



AUTOVALORES PRINCIPAIS DE GRAFOS

Francisca Andréa Macedo França

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: Nair Maria Maia de Abreu
Cybele Maia Vinagre

Rio de Janeiro
Outubro de 2015

AUTOVALORES PRINCIPAIS DE GRAFOS

Francisca Andréa Macedo França

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:

Prof^ª. Nair Maria Maia de Abreu, D.Sc.

Prof^ª. Cybele Maia Vinagre, D.Sc.

Prof^ª. Carla Silva Oliveira, D.Sc.

Prof^ª. Christina Fraga Esteves Maciel Waga, D.Sc.

Prof. Fábio Protti, D.Sc.

Prof^ª. Maria Agueiras Alvarez de Freitas, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

OUTUBRO DE 2015

França, Francisca Andréa Macedo

Autovalores principais de grafos/Francisca Andréa
Macedo França. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2015.

XIII, 101 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Nair Maria Maia de Abreu

Cybele Maia Vinagre

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

Referências Bibliográficas: p. 95 – 99.

1. Autovalores principais. 2. Espectro de grafos.
3. Árvores. I. Abreu, Nair Maria Maia de *et al.*
II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE,
Programa de Engenharia de Produção. III. Título.

*Ao amor da minha vida e a
Deus, sempre acima de tudo.
“Os sonhos são nossos, mas o
veredicto da realização é Dele”.*

Agradecimentos

Às minhas orientadoras Nair M. M. de Abreu e Cybele Maia Vinagre pela dedicação e apoio a mim dispensados.

Ao meu marido André por toda ajuda e apoio. À minha mãe e ao meu irmão pelo incentivo. À minha família do Sul, em especial à minha cunhada Juliana, por seu carinho.

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

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

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

AUTOVALORES PRINCIPAIS DE GRAFOS

Francisca Andréa Macedo França

Outubro/2015

Orientadores: Nair Maria Maia de Abreu
Cybele Maia Vinagre

Programa: Engenharia de Produção

Um autovalor da matriz de adjacência de um grafo é dito principal quando possui um autovetor que não é ortogonal ao vetor com todas as coordenadas iguais a 1. Cardoso *et al.* propuseram três questões relacionadas a tais autovalores no artigo “Spectral upper bounds on the size of k -regular induced subgraphs” (*Electron. Notes Discrete Math*, v. 32, pp. 3–10, 2009). A primeira questão trata da existência de grafos conexos cujos complementos possuem um autovalor principal distinto do índice e maior que $-1 - \lambda_{\min}$, onde λ_{\min} é o menor autovalor do grafo. A segunda é relativa à caracterização de grafos cujos complementos possuem $-1 - \lambda_{\min}$ como um autovalor principal. A terceira questão, se refere a grafos conexos em que o menor autovalor é não principal. Nesta tese, nos propusemos a investigar tais questões. Identificamos que a primeira já havia sido resolvida e respondemos às duas outras para grafos bipartidos. Motivados por esta investigação, determinamos os autovalores principais de alguns tipos de grafos bipartidos tais como caminhos, árvores de diâmetro 3 e árvores completas quase-regulares. Finalmente, determinamos o número de autovalores principais para determinados grafos.

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

MAIN EIGENVALUES OF GRAPHS

Francisca Andréa Macedo França

October/2015

Advisors: Nair Maria Maia de Abreu

Cybele Maia Vinagre

Department: Production Engineering

An eigenvalue of the adjacency matrix of a graph is said to be *main* when it has an eigenvector that is not orthogonal to the vector whose coordinates are equal to 1. Cardoso *et al.* proposed three questions related to such eigenvalues in “Spectral upper bounds on the size of k -regular induced subgraphs” (*Electron. Notes Discrete Math*, v. 32, pp. 3-10, 2009). The first one deals with the existence of connected graphs whose complements have at least a main eigenvalue, different from the index, and greater than $-1 - \lambda_{\min}$, where λ_{\min} is the least eigenvalue of the graph. The second relates to the characterization of graphs whose complements have $-1 - \lambda_{\min}$ as main eigenvalue. The third question refers to connected graphs in which the least eigenvalue is non-main. In this thesis, we set out to investigate these issues. We find that the first had been previously resolved and manage to solve the other two questions related to bipartite graphs. Motivated by this investigation, we determine the main eigenvalues of some types of bipartite graphs such as paths, trees with diameter 3 and complete quasi-regular trees. Finally, we determine the number of main eigenvalues for certain graphs.

Sumário

Lista de Figuras	viii
Lista de Tabelas	x
Lista de Símbolos	xi
1 Introdução	1
2 Resultados básicos	3
2.1 Teoria de grafos	3
2.2 Teoria de matrizes	6
2.3 Teoria espectral de grafos	12
3 Autovalores principais de um grafo	18
3.1 Conjuntos (k, τ) -regulares	26
3.2 Grafos harmônicos	29
4 Grafos com dois autovalores principais	31
5 Autovalores principais de alguns grafos e seus complementares	45
6 Partições equilibradas e autovalores principais	62
7 Espectro principal de certas famílias de árvores	71
7.1 Caminho	71
7.2 Árvores de Bethe Generalizadas	74
7.3 Árvore de Bethe	85
7.4 Árvore completa quase-regular	91
8 Considerações finais	94
Referências Bibliográficas	95
Índice Remissivo	100

Lista de Figuras

2.1	Multigrafo orientado \mathcal{D}	4
2.2	Tipos de vértices gêmeos	15
2.3	Pares de vértices gêmeos rotulados em G_1 e G_2	16
2.4	\mathcal{P}_5	16
3.1	Árvore cujo autovalor 0 possui 2 autovetores não ortogonais a \mathcal{J}	23
3.2	Grafos com três autovalores principais	24
3.3	Conjuntos (2, 2)-regular e (0, 2)-regular	27
3.4	Grafos 4-harmônico e 3-harmônico	29
3.5	Árvore 2-harmônica \mathcal{T}_2	30
4.1	Grafos controláveis	31
4.2	Grafos com 2 autovalores principais	33
4.3	Grafos 2-cadeia (a, b) -lineares	35
4.4	Grafos bicíclicos 2-cadeia (a, b) -lineares	42
4.5	Grafos tricíclicos 2-cadeia (a, b) -lineares com $b \geq 0$	43
4.6	Grafos tricíclicos 2-cadeia (a, b) -lineares com $b < 0$	43
4.7	Grafo bipartido semirregular	44
5.1	Árvore com o simétrico de um dos autovalores simples não principal e com outro cujo simétrico é principal	53
5.2	Dupla estrela $T(k, s)$	53
5.3	A H -junção de K_1, \mathcal{P}_2 e C_3 , onde $H = \mathcal{P}_3$	59
5.4	Grafos $H_{3,4}$ e $H_{5,5}$	60
5.5	Duplas estrelas $T(3, 4)$ e $T(5, 5)$	61
6.1	Partição equilibrada π_3	62
6.2	Grafo quociente G/π_3	63
6.3	Duplas estrelas	65
6.4	$H_{s,s}$	66
6.5	Grafo foguete $F_{5,4,3}$	67

7.1	\mathcal{P}_6 e \mathcal{P}_7	71
7.2	\mathbb{I}_6 e \mathbb{I}_7	74
7.3	Árvore de Bethe $\mathcal{B}_{2,4}$ e a árvore de Bethe generalizada $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$	75
7.4	Árvore completa quase-regular $\mathcal{Q}_{3,5}$	91

Lista de Tabelas

7.1	Autovalores de $\mathcal{B}_{2,4}$	77
7.2	Autovalores de $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$	77
7.3	Rotulação para \mathcal{B}_k	77

Lista de Símbolos

$N_G(i)$	vizinhança do vértice i , p. 3
$d(i)$	grau do vértice i , p. 3
$\delta(G)$	grau mínimo de G , p. 3
$\Delta(G)$	grau máximo de G , p. 3
$\bar{d}(G)$	grau médio de G , p. 3
d_G	vetor dos graus de G , p. 3
A	matriz de adjacência de um grafo, p. 4
$\langle S \rangle$	subgrafo induzido por um conjunto de vértices S , p. 5
\bar{G}	grafo complementar de G , p. 5
K_n	grafo completo com n vértices, p. 5
C_n	ciclo com n vértices, p. 5
$d(i, j)$	distância entre os vértices i e j , p. 6
$e(i)$	excentricidade do vértice i , p. 6
$diam(G)$	diâmetro do grafo G , p. 6
K_{p_1, p_2, \dots, p_r}	grafo r -partido completo, p. 6
\mathcal{P}_n	caminho com n vértices, p. 6
$K_{1, n-1}$	estrela com n vértices, p. 6
J	matriz de ordem $n \times m$ com as entradas iguais a 1, p. 6
j	n -vetor coluna com as coordenadas iguais a 1, p. 6
$M[\alpha_k]$	a submatriz principal líder de ordem k da matriz M , p. 7

$diag_{(n)}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$	matriz diagonal com n vértices, p. 7
$Span(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k)$	o subespaço de \mathbb{R}^n gerado pelos n -vetores coluna $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k$, p. 8
I	matriz identidade, p. 8
$rank(M)$	posto da matriz M , p. 10
$\mathbf{x}^T \mathbf{y}$	produto interno de \mathbf{x} e \mathbf{y} , p. 10
$\ \mathbf{x}\ $	norma do vetor \mathbf{x} , p. 10
$Spec(G)$	conjunto dos autovalores de G , p. 12
$\lambda_i(G)$	i -ésimo maior autovalor de G , p. 12
$\mathcal{E}_G(\lambda)$	autoespaço associado a $\lambda \in Spec(G)$, p. 12
\mathbf{f}_{ij}	vetor de Faria associado aos vértices gêmeos i e j , p. 15
$d_k(i)$	quantidade de cadeias de comprimento k que começam no vértice i , p. 16
W	matriz cadeia de um grafo, p. 16
$MainSpec(G)$	conjunto dos autovalores principais distintos de G , p. 18
$Main(G)$	subespaço gerado por autovetores associados aos autovalores principais de G que não são ortogonais a J , p. 19
$M(G, x)$	polinômio característico principal de G , p. 19
$\mathbf{0}$	vetor nulo, p. 25
\mathbf{x}_S	vetor característico de S , p. 27
\mathcal{T}_ℓ	árvore obtida de $\ell^2 - \ell + 1$ estrelas disjuntas $K_{1, \ell-1}$ cujos vértices centrais possuem um vizinho em comum, p. 29
ν_G	vetor discriminante de G , p. 30
$T(k, s)$	dupla estrela, p. 38
$F_{k,r,p}$	grafo foguete, p. 67
$\mathcal{B}_{d,k}$	árvore de Bethe, p. 74
$\mathcal{B}_{(d_k, d_{k-1}, \dots, d_2)}$	árvore de Bethe generalizada, p. 74
$\mathcal{Q}_{d,k}$	árvore completa quase-regular, p. 91

Capítulo 1

Introdução

Um autovalor da matriz de adjacência de um grafo é dito *principal* se o vetor com todas as coordenadas iguais a 1 não é ortogonal ao autoespaço associado a ele. Em 1970, CVETKOVIĆ [1] apresenta o conceito de autovalores principais de um grafo e, no ano seguinte, em [2], relaciona os autovalores principais diretamente com a quantidade de cadeias em um grafo e caracteriza os grafos regulares como aqueles que têm exatamente um autovalor principal. Isso mostra a importante relação entre propriedades espectrais e as estruturas de grafos. Mais tarde, em [3], o mesmo autor levanta a questão de determinar os grafos com exatamente k ($k \geq 2$) autovalores principais.

Em 2002, surge um dos principais trabalhos relativos a autovalores principais: HAGOS [4] mostra que o número de autovalores principais de um grafo coincide com o posto da matriz cadeia do grafo e caracteriza os grafos com exatamente dois autovalores principais. Utilizando tal caracterização, os seguintes autores determinaram os grafos com exatamente dois autovalores principais em classes específicas: HOU e ZHOU [5] em árvores; HOU e TIAN [6], em grafos unicyclicos; HU *et al.* [7] e HOU *et al.* [8], em grafos bicyclicos; HOU *et al.* [8] e FAN e LUO [9], em grafos tricyclicos.

Em 2009, CARDOSO e PINHEIRO [10] investigaram relações entre os autovalores principais de um grafo e o espectro do seu complementar, buscando estimativas para o tamanho máximo de subgrafos induzidos regulares. No referido artigo, os autores propõem três questões. A primeira, trata da existência de grafos conexos cujo complementar possui um autovalor principal que seja maior do que $-1 - \lambda_{\min}$ e distinto do índice, onde λ_{\min} indica o menor autovalor da matriz de adjacência do grafo. A segunda levanta a possibilidade de caracterizar os grafos cujos complementares possuem $-1 - \lambda_{\min}$ como um autovalor principal. Finalmente, a terceira questão trata da caracterização de grafos conexos em que o menor autovalor é não principal. Nesta tese, nos propusemos a tentar responder tais questões e contribuimos

com novos resultados sobre o número de autovalores principais em certas famílias de grafos.

A tese se desenvolve da seguinte forma: no Capítulo 2 são introduzidos conceitos e resultados da Teoria de Grafos, Teoria de Matrizes e da Teoria Espectral de Grafos necessários à compreensão do texto. O Capítulo 3 é dedicado a uma revisão bibliográfica sobre autovalores principais de um grafo. No Capítulo 4 são apresentados resultados da literatura que respondem à questão da caracterização de grafos com dois autovalores principais. No Capítulo 5 aparecem as nossas primeiras contribuições na tentativa de responder as questões propostas em [10]. Identificamos que a primeira questão decorre diretamente das Desigualdades de Weyl como visto em [11]. Os resultados subsequentes foram obtidos na tentativa de responder a segunda e a terceira questões, o que foi feito no contexto dos grafos bipartidos.

No Capítulo 6, utilizamos a relação entre os autovalores principais e as partições equilibradas de um grafo para construir uma família de grafos com exatamente três autovalores principais. Na sequência apresentamos uma condição necessária e suficiente para que grafos com partições equilibradas com três células possuam dois autovalores principais. No Capítulo 7, explicitamos os autovalores principais dos caminhos. Apresentamos também alguns resultados sobre as árvores de Bethe generalizadas e uma conjectura para o caso em que tais árvores possuem um número par de níveis. Concluimos o capítulo, aplicando os resultados obtidos para determinar a quantidade de autovalores principais das árvores completas quase-regulares definidas por CVETKOVIĆ e DAVIDOVIĆ [12]. No último capítulo, expomos nossas considerações finais e nossas propostas para a continuação desta pesquisa.

Capítulo 2

Resultados básicos

Conceitos e resultados básicos da Teoria dos Grafos, da Teoria de Matrizes e da Teoria Espectral de Grafos são apresentados neste capítulo no intuito de tornar o texto autocontido, facilitando a compreensão do leitor.

2.1 Teoria de grafos

As noções básicas da Teoria dos Grafos, aqui apresentadas, podem ser encontradas em [13], [14], [15], [16], [17] e [18].

Um *grafo simples* é uma estrutura $G = (V, E)$ constituída por um conjunto finito e não vazio V cujos elementos são denominados *vértices* e um conjunto $E = \{\{i, j\} | i, j \in V, i \neq j\}$, cujos elementos são denominados *arestas*. A *ordem de um grafo* G é o número de vértices de G e a indicamos por $|V|$. Quando necessário, denotamos $V = V(G)$ e $E = E(G)$. Se G não possui arestas dizemos que é um *grafo vazio*. Se V é um conjunto unitário e $E = \emptyset$ então G é chamado *grafo trivial*. Os vértices ligados por arestas são ditos *adjacentes*, a *vizinhança de um vértice* i é o conjunto $N_G(i) = \{j \in V | \{i, j\} \in E\}$ e o *grau de* i é a cardinalidade da sua vizinhança, isto é, $d(i) = |N_G(i)|$. Um subconjunto S do conjunto de vértices de G é dito *independente* se não existem arestas entre os pares de vértices de S .

Dizemos que um vértice de um grafo G é *pendente* se possui grau igual a 1. Denotamos por $\delta = \delta(G) = \min\{d(i) | i \in V\}$, $\Delta = \Delta(G) = \max\{d(i) | i \in V\}$ e $\bar{d} = \bar{d}(G) = \frac{1}{|V|} \sum_{i \in V} d(i)$ o *grau mínimo*, *grau máximo* e o *grau médio* de G , respectivamente. Se G possui n vértices, denotamos por d_G o vetor com n coordenadas iguais aos graus dos respectivos vértices.

Um grafo é completamente determinado por suas adjacências. Esta informação pode ser convenientemente obtida na forma matricial. Com efeito, dado um grafo cujos vértices estão devidamente rotulados, existem algumas matrizes associadas a este grafo. Em nosso trabalho, nos restringimos ao estudo da matriz de adjacência.

A *matriz de adjacência* de um grafo simples $G = (V, E)$ com n vértices é a matriz quadrada $A = A(G)$ de ordem n cuja (i, j) -entrada é definida por

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

Todas as entradas da diagonal de A são nulas. Temos que $\{i, j\}$ é uma aresta de G se e somente se $\{j, i\}$ também é uma aresta. Observe ainda que para cada $i \in V$, $\sum_{j=1}^n a_{ij} = d(i)$, isto é, a soma das entradas da i -ésima linha de A é o grau do vértice i .

Um *grafo orientado* $D = (V, \mathcal{O})$ é uma estrutura constituída por um conjunto finito e não vazio V cujos elementos são chamados *vértices* e uma coleção de pares ordenados distintos $\mathcal{O} = \{(i, j) \mid i, j \in V \text{ e } i \neq j\}$ cujos elementos (i, j) são denominados *arcos*. No caso em que $i = j$, denominamos o arco (i, i) por *laço no vértice* i , ou simplesmente *laço*. Um arco (i, j) é usualmente representado por uma seta que parte de i e termina em j .

Um *multigrafo orientado* é um grafo orientado que pode possuir múltiplos laços e arcos entre os vértices. A *matriz de adjacência de um multigrafo* \mathcal{D} de ordem n é uma matriz quadrada $A(\mathcal{D})$ de ordem n cuja entrada a_{ij} é igual a quantidade de arcos (i, j) em \mathcal{D} . Por exemplo, o multigrafo orientado \mathcal{D} da Figura 2.1

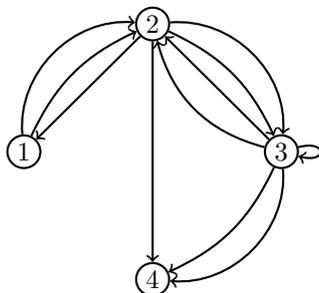


Figura 2.1: Multigrafo orientado \mathcal{D}

tem como matriz de adjacência

$$A(\mathcal{D}) = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Proposição 2.1 *Toda matriz quadrada com entradas não negativas é a matriz de adjacência de um multigrafo orientado.*

Demonstração. Com efeito, dada uma matriz quadrada $M = (m_{ij})$ de ordem n com entradas não negativas, considere o multigrafo orientado com n vértices cuja quantidade de arcos que partem do vértice i e chegam no vértice j é igual a entrada m_{ij} . □

Dados os grafos G e G' , dizemos que G' é um *subgrafo* de G se $V(G') \subseteq V(G)$ e $E(G') \subseteq E(G)$. Um *subgrafo induzido* por um conjunto de vértices S de G , denotado por $\langle S \rangle$, é um subgrafo de G que possui S como conjunto de vértices, cujos vértices são adjacentes em $\langle S \rangle$ se e somente se são adjacentes em G .

O *grafo complementar* \overline{G} de um grafo G é o grafo que possui os mesmos vértices de G e dois vértices são adjacentes em \overline{G} se e somente se não são adjacentes em G . O *grafo completo* é um grafo no qual quaisquer dois vértices distintos são adjacentes. O grafo completo com n vértices é denotado por K_n . Quando todos os vértices de um grafo possuem grau r diz-se que tal grafo é *r-regular* ou um *grafo regular de grau r*. Caso contrário, o grafo é dito *irregular*.

Sejam os grafos $G_1 = (V_1, E_1)$ e $G_2 = (V_2, E_2)$, onde V_1 e V_2 são disjuntos. O grafo $G = (V, E)$, onde $V = V_1 \cup V_2$ e $E = E_1 \cup E_2$ é chamado *união* de G_1 e G_2 e denotado por $G_1 \cup G_2$. A *junção* (“join”) ou *produto completo* dos grafos G_1 e G_2 é o grafo $G_1 \vee G_2$ obtido a partir de $G_1 \cup G_2$ ao unir-se cada vértice de G_1 a todos os vértices de G_2 , isto é, $G_1 \vee G_2$ é o grafo cujo conjunto de vértices é $V(G_1) \cup V(G_2)$ e cujo conjunto de arestas é $E(G_1) \cup E(G_2) \cup \{\{v, w\}; v \in V(G_1) \text{ e } w \in V(G_2)\}$. A junção entre dois grafos também relaciona-se com os seus grafos complementares através da seguinte identidade: $G_1 \vee G_2 = \overline{\overline{G_1} \cup \overline{G_2}}$.

Uma sequência finita $i_1 i_2 \cdots i_k$ de vértices de um grafo $G = (V, E)$ com n vértices tal que $\{i_j, i_{j+1}\} \in E$ para todo $j \in \{1, 2, \dots, k-1\}$ é dita uma *cadeia de i_1 a i_k* no grafo G . Dizemos que $i_1 i_2 \cdots i_k$ é uma *cadeia fechada* (*cadeia aberta*) em G se $i_1 = i_k$ ($i_1 \neq i_k$). Um *caminho* em um grafo G é uma cadeia em que todos os vértices são distintos. O *comprimento de um caminho* é o número de arestas que ligam os seus vértices. Um grafo é dito *conexo* quando existe um caminho ligando cada par de vértices. Em caso contrário, o grafo é denominado *desconexo*. Uma *componente conexa de um grafo G* é um subgrafo conexo maximal de G . Por simplicidade, chamamos componente conexa somente de componente. No caso em que G possui exatamente uma componente temos que G é um grafo conexo.

Um caminho fechado em um grafo G é denominado *ciclo*. Quando um grafo com n vértices é ele próprio um ciclo, denotamos por C_n . O grafo C_n^k é o grafo obtido por um ciclo C_n acrescentando $k \geq 0$ vértices pendentes a cada vértice de C_n . Um grafo conexo G é dito ser *k-cíclico* se $|E| = |V| + k$. Nos casos particulares de $k = 0$, $k = 1$ e $k = 2$, o grafo é dito ser *unicíclico*, *bicíclico* e *tricíclico*, respectivamente.

A *distância* $d(i, j)$ entre os vértices i e j de um grafo conexo G é o mínimo dos comprimentos dos caminhos que ligam os vértices i e j . A maior distância entre o vértice i e os demais vértices do grafo é a *excentricidade* $e(i)$ do vértice i . O vértice de menor excentricidade é denominado *vértice central*. O máximo das distâncias entre dois vértices quaisquer de G é chamado *diâmetro* de G e denotado por $diam(G)$. Quando G for um grafo desconexo, escrevemos $diam(G) = \infty$.

Uma *partição de um conjunto* não vazio S é uma coleção P_r constituída por r subconjuntos não vazios e dois a dois disjuntos de S cuja união é S . Denominamos os elementos de P_r por *células*.

Seja P_r uma partição do conjunto de vértices de um grafo G . Tal grafo é dito *r-partido* quando os vértices que estão em uma mesma célula não são adjacentes. Se $r = 2$, G é dito *bipartido*. Um grafo bipartido é denominado *bipartido semirregular*, ou simplesmente *semirregular*, se não é regular e os vértices que pertencem à mesma célula possuem o mesmo grau.

Um grafo *r-partido completo* é um grafo *r-partido* no qual quaisquer dois vértices que pertencem a células distintas são adjacentes. Se P_r é uma partição do conjunto de vértices de um grafo *r-partido* completo cujas células possuem cardinalidades p_1, p_2, \dots, p_r então denotamos tal grafo por K_{p_1, p_2, \dots, p_r} , e se cada célula tem cardinalidade p então o grafo é dito *r-partido balanceado* e o denotamos por $K_{r(p)}$.

Uma *árvore* é um grafo conexo que não possui ciclos. Em uma árvore, chamamos os vértices pendentes de *folhas*. As árvores são exemplos de grafos bipartidos e dentre as famílias de árvores conhecidas destacamos as estrelas e os caminhos. A árvore $K_{1,n}$ é denominada *estrela*. O *caminho* \mathcal{P}_n é uma árvore com n vértices que possui apenas duas folhas e os seus demais vértices possuem grau 2. Algumas vezes é conveniente destacar um vértice de uma árvore, tal vértice é chamado *raiz*. Uma árvore com uma raiz fixada é denominada *árvore enraizada*.

2.2 Teoria de matrizes

As definições e resultados listados a seguir podem ser encontrados em [19], [20], [21], [22], [23], [24] e [25].

Todas as matrizes consideradas no texto possuirão suas entradas reais. Representamos uma matriz com entradas reais de ordem $n \times m$ por $M_{n \times m}$. No caso de não ser necessário explicitar a ordem, denotamos tais matrizes simplesmente por M . Dizemos que uma matriz M é *positiva* (*não negativa*) se possui todas as entradas positivas (*não negativas*) e M é chamada *matriz nula* se possui todas as entradas nulas. Denominamos por *n-vetor coluna* (*n-vetor linha*) a matriz que possui somente uma coluna (linha) e n linhas (colunas). Ao longo do texto, $J_{n \times m}$ denota a matriz de ordem $n \times m$ cujas entradas são iguais a 1 e J_n denota o *n-vetor*

coluna cujas coordenadas são iguais a 1. Quando estiver claro, evitaremos o uso de índices nas notações. Por exemplo, $J_{n \times m}$ será denotado simplesmente por J e J_n será denotado por j .

Lema 2.2 *Seja $R_{n \times m}$ uma matriz com todas as linhas iguais, à exceção da primeira. Para toda matriz $S_{m \times p}$, a matriz RS possui todas as linhas, com exceção da primeira, iguais.*

Demonstração. Dada uma matriz R de ordem $n \times m$, denotemos a i -ésima linha de R por R_{i*} com $i \in \{1, 2, \dots, n\}$. Assim, a i -ésima linha do produto de R com uma matriz S com ordem $m \times p$ é dada por

$$[RS]_{i*} = (i\text{-ésima linha de } R) \times S.$$

Para todo $i_1, i_2 \in \{2, 3, \dots, n\}$ temos que as linhas i_1 e i_2 de R são iguais segue, para todo $i_1, i_2 \in \{2, 3, \dots, n\}$, que as linhas i_1 e i_2 de RS também serão iguais. \square

Uma matriz é dita *quadrada de ordem n* , ou simplesmente *quadrada*, quando o número de linhas e o número de colunas são iguais a n e a denotamos por M_n . Uma *matriz diagonal* é uma matriz de ordem n cujas entradas que não estão na diagonal principal são nulas. Neste caso, denotamos tal matriz por $\text{diag}_{(n)}(m_{11}, m_{22}, \dots, m_{nn})$. A matriz diagonal de ordem n em que todas as entradas da diagonal principal são iguais a 1 é chamada *matriz identidade* e a denotamos por I_n . Caso não seja necessário especificar a ordem, a matriz identidade será simplesmente I . Uma *matriz tridiagonal* é uma matriz quadrada M tal que $m_{ij} = 0$ sempre que $|i - j| > 1$.

Dada uma matriz M , sejam α e β conjuntos não vazios de índices que representam linhas e colunas em M , respectivamente. Uma *submatriz de M* é a matriz $M[\alpha, \beta]$ obtida selecionando as entradas de M que estão nas linhas correspondentes aos índices em α e nas colunas correspondentes aos índices em β . Quando $\alpha = \beta$, a submatriz é chamada *submatriz principal de M* e neste caso denotamos por $M[\alpha]$. Uma *submatriz principal líder de M* é uma submatriz principal da forma $M[\alpha_k]$, onde $\alpha_k = \{1, 2, \dots, k\}$.

Seja M uma matriz quadrada de ordem n . Um escalar λ é um *autovalor* de M se existe um n -vetor coluna não nulo \mathbf{v} tal que $M\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$. O vetor \mathbf{v} é chamado um *autovetor de M associado ao autovalor λ* . O *polinômio característico de M* é definido por $p(x) = \det(M - xI)$ e suas raízes são exatamente os autovalores de M . O *espectro* de uma matriz quadrada M , $\sigma(M)$, é o multiconjunto dos autovalores de M . O *raio espectral de M* é o número real não negativo $\rho(M) = \max\{|\lambda| \mid \lambda \in \sigma(M)\}$.

Denotamos por $\text{Span}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k)$ o subespaço de \mathbb{R}^n gerado pelos n -vetores coluna $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k$. O subespaço de \mathbb{R}^n gerado pelos autovetores associados ao autovalor λ de M é o *autoespaço associado a λ* que denotamos por $\mathcal{E}(\lambda)$.

A *multiplicidade algébrica* de um autovalor λ de M , $\text{alg}(\lambda)$, é a multiplicidade de λ como raiz do polinômio característico de M e a *multiplicidade geométrica* de λ , $\text{geo}(\lambda)$, é o número máximo de autovetores associados a λ que são linearmente independentes. Um autovalor λ é dito *simples* se $\text{alg}(\lambda) = 1$. No caso de $\text{geo}(\lambda) = \text{alg}(\lambda)$, o autovalor λ é denominado *semissimples* e sua multiplicidade é denotada por $m_G(\lambda)$.

O próximo resultado refere-se aos autovalores e autovetores de certas matrizes tridiagonais simétricas.

Teorema 2.3 (FIEDLER [24]) *Seja $A = (a_{ij})$ uma matriz tridiagonal e simétrica de ordem n . Se $a_{ij} \neq 0$ sempre que $|i - j| = 1$ então os autovalores de A são distintos. Além disso, a primeira e a última coordenadas de todos os autovetores de A são não nulas.*

O próximo resultado, que pode ser visto em [26], fornece um método para determinar alguns autovalores de uma matriz e será utilizado no Capítulo 7.

Teorema 2.4 *Seja M uma matriz quadrada de ordem n decomposta em blocos $M_{i,j}$ de ordem $n_i \times m_j$, $i, j \in \{1, 2, \dots, k\}$,*

$$M = \begin{pmatrix} M_{1,1} & M_{1,2} & \cdots & M_{1,k} \\ M_{2,1} & M_{2,2} & \cdots & M_{2,k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ M_{k,1} & M_{k,2} & \cdots & M_{k,k} \end{pmatrix}.$$

Para $i, j \in \{1, 2, \dots, k\}$, suponhamos que as linhas dos blocos $M_{i,j}$ têm somas constantes iguais a c_{ij} e que $\overline{M} = (c_{ij})$. Desta forma, o polinômio característico de \overline{M} divide o polinômio característico de M . Além disso, se $\mathbf{w} = (w_1 \ w_2 \ \cdots \ w_k)^T$ é um autovetor de \overline{M} associado a um autovalor λ então $\mathbf{v} = (w_1 j_{n_1} \ w_2 j_{n_2} \ \cdots \ w_k j_{n_k})^T$ é um autovetor de M associado a λ , onde j_{n_i} é o n_i -vetor de coordenadas iguais a 1.

Uma matriz quadrada M de ordem n é *invertível* se existe uma matriz quadrada N de ordem n tal que $MN = NM = I$. Neste caso, denotamos N por M^{-1} . Duas matrizes quadradas M e N são *semelhantes* se existe uma matriz invertível P tal que $M = P^{-1}NP$. Temos, como exemplo, a *matriz de permutação*, que é a matriz quadrada de ordem n , onde em cada linha e coluna possuem $n - 1$ elementos nulos e um único elemento igual a 1. Esta é invertível e semelhante a matriz identidade I .

Teorema 2.5 (HORN e JOHNSON [19]) *Sejam M e N duas matrizes quadradas de ordem n . Se M é semelhante a N então M possui o mesmo polinômio característico que a matriz N , conseqüentemente o mesmo espectro.*

A *transposta* de uma matriz $M = (m_{ij})$ de ordem $n \times m$ é a matriz $M^T = (m_{ij}^T)$ de ordem $m \times n$ tal que $m_{ij}^T = m_{ji}$. Denominamos uma matriz quadrada M por *simétrica* quando $M = M^T$. Dada uma matriz quadrada M , quando existem uma permutação Q e matrizes quadradas X e Z tais que

$$Q^T M Q = \begin{pmatrix} X & Y \\ 0 & Z \end{pmatrix},$$

dizemos que M é uma *matriz redutível*. Caso contrário, M é chamada *matriz irredutível*.

Os próximos teoremas são de uso fundamental em Teoria Espectral de Grafos: Teorema de Perron-Frobenius e o Teorema de Weyl. O primeiro é válido para as matrizes irredutíveis e pode ser encontrado em [19].

Teorema 2.6 (Teorema de Perron-Frobenius) *Seja M uma matriz quadrada de ordem n irredutível e não negativa. Então,*

- (i) $\rho(M) > 0$;
- (ii) $\rho(M)$ é um autovalor de M ;
- (iii) Existe um n -vetor coluna positivo, \mathbf{v} , tal que $M\mathbf{v} = \rho(M)\mathbf{v}$;
- (iv) $\rho(M)$ é um autovalor simples.

O teorema a seguir apresenta as *Desigualdades de Weyl* para a soma de matrizes. Sua prova pode ser encontrada em [19]. O resultado que estabelece condições para as igualdades pode ser encontrado em [20].

Teorema 2.7 (Teorema de Weyl) *Sejam M e N matrizes simétricas de ordem n . Então,*

- (i) $\lambda_i(M) + \lambda_j(N) \leq \lambda_{i+j-n}(M + N)$, se $n + 1 \leq i + j$;
- (ii) $\lambda_{i+j-1}(M + N) \leq \lambda_i(M) + \lambda_j(N)$, se $i + j \leq n + 1$.

A igualdade ocorre nas desigualdades anteriores, se e somente se existir um n -vetor não nulo que é um autovetor comum a cada um dos três autovalores envolvidos nas referidas desigualdades.

O posto de uma matriz M de ordem $n \times m$, $\text{rank}(M)$, é o número de linhas (ou colunas) linearmente independentes de M . É bem conhecido que matrizes semelhantes possuem o mesmo posto (ver [22]). Uma matriz quadrada M é *diagonalizável* se é semelhante a uma matriz diagonal. A seguir, apresentamos resultados referentes a matrizes diagonalizáveis.

Teorema 2.8 (MEYER [22]) *Seja M uma matriz quadrada de ordem n . Então M é diagonalizável se e somente se todos os autovalores de M são semissimples.*

Teorema 2.9 (HORN e JOHNSON [19]) *Seja M uma matriz quadrada de ordem n . Então M é diagonalizável se e somente se M possui um conjunto de n autovetores que são linearmente independentes.*

Dados os n -vetores coluna $\mathbf{v} = (v_i)$ e $\mathbf{w} = (w_i)$ o produto interno usual de \mathbf{v} e \mathbf{w} é $\langle \mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle = \mathbf{v}^T \mathbf{w} = \sum_{i=1}^n v_i w_i$; a norma euclidiana de \mathbf{v} é $\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle} = \sqrt{\mathbf{v}^T \mathbf{v}}$. Se $\|\mathbf{v}\| = 1$, dizemos que \mathbf{v} é *unitário*.

O menor e o maior autovalores de uma matriz simétrica são caracterizados como a solução de um problema de mínimo e máximo, respectivamente. Apresentamos no Teorema 2.10 essa caracterização e sua demonstração pode ser encontrada em [19].

Teorema 2.10 (Rayleigh-Ritz) *Seja M uma matriz simétrica de ordem n cujos autovalores estão em ordem não crescente $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$. Tem-se:*

- (i) $\lambda_1 \mathbf{v}^T \mathbf{v} \geq \mathbf{v}^T M \mathbf{v} \geq \lambda_n \mathbf{v}^T \mathbf{v}, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$;
- (ii) $\lambda_1 = \sup \{ \mathbf{v}^T M \mathbf{v} \mid \|\mathbf{v}\| = 1, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \}$;
- (iii) $\lambda_n = \inf \{ \mathbf{v}^T M \mathbf{v} \mid \|\mathbf{v}\| = 1, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n \}$.

Um conjunto $S = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k\}$ de n -vetores coluna é denominado *ortogonal* se quaisquer dois vetores distintos em S são *ortogonais*, isto é, $\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_j = 0$ sempre que $i \neq j$. Se todos os vetores de S são unitários então o conjunto S é dito *ortonormal*.

