



## UM ESTUDO SOBRE A MATRIZ DISTÂNCIA DE GRAFOS

Joice Santos do Nascimento

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  
Abril de 2018

UM ESTUDO SOBRE A MATRIZ DISTÂNCIA DE GRAFOS

Joice Santos do Nascimento

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

Examinada por:

---

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

---

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

---

Prof. Nair Maria Maia Abreu, D.Sc.

---

Prof. Fabio Protti, D.SC.

---

Prof. Christina Fraga Esteves Maciel Waga, D.SC.

---

Prof. Leonardo Silva de Lima, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

ABRIL DE 2018

Nascimento, Joice Santos do

Um estudo sobre a matriz distância de grafos/Joice Santos do Nascimento. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2018.

X, 79 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Maria Agueiras Alvarez de Freitas

Renata Raposo Del-Vecchio

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia de Produção, 2018.

Referências Bibliográficas: p. 78 – 79.

1. matriz distância. 2. autovalores distintos. 3. multiplicidade. I. Freitas, Maria Agueiras Alvarez de *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia de Produção. III. Título.

*A meu filho Leonardo, como  
recompensa por todos os  
momentos roubados.  
Ao meu irmão, Rubens (in  
memoriam).*

# Agradecimentos

A Deus pela ajuda, presença e inspiração.

Às minhas orientadoras, Maria e Renata, pela confiança, tempo e dedicação prestados ao meu ensino.

Ao meu amigo Diego, por toda ajuda.

E ao meu marido Fabio, por toda paciência.

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 A MATRIZ DISTÂNCIA DE GRAFOS

Joice Santos do Nascimento

Abril/2018

Orientadores: Maria Agueiras Alvarez de Freitas

Renata Raposo Del-Vecchio

Programa: Engenharia de Produção

Neste trabalho, discutimos aspectos importantes de duas famílias de grafos: os *caterpillar* e os *threshold*, com o objetivo de determinar a multiplicidade de autovalores da matriz distância desses grafos e o número de autovalores distintos. Para alguns desses grafos, conseguimos descrever exatamente os autovalores ou localizá-los entre cotas melhores que as encontradas na literatura. Também determinamos um novo parâmetro do grafo *threshold* que está associado tanto à estrutura quanto à aspectos espectrais do grafo. Esse parâmetro nos permitiu determinar a multiplicidade de alguns autovalores quanto o número de autovalores distintos. Por fim, verificamos que grafos com quatro ou cinco autovalores distintos são caracterizados por seu espectro.

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 ABOUT THE DISTANCE MATRIX OF GRAPH

Joice Santos do Nascimento

April/2018

Advisors: Maria Agueiras Alvarez de Freitas

Renata Raposo Del-Vecchio

Department: Production Engineering

In this thesis we discuss important aspects of two families of graphs: Caterpillar and Threshold graphs. Our goal is to determine the multiplicity of the distance eigenvalues and the number of distinct distance eigenvalues for these graphs. For some graphs within these families, we are able to describe exactly the eigenvalues or locate them between better bounds than those found in the literature. We also determine a new parameter to threshold graphs which is associated with the structure as well as spectral aspects of the graph. This parameter allow us to calculate the multiplicity of some eigenvalues and the number of distinct distance eigenvalues. Finally, we verify that the threshold graphs with four or five distinct distance eigenvalues are characterized by their spectrum.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>ix</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Conceitos básicos</b>	<b>3</b>
2.1 Conceitos básicos sobre Teoria de Matrizes . . . . .	3
2.2 Conceitos básicos sobre Teoria de Grafos . . . . .	6
2.3 Conceitos básicos sobre Teoria Espectral de Grafos . . . . .	8
2.3.1 Sobre árvores . . . . .	10
2.3.2 Sobre grafos threshold . . . . .	12
<b>3 Os <math>D</math>-autovalores de grafos <i>caterpillar</i></b>	<b>13</b>
3.1 Resultados . . . . .	13
3.2 Grafos <i>caterpillar</i> de diâmetros 3 ou 4 . . . . .	39
<b>4 Os <math>D</math>-autovalores de grafos <i>threshold</i></b>	<b>50</b>
4.1 Resultados . . . . .	50
4.2 Grafos com variação binária mínima . . . . .	58
4.3 Grafos com variação binária máxima . . . . .	59
4.4 Índice de Wiener . . . . .	61
4.5 Caracterização de grafos threshold com 4 e 5 $D$ -autovalores distintos	63
4.6 Duas famílias de grafos threshold . . . . .	66
4.7 Variação binária como uma ferramenta estrutural . . . . .	72
<b>5 Conclusão</b>	<b>76</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>78</b>



# Lista de Figuras

2.1	Grafo threshold $(0, 0, 1, 1, 1, 0, 0, 1)$ . . . . .	7
2.2	Grafo split-completo . . . . .	8
3.1	$P_5$ e $V(1, 5, 4)$ . . . . .	14
3.2	$V(5, 5, 4)$ e $C(5, 2, 5)$ . . . . .	14
3.3	$C(2, 3, 1) \approx C(1, 3, 2)$ . . . . .	14
3.4	Dupla vassoura $V(t, s, d)$ . . . . .	15
3.5	$V(4, 5, 4)$ . . . . .	18
3.6	$V(3, 5, 8)$ . . . . .	18
3.7	Caterpillar $C(1, 1, 1)$ . . . . .	20
3.8	Caterpillar $C(p)$ de diâmetro $d + 1$ , com $p_1 = p_{d-1} = p_d = 1$ . . . . .	21
3.9	Caterpillar $C(p)$ de diâmetro $d + 1$ , com $p_2 = 1$ e $p_{d-1} = 0$ . . . . .	22
3.10	Caterpillar $C(p)$ de diâmetro $d + 1$ , com $p_2 = p_{d-1} = 0$ . . . . .	22
3.11	Caterpillar $C(p) \in \mathcal{C}'$ . . . . .	26
3.12	$C(2, 2, 0, 3)$ . . . . .	27
3.13	Ciclo $C_8$ . . . . .	28
3.14	Caterpillar $C(p) \in \mathcal{C}'$ . . . . .	32
3.15	Árvore $T$ . . . . .	37
3.16	$C(6, 0, 1, 3, 2, 3, 3)$ . . . . .	37
3.17	$C(4, 2, 1, 3, 2, 3, 3)$ . . . . .	38
3.18	Dupla vassoura $V(t, s, 3)$ . . . . .	39
3.19	$V(3, 3, 3)$ . . . . .	41
3.20	$V(t, t, 3)$ , $V(t, s, 3)$ e $V(s, s, 3)$ . . . . .	43
3.21	Dupla Vassoura $V(t, s, 4)$ . . . . .	44
3.22	$V(t, t, 4)$ , $V(t, s, 4)$ e $V(s, s, 4)$ . . . . .	46
3.23	$C(t, t, t)$ . . . . .	47
4.1	Grafo threshold $(0, 0, 1, 1, 1, 0, 0, 1)$ . . . . .	51
4.2	Grafo threshold $G_1$ e $G_2$ . . . . .	56
4.3	Grafo split-completo . . . . .	59
4.4	Grafo threshold $G = (0, 1, 0, 1, 0, 1)$ . . . . .	60

4.5	Grafo threshold $G = (0, 1, 0, 1, 0, 0, 1)$ . . . . .	60
4.6	Grafo threshold $G = (0, 1, 0, 1, 1, 0, 1)$ . . . . .	60
4.7	Pineapple . . . . .	67
4.8	Pineapple, $G_{1,0} = (0, 1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 1)$ , $G_{2,0} = (0, 1, 1, 1, 0, 0, 1, 0, 1)$ . .	68
4.9	$G_{1,1} = (0, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 1, 1)$ , $G_{2,1} = (0, 1, 1, 0, 0, 1, 0, 1, 1)$ e $G_{0,5} =$ $(0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1)$ . . . . .	68
4.10	Pineapple, $F_{1,0} = (0, 1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 1)$ , $F_{2,0} = (0, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 1)$ . .	68
4.11	$F_{0,1} = (0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 1)$ , $F_{1,1} = (0, 0, 1, 1, 1, 0, 1, 0, 1)$ e $F_{0,3} =$ $(0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1)$ . . . . .	69
4.12	Grafo threshold $(0, 0, 1, 1, 1, 0, 0, 1)$ . . . . .	73
4.13	Grafo threshold $G$ . . . . .	74

# Capítulo 1

## Introdução

A Teoria Espectral de Grafos procura estudar propriedades intrínsecas de um grafo através do espectro de diversas matrizes a ele relacionadas, tais como as matrizes de adjacência, laplaciana, laplaciana sem sinal, distância e outras. Entre os diversos problemas discutidos pela Teoria Espectral de Grafos estão a determinação de autovalores de matrizes e sua multiplicidade, a localização dos mesmos, a caracterização de grafos a partir de seu espectro e determinação de cotas mínimas para o número de autovalores distintos.

O objetivo desse trabalho é estudar o espectro da matriz distância de algumas famílias de grafos com o intuito de localizar e determinar seus autovalores bem como a multiplicidade dos mesmos.

Em 1971, GRAHAM e POLLACK [1] estabeleceram a relação entre o número de autovalores negativos da matriz distância de um grafo e o problema de abordagem de sistemas de comunicação. Eles também provaram que o determinante da matriz distância de uma árvore depende apenas de seu número de vértices [1]. A partir desse ponto, vários matemáticos passaram a estudar a matriz distância de grafos, bem como suas propriedades espectrais.

No Capítulo 2, fazemos uma busca na literatura sobre matrizes distância de árvores e de grafos *threshold*, tais como uma caracterização da inversa da matriz distância de uma árvore determinada em [2], o espectro da matriz distância de um caminho [3], o estudo dos autovalores simples da matriz distância de grafos *threshold* [4] e outras várias observações mais gerais acerca de matrizes e grafos. Ainda abordamos alguns elementos estruturais de grafos cordais [5], como uma classe que contém os grafos *threshold*.

No Capítulo 3, desenvolvemos nosso estudo sobre a matriz distância de uma família de árvores, os grafos *caterpillar*. Em [6], COLLINS determinou uma cota mínima para a multiplicidade de  $-2$  como autovalor da matriz distância de uma árvore, e em [7] MERRIS, alguns autovalores foram localizados em dados intervalos reais. Usamos esses fatos como ponto de partida de nosso estudo e conseguimos

determinar a multiplicidade de  $-2$  como autovalor da matriz distância de qualquer grafo *caterpillar*.

Um resultado conhecido sobre grafos é que o número de autovalores distintos da matriz de adjacência é no mínimo o diâmetro do grafo mais uma unidade; já no caso da matriz distância isso não ocorre. Em [8] foi estabelecido que o número de autovalores distintos da matriz distância de uma árvore é no mínimo a metade de seu diâmetro. Nós determinamos exatamente o número de autovalores distintos da matriz distância dos grafos *caterpillar*.

Em [6], COLLINS descreveu uma técnica para determinar fatores do polinômio característico da matriz distância de um grafo qualquer. Ao tratar de uma dupla vassoura equilibrada (ou duplo cometa equilibrado), a autora cometeu um erro em sua técnica; na Seção 3.2 corrigimos tal erro e calculamos o polinômio característico da matriz distância da dupla vassoura equilibrada.

No Capítulo 4 estudamos da matriz distância de grafos *threshold*, que são grafos definidos por uma sequência binária. JACOBS *et al* [4] provaram que todo autovalor da matriz distância que for distinto de  $-2$  e  $-1$  é simples. Usamos esse resultado como ponto de partida para determinar quando  $-1$  e  $-2$  são autovalores da matriz distância de um grafo *threshold* e, em caso afirmativo, obter suas multiplicidades. Para realizar esse estudo definimos, na Seção 4.1, um novo parâmetro, a *variação binária*, que nos permite descrever alguns aspectos do espectro da matriz distância de grafos *threshold* tais como a multiplicidade exata de  $-1$  e  $-2$  como autovalores e o número de autovalores distintos. Ainda neste capítulo, estudamos os casos extremos, onde a variação binária é mínima ou máxima. Na Seção 4.4 aplicamos os resultados encontrados para estudar grafos *threshold* com 4 ou 5 autovalores da matriz distância distintos. Na Seção 4.5, estendemos nossos resultados à duas famílias de grafos *threshold* estudados em [9] e [10]. E na Seção 4.6 estudamos grafos *threshold* como uma subclasse de grafos cordais e sua relação com a variação binária.

No Capítulo 5 apresentamos a conclusão dos fatos aqui descritos e propostas para trabalhos futuros.

# Capítulo 2

## Conceitos básicos

Nesse capítulo apresentamos alguns conceitos básicos sobre Teoria de Matrizes, de Teoria de Grafos e de Teoria Espectral de Grafos.

### 2.1 Conceitos básicos sobre Teoria de Matrizes

Nessa seção vamos revisar alguns conteúdos sobre Teoria de Matrizes. Tais resultados envolvem matrizes quadradas e simétricas, visto que nosso interesse é estudar os autovalores dessas matrizes. Os conceitos aqui abordados podem ser encontrados em [11] e [12].

Seja  $C = [c_{ij}]$  uma matriz quadrada de ordem  $n$  com entradas reais. A matriz transposta de  $C$  é a matriz  $C^t = [e_{ij}]$  satisfazendo a  $e_{ij} = c_{ji}$  para  $1 \leq i, j \leq n$ . Se  $C = C^t$  dizemos que a matriz  $C$  é simétrica.

O posto de uma matriz  $C$  de ordem  $n \times m$  é o número de linhas ou colunas linearmente independentes de  $C$ .

