



UM ESTUDO SOBRE O ÍNDICE DE UM GRAFO

Laura Patuzzi

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

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

Rio de Janeiro
Março de 2013

UM ESTUDO SOBRE O ÍNDICE DE UM GRAFO

Laura Patuzzi

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

Examinada por:

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

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

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

Prof. Nelson Maculan Filho, D.Habil.

Profa. Simone Dantas de Souza, D.Sc.

Prof. Vilmar Trevisan, PhD.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MARÇO DE 2013

Patuzzi, Laura

Um estudo sobre o índice de um grafo/Laura Patuzzi. –
Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.

XV, 115 p.: il.; 29,7cm.

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

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de
Engenharia de Produção, 2013.

Referências Bibliográficas: p. 102 – 112.

1. Índice de grafos. 2. Matriz de adjacência. 3. Teoria
Espectral de grafos. I. Freitas, Maria Agueiras Alvarez de
et al. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE,
Programa de Engenharia de Produção. III. Título.

*A Airton
que continua
em mim apostando.*

Agradecimentos

Gostaria de agradecer a todos que me apoiaram ao longo de meu Doutorado e à minha família e amigos que estiveram presentes com palavras animadoras. Em especial, agradeço a Airton, que está diariamente presente em minha vida, dividindo os bons momentos em que discutem-se idéias, mesmo que divergindo, e construindo, junto à mim, novos horizontes.

Agradeço às minhas orientadoras Maria e Renata pela presença ativa que estas desempenharam, por elas terem ajudado o meu crescer. A Maria, agradeço a oportunidade que me proporcionou ao me apresentar os amigos e colegas do Grupo de Teoria Espectral de Grafos do Rio de Janeiro (TEG/RIO), cujos seminários regulares motivaram meu interesse nesta área. Agradeço a todos os membros deste grupo por sua receptividade e, especialmente, a Nair, por seu constante e caloroso apoio. Agradeço aos meus amigos Ana Flávia, Aroldo, Joelma, Leonardo, Luciana e Virgínia com os quais pude compartilhar, além dos estudos, meus humores e incertezas e, principalmente, momentos de lazer. A Luciana agradeço seus "*bons ouvidos*" e conselhos.

Agradeço aos professores Boaventura, Maculan e Samuel, e aos colegas de trabalho que sempre mostraram interesse em meus avanços. Dentre os que ainda não mencionei, destaco o apoio recebido por Darci, Ivo, Jefferson, Luérbio, Rubens, Jairo e Macarini. Também a Ráderson, pelas oportunas trocas "*matemáticas*", e a Andréia, pela ajuda ao preparar minhas apresentações em "*inglês*".

Agradeço a todos do Programa de Pós Graduação em Engenharia de Produção (PEP/COPPE) que sempre me receberam com boa vontade e bom humor. Agradeço à Coordenação deste programa, especialmente a Samuel, por incentivar os alunos na participação de eventos científicos, importante para os avanços tanto da pesquisa quanto da Tese. Agradeço a Andréia, Claudete, Diego, Lindalva, Pedro, Roberta que com paciência e prestatividade me atenderam e atendem os alunos. Também a Fátima pela calorosa acolhida.

Agradeço aos meus amigos por compreenderem minha reclusão e, mesmo assim, continuarem demonstrando afeto. Finalizo estes "*longos*" agradecimentos com um abraço aos mais distantes: Mena, Hélcio, Yasmin, Wagner, Rosy, Arthur, Cristina, Evandro, Arlene, Alessandro, Erika, Chiquinho, Elisa, Mário, Carol e Vanusa.

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

UM ESTUDO SOBRE O ÍNDICE DE UM GRAFO

Laura Patuzzi

Março/2013

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

Programa: Engenharia de Produção

Nesta tese estudamos condições de integralidade do índice dos grafos: KK_n^j , *p-broom-like*, árvore de Bethe, árvore *starlike*, vassoura, dupla vassoura, dupla estrela e árvore de diâmetro 4. Excetuando as classes das árvores *starlike* e de duplas estrelas, nas demais, determinamos novos limites para o índice e caracterizamos seus grafos extremos. Em todas, exibimos famílias infinitas de grafos não integrais com índice inteiro. Em algumas, construímos famílias infinitas de grafos integrais e abordamos o problema de ordenação dos grafos.

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

A STUDY OF INDEX IN GRAPHS

Laura Patuzzi

March/2013

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

Department: Production Engineering

In this thesis we study integrality conditions of the index of the following graphs: KK_n^j , p -broom-like, Bethe tree, starlike tree, broom, double broom, double star and tree with diameter 4. Excepting the starlike tree and double star classes, for the other, we determine new limits for the index and we characterize their extremal graphs. In all of them, we exhibit infinite families of non integral graphs with integer index. In some of these classes, we construct infinite families of integral graphs and we study the problem of ordering graphs.

Sumário

| | |
|--|-----------|
| Lista de Figuras | x |
| Lista de Tabelas | xii |
| Lista de Símbolos | xiii |
| 1 Introdução | 1 |
| 2 Conceitos Básicos | 5 |
| 2.1 Conceitos elementares em Teoria de Grafos | 5 |
| 2.2 O índice de um grafo: resultados básicos de Teoria Espectral de Grafos | 8 |
| 2.3 Relações entre índice e operações em grafos | 11 |
| 2.3.1 União, soma, produto e produto forte | 11 |
| 2.3.2 Autovalores de um grafo complementar, linha, <i>join</i> , corona e produto enraizado | 14 |
| 2.3.3 Remoção de vértices ou arestas e subdivisão de arestas | 19 |
| 2.4 Grafos extremais | 23 |
| 3 Limites clássicos para o índice de um grafo | 25 |
| 3.1 Resultados até 1990 | 26 |
| 3.2 Cotas superiores em função dos graus dos vértices, posteriores a 1990 | 28 |
| 3.3 Comparando as melhores cotas superiores para índice em grafos conexos | 34 |
| 3.3.1 Árvores | 35 |
| 3.3.2 Unicíclicos | 36 |
| 3.3.3 Grafos birregulares | 37 |
| 4 Grafos com índice inteiro | 39 |
| 4.1 Grafos Smith não integrais | 41 |
| 4.2 Operações: construindo grafos não integrais com índice inteiro | 43 |
| 4.3 Grafos do tipo KK_n^j | 44 |
| 4.4 Grafos <i>p-broom-like</i> | 48 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 5 | Investigando o índice em árvores | 55 |
| 5.1 | Problema extremal em árvores | 55 |
| 5.2 | Algoritmo para determinar autovalores de uma árvore | 64 |
| 6 | Novos resultados sobre o índice de uma árvore | 70 |
| 6.1 | Limite superior para o índice de uma árvore que possui índice inteiro | 71 |
| 6.2 | Árvores <i>starlike</i> com índice inteiro | 74 |
| 6.3 | O índice de uma dupla vassoura | 81 |
| 6.4 | Árvores de diâmetro 4 | 86 |
| 6.4.1 | Cota superior para o índice | 89 |
| 6.4.2 | Propriedades espectrais de $R(0, r, a)$ | 92 |
| 6.4.3 | Nova família de árvores integrais de diâmetro 4 | 94 |
| 7 | Considerações finais | 99 |
| | Referências Bibliográficas | 102 |
| | Índice Remissivo | 113 |

Lista de Figuras

| | | |
|-----|---|----|
| 2.1 | Pares de grafos coespectrais não isomorfos | 10 |
| 2.2 | Soma, produto e produto forte de K_2 por K_3 | 13 |
| 2.3 | Grafos linha | 15 |
| 2.4 | Dupla estrela, vassoura e dupla vassoura | 16 |
| 2.5 | Grafos coronas | 17 |
| 2.6 | Grafos sol | 17 |
| 2.7 | Coalescência entre C_4 e S_3 | 18 |
| 2.8 | Subdivisões de grafos | 22 |
| 2.9 | Exemplos de caminhos internos | 22 |
| 3.1 | Grafos que satisfazem a igualdade em (3.13) | 30 |
| 3.2 | Grafos roda e roda quebrada | 32 |
| 3.3 | Grafo dos limites superiores para o índice | 34 |
| 3.4 | Comparando limites em grafos birregulares | 38 |
| 4.1 | Grafos "ômegas" , definidos por Cvetković <i>et al.</i> [43] | 40 |
| 4.2 | Exemplos de grafos cúbicos: $\lambda = 3$ | 41 |
| 4.3 | Grafos Smith: $\lambda = 2$ | 42 |
| 4.4 | Grafos conexos com índice $\lambda < 2$ | 42 |
| 4.5 | Grafos KK_n^j | 45 |
| 4.6 | Grafos <i>p-broom-likes</i> | 48 |
| 4.7 | Subdividindo uma aresta de cada caminho interno de $K_3 \square B(3; 2)$ com $a + r = 5$ | 53 |
| 4.8 | Ordenação dos grafos <i>3-broom-like</i> com 15 vértices | 54 |
| 5.1 | Árvores balanceadas de diâmetro par | 57 |
| 5.2 | Um grafo variante de árvore de Bethe valorada | 58 |
| 5.3 | As cinco primeiras árvores maximais | 59 |
| 5.4 | As sexta, sétima e oitava árvores maximais | 60 |
| 5.5 | Da nona à décima terceira árvores maximais | 60 |
| 5.6 | Árvores maximais com acoplamento de tamanho i | 61 |
| 5.7 | Árvores com k arestas pendentes | 62 |

| | | |
|------|--|----|
| 5.8 | Exemplos de árvores minimais de diâmetro 4 | 63 |
| 5.9 | Árvore maximal para a sequência de graus $(4^{(2)}, 3^{(4)}, 2^{(3)}, 1^{(10)})$ | 63 |
| 5.10 | Algoritmo AlgoJT para determinar o polinômio característico de uma árvore | 66 |
| 5.11 | Algoritmo AlgoJT para localizar autovalores de uma árvore | 67 |
| 5.12 | Algoritmo AlgoJT para determinar autovalores de $D(2; 2; 2)$ | 68 |
| | | |
| 6.1 | Aplicando o algoritmo AlgoJT numa árvore de Bethe | 72 |
| 6.2 | Exemplos de árvores starlike | 75 |
| 6.3 | Árvores <i>starlike</i> com 8 vértices e grau máximo 4 | 76 |
| 6.4 | Aplicando o algoritmo AlgoJT na starlike $S(p \cdot r, b \cdot 1)$ | 77 |
| 6.5 | Aplicando o algoritmo AlgoJT na árvore starlike $S(a \cdot r, 2, 1)$ | 78 |
| 6.6 | Vassouras generalizadas com índice maior que $\sqrt{\Delta + 1}$ | 81 |
| 6.7 | Duplas vassouras de diâmetro maior ou igual a 4 com índice maximal | 82 |
| 6.8 | Duplas estrelas não integrais com índice inteiro | 86 |
| 6.9 | Árvores de diâmetro 4 | 87 |
| 6.10 | Uma árvore de diâmetro 4 é uma subárvore de $\mathcal{B}_{\Delta, 4}$ | 90 |
| 6.11 | Coordenadas iguais nos vértices pendentes de cada estrela | 91 |
| 6.12 | Um autovetor de Perron de $R(b, r, a)$ | 91 |
| 6.13 | Menores árvores $R(0, r, r - 1)$ com índice inteiro | 94 |
| 6.14 | Exemplos de árvores não integrais com índice igual a 3 | 96 |
| 6.15 | Menores árvores $R(a, r, a)$ com índice inteiro | 96 |
| 6.16 | Novas árvores integrais $R(b, r, a)$ obtidas pelo Corolário 6.12 | 98 |

Lista de Tabelas

| | | |
|-----|--|-----|
| 2.1 | Autovalores dos grafos completo, ciclo, caminho e bipartido completo | 9 |
| 3.1 | Limites superiores do índice | 33 |
| 4.1 | Valores médios de $t_2(G)$ | 40 |
| 4.2 | Autovalores de grafos conexos com índice $\lambda \leq 2$ | 42 |
| 5.1 | Algoritmo AlgoJT de Jacobs e Trevisan | 65 |
| 7.1 | Novas cotas para o índice | 100 |

Lista de Símbolos

| | |
|----------------------|--|
| $A(G)$ | matriz de adjacência do grafo G , p. 8 |
| $B(G)$ | matriz de incidência do grafo G , p. 8 |
| $B(a; r)$ | vassoura enraizada, p. 48 |
| C_k | ciclo com k vértices, p. 6 |
| $D(G)$ | matriz diagonal dos graus dos vértices do grafo G , p. 8 |
| $D(a; r; b)$ | dupla vassoura de diâmetro $r + 1$, p. 16 |
| $G * H$ | produto forte dos grafos G e H , p. 13 |
| $G \cup H$ | união dos grafos G e H , p. 11 |
| $G \sqcap H$ | produto hierárquico de G por H , p. 18 |
| $G \times H$ | produto dos grafos G e H , p. 13 |
| $G(H_1, \dots, H_n)$ | produto enraizado de G por H_1, \dots, H_n , p. 18 |
| $G + H$ | soma dos grafos G e H , p. 12 |
| $G + \mathcal{S}$ | adiciona-se ao grafo G o conjunto \mathcal{S} , p. 6 |
| $G - \mathcal{S}$ | retira-se do grafo G o conjunto \mathcal{S} , p. 6 |
| $G \cdot H$ | coalescência de G com H , p. 18 |
| $G \circ H$ | grafo corona do grafo G pelo grafo H , p. 16 |
| $G \doteq H$ | o grafo G é isomorfo ao grafo H , p. 9 |
| $G \vee H$ | <i>join</i> dos grafos G e H , p. 15 |
| $G_{u,v}$ | grafo obtido pela subdivisão da aresta uv do grafo G , p. 21 |
| KK_n^j | grafo KK_n^j , p. 44 |

| | |
|-----------------------------|--|
| K_n | grafo completo com n vértices, p. 6 |
| K_{p_1, \dots, p_k} | grafo k -partido completo, p. 7 |
| $L(G)$ | matriz laplaciana do grafo G , p. 8 |
| P_k | caminho com k vértices, p. 6 |
| $Q(G)$ | matriz laplaciana sem sinal do grafo G , p. 8 |
| $S(G)$ | subdivisão do grafo G , p. 21 |
| $S(b, r, a_i)$ | árvore de diâmetro 4, p. 86 |
| $S(n_1, \dots, n_\Delta)$ | árvore <i>starlike</i> de grau máximo Δ , p. 74 |
| S_n | estrela com n vértices, p. 6 |
| $S_{a,b}$ | dupla estrela com vértices centrais de graus $a + 1$ e $b + 1$, p. 16 |
| $Sol(k_1, k_2, \dots, k_g)$ | grafo sol generalizado, p. 17 |
| $T(r_1, r_2, \dots, r_k)$ | árvore balanceada de k níveis e diâmetro $2k$, p. 57 |
| $U_n(x)$ | polinômio de Chebyshev de segundo tipo e de ordem n , p. 64 |
| Δ | grau máximo do grafo, p. 5 |
| Γ_u | conjunto dos vértices vizinhos de u , p. 5 |
| δ | grau mínimo do grafo, p. 5 |
| $\lambda(G)$ | índice do grafo G , p. 8 |
| $\lambda_i(G)$ | i -ésimo autovalor do grafo G , p. 8 |
| \mathbb{I}_n | matriz de identidade de ordem n , p. 8 |
| \mathbb{J}_{rs} | matriz $r \times s$ de entradas todas iguais a 1, p. 20 |
| $\mathcal{B}_{\Delta,k}$ | árvore de Bethe de grau máximo Δ e raio $k - 1$, p. 56 |
| $\mathcal{L}(G)$ | grafo linha do grafo G , p. 14 |
| \overline{G} | grafo complementar de G , p. 6 |
| $d(u, v)$ | distância entre os vértices u e v , p. 7 |
| d_u | grau do vértice u , p. 5 |

| | |
|------------|---|
| $e(u)$ | excentricidade do vértice u , p. 7 |
| kH | união de k cópias do grafo H , p. 12 |
| m_u | grau médio do vértice u , p. 5 |
| $u \sim v$ | o vértice u é adjacente ao vértice v , p. 5 |
| uv | aresta que incide nos vértices u e v , p. 5 |

Capítulo 1

Introdução

O surgimento da Teoria Espectral de Grafos teve suas motivações nas áreas de Química e Física. Segundo [36], o trabalho de Hückel [64], datado em 1931 e voltado para Química Quântica, é considerado o primeiro onde os autovalores (da matriz de adjacência) de um grafo aparecem, de forma implícita. Neste, Hückel propõe um modelo de representação de moléculas de hidrocarbonetos não saturadas, dado por um grafo, no qual os níveis de energia da molécula estariam relacionados com os autovalores deste. De acordo com [116], este trabalho motivou os químicos Günthadr e Primas a proporem, em [51], o questionamento: "*quais grafos são determinados por seus autovalores?*"

O artigo de Collatz e Sinogowitz [114], publicado em 1957, é considerado o primeiro artigo matemático sobre Teoria Espectral de Grafos. Vários resultados, particularmente a respeito do índice (maior autovalor da matriz de adjacência) de um grafo, são provados neste. Alguns destes, enunciados no Capítulo 3, fornecem as primeiras cotas para o índice de um grafo conexo. Outros, como observado por Godsil [57], dão exemplos de grafos não isomorfos coespectrais. Schwenk [99], em 1973, provou que "*a proporção de árvores com n vértices determinadas por seus autovalores tende a zero, quando n cresce*". Em 1983, Hong [68] coloca um novo questionamento: "*que tipo de relações existem entre os autovalores e a estrutura de um grafo?*"

Desde então, o estudo dos autovalores da matriz de adjacência, assim como o de outras matrizes associadas ao grafo, vem crescendo e tendo aplicações em diversas áreas, conforme podemos ver em [36, 39, 44]. *Nosso interesse está focado em investigar relações entre propriedades estruturais de um grafo e o índice deste.* Restringindo os estudos em certas famílias de grafos, buscamos, então, obter novos limites para o índice destes, em função de parâmetros invariantes, assim como determinar os grafos que atingem estes limites (ditos, extremos). Também estamos interessados em estudar a variação do índice sob pequenas perturbações estruturais do grafo, e em ordenar os grafos por meio de seus índices.

O último *survey* sobre índice, escrito por Cvektović e Rowlinson [39], foi publicado em 1990. Eles, juntamente com Simić, escreveram recentemente um livro [44] sobre Teoria Espectral de Grafos e aplicações, no qual incluem uma atualização do *survey* anterior. Mesmo assim, esta não concentra a maior parte dos resultados acerca do índice de um grafo publicados a partir de 1990. De modo que iniciamos nossos estudos realizando uma ampla (porém longe de ser completa) coletânea sobre estes, reunida no Capítulo 3.

A maioria dos resultados encontrados estabelecem cotas superiores ou inferiores para o índice de um grafo e seus grafos extremais, sendo as cotas superiores as que ocorrem com mais frequência. Dadas por meio de uma desigualdade, estas cotas relacionam o índice com alguns dos parâmetros invariantes do grafo. Em nossa pesquisa, nos restringimos às principais cotas obtidas em função dos números de vértices e arestas, e dos graus e graus médios de vértices, e que são aplicadas a classes abrangentes de grafos: conexos, desconexos ou sem vértice isolado.

Separamos estas nas duas primeiras seções do Capítulo 3. Na primeira, enunciaremos as que foram publicadas até 1990; enquanto, na segunda, reportamos apenas as cotas superiores publicadas a partir de 1990. Nossa principal contribuição, neste capítulo, consiste em compararmos estas cotas e em verificar que algumas destas também podem ser aplicadas a grafos desconexos. No caso de cotas inferiores, dadas por Collatz, Nosal e Hofmeister, provamos que esta última é mais precisa quando se trata do índice de um caminho com pelo menos 4 vértices. Para as cotas superiores, listadas na Tabela 3.1, deduzimos quais são as melhores quando aplicadas em um grafo conexo e quais, quando aplicadas em um grafo desconexo.

Na última seção do Capítulo 3, comparamos os quatro melhores limites superiores para o índice de um grafo, aplicando-os a grafos conexos das seguintes classes: árvores, unicíclicos e birregulares. Neste sentido, obtemos alguns resultados, os quais servem para mostrar tanto a dificuldade em se determinar um melhor limite, em classes muito abrangentes de grafos, quanto a necessidade em se buscar novos e mais ajustados limites para o índice de um grafo em classes mais restritas. Nos Capítulos 4 e 6, damos novos e melhores limites para o índice dos grafos que são estudados, assim como seus grafos extremais.

O problema de se determinar uma cota (superior ou inferior) para o índice de um grafo está inteiramente ligado ao problema de se determinar os grafos extremais (que possuem o maior ou menor índice). De acordo com Cvetković e Rowlinson [39], a busca por grafos conexos maximais remonta a um trabalho de Brualdi e Hoffman de 1985. Na última seção do Capítulo 2, fazemos um pequeno histórico sobre este problema. Já nas primeiras seções deste capítulo, damos os preliminares tanto em Teoria de Grafos (primeira seção), quanto em Teoria Espectral de Grafos (segunda seção). Na terceira seção, abordamos operações entre grafos (ou em um

grafo) e, para cada, relacionamos os polinômios característicos ou os índices dos grafos envolvidos na operação.

Como a maior parte dos resultados obtidos estão voltados para o índice de certas classes de árvores, expomos um *survey* sobre os principais limites do índice de uma árvore, na primeira seção do Capítulo 5. No Capítulo 6, obtemos novos limites para o índice de certas árvores, aplicando o algoritmo de Jacobs e Trevisan [73, 74]. Em particular, usamos este algoritmo para analisar, no Teorema 6.2, condições em que o índice de uma árvore *starlike*, de grau máximo Δ , é igual, menor ou maior que $\sqrt{\Delta + 1}$. A fim de dar uma melhor compreensão da aplicabilidade deste algoritmo, expomos diversos exemplos na segunda seção do Capítulo 5. Uma vez que as árvores *starlike* possuem uma forma "*alongada*", fazemos uso de *polinômios de Chebyshev de segundo tipo* na aplicação do algoritmo. Também na segunda seção do Capítulo 5, damos as principais propriedades destes polinômios.

No recente *survey* de Cvetković e Simić [40], sobre aplicações da Teoria Espectral de Grafos na Ciência da Computação, vemos o crescente interesse de grafos integrais (cujos autovalores são todos inteiros) em Computação Quântica e, mais particularmente, em *problemas de balanceamento de cargas*. No artigo [43], os autores estudam este problema aplicado a redes computacionais com multiprocessadores interligados, propondo uma nova medida espectral (*second type mixed tightness*) para se determinar qual estrutura seria mais adequada: $t_2 = \lambda(d + 1)$, onde λ é o índice e d o diâmetro do grafo. Concluindo que o ideal é obtido para medições baixas, eles determinam os grafos que as realizam. No Capítulo 4, analisamos os grafos com n vértices tidos eficientes e observamos, na Tabela 4.1, que a aproximação inteira da média desta medida sempre é realizada por um grafo não necessariamente integral com índice inteiro.

Ainda neste *survey*, os autores concluem que "*subdivisões balanceadas de grafos cúbicos devem ser consideradas como bons modelos de redes computacionais resistentes à propagação de um vírus*". Incluindo os próprios grafos cúbicos, vemos que, novamente, grafos não necessariamente integrais mas com índice inteiro aparecem nestas aplicações. Isto motivou uma nova frente de investigação: *caracterizar grafos não integrais com índice inteiro, em certas classes*. Esta investigação nos levou a obter, em cada classe estudada, novas cotas para o índice dos grafos, caracterizando quando este é inteiro e apresentando famílias infinitas de grafos não integrais com índice inteiro. Em algumas classes, nos permitiu decidir sobre a integralidade do próprio grafo e de construir novas famílias infinitas de grafos integrais.

Na duas primeiras seções do Capítulo 4, determinamos quais grafos Smith (grafos conexos com índice 2) não são integrais e revisamos operações entre grafos e relações destas com o índice, dadas no Capítulo 2, a fim de construirmos exemplos de grafos não integrais com índice inteiro.

Na terceira seção deste capítulo, estudamos condições de integralidade do índice dos grafos KK_n^j , definidos por Freitas *et al.* [48]. Os resultados que aqui expomos constam no artigo [49], onde provamos que, com exceção de KK_1^1 , os grafos KK_n^j não são integrais e possuem índice estritamente entre $n-1$ e $n+1$. Na seção seguinte, estudamos os grafos $K_p \sqcap B(a; r)$, ditos grafos *p-broom-like*. Provamos que os grafos $K_3 \sqcap B(a; 1)$ e $K_4 \sqcap B(a; 1)$ não são integrais e, para cada $p \geq 5$, apresentamos famílias infinitas de $K_p \sqcap B(a; r)$ integrais. No Teorema 4.2 provamos que a classe dos grafos *p-broom-like* com n vértices se ordena total e estritamente através de seus índices.

No Capítulo 6 abordamos o estudo da integralidade do índice de certas famílias de árvores, a saber: árvores de Bethe, árvores *starlike*, vassouras, duplas vassouras, duplas estrelas e árvores de diâmetro 4. Na primeira seção, caracterizamos quando uma árvore de Bethe possui índice inteiro e determinamos a melhor cota superior para o índice de uma árvore que possui índice inteiro e diâmetro menor ou igual a 8. Na segunda seção, exibimos duas famílias infinitas de árvores *starlike* não integrais que possuem índice inteiro e provamos que o índice de quase toda *vassoura generalizada* não é inteiro.

No Teorema 6.3, da terceira seção deste capítulo, provamos que o índice de uma dupla vassoura, de diâmetro $d \geq 4$ e grau máximo Δ , está limitado por $\sqrt{\Delta}$ e $\sqrt{\Delta + 1}$, caracterizando quando esta possui índice igual a $\sqrt{\Delta + 1}$. Ainda, determinamos quais são as duplas vassouras que possuem índice inteiro. No final desta seção, exibimos duas infinitas famílias de duplas estrelas não integrais com índice inteiro.

Finalmente, na última seção, estudamos a integralidade do índice de uma árvore de diâmetro 4. Começamos o nosso estudo com resultados mais gerais a respeito de seus autovalores e provamos, no Teorema 6.4, a recíproca de um resultado de Wang [118]. Na primeira subseção, obtemos, no Teorema 6.5, uma cota superior mais ajustada para estas árvores, em função de seu grau máximo Δ , caracterizando sua árvore maximal. Sendo esta árvore maximal uma árvore balanceada, de diâmetro 4, dedicamos a subseção seguinte ao estudo de propriedades espectrais destas. Na última subseção, construímos uma nova e infinita família de árvores integrais de diâmetro 4.

Finalizamos nossa tese, apresentando no Capítulo 7 nossas considerações finais e nossas propostas para a continuação desta pesquisa.

Capítulo 2

Conceitos Básicos

Neste capítulo apresentamos conceitos gerais e principais resultados de Teoria de Grafos e de Teoria Espectral de Grafos que serão usados no decorrer do texto, introduzindo notações pertinentes. Como principais referências veja [21, 44, 56]. Tanto na segunda, como na terceira seção, fazemos uso de resultados de Teoria de Matrizes, que podem ser encontrados em [70].

2.1 Conceitos elementares em Teoria de Grafos

Um *grafo* G consiste num par de conjuntos finitos $V(G)$, de $n \geq 1$ *vértices*, e $E(G)$, de $m \geq 0$ *arestas*, onde $E(G)$ é um conjunto formado por pares não-ordenados $\{u, v\}$ de vértices u e v distintos. Usualmente, denotamos a aresta $\{u, v\}$ por uv e expressamos o fato desta ser formada pelo par de vértices u e v dizendo, equivalentemente: a aresta uv incide nos vértices u e v ; os vértices u e v incidem na aresta uv ; o *vértice* u é *adjacente* (ou, *vizinho*) ao vértice v ; os vértices u e v são adjacentes (ou, vizinhos). Usamos a notação $u \sim v$ para expressar que os vértices u e v distintos são adjacentes. Também usamos a noção de adjacência entre arestas para exprimir que duas *arestas* distintas são *adjacentes* quando incidem em um mesmo vértice. Eventualmente os conjuntos de vértices $V(G)$ e de arestas $E(G)$ do grafo G serão abreviados, respectivamente, por V e E .

O número d_u de arestas que incidem num vértice u denota o *grau* deste vértice. O maior dentre os graus dos vértices é o *grau máximo* do grafo, denotado por Δ . Analogamente, o menor, denotado por δ , é o *grau mínimo* do grafo. A média dos graus é $\frac{2m}{n}$ e chamada de *grau médio do grafo*. O conjunto dos vértices vizinhos de u será indicado por Γ_u . Caso $d_u \geq 1$, definimos por *grau médio do vértice* u a média $m_u = \frac{1}{d_u} \sum_{z \in \Gamma_u} d_z$. Se necessário, utilizamos $d_u(G)$, $\Delta(G)$, $\delta(G)$, $\Gamma_u(G)$ e $m_u(G)$ para explicitar o grafo G em que são considerados os graus do vértice, máximo e mínimo, os vizinhos do vértice e o grau médio deste. Se $d_u = 0$, dizemos que u é um vértice

isolado. Se $d_u = 1$, u é um *vértice pendente*, assim como a única aresta que nele incide será uma *aresta pendente*. Se $d_u = n - 1$, u será dito *vértice dominante* ou *universal*.

Se dois grafos H e G satisfazem $V(H) \subset V(G)$ e $E(H) \subset E(G)$, dizemos que H é um *subgrafo* de G , ou que G é um *supergrafo* de H . Caso $V(H) \neq V(G)$ ou $E(H) \neq E(G)$, H será um *subgrafo próprio* de G ; caso $V(H) = V(G)$, H será um *subgrafo gerador* de G ; caso nenhuma aresta de G , que não seja aresta de H , incida em algum vértice de H , diremos que H é um *subgrafo induzido* de G . De modo análogo definem-se *supergrafo próprio* e *supergrafo gerador*. Se H é um subgrafo induzido de G , também dizemos que H é *subgrafo gerado por* $V(H)$. Podemos obter um subgrafo (ou, supergrafo) H de um grafo G retirando-se (resp., adicionando-se) ao grafo G um conjunto finito \mathcal{S} de vértices ou arestas. O grafo H será, então, denotado por $G - \mathcal{S}$ (resp., $G + \mathcal{S}$) ou, simplesmente, por $G - u$ ou $G - uv$ (resp., $G + u$ ou $G + uv$), caso \mathcal{S} seja unitário.

Definimos uma *cadeia* (de comprimento $k \geq 0$) de um grafo G como sendo uma sequência $u_1 \dots u_{k+1}$ de $k + 1$ vértices consecutivamente adjacentes, ou seja, tais que $u_i u_{i+1}$ seja uma aresta de G , para $1 \leq i \leq k$. Os vértices u_1 e u_{k+1} são ditos, respectivamente, *vértices inicial* e *final* da cadeia. Se estes vértices coincidirem, dizemos que esta cadeia é *fechada*. Se a cadeia é formada por vértices distintos entre si, dizemos que esta é um *caminho de comprimento* k . Se a cadeia é fechada e os vértices desta, com exceção dos vértices inicial e final, são dois a dois distintos, dizemos que esta é um *ciclo de comprimento* k . No caso da cadeia ser um caminho (ou um ciclo), iremos relacioná-la com o subgrafo de G formado pelos vértices u_i da cadeia e pelas arestas $u_i u_{i+1}$ de G , o qual o chamaremos por caminho (resp., ciclo) de comprimento k e será denotado por P_{k+1} (resp., C_k). Um grafo sem ciclos é dito *acíclico* ou *floresta*.

Um grafo sem arestas é dito *vazio*. Um grafo com n vértices em que um vértice é dominante e os demais são pendentos é dito *estrela* e denotado por S_n . Um grafo com n vértices em que todo vértice é dominante é dito *completo* e denotado por K_n . Um grafo é dito *k-regular*, ou *regular de grau* k , onde $0 \leq k \leq n - 1$, se o grau de todos os seus vértices for k ; é dito *birregular*, de graus r e s distintos, se seus vértices possuem somente grau r ou s e pelo menos dois vértices têm graus distintos; é dito *quase regular* se $\Delta - \delta = 1$ e, portanto, grafos quase regulares são um caso especial de grafos birregulares. Os grafos K_n e C_n são regulares, de graus $n - 1$ e 2 , respectivamente; P_n e S_3 são quase regulares; S_n , para $n \geq 4$, são birregulares, de graus $n - 1$ e 1 . O *complementar* de um grafo G , denotado por \overline{G} , é o grafo que possui exatamente os mesmos vértices de G e, no qual, uv será uma aresta se, e somente se, uv não for aresta de G . Portanto, o grafo vazio com n vértices é $\overline{K_n}$ e o complementar de um grafo k -regular é um grafo regular de grau $n - 1 - k$.

Um grafo é dito *conexo* quando dois vértices quaisquer u e v do grafo são vértices inicial e final de um caminho do grafo. Caso contrário, o grafo será *desconexo*. Um grafo conexo e acíclico é chamado de *árvore*. É conhecido na literatura [21], que uma árvore, com n vértices, possui exatamente $n - 1$ arestas e que, ao ser adicionada de uma aresta, esta passa a ser um grafo conexo com um ciclo, único. Sendo um grafo conexo com um único ciclo chamado de *unicíclico*, este grafo terá iguais números de vértices e arestas.

Num grafo conexo, definimos por *distância* $d(u, v)$ entre dois vértices u e v pelo comprimento do caminho do grafo de menor comprimento e que tenha vértices inicial e final em u e v ; por *excentricidade* $e(u)$ do vértice u , a maior distância entre u e os demais vértices do grafo; por *diâmetro* do grafo, a maior distância entre dois vértices do grafo; por *vértice central*, um vértice de menor excentricidade; por *raio*, a excentricidade de um vértice central; por *cintura*, o comprimento do ciclo do grafo de menor comprimento. Deste modo, para $n \geq 3$, C_n e K_n são grafos conexos de cintura n e 3 , respectivamente, e a estrela S_n é o grafo conexo de diâmetro 2 . Do teorema abaixo, segue que o diâmetro de uma árvore é par se, e somente se, esta possui um único vértice central.

Teorema 2.1. ([62], Teorema 4.2) *Uma árvore ou possui um único vértice central, ou possui exatamente dois vértices centrais, os quais são adjacentes.*

É comum, numa árvore, escolher um vértice r , denominando-o de *raiz*, e estabelecer o *nível* de um vértice como sendo a distância deste à raiz, sendo, portanto, a raiz o único vértice de nível 0 . Por exemplo, se escolhermos como raiz de S_n o seu vértice central, então os demais vértices estarão no nível 1 . Caso contrário, o vértice central estará no nível 1 e os demais vértices, distintos da raiz, estarão no nível 2 .

Um grafo é *k-partido* quando seu conjunto V de vértices pode ser particionado em k conjuntos V_i (ditos *classes da partição*) de modo que não existam adjacências entre dois vértices de um mesmo conjunto V_i . Como todo grafo de n vértices é n -partido e o único grafo 1 -partido é o grafo vazio, consideramos grafos k -partidos apenas para $2 \leq k \leq n - 1$. Um grafo k -partido é dito *completo* quando cada vértice de uma classe V_i é adjacente aos demais vértices de $V - V_i$. Sendo $p_i = |V_i|$, denotamos um k -partido completo por K_{p_1, \dots, p_k} . Caso $k = 2$, dizemos que o grafo é *bipartido* em vez de 2 -partido. Uma caracterização de grafos bipartidos é dada pelo Teorema 2.2. Segue deste que as árvores são grafos bipartidos, assim como os ciclos C_{2k} de comprimento par. Observamos que S_n e C_4 são bipartidos completos: $S_n = K_{1, n-1}$ e $C_4 = K_{2, 2}$.

Teorema 2.2. ([81], Teorema 2.23) *Um grafo G com $n \geq 2$ vértices é bipartido se, e somente se, G não possui ciclo de comprimento ímpar.*

Um grafo bipartido é *semirregular* se os vértices de uma mesma classe da partição possuem mesmo grau. Por exemplo, C_{2k} , S_n e $K_{r,s}$ são bipartidos semirregulares. Eventualmente há interesse em se especificar os graus r e s dos vértices de um tal grafo bipartido, vindo a chamá-lo de (r, s) -*semirregular*. Esta definição pode ser encontrada em [29, 102].

Um *acoplamento* de um grafo é um conjunto de arestas duas a duas não adjacentes, ou seja, que incidem em vértices distintos. Caso o conjunto de vértices incidentes das arestas de um acoplamento for igual ao conjunto de vértices do grafo, diremos que o acoplamento é *perfeito*. Observe que todo grafo com pelo menos uma aresta (não vazio) possui acoplamento (não vazio). Dado um acoplamento de um grafo, diremos que este é *maximal* se não existir um outro acoplamento que o contenha; diremos que é *máximo* se possuir, dentre todos os acoplamentos do grafo, o maior número de arestas. No grafo bipartido completo $K_{s,t}$ (com $1 \leq s \leq t$), um acoplamento com s arestas será maximal assim como máximo, sendo perfeito somente se $s = t$. No Capítulo 5, apresentamos resultados da literatura sobre o índice de árvores que possuem acoplamento perfeito ou máximo.

2.2 O índice de um grafo: resultados básicos de Teoria Espectral de Grafos

Dado um grafo G , com n vértices (enumerados de 1 até n) e m arestas (enumeradas de 1 até m), associamos a este algumas matrizes. A *matriz de adjacência* $A(G)$, quadrada de ordem n , cuja entrada a_{ij} é igual a 1, se os vértices i e j forem adjacentes, ou 0, caso contrário. A *matriz de incidência* $B(G)$, de ordem $n \times m$, com entrada b_{ij} igual a 1, se a aresta j incide no vértice i , ou 0, caso contrário. A *matriz diagonal dos graus* $D(G) = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$, onde d_i é o grau do vértice i . A *matriz laplaciana* $L(G) = D(G) - A(G)$ e a *matriz laplaciana sem sinal* $Q(G) = D(G) + A(G)$.

Denotamos por \mathbb{I}_n a matriz de identidade de ordem n . Com exceção da matriz de incidência, para cada matriz M acima temos definidos seu *polinômio característico* $p_M(x) = \det(x\mathbb{I}_n - M)$ e seus *autovalores* (raízes complexas deste polinômio). Por M ser uma *matriz simétrica*, ou seja, cujas entradas satisfazem $m_{ij} = m_{ji}$, seus autovalores são reais e, por isto, podem ser ordenados de modo não-crescente. O maior de seus autovalores é dito *índice* da matriz M e o maior módulo destes, *raio espectral* de M . Caso M seja a matriz de adjacência $A(G)$, denotamos seu polinômio característico por $p_G(x)$ e seus autovalores (ordenados) por $\lambda_1(G) \geq \dots \geq \lambda_n(G)$, chamando-os de *polinômio característico* e *autovalores do grafo* G , respectivamente. O índice $\lambda_1(G)$ de $A(G)$ é dito *índice do grafo* G e denotado por $\lambda(G)$. Desde que

isto não gere confusão, omitiremos o G nas notações acima.

Observação 2.1. *Um autovalor de um grafo, sendo raiz de um polinômio mônico com coeficiente inteiros, ou é inteiro ou é irracional.*

Na Tabela 2.1 apresentamos os autovalores dos grafos completo, ciclo, caminho e bipartido completo, retirada de [68]. Em [26, 44, 89] podem-se encontrar tabelas e listagens com os autovalores de diversos grafos conexos.

| Grafo | Autovalores |
|-----------|--|
| K_n | $n - 1, -1$ |
| C_n | $2 \cos(\frac{2k\pi}{n})$, para $0 \leq k \leq n - 1$ |
| P_n | $2 \cos(\frac{k\pi}{n+1})$, para $1 \leq k \leq n$ |
| $K_{a,b}$ | $\sqrt{ab}, 0, -\sqrt{ab}$ |

Tabela 2.1: *Autovalores dos grafos completo, ciclo, caminho e bipartido completo*

Observamos que os polinômios característicos e autovalores dessas matrizes M não dependem das enumerações efetuadas nos vértices e nas arestas do grafo. Precisamente, se existir um *isomorfismo* entre os grafos G e H , ou seja, uma bijeção φ entre os vértices $V(G)$ e $V(H)$ que preserve a relação de adjacência (i.e., $\varphi(u) \sim \varphi(v)$ se, e somente se, $u \sim v$), então as matrizes $M(G)$ e $M(H)$ são similares e, portanto, terão polinômios característicos iguais. Quando existe um isomorfismo, dizemos que os grafos são *isomorfos* e, por simplicidade, denotamos este fato pela igualdade $G = H$.

Como observado por Hong [68], o estudo de autovalores de um grafo aparece naturalmente em diversas aplicações da Teoria de Grafos. Por exemplo, eles determinam os níveis de energia de elétrons de moléculas não saturadas de hidrocarbono. Assim, é inevitável o questionamento que Hong propõe: "*Que tipo de relações existem entre os autovalores e a estrutura de um grafo?*" Godsil e McKay [55] apresentam técnicas para se construir pares de grafos que possuem os mesmos autovalores, ditos *coespectrais*, e que não sejam isomorfos, mostrando que quase toda árvore, em geral, admite um tal par e, portanto, não pode ser determinada unicamente por seus autovalores. Estudos de grafos unicamente determinados por seus autovalores (ou autovalores das matrizes laplaciana e laplaciana sem sinal) podem ser encontrados vastamente na literatura [6, 24, 61, 78, 87, 112, 115–117]. Na Figura 2.1 temos exemplos de pares de grafos coespectrais.

Um dos principais resultados espectrais é consequência do *Teorema de Perron-Frobenius*, o qual pode ser encontrado na literatura com algumas variações (Teorema

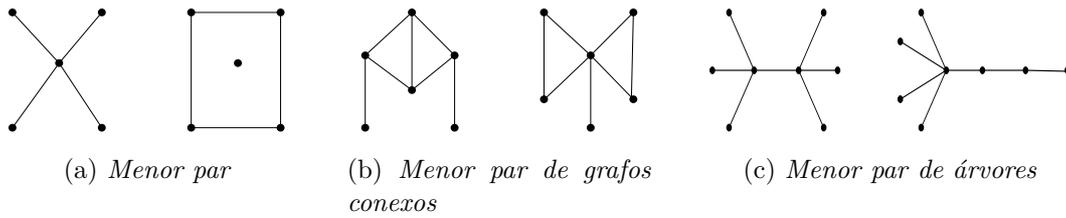


Figura 2.1: Pares de grafos coespectrais não isomorfos

I de [23], Teorema 8.8.1 de [56], Teorema 1.3.6 de [44], Proposição 3.1.1 de [26]). Enunciado pelo Teorema 2.3, tem diversas aplicações na Teoria de Grafos. De [56], reportamos:

1. O raio espectral e o índice de um grafo conexo coincidem;
2. Um grafo é bipartido se, e somente se, seus autovalores são simétricos com relação a 0;
3. Um grafo conexo é bipartido se, e somente se, $-\lambda$ é autovalor do grafo.

Este Teorema se aplica a matrizes quadradas reais com entradas não negativas e que sejam *irredutíveis*, como ocorre com as matrizes A e Q de grafos conexos. Dizemos que uma matriz quadrada M (de ordem n) é irredutível quando não existe uma matriz P , obtida permutando-se as colunas de \mathbb{I}_n , tal que PMP^T seja da forma $\begin{bmatrix} B & C \\ \mathbb{O} & D \end{bmatrix}$, onde \mathbb{O} denota uma matriz nula.

Teorema 2.3. ([70], p. 508) *Seja M uma matriz real quadrada, de ordem n , com entradas não negativas. Se M for irredutível, então:*

- (a) O raio espectral ρ de M é positivo e é autovalor de M ;
- (b) Existe um vetor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ de coordenadas positivas tal que $M\mathbf{v} = \rho\mathbf{v}$; e
- (c) ρ é um autovalor geometricamente e algebricamente simples.

No caso da matriz de adjacência A de um grafo conexo G , a qual satisfaz as condições do teorema acima, é usual se referir a um vetor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$, de coordenadas positivas, que satisfaz a equação $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$, por *um autovetor de Perron do grafo G* . Veja, por exemplo, [11, 26]. Desta equação, $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$, temos que cada coordenada v_i de \mathbf{v} satisfaz a equação

$$\lambda v_i = \sum_{j \sim i} v_j, \quad (2.1)$$

conhecida por *equação do índice para o i -ésimo vértice*. No Capítulo 6, iremos determinar um autovetor de Perron de uma especial árvore de diâmetro 4.

Uma consequência do Teorema 2.3 relaciona o índice de um grafo conexo com o de um seu subgrafo. Enunciada pela Proposição 2.1, uma idéia da prova desta pode ser encontrada na p. 515 de [70].