Uma matriz quadrada M é dita *ortogonal* quando é invertível e sua inversa é tal que $M^{-1} = M^T$. Assim, uma matriz quadrada de ordem n é ortogonal se e somente se suas linhas (ou colunas) formam um conjunto ortonormal de vetores em \mathbb{R}^n . Se existe uma matriz ortogonal P tal que $P^T M P$ é uma matriz diagonal D então M é dita *ortogonalmente diagonalizável*. Neste caso, $D = \text{diag}_{(n)}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, onde $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ são os autovalores de M , não necessariamente distintos. As colunas de P constituem uma base ortonormal para \mathbb{R}^n formada por autovetores respectivamente associados a estes autovalores. Se esta base é construída agrupando-se as bases ortonormais dos autoespaços de M então $D = \lambda_{t_1} E_1 + \lambda_{t_2} E_2 + \dots + \lambda_{t_m} E_m$, onde $\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_m}$ são os autovalores distintos de M e E_i é um bloco diagonal $\text{diag}_{(n)}(0, \dots, 0, I_{\text{geo}(\lambda_{t_i})}, 0, \dots, 0)$ para todo $i \in \{1, 2, \dots, m\}$. Neste caso, $I_{\text{geo}(\lambda_{t_i})}$ é a matriz identidade com ordem igual a multiplicidade geométrica de λ_{t_i} .

Teorema 2.11 (HORN e JOHNSON [19]) *Uma matriz quadrada real M é simétrica se e somente se M é ortogonalmente diagonalizável.*

Corolário 2.12 (MEYER [22]) *Os autovalores de uma matriz simétrica são semissimples.*

O próximo teorema apresenta uma decomposição para as matrizes ortogonalmente diagonalizáveis em função do seu espectro, o qual pode ser encontrado em MEYER [22].

Teorema 2.13 (Teorema da Decomposição Espectral) *Seja M uma matriz quadrada de ordem n com m autovalores distintos $\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_m}$. Se existe uma matriz ortogonal P tal que $P^T M P$ é uma matriz diagonal então existem matrizes P_1, P_2, \dots, P_m tais que M pode ser descrita como*

$$M = \lambda_{t_1} P_1 + \lambda_{t_2} P_2 + \dots + \lambda_{t_m} P_m. \quad (2.1)$$

Para cada $i \in \{1, 2, \dots, m\}$, a matriz P_i possui as seguintes propriedades:

- (i) $P_i = P E_i P^T$, onde $E_i = \text{diag}_{(n)}(0, \dots, 0, I_{\text{geo}(\lambda_{d_i})}, 0, \dots, 0)$;
- (ii) $P_1 + P_2 + \dots + P_m = I$;
- (iii) $P_i = \mathbf{v}_{i1} \mathbf{v}_{i1}^T + \mathbf{v}_{i2} \mathbf{v}_{i2}^T + \dots + \mathbf{v}_{id} \mathbf{v}_{id}^T$, onde $\{\mathbf{v}_{i1}, \dots, \mathbf{v}_{id}\}$ é uma base ortonormal para $\mathcal{E}(\lambda_i)$;
- (iv) P_i é a matriz da projeção ortogonal de \mathbb{R}^n sobre $\mathcal{E}(\lambda_i)$ com respeito à base ortonormal canônica de \mathbb{R}^n ;
- (v) $P_i^2 = P_i = P_i^T$ e $P_i P_j = 0$ para quaisquer $i \neq j$.

A expansão 2.1 é conhecida como a *decomposição espectral de M* e para cada $i \in \{1, 2, \dots, m\}$, P_i é chamada *projeção espectral associada à M* .

Corolário 2.14 *Toda matriz simétrica M possui uma decomposição espectral.*

O resultado a seguir afirma que matrizes simétricas permitem uma decomposição espectral de \mathbb{R}^n como soma direta dos autoespaços associados aos autovalores distintos da matriz. Uma versão mais geral do referido teorema está em [23].

Teorema 2.15 (MEYER [22]) *Seja M uma matriz simétrica de ordem n com m autovalores distintos $\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_m}$. Então \mathbb{R}^n decompõe-se como soma direta dos subespaços $\mathbb{R}^n = \mathcal{E}(\lambda_{t_1}) \oplus \mathcal{E}(\lambda_{t_2}) \oplus \dots \oplus \mathcal{E}(\lambda_{t_m})$.*

2.3 Teoria espectral de grafos

Os conceitos e resultados a seguir apresentados podem ser encontrados em [26], [27], [28], [29], [30], [31], [32], [33] e [34].

Dada a matriz de adjacência A de um grafo (ou um multigrafo) G , os seus autovalores são chamados *autovalores de G* . Denotamos por $Spec(G)$, o multiconjunto dos autovalores do grafo G . O *polinômio característico de G* , $p_G(x)$, é o polinômio característico da sua matriz de adjacência. Fora menção em contrário, consideramos que os n autovalores de G são apresentados em ordem não crescente $\lambda_{\max} = \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n = \lambda_{\min}$, muitas vezes, denotados por $\lambda_i(G)$ para $i \in \{1, 2, \dots, n\}$. O maior autovalor de G é dito ser o *índice do grafo G* . Os autovetores associados aos autovalores de G são denominados *autovetores do grafo*. O subespaço vetorial de \mathbb{R}^n contendo o vetor nulo e os autovetores associados ao autovalor λ é o *autoespaço associado a λ* , denotado por $\mathcal{E}_G(\lambda)$.

Proposição 2.16 (DOOB [28]) *Seja λ_{\min} o menor autovalor de um grafo G . Tem-se:*

- (i) $\lambda_{\min} = 0$ se e somente se G é um grafo sem arestas;
- (ii) $\lambda_{\min} = -1$ se e somente se G possui todas as componentes completas;
- (iii) $\lambda_{\min} \leq -\sqrt{2}$, em caso contrário.

Se \overline{G} é o grafo complementar do grafo G de ordem n então a sua matriz de adjacência é $A(\overline{G}) = J - I - A(G)$. O próximo resultado fornece o polinômio característico de \overline{G} em função do polinômio característico de G .

Teorema 2.17 (CVETKOVIĆ e DOOB [30]) *Seja G um grafo com n vértices e $p_G(x) = \prod_{i=1}^n (x - \lambda_i(G))$ o seu polinômio característico. O polinômio característico de \overline{G} é*

$$P_{\overline{G}}(x) = (-1)^n P_G(-1 - x) \left(1 - \sum_{i=1}^n \frac{(j^T \mathbf{v}_i)^2}{x + 1 + \lambda_i(G)} \right),$$

onde $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$ são autovetores linearmente independentes associados aos autovalores $\lambda_1(G), \lambda_2(G), \dots, \lambda_n(G)$, respectivamente.

O teorema a seguir caracteriza os grafos regulares considerando o grau médio e o grau máximo do grafo.

Teorema 2.18 (CVETKOVIĆ *et al.* [26]) *Se λ_1 é o índice de um grafo G então $\overline{d} \leq \lambda_1 \leq \Delta$. Além disso, $\overline{d} = \lambda_1$ se e somente se G é regular. Para um grafo conexo G , $\lambda_1 = \Delta$ se e somente se G é regular.*

Observe que o Teorema 2.19 é um resultado forte já que é suficiente verificar que o simétrico do índice de um grafo G é autovalor de G , para verificarmos que G é bipartido e possui em seu espectro o simétrico de cada um dos seus autovalores.

Teorema 2.19 (CVETKOVIĆ *et al.* [33]) *Seja G um grafo conexo. Então as seguintes afirmações são equivalentes:*

- (i) G é um grafo bipartido;
- (ii) se λ é um autovalor de G então $-\lambda$ é também um autovalor de G com a mesma multiplicidade;
- (iii) $-\lambda_{\max}$ é um autovalor de G , onde λ_{\max} é o índice de G .

Destacamos o espectro dos ciclos, dos grafos bipartidos completos $K_{r,s}$ e dos grafos completos. Para cada $j \in \{1, 2, \dots, n\}$, $\mathbf{v}^{(j)} = \begin{pmatrix} 1 & \xi & \dots & \xi^{n-1} \end{pmatrix}$ é um autovetor associado a $\lambda_j = 2 \cos\left(\frac{j2\pi}{n}\right)$, autovalor do ciclo C_n , onde $\xi = e^{\frac{j2\pi}{n}}$. O espectro dos grafos bipartidos completos $K_{r,s}$ é constituído pelos autovalores simples $-\sqrt{rs}$ e \sqrt{rs} e pelo autovalor nulo com multiplicidade $r + s - 2$. Em particular, o espectro da estrela com n vértices $K_{1,n-1}$ é formado pelos autovalores simples $-\sqrt{n-1}$, $\sqrt{n-1}$ e pelo autovalor 0 com multiplicidade $n - 2$ (veja [35]). Finalmente, os autovalores do grafo completo K_n são $n - 1$ e -1 com multiplicidades 1 e $n - 1$, respectivamente. O índice de um grafo k -regular com n vértices é k , que possui como autovetor \mathbf{j} (vetor com todas as coordenadas iguais a 1). Como consequência do fato de K_n ser um grafo regular temos que os autovetores associados ao autovalor -1 é ortogonal a \mathbf{j} .

Teorema 2.20 (CVETKOVIĆ *et al.* [29]) *O polinômio característico do caminho \mathcal{P}_n é*

$$p(x) = \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (-1)^{n-j} \binom{n-j}{j} x^{n-2j} = \frac{\text{sen}((n+1) \arccos(-\frac{x}{2}))}{\sqrt{1 - \frac{x^2}{4}}}.$$

Teorema 2.21 (LEE e YEH [31]) *Seja \mathcal{P}_n o caminho com n vértices. Os autovalores de \mathcal{P}_n são autovalores simples $\alpha_j = 2 \cos\left(\frac{j\pi}{n+1}\right)$ que possui um autovetor $\mathbf{w}^{(j)} = (w_i)$ cuja i -ésima coordenada é definida por $w_i = \text{sen}\left(\frac{ij\pi}{n+1}\right)$ para todo $j \in \{1, 2, \dots, n\}$.*

Corolário 2.22 *Seja \mathcal{P}_n o caminho com n vértices. Para $j \in \{1, 2, \dots, n\}$ os autovalores de \mathcal{P}_n , $\alpha_j = 2 \cos\left(\frac{j\pi}{n+1}\right)$, estão dispostos em ordem decrescente.*

Demonstração. Considere a função $f(x) = 2 \cos\left(\frac{x\pi}{n+1}\right)$ para todo $x \in \mathbb{R}$. Derivando a função f , obtemos

$$f'(x) = \frac{-2\pi}{n+1} \operatorname{sen}\left(\frac{x\pi}{n+1}\right), \quad x \in \mathbb{R}.$$

Como $\frac{x\pi}{n+1} < \pi$ segue que $\operatorname{sen}\left(\frac{x\pi}{n+1}\right) > 0$. Deste modo, $f'(x) < 0$ e, portanto, f é decrescente. Logo, os autovalores de \mathcal{P}_n estão em ordem decrescente. \square

Proposição 2.23 (BROUWER e HAEMERS [35]) *O espectro de um grafo com mais de uma componente é a união dos espectros de suas respectivas componentes.*

O teorema a seguir é uma formulação para grafos conexos do Teorema de Perron-Frobenius (Teorema 2.6).

Teorema 2.24 (CVETKOVIĆ *et al.* [33]) *Um grafo G é conexo se e somente se o índice de G é um autovalor simples cujo autovetor correspondente possui todas as coordenadas positivas.*

Corolário 2.25 *Seja G um grafo desconexo. O índice de G possui um autovetor correspondente com coordenadas não negativas.*

Demonstração. Seja G um grafo desconexo com índice $\lambda_1(G)$.

Pela Proposição 2.23, $\lambda_1(G)$ é um autovalor de uma componente C de G . Do Teorema 2.24, existe um autovetor \mathbf{u} de C com todas as coordenadas positivas associado a $\lambda_1(G)$. O vetor \mathbf{v} que possui as mesmas coordenadas de \mathbf{u} nas entradas correspondentes aos vértices de C e coordenadas nulas em caso contrário, é um autovetor de G associado a $\lambda_1(G)$. Logo, o índice de G possui um autovetor com todas as entradas não negativas. \square

Também é possível obter informações sobre a conectividade de um grafo pela dimensão do autoespaço associado a seu índice, como mostra o próximo teorema.

Teorema 2.26 (CVETKOVIĆ *et al.* [33]) *O número de componentes de um grafo G é igual ao número máximo de autovetores não negativos linearmente independentes de G .*

Note que no Corolário 2.27, a condição do grafo ser conexo não é necessária, visto que em um grafo desconexo regular a multiplicidade do seu índice é igual ao número de componentes do grafo.

Corolário 2.27 (CVETKOVIĆ *et al.* [33]) *Um grafo G é regular se e somente se G possui um autovetor com todas as coordenadas iguais a 1.*

Dado G um grafo com n vértices, sejam i e j vértices distintos de G . Dizemos que i e j são *vértices gêmeos* quando $N_G(i) - \{j\} = N_G(j) - \{i\}$, o que implica $d(i) = d(j)$. Por exemplo, o grafo G na Figura 2.2 possui vértices gêmeos. As vizinhanças dos vértices adjacentes 1 e 2 são $N_G(1) = \{2, 3\}$ e $N_G(2) = \{1, 3\}$ sendo que $N_G(1) \setminus \{2\} = N_G(2) \setminus \{1\} = \{3\}$. Logo, 1 e 2 são vértices gêmeos. Por outro lado, os vértices não adjacentes 5, 6 e 7 possuem a mesma vizinhança $N_G(5) = N_G(6) = N_G(7) = \{4\}$ e, por conseguinte, $\{5, 6\}$, $\{5, 7\}$ e $\{6, 7\}$ são pares de vértices gêmeos.

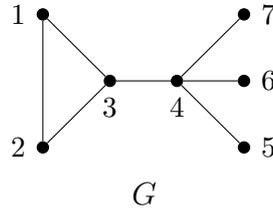


Figura 2.2: Tipos de vértices gêmeos

Sejam i e j vértices gêmeos. O n -vetor coluna $\mathbf{f}_{ij} = (f_\ell)$ é denominado um *vetor de Faria* quando suas coordenadas são definidas por

$$f_\ell = \begin{cases} 1, & \text{se } \ell = i; \\ -1, & \text{se } \ell = j; \\ 0, & \text{nos demais casos.} \end{cases}$$

O próximo resultado permite determinar alguns dos autovalores de um grafo G através da sua estrutura (veja [36] e [37]).

Teorema 2.28 *Seja $G = (V, E)$ um grafo com n vértices tal que i e j são vértices gêmeos de G .*

- (i) *Se $\{i, j\} \notin E$ então $0 \in \text{Spec}(G)$;*
- (ii) *Se $\{i, j\} \in E$ então $-1 \in \text{Spec}(G)$.*

Em cada caso, o vetor de Faria \mathbf{f}_{ij} é um autovetor de G que está associado ou ao autovalor 0 ou ao autovalor -1 , respectivamente.

Exemplificamos o Teorema 2.28 na Figura 2.3. O grafo G_1 possui zero como autovalor com multiplicidade maior ou igual a 4, pois os conjuntos $\{u_1, u_2\}$, $\{u_3, u_4\}$,

$\{u_5, u_6\}$ e $\{u_6, u_7\}$ são pares de vértices gêmeos não adjacentes de G_1 e seus correspondentes vetores de Faria: \mathbf{f}_{12} , \mathbf{f}_{34} , \mathbf{f}_{56} e \mathbf{f}_{67} , formam um conjunto linearmente independente de autovetores associados ao autovalor 0. Note que, G_1 possui ainda o par de vértices gêmeos não adjacentes $\{u_5, u_7\}$, porém $\mathbf{f}_{57} = \mathbf{f}_{56} + \mathbf{f}_{67}$. Por outro lado, v_1 e v_2 são vértices gêmeos adjacentes do grafo G_2 e, portanto, -1 é um autovalor do grafo G_2 .

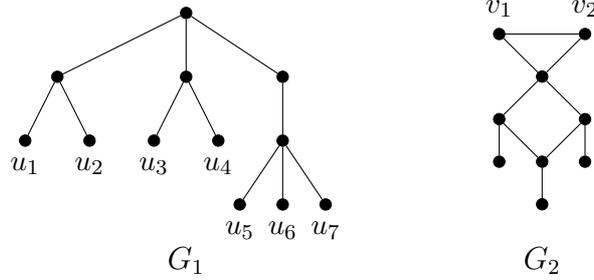


Figura 2.3: Pares de vértices gêmeos rotulados em G_1 e G_2

Note que a recíproca do Teorema 2.28 não é sempre verdadeira. O caminho \mathcal{P}_5 contém zero como autovalor, mas não possui vértices gêmeos.

Seja $G = (V, E)$ um grafo com n vértices. Denotamos por $d_k(i)$ o número de cadeias do grafo G de comprimento k que começam no vértice i . Para todo $i \in V$, temos que $d_0(i) = 1$, $d_1(i) = d(i)$ e $d_{k+1}(i) = \sum_{j \in N_G(i)} d_k(j)$ para todo inteiro $k \geq 0$.

Lema 2.29 *Se i é um vértice de um grafo G então o número de cadeias de comprimento 2 que começa no vértice i é a soma dos graus dos seus vizinhos, isto é, $d_2(i) = \sum_{j \in N_G(i)} d(j)$.*

A *matriz cadeia* de um grafo G com n vértices é a matriz quadrada $W = (w_{ij})$ de ordem n tal que $w_{ij} = d_{j-1}(i)$. Caso seja necessário, denotamos tal matriz por $W(G)$. A Figura 2.4 explicita o caminho \mathcal{P}_5 e, a seguir, a sua matriz cadeia.

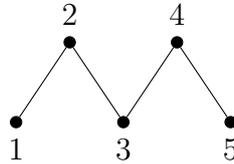


Figura 2.4: \mathcal{P}_5

$$W = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & 3 & 6 \\ 1 & 2 & 3 & 6 & 9 \\ 1 & 2 & 4 & 6 & 12 \\ 1 & 2 & 3 & 6 & 9 \\ 1 & 1 & 2 & 3 & 6 \end{pmatrix}.$$

Para explicar a sua construção, analisamos as entradas w_{33} e w_{54} . Como as cadeias de comprimento 2 que começam no vértice 3 são: 323 , 321 , 343 e 345 temos que $w_{33} = d_2(3) = 4$. Por outro lado, as cadeias de comprimento 3 que começam no vértice 5 são: 5454 , 5434 e 5432 e, portanto, $w_{54} = d_3(5) = 3$.

O próximo teorema relaciona a quantidade de cadeias de um grafo com a sua matriz de adjacência. Sua demonstração pode ser encontrada em [17] e [34].

Teorema 2.30 *Se A é a matriz de adjacência de um grafo G , então a ij -entrada da matriz A^k é igual ao número de cadeias de comprimento k que começam no vértice i e terminam no vértice j .*

Pelo Teorema 2.30, se A é a matriz de adjacência de um grafo G com n vértices então $A^k j$ é o n -vetor coluna cuja i -ésima coordenada é igual ao número de cadeias de comprimento k que começam no vértice i . Assim, a matriz cadeia pode ser escrita do seguinte modo

$$W = \begin{pmatrix} j & Aj & \cdots & A^{n-1}j \end{pmatrix}.$$

Retornemos à Figura 2.4 para ilustrar o Teorema 2.30. A menos de semelhança, a matriz de adjacência de \mathcal{P}_5 e sua potência ao quadrado são

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad A^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Temos que o vetor $A^2 j = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 & 3 & 2 \end{pmatrix}^T$ coincide exatamente com a terceira coluna da matriz cadeia do caminho \mathcal{P}_5 .

Capítulo 3

Autovalores principais de um grafo

Alguns problemas combinatórios podem ser reduzidos a calcular o número de cadeias em grafos. É possível determinar o número de cadeias em um grafo em função dos autovalores e autovetores de tal grafo. Isto indica uma importante ligação entre as propriedades espectrais e estruturais de um grafo.

Sejam $\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_m}$ os autovalores distintos de um grafo G de ordem n . Pelo Teorema 2.13, a matriz de adjacência A de G possui a decomposição espectral

$$A = \lambda_{t_1}P_1 + \lambda_{t_2}P_2 + \dots + \lambda_{t_m}P_m,$$

onde P_i é a projeção espectral associada a A .

Assim, $A^k = (\lambda_{t_1})^k P_1 + (\lambda_{t_2})^k P_2 + \dots + (\lambda_{t_m})^k P_m$ para $k \geq 0$. Então,

$$j^T A^k j = \sum_{i=1}^m (\lambda_{t_i})^k \|P_i j\|^2, \quad (3.1)$$

onde j é o n -vetor coluna com todas as coordenadas iguais a 1.

Pela equação 3.1, o número de cadeias de comprimento k no grafo G depende dos autovalores λ_{t_i} tais que $\|P_i j\|^2 \neq 0$, onde $i \in \{1, 2, \dots, m\}$. Em vista disto, CVETKOVIĆ [1] definiu um *autovalor principal de G* como um autovalor λ_{t_i} para o qual $\|P_i j\|^2 \neq 0$, ou seja, λ é um autovalor principal de G se existe um autovetor \mathbf{v} associado a λ que não é ortogonal a j . Caso contrário, dizemos que λ é um *autovalor não principal de G* . Note que na contagem dos autovalores principais de um grafo são considerados somente aqueles que são distintos. O subconjunto do $Spec(G)$ formado pelos autovalores principais distintos de G é chamado *espectro principal de G* e denotado por $MainSpec(G)$.

Proposição 3.1 (CVETKOVIĆ [1]) *O índice de um grafo G pertence a $MainSpec(G)$.*

Demonstração. Pelo Teorema 2.24, o índice de todo grafo conexo é um autovalor principal. Se G é um grafo desconexo, basta notar que seu espectro é a união dos espectros de suas componentes conexas. □

O teorema a seguir garante que os grafos regulares são os únicos grafos com um único autovalor principal.

Teorema 3.2 (CVETKOVIĆ *et al.* [32]) *Um grafo é regular se e somente se possui um único autovalor principal.*

Demonstração. Seja G um grafo de ordem n que possui m autovalores distintos. O conjunto dos autovalores distintos de G é $\{\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_m}\}$ tal que λ_{t_1} é o índice de G .

É conhecido que o grafo G é regular se e somente se $j \in \mathcal{E}_G(\lambda_{t_1})$ (Corolário 2.27). Isto equivale a

$$j \in (\mathcal{E}_G(\lambda_{t_2}) \oplus \mathcal{E}_G(\lambda_{t_3}) \oplus \dots \oplus \mathcal{E}_G(\lambda_{t_m}))^\perp.$$

Logo, G é regular se e somente se possui um único autovalor principal. □

Seja G um grafo de ordem n com m autovalores distintos para os quais, s deles são autovalores principais distintos de G . Convencionamos que a ordenação não necessariamente decrescente dada pelo conjunto $\{\lambda_{t_1}, \dots, \lambda_{t_s}, \lambda_{t_{s+1}}, \dots, \lambda_{t_m}\}$, indicará que os seus s primeiros elementos constituem $MainSpec(G)$ de modo que $\lambda_{t_1} > \lambda_{t_2} > \dots > \lambda_{t_s}$. Neste caso, λ_{t_1} é o índice do grafo G , pois o índice de todo grafo é sempre um autovalor principal (Teorema 3.1).

Para cada $i \in \{1, 2, \dots, s\}$ podemos estender uma base de $\mathcal{E}_G(\lambda_{t_i}) \cap Span(j)^\perp$ a uma base ortonormal de $\mathcal{E}_G(\lambda_{t_i})$ adicionando-se pelo menos um vetor unitário \mathbf{v}_{t_i} , que não será ortogonal ao vetor j . O subespaço gerado por $\mathcal{M}_s = \{\mathbf{v}_{t_1}, \mathbf{v}_{t_2}, \dots, \mathbf{v}_{t_s}\}$ será denotado por $Main(G)$.

Dado um grafo G com s autovalores principais distintos, o *polinômio característico principal* de G é o polinômio cujas raízes são os autovalores principais, que denotamos por

$$M(G, x) = \prod_{i=1}^s (x - \lambda_{t_i}) = x^s - c_0 x^{s-1} - c_1 x^{s-2} - \dots - c_{s-2} x - c_{s-1},$$

onde $c_j \in \mathbb{R}$ para todo $j \in \{0, 1, \dots, s-1\}$.

Proposição 3.3 (CVETKOVIĆ *et al.* [32]) *Se G é um grafo com s autovalores principais distintos então os coeficientes de $M(G, x)$ são números inteiros, ou seja, $M(G, x)$ é um polinômio inteiro.*

Na Proposição 3.4, temos que os grafos e os seu complementares possuem o mesmo número de autovalores principais.

Proposição 3.4 (CVETKOVIĆ [2]) *Um grafo G e o seu complementar \overline{G} possuem o mesmo número de autovalores principais.*

Demonstração. Seja G um grafo de ordem n que possui m autovalores distintos.

Consideremos $\{\lambda_{t_1}, \dots, \lambda_{t_s}, \lambda_{t_{s+1}}, \dots, \lambda_{t_m}\}$ o seu conjunto de autovalores distintos, sendo que os s primeiros são seus autovalores principais.

Suponhamos que $\mathbf{v} \in \mathcal{E}_G(\lambda_{t_i}) \cap \text{Span}(j)^\perp$ para algum $i \in \{1, 2, \dots, m\}$. Como $A(\overline{G}) = J - I - A(G)$ então $A(\overline{G})\mathbf{v} = (J - I - A(G))\mathbf{v} = J\mathbf{v} - I\mathbf{v} - A(G)\mathbf{v}$. Assim, $A(\overline{G})\mathbf{v} = (-1 - \lambda_{t_i})\mathbf{v}$.

Para $i \in \{1, 2, \dots, m\}$, temos

$$\mathcal{E}_G(\lambda_{t_i}) \cap \text{Span}(j)^\perp \subseteq \mathcal{E}_{\overline{G}}(-1 - \lambda_{t_i}), \quad (3.2)$$

onde $\mathcal{E}_{\overline{G}}(-1 - \lambda_{t_i})$ pode ser o subespaço nulo.

Pelo Teorema 2.15, $\mathbb{R}^n = \mathcal{E}_G(\lambda_{t_1}) \oplus \mathcal{E}_G(\lambda_{t_2}) \oplus \dots \oplus \mathcal{E}_G(\lambda_{t_m})$. Para todo $i \in \{1, 2, \dots, m\}$, se λ_{t_i} é não principal então $\mathcal{E}_G(\lambda_{t_i}) = \mathcal{E}_G(\lambda_{t_i}) \cap \text{Span}(j)^\perp$. Portanto, $n - s = \sum_{i=1}^m \dim(\mathcal{E}_G(\lambda_{t_i}) \cap \text{Span}(j)^\perp)$.

Seja \mathcal{B}_i uma base ortonormal do subespaço $\mathcal{E}_G(\lambda_{t_i})$ para $i \in \{1, 2, \dots, m\}$. Por (3.2), os $n - s$ vetores linearmente independentes em $\bigcup_{i=1}^m \mathcal{B}_i$ pertencem a $\text{Span}(j)^\perp$.

Logo, se tais vetores forem autovetores de \overline{G} então estarão associados a autovalores não principais de \overline{G} . Deste modo, \overline{G} tem no máximo s autovalores principais distintos. Substituindo G e \overline{G} nas contas anteriores, concluímos que G e \overline{G} possuem o mesmo número de autovalores principais. □

Seja G um grafo de ordem n e seja $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$ uma base ortonormal de autovetores associados aos autovalores de G . Pelo Teorema 2.17, o polinômio característico de \overline{G} é

$$\begin{aligned}
P_{\overline{G}}(x) &= \prod_{i=1}^n (x - \lambda_i(\overline{G})) \\
&= (-1)^n P_G(-1 - x) \left(1 - \sum_{i=1}^n \frac{(j^T \mathbf{v}_i)^2}{x + 1 + \lambda_i(G)} \right) \\
&= (-1)^n \prod_{i=1}^n (-1 - x - \lambda_i(G)) \left(1 - \sum_{i=1}^n \frac{(j^T \mathbf{v}_i)^2}{x + 1 + \lambda_i(G)} \right) \\
&= \prod_{i=1}^n (x + 1 + \lambda_i(G)) - \sum_{i=1}^n (j^T \mathbf{v}_i)^2 \prod_{j=1, j \neq i}^n (x + 1 + \lambda_j(G)).
\end{aligned}$$

Suponhamos que $MainSpec(G) = \{\lambda_{t_1}(G), \lambda_{t_2}(G), \dots, \lambda_{t_s}(G)\}$ e $MainSpec(\overline{G}) = \{\lambda_{t_1}(\overline{G}), \lambda_{t_2}(\overline{G}), \dots, \lambda_{t_s}(\overline{G})\}$.

Se $Main(G) = Span(\mathcal{M}_s)$, onde $\mathcal{M}_s = \{\mathbf{v}_{t_1}, \mathbf{v}_{t_2}, \dots, \mathbf{v}_{t_s}\} \subseteq \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$, então podemos simplificar ainda mais o polinômio característico de \overline{G} , considerando apenas os autovalores principais de G e \overline{G} ,

$$\prod_{i=1}^s (x - \lambda_{t_i}(\overline{G})) = \prod_{i=1}^s (x + 1 + \lambda_{t_i}(G)) - \sum_{i=1}^s (j^T \mathbf{v}_{t_i})^2 \prod_{j=1, j \neq i}^s (x + 1 + \lambda_{t_j}(G)). \quad (3.3)$$

Se λ é um autovalor principal de um grafo G então $-1 - \lambda$ não é necessariamente um autovalor principal do seu complementar \overline{G} . Por exemplo, o espectro do ciclo C_4 é constituído pelos autovalores simples -2 e 2 e pelo autovalor 0 com multiplicidade 2 , enquanto que o espectro do seu complementar $\overline{C_4} = 2K_2$ é formado pelos autovalores -1 e 1 , ambos com multiplicidade 2 . Como C_4 e $2K_2$ são grafos regulares segue que possuem o seu índice como seu único autovalor principal. Considerando o autovalor principal $\lambda_1(2K_2) = 1$, temos que $-1 - \lambda_1(2K_2) = -2$ é um autovalor não principal de C_4 . Por outro lado, escolhendo o autovalor principal $\lambda_1(C_4) = 2$ temos que $-1 - \lambda_1(C_4) = -3$ não é sequer um autovalor de $2K_2$. Na verdade, pode-se provar o seguinte:

Teorema 3.5 (CVETKOVIĆ [2]) *Se λ é um autovalor principal de um grafo G então $-1 - \lambda$ é um autovalor não principal de \overline{G} .*

Demonstração. Dado um grafo G , sejam $\lambda_{t_1}(G), \lambda_{t_2}(G), \dots, \lambda_{t_s}(G)$ os autovalores distintos de G .

Pela Proposição 3.4, \overline{G} também possui s autovalores principais distintos dados pelo conjunto $MainSpec(\overline{G}) = \{\lambda_{t_1}(\overline{G}), \lambda_{t_2}(\overline{G}), \dots, \lambda_{t_s}(\overline{G})\}$.

Suponhamos, por absurdo, que existe $k \in \{1, 2, \dots, s\}$ tal que $-1 - \lambda_{t_k}(G)$ é um autovalor principal de \overline{G} , isto é, existe $k^* \in \{1, 2, \dots, s\}$ tal que $\lambda_{t_{k^*}}(\overline{G}) = -1 - \lambda_{t_k}(G)$.

Calculando a equação 3.3 em $\lambda_{t_k^*}(\overline{G})$ temos

$$\begin{aligned} \prod_{i=1}^s (\lambda_{t_k^*}(\overline{G}) - \lambda_{t_i}(\overline{G})) &= \prod_{i=1}^s (-1 - \lambda_{t_k}(G) + 1 + \lambda_{t_i}(G)) \\ &\quad - (j^T \mathbf{v}_{t_k})^2 \prod_{j=1, j \neq k}^s (-1 - \lambda_{t_k}(G) + 1 + \lambda_{t_j}(G)) \\ &= - (j^T \mathbf{v}_{t_k})^2 \prod_{j=1, j \neq k}^s (-\lambda_{t_k}(G) + \lambda_{t_j}(G)) \neq 0. \end{aligned}$$

Porém, $\prod_{i=1}^s (\lambda_{t_k^*}(\overline{G}) - \lambda_{t_i}(\overline{G})) = 0$, pois $(\lambda_{t_k^*}(\overline{G}) - \lambda_{t_k^*}(\overline{G})) = 0$ é um dos fatores do produtório. Portanto, para nenhum $k \in \{1, 2, \dots, s\}$, $-1 - \lambda_k$ é um autovalor principal de \overline{G} . □

HAGOS [4] mostra, no Corolário 3.6, que se λ é um autovalor principal de G e também um autovalor simples (isto é, possui multiplicidade 1) então λ não está no espectro de \overline{G} .

Corolário 3.6 (HAGOS [4]) *Se λ é um autovalor simples e principal de um grafo G então $-1 - \lambda \notin \text{Spec}(\overline{G})$.*

Demonstração. Seja λ um autovalor simples e principal de um grafo G .

Suponhamos, por absurdo, que $-1 - \lambda \in \text{Spec}(\overline{G})$. Do Teorema 3.5, $-1 - \lambda$ é um autovalor não principal de \overline{G} .

Seja $A(\overline{G})\mathbf{v} = (-1 - \lambda)\mathbf{v}$. Como $A(\overline{G}) = J - I - A(G)$ segue que $A(\overline{G})\mathbf{v} = J\mathbf{v} - I\mathbf{v} - A(G)\mathbf{v}$. Assim, $(-1 - \lambda)\mathbf{v} = J\mathbf{v} - I\mathbf{v} - A(G)\mathbf{v}$. Deste modo, $A(G)\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$.

Como λ é um autovalor simples segue que o seu autoespaço possui um único representante. Mas, λ é um autovalor principal de G e, portanto, a soma das coordenadas de todos os autovetores de λ são diferentes de 0. Mas isto contraria o fato de que \mathbf{v} é um autovetor do autovalor não principal $-1 - \lambda$ de \overline{G} . □

Note que existem grafos com autovalores principais que possuem autovetores linearmente independentes que não são ortogonais a j . Por exemplo, o grafo desconexo $G = K_3 \cup K_3$. O índice é um autovalor principal de G (Proposição 3.1) que possui dois autovetores associados às componentes conexas (Corolário 2.25) que não são ortogonais a j e como exemplo de um grafo conexo que satisfaça esta condição, veja a árvore na Figura 3.1. Note que 0 é um autovalor principal de tal árvore e seu autoespaço contém os autovetores linearmente independentes $\mathbf{v}_1 = \left(0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ -1 \right)^T$ e $\mathbf{v}_2 = \left(0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ -1 \right)^T$ os quais não são ortogonais a j .

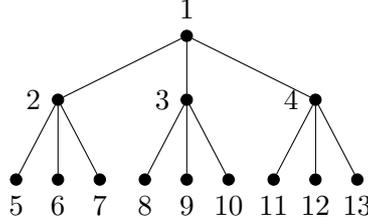


Figura 3.1: Árvore cujo autovalor 0 possui 2 autovetores não ortogonais a j

O Teorema 3.7 reúne alguns resultados que podem ser encontrados em [2] e [4].

Teorema 3.7 *Seja G um grafo de ordem n e $\lambda \in \text{Spec}(G)$. As seguintes afirmações são equivalentes:*

- (i) *o autovalor λ é não principal ou λ é principal com multiplicidade maior do que 1;*
- (ii) *existe um autovetor \mathbf{v} de G associado a λ tal que $j^T \mathbf{v} = 0$;*
- (iii) *o escalar $-1 - \lambda$ pertence a $\text{Spec}(\overline{G})$.*

Demonstração. Seja λ um autovalor de um grafo G de ordem n .

(i) \implies (ii): Se λ é um autovalor não principal então a afirmação (ii) segue direto da definição. Por outro lado, se λ é um autovalor principal que possui multiplicidade maior do que 1 então existem pelo menos dois autovetores linearmente independentes \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 associados a λ .

Se um dos vetores \mathbf{v}_1 ou \mathbf{v}_2 é ortogonal ao vetor j então obtemos o resultado desejado. Caso contrário, consideramos o vetor $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 - \frac{(j^T \mathbf{v}_1)}{(j^T \mathbf{v}_2)} \mathbf{v}_2$, que também é um autovetor de λ visto que é combinação linear de \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 . Como

$$j^T \mathbf{v} = j^T \left(\mathbf{v}_1 - \frac{(j^T \mathbf{v}_1)}{(j^T \mathbf{v}_2)} \mathbf{v}_2 \right) = j^T \mathbf{v}_1 - \frac{(j^T \mathbf{v}_1)}{(j^T \mathbf{v}_2)} (j^T \mathbf{v}_2) = 0,$$

temos que \mathbf{v} é ortogonal ao vetor j . Logo, existe um autovetor de G associado a λ ortogonal a j .

(ii) \implies (iii): Suponhamos que λ possui um autovetor \mathbf{v} tal que $j^T \mathbf{v} = 0$.