**Definição 2.1.1.** *Uma matriz quadrada  $C = [c_{ij}]$  de ordem  $n \times n$  é dita tridiagonal se  $c_{ij} = 0$  sempre que  $|i - j| > 1$ .*

$$C = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & 0 & & 0 & 0 \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & & 0 & 0 \\ 0 & c_{32} & c_{33} & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-2n-1} & 0 \\ 0 & 0 & & c_{n-1n-2} & c_{n-1n-1} & c_{n-1n} \\ 0 & 0 & & 0 & c_{nn-1} & c_{nn} \end{bmatrix}$$

**Observação 2.1.2.** *Podemos verificar que o posto de uma matriz tridiagonal  $C$  é no mínimo  $n - 1$  se  $c_{ij} \neq 0$  sempre que  $i = j + 1$ . De fato, a submatriz quadrada  $C'$  formada pelas linhas  $2, 3, \dots, n$  e pelas colunas  $1, 2, \dots, n - 1$  será uma matriz*

triangular superior com determinante não nulo, já que sua diagonal principal é formada por elementos não nulos.

$$C' = \begin{bmatrix} c_{21} & c_{22} & c_{23} & & 0 \\ 0 & c_{32} & c_{33} & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-2n-1} \\ 0 & 0 & & c_{n-1n-2} & c_{n-1n-1} \\ 0 & 0 & & 0 & c_{nn-1} \end{bmatrix}$$

Então  $C$  possuiu  $n - 1$  linhas (ou colunas) linearmente independentes.

Uma maneira de determinar o posto de uma matriz  $C$  de ordem  $n$  é fazer uso de operações elementares, por vezes lançaremos mão desse recurso. Denotaremos as operações entre linhas por  $R_i \leftarrow aR_i + bR_j$ , para algum  $1 \leq i, j \leq n$ , com  $a$  e  $b$  constantes reais, que significa que vamos trocar a linha  $R_i$  da matriz  $C$  pelo resultado da operação  $aR_i + bR_j$ . Analogamente, as operações colunas são denotadas por  $C_i \leftarrow aC_i + bC_j$  para algum  $1 \leq i, j \leq n$  com  $a$  e  $b$  constantes reais.

Sejam  $C$  e  $C'$  duas matrizes de mesma ordem onde  $C'$  é o resultado de uma ou mais operações elementares aplicadas a  $C$ , então dizemos que  $C$  e  $C'$  são equivalentes.

Algumas notações de matrizes são necessárias tais como a matriz  $J_{p,q}$  é a matriz de ordem  $p \times q$  onde todas as entradas são iguais a 1,  $I_p$  é a matriz identidade de ordem  $p$  e o vetor  $\mathbf{k}_p$  é o vetor coluna de  $p$  entradas iguais a  $k$  constante real.

O polinômio característico de uma matriz  $C$  de ordem  $n$  é definido pelo polinômio mônico  $p_C(\lambda) = \det(\lambda I_n - C)$ . Se  $C$  é uma matriz simétrica, as raízes de seu polinômio característico são todas reais e são chamadas de  $C$ -autovalores e ao multiconjunto desses  $C$ -autovalores chamamos de  $C$ -espectro. Se  $\lambda$  é um  $C$ -autovalor então existe uma matriz coluna não nula  $\mathbf{w}$  com  $n$  linhas tal que  $C\mathbf{w} = \lambda\mathbf{w}$ , chamamos  $\mathbf{w}$  de  $C$ -autovetor associado a  $\lambda$ .

Uma partição de um conjunto  $S$  é uma coleção de subconjuntos não vazios  $S_1, S_2, \dots, S_l$  de  $S$  tais que  $S_i \cap S_j = \emptyset$  se  $i \neq j$  e  $S = S_1 \cup S_2 \cup \dots \cup S_l$ .

**Definição 2.1.3.** [13] Seja  $X = X_1 \cup X_2 \cup \dots \cup X_l$  uma partição do conjunto  $\{1, 2, \dots, n\}$  e  $|X_i| = n_i$ . Vamos descrever a matriz  $C$  como matriz dos blocos correspondentes a partição  $X$  na forma:

$$\begin{bmatrix} C_{1,1} & \dots & C_{1,l} \\ \vdots & & \vdots \\ C_{l,1} & \dots & C_{l,l} \end{bmatrix}$$

Assim cada bloco  $C_{i,j}$  tem ordem  $n_i \times n_j$ . Dizemos que  $X$  é uma partição equilibrada de  $C$  quando em cada bloco  $C_{i,j}$  temos que a soma de cada linha é constante.

**Teorema 2.1.4.** [13] Consideremos  $X$  uma partição equilibrada de uma matriz quadrada  $C$  de ordem  $n$  onde em cada bloco  $C_{ij}$  a soma de suas linhas é constante e igual a  $c_{ij}$ . Seja  $C' = (c_{ij})_{i,l}$ , então os autovalores não nulos de  $C'$  pertencem ao  $C$ -espectro, levando em conta as multiplicidades.

Outro teorema importante da Teoria de Matrizes é o Teorema de Perron-Frobenius, porém antes de o enunciarmos precisamos de algumas definições.

**Definição 2.1.5.** [13] Dizemos que uma matriz  $C$  é não-negativa (ou positiva) quando todas as suas entradas são não-negativas (ou positivas).

Dizemos que uma matriz simétrica  $C$  é irredutível quando não existe uma matriz de permutação  $P$  tal que a matriz  $PCP^t$  é escrita da seguinte forma

$$\begin{bmatrix} Y & W \\ \mathbf{0} & Z \end{bmatrix},$$

onde  $Y$  e  $Z$  são matrizes quadradas e  $\mathbf{0}$  representa uma matriz nula. Caso contrário, dizemos que  $C$  é uma matriz redutível.

**Teorema 2.1.6.** [13] (Teorema de Perron-Frobenius). Suponhamos que  $C$  seja matriz simétrica, não negativa e irredutível, e que  $c_1 \geq c_2 \geq \dots \geq c_n$  sejam seus autovalores em ordem não crescente. Então

- $c_1 > 0$  e existe um autovetor com todas as entradas positivas associado a ele;
- $c_1 > c_2$ ;
- $|c_i| \leq c_1$ , para todo  $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ .

Pelo Teorema de Perron-Frobenius temos que o maior autovalor de uma matriz simétrica, não negativa e irredutível é simples. Tal autovalor é chamado de *raio espectral* e também é alvo de vários estudos, como veremos nas próximas seções. O raio espectral de  $C$  será denotado por  $\rho_C$  e o autovetor positivo e unitário  $\mathbf{x}_c$  associado à  $\rho_C$  é chamado de vetor de Perron.

Ainda usaremos o teorema a seguir, conhecido como Teorema do Entrelaçamento para matrizes.

**Teorema 2.1.7.** [11] Sejam  $C$  uma matriz simétrica de ordem  $n$  e  $M$  uma matriz de ordem  $n \times m$ , ambas com entradas reais, tal que  $M^t M = I_m$  e  $n \geq m$ . Sejam  $c_1 \geq c_2 \geq \dots \geq c_n$  e  $c'_1 \geq c'_2 \geq \dots \geq c'_m$  autovalores de  $C$  e  $M^t C M$ , respectivamente. Então para cada  $i$ ,  $1 \leq i \leq m$ , vale

$$c_{n-m+i} \leq c'_i \leq c_i.$$

Veremos algumas aplicações do teorema do entrelaçamento nesse trabalho. Em geral, nos valem dele para localizar autovalores, determinar cotas mínimas para suas multiplicidades, entre outras aplicações.

## 2.2 Conceitos básicos sobre Teoria de Grafos

Os conceitos aqui abordados podem ser encontrados em [13] e [5]

Seja  $G = (V, E)$  um grafo simples, não orientado com  $n$  vértices, onde  $V$  é o conjunto de vértices e  $E$  o conjunto de arestas. Dizemos que dois vértices  $u$  e  $v$  de  $G$  são adjacentes se existe a aresta  $\{u, v\} \in E$ . Dada uma aresta  $\{u, v\} \in E$  dizemos que  $\{u, v\}$  incide em  $v$  (e em  $u$ ).

O grau de cada vértice  $v \in V$  é igual ao número de arestas que incidem nele. O grau máximo de  $G$ , denotado por  $\Delta$ , é o maior grau dentre todos os graus de vértices de  $G$  e o grau mínimo, denotado por  $\delta$ , é o menor grau dentre os graus de todos os vértices de  $G$ . Se algum vértice  $v$  de  $G$  tem grau igual a 1 dizemos que  $v$  é um vértice *pendente* de  $G$ . Um grafo  $G$  é dito *regular* quando os graus de todos os seus vértices são iguais.

Quando  $G' = (V', E')$  é um grafo satisfazendo  $V' \subset V$  e  $E' \subset E$  escrevemos  $G' \subset G$  e dizemos que  $G'$  é um *subgrafo* de  $G$ . Quando  $G' \subset G$  é tal que dois vértices são adjacentes em  $G'$  se e somente se eles são adjacentes em  $G$ , dizemos que  $G'$  é um *subgrafo induzido* de  $G$ .

Um grafo  $G = (V, E)$  é dito *completo* quando para quaisquer vértices  $v_i$  e  $v_j \in V$  temos que  $\{v_i, v_j\} \in E$ . Um grafo completo com  $n$  vértices será denotado por  $K_n$ . Seja  $G = (V, E)$  um grafo, dizemos que um subconjunto não vazio  $V' \subset V$  é um *conjunto independente* se  $\{v, u\} \notin E$ , para todos  $v, u \in V'$ . Dizemos que um conjunto  $V' \subset V$  é uma *clique* se  $\{v, u\} \in E$  para todos  $u, v \in V'$ . Chamamos de *número clique*  $\omega$  o número de vértices da maior clique do grafo. Um grafo  $G = (V, E)$  é dito *multipartido completo* quando seu conjunto de vértices pode ser escrito como união de subconjuntos  $V_1, V_2, \dots, V_l$  de  $V$  de modo que  $V_i \cap V_j = \emptyset$ , se  $i \neq j$ ,  $V = V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_l$  e  $\{v, u\} \in E$  se, e somente se,  $u \in V_i$  e  $v \in V_j$  com  $i \neq j$ . Um grafo multipartido completo será denotado por  $K_{n_1, n_2, \dots, n_l}$  onde  $|V_i| = n_i$  para todo  $i = 1, 2, \dots, l$  com  $n = n_1 + n_2 + \dots + n_l$ . Em particular, quando  $l = 2$  dizemos que  $K_{n_1, n_2}$  é um grafo *bipartido completo*. Uma *estrela* é um grafo bipartido completo onde  $n_1 = 1$ , ou seja, é o grafo  $K_{1, n-1}$  com  $n \geq 2$ .

Uma sequência finita  $v_1, v_2, \dots, v_j$  de vértices de um grafo  $G$  é dita uma *cadeia* quando  $\{v_i, v_{i+1}\} \in E$ , para todo  $i = 1, 2, \dots, j - 1$ . Uma cadeia é dita fechada (respectivamente, aberta) quando  $v_1 = v_j$  (respectivamente,  $v_1 \neq v_j$ ). Dada uma cadeia  $v_1, v_2, \dots, v_l$  de vértices dois a dois distintos, denotaremos por  $P_l$  o subgrafo formado pelos vértices desta cadeia e pelas arestas  $\{v_i, v_{i+1}\}$ ,  $i = 1, 2, \dots, l - 1$  e dizemos que  $P_l$  é um *caminho* de comprimento  $l - 1$  do grafo. Dada uma cadeia fechada  $v_1, v_2, \dots, v_l$  na qual  $v_i = v_j$  se, e somente se,  $i = 1$  e  $j = l$ , denotaremos por  $C_l$  o subgrafo formado pelos vértices desta cadeia e pelas arestas  $\{v_i, v_{i+1}\}$ ,  $i = 1, 2, \dots, l - 1$  e dizemos que  $C_l$  é um *ciclo* de comprimento  $l$  do grafo.



Um grafo  $G$  é dito *conexo* se para quaisquer dois vértices  $u$  e  $v$  de  $G$  existe pelo menos um caminho que os liga. Um grafo  $T$  é uma *árvore* se é um grafo conexo sem ciclos. Da literatura sabemos que se  $n$  é o número de vértices de uma árvore então seu número de arestas é  $n - 1$ . Um vértice pendente de uma árvore  $T$  é chamado de *folha*. Um vizinho pendente ou quase-folha é um vértice adjacente a um vértice pendente ou a uma folha.

Sejam  $G_1 = (V_1, E_1)$  e  $G_2 = (V_2, E_2)$  grafos com  $V_1 \cap V_2 = \emptyset$ . O grafo *união*  $G_1 \cup G_2$  é aquele cujo conjunto de vértices é dado por  $V_1 \cup V_2$  e o conjunto de arestas é dado por  $E_1 \cup E_2$ . O grafo *join* de  $G_1$  e  $G_2$  é obtido de  $G_1 \cup G_2$  unindo-se cada vértice de  $G_1$  com todos os vértices de  $G_2$  por uma aresta, e é denotado por  $G_1 \vee G_2$ .

Neste trabalho também estudamos uma classe de grafos chamada *threshold*. Tal classe possui aplicações em várias áreas como psicologia, sincronização de processos paralelos, eficiência e estabilidade de estruturas de redes, entre outras [14, 15]. Provavelmente, devido às inúmeras aplicações, a classe de grafos *threshold* é caracterizada de várias maneiras, entre elas temos grafos livres de  $\{K_2 \cup K_2, C_4, P_4\}$ , grafos *nested split*, unigrafos e, por fim, através de uma sequência binária.

**Definição 2.2.1.** [11] Um grafo *threshold*  $G = (V, E)$  com  $n$  vértices é definido por uma sequência binária  $(b_1, b_2, \dots, b_n)$  onde  $b_i = 0$  representa adição de um vértice isolado e  $b_i = 1$ , representa adição de um vértice dominante (o vértice  $v_i$  é dominante se  $\{v_i, v_j\} \in E$  para todo  $j < i$ ). O número de entradas unitárias da sequência binária é chamado de *traço do grafo*, e será denotado por  $\tau$ . Por convenção, definimos que  $b_1 = 0$  e  $b_n = 1$  em todo grafo *threshold*, ou seja, todo grafo *threshold* aqui mencionado será *conexo*.

