) + \frac{1}{3}(d-2)(d-1)d$$

com a igualdade ocorrendo se, e somente se, G é um grafo de diâmetro 2.

integrais

Proposição 3.2.16. [63] *Seja G um grafo conexo com $n \geq 5$ vértices, com complemento conexo \bar{G} . Então*

$$\sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L(G) + \sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L(\bar{G}) = \sum_{i=1}^n \partial_i^Q(G) + \sum_{i=1}^n \partial_i^Q(\bar{G}) \leq \frac{n^3 + 3n^2 + 2n - 6}{3}.$$

Proposição 3.2.17. [58] *Seja G um grafo conexo com $n \geq 2$ vértices, diâmetro d e com complemento conexo \bar{G} , cujo diâmetro é denotado por \bar{d} . Se $k = \max\{d, \bar{d}\}$ então*

$$\sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L(G) + \sum_{i=1}^{n-1} \partial_i^L(\bar{G}) = \sum_{i=1}^n \partial_i^Q(G) + \sum_{i=1}^n \partial_i^Q(\bar{G}) \leq n(n-1)(k+1) - \frac{2}{3}k(k-1)(k-2),$$

com a igualdade ocorrendo se e somente se G é um grafo de diâmetro 2 ou $G \cong P_n$ ou G é isomorfo a algum grafo do tipo G^* e \bar{G} é um grafo de diâmetro 2.

Observação 3.2.18. *No caso de $k \leq n/3$ temos*

$$\frac{n^3 + 3n^2 + 2n - 6}{3} \geq n(n-1)(k+1)$$

e portanto a cota apresentada na Proposição 3.2.17 é melhor do que a apresentada na Proposição 3.2.16 sempre que $k \leq \frac{n}{3}$.

3.3 Propostas para trabalhos futuros

Pensamos em explorar as cotas apresentadas na última seção deste capítulo, com o objetivo de conseguir novas cotas, envolvendo agora autovalores específicos das laplacianas da matriz distância, ou somas envolvendo uma menor quantidade de autovalores. Também desejamos estudar em mais detalhes até que ponto o índice de Wiener pode ser utilizado como ferramenta para o estudo de coespectralidade. Em particular, interessa-nos o problema da coespectralidade relativa à matriz distância e suas laplacianas na classe das árvores starlike. Este questionamento torna-se especialmente interessante na medida em que Aouchiche e Hansen [11] apontaram a dificuldade em se encontrar árvores \mathcal{D}^L -coespectrais ou \mathcal{D}^Q -coespectrais. Além disto, a coespectralidade nesta família já foi considerada em outras matrizes. Em 2002, LEPOVIC e GUTMAN [64] provaram que não existem duas árvores starlike A -coespectrais e, em 2007, OMIDI e TAJBAKSH [65] provaram que árvores starlike também são determinadas pelo seu espectro laplaciano. Em 2010, OMIDI e VATANDOOST [66], demonstraram que árvores starlike cujo grau máximo é quatro são determinadas pelos seu Q -espectro. Em 2012, este resultado foi estendido por BU e ZHOU [67], para o caso onde o grau máximo excede quatro.

Capítulo 4

Sobre algumas conjecturas a respeito das laplacianas da matriz distância

A construção desta capítulo teve como ponto de partida o interesse em estudar algumas das conjecturas propostas por Aouchiche e Hansen para as laplacianas da matriz distância. Dentre elas, destacamos:

Conjectura 4.0.1. [13] *O maior autovalor da matriz distância laplaciana sem sinal de um grafo conexo G de ordem n é máximo se, e somente se, G é um caminho.*

Conjectura 4.0.2. [12] *O maior autovalor da matriz distância laplaciana de um grafo conexo G de ordem n é máximo se, e somente se, G é um caminho*

Se G é um grafo conexo, denotamos a multiplicidade do autovalor $\partial_i^L(G)$, $1 \leq i \leq n$, por $m(\partial_i^L(G))$.

Conjectura 4.0.3. [12] *Se G é um grafo conexo com $n \geq 3$ vértices e $G \not\cong K_n$, então $m(\partial_1^L(G)) \leq n - 2$ com igualdade ocorrendo se, e somente se, G é a estrela S_n ou se $n = 2p$ para o grafo bipartido completo $K_{p,p}$.*

O interesse pelas Conjecturas 4.0.1 e 4.0.2, que são discutidas na primeira seção deste capítulo, deve-se, primeiramente, ao fato de tratarem de problemas de natureza similar mas, principalmente, pela aparente simetria destes resultados (e do equivalente para a matriz distância), quando comparados aos existentes para a matriz adjacência de um grafo e suas laplacianas. A saber:

Teorema 4.0.4. [68],[69] *O maior autovalor da matriz distância de um grafo conexo G de ordem n é máximo se, e somente se, G é um caminho.*

Teorema 4.0.5. [70] *O maior autovalor da matriz de adjacência de um grafo conexo G de ordem n é mínimo se, e somente se, G é um caminho.*

Teorema 4.0.6. [71] *O maior autovalor da matriz laplaciana de um grafo conexo G de ordem n é mínimo se, e somente se, G é um caminho.*

Teorema 4.0.7. [72] *O maior autovalor da matriz laplaciana sem sinal de um grafo conexo G de ordem n é mínimo se, e somente se, G é um caminho.*

Já a Conjectura 4.0.3, que é abordada na segunda seção deste capítulo, foi considerada por envolver multiplicidade de autovalores, um tipo de problema que, até então, não havíamos nos aprofundado. Esperávamos, desta forma, conhecer e trabalhar com outros tipos de técnicas.

Os resultados aqui apresentados são consequência de colaboração com o professor Vladimir Nikiforov, da Universidade de Memphis, e foram submetidos em dois artigos. Tais resultados foram publicados em DA SILVA JUNIOR e NIKIFOROV [23], enquanto a segunda é parte integrante de DA SILVA JUNIOR *et al.* [24].

4.1 Funções de grafos maximizadas pelo caminho

Recentemente, LIN e LU [22] apresentaram uma prova para a Conjectura 4.0.1, mas a Conjectura 4.0.2 permaneceu sem solução até o presente momento. Um problema similar ao das Conjecturas 4.0.1 e 4.0.2, para a matriz distância, foi resolvido parcialmente há algum tempo por RUZIEH e POWERS [68], que provaram que o maior autovalor da matriz distância de um grafo conexo G de ordem n é máximo se G é um caminho. A solução completa (Teorema 4.0.4) foi estabelecida algum tempo depois por STEVANOVIĆ e ILIĆ [69].

O objetivo central desta seção é fornecer uma abordagem geral para estes problemas. Para isto, mostramos que todos estes resultados estão associados a ideias mais amplas, o que nos permite não apenas obter demonstrações inéditas para a Conjectura 4.0.1 e o Teorema 4.0.4, como também resolver a Conjectura 4.0.2.

4.1.1 A função $F_M(G)$ e seu máximo

Iniciamos introduzindo uma função geral em grafos e vamos estudar seu máximo.

Definição 4.1.1. *Dado um grafo conexo G de ordem n e uma matriz simétrica não negativa $M = [m_{i,j}]$ de ordem n , definimos a função $F_M(G)$ como*

$$F_M(G) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} d_G(i, j) m_{i,j},$$

onde $d_G(i, j)$ denota a distância entre os vértices i e j em G .

Observemos que, como $d_G(i, i) = 0$ para todo $i \in V(G)$, então a diagonal de M é irrelevante para $F_M(G)$.

Lembremos ainda que, dadas $B = [b_{i,j}]_{m \times n}$ e $C = [c_{i,j}]_{m \times n}$, o produto de Hadamard de B e C é definido por $B \circ C = [h_{i,j}]_{m \times n}$, onde $h_{i,j} = b_{i,j} \cdot c_{i,j}$, para todo $1 \leq i \leq m$ e $1 \leq j \leq n$. Assim, a função $F_M(G)$ pode ser representada como

$$F_M(G) = \|H \circ D(G)\|_1.$$

Este ponto de vista sugere um número de extensões, que pensamos em estudar futuramente.

A partir de agora, voltamos nossa atenção para os pontos extremais de $F_M(G)$, ou seja, estamos interessados em saber quais grafos conexos G de ordem n satisfazem a condição

$$F_M(G) = \max \{F_M(H) : H \text{ é um grafo conexo de ordem } n\}.$$

Em particular, provamos o fato, de alguma forma surpreendente, de que para qualquer matriz admissível M , a função $F_M(G)$ é sempre maximizada por um caminho, isto é, provamos que $F_M(G) \leq F_M(P)$ para algum caminho de ordem n . Mais ainda, se cada linha de M possui no máximo uma entrada não nula fora da diagonal principal, então $F_M(G) < F_M(P)$ para algum caminho de ordem n , a menos que G seja um caminho. Em particular, este resultado implica as Conjecturas 4.0.1, 4.0.2 e o Teorema 4.0.4.

Durante esta seção, assumimos que qualquer grafo de ordem n está definido no conjunto de vértices $\{1, 2, \dots, n\}$. Além disto, denotamos por $G - u$ o grafo obtido a partir de G , pela remoção do vértice u , e por $G - \{u, v\}$ o grafo obtido a partir de G , pela remoção dos vértices u e v .

As demonstrações dos Teoremas 4.1.2 e 4.1.3 possuem a mesma estrutura geral, mas a última exige diversos detalhes adicionais e por isto fazemos a apresentação separadamente.

Teorema 4.1.2. *Seja G um grafo conexo de ordem n e seja $M = [m_{i,j}]$ uma matriz simétrica de ordem n . Se M é não negativa, então existe um caminho P com $V(P) = V(G)$ tal que*

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} d_G(i, j) m_{i,j} \leq \sum_{1 \leq i < j \leq n} d_P(i, j) m_{i,j}. \quad (4.1)$$

Demonstração. Notemos primeiramente que se H é uma árvore geradora de G , então $d_G(i, j) \leq d_H(i, j)$ para todos $i, j \in V(G)$; logo

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} d_G(i, j) m_{i,j} \leq \sum_{1 \leq i < j \leq n} d_H(i, j) m_{i,j}.$$

Assim, podemos e vamos assumir que G é uma árvore. A demonstração é feita por

indução em n . Se $n \leq 3$, toda árvore de ordem n é um caminho, então não há nada a ser provado neste caso. Assumamos agora que $n > 3$ e que a afirmação seja válida para todo n' tal que $n' < n$. Escolha um vértice $u \in V(G)$ de grau 1. Sem perda de generalidade, assumamos que $u = n$, e seja k o único vizinho de u ; portanto $G - n$ é uma árvore de ordem $n - 1$.

Definamos a matriz simétrica $M' = [m'_{ij}]$ de ordem $n - 1$ como segue:

$$m'_{i,j} = \begin{cases} m_{i,j}, & \text{se } i \neq k \text{ e } j \neq k; \\ m_{k,j} + m_{n,j}, & \text{se } i = k; \\ m_{i,k} + m_{i,n}, & \text{se } j = k. \end{cases}$$

Claramente, M' é uma matriz simétrica não negativa. Pela hipótese de indução, existe um caminho P' com $V(P') = V(G - n) = \{1, 2, \dots, n - 1\}$ tal que

$$\sum_{1 \leq i < j < n} d_{G-n}(i, j) m'_{i,j} \leq \sum_{1 \leq i < j < n} d_{P'}(i, j) m'_{i,j}. \quad (4.2)$$

Por outro lado, para cada $j \in V(G - n)$, o caminho mais curto entre n e j contém k , então

$$d_G(j, n) = d_{G-n}(j, k) + 1.$$

Portanto, temos que

$$\begin{aligned} \sum_{1 \leq i < j \leq n} d_G(i, j) m_{i,j} &= \sum_{j=1}^{n-1} d_G(j, n) m_{j,n} + \sum_{1 \leq i < j < n} d_{G-n}(i, j) m_{i,j} \\ &= \sum_{j=1}^{n-1} (d_{G-n}(k, j) + 1) m_{j,n} + \sum_{1 \leq i < j < n} d_{G-n}(i, j) m_{i,j} \\ &= \sum_{j=1}^{n-1} m_{n,j} + \sum_{1 \leq i < j < n} d_{G-n}(i, j) m'_{i,j}. \end{aligned}$$

Agora, (4.2) implica em

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} d_G(i, j) m_{i,j} \leq \sum_{j=1}^{n-1} m_{j,n} + \sum_{1 \leq i < j < n} d_{P'}(i, j) m'_{i,j}. \quad (4.3)$$

Desta forma, seja T a árvore obtida a partir do caminho P' , pelo acréscimo da aresta

entre n e o vértice $k \in V(P')$. Como antes, vemos que

$$\begin{aligned}
\sum_{1 \leq i < j \leq n} d_T(i, j) m_{i,j} &= \sum_{j=1}^{n-1} d_T(j, n) m_{j,n} + \sum_{1 \leq i < j < n} d_{T-n}(i, j) m_{i,j} \\
&= \sum_{j=1}^{n-1} (d_{P'}(j, k) + 1) m_{j,n} + \sum_{1 \leq i < j < n} d_{P'}(i, j) m_{i,j} \\
&= \sum_{j=1}^{n-1} m_{j,n} + \sum_{1 \leq i < j < n} d_{P'}(i, j) m'_{i,j}.
\end{aligned}$$

Isto, junto com (4.3), implica em

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} d_G(i, j) m_{i,j} \leq \sum_{1 \leq i < j \leq n} d_T(i, j) m_{i,j}.$$

Se $T \cong P_n$ não há nada a ser provado, então, suponhamos que $T \not\cong P_n$. Para completar a prova, devemos verificar que é possível acrescentar uma aresta entre n e um dos vértices extremos de P' de forma que $F_M(T)$ não decresça.

Sem perda de generalidade, vamos assumir que a sequência de vértices do caminho P' seja precisamente $1, 2, \dots, n-1$; então, o vizinho k de n satisfaz $1 < k < n-1$. Escrevamos M_0 para a submatriz principal de M correspondente às primeiras $n-1$ linhas e notemos que

$$F_M(T) = \sum_{i=1}^k (k-i+1) m_{i,n} + \sum_{i=k+1}^{n-1} (i-k+1) m_{i,n} + F_{M_0}(P').$$

Agora, removamos a aresta $\{n, k\}$ em T , acrescentemos a aresta $\{n, 1\}$, e escrevamos T_1 para o caminho resultante. Se $F_M(T_1) > F_M(T)$, a prova está completa. Assim, suponhamos $F_M(T_1) \leq F_M(T)$. Como

$$F_M(T_1) = \sum_{i=1}^{n-1} i m_{i,n} + F_{M_0}(P'),$$

de $F_M(T_1) \leq F_M(T)$, obtemos que

$$\sum_{i=1}^{k-1} i m_{i,n} + \sum_{i=k}^{n-1} i m_{i,n} \leq \sum_{i=1}^{k-1} (k-i+1) m_{i,n} + \sum_{i=k}^{n-1} (i-k+1) m_{i,n}$$

e então

$$\begin{aligned} (k-1)(m_{k,n} + \cdots + m_{n-1,n}) &\leq \sum_{i=1}^{k-1} (k-2i+1)m_{i,n} \\ &\leq (k-1)(m_{1,n} + \cdots + m_{k-1,n}). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Por outro lado, removamos a aresta $\{n, k\}$ em T , acrescentemos a aresta $\{n, n-1\}$, e escrevamos T_2 para o caminho resultante. Se $F_M(T_2) > F_M(T)$, a prova está completa. Assim, suponhamos $F_M(T_2) \leq F_M(T)$. Visto que

$$F_M(T_2) = \sum_{i=1}^{n-1} (n-i)m_{i,n} + F_{M_0}(P'),$$

de $F_M(T_2) \leq F_M(T)$, obtemos que

$$\sum_{i=1}^{k-1} (n-i)m_{i,n} + \sum_{i=k}^{n-1} (n-i)m_{i,n} \leq \sum_{i=1}^{k-1} (k-i+1)m_{i,n} + \sum_{i=k}^{n-1} (i-k+1)m_{i,n},$$

e então

$$\begin{aligned} (n-k-1)(m_{1,n} + \cdots + m_{k-1,n}) &\leq \sum_{i=k}^{n-1} (2i-k-n+1)m_{i,n} \\ &\leq (n-k-1)(m_{k,n} + \cdots + m_{n-1,n}). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Como $1 < k < n-1$, a desigualdade acima, juntamente com (4.4), implicam em

$$m_{k,n} + \cdots + m_{n-1,n} = m_{1,n} + \cdots + m_{k-1,n}.$$

Disto, é fácil ver que as desigualdades que geram (4.4) e (4.5) também se tornam igualdades. Portanto, $F_M(T_1) = F_M(T)$ e $F_M(T_2) = F_M(T)$. Isto completa o passo indutivo e a prova do teorema. \square

É natural tentar caracterizar todas as matrizes simétricas e não negativas M , para o qual $F_M(G)$ é máximo somente se G é um caminho. A solução completa deste problema parece difícil, mas exibimos uma solução parcial, suficiente para os nossos objetivos. Como a maior parte desta solução lida com o caso de G ser uma árvore, então provamos inicialmente o resultado para esta classe de grafos no Teorema 4.1.3 abaixo. O caso geral é exibido na sequência, com argumentos diferentes.

Denotamos por $N(n)$ a classe de todas as matrizes simétricas não negativas M de ordem n tal que cada linha de M possui no máximo uma entrada nula fora da diagonal principal.

Teorema 4.1.3. *Seja G uma árvore de ordem n . Se $M \in N(n)$ e $G \not\cong P_n$, então existe um caminho P com $V(P) = V(G)$ tal que $F_M(G) < F_M(P)$.*

Demonstração. A prova é feita por indução em n sendo estruturada como a do Teorema 4.1.2. Se $n \leq 3$, toda árvore de ordem n é um caminho, logo não há nada a ser provado neste caso. Vamos fazer a prova do caso $n = 4$ diretamente. Existem duas árvores com 4 vértices - um caminho e uma estrela. Assumamos que G é uma estrela, e, sem perda de generalidade, suponhamos que o vértice 2 seja seu centro. Temos que

$$F_M(G) = 2m_{4,1} + m_{4,2} + 2m_{4,3} + m_{1,2} + m_{2,3} + 2m_{1,3}.$$

Removamos a aresta $\{4, 2\}$ e acrescentamos a aresta $\{4, 1\}$, obtendo, portanto, um caminho G_1 . Assuma por contradição $F_M(G) \geq F_M(G_1)$, o que implica em $m_{4,1} \geq m_{4,2} + m_{4,3}$. Agora, removamos de G a aresta $\{4, 2\}$ e acrescentamos a aresta $\{4, 3\}$, obtendo, portanto, um caminho G_2 . Assuma também, por contradição, que $F_M(G) \geq F_M(G_2)$, o que implica em $m_{4,3} \geq m_{4,2} + m_{4,1}$. Concluimos que $m_{4,2} = 0$. Por simetria, também obtemos $m_{1,2} = 0$ e $m_{3,2} = 0$; logo M tem uma linha nula, contradizendo a hipótese. Assim, G é um caminho.

Assumamos agora que $n \geq 5$ e que a afirmação do teorema é válida para todo n' tal que $n' < n$. Seja G uma árvore para a qual $F_M(G)$ atinga seu máximo. Devemos provar que $G \cong P_n$. Escolha um vértice $u \in V(G)$ de grau 1. Sem perda de generalidade, assumamos que $u = n$, e seja k o único vizinho de u ; portanto $G - n$ é uma árvore de ordem $n - 1$.

Definamos uma matriz simétrica $M' = [m'_{ij}]$ de ordem $n - 1$ tal que

$$m'_{i,j} = \begin{cases} m_{i,j}, & \text{se } i \neq k \text{ e } j \neq k; \\ m_{k,j} + m_{n,j}, & \text{se } i = k; \\ m_{i,k} + m_{i,n}, & \text{se } j = k. \end{cases}$$

Claramente $M' \in N(n - 1)$. Suponhamos que $G - n \not\cong P_{n-1}$. Pela hipótese de indução, existe um caminho P' com $V(P') = V(G - n) = \{1, 2, \dots, n - 1\}$ tal que

$$\sum_{1 \leq i < j < n} d_{G-n}(i, j) m'_{i,j} < \sum_{1 \leq i < j < n} d_{P'}(i, j) m'_{i,j}.$$

Portanto, como na prova do Teorema 4.1.2, temos que

$$F_M(G) = \sum_{j=1}^{n-1} m_{j,n} + \sum_{1 \leq i < j < n} d_{G-n}(i, j) m'_{i,j} < \sum_{j=1}^{n-1} m_{j,n} + \sum_{1 \leq i < j < n} d_{P'}(i, j) m'_{i,j}.$$

Agora, acrescentemos a aresta entre n e k , e escrevamos T para a árvore obtida.

Como antes, vemos que

$$F_M(T) = \sum_{j=1}^{n-1} m_{j,n} + \sum_{1 \leq i < j < n} d_{P'}(i, j) m'_{i,j} > F_M(G).$$

Isto contradiz a hipótese de que $F_M(G)$ é máximo. Portanto, $G - n \cong P_{n-1}$.

Sem perda de generalidade, suponhamos que a sequência de vértices do caminho $G - n$ seja precisamente $1, 2, \dots, n - 1$. Se $k = 1$ ou $k = n - 1$, vemos que $G \cong P_n$, então, assumamos que $1 < k < n - 1$. Para completar a prova resta mostrar que podemos acrescentar uma aresta entre n e 1 ou $n - 1$ de forma que $F_M(G)$ aumente.

Escrevamos M_0 para a submatriz principal de M correspondente às $n - 1$ primeiras linhas e notemos que

$$F_M(G) = \sum_{i=1}^k (k - i + 1) m_{i,n} + \sum_{i=k+1}^{n-1} (i - k + 1) m_{i,n} + F_{M_0}(G - n).$$

Em seguida, deletemos a aresta $\{n, k\}$ em G , adicionemos a aresta $\{n, 1\}$, e escrevamos G_1 para o caminho resultante. Como $F_M(G)$ é máximo, vemos que $F_M(G_1) \leq F_M(G)$. De

$$F_M(G_1) = \sum_{i=1}^{n-1} i m_{i,n} + F_{M_0}(G - n),$$

segue que

$$\sum_{i=1}^{k-1} (k - i + 1) m_{i,n} + \sum_{i=k}^{n-1} (i - k + 1) m_{i,n} \geq \sum_{i=1}^{n-1} i m_{i,n},$$

e, então,

$$\sum_{i=1}^{k-1} (k - 2i + 1) m_{i,n} \geq (k - 1) (m_{k,n} + \dots + m_{n-1,n}).$$

Assim, tomando

$$S_1 = -2 \sum_{i=1}^{k-1} (i - 1) m_{i,n},$$

obtemos

$$(k - 1) (m_{1,n} + \dots + m_{k-1,n}) + S_1 \geq (k - 1) (m_{k,n} + \dots + m_{n-1,n}),$$

isto é,

$$(k - 1) ((m_{1,n} + \dots + m_{k-1,n}) - (m_{k,n} + \dots + m_{n-1,n})) \geq -S_1. \quad (4.6)$$

Finalmente, deletemos a aresta $\{n, k\}$ em G , acrescentemos a aresta $\{n, n - 1\}$,

e escrevamos G_2 para o caminho resultante. Como $F_M(G)$ é máximo, vemos que $F_M(G_2) \leq F_M(G)$. De

$$F_M(G_2) = \sum_{i=1}^{n-1} (n-i) m_{i,n} + F_{M_0}(G-n)$$

segue que

$$\sum_{i=1}^k (k-i+1) m_{i,n} + \sum_{i=k+1}^{n-1} (i-k+1) m_{i,n} \geq \sum_{i=1}^{n-1} (n-i) m_{i,n},$$

e, portanto,

$$\sum_{i=k}^{n-1} (2i-k-n+1) m_{i,n} \geq (n-k-1)(m_{1,n} + \cdots + m_{k-1,n}).$$

Logo, tomando

$$S_2 = -2 \sum_{i=k}^{n-1} (n-i-1) m_{i,n}$$

obtemos

$$(n-k-1)(m_{k,n} + \cdots + m_{n-1,n}) + S_2 \geq (n-k-1)(m_{1,n} + \cdots + m_{k-1,n}),$$

isto é,

$$(n-k-1)((m_{k,n} + \cdots + m_{n-1,n}) - (m_{1,n} + \cdots + m_{k-1,n})) \geq -S_2.$$

Comparando esta desigualdade com (4.6), e utilizando $1 < k < n-1$, $S_1 \leq 0$ e $S_2 \leq 0$, encontramos que

$$m_{k,n} + \cdots + m_{n-1,n} = m_{1,n} + \cdots + m_{k-1,n} \quad \text{e} \quad S_1 = S_2 = 0.$$

Mais ainda, de $S_1 = S_2 = 0$, como $m_{i,j} \geq 0$ para todo $1 \leq i, j \leq n$, segue que

$$m_{2,n} = \cdots = m_{k-1,n} = 0 \quad \text{e} \quad m_{k,n} = \cdots = m_{n-2,n} = 0.$$

Como $n-3 \geq 2$, dentre as entradas fora da diagonal principal da n -ésima linha de M , existem duas que são nulas, contrariando a hipótese. Portanto, $G \cong P_n$, completando a indução e a prova do teorema. \square

O Teorema 4.1.3 nos permite demonstrar o Teorema 4.1.4.

Teorema 4.1.4. *Seja G um grafo conexo de ordem n . Se $M \in N(n)$ e $G \not\cong P_n$,*

então existe um caminho P com $V(P) = V(G)$ tal que $F_M(G) < F_M(P)$.

Demonstração. Se G é uma árvore o resultado segue do Teorema 4.1.3. Suponhamos então que G seja um grafo unicíclico, isto é, que G tem exatamente $n \geq 3$ arestas. Suponhamos que G não seja, ele mesmo, o ciclo C_n . Logo, G contém uma árvore geradora H com grau máximo $\Delta(H) \geq 3$ e, portanto, $H \not\cong P_n$. O Teorema 4.1.3 implica em existir um caminho P com $V(P) = V(G)$ e, tal que,

$$F_M(G) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} d_G(i, j) m_{i,j} \leq \sum_{1 \leq i < j \leq n} d_H(i, j) m_{i,j} < \sum_{1 \leq i < j \leq n} d_P(i, j) m_{i,j}.$$

Se G é o ciclo C_n , sejam i, j, k três vértices consecutivos no ciclo. A remoção da aresta $\{i, j\}$ aumenta a distância entre i e j , isto é,

$$d_G(i, j) < d_{G-\{i,j\}}(i, j)$$

e, então,

$$F_M(G) \leq F_M(G - \{i, j\}).$$

Se $F_M(G) < F_M(G - \{i, j\})$, o teorema está provado. Caso contrário $F_M(G) = F_M(G - \{i, j\})$ e $m_{i,j} = 0$. De forma análoga, obtemos $m_{j,k} = 0$; logo, dentre as entradas fora da diagonal da j -ésima linha de M existem duas que são nulas, contrariando a hipótese. Fica então provado que o teorema é válido para grafos unicíclicos.

Por fim, notemos que qualquer grafo conexo G que não é uma árvore contém um subgrafo gerador conexo e unicíclico H ou é unicíclico ele mesmo. Portanto, Se G não é uma árvore, então $F_M(G) \leq F_M(H)$ para algum grafo conexo unicíclico H , e então existe um caminho P com $V(P) = V(G)$ tal que

$$F_M(G) \leq F_M(H) < F_M(P).$$

A demonstração do teorema está completa. □

4.1.2 A função $F_M(G)$ aplicada à matriz distância e suas laplacianas

Embora o Teorema 4.1.4 apresente condições gerais sobre a matriz M em questão, para provar as Conjecturas 4.0.1, 4.0.2, e o Teorema 4.0.4, precisamos apenas do seguinte corolário simples.

Corolário 4.1.5. *Seja G um grafo conexo de ordem n e seja $M = [m_{i,j}]$ uma matriz simétrica de ordem n . Se cada elemento fora da diagonal principal de M é positivo,*

e G não é um caminho, então existe um caminho P como $V(P) = V(G)$ tal que $F_M(P) > F_M(G)$.

Trazemos agora demonstrações inéditas para a Conjectura 4.0.1 e o Teorema 4.0.4.

Teorema 4.1.6. *O maior autovalor da matriz distância laplaciana sem sinal de um grafo conexo G de ordem n é máximo se, e somente se, G é um caminho.*

Demonstração. Seja G um grafo conexo de ordem n tal que $\lambda(D^Q(G))$ é máximo entre todos os grafos conexos de ordem n . Devemos provar que G é um caminho. Seja $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ um autovetor unitário para $\lambda(D^Q(G))$. Como $D^Q(G)$ é irredutível, o vetor \mathbf{x} é positivo. Definamos uma matriz $n \times n$, $M = [m_{i,j}]$ fazendo $m_{i,j} = (x_i + x_j)^2$. Claramente M é simétrica e não negativa. Além disto, já é conhecido que

$$\lambda(D^Q(G)) = \langle D^Q(G) \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \sum_{1 \leq i < j \leq n} d_G(i, j) (x_i + x_j)^2 = F_M(G).$$

Como cada elemento fora da diagonal principal de M é positivo, o Corolário 4.1.5 implica que ou $G \cong P_n$ ou existe um caminho P como $V(P) = V(G)$ tal que $F_M(P) > F_M(G)$. A última opção não pode ocorrer, já que teríamos

$$\lambda(D^Q(G)) = F_M(G) < F_M(P) \leq \lambda(D^Q(P)),$$

contradizendo a escolha de G . Portanto, $G \cong P_n$, completando a demonstração. \square

Teorema 4.1.7. *O maior autovalor da matriz distância de um grafo conexo G de ordem n é máximo se, e somente se, G é um caminho.*

Demonstração. O resultado pode ser provado de forma análoga ao feito para a Conjectura 4.0.1, com $M = [m_{i,j}]$ definida por $m_{i,j} = x_i x_j$. \square

Por fim, apresentamos a solução da Conjectura 4.0.2, que exige uma abordagem mais cuidadosa.

Teorema 4.1.8. *O maior autovalor da matriz distância laplaciana de um grafo conexo G de ordem n é máximo se, e somente se, G é um caminho*

Demonstração. Seja G um grafo conexo de ordem n tal que $\lambda(D^L(G))$ é máximo dentre todos os grafos conexos de n vértices. Devemos provar que G é um caminho. Seja $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ um autovetor unitário para $\lambda(D^L(G))$ e definamos uma matriz $n \times n$, $M = [m_{i,j}]$, fazendo $m_{i,j} = (x_i - x_j)^2$. Claramente M é simétrica e não

negativa. Além disto, já é conhecido que

$$\lambda(D^L(G)) = \langle D^L(G) \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \sum_{1 \leq i < j \leq n} d_G(i, j) (x_i - x_j)^2 = F_M(G).$$

Neste ponto, não podemos descartar que M possua diversas entradas nulas e, portanto, o Corolário 4.1.5 não pode ser aplicado como antes. Porém, o Teorema 4.1.2 implica a existência de um caminho P com $V(P) = V(G)$ tal que $F_M(P) \geq F_M(G)$; logo,

$$\lambda(D^L(G)) = F_M(G) \leq F_M(P) \leq \lambda(D^L(P)).$$

Devido a escolha de G , igualdades devem valer na linha acima, implicando que \mathbf{x} é um autovetor de P_n . Mas, nos Teoremas 4.4 e 4.6 de [73], Nath e Paul provaram que todas as entradas de um autovetor para $\lambda(D^L(P_n))$ são diferentes e, portanto, as entradas fora da diagonal principal de M são positivas. Agora, aplicamos o Corolário 4.1.5 e finalizamos a demonstração como feito no Teorema 4.1.6. \square

4.1.3 Propostas para trabalhos futuros

Resultados similares ao Teorema 4.0.4 e as Conjecturas 4.0.1 e 4.0.2 são conhecidos para a matriz de adjacência, laplaciana, e laplaciana sem sinal de um grafo conexo G , como destacado na introdução deste capítulo. Tendo em vista os fatos apresentados nesta sessão, permanecemos interessados na seguinte questão:

Questão 4.1.9. *É possível obter um resultado similar ao Teorema 4.1.4 que implique os Teoremas 4.0.5, 4.0.6, e 4.0.7?*

4.2 Sobre a multiplicidade de autovalores da matriz distância laplaciana

Nesta seção, resolvemos a Conjectura 4.0.3, caracterizando completamente os grafos cujo maior autovalor da matriz distância laplaciana tem multiplicidade $n - 2$. Para que isto seja possível, analisamos como a existência de um subgrafo induzido isomorfo a P_4 influencia a multiplicidade deste autovalor concluindo que, neste caso, a multiplicidade é menor ou igual a $n - 3$. Este fato nos motivou a também investigar a influência de um subgrafo induzido isomorfo a P_5 sobre o \mathcal{D}^L -espectro de um grafo conexo. Neste sentido, provamos que se um grafo admite P_5 como subgrafo induzido, então o maior autovalor da matriz distância laplaciana tem multiplicidade menor ou igual a $n - 4$. Embora não tenhamos feito uma abordagem geral, caracterizando totalmente os grafos conexos cujo maior autovalor da matriz distância laplaciana tem multiplicidade $n - 3$, algumas considerações sobre este tópico são feitas.