Proposição 2.1. *Se H é subgrafo próprio de G e ambos forem conexos, então $\lambda(H) < \lambda(G)$.*

Outro resultado importante é o *Teorema de Rayleigh-Ritz* ([70], p. 176), que reportaremos com enunciado aplicado a matrizes reais simétricas:

Teorema 2.4. *Seja M uma matriz real simétrica, de ordem n , então:*

- (a) $\lambda_1 = \max_{u \in \mathbb{R}^n; u \neq 0} \frac{u^T M u}{u^T u}$, sendo o máximo atingido quando $M u = \lambda_1 u$ e $u \neq 0$;
- (b) $\lambda_n = \min_{u \in \mathbb{R}^n; u \neq 0} \frac{u^T M u}{u^T u}$, sendo o mínimo atingido quando $M u = \lambda_n u$ e $u \neq 0$.

Na seção que segue, daremos continuidade às propriedades espectrais de grafos, apresentando aquelas que envolvem certas operações, entre grafos, e que são usuais na Teoria Espectral de Grafos.

2.3 Relações entre índice e operações em grafos

Operamos em um grafo ou entre grafos visando obter um novo grafo. Nesta seção estamos interessados em relacionar o índice (ou o polinômio característico) do grafo resultante de uma operação com os índices (ou os polinômios característicos) dos grafos envolvidos nesta. Na primeira subseção iremos tratar das operações consideradas elementares, relacionando os autovalores dos grafos envolvidos com os do grafo resultante. Separamos as demais operações, usuais na Teoria Espectral de Grafos, para a segunda subseção. Na terceira subseção consideramos a transformação de um grafo obtida ao retirarmos (ou, adicionarmos) deste uma quantidade de vértices ou arestas, apresentando algumas fórmulas de redução para o cálculo do polinômio característico do grafo.

2.3.1 União, soma, produto e produto forte

Dados dois grafos G_1 e G_2 , efetuamos operações entre os dois de modo a obter um novo grafo G cujo índice esteja diretamente relacionado com os índices de G_1 e G_2 ([39], p.23). Definiremos aquelas que consideramos mais elementares, começando pela mais simples.

Definição 2.1. *A união de dois grafos G_1 e G_2 é o grafo $G = G_1 \cup G_2$ dado por $V(G) = V(G_1) \cup V(G_2)$ e $E(G) = E(G_1) \cup E(G_2)$.*

Supondo os grafos G_1 e G_2 *disjuntos*, ou seja, que não possuem vértice em comum, a matriz de adjacência de $G = G_1 \cup G_2$ pode ser expressa como uma matriz diagonal $\text{diag}(A(G_1), A(G_2))$. E, portanto, $p_G(x) = p_{G_1}(x) \cdot p_{G_2}(x)$ e

$$\lambda(G) = \max\{\lambda(G_1), \lambda(G_2)\} . \quad (2.2)$$

A operação de união pode ser definida mesmo se os grafos não forem disjuntos, como observado por Harary ([62], p.21). Um caso particular disto é dada pela *superposição* ([21], p. 16) de G_1 com G_2 , na qual $V(G_1) = V(G_2)$ e $E(G_1) \cap E(G_2) = \emptyset$. Como neste contexto mais geral o índice de G não é determinado a partir dos índices de G_1 e G_2 , iremos considerar somente a união entre grafos disjuntos, o que nos permite dar uma definição alternativa para grafos conexos.

Definição 2.2. *Um grafo é desconexo se pode ser dado como união de outros dois grafos. Caso contrário, o grafo será conexo.*

Definindo a união de $k \geq 2$ grafos G_1, \dots, G_k , recursivamente, pela união de $G_1 \cup \dots \cup G_{k-1}$ com G_k , podemos escrever qualquer grafo G como união finita de grafos conexos, conforme especificaremos.

Afirmção 2.1. *Dado um grafo G , existem únicos grafos conexos G_1, \dots, G_k (com $k \geq 1$) de modo que $G = G_1 \cup \dots \cup G_k$. Ainda,*

$$\lambda(G) = \max_{1 \leq i \leq k} \lambda(G_i) . \quad (2.3)$$

No caso particular em que G_1, \dots, G_k são isomorfos a um mesmo grafo H , a união $G_1 \cup \dots \cup G_k$ será abreviada por kH , sendo esta igual a k cópias de H .

Definição 2.3. *Os grafos G_1, \dots, G_k da Afirmção 2.1 são ditos componentes conexas do grafo G .*

As seguintes operações, soma, produto e produto forte, definem o conjunto $V(G)$ pelo produto cartesiano $V(G_1) \times V(G_2)$ e, por isto, são chamadas de *operações cartesianas* entre grafos ([44], p.43). Denotamos os vértices de G por $u = (x, y)$, com $x \in V(G_1)$ e $y \in V(G_2)$, e consideramos que os grafos G_1 e G_2 tenham, respectivamente, n_1 e n_2 vértices.

Definição 2.4. *A soma do grafo G_1 com o grafo G_2 é o grafo $G = G_1 + G_2$, no qual dois vértices u_1 e u_2 serão adjacentes somente quando*

(i) $x_1 = x_2$ e $y_1 \sim y_2$, ou

(ii) $x_1 \sim x_2$ e $y_1 = y_2$.

Neste caso, os autovalores de G serão dados pelas somas $\lambda_i(G_1) + \lambda_j(G_2)$, com $1 \leq i \leq n_1$ e $1 \leq j \leq n_2$. E, portanto,

$$\lambda(G) = \lambda(G_1) + \lambda(G_2) . \quad (2.4)$$

Definição 2.5. O produto de G_1 por G_2 é dado por $G = G_1 \times G_2$, cujos vértices u_1 e u_2 serão adjacentes somente quando

$$(iii) \quad x_1 \sim x_2 \text{ e } y_1 \sim y_2.$$

Logo, os autovalores de $G = G_1 \times G_2$ serão os produtos $\lambda_i(G_1) \cdot \lambda_j(G_2)$, com $1 \leq i \leq n_1$ e $1 \leq j \leq n_2$, e seu índice será dado por

$$\lambda(G) = \lambda(G_1) \cdot \lambda(G_2) . \quad (2.5)$$

Por fim, numa combinação da soma com o produto, definimos o produto forte.

Definição 2.6. O produto forte de G_1 por G_2 é o grafo $G = G_1 * G_2$, aonde seus vértices u_1 e u_2 serão adjacentes quando uma das condições (i), (ii) e (iii) anteriores for satisfeita.

Resulta que o índice de $G = G_1 * G_2$ é dado por

$$\lambda(G) = \lambda(G_1) + \lambda(G_2) + \lambda(G_1) \cdot \lambda(G_2) . \quad (2.6)$$

Na Figura 2.2 apresentamos a soma, o produto e o produto forte de K_2 por K_3 .

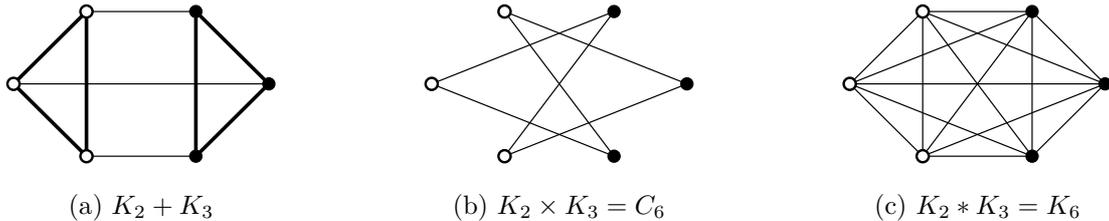


Figura 2.2: Soma, produto e produto forte de K_2 por K_3

As operações cartesianas foram generalizadas por Cvetković e R. Lučić ([37] apud [41]) para o conceito de *NEPS* (*non-completed extended p-sum*): dados p grafos G_i e um conjunto \mathcal{B} de p -uplas $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_p)$ de zeros e uns, não nulas, dizemos que o grafo G é NEPS de G_1, \dots, G_p com base \mathcal{B} quando

- (a) $V(G) = V(G_1) \times \dots \times V(G_p)$ e
- (b) dois de seus vértices $u = (x_1, \dots, x_p)$ e $v = (y_1, \dots, y_p)$ são adjacentes se, e somente se, existir $\beta \in \mathcal{B}$ tal que $x_i \sim y_i$, sempre que $\beta_i = 1$, e $x_i = y_i$, caso $\beta_i = 0$.

A matriz de adjacência de G será dada por $A = \sum_{\beta \in \mathcal{B}} A_1^{\beta_1} \otimes \dots \otimes A_p^{\beta_p}$, onde \otimes denota o produto de Kronecker de matrizes [44]. Portanto, seus autovalores serão da forma

$$\Lambda_{i_1 \dots i_p} = \sum_{\beta \in \mathcal{B}} \lambda(A_1)_{i_1}^{\beta_1} \cdot \dots \cdot \lambda(A_p)_{i_p}^{\beta_p}. \quad (2.7)$$

Observamos que um NEPS de G_1, \dots, G_p é *comutativo* se, e somente se, sua base \mathcal{B} satisfizer: para todo $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_p) \in \mathcal{B}$ e toda permutação $\pi \in S_p$, tem-se que $\beta_\pi = (\beta_{\pi(1)}, \dots, \beta_{\pi(p)}) \in \mathcal{B}$. As operações de soma, produto e produto forte acima serão reobtidas como NEPS considerando, respectivamente, $\mathcal{B} = \{(0, 1), (1, 0)\}$, $\mathcal{B} = \{(1, 1)\}$ e $\mathcal{B} = \{(0, 1), (1, 0), (1, 1)\}$. Portanto, estas operações são comutativas, assim como o é a união. Finalmente, observamos, como bem pontuado por Grone e Merris ([58], p.1568), que diversos autores, incluindo os mesmos, referem-se à soma como *produto cartesiano*. Por exemplo, vejam Beineke *et al.* ([10], p.6), Boaventura Netto ([21], p.15), Doob ([10], p.52), Godsil e McKay [55].

2.3.2 Autovalores de um grafo complementar, linha, *join*, corona e produto enraizado

Diferentemente da subseção anterior, o índice do grafo obtido por meio das operações que aqui trataremos nem sempre está diretamente relacionado com os índices dos grafos envolvidos, salvo casos particulares. Por exemplo, o índice do complementar \overline{G} de um grafo G está relacionado ao índice de G , se este for regular:

Lema 2.1. ([56], p. 172) *Seja G um grafo k -regular. Então, $\lambda(G) = k$ e \overline{G} é $(n - 1 - k)$ -regular, cujos autovalores satisfazem $\lambda(\overline{G}) = n - 1 - k$ e, para $2 \leq i \leq n$, $\lambda(\overline{G})_i = -1 - \lambda(G)_{n-i+2}$.*

Caso o grafo não seja regular, vale uma relação mais fraca entre alguns autovalores de \overline{G} e G :

Lema 2.2. ([53], Teorema 3.1) *Se α é um autovalor do grafo G com multiplicidade $p \geq 2$, então $-1 - \alpha$ é autovalor de \overline{G} com multiplicidade \overline{p} tal que $p - 1 \leq \overline{p} \leq p + 1$.*

O análogo ocorre com o grafo *linha* $\mathcal{L}(G)$ de um grafo G : o grafo linha $\mathcal{L}(G)$ é o grafo cujos vértices correspondem às arestas de G , os quais serão adjacentes se, e somente se, as arestas que correspondem também o são. Segue, então, que $\mathcal{L}(C_n) = C_n$ e que o grafo linha de um grafo k -regular é um grafo $(2k - 2)$ -regular. Na Figura 2.3 damos exemplos de grafos linha.

Do Lema 8.2.2 de [56], temos que, dado um grafo G com n vértices e m arestas, a matriz de adjacência de seu grafo linha satisfaz $A(\mathcal{L}(G)) = [B(G)]^T B(G) - 2\mathbb{I}_m$,

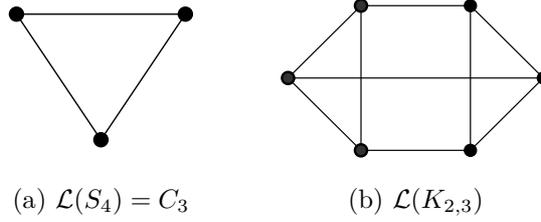


Figura 2.3: Grafos linha

implicando que os autovalores de $\mathcal{L}(G)$ são maiores ou iguais a -2 . Caso G seja k -regular ([56], p. 167),

$$p_{\mathcal{L}(G)}(x) = (x + 2)^{m-n} p_G(x - k + 2) . \quad (2.8)$$

Dentre das operações entre grafos que, em seguida, apresentamos, apenas duas delas são comutativas: *join* e *coalescência*.

Definição 2.7. *O join de dois grafos G_1 e G_2 é o grafo $G = G_1 \vee G_2$ dado por $V(G) = V(G_1) \cup V(G_2)$ e pela arestas de G_1 e G_2 e pelas adjacências entre quaisquer vértices $u \in V(G_1)$ e $v \in V(G_2)$.*

Observamos que o *join* entre dois grafos completos é um grafo completo (ou seja, $K_a \vee K_b = K_{a+b}$) e entre dois grafos vazios é um bipartido completo ($\overline{K_a} \vee \overline{K_b} = K_{a,b}$). Na Proposição 2.2 temos relacionados os autovalores do *join* entre dois grafos com os autovalores destes, desde que eles sejam regulares.

Proposição 2.2. ([44], Teorema 2.1.8) *Sejam G_1 e G_2 grafos regulares de graus r_1 e r_2 e com n_1 e n_2 vértices, respectivamente. Então, o polinômio característico do join $G = G_1 \vee G_2$ é igual a*

$$p_G(x) = \frac{p_{G_1}(x)p_{G_2}(x)}{(x - r_1)(x - r_2)} [(x - r_1)(x - r_2) - n_1 n_2] .$$

Em particular, o índice de G é a maior raiz positiva de $(x - r_1)(x - r_2) - n_1 n_2$.

Caso os grafos não sejam regulares, pode-se determinar o polinômio característico do *join* destes aplicando o teorema:

Teorema 2.5. ([44], Teorema 2.1.5) *Sejam G_1 e G_2 grafos com n_1 e n_2 vértices, respectivamente. Então, o polinômio característico do join $G = G_1 \vee G_2$ é igual a*

$$p_G(x) = (-1)^{n_2} p_{G_1}(x) p_{\overline{G_2}}(-x - 1) + (-1)^{n_1} p_{G_2}(x) p_{\overline{G_1}}(-x - 1) - (-1)^{n_1+n_2} p_{\overline{G_1}}(-x - 1) p_{\overline{G_2}}(-x - 1) .$$

Definição 2.8. ([62], p.167) O grafo corona $G_1 \circ G_2$ é obtido ao tomarmos 1 cópia de G_1 e $n_1 = |V(G_1)|$ cópias de G_2 e, então, efetuarmos o join entre o i -ésimo vértice de G_1 e a i -ésima cópia de G_2 .

Exemplos de grafos coronas são obtidos por um caso especial de *dupla estrela* (a saber, $K_2 \circ \overline{K_a}$) e pelo *grafo sol* $C_n \circ K_1$, mostrados na Figura 2.5 e cujos polinômios são conhecidos na literatura. Dados inteiros positivos a e b , uma *dupla estrela* $S_{a,b}$ é obtida a partir de duas estrelas S_{a+1} e S_{b+1} , unindo seus vértices centrais por uma aresta. A dupla estrela $S_{a,b}$ tem 2 vértices centrais, de graus $a + 1$ e $b + 1$, e os demais $a + b$ vértices são pendent. Caracterizada por ser uma árvore de diâmetro 3, seu polinômio característico pode ser encontrado em [5, 46, 80]:

$$p_{S_{a,b}}(x) = x^{a+b-2}[x^4 - (a + b + 1)x^2 + ab] , \quad (2.9)$$

sendo $\lambda(S_{a,b})$ a maior raiz positiva de $x^4 - (a + b + 1)x^2 + ab$.

No Capítulo 6, estudamos uma classe de árvores que inclui as duplas estrelas, dadas pelas *duplas vassouras*, e obteremos limites superior e inferior para o índice de um grafo desta família. Uma *dupla vassoura* é uma árvore, com $a + b + r$ vértices, obtida ao pendurarmos (isto é, ligarmos por uma aresta) a vértices no extremo inicial v_1 do caminho $P_r = v_1 v_2 \dots v_r$, e pendurarmos b vértices no extremo final v_r . Considerando $a \geq 1$, $b \geq 0$ e $r \geq 1$, denotamos a dupla vassoura por $D(a; r; b)$. Note que, caso $b \geq 1$, esta possui diâmetro $r + 1$ e, exatamente, $a + b$ vértices pendent. Caso $b = 0$ ou $b = 1$, a dupla vassoura também é conhecida por *vassoura*. Se $r = 2$, a dupla vassoura é a dupla estrela $S_{a,b}$; e se $r = 1$, esta coincide com a estrela S_{a+b+1} . Quando $a = b$, dizemos que a dupla vassoura é *balanceada*. Na Figura 2.4 damos alguns exemplos de duplas vassouras.

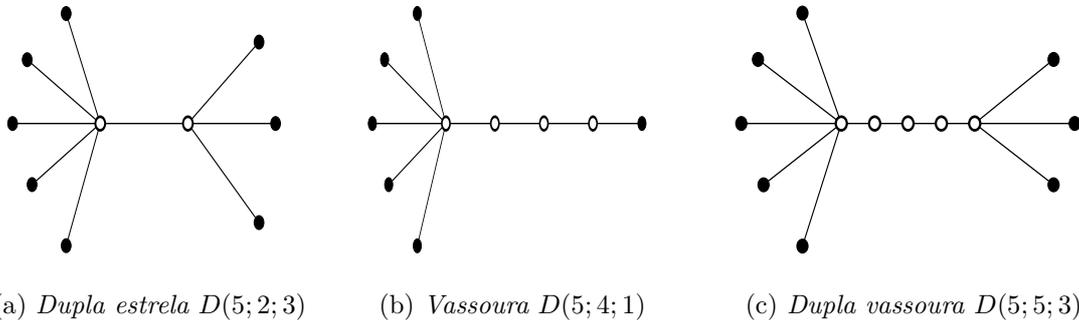


Figura 2.4: *Dupla estrela, vassoura e dupla vassoura*

O grafo corona $K_2 \circ \overline{K_a}$ é a dupla estrela balanceada $S_{a,a}$. Na Figura 2.5a damos um exemplo desta.

Um *grafo sol* com $n = 2g$ vértices ($g \geq 3$), exemplificado pela Figura 2.5b, é o grafo obtido pelo ciclo C_g ao se pendurar em cada vértice do ciclo uma aresta.

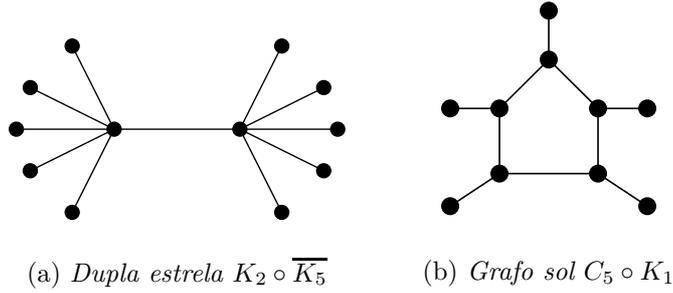


Figura 2.5: Grafos coronas

Portanto, é o grafo corona $C_g \circ K_1$. Um grafo corona é dito *quebrado* se retirarmos do grafo sol alguns vértices pendentes, como mostrado na Figura 2.6a. No artigo de Belardo *et al.* [11], temos definido o *grafo sol generalizado* $Sol(k_1, k_2, \dots, k_g)$, onde $g \geq 3$ e cada $k_i \geq 0$, obtidos ao se pendurar k_i arestas em cada vértice i do ciclo C_g . Um exemplo deste é mostrado na Figura 2.6b. Observe que o grafo sol é o grafo sol generalizado dado por $Sol(1, 1, \dots, 1)$, enquanto o grafo sol quebrado é o caso particular em que cada $k_i \in \{0, 1\}$.

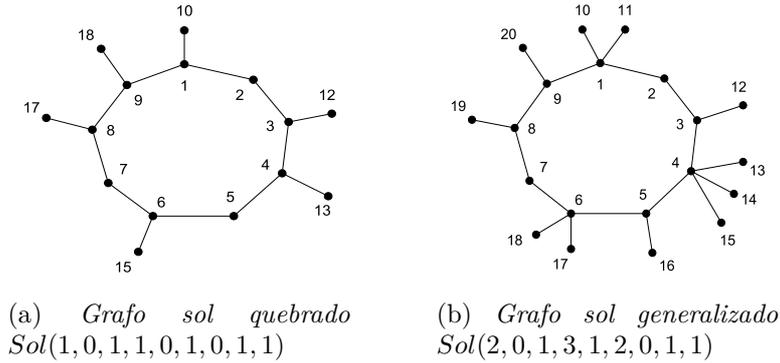


Figura 2.6: Grafos sol

O grafo sol generalizado $Sol(r, r, \dots, r)$ é o grafo corona $C_g \circ \overline{K_r}$. Independentemente da cintura g deste, temos ([11], Teorema 4.1) que seu índice é

$$\lambda(Sol(r, r, \dots, r)) = 1 + \sqrt{r+1} . \quad (2.10)$$

Este resultado pode ser reobtido aplicando o cálculo do polinômio característico de um grafo corona $G \circ H$, por um grafo H r -regular, descrito pelo Lema 2.3.

Lema 2.3. ([44], Teorema 2.2.5) *Dados um grafo G , com n vértices, e um grafo r -regular H , com k vértices, o polinômio característico do grafo corona $G \circ H$ é*

$$p_{G \circ H}(x) = p_G \left(x - \frac{k}{x-r} \right) [p_H(x)]^n .$$

Godsil and McKay em [54] definem o *produto enraizado* entre grafos e calculam seu polinômio característico. O *produto hierárquico*, dado por Barrière *et al.* em [7, 8], é um caso particular do produto enraizado, conforme veremos. Ambos os produtos se baseiam na noção de coalescência de vértices.

Definição 2.9. *Dados um grafo G e um vértice u deste, iremos nos referir ao par (G, u) por grafo enraizado e diremos que u será a raiz deste. A coalescência de dois grafos enraizados (G, u) e (H, v) consiste em identificar o vértice u com o vértice v , ou seja, em obter o grafo $G \cdot H$, a partir do grafo $(G - u) \cup (H - v)$, pela adição de um novo vértice w e das adjacências entre w e os vértices de $\Gamma_u(G) \cup \Gamma_v(H)$.*

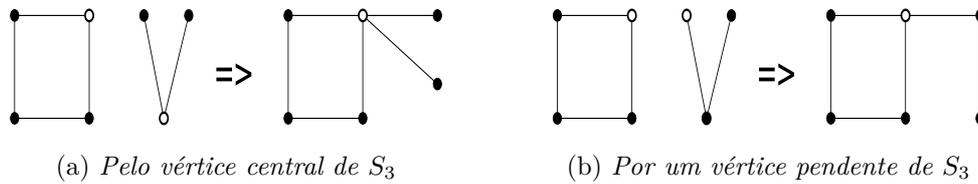


Figura 2.7: Coalescências entre C_4 e S_3

Na Figura 2.7 obtemos duas coalescências entre os grafos C_4 e S_3 , mostrando que esta operação depende das raízes envolvidas. Mesmo assim, ao efetuarmos uma coalescência, é comum omitir as raízes u e v dos grafos enraizados (G, u) e (H, v) , denotando-os apenas por G e H . O polinômio característico desta operação foi determinado por Godsil e McKay ([54], Lema 2.2) e também pode ser encontrado no artigo de Cvetković *et al.* ([44], p. 31):

$$p_{G \cdot H}(x) = p_G(x)p_{H-v}(x) + p_{G-u}(x)p_H(x) - xp_{G-u}(x)p_{H-v}(x). \quad (2.11)$$

A seguir definimos as operações de produto enraizado e de produto hierárquico que são obtidos por sucessivas coalescências.

Definição 2.10. *Dado um grafo G com n vértices, enumerados de 1 até n , e uma sequência de n grafos enraizados (H_i, r_i) , o produto enraizado $G(H_1, \dots, H_n)$ de G pela sequência H_1, \dots, H_n é o grafo obtido pelas sucessivas coalescências de cada (H_i, r_i) com $(G(H_1, \dots, H_{i-1}), i)$. Caso os grafos enraizados sejam iguais a um mesmo grafo enraizado (H, v) , chamamos o produto enraizado $G(H, \dots, H)$ por produto hierárquico $G \square H$.*

O grafo sol generalizado $Sol(k_1, \dots, k_g)$ é o produto enraizado de C_g pela sequência das estrelas $S_{k_1+1}, \dots, S_{k_g+1}$, todas enraizadas por seus vértices centrais. Caso cada $k_i = r$, $S(r, \dots, r) = C_g \square S_{r+1}$, sendo a estrela S_{r+1} enraizada por seu vértice central. Em [11], os autores observam que um grafo conexo unicíclico, de cintura g , é o produto enraizado de C_g por uma sequência de árvores enraizadas T_1, \dots, T_g . O

cálculo do polinômio característico de um grafo enraizado pode ser encontrado em ([54], Teorema 2.1). No Teorema 2.2 de [8], temos que o polinômio característico do produto hierárquico $G \sqcap H$, sendo G um grafo de n vértices e H enraizado em v , é dado por

$$p_{G \sqcap H}(x) = [p_{H-v}(x)]^n p_G \left(\frac{p_H(x)}{p_{H-v}(x)} \right). \quad (2.12)$$

Neste artigo, os autores estudam o produto hierárquico $G \sqcap P_r$. Em ([7], Corolário 3.12), os mesmos calculam o polinômio característico de $G \sqcap K_p$. No Capítulo 4 estudaremos o índice em uma classe especial de grafos $K_p \sqcap G$, ditos *p-broom-like*.

2.3.3 Remoção de vértices ou arestas e subdivisão de arestas

Certamente o modo mais fácil de transformar um grafo G em outro seria retirando-se (ou, adicionando-se) deste uma quantidade finita (não nula) entre arestas ou vértices, obtendo um subgrafo (respectivamente, supergrafo) próprio H deste. Em casos particulares podemos ordenar os autovalores de H e de G , intercalando-os. Nos dois teoremas abaixo damos exemplos disto. O primeiro deles é uma releitura do *Teorema de Entrelaçamento* de Cauchy [72]. O segundo pode ser obtido por aplicações sucessivas do primeiro.

Teorema 2.6. ([70], p. 185) *Se retiramos do grafo G um vértice, obtemos um subgrafo H cujos autovalores estão intercalados com os autovalores do grafo G :*

$$\lambda_{k+1}(G) \leq \lambda_k(H) \leq \lambda_k(G), \text{ para } 1 \leq k \leq n-1.$$

Teorema 2.7. ([56], p. 193) *Se H é um subgrafo induzido de G com r vértices ($1 \leq r \leq n$), então $A(H)$ é submatriz principal de $A(G)$ de ordem r e os autovalores de H se intercalam com os autovalores do grafo G :*

$$\lambda_{n-r+k}(G) \leq \lambda_k(H) \leq \lambda_k(G), \text{ para } 1 \leq k \leq r.$$

Da Proposição 2.1 e de (2.1), podemos concluir:

Afirmção 2.2. *Se H é um subgrafo próprio de G ,*

$$\lambda(H) \leq \lambda(G) \quad (2.13)$$

e a desigualdade é estrita caso G seja conexo.

Há outros resultados de entrelaçamentos entre os autovalores de dois grafos que podem ser encontrados em [44, 56]. No teorema que segue reportaremos o Corolário 1.3.13, o Teorema 1.3.14 e o Corolário 3.9.11 de [44].

Teorema 2.8. *Seja A uma matriz real simétrica de ordem $n \geq 2$. Dada uma partição $\{1, 2, \dots, n\} = V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_r$, com $|V_i| = n_i$, consideremos os blocos A_{ij} (de ordem $n_i \times n_j$) da matriz A e definimos por b_{ij} a média da soma das linhas de A_{ij} . Se $B = (b_{ij})$, então:*

1. $\lambda_{n-r+k}(A) \leq \lambda_k(B) \leq \lambda_k(A)$, para $1 \leq k \leq r$;
2. Se a soma das linhas de cada bloco A_{ij} for constante, então $p_B(x)$ divide $p_A(x)$;
3. Se A for matriz de adjacência de um grafo G e satisfaz as condições do item anterior, então $\lambda(A) = \lambda(B)$.

O Teorema 2.8 tem aplicabilidade no cálculo de autovalores de grafos. Exemplo disto é dado pela Proposição 2.2: a matriz de adjacência do *join* $G_1 \vee G_2$ entre grafos G_1 e G_2 de, respectivamente, n_1 e n_2 vértices, pode ser escrita em blocos na forma

$$\begin{bmatrix} A(G_1) & \mathbb{J}_{n_1 n_2} \\ \mathbb{J}_{n_2 n_1} & A(G_2) \end{bmatrix},$$

onde $\mathbb{J}_{r,s}$ denota uma matriz de entradas todas iguais a 1 de ordem $r \times s$. Se supusermos G_1 e G_2 regulares de graus r_1 e r_2 , respectivamente, então a soma das linhas de cada bloco é constante e, portanto, igual à média b_{ij} , ao qual o Teorema 2.8 se refere. Deste, segue que o polinômio característico da matriz $B = \begin{bmatrix} r_1 & n_2 \\ n_1 & r_2 \end{bmatrix}$, a saber $p_B(x) = (x - r_1)(x - r_2) - n_1 n_2$, divide $p_{G_1 \vee G_2}(x)$. Ainda, que o índice de $G_1 \vee G_2$ será a maior raiz positiva de $p_B(x)$.

Para a concluir a proposição, basta observar que, dado um vetor $v \in \mathbb{R}^{n_1}$ ortogonal ao vetor $\mathbf{1}$, de coordenadas iguais a 1, vale:

$$A(G_1)v = \alpha v \Rightarrow A(G_1 \vee G_2) \begin{pmatrix} v \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} v \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Logo, os autovalores de G_1 , distintos de r_1 , serão também autovalores de $G_1 \vee G_2$. O análogo ocorre com G_2 , concluindo a proposição.

A seguir listaremos algumas fórmulas de redução, para o cálculo de polinômio característico, aplicadas ao se retirar uma aresta uv ou retirando um vértice u de um grafo G . Estando reunidas no artigo de An Chang *et al.* [3], algumas destas também podem ser encontradas em [1, 59, 60, 80, 117]. Começemos por aquela que consideramos mais simples. Podendo ser usada para calcular o polinômio característico de um caminho, é obtida quando retiramos do grafo um vértice pendente:

Lema 2.4. ([3], Lema 2.6) *Seja u um vértice de G de grau 1 e seja v um vértice adjacente a u , então $p_G(x) = x p_{G-u}(x) - p_{G-u-v}(x)$.*

Esta fórmula, também encontrada em ([18], p. 11) e ([44], p. 30), pode ser vista como um caso particular da fórmula de Lovász e Pelikán ([39], p. 15), em que a aresta uv é uma *ponte*, i.e., cuja remoção desconecta o grafo:

$$p_G(x) = p_{G-uv}(x) - p_{G-u-v}(x) . \quad (2.14)$$

E ambas são casos particulares da fórmula obtida ao retirar-se uma aresta qualquer do grafo:

Lema 2.5. ([3], Lema 2.4) *Seja uv uma aresta de G e seja $\mathcal{C}(uv)$ o conjunto dos ciclos de G que contém a aresta uv . Então:*

$$p_G(x) = p_{G-uv}(x) - p_{G-u-v}(x) - 2 \sum_{Z \in \mathcal{C}(uv)} p_{G-V(Z)}(x) .$$

Por último, temos a seguinte fórmula ao retirarmos um vértice qualquer do grafo:

Lema 2.6. ([3], Lema 2.5) *Seja u um vértice de G e seja $\mathcal{C}(u)$ o conjunto dos ciclos de G que passam pelo vértice u . Então:*

$$p_G(x) = p_{G-u}(x) - \sum_{v \sim u} p_{G-u-v}(x) - 2 \sum_{Z \in \mathcal{C}(u)} p_{G-V(Z)}(x) .$$

Observamos que, caso o vértice a ser retirado u seja um *ponto de articulação*, i.e., cuja remoção desconecta o grafo, então, sendo $G - u = H_1 \cup H_2$, para certos grafos H_1 e H_2 disjuntos, $p_{G-u}(x) = p_{H_1}(x)p_{H_2}(x)$.

Uma outra técnica em se gerar um novo grafo seria subdividindo uma aresta deste.

Definição 2.11. *Dado um grafo G e uma aresta uv deste, denotamos por $G_{u,v}$ o grafo obtido pela subdivisão da aresta uv : $G_{u,v}$ é o grafo $G - uv$ acrescentado de um novo vértice w e das arestas uw e wv . O grafo obtido pela subdivisão de cada aresta do grafo G será denotado por $S(G)$ e é chamado de subdivisão do grafo G .*

Observamos que a subdivisão de um grafo produz um grafo bipartido. De fato, cada ciclo C_p do grafo G corresponderá, biunivocamente, a um ciclo C_{2p} no grafo $S(G)$. Portanto, todo ciclo de $S(G)$ é par. Do Teorema 2.2, segue a conclusão.

Caso o grafo seja regular, o polinômio do grafo subdividido é dado em função do polinômio deste, conforme enunciado pelo Lema 2.7. Na Figura 2.8 efetuamos a subdivisão de alguns grafos conexos.

Lema 2.7. ([44], p. 40) *Se G é um grafo r -regular com n vértices e m arestas, então $p_{S(G)}(x) = x^{m-n}p_G(x^2 - r)$.*

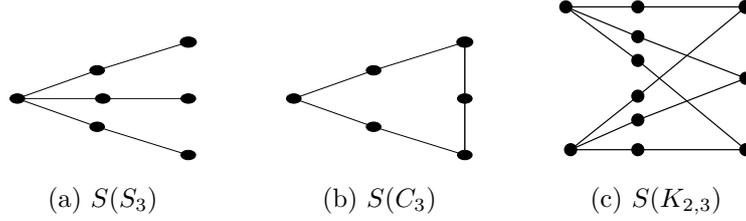


Figura 2.8: *Subdivisões de grafos*

Dado um grafo r -regular G , segue do Lema 2.7 que os autovalores positivos de $S(G)$ são da forma $\sqrt{r + \lambda_i}$, onde λ_i é um autovalor positivo de G . Portanto, o índice da subdivisão $S(G)$ de um grafo r -regular G é igual a

$$\lambda(S(G)) = \sqrt{2r} . \quad (2.15)$$

Caso o grafo G seja conexo, um resultado conhecido de Hoffman e Smith ([65] apud [3]) dá condições suficientes para que o índice do grafo $G_{u,v}$, obtido pela subdivisão da aresta uv de G , seja menor, ou maior, que o índice de G . Antes de reportarmos este resultado, precisamos da noção de *caminho interno* de um grafo. Na Figura 2.9 damos alguns exemplos de caminhos internos.

Definição 2.12. *Seja $v_1v_2 \dots v_s$ uma cadeia do grafo G , de modo a formar um caminho P_s , com pelo menos 2 vértices, ou um ciclo C_{s-1} , com pelo menos 3 vértices. Dizemos que esta é um caminho interno de G se os graus $d(v_1) \geq 3$, $d(v_s) \geq 3$ e, para $2 \leq i \leq s-1$, $d(v_i) = 2$.*

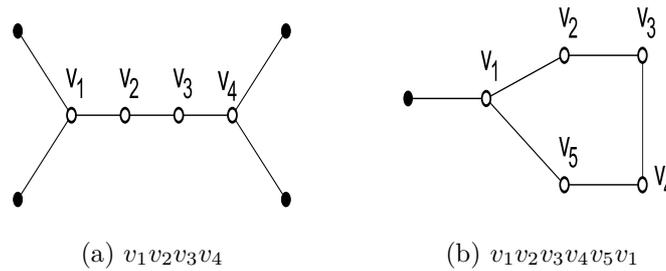


Figura 2.9: *Exemplos de caminhos internos*

O grafo da Figura 2.9a é a dupla vassoura $D(2; 4; 2)$. As duplas vassouras $D(2; t; 2)$, com $t \geq 2$, satisfazem a propriedade particular: ao subdividirmos uma aresta de seu caminho interno, o índice não se altera. De fato, tal subdivisão produz a dupla vassoura $D(2; t + 1; 2)$ cujo índice é conhecido na literatura [26] (veja também a Seção 4.1):

$$\lambda(D(2; t; 2)) = 2 , \text{ para todo } t \geq 1 . \quad (2.16)$$

Um outro exemplo de um grafo cujo índice não se altera por uma subdivisão de aresta é o ciclo C_n : uma subdivisão de uma aresta deste continua sendo um ciclo, a saber C_{n+1} , e, da Tabela 2.1, todo ciclo possui índice 2. Observe que C_n não possui caminho interno. Com exceção destes dois exemplos, ao subdividirmos uma aresta de um grafo conexo, seu índice irá se alterar conforme enunciado no Lema 2.8.

Lema 2.8. ([65] apud [3]) *Seja uv uma aresta de um grafo conexo G com n vértices.*

(i) *Se uv for uma aresta de um caminho interno de G e $G \neq D(2; n-4; 2)$, então $\lambda(G_{u,v}) < \lambda(G)$.*

(ii) *Se uv não for uma aresta de um caminho interno de G e $G \neq C_n$, então $\lambda(G_{u,v}) > \lambda(G)$.*

2.4 Grafos extremais

Na Teoria de Grafos há vários problemas que consistem em obter, dentre uma determinada classe, grafos que maximizam ou minimizam uma certa propriedade e tais grafos são ditos *extremais*. Citamos o livro de Bollobás [22] como leitura sobre alguns destes problemas e retiramos deste um exemplo bastante simples: as árvores são os grafos que possuem maior número de arestas, dentre os grafos sem ciclos e com n vértices. No capítulo que segue veremos que, dentre os grafos conexos com n vértices, os caminhos são os que possuem menor índice. Em geral, a propriedade que se quer maximizar ou minimizar é apresentada por meio de uma desigualdade. Assim, os grafos extremais seriam os que tornam esta desigualdade uma igualdade. Em se tratando de índice, as desigualdades representam cotas (ou limites) para este. Neste caso, diremos que um grafo extremal é *maximal* quando atinge sua cota superior, *minimal* quando atinge sua cota inferior.

De acordo com Cvetković e Rowlinson ([39], p.17), a busca por grafos maximais (i.e., que maximizam o índice) remonta a um trabalho de Brualdi e Hoffman de 1985, no qual se propõe o problema de obter o maior raio espectral de uma matriz quadrada, de ordem n , com entradas $(0, 1)$, conhecendo-se seu número m de entradas iguais a 1. Neste trabalho, Brualdi e Hoffman (apud [39], p.19) provam que, dentre os grafos com $m = \binom{r}{2}$ arestas, onde $r \geq 2$, o grafo de maior índice é dado pela união disjunta de K_r com $n - r$ vértices isolados. Posteriormente, Rowlinson (apud [39]) estende este resultado para $m = \binom{r}{2} + s$ arestas, onde $1 \leq s \leq r - 1$, provando que o grafo que maximiza o índice é obtido da seguinte forma: adiciona-se ao grafo K_r um novo vértice v_s , o qual será adjacente a s vértices de K_r , e adicionam-se $n - r - 1$ vértices isolados.

Dando continuidade à busca de grafos maximais, na classe de grafos conexos com n vértices e m arestas, Brualdi e Solheid [28] provam dois importantes aspectos para

que um grafo seja maximal. O primeiro diz respeito à estrutura do grafo: uma árvore geradora deste é uma estrela. O segundo se refere à matriz de adjacência $A = (a_{ij})$, a qual, após eventual renumeração dos vértices do grafo, admite a seguinte forma escalonada, dada pelo que os autores chamam de *matriz escada*:

$$1 \leq r < s \leq n, a_{rs} = 1 \Rightarrow a_{kl} = 1, \forall k < l; 1 \leq k \leq r, 1 \leq l \leq s. \quad (2.17)$$

Nesta investigação, importantes contribuições foram dadas por diversos autores; citamos: Olesky [113], Cvetković e Rowlinson [38], Bell [14], Aouchiche *et al.* [4]. Como observado por Belardo *et al.* ([101], p. 2362), a propriedade (2.17) equivale a dizermos que o grafo (conexo) é *threshold*. Este fato segue da definição de grafos *threshold* ([81], p. 135), os quais também são caracterizados por não possuírem subgrafos induzidos isomorfos a $2K_2$, C_4 ou P_4 ([81], p. 138). Observamos que a matriz de adjacência de um grafo maximal não necessariamente conexo continua satisfazendo esta propriedade ([28], p.45).

O problema de grafos extremais continua em famílias de grafos, nas quais outros invariantes do grafo, além dos números de vértices ou de arestas, são fixados, como, por exemplo: os graus máximo ou mínimo; o grau médio do grafo; a sequência de graus; os graus médios dos vértices. No Capítulo 3, apresentamos limites, especialmente superiores, para o índice, conhecidos na literatura, envolvendo estes parâmetros.

Capítulo 3

Limites clássicos para o índice de um grafo

Um breve *survey* sobre aplicações da Teoria Espectral de Grafos é dado pela revista [36], na qual os editores Cvektović e Gutman relatam que, além das aplicações clássicas em Química e Física, tem ocorrido um rápido crescimento de aplicações em diversas e novas áreas: Biologia, Geografia, Economia, Ciências Sociais e Ciência da Computação. O estudo de índice de grafos aparece, particularmente, em várias frentes de investigação da Ciência da Computação ([36], pp.14, 16, 34, 38), assim como em Otimização Combinatória, para medir a complexidade do Problema do Caixeiro Viajante ([36], p. 17). Sendo difícil determinar precisamente o índice de um grafo em classes mais abrangentes, em função de parâmetros invariantes deste, encontramos na literatura várias desigualdades que limitam os possíveis valores deste invariante espectral. A maioria destes resultados são sobre limites superiores, como podemos observar em [10, 18, 21, 44, 56]. Afirmamos, portanto, que uma busca de limites mais aprimorados para o índice de um grafo em determinadas classes continua sendo necessária.

A fim de darmos um panorama desta busca, reportamos, na primeira seção, limites consagrados pela literatura. A maior parte destes pode ser encontrada no artigo de Cvetković e Rowlinson [39].

Na seção subsequente expomos as principais cotas superiores para o índice, dadas em função dos graus e graus médios dos vértices do grafo, publicadas a partir de 1990. Comparando entre si estas cotas, obtemos quais são melhores para grafos conexos e quais são melhores para desconexos. No grafo da Figura 3.3 representamos estas comparações. Na Tabela 3.1 listamos os limites superiores, fornecendo, caso tenham sido caracterizados, seus grafos maximais conexos. Na Proposição 3.1 comparamos os limites inferiores dados por Collatz, Nosal e Hofmeister, determinando relações estritas entre estes, quando aplicados a um caminho de pelo menos 4 vértices.

Na última seção comparamos os melhores limites superiores em grafos conexos,

obtendo resultados nas classes das árvores, unicíclicos e birregulares. Estes resultados nos mostram que estes limites se comportam de modo diferente em subfamílias, alternando entre si a posição de melhor limite. Disto resulta que, ao restringirmos a família de grafos conexos, uma busca de limites mais justos, para o índice destes, se faz necessária.

3.1 Resultados até 1990

De acordo com Cvetković e Rowlinson ([39], p.4) e com Godsil, Holton e McKay [57], o artigo de Collatz e Sinogowitz [114] é considerado um dos primeiros voltados para Teoria Espectral de Grafos. Neste último, os autores provam os resultados enunciados nos teoremas que seguem.

Teorema 3.1. ([114] apud [68]) *Se G é um grafo conexo com n vértices, então seu índice λ satisfaz*

$$2 \cos \frac{\pi}{n+1} \leq \lambda \leq n-1, \quad (3.1)$$

onde o limite inferior ocorre somente quando $G = P_n$ e o limite superior ocorre somente quando $G = K_n$.

Este teorema nos fornece as primeiras cotas superior e inferior do índice de um grafo conexo. Caso o grafo seja uma árvore, a cota superior será melhorada pelo índice da estrela.

Teorema 3.2. ([114] apud [68]) *Se G é uma árvore com n vértices, então seu índice λ satisfaz*

$$\lambda \leq \sqrt{n-1}, \quad (3.2)$$

ocorrendo igualdade somente se $G = S_n$.

Observamos que os limites dados pelos Teoremas 3.1 e 3.2 podem ser encontrados também em [1, 2, 31, 45, 68, 105, 126].

Se o grafo for desconexo, sabemos, pela Afirmação 2.1, que seu índice é o maior dentre aqueles de suas componentes conexas, resultando que seu índice será nulo, caso o grafo não tenha arestas, e será positivo, caso contrário. Independentemente disto, os graus máximo Δ , mínimo δ e médio $\frac{2m}{n}$ do grafo satisfazem as seguintes desigualdades encontradas em [39, 84, 92, 105] e reescritas no Teorema 3.3.