**Exemplo 2.2.2.** A Figura 4.12 mostra a construção do grafo *threshold* definido pela sequência binária  $(0, 0, 1, 1, 1, 0, 0, 1)$  que tem 8 vértices e traço 4.

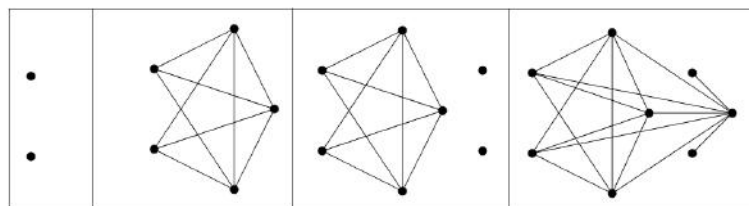


Figura 2.1: Grafo *threshold*  $(0, 0, 1, 1, 1, 0, 0, 1)$

Uma subclasse de grafos *threshold* que também estudamos é a de grafos *split-completos*:

**Definição 2.2.3.** Um grafo  $G = (V, E)$  é dito *split-completo* quando ele é o resultado do *join* de um grafo completo  $K_a$  e a união de  $b$  vértices, ou seja,  $G = bK_1 \vee K_a$ . Nesse caso, temos que os vértices de  $bK_1$  formam um conjunto independente.

**Exemplo 2.2.4.** O grafo abaixo é um grafo split-completo onde o conjunto de vértices  $\{1, 2, 3, 4\}$  é independente e  $\{4, 5, 6, 7, 8, 9\}$  forma uma clique máxima de  $G$ , portanto podemos escrever  $G = 4K_1 \vee K_5$ :

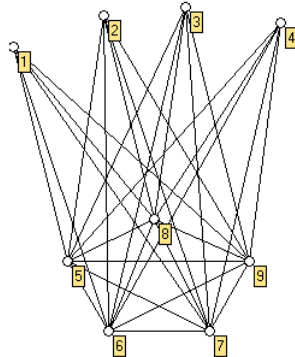


Figura 2.2: Grafo split-completo

O grafo do Exemplo 2.2.4 é um grafo threshold, basta ver que ele é definido pela sequência binária  $(0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1)$ . Isso se dá pelo fato que todo grafo split-completo com número clique  $\omega$  é um grafo threshold de traço  $\tau = \omega - 1$  definido pela sequência binária  $(b_1, b_2, \dots, b_n)$  onde  $b_i = 0$ , para todo  $i = 1, \dots, n - \tau$ , e  $b_i = 1$  para todo  $i = n - \tau + 1, \dots, n$ .

## 2.3 Conceitos básicos sobre Teoria Espectral de Grafos

Agora vamos apresentar alguns conceitos sobre Teoria Espectral de Grafos que podem ser encontrados em [1], [2], [4], [6], [7], [8], [13] e [16].

A partir desse ponto considere sempre  $G = (V, E)$  um grafo conexo com  $n$  vértices. A matriz de adjacência  $A = (a_{ij})_n$  de  $G$  é a matriz quadrada de ordem  $n$  cujas entradas são:

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

A matriz distância  $D = (d_{ij})$  de  $G$  é a matriz quadrada de ordem  $n$  cujas as entradas  $d_{ij}$  são dadas pela distância entre os vértices  $v_i$  e  $v_j$ , isto é, pelo número de arestas de um menor caminho que os liga em  $G$ . Observe que a diagonal principal de  $D$  é nula, pois, para todo  $i = 1, \dots, n$ ,  $d_{ii}$  denota a distância de um vértice a si mesmo. O diâmetro de  $G$ , denotado por  $diam(G)$  é a maior entrada da matriz  $D$ .

Como o grafo é não orientado, temos que as matrizes de adjacência e distância são simétricas e, portanto, seus respectivos autovalores são reais e seus espectros são representados, em ordem não crescente, por:

$$\begin{aligned} \text{Spec}_A(G) &= (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \\ \text{Spec}_D(G) &= (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n). \end{aligned}$$

Uma questão também avaliada em Teoria Espectral de Grafos é a do número de autovalores distintos de uma matriz associada a um grafo. O próximo teorema responde essa questão no caso da matriz de adjacência.

**Proposição 2.3.1.** [13] *Seja  $A$  a matriz de adjacência de um grafo  $G$  com  $n$  vértices e diâmetro  $d$ , então  $A$  possui no mínimo  $d + 1$  autovalores distintos.*

No caso da matriz distância, o número de  $D$ -autovalores distintos pode não depender do diâmetro do grafo, como podemos ver em exemplos em [17]. Nesse trabalho respondemos essa questão para o caso de uma subclasse de árvores.

Vamos usar a seguinte notação:

**Definição 2.3.2.** *Se  $C$  é uma matriz simétrica associada a um grafo  $G$ , denotamos o número de  $C$ -autovalores distintos de  $G$  por:*

$$\mathfrak{N}_C(G).$$

Assim a Proposição 2.3.1 afirma que  $\mathfrak{N}_A(G) \geq d + 1$ .

Dado um grafo qualquer  $G$  temos que  $\Delta$  é o grau máximo e  $\delta$  seu grau mínimo. Agora consideremos  $\Delta_2$  e  $\delta_2$  o segundo grau máximo e o segundo grau mínimo de  $G$ , respectivamente. Observe que se existem pelo menos dois vértices de  $G$  com grau máximo temos que  $\Delta = \Delta_2$ . Analogamente, se temos pelo menos dois vértices de  $G$  com grau mínimo  $\delta = \delta_2$ . Os próximos teoremas determinam cotas superior e inferior para o raio espectral da matriz distância em função dos primeiros e segundos graus máximos e mínimos de  $G$ .

**Teorema 2.3.3.** [18] *Seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices, grau máximo  $\Delta$ , segundo maior grau  $\Delta_2$  e raio espectral  $\alpha_1$ . Então*

$$\alpha_1 \geq \sqrt{(2n - 2 - \Delta)(2n - 2 - \Delta_2)},$$

*com igualdade se e somente se  $G$  é um grafo regular com diâmetro menor ou igual a 2.*

**Teorema 2.3.4.** [18] *Seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices com diâmetro  $d$ , grau mínimo  $\delta$ , segundo grau mínimo  $\delta_2$  e raio espectral  $\alpha_1$ . Então*

$$\alpha_1 \leq \sqrt{\left(dn - \frac{d(d-1)}{2} - 1 - \delta(d-1)\right)\left(dn - \frac{d(d-1)}{2} - 1 - \delta_2(d-1)\right)},$$

com igualdade se e somente se  $G$  é um grafo regular com diâmetro menor ou igual a 2.

Em [19] foi provado o seguinte resultado sobre as coordenadas do vetor de Perron da matriz distância de um grafo qualquer.

**Teorema 2.3.5.** [19] *Sejam  $G$  um grafo,  $u, v, u'$  e  $v'$  vértices de  $G$  tais que  $u'$  e  $v'$  são vértices pendentos a  $u$  e  $v$ , respectivamente. Considere  $x_z$  a componente do vetor de Perron  $\mathbf{x}_D$  correspondente a um vértice  $z$  qualquer de  $G$  e raio espectral  $\alpha_1$ . Então  $(\alpha_1 + 2)(x_{u'} - x_{v'}) = \rho_D(x_u - x_v)$ .*

Observe que se  $u = v$  no teorema acima teremos que  $x_{u'} = x_{v'}$ , ou seja, as coordenadas do vetor de Perron associadas a folhas vizinhas de um mesmo vértice são iguais. Mais tarde veremos que esse teorema se aplica a outros autovetores.

A seguir apresentamos alguns resultados encontrados na literatura sobre a matriz distância de uma árvore.

### 2.3.1 Sobre árvores

Um dos primeiros resultados provados em relação à matriz distância foi o teorema que garante uma fórmula para o determinante da matriz distância de árvores, dado por GRAHAM e POLLACK em 1971 [1].

**Teorema 2.3.6.** [1] *Se  $T$  é uma árvore com  $n \geq 2$  vértices então*

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

Observe que o determinante da matriz distância de qualquer árvore depende apenas de  $n$ , seu número de vértices, e independe da estrutura da árvore. No mesmo artigo foi calculado o determinante da matriz distância de um grafo qualquer.

Outro resultado importante sobre árvores que usaremos aqui é o teorema que determina a inversa da matriz distância de uma árvore, demonstrado em [2] por LOVÀSZ e GRAHAM.

**Teorema 2.3.7.** [2] *Sejam  $T$  é uma árvore com  $n \geq 2$  vértices,  $A = (a_{ij})_n$  sua matriz de adjacência e  $r_i$  o grau do vértice  $v_i$  para  $i = 1, 2, \dots, n$ . Então a inversa da matriz distância  $D$  de  $T$  é  $D^{-1} = (d_{ij}^*)$  dada por:*

$$d_{ij}^* = \frac{(2 - r_i)(2 - r_j)}{2n - 2} + \begin{cases} \frac{-r_i}{2} & \text{se } i = j \\ \frac{a_{ij}}{2} & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

Através do Teorema 2.3.7, RUZIEH e POWERS [3] determinaram os  $D$ -autovalores de um caminho com  $n \geq 2$  vértices.

**Teorema 2.3.8.** [3] Seja  $P_n$  um caminho com  $n \geq 2$  vértices. Os  $D$ -autovalores  $\alpha_i$  e seus respectivos  $D$ -autovetores  $\mathbf{w}_i = (w_1^i, w_2^i, \dots, w_n^i)$  de  $P_n$  são dados por:

1.  $\alpha_1 = \frac{1}{\cosh(\theta) - 1}$ ,  $w_k^1 = \cosh((k - f)\theta)$ , onde  $f = \frac{n+1}{2}$  e  $\theta$  é uma solução positiva da equação  $\tanh\left(\frac{y}{2}\right) \tanh\left(\frac{ny}{2}\right) = \frac{1}{n}$ ;
2.  $\alpha_i = \frac{1}{\cos \theta - 1}$ ,  $w_k^i = \cos((k - f)\theta)$ , onde
  - $f = \frac{n+1}{2}$  e  $\theta$  é uma das  $\left\lfloor \frac{n-1}{2} \right\rfloor$  soluções de  $\tan\left(\frac{y}{2}\right) \tan\left(\frac{ny}{2}\right) = \frac{-1}{n}$  no intervalo  $(0, \pi)$ , ou
  - $f = \frac{1}{2}$  e  $\theta = \frac{2m-1}{n}\pi$  com  $m = 1, 2, \dots, \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor$ .

Em [8] foi proposto o estudo do número de  $D$ -autovalores distintos de uma árvore e foi provado o seguinte resultado:

**Proposição 2.3.9.** [8] Seja  $T$  uma árvore. Então  $T$  tem no mínimo  $\left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor$   $D$ -autovalores distintos.

A importância da Proposição 2.3.9 está no fato de que, em relação à algumas matrizes, como a matriz de adjacência  $A$ , o número de autovalores distintos também depende do diâmetro, como foi visto na Proposição 2.3.1. No mesmo artigo é colocada a conjectura de que para árvores vale a relação entre o diâmetro e o número de autovalores distintos da matriz distância, como no caso da matriz  $A$ .

Ainda sobre árvores, temos algumas desigualdades que foram provadas por MERRIS [7].

**Proposição 2.3.10.** [7] Seja  $T$  uma árvore com  $n_1$  folhas e  $n'_1$  quase-folhas.

1. Se  $\alpha$  é um  $D$ -autovalor de  $T$  com multiplicidade  $k$ , então  $k \leq n_1$ .
2. Entre os  $D$ -autovalores de  $T$ ,  $\alpha = -2$  ocorre com multiplicidade no mínimo  $n_1 - n'_1 - 1$ .
3. Se o diâmetro de  $T$  é  $d$ , então
  - $\alpha_n \leq \frac{-1}{1 - \cos\left(\frac{\pi}{d+1}\right)}$ ;
  - $\alpha_{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor} > -1$ ;
  - $\alpha_{n'_1} > -1$ ;
  - $\alpha_{n-n'_1+2} < -2$ ;
  - $\alpha_{n_1} \geq -2$ ;

- $\alpha_{n-n_1+2} \leq -2$ .

A segunda afirmação da Proposição 2.3.10 foi melhorada por COLLINS em [6] como podemos ver abaixo:

**Teorema 2.3.11.** [6] *Seja  $T$  uma árvore com  $n_1$  folhas e  $n'_1$  quase-folhas. Então, entre os autovalores da matriz distância de  $T$ ,  $-2$  ocorre com multiplicidade no mínimo  $n_1 - n'_1$ .*

Em nosso trabalho estudamos alguns grafos em que essa cota mínima é alcançada.

### 2.3.2 Sobre grafos threshold

Na busca de propriedades espectrais de grafos *threshold* encontramos, em [4], o seguinte teorema:

**Teorema 2.3.12.** [4] *Seja  $D$  a matriz distância de um grafo threshold  $G$ . Então todo autovalor  $\alpha \neq -1, -2$  de  $G$  é simples.*

No Capítulo 4 usamos o teorema acima para obter uma descrição completa do número de  $D$ -autovalores distintos de um grafo *threshold*.

# Capítulo 3

## Os $D$ -autovalores de grafos *caterpillar*

### 3.1 Resultados

Nesse capítulo expomos novos resultados sobre os  $D$ -autovalores de uma família de árvores chamada *caterpillar*. Pela Proposição 2.3.10 temos uma cota mínima para a multiplicidade de  $-2$  como um  $D$ -autovalor de uma árvore qualquer. Nosso objetivo nesse capítulo é determinar, exatamente, a multiplicidade de  $-2$  e o número de  $D$ -autovalores distintos de qualquer grafo *caterpillar*.