4.2.1 P_4 como um subgrafo proibido e o espectro distância laplaciano

Relembramos que um grafo G é um cografo se nenhum subgrafo induzido de G é isomorfo a P_4 [74]. Sobre os cografos, também temos as seguintes caracterizações:

Teorema 4.2.1. [74] *Dado um grafo G , as seguintes afirmações são equivalentes:*

- i) G é um cografo.
- ii) O complemento de qualquer subgrafo conexo de G com pelo menos dois vértices é desconexo.
- iii) Todo subgrafo conexo de G tem diâmetro menor ou igual a 2.

Os próximos lemas, também de nossa autoria, são úteis para provarmos os principais resultados desta seção:

Lema 4.2.2. *Se G é um grafo conexo com $n \geq 2$ vértices e espectro laplaciano $(n, \mu_2, \dots, \mu_2, \mu_2, 0)$, com $\mu_2 \neq n$, então $G \cong S_n$ ou $G \cong K_{p,p}$, onde $n = 2p$.*

Demonstração. Notemos que $Sp(L(\overline{G})) = (n - \mu_2, n - \mu_2, \dots, n - \mu_2, 0, 0)$ e, portanto, \overline{G} tem exatamente 2 componentes. Como cada componente não possui mais de dois autovalores laplacianos distintos, ambos são vértices isolados ou grafos completos. Como ambas as componentes também possuem os mesmos autovalores laplacianos não nulos, segue que $\overline{G} \cong K_1 \cup K_{n-1}$ ou $\overline{G} \cong K_p \cup K_p$, onde $n = 2p$. Portanto, $G \cong S_n$ ou $G \cong K_{p,p}$. Por outro lado, já é conhecido que o L -espectro de S_n e $K_{p,p}$ são, respectivamente, $(n, 1, \dots, 1, 0)$ e $(n, p, \dots, p, 0)$. \square

Lema 4.2.3. *Seja A uma matriz real simétrica de ordem n com maior autovalor λ e M a submatriz principal $m \times m$ de A obtida excluindo-se as $n - m$ últimas linhas e colunas. Se M também tem λ como um autovalor, associado ao autovetor normalizado $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_m)$, então $\mathbf{x}^* = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_m, 0, \dots, 0)$ é um autovetor de A associado ao autovalor λ .*

Demonstração. Como λ é um autovalor de M associado a \mathbf{x} , então $\lambda = \langle M\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle$. Logo, é suficiente ver que $\langle M\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \langle A\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^* \rangle$ e utilizar o Teorema 2.1.2. \square

Com o objetivo de resolver a Conjectura 4.0.3, primeiramente, investigamos como a existência de um subgrafo induzido isomorfo a P_4 influencia a multiplicidade do maior autovalor da matriz distância laplaciana de um grafo.

Teorema 4.2.4. *Se o grafo conexo G tem pelo menos 4 vértices e não é um cografo então $m(\partial_1^L) \leq n - 3$.*

Demonstração. Como G não é um cografo, então G possui um subgrafo induzido isomorfo a P_4 que, sem perda de generalidade, supomos possuir sequência de vértices v_1, v_2, v_3, v_4 . Seja M a submatriz principal de $\mathcal{D}^L(G)$ determinada pelo subgrafo P_4 induzido e denotemos seus autovalores por $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4$. Suponhamos que $m(\partial_1^L) \geq n - 2$. Pelo Teorema 2.1.5 é fácil checar que $\lambda_1 = \lambda_2 = \partial_1^L$. Pelo Lema 4.2.3, se $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ e $\mathbf{y} = (y_1, y_2, y_3, y_4)$ são autovetores associados a ∂_1^L em M , então $\mathbf{x}^* = (x_1, x_2, x_3, x_4, 0, \dots, 0)$ e $\mathbf{y}^* = (y_1, y_2, y_3, y_4, 0, \dots, 0)$ são autovetores associados a ∂_1^L em $\mathcal{D}^L(G)$. Como $\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^* \perp \mathbf{1}$, com uma combinação linear destes vetores, é possível obter $\mathbf{z}^* = (z_1, z_2, 0, z_4, 0, \dots, 0)$ tal que $\mathbf{z}^* \perp \mathbf{1}$ ainda é um autovetor para $\mathcal{D}^L(G)$ associado a ∂_1^L . Portanto, $\mathbf{z} = (z_1, z_2, 0, z_4)$ é um autovetor para M tal que $z_1 + z_2 + z_4 = 0$.

Excetuando-se a distância entre os vértices v_1 e v_4 , que pode assumir os valores 2 ou 3, as distâncias entre os vértices do P_4 ficam determinadas pelo fato de ele ser subgrafo induzido. Portanto, existem apenas duas opções para a matriz M :

$$M_1 = \begin{bmatrix} t_1 & -1 & -2 & -3 \\ -1 & t_2 & -1 & -2 \\ -2 & -1 & t_3 & -1 \\ -3 & -2 & -1 & t_4 \end{bmatrix} \quad \text{ou} \quad M_2 = \begin{bmatrix} t_1 & -1 & -2 & -2 \\ -1 & t_2 & -1 & -2 \\ -2 & -1 & t_3 & -1 \\ -2 & -2 & -1 & t_4 \end{bmatrix},$$

onde t_1, t_2, t_3, t_4 denotam as transmissões dos vértices que induzem P_4 em $\mathcal{D}^L(G)$.

Da terceira linha de $M_1 \mathbf{z} = \lambda_1 \mathbf{z}$ segue que $-2z_1 - z_2 - z_4 = 0$. Isto, junto ao fato de que $z_1 + z_2 + z_4 = 0$, nos permite concluir que $(0, 1, 0, -1)$ é um autovetor associado a ∂_1^L em M_1 . Assim, da primeira linha de $M_1 \mathbf{z} = \lambda_1 \mathbf{z}$, temos uma contradição.

O mesmo ocorre quando aplicamos raciocínio análogo à matriz M_2 no lugar de M_1 .

□

Relembremos que a respeito da multiplicidade do maior autovalor da matriz distância laplaciana de um grafo, Aouchiche e Hansen provaram:

Teorema 4.2.5. [12] *Se G é um grafo conexo de ordem $n \geq 2$ então a multiplicidade do maior autovalor da matriz $D^L(G)$, é tal que $m(\partial_1^L) \leq n - 1$, com a igualdade ocorrendo se, e somente se, G é o grafo completo K_n .*

Utilizando o Teorema 4.2.4, resolvemos a Conjectura 4.0.3:

Teorema 4.2.6. *Se G é um grafo com $n \geq 3$ vértices e $G \not\cong K_n$, então $m(\partial_1^L(G)) \leq n - 2$ com a igualdade ocorrendo se, e somente se, G é isomorfo à estrela S_n ou ao grafo bipartido completo $K_{p,p}$, se $n = 2p$.*

Demonstração. Como $G \not\cong K_n$, já sabemos que $m(\partial_1^L(G)) \leq n - 2$ (Teorema 4.2.5). Portanto, resta checar para quais grafos vale $m(\partial_1^L(G)) = n - 2$. Seja G um grafo

conexo satisfazendo esta propriedade. Então, $m(\partial_{n-1}^L(G)) = 1$. Como $\partial_{n-1}^L(G) = n$ ou $\partial_{n-1}^L(G) \neq n$:

- Se $\partial_{n-1}^L(G) = n$, o \mathcal{D}^L -espectro de G é $(\partial_1^L, \partial_1^L, \dots, \partial_1^L, n, 0)$, com $\partial_1^L(G) \neq n$. Pelo Teorema 3.1.22, \overline{G} é desconexo e tem exatamente duas componentes. Mais ainda, como G é conexo e \overline{G} é desconexo, $\text{diam}(G) \leq 2$. Então, pelo Teorema 3.1.15, o L -espectro de G é $(n, 2n - \partial_1^L, \dots, 2n - \partial_1^L, 2n - \partial_1^L, 0)$. Do Lema 4.2.2, $G \cong S_n$ ou $G \cong K_{p,p}$.
- Se $\partial_{n-1}^L(G) \neq n$, o \mathcal{D}^L -espectro de G é $(\partial_1^L, \partial_1^L, \dots, \partial_1^L, \partial_{n-1}^L, 0)$ com $\partial_1^L \neq \partial_{n-1}^L$ e $\partial_{n-1}^L \neq n$. Afirmamos que não existe grafo com esta propriedade.

Com efeito, pelo Teorema 3.1.22, como $\partial_{n-1}^L \neq n$, \overline{G} também é conexo. Pelo Teorema 4.2.1, G possui P_4 como subgrafo induzido e, portanto, pelo Teorema 4.2.4, G não pode ter um autovalor distância laplaciano com multiplicidade $n - 2$.

Finalmente, lembramos que o \mathcal{D}^L -espectro do grafo estrela e do grafo bipartido completo são [12]:

- $Sp(\mathcal{D}^L(S_n)) = ((2n - 1)^{(n-2)}, n, 0)$;
- $Sp(\mathcal{D}^L(K_{p,p})) = ((3p)^{(n-2)}, n, 0)$.

□

4.2.2 P_5 como um subgrafo proibido e o espectro distância laplaciano

Tendo em vista a relação que foi estabelecida entre a multiplicidade do maior autovalor da matriz distância laplaciana de um grafo conexo e a existência de um subgrafo induzido isomorfo a P_4 , torna-se natural pensar como a existência de um subgrafo induzido isomorfo a P_5 pode influenciar seu \mathcal{D}^L -espectro. Neste sentido, provamos um resultado similar ao Teorema 4.2.4. Para isto, precisamos obter um cota inferior para o maior autovalor da matriz distância laplaciana de um grafo conexo. Chamamos a atenção que este é um resultado análogo ao já consagrado para a matriz laplaciana de um grafo: se G é um grafo com ao menos uma aresta então $\mu_1 \geq \Delta + 1$, onde Δ denota o grau máximo de G ([75]).

Teorema 4.2.7. *Se G é um grafo conexo então $\partial_1^L(G) \geq \max_{i \in V} \text{Tr}(v_i) + 1$. A igualdade ocorre se, e somente se, $G \cong K_n$.*

Demonstração. Suponha, sem perda de generalidade, que $Tr(v_1) = \max_{i \in V} Tr(v_i) = Tr_{\max}$ e seja $\mathbf{x} = (1, \frac{-1}{n-1}, \frac{-1}{n-1}, \dots, \frac{-1}{n-1})$. Então

$$\partial_1^L(G) = \max_{\mathbf{y} \perp \mathbf{1}} \frac{\langle D^L \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle}{\|\mathbf{y}\|_2^2} \geq \frac{\langle D^L \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle}{\|\mathbf{x}\|_2^2} = \left(1 + \frac{1}{n-1}\right)^2 \left(\frac{\sum_{i=1}^n d_{1,i}}{\|\mathbf{x}\|_2^2}\right) = \frac{n^2 Tr_{\max}}{(n-1)^2 \|\mathbf{x}\|_2^2}$$

Como $\|\mathbf{x}\|_2^2 = \frac{n}{n-1}$, obtemos

$$\partial_1^L(G) \geq \frac{n}{n-1} Tr_{\max} = Tr_{\max} + \frac{Tr_{\max}}{n-1} \geq Tr_{\max} + 1.$$

Para garantir quando a igualdade é atingida é suficiente ver que $G \cong K_n$ é o único grafo tal que $Tr_{\max} = n-1$ e \mathbf{x} é um autovetor para $\mathcal{D}^L(K_n)$. \square

Teorema 4.2.8. *Se G é um grafo conexo com $n \geq 5$ vértices e $m(\partial_1^L(G)) = n-3$ então G não pode ter P_5 como subgrafo induzido.*

Demonstração. Suponhamos que G admita P_5 como um subgrafo induzido que, sem perda de generalidade, supomos possuir sequência de vértices v_1, v_2, v_3, v_4, v_5 . Seja M a submatriz principal de $\mathcal{D}^L(G)$ determinada pelo P_5 e denotemos seus autovalores por $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4 \geq \lambda_5$. Se $m(\partial_1^L) = n-3$, pelo Teorema 2.1.5 segue que $\lambda_1 = \lambda_2 = \partial_1^L$. Pelo Lema 4.2.3, se $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$ e $\mathbf{y} = (y_1, y_2, y_3, y_4, y_5)$ são autovetores associados a ∂_1^L em M , então $\mathbf{x}^* = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, 0, \dots, 0)$ e $\mathbf{y}^* = (y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, 0, \dots, 0)$ são autovetores para $\mathcal{D}^L(G)$, associados a ∂_1^L . Como $\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^* \perp \mathbf{1}$, com uma combinação linear destes vetores, é possível obter $\mathbf{z}^* = (z_1, z_2, z_3, z_4, 0, \dots, 0)$ tal que $\mathbf{z}^* \perp \mathbf{1}$ e ainda é um autovetor para $\mathcal{D}^L(G)$, associado a ∂_1^L . Então, $\mathbf{z} = (z_1, z_2, z_3, z_4, 0)$ é um autovetor para M tal que $z_1 + z_2 + z_3 + z_4 = 0$.

Agora, observe que a matriz M pode ser escrita como

$$M = \begin{bmatrix} t_1 & -1 & -2 & -d_{1,4} & -d_{1,5} \\ -1 & t_2 & -1 & -2 & -d_{2,5} \\ -2 & -1 & t_3 & -1 & -2 \\ -d_{1,4} & -2 & -1 & t_4 & -1 \\ -d_{5,1} & -d_{5,2} & -2 & -1 & t_5 \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

onde t_1, t_2, t_3, t_4, t_5 denotam as transmissões dos vértices que induzem P_5 em $\mathcal{D}^L(G)$, $d_{1,5}=2,3$ ou 4 , $d_{2,5} = 2$ ou 3 e $d_{1,4} = 2$ ou 3 . Como P_5 é um subgrafo induzido, é fácil verificar que se $d_{1,5} = 4$ então $d_{2,5} = 3$ e $d_{1,4} = 3$. Mostramos, na sequência, que todas as combinações para $d_{1,5}$, $d_{2,5}$, e $d_{1,4}$ levam a contradições.

- $d_{1,5} = 2$ e $d_{2,5} = 2$:

Como $\mathbf{z} \perp \mathbf{1}$, da quinta linha de $M\mathbf{z} = \partial_1^L \mathbf{z}$ segue que $z_4 = 0$. Então, usando também a quarta linha desta equação, temos que

$$\begin{cases} -d_{1,4}z_1 - 2z_2 - z_3 = 0 \\ z_1 + z_2 + z_3 = 0 \end{cases}$$

Se $d_{1,4} = 2$, então $z_3 = 0$ e $z_1 = -z_2$. Logo, podemos assumir que $\mathbf{z} = (-1, 1, 0, 0, 0)$ é um autovetor de M , o que é uma contradição de acordo com a terceira linha da equação $M\mathbf{z} = \partial_1^L \mathbf{z}$.

Se $d_{1,4} = 3$, então $z_3 = z_1$ e $z_2 = -2z_1$. Logo, podemos assumir que $\mathbf{z} = (1, -2, 1, 0, 0)$ é um autovetor de M . Da terceira linha da equação, concluímos que $t_3 = \partial_1^L$, o que é uma contradição (Teorema 4.2.7).

- $d_{1,5} = 2$ e $d_{2,5} = 3$:

Como $\mathbf{z} \perp \mathbf{1}$, da quinta linha de $M\mathbf{z} = \partial_1^L \mathbf{z}$, segue que $z_2 = z_4 = 1$ e $z_1 + z_3 = -2$. Assim, assumimos $\mathbf{z} = (z_1, 1, -2 - z_1, 1, 0)$, e da segunda linha da mesma equação, concluímos que $t_2 = \partial_1^L$.

- $d_{1,5} = 3$ e $d_{2,5} = 2$:

Como $\mathbf{z} \perp \mathbf{1}$, da quinta linha de $M\mathbf{z} = \partial_1^L \mathbf{z}$, segue que $z_1 = z_4 = 1$ e $z_2 + z_3 = -2$. Desta forma, consideramos $\mathbf{z} = (1, -2 - z_3, z_3, 1, 0)$, e obtemos

$$\begin{cases} t_1 + 2 - z_3 - d_{1,4} = \partial_1^L \\ -d_{1,4} + 4 + z_3 + t_4 = \partial_1^L \end{cases}$$

.

Se $d_{1,4} = 2$, pelo Teorema 4.2.7 temos

$$\begin{cases} z_3 = t_1 - \partial_1^L \leq -1 \\ z_3 = \partial_1^L - t_4 \geq 1 \end{cases}$$

Se $d_{1,4} = 3$, novamente pelo Teorema 4.2.7, temos

$$\begin{cases} z_3 = t_1 - \partial_1^L - 1 \leq -2 \\ z_3 = \partial_1^L - t_4 - 1 \geq 0 \end{cases}$$

- $d_{1,5} = d_{2,5} = 3$:

Visto que $\mathbf{z} \perp \mathbf{1}$, da quinta linha de $M\mathbf{z} = \partial_1^L \mathbf{z}$, segue que $z_3 = -2z_4$ e $z_1 + z_2 = 1$. Logo, podemos escrever $\mathbf{z} = (z_1, 1 - z_1, -2, +1, 0)$, e, então,

$$\begin{cases} -z_1 - 2t_3 - 2 = -2\partial_1^L \\ (2 - d_{1,4})z_1 + t_4 = \partial_1^L \end{cases}$$

Se $d_{1,4} = 2$, então $t_4 = \partial_1^L$, o que é uma contradição.

Se $d_{1,4} = 3$, então

$$\begin{cases} z_1 = 2(\partial_1^L - t_3 - 1) \\ z_1 = t_4 - \partial_1^L \end{cases}$$

o que é absurdo, já que o Teorema 4.2.7 implica $z_1 < 0$ e $z_1 > 0$.

- $d_{1,5} = 4$, $d_{2,5} = 3$ e $d_{1,4} = 3$:

Como $\mathbf{z} \perp \mathbf{1}$, da quinta linha de $M\mathbf{z} = \partial_1^L \mathbf{z}$, segue que $-3z_1 - 2z_2 - z_3 = 0$. Deste fato e da quarta linha desta equação obtemos $t_4 z_4 = z_4 \partial_1^L$. Se $z_4 \neq 0$ chegamos a uma contradição. Se $z_4 = 0$ conclui-se que $-2z_1 - z_2 = 0$. Então, escrevemos $\mathbf{z} = (1, -2, 1, 0, 0)$, o que implica em $t_1 = \partial_1^L$, novamente uma contradição.

□

Embora o último teorema não nos permita descrever completamente os grafos que possuem o maior autovalor distância laplaciano com multiplicidade $n - 3$, é possível obter uma caracterização parcial e fazer algumas observações no que diz respeito a esta questão.

Proposição 4.2.9. *Seja G um grafo conexo com ordem $n \geq 4$ tal que $m(\partial_1^L) = n - 3$. Se $\partial_{n-1}^L = n$ é um autovalor com multiplicidade 2 então $G \cong K_{\frac{n}{3}, \frac{n}{3}, \frac{n}{3}}$, ou $G \cong K_{\frac{n-1}{2}, \frac{n-1}{2}} \vee K_1$, ou $G \cong \overline{K}_{n-2} \vee K_2$.*

Demonstração. Como $\partial_{n-1}^L = n$, \overline{G} é desconexo e $\text{diam}(G) = 2$. Mais ainda, pelo Teorema 3.1.15, o L -espectro de \overline{G} é

$$(n - \partial_1^L, \dots, n - \partial_1^L, 0, 0, 0),$$

isto é, \overline{G} tem três componentes, todas elas com o mesmo autovalor distância laplaciano não nulo. Logo, as três componentes são vértices isolados, ou grafos completos com a mesma ordem, isto é, $\overline{G} \cong K_{\frac{n}{3}} \cup K_{\frac{n}{3}} \cup K_{\frac{n}{3}}$, se $3 \mid n$, $\overline{G} \cong K_{\frac{n-1}{2}} \cup K_{\frac{n-1}{2}} \cup K_1$, se $2 \mid (n - 1)$, ou $\overline{G} \cong K_{n-2} \cup K_1 \cup K_1$.

Por fim, como os grafos citados acima tem diâmetro 2, pelo Teorema 3.1.15, é suficiente conhecer seu L -espectro para escrever o \mathcal{D}^L -espectro:

- $Sp(\mathcal{D}^L(K_{\frac{n}{3}, \frac{n}{3}, \frac{n}{3}})) = \left(\left(\frac{4n}{3} \right)^{(n-3)}, n^{(2)}, 0 \right);$

- $Sp\left(\mathcal{D}^L(K_{\frac{n-1}{2}, \frac{n-1}{2}} \vee K_1)\right) = \left(\left(\frac{3n-1}{2}\right)^{(n-3)}, n^{(2)}, 0\right)$;
- $Sp\left(\mathcal{D}^L(\overline{K}_{n-2} \vee K_2)\right) = ((2(n-1))^{(n-3)}, n^{(2)}, 0)$.

□

Para finalizar a caracterização dos grafos conexos cujo maior autovalor distância laplaciano tem multiplicidade $n-3$ nos resta analisar duas situações:

- Se $\partial_{n-1}^L = n$ é um autovalor com multiplicidade 1;
- Se $\partial_{n-1}^L \neq n$.

Embora não tenhamos caracterizado precisamente estas duas classes, procedendo similarmente à última proposição, podemos concluir no primeiro caso que se o \mathcal{D}^L -espectro de um grafo conexo G é $(\partial_1^L, \dots, \partial_1^L, \partial_{n-2}^L, n, 0)$ então o L -espectro de \overline{G} é escrito como $(\partial_1^L - n, \dots, \partial_1^L - n, \partial_{n-2}^L - n, 0, 0)$. Assim, \overline{G} é um grafo com 2 componentes tal que o maior autovalor laplaciano tem multiplicidade $n-3$. Por exemplo, o grafo $G \cong K_{2, n-2}$ possui esta propriedade já que $Sp(\mathcal{D}^L(K_{2, n-2})) = ((2n-2)^{(n-3)}, n+2, n, 0)$.

No último caso, como $\partial_{n-1}^L \neq n$, então \overline{G} é um grafo conexo. Logo, G possui um subgrafo induzido isomorfo a P_4 . Por outro lado, do Teorema 4.2.8, G não possui P_5 como subgrafo induzido. Por exemplo, C_5 satisfaz esta condição, já que $Sp(\mathcal{D}^L(C_5)) = \left(\left(\frac{15+\sqrt{5}}{2}\right)^{(2)}, \left(\frac{15-\sqrt{5}}{2}\right)^{(2)}, 0\right)$.

4.2.3 Propostas para trabalhos futuros

Diante das questões discutidas nesta seção, permanecemos interessados no seguinte problema:

Questão 4.2.10. *É possível descrever completamente os grafos conexos cujo maior autovalor distância laplaciano possui multiplicidade $n-3$? E os grafos que possuem algum autovalor distância laplaciano com multiplicidade $n-3$?*

Capítulo 5

Grafos \mathcal{D}^L -inteiros e \mathcal{D}^Q -inteiros

Dentre os aspectos estudados pela Teoria Espectral de Grafos, um problema importante é, fixada uma matriz associada ao grafo, caracterizar grafos para os quais todos os autovalores são inteiros. Desde 1974, quando HARARY e SCHWENK [76] introduziram a questão “*Which graphs have integral spectra?*”, a procura por grafos cujo o espectro da matriz de adjacência é formada por inteiros tem sido feita. Em 2001, BALIŃSKA *et al.* [77] publicaram um *survey* dos resultados sobre grafos inteiros. Em 1994, GRONE *et al.* [78] usaram explicitamente a denominação grafo laplaciano integral, o que gerou diversos outros artigos, tais como [79–81].

Mais tarde, a integralidade para a matriz laplaciana sem sinal foi estudada [82–84]. Somente muito recentemente este problema foi estudado para a matriz distância [85, 86].

De modo geral, relembramos que se M é uma matriz real simétrica associada a um grafo G , denotamos por $P_M(G, x)$ o polinômio característico de $M(G)$ e por $Sp_M(G)$ seu espectro. Uma vez que as matrizes que são utilizadas neste trabalho só possuem entradas inteiras, os seus polinômios característicos têm todos os coeficientes inteiros. Como o coeficiente líder de cada um deles é igual a 1, as raízes racionais de cada um deles, quando existem, são, na verdade, inteiras. Assim, dado um grafo G , o seu espectro associado a uma matriz M tem autovalores que são ou números inteiros ou números irracionais. Quando cada elemento de $Sp(M(G))$ é um número inteiro, G é chamado de grafo M -integral.

O objetivo deste capítulo é discutir a \mathcal{D}^L -integralidade e a \mathcal{D}^Q -integralidade para algumas classes especiais de grafos. Em particular, consideramos as classes dos grafos *split* completos, multi-completo similar *split* (multiple complete split-like), completo-estendido similar *split* (extended complete split-like) e multi-completo-estendido similar *split* (multiple extended complete split-like). Estas classes também foram investigadas na discussão da integralidade para a matriz de adjacência [87], matriz laplaciana sem sinal [82] e, muito recentemente, para a matriz distância [85]. Também observamos que, para todo grafo de diâmetro 2, os grafos distância

laplacianos integrais e os laplacianos integrais são os mesmos.

O capítulo é estruturado como segue: na primeira seção apresentamos condições necessárias e suficientes para que grafos obtidos a partir de determinadas operações com grafos regulares sejam \mathcal{D}^L -integrais ou \mathcal{D}^Q -integrais. Também determinamos o \mathcal{D}^Q -polinômio característico dos grafos resultantes destas operações. A segunda seção é dividida em duas partes: na primeira exibimos os únicos valores de $n \in \mathbb{N}$ para os quais o grafo estrela e o grafo roda são \mathcal{D}^Q -integrais. Mais à frente, construímos famílias infinitas de grafos \mathcal{D}^Q -integrais nas classes citadas no parágrafo anterior. Na segunda parte fazemos uma caracterização da \mathcal{D}^Q -integralidade para $K_{n_1} \vee (K_{n_2} \cup K_{n_3})$, e também exibimos famílias infinitas de grafos \mathcal{D}^Q -integrais deste tipo.

Destacamos que o presente capítulo é, a menos de quando explicitamente indicado, composto por resultados de nossa autoria, que foram submetidos em [25]. Na verdade, ainda não há resultados disponíveis na literatura a respeito da integralidade no que diz respeito às matrizes \mathcal{D}^L e \mathcal{D}^Q .

5.1 Alguns resultados sobre grafos \mathcal{D}^L -integrais e grafos \mathcal{D}^Q -integrais

Iniciamos esta seção lembrando a definição de algumas classes de grafos, que foram primeiramente definidas por HANSEN *et al.* [87] :

Definição 5.1.1. *Para $a, b, n \in \mathbb{N}$, consideramos as seguintes classes de grafos:*

- *O grafo split completo $CS_b^a \cong \overline{K_a} \vee K_b$;*
- *O grafo multi-completo similar split $MCS_{b,n}^a \cong \overline{K_a} \vee (nK_b)$;*
- *O grafo completo-estendido similar split $ECS_b^a \cong \overline{K_a} \vee (K_b \times K_2)$;*
- *O grafo multi-completo-estendido similar split $MECS_{b,n}^a \cong \overline{K_a} \vee (n(K_b \times K_2))$.*

Para alguns exemplos, ver Figuras 5.1, 5.2, 5.3, 5.4.

Recordamos agora alguns resultados, já citados no Capítulo 3, sobre o \mathcal{D}^L -espectro e o \mathcal{D}^Q -espectro de um grafo:

Teorema 5.1.2. *Seja $n \in \mathbb{N}$.*

$$i) Sp(\mathcal{D}^L(K_n)) : (n^{(n-1)}, 0) \quad e \quad Sp(\mathcal{D}^Q(K_n)) : (2n-2, (n-2)^{(n-1)});$$

ii) *Se G é k -transmissão regular então*

$$P_{\mathcal{D}^L}(G, x) = (-1)^n P_{\mathcal{D}}(G, k-x) \quad e \quad P_{\mathcal{D}^Q}(G, x) = P_{\mathcal{D}}(G, x-k);$$

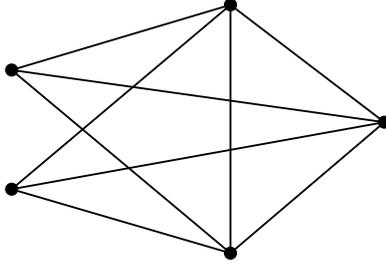


Figura 5.1: CS_3^2

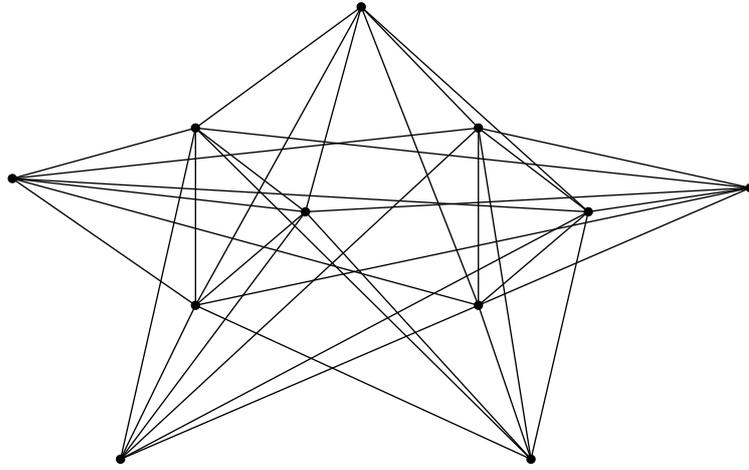


Figura 5.2: $MCS_{3,2}^5$

iii) $Sp(\mathcal{D}^L(K_n - e)) : (n + 2, n^{(n-2)}, 0) ;$

iv) $Sp(\mathcal{D}^Q(K_n - e)) : \left(\frac{3n - 2 \pm \sqrt{n^2 - 4n + 20}}{2}, (n - 2)^{(n-2)} \right) .$

Então, como consequência do último teorema, podemos enunciar alguns resultados iniciais a respeito da integralidade do D^L -espectro e do D^Q -espectro:

Corolário 5.1.3. *Os seguintes resultados são válidos no que diz respeito às matrizes distância laplaciana e distância laplaciana sem sinal:*

i) $G \cong K_n$ é D^L -integral e D^Q -integral;

ii) Se G é transmissão regular então G é D^L -integral se, e somente se, é D^Q -integral se, e somente se, G é D -integral;

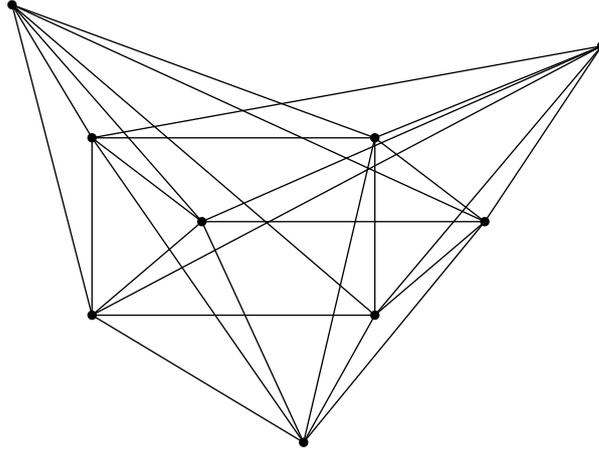


Figura 5.3: ECS_3^3

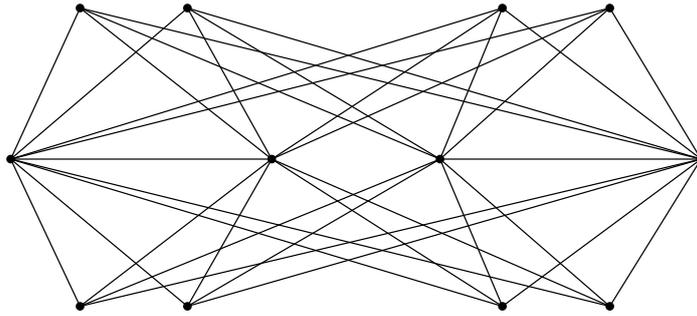


Figura 5.4: $MECS_{1,2}^8$.

iii) $G \cong K_n - e$ é D^L -integral, para qualquer aresta e de K_n ;

iv) $G \cong K_n - e$ é D^Q -integral se, e somente se, $n = 5$, para qualquer aresta e de K_n .

