

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

Localização de Autovalores de Árvores e de Grafos Unicíclicos

por

Rodrigo Orsini Braga

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

Prof. Dr. Vilmar Trevisan
Orientador

Profa. Dra. Virgínia Maria Rodrigues
Coorientadora

Porto Alegre, dezembro de 2015.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Braga, Rodrigo Orsini

Localização de Autovalores de Árvores e de Grafos Unicíclicos / Rodrigo Orsini Braga.—Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2015.

139 p.: il.

Tese (doutorado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2015.

Orientador: Trevisan, Vilmar; Coorientadora: Rodrigues, Virgínia Maria

Tese: Matemática Aplicada

Localização de autovalores, Árvores, Grafos Unicíclicos

Localização de Autovalores de Árvores e de Grafos Unicíclicos

por

Rodrigo Orsini Braga

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

Doutor em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Grafos e Álgebra Linear

Orientador: Prof. Dr. Vilmar Trevisan

Coorientadora: Profa. Dra. Virgínia Maria Rodrigues

Banca Examinadora:

Profa. Dra. Maria Agueiras Alvarez de Freitas
Instituto de Matemática - UFRJ

Prof. Dr. Rogério Ricardo Steffenon
Ciências Exatas e Tecnológicas - UNISINOS

Prof. Dr. Carlos Hoppen
PPGMAp - UFRGS

Prof. Dr. Eliseu Fritscher
COPPE - UFRJ

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente ao meu orientador, Professor Vilmar Trevisan, por ter me concedido a oportunidade de ingressar no doutorado, contando com seu apoio e todo o incentivo para que eu me tornasse, enfim, um pesquisador.

Agradeço em especial à minha coorientadora, grande amiga e comadre, Professora Virgínia Maria Rodrigues, por todo o carinho, dedicação, cumplicidade e profissionalismo com os quais me acompanha por todos estes anos, a quem devo também meu reingresso acadêmico e a honra de ser padrinho de sua querida filha Sofia.

Agradeço aos professores e colegas de seminário, em particular, ao Professor Carlos Hoppen e ao Eliseu Fritscher, pelas valiosas contribuições e sugestões que engrandeceram o meu trabalho e com quem aprendi muito durante nossos encontros semanais nestes últimos quatro anos.

Um agradecimento especial também ao Rogério Ricardo Steffenon, a quem nutro uma profunda admiração, amizade e respeito. Obrigado por todo o apoio e por sempre acreditar no meu trabalho e no meu potencial.

Agradeço ao PPGMAp pela oportunidade de estudar e concluir este doutorado, além dos professores que contribuíram de alguma forma para que este objetivo fosse alcançado.

E, por fim, mas não menos fundamental em minha vida, agradeço ao Flávio, por todo o carinho e companheirismo ao longo desses anos que passamos juntos, vencendo todos os obstáculos. Obrigado!

Sumário

LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE TABELAS	x
LISTA DE ALGORITMOS	xi
LISTA DE SÍMBOLOS	xii
RESUMO	xiii
ABSTRACT	xiv
1 INTRODUÇÃO	1
2 PRELIMINARES	10
2.1 Conceitos básicos de Teoria de Grafos	10
2.2 Conceitos básicos de Álgebra Linear	17
2.3 Matrizes associadas a grafos	21
2.4 Espectros de grafos	26
2.5 Localização de autovalores de árvores	34
3 LOCALIZAÇÃO DE AUTOVALORES DE GRAFOS UNICÍ- CLICOS	43
3.1 Algoritmo de localização de autovalores de grafos unicíclicos	43
3.2 Centopeias unicíclicas	64

4	A MATRIZ LAPLACIANA PERTURBADA	71
4.1	Matrizes simétricas associadas a um mesmo grafo	71
4.2	Localização de autovalores de matrizes laplacianas perturbadas de árvores	77
4.3	Propriedades espectrais da matriz laplaciana perturbada $\mu I - A$	87
4.4	Árvores com 5 autovalores distintos	100
5	APLICAÇÕES À DISTRIBUIÇÃO DE AUTOVALORES DE ÁRVORES	111
5.1	Distribuição dos autovalores da matriz laplaciana combinatória de árvores	111
5.2	A transformação π	114
5.3	A transformação ρ	121
6	CONCLUSÃO	127
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	135

Lista de Figuras

Figura 1.1	Dois grafos coespectrais e não isomorfos	2
Figura 2.1	Grafo 3-regular	12
Figura 2.2	K_5	12
Figura 2.3	C_4 e P_5	13
Figura 2.4	S_5	14
Figura 2.5	$K_{3,2}$	17
Figura 2.6	Grafo do Exemplo 2.3.1	22
Figura 2.7	Grafo do Exemplo 2.3.2	25
Figura 2.8	Grafo S_6^1	32
Figura 2.9	Vértice v_k com um filho v_j e pai v_ℓ	36
Figura 2.10	Árvore do Exemplo 2.5.3	39
Figura 2.11	Aplicação do algoritmo $Diagonalize(T, \alpha)$ com $\alpha = -2$	39
Figura 2.12	Aplicação do algoritmo $Diagonalize(T, \alpha)$ com $\alpha = -1$	40
Figura 2.13	Aplicação do algoritmo $Diagonalize(T, \alpha)$ com $\alpha = 0$	42
Figura 3.1	Um grafo unicíclico	44
Figura 3.2	Grafo unicíclico do Exemplo 3.1.1	47
Figura 3.3	Grafo unicíclico do Exemplo 3.1.4	58
Figura 3.4	Passos 1 e 2 do algoritmo $DiagonalizeUnicyclic(G, \alpha)$ com $\alpha = -2$	59

Figura 3.5	Inicialização do procedimento <i>DiagCycle</i> no caso $\alpha = -2$	60
Figura 3.6	Iteração $i = 4$ do procedimento <i>DiagCycle</i> no caso $\alpha = -2$	60
Figura 3.7	Iteração $i = 3$ do procedimento <i>DiagCycle</i> no caso $\alpha = -2$	60
Figura 3.8	Passos 1 e 2 do algoritmo <i>DiagonalizeUnicyclic</i> (G, α) com $\alpha = 0$	61
Figura 3.9	Valores finais da aplicação do algoritmo <i>DiagonalizeUnicyclic</i> (G, α) com $\alpha = 0$	62
Figura 3.10	Passos 1 e 2 do algoritmo <i>DiagonalizeUnicyclic</i> (G, α) com $\alpha = -1$	63
Figura 3.11	Aplicação do algoritmo <i>DiagonalizeUnicyclic</i> ($\mathcal{C}, -\alpha$) com $\alpha = 0$	64
Figura 3.12	Centopeia unicíclica do Exemplo 3.2.3	65
Figura 3.13	Aplicação do algoritmo <i>DiagonalizeUnicyclic</i> (\mathcal{C}, α) com $\alpha = -1$	66
Figura 3.14	Centopeia unicíclica regular $\mathcal{C}(4, 3)$	67
Figura 4.1	Grafo do Exemplo 4.1.1	72
Figura 4.2	Grafo do Exemplo 4.1.4	75
Figura 4.3	Árvore do Exemplo 4.2.3	83
Figura 4.4	Aplicação do algoritmo <i>DiagonalizeW</i> (T, α) com $\alpha = 0$	83
Figura 4.5	Aplicação do algoritmo <i>DiagonalizeW</i> (T, α) com $\alpha = -2$	84
Figura 4.6	Aplicação do algoritmo <i>DiagonalizeW</i> (T, α) com $\alpha = -1$	85
Figura 4.7	<i>DiagonalizeW</i> ($T, -\mu$).	90
Figura 4.8	Árvore de diâmetro 3	93
Figura 4.9	Árvore de diâmetro 4.	94

Figura 4.10	Árvore de diâmetro 4 com $m = 0$	95
Figura 4.11	Árvore de diâmetro 4 com $m > 0$	95
Figura 4.12	Double broom $T(k, \ell, 3)$	101
Figura 4.13	Árvore de Bethe generalizada de diâmetro 4.	108
Figura 5.1	A transformação π	114
Figura 5.2	A transformação ρ	121
Figura 6.1	Três possíveis casos de grafos bicíclicos	129

Lista de Tabelas

Tabela 2.1	Alguns grafos especiais e seus espectros	29
------------	--	----

Lista de Algoritmos

1	<i>Diagonalize</i> (T, α)	35
2	<i>DiagonalizeUnicyclic</i> (G, α)	45
3	Procedimento <i>DiagCycle</i> (a_1, a_2, \dots, a_b)	46
4	<i>DiagonalizeW</i> (T, α)	78

LISTA DE SÍMBOLOS

$d(v)$	grau do vértice v
K_n	grafo completo de n vértices
S_n	estrela de n vértices
\overline{G}	grafo complementar de G
P_n	caminho de n vértices
C_n	ciclo de n vértices
$d(G)$	diâmetro do grafo G
$K_{p,q}$	grafo bipartido completo com $p + q$ vértices
$\mathbf{1}$	vetor cujas entradas são todas iguais a 1
$\mathbf{0}$	matriz nula
$tr(A)$	traço da matriz A
$p_m(A)$	polinômio minimal da matriz A
$i(A)$	inércia da matriz A
$A(G)$	matriz de adjacências de G
D_G	matriz diagonal dos graus dos vértices de G
$L(G)$	matriz laplaciana combinatória de G
$Q(G)$	matriz laplaciana sem sinal de G
$\mathcal{L}(G)$	matriz laplaciana normalizada de G
ω_{ij}	peso da aresta $\{i, j\}$
$\mathcal{L}(G)$	matriz laplaciana perturbada de G
$p_M(\lambda)$	polinômio característico da matriz M
$a(v)$	valor diagonal do vértice v
$\rho(G)$	índice do grafo G
$G(A)$	grafo da matriz A
$S(G)$	conjunto de todas as matrizes reais simétricas cujo grafo é G
$q(A)$	número de autovalores distintos de A
$m_G(\lambda)$	multiplicidade de λ como autovalor de G
$m_G(I)$	número de autovalores de G no intervalo real I
\bar{d}	média dos graus dos vértices

RESUMO

Neste trabalho, apresentamos um algoritmo que determina o número de autovalores de uma matriz simétrica qualquer que representa uma árvore, num dado intervalo real. Várias aplicações são obtidas em relação à distribuição dos autovalores da matriz laplaciana perturbada, uma matriz de representação de grafos que inclui, como casos particulares, a matriz de adjacências, a matriz laplaciana combinatória, a matriz laplaciana sem sinal e a matriz laplaciana normalizada, amplamente estudadas em Teoria Espectral de Grafos.

Além disso, desenvolvemos também um algoritmo de localização de autovalores da matriz de adjacências de um grafo unicíclico. Este procedimento permite obter propriedades espectrais de grafos unicíclicos denominados centopeias unicíclicas.

Palavras-chaves: *árvores, grafos unicíclicos, localização de autovalores, matriz laplaciana perturbada.*

ABSTRACT

In this work, we present an algorithm that computes the number of eigenvalues of any symmetric matrix that represents a tree, in a given real interval. Several applications are obtained about the distribution of the eigenvalues of the perturbed Laplacian matrix, which is a matrix representation of graphs that includes, as special cases, the adjacency matrix, the combinatorial Laplacian matrix, the signless Laplacian matrix and the normalized Laplacian matrix, widely studied in Spectral Graph Theory.

In addition, we also develop an algorithm that locates the eigenvalues of the adjacency matrix of a unicyclic graph. This procedure allows us to obtain spectral properties of unicyclic caterpillars.

Keywords: *trees, unicyclic graphs, eigenvalue location, perturbed Laplacian matrix.*

1 INTRODUÇÃO

A *Teoria Espectral de Grafos* estuda a relação existente entre o espectro — conjunto de autovalores e suas respectivas multiplicidades algébricas — de matrizes associadas a grafos e propriedades estruturais dos grafos. A matriz mais comumente utilizada para representar um grafo é a *matriz de adjacências*, cujo espectro é dito *espectro do grafo*. Algumas propriedades do grafo podem ser deduzidas a partir dos coeficientes do próprio polinômio característico da matriz de adjacências desse grafo. Por exemplo, se o polinômio característico é dado por

$$p(\lambda) = \lambda^n + a_1\lambda^{n-1} + a_2\lambda^{n-2} + \cdots + a_{n-1}\lambda + a_0,$$

então $-a_2$ é o número de arestas e $-\frac{a_3}{2}$ é o número de triângulos no grafo (veja [2, Proposição 2.1]).

As propriedades de grafos que são preservadas por isomorfismos são chamadas de *invariantes*. O número de vértices, o número de arestas e o número de triângulos são exemplos de invariantes. É também invariante o grau de um vértice, que é o número de arestas incidentes nesse vértice, assim como o grau máximo, que é o maior entre os graus de todos os vértices do grafo. Além disso, grafos isomorfos têm o mesmo espectro e, portanto, o espectro também é um invariante do grafo. Entretanto, isto não significa afirmar que todos os grafos são determinados pelo espectro, ou seja, a partir do espectro, nem sempre podemos determinar univocamente, a menos de isomorfismos, o grafo que possui tal espectro. É possível encontrar, por exemplo, grafos não isomorfos que possuem o mesmo espectro, os quais são denominados grafos *coespectrais*. Os grafos da Figura 1.1 são coespectrais, visto que o polinômio característico de ambos os grafos é dado por:

$$p(\lambda) = \lambda^6 - 7\lambda^4 - 4\lambda^3 + 7\lambda^2 + 4\lambda - 1.$$

O espectro destes grafos é, aproximadamente: $\{1, -1^{(2)}, 2, 7093, 0, 1939, -1, 9032\}$.

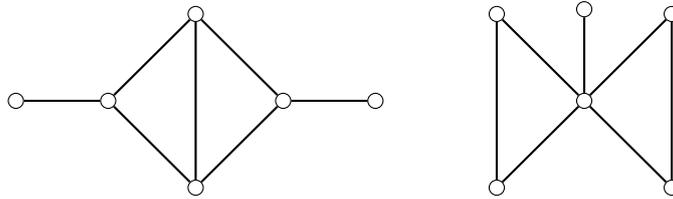


Figura 1.1: Dois grafos coespectrais e não isomorfos

A partir do polinômio característico, podemos deduzir que ambos os grafos da Figura 1.1 possuem sete arestas e dois triângulos, porém eles não são isomorfos, uma vez que o grau máximo do grafo da esquerda é igual a 3, enquanto que o grau máximo do grafo da direita é igual a 5. Assim, estes grafos são exemplos de grafos que não são determinados pelo espectro, uma vez que possuem o mesmo espectro e não são isomorfos. Neste trabalho, veremos algumas famílias de grafos determinadas pelo espectro. Por exemplo, se fixarmos o diâmetro e o número de vértices, todas as árvores de diâmetro três, a menos de isomorfismos, são determinadas pelo espectro.

Conforme Abreu [1], a Teoria Espectral de Grafos teve origem na Química Quântica, na década de 1930, quando utilizaram-se grafos para representar moléculas de hidrocarbonetos nas quais os níveis de energia de certos elétrons eram representados por autovalores desses grafos. Contudo, somente em 1971, com a tese de doutorado de Cvetković [14], a Teoria Espectral de Grafos teve sua fundamentação teórica iniciada e o primeiro livro sobre o assunto, *Spectra of Graphs*, devido a Cvetković, Doob e Sachs [15], foi publicado em 1979. Nas últimas décadas, a quantidade de trabalhos publicados nesta área vem tendo um expressivo crescimento e, de 2010 até o presente momento, contabilizam-se pelo menos 802 trabalhos publicados, conforme dados disponíveis na página *Spectral Graph Theory* [45], mantido pelo Programa de Engenharia de Produção da COPPE (UFRJ). Além disso, na página da revista científica *Linear Algebra and its Applications*, uma das mais bem concei-

tuadas na área de Álgebra Linear, é possível verificar que dois dos cinco artigos mais citados desde 2010 são de Teoria Espectral de Grafos.

Além da matriz de adjacências, outras matrizes são associadas a um grafo no intuito de obter diferentes espectros e invariantes deles derivados que possam caracterizar um número maior de grafos. Entre essas matrizes, destacamos três que são amplamente estudadas em Teoria Espectral de Grafos: a *matriz laplaciana*, a *matriz laplaciana sem sinal* e a *matriz laplaciana normalizada*. Diferentemente da matriz de adjacências, cada uma dessas três matrizes é *positiva semidefinida*, e, portanto, possui somente autovalores não negativos.

Veremos no Capítulo 5 que o menor autovalor da matriz laplaciana de um grafo é sempre zero. Fiedler [18] mostrou, para essa matriz, que o segundo menor autovalor é nulo se e somente se o grafo é desconexo, e que a multiplicidade do zero como autovalor é o número de componentes conexas do grafo. Fiedler denominou esse segundo menor autovalor de *conectividade algébrica* do grafo. Este parâmetro desempenha um papel importante em Teoria Espectral de Grafos, e está associado a diferentes invariantes de grafos, tais como o *número isoperimétrico* e o *diâmetro*, dentre outros (veja [40] para maiores detalhes). Um resultado combinatório clássico, atribuído a Kirchhoff (1847), é o *Teorema da Matriz-Árvore*, o qual afirma que qualquer cofator da matriz laplaciana de um grafo de n vértices, dado por $\frac{1}{n} \prod_{i=2}^n \lambda_i$, onde $0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ são os autovalores da matriz laplaciana, é igual ao número de árvores geradoras do grafo. A partir deste resultado, pode-se facilmente obter que se a conectividade algébrica é nula, então o grafo é desconexo. Na literatura, a matriz laplaciana também é denominada *matriz laplaciana combinatória*, terminologia que utilizaremos neste trabalho para diferenciá-la das outras matrizes de representação de grafos apresentadas neste texto.

Para a matriz laplaciana sem sinal de grafos conexos, Cvetković, Rowlinson e Simić [16] provaram que o menor autovalor é igual a 0 se, e somente se, o grafo é bipartido. Além disso, a multiplicidade de 0 como autovalor da matriz

laplaciana sem sinal é igual ao número de componentes conexas bipartidas e não triviais do grafo. Dessa forma, enquanto que para a matriz laplaciana combinatória, o segundo menor autovalor dá uma medida da conexidade do grafo, o menor autovalor da matriz laplaciana sem sinal estabelece uma medida da *bipartidade* do grafo.

A matriz laplaciana normalizada, introduzida por Chung [12], tem propriedades semelhantes às da matriz laplaciana combinatória e da matriz laplaciana sem sinal. Chung [12] mostrou que, para um grafo sem vértices isolados, todos os autovalores da matriz laplaciana normalizada pertencem ao intervalo $[0, 2]$. Além disso, a multiplicidade de 2 como autovalor dessa matriz é o número de componentes conexas bipartidas e não triviais do grafo e a multiplicidade de 0 como autovalor coincide com o número de componentes conexas do grafo. Dessa forma, um grafo é conexo se, e somente se, o segundo menor autovalor é positivo e, além disso, um grafo conexo é bipartido se, e somente se, o maior autovalor é igual a 2.

Uma das contribuições do nosso trabalho é mostrar que diferentes matrizes de representação de grafos possuem propriedades em comum e podem ser estudadas de maneira mais geral. A nossa principal ferramenta é um algoritmo para localizar os autovalores de uma matriz simétrica qualquer associada a um grafo quando este é uma árvore. Fazendo uso deste algoritmo, mostraremos que podemos obter simultaneamente propriedades espectrais de todas estas matrizes de representação de árvores.

O algoritmo que desenvolvemos estende para uma classe mais geral de matrizes o algoritmo *Diagonalize*, de Jacobs e Trevisan [34], originalmente desenvolvido para a matriz de adjacências de árvores. O algoritmo *Diagonalize* faz a diagonalização da matriz $A + \alpha I$, onde A é a matriz de adjacências de uma árvore T e α é um número real qualquer, e tem por objetivo localizar os autovalores de A em qualquer intervalo real. Este algoritmo tem como característica importante percorrer os vértices do grafo sem necessidade do uso da matriz explicitamente.

O algoritmo de Jacobs e Trevisan tem sido usado em diversos trabalhos, e foi adaptado para outros tipos de matrizes de árvores, tais como a matriz laplaciana combinatória e a matriz laplaciana normalizada, o que permitiu obter algumas propriedades espectrais que descrevemos a seguir.

Em 2011, usando o algoritmo *Diagonalize*, Fritscher *et al.* [20] mostraram que a soma S_k dos k maiores autovalores da matriz laplaciana de uma árvore T com $n \geq 6$ vértices e diâmetro maior ou igual a 4 satisfaz a seguinte relação:

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

Além disso, os autores em [20] demonstraram que a estrela de n vértices tem maior *energia laplaciana* (um invariante introduzido por Gutman e Zhou [26]) entre todas as árvores de n vértices. Nesse mesmo ano, Trevisan *et al.* [46] estabeleceram uma ordem total pela energia laplaciana para todas as árvores de diâmetro 3. Dando continuidade ao trabalho em [20], em 2014, Fritscher *et al.* [21] determinaram as próximas, aproximadamente, \sqrt{n} árvores, depois da estrela, com maior energia laplaciana.

Em 2013, estudamos em nosso trabalho [7] como o número de autovalores menores do que 2 da matriz laplaciana combinatória de uma árvore T com n vértices comporta-se quando T é submetida a uma certa transformação em seus vértices. Fazendo uso do algoritmo de localização de autovalores, obtivemos em [7] que o número de autovalores da matriz laplaciana combinatória de T que são menores do que 2 é pelo menos $\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$. Uma conjectura, proposta por Trevisan *et al.* em [46] é a de que, para qualquer árvore com n vértices, o número de autovalores da matriz laplaciana combinatória de T que são menores do que \bar{d} , onde $\bar{d} = 2 - \frac{2}{n}$ é a média dos graus dos vértices de T , é pelo menos $\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$. Em [7], mostramos que esta conjectura é verdadeira se T é um *caminho* ou uma *centopeia*.

Também em 2013, Jacobs, Trevisan e Tura [35] estenderam o algoritmo *Diagonalize* para calcular o número de autovalores da matriz de adjacências de uma

classe especial de grafos, denominados *grafos threshold*, em um dado intervalo real. Como aplicação, os autores nesse trabalho mostraram que todo autovalor λ , com $\lambda \neq -1$ e $\lambda \neq 0$, de um grafo threshold é simples, e determinaram também qual o grafo threshold com o menor autovalor mínimo.

Em 2014, adaptamos o algoritmo *Diagonalize* para a matriz laplaciana normalizada de uma árvore e, como aplicação deste algoritmo, caracterizamos todas as árvores com até cinco autovalores distintos, verificando que tal quantidade de autovalores distintos está relacionada com o diâmetro dessas árvores. Tais resultados encontram-se em nosso trabalho [8]. Uma motivação para estudar grafos com poucos autovalores distintos é dada por van Dam e Omidi em [17], trabalho no qual os autores afirmam que, em relação à matriz laplaciana normalizada, a maior parte desses grafos não são determinados pelo espectro, o que significa que é difícil distingui-los pelo espectro. Sobre este tipo de matriz de representação de grafos, em [11], Cavers provou que um grafo conexo G com $n \geq 3$ vértices tem exatamente dois autovalores distintos se, e somente se, G é o grafo completo. O autor também caracterizou os grafos com exatamente três autovalores distintos no caso em que esses grafos possuem pelo menos um pendente, enquanto que, em [17], van Dam e Omidi apresentaram uma caracterização dos grafos cuja matriz laplaciana normalizada tem exatamente três autovalores distintos sem restrição no número de vértices. Em nosso trabalho [8], mostramos que entre todas as árvores cuja matriz laplaciana normalizada tem exatamente quatro ou cinco autovalores distintos, não existem duas não isomorfas coespectrais com o mesmo diâmetro, o que significa dizer que todas essas árvores, a menos de isomorfismos, são determinadas pelo espectro.

Após a publicação deste trabalho, percebemos que os resultados que obtivemos em [8] não eram restritos unicamente à matriz laplaciana normalizada de árvores, e poderiam ser estendidos para outras matrizes simétricas associadas a essas mesmas árvores. A partir desta constatação, desenvolvemos um algoritmo que permite localizar os autovalores de qualquer *matriz laplaciana perturbada* de uma

árvore, um tipo de matriz introduzido, em 2001, por Bapat *et al.* [5] e que inclui, como casos particulares, por exemplo, a matriz de adjacências, a matriz laplaciana combinatória, a matriz laplaciana sem sinal e a matriz laplaciana normalizada. O algoritmo que desenvolvemos para matrizes laplacianas perturbadas de árvores constitui uma de nossas principais contribuições neste trabalho, sendo uma ferramenta útil para várias aplicações, algumas das quais apresentamos neste trabalho, além de outros resultados das referências citadas acima que poderiam ser obtidos com o uso do nosso algoritmo.

Uma outra contribuição deste trabalho é apresentar um algoritmo de localização de autovalores para grafos unicíclicos. O algoritmo que desenvolvemos faz também a diagonalização da matriz $A + \alpha I$, onde A é a matriz de adjacências do grafo unicíclico e α é um número real qualquer. O algoritmo que desenvolvemos para grafos unicíclicos por si só é uma ferramenta importante, uma vez que pode levar a obter propriedades do espectro desses grafos, de forma prática e eficiente. Como forma de ilustrar a fácil aplicação deste algoritmo, obtemos propriedades espectrais de certos grafos unicíclicos, chamados de *centopeias unicíclicas*. Entre os resultados obtidos para as centopeias unicíclicas, determinamos a multiplicidade dos autovalores e verificamos também se esses grafos podem ser *integrais*, isto é, se seus autovalores são todos números inteiros. Além disso, com o uso do algoritmo de localização dos autovalores, conseguimos determinar o espectro de todas as centopeias unicíclicas regulares, concluindo que nenhum desses grafos é integral. Tais resultados fazem parte de nosso trabalho [9], que se encontra em preparação. Em [42], Omidi identificou todos os grafos integrais com no máximo dois ciclos (o que inclui árvores e grafos unicíclicos) que não possuem zero como autovalor e, além disso, estabeleceu alguns resultados sobre grafos unicíclicos integrais com exatamente um autovalor zero. Cabe observar que a busca por grafos integrais ou mesmo classes de grafos integrais é um dos problemas estudados em Teoria Espectral de Grafos, conforme apontam Balínska *et al.* em [4].

Queremos ressaltar ainda que ambos os algoritmos apresentados neste trabalho podem ser executados diretamente no grafo, possibilitando, dessa forma, obter informações sobre o espectro sem a necessidade de calcular todas as raízes dos polinômios característicos das matrizes associadas a esse grafo.

O presente trabalho está organizado da forma que descrevemos a seguir.

No Capítulo 2, apresentamos as definições e os resultados necessários da Teoria de Grafos e da Álgebra Linear para compreensão deste trabalho. Também apresentamos as principais matrizes de representação de grafos e mostramos que cada uma delas é um tipo especial de uma matriz laplaciana perturbada. Na última seção, descrevemos o algoritmo desenvolvido por Jacobs e Trevisan [34] para localizar os autovalores de uma árvore em um intervalo dado, explicando o seu funcionamento e execução.

No Capítulo 3, apresentamos o algoritmo que desenvolvemos para localizar os autovalores da matriz de adjacências de um grafo unicíclico em um dado intervalo real. Para ilustrar como este algoritmo pode ser facilmente aplicado para obter algumas propriedades espectrais de grafos unicíclicos, estudamos a multiplicidade dos autovalores das centopeias unicíclicas e o espectro das centopeias unicíclicas regulares.

No Capítulo 4, apresentamos o algoritmo de localização de autovalores que desenvolvemos para ser aplicado a qualquer matriz laplaciana perturbada de uma árvore. Tal algoritmo será uma de nossas principais ferramentas para estudar a multiplicidade dos autovalores e o número de autovalores distintos de árvores de pequenos diâmetros. Entre outros resultados, caracterizamos todas as árvores com até cinco autovalores distintos com respeito às matrizes laplacianas perturbadas estudadas neste capítulo, as quais incluem, como casos particulares, a matriz de adjacências e a matriz laplaciana normalizada.

No Capítulo 5, utilizamos o algoritmo de localização de autovalores do capítulo anterior e uma transformação em árvores, devida à Mohar [41], para obter informações a respeito da distribuição dos autovalores da matriz laplaciana combinatória dessas árvores, determinando inclusive cotas inferiores para o número de autovalores menores do que dois ou, em alguns casos, menores do que a média. Utilizamos também esta transformação em árvores para verificar o que acontece com a multiplicidade do valor médio dos autovalores das matrizes laplacianas perturbadas de espectro simétrico estudadas no Capítulo 4.

Por fim, no Capítulo 6, fazemos um resumo das nossas contribuições e principais resultados obtidos.

2 PRELIMINARES

Neste capítulo, apresentamos a *matriz de adjacências*, a *matriz laplaciana combinatória*, a *matriz laplaciana sem sinal* e a *matriz laplaciana normalizada*, matrizes associadas a grafos amplamente estudadas em Teoria Espectral de Grafos. Apresentamos também a *matriz laplaciana perturbada*, introduzida por Bapat *et al.* em [5]. Mostramos que cada uma das matrizes apontadas neste texto são um caso particular da matriz laplaciana perturbada.

Além disso, apresentamos definições básicas e resultados da Teoria de Grafos e da Álgebra Linear necessários para compreensão deste trabalho. Tal abordagem também é importante para fixarmos a notação que será utilizada ao longo do texto.

Por fim, apresentamos um algoritmo, devido a Jacobs e Trevisan [34], que permite localizar os autovalores da matriz de adjacências de uma árvore em qualquer intervalo real dado.

2.1 Conceitos básicos de Teoria de Grafos

Um *grafo* é uma estrutura constituída por um par ordenado $G = (V, E)$ de conjuntos tais que V é finito e não vazio e E é formado por subconjuntos de dois elementos de V . Os elementos de V são denominados *vértices* e os elementos de E são denominados *arestas*. Denotamos por $|V|$ e $|E|$, respectivamente, o número de vértices e o número de arestas de G . O número de vértices $|V|$ é a ordem de G .

Se $e = \{u, v\} \in E$, dizemos que a aresta e *incide* nos vértices u e v ou, ainda, que e liga u a v e que u e v são as *extremidades* da aresta e . Dois vértices u e v são *adjacentes* se $\{u, v\}$ é uma aresta de G . Neste caso, dizemos também que u e v são *vizinhos*. Um conjunto de vértices é dito *independente* se quaisquer dois elementos do conjunto não são adjacentes.

Neste texto, consideramos unicamente *grafos simples*, isto é, grafos sem laços (arestas ligando vértices a eles mesmos), sem arestas múltiplas (mais de uma aresta ligando os mesmos vértices) e sem orientação.

Dizemos que $G = (V, E)$ é um *grafo com pesos* se, a cada aresta $e \in E$, é associado um número real $\omega(e)$, denominado *peso* da aresta e . Um grafo *sem pesos* também será denominado simplesmente grafo.

Sejam $G = (V, E)$ e $G' = (V', E')$ dois grafos. Dizemos que G e G' são *isomorfos* se existe uma bijeção $\phi : V \rightarrow V'$ tal que $\{u, v\} \in E$ se, e somente se, $\{\phi(u), \phi(v)\} \in E'$. Se $V' \subseteq V$ e $E' \subseteq E$, então dizemos que G' é um *subgrafo* de G . Além disso, dizemos que G' é um *subgrafo induzido* de G se G' é um subgrafo de G e G' contém todas as arestas $\{u, v\} \in E$ para $u, v \in V'$. Se G' é um subgrafo de G com $V' = V$, dizemos que G' é um *subgrafo gerador* de G .

Para um grafo sem pesos, o *grau* de um vértice $v \in V$, denotado por $d(v)$ ou d_v , é o número de arestas que incidem em v . Um vértice de grau 0 é dito um vértice *isolado*. Um vértice *pendente* é um vértice de grau 1. Um vértice *quase-pendente* é um vértice adjacente a um vértice pendente. Uma aresta incidente a um pendente é dita *aresta pendente*.

A soma dos graus dos vértices de um grafo G sem pesos relaciona-se com o número de arestas de G da seguinte forma.

Proposição 2.1.1. *Para todo grafo $G = (V, E)$,*

$$\sum_{v \in V} d(v) = 2 \cdot |E|.$$

Demonstração. Cada aresta contribui com duas unidades para a soma dos graus dos vértices, pois é incidente a exatamente dois vértices. Logo, a soma dos graus dos vértices é o dobro do número de arestas. \square

Dizemos que um grafo é r -regular se todos os vértices têm grau r . A Figura 2.1 mostra um grafo 3-regular.

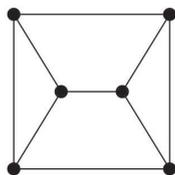


Figura 2.1: Grafo 3-regular

Um grafo é dito *completo* se quaisquer dois vértices distintos são adjacentes. Um grafo completo com n vértices é $(n - 1)$ -regular e é denotado por K_n . A Figura 2.2 mostra um K_5 .

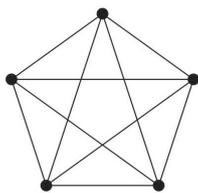


Figura 2.2: K_5

O *grafo complementar* de G é o grafo \overline{G} tal que $V(\overline{G}) = V(G)$ e, para quaisquer $u, v \in V(\overline{G})$, $\{u, v\} \in E(\overline{G})$ se, e somente se, $\{u, v\} \notin E(G)$.

Um *passeio* em um grafo simples $G = (V, E)$ é uma sequência finita de vértices v_1, v_2, \dots, v_t com $\{v_i, v_{i+1}\} \in E$, para todo $i, 1 \leq i \leq t-1$. Um *caminho* é um passeio em que todos os vértices são distintos. Dizemos que um caminho v_1, v_2, \dots, v_t liga o vértice v_1 ao vértice v_t . Dizemos que um passeio v_1, v_2, \dots, v_t é *fechado* (resp. *aberto*) se $v_1 = v_t$ (resp. $v_1 \neq v_t$). Um *ciclo* é um passeio fechado v_1, v_2, \dots, v_t em que $v_1 = v_t$ e $v_i \neq v_j$ para todos os demais i, j com $i \neq j$. O *comprimento* de um passeio é o número de arestas que nele ocorrem. O caminho com n vértices é denotado por

P_n e o ciclo com n vértices é denotado por \mathcal{C}_n . Podemos observar que todo ciclo é um grafo 2-regular. A Figura 2.3 mostra um ciclo \mathcal{C}_4 e um caminho P_5 .

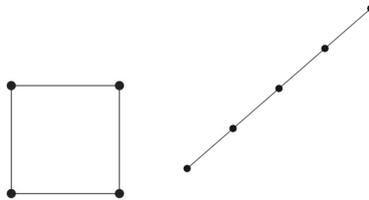


Figura 2.3: \mathcal{C}_4 e P_5

A *distância* entre dois vértices $u, v \in V$, denotada por $d(u, v)$, é o comprimento do menor caminho que liga u a v (se tal caminho não existe, escrevemos $d(u, v) = \infty$). O máximo das distâncias entre dois vértices de G é chamado *diâmetro* de G , denotado por $d(G)$.

Um grafo G é dito *conexo* se qualquer par de vértices de G é ligado por ao menos um caminho. Caso contrário, o grafo é denominado *desconexo*. Dizemos que G' é uma *componente conexa* de G se G' é um subgrafo conexo maximal de G , isto é, G' é um subgrafo conexo de G e não existe um subgrafo conexo H de G tal que G' é subgrafo de H e $H \neq G'$.

Uma *árvore* é um grafo conexo e sem ciclos. Um grafo em que todas as componentes conexas são árvores é chamado de *floresta*. Numa árvore, um vértice pendente também é chamado de *folha*. Se uma árvore T com n vértices tem $n - 1$ arestas pendentes, então T é uma *estrela*. A estrela com n vértices é denotada por S_n . A Figura 2.4 mostra uma estrela com 5 vértices.

Teorema 2.1.2. *Um grafo conexo com n vértices é uma árvore se, e somente se, possui exatamente $n - 1$ arestas.*

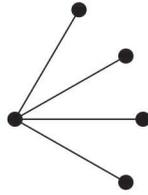


Figura 2.4: S_5

Demonstração. O teorema certamente é verdadeiro para o grafo com apenas um vértice e, portanto, nenhuma aresta. Vamos agora assumir que $n > 1$ e que o teorema é válido para grafos conexos cujo número de vértices é menor do que n .

Seja T uma árvore com n vértices. Como $n > 1$, T possui pelo menos uma aresta. Além disso, como T não contém ciclos, a retirada de uma aresta $e = \{u, v\}$ de T separa o vértice u do vértice v e teremos duas componentes conexas T_1 e T_2 com n_1 e n_2 vértices, respectivamente, tais que $n = n_1 + n_2$. Ambas componentes são árvores, uma vez que são conexas e a retirada de aresta não cria ciclos. Por hipótese, o número de arestas de T_1 é $n_1 - 1$ e o número de arestas de T_2 é $n_2 - 1$. Acrescentando a aresta e , concluímos que o número de arestas de T é, portanto,

$$(n_1 - 1) + (n_2 - 1) + 1 = n - 1.$$

Consideramos agora um grafo G conexo com n vértices e $n - 1$ arestas. Afirmamos que no mínimo um vértice de G tem grau igual a 1. De fato, se isto não fosse verdade, todos os vértices de G teriam grau maior ou igual a 2 e, assim, a soma dos graus seria, no mínimo, $2n$. Pela Proposição 2.1.1, a soma dos graus dos vértices é o dobro do número de arestas e, portanto, o número de arestas de G seria, no mínimo, n , contradição. Podemos considerar, então, um vértice v de G com grau igual a 1. Removendo-se a aresta pendente e que liga v ao grafo G , e removendo também o vértice v , temos um grafo conexo G' com $n - 1$ vértices e $n - 2$ arestas. Por hipótese, G' é uma árvore. Adicionando o vértice v e a aresta e à árvore G' ,

obtemos um grafo conexo e sem ciclos, ou seja, uma árvore, uma vez que v tem grau 1. Portanto, G é uma árvore, o que completa a demonstração do teorema. \square

Corolário 2.1.3. *Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Se $m > n - 1$, então G contém pelo menos um ciclo.*

Demonstração. Sejam G_1, G_2, \dots, G_k as componentes conexas de G . Sejam n_i e m_i , respectivamente, o número de vértices e o número de arestas de G_i , para todo i , $1 \leq i \leq k$. Temos que $\sum n_i = n$ e $\sum m_i = m \geq n$. Portanto, existe algum i tal que $m_i \geq n_i$. Por outro lado, G_i é conexo, e como possui $m_i > n_i - 1$ arestas, pelo Teorema 2.1.2, G_i não é uma árvore. Logo, G_i contém pelo menos um ciclo. \square

Grafos *unicíclicos* são grafos conexos que contêm um único ciclo.