**Definição 3.1.1.** [20] *Grafos caterpillar são árvores que ao removermos todas as folhas obtemos um caminho. Em outras palavras, sejam  $d \geq 3$ ,  $n > d$  e  $p = (p_1, p_2, \dots, p_{d-1})$  tais que  $p_i$  são inteiros não negativos para  $i = 1, 2, \dots, d-1$ ,  $p_1 \geq 1$ ,  $p_{d-1} \geq 1$  e  $n = p_1 + p_2 + \dots + p_{d-1} + d - 1$ . O grafo caterpillar  $C(p)$  é uma árvore com  $n$  vértices, diâmetro  $d$ , obtido identificando-se um vértice de maior grau de cada estrela  $K_{1,p_1}, K_{1,p_2}, \dots, K_{1,p_{d-1}}$  com os vértices do caminho  $P_{d-1}$ .*

Se  $p_i = 0$  para todo  $i = 2, 3, \dots, d-2$  e  $p_1 = p_{d-1} = 1$  temos que o *caterpillar*  $C(p)$  é o *caminho*  $P_{d+1}$ . Se  $p_i = 0$  para todo  $i = 2, 3, \dots, d-2$  com  $p_1 \geq 1$  e  $p_{d-1} > 1$  temos que o *caterpillar*  $C(p)$  é a *dupla vassoura* ou *duplo cometa*, denotado por  $V(t, s, d)$ , onde  $n = t + s + d - 1$ ,  $t = p_1$ ,  $s = p_{d-1}$  e  $s \geq t$ . Se  $p_1 = 1$  e  $p_{d-1} > 1$  temos que a *dupla vassoura* é chamada apenas de *vassoura* ou *cometa* e denotada por  $V(1, s, d)$  onde  $n = d + s$ .

**Exemplo 3.1.2.** *Nas figuras abaixo apresentamos alguns exemplos de grafos caterpillar de diâmetro  $d = 4$ :*

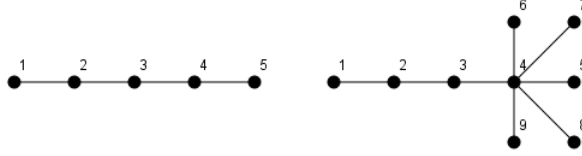


Figura 3.1:  $P_5$  e  $V(1, 5, 4)$

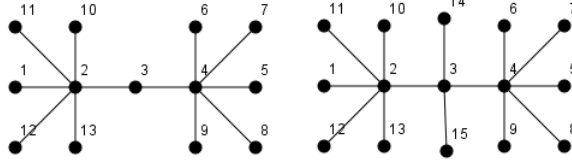


Figura 3.2:  $V(5, 5, 4)$  e  $C(5, 2, 5)$

**Observação 3.1.3.** Se  $p = (p_1, p_2, \dots, p_{d-1})$  e  $p^* = (p_{d-1}, \dots, p_2, p_1)$  então os grafos caterpillars  $C(p)$  e  $C(p^*)$  são isomorfos. Por exemplo:

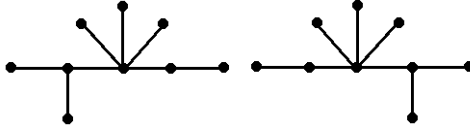


Figura 3.3:  $C(2, 3, 1) \approx C(1, 3, 2)$

Em [3], RUZIEH e POWERS determinaram o  $D$ -espectro de um caminho (Teorema 2.3.8) e nosso próximo lema distingue cada um dos  $D$ -autovalores.

**Lema 3.1.4.** Os  $D$ -autovalores do caminho  $P_n$  são todos simples.

**Demonstração:** Sabemos, pelo Teorema 2.1.6, que o  $D$ -raio espectral de  $P_n$  é um autovalor simples; vamos provar que os demais autovalores também são simples.

Pelo Teorema 2.3.8 temos que os demais  $D$ -autovalores de  $P_n$  são:  $\alpha_i = \frac{1}{\cos \theta - 1}$ , onde  $\theta$  é uma das  $\lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor$  soluções de  $\tan\left(\frac{y}{2}\right) \tan\left(\frac{ny}{2}\right) = \frac{-1}{n}$  no intervalo  $(0, \pi)$ , ou  $\theta = \frac{2m-1}{n}\pi$  com  $m = 1, 2, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ .

Como no intervalo  $(0, \pi)$  a função cosseno é bijetora, as  $\lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor$  soluções de  $\tan\left(\frac{y}{2}\right) \tan\left(\frac{ny}{2}\right) = \frac{-1}{n}$  implicam em  $\lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor$   $D$ -autovalores dois a dois distintos. A função que relaciona cada  $m \in \{1, 2, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor\}$  a  $\frac{2m-1}{n}\pi \in (0, \pi)$  é injetora, assim temos mais  $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor$   $D$ -autovalores distintos entre si. E ainda, se  $\theta$  fosse igual  $\frac{2m-1}{n}\pi$  para algum  $m \in \{1, 2, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor\}$ , teríamos que  $\cos\left(\frac{n\theta}{2}\right) =$



$\cos\left((2m-1)\frac{\pi}{2}\right) = 0$ . Logo não existiria  $\tan\left(\frac{n\theta}{2}\right)$ . Assim os autovalores obtidos pelos valores de  $\theta$  que são solução de  $\tan\left(\frac{y}{2}\right)\tan\left(\frac{ny}{2}\right) = \frac{-1}{n}$  em  $(0, \pi)$  são distintos dos autovalores obtidos de  $\theta = \frac{2m-1}{n}\pi$  para algum  $m = 1, 2, \dots, \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor$ . Logo, todos os autovalores de  $P_n$  são simples. ■

Na Proposição ??, Merris estabelece uma cota mínima para a multiplicidade de  $-2$  como  $D$ -autovalor de uma árvore. Já na Proposição 2.3.11, Collins melhora essa cota mínima, afirmando que para uma árvore  $G$  temos que  $m_D(-2) \geq n_1 - n'_1$ , onde  $n_1$  é o número de folhas de  $G$  e  $n'_1$  é o número de quase-folhas de  $G$ . Vemos no próximo teorema que para as duplas vassouras  $m_D(-2) = n_1 - n'_1$ .

**Teorema 3.1.5.** *Seja a dupla vassoura  $V(t, s, d)$  com  $n = t + s + d - 1$  vértices e diâmetro  $d \geq 3$ . Então, a multiplicidade de  $-2$  como  $D$ -autovalor de  $V(t, s, d)$  é dada por:*

$$m_D(-2) = \begin{cases} n - d, & \text{se } d \equiv 2 \pmod{6} \\ n - d - 1, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

**Demonstração:** Considere a rotulação de uma dupla vassoura  $V(t, s, d)$  como abaixo:

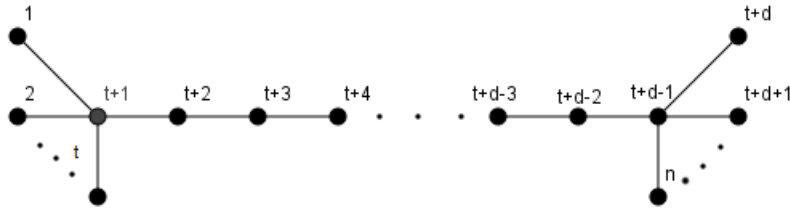


Figura 3.4: Dupla vassoura  $V(t, s, d)$

Então, sua matriz distância  $D$  pode ser expressa em blocos como abaixo:

$$\left( \begin{array}{cccc|cccc|cccc} 0 & 2 & \dots & 2 & 1 & 2 & \dots & d-1 & d & d & \dots & d \\ 2 & 0 & \dots & 2 & 1 & 2 & \dots & d-1 & d & d & \dots & d \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 2 & 2 & \dots & 0 & 1 & 2 & \dots & d-1 & d & d & \dots & d \\ \hline 1 & 1 & \dots & 1 & 0 & 1 & \dots & d-2 & d-1 & d-1 & \dots & d-1 \\ 2 & 2 & \dots & 2 & 1 & 0 & \dots & d-3 & d-2 & d-2 & \dots & d-2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ d-1 & d-1 & \dots & d-1 & d-2 & d-3 & \dots & 0 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \hline d & d & \dots & d & d-1 & d-2 & \dots & 1 & 0 & 2 & \dots & 2 \\ d & d & \dots & d & d-1 & d-2 & \dots & 1 & 2 & 0 & \dots & 2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ d & d & \dots & d & d-1 & d-2 & \dots & 1 & 2 & 2 & \dots & 0 \end{array} \right)$$

Como a multiplicidade de  $-2$  é igual a nulidade da matriz  $D + 2I$ , ou seja, a diferença entre  $n$  e o posto da matriz  $D + 2I$ , vamos calcular esse posto.

$$D + 2I = \begin{bmatrix} 2 & \dots & 2 & 1 & 2 & \dots & d-1 & d & \dots & d \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 2 & \dots & 2 & 1 & 2 & \dots & d-1 & d & \dots & d \\ \hline 1 & \dots & 1 & 2 & 1 & \dots & d-2 & d-1 & \dots & d-1 \\ 2 & \dots & 2 & 1 & 2 & \dots & d-3 & d-2 & \dots & d-2 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ d-1 & \dots & d-1 & d-2 & d-3 & \dots & 2 & 1 & \dots & 1 \\ \hline d & \dots & d & d-1 & d-2 & \dots & 1 & 2 & \dots & 2 \\ d & \dots & d & d-1 & d-2 & \dots & 1 & 2 & \dots & 2 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ d & \dots & d & d-1 & d-2 & \dots & 1 & 2 & \dots & 2 \end{bmatrix}$$

Observemos que as  $t$  primeiras linhas de  $D + 2I$  são iguais, assim como as  $s$  últimas linhas de  $D + 2I$  (tais linhas correspondem às folhas de  $V(t, s, d)$ ). Por isso o posto da matriz  $D + 2I$  é no máximo  $n - s - t + 2 = d + 1$ , o que confirma que  $-2$  é  $D$ -autovalor de  $V(t, s, d)$  com multiplicidade maior ou igual a  $t + s - 2 = n - d - 1$ , como foi visto no Teorema 2.3.11. E ainda, se utilizarmos as seguintes operações elementares  $R_i \leftarrow R_i - R_t$  para todo  $i = 1, \dots, t - 1$ ,  $R_i \leftarrow R_i - R_{t+d}$  para todo  $i = t + d + 1, \dots, n$  e  $C_i \leftarrow C_i - C_t$  para todo  $i = 1, \dots, t - 1$  e  $C_i \leftarrow C_i - C_{t+d}$  para todo  $i = t + d + 1, \dots, n$ , teremos que as entradas não nulas da matriz  $D + 2I$  resultam na submatriz  $D' + 2I$ , onde  $D'$  (abaixo descrita) é a matriz distância do caminho  $P_{d+1}$ .

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & \dots & d-1 & d \\ 1 & 0 & 1 & \dots & d-2 & d-1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 2 & 1 & 0 & \dots & d-3 & d-2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ d-1 & d-2 & d-3 & \dots & 0 & 1 \\ d & d-1 & d-2 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Pelo Teorema 2.3.8 tem-se que os  $D$ -autovalores de  $P_{d+1}$ , distintos do raio espectral, são  $\alpha_i = \frac{1}{\cos\theta - 1}$  onde  $\theta$  é uma das soluções de  $\tan\left(\frac{y}{2}\right) \tan\left(\frac{(d+1)y}{2}\right) = \frac{-1}{d+1}$  no intervalo  $(0, \pi)$  ou  $\theta = \frac{(2m-1)\pi}{d+1}$  para  $m = 1, \dots, \left\lfloor \frac{d+1}{2} \right\rfloor$ . Vamos estu-

dar quando  $\alpha_i = -2$  para algum  $i$ :

$$\begin{aligned}\alpha_i &= -2 \\ \frac{1}{\cos\theta - 1} &= -2 \\ \cos\theta - 1 &= -\frac{1}{2} \\ \cos\theta &= \frac{1}{2}\end{aligned}$$

Como  $\theta \in (0, \pi)$ , temos que  $\theta = \frac{\pi}{3}$ . Agora precisamos verificar para quais valores de  $d$  temos que  $\theta = \frac{\pi}{3}$  satisfaz a equação  $\tan\left(\frac{y}{2}\right) \tan\left(\frac{(d+1)y}{2}\right) = \frac{-1}{d+1}$  ou  $\theta = \frac{(2m-1)\pi}{d+1}$  para algum  $m = 1, \dots, \left\lfloor \frac{d+1}{2} \right\rfloor$ :

- No primeiro caso temos:

$$\begin{aligned}\tan\left(\frac{\pi}{6}\right) \tan\left(\frac{(d+1)\pi}{6}\right) &= \frac{-1}{d+1} \\ \sqrt{3}\tan\left(\frac{(d+1)\pi}{6}\right) &= \frac{-1}{d+1} \\ \tan\left(\frac{(d+1)\pi}{6}\right) &= -\frac{\sqrt{3}}{3(d+1)}\end{aligned}$$

Porém  $\tan\left(\frac{(d+1)\pi}{6}\right) \in \left\{-\sqrt{3}, \frac{-\sqrt{3}}{3}, 0, \sqrt{3}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right\}$  para todo  $d$  inteiro, então,  $\tan\left(\frac{(d+1)\pi}{6}\right) = -\sqrt{3}$  ou  $\tan\left(\frac{(d+1)\pi}{6}\right) = \frac{-\sqrt{3}}{3}$ . Logo,  $d+1 = 1$  ou  $d+1 = 3$ , mas  $d \geq 3$  por hipótese. Assim não existe  $d \geq 3$  tal que  $\frac{\pi}{3}$  seja solução da equação  $\tan\left(\frac{y}{2}\right) \tan\left(\frac{(d+1)y}{2}\right) = \frac{-1}{d+1}$ .