Demonstração. Os três primeiros casos seguem imediatamente do último teorema. No quarto caso, é suficiente ver que $n^2 - 4n + 20 = (n - 2)^2 + 16$ é um quadrado perfeito se, e somente se, existe $y \in \mathbb{N}$ tal que $(n - 2)^2 + 16 = y^2$. Mas, para $n, y \in \mathbb{N}$, é fácil ver que as únicas soluções possíveis para a equação $(n - 2 + y)(n - 2 - y) = -16$ são $n = 2, y = 4$ e $n = 5, y = 5$. Como no primeiro caso teríamos um grafo desconexo, concluímos o resultado. \square

Embora tenhamos optado por manter os resultados sobre a matriz distância laplaciana dos grafos K_n e $K_n - e$ no corolário acima, como exemplos iniciais, estes

resultados também podem ser obtidos considerando o Teorema 3.1.15, onde é exibida uma equivalência entre os espectros laplacianos e distância laplacianos dos grafos conexos de diâmetro menor ou igual a 2. Desta forma, temos o seguinte resultado:

Corolário 5.1.4. *Seja G um grafo conexo com n vértices e $\text{diam}(G) \leq 2$. O grafo G é \mathcal{D}^L -integral se, e somente se, é L -integral.*

Como todos os grafos apresentados na Definição 5.1.1 possuem diâmetro 2 e são L -integrais [88], podemos enunciar o seguinte resultado:

Teorema 5.1.5. *Para todos $a, b, n \in \mathbb{N}$, os grafos $CS_b^a, MCS_{b,n}^a, ECS_b^a$ e $MECS_{b,n}^a$ são \mathcal{D}^L -integrais.*

Tendo em vista o teorema acima, de agora em diante voltamos nossas atenções ao estudo da integralidade com respeito à matriz distância laplaciana sem sinal.

Nos próximos dois teoremas, determinamos o \mathcal{D}^Q -polinômio característico para grafos do tipo $G_1 \vee G_2$ e $G_1 \vee (G_2 \cup G_3)$, onde G_i é um r_i -regular, para $i = 1, 2$ e 3. Além disto, os próximos dois corolários garantem condições suficientes para a \mathcal{D}^Q -integralidade nestas classes de grafos.

Teorema 5.1.6. *Para $i = 1, 2$, seja G_i um grafo r_i -regular com n_i vértices. Então, o polinômio característico da matriz $\mathcal{D}^Q(G_1 \vee G_2)$ é igual a*

$$\frac{P_A(G_1)(-x + (2(n_1 - 2) + n_2 - r_1))P_A(G_2)(-x + (2(n_2 - 2) + n_1 - r_2))}{(x - (2(n_1 - 2) + n_2 - 2r_1))(x - (2(n_2 - 2) + n_1 - 2r_2))} f(x),$$

onde $f(x) = x^2 + x(-5(n_1 + n_2) + 2(r_1 + r_2) + 8) + 4(n_1^2 + n_2^2) + 8(r_1 + r_2 - n_1 r_2 - n_2 r_1) - 20(n_1 + n_2) - 2(n_1 r_1 + n_2 r_2) + 16n_1 n_2 + 4r_1 r_2 + 16$.

Demonstração. Para $i = 1, 2$, seja G_i um grafo r_i -regular com n_i vértices. Então, a matriz $\mathcal{D}(G)$ pode ser escrita como

$$\mathcal{D}(G) = \begin{bmatrix} 2(\mathbb{J}_{n_1} - \mathbb{I}_{n_1}) - A(G_1) & \mathbb{J}_{n_1 \times n_2} \\ \mathbb{J}_{n_2 \times n_1} & 2(\mathbb{J}_{n_2} - \mathbb{I}_{n_2}) - A(G_2) \end{bmatrix}$$

e

$$\text{Tr}(G) = \begin{bmatrix} (2(n_1 - 1) - r_1 + n_2)\mathbb{I}_{n_1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (2(n_2 - 1) - r_2 + n_1)\mathbb{I}_{n_2} \end{bmatrix}.$$

Logo, a matriz $\mathcal{D}^Q(G)$ é escrita como

$$\begin{bmatrix} (2(n_1 - 2) + n_2 - r_1)\mathbb{I}_{n_1} - A(G_1) + 2\mathbb{J}_{n_1} & \mathbb{J}_{n_1 \times n_2} \\ \mathbb{J}_{n_2 \times n_1} & (2(n_2 - 2) + n_1 - r_2)\mathbb{I}_{n_2} - A(G_2) + 2\mathbb{J}_{n_2} \end{bmatrix}.$$

Disto, segue que se $v_1 \in \mathbb{R}^{n_1}$ é tal que $A(G_1)v_1 = \lambda_{v_1} v_1$ e $v_1 \perp \mathbf{1}_{n_1}$, então o vetor

$u_1 = \begin{bmatrix} v_1 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_1+n_2}$ satisfaz $\mathcal{D}^Q(G)u_1 = (2(n_1-2) + n_2 - r_1 - \lambda_{v_1})u_1$. Portanto, $2(n_1-2) + n_2 - r_1 - \lambda_{v_1}$ é um autovalor de $\mathcal{D}^L(G)$.

Analogamente, se $v_2 \in \mathbb{R}^{n_2}$ é tal que $A(G_2)v_2 = \lambda_{v_2}v_2$ e $v_2 \perp \mathbf{1}_{n_2}$. concluimos que $u_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ v_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_1+n_2}$ é autovetor de $\mathcal{D}^Q(G)$, associado ao autovalor $2(n_2-2) + n_1 - r_2 - \lambda_{v_2}$.

Mais ainda, segue que os autovalores da matriz

$$M_Q = \begin{bmatrix} 4(n_1-1) + n_2 - 2r_1 & n_2 \\ n_1 & 4(n_2-1) + n_1 - 2r_2 \end{bmatrix},$$

que são as raízes de $f(x) = x^2 + x(-5(n_1+n_2) + 2(r_1+r_2) + 8) + 4(n_1^2 + n_2^2) + 8(r_1+r_2 - n_1r_2 - n_2r_1) - 20(n_1+n_2) - 2(n_1r_1 + n_2r_2) + 16n_1n_2 + 4r_1r_2 + 16$, são também autovalores de $\mathcal{D}^Q(G)$. \square

Corolário 5.1.7. *Para $i = 1, 2$, seja G_i um grafo regular de grau r_i com n_i vértices. Então, o grafo $G_1 \vee G_2$ é \mathcal{D}^Q -integral se, e somente se, G_1 e G_2 são A -integrais e $(3(n_1 - n_2) - 2(r_1 - r_2))^2 + 4n_1n_2$ é um quadrado perfeito.*

Teorema 5.1.8. *Para $i = 1, 2, 3$, seja G_i um grafo r_i -regular com n_i vértices. Então, o polinômio característico da matriz $\mathcal{D}^Q(G_1 \vee (G_2 \cup G_3))$, é igual a*

$$\frac{P_A(G_1)(-x + (2(n_1-2) + n_2 + n_3 - r_1))P_A(G_2)(-x + (n_1 + 2(n_2-2) + 2n_3 - r_2))}{(x - (2(n_1-2) + n_2 + n_3 - 2r_1))(x - (n_1 + 2(n_2-2) + 2n_3 - 2r_2))} \times$$

$$\frac{P_A(G_3)(-x + (n_1 + 2n_2 + 2(n_3-2) - r_2))}{(x - (n_1 + 2n_2 + 2(n_3-2) - 2r_3))} g(x),$$

onde $g(x)$ é o polinômio característico da matriz

$$\begin{bmatrix} 4(n_1-1) + n_2 + n_3 - 2r_1 & n_2 & n_3 \\ n_1 & n_1 + 4(n_2-1) + 2n_3 - 2r_2 & 2n_3 \\ n_1 & 2n_2 & n_1 + 2n_2 + 4(n_3-1) - 2r_3 \end{bmatrix}.$$

Demonstração. Seja $G = G_1 \vee (G_2 \cup G_3)$, como nas hipóteses do teorema. Então,

$$\mathcal{D}(G) = \begin{bmatrix} 2(\mathbb{J}_{n_1} - \mathbb{I}_{n_1}) - A(G_1) & \mathbb{J}_{n_1 \times n_2} & \mathbb{J}_{n_1 \times n_3} \\ \mathbb{J}_{n_2 \times n_1} & 2(\mathbb{J}_{n_2} - \mathbb{I}_{n_2}) - A(G_2) & 2\mathbb{J}_{n_2 \times n_3} \\ \mathbb{J}_{n_3 \times n_1} & 2\mathbb{J}_{n_3 \times n_2} & 2(\mathbb{J}_{n_3} - \mathbb{I}_{n_3}) - A(G_3) \end{bmatrix}$$

e a matriz de transmissões, $Tr(G)$, é igual a

$$\begin{bmatrix} B_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & B_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & B_3 \end{bmatrix},$$

onde

- $B_1 = (2(n_1 - 1) - r_1 + n_2 + n_3)\mathbb{I}_{n_1}$;
- $B_2 = (2(n_2 - 1) - r_2 + n_1 + 2n_3)\mathbb{I}_{n_2}$;
- $B_3 = (2(n_3 - 1) - r_3 + n_1 + 2n_2)\mathbb{I}_{n_3}$.

Logo,

$$\mathcal{D}^Q(G) = \begin{bmatrix} C_1 & \mathbb{J}_{n_1 \times n_2} & \mathbb{J}_{n_1 \times n_3} \\ \mathbb{J}_{n_2 \times n_1} & C_2 & 2\mathbb{J}_{n_2 \times n_3} \\ \mathbb{J}_{n_3 \times n_1} & 2\mathbb{J}_{n_3 \times n_2} & C_3 \end{bmatrix},$$

onde

- $C_1 = (2n_1 - r_1 + n_2 + n_3 - 4)\mathbb{I}_{n_1} - A(G_1) + 2\mathbb{J}_{n_1}$;
- $C_2 = (n_1 + 2n_2 + 2n_3 - r_2 - 4)\mathbb{I}_{n_2} - A(G_2) + 2\mathbb{J}_{n_2}$;
- $C_3 = (n_1 + 2n_2 + 2n_3 - r_3 - 4)\mathbb{I}_{n_3} - A(G_3) + 2\mathbb{J}_{n_3}$.

Note que, se $v_1 \in \mathbb{R}^{n_1}$ é tal que $A(G_1)v_1 = \lambda_{v_1}v_1$ e $v_1 \perp \mathbf{1}_{n_1}$, então o vetor $u_1 = \begin{bmatrix} v_1 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_1+n_2+n_3}$ satisfaz $\mathcal{D}^Q(G)u_1 = (2n_1+n_2+n_3-r_1-4-\lambda_{v_1})u_1$. Portanto, $2n_1+n_2+n_3-r_1-4-\lambda_{v_1}$ é um autovalor de $\mathcal{D}^Q(G)$.

Analogamente, escolhendo $v_2 \in \mathbb{R}^{n_2}$ e $v_3 \in \mathbb{R}^{n_3}$ tais que $A(G_2)v_2 = \lambda_{v_2}v_2$, com $v_2 \perp \mathbf{1}_{n_2}$, e $A(G_3)v_3 = \lambda_{v_3}v_3$, com $v_3 \perp \mathbf{1}_{n_3}$, concluímos que $u_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ v_2 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_1+n_2+n_3}$

e $u_3 = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ v_3 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_1+n_2+n_3}$ são autovetores de $\mathcal{D}^Q(G)$, associados aos autovalores $2n_2+n_1+2n_3-r_2-4-\lambda_{v_2}$ e $2n_3+n_1+2n_2-r_3-4-\lambda_{v_3}$, respectivamente.

Mais ainda, os autovalores da matriz

$$\begin{bmatrix} 4(n_1 - 1) + n_2 + n_3 - 2r_1 & n_2 & n_3 \\ n_1 & n_1 + 4(n_2 - 1) + 2n_3 - 2r_2 & 2n_3 \\ n_1 & 2n_2 & n_1 + 2n_2 + 4(n_3 - 1) - 2r_3 \end{bmatrix},$$

também são autovalores de $\mathcal{D}^Q(G)$. □

Corolário 5.1.9. Para $i = 1, 2, 3$, seja G_i um grafo regular de grau r_i com n_i vértices. O grafo $(G_1 \vee (G_2 \cup G_3))$, é \mathcal{D}^Q -integral se, e somente se, os grafos G_1, G_2 e G_3 são A -integrais e o polinômio característico da matriz

$$\begin{bmatrix} 4(n_1 - 1) + n_2 + n_3 - 2r_1 & n_2 & n_3 \\ n_1 & n_1 + 4(n_2 - 1) + 2n_3 - 2r_2 & 2n_3 \\ n_1 & 2n_2 & n_1 + 2n_2 + 4(n_3 - 1) - 2r_3 \end{bmatrix}.$$

possui apenas raízes inteiras.

Observação 5.1.10. Do Corolário 5.1.4, e tendo em vista que se G_i é um grafo regular para $i = 1, 2, 3$, então $(G_1 \vee (G_2 \cup G_3))$ é L -integral [79], obtemos a \mathcal{D}^L -integralidade deste tipo de grafo.

5.2 Famílias infinitas de grafos \mathcal{D}^Q -integrais

Nesta seção, construímos diversas famílias infinitas de grafos \mathcal{D}^Q -integrais. Também determinamos o único grafo roda e o único grafo estrela que são \mathcal{D}^Q -integrais, como consequências imediata do Corolário 5.1.7.

Corolário 5.2.1. Seja $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 4$. A roda $R_n \cong C_{n-1} \vee K_1$ é \mathcal{D}^Q -integral se, e somente se, $n = 5$.

Demonstração. Já é conhecido que o grafo C_{n-1} é A -integral se, e somente se, $n = 4, 5$ ou 7 (ver, por exemplo, [77]). Então, usando o Corolário 5.1.7, basta checarmos que, dentre estes três valores, apenas $n = 5$ torna $9n^2 - 56n + 96$ um quadrado perfeito. \square

Proposição 5.2.2. Para $a, b \in \mathbb{N}$, o grafo bipartido completo $K_{a,b} \cong \overline{K}_a \vee \overline{K}_b$ é \mathcal{D}^Q -integral se, e somente se, $9(a-b)^2 + 4ab$ é um quadrado perfeito.

Demonstração. Segue imediatamente do Corolário 5.1.7, fazendo $n_1 = a$, $n_2 = b$ e $r_1 = r_2 = 0$. \square

O próximo corolário fornece uma família infinita de grafos \mathcal{D}^Q -integrais.

Corolário 5.2.3. Para $a, b, j \in \mathbb{N}$, o grafo bipartido completo $K_{a,b} \cong \overline{K}_a \vee \overline{K}_b$ é \mathcal{D}^Q -integral se $a = b$ ou se $a = \frac{j^2 + 5j + 4}{2}$ e $b = \frac{j^2 + 3j}{2}$.

Demonstração. Se $a = b$ então $9(a-b)^2 + 4ab = 4a^2$. No segundo caso temos que $9(a-b)^2 + 4ab = (j^2 + 4j + 6)^2$. \square

Exemplo 5.2.4. Se $G \cong K_{5,2}$, então $Sp(\mathcal{D}^Q(K_{5,2})) = (19, 8^{(5)}, 5)$.

Corolário 5.2.5. Para $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$, o grafo estrela S_n é \mathcal{D}^Q -integral se, e somente se, $n = 2$.

Demonstração. Como $S_n \cong K_1 \vee \overline{K}_{n-1}$, segue que S_n é \mathcal{D}^Q -integral se, e somente se, $9n^2 - 32n + 32$ é um quadrado perfeito. Isto ocorre se, e somente se, existe $x \in \mathbb{N}$ tal que $9n^2 - 32n + 32 = x^2$. Esta equação pode ser reescrita como $(6x + 18n - 32)(6x - 18n + 32) = 2^7$. Como a soma dos fatores à esquerda da equação é igual a $12x$, as únicas possibilidades são $x = 3$ e $x = 2$. Portanto, a única solução é $n = 2$. \square

Proposição 5.2.6. Para $a, b \in \mathbb{N}$, o grafo split completo $CS_b^a \cong \overline{K}_a \vee K_b$ é \mathcal{D}^Q -integral se, e somente se, $(3a + b + 2)^2 - 8a(b + 3)$ é um quadrado perfeito.

Demonstração. Segue imediatamente do Corolário 5.1.7, fazendo $n_1 = a$, $r_1 = 0$, $n_2 = b$ e $r_2 = b - 1$. \square

Novamente, no próximo corolário, exibimos diversas famílias de grafos \mathcal{D}^Q -integrais.

Corolário 5.2.7. Para $a, b, j \in \mathbb{N}$, $j \geq 1$ o grafo CS_b^a é \mathcal{D}^Q -integral se uma das seguintes condições é satisfeita:

- i) $a = 1$ e $b = j$;
- ii) $a = j$ e $b = 2j - 1$;
- iii) $a = j + 2$ e $b = 2j$;
- iv) $a = 2j - 1$ e $b = 9j - 6$;
- v) $a = 2j$ e $b = 9j - 6$.

Demonstração. Respectivamente, temos em cada caso:

- i) O grafo em questão é completo;
- ii) $(3a + b + 2)^2 - 8a(b + 3) = (3j - 1)^2$;
- iii) $(3a + b + 2)^2 - 8a(b + 3) = (3j + 4)^2$;
- iv) $(3a + b + 2)^2 - 8a(b + 3) = (9j - 5)^2$;
- v) $(3a + b + 2)^2 - 8a(b + 3) = (9j - 4)^2$;

\square

Exemplo 5.2.8. Se $G \cong CS_3^2$, então $Sp(\mathcal{D}^Q(CS_3^2)) = (9, 4, 3^{(3)})$ (ver Figura 5.1).

Proposição 5.2.9. Para $a, b \in \mathbb{N}$, o grafo multicompleto similar split $MCS_{b,n}^a \cong \overline{K}_a \vee (nK_b)$ é \mathcal{D}^Q -integral se, e somente se, $(3a+2b+3bn-2)^2 - 8bn(4a+3(b-1))$ é um quadrado perfeito.

Demonstração. Segue imediatamente do Corolário 5.1.7, fazendo $n_1 = a$, $r_1 = 0$, $n_2 = nb$ e $r_2 = b-1$. \square

O corolário abaixo gera outras famílias infinitas de grafos \mathcal{D}^Q -integrals.

Corolário 5.2.10. Para $a, b, j \in \mathbb{N}$, o grafo $MCS_{b,n}^a$ é \mathcal{D}^Q -integral se uma das seguintes condições é satisfeita:

- i) $n = 2$, $a = 3j + 2$ e $b = 2j + 1$;
- ii) $n = 3$, $a = 2j + 3$ e $b = j + 1$;
- iii) $a = (n-1)j + 1$ e $b = j$, para todo $n \in \mathbb{N}$.

Demonstração. Respectivamente, temos em cada caso:

- i) $(3a+2b+3bn-2)^2 - 8bn(4a+3(b-1)) = (7j+4)^2$;
- ii) $(3a+2b+3bn-2)^2 - 8bn(4a+3(b-1)) = (5j+6)^2$;
- iii) $(3a+2b+3bn-2)^2 - 8bn(4a+3(b-1)) = ((2n-1)j+1)^2$.

\square

Exemplo 5.2.11. Se $G \cong MCS_{3,2}^5$, então $Sp(\mathcal{D}^Q(MCS_{3,2}^5)) = (27, 16, 12^{(8)}, 9)$ (ver Figura 5.2)

Proposição 5.2.12. Para $a, b \in \mathbb{N}$, o grafo completo-estendido similar split $ECS_b^a \cong \overline{K}_a \vee (K_b \times K_2)$ é \mathcal{D}^Q -integral se, e somente se, $(3a+4b)^2 - 40ab$ é um quadrado perfeito.

Demonstração. Segue imediatamente do Corolário 5.1.7, fazendo $n_1 = a$, $r_1 = 0$, $n_2 = 2b$ e $r_2 = b$. \square

Corolário 5.2.13. Para $a, b, j \in \mathbb{N}$, o grafo ECS_b^a é \mathcal{D}^Q -integral se uma das seguintes condições é satisfeita:

- i) $a = b$;
- ii) $a = 3j$ e $b = j$ ou $b = 2j$;
- iii) $a = 7j$ e $b = 9j$;
- iv) $a = 16j$ e $b = 7j$ ou $b = 9j$;

$$v) a = 2j + 1 \text{ e } b = \frac{5j^2 + 7j + 2}{2}.$$

Demonstração. Respectivamente, temos em cada caso:

- i) $(3a + 4b)^2 - 40ab = (3a)^2$;
- ii) Em ambos os casos, temos $(3a + 4b)^2 - 40ab = (7j)^2$;
- iii) $(3a + 4b)^2 - 40ab = (27j)^2$;
- iv) Em qualquer dos casos, temos $(3a + 4b)^2 - 40ab = (6j)^2$;
- v) $(3a + 4b)^2 - 40ab = (10j^2 + 10j + 3)^2$;

□

Exemplo 5.2.14. Se $G \cong ECS_3^3$, então $Sp(\mathcal{D}^Q(ECS_3^3)) = (20, 11, 10^{(2)}, 8^{(4)}, 7)$ (ver Figura 5.3).

Proposição 5.2.15. Para $a, b \in \mathbb{N}$, o grafo multicompleto-estendido similar split $MECS_{b,n}^a \cong \overline{K}_a \vee n(K_b \times K_2)$ é \mathcal{D}^Q -integral se, e somente se, $(3a + 2b + 6bn)^2 - 16bn(4a + 3b)$ é um quadrado perfeito.

Demonstração. Segue imediatamente do Corolário 5.1.7, fazendo $n_1 = a$, $r_1 = 0$, $n_2 = nb$ e $r_2 = 2nb$. □

Corolário 5.2.16. Para $a, b, j \in \mathbb{N}$, o grafo $MCS_{b,n}^a$ é \mathcal{D}^Q -integral se uma das seguintes condições é satisfeita:

- i) $n = 2$ e $a = 8j$, $b = j$;
- ii) $n = 3$ e $a = 3j$, $b = j$ ou $a = 8j$, $b = j$ ou $a = 5j$, $b = 2j$;
- iii) $a = (2n - 1)j$ e $b = j$;
- iv) $a = (5n - 2)j$ e $b = j$.
- v) $a = (4n - 1)j$ e $b = 2j$.
- vi) $a = (7n - 2)j$ e $b = 5j$.

Demonstração. Respectivamente, temos em cada caso:

- i) $(3a + 2b + 6bn)^2 - 16bn(4a + 3b) = 14j^2$;
- ii) O valor de $(3a + 2b + 6bn)^2 - 16bn(4a + 3b)$ em cada caso é $(11j)^2$, $(16j)^2$ e $(23j)^2$;
- iii) $(3a + 2b + 6bn)^2 - 16bn(4a + 3b) = j^2(4n - 1)^2$;

$$\text{iv) } (3a + 2b + 6bn)^2 - 16bn(4a + 3b) = j^2(11n - 4)^2;$$

$$\text{v) } (3a + 2b + 6bn)^2 - 16bn(4a + 3b) = j^2(8n - 1)^2;$$

$$\text{vi) } (3a + 2b + 6bn)^2 - 16bn(4a + 3b) = j^2(19n - 4)^2.$$

□

Exemplo 5.2.17. Se $G \cong MECS_{1,2}^8$, então $Sp(\mathcal{D}^Q(MECS_{1,2}^8)) = (24, 16^{(8)}, 12^{(2)}, 10)$ (ver Figura 5.4).

Proposição 5.2.18. Seja $n_i \in \mathbb{N}, i = 1, 2, 3$. O grafo $G = K_{n_1} \vee (K_{n_2} \cup K_{n_3})$ é \mathcal{D}^Q -integral se, e somente se, $n_1^2 + 16n_2n_3$ é um quadrado perfeito.

Demonstração. Segue imediatamente do Corolário 5.1.9, fazendo $r_i = n_i - 1$, para $i = 1, 2, 3$. □

Observação 5.2.19. Segue da última proposição que, se $G = K_{n_1} \vee (K_{n_2} \cup K_{n_3})$ é \mathcal{D}^Q -integral então $K_{cn_1} \vee (K_{cn_2} \cup K_{cn_3})$ também é \mathcal{D}^Q -integral, para todo $c \in \mathbb{N}$. De fato, observando a Proposição 5.2.12 e a Proposição 5.2.15, torna-se claro que podemos proceder analogamente para obter grafos \mathcal{D}^Q -integrais para as classes dos grafos completo-estendido similar split e multicompleto-estendido similar split.

Exemplo 5.2.20. Como $G \cong K_5 \vee (K_3 \cup K_2)$ é \mathcal{D}^Q -integral (ver Figura 5.5), também é o grafo $K_{5c} \vee (K_{3c} \cup K_{2c})$, para todo $c \in \mathbb{N}$.

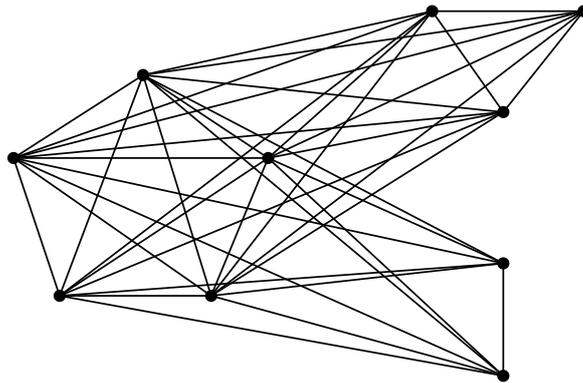


Figura 5.5: $Sp(\mathcal{D}^Q(G)) = (21, 11, 10^{(3)}, 8^{(5)})$

Corolário 5.2.21. Sejam $j, n \in \mathbb{N}$. O grafo $G = K_{n_1} \vee (K_{n_2} \cup K_{n_3})$ é \mathcal{D}^Q -integral se uma das seguintes condições é satisfeita:

$$i) \ n_1 = n_2 = 2 \ e \ n_3 = \frac{j^2 + 3j + 2}{2};$$

$$ii) \ n_1 = n_2 = 2j + 2 \ e \ n_3 = j + 1;$$

$$iii) \ n_1 = j, \ n_2 = n \ e \ n_3 = 4n - j, \ para \ j \leq 4n - 1;$$

Demonstração. Respectivamente, temos em cada caso:

$$i) \ n_1^2 + 16n_2n_3 = (4j + 6)^2;$$

$$ii) \ n_1^2 + 16n_2n_3 = (6j + 6)^2;$$

$$iii) \ n_1^2 + 16n_2n_3 = (j - 8n)^2.$$

□

Finalizamos esta seção chamando a atenção de que, embora para grafos conexos de diâmetro 2 possa ser estabelecida uma equivalência entre as classes dos grafos laplacianos integrais e dos grafos distância laplacianos (Corolário 6.1.7), não podemos afirmar o mesmo considerando as matrizes laplaciana sem sinal e distância laplaciana sem sinal. Os próximos exemplos mostram que todas as possibilidades podem ocorrer para grafos conexos de diâmetro 2:

- $Sp(\mathcal{D}^Q(CS_2^3)) = (9, 4, 3^{(3)})$ e $Sp(Q(CS_2^3)) = \left(\frac{7+\sqrt{33}}{2}, 3, 2^{(2)}, \frac{7-\sqrt{33}}{2}\right)$;
- $Sp(\mathcal{D}^Q(CS_4^4)) = (18, 8^{(4)}, 6^{(3)})$ e $Sp(Q(CS_4^4)) = (12, 6^{(3)}, 4^{(3)}, 2)$;
- $Sp(\mathcal{D}^Q(CS_3^6)) = \left(\frac{33+\sqrt{241}}{2}, 11^{(5)}, \frac{33-\sqrt{241}}{2}, 7^{(2)}\right)$ e
 $Sp(Q(CS_3^6)) = (12, 7^{(2)}, 3^{(5)}, 1)$.

5.3 Propostas para trabalhos futuros

Permanecemos interessados em determinar condições para que um grafo conexo seja \mathcal{D}^L -integral ou \mathcal{D}^Q -integral. Em particular, pensamos em estudar a classe dos grafos KK_n^j , construídos tomando-se duas cópias do grafo completo K_n pelo acréscimo de j arestas, $1 \leq j \leq n$, entre um vértice de uma das cópias e j vértices da outra. Esta classe é, na verdade, uma generalização do grafo KK_n^2 , também introduzido por STEVANOVIĆ *et al.* [89], e já foi considerada para estudo de L -integralidade e Q -integralidade [90].

Observe que, o grafo KK_n^j possui diâmetro maior ou igual a 2 e, portanto, não podemos usar o Corolário 5.1.4 para estudar a \mathcal{D}^L -integralidade no caso geral.

Capítulo 6

Sobre a maior e a menor entrada do autovetor principal da matriz distância laplaciana sem sinal

Como já citado neste trabalho, dado um grafo conexo G as matrizes a ele associadas $A(G)$, $Q(G)$, $\mathcal{D}(G)$ e $\mathcal{D}^Q(G)$ são não negativas, simétricas e irredutíveis. Portanto, pelo Teorema de Perron-Frobenius (Teorema 2.1.7), fixada uma norma p ($1 \leq p < \infty$), cada uma destas matrizes possui único autovetor $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ positivo e unitário ($\|\mathbf{Y}\|_p = 1$) associado ao seu índice. Tal autovetor é chamado autovetor principal associado à matriz. O estudo do autovetor principal torna-se relevante não apenas pela possibilidade de obtenção de caracterizações de grafos a partir dele como também devido às suas aplicações no contexto das medidas de centralidade (ver Seção 7.1).

Em 2000, PAPENDIECK e RECHT [91] obtiveram uma cota superior para a entrada máxima, como função da norma p ($1 \leq p < \infty$), do autovetor principal, $y_A^{\max_p}$, associado ao índice λ da matriz adjacência de um grafo:

$$y_A^{\max_p} \leq \left(\frac{\lambda^{p-2}}{1 + \lambda^{p-2}} \right)^{1/p}.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, $p > 1$ e $G \cong S_n$.

Em 2002, ZHAO e HONG [92] investigaram cotas para a entrada máxima do autovetor principal, $y_M^{\max_p}$, associado ao índice ρ de uma matriz M simétrica, não negativa, com traço zero, como função da norma p ($2 \leq p < \infty$). Obtiveram cotas superiores e inferiores para este valor:

$$\left(\frac{1}{n} \right)^{1/p} \leq y_M^{\max_p} \leq \left(\frac{(n-1)^{(p-2)/2}}{1 + (n-1)^{(p-2)/2}} \right)^{1/p},$$

onde a igualdade ocorre na cota inferior se, e somente se, todas as somas das linhas de M são iguais e a igualdade ocorre na cota superior se, e somente se, $M = \alpha\Omega$, onde $\alpha > 0$ e $\Omega = [\omega_{i,j}]$ é tal que $\omega_{i,j} = 1$ se $i = 1$ e $j \geq 2$ ou $j = 1$ e $i \geq 2$ e $\omega_{i,j} = 0$ caso contrário.

Em 2007, CIOABA e GREGORY [93] melhoraram a cota de PAPENDIECK e RECHT [91], em função do grau máximo do grafo. CIOABA [94] exibiu uma caracterização de grafos bipartidos usando uma cota para a soma das entradas do autovetor principal da matriz de adjacência.

Em 2009, DAS [95] obteve uma cota superior para a entrada máxima, $y_Q^{\max_p}$, do autovetor principal associado ao índice q da matriz laplaciana sem sinal de um grafo:

$$y_Q^{\max_p} \leq \left(\frac{(q - \delta)^{p-1}}{q - \Delta + (q - \delta)^{p-1}} \right)^{1/p}.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, G é um grafo que possui grau máximo $n - 1$ para $p = 1$ ou $G \cong S_n$ para $p > 1$.

Ainda em [95], foi apresentada a seguinte cota superior para a maior entrada do autovetor principal de uma matriz irredutível não negativa e simétrica:

Teorema 6.0.1. [95] *Seja $B = (b_{i,j})_{n \times n}$ uma matriz irredutível não negativa e simétrica sendo R , a maior entrada de sua diagonal principal e r , a menor entrada desta diagonal. Seja $\mathbf{Y} = (y_1, \dots, y_n)$ o autovetor principal de B p -normalizado ($2 \leq p < \infty$) associado ao raio espectral ρ , com $y_1 \geq y_2 \geq \dots \geq y_n$. Então,*

$$y^{\max_p} = y_1 \leq \left(\frac{(n-1)^{(p-2)/2}(\rho-r)^{p/2}}{(n-1)^{(p-2)/2}(\rho-r)^{p/2} + (\rho-R)^{p/2}} \right)^{1/p} \quad (6.1)$$

com a igualdade ocorrendo em (6.1) se, e somente se, $B = c\Omega$, onde $c > 0$ e a matriz Ω é definida por $\Omega = [\omega_{i,j}]$, onde

$$\omega_{i,j} = \begin{cases} R/c & \text{se } i = j = 1, \\ r/c & \text{se } i = j \geq 2, \\ 1 & \text{se } i = 1, j \geq 2, \\ 1 & \text{se } j = 1, i \geq 2, \\ 0 & \text{se } i \geq 2, j \geq 2, i \neq j. \end{cases}$$

Por fim, em 2011, o próprio DAS [26] estudou cotas para a maior e a menor entradas do autovetor principal da matriz distância de um grafo. Citamos alguns dos resultados lá obtidos ao longo desta seção.