Corolário 2.1.4. *Um grafo conexo com n vértices é unicíclico se e somente se possui exatamente n arestas.*

Demonstração. Seja G um grafo unicíclico de ordem n . Seja e uma aresta do único ciclo de G e consideramos o grafo $H = G - e$ obtido de G removendo-se a aresta e . Temos que H é conexo. De fato: qualquer caminho ligando dois vértices de G contendo a aresta e pode ser substituído em H por um outro caminho usando as outras arestas do ciclo. Além disso, como G tem apenas um ciclo, H não possui ciclos. Assim, H é uma árvore com n vértices. Pelo Teorema 2.1.2, H tem $n - 1$ arestas. Logo, G tem n arestas.

Reciprocamente, seja G um grafo conexo com n vértices e n arestas. Pelo Corolário 2.1.3, G contém pelo menos um ciclo. Vamos mostrar que G contém um único ciclo. Se C é um ciclo em G , tomamos uma aresta e de C e consideramos o grafo $H = G - e$. Temos que H é conexo e possui $n - 1$ arestas. Pelo Teorema 2.1.2, H é uma árvore. Adicionando a aresta e à árvore H , criamos exatamente um ciclo. De fato: como quaisquer dois vértices de uma árvore são ligados por um único

caminho, o caminho ligando estes dois vértices juntamente com a aresta incidente a eles forma um ciclo. Portanto, G é unicíclico. \square

Seja $k \geq 2$ um número inteiro. Um grafo $G = (V, E)$ é dito k -partido se o conjunto V de vértices de G pode ser particionado em k subconjuntos não-vazios e dois a dois disjuntos, tal que não há vértices adjacentes em um mesmo subconjunto da partição de V . Assim, $V = V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_k$ com $V_i \cap V_j = \emptyset$ para todo $i \neq j$, de modo que toda aresta de G é da forma $\{x, y\}$ com $x \in V_i$, para algum i , e $y \in V_j$, para algum $j \neq i$. Um grafo 2-partido é chamado de *grafo bipartido*.

A seguinte propriedade caracteriza um grafo bipartido.

Teorema 2.1.5. *Um grafo é bipartido se e somente se não contém ciclos de comprimento ímpar ligando seus vértices .*

Demonstração. Seja $G = (V_1 \cup V_2, E)$ um grafo bipartido. Suponhamos por contradição que existe um ciclo $v_1, v_2, \dots, v_t, v_1$ em G com t ímpar. Sem perda de generalidade, podemos supor que $v_1 \in V_1$. Neste caso, como G é bipartido, é fácil ver que $v_i \in V_1$ se i é ímpar e $v_i \in V_2$ se i é par. Por outro lado, $\{v_t, v_1\}$ é uma aresta de G com ambas extremidades em V_1 , o que é uma contradição com o fato de que G é bipartido. Portanto, um grafo bipartido não contém ciclo de comprimento ímpar.

Reciprocamente, seja $G = (V, E)$ um grafo que não contém ciclos de comprimento ímpar. É suficiente considerar o caso em que G é conexo, pois se cada componente conexa de um grafo é bipartida, então, claramente, todo o grafo é bipartido. Escolhemos um vértice arbitrário $v \in V$ e definimos $V_1 = \{v\} \cup \{u \mid d(u, v) \text{ é par}\}$, onde $d(u, v)$ denota a distância entre dois vértices u e v de G . Definimos $V_2 = V \setminus V_1$. Afirmamos que a partição $V = V_1 \cup V_2$ caracteriza que G é bipartido. Suponhamos, por contradição, que existe um aresta $\{u, w\} \in E$ com $u, w \in V_1$. Logo, $d(u, v)$ e $d(w, v)$ são ambos pares. Vamos denotar por P_{uv} e P_{vw} os caminhos mais curtos ligando u a v , e v a w , respectivamente. Então, o passeio fechado dado por

$P_{vw}, \{w, u\}, P_{uw}$ tem comprimento igual a $d(v, w) + 1 + d(u, v)$, o qual é ímpar, contradição. Portanto, não existe aresta $\{u, w\} \in E$ com $u, w \in V_1$. O caso em que $u, w \in V_2$ é análogo. Segue-se, portanto, que G é bipartido. \square

Corolário 2.1.6. *Toda a árvore é um grafo bipartido.*

Um grafo $G = (V, E)$ é dito *bipartido completo* se existe uma partição de V em subconjuntos disjuntos V_1 e V_2 tais que não há arestas entre os vértices de V_1 nem entre os vértices de V_2 e cada vértice de V_1 é adjacente a cada vértice de V_2 . Se $|V_1| = p$ e $|V_2| = q$, escrevemos $G = K_{p,q}$. A Figura 2.5 apresenta o grafo bipartido completo $K_{3,2}$. Note que a estrela S_n é o grafo bipartido completo $K_{1,n-1}$.

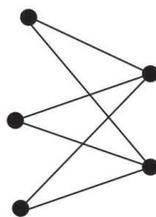


Figura 2.5: $K_{3,2}$

2.2 Conceitos básicos de Álgebra Linear

Nesta seção, trazemos algumas definições e resultados de Álgebra Linear que são utilizados ao longo deste trabalho, além de fixarmos a notação envolvendo matrizes e vetores. Para mais detalhes e demonstrações dos resultados apresentados, indicamos o livro de Horn e Johnson [29].

Usaremos a notação I_n para a matriz identidade de ordem n , $\mathbf{1}_n$ para o vetor coluna de comprimento n com todas as entradas iguais a 1, $\mathbf{0}_{m \times n}$ para a matriz de entradas nulas e ordem $m \times n$ e $\mathbf{0}_n$ para o vetor coluna de comprimento n com todas as entradas nulas. Contudo, omitiremos a ordem da matriz na notação sempre que for possível entendê-la claramente do contexto.

Seja A uma matriz real de ordem $n \times n$. Os *autovalores* de A são os valores complexos de λ que satisfazem a equação matricial $Av = \lambda v$, para $v \in \mathbb{C}^n, v \neq \mathbf{0}$. Neste caso, dizemos que v é um *autovetor* de A associado ao autovalor λ . Pode-se ver facilmente que os autovalores de A são as raízes do *polinômio característico* de A , dado pelo determinante de $\lambda I - A$. A *multiplicidade algébrica* de um autovalor λ de A é a multiplicidade de λ como raiz do polinômio característico da matriz A . O *espectro* de A é o conjunto dos autovalores de A munidos de suas multiplicidades algébricas. O conjunto dos autovetores associados ao autovalor λ é o *autoespaço* de λ . A *multiplicidade geométrica* de λ é a dimensão do seu autoespaço e é menor ou igual a sua multiplicidade algébrica (veja [29, Teorema 1.4.10]). Além disso, é fácil ver que, se A é uma matriz quadrada de ordem n com autovalores $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, então, para quaisquer $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, os autovalores de $\alpha I_n + \beta A$ são $\alpha + \beta \lambda_1, \dots, \alpha + \beta \lambda_n$, com os mesmos autovetores de A .

Uma matriz quadrada A de ordem n é *não singular* (ou *invertível*) se existe uma matriz B de mesma ordem para a qual $AB = BA = I_n$. Neste caso, B é chamada de *matriz inversa* de A e é denotada por A^{-1} .

Sejam A e B duas matrizes quadradas de ordem n . Dizemos que B é *semelhante* à matriz A se existe uma matriz não singular S de ordem $n \times n$ tal que $B = S^{-1}AS$. A transformação $A \rightarrow S^{-1}AS$ é chamada *transformação de semelhança* pela *matriz de semelhança* S .

Os próximos resultados mostram que matrizes semelhantes possuem o mesmo espectro.

Teorema 2.2.1. *Sejam A e B matrizes quadradas de ordem n . Se B é semelhante a A , então A e B possuem o mesmo polinômio característico.*

Demonstração. Se A e B são semelhantes, então existe uma matriz não singular S tal que $S^{-1}AS = B$. Logo, para todo λ , temos que

$$\begin{aligned} \det(\lambda I - B) &= \det(\lambda S^{-1}S - S^{-1}AS) = \det(S^{-1}(\lambda I - A)S) \\ &= \det S^{-1} \det(\lambda I - A) \det S = (\det S)^{-1} \det S \det(\lambda I - A) \\ &= \det(\lambda I - A). \quad \square \end{aligned}$$

Corolário 2.2.2. *Se A e B são semelhantes, então elas possuem os mesmos autovalores, contando multiplicidades.*

Dizemos que uma matriz A é *diagonalizável* se ela é semelhante a uma matriz diagonal.

Dada uma matriz A de ordem $m \times n$, a *transposta* de A é a matriz de ordem $n \times m$, denotada por A^T , cujas colunas são as linhas correspondentes de A . Dizemos que A é *simétrica* se $A = A^T$.

Teorema 2.2.3 (Teorema de Cayley-Hamilton). *Se A é uma matriz quadrada de ordem n e $p(\lambda)$ é o polinômio característico de A , então $p(A) = \mathbf{0}$.*

Demonstração. Veja [29, Teorema 2.4.2]. \square

O *polinômio minimal* p_m de A é o polinômio mônico de menor grau em $\mathbb{C}[x]$ para o qual $p_m(A) = \mathbf{0}$.

Teorema 2.2.4. *Seja A uma matriz quadrada de ordem n . Então:*

- (i) *A é diagonalizável se, e somente se, toda raiz do polinômio minimal de A é simples.*
- (ii) *Se A é real e simétrica, então A é diagonalizável.*

Demonstração. Veja [29, Teorema 2.5.6 e Corolário 3.3.10]. \square

Corolário 2.2.5. *Se A é real e simétrica, então todos os autovalores de A são números reais.*

O *traço* de uma matriz quadrada A , denotado por $tr(A)$, é a soma das entradas da diagonal de A . É bem conhecido o fato de que $tr(A)$ é igual à soma dos autovalores de A , incluindo multiplicidades. O resultado a seguir, devido a Schur (1923), estabelece ainda outras relações entre as entradas da diagonal de A com os seus autovalores, no caso em que A é real e simétrica.

Teorema 2.2.6 (Schur). *Seja A uma matriz real e simétrica de ordem n . Se $d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_n$ e $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ denotam as entradas da diagonal de A e os autovalores de A , respectivamente, então*

$$\sum_{i=1}^k d_i \leq \sum_{i=1}^k \lambda_i, \quad \text{para } k = 1, \dots, n-1, \quad \text{e} \quad \sum_{i=1}^n d_i = \sum_{i=1}^n \lambda_i.$$

Demonstração. Veja [29, Teorema 4.3.26]. \square

Dizemos que uma matriz real e simétrica A de ordem n é *positiva semidefinida* se $x^T A x \geq 0$, para todo $x \in \mathbb{R}^n$.

Teorema 2.2.7. *Seja A uma matriz real e simétrica de ordem n . Então as seguintes afirmações são equivalentes:*

- (i) A é positiva semidefinida.
- (ii) Todos os autovalores de A são não negativos.
- (iii) Existe uma matriz S tal que $A = SS^T$.

Demonstração. Veja [29, Teoremas 7.1.6 e 7.2.1]. \square

Dizemos que duas matrizes A e B são *congruentes* se existe uma matriz não singular P tal que $A = P^T B P$.

A *inércia* de uma matriz A real e simétrica, denotada por $i(A)$, é a terna ordenada (n_+, n_-, n_0) , onde n_+ (resp. n_- e n_0) é o número de autovalores positivos (resp. negativos e nulos) de A .

Apresentamos a seguir uma propriedade importante envolvendo congruência de matrizes simétricas, chamada de *Lei da Inércia de Sylvester*, cuja prova pode ser encontrada em [29, Teorema 4.5.8].

Teorema 2.2.8 (Lei da Inércia de Sylvester). *Sejam A e B matrizes reais e simétricas de mesma ordem. A e B são congruentes se e somente se $i(A) = i(B)$.*

Assim, duas matrizes reais simétricas de mesma ordem são congruentes se e somente se elas têm o mesmo número de autovalores positivos e o mesmo número de autovalores negativos.

2.3 Matrizes associadas a grafos

A seguir apresentamos as principais matrizes simétricas que podem ser associadas a grafos.

Seja $G = (V, E)$ um grafo sem pesos e com n vértices. A *matriz de adjacências* $A = A(G)$ de G é a matriz quadrada de ordem n cujas entradas são

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } \{v_i, v_j\} \in E, \text{ para } v_i, v_j \in V, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Seja D_G a matriz diagonal dos graus dos vértices de G , ou seja, cada entrada d_{ii} da matriz diagonal D_G é dada por $d_{ii} = d(v_i)$, para $1 \leq i \leq n$, e seja A a matriz de adjacências de G . A matriz

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

é chamada de *matriz laplaciana combinatória* (ou simplesmente *matriz laplaciana*) do grafo G .

A *matriz laplaciana sem sinal* de G é definida por

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

Em 1997, Chung [12] introduziu a *matriz laplaciana normalizada*, que tem sido muito estudada nos últimos anos. A matriz laplaciana normalizada de G , representada por $\mathcal{L}(G)$, é matriz quadrada de ordem n com entradas

$$\ell_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \text{ e } d_i > 0, \\ -\frac{1}{\sqrt{d_i \cdot d_j}}, & \text{se } \{v_i, v_j\} \in E, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

onde d_i denota o grau do vértice $v_i \in V$.

Se G não tem vértices isolados, então é fácil ver que $\mathcal{L}(G)$ relaciona-se com as matrizes laplaciana combinatória (L) e de adjacências (A) das seguintes formas:

$$\mathcal{L}(G) = D_G^{-1/2} L D_G^{-1/2}, \quad (2.1)$$

$$= D_G^{-1/2} (D_G - A) D_G^{-1/2}, \quad (2.2)$$

$$= I - D_G^{-1/2} A D_G^{-1/2}. \quad (2.3)$$

Exemplo 2.3.1. Para o grafo da Figura 2.6, as matrizes de adjacências (A), laplaciana combinatória (L), laplaciana sem sinal (Q) e laplaciana normalizada (\mathcal{L}) são dadas por:

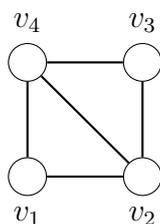


Figura 2.6: Grafo do Exemplo 2.3.1

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad L = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 3 \end{bmatrix},$$

$$Q = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 3 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 3 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{L} = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & 1 & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{3} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} & 1 & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & 1 \end{bmatrix}.$$

As matrizes apresentadas anteriormente também são definidas para um grafo com pesos, geralmente considerados positivos. Consideremos então um grafo $G = (V, E)$ munido de uma *função peso de arestas* $\omega : E \rightarrow \mathbb{R}^+$, que a cada aresta $e_{ij} = \{v_i, v_j\} \in E$, associa o número real positivo $\omega(e_{ij}) = \omega_{ij}$, *peso* da aresta e_{ij} . Neste caso, a matriz de adjacências $A(G)$ correspondente é dada por $A(G) = (a_{ij})$, onde

$$a_{ij} = \begin{cases} \omega_{ij}, & \text{se } \{v_i, v_j\} \in E, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Apesar da função peso de arestas estar definida apenas para o conjunto E de arestas do grafo G , será conveniente definir $\omega_{ij} = 0$ se $\{v_i, v_j\} \notin E$. Neste contexto, o *grau* de um vértice $v_i \in V$ é definido como sendo a soma dos pesos das arestas incidentes em v_i , ou seja,

$$d(v_i) = \sum_{j \neq i} \omega_{ij}.$$

Assim, a *matriz laplaciana combinatória* de um grafo G com pesos positivos, $L(G) = D_G - A(G)$, onde D_G e $A(G)$ são as matrizes diagonal dos graus

dos vértices de G e de adjacências de G , correspondentes, tem entradas:

$$\ell_{ij} = \begin{cases} d(v_i), & \text{se } i = j, \\ -\omega_{ij}, & \text{se } \{v_i, v_j\} \in E, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

E a *matriz laplaciana sem sinal* de G , $Q(G) = D_G + A(G)$, tem entradas

$$q_{ij} = \begin{cases} d(v_i), & \text{se } i = j, \\ \omega_{ij}, & \text{se } \{v_i, v_j\} \in E, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

A *matriz laplaciana normalizada* $\mathcal{L}(G)$ de G é a matriz com entradas

$$\ell_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \text{ e } d_i > 0 \\ -\frac{\omega_{ij}}{\sqrt{d_i \cdot d_j}}, & \text{se } \{v_i, v_j\} \in E, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

onde d_i denota o grau do vértice $v_i \in V$.

Da mesma forma que em (2.1), temos que se G não tem vértices isolados, então

$$\mathcal{L}(G) = D_G^{-1/2}(D_G - A(G))D_G^{-1/2}.$$

É importante observar que se considerarmos um grafo sem pesos como um grafo em que todas as arestas têm peso igual a 1, então as definições das matrizes para grafos com pesos coincidem com aquelas apresentadas para grafos sem pesos.

Exemplo 2.3.2. *Considere G o grafo com pesos nas arestas, como indicado na Figura 2.7. Assim, as matrizes de adjacências $A(G)$, laplaciana combinatória $L(G)$, laplaciana sem sinal $Q(G)$ e laplaciana normalizada $\mathcal{L}(G)$ de G são dadas por:*

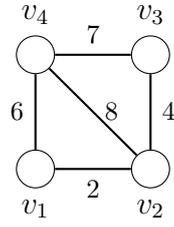


Figura 2.7: Grafo do Exemplo 2.3.2

$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & 6 \\ 2 & 0 & 4 & 8 \\ 0 & 4 & 0 & 7 \\ 6 & 8 & 7 & 0 \end{bmatrix}, \quad L(G) = \begin{bmatrix} 8 & -2 & 0 & -6 \\ -2 & 14 & -4 & -8 \\ 0 & -4 & 11 & -7 \\ -6 & -8 & -7 & 21 \end{bmatrix},$$

$$Q(G) = \begin{bmatrix} 8 & 2 & 0 & 6 \\ 2 & 14 & 4 & 8 \\ 0 & 4 & 11 & 7 \\ 6 & 8 & 7 & 21 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{L}(G) = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{2\sqrt{7}} & 0 & -\frac{3}{\sqrt{42}} \\ -\frac{1}{2\sqrt{7}} & 1 & -\frac{4}{\sqrt{154}} & -\frac{8}{7\sqrt{6}} \\ 0 & -\frac{4}{\sqrt{154}} & 1 & -\frac{7}{\sqrt{231}} \\ -\frac{3}{\sqrt{42}} & -\frac{8}{7\sqrt{6}} & -\frac{7}{\sqrt{231}} & 1 \end{bmatrix}.$$

Em [5], Bapat *et al.* definiram a *matriz laplaciana perturbada* para um grafo com pesos positivos, a qual inclui várias das outras matrizes como casos particulares.

Dada uma matriz diagonal real D , a *matriz laplaciana perturbada* de G com respeito a D , denotada por $\mathcal{L}(G)$, é definida como sendo a matriz

$$\mathcal{L}(G) = D - A(G).$$

Observa-se desta maneira que se D é matriz diagonal D_G dos graus dos vértices de G , então $\mathcal{L}(G)$ coincide com a matriz laplaciana combinatória de

G . Portanto, a matriz laplaciana combinatória é um tipo de matriz laplaciana perturbada.

Também podemos observar que se $D = \mathbf{0}$, então a matriz laplaciana perturbada é simplesmente $-A(G)$. Outro caso, se $D = -D_G$, é a matriz $-Q(G)$, onde $Q(G)$ é a matriz laplaciana sem sinal de G .

A matriz laplaciana normalizada de um grafo G que não possui vértices isolados também pode ser vista como uma matriz laplaciana perturbada, embora não o seja por definição. O que ocorre na verdade é que $\mathcal{L}(G)$ é uma matriz laplaciana perturbada de um grafo G' , o qual possui os mesmos vértices e as mesmas arestas do que G , contudo, com pesos modificados nas arestas. Se ω_{ij} é o peso da aresta e_{ij} de G , então o peso desta mesma aresta e_{ij} de G' é dado por $\omega'_{ij} = \frac{\omega_{ij}}{\sqrt{d_i \cdot d_j}}$ e, assim, temos que $\mathcal{L}(G) = I - D_G^{-1/2} A(G) D_G^{-1/2} = I - A(G')$, ou seja, $\mathcal{L}(G)$ é uma matriz laplaciana perturbada de G' com diagonal $D = I$. Em particular, a matriz laplaciana normalizada de um grafo G sem pesos é uma matriz laplaciana perturbada de um grafo G' cujas arestas tem pesos dados por $\omega'_{ij} = \frac{1}{\sqrt{d_i \cdot d_j}}$.

Na Seção 4.1 deste trabalho, apresentamos propriedades espectrais de matrizes laplacianas perturbadas com respeito a uma matriz diagonal $D = \mu I$, para algum $\mu \in \mathbb{R}$, as quais incluem as matrizes de adjacências e a matriz laplaciana normalizada como casos particulares. Assim, mostramos algumas propriedades que essas matrizes possuem em comum e que serão importantes para a obtenção dos resultados apresentados no decorrer do Capítulo 4.

2.4 Espectros de grafos

Na seção anterior vimos que a matriz da adjacências (A), a matriz laplaciana combinatória (L), a matriz laplaciana sem sinal (Q) e a matriz laplaciana normalizada (\mathcal{L}) são exemplos de matrizes associadas a um grafo.

Para cada matriz quadrada M associada a um grafo G , podemos calcular seu polinômio característico e seus respectivos autovalores. Dado um grafo G , chamamos o polinômio

$$p_M(\lambda) = \det(\lambda I - M)$$

de *polinômio característico de G associado a M* . Além disso, chamamos o espectro da matriz M associada a G de *M -espectro de G* . No caso em que M é a matriz de adjacências A de G , chamamos o *A -espectro de G* simplesmente de *espectro de G* . Usaremos a notação $\lambda^{(m)}$ para indicar que λ aparece no espectro com multiplicidade m .

Uma vez que estamos considerando grafos simples e sem orientação, todas as matrizes de representação desses grafos são reais e simétricas e, portanto, todos os seus autovalores são reais (Corolário 2.2.5).

O polinômio característico e, conseqüentemente, o espectro de um grafo G associado a uma matriz quadrada M são únicos. É importante observar que, embora as matrizes de representação de um grafo dependam da numeração dos seus vértices, se duas matrizes M_1 e M_2 são associadas a diferentes numerações dos vértices de um grafo G , então M_1 e M_2 possuem o mesmo polinômio característico. Isto porque, neste caso, existe uma matriz de permutação P tal que $M_1 = P^{-1}M_2P$, e, portanto, M_1 e M_2 são semelhantes. Conseqüentemente, pelo Teorema 2.2.1, M_1 e M_2 possuem o mesmo polinômio característico e, por conseguinte, o mesmo espectro. Assim, são únicos os polinômios característicos de cada matriz A, L, Q e \mathcal{L} de G , independentemente da numeração dos vértices de G , e, portanto, o espectro de G associado a cada uma dessas matrizes está bem definido.

Exemplo 2.4.1. *Para o grafo G sem pesos da Figura 2.6, o A -espectro é dado por $\{0, -1, \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{17}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{17}\}$, o L -espectro é dado por $\{0, 2, 4^{(2)}\}$, o Q -espectro é dado por $\{3 + \sqrt{5}, 3 - \sqrt{5}, 2^{(2)}\}$ e o \mathcal{L} -espectro é dado por $\{0, 1, \frac{4}{3}, \frac{5}{3}\}$.*

O resultado a seguir relaciona, para grafos bipartidos, o espectro da matriz laplaciana e o espectro da matriz laplaciana sem sinal.

Teorema 2.4.2. *Se G é um grafo bipartido, o espectro da matriz laplaciana sem sinal de G é igual ao espectro da matriz laplaciana combinatória de G .*

Demonstração. Se $G = G(V_1 \cup V_2, E)$ é um grafo bipartido de ordem n , com $|V_1| = p$, $|V_2| = q$, e $n = p + q$, podemos escrever a matriz de adjacências $A = A(G)$ como

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

onde $B_{p \times q}$ representa as adjacências dos vértices em V_1 com os vértices em V_2 . Seja $U = (u_{ij})$ a matriz diagonal de ordem n tal que $u_{ii} = 1$, se $1 \leq i \leq p$, e $u_{ii} = -1$, se $p + 1 \leq i \leq p + q$. É fácil ver que $U = U^{-1}$. Além disso, temos que

$$UAU^{-1} = \begin{bmatrix} I_p & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -I_q \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & B \\ B^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_p & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -I_q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & -B \\ -B^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} = -A.$$

Portanto, para $L = D_G - A$ e $Q = D_G + A$, temos que

$$ULU^{-1} = U(D_G - A)U^{-1} = UD_GU^{-1} - UAU^{-1} = D_GUU^{-1} - (-A) = D_G + A = Q.$$

Logo, L e Q são semelhantes e, portanto, pelo Teorema 2.2.1, L e Q possuem o mesmo polinômio característico, do qual segue o resultado. \square

Para algumas classes de grafos, os espectros com respeito a matriz de adjacências, matriz laplaciana combinatória, matriz laplaciana sem sinal e matriz laplaciana normalizada são bem conhecidos e são apresentados na Tabela 2.1.

Grafo	A -espectro	L -espectro	Q -espectro	\mathcal{L} -espectro
K_n	$(-1)^{(n-1)}, n-1$	$0, n^{(n-1)}$	$(n-2)^{(n-1)}, 2n-2$	$0, \left(\frac{n}{n-1}\right)^{(n-1)}$
$K_{p,q}$	$\pm\sqrt{pq}, 0^{(p+q-2)}$	$0, p^{(q-1)}, q^{(p-1)}, p+q$	$0, p^{(q-1)}, q^{(p-1)}, p+q$	$0, 1^{(p+q-2)}, 2$
P_n	$2 \cos\left(\frac{\pi i}{n+1}\right),$ $i = 1, 2, \dots, n$	$2 - 2 \cos\left(\frac{\pi i}{n}\right),$ $i = 0, 1, \dots, n-1$	$2 - 2 \cos\left(\frac{\pi i}{n}\right),$ $i = 0, 1, \dots, n-1$	$1 - \cos\left(\frac{\pi i}{n-1}\right),$ $i = 0, 1, \dots, n-1$
\mathcal{C}_n	$2 \cos\left(\frac{2\pi i}{n}\right),$ $i = 0, 1, \dots, n-1$	$2 - 2 \cos\left(\frac{2\pi i}{n}\right),$ $i = 0, 1, \dots, n-1$	$2 + 2 \cos\left(\frac{2\pi i}{n}\right),$ $i = 0, 1, \dots, n-1$	$1 - \cos\left(\frac{2\pi i}{n}\right),$ $i = 0, 1, \dots, n-1$

Tabela 2.1: Alguns grafos especiais e seus espectros

Como já citado nesse texto, diferentemente da matriz de adjacências, cada uma das matrizes L, Q e \mathcal{L} é positiva semidefinida, e, portanto, possui somente autovalores não negativos.

Há uma outra maneira de definir a matriz laplaciana combinatória de um grafo G , a qual possibilita concluir que $L(G)$ é uma matriz positiva semidefinida.

Suponhamos que a cada aresta de G é dada uma orientação, a qual pode ser feita arbitrariamente. Neste caso, cada aresta é um par ordenado (u, v) de vértices u, v de G de modo que se $u \neq v$, então $(u, v) \neq (v, u)$ e apenas um entre estes dois pares pode ser uma aresta de G . Assim, se G é um grafo de n vértices e m arestas, a *matriz S de incidência com respeito a uma orientação dada* é a matriz de ordem $n \times m$ cujas entradas são dadas por:

$$s_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } e_j = (v_k, v_\ell) \text{ e } i = k \\ -1, & \text{se } e_j = (v_k, v_\ell) \text{ e } i = \ell \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

A escolha dos sinais em S também pode ser feita arbitrariamente, contanto que em cada coluna de S (correspondente a uma aresta de G) exista exatamente uma entrada positiva e uma negativa. Não é difícil provar que $L(G) = SS^T$. Logo, pelo Teorema 2.2.7, $L(G)$ é positiva semidefinida e, portanto, seus autovalores são não

negativos. Observamos que, embora tenha-se dado uma orientação a cada aresta de G para definir a matriz S , a matriz $L(G)$ é independente de orientação.

Exemplo 2.4.3. *Seja G o grafo cujo conjunto de vértices é $V = \{v_1, v_2, v_3, v_4\}$ e cujas arestas, segundo uma orientação dada, são $e_1 = (v_1, v_2)$, $e_2 = (v_1, v_3)$, $e_3 = (v_1, v_4)$, $e_4 = (v_2, v_3)$ e $e_5 = (v_3, v_4)$. Então*

$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

e

$$L(G) = SS^T = \begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

É fácil ver que $\mathbf{1}$ é um autovetor de $L(G)$ com autovalor 0, uma vez que a soma de todas as entradas de cada linha de $L(G)$ é igual a 0. Assim, se o grafo G tem n vértices, assumimos que os autovalores de $L(G)$ são

$$0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n.$$

Além disso, a matriz $L(G)$ possui o valor dos graus dos vértices de G em sua diagonal principal e, portanto, pela Proposição 2.1.1, possui traço igual a $2m$, onde m é o número de arestas de G . Como a soma dos autovalores é igual ao traço da matriz, segue-se que

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

Exemplo 2.4.4. *O espectro da matriz laplaciana combinatória da estrela S_n pode ser obtido exibindo-se os autovetores. Lembramos que $S_n = K_{1,n-1}$ é o grafo bipartido completo com $n - 1$ pendentos e um vértice de grau $n - 1$ adjacente a todos*

os $n - 1$ pendentes. O polinômio característico de S_n associado à matriz laplaciana combinatória $L = L(G)$ é dado por $p_L(\lambda) = \lambda(\lambda - n)(\lambda - 1)^{n-2}$. De fato: se ordenarmos os vértices de S_n de modo que v_n seja o vértice de grau $n - 1$, pode-se verificar facilmente que $(-1, -1, \dots, -1, n - 1)$ é um autovetor de $L(G)$ correspondente ao autovalor n , enquanto que

$$(1, -1, 0, \dots, 0, 0), (0, 1, -1, 0, \dots, 0, 0), \dots, (0, 0, \dots, 0, 1, -1, 0)$$

formam um conjunto de $n - 2$ autovetores linearmente independentes correspondentes ao autovalor 1 . Além disso, já sabemos que $\mathbf{1}$ é um autovetor de $L(G)$ com autovalor 0 . Conclui-se assim que o L -espectro de S_n é dado por $\{0, 1^{(n-2)}, n\}$. Podemos notar ainda que a soma dos autovalores de S_n é igual a $2(n - 1)$, que é igual ao dobro do número de arestas de S_n , uma vez que S_n é uma árvore e, portanto, possui $n - 1$ arestas (Teorema 2.1.2).

A seguir enunciamos alguns resultados sobre o espectro da matriz laplaciana combinatória de um grafo. A demonstração destes resultados pode ser encontrada em [2].

Proposição 2.4.5. *Seja G um grafo com n vértices e sejam $0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ os autovalores de $L(G)$. Então:*

- (i) G é conexo se e somente se $\lambda_2 > 0$;
- (ii) a multiplicidade do autovalor 0 é igual ao número de componentes conexas de G ;
- (iii) $\lambda_i(G) = n - \lambda_{n+2-i}(\overline{G})$, para todo $i = 2, \dots, n$.

Corolário 2.4.6. *Se um grafo G possui n vértices, então $\lambda_n(G) \leq n$. Além disso, n é autovalor de G se e somente se \overline{G} é desconexo.*

Demonstração. Seja G um grafo de ordem n e seja \overline{G} o grafo complementar de G . Pelo item (iii) da Proposição 2.4.5, temos que $\lambda_n(G) = n - \lambda_2(\overline{G})$. Por outro lado,

como $L(\overline{G})$ é positiva semidefinida, temos que $\lambda_2(\overline{G}) \geq 0$, e, portanto, $\lambda_n(G) \leq n$. A segunda parte segue diretamente dos itens (i) e (iii) da Proposição 2.4.5. \square

Exemplo 2.4.7. O grafo complementar do grafo completo K_n de n vértices é o grafo com n vértices e nenhuma aresta, ou seja, o grafo com n vértices isolados. Assim, a matriz de adjacências de $\overline{K_n}$ é identicamente nula e como todos os seus vértices são isolados, o grau de todos os vértices é igual a 0. Logo, $L(\overline{K_n}) = \mathbf{0}$ e, portanto, o L -espectro de $\overline{K_n}$ é $\{0^{(n)}\}$. Se $0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ são os autovalores de K_n , então, pelo item (iii) da Proposição 2.4.5, temos $\lambda_i = n - 0 = n$, para todo $i = 2, \dots, n$. Ou seja, o L -espectro de K_n é $\{0, n^{(n-1)}\}$.

Outra propriedade dos autovalores da matriz $L(G)$ de um grafo G é o *entrelaçamento* entre G e o grafo H obtido de G adicionando-se uma aresta, conforme descreve o teorema a seguir. A demonstração deste resultado pode ser encontrada em [22, Teorema 13.6.2].

Teorema 2.4.8. Seja G um grafo com n vértices e seja H o grafo obtido de G adicionando uma aresta ligando vértices distintos de G . Se $\lambda_1(G) \leq \lambda_2(G) \leq \dots \leq \lambda_n(G)$ e $\lambda_1(H) \leq \lambda_2(H) \leq \dots \leq \lambda_n(H)$ denotam os autovalores de $L(G)$ e $L(H)$, respectivamente, então

$$\lambda_{i-1}(H) \leq \lambda_i(G) \leq \lambda_i(H),$$

para todo $i = 1, 2, \dots, n$ (assumimos que $\lambda_0 = -\infty$).

Exemplo 2.4.9. Para $n \geq 3$, vamos denotar por S_n^1 o grafo obtido da estrela S_n de n vértices adicionando-se uma aresta. A figura 2.8 ilustra o grafo S_6^1 .

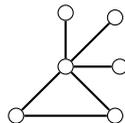


Figura 2.8: Grafo S_6^1 .

É fácil ver que S_n^1 é um grafo unicíclico, uma vez que criamos um ciclo ao adicionar uma aresta a uma árvore com $n \geq 3$ vértices. Se $n = 3$, S_3^1 é o grafo completo K_3 , cujo L -espectro é $\{0, 3^{(2)}\}$. Vamos usar o Teorema 2.4.8 para obter o L -espectro de S_n^1 , para $n \geq 4$, a partir do L -espectro da estrela S_n , o qual é dado por $\{0, 1^{(n-2)}, n\}$, conforme visto no Exemplo 2.4.4. Se $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ denotam os autovalores da matriz laplaciana de S_n^1 , então, pelo Teorema 2.4.8, temos que

$$0 \leq \lambda_1 \leq 1 \leq \lambda_2 \leq 1 \leq \dots \leq 1 \leq \lambda_{n-2} \leq 1 \leq \lambda_{n-1} \leq n \leq \lambda_n. \quad (2.4)$$

Ou seja, $\lambda_i = 1$, para todo $i = 2, \dots, n-2$. Além disso, $\lambda_1 = 0$. Segue de (2.4) e do Corolário 2.4.6 que $\lambda_n = n$. O único autovalor de S_n^1 que ainda falta descobrir é λ_{n-1} . Como S_n^1 é um grafo unicíclico de n vértices, segue do Corolário 2.1.4 que S_n^1 tem n arestas. Logo, como a soma dos autovalores é o dobro do número de arestas, temos que $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 2n$, ou seja, $0 + (n-3) \cdot 1 + \lambda_{n-1} + n = 2n$, do qual segue que $\lambda_{n-1} = 3$. Portanto, o L -espectro de S_n^1 é dado por $\{0, 1^{(n-3)}, 3, n\}$.

Para mais detalhes sobre a matriz laplaciana combinatória, indicamos, por exemplo, [23], [39] e [40].

Dizemos que um grafo G é *integral* se o espectro (com respeito à matriz de adjacências) de G é formado unicamente por números inteiros. Um dos problemas estudados em Teoria Espectral de Grafos é o de identificar quais grafos são integrais. Pode-se encontrar esses grafos entre as mais variadas classes de grafos, embora, ao mesmo tempo, sejam raros e difíceis de serem encontrados. Para maiores detalhes, sugerimos [4]. Abaixo, mostramos alguns exemplos de grafos integrais.

Exemplo 2.4.10. *Conforme a Tabela 2.1, podemos observar que o grafo completo K_n é integral para todo n . Já o caminho P_2 é o único grafo integral entre todos os caminhos P_n , com $n \geq 2$ vértices. Os ciclos C_3, C_4 e C_6 são os únicos grafos integrais entre todos os ciclos C_n . O grafo bipartido completo $K_{p,q}$ é integral se e somente se $p \cdot q$ é um quadrado perfeito. Em particular, a estrela $S_n = K_{1,n-1}$ é integral se e somente se $n-1$ é um quadrado perfeito.*

Salvo casos particulares, em geral é difícil calcular o espectro exato de um grafo G , uma vez que precisamos encontrar todas as raízes de um polinômio de grau igual ao número de vértices de G . Muitas vezes são utilizados programas de computação numérica para aproximar o cálculo dos autovalores.

Na seção a seguir, descrevemos um algoritmo para localizar autovalores da matriz de adjacências, em um dado intervalo real, no caso em que o grafo é uma árvore. Tal procedimento serviu de inspiração para o desenvolvimento deste trabalho.