- No segundo caso, temos  $\theta = \frac{(2m-1)\pi}{d+1}$  para algum  $m = 1, \dots, \left\lfloor \frac{d+1}{2} \right\rfloor$ . Com  $\theta = \frac{\pi}{3}$  temos:

$$\begin{aligned}\frac{(2m-1)\pi}{d+1} &= \frac{\pi}{3} \\ (d+1)\pi &= 3(2m-1)\pi \\ d+1 &= 6m-3 \\ d &= 6m-4\end{aligned}$$

Assim, se  $d \neq 6m-4$  para todo  $m$  inteiro positivo então  $-2$  não é  $D$ -autovalor de  $P_{d+1}$  e a matriz  $D+2I$  tem posto  $d+1$ . Logo, a multiplicidade de  $-2$  como

$D$ -autovalor de  $V(t, s, d)$  é  $n - d - 1$ .

Caso  $d = 6m - 4$  para algum  $m = 1, \dots, \left\lfloor \frac{d+1}{2} \right\rfloor$ , então, pelo Lema 3.1.4,  $-2$  é um  $D$ -autovalor simples de  $P_{d+1}$ , consequentemente,  $-2$  é um  $D$ -autovalor de  $V(t, s, d)$  com multiplicidade  $n - d$ . Observemos que se  $d = 6m - 4$  para algum  $m$  inteiro temos que  $d \equiv 2 \pmod{6}$ . ■

**Exemplo 3.1.6.** A dupla vassoura  $V(4, 5, 4)$  tem 12 vértices e diâmetro 4 então,  $m_D(-2) = n - d - 1 = 12 - 4 - 1 = 7$ .

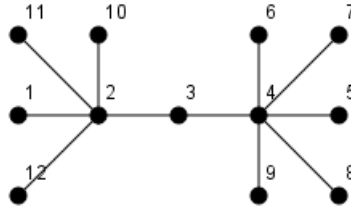


Figura 3.5:  $V(4, 5, 4)$

A dupla vassoura  $V(3, 5, 8)$  tem 15 vértices e diâmetro 8 então,  $m_D(-2) = n - d = 15 - 8 = 7$ .

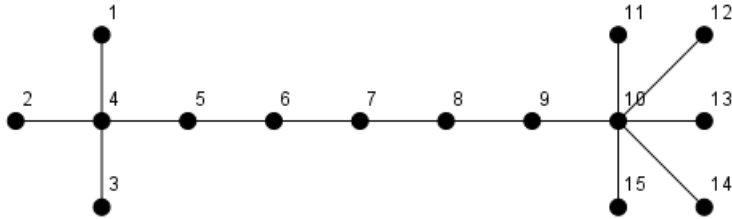


Figura 3.6:  $V(3, 5, 8)$

Seja  $V(t, s, d)$  a dupla vassoura com diâmetro  $d \geq 3$  e  $s \geq 2$ . Então pelo teorema anterior,  $m_D(-2) \geq 1$ . Consideremos  $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_n)$  um  $D$ -autovetor associado ao  $D$ -autovalor  $-2$ , de modo que o vetor  $\mathbf{w}$  esteja associado à rotulação dada na Figura 3.4. Em nosso próximo corolário usamos essa notação para descrever o  $D$ -autoespaço associado a  $-2$ .

**Corolário 3.1.7.** Seja  $V(t, s, d)$  uma dupla vassoura de diâmetro  $d \neq 6m - 4$ , para todo  $m$  inteiro positivo, com  $n = t + s + d - 1$  vértices e  $s \geq 2$ . Então, o  $D$ -autoespaço de  $V(t, s, d)$  associado a  $-2$  é dado por  $W_1 \oplus W_2$  onde:

$$W_1 = \{\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_n) \mid \sum_{i=1}^t w_i = 0 \text{ e } w_i = 0 \text{ para todo } i = t+1, \dots, n\}$$

$$W_2 = \{\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_n) \mid \sum_{i=t+d}^n w_i = 0 \text{ e } w_i = 0 \text{ para todo } i = 1, \dots, n-s\}.$$

**Demonstração:** Considere a matriz distância  $D$  de  $V(t, s, d)$  segundo a rotulação da Figura 3.4. Seja  $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_n) \in W_1$ , então  $\sum_{i=1, i \neq j}^t w_i = -w_j$ , verifiquemos que o vetor  $\mathbf{w}$  é um  $D$ -autovetor associado a  $-2$ :

$$D\mathbf{w} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & \dots & 2 & 1 & 2 & \dots & d-1 & d & d & \dots & d \\ 2 & 0 & \dots & 2 & 1 & 2 & \dots & d-1 & d & d & \dots & d \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 2 & 2 & \dots & 0 & 1 & 2 & \dots & d-1 & d & d & \dots & d \\ \hline 1 & 1 & \dots & 1 & 0 & 1 & \dots & d-2 & d-1 & d-1 & \dots & d-1 \\ 2 & 2 & \dots & 2 & 1 & 0 & \dots & d-3 & d-2 & d-2 & \dots & d-2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ d-1 & d-1 & \dots & d-1 & d-2 & d-3 & \dots & 0 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \hline d & d & \dots & d & d-1 & d-2 & \dots & 1 & 0 & 2 & \dots & 2 \\ d & d & \dots & d & d-1 & d-2 & \dots & 1 & 2 & 0 & \dots & 2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ d & d & \dots & d & d-1 & d-2 & \dots & 1 & 2 & 2 & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_t \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 2 \sum_{i=2}^t w_i \\ 2 \sum_{i=1, i \neq 2}^t w_i \\ \vdots \\ 2 \sum_{i=1}^{t-1} w_i \\ \hline \sum_{i=1}^t w_i \\ 2 \sum_{i=1}^t w_i \\ \vdots \\ (d-1) \sum_{i=1}^t w_i \\ d \sum_{i=1}^t w_i \\ d \sum_{i=1}^t w_i \\ \vdots \\ d \sum_{i=1}^t w_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2w_1 \\ -2w_2 \\ \vdots \\ -2w_t \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = -2\mathbf{w}$$

Então  $W_1$  está contido no  $D$ -autoespaço associado a  $-2$ . E por raciocínio análogo, temos que  $W_2$  também está contido no  $D$ -autoespaço associado a  $-2$ . Logo,  $W_1 + W_2$  está contido no  $D$ -autoespaço associado a  $-2$ .

Note que  $W_1 \cap W_2$  é o vetor nulo e que as dimensões de  $W_1$  e  $W_2$  são, respectivamente,  $t - 1$  e  $s - 1$ . Portanto, a dimensão de  $W_1 \oplus W_2$  é  $t - 1 + s - 1 = n - d - 1 = m_D(-2)$ . Assim,  $W_1 \oplus W_2$  é o  $D$ -autoespaço associado a  $-2$ . ■

Note que se  $d \equiv 2 \pmod{6}$  então  $W_1 \oplus W_2$  está contido apenas no autoespaço associado a  $-2$ , pois ainda existe um autovetor  $u$  associado a  $-2$  que não pertence a  $W_1 \oplus W_2$ .

A definição a seguir auxilia na próxima proposição e descreve uma família particular de grafos *caterpillar*. Como grafos *caterpillar* com diâmetro  $d = 3$  coincidem com duplas vassouras, que já foram estudadas, vamos considerar  $d \geq 4$ .

**Definição 3.1.8.** *Consideremos a seguinte classe de grafos caterpillar:*

$$\mathcal{C} = \{C(p); p = (1, p_2, \dots, p_{d-2}, 1), d \geq 4, 0 \leq p_i \leq 1 \text{ e } \sum_{i=2}^{d-2} p_i \geq 1\}.$$

Observemos que se  $C(p) \in \mathcal{C}$  então  $C(p)$  possui o mesmo número de folhas e quase-folhas e, pelo menos, dois vértices de grau dois. Assim, nenhuma dupla vassoura pertence a família  $\mathcal{C}$ .

**Teorema 3.1.9.** *Se  $C(p) = C(1, p_2, p_3, \dots, p_{d-1}, 1) \in \mathcal{C}$  então  $-2$  não é autovalor de  $D$ , a matriz distância de  $C(p)$ , isto é,  $m_D(-2) = 0$ .*

**Demonstração:** Demonstremos usando indução finita sobre o diâmetro  $d$  dos grafos  $C(p) \in \mathcal{C}$ .

Para  $d = 4$  temos o caterpillar  $C(1, 1, 1)$  e seu  $D$ -espectro é dado por:  $(10.7424, -0.47539, -0.76393, -1.33632, -2.9307, -523607)$  (calculado através do software livre NewGraph)

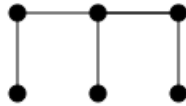


Figura 3.7: Caterpillar  $C(1, 1, 1)$

Suponha que existe algum  $d \geq 4$  tal que para todo  $C(p) \in \mathcal{C}$  de diâmetro  $d$ ,  $-2$  não é autovalor de  $D$ , a matriz distância de  $C(p)$ .

Seja  $C(p) \in \mathcal{C}$  um grafo caterpillar de diâmetro  $d + 1$  e escreva  $p = (1, p_2, \dots, p_{d-1}, p_d)$ . Consideremos os casos em que  $p_{d-1} = 1$  e  $p_{d-1} = 0$ .

Se  $p_{d-1} = 1$  temos que o grafo caterpillar  $C(p') \in \mathcal{C}$ , com  $p' = (1, p_2, \dots, p_{d-2}, 1)$ , e tem diâmetro  $d$ . Logo,  $C(p')$  satisfaz as hipóteses de indução, então  $-2$  não é autovalor da matriz distância  $D'$  de  $C(p')$ . Assim, podemos afirmar que a matriz  $D' + 2I$  é não singular.

Considere a seguinte rotulação de  $C(p)$ :

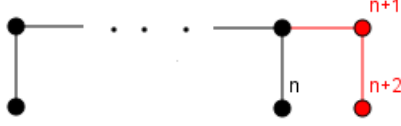


Figura 3.8: Caterpillar  $C(p)$  de diâmetro  $d + 1$ , com  $p_1 = p_{d-1} = p_d = 1$

A matriz distância  $D$  de  $C(p)$ , a partir da rotulação sugerida, é dada por:

$$D = \begin{bmatrix} D' & E \\ E^t & C \end{bmatrix}$$

onde

$$C = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, E = \begin{bmatrix} e_1 & e_1 + 1 \\ e_2 & e_2 + 1 \\ \vdots & \vdots \\ e_{n-1} & e_{n-1} + 1 \\ e_n & e_n + 1 \end{bmatrix},$$

$e_i = d_{in}$ , para todo  $i \in \{1, 2, \dots, n-1\}$  e  $e_n = 2$ .

Aplicamos algumas operações elementares na matriz  $D + 2I_{n+2}$  para verificar que ela ainda é não singular.

$$D + 2I_{n+2} = \begin{bmatrix} D' + 2I_n & E \\ E^t & C + 2I_2 \end{bmatrix}$$

1.  $R_{n+2} \leftarrow R_{n+2} - R_{n+1}$  e  $C_{n+2} \leftarrow C_{n+2} - C_{n+1}$ . Essas operações transformam as matrizes  $C + 2I_2$  e  $E$  nas matrizes  $C_1$  e  $E_1$ , respectivamente:

$$C_1 = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}, E_1 = \begin{bmatrix} e_1 & 1 \\ e_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ e_{n-1} & 1 \\ e_n & 1 \end{bmatrix}$$

2.  $R_{n+1} \leftarrow R_{n+1} - R_n$  e  $C_{n+1} \leftarrow C_{n+1} - C_n$ . Como por definição  $e_i = d_{in}$ , para todo  $i \in \{1, 2, \dots, n-1\}$  e o valor da entrada  $d_{nn}$  da matriz  $D' + 2I_n$  é igual a 2, temos que tais operações transformam as matrizes  $C_1$  e  $E_1$  nas matrizes  $C_2$  e  $E_2$ , respectivamente:

$$C_2 = \begin{bmatrix} 0 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix}, E_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Então, o determinante da matriz  $D + 2I_{n+2}$  pode ser calculado por expansão de Laplace:

$$\begin{aligned} \det(D + 2I_{n+2}) &= (-2)(-1)^{2n+3} \det(D'') \\ &= 2(-2)(-1)^{2n+2} \det(D' + 2I_n) \\ &= -4 \det(D' + 2I_n) \end{aligned}$$

onde a matriz  $D''$  é encontrada retirando a linha  $n + 2$  e a coluna  $n + 1$  da matriz  $D + 2I_{n+2}$

Como, por hipótese de indução,  $\det(D' + 2I_n) \neq 0$ , temos que  $\det(D + 2I_{n+2}) \neq 0$ . Logo, a matriz  $D + 2I_{n+2}$  é não singular e  $-2$  não é autovalor da matriz distância do grafo  $C(p)$ .

Se  $p_{d-1} = 0$  temos outros dois subcasos,  $p_2 = 1$  e  $p_2 = 0$ :

Caso  $p_2 = 1$ , temos que o grafo  $C(p^*) \in \mathcal{C}$ , com  $p^* = (1, 0, p_{d-2}, \dots, p_3, 1)$ , tem diâmetro  $d$  e satisfaz a hipótese de indução. Então, pela primeira parte da demonstração,  $-2$  não é autovalor da matriz distância de  $C(p^*, 1)$ , que é isomorfo a  $C(p)$ . Assim,  $-2$  não é autovalor da matriz distância do grafo  $C(p)$ .

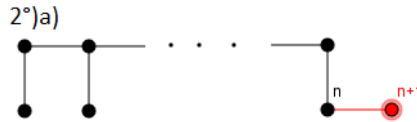


Figura 3.9: Caterpillar  $C(p)$  de diâmetro  $d + 1$ , com  $p_2 = 1$  e  $p_{d-1} = 0$

Caso  $p_2 = 0$ , enumeremos os vértices de  $C(p)$  conforme a rotulação que segue:

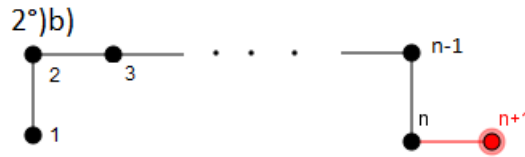


Figura 3.10: Caterpillar  $C(p)$  de diâmetro  $d + 1$ , com  $p_2 = p_{d-1} = 0$

Consideremos  $D$  a matriz distância de  $C(p)$  segundo a rotulação sugerida. Como o grafo caterpillar  $C(p')$  onde  $p' = (1, 0, p_3, \dots, p_{d-2}, 1)$  pertence ao conjunto  $\mathcal{C}$  e tem diâmetro  $d$ ,  $-2$  não é um autovalor da submatriz de  $D$  formada pelas  $n$  primeiras linhas e colunas, por hipótese de indução.