Como $A(\overline{G}) = J - I - A(G)$ segue que $J\mathbf{v} = (A(\overline{G}) + A(G) + I)\mathbf{v} = A(\overline{G})\mathbf{v} + (1 + \lambda)\mathbf{v}$. Porém,

$$J\mathbf{v} = \begin{pmatrix} j^T \mathbf{v} \\ \vdots \\ j^T \mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Logo, $A(\overline{G})\mathbf{v} = (-1 - \lambda)\mathbf{v}$ e, portanto, $-1 - \lambda$ é um autovalor de \overline{G} .

(iii) \implies (i): Se $-1 - \lambda$ é um autovalor de \overline{G} então, pelo Corolário 3.6, λ é não principal de G ou λ é principal com multiplicidade maior do que 1.

□

Como consequência direta do Teorema 3.7, o próximo resultado fornece uma condição necessária e suficiente para que um autovalor simples de um grafo seja não principal.

Corolário 3.8 *Se λ é um autovalor simples de um grafo G então $-1 - \lambda$ é um autovalor de \overline{G} se e somente se λ é não principal em G .*

O próximo resultado (Teorema 3.9) fornece a multiplicidade do autovalor $-1 - \lambda$ em \overline{G} de acordo com a multiplicidade de λ em G .

Teorema 3.9 (TERANISHI [38]) *Seja λ um autovalor de um grafo G . Tem-se:*

- (i) *se λ é um autovalor principal de G com multiplicidade maior do que 1 então $\mathcal{E}_{\overline{G}}(-1 - \lambda) \subset \mathcal{E}_G(\lambda)$ e $m_G(\lambda) = m_{\overline{G}}(-1 - \lambda) + 1$;*
- (ii) *se λ é um autovalor não principal de G e $-1 - \lambda$ é um autovalor não principal de \overline{G} então $\mathcal{E}_G(\lambda) = \mathcal{E}_{\overline{G}}(-1 - \lambda)$;*
- (iii) *se λ é um autovalor não principal de G e $-1 - \lambda$ é um autovalor principal de \overline{G} então $\mathcal{E}_G(\lambda) \subset \mathcal{E}_{\overline{G}}(-1 - \lambda)$ e $m_G(\lambda) = m_{\overline{G}}(-1 - \lambda) - 1$.*

Se G é um grafo com s autovalores principais, podemos determinar, a partir do espectro de G , todos os autovalores de \overline{G} , exceto os s autovalores principais de \overline{G} . Como exemplo, apresentamos o grafo G e o seu complementar \overline{G} na figura a seguir.

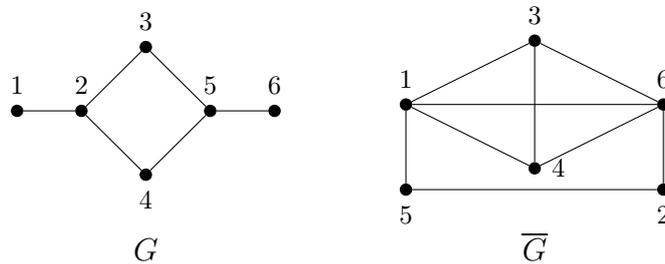


Figura 3.2: Grafos com três autovalores principais

Temos que $Spec(G) = \{-\sqrt{5}, -1, 0, 0, 1, \sqrt{5}\}$ sendo que seus autovalores principais são $-\sqrt{5}$, 0 e $\sqrt{5}$. Do Corolário 3.6, como $-\sqrt{5}$ e $\sqrt{5}$ são autovalores simples e principais de G segue que $-1 - \sqrt{5}$ e $-1 + \sqrt{5}$ não pertencem ao espectro de \overline{G} . Por outro lado, 0 é um autovalor principal de G com multiplicidade 2. Portanto, -1 é

um autovalor não principal de \overline{G} com multiplicidade 1 (item (i), Teorema 3.9). Visto que, do Teorema 3.7, -1 e 1 são autovalores não principais de G então -2 e 0 também pertencem ao espectro de \overline{G} . Observe que $m_{\overline{G}}(-2) = 1$, se -2 é um autovalor não principal de \overline{G} (item (ii), Teorema 3.9). Senão $m_{\overline{G}}(-2) = 2$ (item (iii), Teorema 3.9). As mesmas observações valem para o autovalor 0 . Deste modo, conseguimos três autovalores de \overline{G} , -2 , -1 e 0 , faltando apenas os três autovalores principais distintos. Analisando os autovetores de \overline{G} obtemos $MainSpec(\overline{G}) = \{1 - \sqrt{5}, 1, 1 + \sqrt{5}\}$.

CVETKOVIĆ [3], em 1978, levantou a questão da caracterização dos grafos que possuem um determinado número de autovalores principais. No teorema a seguir, apresentamos a caracterização de HAGOS [4] para grafos com exatamente k autovalores principais.

Teorema 3.10 (HAGOS [4]) *O posto da matriz cadeia de um grafo G é igual ao número de seus autovalores principais.*

Demonstração. Seja G um grafo de ordem n que possui s autovalores principais.

Suponhamos que $MainSpec(G) = \{\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_s}\}$ e $Main(G) = Span(\mathcal{M}_s)$, onde $\mathcal{M}_s = \{\mathbf{v}_{t_1}, \mathbf{v}_{t_2}, \dots, \mathbf{v}_{t_s}\}$.

Como $j \in Main(G)$ segue que existem números reais c_1, c_2, \dots, c_s tais que $j = \sum_{i=1}^s c_i \mathbf{v}_{t_i}$. Assim,

$$A^\ell j = \sum_{i=1}^s c_i (\lambda_{t_i})^\ell \mathbf{v}_{t_i} \text{ para todo } \ell \geq 0.$$

Portanto, $Span(j, Aj, \dots, A^{n-1}j) \subseteq Main(G)$ e o posto da matriz cadeia de G é menor ou igual a s .

Agora, vamos mostrar que o posto da matriz cadeia de G é maior ou igual a s . Para isso vamos verificar que as colunas $j, Aj, \dots, A^{s-1}j$ formam um conjunto linearmente independente.

Sejam k_1, k_2, \dots, k_s reais tais que

$$\sum_{j=1}^s k_j A^{j-1} j = \mathbf{0}. \quad (3.4)$$

Assim, $\left(\sum_{j=1}^s k_j A^{j-1} j\right)^T \mathbf{v}_{t_i} = \mathbf{0}^T \mathbf{v}_{t_i} = 0$ para todo $i \in \{1, 2, \dots, s\}$. Porém,

$$\begin{aligned} \left(\sum_{j=1}^s k_j A^{j-1} j\right)^T \mathbf{v}_{t_i} &= \sum_{j=1}^s k_j j^T (A^{j-1})^T \mathbf{v}_{t_i} \\ &= \sum_{j=1}^s k_j j^T (\lambda_{t_i})^{j-1} \mathbf{v}_{t_i} \\ &= j^T \mathbf{v}_{t_i} \sum_{j=1}^s k_j (\lambda_{t_i})^{j-1}, \end{aligned}$$

para todo $i \in \{1, 2, \dots, s\}$. Como $j^T \mathbf{v}_{t_i} \neq 0$ para todo $i \in \{1, 2, \dots, s\}$ segue que

$$\sum_{j=1}^s k_j (\lambda_{t_i})^{j-1} = 0 \quad \text{para todo } i \in \{1, 2, \dots, s\}. \quad (3.5)$$

Considerando a matriz quadrada $V = (v_{ij})$ de ordem s tal que $v_{ij} = (\lambda_{t_i})^{j-1}$, temos que o seu determinante é dado por $\prod_{q>r} (\lambda_{t_q} - \lambda_{t_r})$. Como os autovalores principais de G são distintos então o determinante de V é não nulo. Deste modo, a equação (3.5) implica em $k_j = 0$ para todo $j \in \{1, 2, \dots, s\}$. Portanto, $j, Aj, \dots, A^{s-1}j$ são linearmente independentes e o posto da matriz cadeia de G é s .

□

Para exemplificar o Teorema 3.10 retornaremos ao caminho \mathcal{P}_5 da Figura 2.4. A matriz de adjacência e matriz cadeia são respectivamente dadas por:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad W = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & 3 & 6 \\ 1 & 2 & 3 & 6 & 9 \\ 1 & 2 & 4 & 6 & 12 \\ 1 & 2 & 3 & 6 & 9 \\ 1 & 1 & 2 & 3 & 6 \end{pmatrix}.$$

O posto de W é 3 e o espectro de \mathcal{P}_5 é $\text{Spec}(\mathcal{P}_5) = \{-\sqrt{3}, -1, 0, 1, \sqrt{3}\}$, sendo que $-\sqrt{3}, 0$ e $\sqrt{3}$ são os autovalores principais de \mathcal{P}_5 .

Teorema 3.11 (HAGOS [4]) *Seja G um grafo de ordem n tal que $\mathbf{v}_{t_1}, \mathbf{v}_{t_2}, \dots, \mathbf{v}_{t_s}$ formam uma base ortonormal dos autovetores associados aos autovalores principais $\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_s}$, respectivamente. Seja $E = (e_{ij})$ a matriz quadrada de ordem s tal que $e_{ij} = j^T \mathbf{v}_{t_i} j^T \mathbf{v}_{t_j}$. Se $M = E - I - \text{diag}(\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_s})$ então os autovalores de M são precisamente os autovalores principais de \overline{G} . Além disso, se $\mathbf{v} = (v_i)$ é um autovetor associado a um autovalor λ de M então $\sum_{j=1}^s v_j \mathbf{v}_{t_j}$ é um autovetor de \overline{G} associado ao autovalor λ .*

3.1 Conjuntos (k, τ) -regulares

Um subconjunto C de vértices de um grafo G é dito ser (k, τ) -regular quando C induz um subgrafo k -regular, tal que todo vértice que não está em C possui τ vizinhos em C . Para mais detalhes consulte [39], [40] e [41]. O grafo G da Figura 3.3 possui o conjunto $(2, 2)$ -regular $S_1 = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ e o conjunto $(0, 2)$ -regular $S_2 = \{7, 8, 9, 10, 11, 12\}$.

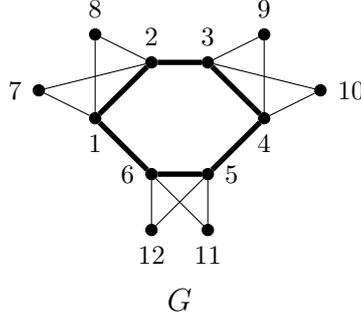


Figura 3.3: Conjuntos $(2, 2)$ -regular e $(0, 2)$ -regular

De fato, S_1 induz o ciclo C_6 e os vértices que não estão em S_1 são adjacentes a exatamente dois vértices no ciclo. Por exemplo, o vértice 7 é adjacente aos vértices 1 e 2, enquanto que o vértice 11 é adjacente aos vértices 5 e 6. Por outro lado, S_2 induz o grafo 0-regular $6K_1$ e os vértices que não estão em S_2 são adjacentes a exatamente dois vértices em S_2 . Como exemplo temos o vértice 4 que é adjacente aos vértices 9 e 10, enquanto que o vértice 1 é adjacente aos vértices 7 e 8.

Dado um subconjunto S de vértices de um grafo G , chama-se *vetor característico* \mathbf{x}_S de S , o n -vetor coluna que possui a i -ésima entrada $x_i = 1$, se $i \in S$, e $x_i = 0$, em caso contrário.

Os resultados a seguir relacionam autovalores principais e não principais de um grafo com os conjuntos (k, τ) -regulares deste grafo.

Teorema 3.12 (CARDOSO *et al.* [39]) *Seja $G = (V, E)$ um grafo e S um subconjunto (k, τ) -regular de vértices de G , $k \geq 0$ e $\tau > 0$.*

Sejam λ um autovalor de G e \mathbf{x}_S o vetor característico de S . Tem-se:

- (i) *λ é um autovalor não principal se e somente se uma das seguintes condições é verdadeira: ou $\lambda = k - \tau$ ou $\mathbf{x}_S \in (\mathcal{E}_G(\lambda))^\perp$;*
- (ii) *Se \mathbf{v} é um autovetor associado a um autovalor principal λ de G então $\mathbf{v}^T \mathbf{x}_S \neq 0$ e $\lambda = \tau \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{x}_{\bar{S}}}{\mathbf{v}^T \mathbf{x}_S} + k$, onde $\bar{S} = V \setminus S$.*

Corolário 3.13 (CARDOSO *et al.* [39]) *Sejam inteiros $k \geq 0$ e $\tau > 0$. Se $k - \tau$ é um autovalor principal de um grafo G então G não tem um conjunto (k, τ) -regular.*

Para qualquer grafo G de ordem n , se $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ então \mathbf{v} pode ser decomposto como $\mathbf{v} = \mathbf{g} + \mathbf{q}$, onde $\mathbf{g} \in \text{Main}(G)$ e $\mathbf{q} \in (\text{Main}(G))^\perp$.

Proposição 3.14 (CARDOSO *et al.* [40]) *Seja $G = (V, E)$ um grafo cujos autovalores principais são $\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_s}$. Seja $\{\mathbf{v}_{t_1}, \mathbf{v}_{t_2}, \dots, \mathbf{v}_{t_s}\}$ uma base ortonormal de $\text{Main}(G)$. Considere um conjunto (k, τ) -regular $S \subseteq V$, com $\tau > 0$, onde seu vetor característico \mathbf{x}_S é decomposto como $\mathbf{x}_S = \mathbf{g} + \mathbf{q}$, onde $\mathbf{g} \in \text{Main}(G)$ e $\mathbf{q} \in (\text{Main}(G))^\perp$.*

(i) Se $k - \tau \notin \text{Spec}(G)$ então $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ e $\mathbf{x}_S = \tau(A - (k - \tau)I)^{-1}\mathbf{j}$;

(ii) Se $k - \tau \in \text{Spec}(G)$ então $\mathbf{q} \in \mathcal{E}_G(k - \tau)$ e $\mathbf{g} = \sum_{i=1}^s \tau \frac{\mathbf{j}^T \mathbf{v}_{t_i}}{\lambda_{t_i} - (k - \tau)} \mathbf{v}_{t_i}$.

Seja $\{\mathbf{v}_{t_1}, \mathbf{v}_{t_2}, \dots, \mathbf{v}_{t_s}\}$ uma base ortonormal de autovetores associados aos respectivos autovalores principais $\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_s}$ de G , que não são ortogonais a \mathbf{j} . Se $k - \tau$ não é um autovalor principal de G , o vetor $\mathbf{g} = \sum_{i=1}^s \tau \frac{\mathbf{j}^T \mathbf{v}_{t_i}}{\lambda_{t_i} - (k - \tau)} \mathbf{v}_{t_i}$ é denominado vetor (k, τ) -paramétrico de G , veja [40].

Corolário 3.15 (CARDOSO *et al.* [40]) *Seja $G = (V, E)$ um grafo com s autovalores principais. Para os números inteiros $k \geq 0$ e $\tau > 0$, se não existe um vetor (k, τ) -paramétrico \mathbf{g} que é o vetor característico de um conjunto (k, τ) -regular $S \subseteq V$ então uma das seguintes afirmações é verdadeira:*

(i) não existe tal subconjunto de vértices S ;

(ii) $k - \tau$ não é um autovalor principal de G . Além disso, existem $\mathbf{q} \in \mathcal{E}_G(\lambda)$ e um vetor (k, τ) -paramétrico $\mathbf{g} \in \text{Main}(G)$ tais que $\mathbf{x}_S = \mathbf{g} + \mathbf{q}$.

Lema 3.16 (SCIRIHA e CARDOSO [41]) *Seja G um grafo de ordem n . Se S é um conjunto (k, τ) -regular com vetor característico \mathbf{x}_S então $A\mathbf{x}_S = (k - \tau)\mathbf{x}_S + \tau\mathbf{j}$.*

Um grafo é dito *singular* se possui 0 como autovalor. A existência de conjuntos (k, k) -regulares em um grafo singular nos permite verificar, através da estrutura do grafo, se 0 é um autovalor não principal.

Proposição 3.17 (SCIRIHA e CARDOSO [41]) *Se G é um grafo singular com n vértices e se, para algum $k > 0$, G possui um conjunto (k, k) -regular então zero é um autovalor não principal.*

Demonstração. Seja G um grafo singular que possui um subconjunto de vértices (k, k) -regular, onde $k > 0$.

Pelo Lema 3.16, se \mathbf{x}_S é o vetor característico do conjunto (k, k) -regular então $A\mathbf{x}_S = k\mathbf{j}$. Se \mathbf{v} é um autovetor associado ao autovalor 0 então $(A\mathbf{v})^T = \mathbf{0}$. Assim, $\mathbf{v}^T A^T \mathbf{x}_S = \mathbf{0}$ e, portanto, $\mathbf{v}^T A\mathbf{x}_S = \mathbf{0}$. Como $A\mathbf{x}_S = k\mathbf{j}$ segue que $\mathbf{v}^T k\mathbf{j} = 0$. Logo, zero é um autovalor não principal de G . □

O grafo da Figura 3.3 é um grafo singular e tem um subconjunto de vértices que é $(2, 2)$ -regular. Deste modo, este grafo possui zero como um autovalor não principal. Outro exemplo é o caminho \mathcal{P}_6 . Este é um grafo singular em que o zero é um autovalor não principal, porém não possui um conjunto de vértices (k, k) -regular. Isto mostra que o fato de um grafo possuir um conjunto (k, k) -regular é

uma condição suficiente mas não necessária para que zero seja um autovalor não principal.

Corolário 3.18 (SCIRIHA e CARDOSO [41]) *Se G possui zero como um autovalor principal então G não possui conjuntos (k, k) -regulares para $n > k > 0$.*

3.2 Grafos harmônicos

Um grafo $G = (V, E)$ é *harmônico* (ou ℓ -*harmônico*) se existe um número natural ℓ tal que para todo vértice $v \in V$, $\sum_{u \in N_G(v)} d(u) = \ell d(v)$, ou seja, $Ad_G = \ell d_G$. Os grafos harmônicos foram apresentados em [42] e [43].

Os grafos conexos regulares são exemplos de grafos harmônicos, pois os índices de tais grafos são simples e possuem o vetor com todas as coordenadas iguais a 1 como autovetor. Para mais exemplos, exibimos na Figura 3.4 os grafos G_1 e G_2 que são 4-harmônico e 3-harmônico, respectivamente.

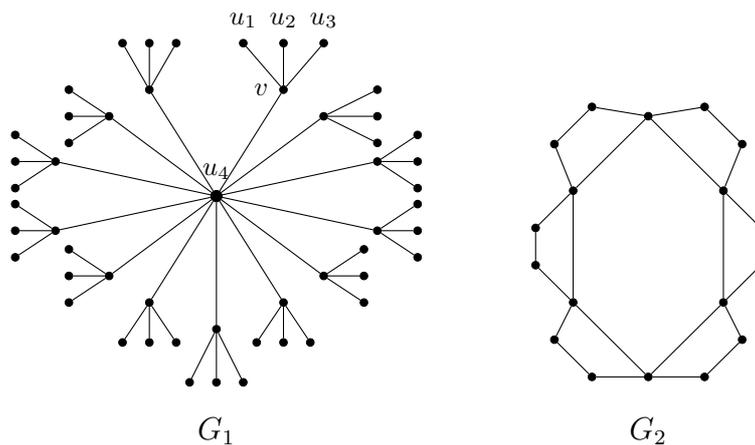


Figura 3.4: Grafos 4-harmônico e 3-harmônico

Os graus dos vértices do grafo G_1 , da Figura 3.4, são: 1, 4 ou 13. Seleccionamos os vértices v , u_1, u_2, u_3 e u_4 tais que $d(v) = 4$, $d(u_i) = 1$ para todo $i \in \{1, 2, 3\}$ e $d(u_4) = 13$. Assim, $\sum_{i=1}^4 d(u_i) = 4d(v)$, o que mostra que G_1 é um grafo 4-harmônico. De modo análogo, mostra-se que G_2 é um grafo 3-harmônico.

Para todo natural $\ell \geq 2$, GRÜNEWALD [42] definiu a árvore \mathcal{T}_ℓ como sendo a árvore obtida de $\ell^2 - \ell + 1$ estrelas disjuntas $K_{1, \ell-1}$ cujos vértices centrais possuem um vizinho em comum. Ainda em [42], Grünwald mostrou que tais árvores são as únicas árvores finitas ℓ -harmônicas e que o único grafo conexo 2-harmônico é a árvore \mathcal{T}_2 . Como exemplos de árvores harmônicas temos o grafo G_1 na Figura 3.4, que é a árvore \mathcal{T}_4 , e a árvore \mathcal{T}_2 na Figura 3.5.

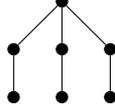


Figura 3.5: Árvore 2-harmônica \mathcal{T}_2

BOROVICANIN *et al.* [44] mostraram que nenhum grafo conexo irregular unicíclico ou bicíclico pode ser harmônico e que existem exatamente 4 e 16 grafos conexos, irregulares e harmônicos tricíclicos e tetracíclicos, respectivamente.

Seja G um grafo que possui s autovalores principais. O vetor discriminante de G é definido em [41] por $\nu_G = c_{s-2}\mathbf{j} + c_{s-3}A\mathbf{j} + \cdots + c_0A^{s-2}\mathbf{j} - A^{s-1}\mathbf{j}$, onde os c_i 's são os coeficientes do polinômio característico principal de G . A proposição a seguir apresenta um critério para que um grafo possua zero como um autovalor principal.

Proposição 3.19 (SCIRIHA e CARDOSO [41]) *Sejam G um grafo não regular e ν_G o vetor discriminante. Tem-se que $\lambda = 0$ é um autovalor principal de G se e somente se $A\nu_G = \mathbf{0}$ e $\nu_G \neq \mathbf{0}$.*

A árvore 2-harmônica \mathcal{T}_2 da Figura 3.5 possui polinômio característico principal $M(\mathcal{T}_2, x) = x^2 - 2x$, isto é, zero é um dos seus autovalores principais. Com efeito, o vetor discriminante de \mathcal{T}_2 é $\nu_{\mathcal{T}_2} = 2\mathbf{j} - A\mathbf{j} \neq \mathbf{0}$, onde A é a matriz de adjacência de \mathcal{T}_2 . Como $A\nu_{\mathcal{T}_2} = 2A\mathbf{j} - A^2\mathbf{j} = \mathbf{0}$ segue, da Proposição 3.19, que zero é um autovalor principal de \mathcal{T}_2 .

Capítulo 4

Grafos com dois autovalores principais

No Capítulo 3, citamos a questão de CVETKOVIĆ [3] sobre a caracterização dos grafos com um número determinado de autovalores principais. Os grafos regulares foram caracterizados como os grafos com exatamente um autovalor principal (veja [32]). Os grafos com dois autovalores principais foram caracterizados em [4] e encontramos diversos resultados relativos a estes grafos em [5], [6], [7], [8], [9], [45] e [46]. Em meio as nossas pesquisas, nos deparamos com os grafos conexos que possuem todos os autovalores distintos e principais conhecidos por *grafos controláveis*, que foram definidos por CVETKOVIĆ *et al.* [47] em 2011. Embora tais grafos não sejam objetos de estudo aqui, apresentamos na Figura 4.1 exemplos de grafos controláveis e indicamos os artigos [47], [48], [49] e [50], onde o leitor pode encontrar diversos resultados sobre eles.

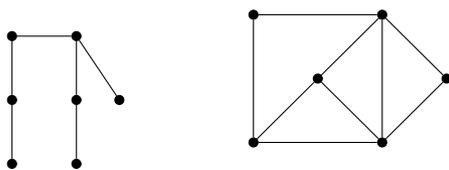


Figura 4.1: Grafos controláveis

Iniciamos este capítulo, apresentando os resultados de HAGOS [4] para grafos com dois autovalores principais. O autor dá um critério para que um grafo possua exatamente dois autovalores principais.

Lema 4.1 (HAGOS [4]) *Seja G um grafo de ordem n . Se $\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_s}$ são os autovalores principais distintos de G e $P = \prod_{i=1}^s (A - \lambda_{t_i} I)$ então $Pj = \mathbf{0}$.*

Demonstração. *Seja $MainSpec(G) = \{\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_s}\}$ o conjunto dos autovalores principais distintos de um grafo G .*

Considere $Main(G) = Span(\mathcal{M}_s)$, onde $\mathcal{M}_s = \{\mathbf{v}_{t_1}, \mathbf{v}_{t_2}, \dots, \mathbf{v}_{t_s}\}$ é uma base ortonormal dos autovetores, não ortogonais a J , associados aos autovalores $\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_s}$, respectivamente.

Como $J \in Main(G)$ segue que existem reais c_1, c_2, \dots, c_s tais que $J = \sum_{j=1}^s c_j \mathbf{v}_{t_j}$. Assim, se A é a matriz de adjacência do grafo G e $P = \prod_{i=1}^s (A - \lambda_{t_i} I)$ então

$$\begin{aligned} PJ &= \prod_{i=1}^s (A - \lambda_{t_i} I) \sum_{j=1}^s c_j \mathbf{v}_{t_j} \\ &= \sum_{j=1}^s c_j \prod_{i=1}^s (A - \lambda_{t_i} I) \mathbf{v}_{t_j} \\ &= \sum_{j=1}^s c_j \mathbf{v}_{t_j} \prod_{i=1}^s (\lambda_{t_j} - \lambda_{t_i}). \end{aligned}$$

Como $\prod_{i=1}^s (\lambda_{t_j} - \lambda_{t_i}) = 0$ segue que $PJ = \mathbf{0}$. □

Note que se G é um grafo desconexo e regular então o índice tem multiplicidade maior do que 1. No próximo teorema HAGOS [4] fornece um critério para um grafo, não necessariamente conexo, ter exatamente dois autovalores principais.

Teorema 4.2 (HAGOS [4]) *Um grafo G possui exatamente dois autovalores principais se e somente se existem únicos $a, b \in \mathbb{Q}$ não simultaneamente nulos tais que $A^2 J - aA J - bJ = \mathbf{0}$. Neste caso, $a = \frac{d_2(u) - d_2(v)}{d(u) - d(v)}$ e $b = \frac{d(v)d_2(u) - d(u)d_2(v)}{d(u) - d(v)}$, onde u e v são dois vértices quaisquer de G com graus distintos.*

Demonstração. Suponhamos que G possui dois autovalores principais. Pelo Lema 4.1, se G tem exatamente dois autovalores principais λ_{t_1} e λ_{t_2} então

$$A^2 J - (\lambda_{t_1} + \lambda_{t_2})A J + (\lambda_{t_1} \lambda_{t_2})J = \mathbf{0}.$$

Como G possui dois autovalores principais temos que ele é não regular. Dados u e v vértices de G com graus distintos temos que

$$d_2(u) - (\lambda_{t_1} + \lambda_{t_2})d(u) + \lambda_{t_1} \lambda_{t_2} = 0 \quad \text{e} \quad d_2(v) - (\lambda_{t_1} + \lambda_{t_2})d(v) + \lambda_{t_1} \lambda_{t_2} = 0.$$

Assim,

$$\lambda_{t_1} + \lambda_{t_2} = \frac{d_2(u) - d_2(v)}{d(u) - d(v)} \quad \text{e} \quad \lambda_{t_1} \lambda_{t_2} = \frac{d(v)d_2(u) - d(u)d_2(v)}{d(u) - d(v)},$$

ou seja, existem $a = \frac{d_2(u) - d_2(v)}{d(u) - d(v)}$ e $b = \frac{d(v)d_2(u) - d(u)d_2(v)}{d(u) - d(v)}$ não simultaneamente nulos tais que $A^2 J - aA J + bJ = \mathbf{0}$.

Reciprocamente, se $A^2 J - aA J + bJ = \mathbf{0}$, onde $a = \frac{d_2(u) - d_2(v)}{d(u) - d(v)}$ e $b = \frac{d(v)d_2(u) - d(u)d_2(v)}{d(u) - d(v)}$ com $d(u) \neq d(v)$, ou seja, a terceira coluna da matriz cadeia é escrita como combinação linear das duas primeiras colunas, então o posto da matriz cadeia de G é

menor ou igual a 2. Do Teorema 3.10, G possui no máximo dois autovalores principais. Como $d(u) \neq d(v)$ segue que G não é um grafo regular e, portanto, G possui exatamente dois autovalores principais. \square

Como exemplo de grafos com exatamente dois autovalores principais temos: a estrela $K_{1,6}$ e o grafo desconexo G , dados na Figura 4.2.

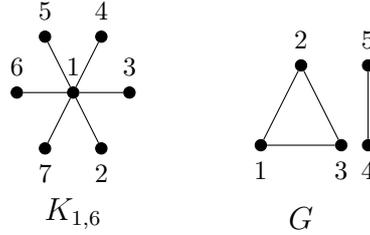


Figura 4.2: Grafos com 2 autovalores principais

Os autovalores principais de $K_{1,6}$ são $\sqrt{6}$ e $-\sqrt{6}$. Para todo $i \in \{1, 2, \dots, 7\}$, tem-se $d_2(i) = 6$. Assim, para $a = \frac{d_2(1)-d_2(2)}{d(1)-d(2)} = 0$ e $b = \frac{d(2)d_2(1)-d(1)d_2(2)}{d(1)-d(2)} = \frac{30}{5} = 6$, a equação $A^2j - 6j = 0$ é satisfeita. Com efeito, a i -ésima entrada de A^2j é exatamente igual a $d_2(i) = 6$. Do mesmo modo, o grafo G possui exatamente dois autovalores principais, que são 1 e 2, pois existem únicos $a = \frac{d_2(1)-d_2(4)}{d(1)-d(4)} = 3$ e $b = \frac{d(4)d_2(1)-d(1)d_2(4)}{d(1)-d(4)} = 0$ que satisfazem $A^2j - 3Aj = 0$.

Corolário 4.3 (HAGOS [4]) *Os autovalores principais de um grafo com exatamente dois autovalores principais são $\lambda_{t_1} = \frac{a+\sqrt{a^2-4b}}{2}$ e $\lambda_{t_2} = \frac{a-\sqrt{a^2-4b}}{2}$, onde a e b são dados no Teorema 4.2.*

Demonstração. Seja G um grafo com exatamente dois autovalores principais, λ_{t_1} e λ_{t_2} .

Pelo Teorema 4.2, $a = \lambda_{t_1} + \lambda_{t_2}$ e $b = \lambda_{t_1}\lambda_{t_2}$ e, portanto, λ_{t_1} e λ_{t_2} são raízes da equação $x^2 - ax + b = 0$. Logo, $\lambda_{t_1} = \frac{a+\sqrt{a^2-4b}}{2}$ e $\lambda_{t_2} = \frac{a-\sqrt{a^2-4b}}{2}$. \square

Teorema 4.4 (HAGOS [4]) *Sejam $\lambda_{t_1}, \lambda_{t_2}, \dots, \lambda_{t_s}$ os autovalores principais distintos de um grafo G com n vértices. Para cada $i \in \{1, 2, \dots, s\}$, considere*

$$M_i = \begin{cases} \prod_{j=1, j \neq i}^s (A - \lambda_{t_j} I), & \text{se } s \neq 1; \\ I, & \text{se } s = 1. \end{cases}$$

Desta forma, $M_i j / \|M_i j\|$ é um autovetor unitário correspondente a λ_{t_i} .

Demonstração. Fixemos $i \in \{1, 2, \dots, s\}$. Pelo Lema 4.1, $(A - \lambda_{t_i} I)M_i j = \mathbf{0}$. Logo, basta provar que $M_i j \neq 0$.

Com efeito, como $M_i j$ é uma combinação linear dos vetores linearmente independentes $j, Aj, \dots, A^{s-1}j$ e G possui exatamente s autovalores principais temos que pelo menos um dos coeficientes na combinação linear é diferente de zero. \square

Do Teorema 4.4, dado um grafo G com exatamente dois autovalores principais, podemos encontrar autovetores associados a esses autovalores e que dependem do número de vértices, arestas e do vetor dos graus, d_G , de G . No corolário a seguir, tais autovetores são apresentados.

Corolário 4.5 (HAGOS [4]) *Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Se G tem exatamente dois autovalores principais λ_{t_1} e λ_{t_2} então*

$$\mathbf{v}_1 = \frac{d_G - \lambda_{t_2} j}{\sqrt{(\lambda_{t_1} - \lambda_{t_2})(2m - n\lambda_{t_2})}} \quad e \quad \mathbf{v}_2 = \frac{d_G - \lambda_{t_1} j}{\sqrt{(\lambda_{t_2} - \lambda_{t_1})(2m - n\lambda_{t_1})}}$$

são autovetores normalizados associados a λ_{t_1} e λ_{t_2} , respectivamente.

Demonstração. Seja G um grafo com n vértices e m arestas.

Suponhamos que G possua exatamente dois autovalores principais λ_{t_1} e λ_{t_2} . Do Teorema 4.4, $M_1 j = (A - \lambda_{t_2} I)j$ e $M_2 j = (A - \lambda_{t_1} I)j$ são autovetores associados aos autovalores principais λ_{t_1} e λ_{t_2} , respectivamente. Por outro lado, $Aj = d_G$ então podemos reescrever esses autovetores como $M_1 j = d_G - \lambda_{t_2} j$ e $M_2 j = d_G - \lambda_{t_1} j$.

A norma de $M_1 j$ é $\|M_1 j\| = \sqrt{(M_1 j)^T M_1 j}$. Temos

$$\begin{aligned} (M_1 j)^T M_1 j &= j^T (A - \lambda_{t_2} I)^T (A - \lambda_{t_2} I) j \\ &= j^T (A(A - \lambda_{t_2} I)j - \lambda_{t_2} (A - \lambda_{t_2} I)j). \end{aligned}$$

Como $AM_1 j = \lambda_{t_1} M_1 j$ segue que $A(A - \lambda_{t_2} I)j = \lambda_{t_1} (A - \lambda_{t_2} I)j$. Deste modo,

$$\begin{aligned} \|M_1 j\| &= \sqrt{j^T (\lambda_{t_1} (A - \lambda_{t_2} I)j - \lambda_{t_2} (A - \lambda_{t_2} I)j)} \\ &= \sqrt{(\lambda_{t_1} - \lambda_{t_2}) j^T (A - \lambda_{t_2} I)j}. \end{aligned}$$

Por outro lado, $j^T Aj = \sum_{i \in V} d(i) = 2m$ e $j^T j = n$. Portanto,

$$\mathbf{v}_1 = \frac{d_G - \lambda_{t_2} j}{\sqrt{(\lambda_{t_1} - \lambda_{t_2})(2m - n\lambda_{t_2})}} \quad \text{é um autovetor associado a } \lambda_{t_1}.$$

De modo análogo, mostramos que $\mathbf{v}_2 = \frac{d_G - \lambda_{t_1} j}{\sqrt{(\lambda_{t_2} - \lambda_{t_1})(2m - n\lambda_{t_1})}}$ é um autovetor associado a λ_{t_2} . \square

Do Corolário 4.5, temos que $(d_G - \lambda_{t_1}j)^T(d_G - \lambda_{t_2}j) = 0$. Como $\bar{d} = \frac{1}{n}j^T d_G$ segue dessa ortogonalidade a seguinte proposição.

Proposição 4.6 (ROWLINSON [51]) *Seja $G = (V, E)$ um grafo com exatamente dois autovalores principais λ_{t_1} e λ_{t_2} . Tem-se que*

$$\frac{1}{n} \sum_{u \in V} (d(u) - \bar{d})^2 = (\lambda_{t_1} - \bar{d})(\bar{d} - \lambda_{t_2}).$$

Corolário 4.7 (ROWLINSON [51]) *Seja G um grafo conexo com exatamente dois autovalores principais λ_{t_1} e λ_{t_2} . Se $\lambda_{t_1} > \lambda_{t_2}$ então $\Delta > \lambda_{t_1} > \bar{d} > \delta > \lambda_{t_2}$.*

Demonstração. Sejam $\lambda_{t_1} = \lambda_{\max} > \lambda_{t_2}$ os únicos autovalores principais de um grafo conexo G .

Do Teorema 3.2, G não é um grafo regular. Portanto, $\bar{d} > \delta$. Além disso, do Teorema 2.18, $\Delta > \lambda_{t_1} > \bar{d}$. Assim, falta apenas mostrar que $\delta > \lambda_{t_2}$.

Como G é conexo segue que λ_{t_1} possui um autovetor $\mathbf{v} = (v_i)$ cujas coordenadas são positivas. Do Corolário 4.5, $\mathbf{v}_1 = d_G - \lambda_{t_2}j$ é um autovetor associado a λ_{t_1} . Como $\Delta > \lambda_{t_2}$ segue que $\mathbf{v}_1 = \alpha \mathbf{v}$ para algum $\alpha > 0$. Portanto, $\delta > \lambda_{t_2}$. □

Note que se um grafo conexo G tem exatamente dois autovalores principais λ_{t_1} e λ_{t_2} então os seus respectivos autovetores normalizados $\mathbf{v}_1 = \frac{d_G - \lambda_{t_2}j}{\sqrt{(\lambda_{t_1} - \lambda_{t_2})(2m - n\lambda_{t_2})}}$ e $\mathbf{v}_2 = \frac{d_G - \lambda_{t_1}j}{\sqrt{(\lambda_{t_2} - \lambda_{t_1})(2m - n\lambda_{t_1})}}$ não são ortogonais ao vetor j . De fato, $j^T(d_G - \lambda_{t_1}j) = j^T d_G - \lambda_{t_1}j^T j$. Do Corolário 4.7, $\lambda_{t_1} > \bar{d} = \frac{1}{n}j^T d_G$. Deste modo, $j^T(d_G - \lambda_{t_1}j) = j^T d_G - \lambda_{t_1}j^T j < 0$. Por outro lado, como $\bar{d} > \lambda_{t_2}$ segue que $j^T(d_G - \lambda_{t_2}j) = j^T d_G - \lambda_{t_2}j^T j > 0$.