2.5 Localização de autovalores de árvores

Em [34], Jacobs e Trevisan apresentaram um algoritmo para localizar autovalores da matriz de adjacências de uma árvore T , ou seja, para determinar o número de autovalores de T num dado intervalo real. Esse método é baseado na diagonalização da matriz $A + \alpha I$, onde A é a matriz de adjacências de T e α é um número real, e na Lei da Inércia de Sylvester (Teorema 2.2.8). O algoritmo, denominado $Diagonalize(T, \alpha)$, tem como entradas a árvore T e o escalar $\alpha \in \mathbb{R}$, sendo executado diretamente sobre os vértices de T , de forma que a matriz A não é necessária explicitamente. A saída do algoritmo é uma matriz diagonal D congruente à matriz $A + \alpha I$.

Para a execução do algoritmo $Diagonalize$ numa dada árvore T , escolhe-se um vértice arbitrário como *raiz* de T . Os vértices de T adjacentes à raiz são seus *filhos*. Os vértices adjacentes a esses filhos (excetuando-se a raiz) são seus filhos, e assim por diante. Todo vértice v de T , exceto a raiz, possui um *pai*, que é o vértice adjacente a v que não é filho de v , e os únicos vértices que não possuem filhos são as folhas, a menos que uma folha seja a raiz.

Deve-se, também, fixar um ordenamento dos vértices de T . Assim, vamos numerar os vértices de T como v_1, v_2, \dots, v_n , de tal forma que se v_j é filho de v_k , então $j > k$. Neste caso, a raiz será v_1 . A cada vértice v_i de T é associado um valor real $a(v_i)$ que no final do algoritmo representará precisamente a entrada ii da matriz diagonal D . Por esta razão, vamos denominar $a(v_i)$ o *valor diagonal* de v_i . Inicialmente, cada vértice v_i recebe o valor diagonal $a(v_i) = \alpha$. O algoritmo então é aplicado seguindo o ordenamento dos vértices, das folhas em direção à raiz, conforme descreve o Algoritmo 1. Para um vértice v_k , denotamos F_k o conjunto de todos os filhos de v_k . Observamos que se v_k é uma folha, que não é a raiz, então $F_k = \emptyset$.

Entrada: árvore T , escalar α
 Saída: matriz diagonal D congruente a $A + \alpha I$

Ordene os vértices de tal forma que se v_j é filho de v_i , então $j > i$.
 Inicialize $a(v) := \alpha$, para todo vértice v de T .
 Para $k = n$ até 1
 se v_k não é uma folha, então
 1. se $a(v) \neq 0$, para todo $v \in F_k$, então

$$a(v_k) \leftarrow a(v_k) - \sum_{v \in F_k} \frac{1}{a(v)};$$

 2. se $a(v) = 0$ para algum $v \in F_k$, então
 escolha um vértice v_j em F_k tal que $a(v_j) = 0$;
 $a(v_k) \leftarrow -\frac{1}{2}$; $a(v_j) \leftarrow 2$;
 se v_k tem um pai v_ℓ , remova a aresta $\{v_k, v_\ell\}$.

Algoritmo 1: *Diagonalize*(T, α)

Para justificar este procedimento, consideremos um vértice v_k de T com um filho v_j e um pai v_ℓ , como ilustra a Figura 2.9.

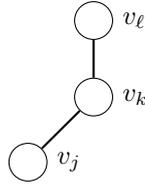


Figura 2.9: Vértice v_k com um filho v_j e pai v_ℓ

A submatriz a seguir mostra as entradas de $A + \alpha I$ correspondentes aos vértices v_k e v_j :

$$\begin{array}{c}
 k \\
 j
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 & \vdots & & \vdots & \\
 \cdots & a(v_k) & \cdots & 1 & \cdots \\
 & \vdots & \ddots & \vdots & \\
 \cdots & 1 & \cdots & a(v_j) & \cdots \\
 & \vdots & & \vdots &
 \end{bmatrix}.$$

Se $a(v_j) \neq 0$, este valor pode ser usado para anular as entradas kj e jk da matriz $A + \alpha I$, executando-se as seguintes operações elementares nas linhas e colunas:

$$L_k \leftarrow L_k - \frac{1}{a(v_j)} L_j$$

e

$$C_k \leftarrow C_k - \frac{1}{a(v_j)} C_j.$$

Realizadas as duas operações acima, o valor diagonal de v_k torna-se

$$a(v_k) - \frac{1}{a(v_j)},$$

resultando na matriz

$$\begin{array}{c}
k \\
j
\end{array}
\begin{bmatrix}
\vdots & & \vdots \\
\cdots & a(v_k) - \frac{1}{a(v_j)} & \cdots & 0 & \cdots \\
\vdots & & \ddots & \vdots & \\
\cdots & 0 & \cdots & a(v_j) & \cdots \\
\vdots & & & \vdots &
\end{bmatrix}.$$

Assim, podemos observar que se todos os filhos v_i de v_k possuem valores diagonais não nulos, então, após processarmos v_k , o seu valor diagonal será

$$a(v_k) - \sum_{v_i \in F_k} \frac{1}{a(v_i)}.$$

Note que, ao processarmos o vértice v_k , podemos considerar que a matriz $A + \alpha I$ está diagonalizada para todas linhas abaixo da linha k .

A maior dificuldade para a diagonalização ocorre quando um dos filhos de v_k possui valor diagonal igual a zero. Suponhamos, então, que exista algum filho v_j de v_k com $a(v_j) = 0$. Então, o vértice v_j pode ser usado para anular as duas entradas não diagonais de qualquer outro filho v_i de v_k , assim como as duas entradas que representam a aresta que liga v_k a seu pai v_ℓ . Até este ponto, a submatriz com linhas e colunas i, j, k, ℓ é dada por:

$$\begin{array}{c}
\ell \\
k \\
j \\
i
\end{array}
\begin{bmatrix}
\alpha & 1 & & \\
1 & \alpha & 1 & 1 \\
& 1 & 0 & \\
& 1 & & a(v_i)
\end{bmatrix}.$$

Fazendo uso de certas operações elementares nas linhas e colunas, pode-se mostrar que esta submatriz resulta na seguinte forma diagonalizada:

$$\begin{array}{l} \ell \\ k \\ j \\ i \end{array} \begin{bmatrix} \alpha & 0 & & \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ & 0 & 2 & \\ & 0 & & a(v_i) \end{bmatrix},$$

de maneira que todos os outros filhos de v_k não são afetados com as operações realizadas, incluindo aqueles que possam ter valores diagonais nulos.

Temos então o seguinte resultado.

Teorema 2.5.1. [34, Teorema 1] *Seja α um número real e seja T uma árvore de ordem n . O algoritmo $Diagonalize(T, \alpha)$ (Algoritmo 1) calcula uma matriz diagonal D congruente a $A + \alpha I$, onde A é a matriz de adjacências de T .*

É importante notar que o algoritmo $Diagonalize(T, \alpha)$ é executado diretamente na árvore T , de tal forma que não é necessário utilizar a matriz $A + \alpha I$ explicitamente.

Vejamos então qual a principal finalidade desse algoritmo.

Teorema 2.5.2. [34, Teorema 3] *Seja D a matriz diagonal cujas entradas na diagonal são produzidas pelo algoritmo $Diagonalize(T, -\alpha)$ para uma árvore T e um número real α . Então, valem as seguintes afirmações.*

- (i) *O número de autovalores de T que são maiores do que α é o número de entradas positivas em D .*
- (ii) *O número de autovalores de T que são menores do que α é o número de entradas negativas em D .*
- (iii) *A multiplicidade de α como autovalor de T é o número de entradas nulas em D .*

Demonstração. Vamos demonstrar o item (i). Pelo Teorema 2.5.1, o algoritmo $Diagonalize(T, -\alpha)$ produz uma matriz diagonal D congruente à matriz $A - \alpha I$,

cujas entradas da diagonal são os valores diagonais obtidos ao final do algoritmo. Pela Lei da Inércia de Sylvester (Teorema 2.2.8), o número de entradas positivas na diagonal é exatamente igual ao número de autovalores de $A - \alpha I$ que são positivos, os quais, por sua vez, são os autovalores de A que são maiores do que α . Esta última afirmação decorre do fato de que se $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ são os autovalores de A e $\mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_n$ são os autovalores de $A - \alpha I$, então $\mu_i = \lambda_i - \alpha$, para todo i , e, portanto, $\lambda_i > \alpha$ se e somente se $\mu_i > 0$, o que prova o item (i). As demonstrações dos itens (ii) e (iii) são análogas. \square

Exemplo 2.5.3. *Seja T a árvore da Figura 2.10. Elegemos arbitrariamente um vértice como raiz, o qual será v_1 , e seguimos uma numeração dos vértices segundo a qual se v_i é filho de v_j , então $i > j$.*

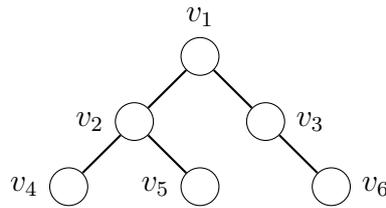


Figura 2.10: Árvore do Exemplo 2.5.3

Vamos aplicar o algoritmo *Diagonalize* para obter o número de autovalores de T que são maiores do que 2. O lado esquerdo da Figura 2.11 mostra a inicialização dos vértices com $\alpha = -2$. Em cada etapa, indicaremos no interior dos círculos o valor diagonal daquele vértice.

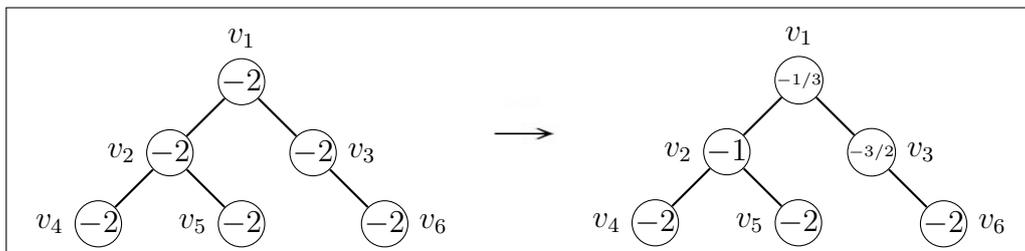


Figura 2.11: Aplicação do algoritmo $Diagonalize(T, \alpha)$ com $\alpha = -2$

Como v_6 é folha e filho de v_3 , ao processarmos o vértice v_3 pelo algoritmo, obtemos

$$a(v_3) = \alpha - \frac{1}{a(v_6)} = -2 - \frac{1}{-2} = -\frac{3}{2}.$$

Como os vértices v_4 e v_5 são folhas, e ambos são filhos de v_2 , então, ao processarmos o vértice v_2 pelo algoritmo, obtemos

$$a(v_2) = \alpha - \frac{1}{a(v_4)} - \frac{1}{a(v_5)} = -2 - \frac{1}{-2} - \frac{1}{-2} = -1.$$

Finalmente, o algoritmo processará o vértice raiz v_1 , cujos filhos são os vértices v_2 e v_3 , da seguinte forma:

$$a(v_1) = \alpha - \frac{1}{a(v_2)} - \frac{1}{a(v_3)} = -2 - \frac{1}{-1} - \frac{1}{-3/2} = -\frac{1}{3}.$$

Obtemos, assim, que todos os valores diagonais que o algoritmo produz são negativos, conforme ilustra o lado direito da Figura 2.11. Portanto, segue-se do Teorema 2.5.2 (ii) que todos os seis autovalores de T são menores do que 2.

Uma vez que todos os autovalores de T são menores do que 2, podemos obter quantos autovalores de T estão no intervalo $[1, 2)$. Neste caso, vamos aplicar o algoritmo *Diagonalize* com $\alpha = -1$ e contar quantos valores positivos (ou nulos) o algoritmo irá produzir neste caso. A Figura 2.12 ilustra este procedimento.

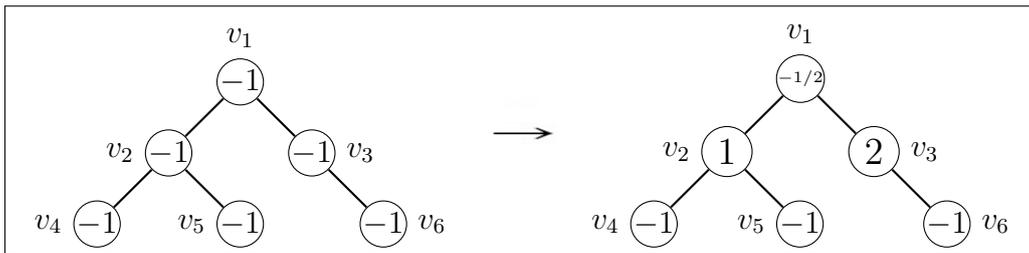


Figura 2.12: Aplicação do algoritmo *Diagonalize*(T, α) com $\alpha = -1$

Como v_6 é uma folha, e filho de v_3 , ao processarmos o vértice v_3 pelo algoritmo, obtemos

$$a(v_3) = \alpha - \frac{1}{a(v_6)} = -1 - \frac{1}{-1} = 0.$$

Como os vértices v_4 e v_5 são folhas, e ambos são filhos de v_2 , então, ao processarmos o vértice v_2 pelo algoritmo, obtemos

$$a(v_2) = \alpha - \frac{1}{a(v_4)} - \frac{1}{a(v_5)} = -1 - \frac{2}{-1} = 1.$$

A seguir, o algoritmo processará o vértice v_1 , cujos filhos são os vértices v_2 e v_3 . Neste caso, como $a(v_3) = 0$, o algoritmo atualiza os valores diagonais de v_1 e v_3 para $a(v_1) = -\frac{1}{2}$ e $a(v_3) = 2$, finalizando o procedimento, uma vez que v_1 é a raiz. Concluímos então que o algoritmo produz dois valores diagonais positivos e quatro negativos, conforme ilustra o lado direito da Figura 2.12. Portanto, segue-se do Teorema 2.5.2 que T tem dois autovalores maiores do que 1 e quatro autovalores menores do que 1.

Como já sabíamos que todos os autovalores de T eram menores do que 2, conclui-se que há exatamente dois autovalores no intervalo $(1, 2)$ e todos os demais autovalores são menores do que 1.

A Figura 2.13 ilustra a aplicação do algoritmo com $\alpha = 0$. Como $a(v_6) = 0$, e v_6 é filho de v_3 , o algoritmo atualizará os valores diagonais de v_3 e v_6 para $a(v_3) = -\frac{1}{2}$ e $a(v_6) = 2$, e, além disso, removerá a aresta que liga v_3 ao seu pai v_1 . Da mesma forma, como v_4 e v_5 são filhos de v_2 , ambos com valores nulos, o algoritmo atualizará o valor diagonal de v_2 para $a(v_2) = -1/2$, substituirá um dos valores diagonais nulos pelo valor $a(v) = 2$ para exatamente um dos filhos de v_2 , e eliminará a aresta entre v_2 e v_1 . Neste caso, v_1 será um vértice isolado (sem arestas incidentes a outros vértices) e, por v_1 ser a raiz, o processo termina.

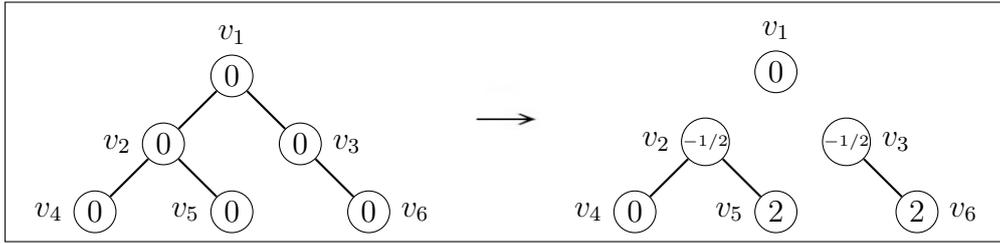


Figura 2.13: Aplicação do algoritmo $Diagonalize(T, \alpha)$ com $\alpha = 0$

Do Teorema 2.5.2, segue-se que T tem dois autovalores iguais a 0, dois autovalores positivos e dois autovalores negativos. Além disso, combinando os casos $\alpha = 0$ e $\alpha = -1$, podemos concluir que T não possui autovalores no intervalo $(0, 1]$.

Concluimos, assim, que T tem dois autovalores positivos no intervalo $(1, 2)$, um autovalor igual a 0 (com multiplicidade 2) e dois autovalores negativos. Com ajuda de um programa de computação numérica, obtemos que os autovalores de T são $0, \pm \frac{1}{2} \sqrt{10 \pm 2\sqrt{5}}$, o que é condizente com os resultados obtidos pelo algoritmo.

Em [34] os autores também observam que o algoritmo $Diagonalize$ poderia ser facilmente adaptado para ser aplicado à matriz laplaciana combinatória de uma árvore T . Tal extensão foi efetivamente utilizada em [20] e em nosso trabalho [7]. Como toda árvore é um grafo bipartido (Corolário 2.1.6), então, pelo Teorema 2.4.2, a matriz laplaciana sem sinal de T e a matriz laplaciana combinatória de T possuem o mesmo espectro. A adaptação do algoritmo para a matriz laplaciana combinatória de T consiste apenas em modificar a inicialização de todos os vértices de T , atribuindo inicialmente a cada vértice v_i o valor $a(v_i) = d(v_i) + \alpha$, onde $d(v_i)$ é o grau do vértice v_i . Com tal adaptação, algumas aplicações em [7] foram obtidas a respeito do espectro da matriz laplaciana combinatória de uma árvore, as quais apresentamos no Capítulo 5.

3 LOCALIZAÇÃO DE AUTOVALORES DE GRAFOS UNICÍCLICOS

No capítulo anterior, descrevemos o algoritmo que Jacobs e Trevisan [34] desenvolveram para calcular o número de autovalores de uma árvore em um determinado intervalo real. Esta técnica de localização de autovalores mostrou-se útil no estudo da distribuição dos autovalores de árvores em diferentes trabalhos — como, por exemplo, [8], [20], [21] e [46] — e nos motiva a estender este método para uma classe maior de grafos, como já foi feito para os grafos *threshold* em [35].

Neste capítulo, apresentamos o algoritmo que desenvolvemos para localizar os autovalores de um grafo unicíclico G em um dado intervalo real. Tal algoritmo é baseado na diagonalização da matriz $A + \alpha I$, onde $A = A(G)$ é a matriz de adjacências de G e α é um número real.

Como aplicação desse algoritmo, obtemos a multiplicidade de zero como autovalor de uma centopeia unicíclica e mostramos que os autovalores não nulos destes grafos têm multiplicidade no máximo igual a dois. Além disso, mostramos que nenhuma centopeia unicíclica regular é integral.

3.1 Algoritmo de localização de autovalores de grafos unicíclicos

Nesta seção, descrevemos nosso procedimento para localização de autovalores da matriz de adjacências de um grafo unicíclico em um dado intervalo real.

O algoritmo tem como entradas um grafo unicíclico G de ordem n contendo um ciclo \mathcal{C}_b , onde $b \geq 3$, e um número real α . Tal algoritmo calcula os valores diagonais de uma matriz diagonal congruente a $A(G) + \alpha I$, o que permite determi-

nar, pela Lei da Inércia de Sylvester, o número de autovalores de $A(G)$ maiores do que $-\alpha$, o número de autovalores de $A(G)$ menores do que $-\alpha$ e a multiplicidade de $-\alpha$ como autovalor de $A(G)$. É importante observar que o algoritmo não necessita da matriz $A(G) + \alpha I$ explicitamente, pois ele é executado percorrendo-se os vértices e as arestas de G .

Inicialmente, os vértices de \mathcal{C}_b são numerados como v_1, v_2, \dots, v_b . Os $n - b$ vértices de G restantes são numerados considerando o vértice v_i , para $1 \leq i \leq b$, a raiz da *árvore pendente* T_i , a qual é o maior subgrafo induzido de G que é uma árvore e cuja intersecção com o ciclo \mathcal{C}_b é o vértice v_i . A Figura 3.1 ilustra um grafo unicíclico G com um ciclo \mathcal{C}_3 e árvores pendentes T_1, T_2 e T_3 .

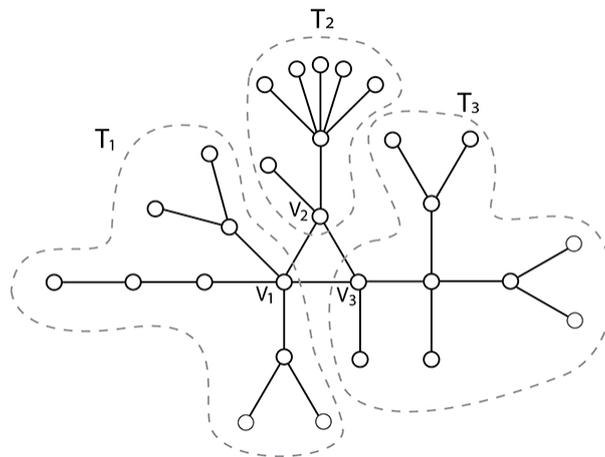


Figura 3.1: Um grafo unicíclico

A numeração dos vértices de cada árvore pendente é feita conforme o algoritmo para árvores, descrito na Seção 2.5, onde os vértices são numerados da raiz em direção às folhas. Numeramos primeiramente os vértices de T_1 , seguidos pelos vértices de T_2 , e assim por diante até T_b .

O algoritmo que desenvolvemos é o Algoritmo 2 apresentado a seguir. A ideia básica desse procedimento é utilizar, primeiramente, o algoritmo de árvores para diagonalizar as partes da matriz $A(G) + \alpha I$ correspondentes às árvores penden-

tes T_i , com $1 \leq i \leq b$, para, então, diagonalizar o bloco da matriz correspondente ao ciclo \mathcal{C}_b , cujos vértices serão processados levando-se em conta os b valores diagonais obtidos pelo algoritmo de árvores durante o processamento de cada árvore pendente T_i .

Para um dado número real α , iniciamos nosso procedimento atribuindo a todos os vértices de G o valor $a(v) := \alpha$ (Passo 1). A seguir, o algoritmo processa os vértices de cada árvore pendente T_i , das folhas em direção à raiz v_i (Passo 2). Observamos que, para cada vértice v_i do ciclo \mathcal{C}_b , ambos os vértices do ciclo \mathcal{C}_b que são adjacentes a v_i são considerados seus pais, e denotamos por F_i o conjunto dos filhos de v_i em T_i . Por fim, o algoritmo processa os vértices do ciclo \mathcal{C}_b , do vértice v_b em direção ao vértice v_1 (Passos 3 e 4).

Entrada: grafo unicíclico G com vértices ordenados v_1, \dots, v_n ,
escalar α

Saída: valores diagonais $a(v_1), \dots, a(v_n)$

1. Inicialize $a(v) := \alpha$, para todo vértice v de G
 2. Aplique o algoritmo $\text{Diagonalize}(T_i, \alpha)$ a cada árvore T_i , para $1 \leq i \leq b$, considerando v_{i-1} e v_{i+1} pais de v_i , onde $v_{i-1} = v_b$, se $i = 1$, e $v_{i+1} = v_1$, se $i = b$.
 3. Se alguma aresta do ciclo \mathcal{C}_b foi removida no passo 2, então aplique o algoritmo $\text{Diagonalize}(P, \alpha)$ a cada caminho P que não é um vértice isolado, escolhendo a extremidade de P com menor índice como raiz.
 4. Se o ciclo \mathcal{C}_b não foi desconectado no passo 2, então defina $a_i := a(v_i)$, para $1 \leq i \leq b$;
aplique o procedimento $\text{DiagCycle}(a_1, a_2, \dots, a_b)$ (Algoritmo 3).
-

Algoritmo 2: $\text{DiagonalizeUnicyclic}(G, \alpha)$

```

Defina TriangDiagonalized := false;  $w_2 := 1, w_b := 1$  e  $w_j := 0$ , para
 $3 \leq j \leq b - 1$ .
Para  $i = b$  até 3
  se  $a_i \neq 0$  então
     $a_{i-1} \leftarrow a_{i-1} - \frac{1}{a_i}; a_1 \leftarrow a_1 - \frac{(w_i)^2}{a_i}; w_{i-1} \leftarrow w_{i-1} - \frac{w_i}{a_i};$  //caso 1
  senão
     $\beta \leftarrow \frac{1}{2} \cdot (w_{i-1} - w_i \cdot (1 + \frac{a_{i-1}}{2})); \gamma \leftarrow w_{i-1} + w_i \cdot (1 - \frac{a_{i-1}}{2});$ 
     $a_i \leftarrow 2; a_{i-1} \leftarrow -\frac{1}{2}; a_1 \leftarrow a_1 + 2\beta^2 - \frac{\gamma^2}{2};$  //caso 2
  se  $i \geq 4$  então
     $w_{i-2} \leftarrow w_{i-2} - w_i;$ 
     $i \leftarrow i - 1;$ 
  senão
    TriangDiagonalized  $\leftarrow$  true;
fimdo laço.
Se TriangDiagonalized = false e  $w_2 \neq 0$  então
  se  $a_2 \neq 0$  então
     $a_1 \leftarrow a_1 - \frac{(w_2)^2}{a_2};$ 
  senão
     $a_2 \leftarrow 2; a_1 \leftarrow -\frac{(w_2)^2}{2}.$ 
Mostre  $(a_1, a_2, \dots, a_b)$ .

```

Algoritmo 3: Procedimento *DiagCycle*(a_1, a_2, \dots, a_b)

Para entender como o algoritmo calcula os valores diagonais de uma matriz diagonal congruente a $A(G) + \alpha I$, vamos considerar a seguinte representação matricial, segundo a numeração estabelecida para os vértices de G .

$$A + \alpha I = \begin{bmatrix} B & E_1 & E_2 & \cdots & E_b \\ (E_1)^T & B_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ (E_2)^T & \mathbf{0} & B_2 & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (E_b)^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & B_b \end{bmatrix},$$

onde $B = A(\mathcal{C}_b) + \alpha I_b$, sendo $A(\mathcal{C}_b)$ a matriz de adjacências do ciclo \mathcal{C}_b ; $B_i = A(T_i - v_i) + \alpha I_{|T_i - v_i|}$, onde $T_i - v_i$ é o subgrafo induzido de G pelos vér-

tices em $V(T_i) \setminus \{v_i\}$ e $A(T_i - v_i)$ é a sua respectiva matriz de adjacências, para $i = 1, \dots, b$; e E_i é o bloco da matriz $A(G)$ com todas as entradas nulas, exceto pelas entradas iguais a 1 da linha i , as quais representam as adjacências entre v_i e seus filhos em F_i , para $i = 1, \dots, b$.

Exemplo 3.1.1. *Seja G o grafo unicíclico da Figura 3.2. Podemos observar os blocos $B, B_1, B_2, B_3, E_1, E_2$ e E_3 na seguinte representação matricial de $A(G) + \alpha I$:*

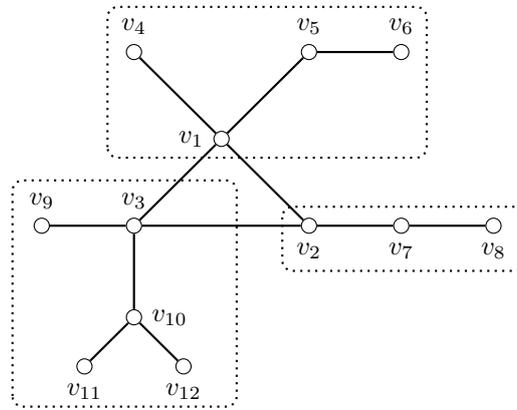


Figura 3.2: Grafo unicíclico do Exemplo 3.1.1

$$\begin{bmatrix}
 \alpha & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 1 & \alpha & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 1 & 1 & \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
 \hline
 1 & 0 & 0 & \alpha & 0 & 0 & & & & & & \\
 1 & 0 & 0 & 0 & \alpha & 1 & & & & & & \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \alpha & & & & & & \\
 \hline
 0 & 1 & 0 & & & & \alpha & 1 & & & & \\
 0 & 0 & 0 & & & & 1 & \alpha & & & & \\
 \hline
 0 & 0 & 1 & & & & & & \alpha & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 1 & & & & & & 0 & \alpha & 1 & 1 \\
 0 & 0 & 0 & & & & & & 0 & 1 & \alpha & 0 \\
 0 & 0 & 0 & & & & & & 0 & 1 & 0 & \alpha
 \end{bmatrix}$$

Como cada T_i é uma árvore e não há aresta entre $T_i - v_i$ e $T_j - v_j$, para $i \neq j$, podemos aplicar o algoritmo $Diagonalize(T_i, \alpha)$ aos vértices de cada subgrafo $T_i - v_i$, sem afetar as adjacências em E_i enquanto o vértice v_i não for processado. Pelo Teorema 2.5.1, o algoritmo produz b matrizes diagonais D_i , para $1 \leq i \leq b$, congruentes a B_i . O bloco B permanece o mesmo após o processamento do subgrafo $T_i - v_i$ pelo algoritmo $Diagonalize(T_i, \alpha)$, pois não há aresta entre o subgrafo $T_i - v_i$ e os vértices do ciclo \mathcal{C}_b diferentes de v_i . Obtemos, assim, a seguinte matriz:

$$\begin{bmatrix} B & E_1 & E_2 & \cdots & E_b \\ (E_1)^T & D_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ (E_2)^T & \mathbf{0} & D_2 & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (E_b)^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & D_b \end{bmatrix}.$$

A seguir, o algoritmo $Diagonalize(T_i, \alpha)$ processará a raiz v_i de cada árvore pendente T_i , considerando que a raiz v_i tem dois pais no ciclo. Se nenhum vértice do ciclo tem algum filho com valor diagonal nulo, isto é, se $a(v) \neq 0$, para todo $v \in F_i$, então o algoritmo $Diagonalize(T_i, \alpha)$ atribui a v_i o valor diagonal

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

e as entradas em E_i que representam as adjacências de v_i com seus filhos em F_i serão anuladas.

Se algum vértice do ciclo tem algum filho com valor diagonal zero, isto é, $a(v_j) = 0$, para algum $v_j \in F_i$, então o algoritmo $Diagonalize(T_i, \alpha)$ atribui a v_i e a v_j os valores diagonais $-\frac{1}{2}$ e 2 , respectivamente, e as entradas em E_i que representam as adjacências de v_i com seus filhos em F_i , bem como as entradas que representam as adjacências de v_i com seus pais v_{i+1} e v_{i-1} , são anuladas. Para entender por que estas operações realmente diagonalizam esta parte da matriz, considere a seguinte submatriz que mostra as entradas correspondentes a v_j, v_i, v_{i+1} e v_{i-1} :

$$\begin{array}{c}
i-1 \\
i \\
i+1 \\
\\
j
\end{array}
\begin{bmatrix}
\vdots & & & & \vdots \\
\cdots & \alpha & 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\
\cdots & 1 & \alpha & 1 & \cdots & 1 & \cdots \\
\cdots & 0 & 1 & \alpha & \cdots & 0 & \cdots \\
& \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\
\cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\
& \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots &
\end{bmatrix}.$$

Então, as operações elementares

$$L_k \leftarrow L_k - L_j$$

e

$$C_k \leftarrow C_k - C_j,$$

para $k \in \{i-1, i+1\}$, anulam as entradas $(i-1, i)$ e $(i, i-1)$ da matriz, quando $k = i-1$, e anulam as entradas $(i+1, i)$ e $(i, i+1)$, quando $k = i+1$, resultando na submatriz abaixo:

$$\begin{array}{c}
i-1 \\
i \\
i+1 \\
\\
j
\end{array}
\begin{bmatrix}
\vdots & & & & \vdots \\
\cdots & \alpha & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\
\cdots & 0 & \alpha & 0 & \cdots & 1 & \cdots \\
\cdots & 0 & 0 & \alpha & \cdots & 0 & \cdots \\
& \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\
\cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\
& \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots &
\end{bmatrix}.$$

Estas operações efetivamente removem a aresta entre v_i e seu pai v_{i-1} , assim como a aresta entre v_i e seu outro pai v_{i+1} no ciclo \mathcal{C}_b , desconectando o ciclo, caso ele ainda não tenha sido desconectado. De forma análoga, as operações elementares citadas anulam as entradas (k, i) e (i, k) da matriz, para todo outro filho v_k de v_i em F_i .

Por fim, a sequência de operações elementares

$$\begin{aligned}
L_i &\leftarrow L_i - \frac{\alpha}{2}L_j \\
C_i &\leftarrow C_i - \frac{\alpha}{2}C_j \\
L_j &\leftarrow L_j + L_i, \\
C_j &\leftarrow C_j + C_i, \\
L_i &\leftarrow L_i - \frac{1}{2}L_j, \\
C_i &\leftarrow C_i - \frac{1}{2}C_j
\end{aligned}$$

diagonalizam esta parte da matriz, atribuindo a v_i o valor diagonal $-1/2$, e a v_j , o valor diagonal 2. Note que os filhos de v_i em F_i , incluindo aqueles que possuem valor diagonal nulo, não são afetados pelas operações acima.

Até este ponto, obtemos a seguinte matriz congruente a $A + \alpha I$, diagonalizada para os vértices v_j , com $b + 1 \leq j \leq n$:

$$\begin{bmatrix}
\tilde{B} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\
\mathbf{0} & D_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\
\mathbf{0} & \mathbf{0} & D_2 & \cdots & \mathbf{0} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & D_b
\end{bmatrix},$$

onde o bloco \tilde{B} de ordem b representa as adjacências remanescentes entre os vértices do ciclo original \mathcal{C}_b , concluindo assim o passo 2 do algoritmo *DiagonalizeUnicyclic*.

Para completar o processo de diagonalização de $A + \alpha I$, resta realizar a diagonalização do bloco \tilde{B} .

Se uma aresta do ciclo \mathcal{C}_b foi removida no passo 2, o ciclo original será agora um único caminho ou a união disjunta de caminhos. Neste caso, podemos aplicar o algoritmo de árvores a cada caminho que não seja um vértice isolado, es-

colhendo a extremidade do caminho com menor índice como a raiz daquele caminho (passo 3), completando o processo de diagonalização da matriz.

Suponhamos, então, que o ciclo \mathcal{C}_b não foi desconectado pela aplicação do algoritmo $Diagonalize(T_i, \alpha)$ a cada uma das árvores pendentes T_i , para $i = 1, \dots, b$, durante a execução do passo 2 do algoritmo $DiagonalizeUnicyclic$. Então, no passo 4 do algoritmo, é executado o procedimento $DiagCycle$, que realiza a diagonalização do bloco \tilde{B} .

A ideia geral é começar a diagonalização do bloco \tilde{B} a partir do vértice v_b em direção ao vértice v_1 , assim como é feito no algoritmo de árvores, com a diferença de que, em cada passo dessa diagonalização, o valor diagonal do vértice v_1 é atualizado, uma vez que ele é afetado pelos cálculos dos outros vértices, conforme descrevemos a seguir.

Denotamos por w_i , para $i = 2, \dots, b$, as entradas $(1, i)$ e $(i, 1)$ da matriz original $A + \alpha I$, que representam a adjacência entre v_1 e v_i . Assim, temos inicialmente que $w_2 = w_b = 1$ e $w_j = 0$, para $3 \leq j \leq b - 1$, porém, esses valores serão atualizados ao aplicarmos o procedimento $DiagCycle$ (Algoritmo 3). Denotamos também $a_i = a(v_i)$, para cada $i = 1, \dots, b$, por simplicidade. Com esta notação, a matriz \tilde{B} tem a seguinte forma:

$$\begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ j-1 \\ j \\ \vdots \\ b \end{array} \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & w_{j-1} & w_j & \cdots & w_b \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ w_{j-1} & \cdots & a_{j-1} & 1 & \cdots & 0 \\ w_j & \cdots & 1 & a_j & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_b & \cdots & 0 & 0 & \cdots & a_b \end{bmatrix}.$$

Para um dado j , com $3 \leq j \leq b$, supondo que foram diagonalizadas as linhas e colunas de \tilde{B} de $j + 1$ até b , vamos diagonalizar a linha j e a coluna j da matriz \tilde{B} .

Se $a_j \neq 0$, as seguintes operações elementares nas linhas e colunas anulam as entradas $(j - 1, j)$ e $(j, j - 1)$:

$$L_{j-1} \leftarrow L_{j-1} - \frac{1}{a_j} L_j$$

e

$$C_{j-1} \leftarrow C_{j-1} - \frac{1}{a_j} C_j.$$

Ao serem realizadas essas duas operações, o valor diagonal de v_{j-1} torna-se $\tilde{a}_{j-1} = a_{j-1} - \frac{1}{a_j}$, e o valor de w_{j-1} torna-se $\tilde{w}_{j-1} = w_{j-1} - \frac{w_j}{a_j}$, resultando na matriz

$$\begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ j-1 \\ j \\ \vdots \\ b \end{array} \left[\begin{array}{cccccc} a_1 & \cdots & \tilde{w}_{j-1} & w_j & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \tilde{w}_{j-1} & \cdots & \tilde{a}_{j-1} & 0 & \cdots & 0 \\ w_j & \cdots & 0 & a_j & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & a_b \end{array} \right].$$

Além disso, as seguintes operações elementares anulam as entradas w_j da primeira linha e coluna da matriz \tilde{B} :

$$L_1 \leftarrow L_1 - \frac{w_j}{a_j} L_j$$

e

$$C_1 \leftarrow C_1 - \frac{w_j}{a_j} C_j,$$

modificando o valor diagonal de v_1 para $\tilde{a}_1 = a_1 - \frac{(w_j)^2}{a_j}$, produzindo a matriz

$$\begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ j-1 \\ j \\ \vdots \\ b \end{array} \begin{bmatrix} \tilde{a}_1 & \cdots & \tilde{w}_{j-1} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \tilde{w}_{j-1} & \cdots & \tilde{a}_{j-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_j & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & a_b \end{bmatrix}.$$

Este processo pode ser repetido sempre que $a_j \neq 0$, conforme o caso 1 do procedimento *DiagCycle* (Algoritmo 3).