Aplicamos algumas operações elementares à matriz  $D + 2I_{n+1}$  para verificar que ela ainda é não singular.



$$D + 2I_{n+1} = \left[ \begin{array}{ccc|ccc} 2 & 1 & 2 & \mathbf{w}_1^t & d-1 & d & d+1 \\ 1 & 2 & 1 & \mathbf{w}_2^t & d-2 & d-1 & d \\ 2 & 1 & 2 & \mathbf{w}_3^t & d-3 & d-2 & d-1 \\ \hline \mathbf{w}_1 & \mathbf{w}_2 & \mathbf{w}_3 & & \mathbf{w}_{n-1} & \mathbf{w}_n & \mathbf{w}_{n+1} \\ \hline d-1 & d-2 & d-3 & \mathbf{w}_{n-1}^t & 2 & 1 & 2 \\ d & d-1 & d-2 & \mathbf{w}_n^t & 1 & 2 & 1 \\ d+1 & d & d-1 & \mathbf{w}_{n+1}^t & 2 & 1 & 2 \end{array} \right]$$

onde  $\mathbf{w}_i \in \mathbb{R}^{n-5}$  é o vetor das distâncias entre os vértices  $i$  e todos os vértices de  $C(p) - \{1, 2, 3, n-1, n, n+1\}$  com  $i \in \{1, 2, 3, n-1, n, n+1\}$  e o espaço em branco representa as demais entradas  $d_{ij}$  da matriz  $D + 2I_{n+1}$ .

Observe que  $\mathbf{w}_1 = \mathbf{w}_3 + \mathbf{2}_{n-5}$ ,  $\mathbf{w}_2 = \mathbf{w}_3 + \mathbf{1}_{n-5}$ ,  $\mathbf{w}_{n+1} = \mathbf{w}_{n-1} + \mathbf{2}_{n-5}$  e  $\mathbf{w}_n = \mathbf{w}_{n-1} + \mathbf{1}_{n-5}$ .

1.  $R_1 \leftarrow R_1 - R_3$ ,  $C_1 \leftarrow C_1 - C_3$ ,  $R_{n+1} \leftarrow R_{n+1} - R_{n-1}$  e  $C_{n+1} \leftarrow C_{n+1} - C_{n-1}$ :

$$\left[ \begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & \mathbf{2}_{n-5}^t & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & \mathbf{w}_2^t & d-2 & d-1 & 2 \\ 0 & 1 & 2 & \mathbf{w}_3^t & d-3 & d-2 & 2 \\ \hline \mathbf{2}_{n-5} & \mathbf{w}_2 & \mathbf{w}_3 & & \mathbf{w}_{n-1} & \mathbf{w}_n & \mathbf{2}_{n-5} \\ \hline 2 & d-2 & d-3 & \mathbf{w}_{n-1}^t & 2 & 1 & 0 \\ 2 & d-1 & d-2 & \mathbf{w}_n^t & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & \mathbf{2}_{n-5}^t & 0 & 0 & 0 \end{array} \right]$$

2.  $R_2 \leftarrow R_2 - R_3$ ,  $C_2 \leftarrow C_2 - C_3$ ,  $R_n \leftarrow R_n - R_{n-1}$  e  $C_n \leftarrow C_n - C_{n-1}$ :

$$\left[ \begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & \mathbf{2}_{n-5}^t & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & \mathbf{1}_{n-5}^t & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \mathbf{w}_3^t & d-3 & 1 & 2 \\ \hline \mathbf{2}_{n-5} & \mathbf{1}_{n-5} & \mathbf{w}_3 & & \mathbf{w}_{n-1} & \mathbf{1}_{n-5} & \mathbf{2}_{n-5} \\ \hline 2 & 1 & d-3 & \mathbf{w}_{n-1}^t & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \mathbf{1}_{n-5}^t & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \mathbf{2}_{n-5}^t & 0 & 0 & 0 \end{array} \right]$$

3.  $R_2 \leftarrow R_2 - R_n$  e  $C_2 \leftarrow C_2 - C_n$ :

$$\left[ \begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & \mathbf{2}_{n-5}^t & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & \mathbf{0}_{n-5}^t & 2 & -2 & 0 \\ 0 & -2 & 2 & \mathbf{w}_3^t & d-3 & 1 & 2 \\ \hline \mathbf{2}_{n-5} & \mathbf{0}_{n-5} & \mathbf{w}_3 & & \mathbf{w}_{n-1} & \mathbf{1}_{n-5} & \mathbf{2}_{n-5} \\ \hline 2 & 2 & d-3 & \mathbf{w}_{n-1}^t & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & \mathbf{1}_{n-5}^t & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \mathbf{2}_{n-5}^t & 0 & 0 & 0 \end{array} \right]$$

4.  $R_{n+1} \leftarrow R_{n+1} - R_1$  e  $C_{n+1} \leftarrow C_{n+1} - C_1$ :

$$\left[ \begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & \mathbf{2}_{n-5}^t & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & \mathbf{0}_{n-5}^t & 2 & -2 & 0 \\ 0 & -2 & 2 & \mathbf{w}_3^t & d-3 & 1 & 2 \\ \hline \mathbf{2}_{n-5} & \mathbf{0}_{n-5} & \mathbf{w}_3 & & \mathbf{w}_{n-1} & \mathbf{1}_{n-5} & \mathbf{0}_{n-5} \\ \hline 2 & 2 & d-3 & \mathbf{w}_{n-1}^t & 2 & -1 & -2 \\ 0 & -2 & 1 & \mathbf{1}_{n-5}^t & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \mathbf{0}_{n-5}^t & -2 & 0 & 0 \end{array} \right]$$

5.  $R_n \leftarrow 2R_n - R_1$  e  $C_n \leftarrow 2C_n - C_1$ :

$$\left[ \begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & \mathbf{2}_{n-5}^t & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & \mathbf{0}_{n-5}^t & 2 & -4 & 0 \\ 0 & -2 & 2 & \mathbf{w}_3^t & d-3 & 2 & 2 \\ \hline \mathbf{2}_{n-5} & \mathbf{0}_{n-5} & \mathbf{w}_3 & & \mathbf{w}_{n-1} & \mathbf{0}_{n-5} & \mathbf{0}_{n-5} \\ \hline 2 & 2 & d-3 & \mathbf{w}_{n-1}^t & 2 & -4 & -2 \\ 0 & -4 & 2 & \mathbf{1}_{n-5}^t & -4 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \mathbf{0}_{n-5}^t & -2 & 0 & 0 \end{array} \right]$$

6.  $R_n \leftarrow R_n + 2R_2$  e  $C_n \leftarrow C_n + 2C_2$ :

$$\left[ \begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & \mathbf{2}_{n-5}^t & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & \mathbf{0}_{n-5}^t & 2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 2 & \mathbf{w}_3^t & d-3 & -2 & 2 \\ \hline \mathbf{2}_{n-5} & \mathbf{0}_{n-5} & \mathbf{w}_3 & & \mathbf{w}_{n-1} & \mathbf{0}_{n-5} & \mathbf{0}_{n-5} \\ \hline 2 & 2 & d-3 & \mathbf{w}_{n-1}^t & 2 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & -2 & \mathbf{0}_{n-5}^t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \mathbf{0}_{n-5}^t & -2 & 0 & 0 \end{array} \right]$$

7.  $R_{n+1} \leftarrow R_{n+1} + R_n$  e  $C_{n+1} \leftarrow C_{n+1} + C_n$ :

$$D'_9 = \left[ \begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & \mathbf{2}_{n-5}^t & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & \mathbf{0}_{n-5}^t & 2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 2 & \mathbf{w}_3^t & d-3 & -2 & 0 \\ \hline \mathbf{2}_{n-5} & \mathbf{0}_{n-5} & \mathbf{w}_3 & & \mathbf{w}_{n-1} & \mathbf{0}_{n-5} & \mathbf{0}_{n-5} \\ \hline 2 & 2 & d-3 & \mathbf{w}_{n-1}^t & 2 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & -2 & \mathbf{0}_{n-5}^t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{0}_{n-5}^t & -2 & 0 & 0 \end{array} \right]$$

Observe que, nenhuma linha (ou coluna) da submatriz formada pelas  $n$  primeiras linhas e colunas da matriz  $D+2I_{n+1}$  foi alterada usando a linha  $n+1$ . Logo, podemos garantir que, por hipótese de indução, as  $n$  primeiras linhas de  $D'_9$  são linearmente independentes.

Verifiquemos agora que a coluna  $n+1$  não pode ser escrita como combinação linear das demais, pois caso contrário, teríamos que:

$$c_{n+1} = k_1 c_1 + k_2 c_2 + \dots + k_n c_n + k_{n+1} c_{n+1}$$

Essa combinação linear gera o seguinte sistema linear:

$$\left\{ \begin{array}{cccccc} & & 2 \sum_{j=4}^{n-2} k_j & +2k_{n-1} & & = 0 \\ & 2k_2 & -2k_3 & & +2k_{n-1} & = 0 \\ -2k_2 & +2k_3 & + \sum_{j=4}^{n-2} d_{3j}k_j & +d_{3n-1}k_{n-1} & -2k_n & = 0 \\ 2k_1 & +d_{43}k_3 & + \sum_{j=4}^{n-2} d_{4j}k_j & +d_{4n-1}k_{n-1} & & = 0 \\ \vdots & & & & & \\ 2k_1 & +d_{i3}k_3 & + \sum_{j=4}^{n-2} d_{ij}k_j & +d_{in-1}k_{n-1} & & = 0 \\ \vdots & & & & & \\ 2k_1 & +d_{n-23}k_3 & + \sum_{j=4}^{n-2} d_{n-2j}k_j & +d_{n-2n-1}k_{n-1} & & = 0 \\ 2k_1 & +2k_2 & +d_{n-13}k_3 & + \sum_{j=4}^{n-2} d_{n-1j}k_j & +2k_{n-1} & = -2 \\ & & -2k_3 & & & = 0 \\ & & & & -2k_{n-1} & = 0 \end{array} \right.$$

Assim temos que  $k_3 = 0$ ,  $k_{n-1} = 0$  e pela segunda equação,  $k_2 = 0$ . Reescrevendo o sistema:

$$\left\{ \begin{array}{ccc} & 2 \sum_{j=4}^{n-2} k_j & = 0 \\ & \sum_{j=4}^{n-2} d_{3j}k_j & -2k_n = 0 \\ 2k_1 & + \sum_{j=4}^{n-2} d_{4j}k_j & = 0 \\ \vdots & & \\ 2k_1 & + \sum_{j=4}^{n-2} d_{ij}k_j & = 0 \\ \vdots & & \\ 2k_1 & + \sum_{j=4}^{n-2} d_{n-2j}k_j & = 0 \\ 2k_1 & + \sum_{j=4}^{n-2} d_{n-1j}k_j & = -2 \end{array} \right.$$

Observemos que as colunas  $c_1, c_4, c_{n-2}$  e  $c_n$  da matriz  $D'_9$  são preservadas no sistema acima, visto que seus coeficientes nas equações eliminadas eram nulos. Isto significa que o posto da matriz dos coeficientes do sistema de  $n - 3$  variáveis e  $n - 2$  equações acima é  $n - 3$ . Logo, o sistema é incompatível, e a coluna  $n + 1$  não pode ser escrita como combinação linear das demais colunas de  $D + 2I_{n+1}$  e essa matriz é não singular.

Assim pelo princípio de indução finita temos que  $-2$  não é um autovalor da matriz distância  $D$  de  $C(p)$ , para todo  $C(p) \in \mathbf{C}$ . ■

Em nosso próximo teorema discutimos a multiplicidade de  $-2$  como  $D$ -autovalor de um grafo *caterpillar* qualquer diferente de uma dupla vassoura. Na verdade, podemos pensar no próximo teorema como uma generalização do Teorema 3.1.5 para o caso de qualquer *caterpillar*. Não é difícil perceber que os teoremas coincidem no caso da dupla vassoura cujo diâmetro é diferente de  $6m + 2$  para todo  $m$  inteiro positivo.

**Definição 3.1.10.** *Consideremos a seguinte classe de grafos caterpillar:*

$$\mathcal{C}' = \{C(p); p = (p_1, p_2, \dots, p_{d-1}), d \geq 4 \text{ e } \sum_{i=2}^{d-2} p_i \geq 1\}.$$

Observemos que se  $C(p) \in \mathcal{C}'$  então ele possui pelo menos três vértices que são quase-folhas. Logo, o caminho  $P_{d+1}$  e a dupla vassoura  $V(t, s, d)$  não pertencem a  $\mathcal{C}'$ . E ainda,  $\mathcal{C} \subset \mathcal{C}'$ .