Nesta capítulo, apresentamos cotas para a maior e a menor entrada do autovetor principal da matriz distância laplaciana sem sinal. Os resultados aqui obtidos estão publicados em [27], em um trabalho em colaboração com o professor Kinkar Das, da

Universidade de Sungkyunkwan. Destacamos ainda que, durante a busca por tais cotas, identificamos um equívoco quanto à condição de igualdade do Teorema 4.1, apresentado por K.C.Das em [26]. O resultado corrigido também compõe [27], e nos auxiliou na construção de um análogo para a matriz distância laplaciana sem sinal.

Este capítulo é dividido da seguinte forma: na primeira seção, fazemos a correção da condição de igualdade do Teorema 4.1 de [26], além de definirmos a família de grafos $\mathcal{G}(n, \alpha, *)$ e estudarmos algumas de suas propriedades. Na segunda e terceira seções apresentamos, respectivamente, cotas para a menor e maior entradas do autovetor principal da matriz distância laplaciana sem sinal de um grafo conexo.

6.1 A correção de um teorema e a família de grafos $\mathcal{G}(n, \alpha, *)$

O próximo teorema consiste no resultado relativo à menor entrada do autovetor principal p -normalizado da matriz distância apresentada por DAS [26]:

Teorema 6.1.1. ([26], Teorema 4.1) *Seja $p \geq 1$ e seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral μ de $D(G)$. Então*

$$y^{\min_p} \leq \left\{ \left[\frac{(\mu - n + \alpha + 1)^p}{(n - \alpha)\alpha^p + \alpha(\mu - n + \alpha + 1)^p} \right]^{1/p}, \left[\frac{(\mu - 2\alpha + 2)^p}{(n - \alpha)(\mu - 2\alpha + 2)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right]^{1/p} \right\}, \quad (6.2)$$

onde α é o número de independência de G . Mais ainda, a igualdade ocorre em (6.2) se, e somente se, $G \cong CI(n, \alpha) = \overline{K}_\alpha \vee K_{n-\alpha}$.

De fato, estudando o teorema identificamos um equívoco quanto à condição apresentada para a igualdade acontecer em (6.2), conforme mostra o próximo exemplo.

Exemplo 6.1.2. *Seja $G \cong \overline{K}_3 \vee C_4$. Seu índice distância vale $\partial = 4 + 2\sqrt{3}$ e seu autovetor principal p -normalizado é $\mathbf{Y} = (a, a, a, b, b, b, b)^T$, onde*

$$a = \left[\frac{(2\sqrt{3})^p}{(2\sqrt{3})^p + 4(3)^p} \right]^{1/p} \quad e \quad b = \left[\frac{(2\sqrt{3})^p}{4(2\sqrt{3})^p + 3(4)^p} \right]^{1/p}.$$

Portanto, a entrada mínima ocorre em “b”, qualquer que seja o valor de $p \geq 1$.

Por outro lado, do Teorema 6.1.1 temos que

$$y^{\min_p} \leq \min \left\{ \left[\frac{(2\sqrt{3} + 1)^p}{4(3)^p + 3(2\sqrt{3} + 1)^p} \right]^{1/p}, \left[\frac{(2\sqrt{3})^p}{4(2\sqrt{3})^p + 3(4)^p} \right]^{1/p} \right\},$$

que ocorre na segunda parcela para todo $p \geq 1$. Logo, a cota apresentada no teorema atinge o valor da entrada mínima do autovetor principal de $G \cong \overline{K}_3 \vee C_4$, embora $\overline{K}_3 \vee C_4 \not\cong CI(7, 3)$,

Tanto o enunciado corrigido do Teorema 6.1.1 como sua demonstração são análogos ao que fazemos posteriormente neste trabalho para a matriz distância laplaciana sem sinal. Sendo assim, optamos por apenas enunciar o teorema com a condição correta para igualdade na próxima seção. Dessa forma, evitamos que o texto se torne repetitivo. Para enunciarmos o teorema de forma correta, consideremos a família $\mathcal{G}(n, \alpha)$, que denota o conjunto de todos os grafos conexos com n vértices e número de independência α e introduzimos a família $\mathcal{G}(n, \alpha, *) = \left\{ G \in \mathcal{G}(n, \alpha) : G \cong \overline{K}_\alpha \vee H, \text{ onde } H \text{ é um grafo regular} \right\}$. Indicamos por $r(H)$ o grau de regularidade do grafo H . Note que $CI(n, \alpha) \in \mathcal{G}(n, \alpha, *)$.

Proposição 6.1.3. *Seja $G \cong \overline{K}_\alpha \vee H \in \mathcal{G}(n, \alpha)$. Então,*

i)

$$Tr(v_i) = \begin{cases} n + \alpha - 2, & \text{se } v_i \in V(\overline{K}_\alpha) \\ 2(n - 1) - \alpha - deg_H(v_i), & \text{se } v_i \in V(H), \end{cases}$$

onde $deg_H(v_i)$ denota o grau do vértice v_i em H ;

ii) $G \in \mathcal{G}(n, \alpha, *)$ se, e somente se, os vértices de $V(H)$ possuem a mesma transmissão. Neste caso, denotando as transmissões dos vértices de $V(\overline{K}_\alpha)$ e dos vértices de $V(H)$ por T_α e T_H , respectivamente, temos que

$$T_\alpha = n + \alpha - 2 \text{ e } T_H = 2(n - 1) - \alpha - r(H),$$

onde r denota o grau de regularidade do grafo H .

Demonstração. Se $v_i \in V(\overline{K}_\alpha)$, então $Tr(v_i) = 2(\alpha - 1) + n - \alpha = n + \alpha - 2$. Para $v_i \in V(H)$, segue que $Tr(v_i) = deg_H(v_i) + 2(n - \alpha - deg_H(v_i) - 1) + \alpha = 2(n - 1) - \alpha - deg_H(v_i)$. \square

Observação 6.1.4. *Quando mais de um grafo $G \cong \overline{K}_\alpha \vee H \in \mathcal{G}(n, \alpha)$ estiver sendo considerado, escrevemos $T_\alpha(G)$ (e $T_H(G)$) no lugar de T_α (e T_H).*

Similarmente ao que foi feito em [26] e [95], é possível obter cotas para a maior e menor entradas do autovetor principal da matriz distância laplaciana sem sinal de um grafo G . Para isto, precisamos dos seguintes resultados:

Teorema 6.1.5. *Se $G \in \mathcal{G}(n, \alpha, *)$, então*

i)

$$\partial^Q(G) = \frac{1}{2} \left(5n - 2r - 8 + \sqrt{(3n - 2\alpha - 2r)^2 - 4\alpha(5n - 4\alpha - 4r) + 12\alpha^2} \right); \quad (6.3)$$

ii) as componentes do autovetor principal p -normalizado associado ao autovalor $\partial^Q(G)$ são

$$y_i = \left(\frac{(\partial^Q - 4n + 3\alpha + 2r + 4)^p}{(n - \alpha)\alpha^p + \alpha(\partial^Q - 4n + 3\alpha + 2r + 4)^p} \right)^{1/p} \quad \text{se } v_i \in V(\overline{K}_\alpha),$$

$$e \quad y_j = \left(\frac{(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p}{(n - \alpha)(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right)^{1/p} \quad \text{se } v_j \in V(H).$$

Demonstração. Como $G \in \mathcal{G}(n, \alpha, *)$, sua matriz distância laplaciana sem sinal pode ser escrita como

$$\mathcal{D}^Q(G) = \begin{bmatrix} (2\mathbb{J} + (n + \alpha - 4)\mathbb{I})_\alpha & \mathbb{J}_{\alpha \times (n-\alpha)} \\ \mathbb{J}_{(n-\alpha) \times \alpha} & \mathbb{H}_{n-\alpha} \end{bmatrix}.$$

onde $\mathbb{H}_{n-\alpha}$ é uma matriz quadrada de ordem $n - \alpha$ onde as entradas da diagonal são T_H e a soma de cada linha é igual a $2T_H - \alpha$.

Seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$, daí $\mathcal{D}^Q(G) \mathbf{Y} = \partial^Q \mathbf{Y}$. Para $v_i, v_k \in V(\overline{K}_\alpha)$,

$$\partial^Q y_i = T_\alpha y_i + 2 \sum_{v_\ell \in V(\overline{K}_\alpha), \ell \neq i} y_\ell + \sum_{v_\ell \in V(H)} y_\ell$$

$$e \quad \partial^Q y_k = T_\alpha y_k + 2 \sum_{v_\ell \in V(\overline{K}_\alpha), \ell \neq k} y_\ell + \sum_{v_\ell \in V(H)} y_\ell.$$

Do visto acima, segue que

$$(\partial^Q - T_\alpha + 2)(y_i - y_k) = 0, \quad \text{isto é, } y_i = y_k \quad \text{já que } \partial^Q \geq 2n - 2 > n + \alpha - 4 = T_\alpha - 2.$$

Similarmente, podemos provar que $y_j = y_k$ para $v_j, v_k \in V(H)$. Disto, segue que o autovetor principal p -normalizado de $\mathcal{D}^Q(G)$ é da forma $\mathbf{Y} = (\underbrace{a, a, \dots, a}_\alpha, \underbrace{b, b, \dots, b}_{n-\alpha})^T$, onde a e b satisfazem

$$\partial^Q a = (n + 3\alpha - 4)a + (n - \alpha)b$$

$$e \quad \partial^Q b = \alpha a + (2T_H - \alpha)b.$$

Portanto,

$$a = \frac{(n - \alpha)b}{\partial^Q - n - 3\alpha + 4} \quad e \quad b = \frac{\alpha a}{\partial^Q - 2T_H + \alpha}. \quad (6.4)$$

Eliminando a e b , obtemos o raio espectral da matriz distância laplaciana sem

sinal do grafo,

$$\partial^Q(G) = \frac{1}{2} \left(n - 4 + 2T_H + 2\alpha + \sqrt{(n - 4 - 2T_H)^2 + 4\alpha(3n - 8 - 4T_H) + 12\alpha^2} \right),$$

e assim obtemos (i), pois $T_H = 2n - 2 - r - \alpha$, concluindo a primeira parte da prova.

Sendo \mathbf{Y} o autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$, segue que

$$a = \left(\frac{(\partial^Q - 2T_H + \alpha)^p}{(n - \alpha)\alpha^p + \alpha(\partial^Q + \alpha - 2T_H)^p} \right)^{1/p},$$

$$b = \left(\frac{(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p}{(n - \alpha)(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right)^{1/p}.$$

Novamente, como $T_H = 2n - 2 - r - \alpha$, temos o resultado desejado em (ii). Isto completa a demonstração. \square

Note que qualquer grafo $G \in \mathcal{G}(n, \alpha)$ pode ser obtido de $CI(n, \alpha)$ pela remoção de arestas. Deste fato e do teorema de Perron-Frobenius, obtemos uma nova cota inferior para $\partial^Q(G)$, baseada no número de vértices e número de independência de G .

Teorema 6.1.6. *Se $G \in \mathcal{G}(n, \alpha)$ então*

$$\partial^Q(G) \geq \partial^Q(CI(n, \alpha)) = \frac{1}{2} \left(3n + 2\alpha - 6 + \sqrt{(n + 2 - 2\alpha)^2 + 8\alpha(\alpha - 1)} \right)$$

com a igualdade ocorrendo se, e somente se, $G \cong CI(n, \alpha)$.

Demonstração. Basta fazer $r = n - \alpha - 1$ em (6.3) para obter o resultado desejado. \square

A respeito da família $\mathcal{G}(n, \alpha, *)$, podemos enunciar a seguinte proposição:

Proposição 6.1.7. *Seja $G \cong \overline{K}_\alpha \vee H \in \mathcal{G}(n, \alpha, *)$. Então, as seguintes condições são equivalentes:*

- i) $r \geq n - 2\alpha$;
- ii) $T_H \leq T_\alpha$, isto é, a transmissão mínima de G é obtida nos vértices de $V(H)$;
- iii) $b \leq a$, onde $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ é o autovetor principal p -normalizado de $\mathcal{D}^Q(G)$, com $y_i = a$ para $v_i \in V(\overline{K}_\alpha)$ e $y_j = b$ para $v_j \in V(H)$.

Neste caso, temos que

$$y^{\min_p} = b = \left(\frac{(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p}{(n - \alpha)(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right)^{1/p}.$$

Demonstração. (i) \iff (ii) : De $T_\alpha = n + \alpha - 2$ e $T_H = 2n - r - \alpha - 2$, obtemos o resultado desejado.

(ii) \iff (iii) : De (6.4), segue que $b \leq a$ se, e somente se, $\partial^Q - 2T_H + \alpha \geq \alpha$ e $\partial^Q - n - 3\alpha + 4 \leq n - \alpha$, o que equivale a $2T_H \leq \partial^Q$ e $\partial^Q \leq 2(n + \alpha - 2) = 2T_\alpha$. \square

Apresentamos agora a versão corrigida do Teorema 6.1.1.

Teorema 6.1.8 (Teorema 6.1.1 corrigido). *Seja $G \in \mathcal{G}(n, \alpha)$. Fixado $p \geq 1$, seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral μ de $D(G)$. Então*

$$y^{\min_p} \leq \left\{ \left[\frac{(\mu - n + \alpha + 1)^p}{(n - \alpha)\alpha^p + \alpha(\mu - n + \alpha + 1)^p} \right]^{1/p}, \right. \\ \left. \left[\frac{(\mu - 2\alpha + 2)^p}{(n - \alpha)(\mu - 2\alpha + 2)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right]^{1/p} \right\},$$

onde α é o número de independência de G . Mais ainda, a igualdade ocorre se, e somente se, $G \cong \overline{K}_\alpha \vee H \in \mathcal{G}(n, \alpha, *)$ com $r(H) \geq n - 2\alpha$.

6.2 Sobre a menor entrada do autovetor principal da matriz distância laplaciana sem sinal

Para um subconjunto W de $V(G)$, seja $G - W$ o subgrafo de G obtido pela remoção dos vértices de W e as arestas incidentes a eles.

Na sequência, exibimos uma cota superior para a menor entrada do autovetor principal da matriz distância sem sinal, em função do número de vértices, o raio espectral e o número de independência do grafo. Embora a primeira parte deste teorema seja similar a prova do resultado [26, Teorema 4.1], com adaptações relacionadas ao fato da diagonal principal, neste caso, ser não nula, torna-se necessário refazê-la para discutirmos a segunda parte da demonstração.

Teorema 6.2.1. *Seja $G \in \mathcal{G}(n, \alpha)$. Fixado $p \geq 1$, seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o*

autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$. Então

$$y^{\min_p} \leq \min \left\{ \left[\frac{(\partial^Q + \alpha - 2n + 2)^p}{(n - \alpha)\alpha^p + \alpha(\partial^Q + \alpha - 2n + 2)^p} \right]^{1/p}, \right. \\ \left. \left[\frac{(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p}{(n - \alpha)(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right]^{1/p} \right\}. \quad (6.5)$$

Mais ainda, a igualdade ocorre se, e somente se, $G \cong \overline{K}_\alpha \vee H \in \mathcal{G}(n, \alpha, *)$ com $r(H) \geq n - 2\alpha$.

Demonstração. Como G tem número de independência α , existem conjuntos A e B tais que $V(G) = A \cup B$ com $A = \{v_1, v_2, \dots, v_\alpha\}$, $B = \{v_{\alpha+1}, v_{\alpha+2}, \dots, v_n\}$ e não existem dois vértices adjacentes no conjunto A . Sejam $v_i \in A$ e $v_j \in B$ tais que $y_i \leq y_k, \forall v_k \in A$, e $y_j \leq y_k, \forall v_k \in B$. De $\mathcal{D}^Q \mathbf{Y} = \partial^Q \mathbf{Y}$, podemos escrever

$$\partial^Q y_i = T_i y_i + \sum_{k=1, k \neq i}^{\alpha} d_{i,k} y_k + \sum_{k=\alpha+1}^n d_{i,k} y_k \geq T_i y_i + \sum_{k=1, k \neq i}^{\alpha} d_{i,k} y_i + \sum_{k=\alpha+1}^n d_{i,k} y_j.$$

Além disso, como $d_{i,k} \geq 2$ se $v_k \in A$, e $d_{i,k} \geq 1$ se $v_k \in B$, segue que

$$\sum_{k=1, k \neq i}^{\alpha} d_{i,k} \geq 2(\alpha - 1) \quad \text{e} \quad \sum_{k=\alpha+1}^n d_{i,k} \geq n - \alpha.$$

Logo,

$$T_i \geq 2(\alpha - 1) + n - \alpha = \alpha + n - 2.$$

Assim,

$$\partial^Q y_i \geq (2(\alpha - 1) + \alpha + n - 2)y_i + (n - \alpha)y_j, \quad \text{isto é,} \quad y_i \geq \frac{(n - \alpha)y_j}{(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)}. \quad (6.6)$$

Similarmente, temos

$$\partial^Q y_j \geq T_j y_j + \sum_{k=1}^{\alpha} d_{j,k} y_i + \sum_{k=\alpha+1, k \neq j}^n d_{j,k} y_j.$$

De $d_{j,k} \geq 1 \forall k \neq j$, segue que

$$\sum_{k=1}^{\alpha} d_{j,k} \geq \alpha, \quad \sum_{k=\alpha+1, k \neq j}^n d_{j,k} \geq n - \alpha - 1 \quad \text{e} \quad T_j \geq n - 1.$$

Então,

$$\partial^Q y_j \geq \alpha y_i + (2n - 2 - \alpha)y_j, \quad \text{isto é,} \quad y_j \geq \frac{\alpha y_i}{(\partial^Q + \alpha - 2n + 2)}. \quad (6.7)$$

Do fato do vetor \mathbf{Y} ser p -normalizado, temos

$$\alpha y_i^p + (n - \alpha) y_j^p \leq \sum_{k=1}^n y_k^p = 1. \quad (6.8)$$

Substituindo (6.7) em (6.8), obtemos

$$y_i \leq \left(\frac{(\partial^Q + \alpha - 2n + 2)^p}{\alpha(\partial^Q + \alpha - 2n + 2)^p + (n - \alpha)\alpha^p} \right)^{1/p} \quad (6.9)$$

e substituindo (6.6) em (6.8), obtemos

$$y_j \leq \left(\frac{(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p}{(n - \alpha)(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right)^{1/p}. \quad (6.10)$$

Terminamos assim a primeira parte da demonstração.

Agora, suponha que a igualdade ocorre em (6.5). Então, as desigualdades (6.9) e (6.10) se tornam igualdades. De (6.8), temos

$$y_k = y_i \quad \text{para} \quad v_k \in A \quad \text{e} \quad y_k = y_j \quad \text{para} \quad v_k \in B.$$

Consideremos os seguintes dois casos:

Caso (i) : $y^{\min_p} = y_i \leq y_j$. Logo,

$$y_j = \frac{\alpha y_i}{(\partial^Q + \alpha - 2n + 2)} \leq \frac{\alpha y_j}{(\partial^Q + \alpha - 2n + 2)},$$

isto é,

$$\partial^Q \leq 2n - 2.$$

Disto, e usando a Proposição 3.1.12, concluímos que $G \cong K_n$.

Caso (ii) : $y^{\min_p} = y_j \leq y_i$. Logo,

$$y_i = \frac{(n - \alpha)y_j}{(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)},$$

isto é,

$$\partial^Q y_i = (n + \alpha - 2) y_i + (2\alpha - 2) y_i + (n - \alpha) y_j.$$

Para $v_\ell \in A$, temos

$$\partial^Q y_i = T_\ell y_i + \sum_{k=1, k \neq \ell}^{\alpha} d_{\ell, k} y_i + \sum_{k=\alpha+1}^n d_{\ell, k} y_j.$$

Usando os dois resultados acima, concluímos que

$$(T_\ell - n - \alpha + 2) y_i + \sum_{k=1, k \neq \ell}^{\alpha} (d_{\ell, k} - 2) y_i + \sum_{k=\alpha+1}^n (d_{\ell, k} - 1) y_j = 0.$$

Como $T_\ell \geq n + \alpha - 2$, $v_\ell \in A$ e $d_{\ell, k} \geq 1$ para $v_k \in B$, $d_{\ell, k} \geq 2$ para $v_k \in A$ ($k \neq \ell$), devemos ter $d_{\ell, k} = 1$ para $v_k \in B$, $d_{\ell, k} = 2$ para $v_k \in A$ ($k \neq \ell$), para qualquer $v_\ell \in A$. Logo, cada vértice de A é adjacente a todo vértice de B . Mais ainda, $d = 2$ e $G \cong \overline{K}_\alpha \vee H$, onde $H = G - A$.

Mostramos agora que quaisquer dois vértices de B devem ter a mesma transmissão, isto é, $T_j = T_s$ para $v_s \in B$. Com efeito, para s tal que $\alpha + 1 \leq s \leq n$, lembrando que $y_s = y_j$, $\forall v_s \in B$,

$$\begin{aligned} \partial^Q y_j &= T_s y_j + \sum_{k=1}^{\alpha} d_{s, k} y_i + \sum_{k=\alpha+1, k \neq s}^n d_{s, k} y_j \\ &= \alpha y_i + (2T_s - \alpha) y_j. \end{aligned}$$

Logo, temos que $T_s = T_j$ para todo $v_s \in B$. Como $d = 2$, então $\deg_H(v_s) = \deg_H(v_j)$ para todo $v_s \in B$. Assim, $H = G - A$ é um grafo regular e, portanto, $G \in \mathcal{G}(n, \alpha, *)$. Da Proposição 6.1.7 segue que $r(H) \geq n - 2\alpha$.

Reciprocamente, se $G \cong \overline{K}_\alpha \vee H \in \mathcal{G}(n, \alpha, *)$ com $r \geq n - 2\alpha$, então a igualdade segue diretamente da Proposição 6.1.7. \square

Observação 6.2.2. *Note que a igualdade ocorre em (6.2) não apenas para o grafo $CI(n, \alpha)$, mas para uma classe muito mais ampla de grafos. Mais especificamente, a mesma classe de grafos que foi apresentada no Teorema 6.2.1. Por exemplo, é fácil ver que a igualdade ocorre para o grafo $K_3 \vee C_4$, que não é isomorfo a $\overline{K}_3 \vee K_4$. Também, o grafo bipartido completo $K_{\alpha, n-\alpha}$, onde $\alpha \geq n - \alpha$ não é isomorfo a $CI(n, \alpha)$, mas satisfaz a igualdade do Teorema 4.1 em [26].*

Visto que $T_k \geq t$, $\forall k \in V(G)$, e $\partial^Q \geq 2t \geq t + n - 1$, pela Proposição 3.1.12, obtemos outra cota superior para $y^{\min p}$.

Teorema 6.2.3. *Seja $G \in \mathcal{G}(n, \alpha)$. Fixado $p \geq 1$, seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$. Então*

$$y^{\min_p} \leq \min \left\{ \left[\frac{(\partial^Q + \alpha - n + 1 - t)^p}{\alpha(\partial^Q + \alpha - n + 1 - t)^p + (n - \alpha)\alpha^p} \right]^{1/p}, \right. \\ \left. \left[\frac{(\partial^Q - 2\alpha + 2 - t)^p}{(n - \alpha)(\partial^Q - 2\alpha + 2 - t)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right]^{1/p} \right\}. \quad (6.11)$$

Mais ainda, a igualdade ocorre em (6.11) se, e somente se, $G \in \mathcal{G}(n, \alpha, *)$ é transmissão regular. Neste caso G é $(n + \alpha - 2)$ -transmissão regular com $\partial^Q = 2(n + \alpha - 2)$ e $y^{\min_p} = (\frac{1}{n})^{1/p}$.

Observação 6.2.4. *Para que a cota seja atingida no último teorema devemos ter $G \cong \bar{K}_\alpha \vee H \in \mathcal{G}(n, \alpha, *)$, e $T_H = T_\alpha$, isto é, $r(H) = n - 2\alpha$.*

Uma questão natural a ser colocada neste ponto é qual dos teoremas exibe uma melhor cota. Com o objetivo de comparar as cotas para y_i , consideremos a função

$$f(x) = \frac{x^p}{\alpha x^p + (n - \alpha)\alpha^p}, \quad \forall x \in (0, \infty).$$

Então

$$f'(x) = \frac{(n - \alpha)\alpha^p p x^{p-1}}{[\alpha x^p + (n - \alpha)\alpha^p]^2} > 0, \quad \forall x \in (0, \infty),$$

já que $p \geq 1$ e $0 < \alpha < n$. Logo, a função $f(x)$ é crescente para $x > 0$. Isto, junto ao fato de

$$\partial^Q + \alpha - 2n + 2 \geq \partial^Q + \alpha - n + 1 - t \iff t \geq n - 1,$$

o que é sempre verdade, nos permite concluir que

$$y_i \leq \left(\frac{(\partial^Q + \alpha - n + 1 - t)^p}{\alpha(\partial^Q + \alpha - n + 1 - t)^p + (n - \alpha)\alpha^p} \right)^{1/p} \\ \leq \left(\frac{(\partial^Q + \alpha - 2n + 2)^p}{\alpha(\partial^Q + \alpha - 2n + 2)^p + (n - \alpha)\alpha^p} \right)^{1/p},$$

para qualquer grafo G .

Para analisar a cota referente a y_j , consideremos a função

$$g(x) = \frac{x^p}{(n - \alpha)x^p + \alpha(n - \alpha)^p}, \quad \forall x \in (0, \infty).$$

Logo

$$g'(x) = \frac{\alpha(n - \alpha)^p p x^{p-1}}{[(n - \alpha)x^p + \alpha(n - \alpha)^p]^2} > 0, \quad \forall x \in (0, \infty).$$

Como $\partial^Q - 2\alpha + 2 - t \geq \partial^Q - 3\alpha + 4 - n \iff t \leq n + \alpha - 2$, usando o fato da função $g(x)$ ser crescente para $x > 0$, segue que

$$\begin{aligned} y_j &\leq \left(\frac{(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p}{(n - \alpha)(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right)^{1/p} \\ &\leq \left(\frac{(\partial^Q - 2\alpha + 2 - t)^p}{(n - \alpha)((\partial^Q - 2\alpha + 2 - t)^p + \alpha(n - \alpha)^p)} \right)^{1/p} \end{aligned}$$

se, e somente se, o grafo G possui $t \leq n + \alpha - 2$.

O próximo corolário combina o resultado dos últimos dois teoremas para que possamos exibir a cota da melhor forma possível.

Corolário 6.2.5. *Seja $G \in \mathcal{G}(n, \alpha)$. Fixado $p \geq 1$, seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$.*

(i) *Se $t \geq n + \alpha - 2$, então*

$$y^{\min_p} \leq \min \left\{ \left(\frac{(\partial^Q + \alpha - n + 1 - t)^p}{\alpha(\partial^Q + \alpha - n + 1 - t)^p + (n - \alpha)\alpha^p} \right)^{1/p}, \right. \\ \left. \left(\frac{(\partial^Q - 2\alpha + 2 - t)^p}{(n - \alpha)(\partial^Q - 2\alpha + 2 - t)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right)^{1/p} \right\},$$

com a igualdade ocorrendo se, e somente se, $G \in \mathcal{G}(n, \alpha, *)$ e, neste caso, o grafo G é $(n + \alpha - 2)$ -transmissão regular com $\partial^Q = 2(n + \alpha - 2)$ e $y^{\min_p} = (\frac{1}{n})^{1/p}$;

(ii) *Se $t \leq n + \alpha - 2$, então*

$$y^{\min_p} \leq \min \left\{ \left(\frac{(\partial^Q + \alpha - n + 1 - t)^p}{\alpha(\partial^Q + \alpha - n + 1 - t)^p + (n - \alpha)\alpha^p} \right)^{1/p}, \right. \\ \left. \left(\frac{(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p}{(n - \alpha)(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right)^{1/p} \right\}$$

com a igualdade ocorrendo se, e somente se, $G \cong \overline{K}_\alpha \vee H \in \mathcal{G}(n, \alpha, *)$ e $T_H \leq T_\alpha$, onde temos

$$y^{\min_p} = \left(\frac{(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p}{(n - \alpha)(\partial^Q - 3\alpha + 4 - n)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right)^{1/p}.$$

Os próximos dois exemplos mostram que, em geral, t e $n + \alpha - 2$ são incom-

paráveis.

Exemplo 6.2.6. *Seja $G \cong P_n$. Seja $\alpha = \lceil \frac{n}{2} \rceil$ e $t = \lfloor \frac{n^2}{4} \rfloor$. Então*

$$\begin{cases} t < n + \alpha - 2 & \text{se } n = 3; \\ t = n + \alpha - 2 & \text{se } n = 2, 4, 5; \\ t > n + \alpha - 2 & \text{se } n \geq 6. \end{cases}$$

Para $G \cong K_{p,q}$ com $p \leq q$, temos $\alpha = q$ e $t = 2(p-1) + q = n + p - 2$. Portanto, $t \leq n + \alpha - 2$.

Visto que estamos determinando cotas para a menor entrada do autovetor principal associado à matriz distância sem sinal de um grafo G , torna-se interessante determinar cotas que não dependam do valor ∂^Q . Neste sentido, novamente utilizando novamente o fato das funções $f(x)$ e $g(x)$ serem crescentes e $\partial^Q \leq 2T$ com a igualdade ocorrendo se, e somente se, o grafo é transmissão regular (Proposição 3.1.12), temos:

Corolário 6.2.7. *Seja $G \in \mathcal{G}(n, \alpha)$. Fixado $p \geq 1$, seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o autovetor principal p -normalizado associado a ∂^Q .*

(i) *Se $t \geq n + \alpha - 2$,*

$$y^{\min_p} \leq \min \left\{ \left(\frac{(2T + \alpha - n + 1 - t)^p}{\alpha(2T + \alpha - n + 1 - t)^p + (n - \alpha)\alpha^p} \right)^{1/p}, \right. \\ \left. \left(\frac{(2T - 2\alpha + 2 - t)^p}{(n - \alpha)(2T - 2\alpha + 2 - t)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right)^{1/p} \right\};$$

(ii) *Se $t \leq n + \alpha - 2$,*

$$y^{\min_p} \leq \left\{ \left(\frac{(2T + \alpha - n + 1 - t)^p}{\alpha(2T + \alpha - n + 1 - t)^p + (n - \alpha)\alpha^p} \right)^{1/p}, \right. \\ \left. \left(\frac{(2T - 3\alpha + 4 - n)^p}{(n - \alpha)(2T - 3\alpha + 4 - n)^p + \alpha(n - \alpha)^p} \right)^{1/p} \right\}.$$

Em ambos os casos a igualdade ocorre se, e somente se, $G \in \mathcal{G}(n, \alpha)$ é transmissão regular com $t = n + \alpha - 2$, $\partial^Q = 2(n + \alpha - 2)$ e $y^{\min_p} = \left(\frac{1}{n}\right)^{1/p}$.

6.3 Sobre a maior entrada do autovetor principal da matriz distância laplaciana sem sinal

Voltamos, a partir de agora, nossa atenção à obtenção de cotas para a maior entrada do autovetor principal p -normalizado, y^{\max_p} , associado ao raio espectral, $\partial^Q(G)$ de um grafo conexo G . A primeira cota é obtida como corolário do Teorema 6.0.1.

Corolário 6.3.1. *Seja G um grafo conexo e seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$ com $y_1 \geq y_2 \geq \dots \geq y_n$. Se $p \geq 2$, então*

$$y^{\max_p} = y_1 \leq \left(\frac{(n-1)^{(p-2)/2}(\partial^Q - t)^{p/2}}{(n-1)^{(p-2)/2}(\partial^Q - t)^{p/2} + (\partial^Q - T)^{p/2}} \right)^{1/p}, \quad (6.12)$$

onde T e t denotam, respectivamente, a maior e a menor transmissão de G . A igualdade ocorre se, e somente se, $G \cong K_2$.

Demonstração. Fazendo $R = T$, $r = t$ e $\rho = \partial^Q$ em (6.1), obtemos o resultado desejado em (6.12). A igualdade ocorre em (6.12) se, e somente se, existe um grafo G tal que sua matriz distância laplaciana sem sinal é escrita como $\mathcal{D}^Q(G) = c\Omega$, onde $c > 0$ e Ω é definido no Lema 6.0.1. Como todas as entradas da matriz distância laplaciana sem sinal são maiores ou iguais a 1, segue que $G \cong K_2$ já que G é um grafo conexo e $\omega_{i,j} = 0$, $i, j \geq 2$, $i \neq j$. Como $c = r = R = 1$, temos $\mathcal{D}^Q(K_2) = c\Omega$ e o resultado está provado. \square

Observação 6.3.2. *Se $p = 2$ e o grafo é transmissão regular, a cota se resume a $y^{\max_p} \leq \frac{\sqrt{2}}{2}$.*

Em DAS [26] foram apresentadas as seguintes cotas:

Teorema 6.3.3. [26] *Seja G um grafo conexo. Fixado $p \geq 2$ seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o autovetor principal p -normalizado associado ao índice ∂ de $\mathcal{D}(G)$ com $y^{\max_p} = y_1 \geq y_2 \geq \dots \geq y_n$. Então*

$$\left(\frac{\partial^{p-2}}{\partial^{p-2} + ((n-1)d - (d-1)\delta)^{p-1}} \right)^{1/p} \leq y^{\max_p} \leq \left(\frac{d(\partial - n + 2)^{p-1}}{\partial + d(\partial - n + 2)^{p-1}} \right)^{1/p} \quad (6.13)$$

onde d , δ denotam o diâmetro e o grau mínimo de G , respectivamente. Além disso, ambos os lados da igualdade ocorrem em (6.13) se e somente se $G \cong K_n$. No caso de $p = 1$, vale

$$\frac{1}{\partial + 1} \leq y^{\max_1} \leq \frac{d}{\partial + d},$$

e a igualdade ocorre se, e somente se, $G = K_n$.