Pelo Lema 2.29 tem-se que $d_2(v)$ é a soma dos graus dos vizinhos do vértice v de um grafo G . HOU e ZHOU [5] definiram um grafo $G = (V, E)$ como *2-cadeia (a, b) -linear* se existem únicos números racionais a, b tais que $d_2(v) = ad(v) + b$ para todo vértice $v \in V$. Apresentamos a seguir exemplos de tais grafos.

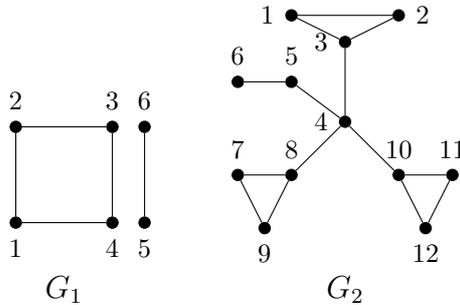


Figura 4.3: Grafos 2-cadeia (a, b) -lineares

Na Figura 4.3, G_1 é um grafo 2-cadeia $(3, -2)$ -linear e G_2 é um grafo 2-cadeia $(3, -1)$ -linear. Inicialmente, vamos mostrar que G_1 é um grafo 2-cadeia $(3, -2)$ -linear, isto é, $d_2(u) = 3d(u) - 2$ para todo vértice u de G_1 . Temos que $d(1) = d(2) = d(3) = d(4) = 2$ e $d(5) = d(6) = 1$. Assim, $d_2(1) = \sum_{u \in N_{G_1}(1)} d(u) = d(2) + d(4) = 4 = 3 \cdot 2 - 2$. De modo análogo, obtemos $d_2(2) = d_2(3) = d_2(4) = 4$ e $d_2(5) = d_2(6) = 1 = 3 \cdot 1 - 2$. A prova que, G_2 é 2-cadeia $(3, -1)$ -linear é análoga.

Note que todo grafo 2-cadeia (a, b) -linear deve ser irregular. Do Lema 2.29, se G é um grafo r -regular então $d_2(v) = rd(v) = r^2$ para todo vértice v de G , o que nos dá $a = r^2$ e $b = 0$. Mas, $d_2(v)$ também pode ser escrito da seguinte forma $d_2(v) = 0d(v) + r^2$, o que fornece $a = 0$ e $b = r^2$, contrariando a unicidade de a e b .

A seguir apresentamos uma prova do resultado de HOU e TIAN [6] que relaciona os grafos 2-cadeia (a, b) -lineares com a caracterização de grafos com exatamente dois autovalores principais dada por HAGOS [4], no Teorema 4.2.

Teorema 4.8 (HOU e TIAN [6]) *Um grafo $G = (V, E)$ tem exatamente dois autovalores principais se e somente se existem a e b racionais tais que G é um grafo 2-cadeia (a, b) -linear. Além disso, os dois autovalores principais de G são $\lambda_{t_1} = \frac{a + \sqrt{a^2 + 4b}}{2}$ e $\lambda_{t_2} = \frac{a - \sqrt{a^2 + 4b}}{2}$.*

Demonstração. Suponhamos que G possua exatamente dois autovalores principais distintos λ_{t_1} e λ_{t_2} . Pelo Teorema 4.2, existem únicos a e b não simultaneamente nulos tais que $A^2j - aAj - bj = \mathbf{0}$. Assim, $\sum_{v \in N_G(u)} d(v) - ad(u) - b = 0$ para todo $u \in V$, ou seja, $d_2(u) = ad(u) + b$ para todo $u \in V$. Logo, G é um grafo 2-cadeia (a, b) -linear.

Agora, suponhamos que G é um grafo 2-cadeia (a, b) -linear, onde a e b são racionais. Temos $d_2(u) = ad(u) + b$ para todo $u \in V$.

Pelo Lema 2.29, $ad(u) + b = \sum_{v \in N_G(u)} d(v)$ para todo $u \in V$, ou seja,

$$\sum_{v \in N_G(u)} d(v) - ad(u) - b = 0 \text{ para todo } u \in V.$$

Desse modo,

$$A^2j - aAj - bj = \mathbf{0} \tag{4.1}$$

e, portanto, o posto da matriz cadeia de G é menor ou igual a 2. Do Teorema 3.10, G possui no máximo dois autovalores principais. Como não é um grafo regular segue que G possui exatamente dois autovalores principais.

Sejam λ_{t_1} e λ_{t_2} os autovalores principais distintos de G . Do Lema 4.1, temos

$$A^2j - (\lambda_{t_1} + \lambda_{t_2})Aj + (\lambda_{t_1}\lambda_{t_2})j = \mathbf{0}. \tag{4.2}$$

Igualando as equações (4.1) e (4.2), obtemos $\{a - (\lambda_{t_1} + \lambda_{t_2})\}Aj + \{b + (\lambda_{t_1}\lambda_{t_2})\}j = \mathbf{0}$. Pelo Teorema 3.10, o posto da matriz cadeia de G é 2. Assim, as colunas j e Aj de W são linearmente independentes e, portanto, $\lambda_{t_1} + \lambda_{t_2} = a$ e $\lambda_{t_1}\lambda_{t_2} = -b$. \square

O Teorema 4.8 afirma que um grafo 2-cadeia (a, b) -linear é um grafo com exatamente dois autovalores principais, os quais podem ser escritos em função de a e b . A proposição a seguir decorre da Proposição 3.3.

Proposição 4.9 (HOU e TIAN [6]) *Se G é um grafo 2-cadeia (a, b) -linear então a e b são inteiros.*

Demonstração. Como G é um grafo 2-cadeia (a, b) -linear segue que G possui exatamente dois autovalores principais, λ_{t_1} e λ_{t_2} . Pela Proposição 3.3, $M(G, x) = (x - \lambda_{t_1})(x - \lambda_{t_2})$ é um polinômio inteiro e, portanto, a e b devem ser números inteiros. \square

Corolário 4.10 (HOU e TIAN [6]) *Se G é um grafo conexo 2-cadeia (a, b) -linear então a é um número inteiro não negativo.*

Demonstração. Se G é um grafo 2-cadeia (a, b) -linear então, do Teorema 4.8, G possui dois autovalores principais distintos $\lambda_{t_1} > \lambda_{t_2}$ tais que $a = \lambda_{t_1} + \lambda_{t_2}$ e $-b = \lambda_{t_1}\lambda_{t_2}$.

Pela Proposição 4.9, a é um número inteiro. Assim, falta apenas mostrar que $a \geq 0$. Da Proposição 3.1 temos que λ_{t_1} é o índice de G . Assim, do Teorema de Perron-Frobenius (Teorema 2.6), como G é um grafo conexo segue que $\lambda_{t_1} \geq |\lambda_{t_2}|$. Logo, $a \geq 0$. \square

Lema 4.11 *Seja $G = (V, E)$ um grafo conexo 2-cadeia (a, b) -linear. Se $d(u) = 1$ para algum $u \in V$ então $d(v) = a + b$ para todo $v \in N_G(u)$.*

Demonstração. Seja $G = (V, E)$ um grafo conexo 2-cadeia (a, b) -linear. Se $d(u) = 1$ para algum $u \in V$ então $d_2(u) = ad(u) + b = a + b$. Como o vértice u possui um único vizinho, v , e $d_2(u) = \sum_{v \in N_G(u)} d(v)$ então $d(v) = a + b$. \square

GRONE e MERRIS [52] caracterizaram as árvores de diâmetro 3 como aquelas com exatamente dois vértices não pendentos e adjacentes entre si, com k folhas adjacentes a um dos vértices e s folhas adjacentes ao outro. Os vértices não pendentos

são os vértices centrais destas árvores e possuem graus $k + 1$ e $s + 1$, respectivamente. Tais árvores também são conhecidas como *duplas estrelas* e aqui denotadas por $T(k, s)$. No caso em que $k = s$, $T(s, s)$ é chamada *dupla estrela balanceada*.

Uma *dupla vassoura* é uma árvore obtida de uma dupla estrela $T(k, s)$ substituindo-se a aresta que liga os dois vértices centrais por um caminho com r vértices. As duplas vassouras possuem diâmetro $r + 2$. No caso em que $r = 1$, as duplas vassouras são duplas estrelas.

Como visto no Capítulo 3, fixado um número natural ℓ maior do que 2, \mathcal{T}_ℓ é a árvore harmônica obtida de $\ell^2 - \ell + 1$ estrelas disjuntas $K_{1, \ell-1}$ cujos vértices centrais possuem um vizinho em comum. HOU e ZHOU [5] identificaram estas como uma das família de árvores com exatamente dois autovalores principais. Visto que o artigo em questão está escrito em chinês, apresentamos uma demonstração do resultado.

Teorema 4.12 *Uma árvore com $n \geq 3$ vértices possui exatamente dois autovalores principais se e somente se é ou uma estrela, ou uma dupla estrela balanceada ou uma árvore harmônica \mathcal{T}_ℓ para $\ell \geq 2$.*

Demonstração. Seja T uma árvore com $n \geq 3$ vértices que possui exatamente dois autovalores principais. Do Teorema 4.8, T é um grafo 2-cadeia (a, b) -linear.

Tome $P = v_0 v_1 \cdots v_\ell$ um caminho em T com comprimento ℓ , onde ℓ é o diâmetro de T . Como v_0 é uma folha cujo vizinho é v_1 segue, do Lema 4.11, que

$$d(v_1) = a + b. \quad (4.3)$$

Afirmção 1 *Se $v \in N_T(v_1) \setminus \{v_2\}$ então $d(v) = 1$.*

Com efeito, se $v \in N_T(v_1) \setminus \{v_2\}$ e $d(v) \geq 2$ então existe $u \in N_T(v) \setminus \{v_1\}$. Logo, o caminho $P' = uvv_1 \cdots v_\ell$ tem comprimento $\ell + 1$ em T , contradizendo o fato de T ter diâmetro ℓ .

Como consequência da Afirmção 1,

$$d_2(v_1) = \sum_{u \in N_T(v_1)} d(u) = (d(v_1) - 1) + d(v_2) = a + b - 1 + d(v_2). \quad (4.4)$$

Porém, T é 2-cadeia (a, b) -linear então

$$d_2(v_1) = ad(v_1) + b = a(a + b) + b. \quad (4.5)$$

Comparando as equações (4.4) e (4.5), obtemos:

$$d(v_2) = a(a + b - 1) + 1. \quad (4.6)$$

Do Corolário 4.10, a é um inteiro não negativo. Em função disso, dividiremos a demonstração em três casos.

Caso 1: $a = 0$

Das equações (4.3) e (4.6), $d(v_1) = b$ e $d(v_2) = 1$. Logo, da Afirmação 1, T é a estrela $K_{1,b}$.

Caso 2: $a = 1$

Das equações (4.3) e (4.6), $d(v_1) = 1 + b$ e $d(v_2) = 1 + b$. Como T é 2-cadeia $(1, b)$ -linear temos que $d_2(v_2) = d(v_2) + b = (1 + b) + b = 1 + 2b$. Assim,

$$\sum_{u \in N_T(v_2)} d(u) = d_2(v_2) = 1 + 2b. \quad (4.7)$$

Como $v_1 \in N_T(v_2)$ segue que

$$\sum_{u \in N_T(v_2)} d(u) = \sum_{u \in N_T(v_2) \setminus \{v_1\}} d(u) + d(v_1) = \sum_{u \in N_T(v_2) \setminus \{v_1\}} d(u) + (1 + b). \quad (4.8)$$

Das equações (4.7) e (4.8), obtemos

$$\sum_{u \in N_T(v_2) \setminus \{v_1\}} d(u) = (1 + 2b) - (1 + b) = b. \quad (4.9)$$

Como $d(v_2) = 1 + b$ então $|N_T(v_2) \setminus \{v_1\}| = b$. Assim, da equação (4.9), cada vértice em $N_T(v_2) \setminus \{v_1\}$ tem grau 1. Logo, T é a dupla estrela balanceada $T(b, b)$.

Caso 3: $a \geq 2$.

Pela equação (4.3), $d(v_1) = a + b \geq 2$. Assim, da equação (4.6), segue que

$$\begin{aligned} d(v_2) &= a(a + b) + 1 - a \\ &> a(a + b) - a \\ &= a(a + b - 1) \\ &\geq 2(a + b - 1) \\ &= a + b + (a + b - 2) \\ &\geq a + b. \end{aligned}$$

Logo,

$$d(v_2) > a + b. \quad (4.10)$$

Afirmação 2 *Se $v \in N_T(v_2) \setminus \{v_3\}$ então $d(u) = 1$ para todo $u \in N_T(v) \setminus \{v_2\}$.*

Com efeito, seja $v \in N_T(v_2) \setminus \{v_3\}$. Do Lema 4.11, se $d(v) = 1$ então $d(v_2) = a + b$, o que contradiz a desigualdade (4.10). Logo, $d(v) \geq 2$.

Suponhamos que existe $u \in N_T(v) \setminus \{v_2\}$ tal que $d(u) \geq 2$. Então existe $w \in N_T(u) \setminus \{v\}$ tal que $P' = wuvv_2 \cdots v_\ell$ é um caminho em T e possui comprimento $\ell + 1$, o que contradiz o fato de ℓ ser o diâmetro de T . Logo, $d(u) = 1$ para todo $u \in N_T(v) \setminus \{v_2\}$.

Se $v \in N_T(v_2) \setminus \{v_3\}$ então, do Lema 4.11 e da Afirmação 2, $d(v) = a + b$. Logo,

$$d_2(v_2) = \sum_{u \in N_T(v_2)} d(u) = (d(v_2) - 1)(a + b) + d(v_3). \quad (4.11)$$

Porém, T é 2-cadeia (a, b) -linear então

$$d_2(v_2) = ad(v_2) + b. \quad (4.12)$$

Das equações (4.6), (4.11) e (4.12), obtemos:

$$d(v_3) = a + b(2 - d(v_2)) = a + b + ab(1 - a - b) = (1 - ab)(a + b - 1) + 1. \quad (4.13)$$

Afirmação 3 *Se $a \geq 2$ então $b = 0$.*

Suponhamos que $b > 0$.

Pela Proposição 4.9, b é um número inteiro então $b \geq 1$. Neste caso, $ab \geq 2$ então $1 - ab \leq -1$. Logo, pela equação (4.13),

$$d(v_3) \leq -1(a + b - 1) + 1 = -a - b + 2 \leq 0,$$

o que contradiz $d(v_3) > 0$.

Afirmação 4 *Se $b \leq -1$ e $v \in N_T(v_3) \setminus \{v_4\}$ então $d(v) = d(v_2)$.*

Como $b \leq -1$ segue que $-ab > 0$. Pelas equações (4.3) e (4.13) temos que

$$d(v_3) = (a + b) - ab(a + b) + ab > (a + b) - ab \cdot 1 + ab = a + b.$$

Logo, pelo Lema 4.11, v_3 não possui folhas, ou seja, $d(v) \neq 1$ para todo $v \in N_T(v_3) \setminus \{v_4\}$.

Por outro lado, como $-b \geq 1$ então $a(-b) \geq a$, isto é, $1 - ab > a$. Assim, pelas equações (4.6) e (4.13) temos

$$d(v_3) = (1 - ab)(a + b - 1) + 1 > a(a + b - 1) + 1 = d(v_2). \quad (4.14)$$

Suponhamos que existe $w \in N_T(v_3) \setminus \{v_4\}$ tal que $d(y) = 1$ para todo $y \in N_T(w) \setminus \{v_3\}$. Pelo Lema 4.11, $d(w) = a + b$. Visto que $d_2(w) = \sum_{u \in N_T(w) \setminus \{v_3\}} d(u) + d(v_3)$ e $d_2(w) = ad(w) + b$ segue que $(d(w) - 1) + d(v_3) =$

$a(a + b) + b$. Logo,

$$d(v_3) = a(a + b - 1) + 1 = d(v_2),$$

o que contradiz a desigualdade (4.14).

Dado $w \in N_T(v_3) \setminus \{v_4\}$, temos que se $v \in N_T(w) \setminus \{v_3\}$ então $d(u) = 1$ para todo $u \in N_T(v) \setminus \{w\}$. Logo, $d(w) = d(v_2)$ para todo $w \in N_T(v_3) \setminus \{v_4\}$, concluindo a afirmação.

Da Afirmação 4,

$$d_2(v_3) = \sum_{u \in N_T(v_3)} d(u) = \sum_{u \in N_T(v_3) \setminus \{v_4\}} d(u) + d(v_4) = (d(v_3) - 1)d(v_2) + d(v_4). \quad (4.15)$$

Como $d(v_2) - a = a(a + b - 2) + 1 \geq 1$ e $d_2(v_3) = ad(v_3) + b$ segue, da equação (4.15), que

$$\begin{aligned} d(v_4) &= \sum_{u \in N_T(v_2)} d(u) - d(v_2)(d(v_3) - 1) \\ &= ad(v_3) + b - d(v_2)d(v_3) + d(v_2) \\ &= d(v_3)(a - d(v_2)) + b + d(v_2) \\ &\leq -d(v_3) + b + d(v_2) < 0, \end{aligned}$$

o que contradiz $d(v_4) > 0$, concluindo a demonstração da Afirmação 3.

Da Afirmação 3 e das equações (4.6) e (4.13) segue que $d(v_3) = a$ e $d(v_2) = a^2 + 1 - a$. Pela Afirmação 2, todos os vizinhos de v_2 , com exceção de v_3 , são vizinhos de folhas e, portanto, possuem grau a .

Agora, vamos analisar os vizinhos de v_3 . Se $v \in N_T(v_3) - \{v_2\}$ então $a \cdot a = \left(\sum_{u \in N_T(v_3) - \{v_2\}} d(u) \right) + a^2 - a + 1$, ou seja, $\sum_{u \in N_T(v_3) \setminus \{v_2\}} d(u) = a - 1$. Como v_3 é adjacente a exatamente $a - 1$ vértices distintos de v_2 segue que o grau de cada um desses vértices deve ser 1. Logo, T é a árvore harmônica \mathcal{T}_a . □

O próximo resultado explicita os valores de a e b para as árvores 2-cadeia (a, b) -lineares.

Corolário 4.13 *Seja T uma árvore 2-cadeia (a, b) -linear com n vértices.*

(i) *Se T é uma estrela então $a = 0$ e $b = n - 1$;*

(ii) *Se T é uma dupla-estrela balanceada então $a = 1$ e $b = \frac{n-2}{2}$;*

(iii) *Se T é uma árvore harmônica \mathcal{T}_ℓ então $a = \ell$ e $b = 0$.*

DRESS e GUTMAN [43] mostraram que todo grafo 2-cadeia $(0, b)$ -linear é bipartido semirregular. Em [6], HOU e TIAN provaram que se G é 2-cadeia $(0, b)$ -linear e tem no mínimo um vértice pendente então G é uma estrela. Nesse mesmo artigo, os autores também apresentaram os grafos C_n^k com $n, k > 0$ (Seção 2.1), como os únicos grafos unicíclicos com exatamente dois autovalores principais. Porém, em [8], HOU *et al.* mostraram que os resultados de [6] valiam apenas para grafos 2-cadeia (a, b) -lineares tais que $b \geq 0$. Portanto, os grafos C_n^k são os únicos grafos unicíclicos 2-cadeia (a, b) -lineares para $b \geq 0$.

Os resultados de HOU e TIAN [6] foram usados em [7], [9] e [45] para determinar os grafos unicíclicos, bicíclicos e tricíclicos com exatamente dois autovalores principais. Porém, as listas dos grafos bicíclicos e tricíclicos estavam, na verdade, incompletas. No teorema a seguir, HOU *et al.* [8] completa a lista dos grafos bicíclicos 2-cadeia (a, b) -lineares ($b \geq 0$) apresentada em [7], com a inclusão dos grafos G_{10} e G_{11} (ver Figura 4.4), que têm $b < 0$.

Teorema 4.14 *Um grafo bicíclico com exatamente dois autovalores principais deve ser um dos grafos apresentados na Figura 4.4.*

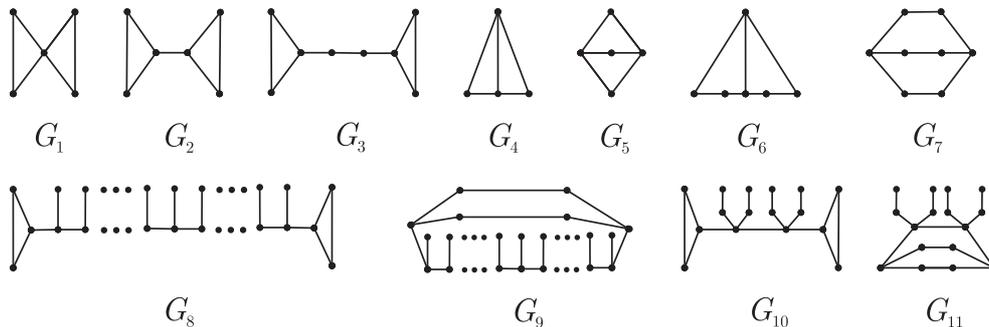


Figura 4.4: Grafos bicíclicos 2-cadeia (a, b) -lineares

Os grafos tricíclicos 2-cadeia (a, b) -lineares com $b \geq 0$ foram encontrados por SHI [45]. Para o caso $b < 0$ os grafos tricíclicos 2-cadeia (a, b) -lineares foram determinados por HOU *et al.* [8].

Teorema 4.15 (HOU *et al.* [8]) *Um grafo tricíclico com exatamente dois autovalores principais deve ser um dos grafos indicados nas Figuras 4.5 e 4.6.*

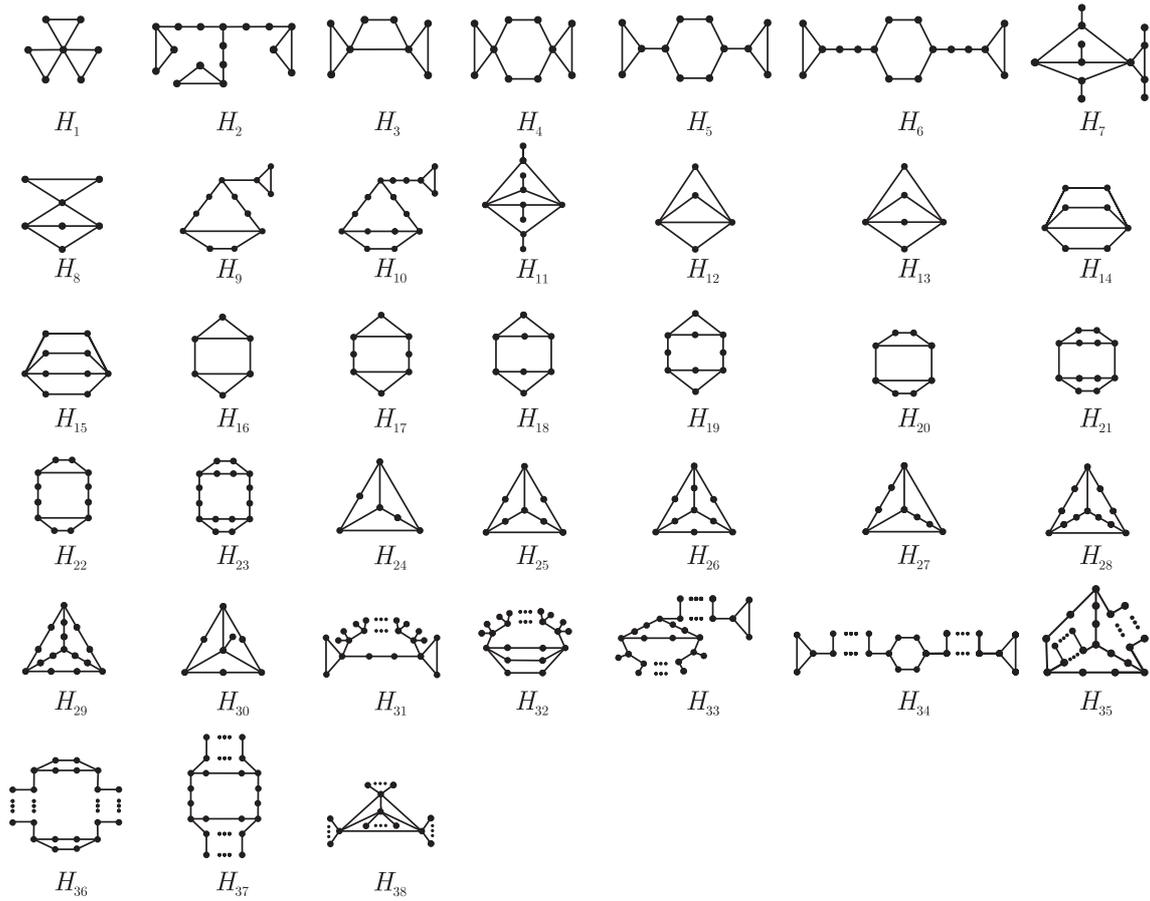


Figura 4.5: Grafos tricíclicos 2-cadeia (a, b) -lineares com $b \geq 0$

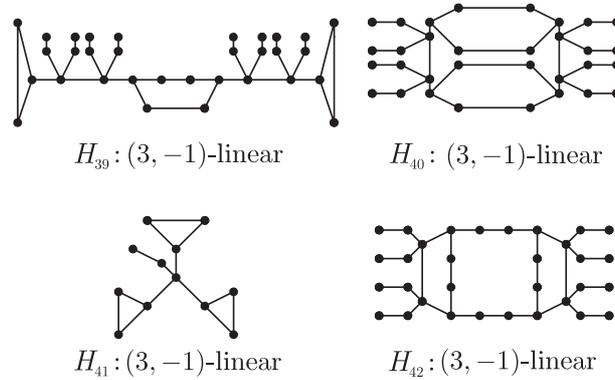


Figura 4.6: Grafos tricíclicos 2-cadeia (a, b) -lineares com $b < 0$

Antes de finalizarmos este capítulo, apresentamos resultados que caracterizam duas famílias de grafos que possuem exatamente dois autovalores principais: os grafos harmônicos não regulares e os grafos bipartidos semirregulares.

Se G é um grafo ℓ -harmônico então ℓ satisfaz a equação $Ad_G = \ell d_G$, a qual pode ser escrita como $(A^2 - \ell A)j = \mathbf{0}$. Vimos, na Seção 3.2, que os grafos regulares são grafos harmônicos e neste caso, possuem um único autovalor principal. Por outro lado, se G é um grafo ℓ -harmônico e não regular então $Aj \neq \mathbf{0}$ e $(A - \ell I)j \neq \mathbf{0}$. A

proposição a seguir caracteriza os grafos harmônicos e não regulares.

Proposição 4.16 (NIKIFOROV [46]) *Se G é um grafo conexo não-trivial com índice λ_1 então G é harmônico e não regular se e somente se os autovalores principais de G são λ_1 e 0 .*

Seja G um grafo conexo harmônico não regular com n vértices e m arestas. Pelo Corolário 4.5, $\mathbf{v}_1 = \frac{d_G}{\sqrt{\lambda_1 2m}}$ e $\mathbf{v}_2 = \frac{d_G - \lambda_1 \mathbf{j}}{\sqrt{n\lambda_1^2 - 2m\lambda_1}}$ são autovetores normalizados associados aos respectivos autovalores principais λ_1 e 0 de G , os quais não são ortogonais a \mathbf{j} .

As duplas estrelas balanceadas são exemplos de grafos bipartidos com exatamente dois autovalores principais, onde λ_1 é um autovalor principal e o seu simétrico $-\lambda_1$ é não principal. Os próximos resultados caracterizam os grafos bipartidos semirregulares como os únicos grafos cujo espectro principal é constituído pelo índice do grafo e o seu simétrico.

Proposição 4.17 (ROWLINSON [51]) *Se os autovalores principais de G são λ e $-\lambda$ então G é um grafo bipartido e λ é o seu índice.*

Proposição 4.18 (ROWLINSON [51]) *Seja G um grafo conexo não trivial com índice λ_1 . Um grafo G é bipartido semirregular se e somente se os únicos autovalores principais de G são λ_1 e $-\lambda_1$.*

Note ainda que dado um grafo conexo bipartido semirregular com índice λ_1 , temos que $\mathbf{v}_1 = \frac{d_G + \lambda_1 \mathbf{j}}{\sqrt{2\lambda_1(2m + n\lambda_1)}}$ e $\mathbf{v}_2 = \frac{d_G - \lambda_1 \mathbf{j}}{\sqrt{-2\lambda_1(2m - n\lambda_1)}}$ são autovetores normalizados não ortogonais a \mathbf{j} associados aos respectivos autovalores principais λ_1 e $-\lambda_1$ de G .

Na Figura 4.7, apresentamos o grafo bipartido semirregular G com grau mínimo 2 e grau máximo 4.

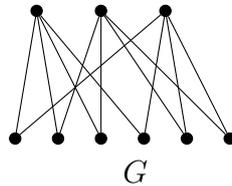


Figura 4.7: Grafo bipartido semirregular

O espectro de G é formado pelos autovalores simples $2\sqrt{2}$ e $-2\sqrt{2}$, pelo autovalor 0 com multiplicidade 3 e pelos autovalores $\sqrt{2}$ e $-\sqrt{2}$ ambos com multiplicidade 2. Pela Proposição 4.18 temos que os únicos autovalores principais de G são $2\sqrt{2}$ e $-2\sqrt{2}$, onde $\mathbf{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{144+96\sqrt{2}}}(d_G + 2\sqrt{2}\mathbf{j})$ e $\mathbf{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{144-96\sqrt{2}}}(d_G - 2\sqrt{2}\mathbf{j})$ são seus respectivos autovetores não ortogonais a \mathbf{j} .

Capítulo 5

Autovalores principais de alguns grafos e seus complementares

CARDOSO e PINHEIRO [10] se basearam em programação convexa quadrática para apresentar novos limitantes superiores espectrais para a ordem dos subgrafos induzidos k -regulares de tamanho máximo. Eles também apresentaram alguns experimentos computacionais que os levaram a propor as seguintes questões:

- (Q1) verificar a existência de grafos G tais que \overline{G} tenha um autovalor principal $\bar{\lambda}$ que satisfaça a desigualdade $-1 - \lambda_n(G) < \bar{\lambda} < \lambda_1(\overline{G})$;
- (Q2) caracterizar os grafos conexos G de ordem n tais que $-1 - \lambda_n(G)$ é um autovalor principal de \overline{G} ;
- (Q3) caracterizar os grafos conexos para os quais o menor autovalor seja não principal.

A questão (Q1) decorre diretamente do lema a seguir e na tentativa de resolver as duas seguintes (Q2) e (Q3) obtivemos alguns resultados que estão aqui provados.

Aplicando as Desigualdades de Weyl (Teorema 2.7), o Lema 5.1 relaciona o menor autovalor de um grafo G com o maior e o segundo maior autovalores de \overline{G} .

Lema 5.1 (CVETKOVIĆ *et al.* [11]) *Se G é um grafo de ordem n então*
 $\lambda_2(\overline{G}) \leq -1 - \lambda_n(G) \leq \lambda_1(\overline{G})$.

Demonstração. Observando-se que $A(G) + A(\overline{G}) = A(K_n)$, segue da primeira desigualdade do Teorema 2.7 que $\lambda_n(G) + \lambda_2(\overline{G}) \leq \lambda_2(K_n)$. Como $\lambda_2(K_n) = -1$ temos que

$$\lambda_2(\overline{G}) \leq -1 - \lambda_n(G). \quad (5.1)$$

Por outro lado, da segunda desigualdade do Teorema 2.7 tem-se $\lambda_n(K_n) \leq \lambda_n(G) + \lambda_1(\overline{G})$. Como $\lambda_n(K_n) = -1$ segue que

$$-1 - \lambda_n(G) \leq \lambda_1(\overline{G}). \quad (5.2)$$

Das inequações (5.1) e (5.2), tem-se

$$\lambda_2(\overline{G}) \leq -1 - \lambda_n(G) \leq \lambda_1(\overline{G}).$$

□

O teorema a seguir responde (negativamente) a primeira questão em aberto (Q1).

Teorema 5.2 *Se G é um grafo de ordem n então \overline{G} não possui um autovalor $\overline{\lambda}$ tal que $-1 - \lambda_n(G) < \overline{\lambda} < \lambda_1(\overline{G})$.*

Demonstração. Do Lema 5.1, tem-se $\lambda_2(\overline{G}) \leq -1 - \lambda_n(G) \leq \lambda_1(\overline{G})$.

Se $-1 - \lambda_n(G)$ for um autovalor de \overline{G} então ou $-1 - \lambda_n(G) = \lambda_1(\overline{G})$, ou $-1 - \lambda_n(G) = \lambda_2(\overline{G})$. Logo, \overline{G} não possui um autovalor principal $\overline{\lambda}$ que satisfaça $-1 - \lambda_n(G) < \overline{\lambda} < \lambda_1(\overline{G})$.

□

A partir de agora, nos propomos a investigar a segunda questão (Q2). Dado $\lambda_n(G)$ o menor autovalor de um grafo conexo G com n vértices, iniciamos nossa investigação analisando quando $-1 - \lambda_n(G)$ é um autovalor do complementar de G . A partir do Lema 5.1 temos dois casos: (a) $\lambda_1(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ e (b) $\lambda_2(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$.

No caso (a), temos que $-1 - \lambda_n(G) = \lambda_1(\overline{G})$ é um autovalor principal de \overline{G} (Proposição 3.1). Além disso, o Teorema 3.5 garante que $\lambda_n(G)$ é um autovalor não principal, pois $\lambda_n(G) = -1 - (-1 - \lambda_n(G))$. Assim, em relação a igualdade (a), estabelecemos o seguinte teorema.

Teorema 5.3 *Seja G um grafo de ordem n . Tem-se: $\lambda_1(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ se e somente se $\lambda_n(G)$ é um autovalor não principal e $\lambda_1(\overline{G})$ possui multiplicidade maior do que 1.*

Demonstração. Se $\lambda_1(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ então $\lambda_n(G)$ é um autovalor não principal. Do Teorema 3.7, $-1 - \lambda_n(G)$ tem um autovetor \mathbf{v}_1 tal que $\mathbf{v}_1 \in \mathcal{E}_G(\lambda_n(G))$ e $j^T \mathbf{v}_1 = 0$. Por outro lado, existe um autovetor \mathbf{v}_2 associado a $\lambda_1(\overline{G})$ tal que $j^T \mathbf{v}_2 \neq 0$ (Teorema 2.24). Do Teorema 3.9, $\mathcal{E}_G(\lambda_n(G)) \subset \mathcal{E}_{\overline{G}}(\lambda_1(\overline{G}))$. Deste modo, \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 são linearmente independentes em $\mathcal{E}_{\overline{G}}(\lambda_1(\overline{G}))$, isto é, a multiplicidade de $\lambda_1(\overline{G})$ é maior do que 1. Reciprocamente, se $\lambda_n(G)$ é não principal então $-1 - \lambda_n(G) \in \text{Spec}(\overline{G})$

(Teorema 3.7). Como a multiplicidade de $\lambda_1(\overline{G})$ é maior do que 1 segue, do Lema 5.1, que $\lambda_1(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$.

□

Corolário 5.4 *Seja G um grafo com n vértices. Se $\lambda_1(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ então \overline{G} é um grafo desconexo com pelo menos duas componentes que possuem $\lambda_1(\overline{G})$ como autovalor.*

Demonstração. De fato, do Teorema 5.3, $\lambda_1(\overline{G})$ possui multiplicidade maior do que 1. Do Teorema 2.24, \overline{G} é desconexo e, portanto, possui pelo menos duas componentes que têm $\lambda_1(\overline{G})$ como autovalor.

□

No Teorema 5.5, apresentamos uma condição necessária e suficiente para $\lambda_2(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ (caso (b)), quando $\lambda_2(\overline{G}) < \lambda_1(\overline{G})$.