Suponhamos então que $a_j = 0$, como ilustra a matriz a seguir.

$$\begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ j-2 \\ j-1 \\ j \\ \vdots \\ b \end{array} \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & w_{j-2} & w_{j-1} & w_j & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ w_{j-2} & \cdots & a_{j-2} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ w_{j-1} & \cdots & 1 & a_{j-1} & 1 & \cdots & 0 \\ w_j & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_b \end{bmatrix}.$$

No caso em que $j \geq 4$, o vértice v_j será usado para anular as duas entradas que representam a aresta entre v_{j-1} e seu pai v_{j-2} , realizando as seguintes operações elementares nas linhas e colunas:

$$L_{j-2} \leftarrow L_{j-2} - L_j$$

e

$$C_{j-2} \leftarrow C_{j-2} - C_j.$$

Estas duas últimas operações modificam o valor de w_{j-2} para $\tilde{w}_{j-2} = w_{j-2} - w_j$ (caso 2 do procedimento *DiagCycle*), produzindo a submatriz abaixo:

$$\begin{array}{c}
1 \\
\vdots \\
j-2 \\
j-1 \\
j \\
\vdots \\
b
\end{array}
\left[\begin{array}{cccccc}
a_1 & \cdots & \tilde{w}_{j-2} & w_{j-1} & w_j & \cdots & 0 \\
\vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
\tilde{w}_{j-2} & \cdots & a_{j-2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
w_{j-1} & \cdots & 0 & a_{j-1} & 1 & \cdots & 0 \\
w_j & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_b
\end{array} \right].$$

No caso em que $j = 3$, a linha $j - 2$ de \tilde{B} é a primeira linha, e a ligação entre v_{j-1} e seu pai v_{j-2} será removida posteriormente.

A seguir, as operações

$$L_{j-1} \leftarrow L_{j-1} - \frac{a_{j-1}}{2} L_j$$

e

$$C_{j-1} \leftarrow C_{j-1} - \frac{a_{j-1}}{2} C_j$$

anulam o valor de a_{j-1} e modificam o valor de w_{j-1} para $\tilde{w}_{j-1} = w_{j-1} - \frac{w_j \cdot a_{j-1}}{2}$. A submatriz torna-se

$$\begin{array}{c}
1 \\
\vdots \\
j-2 \\
j-1 \\
j \\
\vdots \\
b
\end{array}
\left[\begin{array}{cccccc}
a_1 & \cdots & \tilde{w}_{j-2} & \tilde{w}_{j-1} & w_j & \cdots & 0 \\
\vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
\tilde{w}_{j-2} & \cdots & a_{j-2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
\tilde{w}_{j-1} & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\
w_j & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_b
\end{array} \right].$$

Além disso, as operações elementares

$$\begin{aligned} L_j &\leftarrow L_j + L_{j-1}, \\ C_j &\leftarrow C_j + C_{j-1}, \\ L_{j-1} &\leftarrow L_{j-1} - \frac{1}{2}L_j, \\ C_{j-1} &\leftarrow C_{j-1} - \frac{1}{2}C_j \end{aligned}$$

produzem a submatriz

$$\begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ j-2 \\ j-1 \\ j \\ \vdots \\ b \end{array} \left[\begin{array}{cccccccc} a_1 & \cdots & \tilde{w}_{j-2} & \beta & \gamma & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \tilde{w}_{j-2} & \cdots & a_{j-2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \beta & \cdots & 0 & -1/2 & 0 & \cdots & 0 \\ \gamma & \cdots & 0 & 0 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_b \end{array} \right],$$

onde $\beta = \tilde{w}_{j-1} = \frac{1}{2} \cdot (w_{j-1} - w_j \cdot (1 + \frac{a_{j-1}}{2}))$ e $\gamma = \tilde{w}_j = w_{j-1} + w_j \cdot (1 - \frac{a_{j-1}}{2})$.

Finalmente, as operações

$$\begin{aligned} L_1 &\leftarrow L_1 + 2\beta L_{j-1}, \\ C_1 &\leftarrow C_1 + 2\beta C_{j-1}, \\ L_1 &\leftarrow L_1 - \frac{\gamma}{2}L_j, \\ C_1 &\leftarrow C_1 - \frac{\gamma}{2}C_j \end{aligned}$$

anulam as entradas β e γ e atualizam o valor de a_1 para $\tilde{a}_1 = a_1 + 2\beta^2 - \frac{\gamma^2}{2}$, resultando na seguinte submatriz:

$$\begin{array}{c}
1 \\
\vdots \\
j-2 \\
j-1 \\
j \\
\vdots \\
b
\end{array}
\left[\begin{array}{ccccccc}
\tilde{a}_1 & \cdots & \tilde{w}_{j-2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
\tilde{w}_{j-2} & \cdots & a_{j-2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & \cdots & 0 & -1/2 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & \cdots & 0 & 0 & 2 & \cdots & 0 \\
\vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_b
\end{array} \right].$$

Observamos que, neste ponto, tanto a linha (e coluna) j , como a linha (e coluna) $j - 1$, encontram-se diagonalizadas, conforme descrito no caso 2 do procedimento *DiagCycle* (Algoritmo 3). Observamos ainda que, caso $j = 3$, ou seja, $a_3 = 0$, a variável booleana *TriangDiagonalized*, descrita no Algoritmo 3, muda seu valor lógico para *true* e o algoritmo não executa as operações que viriam na sequência. Neste caso, o processo de diagonalização estaria finalizado ao serem realizados os passos acima.

Para demonstrarmos que o procedimento descrito pelo Algoritmo 3 completará a diagonalização de \tilde{B} , resta analisar o caso onde $j = 2$ e ainda falta diagonalizar o bloco 2×2 ilustrado abaixo:

$$\begin{bmatrix} a_1 & w_2 \\ w_2 & a_2 \end{bmatrix}.$$

Note que se $w_2 = 0$, esta submatriz já está diagonalizada. Se $w_2 \neq 0$, é fácil ver que se $a_2 \neq 0$, realizando as operações

$$L_1 \leftarrow L_1 - \frac{w_2}{a_2} L_2$$

e

$$C_1 \leftarrow C_1 - \frac{w_2}{a_2} C_2,$$

completa-se o processo de diagonalização, ficando o valor de a_1 atualizado para $\tilde{a}_1 = a_1 - \frac{(w_2)^2}{a_2}$. Se $w_2 \neq 0$ e $a_2 = 0$, então as seguintes operações elementares nas linhas e colunas

$$\begin{aligned} L_1 &\leftarrow L_1 - \frac{a_1}{2 \cdot w_2} L_2, \\ C_1 &\leftarrow C_1 - \frac{a_1}{2 \cdot w_2} C_2, \\ L_2 &\leftarrow L_2 + \frac{1}{w_2} L_1, \\ C_2 &\leftarrow C_2 + \frac{1}{w_2} C_1, \\ L_1 &\leftarrow L_1 - \frac{w_2}{2} L_2, \\ C_1 &\leftarrow C_1 - \frac{w_2}{2} C_2 \end{aligned}$$

resultam no seguinte bloco 2×2 diagonal

$$\begin{bmatrix} -\frac{w_2^2}{2} & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

Uma vez que todas as operações elementares realizadas nas linhas e colunas foram de tal forma que a mesma operação realizada para linha foi realizada para a coluna, a matriz diagonal D cujas entradas são os n valores diagonais calculados pelo algoritmo é tal que $D = S(A + \alpha I)S^T$, onde S é a matriz invertível composta pelas operações elementares realizadas nas linhas de $A + \alpha I$ e S^T a matriz composta pelas operações elementares nas colunas de $A + \alpha I$. Em outras palavras, D e $A + \alpha I$ são congruentes, comprovando, assim, o resultado a seguir.

Teorema 3.1.2. *Seja G um grafo unicíclico de ordem n com vértices ordenados v_1, v_2, \dots, v_n e seja α um número real. O algoritmo *DiagonalizeUnicyclic*(G, α) (Algoritmo 2) calcula n valores $a(v_i)$, $1 \leq i \leq n$, de forma que a matriz diagonal D com entradas $a(v_1), \dots, a(v_n)$ na diagonal é congruente a $A + \alpha I$, onde A é a matriz de adjacências de G .*

Pelo Teorema 3.1.2 e a Lei da Inércia de Sylvester (Teorema 2.2.8), temos o seguinte resultado, que é a principal finalidade do algoritmo.

Teorema 3.1.3. *Seja G um grafo unicíclico e α um número real. Seja D a matriz diagonal cujas entradas na diagonal são produzidas pelo algoritmo $\text{DiagonalizeUnicyclic}(G, -\alpha)$. Então, valem as seguintes afirmações:*

- (i) *O número de autovalores de G que são maiores do que α é o número de entradas positivas em D .*
- (ii) *O número de autovalores de G que são menores do que α é o número de entradas negativas em D .*
- (iii) *A multiplicidade de α como autovalor de G é o número de entradas nulas em D .*

Demonstração. A prova é a mesma do Teorema 2.5.2. \square

É importante observar que o algoritmo que desenvolvemos pode ser aplicado diretamente sobre os vértices do grafo unicíclico G , sem a necessidade de obter a expressão da matriz $A + \alpha I$ explicitamente.

Exemplo 3.1.4. *Seja G o grafo unicíclico da Figura 3.3.*

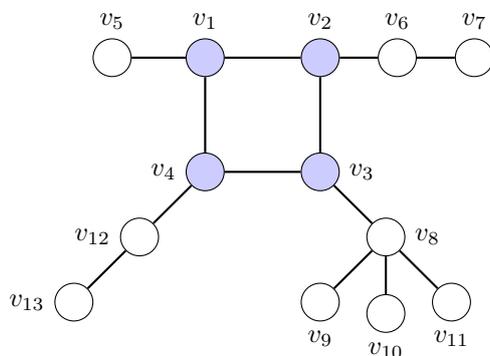


Figura 3.3: Grafo unicíclico do Exemplo 3.1.4

Vamos aplicar o algoritmo *DiagonalizeUnicyclic* em G com escalar $\alpha = -2$. O lado esquerdo da Figura 3.4 mostra a inicialização dos vértices com o valor -2 .

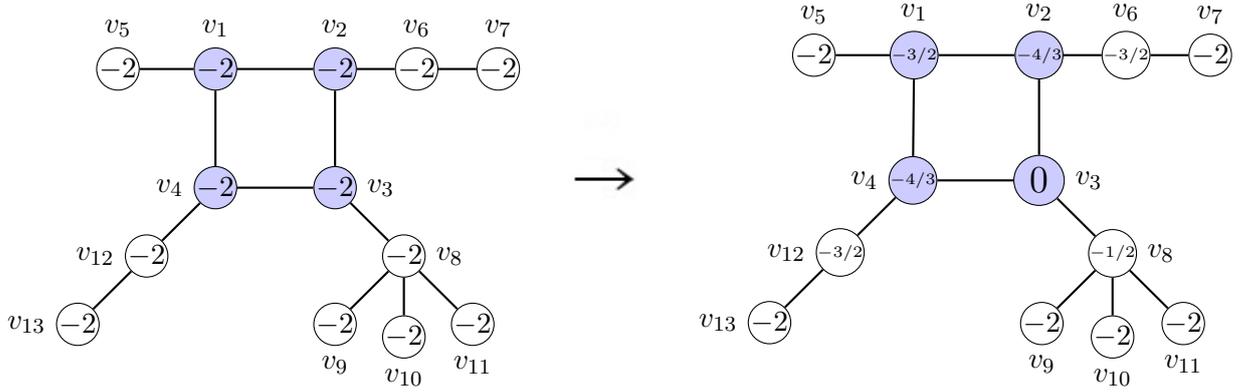


Figura 3.4: Passos 1 e 2 do algoritmo $\text{DiagonalizeUnicyclic}(G, \alpha)$ com $\alpha = -2$

Executando o passo 2, como v_{12} tem apenas um filho, seu valor diagonal torna-se $a(v_{12}) = -2 - \frac{1}{-2} = -\frac{3}{2}$; como v_8 tem três filhos, seu valor torna-se $a(v_8) = -2 - \frac{3}{-2} = -\frac{1}{2}$; analogamente ao caso do vértice v_{12} , o valor de v_6 torna-se $a(v_6) = -\frac{3}{2}$. Na sequência, tanto v_4 como v_2 possuem um único filho com valor diagonal $-\frac{3}{2}$ e, portanto, terão seus valores diagonais atualizados para $-2 - \frac{1}{-3/2} = -\frac{4}{3}$, enquanto que v_3 terá seu valor atualizado para $-2 - \frac{1}{-1/2} = 0$. O lado direito da Figura 3.4 mostra os valores diagonais atualizados desses vértices.

A seguir, como nenhum vértice v_i tem um filho em T_i com valor diagonal nulo, nenhuma aresta do ciclo é removida. Dessa forma, o algoritmo executará o passo 4. Neste passo, o algoritmo executa o procedimento *DiagCycle* (Algoritmo 3). A Figura 3.5 ilustra a inicialização do procedimento *DiagCycle* para os vértices v_1, v_2, v_3, v_4 do ciclo, cujos valores diagonais são, respectivamente, $a_1 = -\frac{3}{2}$, $a_2 = -\frac{4}{3}$, $a_3 = \frac{3}{4}$, $a_4 = -\frac{4}{3}$.

A cada iteração i do laço, de $i = 4$ até 2, o procedimento *DiagCycle* processa os vértices v_{i-1} e v_1 eliminando as arestas com seu filho v_i . Como $a_4 =$

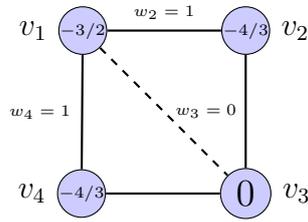


Figura 3.5: Inicialização do procedimento *DiagCycle* no caso $\alpha = -2$

$-\frac{4}{3} \neq 0$, o algoritmo atualiza o valor diagonal de v_3 para $a_3 - \frac{1}{a_4} = 0 - \frac{1}{-4/3} = \frac{3}{4}$, o valor de v_1 para $a_1 - \frac{(w_4)^2}{a_4} = -\frac{3}{2} - \frac{(1)^2}{-4/3} = -\frac{3}{4}$ e o valor de w_3 para $w_3 - \frac{w_4}{a_4} = 0 - \frac{1}{-4/3} = \frac{3}{4}$. A Figura 3.6 ilustra os resultados para esta etapa do algoritmo.

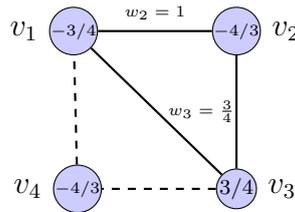


Figura 3.6: Iteração $i = 4$ do procedimento *DiagCycle* no caso $\alpha = -2$

Como $a_3 = \frac{3}{4} \neq 0$, o algoritmo atualiza o valor diagonal de v_2 para $a_2 - \frac{1}{a_3} = -\frac{4}{3} - \frac{1}{3/4} = -\frac{8}{3}$, o valor de v_1 para $a_1 - \frac{(w_3)^2}{a_3} = -\frac{3}{4} - \frac{(\frac{3}{4})^2}{3/4} = -\frac{3}{2}$ e o valor de w_2 para $w_2 - \frac{w_3}{a_3} = 1 - \frac{3/4}{3/4} = 0$. A Figura 3.7 ilustra os resultados para esta etapa do algoritmo.

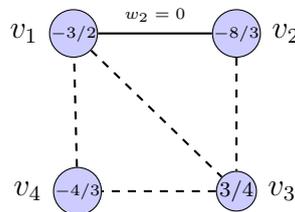


Figura 3.7: Iteração $i = 3$ do procedimento *DiagCycle* no caso $\alpha = -2$

Como $\text{TriangDiagonalized} = \text{false}$, uma vez que não foi executado o caso 2 do procedimento DiagCycle , então o algoritmo vai para o passo final, quando resta processar o vértice v_1 a partir de sua ligação com o vértice v_2 . No entanto, como $w_2 = 0$, este passo não será executado, visto que a ligação de v_2 com v_1 já está eliminada, o que finaliza o procedimento.

Ao final, percebemos que há apenas um valor diagonal positivo (o valor de v_3) e, portanto, pelo Teorema 3.1.3 (i), apenas um autovalor de G é maior do que 2 e todos os demais autovalores são menores do que 2.

Vamos agora aplicar o algoritmo $\text{DiagonalizeUnicyclic}$ em G com escalar $\alpha = 0$, como ilustra o lado esquerdo da Figura 3.8.

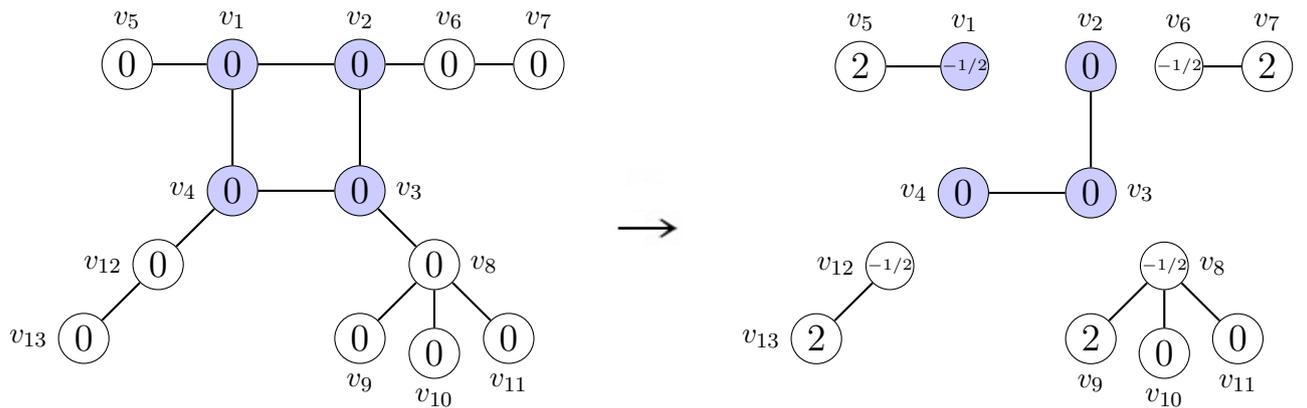


Figura 3.8: Passos 1 e 2 do algoritmo $\text{DiagonalizeUnicyclic}(G, \alpha)$ com $\alpha = 0$

Como todos os vértices são inicializados com valor 0, então, para cada vértice v_i que possuir um filho com valor 0, o Passo 2 do algoritmo vai substituir o valor de v_i pelo valor $-\frac{1}{2}$ e substituir o valor 2 em exatamente um filho de v_i com valor nulo. Além disso, a aresta ligando v_i ao seu pai será removida. O único vértice do ciclo que possui filho com valor nulo é v_1 , e, neste caso, as arestas conectando v_1 aos seus vértices adjacentes no ciclo, v_2 e v_4 , serão removidas, como mostra o lado direito da Figura 3.8.

Dessa forma, o passo 3 será executado no caminho $v_2v_3v_4$ resultante, sendo v_2 a raiz. Assim, como v_4 possui valor nulo, o algoritmo atualizará os valores de v_3 e v_4 para $a(v_3) = -\frac{1}{2}$ e $a(v_4) = 2$, e a aresta ligando v_3 a v_2 é removida, ficando v_2 um vértice isolado ao final do algoritmo, como mostra a Figura 3.9.

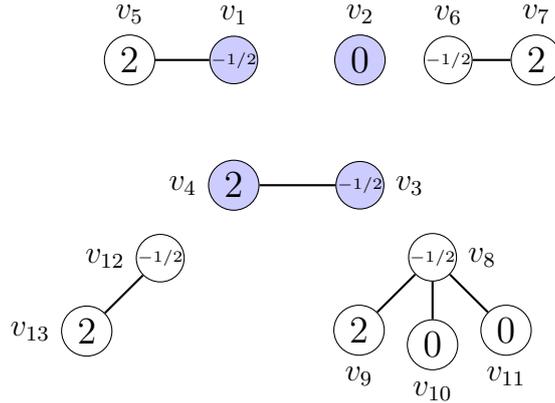


Figura 3.9: Valores finais da aplicação do algoritmo $DiagonalizeUnicyclic(G, \alpha)$ com $\alpha = 0$

Assim, pelo Teorema 3.1.3, concluímos que G possui um autovalor igual a 0 com multiplicidade 3, cinco autovalores positivos e cinco autovalores negativos.

O lado esquerdo da Figura 3.10 mostra a aplicação do algoritmo ao grafo G com escalar $\alpha = -1$ e assim, todos os vértices são inicializados com o valor -1 .

Executando o passo 2, como v_{12} tem apenas um filho, seu valor diagonal torna-se $a(v_{12}) = -1 - \frac{1}{-1} = 0$; como v_8 tem três filhos, seu valor torna-se $a(v_8) = -1 - \frac{3}{-1} = 2$; analogamente ao caso do vértice v_{12} , o valor de v_6 torna-se $a(v_6) = 0$. Como v_4 possui agora um filho com valor nulo, v_{12} , então o algoritmo atualizará os valores de v_4 e v_{12} para $a(v_4) = -\frac{1}{2}$, $a(v_{12}) = 2$, e as arestas ligando v_4 aos seus vértices adjacentes no ciclo, v_1 e v_3 , são removidas. Como v_3 possui como filho o vértice v_8 , temos que seu valor diagonal é atualizado para $a(v_3) = -1 - \frac{1}{2} = -\frac{3}{2}$. Assim como v_4 , o vértice v_2 possui um filho com valor nulo, v_6 , e, de forma análoga,

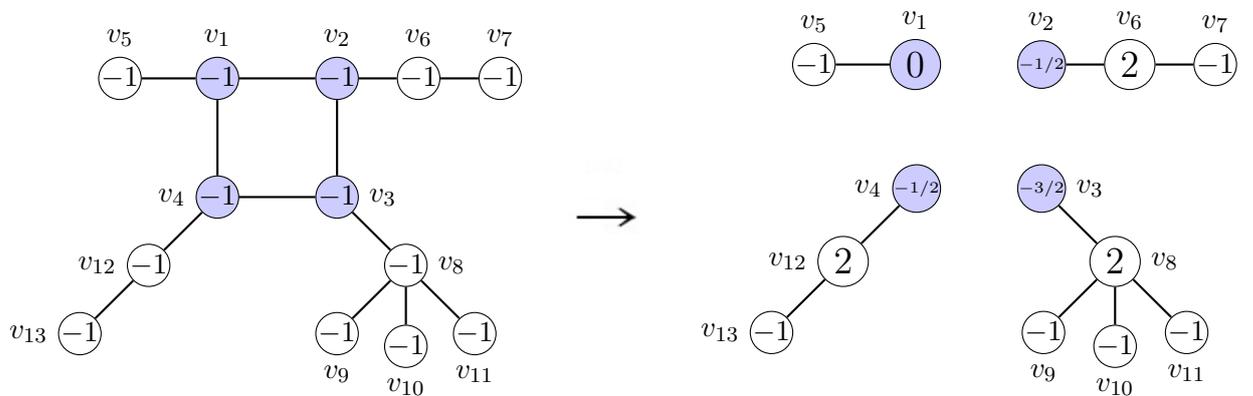


Figura 3.10: Passos 1 e 2 do algoritmo $\text{DiagonalizeUnicyclic}(G, \alpha)$ com $\alpha = -1$

teremos $a(v_4) = -\frac{1}{2}$, $a(v_{12}) = 2$ e as arestas que ligam v_2 aos dois vértices do ciclo, v_1 e v_3 , são removidas. Finalmente, o vértice v_1 tem seu valor diagonal atualizado para $a(v_1) = -1 - \frac{1}{-1} = 0$. Note que, neste caso, todas as arestas do ciclo foram removidas. Dessa forma, o algoritmo termina neste passo, uma vez não restou nenhum caminho no ciclo original. O lado direito da Figura 3.10 mostra os valores finais no caso $\alpha = -1$.

Pelo Teorema 3.1.3, obtemos que G tem um autovalor simples igual a 1 e três autovalores maiores do que 1.

Com base nos resultados anteriores, concluímos que G tem cinco autovalores positivos, sendo um deles o autovalor 1, outro está no intervalo $(0, 1)$, outros dois estão no intervalo $(1, 2)$ e exatamente um autovalor é maior do que 2. Pode ser mostrado, com auxílio de um programa de computação numérica, que este grafo unicyclico tem um autovalor 0 (com multiplicidade três) e autovalores simples ± 1 , $\pm\sqrt{2}$, $\pm 0,53128$, $\pm 1,82357$ e $\pm 2,52831$.

3.2 Centopeias unicíclicas

Nesta seção, vamos estudar os grafos unicíclicos denominados *centopeias unicíclicas* para ilustrar como o algoritmo *DiagonalizeUnicyclic* apresentado na Seção 3.1 pode ser facilmente aplicado para obter resultados a respeito da multiplicidade dos autovalores desses grafos. Uma centopeia unicíclica é o grafo obtido do ciclo C_b , onde $b \geq 3$, adicionando-se pelo menos um pendente a cada vértice do ciclo. Chamamos de *nó dorsal* cada um dos vértices de C_b .

Teorema 3.2.1. *Se \mathcal{C} é uma centopeia unicíclica com b nós dorsais, então \mathcal{C} tem b autovalores positivos e b autovalores negativos.*

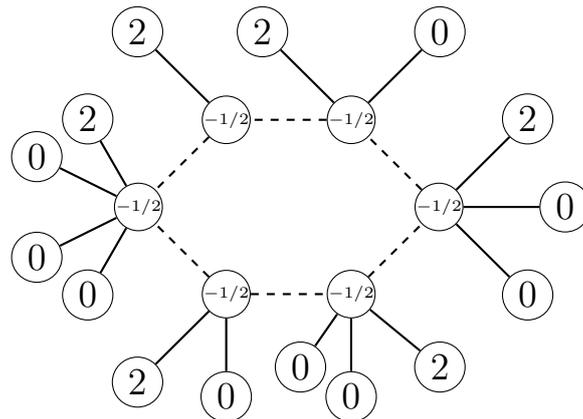


Figura 3.11: Aplicação do algoritmo *DiagonalizeUnicyclic*($\mathcal{C}, -\alpha$) com $\alpha = 0$

Demonstração. Vamos aplicar o algoritmo *DiagonalizeUnicyclic* para o grafo \mathcal{C} com escalar $\alpha = 0$, conforme ilustra a Figura 3.11. Uma vez que cada pendente tem valor diagonal nulo, o algoritmo atribuirá o valor diagonal $-\frac{1}{2}$ a cada um dos b nós dorsais e o valor diagonal 2 a exatamente um pendente de cada um dos b nós dorsais, enquanto que os outros $n - 2b$ vértices restantes permanecerão com o valor diagonal zero. Além disso, todas as arestas do ciclo são removidas, e o algoritmo termina. Portanto, no fim do algoritmo, são produzidos b valores positivos e b valores negativos. Pelo Teorema 3.1.3, segue-se o resultado. \square

Teorema 3.2.2. *Em qualquer centopeia unicíclica \mathcal{C} , os autovalores não nulos possuem multiplicidade no máximo igual a 2.*

Demonstração. Seja \mathcal{C} uma centopeia unicíclica e seja $\lambda \neq 0$ um autovalor de \mathcal{C} . Pelo Teorema 3.1.3 (iii), após a aplicação do algoritmo *DiagonalizeUnicyclic*($\mathcal{C}, -\lambda$), pelo menos um valor diagonal nulo deve ser obtido no fim do algoritmo. Os valores diagonais dos pendentos permanecerão iguais a $-\lambda \neq 0$ até o final. Se algum valor diagonal nulo aparecer em um vértice do ciclo durante a execução do procedimento *DiagCycle* (Algoritmo 3), o algoritmo substituirá tal valor por 2, a menos que tal valor apareça nos vértices v_2 ou v_1 , após terem sido processados todos os demais vértices v_i , para $i = 3, \dots, b$. Assim, o número máximo de valores diagonais nulos é dois. Portanto, pelo Teorema 3.1.3 (iii), λ tem multiplicidade no máximo igual a 2. \square

A situação de ter um autovalor não nulo com multiplicidade igual a 2 pode efetivamente ocorrer caso os valores diagonais dos vértices v_1 e v_2 sejam zero após terem sido processados todos os demais vértices v_i , para $i = 3, \dots, b$, e caso w_2 resulte igual a zero no fim do procedimento *DiagCycle*. O exemplo a seguir ilustra este fato.

Exemplo 3.2.3. *Seja \mathcal{C} a centopeia unicíclica da Figura 3.12.*

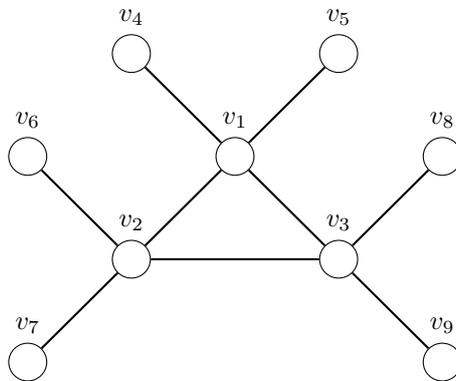


Figura 3.12: Centopeia unicíclica do Exemplo 3.2.3

Aplicando o algoritmo $\text{DiagonalizeUnicyclic}(\mathcal{C}, \alpha)$ com $\alpha = -1$, obtemos dois valores diagonais nulos nos vértices v_1 e v_2 ao final do algoritmo (a Figura 3.13 ilustra esta aplicação). Portanto, pelo Teorema 3.1.3 (iii), 1 é autovalor de \mathcal{C} com multiplicidade 2.

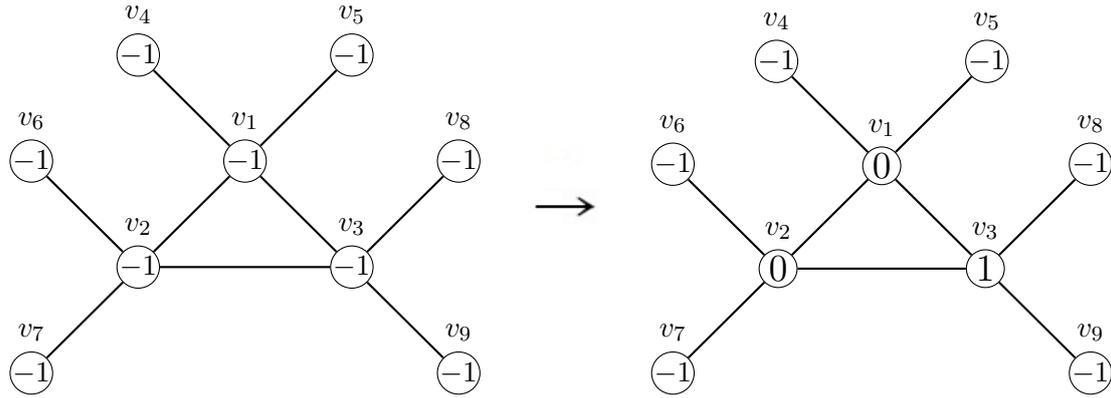


Figura 3.13: Aplicação do algoritmo $\text{DiagonalizeUnicyclic}(\mathcal{C}, \alpha)$ com $\alpha = -1$

O índice de um grafo G é o maior autovalor de G e é denotado por $\rho(G)$. O grau máximo de G é o maior dos graus dos vértices de G .

Lema 3.2.4. Se um grafo unicyclico G tem grau máximo Δ e índice $\rho(G)$, então

$$\rho(G) \leq 2\sqrt{\Delta - 1}.$$

Demonstração. Veja [31], Teorema 1. \square

Teorema 3.2.5. Seja \mathcal{C} uma centopeia unicyclica com b nós dorsais e grau máximo Δ . Então \mathcal{C} tem ao menos um autovalor não inteiro se $b > 4\lfloor\sqrt{\Delta - 1}\rfloor$.

Demonstração. Pelo Teorema 3.2.1, \mathcal{C} tem b autovalores positivos e, pelo Teorema 3.2.2, qualquer autovalor não nulo de \mathcal{C} tem multiplicidade no máximo 2, o que implica que \mathcal{C} tem pelo menos $\lfloor\frac{b}{2}\rfloor$ autovalores positivos e distintos. Pelo Lema 3.2.4, tais autovalores são limitados por $2\sqrt{\Delta - 1}$, e existem exatamente $\lfloor 2\sqrt{\Delta - 1} \rfloor$

inteiros positivos neste intervalo. Assim, pelo Princípio da Casa dos Pombos, se $b > 4\lfloor\sqrt{\Delta - 1}\rfloor$, ao menos um autovalor de \mathcal{C} deverá ser não-inteiro. \square

Vamos denotar $\mathcal{C}(b, p)$ a centopeia unicíclica com $b \geq 3$ nós dorsais v_1, \dots, v_b , cada um dos quais adjacente a exatamente $p \geq 1$ pendentes. Tais grafos são denominados *centopeias unicíclicas regulares*. A Figura 3.14 ilustra o grafo $\mathcal{C}(4, 3)$.

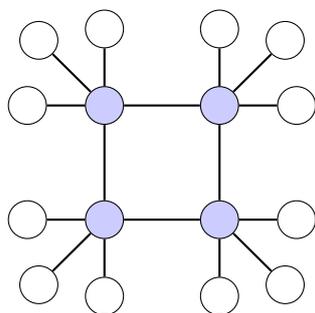


Figura 3.14: Centopeia unicíclica regular $\mathcal{C}(4, 3)$

Conforme a Tabela 2.1, o espectro do ciclo \mathcal{C}_b com b vértices é dado por

$$\left\{ 2 \cos \left(\frac{2\pi i}{b} \right) : i = 0, 1, \dots, b - 1 \right\}.$$

Vamos mostrar que, sabendo-se o espectro de \mathcal{C}_b , é possível obter o espectro completo da centopeia unicíclica regular $\mathcal{C}(b, p)$, utilizando-se, para isto, o algoritmo *DiagonalizeUnicyclic* aplicado ao grafo $\mathcal{C}(b, p)$.