O seguinte corolário simples é útil na Proposição 7.2.24.

Corolário 6.3.4. *Seja G um grafo conexo. Se $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ é o autovetor principal 1-normalizado associado ao índice ∂ de $\mathcal{D}(G)$ então*

$$y^{\max_1} \leq \frac{1}{2}.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, $G = K_2$.

Demonstração. Pela Corolário 3.1.13, $\partial \geq n - 1$ e a igualdade ocorre se e somente $G \cong K_n$. Como $n - 1 \geq d$, do Teorema 6.3.3 temos

$$y^{\max_1} \leq \frac{d}{\partial + d} \leq \frac{d}{n - 1 + d} \leq \frac{1}{2}.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, $\partial = n - 1 = d$. Como a primeira igualdade ocorre se, e somente se, $G \cong K_n$, então $d = 1$ e, portanto, $n = 2$. \square

Analogamente ao resultado estabelecido em [26] para a matriz distância apresentamos, na sequência, cotas superiores e inferiores para a entrada máxima do autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$, resultados publicados em [27]. Exibimos primeiramente uma cota inferior:

Teorema 6.3.5. *Seja G um grafo conexo. Fixado $p \geq 1$, seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$ com $y^{\max_p} = y_1 \geq y_2 \geq \dots \geq y_n$. Então*

$$y^{\max_p} > \left(\frac{(n - \Delta)(\partial^Q - T)^{p-1}}{(\partial^Q - t)T^{p-1} + (n - \Delta)(\partial^Q - T)^{p-1} + (n - 2)(n - \Delta - 1)T^{p-1}} \right)^{1/(p-1)}, \quad (6.14)$$

onde Δ , T e t denotam o grau máximo e as transmissões máxima e mínima de G , respectivamente.

Demonstração. Como \mathbf{Y} é o autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$ e $y_1 \geq y_2 \geq \dots \geq y_n$, temos

$$1 = \sum_{k=1}^n y_k^p \leq y_1^p + y_n^p + (n - 2) y_2^p,$$

isto é,

$$y_n^p \geq 1 - y_1^p - (n - 2) y_2^p. \quad (6.15)$$

Além disto, $\mathcal{D}^Q \mathbf{Y} = \partial^Q \mathbf{Y}$. Para $v_1 \in V(G)$,

$$\partial^Q y_1 = T_1 y_1 + \sum_{k=2}^n d_{1,k} y_k \geq t y_1 + \sum_{k=2}^n y_k + (n - \deg_G(v_1) - 1) y_n. \quad (6.16)$$

Como $p \geq 1$, multiplicando ambos os lados de (6.16) por y_2^{p-1} , concluimos que

$$\begin{aligned} \partial^Q y_1 y_2^{p-1} &\geq t y_1 y_2^{p-1} + \sum_{k=2}^n y_k y_2^{p-1} + (n - \deg_G(v_1) - 1) y_n y_2^{p-1} \\ &\geq t y_1 y_2^{p-1} + \sum_{k=2}^n y_k^p + (n - \deg_G(v_1) - 1) y_n^p, \end{aligned} \quad (6.17)$$

pois $y_2 \geq y_3 \geq \dots \geq y_n$.

Então,

$$\begin{aligned} \partial^Q y_1 y_2^{p-1} &\geq t y_2^{p-1} y_1 + 1 - y_1^p + (n - \deg_G(v_1) - 1) \left[1 - y_1^p - (n-2) y_2^p \right] \\ &\geq t y_2^{p-1} y_1 + (n - \Delta) (1 - y_1^p) - (n-2) (n - \Delta - 1) y_2^p \\ &\geq t y_2^{p-1} y_1 + (n - \Delta) (1 - y_1^p) - (n-2) (n - \Delta - 1) y_2^{p-1}, \end{aligned} \quad (6.18)$$

onde foram utilizados os fatos de $\deg_G(v_1) \leq \Delta$ e $p \geq 1$.

Portanto, obtemos

$$y_2 \geq \left(\frac{(n - \Delta) (1 - y_1^p)}{(\partial^Q - t) y_1 + (n - 2) (n - \Delta - 1)} \right)^{1/(p-1)}. \quad (6.19)$$

Para $v_2 \in V(G)$, temos que

$$\partial^Q y_2 = T_2 y_2 + \sum_{k=1, k \neq 2}^n d_{2,k} y_k \leq T y_2 + T y_1. \quad (6.20)$$

De (6.19) e (6.20), obtemos

$$\frac{(n - \Delta) (1 - y_1^p) (\partial^Q - T)^{p-1}}{(\partial^Q - t) y_1 + (n - 2) (n - \Delta - 1)} \leq T^{p-1} y_1^{p-1},$$

isto é,

$$\begin{aligned} (n - \Delta) (\partial^Q - T)^{p-1} - (n - 2) (n - \Delta - 1) T^{p-1} y_1^{p-1} \\ \leq [(\partial^Q - t) T^{p-1} + (n - \Delta) (\partial^Q - T)^{p-1}] y_1^p \\ \leq [(\partial^Q - t) T^{p-1} + (n - \Delta) (\partial^Q - T)^{p-1}] y_1^{p-1} \end{aligned} \quad (6.21)$$

o que dá o resultado desejado (6.14). Resta provar que a desigualdade é estrita.

Como G é conexo, $y_i > 0$, $i = 1, 2, \dots, n$. Além disto, $2t \leq \partial^Q \leq 2T$. Logo,

$\partial^Q - t > 0$, $T > 0$ e $y_1^p < y_1^{p-1}$. É fácil ver, então, que a desigualdade (6.21) é estrita. Isto completa a demonstração. \square

Corolário 6.3.6. *Seja G um grafo conexo. Fixado $p \geq 1$, seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$ com $y^{\max_p} = y_1 \geq y_2 \geq \dots \geq y_n$. Então*

$$y^{\max_p} \geq \left(\frac{\partial^{Q^{p-1}}}{(2T)^{p-1}(\partial^Q - t) + \partial^{Q^{p-1}}} \right)^{1/p}, \quad (6.22)$$

onde T e t denotam as transmissões máxima e mínima de G , respectivamente. Mais ainda, a igualdade ocorre em (6.22) se, e somente se, $G \cong K_n$.

Demonstração. De (6.17), obtemos

$$\partial^Q y_1 y_2^{p-1} \geq 1 - y_1^p + t y_2^{p-1} y_1, \quad (6.23)$$

isto é,

$$y_2 \geq \left(\frac{1 - y_1^p}{y_1(\partial^Q - t)} \right)^{1/p-1}. \quad (6.24)$$

De (6.20), obtemos

$$\partial^Q y_2 \leq 2T y_1. \quad (6.25)$$

Dos dois resultados acima, concluímos que

$$\partial^Q \left(\frac{1 - y_1^p}{y_1(\partial^Q - t)} \right)^{1/p-1} \leq 2T y_1,$$

implicando

$$y_1^p \geq \frac{\partial^{Q^{p-1}}}{(2T)^{p-1}(\partial^Q - t) + \partial^{Q^{p-1}}},$$

a desigualdade exibida em (6.22). A primeira parte da prova está feita.

Agora, suponha que a igualdade ocorra em (6.22). Então, todas as desigualdades acima se tornam igualdades. Em particular, da igualdade (6.23), obtemos $\deg_G(v_1) = n - 1$, $T_1 = t = n - 1$ e $y_2 = y_3 = \dots = y_n$. Novamente da igualdade (6.25), temos $T_2 = T$ e $y_1 = y_3 = y_4 = \dots = y_n$. Logo, $y_1 = y_2 = \dots = y_n$. Para $v_i \in V(G)$,

$$\partial^Q = 2T_i, \quad i = 1, 2, \dots, n; \text{ isto é } T_1 = T_2 = \dots = T_n$$

e, então, $T = t = n - 1$. Portanto, $\deg_G(v_1) = \deg_G(v_2) = \dots = \deg_G(v_n) = n - 1$

e, por fim, $G \cong K_n$.

Reciprocamente, seja $G \cong K_n$. Então, $\partial^Q = 2(n-1)$, $T = t = n-1$ e $y_1 = y_2 = \dots = y_n = (\frac{1}{n})^{1/p}$. Logo, a igualdade vale em (6.22) para K_n . \square

Analogamente ao que foi feito para y^{\min_p} , também apresentamos no próximo corolário cotas para y^{\max_p} que não dependem do raio espectral do grafo.

Corolário 6.3.7. *Seja G um grafo conexo. Fixado $p \geq 3$, seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$ com $y^{\max_p} = y_1 \geq y_2 \geq \dots \geq y_n$. Então*

$$y^{\max_p} \geq \left(\frac{(2t)^{p-1}}{(2T)^{p-1}t + (2t)^{p-1}} \right)^{1/p},$$

onde T e t denotam a maior e menor transmissões de G , respectivamente. Se $p = 1$ ou $p = 2$, então

$$y^{\max_p} \geq \left(\frac{(2T)^{p-1}}{(2T)^{p-1}(2T-t) + (2T)^{p-1}} \right)^{1/p}.$$

Em qualquer caso, a igualdade ocorre se, e somente se, $G \cong K_n$.

Demonstração. Fixado $a > 0$, considere a função

$$f(x) = \frac{x^{p-1}}{a(x-t) + x^{p-1}}, \quad 2t \leq x \leq 2T.$$

Então, temos que

$$f'(x) = \frac{ax^{p-2}((p-1)(x-t) - x)}{(a(x-t) + x^{p-1})^2}. \quad (6.26)$$

e

$$f'(x) = 0 \quad \text{se, e somente se,} \quad x = \frac{t(p-1)}{p-2}.$$

É fácil ver que $f'(x) \geq 0$, já que

$$x \geq 2t \geq \frac{t(p-1)}{p-2} \quad \text{para} \quad p \geq 3.$$

Se $p = 1$ ou $p = 2$ então, de (6.26), concluímos que $f'(x) \leq 0$. Usando estes resultados, junto ao fato de que $2t \leq \partial^Q \leq 2T$ e o Corolário 6.3.6 obtemos a cota inferior. Mais ainda, em qualquer caso, a igualdade ocorre se, e somente se, $G \cong K_n$, pelo Corolário 6.3.6. \square

Lema 6.3.8. *Seja G um grafo r -regular com diâmetro 2. Fixado $p \geq 1$, seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$ com $y^{\max_p} = y_1 \geq y_2 \geq \dots \geq y_n$. Então*

$$i) T_1 = T_2 = \dots = T_n = 2n - r - 2 \quad e \quad \partial^Q(G) = 2(2n - r - 2);$$

$$ii) y_1 = y_2 = \dots = y_n = \left(\frac{1}{n}\right)^{1/p}.$$

Demonstração. Como G é um grafo r -regular com $d = 2$, temos que $T_i = r + 2(n - 1 - r) = 2(n - 1) - r$ e, então, $T_1 = T_2 = \dots = T_n = T$. Para $v_i \in V(G)$,

$$\partial^Q y_i = T_i y_i + \sum_{k=1, k \neq i}^n d_{i,k} y_k, \quad \text{isto é,} \quad (\partial^Q - T) y_i = \sum_{k=1, k \neq i}^n d_{i,k} y_k.$$

Fazendo a soma de $i = 1$ a n , obtemos

$$\begin{aligned} (\partial^Q - T) \sum_{i=1}^n y_i &= \sum_{i=1}^n \sum_{k=1, k \neq i}^n d_{i,k} y_k \\ &= \sum_{i=1}^n [r + (n - 1 - r)2] y_i, \\ &= (2n - 2 - r) \sum_{i=1}^n y_i. \end{aligned}$$

Como

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

segue que

$$\partial^Q(G) = T + 2n - r - 2.$$

A primeira parte da demonstração fica concluída.

Para $v_1 \in V(G)$,

$$\partial^Q y_1 = T_1 y_1 + \sum_{k=2}^n d_{1,k} y_k \leq T y_1 + (2n - 2 - r) y_2. \quad (6.27)$$

Como $\partial^Q(G) = T + 2n - r - 2$, da desigualdade acima, concluímos que $y_1 \leq y_2$. Mas, $y_1 \geq y_2$ e, portanto, $y_1 = y_2$. Logo, de (6.27), $y_1 = y_2 = \dots = y_n$. Por fim, de

$$\sum_{i=1}^n y_i^p = 1,$$

concluimos que $y_1 = y_2 = \dots = y_n = \left(\frac{1}{n}\right)^{1/p}$. \square

Exibimos agora uma cota superior para a maior entrada do autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$.

Teorema 6.3.9. *Seja G um grafo conexo. Fixado $p \geq 1$, seja $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ o autovetor principal p -normalizado associado ao raio espectral ∂^Q de $\mathcal{D}^Q(G)$ com $y^{\max_p} = y_1 \geq y_2 \geq \dots \geq y_n$. Então*

$$y^{\max_p} \leq \left(\frac{T^{p-1}}{(\partial^Q - T)^p + T^{p-1} - (d-1)(n-\delta-1)T^{p-1}} \right)^{1/p}, \quad (6.28)$$

onde d , δ e T denotam o diâmetro, grau mínimo, e a transmissão máxima de G , respectivamente. Mais ainda, a igualdade ocorre se, e somente se, $G \cong K_n$ ou G é isomorfo a um grafo regular de diâmetro 2.

Demonstração. Para $v_i \in V(G)$,

$$\partial^Q y_i = T_i y_i + \sum_{k=1, k \neq i}^n d_{i,k} y_k,$$

isto é,

$$(\partial^Q - T)y_i \leq (\partial^Q - T_i)y_i = \sum_{k=1, k \neq i}^n d_{i,k} y_k. \quad (6.29)$$

Como $p \geq 1$, usando *weighted power mean inequality*, obtemos

$$\left(\frac{\sum_{k=1, k \neq i}^n d_{i,k} y_k^p}{\sum_{k=1, k \neq i}^n d_{i,k}} \right)^{1/p} \geq \left(\frac{\sum_{k=1, k \neq i}^n d_{i,k} y_k}{\sum_{k=1, k \neq i}^n d_{i,k}} \right),$$

isto é,

$$\left(\sum_{k=1, k \neq i}^n d_{i,k} y_k \right)^p \leq \left(\sum_{k=1, k \neq i}^n d_{i,k} \right)^{p-1} \sum_{k=1, k \neq i}^n d_{i,k} y_k^p. \quad (6.30)$$

Como

$$\sum_{k=1}^n y_k^p = 1,$$

de (6.29) e (6.30), concluimos que

$$(\partial^Q - T)^p y_i^p \leq T_i^{p-1} \left[(1 - y_i^p) + \sum_{k=1, k \neq i}^n (d_{i,k} - 1) y_k^p \right]. \quad (6.31)$$

Fazendo $i = 1$ em (6.31), temos

$$\begin{aligned} (\partial^Q - T)^p y_1^p &\leq T^{p-1} \left[(1 - y_1^p) + (d-1)(n - \deg_G(v_1) - 1) y_2^p \right] \quad \text{já que } T \geq T_1 \\ &\leq T^{p-1} \left[(1 - y_1^p) + (d-1)(n - \delta - 1) y_2^p \right]. \end{aligned} \quad (6.32)$$

Similarmente, fazendo $i = 2$ em (6.31), temos

$$(\partial^Q - T)^p y_2^p \leq T^{p-1} \left[(1 - y_2^p) + (d-1)(n - \delta - 1) y_1^p \right], \quad (6.33)$$

isto é,

$$y_2^p \leq \frac{(d-1)(n - \delta - 1) y_1^p + 1}{(\partial^Q - T)^p + T^{p-1}} T^{p-1}.$$

Substituindo este valor em (6.32), concluimos que

$$\begin{aligned} y_1^p &\leq \frac{\left[(\partial^Q - T)^p + T^{p-1} + (d-1)(n - \delta - 1) T^{p-1} \right] T^{p-1}}{\left((\partial^Q - T)^p + T^{p-1} \right)^2 - (d-1)^2 (n - \delta - 1)^2 T^{2p-2}} \\ &= \frac{T^{p-1}}{(\partial^Q - T)^p + T^{p-1} - (d-1)(n - \delta - 1) T^{p-1}}, \end{aligned}$$

o resultado desejado em (6.28). A primeira parte da prova está feita.

Agora, suponha que a igualdade ocorra em (6.28). Então, todas as desigualdades acima tornam-se igualdades. Em particular, da igualdade (6.29), obtemos $T_i = T$. Da igualdade (6.30), obtemos $y_1 = y_2 = \dots = y_{i-1} = y_{i+1} = \dots = y_n$. Da igualdade (6.32), obtemos $\deg_G(v_1) = \delta$, $T_1 = T$, $y_2 = y_3 = \dots = y_n$ e $d \leq 2$. Da igualdade (6.33), obtemos $\deg_G(v_2) = \delta$, $T_2 = T$, $y_1 = y_3 = \dots = y_n$ e $d \leq 2$. Portanto, $y_1 = y_2 = \dots = y_n = y$, por exemplo. Se $d = 1$, $G \cong K_n$. Caso contrário, $d = 2$.

Para $v_i \in V(G)$, $\partial^Q y = 2T_i y$, isto é,

$$\partial^Q = 2 \left[\deg_G(v_i) + 2(n-1 - \deg_G(v_i)) \right] = 4(n-1) - 2 \deg_G(v_i).$$

Do feito acima, concluimos que $\deg_G(v_1) = \deg_G(v_2) = \dots = \deg_G(v_n)$. Logo, G é um grafo regular com diâmetro 2.

Reciprocamente, seja $G \cong K_n$. Então, $\partial^Q = 2(n-1)$, $T = n-1 = \delta$, $d = 1$

e $y_1 = y_2 = \dots = y_n = \left(\frac{1}{n}\right)^{1/p}$. Pode-se checar facilmente que a igualdade vale em (6.28).

Seja G isomorfo a um grafo r -regular de diâmetro 2. Então, pelo Lema 6.3.8, concluímos que $d = 2$, $T_1 = T_2 = \dots = T_n = 2n - r - 2 = T$ (por exemplo), $y_1 = y_2 = \dots = y_n = \left(\frac{1}{n}\right)^{1/p}$ e $\partial^Q(G) = 2T$. Então

$$\begin{aligned} \frac{T^{p-1}}{(\partial^Q - T)^p + T^{p-1} - (d-1)(n-\delta-1)T^{p-1}} &= \frac{T^{p-1}}{T^p + T^{p-1} - (n-r-1)T^{p-1}} \\ &= \frac{1}{T - n + r + 2} \\ &= \frac{1}{n} = y_1^p, \end{aligned}$$

já que $T = 2n - r - 2$.

Portanto, a igualdade vale em (6.28), finalizando a demonstração do teorema. \square

6.4 Propostas para trabalhos futuros

Em CIOABA e GREGORY [93] e CIOABA [94] são exibidos resultados a respeito da razão principal (a razão entre a maior e a menor entrada do autovetor principal 2-normalizado). Pensamos em investigar que tipo de resultados são obtidos utilizando-se uma razão análoga, agora no contexto da matriz distância laplaciana sem sinal.

Capítulo 7

Medidas de centralidade e convexidade em grafos

O objetivo deste capítulo é explorar possibilidades de aplicações da matriz distância de um grafo para o desenvolvimento de outras áreas da Teoria de Grafos. Particularmente, abordamos as medidas de centralidade, na primeira seção, e a teoria de convexidade, na segunda seção. Em ambos os casos, além de fazer uma revisão de resultados já conhecidos de forma a permitir que o leitor se familiarize com os assuntos, propomos definições, de teor espectral, que pensamos poder contribuir para o desenvolvimento destas áreas.

A primeira seção deste capítulo é dividida em quatro partes. Na primeira, fazemos uma revisão das principais medidas de centralidade existentes na literatura, o que nos auxilia a justificar a proposição da medida de proximidade espectral, na segunda subseção. Na terceira subseção, apresentamos algumas propriedades da nova medida proposta, a partir de releituras de resultados já existentes na literatura e, finalmente, na última subseção, fazemos comparações entre as medidas de proximidade e proximidade espectral, em um mesmo grafo conexo. Alguns resultados inéditos, não só abordando estas medidas, como também o raio espectral da matriz distância de um grafo, são obtidas. Em [28], em trabalho de colaboração com os professores Boaventura-Netto e Jurkiewicz, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, utilizamos duas medidas de centralidade, de grau e de autovetor, como ferramenta para observar e comparar o comportamento dos diretórios estaduais dos partidos, em termos das alianças que se celebraram para eleições governamentais e das coligações estabelecidas para a eleição presidencial.

A última seção, dividida em duas partes, é dedicada à convexidade em grafos. Na primeira parte, após definirmos alguns conceitos da teoria da convexidade abstrata, voltamos nossa atenção para a convexidade em grafos, em especial, a convexidade geodésica. Na segunda, propomos um novo conceito, de teor espectral, para o estudo da convexidade em grafos, algo que não encontramos na literatura.

7.1 Medidas de centralidade

7.1.1 Algumas medidas de centralidade

A teoria de grafos representa uma importante ferramenta para modelagem e análise de diferentes tipos de redes, problema que se torna relevante devido a sua natureza real. Neste sentido, um conceito que desempenha papel importante é o de medida de centralidade, introduzido em 1948 por BAVELAS [96], ainda no contexto específico de redes sociais, com o objetivo de se tentar mensurar a importância dos atores (vértices) envolvidos na rede. Nas décadas posteriores até os dias atuais, tal conceito vem sendo amplamente discutido e utilizado para investigar a importância ou influência dos vértices nos mais diversos tipos de rede como as que modelam problemas nas áreas de transporte [97], mercado financeiro [98], redes sociais [99], redes de alimentos [100], fluxo de informações [101], combate a redes terroristas [102], busca em redes de internet [103], propagação de doenças [104], coligações partidárias [28], entre outros.

Devido à diversidade de características que as redes modeladas podem apresentar, tornou-se necessário que, desde 1948, um grande número de medidas de centralidade fossem definidas, para que, em cada rede, fosse possível optar pela medida que melhor quantificasse os seus diferentes aspectos. Neste trabalho, nos atemos às medidas de centralidade de grau, centralidade de autovetor, centralidade de proximidade e centralidade de eficiência. Para maiores detalhes sobre algumas das medidas mais presentes na literatura sugerimos [105].

A definição mais simples das medidas de centralidade é a de grau, proposta em 1964 por SHAW [106], que atribui maior centralidade ao vértice que possui mais contatos diretos na rede. Definimos da seguinte forma:

Definição 7.1.1. *Seja G um grafo com n vértices e seja v_i um vértice de G . A centralidade de grau de v_i , que denotamos por $c_d(v_i)$, é o número de vértices adjacentes a v_i , isto é,*

$$c_d(v_i) = \sum_{k=1}^n a_{i,k}$$

onde $a_{i,k}$ denotam os elementos da matriz de adjacência $A(G)$.

Exemplo 7.1.2. *No grafo apresentado na Figura 7.1, temos a seguinte centralidade de grau:*

$c_d(\mathbf{v}_1)$	$c_d(\mathbf{v}_{10})$	$c_d(\mathbf{v}_{11})$	$c_d(\mathbf{v}_{12})$	$c_d(\mathbf{v}_{13})$	$c_d(\mathbf{v}_2)$	$c_d(\mathbf{v}_3)$
9	3	3	3	2	1	1
$c_d(\mathbf{v}_4)$	$c_d(\mathbf{v}_5)$	$c_d(\mathbf{v}_6)$	$c_d(\mathbf{v}_7)$	$c_d(\mathbf{v}_8)$	$c_d(\mathbf{v}_9)$	
1	1	1	1	1	1	

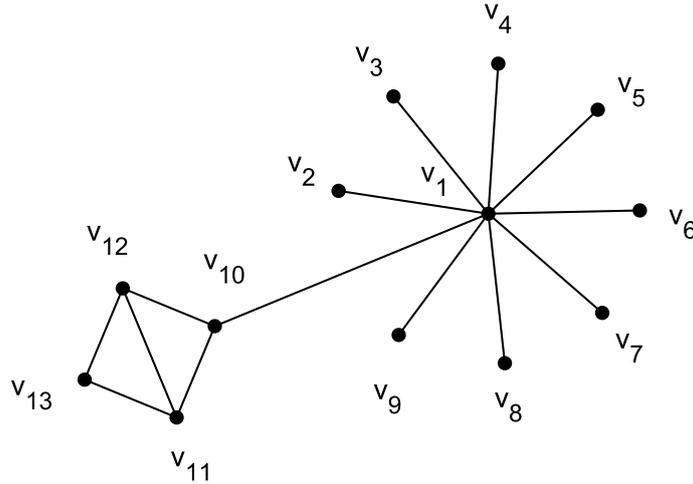


Figura 7.1: Grafo onde v_1 possui a maior centralidade de grau .

Observe que, apesar do vértice v_{10} possuir a mesma centralidade de grau que os vértices v_{11} e v_{12} , eles possivelmente tenham diferentes magnitudes de influência nesta rede já que além das ligações entre estes vértices, o primeiro está diretamente ligado ao vértice que mais possui vizinhos na rede enquanto os demais se ligam ao vértice v_{13} , que só é adjacente aos próprios v_{11} e v_{12} . Esta diferença de magnitude não aparece pois a medida de centralidade atribui relevância a um vértice baseada exclusivamente no seu grau.

Em 1987, BONACICH [107] introduziu a medida de *centralidade de autovetor* que considera não apenas o número de ligações diretas que um vértice possui na rede como também o quão centrais estes vértices adjacentes são.

Definição 7.1.3. *Seja G um grafo conexo com n vértices e seja v_i um vértice de G . A centralidade de autovetor de v_i é definida por*

$$c_{av}(v_i) = x_i,$$

onde x_i é a i -ésima coordenada do autovetor positivo unitário associado ao índice do grafo da matriz de adjacência $A(G)$.

A centralidade de autovetor fica bem definida já que, pelo Teorema de Perron-Frobenius (Teorema 2.1.7), a matriz de adjacência de um grafo admite único autovetor positivo unitário associado ao índice.

Além disto, segue que se λ e $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ são respectivamente o índice e o autovetor unitário associado à matriz $A(G)$ então

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \iff x_i = \frac{1}{\lambda} \sum_{k=1}^n a_{i,k}x_k = \frac{1}{\lambda} \sum_{k \in N(v_i)} x_k$$

mostrando portanto que a centralidade de autovetor de um vértice é determinada por uma combinação linear da centralidade de seus vértices adjacentes, o que justifica o apontado anteriormente sobre esta medida considerar dois fatores na determinação dos vértices mais centrais: número de vértices adjacentes e o quão centrais são estes vértices.

Exemplo 7.1.4. *Para o grafo apresentado na Figura (7.1) temos as seguintes centralidades de autovetor:*

$\mathbf{c}_{av}(\mathbf{V}_1)$	$\mathbf{c}_{av}(\mathbf{V}_{10})$	$\mathbf{c}_{av}(\mathbf{V}_{11})$	$\mathbf{c}_{av}(\mathbf{V}_{12})$	$\mathbf{c}_{av}(\mathbf{V}_2)$	$\mathbf{c}_{av}(\mathbf{V}_3)$	$\mathbf{c}_{av}(\mathbf{V}_4)$
0,63451	0,35727	0,24079	0,24079	0,20311	0,20311	0,20311
$\mathbf{c}_{av}(\mathbf{V}_5)$	$\mathbf{c}_{av}(\mathbf{V}_6)$	$\mathbf{c}_{av}(\mathbf{V}_7)$	$\mathbf{c}_{av}(\mathbf{V}_8)$	$\mathbf{c}_{av}(\mathbf{V}_9)$	$\mathbf{c}_{av}(\mathbf{V}_{13})$	
0,20311	0,20311	0,20311	0,20311	0,20311	0,15416	

É importante observar que ao compararmos as centralidades de grau e autovetor do grafo exibido no exemplo anterior, além de na segunda termos $c_{av}(v_{10}) > c_{av}(v_{11}) = c_{av}(v_{12})$ onde na centralidade de grau tínhamos igualdade, temos também

$$c_d(v_2) = c_d(v_3) = \dots = c_d(v_9) < c_d(v_{13})$$

enquanto

$$c_{av}(v_2) = c_{av}(v_3) = \dots = c_{av}(v_9) > c_{av}(v_{13}).$$

Isto evidencia uma inversão na ordem da centralidade destes vértices ao compararmos as medidas e deve-se ao fato de que apesar dos vértices v_2, \dots, v_9 possuírem apenas um vizinho cada, este vizinho comum v_{10} possui a maior centralidade de autovetor da rede, situação distinta de v_{13} , que é adjacente a vértices de centralidade de autovetor menores.

Muitos grafos modelam redes onde a distância entre os vértices torna-se uma informação fundamental. Nestes casos, os vértices com maior relevância são aqueles que, em algum sentido, estão “mais próximos na rede”. Em 1966, SABIDUSSI [108] introduziu a medida de proximidade, baseada na soma das distâncias de um vértice aos demais vértices do grafo.

Definição 7.1.5. *Seja G um grafo conexo com n vértices e seja v_i um vértice de G . A centralidade de proximidade de v_i é determinada pelo inverso da soma das distâncias de v_i aos demais vértices do grafo, isto é,*

$$c_p(v_i) = \frac{1}{\sum_{k=1}^n d_{v_i, v_k}} = \frac{1}{Tr(v_i)}.$$

Neste caso, o vértice mais central da rede é aquele cuja soma das distâncias a todos os demais vértices é mínima ou, equivalentemente, o vértice de transmissão mínima.

Exemplo 7.1.6. *O grafo da Figura 7.2 apresenta as seguintes centralidades de proximidade:*

$c_p(v_1)$	$c_p(v_6)$	$c_p(v_7)$	$c_p(v_2)$	$c_p(v_5)$
0,06667	0,06667	0,06667	0,05882	0,05882
$c_p(v_8)$	$c_p(v_9)$	$c_p(v_3)$	$c_p(v_4)$	
0,05882	0,05556	0,05263	0,05263	

Em muitas redes deseja-se determinar um local (vértice) tal que a distância máxima para os demais vértices do grafo seja a menor possível, no lugar da distância total. Por exemplo, na determinação de um local para a instalação de uma unidade do Corpo de Bombeiros em uma região, este pode ser um dos parâmetros de interesse. Em 1995, HAGE e HARARY [109] propuseram a denominada *centralidade de eficiência*, baseada no conceito de excentricidade de um vértice.

Definição 7.1.7. *Seja G um grafo conexo com n vértices e seja v_i um vértice de G . A centralidade de eficiência de v_i é dada pelo inverso da excentricidade de v_i , isto é,*

$$c_e(v_i) = \frac{1}{e(v_i)}.$$

Portanto, esta medida torna mais central o vértice que tiver excentricidade mínima.

Exemplo 7.1.8. *O grafo da Figura 7.2 apresenta as seguintes centralidades de eficiência:*

$c_e(v_1)$	$c_e(v_2)$	$c_e(v_5)$	$c_e(v_6)$	$c_e(v_9)$
0,33333	0,33333	0,33333	0,33333	0,33333
$c_e(v_3)$	$c_e(v_4)$	$c_e(v_7)$	$c_e(v_8)$	
0,25	0,25	0,25	0,25	

7.1.2 Uma nova medida de centralidade

Assim como ocorria para a centralidade de grau, é comum ao utilizarmos tanto a centralidade de proximidade, como a de eficiência, que diferentes vértices apresentem o mesmo valor de centralidade sem que ocupem necessariamente localizações “equivalentes” na rede. No Exemplo 7.2, os vértices v_2 e v_8 têm a mesma centralidade de proximidade, apesar de não terem o mesmo grau, por exemplo. Situação

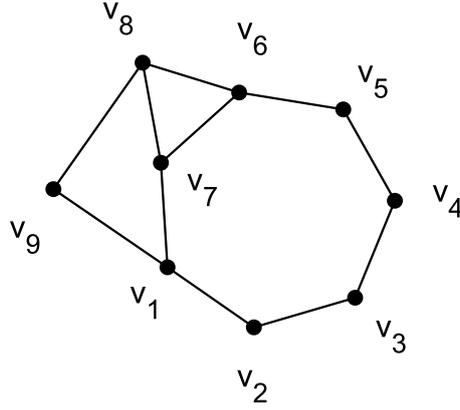


Figura 7.2: Grafo onde apenas v_9 não admite outro vértice com mesma transmissão e apenas dois valores de excentricidade são atribuídos aos vértices.

semelhante à apresentada pelos vértices v_3 e v_8 , para a centralidade de eficiência. Na verdade, neste grafo, apenas v_9 não admite outro vértice com mesma transmissão e apenas dois valores de excentricidade são atribuídos aos vértices. Motivados por esta questão e pelo fato da centralidade de autovetor aperfeiçoar, em certo sentido, a centralidade de grau, propomos uma nova medida de centralidade, espectral, a qual chamamos de medida de proximidade espectral.