**Teorema 3.1.11.** *Se o grafo caterpillar  $C(p) \in \mathcal{C}'$  então  $m_D(-2) = n - d - n'_1 + 1$ , onde  $n'_1$  é o número quase-folhas de  $C(p)$ .*

**Demonstração:** Notemos que  $n'_1$  é igual ao número de índices  $i$  tais que  $p_i \neq 0$ . Consideremos a sequência  $(l_1, l_2, \dots, l_{d-1})$ , onde  $l_i = \sum_{k=1}^i p_k$  para todo  $i = 1, \dots, d-1$ , e a rotulação abaixo para o grafo *caterpillar*  $C(p) \in \mathcal{C}'$ :

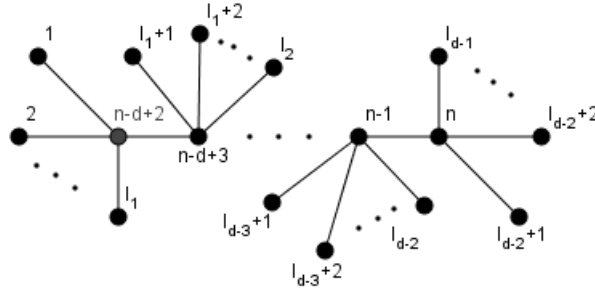


Figura 3.11: Caterpillar  $C(p) \in \mathcal{C}'$

Segundo essa rotulação temos que a matriz distância de  $C(p)$  é dada por:

$$\begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{12}^t & D_{22} \end{bmatrix}$$

onde:

$$D_{11} = \begin{bmatrix} 2(J - I)_{p_1} & 3J_{p_1, p_2} & 4J_{p_1, p_3} & \dots & dJ_{p_1, p_{d-1}} \\ 3J_{p_2, p_1} & 2(J - I)_{p_2} & 3J_{p_2, p_3} & \dots & (d-1)J_{p_2, p_{d-1}} \\ 4J_{p_3, p_1} & 3J_{p_3, p_2} & 2(J - I)_{p_3} & \dots & (d-2)J_{p_3, p_{d-1}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ dJ_{p_{d-1}, p_1} & (d-1)J_{p_{d-1}, p_2} & (d-2)J_{p_{d-1}, p_3} & \dots & 2(J - I)_{p_{d-1}} \end{bmatrix}$$

$$D_{12} = \begin{bmatrix} \mathbf{1}_{p_1} & \mathbf{2}_{p_1} & \cdots & \mathbf{d} - \mathbf{1}_{p_1} \\ \mathbf{2}_{p_2} & \mathbf{1}_{p_2} & \cdots & \mathbf{d} - \mathbf{2}_{p_2} \\ \mathbf{3}_{p_3} & \mathbf{2}_{p_3} & \cdots & \mathbf{d} - \mathbf{3}_{p_3} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathbf{d} - \mathbf{1}_{p_{d-1}} & \mathbf{d} - \mathbf{2}_{p_{d-1}} & \cdots & \mathbf{1}_{p_{d-1}} \end{bmatrix}$$

$$D_{22} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \cdots & d - 2 \\ 1 & 0 & \cdots & d - 3 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ d - 2 & d - 3 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

Pelo Teorema 2.3.11 sabemos que  $-2$  é um  $D$ -autovalor de  $C(p)$  com multiplicidade mínima  $n_1 - n'_1$  onde  $n_1$  é o número de folhas e  $n'_1$  é o número de quase-folhas de  $C(p)$ . Nesse caso,  $n_1 - n'_1 = (n - d + 1) - n'_1$ . Observemos que a matriz  $D + 2I$  possui  $p_i$  linhas iguais, para cada  $i$  tal que  $p_i \neq 0$ , o que reafirma a multiplicidade mínima de  $-2$ .

Analogamente ao que foi feito no Teorema 3.1.5, podemos usar operações elementares feitas nas linhas e colunas de  $D + 2I$  para substituir as linhas repetidas por linhas nulas, mantendo apenas uma das linhas repetidas. E, assim, temos que as entradas de  $D + 2I$  que permanecem não nulas formam a matriz  $D' + 2I$  onde  $D'$  é a matriz distância de um dos grafos caterpillar  $C(p') \in \mathcal{C}$ , ou seja, um grafo  $C(p')$  onde  $p' = (1, p'_2, \dots, p'_{d-2}, 1)$  satisfaz as hipóteses do Teorema 3.1.9, e, portanto, temos que a  $D' + 2I$  é não singular. Assim, a multiplicidade de  $-2$  é, exatamente,  $n - d - n'_1 + 1$ . ■

**Exemplo 3.1.12.** O grafo  $C(2, 2, 0, 3)$  tem 11 vértices, diâmetro 5 e 3 vizinhos de folhas, então  $m_D(-2) = 11 - 5 - 3 + 1 = 4$ .

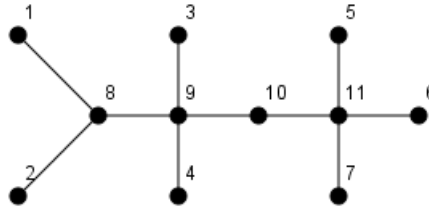


Figura 3.12:  $C(2, 2, 0, 3)$

Seja  $C(p) = C(p_1, p_2, \dots, p_{d-1}) \in \mathcal{C}'$ . Então pelo Teorema 3.1.11 temos que  $m_D(-2) \geq 1$ . Consideremos  $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_n)$  um  $D$ -autovetor associado ao  $D$ -autovalor  $-2$ , de modo que, o vetor  $\mathbf{w}$  esteja associado à rotulação dada na Figura 3.11. Em nosso próximo corolário usamos essa notação para descrever o  $D$ -autoespaço associado a  $-2$ , como fizemos no Corolário 3.1.7.

**Corolário 3.1.13.** Seja  $C(p) \in \mathcal{C}'$  um grafo caterpillar. Então, o  $D$ -autoespaço de  $C(p)$  associado a  $-2$  é dado por  $\bigoplus_{i=1}^{d-1} W_i$  onde:

$$W_1 = \{\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_n) \mid \sum_{j=1}^{l_1} w_j = 0 \text{ e } w_j = 0 \text{ para todo } j = l_1 + 1, \dots, n\},$$

$$W_i = \{\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_n) \mid \sum_{j=l_{i-1}}^{l_i} w_j = 0 \text{ e } w_j = 0 \text{ para todo } i = 1, \dots, l_{i-1}, l_i + 1, \dots, n\}, \text{ e}$$

$$W_{d-1} = \{\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_n) \mid \sum_{j=ld-2}^{ld-1} w_j = 0 \text{ e } w_j = 0 \text{ para todo } i = 1, \dots, l_{d-2}\}.$$

**Demonstração:** A demonstração é análoga à do Corolário 3.1.7 ■

Pela Proposição 2.3.1 temos que a matriz de adjacência de um grafo qualquer possui pelo menos  $d + 1$  autovalores distintos. Nosso Lema 3.1.4, prova que  $P_n$  tem exatamente  $d + 1$   $D$ -autovalores distintos, uma vez que  $n = d + 1$ . Tal fato não é verdade em geral: o exemplo abaixo foi retirado de [17] onde encontramos esse e outros exemplos de grafos para os quais o número de  $D$ -autovalores distintos pode ser menor que  $d + 1$ .

**Exemplo 3.1.14.** Considere  $C_8$  o ciclo com 8 vértices. Seu diâmetro é 4 e seu  $D$ -espectro possui 4  $D$ -autovalores distintos:  $\text{spec}(C_8) = (16, 0^{(3)}, 2(\sqrt{2} - 2)^{(2)}, -2(2 + \sqrt{2})^{(2)})$ , calculado pelo software livre NewGraph.

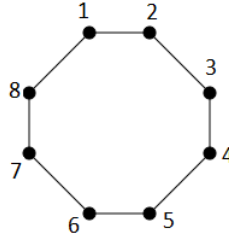


Figura 3.13: Ciclo  $C_8$

A Proposição 2.3.9 fornece uma cota inferior para o número de  $D$ -autovalores distintos de uma árvore  $T$ , mas não prova se tal cota é alcançada. E, ainda, em [8] é apresentada a conjectura de que, para qualquer árvore de diâmetro  $d$ , vale o mesmo resultado da matriz de adjacência, isto é, o número de  $D$ -autovalores distintos é no mínimo  $d + 1$ . No Corolário 3.1.17 provamos que esta cota é válida para dupla vassouras. Na verdade, vemos a seguir que o número exato de  $D$ -autovalores distintos de qualquer dupla vassoura depende apenas de seu diâmetro. Mas antes, apresentamos um lema que serve de ferramenta para nossas próximas demonstrações.

Como consequência do Teorema 2.3.5, se  $u, v$  e  $z$  são vértices de um grafo  $G$ , tais que  $u$  e  $v$  são vértices pendentes a  $z$ , temos que as coordenadas do vetor de Perron  $\mathbf{x}_D$  da matriz distância  $D$  de  $G$  correspondentes a tais folhas são iguais, ou seja,  $x_u = x_v$ . No próximo lema veremos que isso se aplica a qualquer  $D$ -autovetor associado a um  $D$ -autovalor distinto de  $-2$ .

**Lema 3.1.15.** Seja  $G$  um grafo qualquer. Se  $v_i$  e  $v_j$  são vértices pendentes de  $G$  adjacentes ao mesmo vértice e  $\mathbf{w} = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_n)$  é um  $D$ -autovetor de  $G$  associado a um  $D$ -autovalor  $\alpha \neq -2$ , então  $w_i = w_j$ .

**Demonstração:** Seja  $D = (d_{ij})$  a matriz distância de  $G$ . Sem perda da generalidade, suponhamos que  $v_i = v_1$  e  $v_j = v_2$ . Então  $d_{1j} = d(v_1, v_j) = d(v_2, v_j) = d_{2j}$  para todo  $j = 3, \dots, n$ ,  $d(v_1, v_2) = 2$  e  $d(v_1, v_1) = d(v_2, v_2) = 0$ . Para encontrar o autoespaço associado a um autovetor precisamos resolver o sistema linear dado pela

$$\text{equação matricial } D\mathbf{w} = \alpha\mathbf{w}, \text{ onde } \mathbf{w} = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_1 \\ \mathbf{w}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{w}_n \end{bmatrix}.$$

As duas primeiras equações do sistema linear dado por  $D\mathbf{w} = \alpha\mathbf{w}$  são:

$$\begin{aligned} 2\mathbf{w}_2 + \sum_{j=3}^n d_{1j}\mathbf{w}_j &= \alpha\mathbf{w}_1 \\ 2\mathbf{w}_1 + \sum_{j=3}^n d_{2j}\mathbf{w}_j &= \alpha\mathbf{w}_2 \end{aligned}$$

Assim subtraindo as duas equações acima temos:

$$(\alpha + 2)(\mathbf{w}_1 - \mathbf{w}_2) = 0$$

Como  $\alpha \neq -2$  temos que  $\mathbf{w}_1 = \mathbf{w}_2$ . ■

Agora vamos a um teorema importante para distinguir os  $D$ -autovalores de uma dupla vassoura.

**Teorema 3.1.16.** *Seja  $V(t, s, d)$  uma dupla vassoura de diâmetro  $d \geq 3$  com  $n = s + t + d - 1$  vértices. Então, se  $\alpha \neq -2$  é um  $D$ -autovalor de  $V(t, s, d)$ ,  $\alpha$  é simples.*

**Demonstração:** Pelo Teorema 2.3.7 a inversa da matriz distância do grafo  $V(t, s, d)$  é dada por  $D^{-1} = (d_{ij}^*)$  onde:

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

Assim, podemos calcular  $D^{-1}$  no caso da dupla vassoura e segundo a rotulação da Figura 3.4:

$$D^{-1} = \frac{1}{2n-2} \begin{pmatrix} D_1^* & D_{12}^* & J_{t,s} \\ D_{21}^* & D_3^* & D_{23}^* \\ J_{s,t} & D_{32}^* & D_5^* \end{pmatrix}$$

$$\text{onde } D_1^* = \begin{pmatrix} 2-n & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & 2-n & \dots & 1 & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & 2-n & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 2-n \end{pmatrix}_t$$

$$D_{12}^* = (D_{21}^*)^t = \begin{pmatrix} n-t & 0 & \dots & 0 & 1-s \\ n-t & 0 & \dots & 0 & 1-s \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ n-t & 0 & \dots & 0 & 1-s \\ n-t & 0 & \dots & 0 & 1-s \end{pmatrix}_{t \times d-1},$$

$$D_3^* = \begin{pmatrix} d_{t+1}^* & n-1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & (t-1)(s-1) \\ n-1 & 2-2n & n-1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n-1 & 2-2n & n-1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & n-1 & 2-2n & n-1 \\ (t-1)(s-1) & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & n-1 & d_{t+d-1}^* \end{pmatrix}_{d-1},$$

com  $d_{t+1}^* = (t-1)^2 - (n-1)(t+1)$  e  $d_{t+d}^* = (1-s)^2 - (s+1)(n-1)$ ,

$$D_{23}^* = (D_{32}^*)^t = \begin{pmatrix} 1-t & 1-t & \dots & 1-t & 1-t \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ n-s & n-s & \dots & n-s & n-s \end{pmatrix}_{d-1 \times s-1} \quad \text{e}$$

$$D_5^* = \begin{pmatrix} 2-n & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & 2-n & \dots & 1 & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & 2-n & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 2-n \end{pmatrix}_{n-t-d+1}$$

Vamos estudar o autoespaço associado aos  $D^{-1}$ -autovalores diferentes de  $-\frac{1}{2}$  através do sistema linear dado pela equação matricial  $D^{-1}\mathbf{w} = \alpha\mathbf{w}$ , onde  $\mathbf{w} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix}$ . Como o  $D$ -autoespaço associado a  $\alpha \neq 0$  é igual ao  $D^{-1}$ -autoespaço associado a  $\frac{1}{\alpha}$  podemos aplicar o Lema 3.1.15 e obtemos:

$$w_i = w_1, \quad i = 2, \dots, t$$

e

$$w_i = w_n, \quad i = t+d+1, t+d+2, \dots, n-1.$$

Assim vamos escrever a equação (1) do sistema  $D^{-1}\mathbf{w} = \alpha\mathbf{w}$  como:

$$(t-n+1)w_1 + (n-t)w_{t+1} - (s-1)w_{t+d-1} + sw_n - 2\alpha(n-1)w_1 = 0$$

E a equação (n) como:

$$tw_1 + (1-t)w_{t+1} + (n-s)w_{t+d-1} + (1-n+s)w_n = 2\alpha(n-1)w_n$$

Subtraindo (1) de (n) e simplificando a equação, temos que:

$$-(2\alpha+1)w_1 + w_{t+1} - w_{t+d-1} + (2\alpha+1)w_n = 0$$



As equações (j) com  $j = t + 2, t + 3, \dots, t + d - 2$  do sistema  $D^{-1}\mathbf{w} = \alpha\mathbf{w}$  são dadas por:

$$\begin{cases} (n-1)\mathbf{w}_{t+1} - 2(n-1)\mathbf{w}_{t+2} + (n-1)\mathbf{w}_{t+3} = 2\alpha(n-1)\mathbf{w}_{t+2} & (t+2) \\ (n-1)\mathbf{w}_{t+2} - 2(n-1)\mathbf{w}_{t+3} + (n-1)\mathbf{w}_{t+4} = 2\alpha(n-1)\mathbf{w}_{t+3} & (t+3) \\ \vdots \\ (n-1)\mathbf{w}_{t+d-3} - 2(n-1)\mathbf{w}_{t+d-2} + (n-1)\mathbf{w}_{t+d-1} = 2\alpha(n-1)\mathbf{w}_{t+d-2} & (t+d-2) \end{cases}$$