Teorema 3.2.6. *Se r_1, \dots, r_b são os autovalores do ciclo \mathcal{C}_b , então o espectro da centopeia unicíclica regular $\mathcal{C}(b, p)$ é dado por*

$$\left\{ 0^{(n-2b)}, \frac{r_i}{2} \pm \sqrt{p + \left(\frac{r_i}{2}\right)^2}, i = 1, \dots, b \right\}.$$

Demonstração. Pelo Teorema 3.2.1, 0 é autovalor de $\mathcal{C}(b, p)$ com multiplicidade $n - 2b$. Para obtermos os outros $2b$ autovalores restantes, vamos aplicar o algoritmo *DiagonalizeUnicyclic* para $\mathcal{C}(b, p)$ com escalar $\alpha = -\lambda$, onde λ é um autovalor não

nulo de $\mathcal{C}(b, p)$. Uma vez que cada nó dorsal v_i , para $i = 1, \dots, b$, é adjacente a exatamente p pendentes, temos que

$$a(v_i) = -\lambda - \frac{p}{-\lambda} = \frac{\lambda^2 - p}{-\lambda},$$

Como todos os valores $a(v_i)$, para $i = 1, \dots, b$, são iguais e nenhuma aresta foi removida, visto que $a(v) = -\lambda \neq 0$, para todo pendente v do grafo $\mathcal{C}(b, p)$, a única forma de obtermos um valor diagonal zero no fim do algoritmo é quando $a(v_i) = -r$, para todo $i = 1, \dots, b$, onde r é autovalor do ciclo \mathcal{C}_b . Isto porque, uma vez que todos os valores $a(v_i)$ são iguais, podemos pensar que estamos aplicando o algoritmo diretamente a um ciclo \mathcal{C}_b com vértices v_1, \dots, v_b e escalar $\alpha = -r$. Desta forma, pelo Teorema 3.1.3 (iii), algum vértice de \mathcal{C}_b terá valor diagonal nulo no fim do algoritmo se e somente se r for um autovalor de \mathcal{C}_b . Além disso, se $a(v_i) = -r$, para todo $i = 1, \dots, b$, temos que

$$\frac{\lambda^2 - p}{-\lambda} = -r \Leftrightarrow \lambda^2 - p = \lambda r \Leftrightarrow \left(\lambda - \frac{r}{2}\right)^2 = p + \left(\frac{r}{2}\right)^2 \Leftrightarrow \lambda = \frac{r}{2} \pm \sqrt{p + \left(\frac{r}{2}\right)^2}.$$

□

Teorema 3.2.7. *Em uma centopeia unicíclica regular $\mathcal{C}(b, p)$, o índice é dado por $1 + \sqrt{p+1}$ e o maior autovalor negativo é $1 - \sqrt{p+1}$, ambos simples.*

Demonstração. Pelo Teorema 3.2.6, uma vez que 2 é sempre um autovalor do ciclo \mathcal{C}_b , então $\frac{2}{2} \pm \sqrt{p + \left(\frac{2}{2}\right)^2} = 1 \pm \sqrt{p+1}$ são autovalores de $\mathcal{C}(b, p)$. Quando aplicamos o algoritmo para $\mathcal{C}(b, p)$ com escalar $\alpha = -(1 + \sqrt{p+1})$ ou $\alpha = -(1 - \sqrt{p+1})$, temos que $a(v_i) = -2$, para todo $i = 1, \dots, b$. Processando esses vértices pelo algoritmo, apenas um valor diagonal nulo aparecerá e será exatamente na raiz v_1 , com $a(v_i) < 0$, para todo $i = 2, \dots, b$, uma vez que 2 é o índice do ciclo e tal autovalor é simples. Como todos os pendentes recebem o valor α , isto significa que, no caso em que $\alpha = -(1 + \sqrt{p+1}) < 0$, o algoritmo produzirá apenas um valor diagonal nulo e todos os outros valores diagonais serão negativos, o que implica que $1 + \sqrt{p+1}$ é o maior autovalor de $\mathcal{C}(b, p)$. No caso em que $\alpha = -(1 - \sqrt{p+1}) > 0$, teremos

um valor diagonal nulo na raiz v_1 , $b - 1$ valores negativos nos outros $b - 1$ nós dorsais e $n - b$ valores positivos em todos os pendentos do grafo. Como o número de autovalores negativos é igual a b (Teorema 3.2.1), segue-se que $1 - \sqrt{p+1}$ é o maior autovalor negativo de $\mathcal{C}(b, p)$ e com multiplicidade igual a 1. \square

Teorema 3.2.8. *Para qualquer autovalor positivo λ de uma centopeia unicíclica regular $\mathcal{C}(b, p)$, tem-se*

$$\lambda \geq \sqrt{p+1} - 1.$$

Demonstração. Pelo Teorema 3.2.6, o menor autovalor positivo de $\mathcal{C}(b, p)$ é dado por

$$\frac{a}{2} + \sqrt{p + \left(\frac{a}{2}\right)^2},$$

onde a é o menor autovalor do ciclo \mathcal{C}_b . Se b é par, temos que $a = -2$, e se b é ímpar, $a = 2 \cos\left(\frac{(b-1)\pi}{b}\right) = -2 \cos\left(\frac{\pi}{b}\right) > -2$. Assim, se b é par, $-1 + \sqrt{p+1}$ é o menor autovalor positivo de $\mathcal{C}(b, p)$, donde segue-se o resultado. Suponhamos então que b é ímpar. Então,

$$\begin{aligned} \frac{a}{2} + \sqrt{p + \left(\frac{a}{2}\right)^2} > -1 + \sqrt{p+1} &\Leftrightarrow \sqrt{p + \left(\frac{a}{2}\right)^2} > -\left(1 + \frac{a}{2}\right) + \sqrt{p+1} \\ &\Leftrightarrow p + \left(\frac{a}{2}\right)^2 > \left(1 + \frac{a}{2}\right)^2 - 2\left(1 + \frac{a}{2}\right)\sqrt{p+1} + p + 1 \\ &\Leftrightarrow 0 > 2 + a - (a+2)\sqrt{p+1} \\ &\Leftrightarrow 0 > (2+a)(1 - \sqrt{p+1}), \end{aligned}$$

o que é verdade, uma vez que $a + 2 > 0$ e $1 - \sqrt{p+1} < 0$. \square

Corolário 3.2.9. *Para todo autovalor positivo λ de $\mathcal{C}(b, p)$,*

$$-1 + \sqrt{p+1} \leq \lambda \leq 1 + \sqrt{p+1}.$$

Corolário 3.2.10. *Nenhuma centopeia unicíclica regular $\mathcal{C}(b, p)$ é integral.*

Demonstração. Se $b \geq 6$, segue-se, pelos Teoremas 3.2.1 e 3.2.2, que $\mathcal{C}(b, p)$ tem pelo menos quatro autovalores positivos distintos, uma vez que o maior autovalor é

simples. Pelo Corolário 3.2.9, os autovalores positivos de $\mathcal{C}(b, p)$ estão no intervalo $[-1 + \sqrt{p+1}, 1 + \sqrt{p+1}]$. Por outro lado, há no máximo três números inteiros nesse intervalo. Pelo Princípio da Casa dos Pombos, pelo menos um autovalor positivo de $\mathcal{C}(b, p)$ é não-inteiro. No caso em que $b \in \{3, 4, 5\}$, é fácil ver, pelo espectro descrito no Teorema 3.2.6, que $\mathcal{C}(b, p)$ não é integral. \square

Observamos que o espectro das centopeias unicíclicas regulares obtido no Teorema 3.2.6, bem como o maior autovalor desses grafos, são resultados já conhecidos, visto que uma centopeia unicíclica regular é um caso particular de grafos *corona*. Segundo define Harary [28], se G_1 e G_2 são dois grafos com conjuntos disjuntos de n e m vértices, respectivamente, o *corona* $G_1 \circ G_2$ de G_1 e G_2 é o grafo obtido tomando uma cópia de G_1 e n cópias de G_2 , e, então, unindo o i -ésimo vértice de G_1 a cada vértice da i -ésima cópia de G_2 . Assim, o grafo corona $G_1 \circ G_2$ tem $n(m+1)$ vértices e $|E(G_1)| + n \cdot (|E(G_2)| + m)$ arestas. Uma centopeia unicíclica regular $\mathcal{C}(b, p)$ é o grafo corona $\mathcal{C}_b \circ \overline{K_p}$ do ciclo \mathcal{C}_b e o grafo com p vértices isolados. Barik *et al.* mostraram em [6, Teorema 3.1] que, se G_1 é um grafo qualquer e G_2 é um grafo r -regular, e se $\sigma(G_1) = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)$ e $\sigma(G_2) = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_m)$ são os espectros de G_1 e G_2 , respectivamente, então os autovalores de $G = G_1 \circ G_2$ são dados por $\frac{\mu_i + r \pm \sqrt{(r - \mu_i)^2 + 4m}}{2}$, com multiplicidade 1, para $i = 1, \dots, n$, e por η_j , com multiplicidade n , para $j = 1, \dots, m-1$. Além disso,

$$\rho(G) = \frac{\rho(G_1) + r \pm \sqrt{(r - \rho(G_1))^2 + 4m}}{2}.$$

Queremos, contudo, justificar a apresentação e demonstração dos resultados nesta seção, mesmo que sejam já conhecidos, a fim de ilustrar a fácil aplicação do algoritmo *DiagonalizeUnicyclic* para obter propriedades espectrais de grafos unicíclicos como as centopeias unicíclicas.

4 A MATRIZ LAPLACIANA PERTURBADA

Iniciamos este capítulo apresentando algumas propriedades espectrais que várias matrizes simétricas de representação de um grafo possuem em comum, como o número mínimo de autovalores distintos relacionado ao diâmetro do grafo.

Na seção seguinte, apresentamos o algoritmo que desenvolvemos para localizar os autovalores de uma matriz laplaciana perturbada de árvores, o qual estende, para uma classe mais geral de matrizes, o algoritmo de Jacobs e Trevisan [34] descrito na Seção 2.5. Nosso procedimento é mais geral, uma vez que pode ser aplicado a qualquer árvore, com diferentes pesos definidos tanto para as arestas, como para os seus vértices.

Além disso, vamos trabalhar com uma classe especial de matrizes laplacianas perturbadas que inclui, como casos particulares, a matriz de adjacências e a matriz laplaciana normalizada, o que permite obter uma caracterização de árvores de pequeno diâmetro pelo espectro de todas essas matrizes de forma simultânea, utilizando como principal ferramenta o nosso algoritmo de localização de autovalores.

Os resultados apresentados na última seção deste capítulo fazem parte de nosso trabalho em [8].

4.1 Matrizes simétricas associadas a um mesmo grafo

Conforme Johnson e Leal-Duarte [36], se $A = (a_{ij})$ é uma matriz real e simétrica de ordem n , define-se o *grafo de A* , $G = G(A)$, como sendo o grafo de n vértices determinado inteiramente pelas entradas não diagonais de A de forma que G tem uma aresta ligando vértices distintos i e j se e somente se $a_{ij} \neq 0$. Observamos que as entradas diagonais de A , que podem ser ou não nulas, não são levadas em conta para se determinar o grafo de A .

Exemplo 4.1.1. *Considere a matriz*

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 0 & -3 & -1 \\ 0 & 0 & 4 & -1 & 0 \end{bmatrix} .$$

Então $G(A)$ é o grafo da Figura 4.1.

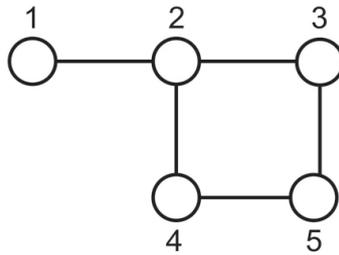


Figura 4.1: Grafo do Exemplo 4.1.1 .

Dado um grafo G , define-se o conjunto $S(G)$ de todas as matrizes reais e simétricas cujo grafo é G . Os autores obtiveram em [37] vários resultados interessantes a respeito da multiplicidade dos autovalores das matrizes $A \in S(G)$, em particular quando G é uma árvore. Um destes resultados afirma que, para qualquer árvore T e qualquer matriz simétrica $A \in S(T)$, o maior e o menor autovalores de A têm sempre multiplicidade igual a 1 [37, Observação 4].

O resultado a seguir relaciona o diâmetro do grafo G com o número de autovalores distintos de uma matriz $A \in S(G)$ com entradas não negativas. Este é um resultado clássico quando A é a matriz de adjacências ou a matriz laplaciana combinatória (veja, por exemplo, [10]), que foi demonstrado, mais recentemente, para a matriz laplaciana normalizada por Chung [12].

Dado um grafo G , denotamos por $q(G)$ o número mínimo de autovalores distintos de todas as matrizes em $S(G)$, ou seja, se $q(A)$ denota o número de autovalores distintos de uma matriz simétrica $A \in S(G)$, então

$$q(G) = \min_{A \in S(G)} q(A).$$

Teorema 4.1.2. *Se A é uma matriz real e simétrica de ordem n com entradas não negativas e $G(A)$ é conexo e com diâmetro d , então*

$$q(A) \geq d + 1.$$

Antes de demonstrar o Teorema 4.1.2, consideramos o lema a seguir e a seguinte notação: se $A \in S(G)$ e x, y são vértices de G , denotamos por A_{xy} a entrada xy de A .

Lema 4.1.3. *Se A é uma matriz real e simétrica de ordem n com entradas não negativas, $G = G(A)$ é conexo e x, y são vértices distintos de G , então, para $\ell \geq 1$ inteiro, $(A^\ell)_{xy} > 0$ se e somente se existe um passeio de comprimento ℓ ligando x a y .*

Demonstração. Vamos fazer a demonstração por indução em ℓ . Se $\ell = 1$, temos, por definição de $G(A)$, que

$$A_{xy} > 0 \Leftrightarrow \{x, y\} \in E \Leftrightarrow d(x, y) = 1,$$

onde E é o conjunto de arestas de G .

Suponhamos que o resultado seja verdadeiro para $\ell \geq 1$. Assim, temos:

$$(A^{\ell+1})_{xy} = (A^\ell A)_{xy} = \sum_{k=1}^n (A^\ell)_{xk} A_{ky} = \sum_{\{k,y\} \in E} (A^\ell)_{xk} A_{ky}. \quad (4.1)$$

Se existe um passeio de comprimento $\ell + 1$ ligando x a y , então, como G é conexo, existe um passeio de comprimento ℓ ligando o vértice x a um vértice

z , onde z é adjacente a y . Por hipótese, $(A^\ell)_{xz} > 0$ e, como $A_{zy} > 0$, segue que o somatório em (4.1) é positivo.

Reciprocamente, suponhamos que $(A^{\ell+1})_{xy} > 0$. Como A tem entradas não negativas, segue de (4.1) que existe um vértice z tal que $(A^\ell)_{xz} > 0$ e z é adjacente a y . Por hipótese, existe um passeio de comprimento ℓ ligando x a z . Assim, como $\{z, y\} \in E$, e G é conexo, pode-se formar um passeio de comprimento $\ell + 1$ ligando x a z . \square

Demonstração do Teorema 4.1.2. Vamos mostrar que, se o número de autovalores distintos de A for $t \geq 2$, então o diâmetro de $G = G(A)$ é no máximo $t - 1$.

Sejam $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_t$ os autovalores distintos da matriz A . Como A é real e simétrica, pelo Teorema 2.2.4, o polinômio minimal de A é

$$p_m(\lambda) = (\lambda - \lambda_1) \cdot (\lambda - \lambda_2) \cdots (\lambda - \lambda_t).$$

Pela definição de polinômio minimal, temos que:

$$p_m(A) = (A - \lambda_1 I) \cdot (A - \lambda_2 I) \cdots (A - \lambda_t I) = \mathbf{0}.$$

Logo, A^t é combinação linear de $I, A, A^2, \dots, A^{t-1}$. Suponhamos que existam vértices $x, y \in V(G)$ tais que $d(x, y) = t$. Então, pelo Lema 4.1.3, temos que $(A^i)_{xy} = 0$, para $0 \leq i \leq t-1$ e $(A^t)_{xy} > 0$. Isto contradiz o fato de A^t ser combinação linear de $I, A, A^2, \dots, A^{t-1}$. Portanto, t é maior do que a distância entre dois vértices quaisquer de G . Como a maior distância em G é o diâmetro $d = d(G)$, segue que $t > d$, ou seja, d é no máximo $t - 1$. \square

É importante observar que a hipótese de que a matriz simétrica A possui entradas não negativas foi importante para a demonstração do Teorema 4.1.2, devido ao Lema 4.1.3. O seguinte exemplo mostra que o resultado pode não ser verdadeiro, caso a matriz tenha entradas negativas.

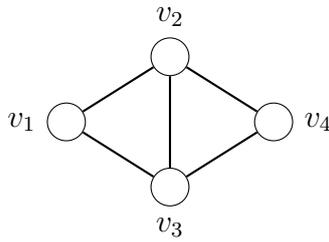


Figura 4.2: Grafo do Exemplo 4.1.4

Exemplo 4.1.4. [37, p.176] Considere a matriz

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 3 \end{bmatrix}$$

cujo grafo $G(A)$ é conforme a Figura 4.2.

Temos que o diâmetro de G é 2, mas A tem só dois autovalores distintos, a saber, $\lambda = 2 \pm \sqrt{3}$, cada um com multiplicidade 2.

No caso de árvores, a hipótese da matriz simétrica ser não negativa não é necessária, como mostra o seguinte resultado de [37].

Teorema 4.1.5. [37, Teorema 2] Para uma árvore T ,

$$q(T) \geq d(T) + 1.$$

Corolário 4.1.6. Se T é um caminho com n vértices e $A \in S(T)$, então A tem exatamente n autovalores distintos.

Demonstração. Basta ver que num caminho T com n vértices, temos $d(T) = n - 1$. O resultado segue do Teorema 4.1.5. \square

No teorema abaixo, mostramos que o Teorema 4.1.2 também vale para qualquer matriz laplaciana perturbada de um grafo. Tal resultado que demonstramos será de grande importância em nosso trabalho.

Teorema 4.1.7. *Se G é conexo e tem diâmetro d , então qualquer matriz laplaciana perturbada $\mathcal{L}(G)$ tem pelo menos $d + 1$ autovalores distintos.*

Demonstração. Seja G um grafo de ordem n conexo e com diâmetro d cuja matriz laplaciana perturbada é dada por $\mathcal{L}(G) = D - A(G)$. Denotamos as entradas da diagonal da matriz D por d_{ii} , para $i \in \{1, \dots, n\}$, e as entradas da matriz de adjacências $A(G)$ por a_{ij} , para todo $i, j \in \{1, \dots, n\}$. Seja $m = 1 + \max\{|\lambda_i|\}$, onde $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ são os autovalores de $\mathcal{L}(G)$, e consideremos a matriz $B = mI - \mathcal{L}(G) = mI - D + A(G)$. Temos que, para todo $i \in \{1, \dots, n\}$, a entrada b_{ii} da diagonal de B é dada por $b_{ii} = m - d_{ii}$ e, para todo $i, j \in \{1, \dots, n\}$ com $i \neq j$, temos que $b_{ij} = a_{ij}$. Como todas as entradas de $A(G)$ são não negativas, então $b_{ij} \geq 0$, para todo $i, j \in \{1, \dots, n\}$ com $i \neq j$. Além disso, $b_{ii} > 0$, para todo $i \in \{1, \dots, n\}$, pois B é simétrica e, pelo Teorema de Schur (Teorema 2.2.6), $d_{ii} \leq \max\{|\lambda_i|\} < m$. Portanto, B é uma matriz com entradas não negativas e como $B \in S(G)$, pelo Teorema 4.1.2, temos que $q(B) \geq d + 1$, onde $q(B)$ é o número de autovalores distintos de B . Como $B = mI - \mathcal{L}(G)$, os autovalores de B são dados por $m - \lambda_1, \dots, m - \lambda_n$. Assim, temos que $q(\mathcal{L}(G)) = q(B)$, do qual segue o resultado. \square

Para um dado grafo $G = (V, E)$ conexo e com pesos das arestas dados por $\omega : E \rightarrow \mathbb{R}^+$, podemos associar infinitas matrizes laplacianas perturbadas da forma $\mathcal{L}(G) = D - A(G)$, onde D é uma matriz diagonal real qualquer e $A(G)$ é a matriz de adjacências de G . Observamos que as entradas da diagonal de D podem ser, inclusive, negativas e, mesmo assim, os resultados apresentados nesta seção continuam valendo. Neste sentido, podemos definir, para uma matriz laplaciana perturbada $\mathcal{L}(G)$, o *peso* do vértice v_i como sendo a entrada ii da matriz diagonal D . Assim, para um dado grafo G conexo e com pesos positivos atribuídos para as arestas de G , podemos armazenar os pesos dos seus vértices. Tal armazenamento será importante para o algoritmo que desenvolvemos para localizar, em qualquer intervalo real, os autovalores de matrizes laplacianas perturbadas de uma dada árvore T , o qual apresentamos na seção a seguir. Observamos ainda que se a matriz diagonal

D é a matriz diagonal dos graus dos vértices de G , então o peso de cada vértice coincide com a definição de grau de um vértice para um grafo com pesos.

4.2 Localização de autovalores de matrizes laplacianas perturbadas de árvores

Nesta seção, apresentamos o algoritmo que desenvolvemos para calcular o número de autovalores de uma matriz laplaciana perturbada de uma dada árvore T com pesos, em qualquer intervalo real dado. Tal algoritmo estende para uma classe mais geral de matrizes o procedimento de Jacobs e Trevisan [34], descrito na Seção 2.5, originalmente desenvolvido para a matriz de adjacências de uma árvore. O algoritmo que apresentamos nesta seção faz a diagonalização da matriz $\mathcal{L}(T) + \alpha I$, onde α é um número real e $\mathcal{L}(T)$ é uma matriz laplaciana perturbada de T com respeito à matriz diagonal D .

Seja $T = (V, E)$ uma árvore de ordem n com pesos dados por $\omega : E \rightarrow \mathbb{R}^+$. Para a execução do algoritmo, deve-se escolher um vértice arbitrário como raiz da árvore T e deve-se fixar um ordenamento dos vértices de T . Assim, numeramos os vértices de T como v_1, v_2, \dots, v_n , de tal forma que se v_j é filho de v_k , então $j > k$. Logo, a raiz será v_1 . Além disso, estabelecemos que $\omega_{ij} = \omega(e_{ij})$, onde $e_{ij} = \{v_i, v_j\} \in E$, e que $\omega_{ij} = 0$, se $\{v_i, v_j\} \notin E$.

Seja $\mathcal{L}(T)$ uma matriz laplaciana perturbada de T com respeito à matriz diagonal D , que consideraremos a matriz diagonal dos pesos dos vértices de T , ou seja, o peso do vértice $v_i \in V$ será dado por $\delta_i = d_{ii}$, onde d_{ii} é a entrada ii da matriz diagonal D .

O algoritmo terá, assim, como entradas a árvore T , com pesos nos vértices e pesos nas arestas, e um escalar $\alpha \in \mathbb{R}$. A saída do algoritmo é uma matriz diagonal Λ congruente à matriz $\mathcal{L}(T) + \alpha I$.

De forma semelhante aos procedimentos anteriores, o algoritmo associa, a cada vértice v_i de T , o *valor diagonal* $a(v_i)$, que, no fim do algoritmo, representará a entrada ii da matriz diagonal Λ .

Iniciamos o algoritmo atribuindo a cada vértice v_i o valor diagonal $a(v_i) = \delta_i + \alpha$. O procedimento segue o ordenamento dos vértices, das folhas em direção à raiz, como descrito na Tabela 4. Lembramos que F_k representa o conjunto de todos os filhos de v_k .

Entrada: escalar α ; árvore T de vértices v_1, v_2, \dots, v_n , com pesos $\delta_1, \dots, \delta_n$ nos vértices e com pesos de arestas $\omega : E \rightarrow \mathbb{R}^+$
Saída: matriz diagonal Λ congruente a $\mathcal{L}(T) + \alpha I$

Inicialize $a(v_i) := \delta_i + \alpha$, para todo vértice v_i de T .

Para $k = n$ até 1

se v_k não é uma folha, então

1. se $a(v_i) \neq 0$, para todo $v_i \in F_k$, então

$$a(v_k) \leftarrow a(v_k) - \sum_{v_i \in F_k} \frac{(\omega_{ik})^2}{a(v_i)}.$$

2. se $a(v_i) = 0$ para algum $v_i \in F_k$, então

escolha um vértice v_j em F_k tal que $a(v_j) = 0$;

$$a(v_k) \leftarrow -\frac{(\omega_{jk})^2}{2}; \quad a(v_j) \leftarrow 2;$$

se v_k tem um pai v_ℓ , remova a aresta $\{v_k, v_\ell\}$.

Algoritmo 4: *Diagonalize* $W(T, \alpha)$

Para justificar este procedimento, consideramos um vértice v_k de T com um filho v_j , conforme ilustra a matriz a seguir

$$\begin{array}{c}
k \\
j
\end{array}
\begin{bmatrix}
\vdots & & \vdots & & \\
\cdots & a(v_k) & \cdots & \omega_{kj} & \cdots \\
& \vdots & \ddots & \vdots & \\
\cdots & \omega_{jk} & \cdots & a(v_j) & \cdots \\
& \vdots & & \vdots &
\end{bmatrix}.$$

$$\begin{array}{l} \ell \\ k \\ j \\ i \end{array} \begin{bmatrix} \delta_\ell + \alpha & \omega_{\ell k} & & & \\ \omega_{k\ell} & \delta_k + \alpha & \omega_{kj} & \omega_{ki} & \\ & \omega_{jk} & 0 & & \\ & \omega_{ik} & & a(v_i) & \end{bmatrix}.$$

As seguintes operações elementares nas linhas e colunas removem as entradas ik e ki da submatriz acima,

$$L_i \leftarrow L_i - \frac{\omega_{ik}}{\omega_{jk}} L_j$$

e

$$C_i \leftarrow C_i - \frac{\omega_{ki}}{\omega_{kj}} C_j,$$

enquanto que as operações abaixo removem as entradas $k\ell$ e ℓk :

$$L_\ell \leftarrow L_\ell - \frac{\omega_{\ell k}}{\omega_{jk}} L_j$$

e

$$C_\ell \leftarrow C_\ell - \frac{\omega_{k\ell}}{\omega_{kj}} C_j.$$

Observamos que $\omega_{jk} = \omega_{kj} \neq 0$, pois v_j é filho de v_k .

Estas duas últimas operações correspondem a remover a aresta que liga v_k ao seu pai v_ℓ , desconectando o grafo. Neste ponto, a submatriz com linhas e colunas i, j, k, ℓ foi transformada como mostra a ilustração a seguir.

$$\begin{array}{l} \ell \\ k \\ j \\ i \end{array} \begin{bmatrix} \delta_\ell + \alpha & 0 & & & \\ 0 & \delta_k + \alpha & \omega_{kj} & 0 & \\ & \omega_{jk} & 0 & & \\ & 0 & & a(v_i) & \end{bmatrix}.$$

A seguir, as operações abaixo

$$L_k \leftarrow L_k - \frac{(\delta_k + \alpha)}{2\omega_{jk}} L_j$$

e

$$C_k \leftarrow C_k - \frac{(\delta_k + \alpha)}{2\omega_{kj}} C_j$$

anulam a entrada kk , e a submatriz torna-se:

$$\begin{array}{c} \ell \\ k \\ j \\ i \end{array} \left[\begin{array}{cccc} \delta_\ell + \alpha & 0 & & \\ & 0 & \omega_{kj} & 0 \\ & & \omega_{jk} & 0 \\ & & 0 & a(v_i) \end{array} \right].$$

Por fim, as operações abaixo

$$\begin{aligned} L_j &\leftarrow L_j + \frac{1}{\omega_{kj}} L_k, \\ C_j &\leftarrow C_j + \frac{1}{\omega_{jk}} C_k, \\ L_k &\leftarrow L_k - \frac{\omega_{kj}}{2} L_j, \\ C_k &\leftarrow C_k - \frac{\omega_{jk}}{2} C_j \end{aligned}$$

resultam na seguinte forma diagonalizada:

$$\begin{array}{c} \ell \\ k \\ j \\ i \end{array} \left[\begin{array}{cccc} \delta_\ell + \alpha & 0 & & \\ & 0 & -\frac{(\omega_{kj})^2}{2} & 0 \\ & & 0 & 2 \\ & & 0 & a(v_i) \end{array} \right],$$

Note que, uma vez que T é uma árvore, todos os outros valores diagonais dos filhos de v_k não são afetados com as operações realizadas anteriormente, incluindo aqueles que poderiam ter valores diagonais nulos.

Uma vez que todas as operações elementares realizadas nas linhas e colunas foram de tal forma que a mesma operação realizada para linha foi realizada para a coluna, a matriz diagonal Λ cujas entradas são os n valores diagonais calculados pelo algoritmo é tal que $\Lambda = S(\mathcal{L}(T) + \alpha I)S^T$, onde S é a matriz invertível

composta pelas operações elementares realizadas nas linhas de $\mathcal{L}(T) + \alpha I$. Desta forma, Λ e $\mathcal{L}(T) + \alpha I$ são congruentes, demonstrando assim o resultado a seguir.

Teorema 4.2.1. *Seja α um número real e seja T uma árvore de ordem n com vértices v_1, v_2, \dots, v_n com peso de arestas $\omega : E \rightarrow \mathbb{R}^+$ e peso do vértice v_i dado pela entrada ii de uma matriz diagonal real D . Seja $\mathcal{L}(T)$ a matriz laplaciana perturbada de T com respeito a D . O algoritmo *DiagonalizeW*(T, α) (Algoritmo 4) calcula n valores $a(v_i)$, $1 \leq i \leq n$, de forma que a matriz diagonal Λ com entradas $a(v_1), \dots, a(v_n)$ na diagonal é congruente a $\mathcal{L}(T) + \alpha I$.*

Pelo Teorema 4.2.1 e a Lei da Inércia de Sylvester (Teorema 2.2.8), temos o seguinte resultado, que mostra o objetivo principal do algoritmo.

Teorema 4.2.2. *Seja T uma árvore conforme a descrição no Teorema 4.2.1 e α um número real. Seja Λ a matriz diagonal cujas entradas na diagonal são produzidas pelo algoritmo *DiagonalizeW*($T, -\alpha$). Então, valem as seguintes afirmações:*

- (i) *O número de autovalores de $\mathcal{L}(T)$ que são maiores do que α é o número de entradas positivas em Λ .*
- (ii) *O número de autovalores de $\mathcal{L}(T)$ que são menores do que α é o número de entradas negativas em Λ .*
- (iii) *A multiplicidade de α como autovalor de $\mathcal{L}(T)$ é o número de entradas nulas em Λ .*

Demonstração. A prova é a mesma do Teorema 2.5.2. \square

Observamos que o algoritmo *DiagonalizeW*(T, α) (Algoritmo 4) pode ser executado diretamente sobre a árvore T , desde que tenhamos armazenado os pesos dos vértices e das arestas de T .

Exemplo 4.2.3. *Seja T a árvore com pesos indicados na Figura 4.3.*

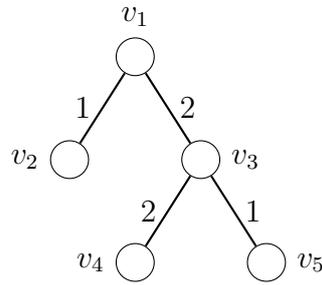


Figura 4.3: Árvore do Exemplo 4.2.3

Consideramos o caso em que os pesos dos vértices v_1, v_2, v_3, v_4 e v_5 de T são dados, respectivamente, por $\delta_1 = 1, \delta_2 = 2, \delta_3 = 1, \delta_4 = 1$ e $\delta_5 = 1$. Neste caso, a matriz laplaciana perturbada de T com respeito a matriz diagonal dos pesos dos vértices de T é dada por:

$$\mathbb{L}(T) = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -2 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 1 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Vamos aplicar o algoritmo $\text{Diagonalize}W(T, \alpha)$, com $\alpha = 0$. Neste caso, cada vértice v_i de T será inicializado com o valor diagonal $a(v_i) = \delta_i$, para $i = 1, \dots, 5$, conforme ilustra o lado esquerdo da Figura 4.4.

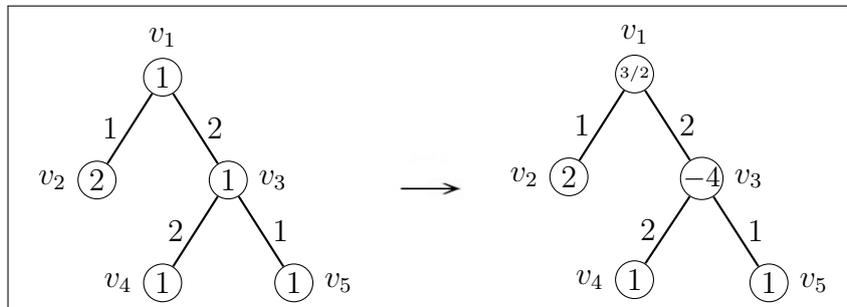


Figura 4.4: Aplicação do algoritmo $\text{Diagonalize}W(T, \alpha)$ com $\alpha = 0$

Como os vértices v_4 e v_5 são folhas, e ambos são filhos de v_3 , então, ao processarmos o vértice v_3 pelo algoritmo, obtemos

$$a(v_3) = \delta_3 - \frac{(\omega_{34})^2}{a(v_4)} - \frac{(\omega_{35})^2}{a(v_5)} = 1 - \frac{2^2}{1} - \frac{1^2}{1} = 1 - 4 - 1 = -4.$$

Como v_2 é folha, o algoritmo passará a processar o vértice v_1 , cujos filhos são os vértices v_2 e v_3 . Assim, temos que:

$$a(v_1) = \delta_1 - \frac{(\omega_{12})^2}{a(v_2)} - \frac{(\omega_{13})^2}{a(v_3)} = 1 - \frac{1^2}{2} - \frac{2^2}{-4} = 1 - \frac{1}{2} + 1 = \frac{3}{2}.$$

Vemos assim que o algoritmo produziu quatro valores diagonais positivos e um negativo, conforme ilustra o lado direito da Figura 4.4. Portanto, pelo Teorema 4.2.2, $\mathcal{P}(T)$ tem quatro autovalores positivos e um negativo.

A Figura 4.5 ilustra a aplicação do algoritmo com $\alpha = -2$.

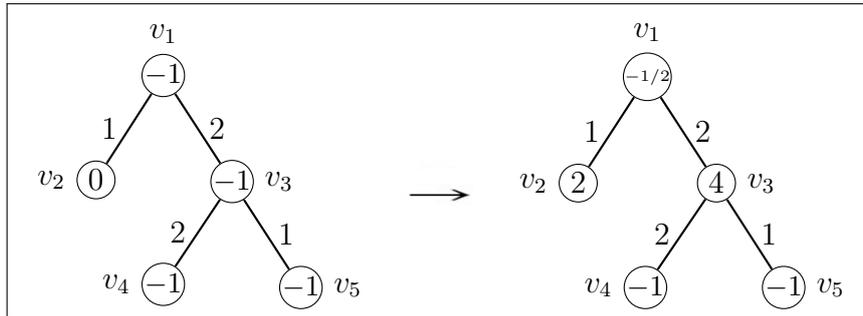


Figura 4.5: Aplicação do algoritmo $\text{Diagonalize } W(T, \alpha)$ com $\alpha = -2$

Neste caso, todos os vértices são inicializados com o valor $a(v_i) = \delta_i - 2$, para $i = 1, \dots, 5$. Como $a(v_4) = a(v_5) = 1 - 2 = -1$, ao processarmos o vértice v_3 pelo algoritmo, obtemos

$$a(v_3) = 1 - 2 - \frac{(\omega_{34})^2}{a(v_4)} - \frac{(\omega_{35})^2}{a(v_5)} = -1 - \frac{2^2}{-1} - \frac{1^2}{-1} = -1 + 4 + 1 = 4.$$

Vemos que $a(v_2) = 2 - 2 = 0$. Neste caso, como v_1 tem um filho com valor nulo, o algoritmo atribui o valor 2 para v_2 , enquanto que o valor diagonal de v_1 será

$$a(v_1) = -\frac{(\omega_{12})^2}{2} = -\frac{1^2}{2} = -\frac{1}{2},$$

o que permite concluir, pelo Teorema 4.2.2, que $\mathbb{P}(T)$ tem dois autovalores maiores do que 2 e três autovalores menores do que 2.

A Figura 4.6 mostra a aplicação do algoritmo com $\alpha = -1$.

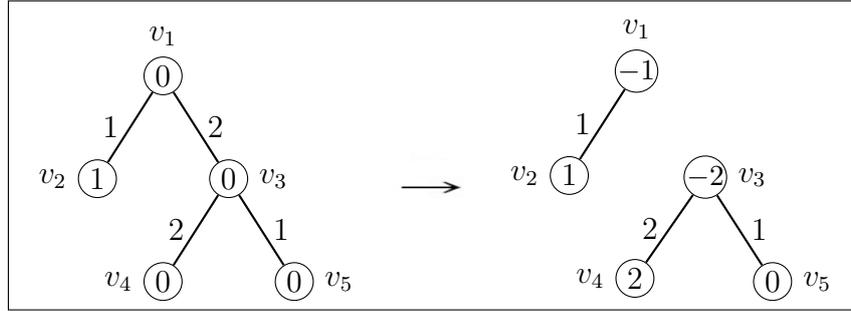


Figura 4.6: Aplicação do algoritmo $\text{Diagonalize}W(T, \alpha)$ com $\alpha = -1$

Neste caso, todos os vértices são inicializados com o valor $a(v_i) = \delta_i - 1$, para $i = 1, \dots, 5$. Como $a(v_4) = a(v_5) = 1 - 1 = 0$, e ambos os vértices v_4 e v_5 são filhos de v_3 , para processarmos o vértice v_3 , teremos que escolher um dos dois vértices, v_4 ou v_5 , para atribuir o valor diagonal 2. Suponhamos que o vértice escolhido seja v_4 . Então, o valor diagonal de v_3 será

$$a(v_3) = -\frac{(\omega_{34})^2}{2} = -\frac{2^2}{2} = -2.$$

Além disso, como v_3 não é a raiz e é filho de v_1 , a aresta que liga v_3 a v_1 é removida. Assim, v_1 passa a ter apenas v_2 como filho. Logo,

$$a(v_1) = 1 - 1 - \frac{(\omega_{12})^2}{a(v_2)} = 0 - \frac{1^2}{1} = -1,$$

demonstrando, pelo Teorema 4.2.2, que $\mathbb{P}(T)$ tem um autovalor igual a 1, dois autovalores menores do que 1 e dois autovalores maiores do que 1.

Podemos, dessa forma, concluir que $\mathbb{P}(T)$ tem um autovalor negativo, um autovalor positivo em $(0, 1)$, um autovalor igual a 1 e dois autovalores maiores do que 2. Com ajuda de um programa de computação numérica, obtemos que o polinômio característico de $\mathbb{P}(T)$ é dado por $p_{\mathbb{P}(T)}(\lambda) = (\lambda - 1) \cdot (\lambda^4 - 5\lambda^3 - \lambda^2 + 22\lambda - 12)$, cujas raízes são, aproximadamente, 1, 4, 1168, 2, 3342, 0, 6068 e $-2, 0579$.

É importante observar que o procedimento que descrevemos nesta seção poderia ser utilizado para localizar os autovalores de qualquer matriz simétrica M associada a uma árvore T . Isto porque não há restrições sobre os valores reais para os pesos dos vértices de T , os quais são as entradas da diagonal de M , incluindo possivelmente valores nulos. Apesar do algoritmo *Diagonalize W* ter sido desenvolvido para matrizes laplacianas perturbadas de árvores, as quais possuem pesos positivos nas arestas, ele utiliza durante sua execução os valores dos pesos das arestas elevado ao quadrado, e, portanto, não há restrições sobre os valores reais que representam estes pesos para o algoritmo. Tal observação mostra que nosso procedimento é mais geral e poderia ser aplicado a qualquer matriz real simétrica cujo grafo é uma árvore T . A condição necessária é a de que a matriz que será diagonalizada pelo algoritmo precisa ser a matriz de representação de uma árvore.

Dessa forma, uma questão a ser levantada é como identificar se uma dada matriz simétrica M de ordem n é a matriz de uma árvore de n vértices. Uma árvore é um grafo conexo sem ciclos. Assim, devemos identificar, primeiramente, se o grafo $G = G(M)$ é conexo. Para tal identificação, podemos utilizar algum algoritmo de busca, tais como o algoritmo de busca em profundidade *DFS* (*Depth First Search*) ou o algoritmo de busca em largura *BFS* (*Breadth First Search*). Tais algoritmos podem fazer uma varredura na matriz, buscando verificar se a partir de um vértice arbitrário v_i é possível alcançar, por algum caminho, todos os demais vértices de G . Para maiores detalhes sobre estes dois algoritmos citados, indicamos [13] e [38].

Uma vez que sabemos que G é conexo, para saber se G tem ou não ciclos, basta contar o número de entradas não nulas de M que estão acima da diagonal. Tal número representa exatamente o número de arestas de G . De fato: pela definição de $G(M)$, se $i \neq j$, então a entrada m_{ij} de M é não nula se e somente se $\{v_i, v_j\}$ é uma aresta de G ; além disso, $m_{ij} = m_{ji}$, pois M é simétrica e, portanto, o número de arestas de G será o número de entradas não nulas acima (ou abaixo)

da diagonal de M . Se tal número for igual a $n - 1$, então G é uma árvore (Teorema 2.1.2). Caso este número seja igual a n , então G é um grafo unicíclico (Corolário 2.1.4).

4.3 Propriedades espectrais da matriz laplaciana perturbada $\mu I - A$

Como a expressão da matriz laplaciana perturbada é geral, pois depende de uma matriz diagonal D arbitrária, convém considerar um caso especial deste tipo de matriz, buscando com isto obter algumas propriedades.

Consideremos então o caso em que $D = \mu I$, para algum $\mu \in \mathbb{R}$. Neste caso, dado o grafo G , a matriz laplaciana perturbada de G é

$$\mathcal{L}(G) = \mu I - A(G).$$

Observe que, em particular, se $\mu = 0$, $\mathcal{L}(G) = -A(G)$; enquanto que, se G não tem vértices isolados, $\mu = 1$ e os pesos das arestas de G forem dados por $\omega_{ij} = \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}}$, temos que $\mathcal{L}(G) = \mathcal{L}(G')$, onde G' é um grafo com as mesmas arestas e vértices do que G , porém, sem pesos (veja (2.3)). Ou seja, a matriz de adjacências de um grafo com pesos e a matriz laplaciana normalizada de um grafo sem pesos e sem vértices isolados são casos particulares de uma matriz laplaciana perturbada da forma $\mathcal{L}(G) = \mu I - A(G)$.