Definição 7.1.9. *Seja G um grafo conexo com n vértices e seja v_i um vértice de G . A centralidade de proximidade espectral de v_i é definida por*

$$c_{pe}(v_i) = \frac{1}{x_i},$$

onde x_i é a i -ésima coordenada do autovetor positivo unitário associado ao índice do grafo da matriz de distância, $\mathcal{D}(G)$.

Note que, novamente do Teorema de Perron-Frobenius (Teorema 2.1.7), segue que a centralidade de proximidade espectral fica bem definida.

Se ∂ e $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ são respectivamente o índice e o autovetor unitário positivo associado à matriz $\mathcal{D}(G)$ então

$$\mathcal{D}\mathbf{x} = \partial\mathbf{x} \iff x_i = \frac{1}{\partial} \sum_{k=1}^n d_{v_i, v_k} x_k \iff c_{pe}(v_i) = \frac{1}{x_i} = \frac{\partial}{\sum_{k=1}^n d_{v_i, v_k} x_k}. \quad (7.1)$$

Portanto, a centralidade de proximidade espectral de um vértice v_i é determinada, a menos da multiplicação pelo índice da matriz distância, pelo inverso da combinação linear das entradas do autovetor principal da matriz distância de G associadas aos demais vértices do grafo, onde o coeficiente de cada uma destas entradas é a distância de v_i ao vértice associado à entrada. Logo, podemos pensar que

um vértice v_i torna-se mais central com respeito à proximidade espectral à medida em que dois fatores são combinados: valor reduzido para sua transmissão (única condição que estava presente na centralidade de proximidade) e uma possível quantidade maior de vértices que estão muito distantes de v_i e que também tenham alta centralidade (quando comparado ao que ocorre com os demais vértices do grafo). Sobre o segundo fator, cabe observar que como as entradas do autovetor normalizado são valores entre zero e um e multiplicam distâncias maiores ou iguais a um, podemos pensar que cada valor de distância de v_i a um vértice v_j , d_{v_i, v_j} , contribui apenas com um percentual seu, no denominador da equação (7.1). Percentual este que é determinado exatamente pelo valor da entrada do autovetor principal da matriz distância associado ao vértice v_j , x_j (inverso da centralidade deste vértice). Sendo assim, com o objetivo de minimizar o denominador, e maximizar a centralidade, desejamos os menores percentuais sendo tomados das maiores distâncias, ou seja, grandes centralidades ocorrendo em vértices distantes entre si. O primeiro fator segue de forma imediata, pelo fato da transmissão fazer contribuições no denominador da expressão (7.1).

É importante observar que temos no segundo fator algo que é esperado quando pensamos em um problema de natureza real. Caso estejamos, por exemplo, tentando decidir em qual vértice de um grafo instalar um depósito, a partir de onde são distribuídos produtos (para os demais vértices do grafo), a existência de vértices centrais e distantes entre si apenas reafirma a relevância de suas posições. De fato, fixado um vértice v_0 com esta característica, ele está próximo de um grupo de vértices (vizinhos, vizinhos de vizinhos...) e, mesmo os demais vértices que não fazem parte deste grupo ainda desempenham papel central na rede, por terem alta centralidade e, portanto, não devem estar a uma distância tão grande de v_0 . Logo, em certo sentido, v_0 está, de fato, próximo de toda a rede.

Optamos pela utilização do inverso na definição da centralidade de proximidade espectral motivados pelas definições, já consagradas na literatura, de medida de proximidade e eficiência, onde o inverso também está presente. Desta forma, conseguimos não apenas que os vértices com maior centralidade espectral sejam os mais próximos da rede, diferentemente do que ocorreria sem a utilização do inverso que acarretaria no fato do vértice mais central ser o menos próximo aos demais vértices da rede, como também tornamos mais simples a comparação dos resultados destas três medidas, de mesma natureza, em um determinado grafo.

Exemplo 7.1.10. *O grafo da Figura 7.2 apresenta as seguintes medidas de centralidade de proximidade espectral para seus vértices:*

$C_{pe}(v_1)$	$C_{pe}(v_6)$	$C_{pe}(v_7)$	$C_{pe}(v_2)$	$C_{pe}(v_5)$
3,34045	3,33177	3,291206	3,02096	3,01431
$C_{pe}(v_8)$	$C_{pe}(v_9)$	$C_{pe}(v_3)$	$C_{pe}(v_4)$	
2,94715	2,80654	2,74394	2,73748	

O Exemplo 7.1.10 evidencia que, diferentemente do que ocorreu com as medidas de centralidade de proximidade e de eficiência do grafo exibido na Figura 7.2, não há pares de vértices que possuam a mesma centralidade de proximidade espectral. O Exemplo 7.1.11 vem mostrar que além de termos casos onde as medidas de proximidade e eficiência apresentam vértices com mesma centralidade enquanto a medida de proximidade espectral os distingue, também é possível que haja inversão da magnitude das centralidades.

Exemplo 7.1.11. Para o grafo da Figura 7.3 temos

- *Centralidade de Eficiência:*

$C_e(v_5)$	$C_e(v_1)$	$C_e(v_4)$	$C_e(v_6)$	$C_e(v_2)$	$C_e(v_3)$
0,25	0,2	0,2	0,2	0,16666	0,16666
$C_e(v_7)$	$C_e(v_{10})$	$C_e(v_8)$	$C_e(v_{11})$	$C_e(v_{12})$	$C_e(v_{13})$
0,16666	0,16666	0,14286	0,14286	0,14286	0,14286
$C_e(v_9)$	$C_e(v_{14})$	$C_e(v_{15})$	$C_e(v_{16})$	$C_e(v_{17})$	
0,125	0,125	0,125	0,125	0,125	

- *Centralidade de Proximidade:*

$C_p(v_4)$	$C_p(v_{10})$	$C_p(v_5)$	$C_p(v_3)$	$C_p(v_{11})$	$C_p(v_{13})$
0,02564	0,025	0,02326	0,01961	0,01961	0,01961
$C_p(v_6)$	$C_p(v_1)$	$C_p(v_{12})$	$C_p(v_2)$	$C_p(v_7)$	$C_p(v_{14})$
0,01961	0,01818	0,01818	0,01695	0,01587	0,01515
$C_p(v_{15})$	$C_p(v_{16})$	$C_p(v_{17})$	$C_p(v_8)$	$C_p(v_9)$	
0,01515	0,01515	0,01515	0,01316	0,01099	

- *Centralidade de Proximidade Espectral:*

$C_{pe}(v_4)$	$C_{pe}(v_{10})$	$C_{pe}(v_5)$	$C_{pe}(v_6)$	$C_{pe}(v_{11})$	$C_{pe}(v_{13})$
5,97051	5,84010	5,54293	4,74316	4,69285	4,69285
$C_{pe}(v_3)$	$C_{pe}(v_1)$	$C_{pe}(v_{12})$	$C_{pe}(v_2)$	$C_{pe}(v_7)$	$C_{pe}(v_{14})$
4,64490	4,38596	4,34065	4,07664	4,02885	3,69140
$C_{pe}(v_{15})$	$C_{pe}(v_{16})$	$C_{pe}(v_{17})$	$C_{pe}(v_8)$	$C_{pe}(v_9)$	
3,69140	3,69140	3,69140	3,40414	2,86541	

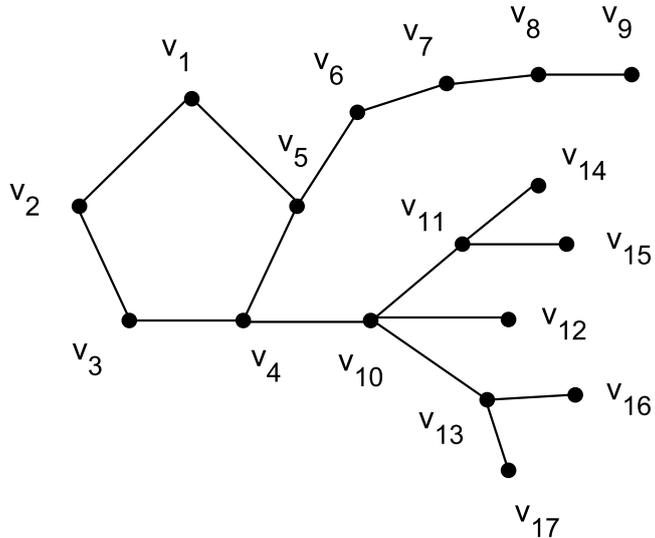


Figura 7.3: Grafo onde $c_p(v_3) > c_p(v_6)$, $c_{pe}(v_3) < c_{pe}(v_6)$ e $c_e(v_3) < c_e(v_6)$.

Portanto, $c_p(v_3) > c_p(v_6)$ e $c_{pe}(v_3) < c_{pe}(v_6)$, e $c_e(v_3) < c_e(v_6)$.

Tendo em vista a possibilidade das centralidades de proximidade e proximidade espectral ordenarem os vértices de um mesmo grafo de forma distinta, torna-se natural o interesse pela possibilidade de não apresentarem o mesmo vértice como mais central. O próximo exemplo garante a existência de grafo com tal propriedade.

Exemplo 7.1.12. Para o grafo da Figura 7.4, temos

- *Centralidade de Proximidade:*

$c_p(v_1)$	$c_p(v_2)$	$c_p(v_4)$	$c_p(v_9)$	$c_p(v_{10})$	$c_p(v_{11})$
0,06667	0,06667	0,06667	0,06667	0,06667	0,06667
$c_p(v_6)$	$c_p(v_3)$	$c_p(v_5)$	$c_p(v_7)$	$c_p(v_8)$	
0,06250	0,05882	0,05882	0,05882	0,04	

- *Centralidade de Proximidade Espectral:*

$c_{pe}(v_6)$	$c_{pe}(v_1)$	$c_{pe}(v_2)$	$c_{pe}(v_4)$	$c_{pe}(v_9)$	$c_{pe}(v_{10})$
3,60881	3,57424	3,57424	3,57424	3,57424	3,57424
$c_{pe}(v_{11})$	$c_{pe}(v_3)$	$c_{pe}(v_5)$	$c_{pe}(v_7)$	$c_{pe}(v_8)$	
3,57424	3,29772	3,29772	3,29772	2,37225	

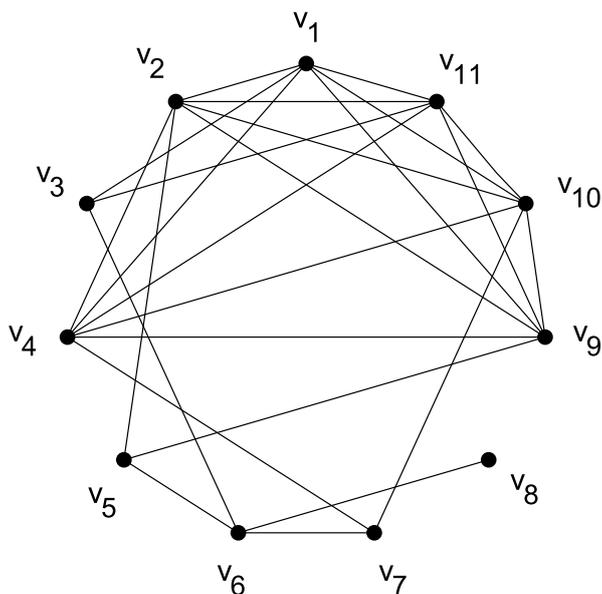


Figura 7.4: Grafo onde o conjunto de vértices que assumem a maior centralidade de proximidade e o conjunto de vértices que assumem o maior valor de proximidade espectral são disjuntos.

7.1.3 Algumas propriedades da medida de proximidade espectral

Diante da definição proposta para a medida de proximidade espectral, a compreensão de suas propriedades passa pelo estudo do autovetor principal da matriz distância de um grafo, largamente estudado [10, 26]. Nesta seção, além de exibirmos algumas propriedades da medida de centralidade espectral, obtidas a partir de uma releitura de alguns resultados já presentes na literatura, obtemos, ao fim dela, uma cota inferior inédita para o menor autovetor principal da matriz distância de um grafo conexo, 1-normalizado.

O próximo resultado traz como consequência o fato da medida de proximidade espectral sempre atribuir a mesma centralidade a vértices transitivos.

Proposição 7.1.13. [16] *Seja G um grafo conexo com autovetor principal da matriz distância $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ e η um automorfismo de G . Se $\eta(v_i) = v_j$ então $x_i = x_j$*

Corolário 7.1.14. *Se G é um grafo conexo e $v_i, v_j \in V(G)$ são vértices transitivos então $c_{pe}(v_i) = c_{pe}(v_j)$.*

Notemos que se G é um grafo transmissão regular então todos os seus vértices possuem a mesma centralidade de proximidade espectral. De fato, como a soma

dos elementos de cada linha da matriz distância de G é constante, então esta matriz tem como autovetor principal o vetor $\mathbf{1} = \{1, 1, \dots, 1\}$. Na verdade, os grafos transmissão regular desempenham papel análogo, para a centralidade de proximidade espectral, ao desempenhado pelos grafos regulares com respeito à centralidade de autovetor já que, no segundo caso, o autovetor principal associado a matriz de adjacência também é o vetor $\mathbf{1}$. Destacamos ainda que a recíproca do Corolário 7.1.14 não se verifica no caso geral. Como exemplo, podemos considerar o grafo apresentado na Figura 3.1 que, apesar de não ser regular (portanto, possui vértices não transitivos), é transmissão regular, o que implica em todos os seus vértices terem a mesma centralidade de proximidade espectral.

Também são resultados conhecidos:

Teorema 7.1.15. [10] *Seja G um grafo conexo com $n \geq 3$ vértices e autovetor principal da matriz distância $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$.*

- i) Se u é um vértice pendente adjacente a um vértice v , então $x_u > x_v$;*
- ii) Se G é uma árvore e $x_v < x_u$, então as entradas de \mathbf{x} por qualquer caminho da forma $vu \dots w$ formam uma sequência crescente de números positivos;*
- iii) Para uma árvore, a entrada mínima do vetor de Perron ocorre em um vértice interior. Mais ainda, o mínimo pode ocorrer em no máximo dois vértices que, neste caso, são adjacentes;*
- iv) Para uma árvore, a entrada máxima do vetor de Perron ocorre em um vértice pendente e pode ocorrer em diversos vértices;*
- v) Dados $u, v \in V(G)$, se $N(u) \setminus \{v\} \subsetneq N(v) \setminus \{u\}$, então $x_u > x_v$. Mais ainda, se $N(u) \setminus \{v\} = N(v) \setminus \{u\}$, então $x_u = x_v$.*

As seguintes propriedades a respeito da centralidade de proximidade espectral são obtidas a partir de uma releitura do teorema acima:

Corolário 7.1.16. *Seja G um grafo conexo com $n \geq 3$ vértices.*

- i) Se u é um vértice pendente adjacente a um vértice v , então $c_{pe}(u) < c_{pe}(v)$;*
- ii) Se G é uma árvore e $c_{pe}(u) < c_{pe}(v)$ as centralidades por qualquer caminho da forma $vu \dots w$ formam uma sequência decrescente de números positivos;*
- iii) Para uma árvore, o vértice de maior centralidade de proximidade espectral ocorre em um vértice interior. Mais ainda, a centralidade máxima pode ocorrer em no máximo dois vértices que, neste caso, são adjacentes;*

iv) Para uma árvore, a centralidade mínima de proximidade espectral ocorre em um vértice pendente e pode ocorrer em diversos vértices;

v) Dados $u, v \in V(G)$, tais que $N(u) \setminus \{v\} \subsetneq N(v) \setminus \{u\}$, então $c_{pe}(u) < c_{pe}(v)$.
 Mais ainda, se $N(u) \setminus \{v\} = N(v) \setminus \{u\}$, então $c_{pe}(u) = c_{pe}(v)$.

Observação 7.1.17. O item (v) do Teorema 7.1.15 e do Corolário 7.1.16 podem ser enunciados de forma análoga para a transmissão de um vértice [110] e, portanto, para a centralidade de proximidade, respectivamente. Este resultado é utilizado mais à frente.

No Capítulo 6 é feita uma revisão acerca das cotas existentes na literatura para a maior e menor entrada do autovetor principal p -normalizado associado às matrizes de adjacência, laplaciana sem sinal, distância, bem como matrizes não negativas, de forma mais ampla. Cotas inferiores para a menor entrada do autovetor principal p -normalizado associado à matriz distância de um grafo conexo não foram determinadas. Diante da definição de centralidade proposta nesta seção, tal cota torna-se relevante já que representa uma cota superior para a maior centralidade de proximidade espectral de um grafo. Mais ainda, tal fato nos ajudaria a determinar para quais valores de p a medida de proximidade espectral se torna uma centralidade de nó (node-centrality), conceito introduzido por RUHNAU [111] em 2000 :

Definição 7.1.18. Seja G um grafo conexo de ordem n . Seja nc uma função que associa um valor real a todo vértice $v \in V(G)$. A função nc é chamada uma centralidade de nó se:

- i) $nc(v) \in [0, 1]$ para todo $v \in V(G)$;
- ii) $nc(v) = 1$ se, e somente se, $G \cong S_n$ e $d(v) = n - 1$.

Apesar de ainda não termos obtido a cota desejada, apresentamos, na sequência, um resultado inicial, de nossa autoria, sobre o assunto. Antes, recordamos o seguinte resultado bem conhecido:

Lema 7.1.19. [91] Se p_1, p_2, \dots, p_n são números positivos, então:

$$\frac{r_1 + r_2 + \dots + r_n}{p_1 + p_2 + \dots + p_n} \geq \min_i \frac{r_i}{p_i}$$

para quaisquer números reais r_1, r_2, \dots, r_n . A igualdade ocorre se, e somente se, todos os quocientes $\frac{r_i}{p_i}$ são iguais.

Teorema 7.1.20. Seja G um grafo conexo com n vértices e $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$, o autovetor 1-normalizado associado ao raio espectral ∂ de $D(G)$, onde $y_1 \geq y_2 \geq \dots \geq y_n$. Então

$$y_n \geq \frac{1}{\partial + 1}. \quad (7.2)$$

Mais ainda, uma condição necessária para que a igualdade ocorrer é que G possua um vértice universal.

Demonstração. Da equação $\mathcal{D}\mathbf{Y} = \partial\mathbf{Y}$ e do Lema 7.1.19 segue que

$$\frac{\partial y_n}{1 - y_n} = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} d_{ni}y_i}{\sum_{i=1}^{n-1} y_i} \geq \min_i \frac{d_{ni}y_i}{y_i} = 1,$$

já que o grafo é conexo. Logo,

$$y_n \geq \frac{1}{\partial + 1}.$$

Reciprocamente, suponhamos que a igualdade ocorra em (7.2). Novamente, usando Lema 7.1.19, temos $d_{ni} = 1$ para todo $i = 1, 2, \dots, n - 1$. Portanto, G possui um vértice universal. \square

7.1.4 Comparando as centralidades de proximidade e de proximidade espectral

Como vimos na seção anterior, as centralidades de proximidade e proximidade espectral podem apresentar diferentes vértices como os de maior relevância. Tendo como motivação o trabalho feito por GRASSI *et al.* [112], onde são discutidas condições para que um grafo tenha o mesmo vértice com a maior centralidade de grau e de autovetor, exibimos uma condição análoga à lá apresentada, agora para que o mesmo vértice tenha as maiores centralidades de proximidade e proximidade espectral. Para isto, obtemos uma cota simples, porém inédita, para o raio espectral da matriz distância de um grafo conexo, melhorando a cota apresentada no Teorema 3.1.11. Por fim, mostramos que na família dos grafos *threshold* conexos tais centralidades coincidem.

Ao longo desta seção, dado um grafo conexo G de ordem n , denotamos a transmissão de seus vértices por $Tr_1 \leq Tr_2 \leq \dots \leq Tr_n$. Além disto, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ denota um autovetor unitário associado ao raio espectral ∂ de $\mathcal{D}(G)$. Consideramos os conjuntos $U = \{v \in V(G) : x_v = \max x_i\}$, $W = \{v \in V(G) : x_v = \min x_i\}$, $T_{\min}(U) = \min \{Tr(v) : v \in U\}$ e $T_{\max}(W) = \max \{Tr(v) : v \in W\}$. Lembramos ainda que, se $v \in V$ é tal que $x_v = \min \{x_i : i \in V(G)\}$, então este vértice possui o maior valor de centralidade de proximidade espectral do grafo G . De forma similar, se $Tr(v) = Tr_1$ então o vértice v possui o maior valor de centralidade de proximidade do grafo em questão.

O próximo teorema fornece uma nova cota para o raio espectral da matriz distância de um grafo.

Teorema 7.1.21. *Sejam G um grafo conexo de ordem n e $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ um autovetor unitário associado ao raio espectral ∂ de $\mathcal{D}(G)$. Então, $T_{\max}(W) \leq \partial \leq T_{\min}(U)$, com a igualdade ocorrendo se, e somente se, G é transmissão regular.*

Demonstração. Vamos provar apenas uma das desigualdades, visto que a outra segue de forma análoga. Seja $v \in U$ tal que $Tr(v) = T_{\min}(U)$. Então

$$\partial = \frac{1}{x_v} \sum_{k=1}^n d_{k,v} x_k \leq \sum_{k=1}^n d_{k,v} = Tr(v) = T_{\min}(U). \quad (7.3)$$

Se vale a igualdade em (7.3), então,

$$\sum_{k=1}^n d_{k,v} x_k = \sum_{k=1}^n d_{k,v} x_v$$

e, como $0 \leq x_k \leq x_v$, segue que $x_k = x_v \forall k \in V$. Logo, G é transmissão regular. \square

Exemplo 7.1.22. *Para o grafo da Figura 7.4, a cota apresentada no Teorema 3.1.11 nos dá $15 \leq \partial \leq 25$, enquanto pelo teorema anterior temos $16 \leq \partial \leq 25$.*

O próximo corolário é fundamental para enunciarmos um condição suficiente para que o vértice com a maior centralidade de proximidade espectral tenha também a maior centralidade de proximidade.

Corolário 7.1.23. *Sejam G um grafo conexo de ordem n e $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ um autovetor unitário associado ao raio espectral ∂ de $\mathcal{D}(G)$. Se $v \in V(G)$ é um vértice tal que $x_v = \min x_i$ então, para todo vértice $w \in V(G)$ tal que $Tr(w) > \partial$, temos $x_w > x_v$.*

Demonstração. Caso $x_w = x_v$, teríamos $w \in W$ e $Tr(w) \leq T_{\max}(W) \leq \partial$, absurdo. \square

Teorema 7.1.24. *Sejam G um grafo conexo de ordem n , $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ um autovetor unitário associado ao raio espectral ∂ de $\mathcal{D}(G)$ e $x_v = \min x_i$. Se $Tr_1 = Tr_2 = \dots = Tr_k \leq \partial < Tr_{k+1} \leq \dots Tr_n$, para algum $1 \leq k \leq n - 1$ então $Tr(v) = Tr_1$.*

Demonstração. Se $v \in V$ é tal que $x_v = \min x_i$, pelo corolário anterior, $Tr(v) \leq \partial$ e, portanto, $Tr(v) = Tr_1$. \square

Pelo teorema anterior, com a condição de que $Tr_1 = Tr_2 = \dots = Tr_k \leq \partial < Tr_{k+1} \leq \dots Tr_n$, para algum $1 \leq k \leq n - 1$, o vértice com menor entrada de autovetor é obrigatoriamente um vértice com a menor transmissão. Não é verdade,

no caso geral, que o vértice com menor transmissão seja um vértice com a menor entrada de autovetor (ver Exemplos 7.1.6 e 7.1.10).

O próximo teorema fornece uma condição suficiente para que um grafo admita exatamente um vértice com a maior centralidade de proximidade e para que, este mesmo vértice, possua, de forma estrita, a maior centralidade de proximidade espectral.

Teorema 7.1.25. *Sejam G um grafo conexo de ordem n e $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ um autovetor unitário associado ao raio espectral ∂ de $\mathcal{D}(G)$. Se $Tr_2 > \partial$ então existe único $v \in V$ tal que $x_v < \min_{i \neq v} x_i$ e $Tr(v) = Tr_1 < Tr_2$.*

Demonstração. Seja $v \in V$ tal que $Tr(v) = Tr_1$. Logo, $Tr(v) \leq \partial < Tr_2$. Além disso, se $w \in V$ é tal que $x_w = \min x_i$, pelo corolário anterior, $Tr(w) \leq \partial$, ou seja, $w = v$. \square

Exemplo 7.1.26. *Se $G \cong S_n$, onde $n \geq 3$, então suas transmissões são $Tr_1 = n - 1$ e $Tr_2 = Tr_3 = \dots = Tr_n = 2n - 3$. Além disto, como*

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

temos que $Tr_1 < \rho(S_n) < Tr_2 = \dots = Tr_n$. Logo, o vértice universal da estrela é o único a possuir a maior centralidade de proximidade e o único a possuir a maior centralidade de proximidade espectral.

Não é difícil verificar que, no exemplo acima, toda a ordenação apresentada pelas centralidades de proximidade e proximidade espectral coincidem. Em ambos os casos, o vértice universal da estrela é o mais central, de forma estrita, e todos os demais vértices possuem a mesma centralidade. De fato, como vemos na sequência, o grafo estrela faz parte de uma importante família de grafos onde as centralidades de proximidade e proximidade espectral coincidem: os grafos *threshold*.

Os grafos *threshold* foram introduzidos por CHVÁTAL e HAMMER [113] nos anos 70 e suas aplicações abrangem a área da psicologia, sincronização de processos paralelos entre outros [114].

Definição 7.1.27. *Um grafo *threshold* G de ordem n é definido por uma sequência binária (b_1, b_2, \dots, b_n) , onde $b_i = 0$ representa adição de um vértice isolado e $b_i = 1$ representa adição de um vértice dominante.*

Exemplo 7.1.28. *O grafo estrela de ordem n é um grafo *threshold* com sequência binária $(\underbrace{0, 0, \dots, 0}_{n-1}, 1)$.*

O próximo teorema garante que as medidas de centralidade de proximidade e proximidade espectral ordenam os vértices de grafos *threshold* conexos da mesma forma.

Teorema 7.1.29. *Seja G um grafo threshold conexo de ordem n , e seja $(b_1 = 0, b_2, \dots, b_{n-1}, b_n = 1)$ sua sequência binária. Então, a ordenção dos vértices de G , segundo a centralidade de proximidade, é $c_p(v_1) \geq c_p(v_2) \geq \dots \geq c_p(v_m) \geq c_p(w_1) \geq c_p(w_2) \geq \dots \geq c_p(w_k)$, $m + k = n$, onde:*

- i) Todo vértice v_i , $1 \leq i \leq m$, está associado ao número 1 na sequência binária de G ; todo vértice w_j , $1 \leq j \leq k$, está associado ao número 0 na sequência binária de G ;*
- ii) $c_p(v_m) = c_p(w_1)$ se, e somente se, $b_2 = 1$;*
- iii) $c_p(v_i) \geq c_p(v_j)$ se, e somente se, v_i está associado a uma entrada na sequência binária de G posterior à associada a v_j ; $c_p(v_i) = c_p(v_j)$ se, e somente se, v_i e v_j são vértices associados a entradas consecutivas da sequência binária;*
- iv) $c_p(w_i) \geq c_p(w_j)$ se, e somente se, w_i está associado a uma entrada na sequência binária de G anterior à associada a w_j ; $c_p(w_i) = c_p(w_j)$ se, e somente se, w_i e w_j são vértices associados a entradas consecutivas da sequência binária.*

Demonstração. Seja G um grafo de ordem n , como nas hipóteses do teorema, e $(0, b_2, \dots, b_{n-1}, 1)$ sua sequência binária. Observe que os vértices associados ao número 1, na sequência binária, determinam, da esquerda para direita, uma sequência crescente de “conjuntos de vizinhança encaixantes” no sentido de que, se $b_i = b_j = 1$ e $i < j$, então $N(v_i) \setminus \{v_j\} \subset N(v_j) \setminus \{v_i\}$. Mais ainda, $N(v_i) \setminus \{v_j\} = N(v_j) \setminus \{v_i\}$ se, e somente se, $j = i + 1$. Desta forma, segue da Observação 7.1.17 que, se $b_i = b_j = 1$ e $i < j$ então $c_p(v_i) \leq c_p(v_j)$, com a igualdade ocorrendo se, e somente se, $j = i + 1$. Por outro lado, utilizando raciocínio análogo, temos que os vértices associados ao número 0 na sequência binária determinam, da esquerda para direita, uma sequência decrescente de conjuntos de vizinhança encaixantes. Logo, novamente pela Observação 7.1.17, se $b_i = b_j$ e $i < j$ então $c_p(v_i) \geq c_p(v_j)$, com a igualdade ocorrendo se, e somente se, $j = i + 1$. Afim de determinar totalmente a ordenação dos vértices de G segundo a centralidade em questão, resta observarmos que se $i_0 \in \mathbb{N}$ é o menor índice tal que $b_{i_0} = 1$ e se $j_0 \in \mathbb{N}$ é o menor índice tal que $b_{j_0} = 0$, então $N(v_j) \setminus \{v_{j_0}\} \subset N(v_{i_0}) \setminus \{v_{j_0}\}$, com a igualdade ocorrendo se, e somente se, $j_0 = 1$ e $i_0 = 2$. Em qualquer caso, a ordenação fica determinada. \square

Utilizando o Corolário 7.1.16, podemos enunciar o resultado acima de forma totalmente análoga para a medida de proximidade espectral e, portanto, estas medidas ordenam os vértices de um grafo *threshold* conexo da mesma forma.

Teorema 7.1.30. *Todo grafo threshold conexo apresenta a mesma ordenação de vértices segundo as centralidades de proximidade e proximidade espectral.*

7.2 Convexidade em grafos

Nas últimas décadas, diversos conceitos e técnicas da matemática contínua vêm sendo utilizados de forma a desenvolver a teoria de grafos. Entre elas, podemos destacar os diversos estudos que vêm sendo feitos inspirados na teoria da convexidade abstrata, que trazem consigo desde conceitos como os de conjuntos convexos, fechados e envoltórias convexas até abordagens motivadas pelas propriedades de Helly, Radon, Carathéodoy, entre outros. Apesar disto, não encontramos, na literatura, qualquer interseção entre os estudos de convexidade em grafos e teoria espectral de grafos. Nesta seção fazemos uma proposta de trabalho que envolva as duas áreas.

Exibimos, na sequência, apenas algumas definições e resultados da teoria de espaços convexos que são necessários para uma melhor compreensão dos espaços de convexidade em grafos. Para um estudo mais completo sugerimos [115].

O estudo da convexidade abstrata teve início no começo dos anos cinquenta com LEVI [116] introduzindo um sistema de axiomas que definiu um conjunto convexo de forma a generalizar o conceito clássico de convexidade euclidiana. Diversas contribuições a respeito deste tema já foram feitas e estruturas como espaços métricos, conjuntos ordenados e a própria teoria de grafos passaram a ser estudados sob esta ótica. Iniciamos apresentando a definição axiomática para convexidade.

Definição 7.2.1. *Uma convexidade \mathcal{C} em um conjunto não vazio X é uma coleção de subconjuntos de X tais que:*

- (C1) $\emptyset, X \in \mathcal{C}$;
- (C2) *Interseções arbitrárias de conjuntos de \mathcal{C} estão em \mathcal{C} ;*
- (C3) *\mathcal{C} é fechado sobre uniões aninhadas, isto é, se $\mathcal{D} \subset \mathcal{C}$ é não vazio e totalmente ordenado por inclusão, então $\cup \mathcal{D}$ também está em \mathcal{C} .*

Um espaço de convexidade é um par ordenado (X, \mathcal{C}) onde X é um conjunto não vazio e \mathcal{C} é uma convexidade em X . Os elementos de \mathcal{C} são chamados *conjuntos convexos*.

Pela definição de convexidade, qualquer conjunto $S \subset X$ está contido em ao menos um conjunto convexo, o próprio X . Mais ainda, a interseção de todos os convexos que contêm S também é um conjunto convexo, pelo axioma (C2), sendo, portanto, o menor conjunto convexo a conter S . Chamamos este conjunto de *envoltória convexa* de S e o denotamos por

$$[S]_{\mathcal{C}} = \bigcap \{C \in \mathcal{C} : S \subset C\}.$$

No caso de $S \subset X$ tal que $[S]_{\mathcal{C}} = S$, o conjunto em questão é convexo e, caso $[S]_{\mathcal{C}} = X$ dizemos que S é um conjunto \mathcal{C} -envoltório de X .

Exemplo 7.2.2. *Uma convexidade trivial em um conjunto $X \neq \emptyset$ qualquer é dada tomando-se $\mathcal{C} = \{\emptyset, X\}$.*

O próximo exemplo traz um espaço de convexidade de suma importância neste trabalho, já que tem como caso particular a convexidade em grafos que é tratada aqui. Como depende da ideia de distância mínima, é chamada de *convexidade geodésica*.