Teorema 5.5 *Seja G um grafo com n vértices. Tem-se: $\lambda_2(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G) < \lambda_1(\overline{G})$ se e somente se $\lambda_n(G)$ é um autovalor não principal de G ou um autovalor principal de G com multiplicidade maior do que 1 e $\lambda_1(\overline{G})$ é simples*

Demonstração. Do Teorema 3.7, $\lambda_2(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ implica em $\lambda_n(G)$ ser ou um autovalor não principal de G , ou um autovalor principal com multiplicidade maior do que 1. Como $\lambda_2(\overline{G}) < \lambda_1(\overline{G})$ segue que o índice de \overline{G} é simples. Reciprocamente, se $\lambda_n(G)$ é um autovalor não principal de G ou um autovalor principal de G com multiplicidade maior do que 1 então, do Teorema 3.7, $-1 - \lambda_n(G) \in \text{Spec}(\overline{G})$. Como $\lambda_1(\overline{G})$ é simples segue, do Lema 5.1, que $\lambda_2(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$.

□

Do Lema 5.1 e dos Teoremas 5.3 e 5.5 podemos concluir que $-1 - \lambda_n(G)$ é um autovalor de \overline{G} se e somente se $\lambda_2(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$. O resultado a seguir é uma consequência direta de tal fato.

Corolário 5.6 *Seja G um grafo com n vértices. Tem-se: $\lambda_2(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ se e somente se $\lambda_n(G)$ é ou um autovalor não principal de G ou um autovalor principal de G com multiplicidade maior do que 1.*

Demonstração. De fato, $\lambda_2(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ se e somente se $-1 - \lambda_n(G)$ é um autovalor de \overline{G} . Do Teorema 3.7, $\lambda_n(G)$ é ou um autovalor não principal de \overline{G} , ou um autovalor principal com multiplicidade maior do que 1.

□

O próximo resultado, outra contribuição nossa, caracteriza os grafos conexos bipartidos que satisfazem $\lambda_1(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$, ou seja, apresentamos uma subfamília dos grafos conexos bipartidos em que $-1 - \lambda_n(G)$ é um autovalor principal de \overline{G} .

Teorema 5.7 *Seja G um grafo conexo bipartido de ordem n . Tem-se que $\lambda_1(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ se e somente se G é um grafo bipartido completo e balanceado.*

Demonstração. Seja G um grafo conexo bipartido de ordem n .

Suponhamos que $\lambda_1(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$. Inicialmente, provamos que G é um grafo bipartido completo.

Do Corolário 5.4, temos que \overline{G} é um grafo desconexo que possui pelo menos duas componentes tendo $\lambda_1(\overline{G})$ como autovalor. Como G é bipartido segue que \overline{G} possui exatamente duas componentes que são grafos completos e como $\lambda_1(\overline{G})$ possui multiplicidade maior do que 1 temos que $k = s$.

Suponhamos que G um grafo bipartido completo e balanceado $K_{s,s}$. Neste caso, $\overline{G} = \overline{K_{s,s}}$ é um grafo desconexo com duas componentes que são grafos completos e cada componente possui s vértices. Assim,

$$\lambda_n(G) = -\sqrt{s \cdot s} = -s \text{ e } \lambda_1(\overline{G}) = s - 1.$$

Logo, $\lambda_1(\overline{G}) = -\lambda_n(G) - 1$.

□

O corolário a seguir mostra que todo grafo de ordem n bipartido completo e balanceado G possui $-1 - \lambda_n(G)$ como autovalor principal de \overline{G} .

Corolário 5.8 *Se G é um grafo bipartido completo e balanceado de ordem n então $-1 - \lambda_n(G)$ é um autovalor principal de \overline{G} .*

Demonstração. De fato, $\lambda_1(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ e, portanto, $-1 - \lambda_n(G)$ é um autovalor principal de \overline{G} .

□

No próximo teorema, apresentamos condições para que $-1 - \lambda_n(G)$ seja um autovalor não principal do complementar de um grafo G conexo de ordem n .

Teorema 5.9 *Seja G um grafo conexo de ordem n tal que $-1 - \lambda_n(G) = \lambda_2(\overline{G}) < \lambda_1(\overline{G})$.*

(i) *Se $\lambda_n(G)$ é um autovalor não principal e possui a mesma multiplicidade de $\lambda_2(\overline{G})$ então $-1 - \lambda_n(G)$ é um autovalor não principal de \overline{G} .*

(ii) *Se $\lambda_2(\overline{G})$ é um autovalor simples então $-1 - \lambda_n(G)$ é um autovalor não principal de \overline{G} .*

Demonstração. Seja G um grafo conexo de ordem n tal que $-1 - \lambda_n(G) = \lambda_2(\overline{G}) < \lambda_1(\overline{G})$.

(i) Suponhamos que $\lambda_n(G)$ é um autovalor não principal e possui a mesma multiplicidade de $\lambda_2(\overline{G})$.

Seja $\mathbf{v} \in \mathcal{E}_G(\lambda_n(G))$. Como $A(\overline{G}) = J - I - A(G)$ segue que

$$\begin{aligned} A(\overline{G})\mathbf{v} &= J\mathbf{v} - I\mathbf{v} - A(G)\mathbf{v} \\ &= J\mathbf{v} + (-1 - \lambda_n(G))\mathbf{v}. \end{aligned}$$

Visto que $\lambda_n(G)$ é não principal temos que $\mathbf{v}^T j = 0$. E, portanto, $A(\overline{G})\mathbf{v} = (-1 - \lambda_n(G))\mathbf{v}$. Logo, os autovetores de $\lambda_n(G)$ são também autovetores de $\lambda_2(\overline{G})$. Como $\lambda_2(\overline{G})$ possui a mesma multiplicidade de $\lambda_n(G)$ temos que todos os seus autovetores são também ortogonais a j . Deste modo, $\lambda_2(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ é um autovalor não principal de \overline{G} .

(ii) Suponhamos que $\lambda_2(\overline{G})$ é um autovalor simples.

Do Teorema 3.7, como $\lambda_2(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ segue que existe um autovetor \mathbf{v} associado a $\lambda_2(\overline{G})$ tal que $\mathbf{v}^T j = 0$. Como $\lambda_2(\overline{G})$ é simples segue que $-1 - \lambda_n(G)$ é um autovalor não principal de \overline{G} . □

Note que o Teorema 5.9 também pode ser demonstrado utilizando o Teorema 3.9. Na sequência, apresentamos os resultados que obtivemos durante a tentativa de resolver a terceira questão em aberto (Q3): caracterizar os grafos conexos para os quais o menor autovalor seja não principal.

Entre os exemplos de famílias de grafos com o menor autovalor não principal temos os grafos conexos harmônicos, dentre os quais estão os grafos regulares (Seção 3.2). Note que os grafos regulares possuem o seu índice como o único autovalor principal (Teorema 3.1), enquanto que os grafos conexos harmônicos e não regulares possuem exatamente dois autovalores principais: o seu índice e o autovalor 0 (Proposição 4.16).

O resultado a seguir nos dá uma condição necessária e suficiente para que o menor autovalor de um grafo conexo seja não principal, quando tal autovalor é simples.

Teorema 5.10 *Seja G um grafo conexo de ordem n tal que $\lambda_n(G)$ é um autovalor simples. Tem-se que $\lambda_2(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ se e somente se $\lambda_n(G)$ é um autovalor não principal.*

Demonstração. Seja G um grafo conexo de ordem n cujo menor autovalor $\lambda_n(G)$ é um autovalor simples.

Suponhamos que $\lambda_2(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$. Do Corolário 5.6, $\lambda_n(G)$ é ou um autovalor não principal de G , ou um autovalor principal com multiplicidade maior do que 1. Como $\lambda_n(G)$ é um autovalor simples segue que $\lambda_n(G)$ é não principal.

Por outro lado, se $\lambda_n(G)$ é um autovalor não principal de G então, do Teorema 3.7, $-1 - \lambda_n(G)$ é um autovalor de \overline{G} .

□

Como o índice de um grafo conexo bipartido G é um autovalor simples e $\lambda_n(G) = -\lambda_1(G)$ segue, do Teorema 2.19, que $\lambda_n(G)$ também é um autovalor simples. O corolário a seguir decorre de tal fato.

Corolário 5.11 *Seja G um grafo conexo bipartido de ordem n . Então $\lambda_2(\overline{G}) = -1 - \lambda_n(G)$ se e somente se $\lambda_n(G)$ não é um autovalor principal.*

Agora, analisaremos duas subfamílias de grafos bipartidos: os caminhos e as árvores de diâmetro 3. Para provar que o menor autovalor de um caminho \mathcal{P}_n é não principal se e somente se n é um número par, precisamos reaver os lemas a seguir.

Lema 5.12 (DO CARMO *et al.* [53]) *Sejam a, r reais e n um inteiro não negativo. Tem-se: $\sum_{i=0}^n \text{sen}(a + ir) = \frac{\cos(a - \frac{r}{2}) - \cos(a + nr + \frac{r}{2})}{2\text{sen}(\frac{r}{2})}$.*

Demonstração. Provaremos por indução sobre $n \geq 0$ que

$$\sum_{i=0}^n \text{sen}(a + ir) = \frac{\cos(a - \frac{r}{2}) - \cos(a + nr + \frac{r}{2})}{2\text{sen}(\frac{r}{2})}. \quad (5.3)$$

A equação (5.3) é verdadeira para $n = 0$. De fato,

$$\begin{aligned} \frac{\cos(a - \frac{r}{2}) - \cos(a + \frac{r}{2})}{2\text{sen}(\frac{r}{2})} &= \frac{-2\text{sen}\left(\frac{a - \frac{r}{2} + a + \frac{r}{2}}{2}\right) \text{sen}\left(\frac{a - \frac{r}{2} - a - \frac{r}{2}}{2}\right)}{2\text{sen}(\frac{r}{2})} \\ &= \frac{-2\text{sen}(a) \text{sen}(\frac{-r}{2})}{2\text{sen}(\frac{r}{2})} = \text{sen}(a). \end{aligned}$$

Suponhamos que a equação (5.3) é verdadeira para um inteiro não negativo n .

Escrevamos $\sum_{i=0}^{n+1} \text{sen}(a + ir) = \sum_{i=0}^n \text{sen}(a + ir) + \text{sen}(a + (n+1)r)$. Por hipótese,

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{n+1} \text{sen}(a + ir) &= \frac{\cos(a - \frac{r}{2}) - \cos(a + nr + \frac{r}{2})}{2\text{sen}(\frac{r}{2})} + \text{sen}(a + (n+1)r) \\ &= \frac{\cos(a - \frac{r}{2}) - \cos(a + nr + \frac{r}{2})}{2\text{sen}(\frac{r}{2})} + \frac{2\text{sen}(a + (n+1)r)\text{sen}(\frac{r}{2})}{2\text{sen}(\frac{r}{2})}. \end{aligned}$$

Como $\cos(a + (n+1)r + \frac{r}{2}) = \cos(a + (n+1)r) \cos(\frac{r}{2}) - \text{sen}(a + (n+1)r) \text{sen}(\frac{r}{2})$

temos que

$$\begin{aligned}
2\text{sen}(a + (n + 1)r)\text{sen}\left(\frac{r}{2}\right) &= \text{sen}(a + (n + 1)r)\text{sen}\left(\frac{r}{2}\right) + \cos(a + (n + 1)r)\cos\left(\frac{r}{2}\right) \\
&\quad - \cos\left(a + (n + 1)r + \frac{r}{2}\right) \\
&= \cos\left(a + (n + 1)r - \frac{r}{2}\right) - \cos\left(a + (n + 1)r + \frac{r}{2}\right) \\
&= \cos\left(a + nr + \frac{r}{2}\right) - \cos\left(a + (n + 1)r + \frac{r}{2}\right).
\end{aligned}$$

Logo, $\sum_{i=0}^{n+1} \text{sen}(a + ir) = \frac{\cos\left(a - \frac{r}{2}\right) - \cos\left(a + (n + 1)r + \frac{r}{2}\right)}{2\text{sen}\left(\frac{r}{2}\right)}$. Estabelecendo, assim, o resultado para todo n inteiro não negativo. \square

Lema 5.13 (DO CARMO *et al.* [53]) *Sejam $x, a \in \mathbb{R}$. Tem-se $\cos(x) = \cos(a)$ se e somente se ou $x = a + 2k\pi$ para algum $k \in \mathbb{Z}$, ou $x = -a + 2k\pi$ para algum $k \in \mathbb{Z}$.*

Proposição 5.14 *Seja α_n o menor autovalor do caminho \mathcal{P}_n . Então α_n é um autovalor não principal se e somente se n é um número par.*

Demonstração. Suponhamos que α_n é um autovalor não principal do caminho \mathcal{P}_n . Do Teorema 2.21, α_n possui um autovetor dado por

$$\mathbf{w}^{(n)} = \left(\text{sen}\left(\frac{n\pi}{(n+1)}\right) \text{sen}\left(\frac{2n\pi}{(n+1)}\right) \cdots \text{sen}\left(\frac{n^2\pi}{(n+1)}\right) \right)^T.$$

Seja $S = \sum_{i=0}^n \text{sen}\left(\frac{in\pi}{(n+1)}\right)$ a soma das coordenadas do autovetor $\mathbf{w}^{(n)}$. Do Lema 5.12, se $a = 0$ e $r = \frac{n\pi}{n+1}$ então

$$S = \frac{\cos\left(a - \frac{r}{2}\right) - \cos\left(a + nr + \frac{r}{2}\right)}{2\text{sen}\left(\frac{r}{2}\right)} = \frac{\cos\left(\frac{-n\pi}{2(n+1)}\right) - \cos\left(\frac{n^2\pi}{(n+1)} + \frac{n\pi}{2(n+1)}\right)}{2\text{sen}\left(\frac{n\pi}{2(n+1)}\right)}.$$

Consequentemente, α_n é não principal se e somente se

$$\cos\left(\frac{-n\pi}{2(n+1)}\right) = \cos\left(\frac{n^2\pi}{(n+1)} + \frac{n\pi}{2(n+1)}\right).$$

Pelo Lema 5.13, resta-nos analisar os casos: $\frac{n^2\pi}{n+1} + \frac{n\pi}{2(n+1)} = \frac{n\pi}{2(n+1)} + 2k\pi$ para algum $k \in \mathbb{Z}$, e $\frac{n^2\pi}{n+1} + \frac{n\pi}{2(n+1)} = \frac{-n\pi}{2(n+1)} + 2k\pi$ para algum $k \in \mathbb{Z}$

$$\mathbf{1^o \text{ caso:}} \quad \frac{n^2\pi}{n+1} + \frac{n\pi}{2(n+1)} = \frac{n\pi}{2(n+1)} + 2k\pi, k \in \mathbb{Z}$$

Nas condições acima, $2n^2\pi + n\pi = n\pi + 2k\pi(2(n+1))$. Logo, $2n^2 - 4k(n+1) = 0$ e

$$n^2 - 2kn - 2k = 0. \quad (5.4)$$

As raízes da equação (5.4) são $k + \sqrt{k(k+2)}$ e $k - \sqrt{k(k+2)}$ e estes serão números inteiros se e só se $k(k+2)$ for um quadrado perfeito. Neste caso, $k = 0$ ou $k = -2$. Como $n > 0$ segue que no 1º caso não possui solução.

$$\mathbf{2^o \text{ caso:}} \quad \frac{n^2\pi}{n+1} + \frac{n\pi}{2(n+1)} = \frac{-n\pi}{2(n+1)} + 2k\pi, k \in \mathbb{Z}$$

Neste caso, $2n^2\pi + 2n\pi - 2k\pi(2(n+1)) = 0$ e isto implica

$$n^2 + n(1 - 2k) - 2k = 0. \quad (5.5)$$

Como as raízes da equação (5.5) são $n = 2k$ e $n = -1$ segue que $n = 2k$ para algum $k \in \mathbb{Z}$, pois $n > 0$. Logo, α_n é um autovalor não principal se e somente se n é um número par.

□

Vale ressaltar que no Capítulo 7 iremos determinar todos os autovalores principais dos caminhos. A proposição a seguir fornece uma condição necessária e suficiente para que um autovalor seja não principal.

Proposição 5.15 *Seja λ um autovalor não nulo de um grafo G . Tem-se que λ é um autovalor não principal de G se e somente se d_G é ortogonal ao autoespaço $\mathcal{E}_G(\lambda)$.*

Demonstração. Como λ é um autovalor de G segue que para todo $\mathbf{v} \in \mathcal{E}_G(\lambda)$ tem-se $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ o que implica em $j^T A\mathbf{v} = \lambda j^T \mathbf{v}$. Visto que $j^T A = d_G$ temos $d_G^T \mathbf{v} = \lambda j^T \mathbf{v}$ para todo $\mathbf{v} \in \mathcal{E}_G(\lambda)$.

Se λ é não principal segue que $d_G^T \mathbf{v} = 0$. Reciprocamente, se d_G é ortogonal ao autoespaço $\mathcal{E}_G(\lambda)$ então $d_G^T \mathbf{v} = 0$ para todo $\mathbf{v} \in \mathcal{E}_G(\lambda)$. Logo, $j^T \mathbf{v} = 0$ para todo $\mathbf{v} \in \mathcal{E}_G(\lambda)$, pois $\lambda \neq 0$.

□

A Figura 5.1 ilustra uma árvore T com autovalores simples, cujos respectivos simétricos não são todos principais.

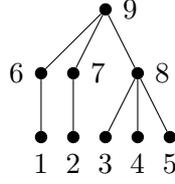


Figura 5.1: Árvore com o simétrico de um dos autovalores simples não principal e com outro cujo simétrico é principal

Com efeito, o espectro de T é constituído pelos autovalores simples $-\sqrt{5}, -\sqrt{2}, -1, 1, \sqrt{2}$ e $\sqrt{5}$ e pelo autovalor zero que possui multiplicidade 3. Os respectivos simétricos dos autovalores simples 1 e $-\sqrt{5}$ têm como respectivos autovetores $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T$ e $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & -\sqrt{5} & -\sqrt{5} & -2\sqrt{5} & 4 \end{pmatrix}^T$. Sendo o vetor dos graus de T $d_T = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 4 & 3 \end{pmatrix}^T$ e dado que $d_T^T \mathbf{v}_1 = 0$ e $d_T^T \mathbf{v}_2 = 20 - 12\sqrt{5}$, da Proposição 5.15, -1 é um autovalor não principal de T enquanto que $-\sqrt{5}$ é um autovalor principal.

Daqui em diante, consideramos a árvore dupla estrela $T(k, s)$, com $k + s + 2$ vértices, rotulada como mostra a Figura 5.2.

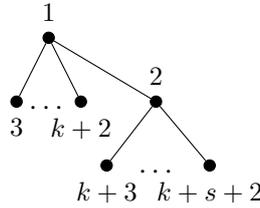


Figura 5.2: Dupla estrela $T(k, s)$

Nos Lemas 5.16 e 5.17, explicitamos o espectro de $T(k, s)$ e os autovetores associados aos seus autovalores não nulos.

Lema 5.16 *O espectro da dupla estrela $T(k, s)$ é constituído por 0 com multiplicidade $s + k - 2$ e pelos autovalores simples*

$$\lambda_i = \begin{cases} \frac{\sqrt{k+s+1+2\sqrt{ks}} + \sqrt{k+s+1-2\sqrt{ks}}}{2}, & \text{se } i = 1; \\ \frac{\sqrt{k+s+1+2\sqrt{ks}} - \sqrt{k+s+1-2\sqrt{ks}}}{2}, & \text{se } i = 2; \\ \frac{-\sqrt{k+s+1+2\sqrt{ks}} + \sqrt{k+s+1-2\sqrt{ks}}}{2}, & \text{se } i = k+s+1; \\ \frac{-\sqrt{k+s+1+2\sqrt{ks}} - \sqrt{k+s+1-2\sqrt{ks}}}{2}, & \text{se } i = k+s+2. \end{cases}$$

Demonstração. De fato, por DEL VECCHIO *et al.* [54], o polinômio característico de $T(k, s)$ é dado por $p(x) = x^{s-1}x^{k-1}(x^4 - x^2(k + s + 1) + ks)$.

□

Lema 5.17 *Se $\lambda \neq 0$ é um autovalor simples de $T(k, s)$ então λ possui um autovetor \mathbf{v} cuja i -ésima coordenada é dada por*

$$v_i = \begin{cases} 1, & \text{se } i = 1; \\ \lambda - \frac{k}{\lambda}, & \text{se } i = 2; \\ \frac{1}{\lambda}, & \text{se } 3 \leq i \leq k + 2; \\ 1 - \frac{k}{\lambda^2}, & \text{se } k + 3 \leq i \leq k + s + 2. \end{cases}$$

Demonstração. Seja a dupla estrela $T(k, s)$ com $k + s + 2$ vértices rotulada como na Figura 5.2. e cuja matriz de adjacência é

$$A = \left(\begin{array}{cc|ccc|ccc} 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 1 \\ \hline 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{array} \right).$$

Como $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ então

$$A\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_2 + v_3 + \cdots + v_{k+2} \\ v_1 + v_{k+3} + \cdots + v_{k+s+2} \\ v_1 \\ \vdots \\ v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda v_1 \\ \lambda v_2 \\ \lambda v_3 \\ \vdots \\ \lambda v_{k+2} \\ \lambda v_{k+3} \\ \vdots \\ \lambda v_{k+s+2} \end{pmatrix}.$$

Escrevendo as coordenadas do vetor \mathbf{v} em função de sua primeira coordenada, v_1 , obtém-se

- $v_3 = v_4 = \cdots = v_{k+2} = \frac{v_1}{\lambda};$

- $v_2 + v_3 + \dots + v_{k+2} = \lambda v_1 \implies v_2 + k \frac{v_1}{\lambda} = \lambda v_1 \implies v_2 = v_1 \left(\lambda - \frac{k}{\lambda} \right)$;
- $v_{k+3} = v_{k+4} = \dots = v_{k+s+2} = \frac{v_2}{\lambda} = v_1 \left(1 - \frac{k}{\lambda^2} \right)$.

Assim,

$$\mathbf{v} = \left(v_1 \quad v_1 \left(\lambda - \frac{k}{\lambda} \right) \quad \frac{v_1}{\lambda} \quad \dots \quad \frac{v_1}{\lambda} \quad v_1 \left(1 - \frac{k}{\lambda^2} \right) \dots v_1 \left(1 - \frac{k}{\lambda^2} \right) \right)^T.$$

Fazendo $v_1 = 1$ tem-se o resultado. □

Em nossos testes, consideramos as duplas estrelas com o número de vértices variando de 4 a 18. Pudemos constatar que a quantidade dos autovalores principais está relacionada com a condição do menor autovalor de tais árvores ser principal ou não principal. Apresentamos a seguir dois lemas necessários para provar o teorema que determina os autovalores principais das duplas estrelas.

Seja $G = (V, E)$ um grafo conexo bipartido. Considere $P_2 = \{V_1, V_2\}$ uma partição de V tal que $|V_1| = n_1$ e $|V_2| = n_2$. Assim, a matriz de adjacência de G pode ser escrita como

$$A = \left(\begin{array}{c|c} 0_{n_1 \times n_1} & \mathcal{B}_{n_1 \times n_2} \\ \hline \mathcal{B}_{n_2 \times n_1}^T & 0_{n_2 \times n_2} \end{array} \right),$$

onde $\mathcal{B}_{n_1 \times n_2}$ é chamado *bloco da partição de G* .

Lema 5.18 *Seja G um grafo bipartido de ordem n e seja $p \in \mathbb{N}$. Se $\mathcal{B} = \mathcal{B}_{n_1 \times n_2}$ é o bloco da partição de G então*

$$A^{2p} \mathbf{j} = \begin{pmatrix} (\mathcal{B}\mathcal{B}^T)^p \mathbf{j}_1 \\ \hline (\mathcal{B}^T \mathcal{B})^p \mathbf{j}_2 \end{pmatrix} \quad e \quad A^{2p+1} \mathbf{j} = \begin{pmatrix} \mathcal{B}(\mathcal{B}^T \mathcal{B})^p \mathbf{j}_2 \\ \hline \mathcal{B}^T (\mathcal{B}\mathcal{B}^T)^p \mathbf{j}_1 \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

Demonstração. Como $A \mathbf{j} = \begin{pmatrix} \mathcal{B} \mathbf{j}_2 \\ \hline \mathcal{B}^T \mathbf{j}_1 \end{pmatrix}$ então $A^2 \mathbf{j} = \begin{pmatrix} (\mathcal{B}\mathcal{B}^T) \mathbf{j}_1 \\ \hline (\mathcal{B}^T \mathcal{B}) \mathbf{j}_2 \end{pmatrix}$ e $A^3 \mathbf{j} =$

$$A \cdot A^2 j = \begin{pmatrix} \mathcal{B}(\mathcal{B}^T \mathcal{B}) j_2 \\ \hline \mathcal{B}^T(\mathcal{B} \mathcal{B}^T) j_1 \end{pmatrix}.$$

Dado um número natural p , suponhamos que $A^{2p} j = \begin{pmatrix} (\mathcal{B} \mathcal{B}^T)^p j_1 \\ \hline (\mathcal{B}^T \mathcal{B})^p j_2 \end{pmatrix}$

e $A^{2p+1} j = \begin{pmatrix} \mathcal{B}(\mathcal{B}^T \mathcal{B})^p j_2 \\ \hline \mathcal{B}^T(\mathcal{B} \mathcal{B}^T)^p j_1 \end{pmatrix}$. Desta forma, $A^{2(p+1)} j = A \cdot A^{2p} j =$

$$\begin{pmatrix} (\mathcal{B} \mathcal{B}^T)^{p+1} j_1 \\ \hline (\mathcal{B}^T \mathcal{B})^{p+1} j_2 \end{pmatrix} \text{ e } A^{2(p+1)+1} j = A \cdot A^{2(p+1)} j = \begin{pmatrix} \mathcal{B}(\mathcal{B}^T \mathcal{B})^{p+1} j_1 \\ \hline \mathcal{B}^T(\mathcal{B} \mathcal{B}^T)^{p+1} j_2 \end{pmatrix}.$$

Logo, pelo Princípio de Indução valem as equações apresentadas em (5.6). □

Lema 5.19 *Seja a árvore dupla estrela $T(k, s)$ de ordem n . Para todo $p \in \mathbb{N}$, os n -vetores coluna A_j^{2p} e A_j^{2p+1} possuem no máximo 4 linhas distintas.*

Demonstração. Seja a árvore dupla estrela $T(k, s)$ de ordem $n = k + s + 2$.

Considere $P_2 = \{V_1, V_2\}$ uma partição do conjunto de vértices de uma dupla estrela $T(k, s)$ tal que $V_1 = \{1, 2, \dots, k + 1\}$ e $V_2 = \{k + 2, k + 3, \dots, k + s + 2\}$.

O bloco da partição P_2 é a matriz de ordem $(k + 1) \times (s + 1)$ dada por

$$\mathcal{B} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

Assim,

$$\mathcal{B}\mathcal{B}^T = \begin{pmatrix} s+1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \text{ e } \mathcal{B}^T\mathcal{B} = \begin{pmatrix} k+1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

Do Lema 2.2, para todo $p \in \mathbb{N}$ temos que $(\mathcal{B}\mathcal{B}^T)^p \mathbf{j}$, $(\mathcal{B}^T\mathcal{B})^p \mathbf{j}$, $\mathcal{B}^T(\mathcal{B}\mathcal{B}^T)^p \mathbf{j}$ e $\mathcal{B}(\mathcal{B}^T\mathcal{B})^p \mathbf{j}$ possuem todas as linhas iguais com exceção da primeira linha.

Por conseguinte, do Lema 5.18, segue que cada bloco que compõe cada um dos n -vetores coluna $A^{2p} \mathbf{j}$ e $A^{2p+1} \mathbf{j}$ possui duas linhas distintas. Como cada um desses vetores possui dois blocos temos que eles possuem no máximo quatro linhas distintas. \square

Teorema 5.20 *Seja T uma dupla estrela de ordem n .*

- (i) *Se T é balanceada então T possui dois autovalores principais: λ_1 e λ_{n-1} ;*
- (ii) *Se T não é balanceada então T possui quatro autovalores principais: $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_{n-1}$ e λ_n .*

Demonstração.

(i) Seja $T = T(k, k)$ uma dupla estrela balanceada de ordem $n = 2k + 2$. Do Lema 5.16, o espectro de T é constituído por 0 com multiplicidade $n - 4$ e pelos autovalores simples $\lambda_1 = \frac{1+\sqrt{1+4k}}{2}$, $\lambda_2 = \frac{-1+\sqrt{1+4k}}{2}$, $\lambda_{n-1} = \frac{1-\sqrt{1+4k}}{2}$ e $\lambda_n = \frac{-1-\sqrt{1+4k}}{2}$.

Do Lema 5.17, se λ é um autovalor não nulo de T então

$$\mathbf{v} = \left(1 \quad \left(\lambda - \frac{k}{\lambda} \right) \quad \frac{1}{\lambda} \quad \cdots \quad \frac{1}{\lambda} \quad \left(1 - \frac{k}{\lambda^2} \right) \quad \cdots \quad \left(1 - \frac{k}{\lambda^2} \right) \right)^T$$

é um autovetor associado a λ . Como os autovalores não nulos de T são simples, para verificar se tais autovalores são não principais, basta analisar quando $\mathbf{v}^T \mathbf{j} = 0$.

Temos

$$\mathbf{v}^T \mathbf{j} = \frac{\lambda^2 + (\lambda^2 - k)\lambda + \lambda k + k(\lambda^2 - k)}{\lambda^2} = \frac{(\lambda^2 + \lambda - k)(\lambda + k)}{\lambda^2}.$$

Assim, $\mathbf{v}^T \mathbf{j} = 0$ se e somente se $(\lambda^2 + \lambda - k)(\lambda + k) = 0$. Como $-k$ não é um autovalor de T segue que os autovalores não nulos e não principais de T são $\lambda_2 = \frac{-1+\sqrt{1+4k}}{2}$ e $\lambda_n = \frac{-1-\sqrt{1+4k}}{2}$.

Como $T(k, k)$ possui exatamente dois autovalores principais, pelo Teorema 4.12, segue que λ_1 e λ_{n-1} são os autovalores principais de T .

(ii) Seja $T = T(k, s)$ um dupla estrela não balanceada de ordem $n = k + s + 2$ ($k \neq s$).

Para mostrar que T possui quatro autovalores principais, provamos que a sua matriz cadeia W possui posto igual a 4. Iniciamos, mostrando que W possui no máximo quatro linhas distintas.

Sejam i_1 e i_2 duas linhas de W tais que $i_1, i_2 \in \{1, 2, \dots, k + 1\}$.

Na 1ª coluna de W temos que i_1 e i_2 de W possuem as entradas iguais a 1. Na 2ª coluna de W , se uma dentre as linhas i_1 e i_2 de W for a 1ª linha de W segue pela definição de $B\mathcal{J}_2$ que as respectivas entradas de i_1 e i_2 são distintas. Caso contrário, as entradas das linhas i_1 e i_2 na 2ª coluna de W são iguais. Por fim, se escolhermos qualquer outra coluna de W , do Lema 5.19, que se uma das linhas i_1 e i_2 for a 1ª linha de W então i_1 e i_2 possuem suas respectivas entradas distintas, caso contrário tais entradas serão iguais. Logo, existem somente duas linhas distintas dentre as $k + 1$ primeiras linhas de W : a 1ª linha e as restantes que são iguais.

De modo análogo, mostra-se que da $(k+2)$ ª a $(k+s+2)$ ª linha existem exatamente duas linhas distintas: a $(k + 2)$ ª linha e as restantes que são iguais. Deste modo,

$$\text{rank}(W) \leq 4. \quad (5.7)$$

Agora, vamos mostrar que as colunas $\mathcal{J}, A\mathcal{J}, A^2\mathcal{J}$ e $A^3\mathcal{J}$ são linearmente independentes. Se $x_1\mathcal{J} + x_2A\mathcal{J} + x_3A^2\mathcal{J} + x_4A^3\mathcal{J} = \mathbf{0}$ então

$$x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} s+1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ k+1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} + x_3 \begin{pmatrix} s+1+k \\ k+1 \\ \vdots \\ k+1 \\ k+1+s \\ \vdots \\ s+1 \end{pmatrix} + x_4 \begin{pmatrix} s+1+k+s(s+1) \\ k+1+s \\ \vdots \\ k+1+s \\ k+1+s+k(k+1) \\ \vdots \\ s+1+k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix},$$

o que nos dá o seguinte sistema linear homogêneo com 4 equações e 4 incógnitas:

$$S : \begin{cases} x_1 + x_2(s+1) + x_3(s+1+k) + x_4(s+1+k+s(s+1)) = 0 \\ x_1 + x_2 + x_3(1+k) + x_4(s+1+k) = 0 \\ x_1 + x_2(k+1) + x_3(s+1+k) + x_4(s+1+k+k(k+1)) = 0 \\ x_1 + x_2 + x_3(1+s) + x_4(s+1+k) = 0 \end{cases}$$

O determinante da matriz dos coeficientes de S é

$$D = (k^2 - ks)s(s+1) + k(k+1)s^2 - kk(k+1)s.$$

Assim, $D \neq 0$ quando $k \neq s$. Neste caso, $\text{rank}(W) \geq 4$. De (5.7), $\text{rank}(W) = 4$. Logo, T possui quatro autovalores principais.

Para determinar os quatro autovalores principais de T , vamos mostrar que 0 é um autovalor não principal.

Da Proposição 2.28, cada par de vértices gêmeos e não adjacentes está relacionado a um vetor de Faria, que é um autovetor associado ao autovalor 0 . Fixe um vértice i de grau 1 e considere os pares de vértices gêmeos não adjacentes i e j , onde j tem grau 1 e possui o mesmo vizinho de i . Deste modo, obtemos $s + k - 2$ vetores de Faria linearmente independentes que são autovetores associados ao autovalor 0 . Como 0 possui multiplicidade $k + s - 2$, pelo Lema 5.16, segue que 0 é um autovalor não principal de T . Logo, os autovalores principais de T são $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_{n-1}$ e λ_n . \square

Como consequência imediata do Teorema 5.20, temos o seguinte resultado.

Corolário 5.21 *Seja $T(k, s)$ uma dupla estrela. O menor autovalor de $T(k, s)$ é não principal se e somente se $k = s$.*

Uma generalização da operação junção, definida na Seção 2.1, foi primeiramente introduzida em [55] sob a designação de composição generalizada e mais recentemente em [56] com a designação de H -junção (“ H -join”) definida como segue: dado um grafo H tal que $V(H) = \{1, 2, \dots, p\}$, considere uma família com p grafos, $\mathcal{F} = \{G_1, G_2, \dots, G_p\}$, onde, para $j \in \{1, 2, \dots, p\}$, cada grafo G_j tem ordem n_j . Cada vértice $j \in V(H)$ está associado ao grafo $G_j \in \mathcal{F}$. A H -junção de G_1, G_2, \dots, G_p é o grafo $G = H[G_1, G_2, \dots, G_p]$ tal que $V(G) = \bigcup_{j=1}^p V(G_j)$ e $E(G) = \left(\bigcup_{j=1}^p E(G_j) \right) \cup \left(\bigcup_{\{r,s\} \in E(H)} \{ \{u, v\}; u \in V(G_r) \text{ e } v \in V(G_s) \} \right)$. Para exemplificar a operação H -junção, considere o grafo $H = \mathcal{P}_3$, onde $V(H) = \{1, 2, 3\}$ e $E(H) = \{ \{i, i + 1\} \mid 1 \leq i \leq 2 \}$, e os grafos $G_1 = K_1, G_2 = \mathcal{P}_2$ e $G_3 = C_3$. A H -junção de K_1, \mathcal{P}_2 e C_3 é o grafo $H[K_1, \mathcal{P}_2, C_3]$, que está ilustrado na Figura 5.3.

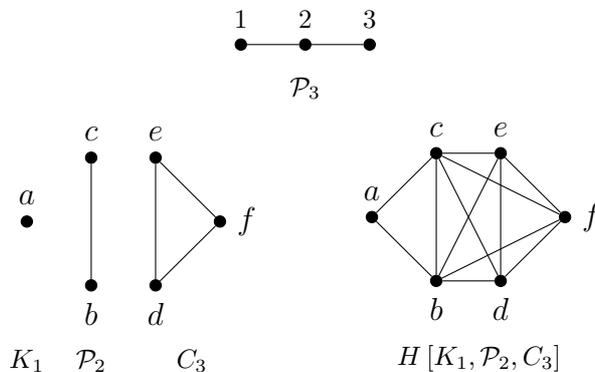


Figura 5.3: A H -junção de K_1, \mathcal{P}_2 e C_3 , onde $H = \mathcal{P}_3$

Sejam k, s inteiros positivos. Considere o grafo $H = \mathcal{P}_4$, onde $V(H) = \{1, 2, 3, 4\}$ e $E(H) = \{\{i, i + 1\} \mid 1 \leq i \leq 3\}$. Sejam os grafos $G_1 = K_1, G_2 = K_k, G_3 = K_s$ e $G_4 = K_1$. Denotamos a H -junção de K_1, K_k, K_s e K_1 por $H_{k,s} = H[K_1, K_k, K_s, K_1]$. Ilustramos na figura a seguir os grafos $H_{3,4}$ e $H_{5,5}$.