Teorema 3.3. ([44], Teorema 3.2.1) *Seja λ o índice de um grafo G , com n vértices e m arestas. Sejam δ e Δ seus respectivos graus mínimo e máximo. Então,*

$$\delta \leq \frac{2m}{n} \leq \lambda \leq \Delta. \quad (3.3)$$

Ainda, $\lambda = \delta$ se, e somente se, G é regular; e $\lambda = \frac{2m}{n}$ se, e somente se, G é regular. Caso o grafo G seja conexo, $\lambda = \Delta$ se, e somente se, G é regular.

Observamos que, se o grafo não for conexo, como por exemplo $G = K_4 \cup K_3$, não é verdade que a igualdade $\lambda = \Delta$ implique na regularidade do grafo. De fato, neste exemplo, $\lambda(K_4 \cup K_3) = 4$ e $K_4 \cup K_3$ não é regular.

Outras importantes desigualdades, também dadas em função dos graus dos vértices do grafo, são a de Nosal

$$\sqrt{\Delta} \leq \lambda, \quad (3.4)$$

que pode ser encontrada em [39, 45, 92, 105], e a desigualdade de Hofmeister

$$\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{u \in V} d_u^2} \leq \lambda, \quad (3.5)$$

encontrada em [39, 83, 84].

Ao compararmos, nos grafos regulares, os limites inferiores dados pelo grau médio $L_1 = \frac{2m}{n}$, por $L_2 = \sqrt{\Delta}$ e por $L_3 = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{u \in V} d_u^2}$, observamos que L_1 e L_3 coincidem com o índice Δ destes, sendo, portanto, L_2 o pior dos três limites. Isto não ocorre na classe das estrelas, com pelo menos três vértices, pois lá temos $L_1 < L_2 = L_3 = \lambda$. Já na classe dos caminhos, com pelo menos 4 vértices, L_2 e L_1 dão os piores limites, conforme provaremos na Proposição 3.1.

Proposição 3.1. *Se P_n é um caminho com $n \geq 4$ vértices, então*

$$\sqrt{\Delta} < \frac{2m}{n} < \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{u \in V} d_u^2} < \lambda.$$

Prova:

Temos que $h(n) = 2 \cos \frac{\pi}{n+1}$ é o índice de P_n e que este é limitado inferiormente por $f(n) = \frac{2m}{n} = 2 - \frac{2}{n}$ e por $g(n) = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{u \in V} d_u^2} = \sqrt{4 - \frac{6}{n}}$, os quais são funções contínuas no intervalo dos números reais $n \geq 2$. Como $\sqrt{\Delta} = \sqrt{2} < f(4) = 1,5$ e $f(n)$ é crescente para $n \geq 4$, $\sqrt{\Delta} < f(n)$ para $n \geq 4$. Como $f(n)$ e $g(n)$ coincidem apenas em $n = 2$ e $f(4) < g(4) \approx 1,58$, temos que $f(n) < g(n)$ para $n \geq 4$.

A fim de obtermos que $g(n) < h(n)$, para os inteiros $n \geq 4$, basta verificar que a função contínua $\psi(n) = h(n)^2 - g(n)^2 = \frac{6}{n} - 4 \operatorname{sen}^2(\frac{\pi}{n+1})$ seja positiva para os inteiros deste intervalo. De fato, $\psi(4) \approx 0,12$, $\psi(5) = 0,2$ e $\psi(n)$ não se anula para $n \geq 5$:

Se $\psi(n) = 0$, então $\operatorname{sen}(\frac{\pi}{n+1}) = \sqrt{\frac{3}{2n}}$ e, como $\operatorname{sen}(\frac{\pi}{n+1}) < \frac{\pi}{n+1}$, teremos $\sqrt{\frac{3}{2n}} < \frac{\pi}{n+1}$; donde, $p(n) = 3n^2 + (6 - 2\pi^2)n + 3 < 0$. Como $p(4) \approx -3,96$ e $p(5) \approx 9,3$, concluímos que $p(n) > 0$ se $n \geq 5$. Portanto, $\psi(n) \neq 0$ para $n \geq 5$. ■

Os limites que seguem envolvem apenas o número n de vértices e o número m de arestas do grafo. O primeiro deles, segundo [39, 83], deve-se a Wilf e é dado pela desigualdade

$$\lambda \leq \sqrt{2m\left(\frac{n-1}{n}\right)}. \quad (3.6)$$

O segundo, devido a Stanley, pode ser encontrado em [39, 45, 83] e é dado por

$$\lambda \leq \frac{1}{2} \left(-1 + \sqrt{1 + 8m}\right), \quad (3.7)$$

ocorrendo igualdade somente quando $m = \frac{d(d-1)}{2}$, para algum $1 \leq d \leq n$, e G for uma união de um grafo completo K_d e $n - d$ vértices isolados.

O próximo, atribuído a Hong, encontra-se citado em [29, 39, 45, 68, 83] e vale para grafos sem vértices isolados:

$$\lambda \leq \sqrt{2m - n + 1}, \quad (3.8)$$

tendo igualdade se, e somente se, G é a união de K_p ou S_p com um número finito de cópias de K_2 .

Como num grafo $2m \leq n(n-1)$, temos que (3.7) é melhor que (3.6) e, para grafos sem vértices isolados, (3.8) é melhor que (3.6). Ainda, conforme observado em ([45], p. 150), (3.8) é melhor que (3.7). Por fim, ressaltamos que os limites superiores, dados por (3.7) e (3.8), podem não ser melhores que Δ , o que ocorre, por exemplo, nos grafos regulares, não necessariamente conexos, em que $2 \leq \Delta \leq n - 2$.

3.2 Cotas superiores em função dos graus dos vértices, posteriores a 1990

Nesta seção abordamos os limites superiores para o índice de um grafo, em geral, que foram publicados a partir de 1990, e dividimos estes resultados em duas subseções, separando os limites superiores dos limites inferiores.

Iniciamos listando limites que envolvem os graus e graus médios dos vértices de um grafo. O primeiro se deve a Cao ([29], Corolário 2). Melhorando o limite (3.8) por meio da estimativa dada no Teorema 3.4, Cao observa que essa também é melhor que Δ .

Teorema 3.4. [29] *Seja G um grafo conexo com n vértices e seja*

$$d_2(G) = \max\left\{\sum_{v \in \Gamma_u} d_v; u \in V(G)\right\}.$$

Então, seu índice λ satisfaz

$$\lambda \leq \sqrt{d_2(G)} , \quad (3.9)$$

ocorrendo igualdade se, e somente se, G é regular ou bipartido semirregular.

Se considerarmos $d_u m_u = 0$ caso o vértice u seja isolado, podemos reescrever a desigualdade acima por

$$\lambda \leq \max_{u \in V(G)} \sqrt{d_u m_u} , \quad (3.10)$$

a qual aparece em ([45], p. 151) atribuída a Favaron, Mathéo e Sácle.

Outra cota superior para o índice de grafos conexos, também atingida somente quando o grafo for regular ou bipartido semirregular, é dada por Berman e Zhang, em [17]:

$$\lambda \leq \max_{u \sim v} \sqrt{d_u d_v} . \quad (3.11)$$

Observação 3.1. Entendendo-se $\max_{u \sim v} \sqrt{d_u d_v} = 0$ caso o grafo não tenha aresta, a desigualdade (3.11) continua válida para grafos não conexos, devido à natureza local desta. De fato, neste caso, o grafo G será dado pela união $H_1 \cup \dots \cup H_r$ de $r \geq 2$ grafos conexos e $\lambda(G) = \max_{1 \leq i \leq r} \lambda(H_i)$. De (3.11),

$$\lambda(H_i) \leq a_i = \max\{\sqrt{d_u d_v}; u \sim v, u \text{ e } v \in V(H_i)\} ,$$

para cada $1 \leq i \leq r$. Logo, $\lambda(G) \leq \max_{1 \leq i \leq r} a_i$ e, portanto,

$$\lambda(G) \leq \max\{\sqrt{d_u d_v}; u \sim v, u \text{ e } v \in V(G)\} .$$

De modo similar, o mesmo ocorre com (3.10).

O resultado (3.11) aparece posteriormente em [45], aonde é citado outro limite atribuído a Favaron, Mathéo e Sácle, válido para grafos G sem vértices isolados:

$$\lambda \leq \max_{u \in V(G)} m_u . \quad (3.12)$$

Ainda em [45], admitindo G conexo, os autores Das e Kumar provam o seguinte limite para o índice:

$$\lambda \leq \max_{u \sim v} \sqrt{m_u m_v} , \quad (3.13)$$

no qual a igualdade ocorre se, e somente se, os vértices de G possuem o mesmo grau médio, ou G é bipartido e os vértices de cada classe da partição possuem o mesmo grau médio.

Novamente, observamos que as desigualdades (3.12) e (3.13) se estendem para grafos em geral, se subentendermos $\max_{u \in V(G)} m_u = 0$ e $\max_{u \sim v} \sqrt{m_u m_v} = 0$, caso o grafo seja vazio.

Na Figura 3.1, damos alguns exemplos de grafos que satisfazem a igualdade em (3.13). Podemos observar que os grafos que satisfazem a igualdade em (3.10) e (3.11), que são regulares ou bipartidos semirregulares, irão satisfazer a igualdade em (3.13). Mas nem todo grafo que satisfaz esta última igualdade será regular ou bipartido semirregular: P_5 é bipartido, porém não é semirregular (nem regular), e seus graus médios, correspondentes a cada partição de vértices, são 2 e $\frac{3}{2}$.

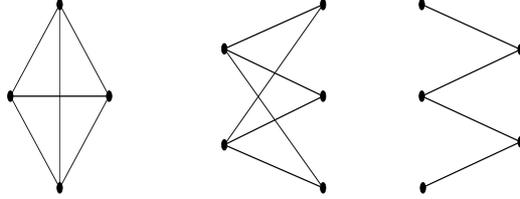


Figura 3.1: Grafos que satisfazem a igualdade em (3.13)

Das e Kumar observam ([45], p. 153) que, para grafos sem vértices isolados, o limite superior (3.13) é melhor que (3.12) e o limite (3.10) é melhor que (3.8). No caso de grafos quaisquer, observam que (3.10) é melhor que (3.11).

A seguir listamos dois limites envolvendo os graus máximo e mínimo de um grafo, assim como seus números de vértices e de arestas, ambos citados em [45] e que valem para grafos em geral. O primeiro é dado por Das e Kumar ([45], Teorema 2.7), que os autores aplicam apenas a grafos conexos:

$$\lambda \leq \sqrt{2m - (n - 1)\delta + (\delta - 1)\Delta}, \quad (3.14)$$

concluindo que a igualdade é atingida somente em grafos regulares e em S_n . Este limite foi provado anteriormente por Cao ([29], Teorema 2), para grafos quaisquer (sem vértices isolados), obtendo igualdade somente quando o grafo for regular, ou união de uma estrela e cópias de K_2 , ou união de um grafo completo por um grafo regular (de grau menor). Ainda, Cao observa que este resultado pode ser obtido como consequência do Teorema 3.4, mas por questões de clareza prefere dar uma outra prova. Observamos que a prova dada por Das e Kumar é muito similar à prova dada por Cao.

Observação 3.2. Não é difícil ver que (3.14) continua valendo para grafos com vértices isolados. De fato, caso $\delta = 0$, teríamos $\lambda \leq \sqrt{2m - \Delta}$, o que é trivial se G for \overline{K}_n . Se não, $G = H \cup \overline{K}_p$, para algum grafo H com $n - p$ vértices e $\delta(H) \geq 1$. Então, $\lambda = \lambda(H) \leq \sqrt{2m - \delta(H)[n - p - 1] + [\delta(H) - 1]\Delta}$. Como $\Delta \leq n - p - 1$, temos $2m - \Delta + \delta(H)[\Delta - (n - p - 1)] \leq 2m - \Delta$, donde concluímos $\lambda \leq \sqrt{2m - \Delta}$.

Deste modo, a igualdade em (3.14) será atingida somente se G for um grafo regular (podendo ser vazio), ou a união de um grafo vazio com H , onde H é um

grafo regular, ou a união de uma estrela e cópias de K_2 , ou a união de um grafo completo por um grafo regular (de grau menor).

O segundo limite é atribuído tanto a Fang, Hong e Shu [69] quanto a Nikiforov [83]:

$$\lambda \leq \frac{1}{2} \left(\delta - 1 + \sqrt{(\delta + 1)^2 + 4(2m - \delta n)} \right). \quad (3.15)$$

De acordo com Hong *et al.* [69], os únicos grafos conexos que atingem a igualdade em (3.15) são os grafos regulares e os grafos birregulares de graus δ e $n - 1$. No caso do grafo ser conexo, um grafo birregular, de graus δ e $n - 1$, é dado pelo *join* de um grafo completo, com p vértices, por um grafo regular não completo, com $n - p$ vértices. Por exemplo, $K_2 \vee (2K_2)$, $K_3 \vee C_5$, $S_n = K_1 \vee \overline{K_{n-1}}$.

Shu e Wu [100] fornecem um resultado similar a (3.15) pelo Teorema 3.5, no qual obtêm uma cota superior para o índice de um grafo conexo em função da sequência de graus dos vértices.

Teorema 3.5. ([100], Teorema 2.2) *Seja G um grafo conexo com n vértices e sequência de graus $\Delta = d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_n = \delta$ então*

$$\lambda \leq \frac{1}{2} (d_i - 1 + \sqrt{(d_i + 1)^2 + 4(i - 1)(\Delta - d_i)}) , \quad (3.16)$$

onde $1 \leq i \leq n$. Além disso, a igualdade ocorre se, e somente:

1. Caso $i = 1$, G é regular;
2. Caso $2 \leq i \leq n$, G é regular ou um grafo birregular de graus

$$n - 1 = \Delta = \dots = d_i \text{ e } d_{i+1} = \dots = d_n = \delta .$$

Como consequência do Teorema 3.5, eles obtêm ([100], Teorema 2.3), para grafos conexos que têm exatamente p vértices de grau máximo Δ e q vértices de segundo grau máximo Δ' (considerando $\Delta = \Delta'$ caso o grafo seja regular):

$$\lambda \leq \frac{1}{2} (\Delta' - 1 + \sqrt{(\Delta' + 1)^2 + 4p(\Delta - \Delta')}) , \quad (3.17)$$

onde a igualdade vale somente se G for regular ou $G = K_p \vee H$, para algum grafo H $(\Delta' - p)$ -regular e com $n - p$ vértices. Se $p + q \geq \Delta + 1$, eles provam ([100], Teorema 2.5) que (3.17) é melhor que (3.15). Como exemplos, eles calculam ([100], Corolário 2.7) os índices

$$\lambda(K_1 \vee C_{n-1}) = 1 + \sqrt{n} \text{ e } \lambda(K_2 \vee C_{n-2}) = \frac{3 + \sqrt{8n - 15}}{2} , \quad (3.18)$$

observando que o grafo $K_1 \vee C_{n-1}$, denotado por W_n , é denominado de *roda* de n vértices. Na Figura 3.2 damos um exemplo de uma roda e de uma *roda quebrada*, a qual, analogamente aos grafos sol quebrados, é obtida ao retirarmos algumas arestas de uma roda que não estejam no ciclo maior C_{n-1} . O índice destes grafos é estudado em [15].

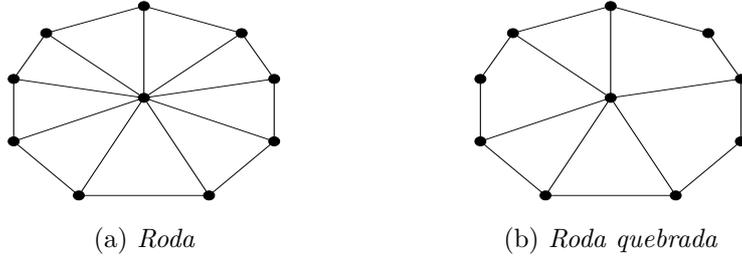


Figura 3.2: Grafos roda e roda quebrada

Observação 3.3. *As desigualdades obtidas pelo Teorema 3.5, para cada i tal que $d_i = \delta$, não fornecem um limite melhor que (3.15). Supondo o grafo ser conexo e ter exatamente p vértices de grau Δ , q vértices de grau δ e $r = n - p - q \geq 0$ vértices j de grau $\delta < d_j < \Delta$, temos:*

$$2m - n\delta = p(\Delta - \delta) + (S - r\delta) \quad e \quad (p+r)(\Delta - \delta) \leq (i-1)(\Delta - \delta),$$

onde $S = \sum_{p+1 \leq j \leq p+r} d_j$, caso $r \geq 1$, ou $S = 0$, caso $r = 0$. Se $r = 0$, então o grafo é regular ou birregular e, portanto, ambos os limites coincidem com λ . Se $r \geq 1$, temos que $S - r\delta = \sum_{p+1 \leq j \leq p+r} (d_j - \delta) < \sum_{1 \leq j \leq r} (\Delta - \delta) = r(\Delta - \delta)$. Logo,

$$\frac{1}{2} \left(\delta - 1 + \sqrt{(\delta + 1)^2 + 4(2m - n\delta)} \right) < \frac{1}{2} \left(\delta - 1 + \sqrt{(\delta + 1)^2 + 4(i-1)(\Delta - \delta)} \right).$$

Observamos, também, que o Teorema 3.5 não vale para grafos desconexos. Considere o grafo $G = K_4 \cup K_3$. Então, $\lambda = d_1 = d_2 = d_3 = d_4 = 3$ e $d_5 = d_6 = d_7 = 2$. Deste modo, para $1 \leq i \leq 4$, $\frac{1}{2} \left(d_i - 1 + \sqrt{(d_i + 1)^2 + 4(i-1)(\Delta - d_i)} \right) = \frac{1}{2} \left(3 - 1 + \sqrt{(3 + 1)^2} \right) = 2 < \lambda$.

Tanto em [69] como em [83], os autores provam que (3.15) é melhor que a desigualdade de Stanley (3.7). Já no artigo [45] (p.154), observa-se que a desigualdade (3.14) nem sempre é melhor que as desigualdades (3.15), (3.10) e (3.13). Com isto, podemos listar como principais limites superiores:

- Para grafos conexos, (3.10), (3.13), (3.14), (3.15) e (3.17), os quais coincidem com o índice do grafo, caso esse seja regular ou uma estrela;
- Para grafos desconexos, (3.10), (3.13), (3.14) e (3.15).

| Num. (ref.) | Limite | Restrição | Grafo maximal conexo |
|-------------|--|-----------------|--|
| 3 (3.3) | Δ | nenhuma | regular |
| 6 (3.6) | $\sqrt{2m\binom{n-1}{n}}$ | nenhuma | desconhecido |
| 7 (3.7) | $\frac{1}{2}(-1 + \sqrt{1 + 8m})$ | nenhuma | K_n |
| 8 (3.8) | $\sqrt{2m - n + 1}$ | $\delta \geq 1$ | K_n e $H = S_n$ |
| 10 (3.10) | $\max_{u \in V(G)} \sqrt{d_u m_u}$ | nenhuma | regular e bipartido se- mirregular |
| 11 (3.11) | $\max_{u \sim v} \sqrt{d_u d_v}$ | nenhuma | regular e bipartido se- mirregular |
| 12 (3.12) | $\max_{u \in V(G)} m_u$ | nenhuma | desconhecido |
| 13 (3.13) | $\max_{u \sim v} \sqrt{m_u m_v}$ | nenhuma | grau médio igual para todos os vértices, ou para os vértices de uma mesma classe da partição |
| 14 (3.14) | $\sqrt{2m - (n - 1)\delta + (\delta - 1)\Delta}$ | nenhuma | regular e S_n |
| 15 (3.15) | $\frac{1}{2}(\delta - 1 + \sqrt{(\delta + 1)^2 + 4(2m - \delta n)})$ | nenhuma | regular e $K_p \vee H$, onde H é regular |
| 17 (3.17) | $\frac{1}{2}(\Delta' - 1 + \sqrt{(\Delta' + 1)^2 + 4p(\Delta - \Delta')})$ | conexo | regular e $K_p \vee H$, onde H é $(\Delta' - p)$ -regular |

Tabela 3.1: *Limites superiores do índice*

Na Tabela 3.1 resumimos os limites superiores apresentados para o índice de grafos, informando, caso ocorram, restrições em suas aplicações e, caso descobertos, quais os grafos maximais conexos para cada limite. Na primeira coluna, enumeramos os limites similarmente como foram referenciados: o limite 3 é definido pela desigualdade dada em (3.3). Esta numeração nos possibilita estabelecer, por meio de um grafo direcionado (veja Figura 3.3), a seguinte relação entre dois limites i e j : o arco $\{i, j\}$ representa que o limite i é menor ou igual ao limite j , sendo, portanto, o limite i melhor que o limite j .

Na Figura 3.3, o arco $\{17, 15\}$ está tracejado para lembrar que este existe se o limite 17 estiver sendo aplicado num grafo cujos números p de vértices de grau Δ e q , de grau Δ' , satisfaçam $p + q \geq \Delta + 1$. Colorimos o vértice 8 de amarelo alertando

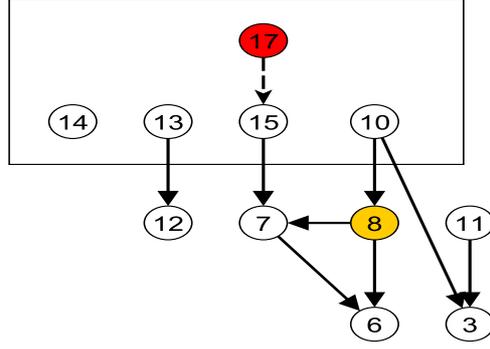


Figura 3.3: Grafo dos limites superiores para o índice

que este existe apenas se o grafo, no qual o limite está sendo aplicado, não possuir vértices isolados. Analogamente, o vértice 17 é vermelho, lembrando que este limite só pode ser aplicado em grafos conexos. Por fim, enquadrámos os melhores limites: 10, 13, 14, 15 e 17. Na próxima seção, iremos comparar os limites 10, 13, 14 e 15 em certas classes de grafos conexos, mostrando que a dificuldade de decidir de modo mais geral qual destes é melhor numa classe mais abrangente.

3.3 Comparando as melhores cotas superiores para índice em grafos conexos

Nesta seção comparamos os limites superiores do índice dados por (3.10), (3.13), (3.14) e (3.15) obtendo resultados em algumas classes restritas de grafos conexos, que nos mostram a dificuldade de uma comparação destes em classes mais abrangentes. Para facilitar, os denotaremos, respectivamente, por

$$A = \max_{u \in V(G)} \sqrt{d_u m_u}, \quad B = \max_{u \sim v} \sqrt{m_u m_v}, \quad C = \sqrt{2m - (n-1)\delta + (\delta-1)\Delta}$$

$$\text{e } D = \frac{1}{2} \left(\delta - 1 + \sqrt{(\delta+1)^2 + 4(2m - \delta n)} \right).$$

Alguns dos resultados que apresentaremos serão obtidos como consequências da Proposição 3.2, na qual fornecemos condições equivalentes para o limite C ser maior, igual ou menor que o limite D .

Proposição 3.2. *Se $\delta \geq 2$, então ocorre exatamente uma das situações:*

- (i) $D < C < \Delta \Leftrightarrow 2m - (n-1)\delta < \Delta^2 - (\delta-1)\Delta$;
- (ii) $D = C = \Delta \Leftrightarrow 2m - (n-1)\delta = \Delta^2 - (\delta-1)\Delta$;
- (iii) $D > C > \Delta \Leftrightarrow 2m - (n-1)\delta > \Delta^2 - (\delta-1)\Delta$.

Se $\delta = 1$, $C = D = \sqrt{2m - (n - 1)}$.

Prova:

Se $\delta = 1$, segue diretamente que $C = D = \sqrt{2m - (n - 1)}$. Deste modo, verificaremos apenas a primeira parte da proposição, na qual $\delta \geq 2$. Como os três itens seguem de contas similares, iremos provar somente o primeiro:

$$D < C \Leftrightarrow D^2 < C^2 \Leftrightarrow D^2 - (\delta - 1)D < C^2 - (\delta - 1)\Delta + (\delta - 1)(\Delta - D).$$

Como $2m - (n - 1)\delta = C^2 - (\delta - 1)\Delta$ e $2m - (n - 1)\delta = D^2 - (\delta - 1)D$, temos:

$$D < C \Leftrightarrow 0 < (\delta - 1)(\Delta - D) \Leftrightarrow \delta \geq 2 \text{ e } D < \Delta.$$

Por sua vez,

$$D < \Delta \Leftrightarrow \sqrt{(\delta + 1)^2 + 4(2m - \delta n)} < 2\Delta - (\delta - 1) \Leftrightarrow 2m - (n - 1)\delta < \Delta^2 - (\delta - 1)\Delta.$$

Como $2m - (n - 1)\delta = C^2 - (\delta - 1)\Delta$,

$$D < \Delta \Leftrightarrow C < \Delta \Leftrightarrow 2m - (n - 1)\delta < \Delta^2 - (\delta - 1)\Delta.$$

■

3.3.1 Árvores

Da Tabela 3.1, concluímos que, caso a árvore seja uma estrela S_n , os limites dados por A , B , C e D são iguais ao seu índice $\sqrt{n - 1}$. Para árvores em geral, aplicando a Proposição 3.2, obtemos o seguinte corolário:

Corolário 3.1. *Seja T uma árvore com n vértices, então os limites superiores C e D são iguais a $\sqrt{n - 1}$.*

Uma outra família de árvores em que estes quatro limites coincidem é dada pelas duplas estrelas $S_{a,b}$, como mostramos na proposição abaixo.

Proposição 3.3. *Dados inteiros $a \geq b \geq 1$, os limites superiores A e B , para o índice da dupla estrela $S_{a,b}$, são iguais a $\sqrt{n - 1}$.*

Prova:

Seja u um vértice de $S_{a,b}$. Determinamos o valor $d_u m_u$, obtendo: $d_u m_u = a + 1$ ou $d_u m_u = b + 1$, caso $d_u = 1$; $d_u m_u = a + b + 1$, caso contrário. Como $n - 1 = a + b + 1$ e $a + b + 1 > a + 1$, segue que $A = \sqrt{n - 1}$.

Dados dois vértices u e v adjacentes, calculamos os possíveis valores de $m_u m_v$. Se $d_u = 1$ ou $d_v = 1$, então $m_u m_v = a + b + 1$; caso contrário, $m_u m_v = \frac{(a + b + 1)^2}{(a + 1)(b + 1)}$. Assim, para concluirmos que $B \leq \sqrt{n - 1}$, basta verificar que $a + b + 1 \leq (a + 1)(b + 1)$. De fato, $(a + 1) + b < (a + 1) + (a + 1) = 2(a + 1) \leq (a + 1)(b + 1)$. ■

Se a árvore não for uma estrela, do Teorema 3.2, temos que seu índice é inferior a $\sqrt{n - 1}$. No lema que segue, observamos que, nas árvores, os limites A e B são inferiores ou iguais a $\sqrt{n - 1}$ e, portanto, melhores que os limites C e D .

Lema 3.1. *Seja T uma árvore com n vértices, então tanto o limite A quanto o limite B são inferiores ou iguais a $\sqrt{n - 1}$.*

Prova:

Dado um vértice u da árvore, de grau $r \geq 1$, sejam v_1, \dots, v_r os seus vizinhos. Então, $d_u m_u = d_{v_1} + \dots + d_{v_r}$. Por outro lado, sendo T um grafo acíclico, $\Gamma_{v_i} \cap \Gamma_{v_j} = \{u\}$, para quaisquer $1 \leq i < j \leq r$, e, portanto, a árvore terá pelo menos $d_{v_1} + \dots + d_{v_r} + 1$ vértices. Donde, $d_u m_u \leq n - 1$, provando que $A \leq \sqrt{n - 1}$.

Conforme observado, o limite B é inferior ou superior a $\max_{u \in V(G)} m_u$. Como $d_u m_u \leq n - 1$, para qualquer vértice u de T , concluímos que $B \leq \sqrt{n - 1}$. ■

No caso de caminhos com pelo menos 6 vértices provaremos, na proposição que segue, que $\lambda < A = B = 2 < C = D$. Como o índice $\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda(P_n) = 2$, podemos considerar os limites A e B suficientemente bons para os índices de caminhos.

Proposição 3.4. *Seja P_n um caminho com $n \geq 6$ vértices. Então, seu índice λ é menor que os limites dados por A e B , os quais são iguais a 2 e, por sua vez, inferiores a C e D .*

Prova:

De fato, enumerando os vértices de P_n por $1, 2, \dots, n$ e supondo $i \sim i + 1$ para $1 \leq i \leq n - 1$, temos que $d_1 = d_n = 1$, $d_i = 2$ para $2 \leq i \leq n - 1$, $m_1 = m_n = m_i = 2$ para $3 \leq i \leq n - 2$ e $m_2 = m_{n-1} = \frac{3}{2}$. Portanto, $d_1 m_1 = d_n m_n = 2$, $d_2 m_2 = d_{n-1} m_{n-1} = 3$ e $d_i m_i = 4$ para $3 \leq i \leq n - 2$. Donde, $A = 2$. Similarmente calculamos: $m_1 m_2 = m_2 m_3 = m_n m_{n-1} = m_{n-2} m_{n-1} = 3$ e $m_i m_{i+1} = 4$ para $3 \leq i \leq n - 3$. Obtendo, $B = 2$. ■

3.3.2 Unicíclicos

Como observado na Tabela 3.1, se o grafo for regular também vale que $\lambda = A = B = C = D$. Assim, considerando um unicíclico não regular, teremos $\delta = 1$ e, pela Proposição 3.2, $C = D = \sqrt{2m - n + 1} = \sqrt{n + 1}$, que é o limite dado por (3.8). Logo, este limite é maior que o índice.

Exemplos de unicíclicos (de cintura g) não regulares são dados pelos grafos sol generalizados $Sol(k_1, \dots, k_g)$ (veja Figura 2.6). Nestes grafos observamos $\lambda \leq B \leq A \leq C = D$, conforme provado na proposição:

Proposição 3.5. *Nos unicíclicos $Sol(k_1, \dots, k_g)$ com $n = g + k_1 + \dots + k_g$ vértices, temos $B \leq A = \max_{1 \leq i \leq g} \sqrt{d_i m_i}$ e $A \leq \sqrt{n+1}$.*

Prova:

Para o cálculo de A e de B , enumeramos os vértices de C_g sequencialmente por $1, 2, \dots, g$ e enumeramos os k_i vértices pendurados no i -ésimo vértice de C_g por $g + k_1 + \dots + k_{i-1} + j$ (para $1 \leq j \leq k_i$), como mostrado na Figura 2.6b. Deste modo obtemos: $d_i = k_i + 2$, para $1 \leq i \leq g$, e $d_u = 1$, para os demais vértices u . Portanto: $d_i m_i = 4 + k_{i-1} + k_i + k_{i+1}$, para $2 \leq i \leq g-1$, $d_1 m_1 = 4 + k_g + k_1 + k_2$ e $d_g m_g = 4 + k_{g-1} + k_g + k_1$; e, para u pendurado no i -ésimo vértice de C_g , $d_u m_u = 2 + k_i$. Logo, $A = \max_{1 \leq i \leq g} \sqrt{d_i m_i}$. Como $n = g + k_1 + \dots + k_g$ e $g \geq 3$, temos $4 + k_{i-1} + k_i + k_{i+1} \leq n + 1$. Donde, $A = \max_{1 \leq i \leq g} \sqrt{d_i m_i} \leq \sqrt{n+1}$.

Se o vértice u estiver pendurado no vértice i , $m_u m_i = d_i m_i$. Como $\frac{m_{i+1}}{d_i} = \frac{d_{i+1} m_{i+1}}{d_i d_{i+1}} \leq d_{i+1} m_{i+1}$, uma vez que $d_i d_{i+1} \geq 1$, temos $m_i m_{i+1} = (d_i m_i) \left(\frac{m_{i+1}}{d_i} \right) \leq (d_i m_i) (d_{i+1} m_{i+1}) \leq A^2$ e, portanto, $B \leq A$. ■

3.3.3 Grafos birregulares

Para os grafos birregulares com n_1 vértices de grau δ e n_2 vértices de grau Δ , temos $C = \sqrt{\delta \Delta + (\Delta - \delta)(n_2 - 1)}$ e $D = \frac{1}{2} \left(\delta - 1 + \sqrt{(\delta + 1)^2 + 4n_2(\Delta - \delta)} \right)$. Da Proposição 3.2, obtemos o seguinte corolário, desde que $\delta \geq 2$:

Corolário 3.2. *Seja G um grafo birregular com n_2 vértices de grau máximo Δ . Então, valem, para os limites superiores dados por C e D , as condições:*

(i) $D < C \Leftrightarrow n_2 < \Delta + 1$;

(ii) $D = C \Leftrightarrow n_2 = \Delta + 1$;

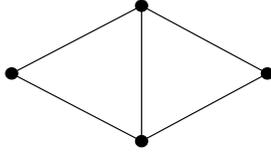
(iii) $D > C \Leftrightarrow n_2 > \Delta + 1$.

Observação 3.4. *Na Figura 3.4, ilustramos as condições do Corolário 3.2 em cada caso: $D < C$, $D = C$ e $D > C$. Observamos que nestes exemplos, temos sempre $A = B$:*

(a) O grafo da Figura 3.4a satisfaz $D = \frac{1+\sqrt{17}}{2} < A = B = C = \sqrt{7}$;

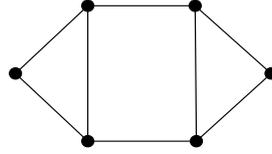
(b) Na Figura 3.4b, verificamos que $A = B = \sqrt{8} < C = D = 3$;

(c) Enquanto na Figura 3.4c, ocorre $A = B = 3 < C = \sqrt{11} < D = \frac{1+\sqrt{33}}{2}$.



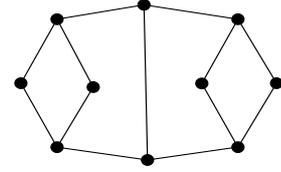
$$D < A = B = C$$

$$(a) \lambda \approx 2,56155 < D < C$$



$$A = B < C = D$$

$$(b) \lambda \approx 2,73205 < D = C$$



$$A = B < C < D$$

$$(c) \lambda \approx 2,68133 < D > C$$

Figura 3.4: Comparando limites em grafos birregulares

Nos grafos da Figura 3.4 observamos que nem sempre A e B são os melhores limites. Isto também pode ser confirmado nos dois exemplos que seguem:

Se o grafo for bipartido semirregular, $\lambda = \sqrt{d_1 d_2} = A = B \leq D \leq C$. Já nos grafos $K_r \vee \overline{K_{n-r}}$, nos quais $\Delta = n-1$ e $n_2 = r$, temos $\lambda = D = \frac{r-1}{2} + \sqrt{\frac{(r-1)^2}{4} + r(n-r)}$, $C = \sqrt{r(n-1) + (r-1)(n-1-r)}$, $A = \max\{C, \sqrt{r(n-1)}\} = C$ e $B = \max\{\frac{C^2}{n-1}, C\} = C$. Portanto, $\lambda = D \leq A = B = C$.

Capítulo 4

Grafos com índice inteiro

O problema de estudar grafos com todos os seus autovalores inteiros, ditos *integrais*, foi inicialmente proposto por F. Harary e A. J. Schwenk em 1973 [63]. Segundo Balinška *et al.* ([5], pp. 42-43), a busca de grafos integrais apresentou resultados em diversas classes, contudo mostrou-se difícil, já que, diante de restrições impostas pela própria classe, a quantidade existente de grafos integrais se torna restrita. O estudo de grafos integrais se aprofundou nas seguintes classes: árvores [25, 27, 34, 50, 86, 125]; com índice limitado [32, 33, 110]; com número limitado de autovalores distintos [32, 76, 106]; regulares [106, 107]; multipartidos completos [120, 121]; dentre outras [9, 33, 82, 124]. Um *survey* sobre grafos integrais é dado por Balińska *et al.* [5] e, mais recentemente, por Wang [118, 119].

Cvetković *et al.* ([43], p. 3) observam que grafos integrais têm aplicabilidade tanto em Computação Quântica quanto em Química e introduzem o emprego destes para resolver problema de *balanceamento de cargas*. Neste artigo, assim como em ([36], p. 34), os autores investigam estruturas de redes computacionais com multiprocessadores interligados (representadas por grafos) e comparam medidas de *ajustamento* (usadas para se determinar qual estrutura seria mais adequada) existentes na literatura com outras que os mesmos propõe, em particular: a medida espectral $t_2(G) = (\Delta + 1)\lambda$, denominada de *second type mixed tightness*. Em ([43], p. 2) ressaltam que uma estrutura é mais adequada quanto menor sua medida espectral. Neste artigo, determinam os grafos conexos cujas medida $t_2(G)$ não excede 9. Comparando esta medida com outras medidas não espectrais para estes grafos, nas tabelas das pp. 18 – 20, concluem que esta é mais eficiente. Olhando para estas tabelas, para cada número $2 \leq n \leq 10$ de vértices fixado, calculamos o valor médio \bar{t}_2 de $t_2(G)$ e verificamos: se $n \neq 2$ e $n \neq 10$, não existe grafo que possua $t_2(G) = \bar{t}_2$; entretanto, para cada n , sempre existe pelo menos um grafo com índice inteiro cujo valor $t_2(G)$ seja igual à aproximação inteira de \bar{t}_2 , conforme mostramos na Tabela 4.1.

| n | Valor médio de $t_2(G)$ | Aproximação inteira deste valor | Grafos com índice inteiro que realizam esta aproximação |
|-----|-------------------------|---------------------------------|---|
| 2 | 2 | 2 | K_2 |
| 3 | 4, 115 | 4 | K_3 |
| 4 | 6, 308 | 6 | K_4 e C_4 |
| 5 | 7, 826 | 8 | K_5 |
| 6 | 7, 832 | 8 | C_6 e $\Omega_{6,5}$ |
| 7 | 8, 458 | 8 | C_7 |
| 8 | 8, 73 | 9 | $\Omega_{8,5}$, $\Omega_{8,6}$ e $\Omega_{8,7}$ |
| 9 | 8, 745 | 9 | $\Omega_{9,2}$ |
| 10 | 9 | 9 | S_{10} e $\Omega_{10,2}$ |

Tabela 4.1: Valores médios de $t_2(G)$

Observe que nem todo grafo que realiza o valor inteiro de $t_2(G)$ é necessariamente integral. De fato basta que tenha índice inteiro, como ocorre com C_7 e os grafos $\Omega_{8,5}$, $\Omega_{8,6}$, $\Omega_{8,7}$ e $\Omega_{9,2}$, mostrados na Figura 4.1.

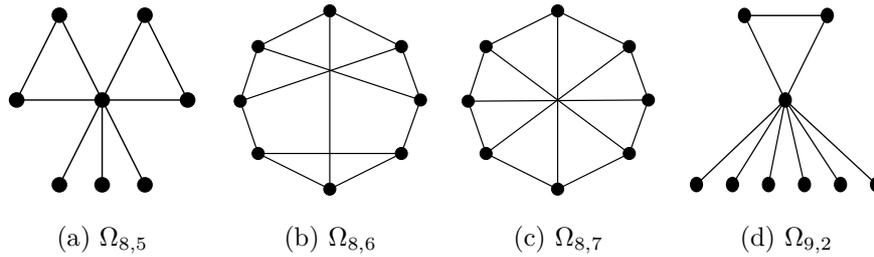


Figura 4.1: Grafos "ôegas", definidos por Cvetković et al. [43]

Outro parâmetro relacionado a redes computacionais e que envolve apenas o índice é dada por Chakrabarti *et al.* [30]. Neste, eles propõem uma nova taxa de propagação de vírus dada por $\tau(G) = \frac{1}{\lambda}$, mostrando que a propagação virótica (em diversos tipos de redes) tem sobrevivência com decaimento exponencial, se $\tau(G) < 1$, e se transforma em *epidemia*, caso $\tau(G) > 1$ (daí eles denominarem a razão $\tau(G)$ por *epidemic threshold*). Como observado por Cvetković e Simić em [40], a propagação de um vírus é a mesma propagação de uma informação e, sendo de interesse aplicar este estudo em grafos cujos número de vértice e diâmetro são fixados, o problema consistirá em minimizar (quando se trata de deter a infeciosidade) ou maximizar (para uma mais rápida acessibilidade de informações) o índice de grafos nesta classe. Ainda, na p. 1557, os autores concluem que "*subdivisões balanceadas de grafos cúbicos devem ser consideradas como bons modelos de redes computacionais resistentes a vírus*". E isto inclui os próprios *grafos cúbicos*, isto é, grafos 3-regulares conexos, os quais constituem uma infinidade de exemplos de grafos não integrais com índice inteiro, já que somente 13 destes são integrais ([5], p. 50). Para obter

uma família infinita de grafos cúbicos, basta considerar os grafos $K_2 + C_n$. Na Figura 4.2, damos alguns exemplos destes.

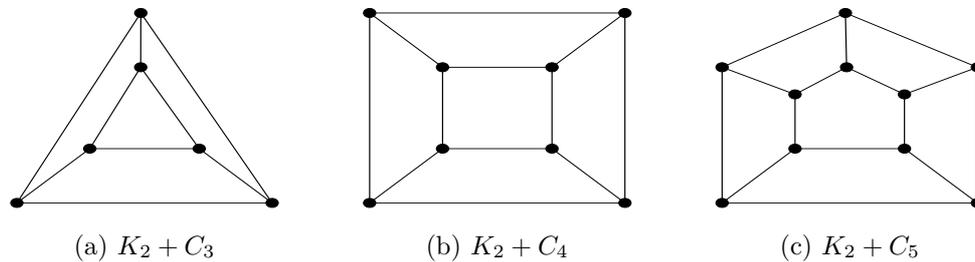


Figura 4.2: *Exemplos de grafos cúbicos: $\lambda = 3$*

Os fatos aqui expostos motivaram nossos estudos de grafos conexos com índice inteiro, onde concentram-se nossas principais contribuições. Lembramos que já existe na literatura ampla investigação de grafos integrais. Nosso principal objetivo, portanto, é caracterizar grafos não integrais com índice inteiro, em classes específicas.

O estudo da integralidade do índice nos levou a obter novas famílias de grafos integrais, ainda não conhecidas. Além disso, em algumas dessas classes, determinamos novas cotas superiores e inferiores para o índice, melhores que as encontradas na literatura. Em outras, deduzimos que os grafos desta não possuem índice inteiro e, portanto, não são integrais, ou obtemos ordem total, com relação ao índice. Apresentamos novos resultados tanto no presente capítulo quanto no Capítulo 6.

Neste capítulo estudamos a integralidade do índice em duas classes especiais de grafos: a primeira, dada pelos KK_n^j , será abordada na Seção 3; a segunda, dada pelos grafos *p-broom-like*, é discutida na Seção 4. Deixamos para o Capítulo 6 o estudo da integralidade do índice em árvores.

Na primeira seção deste capítulo, abordamos os grafos não integrais com índice 2, que são grafos Smith. Na seção seguinte, revemos resultados apresentados em capítulos anteriores que nos possibilitam construir grafos não integrais com índice inteiro, a partir de grafos conhecidos.

4.1 Grafos Smith não integrais

Os grafos conexos com índice $\lambda = 2$, conhecidos na literatura como *grafos Smith*, são dados pela Figura 4.3. De acordo com o Teorema 3.1.3 de [26], se o grafo conexo possuir índice $\lambda < 2$, então este será um dos subgrafos de um grafo Smith, dados pela Figura 4.4.

Na Tabela 4.2 damos os autovalores dos grafos Smith e de subgrafos de grafos Smith, retirados de [26] (p. 35). Desta, observamos:

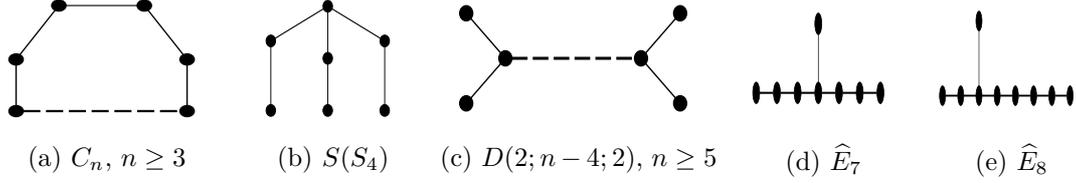


Figura 4.3: Grafos Smith: $\lambda = 2$

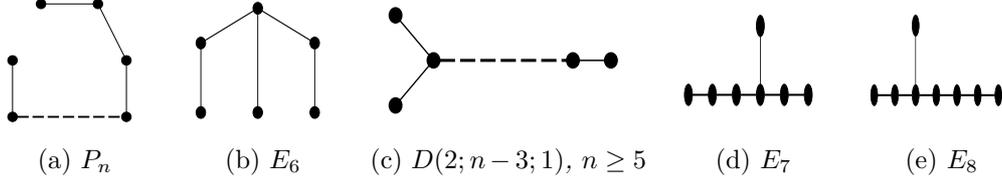


Figura 4.4: Grafos conexos com índice $\lambda < 2$

$$\lambda(P_n) = 2 \cos\left(\frac{\pi}{n+1}\right); \quad \lambda(E_6) = 2 \cos\left(\frac{\pi}{12}\right); \quad \lambda(D(2; n-3; 1)) = 2 \cos\left(\frac{\pi}{2n-2}\right);$$

$$\lambda(E_7) = 2 \cos\left(\frac{\pi}{18}\right); \quad \lambda(E_8) = 2 \cos\left(\frac{\pi}{30}\right).$$

Isto nos possibilita listar os grafos conexos com índice igual a 1 ou 2, que não sejam integrais.