Exemplo 7.2.3. *Dado (X, d) um espaço métrico, seja \mathcal{C} uma coleção de subconjuntos de X tal que $C \in \mathcal{C}$ se, e somente se, para todo $x, y \in C$ o conjunto $\{z \in X : d(x, z) + d(z, y) = d(x, y)\}$ está contido em C , ou seja, se todos os elementos que estão geodesicamente entre x e y pertencem ao conjunto C .*

Definição 7.2.4. *Dado um espaço de convexidade (X, \mathcal{C}) e um conjunto convexo $C \subseteq X$, um elemento $c \in C$ é chamado um ponto extremo de C se o conjunto $C - \{c\}$ ainda é convexo.*

Alguns espaços de convexidade satisfazem a chamada propriedade de Minkowski–Krein–Milman: *Todo conjunto convexo é a envoltória convexa dos seus pontos extremos* ([117], [118, 119]). Tais espaços são denominados *geometria convexa*.

Na teoria de grafos, temos o seguinte correspondente para a definição de espaço de convexidade:

Definição 7.2.5. *Um espaço de convexidade em grafos é um par ordenado (G, \mathcal{C}) formado por um grafo conexo $G = (V, E)$ e uma convexidade \mathcal{C} em V tal que (V, \mathcal{C}) satisfaz adicionalmente a seguinte propriedade:*

(C4) *Todo conjunto convexo induz um subgrafo conexo de G .*

Observação 7.2.6. *Na definição de espaço de convexidade em grafos o axioma (C3) é trivialmente satisfeito já que $V(G)$ sempre é finito.*

As definições já apresentadas para envoltória convexa, conjunto envoltório e pontos extremos, assim como o de geometria convexa, seguem de forma análoga no estudo da convexidade em grafos. Em aplicações envolvendo grafos, muitas vezes estamos interessados em estudar vértices que fazem parte de algum tipo de caminho entre outros dois vértices, como caminhos geodésicos, mais longos, induzidos ou de comprimento dois. Na verdade, as convexidades de grafos mais comuns são exatamente as chamadas convexidades de caminho. Assim, se ϕ é a propriedade de interesse no conjunto dos caminhos de um grafo G , denominamos *ϕ -caminho* a qualquer caminho que possuir esta propriedade. Chamamos esta propriedade de *factível* caso entre todo par de vértices de G exista ao menos um caminho com propriedade em questão. Uma *convexidade de caminho* é definida a partir da família \mathcal{P}_ϕ ,

constituída por todos os ϕ -caminhos de G , onde ϕ é uma propriedade de caminho factível. Neste caso, se S é um conjunto de vértices de G , definimos o ϕ -fecho de S , $I_\phi[S]$, como sendo o próprio conjunto S acrescido de todos os vértices que fazem parte de algum ϕ -caminho entre outros dois vértices de S . Dizemos que este conjunto é *convexo* se $I_\phi[S] = S$. Verifica-se que, desta forma, temos uma convexidade bem definida em V . É possível encontrar na literatura importantes convexidades de caminhos introduzidas com a exclusão do item (C4) por não serem factíveis.

Exemplo 7.2.7. *Algumas convexidades de caminho em grafos:*

- *Convexidade geodésica (um exemplo de convexidade métrica): obtida quando \mathcal{P}_ϕ é o conjunto de todos os caminhos de comprimento geodésico, isto é, de comprimento mínimo [120–123];*
- *Convexidade monofônica (também conhecida como convexidade do caminho induzido): obtida quando \mathcal{P}_ϕ é o conjunto de todos os caminhos que não possuem cordas, isto é, caminhos induzidos [117, 124–126];*
- *Convexidade P_3 : obtida quando \mathcal{P}_ϕ é o conjunto de todos os caminhos de comprimento dois. Foi introduzida excluindo-se (C4) da definição de convexidade em grafos tendo em vista que existem grafos onde nem todo par de vértices possui um caminho de comprimento dois ligando-os [127–129].*

Neste trabalho nos atemos, principalmente, à convexidade geodésica, apesar de planejarmos futuramente abordarmos outras, especialmente a P_3 . Por isto, a partir de agora só fazemos menção a esta convexidade. Primeiramente, apresentamos novamente as definições de fecho geodésico e envoltória geodésica, considerando apenas a convexidade de nosso interesse.

Definição 7.2.8. *O intervalo geodésico entre dois vértices v_i e v_j é o conjunto $I[v_i, v_j]$ de todos os vértices pertencentes a alguma geodésica entre v_i e v_j . O intervalo geodésico também pode ser denominado fecho geodésico entre v_i e v_j . Se $S \subset V(G)$, então o fecho geodésico de S é definido por*

$$I[S] = \bigcup_{v_i, v_j \in S} I[v_i, v_j]$$

Portanto, o fecho geodésico de um conjunto S é formado pelo próprio conjunto S acrescido de todos os vértices que estejam em algum caminho geodésico entre dois vértices de S .

Definição 7.2.9. *Um conjunto $S \subset V(G)$ é denominado conjunto geodésico de G se $I[S] = V(G)$. O número geodésico, $gn(G)$, de um grafo G é a cardinalidade do menor conjunto geodésico de G .*

Observação 7.2.10. É conhecido o fato de que determinar o número geodésico de um grafo é um problema NP-completo.

Exemplo 7.2.11. No grafo da Figura 7.5, consideremos $S_1 = \{v_1, v_7\}$, $S_2 = \{v_1, v_4, v_7\}$, $S_3 = \{v_1, v_6\}$. Então, $I[S_1] = I[S_2] = \{v_1, v_3, v_4, v_7, v_8\}$ e $I[S_3] = V(G) - \{v_2\}$. Portanto, $S = \{v_1, v_2, v_6\}$ forma um conjunto geodésico de G . Mais ainda, é fácil ver que G não possui conjuntos geodésicos de cardinalidade dois e, portanto, $gn(G) = 3$.

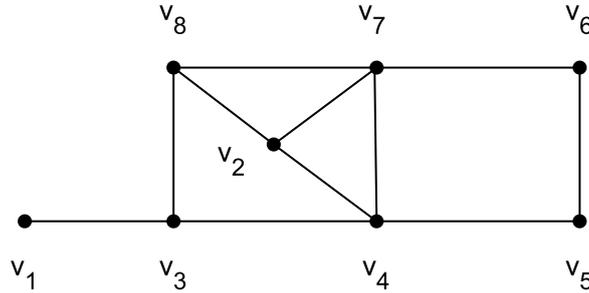


Figura 7.5: Grafo onde o conjunto $S = \{v_1, v_2, v_6\}$ é geodésico.

Definição 7.2.12. Seja G um grafo e $S \subset V(G)$. A envoltória convexa de S , denotada por $[S]$, é o menor conjunto convexo de G que contém S . Se $[S] = V(G)$, então S é chamado conjunto envoltório de G . O número envoltório de G , $hn(G)$, é a cardinalidade do menor conjunto envoltório de G .

Observação 7.2.13. Também é conhecido o fato de que determinar o número envoltório de um grafo é um problema NP-completo.

Exemplo 7.2.14. Novamente recorrendo ao grafo da Figura 7.5, seja $S_1 = \{v_3, v_7\}$ e $S_2 = \{v_1, v_6\}$. Então $[S_1] = \{v_2, v_3, v_4, v_7, v_8\}$ e $[S_2] = V(G)$ e, portanto, S_2 é um conjunto envoltório de G ($hn(G) = 2$). Mais ainda, o conjunto $S_3 = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_7, v_8\}$ é convexo e v_1 é um ponto extremo de S_3 .

No teoria de grafos, torna-se relevante o estudo a respeito de quais grafos admitem a propriedade de Minkowski–Krein–Milman já que, neste caso, se S é um subconjunto convexo de $V(G)$ então ele poderia ser reconstruído a partir de seus pontos extremos utilizando o operador envoltória convexa. Em certo sentido, isto significa que conjuntos convexos tem sua informação armazenada num pequeno subconjunto de vértices [130] e, em particular, o próprio conjunto $V(G)$, convexo, teria esta propriedade.

Em 1986, FARBER e JAMISON [117] demonstraram que um grafo é geometria convexa se, e somente se, é Ptolemaico. O fato de nem todo grafo ter seus conjuntos convexos reconstruídos a partir dos pontos extremos através do operador envoltória convexa motivou, já em 2005, CÁCERES *et al.* [131] a buscarem uma condição sobre o grafo para que valesse tal propriedade. Num primeiro momento, estenderam o conjunto dos pontos extremos com o objetivo de obter um novo conjunto que possuísse a propriedade desejada. Para isto, introduziram a definição de conjunto de contorno de um subconjunto $S \subset V(G)$, o qual demonstraram, também neste trabalho, conter o conjunto dos pontos extremos de S e ser um conjunto envoltório de G .

Seja S um conjunto de vértices de um grafo conexo $G = (V, E)$. Denotamos $e_S(v) = \max \{d_G(v, u) : u \in S\}$ e $c_e^S = \frac{1}{e_S(v)}$.

Definição 7.2.15. *Seja S um conjunto de vértices de um grafo conexo $G = (V, E)$. Um vértice $v_i \in S$ é chamado vértice de contorno de S se $e_S(v_i) \geq e_S(v_j)$ para todo vizinho v_j de v_i em S . O conjunto de todos os vértices de contorno de S é chamado o conjunto de contorno de S e denotado por $Ct(S)$. Escrevemos $Ct(G)$ quando $S = V$.*

Exemplo 7.2.16. *No grafo apresentado na Figura 7.5, o conjunto dos pontos extremos de G se resume ao vértice v_1 , não sendo, portanto, nem um conjunto geodésico nem envoltório de G . Por outro lado, os vértices apresentam as seguintes excentricidades:*

$e(v_1)$	$e(v_2)$	$e(v_3)$	$e(v_4)$	$e(v_5)$	$e(v_6)$	$e(v_7)$	$e(v_8)$
4	3	3	2	3	4	3	3

Logo, $Ct(G) = \{v_1, v_2, v_6, v_8\}$, que é geodésico e envoltório.

Proposição 7.2.17. [131] *Seja $G = (V, E)$ um grafo conexo e $S \subset V(G)$. Então o contorno de S contém todos os vértices extremos de S .*

Teorema 7.2.18. [131] *Seja $G = (V, E)$ um grafo conexo e $S \subset V(G)$. Então $[Ct(S)] = S$, ou seja, o conjunto de contorno de S é um conjunto envoltório de S .*

Em particular, tomando $S = V(G)$, o último teorema garante que o conjunto de contorno de um grafo é sempre um conjunto envoltório.

Num segundo momento, CÁCERES *et al.* [131] propuseram a discussão sobre a possibilidade do conjunto de contorno também ser um conjunto geodésico para qualquer grafo, o que representaria reconstruir o conjunto de vértices de qualquer grafo utilizando o conjunto de contorno e um operador mais "fraco", quando comparado ao operador envoltória. A resposta veio de forma negativa (Figura 7.6). Tal fato motivou que introduzissem a seguinte pergunta: *Para quais classes de grafos*

o contorno é um conjunto geodésico? A questão foi abordada no contexto dos grafos perfeitos. Após contribuições para esta questão no próprio artigo, em 2008 CÁCERES *et al.* [130] apresentaram o diagrama da Figura 7.7 apontando o andamento do problema. Em 2013, ARTIGAS *et al.* [132] completaram o diagrama: com resposta positiva no caso dos grafos cocordais e não necessariamente no caso dos grafos bipartidos e, portanto, dos grafos paridade.

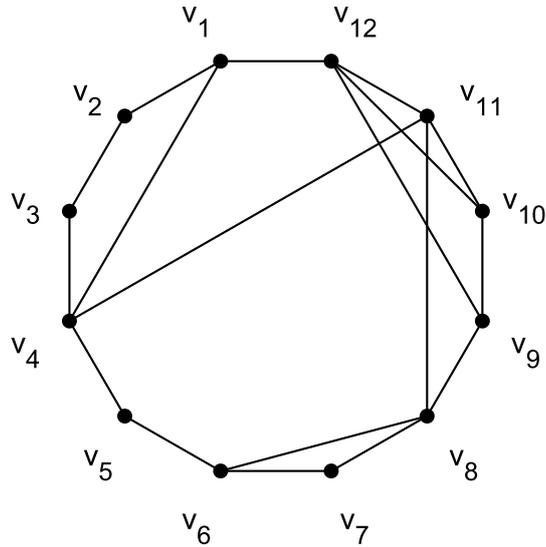


Figura 7.6: $Ct(G) = \{v_2, v_7, v_9\}$ e $v_{10} \notin I[Ct(G)]$.

A discussão sobre conjuntos geodésicos não se restringiu ao conjunto dos pontos extremos e de contorno. CÁCERES *et al.* [133] e HERNANDO *et al.* [134] estudaram a relação do conjunto de contorno e extremo de um grafo com outros conjuntos: conjunto dos vértices periféricos, excentricidade e conjunto de fronteira de um grafo. Desta forma, obtiveram relações entre tais conjuntos bem como condições para obtenção de conjuntos geodésicos. Optamos por não formalizar tais conceitos neste trabalho, apesar de também desempenharem um papel importante no contexto dos conjuntos geodésicos, nem apresentar os resultados a que nos referimos, pois não utilizamos, de forma direta, neste momento.

Os fatos e questões apresentados justificam não só a relevância do estudo a respeito da determinação e busca de propriedades do conjunto de contorno de um grafo como também, de forma mais geral, da possibilidade de grafos possuírem subconjuntos de vértices geodésicos ou envoltórios. Isto, junto a ausência de qualquer tratamento do problema através da Teoria Espectral de Grafos, responsável pelo desenvolvimento de diversas áreas da Teoria de Grafos, nos motivaram a estudar este assunto sob esta nova ótica. Após diversas tentativas de caracterizar o conjunto de contorno ou dos vértices extremos de um grafo através de propriedades espectrais, ainda não conseguimos compreender se isto é possível e como fazê-lo. No entanto,

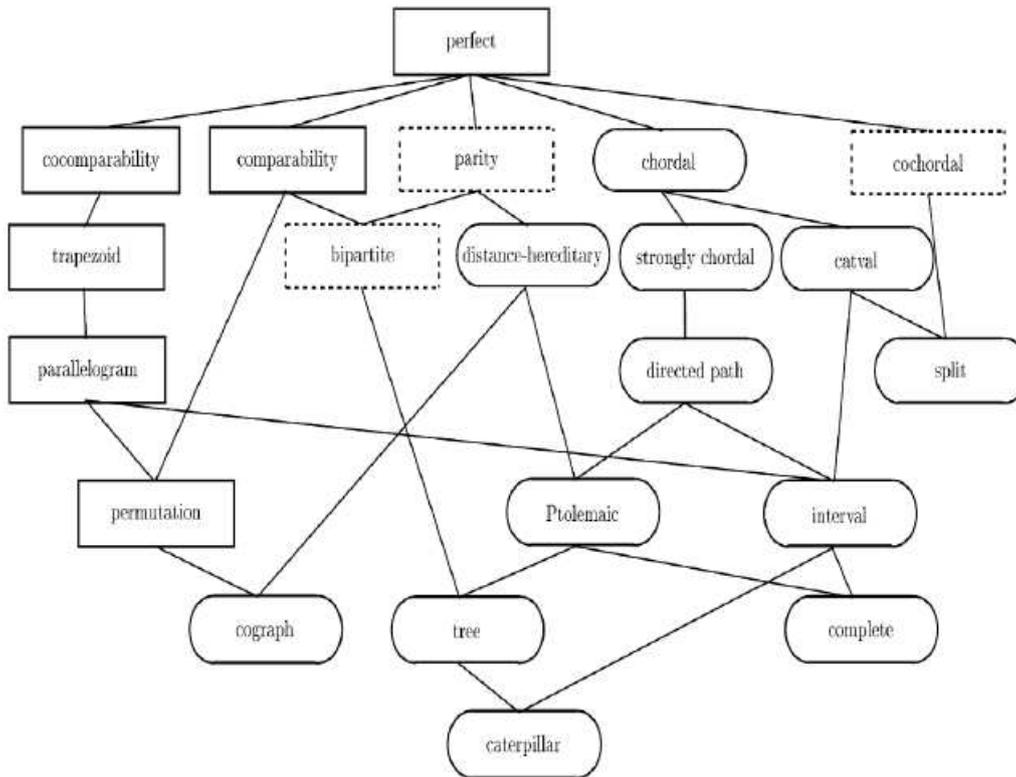


Figura 7.7: O contorno é geodésico? Sim para os arredondados, não necessariamente para os retângulos sólidos e está em aberto para os retângulos tracejados.

fizemos alguns avanços sobre este assunto.

É interessante notar que se $G = (V, E)$ é um grafo conexo então um subconjunto $S \subset V(G)$ é convexo se, e somente se, contém todos os caminhos geodésicos entre os pares de vértices de S . Logo, se $S \subset V(G)$ é convexo então dados $v_i, v_j \in S$ temos $d_G(v_i, v_j) = d_H(v_i, v_j)$, onde H é o subgrafo induzido por S . Isto implica, em particular, na matriz distância do subgrafo induzido por um subconjunto convexo ser uma submatriz principal da matriz distância de G . Esta seria, portanto, uma condição necessária para um subconjunto ser convexo, embora não seja suficiente (Figura 7.8).

Mais ainda, através do Teorema 2.1.5, também conseguimos a seguinte condição necessária sobre os autovalores distância de um grafo e de um subgrafo induzido por um subconjunto de vértices, para que este último seja convexo:

Proposição 7.2.19. *Seja $G = (V, E)$ um grafo conexo com n vértices e $S \subset V(G)$ um subconjunto de cardinalidade m . É uma condição necessária para S ser convexo que os autovalores de G e $G \langle S \rangle$ satisfaçam a seguinte propriedade:*

$$\rho_{n-k+i}(G) \leq \rho_i(G \langle S \rangle) \leq \rho_i(G) \quad \forall \quad i = 1, \dots, m.$$

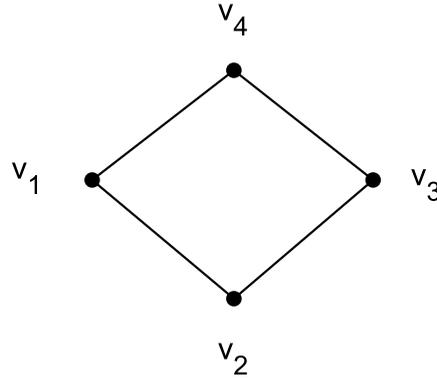


Figura 7.8: Grafo G cujo subgrafo induzido por $S = \{v_1, v_2, v_3\}$ tem como matriz distância uma submatriz principal de $\mathcal{D}(G)$, embora S não seja um subconjunto convexo.

Observemos também que a definição de vértice de contorno de $V(G)$ poderia ser feita, equivalentemente, utilizando-se a medida de centralidade de eficiência de um grafo. De fato, dados $v_i, v_j \in V$ temos

$$e(v_i) \geq e(v_j) \iff \frac{1}{e(v_i)} \leq \frac{1}{e(v_j)} \iff c_e(v_i) \leq c_e(v_j).$$

Logo, poderíamos definir de forma equivalente:

Definição 7.2.20. *Seja S um conjunto de vértices de um grafo conexo $G = (V, E)$. Um vértice $v_i \in S$ é chamado vértice de contorno de S se $c_e^S(v_i) \leq c_e^S(v_j)$ para todo vizinho v_j de v_i em S .*

Considerando a natureza da medida de eficiência, tornam-se naturais as perguntas:

- Que tipos de conjuntos obteríamos utilizando definição análoga à considerada para conjunto de contorno mas considerando, no lugar da medida de eficiência, a medida de proximidade ou de proximidade espectral (medidas de mesma natureza da eficiência)?
- Os novos conjuntos obtidos são bons candidatos a conjuntos geodésicos ou envoltórios de um grafo?

Tendo em vista a possibilidade da medida de proximidade espectral, introduzida neste trabalho, distinguir melhor os vértices de uma rede quando comparada às medidas de eficiência ou proximidade, no sentido de apresentar uma menor quantidade de vértices com mesmo valor de centralidade sem que ocupem posições “equivalentes” no grafo, e vislumbrando a possibilidade de utilizar técnicas da teoria espectral

de grafos para o desenvolvimento da teoria de convexidade, propomos a seguinte definição:

Definição 7.2.21. *Dado um grafo $G = (V, E)$ e $S \subset V(G)$, dizemos que $v_i \in S$ é um vértice de contorno espectral de S se $c_{pe}(v_i) \leq c_{pe}(v_j)$ para todo vizinho v_j de v_i em S .*

Note que, se $v_i, v_j \in V(G)$ e $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ é o autovetor unitário associado ao índice ∂ da matriz $\mathcal{D}(G)$, então

$$c_{pe}(v_i) \leq c_{pe}(v_j) \iff \frac{1}{x_i} \leq \frac{1}{x_j} \iff x_j \geq x_i.$$

Baseados na definição já consagrada de conjunto de contorno e evitando a utilização dos inversos presentes na centralidade de proximidade espectral apresentamos abaixo uma definição equivalente para conjunto de contorno espectral, que adotamos a partir de agora.

Definição 7.2.22. *Seja S um conjunto de vértices de um grafo conexo $G = (V, E)$, de ordem n , e $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ o autovetor unitário associado ao índice ∂ da matriz $\mathcal{D}(G)$. Um vértice $v_i \in S$ é chamado vértice de contorno espectral de S se $x_i \geq x_j$ para todo vizinho v_j de v_i em S . O conjunto de todos os vértices de contorno espectral de S é chamado o conjunto de contorno espectral de S e denotado por $Ct_e(S)$. Escrevemos $Ct_e(G)$ quando $S = V$.*

Observação 7.2.23. *A definição de contorno espectral independe da normalização escolhida para o autovetor principal.*

Dado grafo $G = (V, E)$, uma condição necessária para que um subconjunto de V seja envoltório ou geodésico é conter todos os vértices pendentes de G . De fato, os vértices pendentes não fazem parte de nenhum caminho geodésico que não os tenha como extremo. A próxima proposição garante que o conjunto de contorno espectral de um grafo conexo possui tal propriedade.

Proposição 7.2.24. *Seja $G = (V, E)$ grafo conexo com $v_p, v_q \in V(G)$ tais que v_p seja um vértice pendente de G e v_q seu único vértice adjacente. Se $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ é o autovetor unitário associado ao índice ∂ da matriz distância de G e y_p, y_q são as entradas do autovetor principal associadas aos vértices v_p e v_q , respectivamente, então $y_p \geq y_q$. Mais ainda, a igualdade ocorre se, e somente se, $G \cong K_2$.*

Demonstração. Sem perda de generalidade basta mostrarmos o resultado para a norma 1. Do fato de $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ ser autovetor principal temos

$$\mathcal{D}\mathbf{Y} = \partial\mathbf{Y} \implies \sum_{k=1, k \neq p}^n d_{p,k}y_k = \partial y_p \quad \text{e} \quad \sum_{k=1, k \neq q}^n d_{q,k}y_k = \partial y_q,$$

isto é,

$$\partial y_p = y_q + \sum_{k=1, k \neq p, q}^n d_{p,k} y_k \quad \text{e} \quad \partial y_q = y_p + \sum_{k=1, k \neq p, q}^n d_{q,k} y_k. \quad (7.4)$$

já que $d_{p,q} = 1$. Mas, sendo v_p um vértice pendente e tal que seu único vizinho é v_q , temos

$$d_{p,k} = d_{q,k} + 1$$

sempre que $k \neq p, q$. Segue, portanto, da equação (7.4) que

$$\partial y_p = y_q + \sum_{k=1, k \neq p, q}^n (d_{q,k} + 1) y_k \implies \partial y_p = y_q + \sum_{k=1, k \neq p, q}^n d_{q,k} y_k + \sum_{k=1, k \neq p, q}^n y_k. \quad (7.5)$$

Logo,

$$\partial(y_p - y_q) = y_q - y_p + \sum_{k=1, k \neq p, q}^n y_k = 1 - 2y_p$$

já que $\|\mathbf{Y}\|_1 = 1$.

Como $\partial > 0$,

$$(y_p - y_q) \geq 0 \iff 1 - 2y_p \geq 0 \iff y_p \leq \frac{1}{2}$$

e o resultado segue do Corolário 6.3.4. □

Exibimos agora alguns exemplos onde foram determinados os conjuntos de contorno espectral de grafos.

Exemplo 7.2.25. *No grafo da Figura 7.6 temos :*

- $Ct(G) = \{v_2, v_7, v_9\}$, $v_{10} \notin I[Ct(G)]$ e $[Ct(G)] = V(G)$;
- $Ct_e(G) = \{v_2, v_7, v_{10}\}$ e $I[Ct_e(G)] = [Ct_e(G)] = V(G)$.

Logo, apesar do conjunto de contorno não ser geodésico, o conjunto de contorno espectral possui tal propriedade e a mesma cardinalidade.

Exemplo 7.2.26. *No grafo da Figura 7.9 temos :*

- $Ct(G) = \{v_4, v_8, v_{10}\}$, $v_7 \notin I[Ct(G)]$ e $[Ct(G)] = V(G)$;
- $Ct_e(G) = \{v_4, v_8, v_{10}\}$, $v_7 \notin I[Ct_e(G)]$ e $[Ct_e(G)] = V(G)$.

Logo, os conjuntos de contorno e contorno espectral coincidem e são envoltórios, embora não sejam geodésicos.

Exemplo 7.2.27. *No grafo da Figura 7.2 temos :*

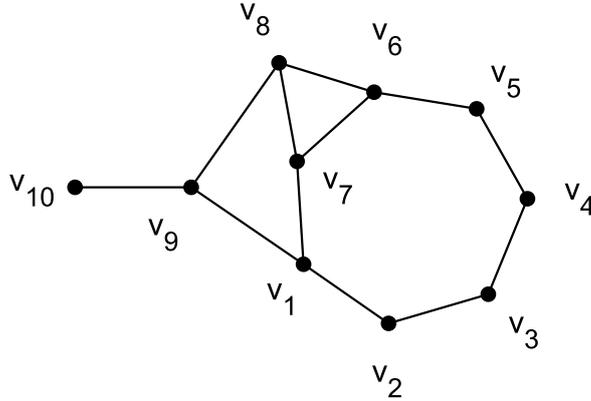


Figura 7.9: $[Ct(G)] = [Ct_e(G)] = V(G)$

- $Ct(G) = \{v_3, v_4, v_8, v_9\}$ e $I[Ct(G)] = [Ct(G)] = V(G)$;
- $Ct_e(G) = \{v_4, v_9\}$, $v_7 \notin I[Ct_e(G)]$ e $[Ct_e(G)] = V(G)$.

Logo, o conjunto de contorno é geodésico enquanto o conjunto de contorno espectral não. Apesar disto, vale ressaltar que mesmo com a exclusão de dois vértices, v_8 e v_9 , de $Ct(G)$ ainda teríamos um conjunto geodésico. Portanto, a cardinalidade deste conjunto é maior que a necessária para um conjunto geodésico. Por outro lado, com o acréscimo de apenas um vértice, v_7 , ao conjunto $Ct_e(G)$ também teríamos um conjunto geodésico.

Mais ainda, é interessante notar que o vértice v_3 possui a maior excentricidade no grafo e $v_3 \in Ct(G)$ com $e(v_3) > e(v_2)$ e $e(v_3) = e(v_4)$. Apesar disto, e mesmo possuindo a segunda maior entrada do autovetor principal de $\mathcal{D}(G)$, $v_3 \notin Ct_e(G)$ já que o vértice v_4 tem, de forma estrita, a maior entrada do autovetor principal de \mathcal{D} . Fato similar ocorre com os vértices v_8 e v_9 e justifica a inclusão de v_8 no conjunto $Ct(G)$ e sua exclusão do conjunto $Ct_e(G)$. Tais fatos exemplificam que, possivelmente, a redução da quantidade de vértices com mesma excentricidade, quando comparada à quantidade de vértices com mesma entrada no autovetor principal, já comentada anteriormente, resulte também em uma redução na cardinalidade de $Ct_e(G)$, quando comparada a cardinalidade de $Ct(G)$, em muitos casos.

Exemplo 7.2.28. Em ARTIGAS et al. [132] foi demonstrado que se G é um grafo bipartido tal que $\text{diam}(G) \leq 7$, então $Ct(G)$ é geodésico. Foi exibido também, para cada $k \geq 8$, um grafo bipartido com $\text{diam}(G) = k$ cujo contorno não é geodésico. Para o caso onde $\text{diam}(G) = 8$ (Figura 7.10) temos:

- $Ct(G) = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\}$, $v_6 \notin I[Ct(G)]$ e $[Ct(G)] = V(G)$;
- $Ct_e(G) = \{v_3, v_4, v_5, v_6, v_7\}$, e $I[Ct_e(G)] = [Ct_e(G)] = V(G)$.

Novamente, apesar do conjunto de contorno não ser geodésico, o conjunto de contorno espectral possui tal propriedade e a mesma cardinalidade. Já a Figura 7.11 exibe um grafo bipartido de diâmetro 7, onde vale:

- $Ct(G) = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_9, v_{14}, v_{17}\}$ e $I[Ct(G)] = [Ct(G)] = V(G)$;
- $Ct_e(G) = \{v_3, v_4, v_5, v_{14}, v_{17}\}$, e $I[Ct_e(G)] = [Ct_e(G)] = V(G)$.

Assim, embora ambos os conjuntos sejam geodésicos e envoltórios, o conjunto de contorno espectral possui menor cardinalidade. Vale ressaltar que $v_2 \in Ct(G)$ com $e(v_2) = e(v_3) = e(v_{15}) = 6$ mas não é um vértice de contorno espectral já que $x_2 < x_3$. Situação análoga ocorre com o vértice v_9 que tinha $e(v_9) = e(v_{10}) > e(v_8)$ mas ocorre $x_9 < x_{10}$.

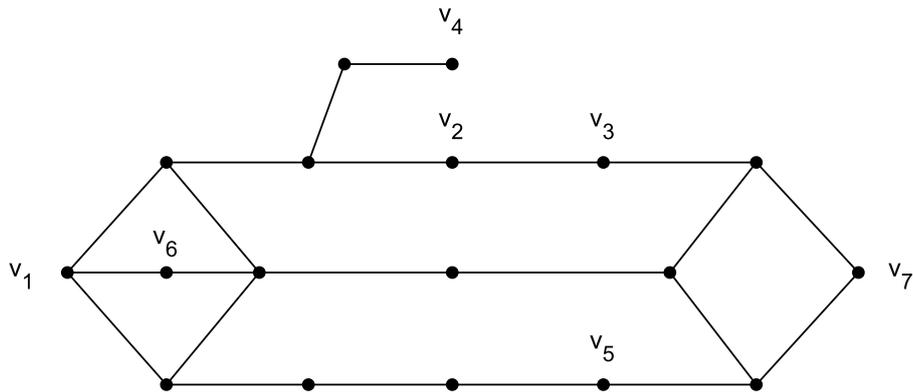


Figura 7.10: Grafo que possui conjunto de contorno não geodésico e conjunto de contorno espectral geodésico.

Encerramos nossos exemplos com os grafos presentes das Figuras 3.1 e 3.2, que possuem exatamente uma dentre as propriedades de regularidade na transmissão e no grau.

Exemplo 7.2.29. O grafo da Figura 3.1 é transmissão regular (apesar de não ser regular). Logo, todas as linhas da matriz distância têm soma constante e todas as entradas do seu autovetor principal são iguais. Todos os vértices deste grafo também têm excentricidade quatro. Logo,

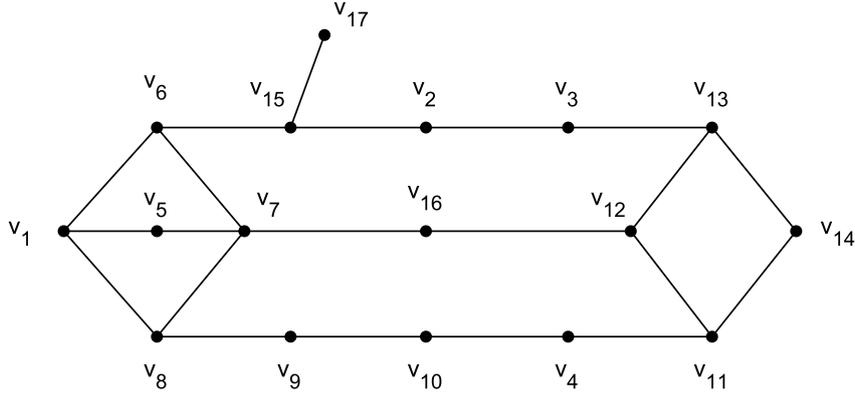


Figura 7.11: Grafo cujo conjunto de contorno espectral, geodésico, tem cardinalidade menor que o conjunto de contorno, também geodésico.

- $Ct(G) = V(G)$ e $I[Ct(G)] = [Ct(G)] = V(G)$;
- $Ct_e(G) = V(G)$ e $I[Ct_e(G)] = [Ct_e(G)] = V(G)$.