A seguir apresentamos algumas propriedades espectrais de uma matriz laplaciana perturbada da forma $\mathcal{L}(G) = \mu I - A(G)$. Primeiramente, utilizamos o seguinte resultado da matriz de adjacências. Uma versão deste resultado para um grafo sem pesos pode ser encontrada em [10, Proposição 3.4.1].

Teorema 4.3.1. *Sejam G um grafo de n vértices com pesos e $A = A(G)$ a matriz de adjacências de G . Se G é um grafo conexo, então G é bipartido se e somente se para cada autovalor η de A , $-\eta$ é também um autovalor, com a mesma multiplicidade.*

Demonstração. Se $G = G(V_1 \cup V_2, E)$ é um grafo bipartido de ordem n , com $|V_1| = p$, $|V_2| = q$, e $n = p + q$, podemos escrever a matriz de adjacências $A = A(G)$ como

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

onde $B_{p \times q}$ representa as adjacências dos vértices em V_1 com os vértices em V_2 .

Assim, se $v = [x \ y]^T$, com $x \in \mathbb{R}^p$, $y \in \mathbb{R}^q$, é um autovetor de A associado ao autovalor η , então temos que:

$$\begin{bmatrix} \eta x \\ \eta y \end{bmatrix} = \eta \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} By \\ B^T x \end{bmatrix}.$$

Logo, $By = \eta x$ e $B^T x = \eta y$. Portanto, para o vetor $w = [x \ -y]^T$ obtemos:

$$Aw = \begin{bmatrix} -By \\ B^T x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\eta x \\ \eta y \end{bmatrix} = -\eta \begin{bmatrix} x \\ -y \end{bmatrix} = -\eta w;$$

ou seja, w é um autovetor de A associado ao autovalor $-\eta$. Além disso, é fácil ver que se η tem multiplicidade m , então $-\eta$ também tem multiplicidade m , uma vez que o espaço gerado por v tem a mesma dimensão que o espaço gerado por w . Isto mostra que o espectro de A é simétrico, se G é bipartido.

Reciprocamente, suponhamos que o espectro de $A = A(G)$ é simétrico e sejam η_1, \dots, η_n os autovalores de A . Então, para qualquer k ímpar, temos que

$$\sum_{i=1}^n \eta_i^k = 0,$$

uma vez que para cada i , temos que $(-\eta_i)^k = -\eta_i^k$. Por outro lado, se η é autovalor de A , então η^k é autovalor de A^k , com a mesma multiplicidade. Assim, como A é

simétrica e, portanto, diagonalizável (Teorema 2.2.4), A^k é semelhante a uma matriz diagonal D por uma transformação de semelhança $S^{-1}A^kS = D$, onde D é a matriz diagonal com os autovalores de A^k na diagonal e S é a matriz de semelhança. Logo,

$$\text{tr}(A^k) = \text{tr}(S^{-1}A^kS) = \text{tr}(D) = \sum_{i=1}^n \eta_i^k = 0.$$

Contudo, como A é uma matriz com entradas não negativas, podemos concluir que todas as entradas da diagonal de A^k são nulas. Pelo Lema 4.1.3, sabemos que a entrada diagonal ii de A^k é positiva se e somente se existe um passeio fechado de comprimento k iniciando e terminando em i . Portanto, não existe nenhum ciclo de comprimento k em G . Consequentemente, pelo Teorema 2.1.5, G é bipartido, o que completa a prova. \square

Teorema 4.3.2. *Sejam G um grafo de n vértices e com pesos, $A(G)$ a matriz de adjacências de G e seja $\mu \in \mathbb{R}$. A matriz $\mathcal{P}(G) = \mu I - A(G)$, com autovalores $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$, possui as seguintes propriedades:*

- (i) $\sum_{i=1}^n \lambda_i = \mu \cdot n$.
- (ii) *Se G é um grafo conexo, então G é bipartido se e somente se para cada λ_i , $1 \leq i \leq n$, o número $2\mu - \lambda_i$ também é um autovalor de $\mathcal{P}(G)$.*

Demonstração. A prova do item (i) é direta, visto que o traço da matriz $\mu I - A(G)$ é $\mu \cdot n$. Para provar o item (ii), basta mostrarmos que o espectro de $\mu I - A(G)$ é simétrico em relação a μ se e somente se o espectro de $A(G)$ é simétrico (contando multiplicidades), e o resultado segue do Teorema 4.3.1. Suponhamos que o espectro de $A(G)$ é simétrico. Se λ é um autovalor de $\mu I - A(G)$, então $\mu - \lambda$ é autovalor de $A(G)$. Como o espectro de $A(G)$ é simétrico, segue-se que $\lambda - \mu$ é autovalor de $A(G)$. Logo, $\mu - (\lambda - \mu) = 2\mu - \lambda$ é autovalor de $\mu I - A(G)$. A recíproca é análoga. \square

Uma vez que, para grafos bipartidos, o espectro de $\mu I - A(G)$ é simétrico em relação ao valor μ , podemos nos perguntar quando μ é autovalor da

matriz $\mu I - A(G)$ e com qual multiplicidade. No caso específico de árvores, que são grafos bipartidos (veja Teorema 2.1.6), podemos obter tal multiplicidade usando o algoritmo $DiagonalizeW(T, \alpha)$, aplicando-o em uma árvore T e escalar $\alpha = -\mu$.

Consideremos um vértice v incidente a $k > 0$ pendentes e possivelmente outros filhos que não são pendentes, assim como um pai w , caso v não seja a raiz. A cada pendente y de v é atribuído o valor diagonal $a(y) = \mu - \mu = 0$, como mostra o lado esquerdo da Figura 4.7. Ao processar o vértice v pelo algoritmo, seu valor diagonal passa a ser $-\frac{(\omega_{vy^*})^2}{2}$, onde y^* é um pendente de v escolhido para assumir o valor 2. Portanto, $k - 1$ pendentes continuam com valor diagonal 0, e a aresta conectando v com seu pai w é removida, como ilustra o lado direito da Figura 4.7. Isto mostra que existem pelo menos $k - 1$ autovalores de $\mathcal{L}(T)$ iguais ao valor μ . Como isto ocorre para cada vértice que tenha vértices pendentes, então a multiplicidade do autovalor μ é pelo menos $p(T) - q(T)$, onde $p(T)$ e $q(T)$ denotam, respectivamente, o número de pendentes e o de quase-pendentes de T .

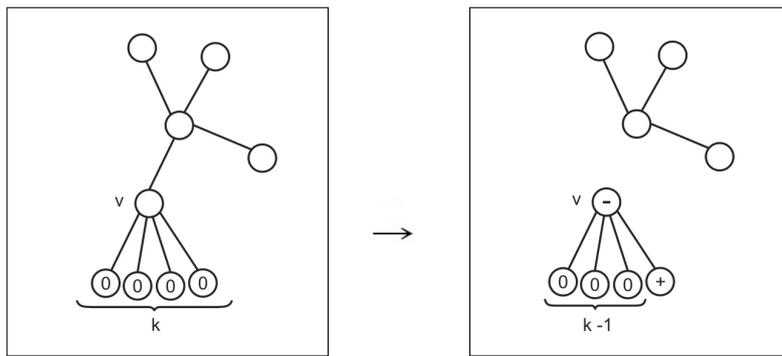


Figura 4.7: $DiagonalizeW(T, -\mu)$.

Podemos obter um resultado ainda mais forte. Um *vértice interior* de uma árvore T é um vértice de T que não é pendente nem quase-pendente. Um *vértice interior isolado* é um vértice interior de T que só é adjacente a quase-pendentes de T . Denotamos por $inn(T)$ o número de vértices interiores isolados de T . Analisando o procedimento descrito acima, note que, se u é um vértice interior isolado de T , seu

valor diagonal continua zero após serem processados todos os quase-pendentes que são adjacentes a ele, supondo que u não seja filho de nenhum destes quase-pendentes. Se u for filho de algum quase-pendente x , então o valor diagonal de u continua zero, no caso em que atribuímos o valor 2 a um dos pendentes ou a outro vértice interior isolado filho de x , ou, então, atribui-se o valor 2 a u e todos os valores diagonais dos filhos de x (pendentes e possíveis vértices interiores isolados) continuam zero. Portanto, obtemos o seguinte resultado. Denotamos por $m_T(\lambda)$ a multiplicidade de λ como autovalor da matriz $\mathcal{L}(T) = \mu I - A(T)$ de uma árvore T .

Teorema 4.3.3. *Se T é uma árvore com $p(T)$ vértices pendentes, $q(T)$ vértices quase-pendentes e $inn(T)$ vértices interiores isolados e $\mu \in \mathbb{R}$, então*

$$m_T(\mu) \geq p(T) - q(T) + inn(T).$$

O Teorema 4.3.3 generaliza resultados já obtidos para certas matrizes. A cota inferior apresentada no Teorema 4.3.3 foi obtida por Vukadinović *et al* [47] para o autovalor 1 da matriz laplaciana normalizada $\mathcal{L}(T)$ de uma árvore T . Um resultado mais clássico aparece em [15], segundo o qual $m_T(0) \geq p(T) - q(T)$, onde $m_T(0)$ representa a multiplicidade do zero como autovalor da matriz de adjacências de uma árvore T .

Observamos que esta cota pode não ser verdadeira se $\mathcal{L}(T)$ for uma matriz laplaciana perturbada de uma árvore T com respeito a uma matriz diagonal $D \neq \mu I$, para todo $\mu \in \mathbb{R}$.

Exemplo 4.3.4. *Seja T a árvore do Exemplo 4.2.3, com os mesmos pesos de arestas, porém agora com pesos dos vértices v_1, v_2, v_3, v_4, v_5 dados, respectivamente, por $-1, 0, 0, 1, 0$. Neste caso, a matriz laplaciana perturbada de T com respeito à matriz*

diagonal dos pesos dos vértices de T é dada por:

$$\mathcal{P}(T) = \begin{bmatrix} -1 & -1 & -2 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Embora o traço da matriz seja igual a 0, temos que 0 não é autovalor de $\mathcal{P}(T)$, uma vez que tal matriz é não singular. Por outro lado, temos que $p(T) - q(T) = 3 - 2 = 1 > m_T(0)$.

A cota do Teorema 4.3.3 é atendida com exatidão para $\mathcal{P}(T) = \mu I - A(T)$ quando T tem diâmetro $d \leq 4$. No caso em que $d = 1$, temos que $T = K_2$, o grafo completo de 2 vértices, cujos autovalores são $\mu + \omega$ e $\mu - \omega$, onde ω representa o peso da aresta que liga os dois vértices. Assim, $m_T(\mu) = 0$.

No caso em que $d = 2$, temos que $T = S_n$, a estrela de n vértices e, neste caso, temos que $p(T) = n - 1$, $q(T) = 1$ e $\text{inn}(T) = 0$. Para ver que $m_T(\mu) = n - 2$, aplicamos o algoritmo *DiagonalizeW*(S_n, α), com $\alpha = -\mu$ e escolhemos o vértice de grau $n - 1$ como raiz. Como todos os $n - 1$ pendentes de S_n recebem valores diagonais nulos, ao processarmos a raiz v , seu valor diagonal passa a ser $-\frac{(\omega_{vy^*})^2}{2}$, onde y^* é um pendente de v escolhido para assumir o valor 2. Portanto, $n - 2$ pendentes restarão com valor diagonal 0 ao finalizarmos o algoritmo, o que mostra que $m_T(\mu) = n - 2$.

Vejamos o caso em que $d = 3$. Uma árvore de diâmetro 3 pode ser vista como um caminho P_2 de 2 vértices, em que colocamos $k \geq 1$ pendentes num dos vértices e colocamos $\ell \geq 1$ pendentes no outro vértice de P_2 , conforme ilustra a Figura 4.8.

Denotamos por $T(k, \ell, d)$ e chamamos de *double broom* com n vértices, uma árvore construída tomando-se o caminho de vértices $1, 2, \dots, d$, adicionando

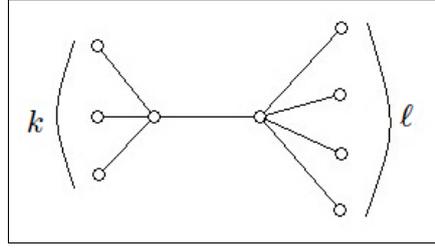


Figura 4.8: Árvore de diâmetro 3

$k \geq 1$ vértices pendentes adjacentes ao vértice 1 e $\ell \geq 1$ vértices pendentes adjacentes ao vértice d , de tal forma que $n = k + \ell + d$ é o número de vértices da árvore e $d + 1$ é o diâmetro de T . Desta forma, uma árvore de diâmetro 3 é uma *double broom* $T(k, \ell, 2)$, uma vez que uma árvore de diâmetro 3 tem exatamente 2 vértices não pendentes e que são adjacentes.

Assim, para uma árvore $T = T(k, \ell, 2)$, de diâmetro 3, temos que $p(T) = k + \ell = n - 2$, $q(T) = 2$ e $inn(T) = 0$. Vamos mostrar que $m_T(\mu) = n - 4$. Para isto, aplicamos o algoritmo *DiagonalizeW(T, α)*, com $\alpha = -\mu$ e T com raiz no vértice com ℓ pendentes. O algoritmo então inicializa todos os vértices com o valor 0. Como todos os k pendentes do vértice adjacente à raiz têm valores nulos, ao processarmos este vértice, seu valor diagonal torna-se negativo e um de seus k pendentes torna-se positivo. Ao processarmos a raiz que tem ℓ pendentes, como ela possui pelo menos um pendente com valor zero, já que $\ell \geq 1$, seu valor diagonal torna-se negativo, e exatamente um dos seus ℓ pendentes recebe valor positivo, o que mostra que, ao final do procedimento, obteremos $k + \ell - 2 = n - 4$ valores nulos. Portanto, $m_T(\mu) = n - 4$.

Vamos agora considerar o conjunto de todas as árvores de diâmetro 4. As árvores neste conjunto são da forma ilustrada na Figura 4.9 abaixo.

Escrevemos $T = \mathcal{T}(k, p_1, p_2, \dots, p_k, m)$ para representar uma árvore de diâmetro 4, que contém um vértice v adjacente a $k \geq 2$ quase-pendentes de grau $p_i + 1$, onde $p_i \geq 1$ para todo i , $i = 1, \dots, k$, e também possivelmente adjacente

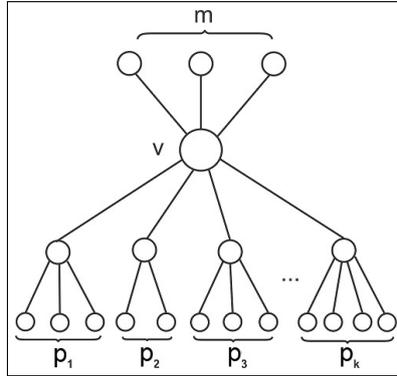


Figura 4.9: Árvore de diâmetro 4.

a $m \geq 0$ pendentos de grau 1, de forma que o número de vértices de T é $n = k + m + 1 + \sum_{i=1}^k p_i$. O seguinte resultado dá a exata multiplicidade de μ como autovalor de $\mathcal{D}(T) = \mu I - A(T)$, onde T é uma árvore de diâmetro 4 qualquer.

Teorema 4.3.5. *Para toda árvore T de diâmetro 4 da forma $T = \mathcal{T}(k, p_1, p_2, \dots, p_k, m)$, com $p(T)$ pendentos e $q(T)$ quase-pendentos, a multiplicidade de μ como autovalor de $\mu I - A(T)$ é*

$$1 - k + \sum_{i=1}^k p_i = p(T) - q(T) + 1 \geq 1,$$

quando $m = 0$, e é igual a

$$m - 1 - k + \sum_{i=1}^k p_i = p(T) - q(T),$$

quando $m > 0$.

Demonstração. Vamos aplicar o algoritmo $DiagonalizeW(T, \alpha)$, com $\alpha = -\mu$, em uma árvore $\mathcal{T}(k, p_1, p_2, \dots, p_k, m)$ com raiz no vértice v de grau $k + m$, adjacente aos vértices quase-pendentos v_1, v_2, \dots, v_k , de graus $p_1 + 1, \dots, p_k + 1$, respectivamente.

Suponhamos que $m = 0$, ou seja, que a raiz v não tem pendentos. Todos os vértices são inicializados com valor diagonal nulo, uma vez que $\mu + \alpha = 0$, como mostra o lado esquerdo da Figura 4.10.

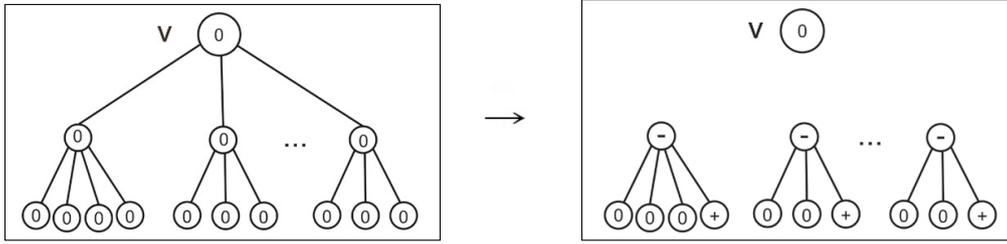


Figura 4.10: Árvore de diâmetro 4 com $m = 0$.

A seguir, para $i = 1, \dots, k$, o valor de v_i torna-se $-\frac{(\omega_{v_i v_i^*})^2}{2}$, onde v_i^* é um pendente de v_i escolhido para receber o valor 2, e a aresta conectando v_i a v é removida, de forma que o valor da raiz v continua 0. Os outros $\sum (p_i - 1)$ pendentes também continuam com valor diagonal 0, como ilustra o lado direito da Figura 4.10. Portanto, pelo Teorema 4.2.2, a multiplicidade de μ como um autovalor de $\mathcal{L}(T)$ é exatamente

$$\sum_{i=1}^k (p_i - 1) + 1 = \left(\sum_{i=1}^k p_i \right) - k + 1 = p(T) - q(T) + 1.$$

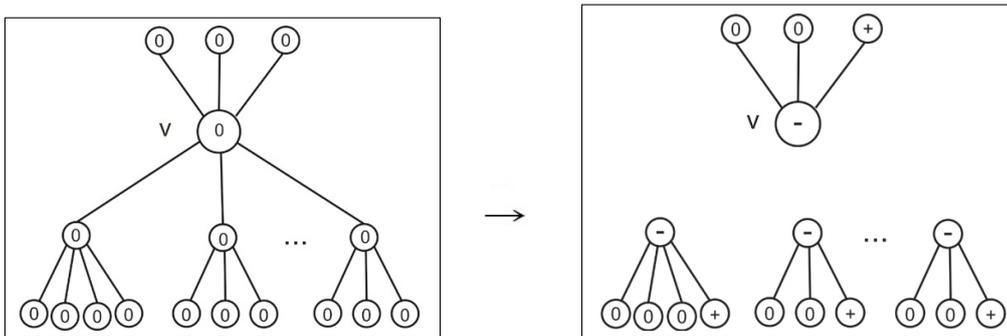


Figura 4.11: Árvore de diâmetro 4 com $m > 0$.

Suponhamos agora que $m > 0$. Neste caso, após serem removidas as arestas que conectam os v_i 's ao vértice v , o valor diagonal de v muda (veja a Figura 4.11). Processando a raiz v , uma vez que só restam arestas conectando v aos seus m pendentes, os quais possuem valor 0, o valor diagonal atribuído a v é $-\frac{(\omega_{v v^*})^2}{2}$, onde v^* é um pendente de v escolhido para receber o valor 2. Logo, a multiplicidade de

μ como um autovalor de $\mathcal{L}(T)$ é exatamente

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k (p_i - 1) + (m - 1) &= \left(\sum_{i=1}^k p_i \right) - k + (m - 1) = \left(\sum_{i=1}^k p_i \right) + m - (k + 1) \\ &= p(T) - q(T). \quad \square \end{aligned}$$

Salientamos que o Teorema 4.3.5 mostra que a cota inferior do Teorema 4.3.3 é atingida para árvores de diâmetro 4, pois no caso em que $m = 0$, temos que $\text{inn}(T) = 1$ e, no caso em que $m > 0$, temos que $\text{inn}(T) = 0$.

Corolário 4.3.6. *A cota inferior do Teorema 4.3.3 é atingida para qualquer árvore com diâmetro menor do que 5.*

Passamos agora a analisar a multiplicidade dos demais autovalores de $\mathcal{L}(T) = \mu I - A(T)$, para árvores com diâmetro $d \leq 4$. No caso em que $d = 1$, então $T = K_2$ e $\mathcal{L}(T)$ tem 2 autovalores distintos ($\mu + \omega$ e $\mu - \omega$, onde ω é o peso da aresta que liga os dois vértices). Se $d = 2$, então $\mathcal{L}(T)$ tem 3 autovalores distintos, uma vez que $m_T(\mu) = n - 2$ e o espectro de $\mathcal{L}(T)$ é simétrico em relação a μ , pelo Teorema 4.3.2. Além disso, os autovalores diferentes de μ são simples.

Se $d = 3$, usando o algoritmo para localização de autovalores, obtemos o resultado abaixo.

Teorema 4.3.7. *Seja T uma árvore de diâmetro 3. Então todos os autovalores de $\mathcal{L}(T) = \mu I - A(T)$, exceto possivelmente pelo autovalor μ , são simples. Mais ainda, $\mathcal{L}(T)$ tem exatamente 4 autovalores distintos se e somente se $T = P_4$, o caminho com 4 vértices. Caso contrário, $\mathcal{L}(T)$ tem exatamente 5 autovalores distintos.*

Demonstração. Segue do Corolário 4.1.6 que se $T = P_4$, então $\mathcal{L}(T)$ tem exatamente 4 autovalores distintos. Suponhamos então que T não é o caminho. Como $m_T(\mu) = n - 4 > 0$, precisamos mostrar que os demais quatro autovalores de T são simples. Suponhamos que $\lambda \neq \mu$ seja autovalor de $\mathcal{L}(T)$. Como T é uma árvore de diâmetro 3, T tem exatamente dois vértices que não são pendentos (veja Figura

4.8). Assim, vamos aplicar o algoritmo *Diagonalize* $W(T, \alpha)$ com $\alpha = -\lambda$ e com raiz em um dos dois vértices que não são pendentos. Neste caso, o valor diagonal de todos os pendentos é $\mu - \lambda \neq 0$. Logo, os únicos valores diagonais que podem ser nulos são o da raiz e o valor do outro vértice que não é pendente. Porém, se o valor do vértice não pendente diferente da raiz for nulo, o algoritmo atribuirá um valor negativo para a raiz e o valor do outro vértice ficará positivo. Isto contradiz o fato de que λ é autovalor de $\mathcal{P}(T)$ e, pelo Teorema 4.2.2, ao menos um valor diagonal deve ser zero. Consequentemente, o valor diagonal da raiz é o único nulo, o que implica que a multiplicidade de λ é 1. Portanto, todos os autovalores de $\mathcal{P}(T)$, exceto possivelmente μ , são simples, o que implica que $\mathcal{P}(T)$ tem exatamente 5 autovalores distintos. \square

No caso em que $d = 4$, vamos considerar a árvore $T = \mathcal{T}(k, p_1, p_2, \dots, p_k, m)$ como na Figura 4.9. Para cada $i = 1, \dots, k$, vamos denotar os pendentos do vértice v_i por q_{ih} , onde $h = 1, \dots, p_i$, e por ω_{ih} o peso da aresta que liga v_i com q_{ih} . Temos assim o seguinte resultado envolvendo a multiplicidade dos autovalores de $\mathcal{P}(T) = \mu I - A(T)$ para árvores de diâmetro 4.

Teorema 4.3.8. *Seja $T = \mathcal{T}(k, p_1, p_2, \dots, p_k, m)$ uma árvore de diâmetro 4. Então, valem as seguintes afirmações:*

- (i) *Se a soma dos quadrados dos pesos das arestas que ligam v_i aos seus pendentos é igual a σ para exatamente $t + 1$ v_i 's, $t \geq 1$, então $\lambda_1 = \mu - \sqrt{\sigma}$ e $\lambda_2 = \mu + \sqrt{\sigma}$ são autovalores de $\mathcal{P}(T)$ com multiplicidade t .*
- (ii) *Se $\lambda \neq \mu$ é um autovalor de $\mathcal{P}(T)$ com multiplicidade $t \geq 2$, então exatamente $t + 1$ v_i 's possuem a mesma soma dos quadrados dos pesos ω_{ih} , $h = 1, \dots, p_i$, das arestas que ligam v_i aos seus pendentos.*

Demonstração. (i) Sem perda de generalidade, suponhamos que, para algum t , $1 \leq t < k$, tenhamos $\sum_{h=1}^{p_i} (\omega_{ih})^2 = \sigma$, para todo i , com $1 \leq i \leq t + 1$, e que $\sum_{h=1}^{p_i} (\omega_{ih})^2 \neq \sigma$, se $i > t + 1$. Aplicamos o algoritmo *Diagonalize* $W(T, \alpha)$, com raiz o

vértice v de grau $k + m$ e com $\alpha = -\lambda$, onde $\lambda = \mu - \sqrt{\sigma}$. Inicialmente, todos os pendentes de T recebem valor diagonal $\mu - \lambda = \sqrt{\sigma}$, o qual é positivo. Além disso, para todo i , $i = 1, \dots, t + 1$, os quase-pendentes v_i têm seu valor diagonal atualizado para zero, uma vez que

$$a(v_i) = \mu - \lambda - \sum_{h=1}^{p_i} \frac{(\omega_{ih})^2}{\mu - \lambda} = \frac{(\mu - \lambda)^2 - \sigma}{\mu - \lambda} = 0.$$

Assim, processando a raiz v , obtemos $a(v_j) = 2$, para exatamente um j em $\{1, \dots, t + 1\}$ e $a(v) = -\frac{(\omega_{vv_j})^2}{2} < 0$. Portanto, ao final do algoritmo, haverá exatamente t valores diagonais iguais a zero, o que implica que λ é um autovalor de $\mathcal{L}(T)$ com multiplicidade t . O resultado para $\lambda = \mu + \sqrt{\sigma}$ segue da simetria do espectro de $\mathcal{L}(T) = \mu I - A(T)$ (Teorema 4.3.2, (ii)).

(ii) Suponhamos que $\lambda \neq \mu$ é um autovalor de $\mathcal{L}(T)$ com multiplicidade $t \geq 2$. Ao aplicarmos o algoritmo *Diagonalize* $W(T, -\lambda)$, considerando o vértice v de grau $k + m$ como raiz, cada pendente de T recebe o valor $\mu - \lambda \neq 0$. Logo, $a(v_i) = \mu - \lambda - \sum_{h=1}^{p_i} \frac{(\omega_{ih})^2}{\mu - \lambda}$, para todo i , $i = 1, \dots, k$. Por outro lado, devido à multiplicidade de λ , ao final do algoritmo existirão exatamente t valores diagonais nulos. Uma vez que todos os pendentes de T possuem valor não nulo e $t \geq 2$, a única possibilidade de obtermos exatamente t valores diagonais nulos ao fim do algoritmo é que $a(v_i) = 0$ para exatamente $t + 1$ v_i 's, de tal forma que, ao processar a raiz v , o valor de v torna-se negativo e o valor de um desses $t + 1$ quase-pendentes torna-se positivo. Isto implica que $t + 1 \leq k$. Além disso, para $1 \leq i < j \leq k$,

$$a(v_i) = a(v_j) \Leftrightarrow \mu - \lambda - \sum_{h=1}^{p_i} \frac{(\omega_{ih})^2}{\mu - \lambda} = \mu - \lambda - \sum_{h=1}^{p_j} \frac{(\omega_{jh})^2}{\mu - \lambda} \Leftrightarrow \sum_{h=1}^{p_i} (\omega_{ih})^2 = \sum_{h=1}^{p_j} (\omega_{ij})^2,$$

como queríamos demonstrar. \square

A partir do Teorema 4.3.8, podemos estabelecer uma cota inferior para o número de autovalores simples de $\mathcal{L}(T) = \mu I - A(T)$, onde $T = \mathcal{T}(k, p_1, p_2, \dots, p_k, m)$ é uma árvore de diâmetro 4. Vamos fazer uma partição dos vértices $\{v_1, v_2, \dots, v_k\} = V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_s$, com $s \geq 1$, de maneira que v_i e v_j pertencem ao mesmo subconjunto

V_ℓ se e somente se $\sum_{h=1}^{p_i} (\omega_{ih})^2 = \sum_{h=1}^{p_j} (\omega_{jh})^2 = \sigma_\ell$, ou seja, dois vértices quase-pendentes de T estão no mesmo subconjunto da partição se e somente se a soma dos quadrados dos pesos das arestas que ligam estes vértices aos seus respectivos pendentes são iguais. Note que se $\sum_{h=1}^{p_i} (\omega_{ih})^2 \neq \sum_{h=1}^{p_j} (\omega_{jh})^2$, para todo $1 \leq i < j \leq k$, então $V_\ell = \{v_\ell\}$, para todo $1 \leq \ell \leq k$. Temos então o seguinte resultado.

Teorema 4.3.9. *Se $T = \mathcal{T}(k, p_1, p_2, \dots, p_k, m)$ é uma árvore de diâmetro 4 com partição dos vértices $\{v_1, v_2, \dots, v_k\} = V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_s$ estabelecida conforme acima, então $\mathcal{P}(T) = \mu I - A(T)$ tem pelo menos $2s$ autovalores simples, no caso em que $m = 0$, e tem pelo menos $2s + 2$ autovalores simples, no caso em que $m > 0$.*

Demonstração. Vamos considerar inicialmente o caso em que $m = 0$. Neste caso, pelo Teorema 4.3.5, a multiplicidade do autovalor μ é exatamente $1 - k + \sum_{i=1}^k p_i$. Portanto, $\mathcal{P}(T)$ tem $2k$ autovalores diferentes de μ . Tomando uma partição $\{v_1, v_2, \dots, v_k\} = V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_s$, temos que, pelo Teorema 4.3.8, $\mu + \sqrt{\sigma_\ell}$ e $\mu - \sqrt{\sigma_\ell}$ são autovalores de $\mathcal{P}(T)$ com multiplicidade $|V_\ell| - 1$, se $|V_\ell| > 1$. Observamos que, se $|V_\ell| = 1$, então $\mu + \sqrt{\sigma_\ell}$ e $\mu - \sqrt{\sigma_\ell}$ não são autovalores de $\mathcal{P}(T)$. Totalizando estes possíveis autovalores, obtemos $2 \cdot \sum_{\ell=1}^s (|V_\ell| - 1) = 2 \cdot (k - s)$. Pelo Teorema 4.3.8, se $\lambda \neq \mu$ for algum autovalor de T com multiplicidade $t \geq 2$, então λ está obrigatoriamente entre os $2(k - s)$ possíveis autovalores de T calculados acima. Logo, os demais $2k - (2k - 2s) = 2s$ autovalores serão todos simples. Portanto, no caso em que $m = 0$, segue-se que $\mathcal{P}(T)$ tem, pelo menos, $2s$ autovalores simples.

No caso em que $m > 0$, temos que, pelo Teorema 4.3.5, a multiplicidade do autovalor μ é exatamente $m - 1 - k + \sum_{i=1}^k p_i$. Logo, neste caso, existem $2k + 2$ autovalores de $\mathcal{P}(T)$ diferentes de μ . Com um argumento análogo ao caso acima, obtemos que $\mathcal{P}(T)$ tem, pelo menos, $2k + 2 - (2k - 2s) = 2s + 2$ autovalores simples. \square .

Corolário 4.3.10. *Se $\sum_{h=1}^{p_i} (\omega_{ih})^2 \neq \sum_{h=1}^{p_j} (\omega_{jh})^2$, para todo $1 \leq i < j \leq k$, então, exceto possivelmente pelo autovalor μ , todos os autovalores de $\mathcal{L}(T) = \mu I - A(T)$ são simples.*

4.4 Árvores com 5 autovalores distintos

Queremos, nesta seção, caracterizar exatamente quais são as árvores para as quais qualquer matriz laplaciana perturbada tem exatamente 5 autovalores distintos.

Com relação a esta classe de matrizes, vimos nas seções anteriores que a única árvore com diâmetro 1 é o K_2 , que tem 2 autovalores distintos; a única árvore de diâmetro 2 é a estrela, que tem exatamente 3 autovalores distintos; o caminho P_4 tem exatamente 4 autovalores distintos (Corolário 4.1.6) e qualquer árvore de diâmetro 3 que não é o caminho tem exatamente 5 autovalores distintos (Teorema 4.3.7). Além disso, se o diâmetro de uma árvore T é maior do que 3, então, pelo Teorema 4.1.7, T tem pelo menos 5 autovalores distintos. Logo, P_4 é a única árvore com 4 autovalores distintos.

Vejamos então quais são as outras árvores, necessariamente de diâmetro 4, que possuem exatamente 5 autovalores distintos para a matriz laplaciana perturbada $\mu I - A$, caso existam.

Uma double broom $T(k, \ell, 3)$, ilustrada na Figura 4.12, é uma árvore de diâmetro 4.

O argumento usado na demonstração do Teorema 4.3.7 para o caso de diâmetro 3 pode ser aplicado de maneira similar para obtermos o resultado abaixo.

Teorema 4.4.1. *Se uma árvore T é uma double broom $T(k, \ell, 3)$ de diâmetro 4, então $\mathcal{L}(T) = \mu I - A(T)$ tem exatamente 5 autovalores distintos.*

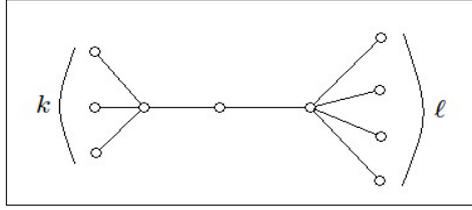


Figura 4.12: Double broom $T(k, \ell, 3)$.

Queremos mostrar ainda que existe um outro tipo de árvore de diâmetro 4 que tem 5 autovalores distintos. Como na seção anterior, escrevemos $T = \mathcal{T}(k, p_1, p_2, \dots, p_k, m)$ para representar uma árvore de diâmetro 4 de ordem $n = k + m + 1 + \sum_{i=1}^k p_i$, que contém um vértice v adjacente a $k \geq 2$ quase-pendentes v_i de grau $p_i + 1$, onde $p_i \geq 1$ para todo i , $i = 1, \dots, k$, e também possivelmente adjacente a $m \geq 0$ vértices pendentes (veja a Figura 4.9).

Teorema 4.4.2. *Seja T uma árvore de diâmetro 4 da forma $\mathcal{T}(k, p_1, p_2, \dots, p_k, m)$. Se $m = 0$ e todos os vértices v_i , $i = 1, \dots, k$, possuem a mesma soma dos quadrados dos pesos ω_{ih} , $h = 1, \dots, p_i$, das arestas que ligam v_i aos seus pendentes, então $\mathcal{L}(T) = \mu I - A(T)$ tem exatamente 5 autovalores distintos.*

Demonstração. Pelo Teorema 4.3.5, como $m = 0$, $m_T(\mu) = 1 - k + \sum_{i=1}^k p_i$. Logo, $\mathcal{L}(T)$ tem exatamente $2k$ autovalores diferentes de μ . Se $\sum_{h=1}^{p_i} (\omega_{ih})^2 = \sigma$, para todo $1 \leq i \leq k$, então, pelo Teorema 4.3.8, $\lambda_1 = \mu + \sqrt{\sigma}$ e $\lambda_2 = \mu - \sqrt{\sigma}$ são autovalores de $\mathcal{L}(T)$ com multiplicidade $k - 1 \geq 1$ cada um. Logo, os autovalores de $\mathcal{L}(T)$ diferentes de μ , $\mu + \sqrt{\sigma}$ e de $\mu - \sqrt{\sigma}$ são exatamente $2k - (2(k - 1)) = 2$. Além disso, estes dois autovalores são simples (Teorema 4.3.9), o que conclui que $\mathcal{L}(T)$ tem exatamente 5 autovalores distintos. \square

Queremos mostrar que as árvores descritas nos Teoremas 4.3.7, 4.4.1 e 4.4.2 são as únicas para as quais a matriz laplaciana perturbada da forma $\mathcal{L}(T) =$

$\mu I - A(T)$ tem exatamente 5 autovalores distintos, o que completa a caracterização das árvores com até 5 autovalores distintos.

Seja T uma árvore de diâmetro 4 da forma $\mathcal{T}(k, p_1, p_2, \dots, p_k, m)$. Vamos considerar inicialmente o caso em que, para todo $1 \leq i < j \leq k$, tenhamos $\sum_{h=1}^{p_i} (\omega_{ih})^2 \neq \sum_{h=1}^{p_j} (\omega_{jh})^2$, ou seja, não há dois vértices distintos v_i e v_j para os quais a soma dos quadrados dos pesos das arestas que ligam v_i e v_j a seus pendentes seja a mesma. Observamos que se $k = 2$ e $m = 0$, então T é uma *double broom* de diâmetro 4, que já consideramos no Teorema 4.4.1. Portanto, vamos considerar os casos em que $m > 0$ e $k \geq 2$, e $m = 0$ e $k \geq 3$.

Lema 4.4.3. *Seja $T = T(k, p_1, p_2, \dots, p_k, m)$ árvore de diâmetro 4 que não é uma double broom. Se $\sum_{h=1}^{p_i} (\omega_{ih})^2 \neq \sum_{h=1}^{p_j} (\omega_{jh})^2$, para todo $1 \leq i < j \leq k$, então $\mathcal{P}(T) = \mu I - A(T)$ tem pelo menos 6 autovalores distintos.*

Demonstração. Primeiramente, vamos considerar o caso em que $m = 0$ e $k \geq 3$. Pelo Teorema 4.3.5, a multiplicidade do autovalor μ é exatamente $1 - k + \sum_{i=1}^k p_i \geq 1$. Logo, $\mathcal{P}(T)$ possui $n - m_T(\mu) = 2k \geq 6$ autovalores diferentes de μ . Como, por hipótese, $\sum_{h=1}^{p_i} (\omega_{ih})^2 \neq \sum_{h=1}^{p_j} (\omega_{jh})^2$, para todo $1 \leq i < j \leq k$, então, pelo Corolário 4.3.10, todos os $2k$ os autovalores diferentes de μ são simples. Portanto, segue que $\mathcal{P}(T)$ tem pelo menos 7 autovalores distintos neste caso.