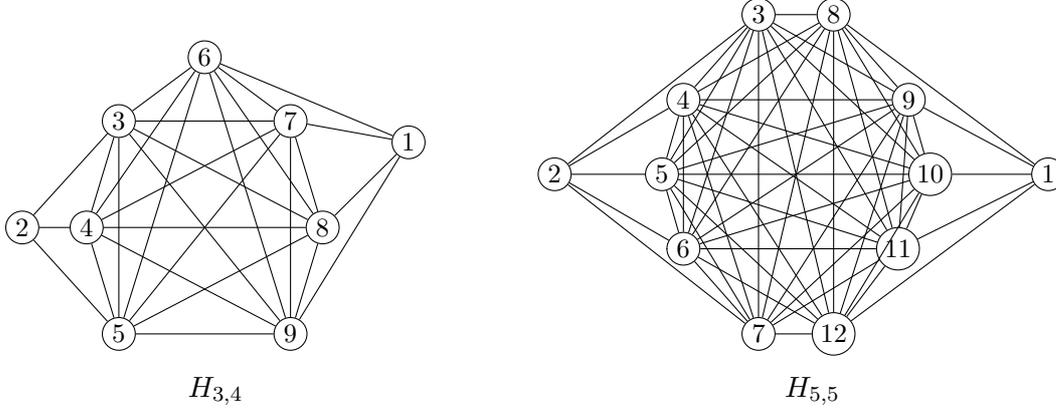


Figura 5.4: Grafos $H_{3,4}$ e $H_{5,5}$

Teorema 5.22 *Dados k, s inteiros positivos, considere os grafos $H_{k,s} = H[K_1, K_k, K_s, K_1]$, onde $H = \mathcal{P}_4$.*

- (i) *Se $k = s$ então $H_{k,s}$ possui dois autovalores principais;*
- (ii) *Se $k \neq s$ então $H_{k,s}$ possui quatro autovalores principais.*

Demonstração. Para k, s inteiros positivos e $H = \mathcal{P}_4$, o grafo $H_{k,s} = H[K_1, K_k, K_s, K_1]$ é o complementar da dupla estrela $T(k, s)$. Com efeito, $H_{k,s}$ possui o mesmo conjunto de vértices de $\overline{T(k, s)}$ e o seu conjunto de arestas é

$$E = \left(\bigcup_{j=1}^4 E(G_j) \right) \cup \left(\bigcup_{\{i,j\} \in E(H)} \{\{u, v\}; u \in V(G_i) \text{ e } v \in V(G_j)\} \right),$$

que é igual ao conjunto $\{\{i, j\} \mid i + 2 \leq j \leq n, \text{ onde } i \in \{1, 2, \dots, n - 2\}\}$, o qual é o conjunto de arestas de $\overline{T(k, s)}$. Pela Proposição 3.4, as duplas estrelas e os grafos $H_{k,s}$ possuem o mesmo número de autovalores principais. Logo, o resultado segue do Teorema 5.20. □

Observe que os grafos $H_{3,4}$ e $H_{5,5}$, dados na Figura 5.4, são os complementares das respectivas duplas estrelas $T(3,4)$ e $T(5,5)$, que estão apresentadas na Figura 5.5.

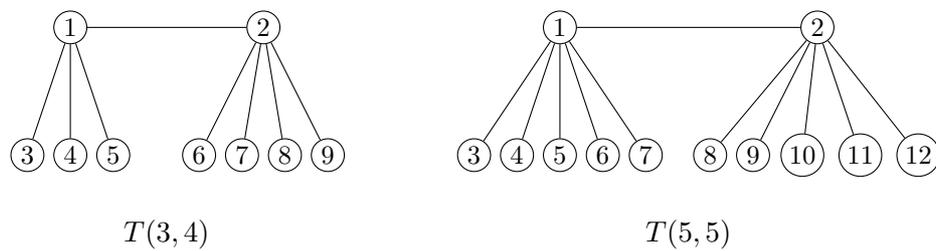


Figura 5.5: Duplas estrelas $T(3,4)$ e $T(5,5)$

Capítulo 6

Partições equilibradas e autovalores principais

Neste capítulo utilizamos as partições equilibradas para determinar uma cota superior para o conjunto dos autovalores principais de um grafo. Definimos os grafos foguete e mostramos que estes grafos possuem exatamente três autovalores principais. Por fim, apresentamos uma condição para que um grafo com uma partição equilibrada de três células possua dois autovalores principais.

Seja V o conjunto de vértices de um grafo G . Uma *partição equilibrada* de G é uma partição de V com r células $\pi_r(G) = \{V_1, V_2, \dots, V_r\}$ tal que, para $i \in \{1, 2, \dots, r\}$, a célula V_i possui n_i vértices e dados $i, j \in \{1, 2, \dots, r\}$ distintos temos que

- (i) o subgrafo induzido $\langle V_i \rangle$ é um grafo regular;
- (ii) os vértices de V_i possuem o mesmo número de vizinhos em V_j .

Denotamos por d_{ii} o grau do subgrafo induzido regular $\langle V_i \rangle$ e para $i, j \in \{1, 2, \dots, r\}$ distintos, denotamos por d_{ij} o número de vizinhos que cada vértice da célula V_i possui em V_j . Se não houver dúvida, denotamos a partição equilibrada de G com r células por π_r .

Para o grafo da Figura 6.1, apresentamos uma partição equilibrada com três células: $\pi_3 = \{V_1, V_2, V_3\}$, onde $V_1 = \{6\}$, $V_2 = \{5, 7\}$ e $V_3 = \{1, 2, 3, 4, 8, 9, 10, 11\}$.

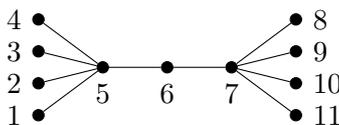


Figura 6.1: Partição equilibrada π_3

Com efeito, para todo $i \in \{1, 2, 3\}$ temos que o subgrafo induzido $\langle V_i \rangle$ é um grafo vazio, logo $d_{ii} = 0$. O vértice 6 da célula V_1 possui 2 vizinhos em V_2 (vértices 5 e 7) e não possui vizinhos em V_3 . Portanto, $d_{12} = 2$ e $d_{13} = 0$. Cada vértice de V_2 possui 1 vizinho em V_1 e 4 vizinhos em V_3 . Logo, $d_{21} = 1$ e $d_{23} = 4$. Por fim, cada vértice de V_3 possui 1 vizinho em V_2 e não tem vizinho em V_1 . Assim, $d_{32} = 1$ e $d_{31} = 0$.

A proposição a seguir estabelece que o grau dos vértices de V_i é igual a soma dos números de seus vizinhos em todas as células da partição.

Proposição 6.1 (SCHWENK [55]) *Seja G um grafo com uma partição equilibrada $\pi_r = \{V_1, V_2, \dots, V_r\}$. Dado $i \in \{1, 2, \dots, r\}$, os vértices da célula V_i possuem grau $d_{ii} + \sum_{\substack{t=1 \\ t \neq i}}^r d_{it}$.*

Neste capítulo serão utilizados os multigrafos orientados definidos no Capítulo 2. Seja $\pi_r = \{V_1, V_2, \dots, V_r\}$ uma partição equilibrada de um grafo G . Definimos a matriz quadrada $\mathcal{M}_{\pi_r} = (m_{ij})$ de ordem r cuja entrada m_{ij} é igual ao número de vizinhos que os vértices da célula V_i possuem na célula V_j , isto é, $m_{ij} = d_{ij}$ como a *matriz quociente* de π_r . O multigrafo orientado tal que \mathcal{M}_{π_r} é sua matriz de adjacência é chamado *grafo quociente* ou *divisor* de G . Este será denotado por G/π_r .

Por exemplo, o grafo G da Figura 6.1 possui a partição equilibrada $\pi_3 = \{V_1, V_2, V_3\}$ com $V_1 = \{6\}$, $V_2 = \{5, 7\}$ e $V_3 = \{1, 2, 3, 4, 8, 9, 10, 11\}$. Como $d_{11} = 0$, $d_{12} = 2$, $d_{13} = 0$, $d_{21} = 1$, $d_{22} = 0$, $d_{23} = 4$, $d_{31} = 0$, $d_{32} = 1$ e $d_{33} = 0$, a matriz quociente de π_3 é

$$\mathcal{M}_{\pi_3} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Da Proposição 2.1, o grafo quociente de G , explicitado na Figura 6.2, é o multigrafo orientado cujo conjunto de vértices é $V' = \{V_1, V_2, V_3\}$ e a quantidade de arcos que partem de um vértice i a um vértice j é igual a entrada (i, j) de \mathcal{M}_{π_3} .

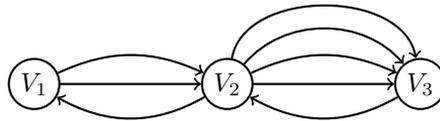


Figura 6.2: Grafo quociente G/π_3

O próximo teorema afirma que o espectro do grafo quociente de G está contido no espectro do grafo G .

Teorema 6.2 (FINCK e SACHS [57]) *Se π_r é uma partição equilibrada de um grafo G então o polinômio característico da matriz de adjacência do grafo quociente G/π_r divide o polinômio característico de G .*

Todo grafo G possui pelo menos a partição equilibrada, aquela cujas células são subconjuntos unitários de vértices disjuntos dois a dois. Chamamos tal partição de *partição equilibrada simples*. Existem grafos que possuem mais de uma partição equilibrada e, conseqüentemente, mais de um grafo divisor, por exemplo, o grafo da Figura 6.1, além de possuir a partição equilibrada simples, possui outra denotada por π_3 .

Teorema 6.3 (CVETKOVIĆ [3]) *Todo autovalor principal de G é autovalor de qualquer grafo quociente de G .*

A seguir registramos as matrizes de adjacência de G e de G/π_3 para o grafo G dado na Figura 6.1 e para o grafo G/π_3 na Figura 6.2,

$$A(G) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad A(G/\pi_3) = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Observe que $A(G/\pi_3) = \mathcal{M}_{\pi_3}$ e o espectro de G é constituído pelos autovalores simples $-2, 2, -\sqrt{6}, \sqrt{6}$ e pelo autovalor 0 com multiplicidade 7. Por sua vez, os autovalores principais de G pertencem ao espectro do grafo quociente: $MainSpec(G) = \{-\sqrt{6}, 0, \sqrt{6}\} = Spec(G/\pi_3)$.

No Capítulo 5, determinamos a quantidade de autovalores principais das duplas estrelas utilizando suas respectivas matrizes cadeias. Note que também podemos utilizar as partições equilibradas para determinar os autovalores principais das duplas estrelas balanceadas e encontrar uma cota superior para o número de autovalores principais das duplas estrelas não balanceadas. É o que fazemos a seguir, como exemplo de aplicação do Teorema 6.3.

Como antes, consideramos as duplas estrelas $T(k, s)$ rotuladas como na Figura 6.3, nos casos $k = s$ e $k \neq s$.

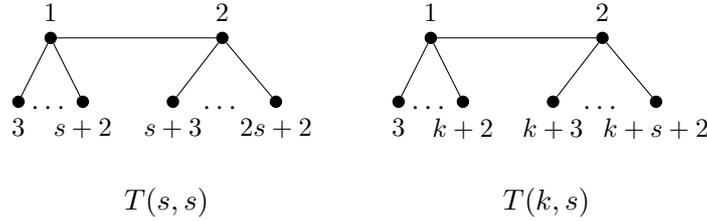


Figura 6.3: Duplas estrelas

No caso $k = s$, temos que $\pi_2 = \{V_1, V_2\}$, onde $V_1 = \{1, 2\}$ e $V_2 = \{3, 4, \dots, 2s+2\}$, é uma partição equilibrada da dupla estrela balanceada $T(s, s)$. Com efeito, o subgrafo induzido $\langle V_1 \rangle$ é um grafo regular de grau 1 e $\langle V_2 \rangle$ é um grafo vazio. Os vértices de V_1 possuem s vizinhos em V_2 , enquanto que os vértices de V_2 possuem um único vizinho em V_1 . Assim, a matriz quociente de π_2 é dada por

$$\mathcal{M}_{\pi_2} = \begin{pmatrix} 1 & s \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Do Teorema 6.3, temos que $T(s, s)$ possui no máximo dois autovalores principais. Como não é um grafo regular segue que o espectro de \mathcal{M}_{π_2} é exatamente o espectro principal da dupla estrela balanceada, ou seja, $MainSpec(T(s, s)) = \left\{ \frac{1+\sqrt{1+4s}}{2}, \frac{1-\sqrt{1+4s}}{2} \right\}$.

No outro caso, considere a dupla estrela não balanceada $T(k, s)$ rotulada como na Figura 6.3. Tal árvore possui a partição equilibrada $\pi_4 = \{V_1, V_2, V_3, V_4\}$, onde $V_1 = \{1\}$, $V_2 = \{2\}$, $V_3 = \{3, 4, \dots, k+2\}$ e $V_4 = \{k+3, k+4, \dots, k+s+2\}$. De fato, os subgrafos induzidos $\langle V_i \rangle$ são grafos vazios para todo $i \in \{1, 2, 3, 4\}$. O vértice de V_1 possui 1 vizinho em V_2 , k vizinhos em V_3 e 0 vizinhos em V_4 ; o vértice de V_2 possui 1 vizinho em V_1 , 0 vizinho em V_3 e s vizinhos em V_4 ; os vértices de V_3 possuem 1 vizinho em V_1 e 0 vizinho em V_3 e V_4 , e os vértices de V_4 possuem 1 vizinho em V_2 e 0 vizinho em V_1 e V_3 . O Teorema 6.3 garante que a dupla estrela $T(k, s)$ possui no máximo quatro autovalores principais. Lembramos que no Capítulo 5 mostramos que eram exatamente quatro os autovalores principais de $T(k, s)$ e os exibimos.

Outro resultado obtido no final do capítulo anterior, o Corolário 5.22, que fornece a quantidade de autovalores principais dos grafos $H_{k,s} = H[K_1, K_k, K_s, K_1]$, onde $H = \mathcal{P}_4$, que são os complementares das duplas estrelas $T(k, s)$. Utilizando as partições equilibradas e suas respectivas matrizes quocientes podemos determinar os autovalores principais de tais grafos.

Dada uma dupla estrela balanceada $T(s, s)$, considere o grafo $H_{s,s}$, como exemplo temos $H(5, 5)$ na Figura 5.5. A partição equilibrada $\pi_2 = \{V_1, V_2\}$, onde $V_1 = \{1, 2\}$

e $V_2 = \{3, 4, \dots, 2s + 2\}$, dada acima para a dupla estrela balanceada também é uma partição equilibrada para $H_{s,s}$, dado na Figura 6.4.

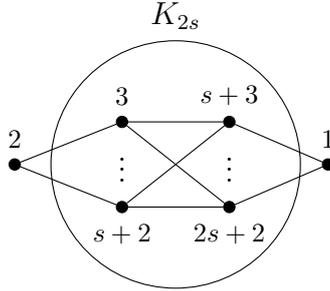


Figura 6.4: $H_{s,s}$

Com efeito, o subgrafo induzido $\langle V_1 \rangle$ é um grafo vazio e $\langle V_2 \rangle$ é um grafo regular de grau $2s - 1$. Os vértices de V_1 possuem s vizinhos em V_2 , enquanto que os vértices de V_2 possuem um único vizinho em V_1 . Assim, a matriz quociente de π_2 é

$$\mathcal{M}_{\pi_2} = \begin{pmatrix} 0 & s \\ 1 & 2s - 1 \end{pmatrix}.$$

Do Corolário 5.22, $H_{s,s}$ possui exatamente dois autovalores principais. Do Teorema 6.3, $\text{MainSpec}(H_{s,s}) = \sigma(\mathcal{M}_{\pi_2})$. Portanto, $-\frac{\sqrt{4s^2+1}-2s+1}{2}$ e $\frac{\sqrt{4s^2+1}+2s-1}{2}$ são os autovalores principais de $H_{s,s}$.

Agora, considere o grafo $H_{k,s}$ para $k \neq s$ (ver Figura 6.3). Temos que a partição equilibrada $\pi_4 = \{V_1, V_2, V_3, V_4\}$, onde $V_1 = \{1\}$, $V_2 = \{2\}$, $V_3 = \{3, 4, \dots, k + 2\}$ e $V_4 = \{k + 3, k + 4, \dots, k + s + 2\}$ dada anteriormente para a dupla estrela não balanceada também é uma partição equilibrada para $H_{k,s}$. De fato, os subgrafos induzidos $\langle V_1 \rangle$ e $\langle V_2 \rangle$ são grafos vazios, $\langle V_3 \rangle$ é um grafo regular de grau $k - 1$ e $\langle V_4 \rangle$ é um grafo regular de grau $s - 1$. O vértice de V_1 não possui vizinhos em V_2 e V_3 enquanto possui s vizinhos em V_4 ; o vértice de V_2 não possui vizinhos em V_1 e V_4 , mas possui k vizinhos em V_3 ; os vértices de V_3 possuem 1 vizinho em V_2 , s vizinhos em V_4 e 0 vizinhos em V_1 . Finalmente, os vértices de V_4 possuem apenas 1 vizinho em V_1 , não possuem vizinhos em V_2 e k vizinhos em V_3 . Logo, a matriz quociente de π_4 é

$$\mathcal{M}_{\pi_2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & s \\ 0 & 0 & k & 0 \\ 0 & 1 & k - 1 & s \\ 1 & 0 & k & s - 1 \end{pmatrix}.$$

Do Corolário 5.22, $H_{k,s}$ possui exatamente quatro autovalores principais. Logo, do Teorema 6.3, os autovalores principais de $H_{k,s}$ são as raízes do polinômio característico de \mathcal{M}_{π_2} , $p(x) = x^4 + (-s - k + 2)x^3 + (-2s - 2k + 1)x^2 + ((2k - 1)s - k)x + ks$.

Um *grafo foguete*, $F_{k,r,p}$, é formado por um grafo r -regular ($r > 0$) possuindo $k > 1$ vértices de modo que cada um dos seus vértices é ligado ao vértice central da estrela $K_{1,p}$. O grafo foguete $F_{5,4,3}$ aparece na Figura 6.5. Este é formado por K_5 em que cada um dos seus vértices é ligado ao vértice central da estrela $K_{1,3}$.

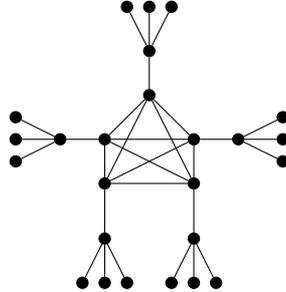


Figura 6.5: Grafo foguete $F_{5,4,3}$

Lema 6.4 A partição $\pi = \{V_1, V_2, V_3\}$ do grafo foguete $F_{k,r,p}$ em que V_1 é a célula constituída pelos $k \cdot p$ vértices pendentes de $F_{k,r,p}$, a célula V_2 é formada pelos k vértices centrais das estrelas e V_3 é composta pelos k vértices do grafo r -regular é uma partição equilibrada.

Demonstração. Seja $F_{k,r,p}$ um grafo foguete. Considere a partição $\{V_1, V_2, V_3\}$ de $F_{k,r,p}$ tal que a célula V_1 é constituída pelos vértices pendentes, V_2 é formada pelos vértices centrais das estrelas $K_{1,p}$ e a célula V_3 é composta pelos vértices do grafo r -regular.

Em primeiro lugar devemos verificar se o subgrafo induzido por cada uma das células da partição é um grafo regular. De fato, $\langle V_1 \rangle$, $\langle V_2 \rangle$ são grafos vazios e $\langle V_3 \rangle$ é o grafo r -regular com k vértices.

Agora, mostraremos que os vértices de uma dada célula possuem o mesmo número de vizinhos em cada uma das outras células. Com efeito, cada vértice de V_1 possui um vizinho em V_2 e não possui vizinho em V_3 . Cada vértice de V_2 possui p vizinhos em V_1 e um vizinho em V_3 e, por fim, cada um dos vértices de V_3 possui um vizinho em V_2 e não possui vizinho em V_1 .

□

Teorema 6.5 *Todo grafo foguete possui três autovalores principais.*

Demonstração. Seja $F_{k,r,p}$ um grafo foguete com a partição equilibrada $\pi = \{V_1, V_2, V_3\}$ descrita no Lema 6.4.

Sejam x, y e z vértices em V_1, V_2 e V_3 , respectivamente. Tem-se que $d(x) = 1$, $d(y) = p + 1$ e $d(z) = r + 1$.

Como o grafo quociente $F_{k,r,p}/\pi$ possui 3 vértices, segue-se do Teorema 6.3 que $F_{k,r,p}$ tem no máximo três autovalores principais. Visto que $F_{k,r,p}$ não é regular, do Teorema 3.2, $F_{k,r,p}$ possui dois ou três autovalores principais.

Suponhamos, por absurdo, que $F_{k,r,p}$ possui dois autovalores principais. Do Teorema 4.8, existem a e b racionais tais que $F_{k,r,p}$ é um grafo 2-cadeia (a, b) -linear. Ainda temos, da Proposição 4.9, que a e b são inteiros. Assim, $d_2(u) = ad(u) + b$ para todo vértice u de $F_{k,r,p}$ e temos,

$$d_2(x) = a + b, \quad d_2(y) = a(p + 1) + b \quad \text{e} \quad d_2(z) = a(r + 1) + b. \quad (6.1)$$

Do Lema 2.29, $d_2(u) = \sum_{j \in N_G(u)} d(j)$ para todo $u \in V(G)$. Portanto,

$$d_2(x) = p + 1, \quad d_2(y) = p + (r + 1) \quad \text{e} \quad d_2(z) = (p + 1) + r(r + 1). \quad (6.2)$$

De (6.1) e (6.2), segue-se que

$$a + b = p + 1. \quad (6.3)$$

Logo,

$$a(p + 1) + b = p + r + 1 \quad \text{e} \quad a(r + 1) + b = (p + 1) + r(r + 1). \quad (6.4)$$

De (6.3), $a = p + 1 - b$. Substituindo em (6.4), chegamos a $b = b(p + 1) + p + r + 1 - (p + 1)^2$. Consequentemente, como $p \neq 0$ tem-se

$$b = \frac{p^2 - r + p}{p}. \quad (6.5)$$

Substituindo (6.5) em (6.3) obtemos

$$a = \frac{p(p + 1) - (p + 1)^2 + p + r + 1}{p}.$$

Sendo $(p + 1)^2 = p(p + 1) + p + 1$, segue-se

$$a = \frac{r}{p}. \quad (6.6)$$

Aplicando (6.5) e (6.6) a (6.4) chegamos a $r(r + 1) + p^2 - r + p = p(p + 1) + pr(r + 1)$. Assim, $r(r + 1) + p(p + 1) - r = p(p + 1) + pr(r + 1)$. Portanto, $r^2 = pr(r + 1)$. Como $r \neq 0$, temos que $p = \frac{r}{r + 1} < 1$. Isto contraria a definição do grafo $F_{k,r,p}$. Logo, $F_{k,r,p}$ possui três autovalores principais. □

Note que se G é um grafo com s autovalores principais então qualquer partição equilibrada de G possui pelo menos s células (Teorema 6.2). Foi conjecturado em 1979 por HARARY e SCHWENK [58] que sempre existe uma partição equilibrada

cuja quantidade de células é exatamente o número de autovalores principais do grafo, os grafos foguete são exemplos de grafos com três autovalores principais que possuem uma partição equilibrada com três células. Mas, isso não é sempre verdade. Além do contraexemplo fornecido em 1982 por POWERS e SULAIMAN [59], citamos as árvores harmônicas \mathcal{T}_ℓ que são grafos com exatamente dois autovalores principais (Proposição 4.16). Estas árvores não possuem partições equilibradas com duas células, visto que os vértices de uma mesma célula possuem o mesmo grau, teríamos que os vértices das árvores \mathcal{T}_ℓ possuiriam somente dois graus distintos. Porém, tais árvores possuem partições equilibradas com três células. Por exemplo, a partição $\{V_1, V_2, V_3\}$ tal que V_1 é formado pelas $(\ell^2 - \ell + 1)(\ell - 1)$ folhas, V_2 é constituído pelos vértices centrais das $\ell^2 - \ell + 1$ estrelas $K_{1, \ell-1}$ e V_3 é um conjunto unitário cujo vértice é vizinho aos vértices centrais das estrelas é uma partição equilibrada de \mathcal{T}_ℓ . De fato, os subgrafos induzidos $\langle V_1 \rangle$, $\langle V_2 \rangle$ e $\langle V_3 \rangle$ são grafos vazios. Os vértices da célula V_1 possuem um único vizinho que está na célula V_2 e os vértices de V_2 possuem $\ell - 1$ vizinhos em V_1 e um só vizinho em V_3 . Por fim, o vértice da célula V_3 possui exatamente $\ell^2 - \ell + 1$ vizinhos que estão em V_2 .

Revedo a notação $d_2(i) = \sum_{j \in N_G(i)} d(j)$ com $i \in V(G)$ (Lema 2.29), apresentamos no teorema a seguir uma condição necessária e suficiente para que os grafos que possuem uma partição equilibrada com três células tenham exatamente dois autovalores principais.

Teorema 6.6 *Seja G um grafo não regular com partição equilibrada $\pi_3 = \{V_1, V_2, V_3\}$ tal que os vértices de duas das células, digamos V_1 e V_2 , possuam graus distintos. Sejam x, y e z vértices quaisquer em V_1, V_2 e V_3 , respectivamente. Tem-se que G possui exatamente dois autovalores principais se e somente se*

$$d_2(z) = \frac{d_2(x)(d(y) - d(z)) + d_2(y)(d(z) - d(x))}{d(y) - d(x)}.$$

Demonstração. Seja G um grafo não regular com uma partição equilibrada $\pi_3 = \{V_1, V_2, V_3\}$.

Sejam x, y e z vértices em V_1, V_2 e V_3 , respectivamente.

Do Teorema 4.8, G possui exatamente dois autovalores principais se e somente se existem inteiros a e b únicos tais que $d_2(u) = ad(u) + b$ para todo $u \in V(G)$. Assim,

$$d_2(x) = ad(x) + b, \quad d_2(y) = ad(y) + b \quad \text{e} \quad d_2(z) = ad(z) + b. \quad (6.7)$$

Da primeira equação em (6.7), temos que

$$b = d_2(x) - ad(x). \quad (6.8)$$

Substituindo (6.8) na segunda equação de (6.7), chegamos a $d_2(y) = ad(y) + d_2(x) -$

$ad(x)$, o que implica em $d_2(y) + d_2(x) = a(d(y) - d(x))$. Como os vértices das células V_1 e V_2 possuem graus distintos segue que $d(y) \neq d(x)$. Deste modo,

$$a = \frac{d_2(y) - d_2(x)}{d(y) - d(x)}. \quad (6.9)$$

Substituindo (6.9) em (6.8), obtemos:

$$\begin{aligned} b &= d_2(x) - \left(\frac{d_2(y) - d_2(x)}{d(y) - d(x)} \right) d(x) \\ &= \frac{d_2(x)(d(y) - d(x)) - d(x)d_2(y) + d(x)d_2(x)}{d(y) - d(x)}. \end{aligned}$$

Logo,

$$b = \frac{d(y)d_2(x) - d(x)d_2(y)}{d(y) - d(x)}. \quad (6.10)$$

Substituindo (6.9) e (6.10) em (6.7), chegamos a

$$d_2(z) = \left(\frac{d_2(y) - d_2(x)}{d(y) - d(x)} \right) d(z) + \frac{d(y)d_2(x) - d(x)d_2(y)}{d(y) - d(x)} \quad \text{que equivale a}$$

$$d_2(z) = \frac{d_2(x)(d(y) - d(z)) + d_2(y)(d(z) - d(x))}{d(y) - d(x)}.$$

□

Observação: É bom esclarecer que o Teorema 6.5 pode ser obtido como uma aplicação do Teorema 6.6. Com efeito, seja $F_{k,r,p}$ um grafo foguete com a partição equilibrada $\pi = \{V_1, V_2, V_3\}$ como dada no Lema 6.4.

Sejam x, y e z vértices em V_1, V_2 e V_3 , respectivamente. Assim, $d(x) = 1$, $d(y) = p + 1$ e $d(z) = r + 1$. Do Lema 2.29, $d_2(x) = p + 1$, $d_2(y) = p + r + 1$ e $d_2(z) = p + 1 + r(r + 1)$.

Suponhamos que $F_{k,r,p}$ possua dois autovalores principais. Do Teorema 6.6,

$$p + 1 + r(r + 1) = \frac{(p + 1)(p - r) + (p + r + 1)r}{p}.$$

Então, $p(p + 1) + pr(r + 1) = (p + 1)p - (p + 1)r + (p + 1)r + r^2$. Assim, $pr(r + 1) = r^2$. Como $r \neq 0$ temos que $p = \frac{r}{r + 1} < 1$, o que é uma contradição. Logo, $F_{k,r,p}$ possui três autovalores principais.

Capítulo 7

Espectro principal de certas famílias de árvores

Neste capítulo, determinamos os autovalores principais dos caminhos e apresentamos alguns resultados envolvendo as árvores de Bethe generalizadas. Por fim, determinamos a quantidade de autovalores principais de uma subfamília das árvores de Bethe generalizadas, as árvores completas quase-regulares, e apresentamos o seu polinômio característico principal.

7.1 Caminho

Nesta seção, vamos determinar os autovalores principais do caminho \mathcal{P}_n e constatamos que a ordem do seu espectro principal depende da paridade de n . Na figura a seguir, apresentamos o caminho \mathcal{P}_6 que contém dois vértices centrais: 3 e 4, e o caminho \mathcal{P}_7 que tem um único vértice central, 4.

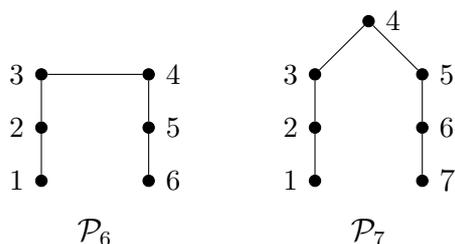


Figura 7.1: \mathcal{P}_6 e \mathcal{P}_7

No Teorema 7.1 caracterizamos os autovalores principais dos caminhos.

Teorema 7.1 *Seja \mathcal{P}_n o caminho com n vértices e seja $j \in \{1, 2, \dots, n\}$. O autovalor $\alpha_j = 2 \cos\left(\frac{j\pi}{n+1}\right)$ de \mathcal{P}_n é principal se e somente se j é ímpar.*

Demonstração. Pela Proposição 2.21, o vetor $\mathbf{w}^{(j)} = (w_i)$, cujas coordenadas são dadas por $w_i = \text{sen}(i\delta_j)$, é um autovetor do autovalor $\alpha_j = 2 \cos(\delta_j)$ de \mathcal{P}_n para todo $j \in \{1, 2, \dots, n\}$, onde $\delta_j = \frac{j\pi}{n+1}$. Assim, $\sum_{i=1}^n w_i = \sum_{i=1}^n \text{sen}(i\delta_j)$. Como $\text{sen}(0) = 0$ segue que

$$\sum_{i=1}^n w_i = \sum_{i=0}^n \text{sen}(i\delta_j).$$

Pelo Lema 5.12, fazendo $a = 0$ e $r = \delta_j = \frac{j\pi}{n+1}$ temos que

$$\sum_{i=1}^n w_i = \frac{\cos\left(\frac{-j\pi}{2(n+1)}\right) - \cos\left(\frac{nj\pi}{n+1} + \frac{j\pi}{2(n+1)}\right)}{2\text{sen}\left(\frac{j\pi}{2(n+1)}\right)}.$$

Como $1 \leq j \leq n$ temos que $\text{sen}\left(\frac{j\pi}{2(n+1)}\right) \neq 0$ e como a função cosseno é uma função par segue que

$$\sum_{i=1}^n w_i = 0 \iff \cos\left(\frac{j\pi}{2(n+1)}\right) = \cos\left(\frac{nj\pi}{n+1} + \frac{j\pi}{2(n+1)}\right). \quad (7.1)$$

Do Lema 5.13 e da equação (7.1), $\sum_{i=1}^n w_i = 0$ se e somente se para algum $k \in \mathbb{Z}$, ou $\frac{nj\pi}{n+1} + \frac{j\pi}{2(n+1)} = \frac{j\pi}{2(n+1)} + 2k\pi$, ou $\frac{nj\pi}{n+1} + \frac{j\pi}{2(n+1)} = \frac{-j\pi}{2(n+1)} + 2k\pi$. Vamos analisar os casos possíveis.

1º caso: Existe $k \in \mathbb{Z}$ tal que $\frac{nj\pi}{n+1} + \frac{j\pi}{2(n+1)} = \frac{j\pi}{2(n+1)} + 2k\pi$.

Neste caso,

$$\frac{nj\pi}{n+1} + \frac{j\pi}{2(n+1)} = \frac{j\pi}{2(n+1)} + 2k\pi \iff \frac{jn}{n+1} = 2k.$$

Dado que $\frac{n}{n+1} < 1$, tem-se $\frac{jn}{n+1} < j \leq n$, ou seja,

$$2k < j \leq n. \quad (7.2)$$

Por outro lado,

$$\frac{jn}{n+1} = 2k \iff n(j-2k) = 2k \iff n = \frac{2k}{j-2k}. \quad (7.3)$$

Da inequação (7.2), $\frac{2k}{j-2k} < \frac{j}{j-2k} \leq \frac{n}{j-2k}$. Assim, da equação (7.3),

$n < \frac{n}{j-2k}$, isto é, $j < 1 + 2k$. De (7.2), temos:

$$2k < j < 2k + 1,$$

o que contradiz o fato de j ser um número inteiro. Logo, tal caso não é possível.

2º caso: Existe $k \in \mathbb{Z}$ tal que $\frac{nj\pi}{n+1} + \frac{j\pi}{2(n+1)} = \frac{-j\pi}{2(n+1)} + 2k\pi$.

Temos agora que

$$\begin{aligned} \frac{jn\pi}{n+1} + \frac{j\pi}{2(n+1)} = \frac{-j\pi}{2(n+1)} + 2k\pi &\iff \frac{2jn+j}{2(n+1)} = \frac{-j+2k(2(n+1))}{2(n+1)} \\ &\iff 2j(n+1) = 4k(n+1) \\ &\iff j = 2k. \end{aligned}$$

Deste modo, $\sum_{i=1}^n w_i \neq 0$ se e somente se $j \in \{1, 2, \dots, n\}$ é um número ímpar. \square

Note que a Proposição 5.14 decorre do Teorema 7.1. De fato, do Teorema 7.1 temos que o menor autovalor de \mathcal{P}_n é não principal se e somente se n é par. No corolário a seguir, determinamos a quantidade de autovalores principais que um caminho possui.

Corolário 7.2 *Seja \mathcal{P}_n o caminho com n vértices. Se n é par então \mathcal{P}_n possui exatamente $n/2$ autovalores principais e, se n é ímpar, então \mathcal{P}_n possui exatamente $(n+1)/2$ autovalores principais.*

Demonstração. Pelo Teorema 7.1, os autovalores principais de \mathcal{P}_n são $\alpha_j = 2 \cos\left(\frac{j\pi}{n+1}\right)$ para j ímpar. Deste modo, \mathcal{P}_n possui $n/2$ autovalores principais, quando n é par. No caso em que n é ímpar, \mathcal{P}_n possui $(n+1)/2$ autovalores principais. \square

Seja o grafo \mathbb{I}_n com n vértices rotulado de 1 a n . Para cada $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, $\{i, j+2\}$ é uma aresta quando $j \in \{i, i+1, \dots, n-2\}$. O grafo \mathbb{I}_n tem exatamente estas arestas. Este grafo é o complementar do caminho \mathcal{P}_n , ou seja, $\mathbb{I}_n = \overline{\mathcal{P}_n}$. Note que tal grafo possui $n-2$ vértices de grau $n-3$ e dois vértices de grau $n-2$. A Figura 7.2 exhibe os grafos \mathbb{I}_6 e \mathbb{I}_7 .

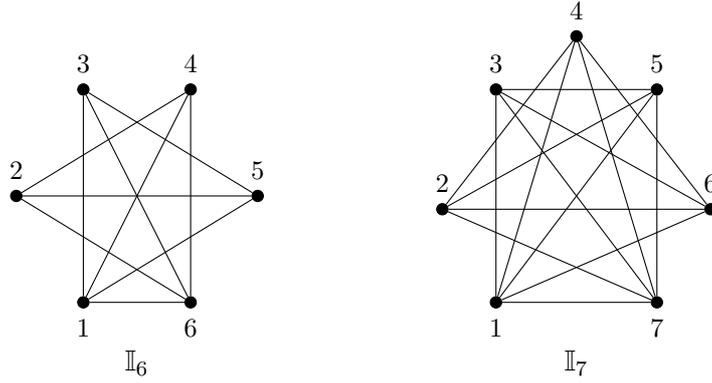


Figura 7.2: \mathbb{I}_6 e \mathbb{I}_7

Pela Proposição 3.4, os caminhos e seus grafos complementares possuem o mesmo número de autovalores principais. Imediatamente, temos o seguinte resultado.