Proposição 4.1. *Se G é um grafo conexo com índice inteiro $\lambda = 1$ ou 2 , então ou G é um grafo Smith ou G é P_1 ou P_2 . Ainda, G não será integral caso seja: C_n , com $n = 5$ ou $n \geq 7$; $D(2; n-4; 2)$, com $n \geq 7$; \widehat{E}_7 , ou \widehat{E}_8 .*

Prova:

Dado um inteiro q positivo, $2 \cos\left(\frac{\pi}{q}\right)$ é inteiro positivo somente se $q = 2, 3$. Aplicando este fato aos índices dos grafos da Figura 4.4, segue a primeira afirmação da proposição.

Da Tabela 4.2 vemos que $S(S(4))$ é integral, enquanto o mesmo não ocorre com os grafos \widehat{E}_7 e \widehat{E}_8 . Sendo $S_5 = D(2; 1; 2)$ integral, para concluir a proposição, falta-

| Grafo | Autovalores | Grafo | Autovalores |
|-----------------|--|----------------|---|
| C_n | $2 \cos\left(\frac{2k\pi}{n}\right),$ $0 \leq k \leq n-1$ | P_n | $2 \cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right), 1 \leq k \leq n$ |
| $S(S_4)$ | $2, 1, 0, -1, -2$ | E_6 | $2 \cos\left(\frac{k\pi}{12}\right), k = 1, 4, 5, 7,$ $8, 11$ |
| $D(2; n-4; 2)$ | $2, 0, -2$ e $2 \cos\left(\frac{k\pi}{n-3}\right),$ $1 \leq k \leq n-4$ | $D(2; n-3; 1)$ | $2 \cos\left(\frac{k\pi}{2n-2}\right), k = 1, 3,$ $5, \dots, 2n-3$ |
| \widehat{E}_7 | $2, \sqrt{2}, 1, 0, -\sqrt{2}, -2$ | E_7 | $2 \cos\left(\frac{k\pi}{18}\right), k = 1, 5, 7, 9,$ $11, 13, 17$ |
| \widehat{E}_8 | $2, \tau, 1, \frac{1}{\tau}, 0, -\frac{1}{\tau}, -1, -\tau, -2,$ onde $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ | E_8 | $2 \cos\left(\frac{k\pi}{30}\right), k = 1, 7, 11, 13,$ $17, 19, 23, 29$ |

Tabela 4.2: Autovalores de grafos conexos com índice $\lambda \leq 2$

nos verificar que C_n é integral somente se $n = 3, 4, 6$, e que $D(2; n - 4; 2)$ é integral somente para $n = 6$.

Observamos que o autovalor $2 \cos(\frac{2k\pi}{n})$ de C_n será inteiro somente se $\frac{2k}{n}$ assumir valor em $\{\frac{a}{3}; 0 \leq a \leq 5\}$ ou em $\{\frac{b}{2}; 0 \leq b \leq 3\}$. Disto resulta que, n é par ou múltiplo de 3. Como, para $n \geq 8$, $2 \cos(\frac{2\pi}{n}) \leq \sqrt{2}$, concluímos que C_n não é integral neste caso. Assim C_n só poderia ser integral se $n = 3, 4$ ou 6 , o que de fato ocorre.

Seguindo raciocínio análogo, vemos: $2 \cos(\frac{k\pi}{n-3}) = 1$ se, e somente se, n é múltiplo de 3, e $2 \cos(\frac{k\pi}{n-3}) = 0$ se, somente se, n for ímpar. Sendo $D(2; n-4; 2)$ bipartido, seus autovalores são simétricos com relação a 0 e, portanto, 2 e -2 possuem multiplicidade 1. Como o mesmo ocorre com 1 e -1 , caso estes sejam autovalores, concluímos que 0 tem multiplicidade 2, para n par, ou 3, caso contrário. Portanto, $D(2; 2; 2)$ é integral e, para $n \geq 7$, existirá um autovalor não inteiro de $D(2; n - 4; 2)$. ■

4.2 Operações: construindo grafos não integrais com índice inteiro

A partir das operações entre grafos e relações destas com o índice, dadas no Capítulo 2, podemos construir exemplos de grafos conexos não integrais e com índice inteiro:

- (1) Do Lema 2.1 temos que o complementar \overline{G} de um grafo regular G é regular, portanto tem índice inteiro. Neste caso, \overline{G} é integral se, somente se, o grafo G é integral.
- (2) De (2.8) temos que o grafo linha $\mathcal{L}(G)$ de um grafo r -regular também é regular (de grau $2r - 2$) e, caso G não seja integral, o mesmo ocorre com $\mathcal{L}(G)$.
- (3) Dados dois grafos G_1 e G_2 regulares de, respectivamente, graus d_1 e d_2 e com, respectivamente, n_1 e n_2 vértices, segue da Proposição 2.2, que o *join* $G_1 \vee G_2$ possuirá índice inteiro se, e somente se, $(d_1 - d_2)^2 - n_1 n_2$ for um quadrado perfeito. Ainda, $G_1 \vee G_2$ não é integral, caso G_1 ou G_2 não seja integral.

Deste modo, os grafos complementares $\overline{C_n}$, de um ciclo C_n , e os grafos linha $\mathcal{L}(\overline{C_n})$ destes, para $n = 5$ e $n \geq 7$, são exemplos de grafos não integrais com índice inteiro. Assim como a roda $W_n = K_1 \vee C_{n-1}$, cujo índice é dado por (3.18), se $n \geq 9$ seja um quadrado perfeito.

- (4) Se G é um grafo integral e H é um grafo não integral, mas com índice inteiro, então a soma $G + H$, o produto $G \times H$ e o produto forte $G * H$ são grafos não integrais que possuem índice inteiro.

Logo, os grafos cúbicos $K_2 + C_n$ não são integrais, para $n = 5$ ou $n \geq 7$. Também poderíamos considerar a subdivisão $S(G)$ de um grafo r -regular G . Do Lema 2.7, segue que os autovalores de $S(G)$ são da forma $\pm\sqrt{\lambda_i + r}$, onde λ_i é um autovalor de G . Portanto:

- (5) Se G é um grafo r -regular não integral, $S(G)$ não é integral. Ainda, $\lambda(S(G))$ é inteiro se, e somente se, $r = 2^p q^2$, para alguns p e q ímpares positivos.

Um caso particular ($p = q = 1$) é dado pela subdivisão de um ciclo (grafo 2-regular conexo) C_n , o qual é um ciclo C_{2n} e, portanto, não é integral para $n \geq 4$.

Nossas principais contribuições, em construir famílias infinitas de grafos conexos não integrais e com índice inteiro, serão dadas tanto nas próximas seções deste capítulo quanto no Capítulo 6.

4.3 Grafos do tipo KK_n^j

No artigo [48], Freitas *et al.* definem os grafos KK_n^j e obtêm propriedades relativas aos autovalores de suas matrizes de adjacência, laplaciana e laplaciana sem sinal, calculando os polinômios característicos destas matrizes. Ainda, caracterizam quando estes possuem todos os autovalores inteiros, com respeito às duas últimas matrizes.

No artigo [49], completamos o estudo da integralidade dos autovalores destes grafos, com relação à matriz de adjacência. Nesta seção, reportamos os principais resultados que provamos neste artigo. Na Proposição 4.3, mostramos que, com exceção de KK_1^1 , os grafos KK_n^j não são integrais. No Corolário 4.1, determinamos o possível valor inteiro para o índice de KK_n^j e, na Proposição 4.4, caracterizamos, em função de n e j , quais destes possuem índice inteiro, apresentando, no Corolário 4.2, uma família infinita de KK_n^j com índice inteiro. Ainda, na Proposição 4.2, damos cotas superior e inferior ajustadas para o índice de KK_n^j . A seguir definimos estes grafos.

Definição 4.1. *Seja o grafo KK_n^j obtido a partir de duas cópias do grafo completo K_n por adição de j arestas entre um vértice de uma cópia de K_n e j vértices da outra cópia, onde j é tal que $1 \leq j \leq n$.*

Da definição segue que os únicos grafos KK_n^j , para $n = 1$, é K_2 e, para $n = 2$, são P_4 e $S_4 + e$. O grafo K_2 é integral, enquanto que P_4 e $S_4 + e$ não possuem índice inteiro. Deste modo, estaremos interessados em estudar os grafos KK_n^j para $n \geq 3$.

Na Figura 4.5 damos alguns exemplos destes grafos. Observamos que KK_n^j possui um único vértice de grau máximo $\Delta = n - 1 + j$, exatamente j vértices de

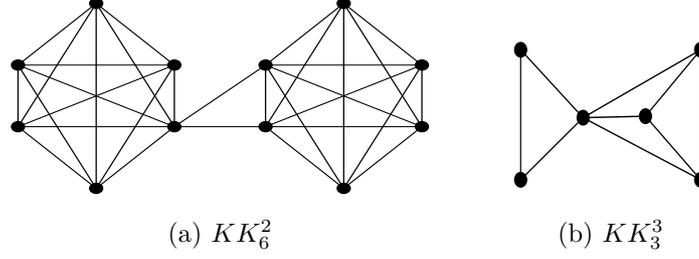


Figura 4.5: Grafos KK_n^j

segundo maior grau $\Delta' = n$ e, os demais $n - j - 1$ vértices possuem grau mínimo $\delta = n - 1$. Usaremos este fato na prova da Proposição 4.2.

O polinômio característico de KK_n^j é dado no teorema:

Teorema 4.1. ([48]) *Se $1 \leq j \leq n$ e $n \geq 3$, então o polinômio característico de KK_n^j é $p_{KK_n^j}(x) = (x + 1)^{(2n-4)}h(x)$, onde*

$$h(x) = x^4 + (4 - 2n)x^3 + (n^2 - 6n + 6 - j)x^2 + \quad (4.1)$$

$$+(2n^2 - 6n + 2nj - j^2 - 3j + 4)x + (1 + nj^2 - 2j^2 + n^2 - 2n - 2j + 3jn - jn^2) .$$

Do Teorema 4.1 temos que o índice de KK_n^j é a maior raiz de $h(x)$. Na proposição subsequente damos cotas inferior e superior para este.

Proposição 4.2. *Seja KK_n^j , para $1 \leq j \leq n$ e $n \in \mathbb{N}$. Então, seu índice λ satisfaz:*

$$n - 1 < \lambda < n + 1 .$$

Prova:

Como K_n é um subgrafo próprio de KK_n^j e ambos são conexos, da Proposição 2.1 resulta que $n - 1 < \lambda$.

Como já observamos, a sequência de graus de KK_n^j é dada por

$$\Delta = n - 1 + j = d_1 > n = d_2 = \dots = d_{j+1} > n - 1 = d_{j+2} = \dots = d_n .$$

Deste modo, segue do Teorema 3.5 que

$$\lambda \leq \frac{1}{2}(d_2 - 1 + \sqrt{(d_2 + 1)^2 + 4(2 - 1)(\Delta - d_2)}) =$$

$$\frac{1}{2}(n - 1 + \sqrt{(n + 1)^2 + 4(j - 1)}) .$$

Sendo $j \leq n$, estimamos $\lambda \leq \frac{1}{2}(n - 1 + \sqrt{(n + 1)^2 + 4(n - 1)}) < \frac{1}{2}(n - 1 + \sqrt{(n + 3)^2})$; donde, $\lambda < n + 1$. ■

Desta proposição concluímos o corolário:

Corolário 4.1. *Seja KK_n^j , para $1 \leq j \leq n$ e $n \in \mathbb{N}$. Seu índice λ será inteiro se, e somente se, $\lambda = n$.*

Provamos, em seguida, que os grafos KK_n^j , para $1 \leq j \leq n$ e $n \geq 2$, não são integrais.

Proposição 4.3. *Seja $1 \leq j \leq n$ e $n \geq 2$. Então, KK_n^j não é integral. Ainda, caso $n \geq 3$, este grafo possuirá um autovalor não inteiro no intervalo $(n-2, n-1)$.*

Prova:

Conforme observado, $KK_2^1 = P_4$ e $KK_2^2 = S_4 + e$ não são integrais. Assim, basta provarmos a segunda afirmação da proposição. Do Teorema 4.1, é suficiente verificarmos que o polinômio $h(x)$, definido por (4.1), possui uma raiz no intervalo $(n-2, n-1)$. E isto seguirá de sua continuidade e do fato de $h(n-2) > 0 > h(n-1)$. De fato, calculamos:

$$\begin{aligned} h(n-2) &= [(n-2)^4 + (4-2n)(n-2)^3] + (n^2 - 6n + 6 - j)(n-2)^2 + \\ &+ (2n^2 - 6n + 2nj - j^2 - 3j + 4)(n-2) + (1 + nj^2 - 2j^2 + n^2 - 2n - 2j + 3jn - jn^2) = \\ &= n^2 - 2n + 1 = (n-1)^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} e \quad h(n-1) &= [(n-1)^4 + (4-2n)(n-1)^3] + (n^2 - 6n + 6 - j)(n-1)^2 + \\ &+ (2n^2 - 6n + 2nj - j^2 - 3j + 4)(n-1) + (1 + nj^2 - 2j^2 + n^2 - 2n - 2j + 3jn - jn^2) = \\ &= -j^2 \end{aligned}$$

■

Na Proposição 4.4 caracterizamos os grafos KK_n^j , com $n \geq 3$, que possuem índice inteiro, obtendo que, para tais grafos, $x = 2j + 1$ e $y = n + 1$ é uma solução da equação diofantina $x^2 - 2y^2 = 1$.

Proposição 4.4. *Seja KK_n^j , para $n \geq 3$ e $1 \leq j \leq n$. Então, seu índice λ é inteiro se, e somente se, equivalentemente ocorrem as condições:*

(a) $(n+1)^2 = 2j(j+1)$;

(b) $j = \frac{x-1}{2}$ e $n = y-1$, para alguma solução inteira (x, y) da equação $x^2 - 2y^2 = 1$ tal que $3 \leq x \leq 2y-1$ e $y \geq 4$.

Prova:

Do Corolário 4.2, temos que λ é inteiro se, e somente se, $\lambda = n$. Sendo $n \geq 3$, do Teorema 4.1, concluímos que $\lambda = n$ se, e somente se, $h(n) = 0$.

Calculando

$$\begin{aligned} h(n) &= [n^4 + (4 - 2n)n^3] + (n^2 - 6n + 6 - j)n^2 + \\ &+ (2n^2 - 6n + 2nj - j^2 - 3j + 4)n + (1 + nj^2 - 2j^2 + n^2 - 2n - 2j + 3jn - jn^2) = \\ &= (n + 1)^2 - 2j(j + 1) , \end{aligned}$$

provamos que λ é inteiro se, e somente se, $(n + 1)^2 = 2j(j + 1)$.

Considerando $x = 2j + 1$ e $y = n + 1$, temos:

$$h(n) = 0 \Leftrightarrow y^2 = \frac{x^2 - 1}{2} \Leftrightarrow x^2 - 2y^2 = 1 .$$

Como $1 \leq j \leq n$ e $n \geq 3$, então $3 \leq x \leq 2y - 1$ e $y \geq 4$, concluindo a prova. ■

Usamos a segunda condição da proposição anterior, para construirmos uma família infinita de grafos KK_n^j não integrais e com índice inteiro, descrita abaixo:

Corolário 4.2. *Seja KK_n^j , com*

$$n = \frac{(3 + 2\sqrt{2})^p - (3 - 2\sqrt{2})^p}{2\sqrt{2}} - 1 \quad e \quad j = \frac{(3 + 2\sqrt{2})^p + (3 - 2\sqrt{2})^p - 2}{4} ,$$

para $p \geq 2$ inteiro. Então, KK_n^j possui índice inteiro.

Prova:

Considerando $x = 2j + 1$ e $y = n + 1$, temos que

$$x = \frac{(3 + 2\sqrt{2})^p + (3 - 2\sqrt{2})^p}{2} \quad e \quad y = \frac{(3 + 2\sqrt{2})^p - (3 - 2\sqrt{2})^p}{2\sqrt{2}}$$

são inteiros. De fato, expandindo os binômios de Newton, calculamos:

$$\begin{aligned} (3 + 2\sqrt{2})^p + (3 - 2\sqrt{2})^p &= \sum_{k=0}^p \binom{p}{k} 3^{p-k} [(2\sqrt{2})^k + (-1)^k (2\sqrt{2})^k] = \\ &= 2 \cdot 3^p + 4 \sum_{k \geq 2 \text{ par}} \binom{p}{k} 3^{p-k} \cdot 2^{k-1} \cdot 2^{\frac{k}{2}} , \end{aligned}$$

donde concluímos que $x = 3^p + 2 \sum_{k \geq 2 \text{ par}} \binom{p}{k} 3^{p-k} \cdot 2^{k-1} \cdot 2^{\frac{k}{2}}$. Analogamente, obtemos que $y = \sum_{k \text{ ímpar}} \binom{p}{k} 3^{p-k} \cdot 2^k \cdot 2^{\frac{k-1}{2}}$.

Afirmamos que (x, y) é solução inteira de $x^2 - 2y^2 = 1$:

$$\begin{aligned} x^2 - 2y^2 &= \frac{(3 + 2\sqrt{2})^{2p} + (3 - 2\sqrt{2})^{2p}}{4} + \frac{1}{2}(3 + 2\sqrt{2})^p(3 - 2\sqrt{2})^p - \\ &- 2 \left(\frac{(3 + 2\sqrt{2})^{2p} + (3 - 2\sqrt{2})^{2p}}{8} - \frac{1}{4}(3 + 2\sqrt{2})^p(3 - 2\sqrt{2})^p \right) = 1 . \end{aligned}$$

Portanto, x é ímpar, o que implica em $j = \frac{x-1}{2}$ ser inteiro. Ainda:

- (i) $x \geq \frac{3 + 2\sqrt{2} + 3 - 2\sqrt{2}}{2} = 3;$
- (ii) $y \geq \sum_{k \text{ ímpar}} \binom{p}{k} 3^{p-k} \cdot 2^k \cdot 2^{\frac{k-1}{2}} \geq \binom{2}{1} 3 \cdot 4 \cdot 2^0 = 12;$
- (iii) $2y - x = (3 + 2\sqrt{2})^p [\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{1}{2}] - (3 - 2\sqrt{2})^p [\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{1}{2}] = \frac{\sqrt{2}-1}{2} \cdot 2\sqrt{2} \cdot y$ é positivo.
Logo, $2y - x \geq 1$ e, conseqüentemente, $x \leq 2y - 1.$

Tendo verificado que as condições dadas na Proposição 4.4 são satisfeitas, concluimos nossa prova. ■

4.4 Grafos *p-broom-like*

No Capítulo 2 definimos a vassoura, $D(a; r; 0)$, como sendo o grafo, com $a + r$ vértices, obtido ao pendurarmos a vértices no vértice v_1 do caminho $P_r = v_1 \dots v_r$. No que segue, consideramos a vassoura *enraizada* pelo extremo v_r de P_r , sendo, por isto, denotada por $B(a; r)$. Caso $r = 1$ a vassoura enraizada $B(a; r)$ coincide com a estrela S_{a+1} enraizada por seu vértice central.

Um grafo *p-broom-like* é o grafo, com $p(a + r)$ vértices, obtido pelo produto hierárquico $K_p \square B(a; r)$, do grafo completo K_p pela vassoura enraizada $B(a; r)$, onde $p \geq 3$, $a \geq 1$ e $r \geq 1$. Esta definição é uma variante da definição dada por Tyomkyna e Uzzellem em [111]. Alguns exemplos de grafos *p-broom-like* são exibidos pela Figura 4.6. Nesta seção estudamos, na Proposição 4.5, a integralidade do índice de um *p-broom-like* $K_p \square B(a; 1)$, dado por $r = 1$. Diferentemente da seção anterior, seus autovalores e, em particular, seu índice, são determinados por fórmulas fechadas, o que nos possibilita construir tanto famílias integrais, quanto não integrais, de grafos $K_p \square B(a; 1)$ que possuem índice inteiro. No Teorema 4.2 provamos que a classe de *p-broom-like* $K_p \square B(a; r)$, com n vértices, pode ser totalmente e estritamente ordenada pelo índice. Portanto, não existem pares coespectrais não isomorfos de dois grafos nesta classe.

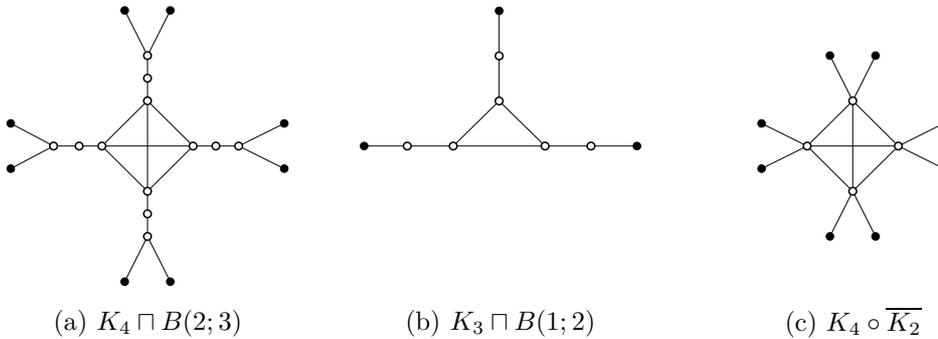


Figura 4.6: Grafos *p-broom-likes*

Note que, caso $r = 1$, o produto hierárquico $K_p \square B(a; 1)$ coincide com o grafo coroa $K_p \circ \overline{K_a}$, cujo polinômio característico pode ser calculado usando o Lema 2.3:

$$\begin{aligned} p_{K_p \circ \overline{K_a}} &= \left[p_{\overline{K_a}}(x) \right]^p p_{K_p} \left(x - \frac{a}{x} \right) = \\ &= x^{ap} p_{K_p} \left(\frac{x^2 - a}{x} \right) = x^{ap} \left[\frac{x^2 - a}{x} - (p-1) \right] \left[\frac{x^2 - a}{x} + 1 \right]^{p-1} = \\ &= x^{ap} \left[\frac{x^2 - (p-1)x - a}{x} \right] \frac{[x^2 + x - a]^{p-1}}{x^{p-1}} = \\ &= x^{p(a-1)} [x^2 - (p-1)x - a] [x^2 + x - a]^{p-1}. \end{aligned}$$

Segue, portanto, que seu índice é

$$\lambda(K_p \circ \overline{K_a}) = \frac{p-1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(p-1)^2 + 4a}. \quad (4.2)$$

Na Proposição 4.5 damos condições necessárias e suficientes tanto para a integralidade do índice de $K_p \circ \overline{K_a}$ quanto para a integralidade do próprio grafo.

Proposição 4.5. *Sejam $p \geq 3$ e $a \geq 1$ inteiros. Então:*

(i) $K_p \circ \overline{K_a}$ possui índice λ inteiro se, e somente se, existe um inteiro positivo q tal que

$$a = q(p-1+q).$$

Neste caso, $\lambda = p-1+q$.

(ii) $K_p \circ \overline{K_a}$ é integral se, e somente se, existem inteiros positivos q e s tais que

$$a = q(p-1+q) \quad \text{e} \quad a = s(s+1).$$

Prova:

Sendo $p(x) = x^{p(a-1)} [x^2 - (p-1)x - a] [x^2 + x - a]^{p-1}$ o polinômio característico de $K_p \circ \overline{K_a}$, da Observação 6.4, temos:

- (i) $K_p \circ \overline{K_a}$ possui índice inteiro se, e somente se, $(p-1)^2 + 4a$ for um quadrado perfeito;
- (ii) $K_p \circ \overline{K_a}$ é integral se, e somente se, $(p-1)^2 + 4a$ e $1+4a$ forem ambos quadrados perfeitos.

Assim, verificaremos, primeiramente, que $(p-1)^2 + 4a$ é um quadrado perfeito se, e somente se, existir um inteiro positivo q tal que $a = q(p-1+q)$; e calcularemos o índice λ . Faremos isto, dividindo o caso em que p é ímpar do caso em que p é par:

Se $p = 2t + 1$, para algum $t \geq 1$, $(p-1)^2 + 4a = 4(t^2 + a)$ é um quadrado perfeito se, e somente se, $t^2 + a = x^2$, para algum inteiro positivo x . Onde:

$a = (x+t)(x-t)$. Considerando $q = x - t$, temos: $a = q(q + 2t)$ e, portanto, $a = q(q + p - 1)$. Disto resulta que $(p - 1)^2 + 4a = 4x^2 = 4(q + t)^2 = 4[q + \frac{p-1}{2}]^2$. Como $\lambda = \frac{p-1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(p-1)^2 + 4a}$, calculamos: $\lambda = \frac{p-1}{2} + [q + \frac{p-1}{2}] = q + p - 1$.

Se $p = 2t$, para algum $t \geq 2$, $(p - 1)^2 + 4a = 4(t^2 - t + a) + 1$ é ímpar. Assim, este é um quadrado perfeito se, e somente se, existir um inteiro positivo x tal que $4(t^2 - t + a) + 1 = (2x + 1)^2$, ou seja, $t^2 - t + a = x^2 + x$. Portanto, $a = x^2 - t^2 + x + t = (x + t)(x - t + 1)$. Neste caso, consideramos $q = x - t + 1$, o que nos possibilita escrever $a = q(q + 2t - 1) = q(q + p - 1)$. Como $(p - 1)^2 + 4a = (2x + 1)^2 = (2q + 2t - 1)^2 = (2q + p - 1)^2$, temos: $\lambda = \frac{p-1}{2} + \frac{1}{2}(2q + p - 1) = q + p - 1$, conforme queríamos.

Para terminarmos a prova desta proposição, nos resta verificar que $1 + 4a$ é um quadrado perfeito se, e somente se, existir um inteiro positivo s tal que $a = s(s + 1)$: $1 + 4a = x^2$, para algum x ímpar positivo, se, e somente se, $a = (\frac{x-1}{2})(\frac{x+1}{2})$, uma vez que $x - 1$ e $x + 1$ são ambos pares. Como $\frac{x+1}{2} = \frac{x-1}{2} + 1$, temos provado a afirmação. ■

Desta proposição, vemos que, caso $p = a$, $(p - 1)^2 + 4a = (p + 1)^2$. Logo, $K_p \circ \overline{K_p}$ possui índice inteiro, a saber: $\lambda = \frac{p-1}{2} + \frac{p+1}{2}$; donde, $\lambda = p$. Mas nem sempre este p -broom-like é integral. De fato, para que seja integral devemos ter $p = s(s + 1)$, para algum inteiro positivo $s \geq 2$. Portanto, p deve ser par. Com isto provamos o seguinte corolário:

Corolário 4.3. *Dado um inteiro $p \geq 3$, o p -broom-like $K_p \circ \overline{K_p}$ possui índice inteiro $\lambda = p$. Este é integral se, e somente se, p é par e é produto de dois inteiros positivos consecutivos.*

Aplicamos, a seguir, a Proposição 4.5 a fim de obter famílias infinitas de grafos $K_p \circ \overline{K_a}$ integrais, para $p \neq a$. Claramente, iremos considerar o caso em que estes possuem índice inteiro: $a = q(q + p - 1)$, onde $q \geq 1$ é inteiro. Entretanto, observamos que, se $p = 3$ ou $p = 4$, $K_p \circ \overline{K_a}$ nunca é integral, qualquer que seja $a \geq 1$:

Corolário 4.4. *Para todo $a \geq 1$, os grafos $K_3 \circ \overline{K_a}$ e $K_4 \circ \overline{K_a}$ não são integrais.*

Prova:

Supondo que $K_3 \circ \overline{K_a}$ tenha índice inteiro, temos que $a = q(2 + q)$, para algum inteiro positivo q . Se este 3-broom-like fosse integral, então $a = s(s + 1)$, para algum inteiro $s \geq 2$. Logo, $(q + 1)^2 = (q^2 + 2q) + 1 = (s^2 + s) + 1$ e, portanto, $x = q + 1$ e $y = s$ é solução inteira da equação $x^2 = y^2 + y + 1$. Esta equação equivale à equação $4x^2 = (2y + 1)^2 + 3$, ou seja, à equação $(2x - 2y - 1)(2x + 2y + 1) = 3$. Como procuramos por uma solução inteira positiva, temos que $2x - 2y - 1 = 1$ e

$2x + 2y + 1 = 3$. Logo, $x = 1$ e $y = 0$, que não é solução positiva. Portanto, $K_3 \circ \overline{K_a}$ não é integral.

Supomos agora que $K_4 \circ \overline{K_a}$ seja integral: existem inteiros positivos q e s tais que $q(3+q) = s(s+1)$ e, portanto, $x = 2q+3$ e $y = s$ é solução inteira positiva da equação $x^2 = 4y^2 + 4y + 9$. Sendo esta equação equivalente a $(x - 2y - 1)(x + 2y + 1) = 8$, temos: ou bem $x - 2y - 1 = 1$ e $x + 2y + 1 = 8$, ou bem $x - 2y - 1 = 2$ e $x + 2y + 1 = 4$. Como $(x - 2y - 1) + (x + 2y + 1) = 2x$, no primeiro caso não há solução inteira. Resolvendo o segundo caso obtemos $x = 3$ e $y = 0$, a qual não é uma solução positiva. Deste modo, $K_4 \circ \overline{K_a}$ não é integral. ■

A Proposição 4.5 nos mostra que para cada $p \geq 3$ existe uma família infinita de grafos p -broom-like, do tipo $K_p \circ \overline{K_a}$, que possuem índice inteiro, mas não necessariamente integrais. De fato, a condição de integralidade destes é mais difícil de ser realizada, como podemos comprovar pelo Corolário 4.4. Nos dois subsequentes corolários construímos exemplos de tais grafos integrais. Começemos considerando $p \geq 5$ ímpar:

Corolário 4.5. *Seja $t \geq 2$ inteiro. Se*

$$p = 2t + 1 \quad e \quad a = t^2(t^2 - 1) ,$$

então $K_p \circ \overline{K_a}$ é integral e seu índice é $\lambda = t(t + 1)$.

Prova:

Da prova da Proposição 4.5, temos que $K_p \circ \overline{K_a}$ é integral se, e somente se, $(p-1)^2 + 4a$ e $1 + 4a$ forem ambos quadrados perfeitos. Assim, calculando

$$(p - 1)^2 + 4a = 4t^4 \quad e \quad 1 + 4a = 4t^4 - 4t^2 + 1 = (2t^2 - 1)^2 ,$$

concluimos a prova. ■

Consideramos o caso em $p \geq 6$ é par, obtendo a seguinte família de grafos p -broom-like integrais:

Corolário 4.6. *Seja $t \geq 3$ inteiro. Se*

$$p = 2t \quad e \quad a = \frac{(t - 2)(t - 1)}{2} \cdot \frac{t(t + 1)}{2} ,$$

então $K_p \circ \overline{K_a}$ é integral e seu índice é $\lambda = \frac{t(t + 1)}{2}$.

Prova:

Procedendo de modo análogo à prova do Corolário 4.5, calculamos:

$$1 + 4a = 1 + (t - 2)(t - 1)t(t + 1) = (t^2 - t - 1)^2;$$

$$(p - 1)^2 + 4a = (2t - 1)^2 + 4a = 4(t^2 - t) + (t^2 - t - 1)^2 = (t^2 - t + 1)^2 .$$

Sendo ambos quadrados perfeitos, segue que o p -broom-like é integral. \blacksquare

Observamos que as famílias dadas nestes dois últimos corolários não são as únicas de grafos $K_p \circ \overline{K_a}$ integrais. Por exemplo, para o ímpar $p = 9$, do Corolário 4.5, temos que $K_9 \circ \overline{K_{240}}$ é integral. O mesmo ocorrendo com $K_9 \circ \overline{K_{20}}$, uma vez que $1 + 4 \cdot 20 = 81$ e $(9 - 1)^2 + 4 \cdot 20 = 144$ são quadrados perfeitos. Também para o par $p = 12$ obtemos dois 12-broom-like $K_{12} \circ \overline{K_a}$ integrais: $K_{12} \circ \overline{K_{210}}$, obtida pelo Corolário 4.6, e $K_{12} \circ \overline{K_{42}}$. No caso em que p seja ímpar, conseguimos obter mais duas famílias infinitas de $K_p \circ \overline{K_a}$ integrais:

Corolário 4.7. *Seja u um inteiro positivo. Se os inteiros positivos p e a satisfizerem uma das condições abaixo:*

$$(i) \quad p = 6u - 1 \text{ e } a = 4u(4u - 1);$$

$$(ii) \quad p = 6u + 3 \text{ e } a = 4u(4u + 1);$$

então $K_p \circ \overline{K_a}$ é integral.

A prova deste corolário é bastante simples, resumindo-se ao fato de $1 + 4a$ e $(p - 1)^2 + 4a$ serem ambos quadrados perfeitos: no primeiro caso, calculamos $1 + 4a = (8u - 1)^2$ e $(p - 1)^2 + 4a = (10u - 2)^2$; enquanto no segundo, $1 + 4a = (8u + 1)^2$ e $(p - 1)^2 + 4a = (10u + 2)^2$. Vejamos que ambas as famílias, dadas por este corolário, são distintas da família obtida pelo Corolário 4.5: considerando $p = 6u - 1 = 2t + 1$, temos que $t = 3u - 1$. Se $a = t^2(t^2 - 1)$, então $a = 3u(3u + 2)(3u - 1)^2$ e, portanto, $a \neq 4u(u - 1)$. Analogamente, se $p = 6u + 3 = 2t + 1$, $t = 3u + 1$. Logo, $a = t^2(t^2 - 1) = 3u(3u + 2)(3u + 1)^2$ é distinto de $4u(4u + 1)$.

Por último, mostraremos, no Teorema 4.2, que a classe dos grafos p -broom-like com n vértices se ordena totalmente. Portanto, não existem dois p -broom-like coespectrais não isomorfos, uma vez que estes possuem diferentes índices. Como o número de vértices é $n = p \cdot (a + r)$, estaremos considerando os parâmetros p e $c = a + r$ constantes. Mais precisamente, mostramos que existe uma ordenação total e estrita, dada pelo índice, dos p -broom-like com $n = p \cdot c$ vértices:

$$\lambda(K_p \sqcap B(c - 1; 1)) > \lambda(K_p \sqcap B(c - 2; 2)) > \dots > \lambda(K_p \sqcap B(1; c - 1)) .$$

Teorema 4.2. *Sejam $p \geq 3$ e $c \geq 2$ inteiros. Então:*

$$\lambda(K_p \sqcap B(a - 1; c - a + 1)) < \lambda(K_p \sqcap B(a; c - a)) ,$$

para todo $2 \leq a \leq c - 1$.

Prova:

A prova deste teorema se divide em duas partes. Na primeira, consideramos $r = c - a \geq 2$ e utilizamos o método de subdividir uma aresta de um caminho interno do grafo, ilustrado pela Figura 4.7:

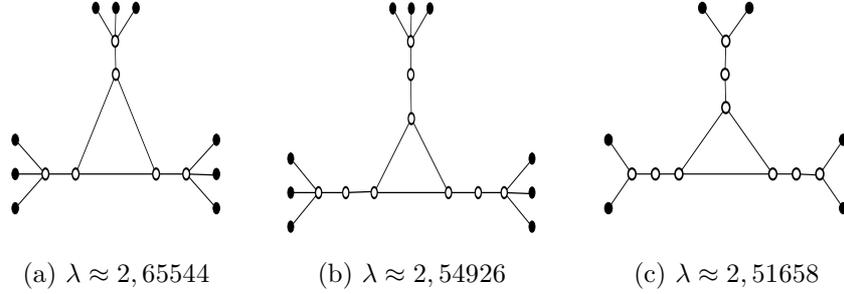


Figura 4.7: *Subdividindo uma aresta de cada caminho interno de $K_3 \square B(3; 2)$*

Se $r = c - a \geq 2$, $K_p \square B(a; r)$ possui p caminhos internos, cada qual sendo dado pelas arestas do caminho P_r contido na vassoura enraizada $B(a; r)$. Como o grafo conexo $K_p \square B(a; r)$ não é uma dupla vassoura $D(2; t; 2)$, do Lema 2.8, temos que, ao subdividirmos uma aresta de cada um destes caminhos, o índice do grafo obtido, a saber $K_p \square B(a; r + 1)$, será estritamente menor que o índice do grafo original. Como $K_p \square B(a - 1; r + 1)$ é subgrafo próprio de $K_p \square B(a; r + 1)$ e ambos são conexos, da Proposição 2.1, segue que o índice de $K_p \square B(a - 1; r + 1)$ é estritamente menor que o índice de $K_p \square B(a; r + 1)$. Logo, provamos, neste caso, que $\lambda(K_p \square B(a - 1; c - a + 1)) < \lambda(K_p \square B(a; c - a))$, para todo $2 \leq a \leq c - 1$.

Consideramos, agora, que $r = c - a = 1$, então $K_p \square B(a; 1)$ coincide com $K_p \circ \overline{K_a}$, cujo índice r_1 é a maior raiz de $p_1(x) = x^2 - (p - 1)x - a$. De (2.12), temos que o polinômio característico $q(x)$ de $K_p \square B(a - 1; 2)$ é dado pela fórmula

$$q(x) = [p_{S_a}(x)]^p p_{K_p} \left(\frac{p_{S_{a+1}}(x)}{p_{S_a}(x)} \right).$$

Como $p_{S_a}(x) = x^{a-2}(x^2 - a + 1)$ e $p_{K_p} = (x + 1)^{p-1}(x - p + 1)$, deduzimos que

$$\begin{aligned} q(x) &= x^{(a-2)p} (x^2 - a + 1)^p p_{K_p} \left(\frac{x(x^2 - a)}{x^2 - a + 1} \right) = \\ &= x^{(a-2)p} (x^2 - a + 1)^p \left[\frac{x(x^2 - a) + x^2 - a + 1}{x^2 - a + 1} \right]^{p-1} \left[\frac{x(x^2 - a) - (p-1)(x^2 - a + 1)}{x^2 - a + 1} \right] = \\ &= x^{(a-2)p} [x(x^2 - a) + x^2 - a + 1]^{p-1} [x(x^2 - a) - (p-1)(x^2 - a + 1)]. \end{aligned}$$

Logo, sendo uma raiz simples de $q(x)$, o índice r_2 de $K_p \square B(a - 1; 2)$ será a maior raiz de $p_2(x) = x(x^2 - a) - (p - 1)(x^2 - a + 1)$. Como queremos provar que $r_2 < r_1$, basta verificar que $p_1(r_2) < 0$. Sendo $r_2 > 0$, verificaremos que $r_2 p_1(r_2) < 0$:

$p_1(r_2) = r_2^2 - (p - 1)r_2 - a$ e, portanto, $r_2 p_1(r_2) = r_2^3 - (p - 1)r_2^2 - ar_2 = r_2(r_2^2 - a) - (p - 1)(r_2^2 - a + 1) + (p - 1)(-a + 1) = p_2(r_2) - (p - 1)(a - 1)$. Donde, $r_2 p_1(r_2) = -(p - 1)(a - 1)$ é, de fato, negativo. ■

Como exemplo, ordenamos na Figura 4.8 os grafos 3-*broom-like* com 15 vértices.

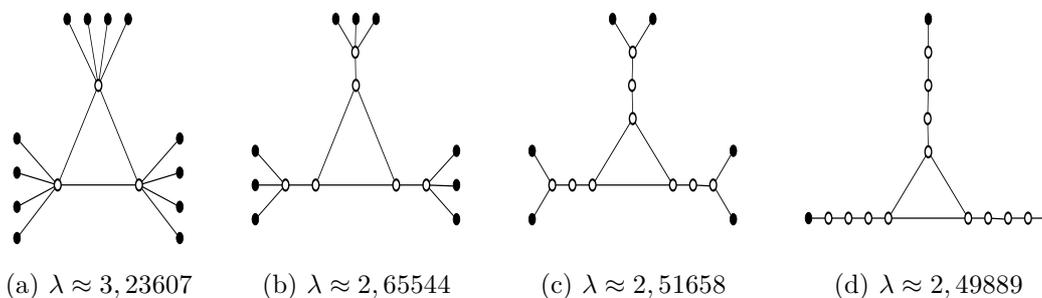


Figura 4.8: Ordenação dos grafos 3-*broom-like* com 15 vértices

Capítulo 5

Investigando o índice em árvores

No Capítulo 3, mostramos a necessidade de se obter novos e mais ajustados limites (superior ou inferior) para o índice de um grafo pertencente a uma família restrita. Em nossos estudos, buscando melhores limites para o índice de grafos conexos, obtemos novos resultados, especialmente para certas famílias de árvores, que são apresentados no capítulo subsequente. Dentre estes resultados, damos novas cotas para o índice de algumas árvores e determinamos as árvores extremas para estas cotas. Para que haja uma melhor compreensão da contribuição destes resultados, consideramos necessário fazer um levantamento das melhores cotas, existentes na literatura, para o índice de uma árvore.

Deste modo, iniciamos este capítulo apresentando um *survey* sobre o problema extremal em árvores. Em algumas famílias, abordamos também o problema de ordenação por meio do índice, resultando que, nestas famílias, não existem pares coespectrais de árvores não isomorfas. Na segunda seção, introduzimos o algoritmo de Jacobs e Trevisan [73] para o cálculo de polinômio característico de uma árvore, o qual será imprescindível na obtenção dos resultados do Capítulo 6. Este algoritmo é uma ferramenta útil para se localizar o índice de uma árvore em um intervalo de números reais. Também nesta seção, apresentamos as principais propriedades de polinômios de Chebyshev de segundo tipo, uma vez que estes aparecem naturalmente quando aplicamos o algoritmo de Jacobs e Trevisan para localizar o índice de uma árvore de diâmetro grande e do tipo "*alongada*", como ocorre com as árvores *starlike*, o que iremos constatar no próximo capítulo.

5.1 Problema extremal em árvores

No Capítulo 3 vimos que o índice de uma árvore T , com n vértices, é limitado superiormente por $\sqrt{n-1}$, atingindo o limite somente no caso da árvore ser uma estrela. Das e Kumar [45] dão um limite superior mais preciso, observando que, para $n > 3$, este limite é estritamente inferior a $\sqrt{n-1}$, exceto para as estrelas:

Teorema 5.1. [45] *Seja T uma árvore com n vértices e grau máximo Δ atingido num vértice v . Seja $d_p = \max_{w \sim v} d_w$, então:*

$$\lambda(T) \leq \sqrt{n-1 - \frac{(\Delta + d_p - 1) - \sqrt{(\Delta + d_p - 1)^2 - 4(\Delta - 1)(d_p - 1)}}{2}}. \quad (5.1)$$

Ainda no Capítulo 3, vimos que o índice de um grafo é limitado superiormente pelo seu grau máximo Δ . Godsil ([52] apud [105]) provou que o índice de árvores com grau máximo $\Delta \geq 2$ é estritamente limitado por

$$\lambda(T) < 2\sqrt{\Delta - 1}. \quad (5.2)$$

Este limite aparece em [92], onde o autor determina o polinômio característico de uma *árvore de Bethe generalizada* e dá um limite, para árvores em geral, melhor que (5.2):

Teorema 5.2. [92] *Seja T uma árvore com grau máximo Δ , atingido num vértice u . Seja $k = e_u + 1$, onde e_u é a excentricidade de u . Para $1 \leq j \leq k - 1$, seja d_j o maior grau dos vértices que distam j arestas de u . Então, o índice de T satisfaz:*

$$\lambda(T) \leq \max\left\{ \max_{2 \leq j \leq k-2} \sqrt{d_j - 1} + \sqrt{d_{j-1} - 1}, \sqrt{d_1 - 1} + \sqrt{\Delta} \right\}. \quad (5.3)$$

De acordo com a definição dada por Stevanović [105], uma *árvore de Bethe (enraizada)* $\mathcal{B}_{\Delta,k}$, de grau máximo Δ e raio $k - 1$, é obtida recursivamente: a árvore $\mathcal{B}_{\Delta,1}$ consiste de um único vértice, o qual é raiz desta. Para $k \geq 2$, a árvore $\mathcal{B}_{\Delta,k}$ consiste de um vértice u (que será raiz desta) adjacente às raízes de $\Delta - 1$ cópias de árvores $\mathcal{B}_{\Delta,k-1}$. Na Figura 5.1, damos um exemplo. Observe que a raiz de uma árvore de Bethe terá grau $\Delta - 1$, enquanto os demais vértices não pendentos terão grau Δ . Ainda, $\mathcal{B}_{\Delta,1} = K_1$ e $\mathcal{B}_{\Delta,2} = S_\Delta$.