No caso em que $m > 0$ e $k \geq 2$, pelo Teorema 4.3.5, a multiplicidade do autovalor μ é exatamente $m - 1 - k + \sum_{i=1}^k p_i \geq 0$. Logo, existem $n - m_T(\mu) = 2k + 2 \geq 6$ autovalores de $\mathcal{P}(T)$ diferentes de μ . Se $\sum_{h=1}^{p_i} (\omega_{ih})^2 \neq \sum_{h=1}^{p_j} (\omega_{jh})^2$, para todo $1 \leq i < j \leq k$, então, pelo Corolário 4.3.10, todos os $2k + 2$ autovalores diferentes de μ são simples. Portanto, $\mathcal{P}(T)$ tem pelo menos 6 autovalores distintos, uma vez que $m_T(\mu)$ pode ser igual a zero neste caso. \square

Vamos considerar agora o caso das árvores T de diâmetro 4 da forma $T = \mathcal{T}(k, p_1, p_2, \dots, p_k, m)$, onde, para certos v_i e v_j , $1 \leq i < j \leq k$, possamos ter

$$\sum_{h=1}^{p_i} (\omega_{ih})^2 = \sum_{h=1}^{p_j} (\omega_{jh})^2. \quad (4.2)$$

Podemos notar que se a igualdade (4.2) for válida para todos os v_i 's e $m = 0$, então T é a árvore descrita no Teorema 4.4.2. Assim, vamos considerar os subcasos onde ou $m > 0$ ou existe pelo menos um vértice v_ℓ , $1 \leq \ell \leq k$, para o qual não vale a igualdade (4.2).

Lema 4.4.4. *Seja $T = \mathcal{T}(k, p_1, p_2, \dots, p_k, m)$ uma árvore de diâmetro 4 que não satisfaz as hipóteses do Teorema 4.4.2. Se existirem i e j , $1 \leq i < j \leq k$, para os quais a igualdade (4.2) for verdadeira, então $\mathcal{P}(T) = \mu I - A(T)$ tem pelo menos 6 autovalores distintos.*

Demonstração. Como T não satisfaz as hipóteses do Teorema 4.4.2, ou (i) $k \geq 3$ e existe um vértice v_r , $1 \leq r \leq k$, $r \neq i, j$, tal que a soma dos quadrados dos pesos das arestas que ligam v_r aos seus pendentes não satisfaz a igualdade (4.2), ou (ii) todos os v_i 's são tais que a soma dos quadrados dos pesos das arestas que ligam v_i aos seus pendentes satisfazem a igualdade (4.2) e $m > 0$.

Façamos uma partição de $\{v_1, v_2, \dots, v_k\} = V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_s$ de maneira que dois vértices estão no mesmo subconjunto da partição se e somente se a soma dos quadrados dos pesos das arestas que ligam estes vértices aos seus respectivos pendentes são iguais. Por hipótese, existe pelo menos um V_ℓ , para $1 \leq \ell \leq s$, com $|V_\ell| \geq 2$ vértices e, para os quais, a soma dos quadrados dos pesos das arestas que ligam estes vértices aos seus pendentes são iguais a σ_ℓ . Pelo Teorema 4.3.8, $\lambda_1 = \mu - \sqrt{\sigma_\ell}$ e $\lambda_2 = \mu + \sqrt{\sigma_\ell}$ são autovalores de $\mathcal{P}(T)$ com multiplicidade $|V_\ell| - 1 \geq 1$.

Para o caso (i), teremos que o número s de subconjuntos da partição será pelo menos 2, uma vez que v_r não satisfaz a igualdade (4.2) para nenhum $i \neq r$ e, portanto, $v_r \notin V_\ell$. Além disso, se $m = 0$, pelo Teorema 4.3.5, a multiplicidade

do autovalor μ é exatamente $1 - k + \sum_{i=1}^k p_i \geq 1$ e, pelo Teorema 4.3.9, T tem pelo menos $2s \geq 4$ autovalores simples diferentes de μ e $\mu \pm \sqrt{\sigma_\ell}$, o que mostra que T terá pelo menos 7 autovalores distintos. Se $m > 0$, pelo Teorema 4.3.9, T tem pelo menos $2s + 2 \geq 6$ autovalores simples diferentes de μ e $\mu \pm \sqrt{\sigma_\ell}$, o que mostra que T terá pelo menos 8 autovalores distintos, uma vez que a multiplicidade μ pode ser zero quando $m > 0$ (Teorema 4.3.5).

No caso (ii), onde $m > 0$, $k \geq 2$ e $\sum_{h=1}^{p_i} (\omega_{ih})^2 = \sigma$, para todo $i \in \{1, \dots, k\}$, então $s = 1$ e, assim, pelo Teorema 4.3.9, T tem pelo menos $2s + 2 \geq 4$ autovalores simples diferentes de μ e $\mu \pm \sqrt{\sigma}$, o que mostra que T terá pelo menos 6 autovalores distintos, uma vez que $m_T(\mu)$ pode ser igual a zero quando $m > 0$ (Teorema 4.3.5). \square

Finalmente, estabelecemos o resultado abaixo, que caracteriza todas as árvores com 5 autovalores distintos da matriz laplaciana perturbada de espectro simétrico em relação a μ .

Teorema 4.4.5. *Seja T uma árvore com $n \geq 4$ vértices. Então $\mathcal{P}(T) = \mu I - A(T)$ tem 5 autovalores distintos se e somente se exatamente uma das três situações abaixo ocorre.*

- (i) $T \neq P_4$ é uma árvore de diâmetro 3.
- (ii) T é uma double broom de diâmetro 4.
- (iii) T é uma árvore de diâmetro 4 que satisfaz as hipóteses do Teorema 4.4.2.

Demonstração. O resultado segue dos Teoremas 4.1.7, 4.3.7, 4.4.1 e 4.4.2, e Lemas 4.4.3 e 4.4.4. \square

Concluimos esta seção caracterizando todas as árvores com 5 autovalores distintos nos casos específicos em que a matriz laplaciana perturbada é a matriz laplaciana normalizada \mathcal{L} e matriz de adjacências A de um grafo sem pesos.

A matriz de adjacências A de um grafo G sem pesos é um caso particular da matriz laplaciana perturbada $\mathcal{P}(G) = \mu I - A(G)$ no caso em que $\mu = 0$ e $\omega_{ij} = 1$ se os vértices i e j são adjacentes. Neste caso, pelo Teorema 4.3.2, a soma dos autovalores é zero e o espectro é simétrico se e somente se o grafo G for bipartido.

A matriz laplaciana normalizada \mathcal{L} de um grafo G sem vértices isolados e sem pesos é uma matriz laplaciana perturbada de um grafo G' com as mesmas arestas de G , mas com pesos diferentes. Temos que $\mathcal{P}(G) = \mu I - A(G')$, no caso em que $\mu = 1$ e $\omega_{ij} = \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}}$ se os vértices i e j são adjacentes e d_i e d_j denotam, respectivamente, o grau dos vértices i e j . Novamente, pelo Teorema 4.3.2, a soma dos autovalores de $\mathcal{L}(G)$ é n e o espectro é simétrico em relação ao valor 1 se e somente se o grafo G for bipartido. Além destas propriedades, é conhecido que o espectro de $\mathcal{L}(G)$ está no intervalo $[0, 2]$ e que o maior autovalor é igual a 2 se e somente se alguma componente conexa de G for bipartida (veja, por exemplo, [12]).

Convém então, com base no que foi apresentado na seção anterior, que para estes dois exemplos de matrizes façamos a caracterização de todas as árvores com 5 autovalores distintos.

Sabemos, da seção anterior, que as *double brooms* de diâmetros 3 e 4 são exemplos de grafos com cinco autovalores distintos. Assim, iremos calcular o espectro destas árvores no caso em $\mathcal{P}(T) = A(T)$ e $\mathcal{P}(T) = \mathcal{L}(T)$. Para tanto, observamos que o algoritmo *Diagonalize* pode ser usado para calcular o polinômio característico de qualquer matriz cujo grafo é uma árvore T . Cada vértice v é inicializado com a expressão $a(v) = \lambda$, no caso em que $\mathcal{P}(T) = A(T)$, ou então $a(v) = \lambda - 1$, no caso em que $\mathcal{P}(T) = \mathcal{L}(T)$. Uma vez que todos os filhos de v tiverem sido processados pelo algoritmo, v recebe como valor diagonal a função racional

$$a(v) - \sum_{c \in F_v} \frac{1}{a(c)},$$

se $\mathcal{D}(T) = A(T)$, ou

$$a(v) = \sum_{c \in F_v} \frac{1}{a(c)d(c)d(v)},$$

se $\mathcal{D}(T) = \mathcal{L}(T)$, onde F_v é o conjunto dos filhos de v . Após todos os vértices terem sido processados, obtemos o polinômio característico de $A(T)$ (ou $\mathcal{L}(T)$) tomando o produto de todas as funções racionais $a(v)$:

$$p(\lambda) = \prod_{v \in V} a(v).$$

Usando este procedimento, podemos calcular o polinômio característico de qualquer árvore $T = T(k, \ell, 2)$ de diâmetro 3. E assim, podemos confirmar que, de fato, T terá somente 5 autovalores distintos se T não é o caminho P_4 .

Proposição 4.4.6. *Para uma árvore $T(k, \ell, 2)$ de diâmetro 3, o polinômio característico da matriz de adjacências de T é dado por*

$$p_A(\lambda) = \lambda^{n-4}(\lambda^4 - (k + \ell + 1)\lambda^2 + \ell k),$$

e o polinômio característico da matriz laplaciana normalizada de T é dado por

$$p_{\mathcal{L}}(\lambda) = \lambda(\lambda - 2)(\lambda - 1)^{n-4}(\lambda^2 - 2\lambda + C),$$

onde $C = \frac{k + \ell + 1}{(k + 1)(\ell + 1)}$.

O seguinte resultado decorre diretamente da Proposição 4.4.6 acima.

Corolário 4.4.7. *Para uma árvore $T(k, \ell, 2)$ de diâmetro 3, o espectro da matriz de adjacências de T é dado por*

$$\left\{ 0^{(n-4)}, \pm \sqrt{\frac{(k + \ell + 1) + \sqrt{(k - \ell)^2 + 2(\ell + k) + 1}}{2}}, \pm \sqrt{\frac{(k + \ell + 1) - \sqrt{(k - \ell)^2 + 2(\ell + k) + 1}}{2}} \right\},$$

e o espectro da matriz laplaciana normalizada de T é

$$\left\{ 0, \left(1 - \sqrt{\frac{k\ell}{(k + 1)(\ell + 1)}} \right), 1^{n-4}, \left(1 + \sqrt{\frac{k\ell}{(k + 1)(\ell + 1)}} \right), 2 \right\}.$$

Os resultados anteriores mostram que de fato, qualquer árvore de diâmetro 3 tem pelo menos quatro autovalores diferentes de 0 (no caso da matriz de adjacências) e diferentes de 1 (no caso da matriz laplaciana normalizada). No caso em que $n = 4$ e $k = \ell = 1$, a árvore é o caminho P_4 e todos os quatro autovalores distintos são: $\pm\sqrt{\frac{3+\sqrt{5}}{2}}, \pm\sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{2}}$ (no caso da matriz de adjacências) e $0, 1/2, 3/2$ e 2 (no caso da matriz laplaciana normalizada), espectros conhecidos na literatura.

Como vimos também na seção anterior, as *double brooms* $T(k, \ell, 3)$ de diâmetro 4 são exemplos de uma classe de árvores com exatamente 5 autovalores para a matriz laplaciana perturbada $\mathcal{L}(T) = \mu I - A(T)$. Aplicando o mesmo procedimento para o cálculo do polinômio característico utilizando o algoritmo *Diagonalize*, obtemos o seguinte resultado.

Proposição 4.4.8. *Para uma árvore double broom $T(k, \ell, 3)$ de diâmetro 4, o polinômio característico da matriz de adjacências de T é dado por*

$$p_A(\lambda) = \lambda^{n-4}(\lambda^4 - (k + \ell + 2)\lambda^2 + \ell + k + \ell k),$$

e o polinômio característico da matriz laplaciana normalizada de T é dado por

$$p(\lambda) = \lambda(\lambda - 2)(\lambda - 1)^{n-4}(\lambda^2 - 2\lambda + B),$$

onde $B = \frac{k + \ell + 2}{2(k + 1)(\ell + 1)}$.

Corolário 4.4.9. *Para uma árvore $T(k, \ell, 3)$ de diâmetro 4, o espectro da matriz de adjacências de T é dado por*

$$\left\{ 0^{(n-4)}, \pm\sqrt{\frac{(k + \ell + 2) + \sqrt{(k - \ell)^2 + 4}}{2}}, \pm\sqrt{\frac{(k + \ell + 2) - \sqrt{(k - \ell)^2 + 4}}{2}} \right\},$$

e o espectro da matriz laplaciana normalizada de T é

$$\left\{ 0, \left(1 - \sqrt{\frac{2k\ell + k + \ell}{2(k + 1)(\ell + 1)}}\right), 1^{n-4}, \left(1 + \sqrt{\frac{2k\ell + k + \ell}{2(k + 1)(\ell + 1)}}\right), 2 \right\}.$$

No caso em que $\mathcal{D}(T) = \mathcal{L}(T)$ ou $\mathcal{D}(T) = A(T)$ para grafos sem pesos, a árvore que satisfaz as hipóteses do Teorema 4.4.2 é uma *árvore de Bethe generalizada* de diâmetro 4. Uma *árvore de Bethe generalizada* é uma árvore com uma raiz na qual vértices a uma mesma distância da raiz (nível) têm o mesmo grau. Tal definição foi introduzida por Rojo e Robbiano, em [44].

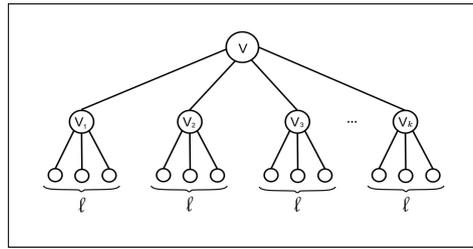


Figura 4.13: Árvore de Bethe generalizada de diâmetro 4.

Para uma árvore de Bethe generalizada T de diâmetro 4, com $n = k(\ell + 1) + 1$ vértices, onde $k \geq 2$ é o grau da raiz e $\ell + 1$ é o grau de cada vértice do nível 1, com $\ell \geq 1$, então, segue diretamente dos Teoremas 4.3.5 e 4.3.8 o seguinte resultado.

Corolário 4.4.10. *Para uma árvore de Bethe generalizada T de diâmetro 4, o espectro da matriz de adjacências de T é dado por*

$$\left\{ -\sqrt{\ell + k}, -\sqrt{\ell}^{(k-1)}, 0^{(\ell(k-1)+1)}, \sqrt{\ell}^{(k-1)}, \sqrt{\ell + k} \right\},$$

e o espectro da matriz laplaciana normalizada de T é

$$\left\{ 0, \left(1 - \sqrt{\frac{\ell}{\ell + 1}} \right)^{(k-1)}, 1^{(\ell(k-1)+1)}, \left(1 + \sqrt{\frac{\ell}{\ell + 1}} \right)^{(k-1)}, 2 \right\}.$$

O resultado abaixo é um caso particular do Teorema 4.4.5 e estabelece a caracterização de todas as árvores sem pesos com 5 autovalores distintos para as matrizes de adjacências e matriz laplaciana normalizada.

Teorema 4.4.11. *Seja T uma árvore com $n \geq 4$ vértices e sem pesos. Então a matriz de adjacências de T e a matriz laplaciana normalizada de T têm 5 autovalores distintos se e somente se exatamente uma das três situações abaixo ocorre.*

- (i) $T \neq P_4$ é uma árvore de diâmetro 3.
- (ii) T é uma double broom de diâmetro 4.
- (iii) T é uma árvore de Bethe generalizada de diâmetro 4.

Uma vez que o Teorema 4.4.5 caracteriza todas as árvores com quatro ou cinco autovalores distintos para uma matriz laplaciana perturbada da forma $\mathcal{L}(T) = \mu I - A$, $\mu \in \mathbb{R}$, poderíamos tentar estender esta caracterização para outras matrizes que não são da forma $\mu I - A$, como por exemplo, para a matriz laplaciana combinatória $L(T) = D_T - A$, onde D_T é a matriz diagonal dos graus dos vértices da árvore T . Entretanto, como mostra o resultado a seguir, encontramos casos de árvores com 6 autovalores distintos para a matriz $L(T)$, enquanto que para todas as matrizes da forma $\mu I - A$, essas mesmas árvores possuem exatamente 5 autovalores distintos.

Fazendo uso do algoritmo *Diagonalize* e inicializando cada vértice v da árvore T com o valor $a(v) = \lambda - d(v)$, onde $d(v)$ é o grau de v , podemos calcular o polinômio característico com respeito à matriz laplaciana combinatória $L(T)$ no caso em que T é um grafo sem pesos. Obtemos dessa forma os seguintes resultados.

Proposição 4.4.12. *As afirmações abaixo referem-se ao polinômio característico da matriz laplaciana combinatória de grafos sem pesos.*

- (i) Para qualquer árvore $T = T(k, \ell, 2)$ de diâmetro 3, o polinômio característico é dado por:

$$p_L(\lambda) = \lambda(\lambda - 1)^{n-4}(\lambda^3 - (k + \ell + 4)\lambda^2 + (k\ell + 2k + 2\ell + 5)\lambda - 2 - k - \ell).$$

- (ii) Para qualquer árvore $T = T(k, \ell, 3)$ de diâmetro 4, o polinômio característico é dado por:

$$p_L(\lambda) = \lambda(\lambda - 1)^{n-5}(\lambda^4 - (k + \ell + 6)\lambda^3 + (k\ell + 4k + 4\ell + 2)\lambda^2 - (2k\ell + 4k + 4\ell + 10)\lambda + k + \ell + 3).$$

(iii) Para qualquer árvore de Bethe generalizada de diâmetro 4 com $n = k(\ell + 1) + 1$ vértices, onde $k \geq 2$ é o grau da raiz e $\ell + 1$ é o grau de cada vértice do nível 1, com $\ell \geq 1$, o polinômio característico é dado por:

$$p_L(\lambda) = \lambda(\lambda - 1)^{k(\ell-1)}(\lambda^2 - (\ell + 2)\lambda + 1)^{k-1}(\lambda^2 - (k + \ell + 2)\lambda + k\ell + k + 1).$$

Usando das mesmas técnicas empregadas na seção anterior para caracterizar as árvores com exatamente 4 ou 5 autovalores distintos, podemos obter o seguinte resultado:

Teorema 4.4.13. *Seja T uma árvore com $n \geq 4$ vértices e sem pesos. Então a matriz laplaciana combinatória de T tem 5 autovalores distintos se e somente se exatamente uma das duas situações abaixo ocorre.*

- (i) $T \neq P_4$ é uma árvore de diâmetro 3.
- (ii) T é uma árvore de Bethe generalizada de diâmetro 4 com $n = 2k + 1$ vértices, onde $k \geq 2$ e todos os vértices do nível 1 têm grau 2.

5 APLICAÇÕES À DISTRIBUIÇÃO DE AUTOVALORES DE ÁRVORES

O algoritmo que apresentamos no capítulo anterior permite estudar a distribuição dos autovalores de árvores em um dado intervalo real. Embora incluída como um caso particular de matriz laplaciana perturbada, a matriz laplaciana combinatória apresenta propriedades espectrais distintas em relação a outras matrizes já citadas neste trabalho, como a matriz de adjacências e a matriz laplaciana normalizada. Por exemplo, o espectro da matriz laplaciana combinatória não é simétrico. Uma conjectura proposta em [46] afirma que pelo menos metade dos autovalores da matriz laplaciana combinatória de uma árvore são menores do que a média dos autovalores.

Neste capítulo, utilizando o algoritmo *Diagonalize* e uma transformação aplicada a árvores, estabelecemos uma cota inferior para o número de autovalores da matriz laplaciana combinatória de uma árvore T no intervalo $[0, 2)$ e mostramos que, para uma *double broom*, a conjectura acima é verdadeira. Mostramos também que a multiplicidade de μ como autovalor da matriz laplaciana perturbada da forma $\mu I - A$ não aumenta quando essa mesma transformação é aplicada a uma árvore.

5.1 Distribuição dos autovalores da matriz laplaciana combinatória de árvores

Lembramos que a matriz laplaciana combinatória de um grafo G é a matriz $L(G) = D_G - A(G)$, onde D_G é a matriz diagonal dos graus dos vértices de G e $A(G)$ é a matriz de adjacências de G . Usaremos a partir daqui a definição usual da matriz laplaciana combinatória para um grafo sem pesos.

Nosso propósito está em investigar a distribuição dos autovalores da matriz laplaciana combinatória quando o grafo G é uma árvore T . Sabe-se que $\lambda_n \leq n$ com igualdade apenas quando T é a estrela S_n (veja, por exemplo, [20],

Lema 2.3). Assim, é natural investigar a distribuição dos autovalores da matriz laplaciana combinatória de T em $[0, n)$.

Aplicando o algoritmo *Diagonalize*, podemos facilmente obter cotas para o número de autovalores da matriz laplaciana combinatória em certos intervalos. Usando-se um argumento similar ao da demonstração do Teorema 4.3.3, com a aplicação do algoritmo *Diagonalize*(T, α) em uma árvore T e escalar $\alpha = -1$, podemos obter os seguintes resultados. Denotamos por $m_G(\lambda)$ a multiplicidade de λ como um autovalor de $L(G)$ e por $m_G(I)$ o número de autovalores de $L(G)$, incluindo multiplicidades, pertencentes ao intervalo real I .

Teorema 5.1.1. *Se T é uma árvore com n vértices, $p(T)$ vértices pendentos e $q(T)$ vértices quase-pendentos, então*

- (i) $m_T(1) \geq p(T) - q(T)$;
- (ii) $m_T[0, 1] \geq p(T)$;
- (iii) $m_T(1, n] \geq q(T)$.

O resultado (i) é devido a Faria [19], enquanto que (ii) e (iii) aparecem em Grone, Merris e Sunder [23]. Neste último artigo, os autores mostram também que, para uma árvore T com diâmetro d ,

$$m_T(0, 2) \geq \lfloor d/2 \rfloor \quad \text{e} \quad m_T(2, n] \geq \lfloor d/2 \rfloor.$$

Uma vez que uma árvore T com n vértices tem $n - 1$ arestas (Teorema 2.1.2) e a soma dos graus dos vértices de T é o dobro do número de arestas, temos que a *média dos graus dos vértices* de T é dada por

$$\bar{d} = \frac{2(n-1)}{n} = 2 - \frac{2}{n}. \tag{5.1}$$

Proposição 5.1.2. *Para o caminho P_n com $n > 1$ vértices, o número de autovalores da matriz laplaciana combinatória que são menores do que a média dos graus \bar{d} é exatamente $\lceil \frac{n}{2} \rceil$.*

Demonstração. O espectro da matriz laplaciana combinatória do caminho P_n , $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$, é dado por

$$\lambda_i = 2 + 2 \cos \left(\frac{(n+1-i)\pi}{n} \right), \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Portanto, o resultado é claramente verdadeiro para o caminho P_2 .

Para n par e maior do que 2 temos que

$$\lambda_{\lceil \frac{n}{2} \rceil} = \lambda_{\frac{n}{2}} = 2 + 2 \cos \left(\frac{(n/2+1)\pi}{n} \right) = 2 + 2 \cos \left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{n} \right).$$

Logo,

$$\lambda_{\lceil \frac{n}{2} \rceil} < \bar{d} \Leftrightarrow \cos \left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{n} \right) < -\frac{1}{n} \Leftrightarrow \cos \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{n} \right) > \frac{1}{n} \Leftrightarrow \sin \left(\frac{\pi}{n} \right) > \frac{1}{n}.$$

A última desigualdade segue facilmente do fato de que $\sin(x) \geq x - \frac{x^3}{3!}$ e $n > 2$. Assim, P_n tem pelo menos $\lceil \frac{n}{2} \rceil$ autovalores menores do que \bar{d} . Além disso,

$$\lambda_{\lceil \frac{n}{2} \rceil + 1} = \lambda_{\frac{n}{2} + 1} = 2 + 2 \cos \left(\frac{\pi}{2} \right) = 2 > \bar{d}.$$

Portanto, quando n é par, P_n tem exatamente $\lceil \frac{n}{2} \rceil$ autovalores da matriz laplaciana combinatória menores do que \bar{d} .

Analogamente, para n ímpar, temos que

$$\lambda_{\lceil \frac{n}{2} \rceil} = \lambda_{\frac{n+1}{2}} = 2 + 2 \cos \left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2n} \right).$$

Assim,

$$\lambda_{\lceil \frac{n}{2} \rceil} < \bar{d} \Leftrightarrow \cos \left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2n} \right) < -\frac{1}{n} \Leftrightarrow \cos \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2n} \right) > \frac{1}{n} \Leftrightarrow \sin \left(\frac{\pi}{2n} \right) > \frac{1}{n},$$

o qual também é verdade para $n > 2$. Além disso,

$$\lambda_{\lceil \frac{n}{2} \rceil + 1} = \lambda_{\frac{n+3}{2}} = 2 + 2 \cos \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2n} \right) = 2 + 2 \sin \left(\frac{\pi}{2n} \right),$$

e assim, $\lambda_{\lceil \frac{n}{2} \rceil + 1} > 2 > \bar{d}$. Portanto, o resultado também é verdadeiro quando n é ímpar. \square

Na seções a seguir, juntamente com o algoritmo *Diagonalize*, utilizaremos algumas transformações em árvores para obter uma cota inferior para o número de autovalores da matriz laplaciana combinatória nos intervalos $[0, 2)$ e $[0, \bar{d})$.

5.2 A transformação π

Nesta seção, utilizamos uma transformação definida por Mohar em [41], a qual foi denominada *transformação π* , para obter uma cota inferior para o número de autovalores menores do que 2 da matriz $L(T)$ de uma árvore T .

Seja u um vértice da árvore T . Denotamos por $P = u u_1 \cdots u_p$ (com $p \geq 1$) um caminho em T cujos vértices u_1, \dots, u_{p-1} tenham cada um grau dois e u_p é um folha. Dizemos que P é um *caminho pendente* de comprimento p incidente a u .

A transformação π é definida da seguinte forma. Suponhamos que T contém um vértice u de grau pelo menos três e que $P = u u_1 \cdots u_p$ e $Q = u v_1 \dots v_q$ são dois caminhos pendentes incidentes a u . Formamos então uma árvore \tilde{T} removendo a aresta que conecta u e v_1 e adicionando uma aresta conectando u_p e v_1 , obtendo assim um caminho mais longo $R = u u_1 \cdots u_p v_1 \cdots v_q$ incidente ao vértice u . Dizemos que \tilde{T} é uma π -transformada de T e escrevemos $\tilde{T} = \pi(T, u, P, Q)$. A Figura 5.1 ilustra esta transformação.

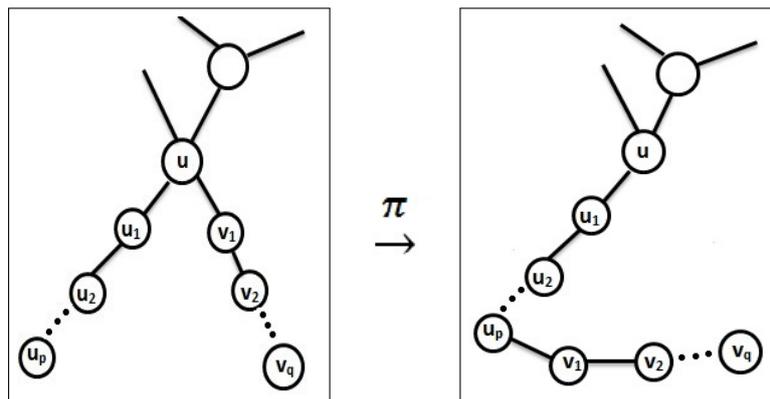


Figura 5.1: A transformação π .

Primeiramente, precisamos do seguinte resultado devido a Mohar [41, Proposição 2.1, p. 737].

Proposição 5.2.1. *Toda árvore que não é um caminho contém um vértice de grau pelo menos três conectado a pelo menos dois caminhos pendentos. Em particular, toda árvore pode ser transformada em um caminho por uma sequência de transformações π .*

Aplicando o algoritmo *Diagonalize*, obtemos uma propriedade interessante da transformação π : o número de autovalores da matriz laplaciana combinatória de uma árvore que são menores do que 2 não aumenta por esta transformação. Mais precisamente, temos o seguinte resultado.

Teorema 5.2.2. *Seja T uma árvore com $n > 2$ vértices. Se \tilde{T} é uma π -transformada de T , então*

$$m_T[0, 2) = m_{\tilde{T}}[0, 2) \quad \text{ou} \quad m_T[0, 2) = m_{\tilde{T}}[0, 2) + 1.$$

Demonstração.

Seja T uma árvore com $n > 2$ vértices. Sem perda de generalidade, podemos supor que T não é um caminho, pois, do contrário, a transformação π não poderia ser aplicada em T . Logo, pela Proposição 5.2.1, T contém um vértice u de grau pelo menos três conectado com pelo menos dois caminhos pendentos $P = u u_1 \cdots u_p$ e $Q = u v_1 \cdots v_q$. Como u tem grau maior do que dois, também está conectado a uma floresta não vazia $\mathcal{F} \subset T$, a qual não contém nenhum vértice de P ou Q . Seja $\tilde{T} = \pi(T, u, P, Q)$. Note que a floresta \mathcal{F} e o conjunto C dos filhos de u em \mathcal{F} permanecem os mesmos pela transformação π , mas o grau de u em T , $d(u)$, decresce em 1. Aplicamos então o algoritmo *Diagonalize* às árvores T e \tilde{T} , com $\alpha = -2$, considerando o vértice u como raiz em ambas as árvores. Dividimos a prova em três casos diferentes, dependendo da paridade de p e q .

Para o primeiro caso, suponhamos que p e q são ambos ímpares e consideremos a aplicação do algoritmo *Diagonalize* à árvore T . Como os pendentos têm grau 1, u_p e v_q são inicializados com o valor diagonal -1 pelo algoritmo. Como

os vértices $u_1, \dots, u_{p-1}, v_1, \dots, v_{q-1}$ têm grau 2, todos são inicializados com o valor diagonal 0 pelo algoritmo, enquanto que u será inicializado com o valor diagonal $a(u) = d(u) - 2$.

A seguir, processando os vértices de T das folhas em direção à raiz, temos que u_p e v_q permanecem com o valor -1 , enquanto que os valores nos dois vértices acima destes mudarão para $0 - (1/-1) = 1$, os valores nos próximos vértices acima destes últimos serão $0 - (1/1) = -1$ e assim por diante até chegar aos vértices u_1 e v_1 . Como p e q são ímpares, os valores de u_1 e v_1 serão iguais a -1 . Assim, no caminho P teremos $\frac{p+1}{2}$ vértices com valor -1 e $\frac{p-1}{2}$ com valor $+1$, enquanto que no caminho Q teremos $\frac{q+1}{2}$ vértices com valor -1 e $\frac{q-1}{2}$ com valor $+1$. Portanto, nos dois caminhos pendentes temos um total de $\frac{p+q}{2} + 1$ valores negativos e $\frac{p+q}{2} - 1$ valores positivos. Além disso, para o vértice u temos que

$$a(u) = d(u) - 2 - \left(\frac{1}{-1} + \frac{1}{-1} + \sum_{c \in C} \frac{1}{a(c)} \right) = d(u) - \sum_{c \in C} \frac{1}{a(c)},$$

caso nenhum filho de u em \mathcal{F} tenha valor nulo, onde C é o conjunto dos filhos de u em \mathcal{F} , ou

$$a(u) = -1/2,$$

se u tiver algum filho em \mathcal{F} com valor nulo.

Analogamente, para a árvore transformada \tilde{T} , após a aplicação do algoritmo, notamos que os valores de v_1, v_2, \dots, v_q são os mesmos como em T , mas os valores de u_1, u_2, \dots, u_p mudam de -1 para $+1$ e de $+1$ para -1 , de forma que o valor de u_1 torna-se $+1$, uma vez que o caminho pendente $R = u u_1 \cdots u_p v_1 \cdots v_q$ tem comprimento par $p + q$. Assim, temos $\frac{q+1}{2} + \frac{p-1}{2} = \frac{p+q}{2}$ valores -1 e $\frac{q-1}{2} + \frac{p+1}{2} = \frac{p+q}{2}$ valores $+1$. Portanto, considerando apenas os vértices que formam R , vemos que \tilde{T} tem um valor negativo a menos do que T . Além disso, o valor do vértice u será

$$\tilde{a}(u) = (d(u) - 1) - 2 - \left(\frac{1}{1} + \sum_{c \in C} \frac{1}{a(c)} \right) = d(u) - 4 - \sum_{c \in C} \frac{1}{a(c)},$$

caso nenhum filho de u em \mathcal{F} tenha valor nulo, ou

$$\tilde{a}(u) = -1/2,$$

se u tiver algum filho em \mathcal{F} com valor nulo.

Segue então que $\tilde{a}(u) - a(u) = -4$ ou $\tilde{a}(u) = a(u) = -1/2$, o que implica que

$$\tilde{a}(u) \leq a(u).$$

Observamos que se $a(u) < 0$, então $\tilde{a}(u) < 0$, de forma que o número de sinais negativos na saída em $Diagonalize(T, -2)$ é exatamente um a mais do que o número de sinais negativos na saída de $Diagonalize(\tilde{T}, -2)$. Por outro lado, se $a(u) \geq 0$, então tanto $\tilde{a}(u) < 0$ como $\tilde{a}(u) \geq 0$ podem ocorrer. Em qualquer caso, temos que o número de sinais negativos na saída de $Diagonalize(T, -2)$ é igual ou é exatamente um a mais do que o número de sinais negativos na saída de $Diagonalize(\tilde{T}, -2)$. Portanto, pelo Teorema 4.2.2, segue o resultado.

Para o segundo caso, supondo que p e q sejam ambos pares, um raciocínio análogo nos leva a concluir que os valores dos vértices $u_1, \dots, u_p, v_1, \dots, v_q$ pelo algoritmo serão os mesmos para ambas as árvores e

$$a(u) = \tilde{a}(u) = d(u) - 4 - \sum_{c \in \mathcal{C}} \frac{1}{a(c)},$$

caso nenhum filho de u em \mathcal{F} tenha valor nulo, ou

$$\tilde{a}(u) = a(u) = -1/2,$$

se u tiver algum filho em \mathcal{F} com valor nulo. Portanto, o número de autovalores em $[0, 2)$ é o mesmo para ambas as árvores, pelo Teorema 4.2.2.

Para o último caso, sem perda de generalidade, vamos assumir que p é par e q é ímpar. Similarmente ao primeiro caso, considerando apenas os vértices que formam R , obtemos que T e \tilde{T} têm o mesmo número de valores -1 e o mesmo número de valores $+1$. Além disso,

$$a(u) = \tilde{a}(u) = d(u) - 2 - \sum_{c \in \mathcal{C}} \frac{1}{a(c)},$$

caso nenhum filho de u em \mathcal{F} tenha valor nulo, ou

$$\tilde{a}(u) = a(u) = -1/2,$$

se u tiver algum filho em \mathcal{F} com valor nulo. Logo, o resultado segue do Teorema 4.2.2, o que completa nossa prova. \square

Usando os resultados obtidos anteriormente, podemos obter uma cota inferior para o número de autovalores da matriz laplaciana combinatória de uma árvore que são menores do que 2. O resultado que provamos a seguir estabelece que a maioria dos autovalores são menores do que 2. Esta cota foi estabelecida por Guo [24, Corolário 1, p. 57].

Teorema 5.2.3. *Para uma árvore T com $n > 1$ vértices,*

$$m_T[0, 2) \geq \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor.$$

Demonstração. Seja T uma árvore com $n > 1$ vértices. Queremos mostrar que o número de autovalores da matriz laplaciana combinatória de T em $[0, 2)$ é pelo menos $\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor$. Observamos que, pela Proposição 5.2.1, se T não é um caminho, então T pode ser transformada em um caminho por uma sequência de transformações π . Pelo Teorema 5.2.2, sabemos que, em cada passo, o número de autovalores da matriz laplaciana combinatória que são menores do que 2 não aumenta. Portanto,

$$m_T[0, 2) \geq m_{P_n}[0, 2) \geq m_{P_n}[0, \bar{d}),$$

uma vez que $2 > \bar{d}$. O resultado segue pela Proposição 5.1.2. \square

Sabemos, pelo Teorema 4.3.2, que o espectro da matriz laplaciana perturbada da forma $\mu I - A$ é simétrico em relação a μ no caso de árvores. Assim, aplicamos a transformação π para saber o que acontece com a multiplicidade de μ como autovalor de $\mu I - A$ ao transformarmos uma árvore T por esta transformação. Temos então o seguinte resultado, que mostra que tal multiplicidade não aumenta quando aplicamos a transformação π e que pode vir a ser uma ferramenta para obter cotas para o número de autovalores da matriz laplaciana perturbada $\mu I - A$.