Corolário 7.3 *Os grafos \mathbb{I}_n possuem exatamente $n/2$ autovalores principais, se n é par, e têm exatamente $(n + 1)/2$ autovalores principais, se n é ímpar.*

Na próxima seção, trabalhamos com as árvores de Bethe generalizadas e apresentamos nossas contribuições para esta família com relação aos autovalores principais.

7.2 Árvores de Bethe Generalizadas

Uma *árvore de Bethe* $\mathcal{B}_{d,k}$ é uma árvore enraizada com k níveis cuja raiz está no nível 1 e tem grau d , os vértices dos níveis de 2 a $k - 1$ possuem os graus iguais a $d + 1$ e os vértices do nível k tem grau 1. Uma *árvore de Bethe generalizada* com k níveis é uma árvore enraizada na qual os vértices no mesmo nível têm o mesmo grau (mas podem ter graus distintos em níveis diferentes). Adotando aqui as mesmas notações de [60], para $m \in \{1, 2, \dots, k\}$ representamos por d_{k-m+1} o grau dos vértices do nível m e o número de vértices neste nível por n_{k-m+1} . Assim, $n_{k-m} = n_{k-m+1}(d_{k-m+1} - 1)$ para todo $m \in \{2, 3, \dots, k - 1\}$. Além disso, o grau de cada vértice do nível k é dado por $d_1 = 1$ enquanto que no nível 1, temos somente a raiz que possui grau d_k . Tal árvore será denotada por $\mathcal{B}_{(d_k, d_{k-1}, \dots, d_2)}$, quando não houver dúvidas sobre a notação será simplesmente denotada por \mathcal{B}_k . Para maiores detalhes sugerimos [60], [61] e [62], assim como [63], [64], [65], [66] e [67].

Note que toda árvore de Bethe é uma árvore de Bethe generalizada quando $d_2 = d_3 = \dots = d_{k-1} = d + 1$, onde $d = d_k$ é o grau da raiz da árvore de Bethe. Nesta seção, iniciamos com a apresentação dos resultados conhecidos sobre tais árvores, para posteriormente, apresentar os resultados que obtivemos sobre as mesmas. Veja, na Figura 7.3, a árvore de Bethe $\mathcal{B}_{2,4}$ e a árvore de Bethe generalizada $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$.

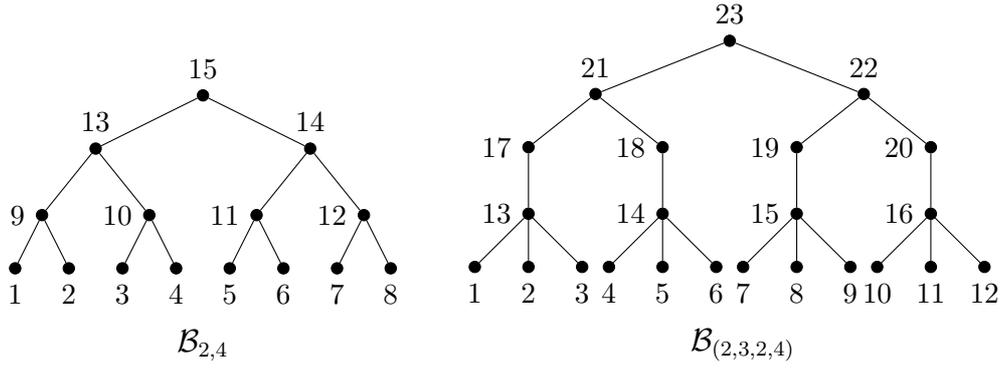


Figura 7.3: Árvore de Bethe $\mathcal{B}_{2,4}$ e a árvore de Bethe generalizada $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$

A árvore $\mathcal{B}_{2,4}$ possui quatro níveis, com números de vértices por níveis $n_1 = 8$, $n_2 = 4$, $n_3 = 2$ e $n_4 = 1$, e cujos graus são $d_1 = 1$, $d_2 = 3$, $d_3 = 3$ e $d_4 = 2$. A árvore de Bethe generalizada $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$ possui cinco níveis com número de vértices por níveis iguais a $n_1 = 12$, $n_2 = 4$, $n_3 = 4$, $n_4 = 2$ e $n_5 = 1$ e cujos graus são $d_1 = 1$, $d_2 = 4$, $d_3 = 2$, $d_4 = 3$ e $d_5 = 2$.

Na proposição a seguir é dada uma recorrência que fornece uma expressão para o polinômio característico e o espectro de uma árvore de Bethe generalizada.

Proposição 7.4 (ROJO e SOTO [60]) *Seja \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com k níveis e seja $\Omega = \{m \mid 1 \leq m \leq k-1 \text{ e } n_m > n_{m+1}\}$. Para cada $x \in \mathbb{R}$, define-se a recorrência:*

$$\begin{cases} q_0(x) = 1; \\ q_1(x) = x; \\ q_m(x) = xq_{m-1}(x) - \frac{n_{m-1}}{n_m}q_{m-2}(x), \quad 2 \leq m \leq k. \end{cases} \quad (7.4)$$

(i) Se $q_m(x) \neq 0$ para todo $m \in \{1, 2, \dots, k-1\}$ então

$$\det(xI - A(\mathcal{B}_k)) = q_k(x) \prod_{m \in \Omega} (q_m(x))^{n_m - n_{m+1}}.$$

(ii) O espectro de \mathcal{B}_k é dado por

$$\text{Spec}(\mathcal{B}_k) = \left[\bigcup_{m \in \Omega} \{x \in \mathbb{R} \mid (q_m(x))^{n_m - n_{m+1}} = 0\} \right] \cup \{x \in \mathbb{R} \mid q_k(x) = 0\}.$$

Dada uma árvore de Bethe generalizada \mathcal{B}_k , a matriz tridiagonal $R_k = R(\mathcal{B}_k)$ de ordem k tem (i, j) -ésima entrada denotada por r_{ij} , assim definida:

$$r_{ij} = \begin{cases} \sqrt{\frac{n_i}{n_{i+1}}}, & \text{se } j = i + 1 \text{ para } 1 \leq i \leq k - 1; \\ \sqrt{\frac{n_{i-1}}{n_i}}, & \text{se } j = i - 1 \text{ para } 2 \leq i \leq k; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (7.5)$$

Tal matriz é denominada a *matriz tridiagonal de \mathcal{B}_k* . Por exemplo, $\mathcal{B}_{2,4}$ e $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$, árvores dadas na Figura 7.3, possuem as seguintes matrizes tridiagonais

$$R_4 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \text{ e } R_5 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Lema 7.5 (ROJO e SOTO [60]) *Sejam \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com k níveis e R_k a sua matriz tridiagonal. Para todo $m \in \{1, 2, \dots, k\}$ tem-se $q_m(x) = \det(xI_m - R_k[\alpha_m])$, onde $R_k[\alpha_m]$ é a submatriz principal líder de R_k .*

Teorema 7.6 (ROJO e SOTO [60]) *Sejam \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com k níveis e R_k a matriz tridiagonal de \mathcal{B}_k . Para o conjunto $\Omega = \{m \mid 1 \leq m \leq k - 1 \text{ e } n_m > n_{m+1}\}$, tem-se:*

$$(i) \text{ Spec}(\mathcal{B}_k) = \left[\bigcup_{m \in \Omega} \sigma(R_k[\alpha_m]) \right] \cup \sigma(R_k) \text{ e}$$

(ii) *a multiplicidade de qualquer autovalor de $R_k[\alpha_m]$, como autovalor de \mathcal{B}_k , é pelo menos $n_m - n_{m+1}$ para todo $m \in \Omega$ e a multiplicidade é 1 para $m = k$.*

Como exemplo de aplicação do Teorema 7.6, prosseguimos considerando as árvores $\mathcal{B}_{2,4}$ e $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$ dadas na Figura 7.3 e as suas matrizes tridiagonais R_4 e R_5 dadas anteriormente. Iniciamos, analisando a árvore de Bethe $\mathcal{B}_{2,4}$. Neste caso, $\Omega = \{1, 2, 3\}$. Para o espectro de $\mathcal{B}_{2,4}$ serão considerando os espectros da matriz tridiagonal R_4 e das suas submatrizes principais líderes: $R_4[\alpha_1]$, $R_4[\alpha_2]$ e $R_4[\alpha_3]$. Apresentamos na Tabela 7.1 os autovalores destas matrizes e as suas respectivas multiplicidades no espectro de $\mathcal{B}_{2,4}$:

	Autovalores	Multiplicidade em $\mathcal{B}_{2,4}$
$R_4[\alpha_1]$	0	$n_1 - n_2 = 8 - 4 = 4$
$R_4[\alpha_2]$	$-\sqrt{2}, \sqrt{2}$	$n_2 - n_3 = 4 - 2 = 2$
$R_4[\alpha_3]$	-2, 0, 2	$n_3 - n_4 = 2 - 1 = 1$
R_4	$-\sqrt{\sqrt{5} + 3}, -\sqrt{3 - \sqrt{5}}, \sqrt{3 - \sqrt{5}}, \sqrt{\sqrt{5} + 3}$	1

Tabela 7.1: Autovalores de $\mathcal{B}_{2,4}$

Como todos os autovalores não nulos de $R_4[\alpha_1], R_4[\alpha_2], R_4[\alpha_3]$ e R_4 são distintos, cada autovalor não nulo de $\mathcal{B}_{2,4}$ possui a multiplicidade indicada na terceira coluna. O autovalor 0 tem multiplicidade igual a $4 + 1 = 5$.

No caso da árvore de Bethe generalizada $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$, $\Omega = \{1, 3, 4\}$. Assim, o espectro de $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$ depende dos espectros da matriz tridiagonal R_5 e das suas submatrizes principais líderes: $R_5[\alpha_1], R_5[\alpha_3]$ e $R_5[\alpha_4]$. Na Tabela 7.2, apresentamos os autovalores destas matrizes e as suas respectivas multiplicidades no espectro de $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$:

	Autovalores	Multiplicidade em $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$
$R_5[\alpha_1]$	0	$n_1 - n_2 = 12 - 4 = 8$
$R_5[\alpha_2]$	$-\sqrt{3}, \sqrt{3}$	—————
$R_5[\alpha_3]$	-2, 0, 2	$n_3 - n_4 = 4 - 2 = 2$
$R_5[\alpha_4]$	$-\sqrt{\sqrt{3} + 3}, -\sqrt{3 - \sqrt{3}}, \sqrt{3 - \sqrt{3}}, \sqrt{\sqrt{3} + 3}$	$n_4 - n_5 = 2 - 1 = 1$
R_5	$-\sqrt{\sqrt{2} + 4}, -\sqrt{4 - \sqrt{2}}, 0, \sqrt{4 - \sqrt{2}}, \sqrt{\sqrt{2} + 4}$	1

Tabela 7.2: Autovalores de $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$

Novamente, os autovalores não nulos de $R_5[\alpha_1], R_5[\alpha_3], R_5[\alpha_4]$ e R_5 são distintos. Portanto, cada autovalor não nulo de $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$ possui a multiplicidade indicada na última coluna. O autovalor 0 tem multiplicidade igual a $8 + 2 + 1 = 11$.

Seja \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com n vértices. Rotulamos os vértices de \mathcal{B}_k , a partir do nível k (de baixo para cima) e da esquerda para a direita como descrito na Tabela 7.3:

Nível	Número de vértices	Grau dos vértices	Rotulação dos vértices
1	$n_k = 1$	d_k	n
2	$n_{k-1} = d_k$	d_{k-1}	$n - d_k, n - d_k + 1, \dots, n - 1$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
$k - 1$	n_2	d_2	$n_1 + 1, n_1 + 2, \dots, n_1 + n_2$
k	n_1	$d_1 = 1$	$1, 2, \dots, n_1$

Tabela 7.3: Rotulação para \mathcal{B}_k

Definimos a partição $\{V_1, V_2, \dots, V_k\}$ de \mathcal{B}_k cujos vértices do nível i constituem a célula V_{k-i+1} . Com a rotulação da árvore \mathcal{B}_k , dada na Tabela 7.3, as células da partição ficam da seguinte forma:

$$\begin{aligned} V_1 &= \{1, \dots, n_1\}; \\ V_2 &= \{n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2\}; \\ &\vdots \\ V_{k-1} &= \{n - d_k, n - d_k + 1, \dots, n - 1\} \text{ e} \\ V_k &= \{n\}, \end{aligned} \tag{7.6}$$

onde $n = 1 + \sum_{i=1}^{k-1} n_i$ e $\#V_i = n_i$. Denotamos tal partição por $\pi(\mathcal{B}_k)$.

O lema que segue mostra que $\pi(\mathcal{B}_k)$ é uma partição equilibrada.

Lema 7.7 *Para $k \geq 2$, seja \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com k níveis. A partição $\pi(\mathcal{B}_k)$ cuja $(k - i + 1)$ -ésima célula é constituída pelos vértices de \mathcal{B}_k no nível i é uma partição equilibrada de \mathcal{B}_k .*

Demonstração. Para $k \geq 2$, seja \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com k níveis e $\pi(\mathcal{B}_k)$ a partição de \mathcal{B}_k definida de modo que os vértices do nível i constituem a célula V_{k-i+1} , veja em (7.6).

Para todo $i \in \{1, 2, \dots, k\}$, os subgrafos induzidos $\langle V_i \rangle$ são grafos vazios e, portanto, regulares. Agora, vamos verificar se os vértices de uma dada célula possuem o mesmo número de vizinhos nas outras células.

Os vértices da célula V_1 são folhas e cada uma delas só possui um vizinho em V_2 . Para $i \in \{2, 3, \dots, k - 1\}$, cada vértice de V_i possui $d_i - 1$ vizinhos em V_{i-1} e um só vizinho em V_{i+1} . Por fim, a célula V_k é constituída somente pela raiz de \mathcal{B}_k que possui d_k vizinhos em V_{k-1} . Logo, a partição $\pi(\mathcal{B}_k)$ é uma partição equilibrada de \mathcal{B}_k . □

Para a partição equilibrada $\pi(\mathcal{B}_k)$ de uma árvore de Bethe generalizada \mathcal{B}_k , a matriz quociente $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)} = (m_{ij})$ possui as entradas definidas por

$$m_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } j = i + 1; \\ \frac{n_{i-1}}{n_i}, & \text{se } j = i - 1; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{7.7}$$

Por exemplo, as árvores $\mathcal{B}_{2,4}$ e $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$ (Figura 7.3) estão rotuladas como na Tabela 7.3. A partição equilibrada de $\mathcal{B}_{2,4}$ definida por níveis é $\pi(\mathcal{B}_{2,4}) = \{V_1, V_2, V_3, V_4\}$, onde $V_1 = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$, $V_2 = \{9, 10, 11, 12\}$, $V_3 = \{13, 14\}$ e $V_4 = \{15\}$ e a sua matriz quociente é

$$\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_{2,4})} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix},$$

enquanto que a partição equilibrada de $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$ definida por níveis é $\pi(\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}) = \{V_1, V_2, V_3, V_4, V_5\}$, onde $V_1 = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12\}$, $V_2 = \{13, 14, 15, 16\}$, $V_3 = \{17, 18, 19, 20\}$, $V_4 = \{21, 22\}$ e $V_5 = \{23\}$, cuja matriz quociente é

$$\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_{(2,3,2,4)})} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Nos exemplos acima notamos que as matrizes quocientes $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_{2,4})}$ e $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_{(2,3,2,4)})}$ possuem o mesmo espectro das respectivas matrizes tridiagonais R_4 e R_5 das árvores $\mathcal{B}_{2,4}$ e $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$. O que nos leva a próxima proposição, a qual nos permite concluir que o espectro da matriz tridiagonal de uma árvore de Bethe generalizada \mathcal{B}_k é igual ao espectro do seu grafo quociente $\mathcal{B}_k/\pi(\mathcal{B}_k)$.

Proposição 7.8 *Seja \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada cuja partição equilibrada definida por níveis é $\pi(\mathcal{B}_k)$. A matriz tridiagonal de \mathcal{B}_k é semelhante à matriz de adjacência $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)}$ do grafo quociente $\mathcal{B}_k/\pi(\mathcal{B}_k)$.*

Demonstração. Sejam \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com a partição equilibrada definida por níveis $\pi(\mathcal{B}_k)$, dada em (7.6).

Seja $S_k = (s_{ij})$, a matriz diagonal de ordem k com entradas

$$s_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j = 1; \\ \sqrt{\frac{n_1}{n_i}}, & \text{se } i = j \neq 1; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (7.8)$$

Sejam $R_k = (r_{ij})$ e $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)} = (m_{ij})$ matrizes quadradas de ordem k definidas em (7.5) e (7.7), respectivamente. Provaremos que as matrizes quadradas $S_k R_k = (p_{ij})$ e $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)} S_k = (q_{ij})$ são iguais, para concluir que R_k e $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)}$ são semelhantes.

Como S_k é uma matriz diagonal, para $i \in \{1, 2, \dots, k\}$, s_{ii} são as únicas entradas não nulas. Assim, para quaisquer $i, j \in \{1, 2, \dots, k\}$,

$$p_{ij} = \sum_{l=1}^k s_{il} r_{lj} = s_{ii} r_{ij} \quad \text{e} \quad q_{ij} = \sum_{l=1}^k m_{il} s_{lj} = m_{ij} s_{jj}. \quad (7.9)$$

Agora, para cada $i \in \{1, 2, \dots, k\}$ vamos verificar se as entradas não nulas das matrizes $S_k R_k$ e $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)} S_k$ são iguais.

Se $i = 1$, as matrizes $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)}$ e R_k possuem as entradas $m_{12} = 1$ e $r_{12} = \sqrt{\frac{n_1}{n_2}}$ como as únicas entradas não nulas e, de (7.9),

$$s_{11}r_{12} = \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} \quad \text{e} \quad m_{12}s_{22} = \sqrt{\frac{n_1}{n_2}}.$$

Logo, $p_{12} = q_{12}$.

Para $2 \leq i \leq k-1$, as i -ésimas linhas de R_k e $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)}$ possuem somente duas entradas não nulas nas colunas $j = i-1$ e $j = i+1$. No caso $j = i-1$, por (7.9), chega-se a

$$\begin{aligned} p_{i(i-1)} &= s_{ii}r_{i(i-1)} \\ &= \sqrt{\frac{n_1}{n_i}} \sqrt{\frac{n_{i-1}}{n_i}} \\ &= \left(\sqrt{\frac{n_1}{n_{i-1}}} \sqrt{\frac{n_{i-1}}{n_i}} \right) \sqrt{\frac{n_{i-1}}{n_i}} \\ &= \frac{n_{i-1}}{n_i} \sqrt{\frac{n_1}{n_{i-1}}} \end{aligned}$$

$$\text{e também a } q_{i(i-1)} = m_{i(i-1)}s_{(i-1)(i-1)} = \frac{n_{i-1}}{n_i} \sqrt{\frac{n_1}{n_{i-1}}}.$$

Deste modo, $p_{i(i-1)} = q_{i(i-1)}$. No caso $j = i+1$, temos

$$\begin{aligned} p_{i(i+1)} &= s_{ii}r_{i(i+1)} \\ &= \sqrt{\frac{n_1}{n_i}} \sqrt{\frac{n_i}{n_{i+1}}} \\ &= \sqrt{\frac{n_1}{n_{i+1}}} \end{aligned}$$

$$\text{e } q_{i(i+1)} = m_{i(i+1)}s_{(i+1)(i+1)} = 1 \cdot \left(\sqrt{\frac{n_1}{n_{i+1}}} \right).$$

Consequentemente, $p_{i(i+1)} = q_{i(i+1)}$.

Por fim, para o caso $i = k$, as únicas entradas não nulas de R_k e $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)}$ são $r_{k(k-1)} = \sqrt{\frac{n_{k-1}}{n_k}}$ e $m_{k(k-1)} = \frac{n_{k-1}}{n_k}$. Consequentemente,

$$\begin{aligned} p_{k(k-1)} &= s_{kk}r_{k(k-1)} \\ &= \left(\sqrt{\frac{n_1}{n_{k-1}}} \sqrt{\frac{n_{k-1}}{n_k}} \right) \sqrt{\frac{n_{k-1}}{n_k}} \\ &= \frac{n_{k-1}}{n_k} \sqrt{\frac{n_1}{n_{k-1}}} \end{aligned}$$

$$e \quad q_{k(k-1)} = m_{k(k-1)} s_{(k-1)(k-1)} = \frac{n_{k-1}}{n_k} \sqrt{\frac{n_1}{n_{k-1}}}.$$

Portanto, $p_{k(k-1)} = q_{k(k-1)}$. Logo, as matrizes R_k e $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)}$ são semelhantes. \square

A matriz $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)}$ é a matriz de adjacência do grafo quociente $\mathcal{B}_k/\pi(\mathcal{B}_k)$ que, pelo Teorema 6.3, contém os autovalores principais de \mathcal{B}_k . Visto que $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)}$ é uma matriz quadrada de ordem k temos que a quantidade de níveis de \mathcal{B}_k nos dá uma cota superior para a quantidade de seus autovalores principais. Note que esta cota não é justa. De fato, a árvore harmônica \mathcal{T}_2 (Figura 3.5) é uma árvore de Bethe generalizada com três níveis e apenas dois autovalores principais (Teorema 4.12), enquanto que a árvore de Bethe $\mathcal{B}_{2,4}$ na Figura 7.3 possui quatro níveis e quatro autovalores principais: $-\sqrt{\sqrt{5}+3}$, $-\sqrt{3-\sqrt{5}}$, $\sqrt{3-\sqrt{5}}$ e $\sqrt{\sqrt{5}+3}$. Baseados nestas observações apresentamos a seguinte conjectura.

Conjectura 7.9 *Para todo k par, \mathcal{B}_k , uma árvore de Bethe generalizada com k níveis, possui exatamente k autovalores principais.*

Prosseguimos apresentando as nossas contribuições sobre os autovalores principais para as árvores de Bethe generalizadas. O Teorema 7.10 afirma que a matriz tridiagonal de \mathcal{B}_k , uma árvore de Bethe generalizada, contém os autovalores principais.

Teorema 7.10 *Os autovalores principais de uma árvore de Bethe generalizada \mathcal{B}_k são autovalores de sua matriz tridiagonal R_k consequentemente, \mathcal{B}_k possui no máximo k autovalores principais.*

Demonstração. Seja \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com a partição equilibrada definida por níveis é $\pi(\mathcal{B}_k)$, dada em (7.6). Da Proposição 7.8, a matriz tridiagonal R_k é semelhante à matriz de adjacência do grafo quociente $\mathcal{B}_k/\pi(\mathcal{B}_k)$. Do Teorema 2.5, essas matrizes têm o mesmo espectro. Logo, do Teorema 6.3, R_k contém os autovalores principais de \mathcal{B}_k . \square

O teorema a seguir apresenta uma relação sobre as coordenadas dos autovetores de \mathcal{B}_k considerando a partição equilibrada definida por níveis.

Lema 7.11 *Sejam \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com n vértices e a sua partição equilibrada definida por níveis $\pi(\mathcal{B}_k) = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$. Se $\mathbf{v} = (v_i)$ é um autovetor associado a um autovalor λ de \mathcal{B}_k então $\lambda \sum_{i=1}^n v_i = \sum_{j=1}^k d_j \sum_{i \in V_j} v_i$, onde d_j é o grau dos vértices em V_j .*

Demonstração. Seja \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com n vértices cuja partição equilibrada por níveis é $\pi(\mathcal{B}_k) = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$.

Seja $\lambda \mathbf{v} = A\mathbf{v}$, onde $\mathbf{v} = (v_i)$ e $A = (a_{ij})$ é a matriz de adjacência de \mathcal{B}_k . Temos $\lambda v_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} v_j = \sum_{j \sim i} v_j$ para todo $i \in \{1, 2, \dots, n\}$. Assim,

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda \sum_{i \in V_1} v_i = (d_2 - 1) \sum_{i \in V_2} v_i; \\ \lambda \sum_{i \in V_j} v_i = (d_{j+1} - 1) \sum_{i \in V_{j+1}} v_i + \sum_{i \in V_{j-1}} v_i, \text{ se } 2 \leq j \leq k-2; \\ \lambda \sum_{i \in V_{k-1}} v_i = d_k v_n + \sum_{i \in V_{k-2}} v_i; \\ \lambda v_n = \sum_{i \in V_{k-1}} v_i. \end{array} \right.$$

Somando todas as coordenadas de $\lambda \mathbf{v}$, temos:

$$\begin{aligned} \lambda \sum_{i=1}^n v_i &= \sum_{j=1}^{k-2} \left((d_{j+1} - 1) \sum_{i \in V_{j+1}} v_i \right) + d_k v_n + \sum_{j=2}^k \sum_{i \in V_{j-1}} v_i \\ &= \sum_{j=2}^{k-1} \left((d_j - 1) \sum_{i \in V_j} v_i \right) + d_k v_n + \sum_{j=1}^{k-1} \sum_{i \in V_j} v_i \end{aligned}$$

Deste modo,

$$\begin{aligned} \lambda \sum_{i=1}^n v_i &= \sum_{j=2}^k \left(d_j \sum_{i \in V_j} v_i \right) - \sum_{j=2}^{k-1} \sum_{i \in V_j} v_i + \sum_{j=1}^{k-1} \sum_{i \in V_j} v_i \\ &= \sum_{j=2}^k \left(d_j \sum_{i \in V_j} v_i \right) + \sum_{i \in V_1} v_i. \end{aligned}$$

Como $d_1 = 1$, segue que $\lambda \sum_{i=1}^n v_i = \sum_{j=1}^k \left(d_j \sum_{i \in V_j} v_i \right)$.

□

O próximo resultado nos dá uma condição necessária e suficiente para que um autovalor não nulo de uma árvore de Bethe generalizada seja não principal.

Teorema 7.12 *Seja \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com n vértices e a partição equilibrada por níveis $\pi(\mathcal{B}_k) = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$. Um autovalor não nulo λ de \mathcal{B}_k é não principal se e somente se $\sum_{j=1}^k d_j \sum_{i \in V_j} v_i = 0$ para todo autovetor $\mathbf{v} = (v_i)$ de λ , onde d_j é o grau de cada vértice em V_j .*

Demonstração. Seja λ um autovalor de uma árvore de Bethe generalizada \mathcal{B}_k .

Temos que λ é não principal se e somente se todo autovetor \mathbf{v} associado a λ possui a soma de suas coordenadas iguais a 0. Logo, pelo Lema 7.11, λ é não principal se e somente se as coordenadas de qualquer autovetor $\mathbf{v} = (v_i)$ associado a λ satisfazem

$$\sum_{j=1}^k d_j \sum_{i \in V_j} v_i = 0.$$

□

O lema a seguir fornece propriedades sobre a primeira e a última coordenadas de um autovetor da matriz tridiagonal R_k . Note que este resultado é um caso particular do Teorema 2.3.

Lema 7.13 *Todo autovetor associado a um autovalor da matriz tridiagonal de uma árvore de Bethe generalizada \mathcal{B}_k tem a primeira e a última coordenadas não nulas.*

Demonstração. Dada \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com k níveis, considere a sua matriz tridiagonal R_k .

Seja $\lambda \mathbf{w} = R_k \mathbf{w}$. As coordenadas de $\mathbf{w} = (w_i)$ satisfazem a relação:

$$\begin{cases} \lambda w_1 = w_2; \\ \lambda w_i = \sqrt{\frac{n_{i-1}}{n_i}} w_{i-1} + \sqrt{\frac{n_i}{n_{i+1}}} w_{i+1}, & 2 \leq i \leq k-1; \\ \lambda w_k = w_{k-1}. \end{cases} \quad (7.10)$$

Suponhamos por absurdo que se tenha, por exemplo, $w_1 = 0$. Da primeira equação de (7.10) segue que $w_2 = 0$. Da segunda equação obtemos $w_i = 0$, para $i \in \{3, 4, \dots, k\}$. Isto contradiz o fato de \mathbf{w} ser um autovetor. Logo, $w_1 \neq 0$.

□

Lema 7.14 *Seja \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com n vértices cuja partição equilibrada definida por níveis é $\pi(\mathcal{B}_k) = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$. Se $\mathbf{w} = (w_i)$ é um autovetor associado a um autovalor λ da matriz tridiagonal R_k de \mathcal{B}_k então λ é um autovalor de \mathcal{B}_k que possui um autovetor $\mathbf{v} = (v_i)$ cujas coordenadas são dadas por*

$$v_i = \sqrt{\frac{n_1}{n_j}} w_j \text{ para todo } i \in V_j, \quad (7.11)$$

onde n_j é o número de vértices na célula V_j para todo $j \in \{1, 2, \dots, k\}$.

Demonstração. Seja $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)}$ a matriz quociente da partição $\pi(\mathcal{B}_k)$ e seja R_k a matriz tridiagonal de \mathcal{B}_k . Da Proposição 7.8, existe uma matriz diagonal $S_k = (s_{ij})$ de ordem k cujas entradas são dadas por

$$s_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j = 1; \\ \sqrt{\frac{n_1}{n_i}}, & \text{se } i = j \neq 1; \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

tal que $S_k R_k = \mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)} S_k$.

Seja $\mathbf{w} = (w_i)$ um autovetor de R_k associado a um autovalor λ . Como $S_k R_k \mathbf{w} = \mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)} S_k \mathbf{w}$ temos que $S_k \lambda \mathbf{w} = \mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)} S_k \mathbf{w}$, isto é, $\lambda(S_k \mathbf{w}) = \mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)}(S_k \mathbf{w})$. Deste modo,

$$S_k \mathbf{w} = \left(w_1 \quad \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} w_2 \quad \cdots \quad \sqrt{\frac{n_1}{n_k}} w_k \right)^T$$

é um autovetor de $\mathcal{M}_{\pi(\mathcal{B}_k)}$ associado a λ . Segue, pelo Teorema 2.4, que o vetor

$$\mathbf{v} = \left(w_1 j_{n_1} \quad \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} w_2 j_{n_2} \quad \cdots \quad \sqrt{\frac{n_1}{n_k}} w_k j_{n_k} \right)^T$$

é um autovetor de \mathcal{B}_k associado a λ . □

Conforme observado nas Tabelas 7.1 e 7.2, as árvores $\mathcal{B}_{2,4}$ e $\mathcal{B}_{(2,3,2,4)}$ são exemplos de árvores de Bethe generalizadas que possuem, além dos seus índices, outros autovalores simples. O Teorema 7.15 apresenta uma condição necessária e suficiente para que um autovalor da matriz tridiagonal R_k de uma árvore de Bethe generalizada \mathcal{B}_k , que é simples em \mathcal{B}_k , seja um autovalor não principal.

Teorema 7.15 *Seja $\mathbf{w} = (w_i)$ um autovetor associado a um autovalor λ da matriz tridiagonal R_k de uma árvore de Bethe generalizada \mathcal{B}_k . Suponha que λ seja um autovalor simples de \mathcal{B}_k . Desse modo, λ é um autovalor não principal de \mathcal{B}_k se e somente se $\sum_{i=1}^k \sqrt{n_i} w_i = 0$.*

Demonstração. Seja \mathcal{B}_k uma árvore de Bethe generalizada com partição equilibrada $\pi(\mathcal{B}_k) = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$, dada em (7.6). Logo, a cardinalidade de V_j é n_j , para cada $j \in \{1, 2, \dots, k\}$.

Se $\mathbf{w} = (w_i)$ é um autovetor associado a um autovalor λ de R_k , do Lema 7.14, o vetor $\mathbf{v} = (v_i)$ cujas coordenadas são dadas por

$$v_i = \sqrt{\frac{n_1}{n_j}} w_j \text{ para todo } i \in V_j,$$

onde $j \in \{1, 2, \dots, k\}$, é um autovetor de \mathcal{B}_k associado ao autovalor λ . Então a soma das coordenadas de \mathbf{v} é

$$\sum_{j=1}^k \sum_{i \in V_j} v_i = \sum_{j=1}^k n_j \sqrt{\frac{n_1}{n_j}} w_j = \sum_{j=1}^k \sqrt{n_1 n_j} w_j = \sqrt{n_1} \sum_{j=1}^k \sqrt{n_j} w_j. \quad (7.12)$$

Como λ é um autovalor simples de \mathcal{B}_k segue que λ é um autovalor não principal de \mathcal{B}_k se e somente se $\sum_{j=1}^k \sqrt{n_j} w_j = 0$. □

O próximo resultado, Teorema 7.16, fornece uma condição suficiente para que um autovalor de R_k seja um autovalor principal para a árvore B_k , mesmo que não seja um autovalor simples de B_k .

Teorema 7.16 *Seja $\mathbf{w} = (w_i)$ um autovetor associado a um autovalor λ da matriz tridiagonal R_k de uma árvore de Bethe generalizada \mathcal{B}_k . Se $\sum_{i=1}^k \sqrt{n_i} w_i \neq 0$ então λ é um autovalor principal de \mathcal{B}_k .*

Demonstração. Seja $\mathbf{w} = (w_i)$ um autovetor associado a um autovalor λ de R_k . Do Lema 7.14, o vetor $\mathbf{v} = (v_i)$ cujas coordenadas são dadas por

$$v_i = \sqrt{\frac{n_1}{n_j}} w_j \text{ para todo } i \in V_j,$$

onde $j \in \{1, 2, \dots, k\}$, é um autovetor de \mathcal{B}_k associado ao autovalor λ . De (7.12), $\sum_{i=1}^n v_i = \sqrt{n_1} \sum_{j=1}^k \sqrt{n_j} w_j$. Como $\sum_{i=1}^k \sqrt{n_i} w_i \neq 0$ segue que a soma das coordenadas de \mathbf{v} não é nula. Logo, λ é um autovalor principal de \mathcal{B}_k . □

7.3 Árvore de Bethe

Nesta seção, vamos analisar os autovalores principais para as árvores de Bethe e apresentaremos uma conjectura sobre a ordem do espectro principal de tais árvores.

Para a árvore de Bethe $\mathcal{B}_{d,k}$, a matriz tridiagonal definida em (7.5), $R_k = (r_{ij})$, possui as coordenadas dadas por:

$$r_{ij} = \begin{cases} \sqrt{d}, & \text{se } j = i + 1 \text{ ou } j = i - 1; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (7.13)$$

Como exemplo temos a matriz tridiagonal R_4 (página 76) da árvore de Bethe $\mathcal{B}_{2,4}$ (Figura 7.3).

Apresentamos a seguir, um resultado de ROJO e ROBBIANO [66] que determina o espectro das árvores de Bethe.

Proposição 7.17 (ROJO e ROBBIANO [66]) *Para todo $j \in \{1, 2, \dots, k\}$ e para todo $\ell \in \{1, 2, \dots, j\}$ os autovalores da árvore de Bethe $\mathcal{B}_{d,k}$ distintos do índice são $2\sqrt{d} \cos\left(\frac{\ell\pi}{j+1}\right)$ com multiplicidades iguais a $d^{k-j-1}(d-1)$, enquanto que o seu índice é $2\sqrt{d} \cos\left(\frac{\pi}{k+1}\right)$.*

Do Teorema 7.10, o espectro principal da árvore de Bethe $\mathcal{B}_{d,k}$ está contido no espectro da matriz R_k . No Teorema 7.18, mostramos que os autovetores do caminho \mathcal{P}_k são também autovetores da matriz tridiagonal R_k .

Teorema 7.18 *Sejam d e k inteiros positivos. Tem-se que \mathbf{w} é um autovetor associado ao autovalor α do caminho \mathcal{P}_k se e somente se \mathbf{w} é um autovetor associado ao autovalor $\lambda = \alpha\sqrt{d}$ da matriz tridiagonal R_k da árvore de Bethe $\mathcal{B}_{d,k}$.*

Demonstração. De (7.13), temos que

$$R_k = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{d} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \sqrt{d} & 0 & \sqrt{d} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{d} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \sqrt{d} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \sqrt{d} & 0 \end{pmatrix} = \sqrt{d} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix} = \sqrt{d}A(\mathcal{P}_k).$$

Assim, $A(\mathcal{P}_k)\mathbf{w} = \alpha\mathbf{w}$ se e só se $\sqrt{d}A(\mathcal{P}_k)\mathbf{w} = \alpha\sqrt{d}\mathbf{w}$.

□

Como consequência do Teorema 7.18, para utilizar os autovetores da matriz R_k , basta considerar os autovetores do caminho \mathcal{P}_k .