Já no caso do Exemplo 3.2, apesar do grafo ser regular e da excentricidade ser constante, igual a 4, sua transmissão não é regular. Assim, seu autovetor principal não possui todas as entradas idênticas e, portanto, a medida de proximidade espectral não é constante. Temos, portanto:

- $Ct(G) = V(G)$ e $I[Ct(G)] = [Ct(G)] = V(G)$;
- $Ct_e(G) = V(G) - \{v_3, v_6, v_8, v_{12}\}$ e $I[Ct_e(G)] = [Ct_e(G)] = V(G)$.

Com os exemplos acima fica claro não ser possível fazer relações de inclusão entre o conjunto de contorno e conjunto de contorno espectral de um grafo, no caso geral. Também já podemos afirmar que, assim como o conjunto de contorno, o conjunto de contorno espectral não é geodésico no caso geral. Apesar disto, tais exemplos nos levam a crer que este conjunto pode desempenhar papel importante na teoria de convexidade em grafos. Nos exemplos que geramos até o momento, mesmo os não inclusos neste trabalho, ainda não obtivemos exemplo onde o conjunto de contorno espectral não é envoltório nem exemplo onde a cardinalidade do conjunto de contorno espectral seja maior que a cardinalidade do conjunto de contorno.

7.3 Propostas para trabalhos futuros

Embora a medida de proximidade espectral proposta pareça ordenar de forma mais refinada os vértices de um grafo, quando comparada a medida de proximidade e a de eficiência, já provamos que na classe dos grafos *threshold* as ordenações das duas primeiras coincidem. Neste sentido, permanecemos interessados nas seguintes questões:

- Existem outras classes de grafos onde a ordenação das centralidades de proximidade e proximidade espectral (ou a ordenação das transmissões e das entradas do autovetor principal) coincidem?
- É possível descrever, de forma mais precisa, que tipo de grafos satisfazem as hipóteses da condição exibida no Teorema 7.1.25?

Quanto ao Teorema 7.1.20, pensamos em obter uma cota inferior mais geral para a menor entrada do autovetor principal da matriz distância de um grafo conexo, que nos permita discutir em quais casos a medida de proximidade espectral se torna uma centralidade de nó.

Finalmente, pretendemos comparar o comportamento da medida de proximidade espectral e de eficiência em determinadas classes de grafos. Observemos que, avançar nesta questão significa compreender melhor, também, os conjuntos de contorno e de contorno espectral, proposto na Seção 7.2. Sobre este conjunto, as seguintes questões ficam em aberto:

- É possível estabelecer relações de inclusão entre os conjuntos de contorno e conjunto de contorno espectral em determinadas classes de grafos?
- O conjunto de contorno espectral é sempre envoltório?
- O Exemplo 7.9 mostra que o conjunto de contorno espectral nem sempre é geodésico. Procedendo de forma análoga ao proposto em CÁCERES *et al.* [131], torna-se natural a pergunta : em quais subclasses dos grafos perfeitos o conjunto de contorno espectral é geodésico, isto é, como ficaria o diagrama trazido na Figura, 7.7, considerando o conjunto que introduzimos?
- Nos casos em que tanto o conjunto de contorno como o de contorno espectral são geodésicos, é possível decidir qual dos conjuntos tem menor cardinalidade em classes de grafos específicas? E no caso em que ambos os conjuntos são envoltórios?

Considerando a pergunta deixada em CÁCERES *et al.* [131] a respeito da existência de grafo tal que $I[I[Ct(G)]] = I^2[Ct(G)] \neq V(G)$, pensamos em estudar esta questão no caso do conjunto de contorno espectral (em todos os exemplos deste texto $I^2[Ct_e(G)] = V(G)$).

Por fim, pensamos em estudar a convexidade P_3 a partir da Teoria Espectral de Grafos.

Capítulo 8

Considerações finais

Neste trabalho fazemos uma revisão de definições e resultados já presentes na literatura a respeito da matriz distância e suas laplacianas, medidas de centralidade e teoria de convexidade em grafos. Além disto, conseguimos obter diversos resultados inéditos envolvendo as laplacianas da matriz distância de um grafo e propomos duas novas definições, ligadas à medida de centralidade e à teoria de convexidade em grafos.

No Capítulo 3, trazemos na primeira seção a relação existente entre o índice de Wiener e a soma dos autovalores das laplacianas associadas a matriz distância de um grafo (Proposição 3.2.4). No caso específico das árvores mostramos que também há relação com a soma dos inversos dos autovalores laplacianos não nulos (Corolário 3.2.5). Tais fatos nos permitem não apenas obter novas cotas para a soma dos autovalores das laplacianas associadas à matriz distância de um grafo, ainda que como consequências imediatas de resultados já conhecidos a respeito do índice de Wiener [58], como também fornecem uma ferramenta para estudo de coespectralidade de grafos, no caso particular das matrizes distância laplaciana e distância laplaciana sem sinal, problema destacado em [11].

Na primeira seção do quarto capítulo, publicada em [23], construímos uma abordagem geral para resolver a Conjectura 4.0.2, que nos possibilita não apenas resolver este problema, aberto até então, como oferece demonstrações novas, e mais simples, para a Conjectura 4.0.1 e o Teorema 4.0.4. Na segunda seção, que compõe trabalho submetido em [24], estudamos a influência de um subgrafo induzido isomorfo a P_4 ou a P_5 no \mathcal{D}^L -espectro de um grafo conexo. Em particular, resolvemos a Conjectura 3.1.22, até então em aberto.

O quinto capítulo, cujos resultados foram submetidos em [25], é voltado à discussão da \mathcal{D}^L -integralidade e a \mathcal{D}^Q -integralidade. Provamos que, considerando os grafos de diâmetro 2, os grafos distância laplacianos integrais e os laplacianos integrais são os mesmos. Além disto, no caso da integralidade relativa à matriz distância laplaciana sem sinal, exibimos condições necessárias e suficientes para que grafos ob-

tidos a partir de determinadas operações com grafos regulares sejam \mathcal{D}^Q -integrals. Com isto determinamos, por exemplo, os únicos valores de $n \in \mathbb{N}$ para os quais o grafo estrela e o grafo roda são \mathcal{D}^Q -integrals. Também construímos famílias infinitas de grafos \mathcal{D}^Q -integrals nas classes dos grafos *split* completos, multi-completo similar *split*, completo-estendido similar *split* e multi-completo-estendido similar *split*. Ainda neste capítulo discutimos a \mathcal{D}^Q -integralidade para $K_{n_1} \vee (K_{n_2} \cup K_{n_3})$, e também exibimos famílias infinitas de grafos \mathcal{D}^Q -integrals deste tipo.

No sexto capítulo, que traz os resultados, de nossa autoria, publicados em [27], obtemos novas cotas para a maior e menor entradas do autovetor principal da matriz distância laplaciana sem sinal. Embora os resultados sejam parcialmente motivados pelas técnicas utilizadas por DAS [26], apresentamos um contra-exemplo (Exemplo 6.1.2) a um dos teoremas centrais lá presentes (Teorema 6.1.1) e, na sequência, corrigimos o resultado. Para isto, introduzimos e estabelecemos propriedades da família de grafos $\mathcal{G}(n, \alpha, *)$. Também obtemos nesta seção uma cota simples, porém inédita, para o índice da matriz distância sem sinal em função do número de vértices do grafo e seu número de independência (Corolário 6.1.6).

No Capítulo 7, voltamos nossa atenção a possíveis aplicações da matriz distância de um grafo, com enfoque em dois tópicos: medidas de centralidade e convexidade em grafos. No caso das medidas de centralidade, assunto da Seção 7.1, propusemos uma nova medida de centralidade: proximidade espectral (Definição 7.1.9). Os exemplos até então gerados nos levam a crer que esta possa ser uma medida que diferencia os vértices de um grafo de forma mais refinada quando comparadas às medidas de excentricidade e proximidade. Diversas propriedades a respeito desta nova medida são apresentadas e uma condição suficiente para que o mesmo vértice possua a maior centralidade de proximidade e de proximidade espectral é exibida. A construção desta condição também nos possibilita conseguir uma nova cota simples para o raio espectral da matriz distância de um grafo conexo (Teorema 7.1.21), que incrementa a cota exibida no Teorema 3.1.11. Provamos ainda que, na família dos grafos *threshold*, a ordenação de vértices apresentadas pelas medidas de proximidade e proximidade espectral coincidem (Teorema 7.1.30). Na Seção 7.2, onde discutimos convexidade em grafos, exibimos (Proposição 7.2.19) uma condição necessária sobre os autovalores distância de um grafo e de um subgrafo induzido por um subconjunto de vértices, para que este último seja convexo. Também definimos o conjunto de contorno espectral (Definição 7.2.22). Embora este não seja sempre um conjunto geodésico para um grafo, demonstramos que ele satisfaz uma condição necessária para que isto ocorra (Proposição 7.2.24). Baseando-nos nos exemplos gerados, acreditamos ser um conjunto que pode contribuir para o estudo da convexidade em grafos.

Referências Bibliográficas

- [1] MIHALIC, Z., VELJAN, D., AMIC, D., et al. “The distance matrix in chemistry”, *J. Math. Chem.*, v. 11, pp. 223–258, 1992.
- [2] CAYLEY, A. “A theorem in the geometry of position”, *Cambridge Math. J.*, v. 2, pp. 267–271, 1841.
- [3] BRUNEL, M. *Mémoires. Soc. Sci. Bordeaux*, 1895.
- [4] GRAHAM, R., POLLACK, H. “On the addressing problem for loop switching”, *Bell System Tech*, v. 50, pp. 2495–2519, 1971.
- [5] ELZINGA, R., GREGORY, D., MEULEN, K. V. “Addressing the Petersen graph”, *Discrete Math.*, v. 286, pp. 241–244, 2004.
- [6] DEZA, M., LAURENT, M. *Geometry of Cuts and Metrics*. Berlin, Springer, 1997.
- [7] ZHOU, B., TRINAJSTIĆ, N. “Mathematical properties of molecular descriptors based on distances”, *Croatica Chemica Acta*, v. 83, pp. 227–242, 2010.
- [8] GUTMAN, I., MEDELEANU, M. “On structure-dependence of the largest eigenvalue of the distance matrix of an alkane”, *Indian Journal of Chemistry -Section A*, v. 37, pp. 569–573, 1998.
- [9] BURTON, D., TOINT, P. “The inverse shortest paths problem with upper bounds on shortest paths costs”, *Network Optim.*, v. 1, pp. 156–171, 1997.
- [10] AOUCHICHE, M., HANSEN, P. “Distance spectra of graphs: A survey”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 458, pp. 301–386, 2014.
- [11] AOUCHICHE, M., HANSEN, P. “Two Laplacians for the distance matrix of a graph”, *Linear Algebra Appl*, v. 439, n. 1, pp. 21–33, 2013.
- [12] AOUCHICHE, M., HANSEN, P. “Some properties of the distance Laplacian eigenvalues of a graph”, *Czechoslovak Mathematical Journal*, v. 64, n. 3, pp. 751–761, 2014.

- [13] AOUCHICHE, M., HANSEN, P. *A Signless Laplacian for the Distance Matrix of a Graph*. In: Report G-2011-78, GERAD-HEC, Montreal, 2011.
- [14] XING, R., ZHOU, B. “Sharp bounds for the spectral radius of nonnegative matrices”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 449, pp. 194–209, 2014.
- [15] HONG, W., YOU, L. “Some sharp bounds on the distance signless Laplacian spectral radius of graphs”, <http://arxiv.org/pdf/1308.3427v1.pdf>, 2013.
- [16] XING, R., ZHOU, B. “On the distance and distance signless Laplacian spectral radii of bicyclic graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 439, pp. 3955–3963, 2013.
- [17] NIU, A., FAN, D., WANG, G. “On the distance Laplacian spectral radius of bipartite graphs”, *Discrete Applied Mathematics*, v. 186, pp. 207–213, 2015.
- [18] TIAN, F., WONG, D., ROU, J. “Proof for four conjectures about the distance Laplacian and distance signless Laplacian eigenvalues of a graph”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 471, pp. 10–20, 2015.
- [19] DAS, K. C. “Proof of conjectures on the distance signless Laplacian eigenvalues of graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 467, pp. 100–115, 2015.
- [20] XING, R., ZHOU, B., LI, J. “On the distance signless Laplacian spectral radius of graphs”, *Linear and Multilinear Algebra*, v. 62, n. 10, pp. 1377–1387, 2014.
- [21] LI, X., FAN, Y., ZHA, S. “A Lower Bound for the Distance Signless Laplacian Spectral Radius of Graphs in Terms of Chromatic Number”, *Journal of Mathematical Research with Applications*, v. 34, n. 3, pp. 289–294, 2014.
- [22] LIN, H., LU, X. “Bounds on the distance signless Laplacian spectral radius in terms of clique number”, *Linear and Multilinear Algebra*, v. 63, n. 9, pp. 1750–1759, 2015.
- [23] DA SILVA JUNIOR, C. M., NIKIFOROV, V. “Graph functions maximized on a path”, *aceito para publicação em Linear Algebra and its Applications*, 2014.
- [24] DA SILVA JUNIOR, C. M., DE FREITAS, M. A. A., DEL-VECCHIO, R. R. “A note on a conjecture for the distance Laplacian matrix”, *submetido*, 2015.

- [25] DA SILVA JUNIOR, C. M., DE FREITAS, M. A. A., DEL-VECCHIO, R. R. “ \mathcal{D}^L -integral and \mathcal{D}^Q -integral graphs”, *submetido*, 2015.
- [26] DAS, K. C. “Maximal and minimal entry in the principal eigenvector for the distance matrix of a graph”, *Discr. Math*, v. 311, pp. 2593–2600, 2011.
- [27] DAS, K. C., DA SILVA JUNIOR, C. M., DE FREITAS, M. A. A., et al. “Bounds on the entries of the principal eigenvector of the distance signless Laplacian matrix”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 483, pp. 200–220, 2015.
- [28] SILVA JUNIOR, C. M., BOAVENTURA-NETTO, P. O., JURKIEWICZ, S. “Coligações Partidárias Governamentais em 2010: Uma Visão Através da Teoria de Grafos”, *Pesquisa Operacional para o Desenvolvimento*, v. 5, pp. 245–265, 2013.
- [29] HORN, R. A., JOHNSON, C. R. *Matrix Analysis*. 2 ed. New York, Cambridge University Press, 2012.
- [30] ORTEGA, J. M. *Matrix Theory: A Second Course*. 1 ed. New York, Plenum Press, 1987.
- [31] DE FREITAS, M. A. A. *Grafos Integrais e Grafos Laplacianos Integrais*. Tese de D.Sc., Engenharia de Produção - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2009.
- [32] MINC, H. *Nonnegative Matrices*. 1 ed. New York, John Wiley and Sons Inc., 1988.
- [33] DIESTEL, R. *Graph Theory*. 4 ed. Heidelberg, Springer-Verlag, 2000.
- [34] BOAVENTURA NETTO, P. O. *Grafos: Teoria, Modelos, Algoritmos*. Ed. Edgard Blucher LTDA, 2003.
- [35] HOWORKA, E. “A characterization of distance hereditary graphs”, *The Quarterly Journal of Mathematics*, v. 28, pp. 417–420, 1977.
- [36] CVETKOVIĆ, D., DOOB, M., SACHS, H. *Spectra of Graphs - Theory and Applications*. 3 ed. Heidelberg-Leipzig, Johann Ambrosius Barth Verlag, 1995.
- [37] GRAHAM, R., LOVÁSZ, L. “Distance matrix polynomials of trees”, *Adv. Math.*, v. 29, pp. 60–88, 1978.

- [38] EDELBERG, M., GAREY, M., GRAHAM, R. “On the distance matrix of a tree”, *Discrete Math*, v. 14, pp. 23–39, 1976.
- [39] HOSOYA, H., MURAKAMI, M., GOTOH, M. “Distance polynomial and characterization of a graph”, *Natur. Sci. Rep. Ochanomizu Univ.*, v. 24, pp. 27–34, 1973.
- [40] BAPAT, R. “Determinant of the distance matrix of a tree with matrix weights”, *Linear Algebra Appl*, v. 416, pp. 2–7, 2006.
- [41] BAPAT, R., KIRKLAND, S., NEUMANN, M. “On distance matrices and Laplacians”, *Linear Algebra Appl*, v. 401, pp. 193–209, 2005.
- [42] BAPAT, R., LAL, A., PATI, S. “A q-analogue of the distance matrix of a tree”, *Linear Algebra Appl*, v. 416, pp. 799–814, 2006.
- [43] KLEIN, D. J., RANDIC, M. “Resistance distance”, *J. Math. Chem.*, v. 12, pp. 81–95, 1993.
- [44] HANDA, K. “Bipartite graphs with balanced (a, b)-partitions”, *Ars Combinatoria*, v. 51, pp. 113–119, 1999.
- [45] CABELLO, S., LUKSIC, P. “The complexity of obtaining a distance-balanced graph”, *Electron. J. Combin.*, v. 18, n. 1, pp. P49, 2011.
- [46] GUNTARD, H., PRIMAS, H. “Zusammenhang von graphtheorie und MOtheorie von molekeln mit systemen konjugierter bindungen”, *Helv. Chim.*, v. 39, pp. 1645–1653, 1956.
- [47] COLLATZ, L., SINOGOWITZ, U. “Spektren endlicher grafen”, *Abh. Math. Sem. Univ. Hamburg*, v. 21, pp. 63–77, 1957.
- [48] SCHWENK, A. “Almost all trees are cospectral”. In: *New Directions in the Theory of Graphs*, pp. 275–307, New York, 1976.
- [49] HAEMERS, W., SPENCE, E. “Enumeration of cospectral graphs”, *European J. Combin*, v. 25, pp. 199–211, 2004.
- [50] HALBEISEN, L., HUNGERBHLER, N. “Generation of isospectral graphs”, *J. Graph Theory*, v. 31, pp. 255–265, 1999.
- [51] MERRIS, R. “Large families of Laplacian isospectral graphs”, *Linear and Multilinear Algebra*, v. 43, pp. 201–205, 1997.
- [52] MERRIS, R. “Laplacian matrices of graphs: a survey”, *Linear Algebra Appl.*, v. 197/198, pp. 143–176, 1994.

- [53] TAN, J. “On isospectral graphs”, *Interdiscip. Inform. Sci.*, v. 4, pp. 117–124, 1998.
- [54] DAM, E. V., HAEMERS, W. “Which graphs are determined by their spectrum?” *Linear Algebra Appl*, v. 373, pp. 241–272, 2003.
- [55] MCKAY, B. “On the spectral characterisation of trees”, *Ars Combin*, v. 3, pp. 219–232, 1977.
- [56] FIEDLER, M. “Algebraic connectivity of graphs”, *Czechoslovak Math. J.*, v. 23, pp. 298–305, 1973.
- [57] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., SIMIĆ, S. “Existence Theorems in the Theory of Mixtures. Signless Laplacians of finite graphs”, *Linear Algebra Appl*, v. 423, n. 1, pp. 155–171, 2007.
- [58] DAS, K. C., GUTMAN, I. “Estimating the Wiener Index by Means of Number of Vertices, Number of Edges, and Diameter”, *Match*, v. 64, n. 3, pp. 647–660, 2010.
- [59] DOBRYNIN, A., ENTRINGER, R., GUTMAN, I. “Wiener index of trees: Theory and applications”, *Acta Applicandae Mathematica*, v. 66, n. 3, pp. 211–249, 2001.
- [60] INDULAL, G. “Sharp bounds on the distance spectral radius and the distance energy of graphs”, *Linear Algebra Appl*, v. 430, pp. 106–113, 2009.
- [61] BAPAT, R. B. *Graphs and Matrices*. 2 ed. London, Springer-Verlag, 2010.
- [62] ENTRINGER, R., JACKSON, D., SNYDER, D. “Distance in graphs”, *Czechoslovak Math. J.*, v. 26, pp. 283–296, 1976.
- [63] ZHANG, L., WU, B. “The Nordhaus-Gaddum-type inequalities for some chemical indices, MATCH Commun”, *Math. Comput. Chem.*, v. 54, pp. 183–194, 2005.
- [64] LEPOVIC, M., GUTMAN, I. “No starlike trees are cospectral”, *Discrete Mathematics*, v. 242, n. 1-3, pp. 291–295, 2002.
- [65] OMIDI, G., TAJBAKHS, K. “Starlike trees are determined by their Laplacian spectrum”, *Linear Algebra Appl*, v. 422, pp. 654–658, 2007.
- [66] OMIDI, G., VATANDOOST, E. “Starlike trees with maximum degree 4 are determined by their signless Laplacian spectra”, *Electronic Journal of Linear Algebra*, v. 20, pp. 274–290, 2010.

- [67] BU, C., ZHOU, J. “Starlike trees whose maximum degree exceed 4 are determined by their Q-spectra”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 436, pp. 143–151, 2012.
- [68] RUZIEH, S., POWERS, D. “The distance spectrum of the path and the first distance eigenvector of connected graphs”, *Linear and Multilinear Algebra*, v. 28, pp. 75–81, 1990.
- [69] STEVANOVIĆ, D., ILIĆ, A. “Distance spectral radius of trees with fixed maximum degree”, *Electron. J. Linear Algebra*, v. 20, pp. 168–179, 2010.
- [70] LOVÁSZ, L., PELICAN, J. “On the eigenvalues of trees”, *Periodica Math. Hung.*, v. 3, pp. 175–182, 1973.
- [71] PETROVIĆ, M., GUTMAN, I. “The path is the tree with smallest greatest Laplacian eigenvalue”, *Kragujevac J. Math.*, v. 24, pp. 67–70, 2002.
- [72] YAN, C. “Properties of spectra of graphs and line graphs”, *Appl. Math. J. Chinese Univ. Ser. B*, v. 17, pp. 371–371, 2002.
- [73] NATH, M., PAUL, S. “On the distance Laplacian spectra of graphs”, *Linear Algebra Appl.*, v. 460, pp. 97–110, 2014.
- [74] CORNEIL, D., LERCHS, H., BURLINGHAM, L. “Complement reducible graphs”, *Discrete Appl. Math.*, v. 3, pp. 163–174, 1981.
- [75] MERRIS, R. “Laplacian matrices of graphs: a survey”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 197–198, pp. 143–176, 1994.
- [76] HARARY, F., SCHWENK, A. “Which graphs have integral spectra?” *Graphs and Combinatorics*, v. 406, pp. 45–51, 1974.
- [77] BALIŃSKA, K., CVETKOVIĆ, D., RADOSAVLJEVIĆ, Z., et al. “A survey on integral graphs”, *Univ. Beograd. Publ. Elektrotehn. Fak. Ser. Mat.*, v. 13, pp. 42–65, 2002.
- [78] GRONE, R., MERRIS, R., SUNDERS, V. S. “The Laplacian spectrum of a graph II”, *SIAM J. Discrete Math.*, v. 7, pp. 221–229, 1994.
- [79] MERRIS, R. “Laplacian graph eigenvectors”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 278, pp. 221–236, 1998.
- [80] KIRKLAND, S., DE FREITAS, M. A. A., DEL-VECCHIO, R. R., et al. “Split Nonthreshold Laplacian Integral Graphs”, *Linear and Multilinear Algebra*, v. 58, pp. 221–233, 2010.

- [81] KIRKLAND, S. “Constructably Laplacian integral graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 243, pp. 3–21, 2007.
- [82] DE FREITAS, M. A. A., DE ABREU, N. M. M., DEL-VECCHIO, R. R., et al. “Infinite families of Q-integral graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 432, pp. 2353–2360, 2010.
- [83] ZHAO, G., WANG, L., LI, K. “Q-integral complete r-partite graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 438, pp. 1067–1077, 2013.
- [84] SIMIĆ, S., STANIĆ, Z. “Q-integral graphs with edge-degrees at most five”, *Discrete Math.*, v. 308, pp. 4625–4634, 2008.
- [85] POKORNÝA, M., HÍC, P., STEVANOVIĆ, D., et al. “On distance integral graphs”, *Discrete Mathematics*, v. 338, n. 10, pp. 1784–1792, 2015.
- [86] YANG, R., WANG, L. “Distance Integral Complete r-Partite Graphs”, *Filomat*, v. 29, pp. 739–749, 2015.
- [87] HANSEN, P., MELOT, H., STEVANOVIĆ, D. “Integral complete split graphs”, *Univ. Beograd, Publ. Elektrotehn. Fak. Ser. Mat.*, v. 13, pp. 89–95, 2002.
- [88] MERRIS, R. “The distance spectrum of a tree”, *J. Graph Theory*, v. 14, pp. 365–369, 1990.
- [89] STEVANOVIĆ, D., STANKOVIĆ, I., MILOSEVIĆ, M. “More on the relation between energy and Laplacian energy of graphs”, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, v. 61, n. 2, pp. 395–401, 2009.
- [90] DE FREITAS, M. A. A., DEL-VECCHIO, R. R., PATUZZI, L. “Integer indices and spectral properties for the KK_n^j graphs”, *Congressus Numerantium*, v. 212, pp. 119–129, 2012.
- [91] PAPENDIECK, B., RECHT, P. “On maximal entries in the principal eigenvector of graphs”, *Linear Algebra Appl*, v. 310, pp. 129–138, 2000.
- [92] ZHAO, S., HONG, Y. “On the bounds of maximal entries in the principal eigenvector of symmetric nonnegative matrix”, *Linear Algebra Appl*, v. 340, pp. 245–252, 2002.
- [93] CIOABA, S., GREGORY, D. “Principal eigenvectors of irregular graphs”, *Electronic Journal of Linear Algebra*, v. 16, pp. 366–379, 2009.

- [94] CIOABA, S. “A necessary and sufficient eigenvector condition for a graph to be bipartite”, *Electronic Journal of Linear Algebra*, v. 20, pp. 351–353, 2010.
- [95] DAS, K. C. “A sharp upper bound on the maximal entry in the principal eigenvector of symmetric nonnegative matrix”, *Linear Algebra Appl*, v. 431, pp. 1340–1350, 2009.
- [96] BAVELAS, A. “Communication patterns in task oriented groups”, *Journal of the Acoustical Society of America*, v. 22, pp. 725–730, 1950.
- [97] GONÇALVES, J. *Contribuição à Análise Quantitativa das Potencialidades do Trem de Passageiros em Integrar a Estrutura Urbana*. Tese de D.Sc., Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2007.
- [98] DEL VECHIO, R., LIMA, L., GALVÃO, D., et al. “Medidas de Centralidade da Teoria de Grafos aplicada a Fundos de Ações no Brasil”. In: *Anais do XLI Simpósio Brasileiro de Pesquisa Operacional*, pp. 237–253, Porto Seguro, 2009.
- [99] FAUST, K., WASSERMAN, S. *Social Network Analysis: Methods and Applications*. 1 ed. New York and Cambridge, Cambridge University Press, 1994.
- [100] KIRKLAND, S. “Algebraic connectivity for vertex-deleted subgraphs, and a notion of vertex centrality”, *Discrete Mathematics*, v. 310, n. 4, pp. 911–921, 2010.
- [101] BORGATTI, S. P. “Centrality and network flow”, *Social Networks*, v. 27, n. 1, pp. 55–71, 2005.
- [102] HUSSAIN, D. M. A. “Destabilization of Terrorist Networks through Argument Driven Hypothesis Model”, *Journal of software*, v. 2, n. 6, pp. 22–29, 2007.
- [103] WILF, H. S. “Searching the web with eigenvectors”, <https://www.math.upenn.edu/~wilf/website/KendallWei.pdf>, 2001.
- [104] BORGATTI, S. P. “Centrality and AIDS”, *Connections*, v. 18, n. 1, pp. 112–114, 1995.
- [105] QUINTANILHA, L. *Medidas de centralidades em grafos*. Dissertação de mestrado, COPPE/Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro - RJ, 2010.

- [106] SHAW, M. E. “Communication networks”. In: *ADVances in EXPERIMENTAL SOCIAL PSYCHOLOGY*, 1 ed., cap. 4, New York, Academics Press, INC, 1964.
- [107] BONACICH, S. P. “Power and Centrality: A Family of Measures”, *The American Journal of Sociology*, v. 92, n. 5, pp. 1170–1182, 1987.
- [108] SABIDUSSI, G. “The centrality index of a graph”, *Psychometrika*, v. 31, pp. 581–603, 1966.
- [109] HAGE, P., HARARY, F. “Eccentricity and centrality in networks”, *Social Networks*, v. 17, pp. 57–63, 1995.
- [110] LI, X., FAN, Y., ZHA, S. “A lower bound for the distance signless laplacian spectral radius of graphs in terms of chromatic number”, *Journal of Mathematical Research with Applications*, v. 14, n. 3, pp. 289–294, 2014.
- [111] RUHNAU, B. “Eigenvector-centrality : a node-centrality?” *Social Networks*, v. 22, pp. 357–365, 2007.
- [112] GRASSI, R., STEFANI, S., TORRIERO, A. “Some new results on the eigenvector centrality”, *Journal of Mathematical Sociology*, v. 31, pp. 237–248, 2007.
- [113] CHVÁTAL, V., HAMMER, P. L. “Aggregation of inequalities in integer programming”. In: *in Studies in Integer Programming, Annals of Discrete Math.*, pp. 145–162, Amsterdam, 1977.
- [114] MAHADEV, N. V. R., PELED, U. N. *Threshold graphs and related topics*. 1 ed. New York, Elsevier, 1995.
- [115] VAN DE VEL, M. L. J. *Theory of Convex Structures*. 1 ed. Amsterdam, Elsevier, 1993.
- [116] LEVI, F. W. “On Helly’s theorem and the axioms of convexity”, *J. Indian Math. Soc.*, v. 15, pp. 65–76, 1951.
- [117] FARBER, M., JAMISON, R. E. “Convexity in graphs and hypergraphs ,SIAM J.” *Algebraic Discrete Methods*, v. 7, pp. 433–444, 1986.
- [118] JAMISON, R. “Partition numbers for trees and ordered sets.” *Pacific J. Math.*, v. 96, pp. 115–140, 1981.
- [119] KORTE, B., LOVÁSZ, L. “Homomorphisms and Ramsey properties of anti-matroids”, *Discrete Appl. Math*, v. 15, n. 2-3, pp. 283–290, 1986.

- [120] HARARY, F., NIEMINEN, J. “Convexity in graphs”, *J. Differential Geom.*, v. 16, n. 2, pp. 185–190, 1981.
- [121] HARARY, F., LOUKAKIS, E., TSOUROS, C. “The geodetic number of graph”, *Math. Comput. Modelling*, v. 17, n. 11, pp. 89–95, 1993.
- [122] NEBRSKÝ, L. “A characterization of the interval function of a connected graph”, *Czechoslovak Math. J.*, v. 44, n. 1, pp. 173–178, 1994.
- [123] DOURADO, M. C., PROTTI, F., RAUTENBACH, D., et al. “Some remarks on the geodetic number of a graph”, *Discrete Mathematics*, v. 310, pp. 832–837, 2010.
- [124] CHANGAT, M., MATHEW, J. “Induced path transit function, monotone and Peano axioms”, *Discrete Math*, v. 286, n. 3, pp. 185–194, 2004.
- [125] DUCHET, P. “Convex sets in graphs II. Minimal path convexity.” *J. Comb. Theory Ser.*, v. 44, n. 3, pp. 307–316, 1988.
- [126] DOURADO, M. C., PROTTI, F., SZWARCFITER, J. L. “Complexity results related to monophonic convexity”, *Discrete Applied Mathematics*, v. 158, pp. 1268–1274, 2010.
- [127] CENTENO, C., DANTAS, S., DOURADO, M., et al. “Convex partitions of graphs induced by paths of order three”, *Discrete Math. Theory Comput. Sci.*, v. 12, n. 5, pp. 175–184, 2010.
- [128] DOURADO, M., RAUTENBACH, D., DOS SANTOS, V., et al. “An upper bound on the P_3 - Randon number”, *Discrete Math*, v. 316, n. 16, pp. 2433–2437, 2012.
- [129] PARKER, D., WESTHOFF, R., WOLF, M. “Two-path convexity in clone-free regular multipartite tournaments”, *Australas. J. Combin*, v. 36, pp. 177–196, 2006.
- [130] CÁCERES, J., HERNANDO, C., MORA, M., et al. “Geodeticity of the contour of chordal graphs”, *Discrete Applied Mathematics*, v. 156, pp. 1132–1142, 2008.
- [131] CÁCERES, J., MÁRQUEZ, A., OELLERMANN, O. R., et al. “Rebuilding convex sets in graphs”, *Discrete Mathematics*, v. 297, pp. 26–37, 2005.
- [132] ARTIGAS, D., DANTAS, S., DOURADO, M., et al. “On the contour of graphs”, *Discrete Applied Mathematics*, v. 161, pp. 1356–1362, 2013.

- [133] CÁCERES, J., HERNANDO, M., MORA, M., et al. “On geodetic sets formed by boundary vertices”, *Discrete Mathematics*, v. 306, pp. 188–198, 2006.
- [134] HERNANDO, C., MORA, M., PELAYO, I., et al. “Some structural, metric and convex properties of the boundary of a graph”, *Ars Combin*, v. 109, pp. 267–283, 2006.