Em [105], o autor observa que toda árvore T de grau máximo Δ é subgrafo de uma árvore $\mathcal{B}_{\Delta,k}$, para algum $k \geq 1$. Logo, limites superiores para o índice de $\mathcal{B}_{\Delta,k}$ limitarão o índice de T . Ele usa este fato para provar a desigualdade (5.2) e observa que a sequência de árvores $\mathcal{B}_{\Delta,k}$ possuem índices convergindo para o limite superior $2\sqrt{\Delta - 1}$, conforme k cresce indefinidamente.

O conceito de árvore de Bethe generalizada, dada por Rojo [92], é análogo ao anterior exceto quanto aos graus dos vértices em níveis intermediários (entre a raiz e os vértices pendentos): na árvore de Bethe todos terão grau máximo Δ ; já na generalizada, o que importa é que em cada nível os vértices possuam o mesmo grau. (Veja Figura 5.1b.) Tanto árvore de Bethe quanto árvore de Bethe generalizada são árvores balanceadas de diâmetro par ([5], p. 46): uma árvore é dita *balanceada* quando todos os vértices, que estão a uma mesma distância dos vértices centrais,

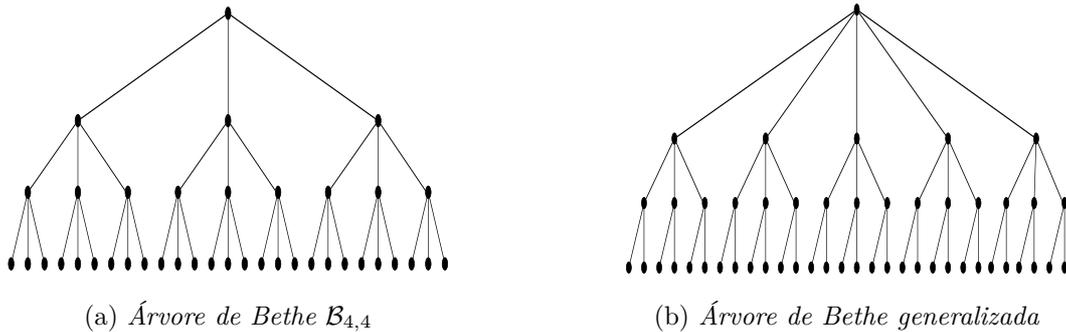


Figura 5.1: *Árvores balanceadas de diâmetro par*

possuem graus iguais. No caso da árvore ter diâmetro par, segue do teorema 2.1, que esta possui um único vértice central. Enraizando a árvore por este, teremos que todos os vértices do nível i tem mesmo grau d_i . Sendo k o raio desta, denotamos esta árvore por $T(r_1, r_2, \dots, r_k)$, onde $r_1 = d_0$ (grau do vértice central) e, para $1 \leq i \leq r - 1$, $r_i = d_{i-1} - 1$. Em outras palavras, uma árvore de Bethe generalizada é uma árvore balanceada de diâmetro par, e uma árvore de Bethe $\mathcal{B}_{\Delta,k}$ é uma árvore balanceada $T(\Delta - 1, \dots, \Delta - 1)$. A árvore de Bethe generalizada da Figura 5.1b é dada por $T(5, 3, 2)$. No Capítulo 6, utilizamos a noção de árvore de Bethe generalizada para obter um novo limite superior para o índice de árvores de diâmetro 4.

Rojo, Robbiano e outros autores deram continuidade ao estudo dos autovalores de uma árvore de Bethe em [90, 91, 93, 94, 97, 128]. Nestes artigos encontramos também limites superiores para o índice de uma árvore e de certos unicíclicos. Em [93] abordam-se grafos obtidos por duas cópias de um árvore de Bethe generalizada, cujas raízes são unidas por uma aresta. Em [97], Rojo e Medina penduram árvores de Bethe (não necessariamente iguais entre si) nos vértices de um caminho. Em [94], lida-se com cópias de uma tal árvore cujas raízes são os vértices de um ciclo. Em [128], Yin estuda os autovalores de um grafo obtido ao se pendurar, pelas raízes, cópias de uma árvore de Bethe generalizada nos vértices de um grafo completo. Em [90] os autores calculam o índice de uma árvore de Bethe, com pelo menos 3 vértices,

$$\lambda(\mathcal{B}_{\Delta,k}) = 2\sqrt{\Delta - 1} \cos \frac{\pi}{k + 1} \tag{5.4}$$

e dão limite superior para árvores em cada um dos casos: em que existe um vértice central de grau menor que Δ ([90], Teorema 10); ambos os vértices centrais têm grau máximo Δ ([90], Teorema 13). Em [91] encontramos resultados sobre os autovalores de árvores de Bethe generalizadas e valoradas. (Um grafo é dito *valorado* quando atribuem-se valores, em geral, inteiros positivos, às arestas.) Uma variação desta estrutura de grafos é definida por Fernandes *et al.* em [47], introduzindo-se arestas entre vértices de um mesmo nível, formando triângulos. Veja exemplo na Figura 5.2.

Também neste artigo são calculados os autovalores destes grafos. Recentemente, uma nova variação na estrutura de árvore de Bethe generalizada é dada no artigo [98], onde os autores identificam vértices de um mesmo nível com vértices de um outro grafo, e estudam seus autovalores. Em [85], o autor aplica árvores de Bethe generalizadas no estudo de modelos de *caminhos randômicos*, usados para descrever trajetórias de partículas quânticas. Considerando as árvores em que os vértices de níveis intermediários possuem mesmo grau $r + 1$, as quais são denominadas por *árvores de Cayley*, o autor calcula seus autovalores e estima valores para o índice, ao considerar o número de níveis da árvore ser relativamente grande comparado a $2r$.

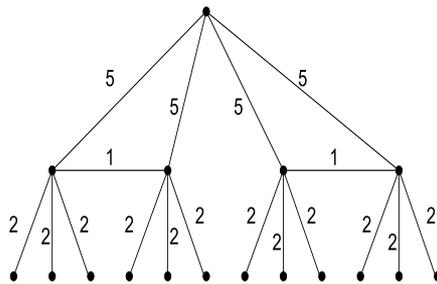


Figura 5.2: *Um grafo variante de árvore de Bethe valorada*

Caporossi *et al.* [42] estudam árvores geradoras de grafos bipartidos completos $K_{r,s}$, para $r \geq s \geq 1$ fixados, que sejam extremais. Neste estudo aparecem árvores conhecidas por vassouras e duplas vassouras. No Teorema 3 de [42], os autores provam que a árvore geradora maximal de $K_{r,s}$ é a dupla estrela $S_{r-1,s-1}$. No Teorema 4, provam que a árvore geradora minimal é obtida pela vassoura $D(2; r + s - 3; 1)$, caso $r = s + 2$ e $r + s \geq 6$, ou pela dupla vassoura $D(2; r + s - 4; 2)$, caso $r = s + 3$ e $r + s \geq 7$. Da Afirmação 2.2, vemos que o índice da vassoura $D(2; t - 3; 1)$ cresce monotonicamente com relação a t . Neste mesmo artigo, os autores provam que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \lambda(D(2; t - 3; 1)) = 2 \quad (5.5)$$

e conjecturam:

Conjectura 5.1. ([42], Conjectura 4) *Se $r = s + 4$, então a árvore geradora minimal é um caterpillar com 5 arestas pendentes. Se $r = s + 5$, então a árvore geradora minimal é um caterpillar com 6 arestas pendentes. (Uma árvore é um caterpillar se, ao retirarmos seus vértices pendentes, o que sobra é um caminho.)*

No Capítulo 6, estudamos o índice de uma dupla vassoura $D(a; r; b)$, obtendo novos limites, tanto superior quanto inferior, para este e determinamos quais são as duplas vassouras extremais.

De acordo com A. Chang e Q. Huang ([1], p. 176), Cvetkovič, em seu artigo [35], indicou várias direções de investigações sobre o espectro de grafos, dentre estas, o estudo de classificar e ordenar grafos por meio dos autovalores. No caso de árvores, com n vértices, Hofmeister [66] deu início a esta investigação, ordenando as cinco primeiras árvores maximais. Sendo a primeira S_n , as demais (veja Figura 5.3) são dadas pelo teorema:

Teorema 5.3. ([66], Teoremas 2-5) *Seja T uma árvore com $n \geq 4$ vértices, distinta de S_n . Então:*

1. $\lambda(T) \leq \sqrt{\frac{1}{2}(n-1 + \sqrt{n^2 - 6n + 13})}$ e a igualdade vale somente se $T - v = S_{n-1}$, para algum vértice pendente v de T . Neste caso, denotaremos T por S_n^2 .
2. Se $T \neq S_n^2$, então $\lambda(T) \leq \sqrt{\frac{1}{2}(n-1 + \sqrt{n^2 - 10n + 33})}$ e a igualdade vale somente se $T = S_n^3$.
3. Se $n \geq 5$, $T \neq S_n^2$ e $T \neq S_n^3$, então $\lambda(T) \leq \sqrt{\frac{1}{2}(n-2 + \sqrt{n^2 - 8n + 24})}$ e a igualdade vale somente se $T = S_n^4$.
4. Se $n \geq 6$, $T \neq S_n^2$, $T \neq S_n^3$ e $T \neq S_n^4$, então $\lambda(T) \leq \sqrt{\frac{1}{2}(n-1 + \sqrt{n^2 - 10n + 29})}$ e a igualdade vale somente se $T = S_n^5$ ou $T = S_8^{5*}$.

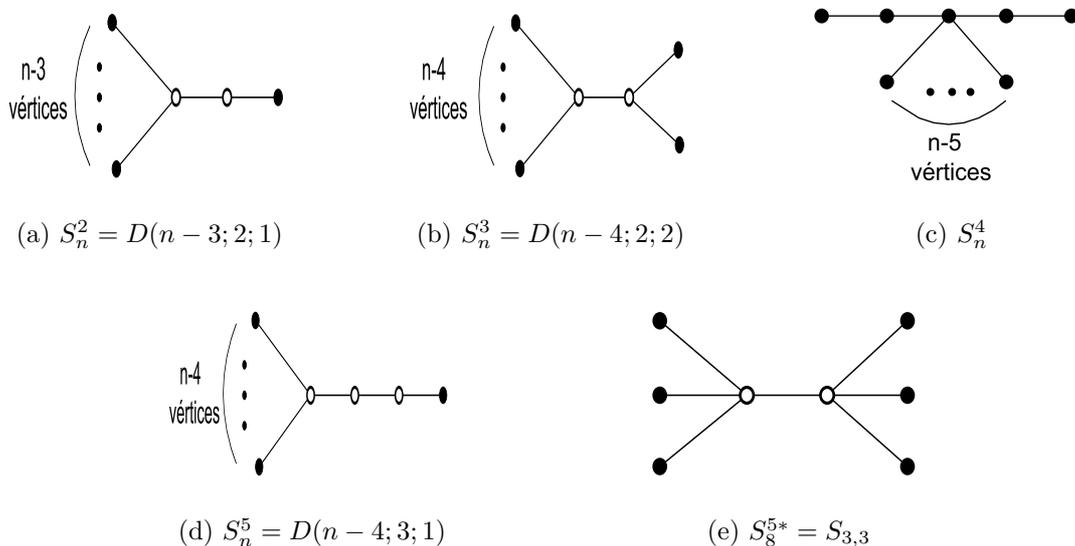


Figura 5.3: As cinco primeiras árvores maximais

Dando continuidade a esta ordenação An Chang e Huang ([1], p. 183) contribuíram com as sexta, sétima e oitava árvores maximais com pelo menos 11 vértices (Figura 5.4). Chen [31] prova que a sexta árvore (obtida por An Chang e Huang) continua a mesma se n for 9 ou 10. Lin e Guo [80] contribuem obtendo até a décima

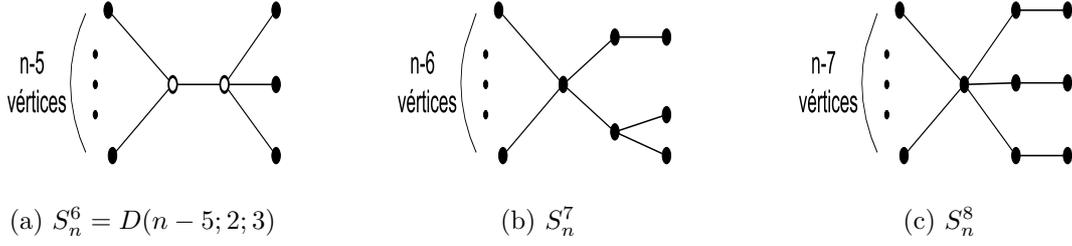


Figura 5.4: As sexta, sétima e oitava árvores maximais

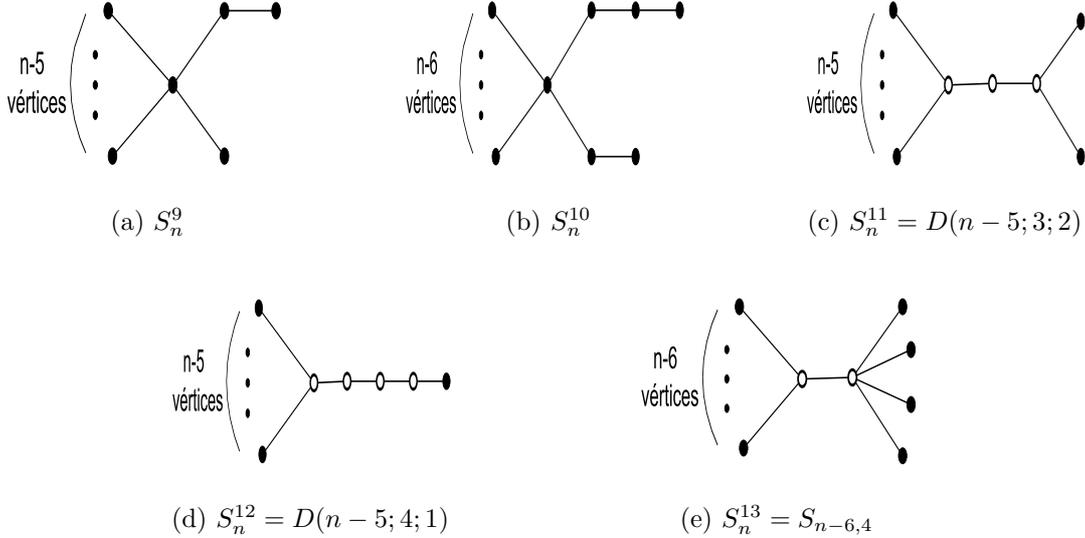


Figura 5.5: Da nona à décima terceira árvores maximais

terceira árvore maximal, com pelo menos 12 vértices (Figura 5.5). Em todos os artigos são calculados os índices destas árvores.

No artigo ([80], Teorema 3.2), Lin e Guo determinam árvores maximais e minimais dentre a classe $\mathcal{T}^\Delta(n)$, das árvores T_n^Δ com $n \geq 4$ vértices e grau máximo Δ . A árvore minimal é dada pela vassoura $D(\Delta - 1; n - \Delta; 1)$ e, para $\lceil \frac{n}{2} \rceil \leq \Delta \leq n - 1$, a maximal é obtida pela dupla estrela $S_{\Delta-1, n-\Delta-1}$. Em ([80], Teorema 3.3), eles provam que em $\mathcal{T}^\Delta(n)$, para $n \geq 4$ e $2 \leq \Delta \leq n - 1$, o índice cresce monotonicamente com relação ao grau máximo $\Delta \geq \lceil \frac{2n}{3} \rceil$:

$$\lambda(S_n) > \lambda(T_n^{n-2}) > \dots > \lambda(T_n^{\lceil \frac{2n}{3} \rceil}) > \lambda(S_{\lfloor \frac{n}{3} \rfloor, \lceil \frac{2n}{3} \rceil - 2}) \geq \lambda(T_n^k),$$

para $2 \leq k \leq \lceil \frac{2n}{3} \rceil - 1$, ocorrendo igualdade se, e somente se, $T_n^k = S_{\lfloor \frac{n}{3} \rfloor, \lceil \frac{2n}{3} \rceil - 2}$. Observam que o limite $\lceil \frac{2n}{3} \rceil - 1$ é o melhor possível: se $T_1 = S_8^5$ e $T_2 = S_8^{5*}$ (dadas pela Figura 5.3), então $\Delta(T_1) > \Delta(T_2) = \lceil \frac{2n}{3} \rceil - 2$, mas $\lambda(T_1) = \lambda(T_2) = \sqrt{\frac{7+\sqrt{13}}{2}}$. Também observam que este resultado não vale para grafos bipartidos em geral: se $B_1 = S_{3,1}$ e $B_2 = K_{3,3}$, então $4 = \Delta(B_1) > \Delta(B_2) = 3 \geq \lceil \frac{2n}{3} \rceil - 1$, mas $\lambda(B_2) = 3 > \lambda(B_1) = \sqrt{\frac{5+\sqrt{13}}{2}}$. O que os leva a propor o problema:

Problema 5.1. ([80], p. 455) Seja $\mathcal{B}(n, m)$ o conjunto de grafos bipartidos conexos com n vértices e m arestas. Dados B_1 e B_2 em $\mathcal{B}(n, m)$, existe uma constante c (que depende apenas de n ou m), próxima a $\lceil \frac{n+m}{3} \rceil$ ou $\lceil \frac{2m}{3} \rceil$, de modo a satisfazer, se $\Delta(B_1) > \Delta(B_2) \geq c$, então $\lambda(B_1) > \lambda(B_2)$?

Tanto An Chang e Huang ([1], Teorema 3.1) como, posteriormente, Simić e Zhou ([103], Teorema 1), ordenam totalmente o conjunto das árvores com n vértices e que possuem exatamente uma aresta não pendente, dado pelas duplas estrelas $S_{r,s}$, através de seus índices: se $1 \leq r \leq s$, $\lambda(S_{r,s}) < \lambda(S_{r-1,s+1})$. Em outras palavras:

$$\lambda(S_{1,n-3}) > \lambda(S_{2,n-4}) > \dots > \lambda(S_{\lfloor \frac{n-2}{2} \rfloor, \lceil \frac{n-2}{2} \rceil}).$$

Xu ([127] apud [3]) prova que uma árvore com $n = 2k$ vértices e acoplamento perfeito terá seu índice limitado por

$$\lambda(T) \leq \frac{1}{2} (\sqrt{k-1} + \sqrt{k+3}) \quad (5.6)$$

e a igualdade vale se, e somente se, $T = T_n(\frac{n}{2})$. (Veja a família de árvores $T_n(i)$ na Figura 5.6.)

Guo e Tan [60] limitam superiormente o índice de árvores, com n vértices, que possuem acoplamento máximo dado por i arestas, obtendo a árvore maximal $T_n(i)$:

$$\lambda(T) \leq \sqrt{\frac{1}{2} \left(n - i + 1 + \sqrt{(n - i + 1)^2 - 4(n - 2i + 1)} \right)} \quad (5.7)$$

e a igualdade ocorre somente se $T = T_n(i)$. Observamos que este resultado generaliza o anterior, dado por Xu, e que o resultado de Guo e Tan é reobtido por Hou e Li ([71], Teorema 3.3). Olhando para as árvores com n vértices e acoplamento dado por i arestas, Hou e Li ([71], Teoremas 3.6 e 3.8) determinam as segunda e terceira maximais, sendo, respectivamente, $B_n(i)$ e $C_n(i)$ da Figura 5.6, juntamente com seus índices ([71], Proposição 3.2).

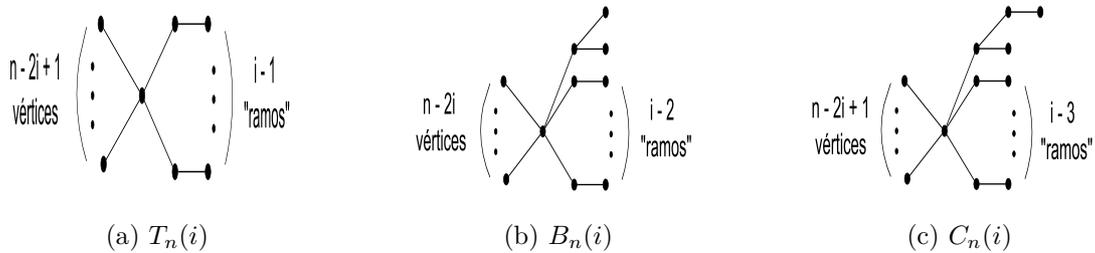


Figura 5.6: Árvores maximais com acoplamento de tamanho i

Wu *et al.* [126] estudam as árvores com n vértices e k arestas pendentes e provam ([126], Teorema 2) que, nesta classe, a árvore maximal é dada por $T_n[k]$,

obtida da seguinte forma: dividindo-se $n - 1$ por k , tem-se $n - 1 = qk + r$ e $0 \leq r \leq k - 1$. Adicionamos, nos vértices pendentes da estrela S_{k+1} , r caminhos P_{q+1} e $k - r$ caminhos P_q , como mostrado na Figura 5.7. Se $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor \leq k \leq n - 1$, então ([126], Teorema 5) o índice de $T_n[k]$ é

$$\lambda(T_n[k]) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(k + 1 + \sqrt{(k + 1)^2 - 4(2k - n + 1)} \right)}. \quad (5.8)$$

No intervalo $2 \leq k \leq n - 1$ os índices das árvores $T_n[k]$ são estritamente monótonos com relação a k ([126], Teorema 3): $\lambda(T_n[k - 1]) < \lambda(T_n[k])$.

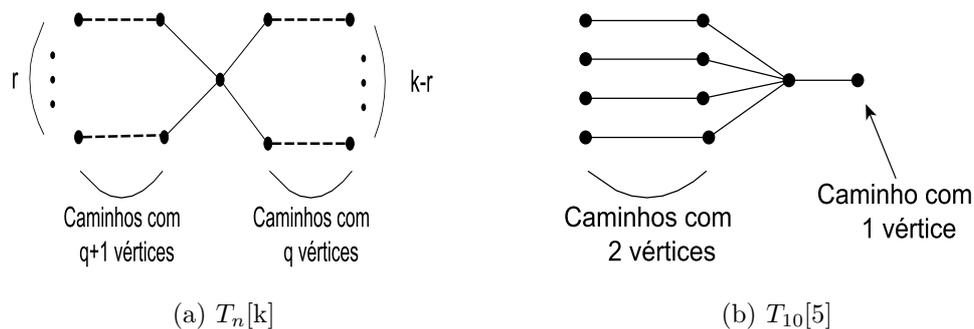


Figura 5.7: Árvores com k arestas pendentes

Observamos que uma árvore $T_n(i)$, com n vértices e acoplamento máximo dado por i arestas, é uma árvore $T_n[k]$, para $k = n - i$. Uma vez que $2i \leq n$, seu índice satisfaz (5.8), que coincide com a cota superior (5.7). Deste modo, Wu *et al.* generalizaram o resultado (5.7) de Guo e Tan.

Guo e Shao [59] estudam ordenação por índice na classe $\mathcal{T}_d(n)$ das árvores com n vértices e diâmetro d ($2 \leq d \leq n - 1$), obtendo: as $\lfloor \frac{d}{2} \rfloor + 1$ primeiras maximais, se $3 \leq d \leq n - 4$; as $\lfloor \frac{d}{2} \rfloor - 1$ primeiras maximais, se $d = n - 3$; as $\lfloor \frac{d}{2} \rfloor$ primeiras maximais, se $d = n - 2$. Observamos que $\mathcal{T}_{n-1}(n)$ se restringe ao caminho P_n , $\mathcal{T}_2(n)$ se restringe à estrela S_n e que $\mathcal{T}_3(n)$ é o conjunto das duplas estrelas com n vértices. Simić e Zhou [103] estudam os *caterpillars* com k "buquês", obtendo as $\lfloor \frac{d}{2} \rfloor$ primeiras árvores maximais em $\mathcal{T}_d(n)$, para $4 \leq d \leq n - 4$.

Simić *et al.* [104], provam que dentre as árvores com n vértices e diâmetro d as que possuem maior índice são os *caterpillars*. Eles determinam a maximal, restringindo o problema aos *caterpillars* com n vértices e diâmetro d , fixada a sequência de graus dos vértices. Em [108], Tan e Yao, desenvolvendo um estudo similar, obtêm a árvore maximal no conjunto de árvores valoradas com n vértices e diâmetro d , sendo dados os valores (mas, não a distribuição destes pelas arestas). Em [13], Belardo *et al.* estudam árvores minimais com n vértices e diâmetro $3 \leq d \leq 4$, reobtendo a minimal $S_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1, \lceil \frac{n}{2} \rceil + 1}$ no caso $d = 3$. As árvores minimais, no caso $d = 4$, são obtidas efetuando-se sucessivas coalescências de vassouras enraizadas $B(a; r)$ em um único

vértice, obtendo uma estrutura similar aos grafos *p-broom-like* definidos no Capítulo 4. Na Figura 5.8 damos alguns exemplos de árvores minimais de diâmetro 4. No Capítulo 6 determinamos a árvore maximal de diâmetro 4 e grau máximo $\Delta \geq 2$.

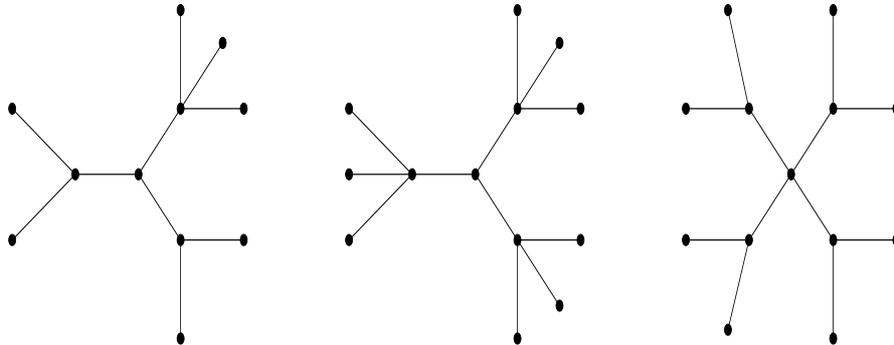


Figura 5.8: Exemplos de árvores minimais de diâmetro 4

Biyikoğlu e Leydold [19] estudam grafos conexos com n vértices e uma dada sequência $d_1 \geq \dots \geq d_n$ de graus dos vértices, obtendo alguns resultados gerais sobre a estrutura de grafos maximais nesta família. Restringindo esta família às árvores, eles mostram ([19], Teorema 2) que, ordenando os vértices v_i de acordo com a sequência de graus (i.e., $d(v_i) = d_i$), estes aparecem, no grafo maximal, numa *formação espiralada*: v_2, \dots, v_{d_1} são os vizinhos de v_1 ; $v_{d_1+1}, \dots, v_{d_1+d_2-1}$ são os vizinhos de v_2 ; e assim sucessivamente. Em [20], estudam árvores birregulares. Na Figura 5.9 damos a árvore maximal para a sequência de graus $(4^{(2)}, 3^{(4)}, 2^{(3)}, 1^{(10)})$.

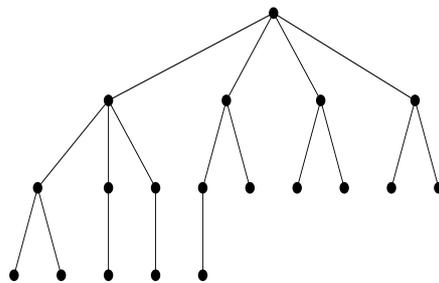


Figura 5.9: Árvore maximal para a sequência de graus $(4^{(2)}, 3^{(4)}, 2^{(3)}, 1^{(10)})$

Ainda neste artigo, os autores observam que, fixados o número n de vértices e o grau máximo Δ , esta classe é não vazia somente se $n = q(\Delta - 1) + 2$. Também observam que esta classe possui um único *caterpillar*. No Teorema 1, dão uma prova alternativa para um resultado atribuído a Belardo *et al.* [12]: uma árvore desta classe é minimal se, e somente se, for um *caterpillar*.

Tan [109] dá continuidade ao estudo de árvores, com n vértices e m arestas valoradas. Nesta classe, determina a árvore com índice maximal, tanto ao fixar a sequência de graus desta como ao restringir seu número de vértices *quase pendent* (i.e., vértices que são vizinhos de vértices pendent).

De modo recente, alguns autores vêm estudando o índice de grafos linha de árvores, dentre estas, os *caterpillars* [95] e árvores de Bethe generalizadas [96]. Em [73], Jacobs e Trevisan obtêm limites, tanto superior quanto inferior, para um *caterpillar regular*, dado pelo produto hierárquico $P_b \sqcap S_{k+1}$, do caminho P_b ($b \geq 2$) com a estrela $S_k + 1$ ($k \geq 1$), enraizada por seu vértice central. No Teorema 4 deste artigo provam:

$$\sqrt{k} - 1 < \lambda(P_b \sqcap S_{k+1}) < \sqrt{k} + 2 . \quad (5.9)$$

Em outra direção, voltada para o estudo de grafos *integrais*, isto é, cujos autovalores são inteiros, vemos o interesse em encontrar novas famílias de árvores integrais como mostram os artigos [25, 27, 34, 50, 124]. No Capítulo 6, daremos novas famílias de árvores integrais, de diâmetro 4. Um *survey* sobre árvores integrais é dado tanto por Balińska *et al.* [5] quanto por Wang [118, 119]. Também neste capítulo apresentamos famílias infinitas de árvores não integrais com índice inteiro.

5.2 Algoritmo para determinar autovalores de uma árvore

Para calcularmos o polinômio característico de um caminho podemos aplicar a fórmula de recorrência dada pelo Lema 2.4, da qual concluímos que

$$p_{P_n}(x) = xp_{P_{n-1}}(x) - p_{P_{n-2}}(x) , \quad (5.10)$$

para $n \geq 3$. Da Tabela 2.1, temos que $p_{P_1}(x) = x$ e $p_{P_2}(x) = x^2 - 1$, uma vez que os caminhos P_1 e P_2 são grafos completos. Portanto, $p_{P_n}(x) = U_n(\frac{x}{2})$, para $n \geq 1$, onde os polinômios $U_n(x)$, ditos *polinômios de Chebyshev de segundo tipo*, são definidos recursivamente por:

$$U_0(x) = 1, \quad U_1(x) = 2x \text{ e } U_n(x) = 2xU_{n-1}(x) - U_{n-2}(x) , \text{ se } n \geq 2 . \quad (5.11)$$

Várias propriedades destes polinômios constam na literatura; como referência recomendamos [16, 67, 88]. Algumas destas enunciamos na Proposição 5.1.

Proposição 5.1. ([67]) *Definindo as funções algébricas $z_1 = x + \sqrt{x^2 - 1}$ e $z_2 = x - \sqrt{x^2 - 1}$, para $x \in \mathbb{C}$, temos que o polinômio de Chebyshev $U_n(x)$, de segundo tipo e ordem n , é dado pela fórmula fechada*

$$U_n(x) = \frac{z_1^{n+1} - z_2^{n+1}}{z_1 - z_2} , \quad (5.12)$$

onde $U_n(x) = \sum_{k=0}^n z_1^{n-k} z_2^k$, caso $z_1 = z_2$. *Disto segue:*

- (a) As raízes de $U_n(x)$ ocorrem somente para x real com $|x| \leq 1$ e são, exatamente, dadas por $x_k = \cos \frac{k\pi}{n+1}$, para $1 < k < n$.
- (b) $U_n(-x) = (-1)^n U_n(x)$; $U_n(1) = n+1$; $U_{2k}(0) = (-1)^k$ e $U_{2k-1}(0) = 0$.
- (c) Para $x = \cos \theta$, $U_n(x) = \frac{\text{sen}(n+1)\theta}{\text{sen}\theta}$.

A fórmula de recorrência (5.10) poderia ter sido obtida de outra forma, usando um algoritmo de Jacobs e Trevisan [73, 74], ao qual nos referiremos por *AlgoJT*, descrito na Tabela 5.1. Conforme os autores mostram, o algoritmo AlgoJT tanto pode ser usado para se calcular o polinômio característico de uma árvore, como para se *localizar os autovalores* desta: dado um valor real, podemos determinar quantos autovalores da árvore serão menores, iguais ou maiores que este. Ilustraremos tais aplicações por meio de exemplos.

| Algoritmo AlgoJT | |
|--|---|
| Entrada: árvore T com n vértices e enraizada; valor real α | |
| Saída: matriz diagonal D congruente à matriz $A(T) + \alpha I_n$ | |
| 1 | inicializar $d(v) := \alpha$ para todo vértice v ; |
| 2 | ordenar os vértices das folhas à raiz; |
| 3 | para $k := 1, \dots, n$ realizar: |
| 4 | se v_k é um filho, então continua; |
| 5 | caso contrário: |
| 6 | se $d(c) \neq 0$ para todo filho de v_k , então |
| 7 | $d(v_k) := \alpha - \sum \frac{1}{d(c)}$, somando sobre todos os filhos c de v_k ; |
| 8 | caso contrário seleciona um filho c_j de v_k tal que $d(c_j) = 0$ e faça: |
| 9 | $d(c_j) := 2$; |
| 10 | $d(v_k) := -\frac{1}{2}$; |
| 11 | se v_k possui um pai u , então remova a aresta $v_k u$. |
| 12 | Fim do laço. |

Tabela 5.1: *Algoritmo AlgoJT de Jacobs e Trevisan*

No Exemplo 5.1 mostramos como obter o polinômio característico de uma árvore. Aplicamos o algoritmo na árvore enraizada da Figura 5.10a e entramos com um valor aleatório " x ", para o qual supomos nunca satisfazer o segundo "caso contrário" (oitava linha) do algoritmo. O polinômio característico $p(x)$ da árvore será igual ao "*produto dos valores obtidos em cada vértice*".

Exemplo 5.1. *Para facilitar o entendimento, alinhamos os vértices de um mesmo nível. O algoritmo é aplicado do maior nível para um nível imediatamente inferior, até chegarmos à raiz (vértice do nível 0). No primeiro passo (veja Figura 5.10b), atribuímos para cada vértice pendente do nível 3 um valor " x " (que corresponde à variável do polinômio característico). Passando, em cada etapa, para um nível*

imediatamente inferior, valoramos os vértices pendentes deste por "x" e os demais vértices v por: "x, subtraído pela soma dos inversos de cada valor que um vértice, adjacente e do nível imediatamente superior, recebeu". Assim sendo, no segundo passo (Figura 5.10c) o vértice receberá valor $y = x - \frac{1}{x} - \frac{1}{x} = x - \frac{2}{x} = \frac{x^2 - 2}{x}$. Já no terceiro (Figura 5.10d), o vértice não pendente será valorado por $z = x - \frac{1}{y} = \frac{xy - 1}{y} = \frac{x(x^2 - 3)}{x^2 - 2}$; enquanto no quarto (Figura 5.10e), a raiz terá valor $w = x - \frac{1}{z} - \frac{1}{x} = \frac{x^2 - 1}{x} - \frac{x^2 - 2}{x(x^2 - 3)} = \frac{x^4 - 5x^2 + 5}{x(x^2 - 3)}$.

Efetuada o produto dos valores obtidos em cada vértice, calculamos

$$p(x) = x^3 y z w = x^3 \cdot \frac{(x^2 - 2)}{x} \cdot \frac{x(x^2 - 3)}{x^2 - 2} \cdot \frac{(x^4 - 5x^2 + 5)}{x(x^2 - 3)} = x^2(x^4 - 5x^2 + 5) .$$

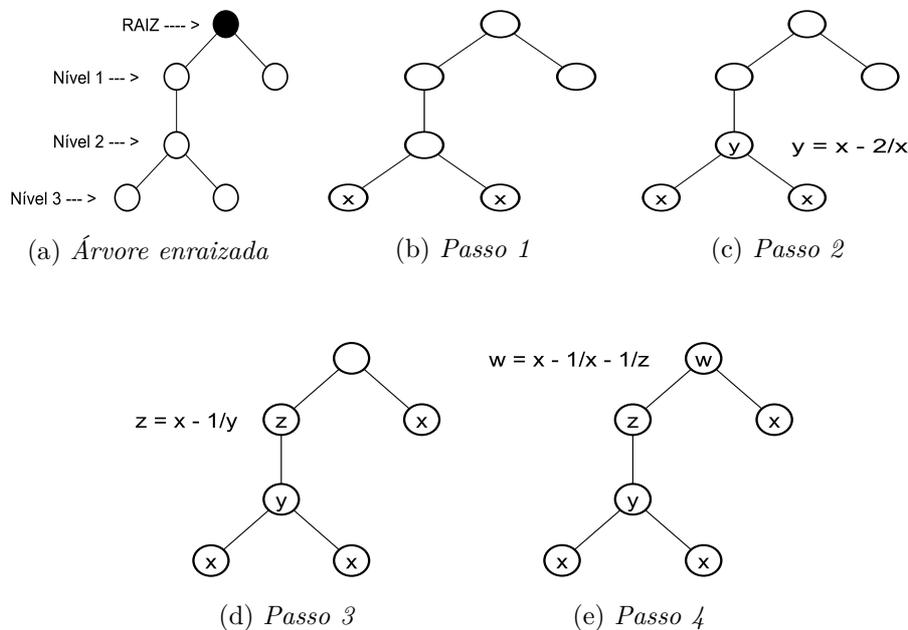


Figura 5.10: Algoritmo AlgoJT para determinar o polinômio característico de uma árvore

Uma observação pertinente é que o algoritmo não depende da escolha da raiz da árvore, podendo-se, inclusive, escolher como raiz um vértice pendente.

No Exemplo 5.2 aplicamos AlgoJT para localizar os autovalores da árvore da Figura 5.10a, determinando em quais intervalos da reta estes se encontram e quantos deles existem em cada um destes intervalos. Para tal, aplicamos o algoritmo em um valor real α . No final do processo, contamos o número de *valores positivos* obtidos. Este corresponderá ao número de autovalores da árvore que são *menores* que α . De mesmo modo, o número de *valores negativos* corresponderá ao número de autovalores que são *maiores* que α ; o número de *valores nulos*, ao número de autovalores *iguais* a α .

Exemplo 5.2. Considerando a árvore enraizada da Figura 5.10a, verificamos se 2 é autovalor desta. Procedendo conforme explicado no Exemplo 5.1, substituindo "x" por 2, aplicamos o algoritmo (veja Figura 5.11). Como obtivemos somente valores positivos (veja Figura 5.11c), concluímos que os autovalores desta árvore são todos menores que 2. Sendo qualquer árvore um grafo bipartido, temos que seus autovalores estarão, portanto, no intervalo $(-2, 2)$ da reta.

Será que 1 é autovalor desta árvore? Procedendo de modo análogo obtemos os valores $1, 1, 1, 2, -1, -\frac{1}{2}$ nos vértices. Logo, há quatro autovalores menores que 1 e 2 maiores que 1. De onde concluímos que o índice desta se situa no intervalo $(1, 2)$ da reta e, portanto, não é inteiro. Ainda, como o índice é autovalor simples e 0 tem multiplicidade 2 (veja Exemplo 5.1), temos que esta árvore possui exatamente 5 autovalores distintos: um deles é 0, dois se encontram em $(1, 2)$ e os outros dois se encontram em $(-2, -1)$.

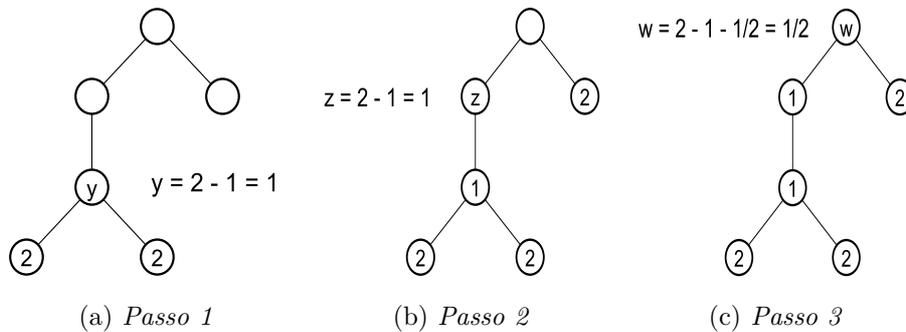


Figura 5.11: Algoritmo AlgoJT para localizar autovalores de uma árvore

O exemplo anterior mostra que o algoritmo pode ser usado tanto para se obter uma cota real estritamente superior, ou inferior, para o índice de uma árvore, assim como concluir que esta não é integral, sem precisar determinar todos os seus autovalores. Na Afirmação 5.1 destacamos as condições necessárias, e suficientes, para que o algoritmo estabeleça uma cota para o índice.

Afirmação 5.1. O valor real "x" é uma cota estritamente superior para o índice de uma árvore se, e somente se, ao aplicarmos o algoritmo AlgoJT temos somente valores positivos. O valor real "x" é uma cota estritamente inferior para o índice de uma árvore se, e somente se, ao aplicarmos o algoritmo AlgoJT temos pelo menos um valor negativo.

Casos de particular interesse na aplicação de AlgoJT ocorrem quando o valor x anula um vértice durante o processo, implicando que este valor é um autovalor da árvore. No Exemplo 5.3, obtemos os autovalores da dupla vassoura $D(2; 2; 2)$, dados pela Proposição 4.1: $2, 1, 0, -1, -2$, sendo 0 autovalor com multiplicidade 2.

Quando aplicamos este algoritmo com o valor 0, anulamos um vértice v que não é raiz, satisfazendo a condição do segundo "caso contrário" (oitava linha). Neste caso, o algoritmo procede de modo diferente dos exemplos anteriores:

1. Somente um vértice v' , do mesmo nível que v , receberá valor 2 e seu adjacente u , de nível inferior, receberá valor $-\frac{1}{2}$. Estes valores 2 e $-\frac{1}{2}$, podem ser substituídos por outros dois com sinais opostos, como 1 e -1 . Isto não irá alterar a contagem de valores positivos e negativos no final.
2. Caso o vértice u seja adjacente a um vértice w , de nível inferior, então será removida a aresta uw , desconectando a árvore. O algoritmo prossegue, sendo aplicado na árvore a qual o vértice w pertence.

Exemplo 5.3. Se aplicamos o Algoritmo para verificar que 1 é autovalor de $D(2; 2; 2)$, anulamos somente a raiz (vértice em negrito), conforme mostrado na Figura 5.12a. E o mesmo ocorre se entrarmos com o valor inicial 2 (veja Figura 5.12b). A diferença do primeiro caso para o segundo é a existência de exatamente uma entrada negativa no primeiro, enquanto não há entradas negativas no segundo. Isto implica que 1 é o segundo maior autovalor de $D(2; 2; 2)$ e que 2 é o índice desta árvore, ambos com multiplicidade 1. Donde, 2, 1, -1 e -2 serão autovalores simples de $D(2; 2; 2)$.

Ao aplicarmos o Algoritmo para o valor 0, anulamos um vértice que não é raiz, pois todos os vértices do nível 2 receberão o valor 0. Prosseguindo de acordo com a alteração, ilustrada pela Figura 5.12c, obtemos duas entradas nulas somente. Portanto, 0 é autovalor de $D(2; 2; 2)$ com multiplicidade 2, computando, assim, os autovalores desta árvore.

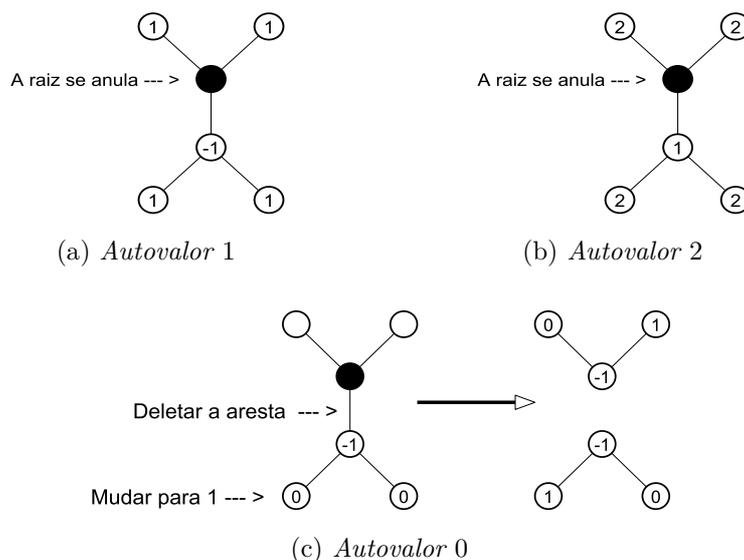


Figura 5.12: Algoritmo Algoritmo para determinar autovalores de $D(2; 2; 2)$

Observamos que x é autovalor da árvore se, e somente se, o algoritmo AlgoJT anula um vértice no final do processo, o que nos leva a concluir:

Afirmção 5.2. *O valor real " x " é o índice de uma árvore (enraizada) se, e somente se, ao aplicarmos o Algoritmo AlgoJT obtemos o valor nulo para a raiz e os demais valores, positivos.*

Fazendo uso de AlgoJT, obtivemos novos resultados para o índice de uma árvore, nas famílias de duplas vassouras e de árvores *starlike*, que apresentamos no Capítulo 6. Este algoritmo poderia também ser usado para dar provas alternativas de outros resultados já conhecidos como, por exemplo, para reobter a cota superior (5.2) de Godsil.