Corolário 7.19 *Os autovalores da matriz R_k são $\lambda_j = 2\sqrt{d} \cos\left(\frac{j\pi}{k+1}\right)$ para todo $j \in \{1, 2, \dots, k\}$ e estão em ordem decrescente com relação ao índice j .*

Demonstração. Do Teorema 2.21, os autovalores do caminho \mathcal{P}_k são simples e são da forma $\alpha_j = 2 \cos\left(\frac{j\pi}{k+1}\right)$ para todo $j \in \{1, 2, \dots, k\}$. Do Teorema 7.18, os autovalores da matriz R_k também são simples e possuem a forma $\lambda_j = 2\sqrt{d} \cos\left(\frac{j\pi}{k+1}\right)$ para $j \in \{1, 2, \dots, k\}$.

Do Lema 2.22, os autovalores de \mathcal{P}_k estão em ordem decrescente e como $\sqrt{d} > 0$ segue que os autovalores de R_k estão dispostos em ordem decrescente.

□

No Corolário 7.20 é apresentado o polinômio característico da matriz tridiagonal de uma árvore de Bethe, sabe-se que o polinômio característico principal de tal árvore divide este polinômio (Proposição 7.8).

Corolário 7.20 *O polinômio característico da matriz tridiagonal R_k de uma árvore de Bethe $\mathcal{B}_{d,k}$ é*

$$r(x) = \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} (-1)^{k-j} \binom{k-j}{j} (\sqrt{d})^{2j} x^{k-2j} (x \in \mathbb{R}).$$

Demonstração. Seja R_k a matriz tridiagonal de uma árvore de Bethe $\mathcal{B}_{d,k}$.

Para todo $j \in \{1, 2, \dots, k\}$, se α_j é um autovalor do caminho \mathcal{P}_k segue, do Teorema 7.18, que $\lambda_j = \sqrt{d} \alpha_j$ é um autovalor de $\mathcal{B}_{d,k}$.

Do Lema 2.20, temos que $\frac{\lambda_j}{\sqrt{d}}$ são as raízes do polinômio $p(x) = \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} (-1)^{k-j} \binom{k-j}{j} x^{k-2j}$ para todo $j \in \{1, 2, \dots, k\}$. Assim, se $r(x)$ é o polinômio do enunciado então, para todo $j \in \{1, 2, \dots, k\}$ tem-se

$$\begin{aligned} r(\lambda_j) &= \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} (-1)^{k-j} \binom{k-j}{j} \sqrt{d}^{2j} \lambda_j^{k-2j} \\ &= \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} (-1)^{k-j} \binom{k-j}{j} (\sqrt{d})^k \left(\frac{\lambda_j}{\sqrt{d}} \right)^{k-2j} \\ &= (\sqrt{d})^k p \left(\frac{\lambda_j}{\sqrt{d}} \right) = 0. \end{aligned}$$

Isto significa que as raízes do polinômio $r(x)$ são os k autovalores da matriz tridiagonal R_k . Como este é mônico temos que $r(x)$ é o polinômio característico de R_k .

□

Note que 0 é uma raiz do polinômio $r(x)$ somente no caso em que k é um número ímpar. Da Proposição 7.8, o polinômio característico principal de $\mathcal{B}_{d,k}$ divide o polinômio $r(x)$ e, portanto, 0 não é um autovalor principal para a árvore de Bethe que possui um número par de níveis. Como podemos constatar na matriz tridiagonal R_4 da árvore $\mathcal{B}_{2,4}$ que não possui 0 no seu espectro (veja Tabela 7.1).

Por meio de testes e vários exemplos, obtivemos evidências de que a quantidade de autovalores principais de uma árvore de Bethe $\mathcal{B}_{d,k}$ é exatamente igual ao número de níveis que ela possui, independente da paridade de k . De fato, uma árvore de Bethe com três níveis (diâmetro 4) possuem no máximo 3 autovalores principais (Teorema 7.10), sendo que as únicas árvores de diâmetro 4 que possuem dois autovalores principais são as árvores harmônicas, que não são árvores de Bethe. Estas considerações nos levam a estabelecer a seguinte conjectura.

Conjectura 7.21 *Uma árvore de Bethe com $k > 3$ níveis possui exatamente k autovalores principais.*

Considerando a partição equilibrada definida anteriormente, fornecemos no teorema a seguir uma condição necessária e suficiente para que um autovalor de uma árvore de Bethe seja não principal a partir do conhecimento das coordenadas referentes às folhas dos seus autovetores associados.

Teorema 7.22 *Seja $\mathcal{B}_{d,k}$ uma árvore de Bethe com n vértices cuja partição equilibrada definida por níveis é $\pi(\mathcal{B}_{d,k}) = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$. Um autovalor λ de $\mathcal{B}_{d,k}$ é não principal se e somente se as coordenadas de qualquer autovetor $\mathbf{v} = (v_i)$ associado a λ satisfazem $v_n = -d \sum_{i \in V_1} v_i$.*

Demonstração. Seja $\mathcal{B}_{d,k}$ uma árvore de Bethe com n vértices cuja partição equilibrada definida por níveis é $\pi(\mathcal{B}_{d,k}) = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$.

Seja $\mathbf{v} = (v_i)$ um autovetor associado a um autovalor λ de $\mathcal{B}_{d,k}$. Pelo Lema 7.11,

$$\lambda \sum_{i=1}^n v_i = \sum_{j=1}^k d_j \sum_{i \in V_j} v_i.$$

Como $d_1 = 1, d_k = d$ e, para $j \in \{2, 3, \dots, k-1\}$, temos $d_j = d + 1$ segue que

$$\begin{aligned} \lambda \sum_{i=1}^n v_i &= \sum_{i \in V_1} v_i + (d+1) \sum_{j=2}^{k-1} \sum_{i \in V_j} v_i + d v_n \\ &= \sum_{i \in V_1} v_i + \sum_{j=2}^{k-1} \sum_{i \in V_j} v_i + d \left(\sum_{j=2}^{k-1} \sum_{i \in V_j} v_i + v_n \right) \\ &= \sum_{i=1}^n v_i - v_n + d \left(\sum_{i=1}^n v_i - \sum_{i \in V_1} v_i \right) \\ &= (d+1) \sum_{i=1}^n v_i - v_n - d \sum_{i \in V_1} v_i. \end{aligned}$$

Portanto,

$$v_n + d \sum_{i \in V_1} v_i = (d + 1 - \lambda) \sum_{i=1}^n v_i. \quad (7.14)$$

Como $\mathcal{B}_{d,k}$ não é um grafo regular e possui o grau máximo $\Delta = d + 1$ segue, do Teorema 2.18, que o índice desta árvore é estritamente menor do que $d + 1$. Consequentemente, $\lambda < d + 1$.

Um autovalor λ é não principal $\mathcal{B}_{d,k}$ se e somente se todo autovetor $\mathbf{v} = (v_i)$ associado a este autovalor satisfaz $\sum_{i=1}^n v_i = 0$. Da equação (7.14), isto equivale a dizer que λ é um autovalor não principal se e somente se qualquer autovetor $\mathbf{v} = (v_i)$ associado a λ satisfaz

$$v_n = -d \sum_{i \in V_1} v_i.$$

□

Para uma aplicação do Teorema 7.22, citamos a árvore de Bethe $\mathcal{B}_{2,4}$, dada na Figura 7.3, com a partição equilibrada definida por níveis $\pi(\mathcal{B}_{2,4}) = \{V_1, V_2, V_3, V_4\}$, onde $V_1 = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$, $V_2 = \{9, 10, 11, 12\}$, $V_3 = \{13, 14\}$ e $V_4 = \{15\}$. Dentre os autovalores de $\mathcal{B}_{2,4}$, consideremos $\sqrt{2}$, com multiplicidade 2, e $-\sqrt{3 + \sqrt{5}}$, com multiplicidade 1 (veja Tabela 7.1). Os vetores $\mathbf{v} = \left(1 \ 1 \ -1 \ -1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ \sqrt{2} \ -\sqrt{2} \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \right)^T$ e $\mathbf{u} = \left(0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 1 \ -1 \ -1 \ 0 \ 0 \ \sqrt{2} \ -\sqrt{2} \ 0 \ 0 \ 0 \right)^T$ formam uma base para o aut espaço de $\sqrt{2}$. Note que, $\sum_{i \in V_1} v_i = \sum_{i \in V_1} u_i = 0$ e $v_n = u_n = 0$. Como $v_n = 0 = -2 \sum_{i \in V_1} v_i$ e $u_n = 0 = -2 \sum_{i \in V_1} u_i$ temos que $\sqrt{2}$ é um autovalor não principal. Por outro lado, se $\lambda = -\sqrt{3 + \sqrt{5}}$ então $\mathbf{v} = \left(1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ \lambda \ \lambda \ \lambda \ \lambda \ \sqrt{5} + 1 \ \sqrt{5} + 1 \ (1 - \sqrt{5}) \ \sqrt{\sqrt{5} + 3} \right)^T$ é um autovetor associado a $-\sqrt{3 + \sqrt{5}}$. Temos que $\sum_{i \in V_1} v_i = 8$ que é diferente de $(1 - \sqrt{5}) \sqrt{\sqrt{5} + 3} \approx -2, 83$. Do Teorema 7.22, $-\sqrt{3 + \sqrt{5}}$ é um autovalor principal.

No Corolário 7.23, aplicamos o Teorema 7.22 analisando os autovetores associados aos autovalores da matriz tridiagonal R_k de uma árvores de Bethe, os quais são simples para a árvore.

Corolário 7.23 *Seja $\mathbf{w} = (w_i)$ um autovetor associado a um autovalor λ da matriz tridiagonal R_k de uma árvore de Bethe $\mathcal{B}_{d,k}$. Se λ é um autovalor simples de $\mathcal{B}_{d,k}$ então λ é um autovalor não principal de $\mathcal{B}_{d,k}$ se e somente se $w_k = -d\sqrt{n_1}w_1$, onde n_1 é o número de vértices no nível k .*

Demonstração. Seja $\mathcal{B}_{d,k}$ uma árvore de Bethe cuja partição definida por níveis é $\pi(\mathcal{B}_{d,k}) = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$.

Seja $\mathbf{w} = (w_i)$ um autovetor associado a um autovalor λ da matriz tridiagonal R_k , que é um autovalor simples de $\mathcal{B}_{d,k}$. Pelo Lema 7.14, $\mathcal{B}_{d,k}$ possui um autovetor associado a λ cuja i -ésima coordenada é definida por

$$v_i = \sqrt{\frac{n_1}{n_j}} w_j \text{ para todo } i \in V_j,$$

onde n_j é o número de vértices no nível $k + 1 - j$ para todo $j \in \{1, 2, \dots, k\}$.

Do Teorema 7.22, λ é um autovalor não principal de $\mathcal{B}_{d,k}$ se e somente se as coordenadas de qualquer autovetor $\mathbf{u} = (u_i)$ de $\mathcal{B}_{d,k}$ associado a λ satisfazem $u_n = -d \sum_{i \in V_1} u_i$. Como λ é um autovalor simples segue que λ é um autovalor não principal de $\mathcal{B}_{d,k}$ se e somente se $v_n = -d \sum_{i \in V_1} v_i$. Porém,

$$\sum_{i \in V_1} v_i = \sum_{i \in V_1} \sqrt{\frac{n_1}{n_1}} w_1 = \sum_{i \in V_1} w_1 = n_1 w_1 \text{ e } v_n = \sqrt{\frac{n_1}{n_k}} w_k = \sqrt{n_1} w_k.$$

Logo, λ é um autovalor não principal de $\mathcal{B}_{d,k}$ se e somente se $w_k = -d\sqrt{n_1} w_1$. □

O próximo resultado, Corolário 7.24, fornece uma condição suficiente para que um autovalor de R_k seja um autovalor principal para a árvore $\mathcal{B}_{d,k}$, mesmo que não seja um autovalor simples de $\mathcal{B}_{d,k}$.

Corolário 7.24 *Seja $\mathbf{w} = (w_i)$ um autovetor associado a um autovalor λ da matriz tridiagonal R_k da árvore de Bethe $\mathcal{B}_{d,k}$. Se $w_k \neq -d\sqrt{n_1} w_1$ então λ é um autovalor principal de $\mathcal{B}_{d,k}$.*

Como consequência imediata do Corolário 7.24 temos que 0 é um autovalor principal das árvores de Bethe com um número ímpar de níveis. De fato, considere a árvore de Bethe $\mathcal{B}_{d,k}$, onde k é ímpar. Dos Teoremas 7.18 e 2.21, temos que

$$\mathbf{w} = \left(\sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \quad \sin(\pi) \quad \cdots \quad \sin\left(\frac{k\pi}{2}\right) \right)^T$$

é um autovetor da matriz tridiagonal R_k associado ao autovalor 0. Note que $\sin\left(\frac{k\pi}{2}\right) \neq -d\sqrt{n_1} \sin\left(\frac{\pi}{2}\right)$. Com efeito, suponhamos por absurdo que $\sin\left(\frac{k\pi}{2}\right) = -d\sqrt{n_1} \sin\left(\frac{\pi}{2}\right)$. Como $\sin\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1$, $d > 1$ e $\sqrt{n_1} > 1$ segue que $\sin\left(\frac{k\pi}{2}\right) = -d\sqrt{n_1} < -1$, um absurdo. Do Corolário 7.23, 0 é um autovalor principal da árvore de Bethe $\mathcal{B}_{d,k}$, onde k é um número ímpar.

Na próxima seção, aplicamos novamente os resultados obtidos na Seção 7.2 e determinamos o polinômio característico principal e conseqüentemente, o número de autovalores principais para um caso particular das árvores de Bethe generalizadas.

7.4 Árvore completa quase-regular

De acordo com CVETKOVIĆ e DAVIDOVIĆ [12], a árvore enraizada com k níveis, cuja raiz está no nível 1 e tem grau $d > 1$, os vértices dos níveis 2 a $k - 1$ também possuem grau d e os vértices no nível k tem grau 1 é chamada *árvore completa quase-regular*. Denotamos tais árvores por $\mathcal{Q}_{d,k}$. Ilustramos a árvore completa quase-regular $\mathcal{Q}_{3,5}$ na Figura 7.4.

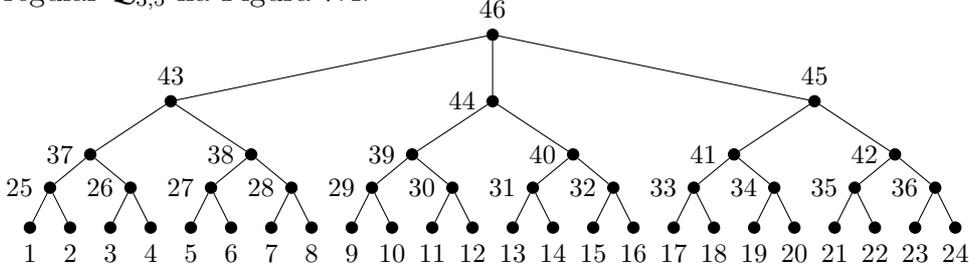


Figura 7.4: Árvore completa quase-regular $\mathcal{Q}_{3,5}$

Note que as árvores completas quase-regulares são árvores de Bethe generalizadas e podemos aplicar os resultados anteriores. Além disso, o caminho \mathcal{P}_n com n ímpar é uma árvore completa quase-regular $\mathcal{Q}_{2, \frac{n+1}{2}}$, enquanto que se n é par então \mathcal{P}_n não é ao menos uma árvore de Bethe generalizada. Por exemplo, o caminho \mathcal{P}_7 na Figura 7.1 é a árvore completa quase-regular $\mathcal{Q}_{2,4}$.

Considere a árvore completa quase-regular $\mathcal{Q}_{d,k}$ cuja matriz tridiagonal R_k (definida em (7.5)) é dada por

$$R_k = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{d-1} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \sqrt{d-1} & 0 & \sqrt{d-1} & \ddots & & \vdots \\ 0 & \sqrt{d-1} & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \sqrt{d-1} & 0 \\ \vdots & & \ddots & \sqrt{d-1} & 0 & \sqrt{d} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \sqrt{d} & 0 \end{pmatrix},$$

pois $d_1 = 1$ e $d_2 = d_3 = \cdots = d_k = d$. Por exemplo, a matriz tridiagonal da árvore $\mathcal{Q}_{3,5}$ é

$$R_5 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}.$$

Considerando a partição equilibrada definida por níveis $\pi(\mathcal{Q}_{d,k})$ (Lema 7.7) para a árvore completa quase-regular $\mathcal{Q}_{d,k}$, no próximo resultado mostramos que a soma

das coordenadas dos autovetores de $\mathcal{Q}_{d,k}$ pode ser reduzido a analisar apenas a soma das coordenadas associadas às folhas da árvore.

Teorema 7.25 *Seja $\mathcal{Q}_{d,k}$ uma árvore completa quase-regular com n vértices com a partição equilibrada definida por níveis $\pi(\mathcal{Q}_{d,k}) = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$. Se $\mathbf{v} = (v_i)$ é um autovetor associado a um autovalor λ de $\mathcal{Q}_{d,k}$ então $(\lambda - d) \sum_{i=1}^n v_i = (1 - d) \sum_{i \in V_1} v_i$.*

Demonstração. Sejam $\mathcal{Q}_{d,k}$ uma árvore completa quase-regular com a rotulação dada em (7.6) e sua partição equilibrada dada por níveis $\pi(\mathcal{Q}_{d,k}) = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$.

Seja λ um autovalor de $\mathcal{Q}_{d,k}$ com autovetor $\mathbf{v} = (v_i)$. Do Lema 7.11, temos que $\lambda \sum_{i=1}^n v_i = \sum_{j=1}^k d_j \sum_{i \in V_j} v_i$, onde d_j é o grau dos vértices na célula V_j . Assim,

$$\begin{aligned} \lambda \sum_{i=1}^n v_i &= \sum_{i \in V_1} v_i + \sum_{j=2}^k d \sum_{i \in V_j} v_i \\ &= \sum_{i \in V_1} v_i + d \left(\sum_{i=1}^n v_i - \sum_{i \in V_1} v_i \right) \\ &= (1 - d) \sum_{i \in V_1} v_i + d \sum_{i=1}^n v_i. \end{aligned}$$

$$\text{Logo, } (\lambda - d) \sum_{i=1}^n v_i = (1 - d) \sum_{i \in V_1} v_i.$$

□

No Teorema 7.26 mostramos que todo autovalor λ da matriz tridiagonal R_k de uma árvore $\mathcal{Q}_{d,k}$ é um autovalor principal de tal árvore.

Teorema 7.26 *Seja $\mathcal{Q}_{d,k}$ uma árvore completa quase-regular. Os autovalores da matriz tridiagonal R_k são autovalores principais de $\mathcal{Q}_{d,k}$.*

Demonstração. Seja $\mathcal{Q}_{d,k}$ uma árvore completa quase-regular e a sua matriz tridiagonal R_k .

Pelo Lema 7.14, se λ é um autovalor de R_k com autovetor $\mathbf{w} = (w_i)$ então λ é um autovalor de $\mathcal{Q}_{d,k}$ cujo autovetor $\mathbf{v} = (v_i)$ possui coordenadas definidas por

$$v_i = \sqrt{\frac{n_1}{n_j}} w_j \text{ para todo } i \in V_j,$$

onde $j \in \{1, 2, \dots, k\}$.

Do Teorema 7.25, $(\lambda - d) \sum_{i=1}^n v_i = (1 - d) \sum_{i \in V_1} v_i$. Assim,

$$(\lambda - d) \sum_{i=1}^n v_i = (1 - d)n_1 w_1. \quad (7.15)$$

Suponhamos, por absurdo, que $\sum_{i=1}^n v_i = 0$.

Como $\mathcal{Q}_{d,k}$ não é um grafo regular e possui o grau máximo $\Delta = d$ segue, do Teorema 2.18, que o índice desta árvore é estritamente menor do que d . Da equação (7.15), $\sum_{i=1}^n v_i = 0$ implica que $(1 - d)n_1 w_1 = 0$. Como $d > 1$ e $n_1 > 1$ temos que $w_1 = 0$, o que contradiz o Lema 7.13. Logo, $\sum_{i=1}^n v_i \neq 0$ e por conseguinte, λ é um autovalor principal de $\mathcal{Q}_{d,k}$. □

Do Teorema 2.3, os autovalores da matriz tridiagonal R_k de uma árvore completa quase-regular $\mathcal{Q}_{d,k}$ são todos distintos e, portanto, $\mathcal{Q}_{d,k}$ possui exatamente k autovalores principais. Por exemplo, os autovalores principais da árvore $\mathcal{Q}_{3,5}$, dada na Figura 7.4, são os autovalores da sua matriz tridiagonal R_5 : $-\frac{\sqrt{\sqrt{17}+9}}{\sqrt{2}}$, $\frac{\sqrt{\sqrt{17}+9}}{\sqrt{2}}$, $-\frac{\sqrt{9-\sqrt{17}}}{\sqrt{2}}$, $\frac{\sqrt{9-\sqrt{17}}}{\sqrt{2}}$ e 0.

Do Lema 7.5, temos que o polinômio característico da matriz tridiagonal R_k de uma árvore completa quase-regular $\mathcal{Q}_{d,k}$ é definida pela recorrência definida em (7.4). No Corolário 7.27, apresentamos o polinômio característico principal de $\mathcal{Q}_{d,k}$.

Corolário 7.27 *O polinômio característico principal de uma árvore completa quase-regular $\mathcal{Q}_{d,k}$ é o polinômio $q_k(x)$ definido pela recorrência*

$$\begin{cases} q_0(x) = 1; \\ q_1(x) = x; \\ q_m(x) = xq_{m-1}(x) - (d-1)q_{m-2}(x), & 2 \leq m \leq k-1; \\ q_k(x) = xq_{k-1}(x) - dq_{k-2}(x). \end{cases}$$

Capítulo 8

Considerações finais

No decorrer deste capítulo, destacamos as nossas contribuições e apontamos possíveis linhas de pesquisa para desenvolvimento futuro.

Dentre as nossas principais contribuições destacamos: a caracterização dos grafos conexos bipartidos de ordem n tais que $-1 - \lambda_{\min}$ é um autovalor principal do grafo; a identificação de algumas classes de grafos conexos bipartidos para os quais o menor autovalor é não principal e a determinação do espectro principal dos caminhos e das duplas estrelas. Além disso, construímos uma classe de grafos (que chamamos grafos foguete) com uma partição equilibrada com três células e exatamente três autovalores principais. Em sequência, apresentamos uma condição necessária e suficiente para que um grafo com uma partição equilibrada com três células possua exatamente dois autovalores principais.

A partir de nossa investigação sobre autovalores principais em árvores de Bethe generalizadas, obtivemos uma condição necessária e suficiente para que um autovalor não nulo de tais árvores seja não principal. Aplicamos os resultados obtidos para determinar a quantidade de autovalores principais das árvores completas quase-regulares, que constituem uma subfamília das árvores de Bethe generalizadas.

Como sugestões para trabalhos futuros, propomos continuar investigando autovalores principais em árvores de Bethe generalizadas. Nesta linha, destacamos as duas conjecturas propostas no Capítulo 7, a saber: árvores de Bethe com k níveis possuem exatamente k autovalores principais e o número de autovalores principais de árvores de Bethe generalizadas com um número par de níveis coincide com o número de níveis. Ainda está em aberto a questão do número de autovalores principais em árvores de Bethe generalizadas com um número ímpar de níveis.

Referências Bibliográficas

- [1] CVETKOVIĆ, D. “The Generating Function for Variations and Paths of the Graph and Self-Complementary Graphs”, *Univ. Beograd Publ. Elektrotehn. Fak. Ser. Mat. Fiz.*, , n. 320-328, pp. 27–34, 1970.
- [2] CVETKOVIĆ, D. M. “Graphs and their spectra”, *Univ. Beograd Publ. Elektrotehn. Fak.*, , n. 354-356, pp. 1–50, 1971.
- [3] CVETKOVIĆ, D. “The main part of the spectrum, divisors and switching of graphs”, *Publ. Inst. Math. (Beograd)*, v. 23, pp. 31–38, 1978.
- [4] HAGOS, E. M. “Some results on graph spectra”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 356, pp. 103–111, 2002.
- [5] HOU, Y., ZHOU, H. “Trees with exactly two main eigenvalues”, *Acta of Human Normal University*, v. 2, n. 28, pp. 1–3 (in Chinese), 2005.
- [6] HOU, Y., TIAN, F. “Unicyclic graphs with exactly two main eigenvalues”, *Applied Mathematics Letters*, v. 19, pp. 1143–1147, 2006.
- [7] HU, Z., LI, S., ZHU, C. “Bicyclic graphs with exactly two main eigenvalues”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 431, pp. 1848–1857, 2009.
- [8] HOU, Y., TANG, Z., SHIU, W. C. “Some results on graphs with exactly two main eigenvalues”, *Applied Mathematics Letters*, v. 25, pp. 1274–1278, 2012.
- [9] FAN, X., LUO, Y. “Tricyclic graphs with exactly two main eigenvalues”, *arXiv*, 2010.
- [10] CARDOSO, D. M., PINHEIRO, S. J. “Spectral upper bounds on the size of k -regular induced subgraphs”, *Electron. Notes Discrete Math*, v. 32, pp. 3–10, 2009.
- [11] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., SIMIĆ, S. K. *Spectral Generalizations of Line Graphs: On Graphs with Least Eigenvalue -2* . Cambridge, Cambridge University Press, 2004.

- [12] CVETKOVIĆ, D., DAVIDOVIĆ, T. “Application of some Graph Invariants to the Analysis of Multiprocessor Interconnection Networks”, *Yugoslav Journal of Operations Research*, v. 18, n. 2, pp. 173–186, 2008.
- [13] HARARY, F. *Graph Theory*. Philippines, Addison-Wesley, 1969.
- [14] GODSIL, C. D., ROYLE, G. *Algebraic Graph Theory*. New York, Springer-Verlag New York, 2001.
- [15] MERRIS, R. *Graph Theory*. California, John Wiley & Sons, Inc., 2001.
- [16] DIESTEL, R. *Graph Theory*. New York, Springer-Verlag Heidelberg, Electronic Edition 2005.
- [17] NETTO, P. O. B. *Grafos: Teoria, Modelos, Algoritmos*. 5 ed. São Paulo, Editora Edgard Blücher Ltda, 2012.
- [18] GROSS, J. L., YELLEN, J., ZHANG, P. *Handbook of Graph Theory*. 2 ed. Boca Raton, FL, CRC Press LCC, 2014.
- [19] HORN, R. A., JOHNSON, C. R. *Matrix Analysis*. New York, Cambridge University Press, 1992.
- [20] SO, W. “Commutativity and spectra of Hermitian matrices”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 212-213, pp. 121–129, 1994.
- [21] LÜTKEPOHL, H. *Handbook of Matrices*. 1 ed. New York, Wiley & Sons, 1996.
- [22] MEYER, C. D. *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*. Philadelphia, SIAM, 2000.
- [23] BUENO, H. P. *Álgebra Linear: Um Segundo Curso*. Rio de Janeiro, SBM, 2006.
- [24] FIEDLER, M. *Special Matrices and their Applications in Numerical Mathematics*. 2 ed. Mineola, New York, Dover Publications, Inc., 2008.
- [25] FALLAT, S. M., JOHNSON, C. R. *Totally Nonnegative Matrices*. Princeton and Oxford, University Press, 2011.
- [26] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., SIMIĆ, S. *An Introduction to the Theory of Graph Spectra*. United Kingdom, Cambridge University Press, 2010.
- [27] CVETKOVIĆ, D., DOOB, M., SACHS, H. *Spectra of Graphs - Theory and Application*. New York, Academic Press, 1979.

- [28] DOOB, M. “A Surprising Property of the Least Eigenvalue of a Graph”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 46, pp. 1–7, 1982.
- [29] CVETKOVIĆ, D., DOOB, M., SACHS, H. *Spectra of Graphs - Theory and Application*. 2 ed. Berlin, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1982.
- [30] CVETKOVIĆ, D., DOOB, M. “Developments in the theory of graph spectra”, *Linear and Multilinear Algebra*, v. 18, pp. 153–181, 1985.
- [31] LEE, S., YEH, Y. “On Eigenvalue and Eigenvectors of Graphs”, *JMC*, v. 12, pp. 121–135, 1993.
- [32] CVETKOVIĆ, D., DOOB, M., SACHS, H. *Spectra of Graphs*. 3 ed. Leipzig, Johann Ambrosius Barth, 1995.
- [33] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., SIMIĆ, S. *Eigenspaces of Graphs*, v. 66, *Encyclopedia of mathematics and its applications*. United Kingdom, Cambridge University Press, 1997.
- [34] ABREU, N. M. M., DEL-VECCHIO, R. R., VINAGRE, C. T. M., et al. *Introdução à Teoria Espectral de Grafos com Aplicações*. 2 ed. São Paulo, SBMAC, 2012.
- [35] BROUWER, A. E., HAEMERS, W. H. *Spectra of Graphs*. New York, Springer, 2012.
- [36] MERRIS, R. “Laplacian graph eigenvectors”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 278, pp. 221–236, 1998.
- [37] ZUMSTEIN, P. *Comparison of Spectral Methods Through the Adjacency Matrix and the Laplacian of a Graph*. Diploma thesis, ETH, Zurich, 2005.
- [38] TERANISHI, Y. “Main eigenvalues of a graph”, *Linear and Multilinear Algebra*, v. 49, pp. 289–303, 2002.
- [39] CARDOSO, D. M., SCIRIHA, I., ZERAFÁ, C. “Main Eigenvalues, (k, τ) –regular Sets and Hamiltonian Graphs”, *Cadernos de Matemática da Universidade de Aveiro*, v. CM08, n. I-09, 2008.
- [40] CARDOSO, D. M., SCIRIHA, I., ZERAFÁ, C. “Main Eigenvalues and (k, τ) –regular sets”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 432, pp. 2399–2408, 2010.

- [41] SCIRIHA, I., CARDOSO, D. M. “Necessary and Sufficient Conditions for a Hamiltonian Graph”, *Journal of Combinatorial Mathematics and Combinatorial Computing*, v. 80, pp. 127–150, 2012.
- [42] GRÜNEWALD, S. “Harmonic trees”, *Appl. Math. Lett.*, v. 15, n. 8, pp. 1001–1004, 2002.
- [43] DRESS, A., GUTMAN, I. “On the number of walks in a graph”, *Appl. Math. Lett.*, v. 16, pp. 797–801, 2003.
- [44] BOROVIĆANIN, B., GRÜNEWALD, S., GUTMAN, I., et al. “Harmonic graphs with small number of cycles”, *Discrete Math.*, v. 265, pp. 31–44, 2003.
- [45] SHI, L. “On graphs with given main eigenvalues”, *Appl. Math. Lett.*, v. 22, pp. 1870–1874, 2009.
- [46] NIKIFOROV, V. “Walks and the spectral radius of graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 418, pp. 257–268, 2006.
- [47] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., STANIĆ, Z., et al. “Controllable graphs”, *Bull. Acad. Serbe Sci. Arts. Cl. Sci. Math. Nat. Sci. Math.*, v. 36, pp. 81–88, 2011.
- [48] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., STANIĆ, Z., et al. “Controllable graphs with least eigenvalue at least -2 ”, *Appl. Anal. Discrete Math.*, v. 5, pp. 165–175, 2011.
- [49] GODSIL, C. “Controllable Subsets in Graphs”, *Ann. Comb.*, v. 16, pp. 733–744, 2012.
- [50] STANIĆ, Z. “Further results on controllable graphs”, *Discrete Appl. Math.*, v. 166, pp. 215–221, 2014.
- [51] ROWLINSON, P. “The main Eigenvalues of a Graph: A Survey”, *Applicable Analysis and Discrete Mathematics*, v. 1, pp. 445–471, 2007.
- [52] GRONE, R., MERRIS, R. “Ordering Trees by Algebraic Connectivity”, *Graphs and Combinatorics*, v. 6, pp. 229–237, 1990.
- [53] DO CARMO, M. P., MORGADO, A. C., WAGNER, E. *Trigonometria, Números Complexos*. Coleção do Professor de Matemática, SBM, 2005.
- [54] DEL VECCHIO, R. R., GUTMAN, I., TREVISAN, V., et al. “On the spectra and energies of double-broom-like trees”, *Kragujevac J. Sci.*, v. 31, pp. 45–58, 2009.

- [55] SCHWENK, A. J. “Computing the characteristic polynomial of a graph”. In: *Graphs and Combinatorics*, n. 406, Lecture Notes in Mathematics, Springer, pp. 153–172, 1974.
- [56] CARDOSO, D. M., DE FREITAS, M. A., MARTINS, E. A., et al. “Spectra of graphs obtained by a generalization of the join graph operation”, *Discrete Math.*, v. 313, pp. 733–741, 2013.
- [57] FINCK, H. J., SACHS, H. “Über Beziehungen zwischen Struktur und Spektrum regulärer Graphen”, *Wiss. Z., T. H. Ilmenau*, v. 19, pp. 83–89, 1973.
- [58] HARARY, F., SCHWENK, A. “The spectral approach to determining the number of walks in a graph”, *Pacific Journal of Mathematics*, v. 80 (2), pp. 443–449, 1979.
- [59] POWERS, D. L., SULAIMAN, M. M. “The walk partition and colorations of a graph”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 48, pp. 145–159, 1982.
- [60] ROJO, O., SOTO, R. “The spectra of the adjacency matrix and Laplacian matrix for some balanced trees”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 403, pp. 97–117, 2005.
- [61] HEILMANN, O. J., LIEB, E. H. “Theory of monomer-dimer systems”, *Commun. Math. Phys.*, v. 25, pp. 190–232, 1972.
- [62] GODSIL, C. D., GUTMAN, I. “On the theory of matching polynomial”, *J. Graph Theory*, v. 5, pp. 137–144, 1981.
- [63] GUTMAN, I. “Characteristic and matching polynomials of some compound graphs”, *Publ. Inst. Math. (Beograd)*, v. 27, pp. 61–66, 1980.
- [64] ROJO, O. “The spectra of some trees and bounds for the largest eigenvalue of any tree”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 414, pp. 199–217, 2006.
- [65] ROJO, O. “The spectra of a graph obtained from copies of a generalized Bethe tree”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 420, pp. 490–507, 2007.
- [66] ROJO, O., ROBBIANO, M. “An explicit formula for eigenvalues of Bethe trees and upper bounds on the largest eigenvalue of any tree”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 427, pp. 138–150, 2007.
- [67] ROJO, O., MEDINA, L. “Spectra of generalized Bethe trees attached to a path”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 430, pp. 483–503, 2009.

Índice Remissivo

- árvore, 6
 - dupla estrela, 38
 - dupla estrela balanceada, 38
 - dupla vassora, 38
 - enraizada, 6
- árvore completa quase-regular, 91
- árvore de Bethe, 74
- árvore de Bethe generalizada, 74
- índice, 12
- autovalor
 - principal, 18
 - semisimples, 8
 - simples, 8
- cadeia, 5
 - aberta, 5
 - fechada, 5
- caminho, 5
- ciclo, 5
- componente de um grafo, 5
- conjunto (k, τ) -regular, 26
- decomposição espectral, 11
- diâmetro, 6
- distância, 6
- divisor de um grafo, 63
- estrela, 6
- excentricidade, 6
- grafo, 3
 - k -cíclico, 5
 - r -partido, 6
 - r -partido balanceado, 6
 - r -partido completo, 6
 - r -regular, 5
 - 2-cadeia (a, b) -linear, 35
 - bicíclico, 5
 - bipartido, 6
 - bipartido semirregular, 6
 - caminho, 6
 - complementar, 5
 - completo, 5
 - conexo, 5
 - foguete, 67
 - harmônico, 29
 - orientado, 4
 - quociente, 63
 - singular, 28
 - tricíclico, 5
 - trivial, 3
 - unicíclico, 5
 - vazio, 3
- grau, 3
 - máximo, 3
 - médio, 3
 - mínimo, 3
- matriz
 - diagonal, 7
 - diagonalizável, 10
 - identidade, 7
 - invertível, 8
 - irredutível, 9
 - não negativa, 6
 - nula, 6
 - ortogonal, 10

- ortogonalmente diagonalizável, 10
- permutação, 8
- positiva, 6
- quadrada, 7
- quociente, 63
- reduzível, 9
- simétrica, 9
- tridiagonal, 7
- matriz cadeia, 16
- matriz de adjacência, 4
- multigrafo orientado, 4
- multiplicidade, 8
 - algébrica, 8
 - geométrica, 8
- norma, 10
- Operação
 - H -junção, 59
 - junção, 5
 - união, 5
- partição, 6
- partição equilibrada, 62
- polinômio característico
 - de um grafo, 12
 - de uma matriz, 7
 - principal, 19
- posto, 10
- produto interno, 10
- projeção espectral, 11
- raio espectral, 7
- raiz, 6
- subgrafo, 5
 - induzido, 5
- submatriz, 7
 - principal, 7
 - principal líder, 7
- vértice, 3
 - adjacente, 3
 - central, 6
 - vértices gêmeos, 15
 - vetor
 - característico, 27
 - de Faria, 15
 - discriminante, 30
 - vizinhança, 3