Teorema 5.2.4. *Seja T uma árvore com $n > 2$ vértices. Se \tilde{T} é uma π -transformada de T e $m_T(\mu)$ denota a multiplicidade de μ como autovalor da matriz laplaciana perturbada $\mu I - A(T)$, então*

$$m_T(\mu) = m_{\tilde{T}}(\mu) \quad \text{ou} \quad m_T(\mu) = m_{\tilde{T}}(\mu) + 2.$$

Demonstração. Novamente, podemos supor, sem perda de generalidade, que T não é um caminho. Então, pela Proposição 5.2.1, T contém um vértice u de grau pelo menos três conectado com pelo menos dois caminhos pendentes $P = u u_1 \dots u_p$ e $Q = u v_1 \dots v_q$. Como u tem grau maior do que dois, u também está conectado a uma floresta não vazia $\mathcal{F} \subset T$, a qual não contém nenhum vértice de P ou Q . Seja $\tilde{T} = \pi(T, u, P, Q)$. Aplicamos então o algoritmo *DiagonalizeW* às árvores T e \tilde{T} , com $\alpha = -\mu$, considerando o vértice u como raiz em ambas as árvores. Dividimos a prova em três casos diferentes, dependendo da paridade de p e q .

Para o primeiro caso, suponhamos que p e q sejam ambos ímpares. Consideramos a aplicação do algoritmo *DiagonalizeW* à árvore T , processando os vértices de T das folhas em direção à raiz. Como os pendentes u_p e v_q são inicializados com o valor diagonal 0 pelo algoritmo, ao processarmos os vértices u_{p-1} e v_{q-1} , estes ficarão negativos, enquanto que u_p e v_q ficarão com valor positivo, e as arestas $\{u_{p-1}, u_{p-2}\}$ e $\{v_{q-1}, v_{q-2}\}$ serão removidas de T . Aplicando-se sucessivamente o algoritmo, como p e q são ímpares, os valores de u_1 e v_1 permanecerão iguais a 0, agora como pendentes do vértice u . Ao processarmos o vértice u , há duas opções: ou escolhe-se um dos pendentes u_1 ou v_1 , e com isto, um deles ficará positivo enquanto $a(u)$ será negativo, ou escolhe-se um dos filhos de u em \mathcal{F} com valor nulo. De qualquer forma, teremos $a(u) < 0$ e, pelo Teorema 4.2.2, a multiplicidade de μ como autovalor de $\mu I - A$ será

$$m_T(\mu) = 1 + \beta,$$

onde β é o número de elementos em \mathcal{F} para os quais o valor diagonal é nulo.

Analogamente, para a árvore transformada \tilde{T} , teremos um caminho pendente $R = u u_1 \cdots u_p v_1 \cdots v_q$ com comprimento par $p + q$. Neste caso, a aresta ligando u_1 a u será removida. Assim, o valor de u dependerá exclusivamente dos valores de seus filhos em \mathcal{F} . Se um filho de u em \mathcal{F} possuir valor diagonal nulo, então $a(u) < 0$ e o número de elementos restantes de \mathcal{F} com valor diagonal nulo será $\beta - 1 = m_{\tilde{T}}(\mu)$, pelo Teorema 4.2.2, o que implicaria que

$$m_T(\mu) = m_{\tilde{T}}(\mu) + 2.$$

Caso u não possua filho em \mathcal{F} com valor diagonal nulo, então o número de valores nulos para \tilde{T} será igual a β ou $\beta + 1$, dependendo, respectivamente, se $a(u) \neq 0$ ou $a(u) = 0$ no fim do algoritmo. Nestas condições, segue do Teorema 4.2.2 que $m_T(\mu) = m_{\tilde{T}}(\mu)$ ou $m_T(\mu) = m_{\tilde{T}}(\mu) + 1$. Contudo, como o espectro de $\mu I - A$ é simétrico em relação a μ e a transformação π preserva o número de vértices, teremos que ter obrigatoriamente

$$m_T(\mu) = m_{\tilde{T}}(\mu).$$

Portanto, no caso em que p e q são ímpares, temos que

$$m_T(\mu) = m_{\tilde{T}}(\mu) \quad \text{ou} \quad m_T(\mu) = m_{\tilde{T}}(\mu) + 2.$$

Para o segundo caso, supondo que p e q sejam ambos pares, um raciocínio similar nos leva a concluir que os valores dos vértices $u_1, \dots, u_p, v_1, \dots, v_q$ pelo algoritmo serão os mesmos para ambas as árvores. Tanto para T como para \tilde{T} , u_1 e v_1 estarão desconectados da raiz u e, assim, o valor diagonal de u será obtido diretamente dos elementos da floresta \mathcal{F} da mesma forma para T e \tilde{T} . Portanto, neste caso, temos, pelo Teorema 4.2.2, que

$$m_T(\mu) = m_{\tilde{T}}(\mu).$$

Para o último caso, sem perda de generalidade, vamos assumir que p é par e q é ímpar. Similarmente ao primeiro caso, obtemos que, tanto para T

como para \tilde{T} , apenas u_1 permanecerá como pendente da raiz u . E deste ponto, o algoritmo percorrerá os vértices igualmente, tanto para T como para \tilde{T} , o que nos leva a concluir que

$$m_T(\mu) = m_{\tilde{T}}(\mu),$$

completando a prova. \square

5.3 A transformação ρ

Nesta seção, consideramos um caso particular da transformação π , ilustrada na Figura 5.2 e será importante para obtermos uma cota inferior para o número de autovalores da matriz laplaciana combinatória menores do que a média dos graus para uma classe de árvores.

Seja T uma árvore que contém um vértice quase-pendente u adjacente a pelo menos dois pendentes p_1 e p_2 . Assim, formamos uma nova árvore \check{T} removendo de T a aresta que conecta u e p_1 e adicionando uma nova aresta conectando p_1 e p_2 . Dizemos que \check{T} é uma ρ -transformada de T e escrevemos $\check{T} = \rho(T, u, p_1, p_2)$.

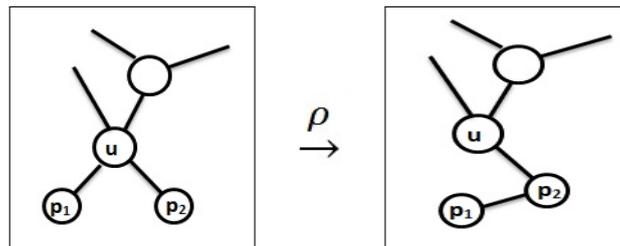


Figura 5.2: A transformação ρ .

Para essa transformação, obtemos o seguinte resultado envolvendo a distribuição dos autovalores da matriz laplaciana combinatória de uma árvore que são menores do que a média dos graus \bar{d} , dada pela Equação (5.1).

Teorema 5.3.1. *Seja T uma árvore com $n > 2$ vértices. Se \check{T} é uma ρ -transformada de T , então*

$$m_T[0, \bar{d}] = m_{\check{T}}[0, \bar{d}] \quad \text{ou} \quad m_T[0, \bar{d}] = m_{\check{T}}[0, \bar{d}] + 1.$$

Demonstração. Seja T uma árvore com $n > 2$ vértices. No intuito de aplicar a transformação ρ , suponhamos, sem perda de generalidade, que T contenha um vértice quase-pendente u que é adjacente aos vértices pendentes p_1 e p_2 e que u também está conectado a uma floresta $\mathcal{F} \subset T$ que não contém p_1 e p_2 . Seja $\check{T} = \rho(T, u, p_1, p_2)$. Note que a floresta \mathcal{F} e o conjunto C dos filhos de u em \mathcal{F} permanecem os mesmos pela transformação ρ , mas o grau de u em T , $d(u)$, decresce em 1. Aplicamos o algoritmo *Diagonalize* às árvores T e \check{T} , com $\alpha = -\bar{d}$, colocando o vértice u como raiz em ambas as árvores. Para a árvore T obtemos

$$a(u) = d(u) - \bar{d} - \left(\frac{2}{1 - \bar{d}} + \sum_{c \in C} \frac{1}{a(c)} \right),$$

se u não tem nenhum filho em \mathcal{F} com valor diagonal nulo, ou

$$a(u) = -1/2,$$

se u tem pelo menos um filho em \mathcal{F} com valor diagonal nulo. Já para a árvore \check{T} , obtemos

$$\check{a}(u) = (d(u) - 1) - \bar{d} - \left(\frac{1}{\check{a}(p_2)} + \sum_{c \in C} \frac{1}{\check{a}(c)} \right),$$

se u não contém nenhum filho em \mathcal{F} com valor diagonal nulo, ou

$$\check{a}(u) = a(u) = -1/2,$$

se u tiver algum filho em \mathcal{F} com valor diagonal nulo. Além disso, temos que

$$\check{a}(p_2) = 2 - \bar{d} - \frac{1}{1 - \bar{d}} = \frac{2}{n} + \frac{n}{n - 2} > 0.$$

Logo, se u não tiver filho em \mathcal{F} com valor nulo, temos que

$$\check{a}(u) - a(u) = -1 - \frac{1}{\check{a}(p_2)} + \frac{2}{1 - \bar{d}} < 0,$$

uma vez que $\check{a}(p_2) > 0$ e $1 - \bar{d} = \frac{2}{n} - 1 < 0$. Portanto, $\check{a}(u) \leq a(u)$. Note também que $a(p_1)$ e $a(p_2)$ são ambos negativos, já que p_1 e p_2 são vértices pendentes de u em T . Além disso, $\check{a}(p_1) < 0$, uma vez que p_1 é pendente de p_2 em \check{T} . Conseqüentemente, como ρ mantém o sinal de p_1 e altera o sinal de p_2 de negativo para positivo, temos que

- se $a(u) < 0$, então $\check{a}(u) < 0$ e, portanto, pelo Teorema 4.2.2,

$$m_T[0, \bar{d}] = m_{\check{T}}[0, \bar{d}] + 1;$$

- se $a(u) \geq 0$, podemos ter $\check{a}(u) < 0$ e neste caso, pelo Teorema 4.2.2, $m_T[0, \bar{d}] = m_{\check{T}}[0, \bar{d}]$; ou podemos ter $\check{a}(u) \geq 0$ e neste caso, pelo Teorema 4.2.2, $m_T[0, \bar{d}] = m_{\check{T}}[0, \bar{d}] + 1$;

Portanto, em qualquer caso, temos que

$$m_T[0, \bar{d}] = m_{\check{T}}[0, \bar{d}] \quad \text{ou} \quad m_T[0, \bar{d}] = m_{\check{T}}[0, \bar{d}] + 1. \quad \square$$

A propriedade acima será importante para a demonstração do resultado a seguir. Lembramos que uma *double broom* $T(k, \ell, d)$ é uma árvore construída tomando-se o caminho de vértices $1, 2, \dots, d$, $d \geq 2$, adicionando $k \geq 1$ vértices pendentes adjacentes ao vértice 1 e $\ell \geq 1$ vértices pendentes adjacentes ao vértice d , de tal forma que $n = k + \ell + d$ é o número de vértices de T . Vamos considerar, sem perda de generalidade, que $\ell \geq k \geq 1$.

Teorema 5.3.2. *Se $T = T(k, \ell, d)$ é uma double broom com $n = k + \ell + d$ vértices, então*

$$m_T[0, \bar{d}] \geq \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil,$$

onde $\bar{d} = 2 - \frac{2}{n}$.

Demonstração. Dividiremos a prova em quatro casos. Para o primeiro caso, consideraremos $k = 1$ e $\ell = 2$. Note que, se aplicarmos a transformação ρ à árvore

$T(1, 2, d)$ no vértice u que possui $\ell = 2$ pendentes, digamos ℓ_1 e ℓ_2 , teremos que $\rho(T, u, \ell_1, \ell_2) = P_n$, o caminho de $n = d + 3$ vértices. Denotando $P_n = \check{T}$, temos, pela Proposição 5.1.2 e Teorema 5.3.1, que

$$m_T[0, \bar{d}] \geq m_{\check{T}}[0, \bar{d}] \geq \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil.$$

Consideremos agora o caso em que $k = 1$ e $\ell \geq 3$. Neste caso, vamos obter o grafo G removendo-se de $T = T(1, \ell, d)$ a aresta que liga os vértices $d - 1$ e d , este último com $\ell \geq 3$ pendentes. Assim, temos que G é o grafo desconexo cujas componentes conexas são o caminho $P = P_{n-\ell-1}$ e a estrela $S = S_{\ell+1}$. Temos que $m_S[0, \bar{d}] = \ell$, uma vez que o L -espectro de $S_{\ell+1}$ é $\{0, 1^{(\ell-1)}, \ell + 1\}$ e $\bar{d} > 1$. Além disso, se \bar{d}_P é a média dos graus dos vértices de P , temos que $\bar{d} > \bar{d}_P$ e, portanto, $m_P[0, \bar{d}] \geq m_P[0, \bar{d}_P]$. Pela Proposição 5.1.2, $m_P[0, \bar{d}_P] = \left\lceil \frac{n-\ell-1}{2} \right\rceil$. Logo, $m_P[0, \bar{d}] \geq \left\lceil \frac{n-\ell-1}{2} \right\rceil$. Assim, como $\ell \geq 3$, temos que

$$m_G[0, \bar{d}] \geq \ell + \left\lceil \frac{n-\ell-1}{2} \right\rceil = \left\lceil \frac{n+\ell-1}{2} \right\rceil \geq \left\lceil \frac{n+2}{2} \right\rceil = \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil + 1.$$

Logo, pelo Teorema 2.4.8, temos que

$$\lambda_{\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil}(T) \leq \lambda_{\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil + 1}(G) < \bar{d},$$

o que mostra que $m_T[0, \bar{d}] \geq \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$.

Como terceiro caso, consideremos $k = 2$ e $\ell \geq 2$. Note que, se aplicarmos a transformação ρ na árvore $T(2, \ell, d)$ no vértice u que possui $k = 2$ pendentes, digamos k_1 e k_2 , teremos que $\rho(T, u, k_1, k_2) = T(1, \ell, d + 1)$. Assim, denotando $\rho(T, u, k_1, k_2) = \check{T}$, temos, pelo segundo caso, que $m_{\check{T}}[0, \bar{d}] \geq \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$. Logo, pelo Teorema 5.3.1,

$$m_T[0, \bar{d}] \geq m_{\check{T}}[0, \bar{d}] \geq \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil.$$

Finalmente, resta provar o caso em que $k \geq 2$ e $\ell \geq 3$. Assim como no segundo caso, vamos obter o grafo G removendo-se de $T = T(k, \ell, d)$ a aresta que

liga os vértices $d - 1$ e d , este último com $\ell \geq 3$ pendentos. Assim, temos que G é o grafo desconexo cujas componentes conexas são a *double broom* $T' = T(1, k, d - 2)$ e a estrela $S = S_{\ell+1}$. Temos que $m_S[0, \bar{d}] = \ell$ e, pelo segundo caso, $m_{T'}[0, \bar{d}] \geq m_{T'}[0, \bar{d}_{T'}] = \left\lceil \frac{n-\ell-1}{2} \right\rceil$, onde $\bar{d}_{T'}$ é a média dos graus dos vértices de T' . Assim, como $\ell \geq 3$, temos que

$$m_G[0, \bar{d}] \geq \ell + \left\lceil \frac{n - \ell - 1}{2} \right\rceil = \left\lceil \frac{n + \ell - 1}{2} \right\rceil \geq \left\lceil \frac{n + 2}{2} \right\rceil = \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil + 1.$$

Logo, pelo Teorema 2.4.8, temos que

$$\lambda_{\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil}(T) \leq \lambda_{\left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil + 1}(G) < \bar{d},$$

o que mostra que $m_T[0, \bar{d}] \geq \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$, completando a prova. \square

Cabe frisar que o resultado apresentado no Teorema 5.3.2 pode ser mais geral. A seguinte conjectura foi proposta por Trevisan *et al.* em [46].

Conjectura 1. *Para uma árvore T com $n > 1$ vértices, temos que*

$$m_T[0, \bar{d}] \geq \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil,$$

onde $\bar{d} = 2 - \frac{2}{n}$.

Além das *double brooms*, a conjectura acima é verdadeira para as *centopeias*, conforme demonstrado em [7]. Uma centopeia é uma árvore formada a partir de um caminho P_b adicionando-se pelo menos um pendente a cada vértice do caminho.

Proposição 5.3.3. *A Conjectura 1 é verdadeira se T é uma centopeia.*

Demonstração. Seja T uma centopeia. O número de pendentos $p(T)$ em T é, pelo menos, igual ao número de vértices não pendentos, ou seja, $p(T) \geq \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$. Aplicando o Teorema 5.1.1, temos que $m_T[0, \bar{d}] \geq m_T[0, 1] \geq q(T)$, provando o resultado. \square

Observamos que, pela Proposição 5.2.1, se uma árvore T não é um caminho, então T pode ser transformada em um caminho por uma sequência de

transformações π . Pelo Teorema 5.2.2, sabemos que, em cada passo, o número de autovalores da matriz laplaciana combinatória que são menores do que 2 não aumenta. Se a transformação π não aumentasse, em cada passo, o número de autovalores da matriz laplaciana combinatória que são menores do que \bar{d} , então, pela Proposição 5.1.2, provaríamos a Conjectura 1. Assim, formulamos a seguinte conjectura, que, se verdadeira, demonstra a Conjectura 1.

Conjectura 2. *Seja T uma árvore com $n > 2$ vértices. Se \tilde{T} é uma π -transformada de T , então*

$$m_T[0, \bar{d}] \geq m_{\tilde{T}}[0, \bar{d}].$$

6 CONCLUSÃO

A maior parte dos resultados que obtivemos e apresentamos neste texto utilizaram como principais ferramentas os algoritmos *DiagonalizeW* e *DiagonalizeUnicyclic*, que foram desenvolvidos para árvores e para grafos unicíclicos, respectivamente.

O algoritmo *DiagonalizeW* estende para uma classe mais geral de matrizes o algoritmo *Diagonalize* de Jacobs e Trevisan [34], originalmente desenvolvido para a matriz de adjacências de árvores sem pesos. Nosso algoritmo faz a diagonalização da matriz $\tilde{\mathcal{L}}(T) + \alpha I$, onde $\tilde{\mathcal{L}}(T)$ é uma matriz Laplaciana perturbada de uma árvore T com pesos e α é um número real, de forma prática e eficiente, uma vez que ele pode ser aplicado diretamente sobre os vértices e arestas da árvore, sem necessidade de obtenção da matriz $\tilde{\mathcal{L}}(T)$ explicitamente. Tal procedimento permite calcular o número de autovalores de $\tilde{\mathcal{L}}(T)$ em um dado intervalo real.

O algoritmo *DiagonalizeUnicyclic*, que apresentamos no Capítulo 3 deste trabalho, foi desenvolvido para localizar os autovalores da matriz de adjacências de qualquer grafo unicíclico sem pesos. Utilizando este algoritmo obtivemos a multiplicidade dos autovalores dos grafos unicíclicos denominados centopeias unicíclicas, bem como uma cota para o maior autovalor destes grafos. Para as centopeias unicíclicas regulares, obtivemos, inclusive, o espectro exato, o que permitiu concluir que nenhum grafo deste tipo é integral. Estes resultados são descritos em nosso trabalho que se encontra em preparação [9].

Empregando o algoritmo *DiagonalizeW*, obtivemos, no Capítulo 4, propriedades espectrais da matriz Laplaciana perturbada $\tilde{\mathcal{L}}(T)$ de uma árvore T , entre elas a multiplicidade e a distribuição dos autovalores no caso em que $\tilde{\mathcal{L}}(T)$ é da forma $\mu I - A(T)$, para algum $\mu \in \mathbb{R}$, o que inclui, como casos particulares, a matriz de adjacências e a matriz Laplaciana normalizada. Entre outras propriedades, mostramos

que o espectro é simétrico em relação ao número real μ , estabelecemos uma cota para a multiplicidade de μ como autovalor da matriz $\mu I - A(T)$ e calculamos a multiplicidade dos demais autovalores para árvores de diâmetro pequeno. Além disso, caracterizamos todas as árvores com exatamente 4 ou 5 autovalores distintos para a matriz $\mu I - A(T)$. Inclusive, calculamos explicitamente o espectro com respeito à matriz de adjacências e à matriz Laplaciana normalizada de todas as árvores com 4 ou 5 autovalores distintos. Tais resultados originalmente obtidos para a matriz Laplaciana normalizada estão presentes em nosso trabalho publicado [8].

No Capítulo 5, utilizando o algoritmo *Diagonalize* e uma transformação aplicada a árvores, estabelecemos uma cota inferior para o número de autovalores da matriz Laplaciana combinatória $L(T)$ de uma árvore T no intervalo $[0, 2)$. Nós mostramos que pelo menos metade dos autovalores de $L(T)$ são menores do que 2 e que a transformação π , definida por Mohar [41], não aumenta a multiplicidade do número real μ como autovalor da matriz Laplaciana perturbada $\mu I - A$. Os resultados obtidos para $L(T)$ encontram-se em nosso artigo publicado [7]. Além disso, com uso de um caso particular da transformação π , mostramos que pelo menos metade dos autovalores da matriz Laplaciana combinatória de uma *double broom* de qualquer diâmetro são menores do que a média dos graus dos vértices de T . Esta mesma cota também foi obtida para caminhos e centopeias em [7]. Estes resultados provam para estas classes de árvores a Conjectura 1, proposta por Trevisan *et al.* em [46]. Essa conjectura é importante para entender melhor a distribuição dos autovalores da matriz Laplaciana combinatória.

O algoritmo de localização de autovalores da matriz de adjacência de árvores, de Jacobs e Trevisan [34], tem sido utilizado em diversos trabalhos, como [7], [20], [21] e [46]. Em vista disto e dos resultados que obtivemos, esperamos que as extensões desse algoritmo para uma classe mais geral de matrizes de árvores e para grafos unicyclicos também sejam ferramentas de grande utilidade para ou-

tras aplicações envolvendo diferentes matrizes de grafos, como a matriz Laplaciana combinatória, a matriz Laplaciana sem sinal e a matriz Laplaciana normalizada.

Nossos algoritmos trabalham de forma muito eficiente com árvores e grafos unicíclicos, uma vez que são de tempo linear e podem ser executados diretamente sobre os vértices e arestas desses grafos, sem a necessidade de obter explicitamente as suas respectivas matrizes de representação. Dessa forma, uma de nossas perspectivas de trabalho futuro é desenvolver um algoritmo de localização de autovalores para uma classe maior de grafos conexos, por exemplo, quando o número de ciclos do grafo já é conhecido. Considerando-se o caso dos grafos bicíclicos, o desenvolvimento de um algoritmo que realizasse a diagonalização da matriz $A + \alpha I$, onde A é a matriz de adjacências destes grafos, dependeria, basicamente, de entender como tal diagonalização seria executada quando o grafo bicíclico se reduz a um dos três casos seguintes: os dois ciclos possuem um único vértice em comum, ou os dois ciclos possuem uma aresta em comum, ou existe uma aresta conectando um vértice de um ciclo a um vértice do outro, como ilustra a Figura 6.1 abaixo.

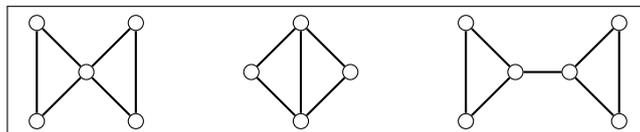


Figura 6.1: Três possíveis casos de grafos bicíclicos

Observamos ainda que o algoritmo que desenvolvemos para grafos unicíclicos poderia ser facilmente adaptado para qualquer matriz Laplaciana perturbada destes grafos. Optamos por não apresentar tal extensão neste trabalho para manter a simplicidade das expressões durante a execução do algoritmo, já que elas ficariam bastante carregadas se tivéssemos que levar em conta diferentes pesos para as arestas e para os vértices destes grafos. O intuito de estender o algoritmo de localização dos grafos unicíclicos para outras matrizes é obter uma ferramenta para estudar

invariantes obtidos de diferentes espectros que possam caracterizar outras classes de grafos unicíclicos além das centopeias unicíclicas.

Utilizando, possivelmente, os algoritmos de localização de autovalores, pretendemos, também, estudar a *energia* de grafos para diferentes matrizes. Dado um grafo G , a *energia* de G , denotada por $E(G)$, é definida como a soma dos valores absolutos dos autovalores da matriz de adjacências de G , isto é, se $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ são os autovalores de $A(G)$, então

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

Tal invariante foi introduzido em 1977 por Gutman [25]. Um dos problemas de grande interesse em Teoria Espectral de Grafos é determinar o grafo de maior (ou menor) energia entre todos os grafos com mesmo número de vértices. Em [25], Gutman estabeleceu valores extremais da energia de árvores e mostrou que a estrela e o caminho são as árvores de menor e maior energia, respectivamente. O problema da energia extremal também está resolvido para grafos unicíclicos, como pode ser verificado em [3], [30] e [32]. Para grafos bicíclicos, sabe-se apenas qual é o grafo de maior energia no caso em que o grafo é bipartido [33]. A busca por grafos extremais para a energia em outras famílias de grafos conexos, tais como os grafos k -cíclicos, com $k \geq 3$, encontra-se em aberto e é um problema que pretendemos investigar.

A noção de energia de um grafo foi estendida para outras matrizes simétricas associadas a grafos. Desta forma, também há interesse em procurar-se grafos extremais para a energia com relação a essas outras matrizes.

Conforme Cavers [11], se G é um grafo de ordem n e M é uma matriz real simétrica associada a G , a M -*energia* de G é definida por:

$$E_M(G) = \sum_{i=1}^n \left| \lambda_i - \frac{\text{tr}(M)}{n} \right|,$$

onde $\frac{\text{tr}(M)}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \lambda_i$ é a média dos autovalores de M .

Um exemplo de M -energia é a *energia Laplaciana* do grafo G , introduzida em 2006 por Gutman e Zhou (veja [26] e [27] para mais detalhes), que é dada por:

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

onde \bar{d} é a média dos graus dos vértices de G . Observe que o traço da matriz Laplaciana combinatória é a soma dos graus dos vértices e, portanto, $\bar{d} = \frac{\text{tr}(L(G))}{n}$. Em 2007, Gutman e Radenković [43] calcularam a energia Laplaciana de árvores com até 17 vértices e conjecturaram que, para qualquer árvore T de n vértices,

$$E_L(P_n) \leq E_L(T) \leq E_L(S_n),$$

estabelecendo assim uma ordem inversa das energias de árvores se comparadas à energia com respeito à matriz de adjacências. Em 2011, Fritscher *et al.* demonstraram a cota superior da desigualdade acima, ou seja, demonstraram que a estrela S_n é o grafo de maior energia Laplaciana entre todas as árvores de n vértices. Além disso, foram obtidos ordenamentos de algumas classes de árvores pela energia Laplaciana em [21] e [46].

Uma das razões para as quais a demonstração da Conjectura 1 seria útil é que se ela for verdadeira, então seria possível obter, de maneira mais eficiente, cotas para a energia Laplaciana. Pode-se provar (veja, por exemplo, [20]) que

$$E_L(G) = 2 \sum_{\lambda_i > \bar{d}} \lambda_i - 2\sigma\bar{d},$$

onde σ é o número de autovalores da matriz Laplaciana combinatória de G maiores ou iguais à média dos graus \bar{d} . Por esta razão, é de grande importância sabermos o número de autovalores abaixo da média.

Em nossas pesquisas, não encontramos registros de grafos unicíclicos extremos para a energia Laplaciana. Baseado em testes realizados, conjecturamos que o grafo S_n^1 , obtido adicionando-se uma aresta entre dois pendentos da estrela S_n , conforme descrito no Exemplo 2.4.9, é o grafo unicíclico de maior energia Laplaciana. Este grafo possui L -espectro formado inteiramente por números inteiros

$\{0, 1^{(n-3)}, 3, n\}$, e sua energia Laplaciana é dada por $E_L(S_n^1) = 2(n-1)$. Observa-se que a confirmação da nossa conjectura manteria, assim como no caso de árvores, uma ordem inversa de energia com relação às matrizes Laplaciana combinatória e de adjacências, uma vez que S_n^1 é o grafo unicíclico de menor energia para a matriz de adjacências [30]. Este também é um problema que queremos investigar.

Além disso, no caso dos grafos unicíclicos, a média dos graus é sempre igual a 2 e, assim, pode-se estudar o número de autovalores menores (ou maiores) do que 2, utilizando-se, possivelmente, o algoritmo de localização de autovalores.

Índice Remissivo

- M -espectro, 27
- árvore, 13
- árvore de Bethe generalizada, 108
- árvore pendente, 44
- índice, 66
- aresta, 10
- aresta pendente, 11
- autovalor, 18
- caminho, 12
- caminho pendente, 114
- Cayley-Hamilton, teorema, 19
- centopeia unicíclica, 64
- centopeias unicíclicas regulares, 67
- ciclo, 12
- componente conexa, 13
- conjunto independente, 10
- diâmetro, 13
- distância, 13
- double broom, 92
- energia de um grafo, 130
- entrelaçamento, 32
- espectro, 18
- espectro de um grafo, 27
- estrela, 13
- fechado, 12
- filho de um vértice, 34
- floresta, 13
- folha, 13
- função peso de arestas, 23
- grafo, 10
- grafo k -partido, 16
- grafo bipartido, 16
- grafo bipartido completo, 17
- grafo com pesos, 11
- grafo complementar, 12
- grafo completo, 12
- grafo conexo, 13
- grafo de uma matriz simétrica, 71
- grafo integral, 33
- grafo regular, 12
- grafo sem pesos, 11
- grafo simples, 11
- grafos isomorfos, 11
- grafos unicíclicos, 15
- grau de um vértice, 11, 23
- grau máximo, 66
- inércia, 20
- média dos graus dos vértices, 112
- matriz de adjacências, 21, 23
- matriz diagonalizável, 19

matriz laplaciana combinatória, 21, 23, 111
 matriz laplaciana normalizada, 22, 24
 matriz laplaciana perturbada, 25
 matriz laplaciana sem sinal, 21, 24
 matriz não singular, 18
 matriz simétrica, 19
 matrizes congruentes, 20
 matrizes semelhantes, 18

 nó dorsal, 64

 pai de um vértice, 34
 passeio, 12
 peso de um vértice, 76
 peso de uma aresta, 11
 polinômio característico, 18, 27
 polinômio minimal, 19
 positiva semidefinida, 20

 quase-pendente, 11

 raiz de uma árvore, 34

 semelhança, transformação de, 18
 subgrafo, 11
 subgrafo gerador, 11
 subgrafo induzido, 11

 traço de uma matriz, 20
 transformação π , 114
 transposta de uma matriz, 19
 vértice interior de uma árvore, 90
 vértice interior isolado, 90
 vértice isolado, 11
 vértice pendente, 11
 valor diagonal, 35, 78
 vizinho, 10

Referências Bibliográficas

- [1] N. M. M. Abreu, Teoria Espectral dos Grafos: Um Híbrido entre a Álgebra Linear e a Matemática Discreta e Combinatória com Origens na Química Quântica, v. 6, Tendências em Matemática Aplicada e Computacional, SBMAC, 2005.
- [2] N. Abreu, R. Del-Vecchio, V. Trevisan, C. Vinagre, Teoria Espectral de Grafos - Uma Introdução, III Colóquio de Matemática da Região Sul, UFSC, 2014.
- [3] E. O. D. Andriantiana, S. Wagner, Unicyclic graphs with large energy, Linear Algebra Appl. 435 (2011) 1399-1414.
- [4] K. T. Balínska, D. Cvetković, Z. Radosavljević, S. K. Simić, D. Stevanović, A survey on integral graphs, Univ. Beograd. Publ. Elektrotehn. Fak. Ser. Mat. 13 (2002) 42-65.
- [5] R. B. Bapat, S. J. Kirkland, S. Pati, The Perturbed Laplacian Matrix of a Graph, Linear and Multilinear Algebra 49 (2001) 219-242.
- [6] S. Barik, S. Pati, B. K. Sarma, The spectrum of the corona of two graphs, SIAM J. Discrete Math. 21 (1) (2007) 47-56.
- [7] R. O. Braga, V. M. Rodrigues, V. Trevisan, On the distribution of Laplacian eigenvalues of trees, Discrete Mathematics 313 (2013) 2382-2389.
- [8] R. O. Braga, R. R. Del-Vecchio, V. M. Rodrigues, V. Trevisan, Trees with 4 or 5 distinct normalized Laplacian eigenvalues, Linear Algebra and its Applications 471 (2015) 615-635.
- [9] R. O. Braga, V. M. Rodrigues, V. Trevisan, Locating the eigenvalues of unicyclic graphs (em preparação).

- [10] A.E. Brouwer, W.H. Haemers, Spectra of graphs, Springer, New York, 2012, (<http://homepages.cwi.nl/~aeb/math/ipm/>).
- [11] M. Cavers, The normalized Laplacian matrix and general Randić index of graphs, Ph.D. Dissertation, University of Regina (CA), 2010.
- [12] F.R.K. Chung, Spectral Graph Theory, American Math. Soc., Providence, 1997.
- [13] T. H. Cormen, C. E. Leiserson, R. L. Rivest, C. Stein, Introduction to Algorithms, Second Edition, Cambridge: The MIT press, 2002.
- [14] D. Cvetkovic, Graphs and their spectra, Univ. Beograd. Publ. Elektrotehn. Fak. Ser. Mat. Fiz. 354-356 (1971) 1-50.
- [15] D. Cvetković, M. Doob, H. Sachs, Spectra of graphs, Academic Press, New York, 1979.
- [16] D. Cvetković, P. Rowlinson, S. Simić, Signless Laplacians of finite graphs, Linear Algebra and its Applications, 423 (1) (2007) 155-171.
- [17] E.R. van Dam, G.R. Omid, Graphs whose normalized Laplacian has three eigenvalues, Linear Algebra and its Applications 435 (2011) 2560-2569.
- [18] M. Fiedler, Algebraic connectivity of graphs, Czech. Math J. 23 (1973) 298-305.
- [19] I. Faria, Permanental roots and the star degree of a graph, Linear Algebra and its Applications 64 (1985) 255-265.
- [20] E. Fritscher, C. Hoppen, I. Rocha, V. Trevisan, On the sum of the Laplacian eigenvalues of a tree, Linear Algebra and its Applications 435 (2011) 371-399.

- [21] E. Fritscher, C. Hoppen, I. Rocha, V. Trevisan, Characterizing trees with large Laplacian energy, *Linear Algebra and its Applications* 442 (2013) 20-49.
- [22] C. Godsil, G. Royle, *Algebraic Graph Theory*, Graduate Texts in Mathematics, 207, Springer-Verlag, New York, 2001.
- [23] R. Grone, R. Merris, V. S. Sunder, The Laplacian spectrum of a graph, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 11 (2) (1990) 218-238.
- [24] J. M. Guo, The k th Laplacian Eigenvalue of a Tree, *J. Graph Theory* 54 (2007) 51-57.
- [25] I. Gutman, Acyclic systems with extremal Hückel π -electron energy, *Theor. Chim. Acta.* 45 (1977) 79-87.
- [26] I. Gutman, B. Zhou, Laplacian energy of a graph, *Linear Algebra Appl.* 414 (2006) 29-37.
- [27] I. Gutman, B. Zhou, On Laplacian energy of graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 57 (2007) 211-220.
- [28] F. Harary, *Graph Theory*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1969.
- [29] R. Horn, C. R. Johnson, *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, 1985.
- [30] Y. Hou, Unicyclic graphs with minimal energy, *J. Math. Chem.* 29 (2001) 163-168.
- [31] S. Hu, The largest eigenvalue of unicyclic graphs, *Discrete Math.* 307 (2007) 280-284.
- [32] B. Huo, X. Li, Y. Shi, Complete solution to a conjecture on the maximal energy of unicyclic graphs, *Europ. J. Combin.* 32 (2011) 662-673.

- [33] B. Huo, S. Ji, X. Li, Y. Shi, Solution to a conjecture on the maximal energy of bipartite bicyclic graphs, *Linear Algebra and its Applications* 435 (2011) 804-810
- [34] D. P. Jacobs, V. Trevisan, Locating the eigenvalues of trees, *Linear Algebra and its Applications* 434 (2011) 81-88.
- [35] D. P. Jacobs, V. Trevisan, F. Tura, Eigenvalue location in threshold graphs, *Linear Algebra and its Applications* 439 (2013) 2762-2773.
- [36] C. R. Johnson, A. Leal Duarte, The maximum multiplicity of an eigenvalue in a matrix whose graph is a tree, *Linear and Multilinear Algebra* 46 (1999) 139-144.
- [37] C. Johnson, A. Leal Duarte, On the minimum number of distinct eigenvalues for a symmetric matrix whose graph is a given tree, *Mathematical Inequalities and Applications* 5 (2002) 175-180.
- [38] K. Mehlhorn, P. Sanders, *Algorithms and Data Structures: The Basic Toolbox*, Springer, 2008.
- [39] R. Merris, Laplacian matrices of graphs: a survey, *Linear Algebra and Its Applications* 197/198 (1994) 143-176.
- [40] B. Mohar, The Laplacian spectrum of graphs, Preprint Series, Department of Mathematics, University E. K. Ljubljana, Yugoslavia, 26 (1988) 353-384.
- [41] B. Mohar, On the Laplacian coefficients of acyclic graphs, *Linear Algebra and its Applications* 722 (2007) 736-741.
- [42] G. R. Omidi, On Integral Graphs with Few Cycles, *Graphs and Combinatorics* 25 (2009) 841-849.

- [43] S. Radenković, I. Gutman, Total π -electron energy and Laplacian energy: How far the analogy goes?, *J. Serb. Chem. Soc.* 72 (12) (2007) 1343-1350.
- [44] O. Rojo, M. Robbiano, An explicit formula for eigenvalues of Bethe trees and upper bounds on the largest eigenvalue of any tree, *Linear Algebra and its Applications* 427 (2007) 138-150.
- [45] Spectral Graph Theory Home Page, Programa de Engenharia de Produção, COPPE/UFRJ, disponível em: <<http://www.sgt.pep.ufrj.br>>, acesso em: 19 out 2015.
- [46] V. Trevisan, J. B. Carvalho, R. R. Del Vecchio, C. T. M. Vinagre, Laplacian energy of diameter 3 trees, *Applied Mathematics Letters* 24 (2011) 918-923.
- [47] D. Vukadinović, P. Huang, T. Erlebach, On the Spectrum and Structure of Internet Topology Graphs, *Lecture Notes in Computer Science* 2346 (2002) 83-95.