Capítulo 6

Novos resultados sobre o índice de uma árvore

Neste capítulo estudamos a integralidade do índice de certas famílias de árvores. Em algumas destas famílias, aplicamos o algoritmo AlgoJT para obter novas cotas para o índice ou para determinar quais estruturas possuem índice inteiro. Construímos famílias de árvores não integrais com índice inteiro e famílias de árvores integrais.

Na primeira seção caracterizamos quando uma árvore de Bethe possui índice inteiro. Com isto provamos, no Corolário 6.1, que uma árvore, com grau máximo $\Delta \geq 2$ e diâmetro $d \leq 8$, terá seu índice limitado superiormente por $\sqrt{3(\Delta - 1)}$, desde que, caso $d = 7$ ou 8 , pelo menos um de seus vértices centrais não possua grau máximo. Ainda, a igualdade é atingida somente se a árvore for a árvore de Bethe $\mathcal{B}_{\Delta,5}$ e, caso tenha índice inteiro, $3(\Delta - 1)$ for um quadrado perfeito.

Na segunda seção exibimos, no Corolário 6.2, duas famílias infinitas de árvores *starlike* não integrais que possuem índice inteiro. (As árvores *starlike* integrais são conhecidas pela literatura.) Supondo seu grau máximo $\Delta \geq 2$, é sabido que o índice λ desta satisfaz $\sqrt{\Delta} \leq \lambda < \sqrt{\Delta + 2}$. Estudaremos, portanto, o caso em que o índice $\sqrt{\Delta + 1}$. No Teorema 6.2, damos condições em que o índice de uma árvore *starlike* é igual, menor ou maior que $\sqrt{\Delta + 1}$. Conseqüentemente, obtemos, no Corolário 6.3, que o índice de quase toda vassoura generalizada está estritamente entre $\sqrt{\Delta}$ e $\sqrt{\Delta + 1}$ e, portanto, não é inteiro. As vassouras generalizadas com índice maior que $\sqrt{\Delta + 1}$ são mostradas na Figura 6.6.

No Teorema 6.3 da Seção 3, provamos que o índice de uma dupla vassoura, com diâmetro $d \geq 4$, também se situa entre $\sqrt{\Delta}$ e $\sqrt{\Delta + 1}$, podendo ser igual a $\sqrt{\Delta + 1}$. No Corolário 6.4, determinamos quais destas possuem índice inteiro. Como uma dupla vassoura é integral somente se seu diâmetro for 3, nenhuma destas será integral. As duplas vassouras de diâmetro 3, também chamadas de duplas estrelas, que são integrais são conhecidas na literatura. Assim, dedicamos o final desta seção

para exibir duas famílias infinitas de duplas estrelas não integrais com índice inteiro. Estas famílias foram construídas através da solução da equação diofantina $x^2 - tx - y^2 = 0$, dada no Lema 6.3. Na Figura 6.8, damos os menores exemplos de duplas estrelas nestas famílias. Ambos possuem um grande número de vértices, implicando na complexidade de obter tais famílias por buscas exaustivas.

Finalmente, na Seção 4 estudamos a integralidade do índice de árvores de diâmetro 4. O estudo de tais árvores integrais foi amplamente abordado pela literatura. Começamos este estudo com resultados mais gerais a respeito de seus autovalores e provamos, no Teorema 6.4, a recíproca do Teorema 3.1.7 de [118], observando a validade de resultado similar se somente a integralidade do índice for requisitado. Na primeira subseção, obtemos, no Teorema 6.5, uma cota superior mais ajustada para estas árvores, em função de seu grau máximo Δ , caracterizando sua árvore maximal. Sendo esta árvore maximal uma árvore balanceada, de diâmetro 4, dedicamos a subseção seguinte ao estudo de propriedades espectrais destas: exibimos pares não coespectrais destas que possuem mesmo índice inteiro e mesmos número de vértice e grau máximo, sendo ambas, ou apenas uma delas, integrais; caracterizamos as árvores maximais que possuem índice inteiro e aquelas que são integrais; estudamos a perturbação sobre o seu índice, devido a uma variação nos parâmetros que a definem. Na última subseção, construímos uma nova e infinita família de árvores integrais de diâmetro 4. Os menores exemplos desta nova família são mostrados na Figura 6.16. Novamente, devido ao grande número de vértices destes, mostramos a dificuldade em se determinar esta família por uma busca computacional.

6.1 Limite superior para o índice de uma árvore que possui índice inteiro

Nos Capítulos 3 e 5 mostramos várias cotas para o índice de um grafo em função de invariantes inteiros deste (grau máximo ou mínimo, número de vértices ou arestas). Uma destas cotas (5.2), dada por Godsil, limita superiormente o índice de uma árvore com grau máximo $\Delta \geq 2$ por $2\sqrt{\Delta - 1}$. Como observado, esta cota nunca é atingida e também não pode ser melhorada, já que as árvores de Bethe $\mathcal{B}_{\Delta,k}$ (de grau máximo Δ e raio $k - 1$) têm seu índice se aproximando de $2\sqrt{\Delta - 1}$, conforme k cresce indefinidamente.

No Lema 6.1, caracterizamos as árvores de Bethe com índice inteiro (com pelo menos 3 vértices), mostrando que seus índices são limitados por $\sqrt{3(\Delta - 1)}$, que é uma cota mais ajustada que $2\sqrt{\Delta - 1}$.

A seguir, fornecemos uma prova alternativa e bastante simples de que $2\sqrt{\Delta - 1}$ limita superiormente o índice de uma árvore, com pelo menos 3 vértices, usando

o algoritmo AlgoJT.

Teorema 6.1. ([105]) *Seja T uma árvore com grau máximo $\Delta \geq 2$. Então,*

$$\lambda(T) < 2\sqrt{\Delta - 1}.$$

Prova:

Dada uma árvore T , com grau máximo $\Delta \geq 2$ e raio r , esta será subgrafo da árvore de Bethe $\mathcal{B}_{\Delta,k}$, para $k \geq r+1$. Da Proposição 2.1, temos que $\lambda(T) \leq \lambda(\mathcal{B}_{\Delta,k})$. Logo, basta verificar que $\lambda(\mathcal{B}_{\Delta,k}) < 2\sqrt{\Delta - 1}$. Aplicamos o algoritmo AlgoJT à árvore $\mathcal{B}_{\Delta,k}$, com o valor " $x = 2\sqrt{\Delta - 1}$ ". Consideramos a árvore $\mathcal{B}_{\Delta,k}$ enraizada em seu vértice central, como mostrado na Figura 6.1.

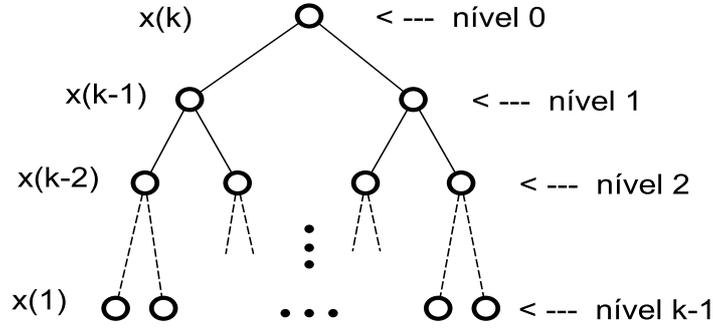


Figura 6.1: *Aplicando o algoritmo AlgoJT numa árvore de Bethe*

Todos os vértices pendentos (do nível $k - 1$) receberão o valor $x_1 = 2\sqrt{\Delta - 1}$. Se $k = 1$, a árvore é a estrela S_Δ e, conseqüentemente, seu índice $\lambda = \sqrt{\Delta - 1}$ é menor que $2\sqrt{\Delta - 1}$. Supondo, $k \geq 2$, os vértices do nível $k - 2$ receberão valor $x_2 = x_1 - \frac{\Delta - 1}{x_1} = \frac{3}{2}\sqrt{\Delta - 1}$, que é positivo. Por indução, os vértices de um nível $k - j$, para $2 \leq j \leq k - 1$, receberão o valor $x_j = x_1 - \frac{\Delta - 1}{x_{j-1}} = \frac{j+1}{j}\sqrt{\Delta - 1}$, que é positivo. Como todos os vértices receberão valores positivos, segue da Afirmação 5.2, que o índice de $\mathcal{B}_{\Delta,k}$ é menor que $2\sqrt{\Delta - 1}$. ■

No Lema 6.1 caracterizamos as árvores de Bethe, com pelo menos 3 vértices, que possuem índice inteiro, calculando seus índices em função de seu grau máximo Δ .

Lema 6.1. *Dados inteiros $\Delta \geq 2$ e $k \geq 2$, seja $\mathcal{B}_{\Delta,k}$ uma árvore de Bethe com índice λ inteiro. Então, somente uma das alternativas ocorre:*

- (i) $\Delta - 1$ é um quadrado perfeito e $k = 2$;
- (ii) $2(\Delta - 1)$ é um quadrado perfeito e $k = 3$;
- (iii) $3(\Delta - 1)$ é um quadrado perfeito e $k = 5$.

Prova:

Se $k = 2$, a árvore de Bethe é a estrela S_Δ , que possui índice $\lambda = \sqrt{\Delta - 1}$. Logo, λ é inteiro se, e somente se, $\Delta - 1$ é um quadrado perfeito.

Se $k \geq 3$, o índice de $\mathcal{B}_{\Delta,k}$, dado por (5.4), é $\lambda = 2\sqrt{\Delta - 1} \cos \frac{\pi}{k+1}$. Sendo λ um inteiro, $\lambda^2 = 4(\Delta - 1) \cos^2 \frac{\pi}{k+1}$ também será um inteiro. Em particular, $\cos^2 \frac{\pi}{k+1}$ é um racional $\frac{a}{b}$, dado por a, b inteiros positivos. Considerando $\theta = \frac{\pi}{k+1}$, $\cos^2 \theta = \frac{\cos 2\theta + 1}{2} = \frac{a}{b}$. Donde, $\cos 2\theta = \frac{2a - b}{b}$. Como 2θ é um ângulo racional (ou seja, um ângulo da forma $2\pi r$, para algum racional r) cujo cosseno também é racional, segue de [75], que $\cos 2\theta \in \{1, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}, -1\}$. Logo, a menos de ângulo giro, $\theta \in \{0, \frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}\}$. Como θ é um ângulo agudo, só pode ocorrer uma das alternativas: $k = 2$, ou $k = 3$, ou $k = 6$. Se $k = 3$, $\lambda = \sqrt{2(\Delta - 1)}$; se $k = 5$, $\lambda = \sqrt{3(\Delta - 1)}$. E isto prova o lema. \blacksquare

Uma consequência imediata do Lema 6.1, dada pela Proposição 6.1, é que uma árvore de Bethe com índice inteiro, e pelo menos 3 vértices, tem seu índice limitado superiormente por $\sqrt{3(\Delta - 1)}$. Este novo limite é menor do que a cota dada pelo Teorema 6.1. Ainda, enquanto a cota anterior nunca é atingida, o novo limite é atingido somente por árvores de Bethe, com índice inteiro, de diâmetro 8.

Proposição 6.1. *Dados inteiros $\Delta \geq 2$ e $k \geq 2$, seja $\mathcal{B}_{\Delta,k}$ uma árvore de Bethe com índice λ inteiro. Então,*

$$\lambda \leq \sqrt{3(\Delta - 1)}, \quad (6.1)$$

onde a igualdade ocorre se, e somente se, $k = 5$ e $3(\Delta - 1)$ é um quadrado perfeito.

No Corolário 6.1 estendemos a cota superior (6.1) para o índice das árvores T de grau máximo $\Delta \geq 2$, que possuem índice inteiro e satisfazem a uma das condições: ou T tem diâmetro $d \leq 6$, ou tem diâmetro $7 \leq d \leq 8$ e um de seus vértices centrais não possui grau máximo. Nesta classe de árvores, existe árvore maximal, dada pela árvore de Bethe $\mathcal{B}_{\Delta,5}$, desde que $3(\Delta - 1)$ seja um quadrado perfeito.

Corolário 6.1. *Seja T uma árvore com grau máximo $\Delta \geq 2$ e índice inteiro λ . Se T satisfaz a uma das condições:*

- (i) T possui diâmetro $d \leq 6$;
- (ii) T possui diâmetro 7 ou 8 e pelo menos um de seus vértices centrais tem grau menor que Δ ;

então

$$\lambda \leq \sqrt{3(\Delta - 1)},$$

cujas igualdade será atingida se, e somente se, $T = \mathcal{B}_{\Delta,5}$ e $3(\Delta - 1)$ for um quadrado perfeito.

Prova:

Sendo d o diâmetro de T , temos que seu raio $r = \frac{d}{2}$, caso d seja par, e $r = \frac{d+1}{2}$, caso contrário. Se um dos vértices centrais de T não tem grau máximo, T é subárvore de $\mathcal{B}_{\Delta, r+1}$. Neste caso, como $d \leq 8$, $r \leq 4$ e, portanto, T é subárvore de $\mathcal{B}_{\Delta, 5}$.

Se todo vértice central de T possuir grau máximo, então T será uma subárvore de $\mathcal{B}_{\Delta, r+2}$. Neste caso, sendo $d \leq 6$, concluímos que $r + 2 \leq 5$.

Como T possui pelo menos $\Delta \geq 2$ e $k \geq 2$, da Proposição 6.1, segue a prova. ■

Nas seções que seguem nos restringimos a algumas classes de árvores, obtendo limites, inferior e superior, do índice mais ajustados se comparados a limites conhecidos na literatura. Observamos que os limites que obtemos para estes grafos são menores ou iguais à cota (6.1), mesmo que estes não possuam índice inteiro.

Assim, é interessante investigar para quais outras árvores continua válido este limite.

6.2 Árvores *starlike* com índice inteiro

Watanabe e Schwenk [125] definem uma árvore *starlike* como sendo uma árvore homeomorfa a uma estrela, ou seja, obtida por sucessivas subdivisões de algumas arestas de uma estrela. Portanto, uma árvore *starlike* ou é um caminho ou é uma árvore com um único vértice de grau maior que 2. Neste mesmo artigo, os autores provam que uma árvore *starlike* é integral se, e somente se, esta é uma estrela, ou uma subdivisão de uma estrela, e possui índice inteiro. Logo, as demais árvores *starlike* que possuem índice inteiro não são integrais. Nesta seção determinamos exatamente quais são estas. A fim de obter precisamente a estrutura destas, introduzimos a seguinte notação, observando:

Uma árvore *starlike* S , com pelo menos 2 vértices, tem grau máximo $\Delta \geq 1$ em um vértice v , o qual é único, caso $\Delta \geq 3$. Ao ser removido, este desconecta o grafo na união de Δ caminhos $P_{n_1}, \dots, P_{n_\Delta}$, ou seja, $S - v = \bigcup_{i=1}^{\Delta} P_{n_i}$. Seu número de vértices será, então, igual a $n = 1 + n_1 + \dots + n_\Delta$. Consideramos $n_i \geq n_{i+1} \geq 1$, para $1 \leq i \leq \Delta - 1$, e denotamos S por $S(n_1, \dots, n_\Delta)$. Eventualmente, observamos que um certo n_i se repete p vezes. Neste caso, escreveremos $S(n_1, \dots, n_{i-1}, \mathbf{p} \cdot \mathbf{n}_i, n_{i+p}, \dots, n_\Delta)$.

As *vassouras generalizadas* são árvores *starlike*, com pelo menos 3 vértices, que se escrevem na forma $S(n_1, (\Delta - 1) \cdot 1)$ ou na forma $S(n_1, n_2, (\Delta - 2) \cdot 1)$. Dentre estas destacamos: as vassouras $S(n_1, (\Delta - 1) \cdot 1)$; a estrela $S(\Delta \cdot 1)$, cujo índice é $\sqrt{\Delta}$; o caminho $P_n = S(n - 2, 1)$, com índice igual a $2 \cos(\frac{\pi}{n+1})$. Outra estrutura particular de árvore *starlike* é dada por $S(\Delta \cdot r)$, dita *balanceada*. Se $r = 2$, esta será subdivisão da estrela $S(\Delta \cdot 1)$ e terá índice igual a $\sqrt{\Delta + 1}$. Alguns exemplos são dados na Figura 6.2.

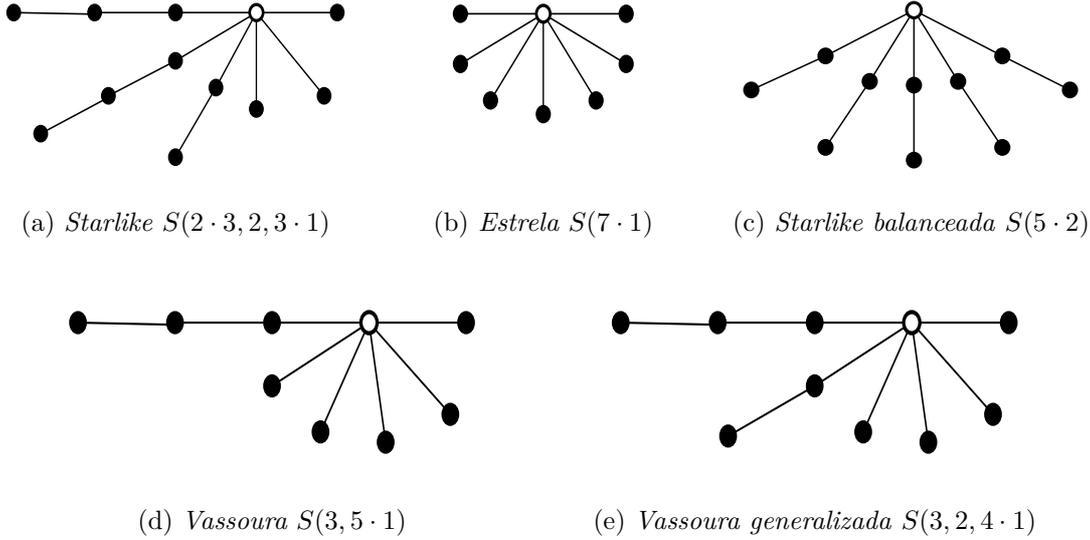


Figura 6.2: *Exemplos de árvores starlike*

Lepović e Gutman [77] provaram que o índice λ de uma árvore *starlike* com $\Delta \geq 2$ satisfaz:

$$\lambda < \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta-1}}. \quad (6.2)$$

Como, da conhecida desigualdade de Nosal [44], o índice de um grafo conexo de grau máximo Δ é maior ou igual a $\sqrt{\Delta}$, temos, de (6.2), que

$$\sqrt{\Delta} \leq \lambda < \sqrt{\Delta+2}, \quad (6.3)$$

se $\Delta \geq 2$. Observamos que (6.3) continua válido se $\Delta = 1$. Assim, λ é inteiro se, e somente se, $\lambda = \sqrt{\Delta}$ e Δ é um quadrado perfeito, ou $\lambda = \sqrt{\Delta+1}$ e $\Delta+1$ é um quadrado perfeito. Obviamente, se a árvore *starlike* não for uma estrela, conterá $S(\Delta \cdot 1)$ como subgrafo próprio e, portanto, seu índice será maior que $\sqrt{\Delta}$. Deste modo, estamos interessados em determinar para quais árvores *starlike* o índice é igual a $\sqrt{\Delta+1}$. Nesta busca, indentificamos, como enunciamos no Teorema 6.2, quando esta possui índice menor, igual ou maior que $\sqrt{\Delta+1}$.

No Capítulo 5, vimos que Wu *et al.* [126] estudaram as árvores com n vértices e k arestas pendentes, obtendo, nesta classe, a árvore maximal. Esta árvore, denotada por $T_n[k]$, coincide com a árvore *starlike* $S(r \cdot (q+1), (k-r) \cdot q)$, onde q e r são, respectivamente, o quociente e o resto da divisão de $n-1$ por k . Observamos que uma árvore *starlike*, de grau máximo Δ , possui exatamente Δ arestas pendentes e, portanto, seu índice λ é menor ou igual a $\lambda(T_n[\Delta])$. Como seu número de vértices é $n = \Delta + 1 + p$, para algum $p \geq 0$, se $n \geq 3$, a árvore *starlike* terá diâmetro menor ou igual a $p+2$. Se $p \leq \Delta$, então $\Delta \geq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ e seu *diâmetro será pequeno*. Neste caso, de (5.8), concluímos que $\lambda \leq \sqrt{\Delta+1}$. Com isto, podemos afirmar:

Afirmção 6.1. Se a árvore *starlike* S possuir grau máximo $\Delta \geq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$, então seu diâmetro d será menor ou igual a $\Delta + 2$ e seu índice λ satisfará:

- (i) $\lambda = \sqrt{\Delta}$, caso $d \leq 2$;
- (ii) $\sqrt{\Delta} < \lambda < \sqrt{\Delta + 1}$, caso $d \geq 3$ e $S \neq S(\Delta \cdot 2)$;
- (iii) $\lambda = \sqrt{\Delta + 1}$, caso $S = S(\Delta \cdot 2)$.

Note que, nas condições da afirmação acima, a estrutura da árvore *starlike* varia de $T_n[\Delta]$ à vassoura $S(n - \Delta, (\Delta - 1) \cdot 1)$, conforme seu diâmetro d aumenta. Na Figura 6.3, exemplificamos esta "variação", no caso da *starlike* possuir 8 vértices e grau máximo 4.

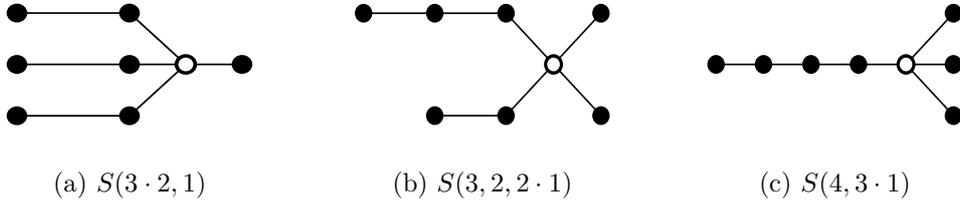


Figura 6.3: Árvores *starlike* com 8 vértices e grau máximo 4

A análise do índice de uma árvore *starlike*, de diâmetro qualquer, será feita através da sequência $n_1 \geq \dots \geq n_\Delta$ que a define. Em primeira instância, consideramos as árvores *starlike quase balanceadas*, que se escrevem na forma $S = S(p \cdot r, b \cdot 1)$, onde $b \geq 0$ e $p \geq 1$ tais que $\Delta = p + b \geq 3$, e $r \geq 2$. Note que, caso $b = 0$, subentende-se $S(p \cdot r, 0) = S(p \cdot r)$. Na Proposição 6.2 caracterizamos quando seu índice é maior, menor ou igual a $\sqrt{\Delta + 1}$, e que isto depende somente de b e r . Para tanto, faremos uso do algoritmo de Jacobs e Trevisan, AlgoJT, apresentado no Capítulo 5.

Proposição 6.2. Sejam $b \geq 0$, $p \geq 1$ e $r \geq 2$ inteiros tais que $\Delta = p + b \geq 3$, então a árvore *starlike* $S(p \cdot r, b \cdot 1)$, de grau máximo Δ , terá seu índice λ satisfazendo:

- (a) $\lambda = \sqrt{\Delta + 1}$, se $b = 0$ e $r = 2$, ou se $b = 1$ e $r = 3$;
- (b) $\lambda > \sqrt{\Delta + 1}$, se $b = 0$ e $r \geq 3$, ou se $b = 1$ e $r \geq 4$;
- (c) $\lambda < \sqrt{\Delta + 1}$, se $b = 1$ e $r = 2$, ou se $b \geq 2$.

Prova:

Aplicamos o algoritmo AlgoJT para deduzir quando o índice λ de $S(p \cdot r, b \cdot 1)$ é maior, menor ou igual a $x_1 = \sqrt{\Delta + 1}$, onde $\Delta = p + b \geq 3$. Para cada vértice da *starlike*, atribuímos um valor x_i , conforme mostrado na Figura 6.4, onde:

$$x_1 = \sqrt{\Delta + 1}; \quad x_i = x_1 - \frac{1}{x_{i-1}}, \quad \text{para } 2 \leq i \leq r; \quad x_{r+1} = x_1 - \frac{p}{x_r} - \frac{b}{x_1}. \quad (6.4)$$

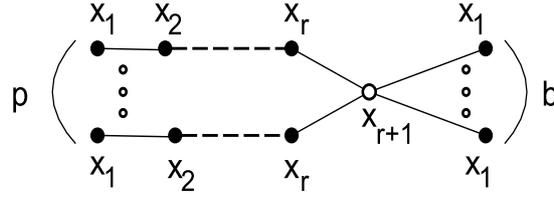


Figura 6.4: Aplicando o algoritmo AlgoJT na starlike $S(p \cdot r, b \cdot 1)$

Para decidir se o valor x_1 é maior, igual ou menor que o índice λ , verificamos, primeiramente, que cada $x_i > 0$, para $1 \leq i \leq r$. Por fim, analisando o sinal de x_{r+1} , concluímos: $\lambda < x_1$, caso $x_{r+1} > 0$; $\lambda = x_1$, caso $x_{r+1} = 0$; e $\lambda > x_1$, caso $x_{r+1} < 0$.

Definindo $y_0 = 1$, $y_1 = x_1$ e, para $j \geq 2$ inteiro, $y_j = x_1 y_{j-1} - y_{j-2}$, temos, de (6.4), que

$$x_i = \frac{y_i}{y_{i-1}}, \quad \text{para } 1 \leq i \leq r. \quad (6.5)$$

Note que $y_j = U_j(\frac{x_1}{2})$, onde U_j é o polinômio de Chebyshev, de segundo tipo, de ordem j .

Deste modo, se $\Delta = 3$, $x_1 = 2$ e $y_j = j + 1 > 0$, para todo $j \in \mathbb{N}$. Se $\Delta \geq 4$, $z_1 = \frac{\sqrt{\Delta+1}}{2} + \frac{\sqrt{\Delta-3}}{2}$ e $z_2 = \frac{\sqrt{\Delta+1}}{2} - \frac{\sqrt{\Delta-3}}{2}$ são distintos. Assim, podemos escrever, para cada $j \in \mathbb{N}$,

$$y_j = \frac{z_1^{j+1} - z_2^{j+1}}{z_1 - z_2},$$

que é positivo. Portanto, em ambos os casos, concluímos que $x_i > 0$, para $1 \leq i \leq r$.

De (6.5) e (6.4), obtemos que

$$x_{r+1} = \frac{f(x_1)}{x_1 y_r}, \quad \text{para } f(x_1) = x_1[x_1 y_r - p y_{r-1}] - b y_r. \quad (6.6)$$

Assim, x_{r+1} e $f(x_1)$ possuem o mesmo sinal. Se $\Delta = 3$, $f(x_1) = 2[2(r+1) - pr] - b(r+1)$ e, como $p+b=3$, $f(x_1) = 2(2-r) + b(r-1)$. Analisando o sinal de $f(x_1)$ para cada $b = 0, 1, 2$, concluímos:

- (a) Se $b = 0$, $f(x_1) = 2(2-r)$. Logo: $\lambda = x_1$, caso $r = 2$, e $\lambda > x_1$, se $r \geq 3$.
- (b) Se $b = 1$, $f(x_1) = 3-r$. Donde: $\lambda < x_1$, caso $r = 2$; $\lambda = x_1$, caso $r = 3$; e $\lambda > x_1$, se $r \geq 4$.
- (c) Se $b = 2$, $f(x_1) = 2$ e, portanto, $\lambda < x_1$, para todo $r \geq 2$.

Supondo agora que $\Delta \geq 4$, reescrevemos $f(x_1)$, dada em (6.6), pelo quociente de $g(x_1)$ por $z_1 - z_2$, onde

$$g(x_1) = x_1[x_1(z_1^{r+1} - z_2^{r+1}) - \Delta(z_1^r - z_2^r)] - b[(z_1^{r+1} - z_2^{r+1}) - x_1(z_1^r - z_2^r)].$$

Sendo $z_1 - z_2$ positivo, $f(x_1)$ e $g(x_1)$ possuem o mesmo sinal. Antes de analisarmos o sinal de $g(x_1)$, iremos simplificar sua expressão.

Considerando as funções $\alpha(x_1) = z_1^r(x_1 z_1 - \Delta) - z_2^r(x_1 z_2 - \Delta)$ e $\beta(x_1) = z_1^r(z_1 - x_1) - z_2^r(z_2 - x_1)$, temos que $g(x_1) = x_1 \alpha(x_1) - b \beta(x_1)$. Como $z_1(x_1 z_1 - \Delta) = -z_2$, $z_2(x_1 z_2 - \Delta) = -z_1$ e $z_1 z_2 = 1$, temos que $\alpha(x_1) = z_2^{r-2} - z_1^{r-2}$. Por outro lado, $z_1 - x_1 = -z_2$ e $z_2 - x_1 = -z_1$. Portanto, $\beta(x_1) = z_2^{r-1} - z_1^{r-1}$. Assim, calculamos:

$$g(x_1) = x_1(z_2^{r-2} - z_1^{r-2}) - b(z_2^{r-1} - z_1^{r-1}). \quad (6.7)$$

Se $b = 0$, $g(x_1) = x_1(z_2^{r-2} - z_1^{r-2})$. Portanto: caso $r = 2$, sendo $g(x_1) = 0$, $\lambda = x_1$; se $r \geq 3$, $g(x_1)$ é negativa, o que implica em $\lambda > x_1$.

Para b positivo, $g(x_1) = z_1^{r-2}(bz_1 - x_1) - z_2^{r-2}(bz_2 - x_1)$. Donde $g(x_1) = (z_2^{r-3} - z_1^{r-3}) + (b-1)(z_1^{r-1} - z_2^{r-1})$. Assim, se $b = 1$, $g(x_1) = z_2^{r-3} - z_1^{r-3}$ e podemos concluir:

Caso $r = 2$, $g(x_1) = z_2^{-1} - z_1^{-1} = z_1 - z_2 > 0$. Neste caso, teremos $\lambda < x_1$. Caso $r = 3$, $g(x_1) = 0$; donde, $\lambda = x_1$. E caso $r \geq 4$, $g(x_1) < 0$ e, portanto, $\lambda > x_1$.

Se $b \geq 2$, então $g(x_1) \geq z_2^{r-3} - z_1^{r-3} + z_1^{r-1} - z_2^{r-1} = z_1^{r-3}(z_1^2 - 1) + z_2^{r-3}(1 - z_2^2)$. Como $z_1 z_2 = 1$ e $z_1 > z_2 > 0$, temos que $z_1 > 1 > z_2$. Portanto, $g(x_1)$ é positiva e, $\lambda < x_1$. Terminando, assim, a prova desta proposição. ■

Em seguida, na Proposição 6.3, analisamos o índice de $S(a \cdot r, 2, 1)$, para $r \geq 3$ e $a \geq 2$. Novamente, fazemos uso do algoritmo de Jacobs e Trevisan a fim de provarmos que o índice desta é menor que $\sqrt{\Delta + 1}$.

Proposição 6.3. *Sejam $r \geq 3$ e $a \geq 2$ inteiros. O índice λ de $S(a \cdot r, 2, 1)$ satisfaz:*

(a) $\lambda < \sqrt{\Delta + 1}$, se $r \leq 4$;

(b) $\lambda = \sqrt{\Delta + 1}$, se $r = 5$.

(c) $\lambda > \sqrt{\Delta + 1}$, se $r \geq 6$.

Prova:

Aplicando o algoritmo AlgoJT em $S(a \cdot r, 2, 1)$, atribuímos em cada vértice desta um valor x_i conforme mostrado na Figura 6.5.

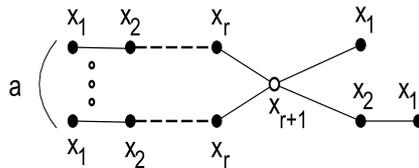


Figura 6.5: Aplicando o algoritmo AlgoJT na árvore starlike $S(a \cdot r, 2, 1)$

Seguindo o raciocínio desenvolvido na prova da Proposição 6.2, temos que $x_1 = \sqrt{\Delta + 1}$ e, para $2 \leq i \leq r$, $x_i = x_1 - \frac{1}{x_{i-1}} = \frac{y_i}{y_{i-1}}$, onde $y_i = U_i(\frac{x_1}{2})$ está definido para todo inteiro positivo i . Como $\Delta \geq 4$, resulta que $x_i > 0$, para $1 \leq i \leq r$.

Neste caso $x_{r+1} = \left(x_1 - \frac{1}{x_1}\right) - a\frac{1}{x_r} - \frac{1}{x_2}$ e, portanto,

$$x_{r+1} = \frac{f(x_1)}{x_1 y_2 y_r}, \quad f(x_1) = y_2^2 y_r - a y_{r-1} x_1 y_2 - x_1^2 y_r. \quad (6.8)$$

Sendo $y_2 = \Delta$, vemos que $f(x_1) = c_1 y_r - c_0 y_{r-1}$, para $c_1 = \Delta^2 - x_1^2$ e $c_0 = x_1 \Delta (\Delta - 2)$.

Por outro lado, para todo $j \in \mathbb{N}$, $y_j = \frac{z_1^{j+1} - z_2^{j+1}}{z_1 - z_2}$, onde $z_1 = \frac{\sqrt{\Delta+1}}{2} + \frac{\sqrt{\Delta-3}}{2}$ e $z_2 = \frac{\sqrt{\Delta+1}}{2} - \frac{\sqrt{\Delta-3}}{2}$. Deste modo, de (6.8), obtemos que $f(x_1)$ será dado pelo quociente de $\frac{g(x_1)}{z_1 - z_2}$, onde

$$g(x_1) = z_1^r (c_1 z_1 - c_0) - z_2^r (c_1 z_2 - c_0).$$

Como $z_1 + z_2 = x_1$, $z_1 z_2 = 1$ e $\Delta - x_1 z_1 = z_2^2$, calculamos

$$\begin{aligned} z_1 (c_1 z_1 - c_0) &= (\Delta^2 - x_1^2) z_1^2 - x_1 \Delta (\Delta - 2) z_1 = \\ &= \Delta^2 z_1^2 - x_1^2 z_1^2 - x_1 z_1 \Delta^2 + x_1 z_1 \Delta + x_1 z_1 \Delta = \\ &= \Delta^2 z_1^2 - (z_1 + z_2) z_1 \Delta^2 + x_1 z_1 \Delta + x_1 z_1 (\Delta - x_1 z_1) = \\ &= -\Delta^2 + x_1 z_1 \Delta + x_1 z_1 (\Delta - x_1 z_1) = \\ &= \Delta (x_1 z_1 - \Delta) + x_1 z_1 (\Delta - x_1 z_1) = -z_2^4. \end{aligned}$$

Analogamente, $z_2 (c_1 z_2 - c_0) = -z_1^4$. Portanto,

$$g(x_1) = z_2^{r-5} - z_1^{r-5}.$$

Como x_{r+1} possui mesmo sinal de $g(x_1)$, concluímos:

- Se $r \leq 4$, x_{r+1} é positivo. Portanto, $\lambda < \sqrt{\Delta + 1}$.
- Se $r = 5$, $x_{r+1} = 0$ e $\lambda = \sqrt{\Delta + 1}$.
- Se $r \geq 6$, x_{r+1} é negativo e $\lambda > \sqrt{\Delta + 1}$.

■

Estas duas proposições nos permitem localizar, no Teorema 6.2, o índice com relação ao valor $\sqrt{\Delta + 1}$, com base na estrutura da árvore *starlike*, dada pela sequência que a define. Neste teorema iremos considerar que a árvore *starlike* possui grau máximo $\Delta \geq 3$, uma vez que é conhecido o índice de um caminho, ou seja, de $S(n_1, n_2)$, resultando: $\lambda(S(n_1, n_2))$ é igual, ou menor, ou maior que $\sqrt{3}$ se, respectivamente, $n_1 + n_2$ é igual, ou menor, ou maior que 3.

Teorema 6.2. *Seja S uma árvore starlike com grau máximo $\Delta \geq 3$ e sejam $n_1 \geq n_2 \geq \dots \geq n_\Delta \geq 1$ inteiros tais que $S = S(n_1, n_2, \dots, n_\Delta)$. Então, o índice λ de S satisfaz:*

(a) Se $2 \leq n_1 \leq 3$ e $n_\Delta = 1$, ou $n_1 = 4$, $n_{\Delta-1} = 2$ e $n_\Delta = 1$, ou $n_1 = 5$, $n_{\Delta-2} \leq 4$, $n_{\Delta-1} = 2$ e $n_\Delta = 1$, ou $n_1 \geq 4$, $n_p \geq 2$ e $n_{p+1} = \dots = n_{\Delta-1} = n_\Delta = 1$, então

$$\sqrt{\Delta} < \lambda < \sqrt{\Delta+1}.$$

(b) Se $n_1 = \dots = n_\Delta = 2$, ou $n_1 = \dots = n_{\Delta-1} = 3$ e $n_\Delta = 1$, ou $n_1 = \dots = n_{\Delta-2} = 5$, $n_{\Delta-1} = 2$ e $n_\Delta = 1$, então

$$\lambda = \sqrt{\Delta+1}.$$

(c) Se $n_1 \geq 3$ e $n_\Delta \geq 2$, ou $n_1 \geq 4$, $n_{\Delta-1} \geq 3$ e $n_\Delta = 1$, ou $n_1 \geq 6$, $n_{\Delta-2} \geq 5$, $n_{\Delta-1} \geq 2$ e $n_\Delta = 1$, ou, caso $\Delta = 3$, $n_1 \geq 6$, $n_2 \geq 2$ e $n_3 = 1$, então

$$\lambda > \sqrt{\Delta+1}.$$

Prova:

Observe que em todos os casos enunciados por este teorema, a estrela $S(\Delta \cdot 1)$ é um subgrafo próprio da árvore *starlike* $S = S(n_1, \dots, n_\Delta)$. Logo, o índice λ de S é maior que $\sqrt{\Delta}$. No restante da prova, iremos denotar por $H \subsetneq G$ o fato de um grafo H ser um subgrafo próprio de G .

Claramente, se $n_1 = \dots = n_\Delta = 2$, $S = S(\Delta \cdot 2)$ e, portanto, $\lambda = \sqrt{\Delta+1}$. Das Proposições 6.2 e 6.3, o mesmo ocorre se $n_1 = \dots = n_{\Delta-1} = 3$ e $n_\Delta = 1$, ou $n_1 = \dots = n_{\Delta-2} = 5$, $n_{\Delta-1} = 2$ e $n_\Delta = 1$, ou seja, se $S = S((\Delta-1) \cdot 3, 1)$ ou $S = S((\Delta-2) \cdot 5, 2, 1)$. Disto, concluímos:

Se $n_1 = 2$ e $n_\Delta = 1$, $S \subsetneq S(\Delta \cdot 2)$. Se $n_1 = 3$ e $n_\Delta = 1$, $S \subsetneq S((\Delta-1) \cdot 3, 1)$. Se $n_1 = 4$, $n_{\Delta-1} = 2$ e $n_\Delta = 1$, ou $n_1 = 5$, $n_{\Delta-2} \leq 4$, $n_{\Delta-1} = 2$ e $n_\Delta = 1$, $S \subsetneq S((\Delta-2) \cdot 5, 2, 1)$. Nestes casos, temos $\lambda < \sqrt{\Delta+1}$.

Se $n_1 \geq 4$, $n_p \geq 2$ e $n_{p+1} = \dots = n_{\Delta-1} = n_\Delta = 1$, então $S \subsetneq S((\Delta-p) \cdot n_1, p \cdot 1)$, onde $p \geq 2$. Da Proposição 6.2, $\lambda < \sqrt{\Delta+1}$.

Se $n_1 \geq 3$ e $n_\Delta \geq 2$, $S(\Delta \cdot 2) \subsetneq S$. Se $n_1 \geq 4$, $n_{\Delta-1} \geq 3$ e $n_\Delta = 1$, $S((\Delta-1) \cdot 3, 1) \subsetneq S$. Se $n_1 \geq 6$, $n_{\Delta-2} \geq 5$, $n_{\Delta-1} = 2$ e $n_\Delta = 1$, $S((\Delta-2) \cdot 5, 2, 1) \subsetneq S$. Nestes casos, $\lambda > \sqrt{\Delta+1}$, concluindo a prova. ■

Observação 6.1. Note que, se a árvore *starlike* S for distinta de uma estrela, de uma subdivisão de uma estrela e de um caminho, o parâmetro mais relevante em sua estrutura, a fim de compararmos seu índice λ com o valor $\sqrt{\Delta+1}$, é a quantidade p de arestas pendentes incidentes no vértice de grau máximo v : se $p \geq 2$, então

$\lambda < \sqrt{\Delta + 1}$; se $p = 0$, $\lambda > \sqrt{\Delta + 1}$. Portanto, para $\lambda = \sqrt{\Delta + 1}$ é necessário que $p = 1$.

Com consequência imediata deste teorema, obtemos duas famílias infinitas de árvores *starlike* não integrais com índice $\lambda \geq 3$ inteiro.

Corolário 6.2. *Para cada inteiro $p \geq 3$, ambas as árvores *starlike* $S((p^2 - 2) \cdot 3, 1)$ e $S((p^2 - 3) \cdot 5, 2, 1)$ possuem índice p .*

Outra consequência do Teorema 6.2 é que o índice de quase toda vassoura generalizada está estritamente entre $\sqrt{\Delta}$ e $\sqrt{\Delta + 1}$ e, portanto, não é inteiro. Na Figura 6.6 mostramos as vassouras generalizadas que possuem índice maior que $\sqrt{\Delta + 1}$.

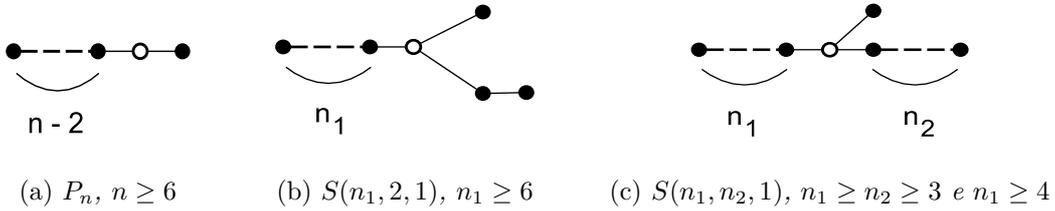


Figura 6.6: Vassouras generalizadas com índice maior que $\sqrt{\Delta + 1}$

Corolário 6.3. *Seja S uma vassoura generalizada. Se $S \neq P_n$, para $n \geq 6$, $S \neq S(n_1, 2, 1)$, para $n_1 \geq 6$, e $S \neq S(n_1, n_2, 1)$, para $n_1 \geq n_2 \geq 3$ e $n_1 \geq 4$, então seu índice λ satisfaz:*

$$\sqrt{\Delta} \leq \lambda \leq \sqrt{\Delta + 1}. \quad (6.9)$$

Além disso, $\lambda = \sqrt{\Delta}$ se, e somente se, S for uma estrela; $\lambda = \sqrt{\Delta + 1}$ se, e somente se, $S = P_5$, ou $S = S(3, 3, 1)$ ou $S = S(5, 2, 1)$.

Na seção seguinte estudamos a integralidade do índice de uma dupla vassoura e provamos que, caso esta tenha diâmetro maior ou igual a 4, as cotas $\sqrt{\Delta}$ e $\sqrt{\Delta + 1}$ delimitam o índice desta, similarmente a o que ocorre com o índice de quase toda vassoura generalizada.

6.3 O índice de uma dupla vassoura

Brouwer *et al.* [27] provam que, se uma árvore integral T possui exatamente dois vértices com graus maiores que dois, então estes são adjacentes. Portanto, as duplas vassouras integrais possuem diâmetro 3, ou seja, são duplas estrelas. No Teorema 6.3 provamos que o índice de uma dupla vassoura, de diâmetro maior ou igual a 4, é menor ou igual a $\sqrt{\Delta + 1}$, e que a igualdade ocorre quando: ou bem a dupla vassoura é um grafo Smith, ou bem a dupla vassoura é balanceada e tem diâmetro 4. Estas duplas vassouras extremas são mostradas na Figura 6.7.

Teorema 6.3. *Sejam $a \geq b \geq 2$ e $r \geq 3$ inteiros. Então, o índice λ da dupla vassoura $D(a; r; b)$ satisfaz:*

$$\sqrt{\Delta} < \lambda \leq \sqrt{\Delta + 1}, \quad (6.10)$$

ocorrendo a igualdade $\lambda = \sqrt{\Delta + 1}$ se, e somente se, $a = b = 2$ ou $a = b \geq 3 = r$.

Prova:

Em [46], Del-Vecchio *et al.* determinam uma fórmula para o cálculo do polinômio característico de uma dupla vassoura. Desta, obtemos que o polinômio característico de $D(a; 3; b)$ é

$$p(x) = x^{a+b-1}[x^4 - (a+b+2)x^2 + (a+b+ab)]$$

e, portanto, o índice de $D(a; 3; b)$ é $\lambda = \sqrt{\frac{a+b+2}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(a-b)^2 + 4}}$. Como $a \geq b$, $(a-b)^2 + 4 \leq [(a-b) + 2]^2$, ocorrendo igualdade se, e somente se, $a = b$. Sendo $\Delta = a+1$, concluímos que $\lambda \leq \sqrt{\Delta + 1}$, ocorrendo igualdade se, e somente se, $a = b$.

Desde que $D(2; r; 2)$ é um grafo Smith com grau máximo $\Delta = 3$, seu índice $\lambda = 2 = \sqrt{\Delta + 1}$. Logo, para provarmos o teorema nos resta verificar que, caso $a \geq 3$ e $r \geq 4$, o índice de $D(a; r; b)$ é menor que $\sqrt{\Delta + 1}$. De fato, do Lema 2.8, segue que o índice decresce em r :

$$\lambda(D(a; r+1; b)) < \lambda(D(a; r; b)), \text{ para } r \geq 3.$$

■

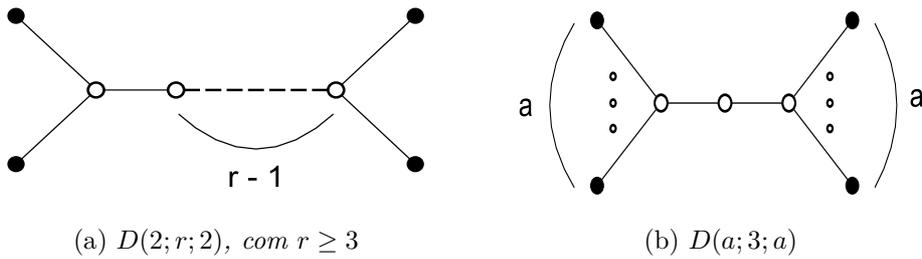


Figura 6.7: Duplas vassouras de diâmetro maior ou igual a 4 com índice maximal

O Teorema 6.3 nos possibilita determinar as duplas vassouras não integrais com índice inteiro de diâmetro maior ou igual a 4:

Corolário 6.4. *As duplas vassouras, de diâmetro maior ou igual a 4, que possuem índice inteiro são os grafos Smith $D(2; r; 2)$, cujo índice é 2, e $D(p^2 - 2; 3; p^2 - 2)$, com índice $p \geq 3$.*

A seguir, estudamos condições de integralidade do índice de uma dupla estrela. Do polinômio característico de $S_{a,b}$, dado por (2.9), resulta que o índice da dupla estrela é

$$\lambda(S_{a,b}) = \sqrt{\frac{a+b+1}{2}} + \frac{1}{2}\sqrt{(a-b)^2 + 2(a+b) + 1}.$$

E isto nos possibilita caracterizar quando a dupla estrela possui índice inteiro:

Lema 6.2. *Sejam $a \geq b \geq 2$. A dupla estrela $S_{a,b}$ terá índice inteiro λ se, e somente se, existirem inteiros $t \geq 0$ e $x \geq t + 2$ tais que*

$$a = x(x-t-1) + t, b = x(x-t-1) \text{ e } x(x-t) \text{ seja um quadrado perfeito.}$$

Neste caso, o índice $\lambda = \sqrt{x(x-t)}$.

Prova:

Claramente, se $a = x(x-t-1) + t$, $b = x(x-t-1)$, $(a-b)^2 + 2(a+b) + 1 = t^2 + 4x^2 - 4xt - 4x + 2t + 1 = (2x-t-1)^2$. Deste modo, o índice λ de $S_{a,b}$ satisfaz $2\lambda^2 = (2x^2 - 2xt - 2x + t + 1) + (2x-t-1) = 2x(x-t)$. Sendo $x(x-t)$ um quadrado perfeito, temos que $\lambda = \sqrt{x(x-t)}$ é inteiro.

Reciprocamente, supondo que o índice λ de $S_{a,b}$ seja inteiro. Para $t = a - b$, vemos que $2\lambda^2 = (t+1) + 2b + \sqrt{(t+1)^2 + 4b}$, o que implica: $(t+1)^2 + 4b = [2\lambda^2 - (2b+t+1)]^2 = 4\lambda^4 - 4\lambda^2(2b+t+1) + 4b^2 + 4b(t+1) + (t+1)^2$. Assim, obtemos $b = \lambda^4 - \lambda^2(2b+t+1) + b^2 + b(t+1)$, ou seja, $0 = (\lambda^2 - b)^2 - t(\lambda^2 - b) - \lambda^2$. Como $x = \lambda^2 - b$ é um inteiro, concluímos que $\lambda^2 = x(x-t)$ e que $b = \lambda^2 - x = x(x-t-1)$. Portanto, $a = b + t = x(x-t-1) + t$, o que prova o lema. ■

Observamos que, nas condições do lema acima, o segundo maior autovalor da dupla estrela é dado por $\sqrt{(x-1)(x-t-1)}$. Deste modo, estando interessados em obter exemplos de duplas estrelas não integrais com índice inteiro, devemos garantir que este autovalor não seja inteiro. Em particular, a dupla estrela não pode ser balanceada, ou seja, $t \geq 1$. Ainda, x , t e $y = \lambda$ devem satisfazer a equação

$$x^2 - tx - y^2 = 0 \tag{6.11}$$

e a condição $x \geq t + 2$. Reciprocamente, a cada solução (x, t, y) de (6.11), dada por inteiros positivos tais que $x \geq t + 2$, irá corresponder uma dupla estrela não balanceada com índice inteiro y , definida por $b = x(x-t-1)$ e $a = b + t$. No lema abaixo descrevemos as soluções inteiras positivas desta equação.

Lema 6.3. *Sejam x , t e y inteiros positivos tais que $x^2 - tx - y^2 = 0$. Seja $s = \text{mdc}(x, t, y)$. Então, existem inteiros positivos $q > p$ tais que $p + q$ é par e*

$$x = s \frac{(q+p)^2}{4}, t = spq \text{ e } y = s \frac{q^2 - p^2}{4}.$$

Prova:

Dada uma solução inteira positiva (x, t, y) da equação $x^2 - tx - y^2 = 0$, seja $s = \text{mdc}(x, t, y)$. Então, ao dividirmos x , t e y por s , obtemos uma solução inteira positiva (x', t', y') desta mesma equação, tal que $\text{mdc}(x', t', y') = 1$. Deste modo, basta provarmos o Lema no caso em que $s = 1$. Fazemos isto, dividindo a prova em duas etapas. Na primeira, supomos t ímpar. Neste caso, $2(x-y) - t$ e $2(x+y) - t$ são primos entre si. De fato, se existir um primo positivo z dividindo ambos $2(x-y) - t$ e $2(x+y) - t$, então, z dividirá $[2(x-y) - t][2(x+y) - t] = t^2$. Portanto, z dividirá t , assim como dividirá $(2x - t + 2y) - (2x - t - 2y) = 4y$. Sendo t ímpar, z é ímpar. Logo, z dividirá y . Por outro lado, dividindo t e $2(x-y) - t$, concluímos que z divide $2x$; donde, z divide x . Mas isto contradiz o fato de x , t e y serem primos entre si.

Como $[2(x-y) - t][2(x+y) - t] = t^2$, temos, necessariamente, que $2(x-y) - t = p^2$ e $2(x+y) - t = q^2$, para certos $q > p \geq 1$ primos entre si tais que $t = p \cdot q$. Donde:

$$\begin{cases} 2(x-y) - t = p^2 \\ 2(x+y) - t = q^2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 2(x-y) = p(p+q) \\ 2(x+y) = q(p+q) \end{cases} .$$

Sendo t é ímpar, o mesmo ocorrerá com seus fatores p e q . Logo, $p+q$ e $q-p$ são pares positivos. Deste modo:

$$\begin{cases} x-y = p \left(\frac{p+q}{2} \right) \\ x+y = q \left(\frac{p+q}{2} \right) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x = \left(\frac{p+q}{2} \right)^2 \\ y = \left(\frac{p+q}{2} \right) \left(\frac{q-p}{2} \right) \end{cases} ,$$

provando que a solução obtida é da forma $x = \frac{(q+p)^2}{4}$ e $y = \frac{q^2 - p^2}{4}$.

Supondo t par, provamos, primeiramente, que 4 divide t :

Como estamos supondo x , t e y primos entre si, temos que x e y são ímpares e, portanto, $x+y = 2a$ e $x-y = 2b$ para certos inteiros positivos $a > b$. (Note que, sendo $x^2 = tx + y^2$, $x > y$.) Assim, escrevendo $t = 2u$, temos que $2(x+y) - t = 2(2a - u)$ e $2(x-y) - t = 2(2b - u)$, donde,

$$(2a - u)(2b - u) = u^2 .$$

Caso u seja ímpar, por argumentos similares usados no caso anterior, deduzimos que $2a - u$ e $2b - u$ são primos entre si. Logo, $2a - u = \bar{q}^2$ e $2b - u = \bar{p}^2$ para ímpares positivos $\bar{q} > \bar{p}$, primos entre si, tais que $u = \bar{p} \cdot \bar{q}$. Portanto, $a = \bar{q} \left(\frac{\bar{p} + \bar{q}}{2} \right)$ e $b = \bar{p} \left(\frac{\bar{p} + \bar{q}}{2} \right)$. Logo,

$$x = a + b = \frac{(\bar{p} + \bar{q})^2}{2} \text{ e } y = a - b = \frac{\bar{q}^2 - \bar{p}^2}{2} .$$

Como $\bar{p} + \bar{q}$ e $\bar{q} - \bar{p}$ são pares, concluímos que x e y são pares. O que é uma contradição.

Se $t = 4u$, para algum inteiro positivo u , sendo $x + y = 2a$ e $x - y = 2b$, temos que

$$(a - u)(b - u) = u^2 .$$

Ainda, $a - u$ e $b - u$ são primos entre si: se z é um número primo que divide $a - u$ e $b - u$, então z dividirá u^2 e, portanto, dividirá u ; implicando que z dividirá $x = a + b$, $t = 4u$ e $y = a - b$. Deste modo, $a - u = \bar{q}^2$ e $b - u = \bar{p}^2$ para certos $\bar{q} > \bar{p}$ inteiros positivos, primos entre si, tais que $u = \bar{p} \cdot \bar{q}$. Resultando que $a = \bar{q}(\bar{q} + \bar{p})$ e $b = \bar{p}(\bar{q} + \bar{p})$, ou seja, que

$$x = (\bar{p} + \bar{q})^2 \text{ e } y = \bar{q}^2 - \bar{p}^2 .$$

Considerando, $q = 2\bar{q}$ e $p = 2\bar{p}$, temos

$$x = \frac{(p + q)^2}{4}, \quad t = pq \text{ e } y = \frac{q^2 - p^2}{4},$$

onde $p + q$ é par e $q > p$, provando, assim, o Lema. ■

A solução geral desta equação diofantina nos permite, então, parametrizar a família de duplas estrelas com índice inteiro. Na Proposição 6.4 damos uma condição de modo a garantir que as duplas estrelas não sejam integrais.

Proposição 6.4. *Uma dupla estrela $S_{a,b}$ possui índice inteiro se, e somente se, existirem $s \geq 1$ e $q > p \geq 0$ inteiros tais que $p + q$ é par, $s \frac{(q-p)^2}{4} \geq 2$ e*

$$b = x(x - t - 1) \text{ e } a = b + t, \text{ para } x = s \frac{(q + p)^2}{4} \text{ e } t = spq .$$

Neste caso, o índice de $S_{a,b}$ é igual a $\lambda = s \frac{q^2 - p^2}{4}$. Além disso, se $\text{mdc}(\frac{s(p+q)^2 - 4}{4}, \frac{s(q-p)^2 - 4}{4})$ é um quadrado perfeito, então $S_{a,b}$ não é integral.

Prova:

A primeira parte do enunciado segue do lema anterior e da observação que $x > t + 2$ se, e somente se, $s \frac{(q-p)^2}{4} \geq 2$.

Supondo que exista um inteiro d tal que $\text{mdc}(x - 1, x - t - 1) = d^2$, verificamos que $\lambda_2 = \sqrt{(x - 1)(x - t - 1)}$ não é inteiro:

Como $x - 1 = d^2u$ e $x - t - 1 = d^2v$, para inteiros u e v primos entre si, se λ_2 fosse inteiro, teríamos que u é um quadrado perfeito, digamos, $u = z^2$. Deste modo, $x(x - 1) = xd^2z^2 = \lambda^2$ é um quadrado perfeito. Portanto, $x = w^2$ para algum inteiro

w . Donde, $w^2 - d^2z^2 = 1$, ou seja, $(w - dz)(w + dz) = 1$. Disto segue que $w = \pm 1$ e $dz = 0$, o que não ocorre. ■

Finalizamos a seção exibindo, no Corolário 6.5, duas famílias infinitas de duplas estrelas não integrais com índice inteiro.

Corolário 6.5. *A dupla estrela $S_{b+t;b}$, onde $b = x(x - t - 1)$, será não-integral e terá índice inteiro, para cada uma das seguintes condições sobre t e x :*

- (i) $t = 2z + 1$ e $x = (z + 1)^2$, para $z \geq 2$ inteiro;
- (ii) $t = 9z(z + 2)$ e $x = 9(z + 1)^2$, para z é ímpar positivo.

Prova:

No primeiro item, considerando $s = p = 1$ e $q = 2z + 1$, escrevemos $t = pq$ e $x = \frac{(p+q)^2}{4}$. Como $\frac{(q-p)^2}{4} = z^2 \geq 2$, da Proposição 6.4, segue que a dupla estrela $S_{b+t;b}$, para $b = x(x - t - 1)$, possui índice inteiro $\lambda = \frac{q^2-p^2}{4} = z(z + 1)$. Uma vez que $\frac{(q+p)^2-4}{4} = (z + 1)^2 - 1 = z(z + 2)$ e $\frac{(q-p)^2-4}{4} = z^2 - 1 = (z - 1)(z + 1)$ são primos entre si, esta dupla estrela não é integral.

No segundo item, procedemos de modo análogo:

Escrevemos $t = pq$, para $s = 1$, $p = 3z$ e $q = 3(z + 2)$. Verificamos que $x = \frac{(p+q)^2}{4}$, e obtemos, neste caso, o índice $\lambda = 9(z + 1)$. Como $\frac{(q+p)^2-4}{4} = 9(z^2 + 2z) + 8 = 8(z + 1)^2 + z(z + 2)$ e $\frac{(q-p)^2-4}{4} = 8$, sendo z ímpar, estes são primos entre si. Donde, a dupla estrela não é integral. ■

Os menores exemplos de duplas estrelas, para cada uma das famílias do corolário acima, são dados na Figura 6.8. Observe que a ordem destes grafos é alta, o que implica em uma alta complexidade computacional na obtenção de grafos destas famílias.

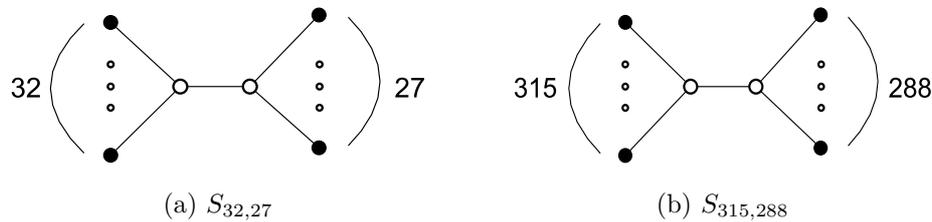


Figura 6.8: *Duplas estrelas não integrais com índice inteiro*

6.4 Árvores de diâmetro 4

Uma árvore de diâmetro 4 pode ser obtida unindo um vértice v aos vértices centrais de r estrelas ($r \geq 2$), $K_{1,a_1}, K_{1,a_2}, \dots, K_{1,a_r}$, e a outros b vértices isolados

($b \geq 0$). Consideramos $a_1 \geq a_2 \geq \dots \geq a_r \geq 1$, e denotamos esta árvore por $S(b, r, a_i)$. O vértice v é seu vértice central. Se $a_1 = a_2 = \dots = a_r = a$, a árvore será, então, denotada por $R(b, r, a)$, como mostramos na Figura 6.9.

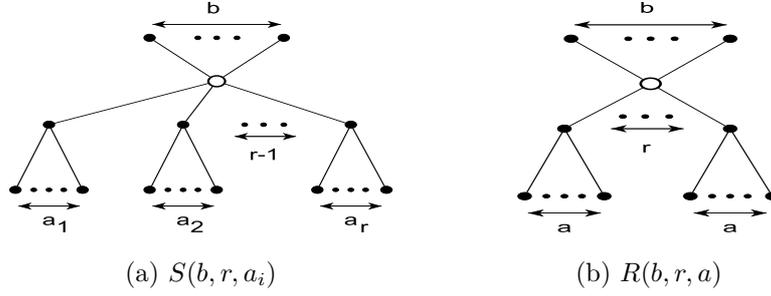


Figura 6.9: Árvores de diâmetro 4

Nesta seção estamos interessados em estudar a integralidade do índice de uma árvore de diâmetro 4. No Teorema 6.5, da primeira subseção, obtemos uma nova cota superior para o índice de $S(b, r, a_i)$ e damos a árvore maximal para esta. Sendo a árvore maximal uma árvore balanceada $R(0, r, a)$, iremos estudar, na Subseção 2, propriedades espectrais destas, construindo pares não coespectrais de tais árvores que possuem os mesmos índice, número de vértices e grau máximo. Observando que a construção de tais pares em que ambas são integrais é mais difícil, exibimos infinitos exemplos integrais no Corolário 6.8. No Corolário 6.9, caracterizamos as árvores maximais $R(0, r, r-1)$ que possuem índice inteiro e aquelas que são integrais. Finalizamos esta subseção estudando perturbações sobre o índice da árvore $R(b, r, a)$ ao variarmos os parâmetros b , r e a que a definem.

Na Subseção 3, exibimos uma nova e família infinita de árvores integrais de diâmetro 4, caracterizando, na Proposição 6.7, quando uma árvore $R(b, r, a)$ possui índice inteiro. Também damos famílias infinitas de árvores, de diâmetro 4, com índice inteiro, que não são integrais. A seguir revemos alguns resultados gerais de Wang [118], sobre árvores integrais de diâmetro 4, mostrando a validade destes se exigido apenas a integralidade do índice.

De acordo com [118], P.Z. Yuan obteve condições necessárias para que uma árvore $S(0, r, a_i)$ seja integral e determinou a distribuição de seus autovalores. No caso geral, os autovalores de $S(b, r, a_i)$ possuem uma distribuição similar, uma vez que o polinômio carcterístico de $S(b, r, a_i)$ é igual ao polinômio característico de $S(0, r, \tilde{a}_j)$, para a sequência $\tilde{a}_1 = a_1 \geq \dots \geq \tilde{a}_r = a_r > 0 = \tilde{a}_{r+1} = \dots = \tilde{a}_{r+b}$, como observado por Wang em [118]. Sendo uma árvore um grafo bipartido, basta determinar somente a distribuição dos autovalores não negativos de $S(b, r, a_i)$, o que faremos na observação que segue.

Observação 6.2. *Seja c_i o número de vezes que o inteiro a_i é repetido na sequência $a_1 \geq a_2 \geq \dots \geq a_r \geq 1$, e seja s o número de valores distintos desta sequência.*

Definindo a constante $z_b = 1$, se $b \neq 0$, e $z_b = 0$, se $b = 0$, listamos os autovalores não negativos de $S(b, r, a_i)$ com suas respectivas multiplicidades:

- 0 é um autovalor com multiplicidade $n - 2(r + z_b)$;
- Para cada $1 \leq i \leq r$, $\sqrt{a_i}$ é um autovalor com multiplicidade $c_i - 1$;
- Existem $s + z_b$ autovalores simples, $u_1 > u_2 > \dots > u_{s+z_b}$, que são as raízes positivas da equação

$$\sum_{k=1}^s \frac{c_i}{x^2 - a_i} = \frac{x^2 - b}{x^2} \quad (6.12)$$

e satisfazem $u_1 > \sqrt{a_1} > u_2 > \sqrt{a_2} > \dots > u_s > \sqrt{a_s}$ e, caso $z_b = 1$, $\sqrt{a_s} > u_{s+1} > 0$.

Desta observação segue que o índice de $S(b, r, a_i)$ é a raiz u_1 da equação (6.12).

No Teorema 3.1.7 de [118], Wang fornece um modo de se construir uma família infinita de árvores integrais, a partir de uma dada árvore integral, todas de diâmetro 4. Dado um inteiro positivo k e uma árvore $S(b, r, a_i)$, onde cada a_i se repete c_i vezes, o autor considera a árvore $S(bk^2, rk^2, a_i k^2)$, onde cada $a_i k^2$ se repete $c_i k^2$ vezes, provando que, se $S(b, r, a_i)$ é integral, então $S(bk^2, rk^2, a_i k^2)$ também é integral. Nós provamos a recíproca desta afirmação, generalizando este resultado de Wang, no teorema:

Teorema 6.4. *Sejam $b \geq 0$, $r \geq 2$ e $a_1 \geq \dots \geq a_r > 1$ inteiros. Dado um inteiro positivo k , temos que a árvore $S(b, r, a_i)$ é integral se, e somente se, $S(bk^2, rk^2, a_i k^2)$ é integral.*

Prova:

Por simplicidade, supomos que $b \neq 0$. Da Observação 6.2, sabemos que $u_1 > \sqrt{a_1} > u_2 > \sqrt{a_2} > \dots > u_s > \sqrt{a_s} > u_{s+1}$ são os autovalores positivos de $S(b, r, a_i)$, onde u_1, \dots, u_{s+1} são as raízes positivas da equação

$$\sum_{k=1}^s \frac{c_i}{x^2 - a_i} = \frac{x^2 - b}{x^2} .$$

Desta mesma observação, concluímos que os autovalores positivos de $S(bk^2, rk^2, a_i k^2)$ são $w_1 > \sqrt{a_1}k > w_2 > \sqrt{a_2}k > \dots > w_s > \sqrt{a_s}k > w_{s+1}$, onde w_1, \dots, w_{s+1} são as raízes positivas da equação

$$\sum_{k=1}^s \frac{c_i k^2}{y^2 - a_i k^2} = \frac{y^2 - bk^2}{y^2} .$$

Fazendo uso da substituição $y = xk$, obtemos que $u_1 k, \dots, u_{s+1} k$ são as raízes positivas desta última equação. Como $u_i k \neq u_j k$, para $i \neq j$, concluímos que

$w_i = u_i k$, para cada $1 \leq i \leq s + 1$. Claramente, se u_i for inteiro, o mesmo ocorre com o respectivo w_i . Por outro lado, se w_i é inteiro, o correspondente $u_i = \frac{w_i}{k}$ é racional. Da Observação , segue que, neste caso, u_i é inteiro. Deste modo, w_i é inteiro se, e somente se, u_i é inteiro.

Similarmente, verifica-se que $\sqrt{a_i}$ é inteiro se, e somente se, $\sqrt{a_i} k$ é inteiro. Logo, provamos que $S(b, r, a_i)$ é integral se, e somente se, $S(bk^2, rk^2, a_i k^2)$ é integral. O caso em que $b = 0$ segue de modo análogo, observando que as equações acima possuirão exatamente s raízes positivas em vez de $s + 1$. ■

Como o estudo de grafos com índice inteiro inclui a busca de grafos integrais, observamos que Teorema 6.4 continua válido na condição de integralidade dada somente pelo índice, e isto segue da prova deste.

Corolário 6.6. *Sejam $b \geq 0$, $r \geq 2$ e $a_1 \geq \dots \geq a_r > 1$ inteiros. Dado um inteiro positivo k , temos que $S(b, r, a_i)$ possui índice inteiro se, e somente se, $S(bk^2, rk^2, a_i k^2)$ possui índice inteiro.*

No caso especial em que $a_i = a$, para $1 \leq i \leq r$, Wang provou, no Teorema 1.3.7 e no Corolário 3.1.11 de [118], que, para $b \neq 0$, $R(b, r, a)$ é integral se, e somente se, $R(a, r, b)$ também é integral. Novamente, observamos que este resultado continua válido se assumirmos apenas a integralidade do índice, uma vez que ambas as árvores possuem o mesmo índice. De fato, do Teorema 9 de [5], temos que os autovalores positivos de $R(b, r, a)$ são \sqrt{a} e as raízes positivas da equação

$$x^4 - (a + b + r)x^2 + ab = 0 . \quad (6.13)$$

Observação 6.3. *Sejam $a \geq 1$, $b \geq 1$ and $r \geq 2$ inteiros. Então, a árvore $R(b, r, a)$ possui índice inteiro se, e somente se, $R(a, r, b)$ também possui índice inteiro.*

6.4.1 Cota superior para o índice

Nesta subseção iremos determinar uma nova cota superior, mais ajustada, para o índice de uma árvore de diâmetro 4, em termos de seu grau máximo Δ . Também determinamos a estrutura da árvore que atinge esta cota. Antes, porém, apresentamos limites superiores para o índice de $S(b, r, a_i)$, em função de Δ , conhecidos na literatura. O primeiro destes, é o limite superior dado por Godsil (veja (5.2)), a saber $2\sqrt{\Delta - 1}$, que é estritamente maior que o índice de qualquer árvore com $\Delta \geq 2$. O segundo, melhor que este limite de Godsil, para árvores de diâmetro 4, é obtido observando:

Uma árvore T , de grau máximo Δ e raio $r \geq 2$, é subárvore de uma árvore de Bethe $\mathcal{B}_{\Delta, k}$, para algum k . Portanto, seu índice $\lambda(T)$ é limitado superiormente por $\lambda(\mathcal{B}_{\Delta, k})$. Logo, quanto menor for k , melhor é o limite superior dado por $\lambda(\mathcal{B}_{\Delta, k})$.

Supondo que T tenha diâmetro 4, vemos que, se seu vértice central possuir grau menor que Δ , então poderíamos considerar $k = 3$. Caso contrário, $k = 4$, como é mostrado pela Figura 6.10.

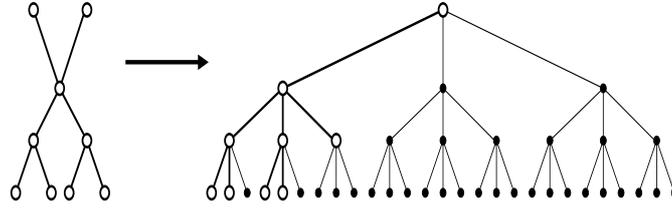


Figura 6.10: Uma árvore de diâmetro 4 é uma subárvore de $\mathcal{B}_{\Delta,4}$

Portanto, uma árvore $S(b, r, a_i)$, de grau máximo Δ , é subárvore própria de $\mathcal{B}_{\Delta,4}$. De (5.4), segue que

$$\lambda(S(b, r, a_i)) < 2\sqrt{\Delta - 1} \cos \frac{\pi}{5}. \quad (6.14)$$

No Teorema 6.5 melhoramos este limite, obtendo uma cota superior para o índice de $S(b, r, a_i)$, em função de Δ , e caracterizando a árvore extremal para esta nova cota, a saber $R(0, \Delta, \Delta - 1)$.

Teorema 6.5. *Sejam $b \geq 0$, $r \geq 2$ e $a_1 \geq a_2 \geq \dots \geq a_r \geq 1$ inteiros. A árvore $S(b, r, a_i)$, com grau máximo Δ , possui índice λ satisfazendo:*

$$\lambda \leq \sqrt{2\Delta - 1}; \quad (6.15)$$

ocorrendo igualdade se, e somente se, $b = 0$, $a_i = a$, para $1 \leq i \leq r$, e $\Delta = a + 1 = r$.

Prova:

Considerando $a = \max_{1 \leq i \leq r} a_i$, temos que $S(b, r, a_i)$ é subgrafo conexo de $R(b, r, a)$. Da Afirmação 2.2, segue que seu índice λ é menor ou igual ao índice de $R(b, r, a)$. Ainda, ocorre a igualdade entre estes índices se, e somente se, $S(b, r, a_i) = R(b, r, a)$. Como $S(b, r, a_i)$ e $R(b, r, a)$ possuem o mesmo grau máximo $\Delta = \max\{a + 1, b + r\}$, é suficiente provar o teorema para a árvore $R(b, r, a)$.

Seja $v \in \mathbb{R}^n$ um autovetor de Perron de $R(b, r, a)$. Cada uma de suas coordenadas v_i é um real positivo satisfazendo a equação (2.1), a saber,

$$\lambda v_i = \sum_{j \sim i} v_j.$$

Desta equação segue a observação:

"Se dois vértices i e j possuem os mesmos vizinhos, então as respectivas coordenadas v_i e v_j são iguais."

Portanto, as coordenadas v_i dos vértices pendentes, de cada estrela $K_{1,a}$, são iguais

entre si, como mostrado na Figura 6.11. Disto resulta que a coordenada do vértice central de uma estrela $K_{1,a}$ é igual a $\lambda \cdot v_i$.

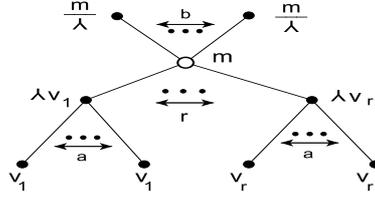


Figura 6.11: *Coordenadas iguais nos vértices pendentes de cada estrela*

Seja m a coordenada de v relativa ao vértice central da árvore $R(b, r, a)$. Como $\lambda^2 v_i = a \cdot v_i + m$, para $1 \leq i \leq r$, segue que, dados $i \neq j$, $(\lambda^2 - a)v_i = (\lambda^2 - a)v_j$. Sendo $\lambda > \sqrt{a}$, concluímos que $v_i = v_j$. Deste modo, podemos considerar as coordenadas v_i iguais a 1, para $1 \leq i \leq r$. Obtemos, assim, o autovetor de Perron de $R(b, r, a)$, cujas coordenadas são distribuídas pelos vértices conforme mostrado na Figura 6.12.

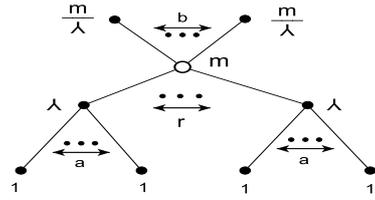


Figura 6.12: *Um autovetor de Perron de $R(b, r, a)$*

Com isto, concluímos que existe um real positivo m satisfazendo:

$$\begin{cases} m = \lambda^2 - a \\ bm = \lambda^2(m - r) \end{cases} \quad (6.16)$$

Logo, $\lambda^2(m - r) = b(\lambda^2 - a)$, donde $\lambda^2(b + r - m) = ab$ e, portanto, $m \leq b + r$. Como $\Delta = \max\{a + 1, b + r\}$, deduzimos que $\lambda \leq \sqrt{2\Delta - 1}$. De fato:

$$\lambda^2 = a + m \leq (a + 1) + (b + r) - 1 \leq 2\Delta - 1. \quad (6.17)$$

Desde que $m = b + r$ se, e somente se, $b = 0$, a igualdade $\lambda^2 = 2\Delta - 1$ irá ocorrer se, e somente se, $b = 0$ e $a + 1 = r = \Delta$. ■

De (6.17), segue que o limite superior (6.15), dado no teorema acima, pode ser melhorado se, além do grau máximo $\Delta = \max\{a + 1, b + r\}$, fixarmos o parâmetro $\Delta' = \min\{a + 1, r + b\}$.

Corolário 6.7. *Sejam $2 \leq \Delta' \leq \Delta$ inteiros. Se $b \geq 0$, $r \geq 2$ e $a = a_1 \geq a_2 \geq \dots \geq a_r \geq 1$ são inteiros tais que $\max\{a + 1, r + b\} = \Delta$ e $\min\{a + 1, r + b\} = \Delta'$, então*

o índice λ de $S(b, r, a_i)$ satisfaz

$$\lambda \leq \sqrt{\Delta + \Delta' - 1}; \quad (6.18)$$

onde a igualdade ocorre se, e somente se, $b = 0$ e $a_i = a$, para $1 \leq i \leq r$.

Observação 6.4. *Segue deste corolário que, se nos restringirmos à família das árvores balanceadas de diâmetro 4 e grau máximo Δ , dadas por $R(0, r, a)$ tais que $\max\{a + 1, r\} = \Delta$, o índice destas é função estritamente crescente com relação ao parâmetro $\Delta' = \min\{a + 1, r\}$. Mais precisamente:*

$$\lambda(R(0, r_1, a_1)) \leq \lambda(R(0, r_2, a_2)) \Leftrightarrow \Delta'_1 \leq \Delta'_2.$$

Portanto, esta família é totalmente ordenada pelo índice, entretanto esta ordenação não é estrita, uma vez que duas árvores distintas desta família podem possuir mesmo índice. De fato, $\lambda(R(0, r_1, a_1)) = \lambda(R(0, r_2, a_2))$ se, e somente se, ou $R(0, r_1, a_1) = R(0, r_2, a_2)$, ou $R(0, r_1, a_1) = R(0, a_2 + 1, r_2 - 1)$ e $r_1 \neq a_1 + 1$. Ainda assim, no caso destas serem distintas, temos que $\sqrt{a_1} \neq \sqrt{a_2}$ e, portanto, não são coespectrais.

Note que as árvores que atingem ambas as cotas superiores (6.15) e (6.18) são as árvores balanceadas $R(0, r, a)$. Na próxima subseção iremos estudar propriedades espectrais destas árvores.

6.4.2 Propriedades espectrais de $R(0, r, a)$

Watanabe e Schwenk, em [125], determinaram os autovalores de uma árvore $R(0, r, a)$, com $r \geq 2$ e $a \geq 1$, provando que esta é integral se, e somente se, a e $a + r$ são ambos quadrados perfeitos. De fato, de (6.13), temos que seus autovalores positivos são \sqrt{a} e $\sqrt{a + r}$, o maior sendo o índice da árvore. Portanto, a família das árvores de diâmetro 4 que possuem índice inteiro k é composta pelas árvores $R(0, k^2 - a, a)$, onde $a \geq 1$ é inteiro tal que $k^2 \geq a + 2$.

Duas árvores distintas desta família, $R(0, k^2 - a, a)$ e $R(0, k^2 - c, c)$, possuem o mesmo grau máximo Δ se, e somente se, $c = k^2 - a - 1$. Neste caso, estas árvores também possuem o mesmo número de vértices, podendo ser ou não integrais. Por exemplo, se $k \geq 2$ e $a = 1$, temos que $R(0, k^2 - 1, 1)$ é integral, enquanto $R(0, 2, k^2 - 2)$ não é. De fato, $R(0, 2, a)$ nunca é integral, uma vez que seus autovalores, \sqrt{a} e $\sqrt{a + 2}$, não podem ser ambos quadrados perfeitos. Exemplos em que ambas as árvores sejam integrais são mais difíceis de construir. Na Proposição 6.5, damos condições sobre a e k para que ambas sejam integrais.

Proposição 6.5. *Sejam a e k inteiros positivos tais que $k^2 - a \geq 2$ e $k^2 - 1 \neq 2a$. As árvores não coespectrais $R(0, k^2 - a, a)$ e $R(0, a + 1, k^2 - a - 1)$ são ambas integrais*

se, e somente se, k é ímpar e existem pares positivos x e y satisfazendo a equação $x^2 + y^2 = k^2 - 1$ e $a = x^2$.

Prova:

É fácil verificar que, se existem inteiros positivos x e y tais que $x^2 + y^2 = k^2 - 1$ e $a = x^2$, as árvores $R(0, k^2 - a, a)$ e $R(0, a + 1, k^2 - a - 1)$ são integrais, desde que $x = \sqrt{a}$ e $y = \sqrt{k^2 - a - 1}$ sejam inteiros. Reciprocamente, assumindo que as árvores $R(0, k^2 - a, a)$ e $R(0, a + 1, k^2 - a - 1)$ são integrais, existem inteiros positivos x e y tais que $x^2 = a$ e $y^2 = k^2 - a - 1$; portanto, $x^2 + y^2 = k^2 - 1$. Deste modo, nos resta verificar que, neste caso, k é ímpar e que x e y são pares. De fato, se k é par, $k^2 - 1 = x^2 + y^2$ é ímpar e, portanto, x e y têm paridades distintas. Supondo y ímpar, vemos que $k^2 - x^2$ é múltiplo de 4, enquanto $y^2 + 1$ não é, resultando em uma contradição. Logo k é ímpar e, similarmente, concluímos que x e y são pares. ■

Desta proposição, comprovamos que facilmente podemos obter pares de tais árvores em que apenas uma delas é integral. Bastaria, para isto, considerar k par ou a ímpar. Por exemplo, se p é um inteiro positivo, vemos que, para $k = 2p$ e $a = p^2$, assim como para $k = 2p + 3$ e $a = (2p + 1)^2$, a árvore $R(0, k^2 - a, a)$ é integral, enquanto que $R(0, a + 1, k^2 - a - 1)$ não é. Para o caso em que ambas as árvores são integrais, mais difícil de se construir, exibimos exemplos no corolário abaixo.

Corolário 6.8. *Dado um inteiro positivo p , para cada par a e k abaixo, as árvores $R(0, k^2 - a, a)$ e $R(0, a + 1, k^2 - a - 1)$ são integrais:*

- (i) $a = 4p^2$ e $k = 2p^2 + 1$;
- (ii) $a = 4p^4$ e $k = 2p^2 + 1$.

Do Teorema 6.5, temos que a árvore $R(0, r, a)$, cujo índice atinge a cota superior $\sqrt{2\Delta - 1}$, possui seus dois maiores graus iguais, sendo, portanto, birregular. Além disso, seu índice λ é inteiro se, e somente se, é ímpar. Neste caso, esta árvore pode ser escrita na forma $R(0, 2p(p + 1) + 1, 2p(p + 1))$, para algum inteiro positivo p , e seu índice, $\lambda = 2p + 1$. Na Figura 6.13, damos os dois menores exemplos destas árvores, juntamente com seus respectivos autovalores positivos. Note que, no primeiro exemplo, a árvore $R(0, 5, 4)$ é integral, enquanto, no segundo, $R(0, 13, 12)$ não é.

No próximo corolário, caracterizamos quando uma árvore $R(0, r, r - 1)$ é integral.

Corolário 6.9. *A árvore $R(0, r, r - 1)$ é integral se, e somente se, $x = \sqrt{r - 1} \geq 2$ e y são soluções inteiras positivas da equação $2x^2 - y^2 + 1 = 0$. Mais precisamente, $x = x_k$ e $y = y_k$ são obtidos recursivamente, para cada inteiro positivo k , através das equações*

$$\begin{cases} x_{k+1} = 3x_k + 2y_k \\ y_{k+1} = 4x_k + 3y_k \end{cases},$$

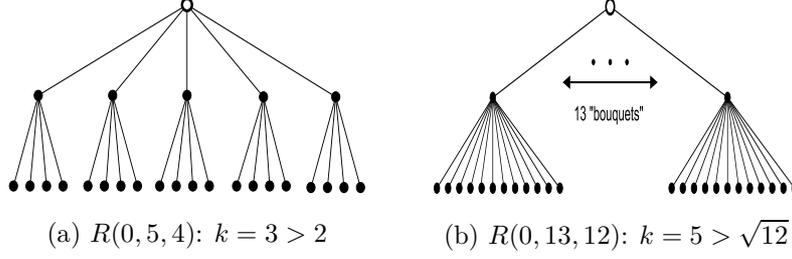


Figura 6.13: Menores árvores $R(0, r, r - 1)$ com índice inteiro

onde $x_1 = 2$, $y_1 = 3$.

Como uma consequência do Corolário 6.7, concluímos que, na subfamília $R(0, r, a)$ com grau máximo Δ , o índice é uma função estritamente crescente em função de Δ' . Entretanto, na família $R(b, r, a)$, com $b > 0$, isto não ocorre. De fato, o índice de $R(2, 2, 2)$ é menor que o índice de $R(1, 3, 2)$, e ambas as árvores possuem o mesmo grau máximo $\Delta = 4$ e o mesmo $\Delta' = 3$. Finalizamos esta subseção estudando a variação do índice das árvores $R(b, r, a)$, diante de certas perturbações nos parâmetros b, r, a que as definem.

Proposição 6.6. *Sejam $a \geq 1$, $b \geq 0$, $r \geq 2$ e $t > 0$ inteiros. Então:*

- (i) $\lambda(R(b, r, a)) < \lambda(R(b - t, r + t, a))$, se $t \leq b$.
- (ii) $\lambda(R(b, r, a)) \leq \lambda(R(b, r + t, a - t))$, se $t \leq a - 1$. A igualdade ocorre se, e somente se, $b = 0$.
- (iii) $\lambda(R(b, r, a)) < \lambda(R(b + t, r, a - t))$, se $a - b < t \leq a - 1$;
 $\lambda(R(b, r, a)) > \lambda(R(b + t, r, a - t))$, se $t \leq a - 1$ e $t < a - b$.

Prova:

Sejam λ, μ, ρ e α os respectivos índices de $R(b, r, a)$, $R(b - t, r + t, a)$, $R(b, r + t, a - t)$ e $R(b + t, r, a - t)$, onde $t > 0$ satisfaz as condições determinadas em cada item. De (6.13), temos que λ, μ, ρ e α são as respectivas maiores raízes de:

$$p(x) = x^4 - (a + b + r)x^2 + ab; \quad q(x) = p(x) - at;$$

$$r(x) = p(x) - bt; \quad s(x) = p(x) - t(b - a + t).$$

Logo, $q(\lambda) < 0$; donde, $\lambda < \mu$. Similarmente, $r(\lambda) \leq 0$ e, portanto, $\lambda < \rho$, se $b > 0$, e $\lambda = \rho$, se $b = 0$. Finalmente, $s(\lambda) < 0$ se $b - a + t > 0$; neste caso, $\lambda < \alpha$. E, $p(\alpha) < 0$, se $b - a + t < 0$, o que implica que $\alpha < \lambda$. ■

6.4.3 Nova família de árvores integrais de diâmetro 4

Iniciamos nosso estudo de propriedades espectrais das árvores $R(b, r, a)$, caracterizando, na proposição abaixo, quando estas possuem índice inteiro. Esta caracterização é uma consequência de (6.16). Nesta, obtemos uma parametrização de a, b e r em função das coordenadas de um autovetor de Perron de $R(b, r, a)$.

Proposição 6.7. *Sejam $a \geq 1$, $b \geq 0$ e $r \geq 2$ inteiros. Um real positivo λ é índice de $R(b, r, a)$ se, e somente se, existem reais positivos m e v tais que*

$$\begin{cases} a = \lambda^2 - m \\ b = \lambda^2 - v \\ r = \frac{mv}{\lambda^2} \end{cases}, \quad (6.19)$$

e $\lambda^2 - m \geq 1$, $\lambda^2 - v \geq 0$ e $\frac{mv}{\lambda^2} \geq 2$. Além disso, λ é inteiro se, e somente se, v é inteiro e $m + a$ é um quadrado perfeito.

Prova:

De (6.16), segue que um real positivo λ é o índice de $R(b, r, a)$ se, e somente se, existe um real positivo m satisfazendo $m = \lambda^2 - a$ e $bm = \lambda^2(m - r)$. Considerando $v = \lambda^2 - b$, temos que $v > 0$ e $r = \frac{mv}{\lambda^2}$, obtendo (6.19). Também resulta que λ é inteiro se, e somente se, $m + a$ é um quadrado perfeito. Resta, portanto, verificar que, se λ é inteiro, v também é inteiro. Isto de fato ocorre, uma vez que $v = \lambda^2 - b$.

■

Em seguida, mostramos como utilizar a Proposição 6.7 a fim de obter exemplos de árvores $R(b, r, a)$ não integrais com índice inteiro. Além do índice, os demais autovalores positivos de $R(b, r, a)$ são

$$\sqrt{a} = \sqrt{\lambda^2 - m} \text{ e, se } b \geq 1, u_2 = \sqrt{\lambda^2 - (m + v - r)}.$$

Assim, bastaria garantir que \sqrt{a} e u_2 não sejam ambos inteiros. No Corolário 6.10, exemplificamos exibindo uma família infinita, na qual \sqrt{a} não é inteiro. Duas árvores desta família serão mostradas na Figura 6.14.

Corolário 6.10. *Sejam k , p e t inteiros tais que $a = k(k - p) \geq 1$, $b = k(k - t) \geq 0$ e $r = pt \geq 2$, e tais que k e p satisfazem uma das seguintes condições:*

- (i) $p \equiv 1 \pmod{2}$ e $k - 1 \geq \left(\frac{p+1}{2}\right)^2$;
- (ii) $p \equiv 0 \pmod{4}$ e $k - 1 \geq \frac{p(p+4)}{8}$;
- (iii) $p \equiv 2 \pmod{4}$ e $k - 1 \geq \frac{(p+2)^2}{8}$.

Então, a árvore $R(b, r, a)$ não é integral e possui índice inteiro igual a k .

No caso em que $a = b \geq 1$ e $r \geq 2$, Wang ([122], Teorema 15) determinou uma família infinita de árvores $R(a, r, a)$ integrais, dadas por $a = zw$ e $r = (z - w)^2$, onde z e w são inteiros positivos tais que $z > w$ e zw é um quadrado perfeito. Para as árvores desta família, o índice é dado por z . Do Corolário 6.11, concluímos que estas são as *únicas* árvores $R(a, r, a)$ integrais. De fato, a parametrização dada por Wang segue deste corolário, se considerarmos $p = z - w$.

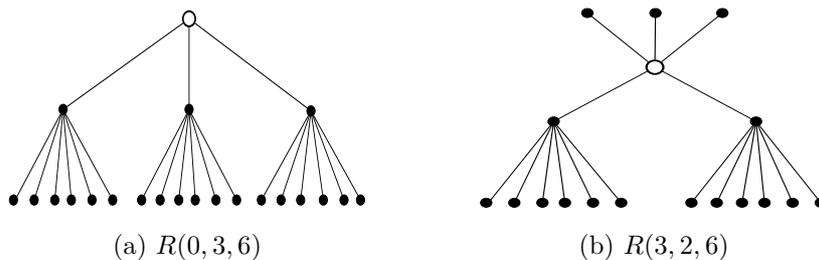


Figura 6.14: Exemplos de árvores não integrais com índice igual a 3

Corolário 6.11. *Dados inteiros $a \geq 1$ e $r \geq 2$, um real positivo λ é o índice da árvore $R(a, r, a)$ se, e somente se, existe um real $2 \leq p < \lambda$ tal que $a = \lambda(\lambda - p)$ e $r = p^2$. Neste caso, λ é inteiro se, e somente se, p é inteiro e $p^2 + 4a$ é um quadrado perfeito. Além disso, se a é um quadrado perfeito, $R(a, r, a)$ é integral.*

No corolário acima, caracterizamos as árvores $R(a, r, a)$ que possuem índice inteiro. Note que o índice desta árvore deverá dividir a coordenada m , relativa ao vértice central, de um seu autovetor de Perron. Na Figura 6.15, apresentamos, nesta família, o menor exemplo de árvore não integral com índice inteiro, $R(3, 4, 3)$, e a menor árvore integral, $R(4, 9, 4)$.

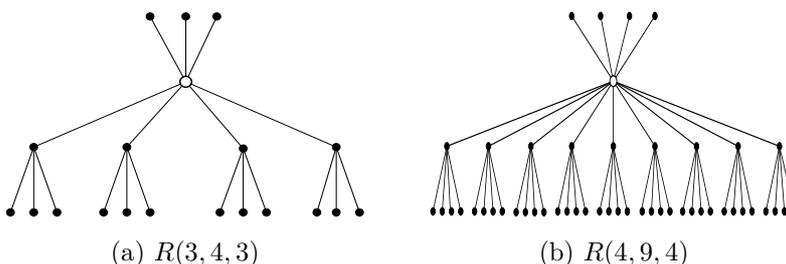


Figura 6.15: Menores árvores $R(a, r, a)$ com índice inteiro

A seguir, estudamos as árvores $R(b, r, a)$, com índice inteiro, em que o índice λ divide m . Aplicando a Proposição 6.7, obtemos uma nova parametrização de a , b e r para este caso:

Se $m = \lambda p$, resulta que $a = \lambda(\lambda - p)$, $b = \lambda^2 - v$ e $r = \frac{pv}{\lambda}$, e que λ divide pv . Consideramos $d = \text{mdc}\{p, \lambda\}$, $p = dq$ e $\lambda = ds$, para certos q e s primos entre si. Como, s dividirá qv , concluímos que $v = sk$, para algum k . Desta forma, obtemos a parametrização de a , b e r enunciada pela Proposição 6.8. Esta parametrização nos possibilita construir uma *nova e infinita família* de árvores integrais no final desta subseção.

Proposição 6.8. *Sejam d , s , q e k inteiros positivos tais que $s > q$, $d^2s \geq k$ e*

$kq \geq 2$. Então, para

$$\begin{cases} a = d^2s(s - q) \\ b = s(d^2s - k) \\ r = kq \end{cases},$$

a árvore $R(b, r, a)$ possui índice inteiro $\lambda = ds$. Caso s e q são primos entre si, esta árvore será integral se, e somente se, s , $s - q$ e $d^2s - k$ forem quadrados perfeitos.

Prova:

De (6.13), o índice λ de $R(b, r, a)$ satisfaz $2\lambda^2 = (a + b + r) + \sqrt{(a + b + r)^2 - 4ab}$. Como $(a + b + r)^2 - 4ab = (d^2sq + sk - kq)^2$, concluímos que λ é um inteiro. Calculando $a + b + r = 2d^2s^2 - d^2sq - sk + kq$, deduzimos que $\lambda = ds$.

Os demais autovalores positivos de $R(b, r, a)$ são $\sqrt{a} = d\sqrt{s(s - q)}$ e, caso $b \neq 0$, $u_2 = \sqrt{(s - q)(d^2s - k)}$. Então, se s , $s - q$ e $d^2s - k$ são quadrados perfeitos, concluímos que \sqrt{a} e u_2 são inteiros. Reciprocamente, caso s e $s - q$ sejam primos entre si, e \sqrt{a} e u_2 sejam inteiros, temos que s e $s - q$ são quadrados perfeitos. Portanto, $d^2s - k$ também será um quadrado perfeito. ■

Note que, na prova da Proposição 6.8, não é necessário que s e q sejam primos entre si para garantir que $R(b, r, a)$ seja integral. Aplicando a parametrização de a , b e r enunciada nesta proposição, obtemos uma família infinita de árvores $R(b, r, a)$ integrais:

Como $a = d^2s(s - q)$, $b = s(d^2s - k)$ e $r = kq$, para certos s , $s - q$ e $d^2s - k$ quadrados perfeitos, iremos considerar $s = (j + p)^2$, $q = j^2$, obtendo: $a = d^2(j + p)^2j^2$, $b = (j + p)^2(ds^2 - k)$ e $r = k(2jp + p^2)$. Assumindo $d^2s - k$ da forma d^2t^2 , temos que $k = d^2[(j + p)^2 - t^2]$. Construimos, assim, a família de árvores integrais considerada no seguinte corolário.

Corolário 6.12. *Sejam d , j , p e t inteiros positivos tais que $t < j + p$. Então, para*

$$\begin{cases} a = d^2(j + p)^2j^2 \\ b = d^2(j + p)^2t^2 \\ r = d^2[(j + p)^2 - t^2](2jp + p^2) \end{cases},$$

a árvore $R(b, r, a)$ é integral.

Chamamos atenção para o fato de que a família de árvores $R(b, r, a)$ integrais, dada no Corolário 6.12, é distinta das famílias de árvores integrais com diâmetro 4, que podem ser encontradas em [5, 79, 118, 122, 123]. todas estas famílias satisfazem a seguinte parametrização:

$$a = y^2, \quad b = \frac{z^2w^2}{y^2} \quad \text{e} \quad r = z^2 + w^2 - y^2 - \frac{z^2w^2}{y^2}, \quad (6.20)$$

onde $z > y > w$ são inteiros positivos. Ainda, satisfazem também a condição adicional de que $z^2 + w^2 - y^2$ seja um quadrado perfeito. Note que z, y, w são seus autovalores positivos.

Determinando o valor $z^2 + w^2 - y^2$, para as árvores do Corolário 6.12, verificamos que este não pode ser um quadrado perfeito, quando $j < t \leq p$. De fato, neste caso, $z = d(j + p)^2$, $y = d(j + p)j$ e $w = dtj$. Logo, $z^2 + w^2 - y^2 = d^2\alpha$, para $\alpha = (j + p)^2(2jp + p^2) + j^2t^2$.

Se $j < t \leq p$, α não é um quadrado perfeito, pois, neste caso, α está estritamente entre dois quadrados perfeitos consecutivos, a saber:

$$[j(j + p) + 2p^2 - 1]^2 < \alpha < [j(j + p) + 2p^2]^2 .$$

Portanto, concluímos que a família de árvores integrais obtida pelo Corolário 6.12 é, de fato, uma *nova* família. Na Figura 6.16 apresentamos duas árvores desta família, a saber, $R(36, 40, 9)$ e $R(64, 180, 16)$.

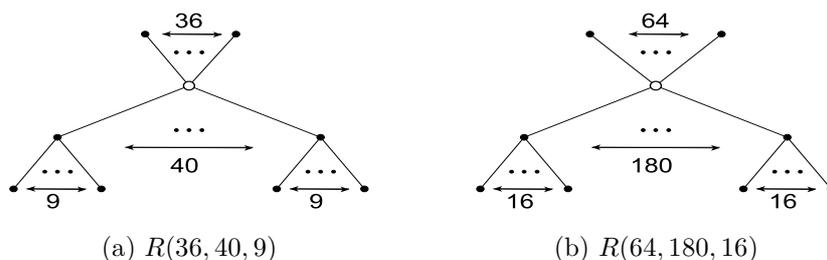


Figura 6.16: *Novas árvores integrais $R(b, r, a)$ obtidas pelo Corolário 6.12*

Os exemplos dados na figura acima são, na verdade, as menores árvores da nova família que apresentamos, tendo o primeiro 437 vértices e o segundo, 3125 vértices. Conseqüentemente, as árvores desta família possuem um número grande de vértices, o que torna difícil uma busca exaustiva destas árvores.

Capítulo 7

Considerações finais

Em nossa tese, mostramos que o estudo da integralidade do índice de um grafo, é uma estratégia que se mostrou eficaz para obter resposta a mais de uma frente de investigação. Por meio desta, encontramos novas e melhores cotas para o índice de um grafo, em função de parâmetros que determinam a estrutura do grafo. Também determinamos os grafos extremais para estas cotas. Em outra frente de investigação, obtemos famílias de grafos não integrais com índice inteiro, assim como novas famílias infinitas de grafos integrais. Este estudo também se mostrou útil para provar que um grafo não é integral, verificando apenas a não integralidade de seu índice. Apresentamos resultados positivos em cada classe de grafos estudadas nos Capítulos 4 e 6, a saber: os grafos KK_n^j , os grafos *p-broom-like*, as árvores de Bethe, as árvores *starlike*, as duplas vassouras e as árvores de diâmetro 4. Na Tabela 7.1 listamos, para cada classe de grafos estudada, as novas cotas para o índice destes e seus respectivos grafos extremais.

Assim como ocorre com a busca de grafos integrais, obter famílias de grafos não integrais com índice inteiro em geral envolve equações diofantinas não lineares, mostrando que o estudo da integralidade do índice é tão complexo quanto a da integralidade do próprio grafo. Um outro aspecto relevante é que este estudo mostrou ser possível fazer uso de técnicas pouco usadas em Teoria Espectral de Grafos, tal como determinar as coordenadas de um autovetor de Perron de um grafo a fim de calcular uma cota superior para o índice deste.

O algoritmo de Jacobs e Trevisan tem se mostrado uma ferramenta útil para se obter propriedades espectrais de árvores, como podemos constatar tanto nos novos resultados que obtemos para as árvores *starlike*, quanto na prova alternativa da desigualdade de Godsil, apresentada no Teorema 6.1. Entretanto, a aplicação deste se torna mais complexo quanto maior for o diâmetro da árvore. No caso das *starlike*, nós contornamos este problema lançando mão dos polinômios de Chebyshev.

Um problema de difícil abordagem em Teoria Espectral de Grafos é o de reconhe-

| Grafo | Novas cotas | Grafos extremais |
|--|---|--|
| KK_n^j | $n - 1 < \lambda < n + 1$ | Caracterizamos quando $\lambda = n$ |
| $K_p \sqcap B(a; r)$ | $\lambda \leq \frac{p-1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(p-1)^2 + 4(a+r-1)}$ | $K_p \sqcap B(1; a+r-1)$ |
| $\mathcal{B}_{\Delta, k}$ com índice inteiro | $\lambda \leq \sqrt{3(\Delta-1)}$ | $\mathcal{B}_{\Delta, 5}$ |
| Árvore <i>starlike</i> S | $\sqrt{\Delta} \leq \lambda < \sqrt{\Delta+2}$ | Exibimos duas famílias infinitas com $\lambda = \sqrt{\Delta+1}$ |
| Vassoura generalizada, com poucas exceções | $\sqrt{\Delta} < \lambda < \sqrt{\Delta+1}$ | |
| Dupla vassoura de diâmetro $d \geq 4$ | $\sqrt{\Delta} < \lambda \leq \sqrt{\Delta+1}$ | $D(2; r; 2)$, para $r \geq 3$, e $D(a; 3; a)$ |
| Árvore de diâmetro 4 | $\lambda \leq \sqrt{2\Delta-1}$ | $R(0, \Delta, \Delta-1)$ |

Tabela 7.1: *Novas cotas para o índice*

cimento do grafo a partir de seus autovalores, ou seja, encontrar famílias de grafos que possam ser unicamente determinados, a menos de um isomorfismo, por seus autovalores. Quando isto é possível, dizemos que o grafo é *determinado por seu espectro*. Na literatura encontramos diversas publicações abordando este tema, tanto provando que os grafos, de uma dada classe, são determinados por seu espectro, quanto provando que estes grafos não são. Vejam, por exemplo, [6, 24, 61, 78, 87, 112, 115–117].

Estando interessados apenas no índice do grafo, temos que o problema de decidir se os grafos, de uma classe, são unicamente determinados por seu índice, a menos de um isomorfismo, equivale a obter uma ordenação total e estrita desta classe por meio do índice.

Em nossa tese, estudamos o problema de ordenação tanto na classe das *p-broom-like* quanto nas árvores de diâmetro 4. Na primeira provamos que a classe se ordena totalmente e estritamente, desde que seja fixado o número de seus vértices. Já na segunda, não obtemos uma ordenação total. Entretanto, vimos na Observação 6.4 que, se nos restringimos à família das árvores balanceadas de grau máximo Δ , duas árvores distintas desta família não são coespectrais.

Nem sempre é possível ordenar os grafos de uma família por meio de seus índices, ou decidir se estes são determinados por seu espectro. O que nos leva a investigar o comportamento do índice por meio de pequenas perturbações no grafo. Em nossos estudos, voltados para as árvores de diâmetro 4, obtemos resultados

nesta linha de investigação. Na Proposição 6.6, comparamos os índices de duas árvores $R(b, r, a)$, após efetuarmos perturbações nos parâmetros b , r e a que as definem, sem alterar, entretando, seu grau máximo $\Delta = \max\{a + 1, r + b\}$ e o parâmetro $\Delta' = \min\{a + 1, r + b\}$.

Em nossa futura pesquisa pretendemos dar continuidade a estas investigações, em outras classes de grafos:

- Obter novas cotas para o índice destes, caracterizando seus grafos maximais;
- Estudar as condições de integralidade do índice, assim como do grafo, construindo tanto famílias de grafos com índice inteiro não integrais, como novas famílias de grafos integrais;
- Estudar a ordenação de grafos determinando se a classe se ordena ou não totalmente, por meio do índice. Em caso negativo, determinar a variação do índice por pequenas perturbações.

Inicialmente, focaremos os futuros estudos nas classes: de árvores com um diâmetro pequeno fixado; de árvores balanceadas; de uma generalização de *p-broom-likes* $K_p \square B(r; a)$, substituindo K_p por um grafo regular de p vértices.

Por fim, observamos que os limites superiores obtidos, para o índice de uma árvore, continuam sendo menores ou iguais ao limite $\sqrt{3(\Delta - 1)}$, dado na Proposição 6.1. Assim, justifica investigar em quais outras classes de árvores (com índice inteiro) este limite continua válido.

Referências Bibliográficas

- [1] AN-CHANG, HUANG, Q., 2003, “Ordering trees by their largest eigenvalues”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 370, pp. 175–184.
- [2] AN-CHANG, TIAN, F., 2003, “On the spectral radius of unicyclic graphs with perfect matchings”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 370, pp. 237–250.
- [3] AN-CHANG, TIAN, F., YU, A., 2004, “On the index of bicyclic graphs with perfect matchings”, *Discrete Mathematics*, v. 283, pp. 51–59.
- [4] AOUCHICHE, M., BELL, F. K., CVETKOVIĆ, D., et al., 2008, “Variable neighborhood search for extremal graphs. 16. Some conjectures related to the largest eigenvalue of a graph”, *European Journal of Operational Research*, v. 191, pp. 661–676.
- [5] BALIŃSKA, K., CVETKOVIĆ, D., RADOSAVLJEVIĆ, Z., et al., 2002, “A survey on integral graphs”, *Univ. Beograd. Publ. Elektrotehn. Fak. Ser. Mat.*, v. 13, pp. 42–65.
- [6] BANG, S., VAN DAM, E. R., KOOLEN, J. H., 2008, “Spectral characterization of the Hamming graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 429, pp. 2678–2686.
- [7] BARRIÈRE, L., COMELLAS, F., DALFÓ, C., et al., 2009, “The hierarchical product of graphs”, *Discrete Applied Mathematics*, v. 157 (1), pp. 36–48.
- [8] BARRIÈRE, L., COMELLAS, F., DALFÓ, C., et al., 2009, “On the hierarchical product of graphs and the generalized binomial tree”, *Linear and Multilinear Algebra*, v. 57 (7), pp. 695–712.
- [9] BAŠIĆ, M., ILIĆ, A., 2009, “On the clique number of integral circulant graphs”, *Applied Mathematics Letters*, v. 22, pp. 1406–1411.
- [10] BEINEKE, L. W., DOOB, M., WILSON, R. J., et al., 2004, *Topics in algebraic graph theory*. 1 ed. Cambridge, Cambridge University Press.

- [11] BELARDO, F., MARZI, E. M. L., SIMIĆ, S. K., 2006, “Some results on the index of unicyclic graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 416, pp. 1048–1059.
- [12] BELARDO, F., MARZI, E. M. L., SIMIĆ, S. K., 2009, “Bidegreed trees with small index”, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, v. 61, pp. 503–515.
- [13] BELARDO, F., MARZI, E. M. L., SIMIĆ, S. K., 2010, “Trees with minimal index and diameter at most four”, *Discrete Mathematics*, v. 310, pp. 1708–1714.
- [14] BELL, F., 1991, “On the maximal index of connected graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 144, pp. 135–151.
- [15] BELL, F. K., SIMIĆ, S., 1995, “On the index of broken wheels”, *Linear and Multilinear Algebra*, v. 39 (1-2), pp. 137–152.
- [16] BENJAMIN, A. T., WALTON, D., 2009, “Counting on Chebyshev Polynomials”, *DRAFT*, v. 82 (2), pp. 1–10.
- [17] BERMAN, A., ZHANG, X. D., 2001, “On the spectral radius of graphs with cut vertices”, *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, v. 83, pp. 233–240.
- [18] BIGGS, N., 1993, *Algebraic graph theory*. 2 ed. Cambridge, Cambridge University Press.
- [19] BIYIKOĞLU, T., LEYDOLD, J., 2008, “Graphs with given degree sequence and maximal spectral radius”, *The Electronic Journal of Combinatorics*, v. 15, pp. 1–9.
- [20] BIYIKOĞLU, T., LEYDOLD, J., 2009, *Semiregular trees with minimal index*. Relatório Técnico <arXiv:0906.1517v1 [math.CO]>, WU, Vienna University of Economics and Business. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/0906.1517v1.pdf>>. Acesso em: 05 fev. 2012, 12:05.
- [21] BOAVENTURA-NETTO, P. O., 2006, *Grafos: teoria, modelos, algoritmos*. 4 ed. São Paulo, Edgar Blücher.
- [22] BOLLOBÁS, B., 1998, *Modern graph theory, Graduate text in mathematics*, v. 184. 1 ed. New York, Springer-Verlag.

- [23] BOROBIA, A., TRÍAS, U. R., 1992, “A geometric proof of the Perron-Frobenius theorem”, *Revista Matemática de la Universidad Complutense de Madrid*, v. 5 (1), pp. 57–63.
- [24] BOULET, R., 2009, “Spectral characterizations of sun graphs and broken sun graphs”, *Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science*, v. 11 (2), pp. 149–160.
- [25] BROUWER, A. E., 2008, “Small integral trees”, *The Electronic Journal of Combinatorics*, v. 15 (1), pp. 1–8.
- [26] BROUWER, A. E., HAEMERS, W. H., 2011, *Spectra of graphs*. Livro eletrônico. Disponível em: <<http://www.win.tue.nl/~aeb/2WF02/spectra.pdf>>. Acesso em: 05 nov. 2012, 12:46.
- [27] BROUWER, A. E., DEL-VECCHIO, R. R., JACOBS, D. P., et al., 2011, “Integral trees homeomorphic to a double star”, *Bulletin of the ICA*, v. 61, pp. 77–80.
- [28] BRUALDI, R. A., SOLHEID, E. S., 1986, “On the spectral radius of connected graphs”, *Publication de L’Institute Mathématique, Nouvelle série*, v. 39 (53), pp. 45–54.
- [29] CAO, D. S., 1998, “Bounds on the eigenvalues and chromatic number”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 270, pp. 1–13.
- [30] CHAKRABARTI, D., WANG, Y., WANG, C., et al., 2008, “Epidemic thresholds in real networks”, *ACM Transactions on Information and System Security*, v. 10 (4), pp. 1–26.
- [31] CHEN, X. E., 2004, “On the largest eigenvalues of trees”, *Discrete Mathematics*, v. 285, pp. 47–55.
- [32] CHUANG, H., OMIDI, G. R., 2009, “Graphs with three distinct eigenvalues and largest eigenvalue less than 8”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 430, pp. 2053–2062.
- [33] CHUNG, T., KOOLEN, J., SANO, Y., et al., 2011, “The non-bipartite integral graphs with spectral radius three”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 435, pp. 2544–2559.
- [34] CSIKVÁRI, P., 2010, “Integral trees of arbitrarily large diameters”, *Journal of Algebraic Combinatorics: An International Journal archive*, v. 32 (3), pp. 1–6.

- [35] CVETKOVIĆ, D., 1981, “Some possible directions in further investigations of graph spectra”, *Algebra Methods in Graph Theory, North-Holland, Amsterdam*, v. 1, pp. 47–67.
- [36] CVETKOVIĆ, D., GUTMAN, I., 2009, *Journal Zbornik Radova (Application of graph spectra)*, 21 (13). Beograd, Matematički institut SANU.
- [37] CVETKOVIĆ, D., LUČIĆ, R., 1970, “A new generalization of the p-sum of graphs”, *Univ. Beograd, Publ. Elektrotehn. Fak., Ser. Mat. Fiz.*, v. 302–319, pp. 67–71.
- [38] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., 1988, “On the connected graphs with maximal index”, *Publications de l’Institut Mathématique*, v. 58 (44), pp. 29–34.
- [39] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., 1990, “The largest eigenvalue of a graph: a survey”, *Linear and Multilinear Algebra*, v. 28, pp. 3–33.
- [40] CVETKOVIĆ, D., SIMIĆ, S., 2011, “Graph spectra in Computer Science”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 434, pp. 1545–1562.
- [41] CVETKOVIĆ, D., SIMIĆ, S., 1993, “Non-complete extended p-sum of graph, graph angles and star partitions”, *Publication de L’Institute Mathématique, Nouvelle série*, v. 67 (53), pp. 4–16.
- [42] CVETKOVIĆ, D., SIMIĆ, S., CAPOROSSO, G., et al., 2001, “Variable neighborhood search for extremal graphs 3. On the largest eigenvalue of color-constrained trees”, *Linear and Multilinear Algebra*, v. 49 (2), pp. 143–160.
- [43] CVETKOVIĆ, D., DAVIDOVIĆ, T., ILIĆ, A., et al., 2010, “Graphs for Small Multiprocessor Interconnection Networks”, *Appl. Math. Comput.*, v. 217, pp. 2468–2480.
- [44] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., SIMIĆ, S., 2010, *An introduction to the graph spectra, London mathematical student texts*, v. 75. Cambridge, Cambridge University Press.
- [45] DAS, K. C., KUMAR, P., 2004, “Some new bounds on the spectral radius of graphs”, *Discrete Mathematics*, v. 281, pp. 149–161.
- [46] DEL-VECCHIO, R. R., GUTMAN, I., TREVISAN, V., et al., 2009, “On the spectra and energies of double-broom-like trees”, *Kragujevac J. Sci.*, v. 31, pp. 45–58.

- [47] FERNANDES, R., GOMES, H., MARTINS, E. A., 2008, “On the spectra of some graphs like weighted rooted trees”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 428 (11-12), pp. 2654–2674.
- [48] FREITAS, M., DEL-VECCHIO, R., ABREU, N., 2010, “Spectral properties of KK_n^j graphs”, *Matemática Contemporânea*, v. 39, pp. 129–134.
- [49] FREITAS, M. A. A., DEL-VECCHIO, R. R., PATUZZI, L., 2012, “Integer indices and spectral properties for the KK_n^j graphs”, *Congressus Numeration*, v. 212, pp. 119–129.
- [50] GHORBANI, E., MOHAMMADIAN, A., TAYFEH-REZAIE, B., 2011, “Integral trees of odd diameters”, *Journal of Graph Theory. Published online in Wiley Online Library (wileyonlinelibrary.com)*, pp. 332–338. Disponível em: <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jgt.20619/pdf>. Acesso em: 05 fev. 2012, 13:10.
- [51] GÜNTHARD, H. H., PRIMAS, H., 39, “Zusammenhang von Graphtheorie und Mo-Theorie von Molekeln mit Systemen konjugierter Bindungen,”, *Helv. Chim. Acta*, v. 1956, pp. 1645–1653.
- [52] GODSIL, C. D., 1984, “Spectra of trees”, *Annals of Discrete Mathematics*, v. 20, pp. 151–159.
- [53] GODSIL, C. D., MCKAY, B. D., 1976, “Some computational results on the spectra of graphs”. In: *Lectures Notes in Mathematics, Combinatorial Mathematics IV: proceedings of the Fourth Australian Conference*, v. 560, pp. 73–92. Berlin, Springer Berlin Heidelberg, Springer-Verlag.
- [54] GODSIL, C. D., MCKAY, B. D., 1978, “A new graph product and its spectrum”, *Bull. Austral. Math. Soc.*, v. 18, pp. 21–28.
- [55] GODSIL, C. D., MCKAY, B. D., 1982, “Constructing cospectral graphs”, *Aequationes Mathematicae*, v. 252, pp. 257–268.
- [56] GODSIL, C. D., ROYLE, G., 2001, *Algebraic graph theory*, v. 207. New York, Springer-Verlag.
- [57] GODSIL, C. D., HOLTON, D. A., MCKAY, B. D., 1977, “The spectrum of a graph”. In: *Lecture Notes in Mathematics, Combinatorial Mathematics V: proceedings of the Fifth Australian Conference*, v. 622, pp. 91–117. Berlin, Springer Berlin Heidelberg, Springer-Verlag.

- [58] GRONE, R., MERRIS, R., 2008, “Indecomposable Laplacian integral graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 428, pp. 1565–1570.
- [59] GUO, J. M., SHAO, J. Y., 2006, “On the spectral radius of trees with fixed diameter”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 413, pp. 131–147.
- [60] GUO, J. M., TAN, S. W., 2001, “On the spectral radius of trees”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 329, pp. 1–8.
- [61] HAEMERS, W. H., LIU, X., ZHANG, Y., 2008, “Spectral characterizations of lollipop graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 428, pp. 2415–2423.
- [62] HARARY, F., 1969, *Graph theory*. 1 ed. Reading, Massachusetts, Addison-Wesley Publishing Company.
- [63] HARARY, F., SCHWENK, A. J., 1974, “Which graphs have integral spectra?” In: *Lecture Notes of Mathematics, Graphs and Combinatorics*, v. 406, pp. 45–51. Berlin, Springer-Verlag.
- [64] HÜCKEL, E., 1931, “Quantentheoretische Beiträge zum Benzolproblem”, *Zeitschrift für Physik a Hadrons*, v. 70 (3-4), pp. 204–286.
- [65] HOFFMAN, A. J., SMITH, J. H., 1975, “On the spectral radii of topologically equivalent graphs”. In: *Recent advances in graph theory*, pp. 273–281. New York, Academia Praha.
- [66] HOFMEISTER, M., 1997, “On the two largest eigenvalues of trees”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 260, pp. 43–59.
- [67] HOLLOS, R., HOLLOS, S., 2006, “Chebyshev Polynomials”, pp. 1–6. Disponível em: <<http://www.exstrom.com/journal/sigproc/chebident.pdf>>. Acesso em: 05 fev. 2012, 14:46.
- [68] HONG, Y., 1993, “Bounds of eigenvalues of graphs”, *Discrete Mathematics*, v. 123 (1-3), pp. 65–74.
- [69] HONG, Y., FANG, J.-L., 2001, “A sharp upper bound of the spectral radius of graphs”, *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, v. 81, pp. 177–183.
- [70] HORN, R., JOHNSON, C., 1999, *Matrix analysis*. Cambridge, Cambridge University Press.

- [71] HOU, Y., LI, J., 2002, “Bounds on the largest eigenvalues of trees with a given size of matching”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 342, pp. 203–217.
- [72] HWANG, S., 2004, “Cauchy’s interlace theorem for eigenvalues of Hermitian matrices”, *The American Mathematical Monthly*, v. February, pp. 157–159.
- [73] JACOBS, D. P., TREVISAN, V., 2011, “Locating the eigenvalues of trees”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 434, pp. 81–88.
- [74] JACOBS, D. P., TREVISAN, V., 1997, “The determinant of a tree’s neighborhood matrix”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 256, pp. 235–249.
- [75] JAHNEL, J., 2010, “When is the (co)sine of a rational angle equal to a rational number?” <*arXiv:1006.2938 [math.HO]*>. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1006.2938.pdf>>. Acesso em: 05 fev. 2012, 15:00.
- [76] KLIN, M., MUZYCHUK, M., 1998, “On graphs with three eigenvalues”, *Discrete Mathematics*, v. 189, pp. 191–207.
- [77] LEPOVIĆ, M., GUTMAN, I., 2001, “Some spectral properties of starlike trees”, *Bulletin de l’Académie Serbe des Sciences et des Arts, Classe des Sciences Mathématiques et Naturelles, Sciences mathématiques*, v. 26, pp. 107–113.
- [78] LI, W. W. F., LU, H., XU, Z., 2011, “Graphs determined by their generalized characteristic polynomials”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 434, pp. 1378–1387.
- [79] LI, X., LIN, G., 1987, “On the problem of integral trees”, *Kexue Tongbao*, v. 32 (11), pp. 813–816.
- [80] LIN, W., GUO, X., 2006, “Ordering trees by their largest eigenvalues”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 418, pp. 450–456.
- [81] MERRIS, R., 2001, *Graph theory*. Wiley-Interscience Series In Discrete Mathematics and Optimization. New York, John Wiley & Sons, Inc.
- [82] MOHAMMADIAN, A., TAYFEH-REZAIE, B., 2011, “Some constructions of integral graphs”, *Linear and Multilinear Algebra*, v. 59 (11), pp. 1269–1279.

- [83] NIKIFOROV, V., 2002, “Some inequalities for the largest eigenvalue of a graph”, *Combinatorics, probability and Computing*, v. 11 (2), pp. 179–189.
- [84] NIKIFOROV, V., 2006, “Walks and the spectral radius of graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 418 (1), pp. 257–268.
- [85] OCHAB, J. K., BURDA, Z., 2012, “Exact solution for Statics and Dynamics of Maximal Entropy Random Walk on Cayley Trees”, *Physical Review E (PRE)*, v. 85 (2), pp. 1–8. Disponível em: <<http://pre.aps.org/pdf/PRE/v85/i3/e031102>>. Acesso em: 05 fev. 2012, 16:00.
- [86] POKORNÝ, M., 2004, “A note on integral balanced rooted tress of diameter 10”, *Acta Fac. Paed. Univ. Tyrnaviensis, Ser. C*, v. 8, pp. 13–15.
- [87] RAMEZANI, F., BROOJERDIAN, N., TAYFEH-REZAIE, B., 2009, “A note on the spectral characterization of θ -graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 431, pp. 626–632.
- [88] RAYES, M. O., TREVISAN, V., WANG, P. S., 1998, “Factorization of Chebyshev Polynomials”, *Tech. Report ICM 199802-0001*. Disponível em: <<http://icm.mcs.kent.edu/reports/1998/ICM-199802-0001.pdf>>. Acesso em: 05 fev. 2012, 16:44.
- [89] READ, R., WILSON, R., 1998, *An atlas of graphs*. Oxford, Clarendon Press.
- [90] ROBBIANO, M., ROJO, O., 2007, “An explicit formula for eigenvalues of Bethe trees and upper bounds on the largest eigenvalue of any tree”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 427, pp. 138–150.
- [91] ROBBIANO, M., ROJO, O., 2007, “On the spectra of some weighted rooted trees and applications”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 420 (2-3), pp. 310–328.
- [92] ROJO, O., 2005, “Improved bounds for the largest eigenvalue of trees”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 404, pp. 297–304.
- [93] ROJO, O., 2006, “The spectra of some trees and bounds for the largest eigenvalue of any tree”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 414 (1), pp. 199–217.
- [94] ROJO, O., 2007, “The spectra of a graph obtained from copies of a generalized Bethe tree”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 420 (2-3), pp. 490–507.

- [95] ROJO, O., 2011, “Line graph eigenvalues and line energy of caterpillars”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 435, pp. 2077–2086.
- [96] ROJO, O., JIMÉNEZ, R. D., 2011, “Line graph of combinations of generalize d Bethe trees: eigenvalues and energy”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 435, pp. 2402–2419.
- [97] ROJO, O., MEDINA, L., 2009, “Spectra of generalized Bethe trees attached to a path”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 430, pp. 483–503.
- [98] ROJO, O., ROBBIANO, M., CARDOSO, D., et al., 2011, “Spectra of weighted rooted graphs having prescribed subgraphs at some levels”, *Electronic Journal of Linear Algebra*, v. 22, pp. 653–671.
- [99] SCHWENK, A. J., 1973, “Almost all trees are cospectral”. In: *New Directions in the Theory of Graphs: Proc. Third Ann. Arbor. Conf., Univ. Michigan, Ann. Arbor., Michigan, 1971*, pp. 275–307. New York, Academic Press.
- [100] SHU, J. L., WU, Y. R., 2004, “Sharp upper bounds on the spectral radius of graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 377, pp. 241–248.
- [101] SIMIĆ, S., BELARDO, F., MARZI, E. M. L., et al., 2010, “Connected graphs of fixed order and size with maximal index: some spectral bounds”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 432, pp. 2361–2372.
- [102] SIMIĆ, S. K., STANIĆ, Z., 2010, “On Q-integral $(3, s)$ -semiregular bipartite graphs”, *Applicable Analysis and Discrete Mathematics*, v. 4, pp. 167–174.
- [103] SIMIĆ, S. K., ZHOU, B., 2007, “Indices of trees with a prescribed diameter”, *Applicable Analysis and Discrete Mathematics*, v. 1, pp. 446–454.
- [104] SIMIĆ, S., MARZI, E. L., BELARDO, F., 2008, “On the index of caterpillars”, *Discrete Mathematics*, v. 308, pp. 324–330.
- [105] STEVANOVIĆ, D., 2003, “Bounding the largest eigenvalue of trees in terms of the largest vertex degree”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 360, pp. 35–42.
- [106] STEVANOVIĆ, D., 2011, “Two spectral characterizations of regular, bipartite graphs with five eigenvalues”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 435, pp. 2612–2625.
- [107] STEVANOVIĆ, D., 1999, “Noexistence of some 4-regular integral graphs”, *Univ. Beograd. Publ. Elektrotehn. Fak., Ser. Mat.*, v. 10, pp. 81–86.

- [108] TAN, S., YAO, Y. H., 2009, “On the spectral radius of weighted trees with fixed diameter and weight set”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 431, pp. 86–98.
- [109] TAN, S. W., 2010, “On the weighted trees with given degree sequence and positive weight set”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 433, pp. 380–389.
- [110] TANG, Z., HOU, Y., 2010, “The integral graphs with index 3 and exactly two main eigenvalues”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 433, pp. 984–993.
- [111] TYOMKYNA, M., UZZELL, A., 2012, *A Turán-type problem on distances in graphs*. Relatório Técnico <arXiv:1011.2450v2[math.CO]>. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1011.2450v2.pdf>>. Acesso em: 05 fev. 2012, 12:05.
- [112] VAN DAM, E. R., HAEMERS, W. H., 2009, “Developments on spectral characterizations of graphs”, *Discrete Mathematics*, v. 309, pp. 576–586.
- [113] VAN DEN DRIESSCHE, P., OLESKY, D. D., ROY, A., 2002, “Maximal graphs and graphs with maximal spectral radius”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 346, pp. 109–130.
- [114] VON COLLATZ, L., SINOGOWITZ, U., 1957, “Spektren endlicher Graphen”, *Abhandlungen aus dem Mathematischen Seminar der Universität Hamburg*, v. 21, pp. 63–77.
- [115] WANG, J., HUANG, Q., BELARDO, F., et al., 2009, “A note on the spectral characterization of dumbbell graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 437, pp. 1707–1714.
- [116] WANG, J., HUANG, Q., BELARDO, F., et al., 2010, “On the spectral characterizations of ∞ -graphs”, *Discrete Mathematics*, v. 310, pp. 1845–1855.
- [117] WANG, J., HUANG, Q., BELARDO, F., et al., 2010, “Spectral characterizations of dumbbell graphs”, *The Electronic Journal of Combinatorics*, v. 17, pp. 1–16.
- [118] WANG, L., 2005, *Integral trees and integral graphs*. Tese de Doutorado, University of Twente, .
- [119] WANG, L., 2005, “A survey of results on integral trees and integral graphs”, *Memorandum, Department of Applied Mathematics, University of Twente, Enschede*, v. 1763, pp. 1–22.

- [120] WANG, L., LIU, X., 2008, “Integral complete multipartite graphs”, *Discrete Mathematics*, v. 308, pp. 3860–3870.
- [121] WANG, L., WANG, Q., 2010, “Integral complete multipartite graphs $K_{a_1.p_1, a_2.p_2, \dots, a_s.p_s}$ with $s = 5, 6$ ”, *Discrete Mathematics*, v. 310, pp. 812–818.
- [122] WANG, L., LI, X., YAO, X., 2002, “Integral trees with diameters 4, 6 and 8”, *Australasian Journal of Combinatorics*, v. 25, pp. 29–44.
- [123] WANG, L., LI, X., ZHANG, S., 2004, “Families of integral trees with diameters 4, 6 and 8”, *Discrete Applied Mathematics*, v. 136, pp. 349–362.
- [124] WANG, L., BROERSMA, H., HOEDE, C., et al., 2008, “Some families of integral graphs”, *Discrete Mathematics*, v. 308, pp. 6383–6391.
- [125] WATANABE, M., SCHWENK, A. J., 1979, “Integral starlike trees”, *J. Austral Math. Soc. (Series A)*, v. 28, pp. 120–128.
- [126] WU, B., XIAO, E., HONG, Y., 2005, “The spectral radius of trees on k pendent vertices”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 395, pp. 343–349.
- [127] XU, G. H., 1997, “On the spectral radius of trees with perfect matchings”, *Combinatorics and Graph Theory, World Scientific, Singapore*.
- [128] YIN, S., 2008, “Investigation on spectrum of the adjacency matrix and Laplacian matrix of graph \mathcal{G}_l ”, *WSEAS TRANSACTIONS on SYSTEMS*, v. 7 (4), pp. 362–372.

Índice Remissivo

- acíclico, 6
- acoplamento, 8
 - máximo, 8
 - maximal, 8
 - perfeito, 8
- algoritmo AlgoJT, 65
- ângulo racional, 73
- aresta
 - adjacente, 5
 - pendente, 6
- árvore, 7
 - balanceada, 56
 - de Bethe, 56
 - generalizada, 56
 - de Cayley, 58
 - de diâmetro 4, 86
 - starlike, 74
 - balanceada, 74
 - quase balanceada, 76
- autovalor, 8
 - de um grafo, 8
- autovetor de Perron, 10
 - da árvore $R(b, r, a)$, 91
- cadeia, 6
 - fechada, 6
- caminho, 6, 27
- caminho interno, 22
- caterpillar, 58
 - regular, 64
- ciclo, 6
- cintura, 7
- classes da partição, 7
- coalescência, 18
- componente conexa, 12, 26
- conexo, 7, 12
- Conjectura(s)
 - de Caporossi *et al.*, 58
- cópias de H , 12
- desconexo, 7
- Desigualdade(s)
 - de Berman e Zhang, 29
 - de Cao, 28
 - de Collatz e Sinogowitz, 26
 - de Das e Kumar, 29
 - de Das e Kumar e de Cao, 30
 - de Fang, Hong e Shu e de Nikiforov, 31
 - de Favaron, Mathéo e Sácle, 29
 - de Godsil, 56
 - de Guo e Tan, 61
 - de Hofmeister, 27
 - de Hong, 28
 - de Nosal, 27
 - de She e Wu, 31
 - de Stanley, 28
 - de Wilf, 28
 - de Wu *et al.*, 62
 - de Xu, 61
- diâmetro, 7
- distância, 7
- dupla estrela, 16, 58
 - balanceada, 16
- dupla vassoura, 16
 - balanceada, 16

excentricidade, 7
 floresta, 6
 formação espiralada, 63
 fórmula de redução, 20
 de Lovász e Pelikán, 21
 grafo, 5
 bipartido, 7, 10
 semirregular, 8
 birregular, 6
 p -broom-like, 48
 coespectrais, 9
 complementar, 6
 completo, 6
 corona, 16
 cúbico, 40
 disjuntos, 12
 do tipo KK_n^j , 44
 enraizado, 18
 estrela, 6
 extremal, 23
 integral, 39, 64
 isomorfos, 9
 linha, 14
 maximal, 23
 minimal, 23
 k -partido, 7
 completo, 7
 regular, 6
 Smith, 41
 sol, 16
 generalizado, 17
 quebrado, 17
 threshold, 24
 valorado, 57
 vazio, 6
 grafo determinado por seu espectro, 100
 grau, 5
 máximo, 5
 médio, 5
 médio do vértice, 5
 mínimo, 5
 índice, 8
 de um caminho, 26
 de um grafo, 8
 de um grafo completo, 26
 de uma árvore de Bethe, 57
 de uma estrela, 26
 de uma roda, 31
 isomorfismo, 9
 join, 15
 localizar um autovalor, 65
 matriz
 de adjacência, 8
 de incidência, 8
 dos graus, 8
 escada, 24
 irreduzível, 10
 laplaciana, 8
 laplaciana sem sinal, 8
 simétrica, 8
 nível, 7
 NEPS, 13
 comutativo, 14
 operações, 11
 cartesianas, 12
 elementares, 11
 polinômio
 de Chebyshev de segundo tipo, 64
 polinômio característico, 8
 de um grafo, 8
 ponte, 21
 ponto de articulação, 21
 Problema(s)

- de Guo e Li, 61
- produto, 13
 - cartesiano, 14
 - enraizado, 18
 - forte, 13
 - hierárquico, 18
- quase regular, 6
- raio, 7
- raio espectral, 8
- raiz, 7, 18
- roda, 32
 - quebrada, 32
- soma, 12
- subdivisão da aresta, 21
- subdivisão do grafo, 21
- subgrafo
 - gerado por, 6
 - gerador, 6
 - induzido, 6, 19
 - próprio, 6, 19
- supergrafo
 - gerador, 6
 - próprio, 6, 19
- superposição, 12
- Teorema
 - de Das e Kumar, 56
 - de Entrelaçamento, 19
 - de Hofmeister, 59
 - de Perron-Frobenius, 9
 - de Rayleigh-Ritz, 11
 - de Rojo, 56
- união, 11
- unicíclico, 7, 18
- vértice
 - adjacente, 5
 - central, 7
 - dominante, 6
 - final da cadeia, 6
 - inicial da cadeia, 6
 - isolado, 6
 - pendente, 6, 20
 - quase pendente, 63
 - universal, 6
 - vizinho, 5
- vassoura, 16
 - enraizada, 48
 - generalizada, 74