Por simplificação podemos reescrevê-las:

$$\begin{cases} \mathbf{w}_{t+1} - (2\alpha + 2)\mathbf{w}_{t+2} + \mathbf{w}_{t+3} = 0 & (t+2) \\ \mathbf{w}_{t+2} - (2\alpha + 2)\mathbf{w}_{t+3} + \mathbf{w}_{t+4} = 0 & (t+3) \\ \vdots \\ \mathbf{w}_{t+d-3} - (2\alpha + 2)\mathbf{w}_{t+d-2} + \mathbf{w}_{t+d-1} = 0 & (t+d-2) \end{cases}$$

A  $(t+1)$ -ésima equação do sistema é dada por:

$$(n-t)t\mathbf{w}_1 + d'_{2,2}\mathbf{w}_{t+1} + (n-1)\mathbf{w}_{t+2} + (t-1)(s-1)\mathbf{w}_{t+d-1} + (1-t)s\mathbf{w}_n = 0$$

onde  $d'_{2,2} = d_{t+1}^* - 2\alpha(n-1) = (t-1)^2 - (n-1)(t+1+2\alpha)$

E a  $(t+d-1)$ -ésima equação é dada por:

$$(1-s)t\mathbf{w}_1 + (t-1)(s-1)\mathbf{w}_{t+1} + (n-1)\mathbf{w}_{t+d-2} + d'_{d-1,d-1}\mathbf{w}_{t+d-1} + (n-s)s\mathbf{w}_n = 0$$

onde  $d'_{d-1,d-1} = d_{t+d-1}^* - 2\alpha(n-1) = (1-s)^2 - (s+1+2\alpha)(n-1)$

Assim temos que as  $d+1$  equações dadas formam um sistema linear homogêneo com matriz dos coeficientes dada abaixo:

$$\begin{bmatrix} d'_{1,1} & n-t & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1-s & s \\ d'_{2,1} & d'_{2,2} & n-1 & 0 & \dots & 0 & 0 & d'_{2,d-1} & d'_{2,d} \\ 0 & 1 & -(2\alpha+2) & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -(2\alpha+2) & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -(2\alpha+2) & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -(2\alpha+2) & 1 & 0 \\ d'_{d-1,1} & d'_{d-1,2} & 0 & 0 & \dots & 0 & n-1 & d'_{d-1,d-1} & d'_{d-1,d} \\ -(2\alpha+1) & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 2\alpha+1 \end{bmatrix},$$

onde  $d'_{1,1} = t - (n-1)(2\alpha+1)$ ,  $d'_{2,1} = (n-t)t$ ,  $d'_{2,d-1} = (t-1)(s-1) = d'_{d-12}$ ,  $d'_{2,d} = (1-t)s$ ,  $d'_{d-1,1} = (1-s)t$ ,  $d'_{d-1,d-1} = d_{t+d-1}^* - 2\alpha(n-1)$  e  $d'_{d-1,d} = (n-s)(s-1)$ . Observemos que  $t \geq 1$ ,  $n \geq d+t \geq d$  e  $s \geq 1$ .

As colunas 1, 2,  $d$  e  $d+1$  da matriz acima são independentes entre si e também não dependem das demais colunas. Como a submatriz principal formada pelas linhas 3, 4,  $\dots$ ,  $d-2$  e  $d-1$ , e suas respectivas colunas, formam uma matriz tridiagonal, então seu posto é no mínimo  $d-4$  pela Observação 2.1.2. Logo, temos exatamente uma variável livre. Assim, se  $\alpha \neq \frac{-1}{2}$  então  $\frac{1}{\alpha}$  é um  $D$ -autovalor simples. ■

Agora como corolário do teorema anterior temos como calcular o número de autovalores distintos de uma dupla vassoura:

**Corolário 3.1.17.** *Seja  $V(t, s, d)$  uma dupla vassoura com diâmetro  $d \geq 3$  e  $n = t + s + d - 1$  vértices. Então o número de autovalores distintos de  $V(t, s, d)$  é dado por:*

$$\mathfrak{N}_D(V(t, s, d)) = \begin{cases} d + 1, & \text{se } d \equiv 2 \pmod{6} \\ d + 2, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

**Demonstração:** Pelos Teoremas 3.1.5 e 3.1.16 temos que o único  $D$ -autovalor múltiplo é  $-2$  e, portanto, o número de  $D$ -autovalores distintos é dado por:

$$\mathfrak{N}_D(V(t, s, d)) = \begin{cases} n - (n - d) + 1 = d + 1, & \text{se } d \equiv 2 \pmod{6} \\ n - (n - d - 1) + 1 = d + 2, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

■

Nosso próximo resultado é uma generalização do Teorema 3.1.16 para o caso de grafos *caterpillar*. Também usamos esse resultado para determinar o número de  $D$ -autovalores distintos de um grafo *caterpillar* em função de seu diâmetro e de seu número de quase-folhas.

**Teorema 3.1.18.** *Seja  $C(p) \in \mathcal{C}'$ . Então os  $D$ -autovalores  $\alpha \neq -2$  de  $C(p)$  são simples.*

**Demonstração:** Considere a sequência  $(l_1, l_2, \dots, l_n)$ , onde  $l_i = \sum_{k=1}^i p_k$  para todo  $i = 1, \dots, d - 1$ , e a rotulação abaixo para o grafo *caterpillar*  $C(p) \in \mathcal{C}'$ :

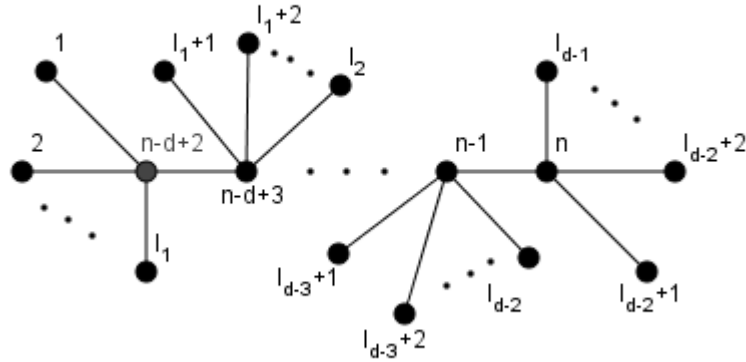


Figura 3.14: Caterpillar  $C(p) \in \mathcal{C}'$

Pelo Teorema 2.3.7 a inversa da matriz distância do grafo  $C(p)$  é dada por  $D^{-1} = (d_{ij}^*)$  onde:

$$d_{ij}^* = \frac{1}{2n - 2} \begin{cases} (2 - r_i)(2 - r_j) + (n - 1)a_{ij} & \text{se } i \neq j \\ (2 - r_i)^2 - (n - 1)r_i & \text{se } i = j \end{cases}$$

Assim, podemos calcular  $D^{-1}$  segundo a rotulação da Figura 3.11:

$$D^{-1} = \begin{bmatrix} D_1 & D_2^t \\ D_2 & D_3 \end{bmatrix},$$

onde  $D_1 = \frac{1}{2n-2}J_{n-d+1} - \frac{n-1}{2n-2}I_{n-d+1}$ ,  $D_2 = (d'_{i,j})_{d-1, n-d-1}$  e  $D_3 = (d''_{i,j})_{d-1}$  tal que:

$$d'_{1,j} = \frac{1}{2n-2} \begin{cases} n - p_1, & \text{se } 1 \leq j \leq l_1 \\ 1 - p_1, & \text{se } l_1 < j \leq l_{d-1} \end{cases}$$

$$d'_{i,j} = \frac{1}{2n-2} \begin{cases} n - p_i - 1, & \text{se } l_{i-1} < j \leq l_i \\ -p_i, & \text{se } 1 \leq j \leq l_{i-1} \text{ ou } l_i < j \leq l_{d-1} \end{cases} \quad \text{onde } i = 2, \dots, d-2$$

$$d'_{d-1,j} = \frac{1}{2n-2} \begin{cases} n - p_{d-1}, & \text{se } l_{d-2} < j \leq l_{d-1} \\ 1 - p_{d-1}, & \text{se } 1 \leq j < l_{d-1} \end{cases}$$

$$d''_{1,j} = \frac{1}{2n-2} \begin{cases} (1 - p_1)^2 - (n-1)(p_1 + 1), & \text{se } j = 1 \\ (p_1 - 1)p_2 + n - 1, & \text{se } j = 2 \\ (p_1 - 1)p_j, & \text{se } j = 3, \dots, d-2 \\ (1 - p_1)(1 - p_{d-1}), & \text{se } j = d-1 \end{cases}$$

$$d''_{2,j} = \frac{1}{2n-2} \begin{cases} (p_1 - 1)p_2 + n - 1, & \text{se } j = 1 \\ p_2^2 - (n-1)(p_2 + 2), & \text{se } j = 2 \\ p_2p_3 + n - 1, & \text{se } j = 3 \\ p_2p_j, & \text{se } j = 4, \dots, d-2 \\ p_2(p_{d-1} - 1), & \text{se } j = d-1 \end{cases}$$

$$d''_{i,j} = \frac{1}{2n-2} \begin{cases} (p_1 - 1)p_i, & \text{se } j = 1 \\ p_i^2 - (n-1)(p_i + 2), & \text{se } i = j \\ (p_i p_j + n - 1), & \text{se } j = i-1 \text{ ou } j = i+1 \\ p_i p_j, & \text{se } j \in \{2, \dots, i-2, i+2, \dots, d-2\} \\ (p_{d-1} - 1)p_i, & \text{se } j = d-1 \end{cases} \quad \text{onde } i = 3, \dots, d-3$$

$$d''_{d-2,j} = \frac{1}{2n-2} \begin{cases} (p_1 - 1)p_{d-2}, & \text{se } j = 1 \\ p_{d-2}p_j, & \text{se } j = 2, \dots, d-4 \\ p_{d-2}p_{d-3} + n - 1; & \text{se } j = d-3 \\ p_{d-2}^2 - (n-1)(p_{d-2} + 2), & \text{se } j = d-2 \\ (p_{d-1} - 1)p_{d-2} + n - 1, & \text{se } j = d-1 \end{cases}$$

$$d''_{d-1,j} = \frac{1}{2n-2} \begin{cases} (1 - p_1)(1 - p_{d-1}), & \text{se } j = 1 \\ (p_{d-1} - 1)p_j, & \text{se } j = 2, \dots, d-3 \\ (p_{d-1} - 1)p_{d-2} + n - 1, & \text{se } j = d-2 \\ (1 - p_{d-1})^2 - (n-1)(p_{d-1} + 1), & \text{se } j = d-1 \end{cases}$$

Ao estudar o sistema linear homogêneo gerado pela equação matricial  $D^{-1}\mathbf{w} =$

$\alpha\mathbf{w}$ , onde  $\mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \dots \\ w_n \end{pmatrix}$  e  $\alpha \neq \frac{-1}{2}$ , vamos provar que  $\alpha$  é um  $D^{-1}$ -autovalor simples.

Para isso, verificaremos que uma solução para o sistema linear homogêneo  $D^{-1}\mathbf{w} - \alpha\mathbf{w} = \mathbf{0}_n$  possui uma única variável livre.

Pelo Lema 3.1.15 temos que:

- $w_j = w_{l_1}$  para todo  $1 \leq j \leq l_1$ ;
- $w_j = w_{l_i}$  para todo  $l_{i-1} < j \leq l_i$  com  $i = 2, \dots, d-2$ ;
- $w_j = w_{l_{d-1}}$  para todo  $l_{d-2} < j \leq l_{d-1}$ .

Logo, podemos reescrever as demais equações do sistema.  
A equação  $(l_1)$ :

$$(p_1 - n + 1)w_{l_1} + \sum_{i=2}^{d-1} p_i w_{l_i} + (n - p_1)w_{n-d+2} - \sum_{i=2}^{d-2} p_i w_{n-d+1+i} + (1 - p_{d-1})w_n = 2\alpha(n-1)w_{l_1}$$

A equação  $(l_j)$  com  $j = 2, \dots, d-2$ :

$$(p_j - n + 1)w_{l_j} + \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{d-1} p_i w_{l_i} + (1 - p_1)w_{n-d+2} - \sum_{\substack{i=2 \\ i \neq j}}^{d-2} p_i w_{n-d+1+i} + (n - p_j - 1)w_{n-d+1+j} + (1 - p_{d-1})w_n = 2\alpha(n-1)w_{l_j}$$

A equação  $(l_{d-1})$ :

$$(p_{d-1} - n + 1)w_{l_{d-1}} + \sum_{i=1}^{d-2} p_i w_{l_i} + (1 - p_1)w_{n-d+2} - \sum_{i=2}^{d-2} p_i w_{n-d+1+i} + (n - p_{d-1})w_n = 2\alpha(n-1)w_{l_{d-1}}$$

Subtraindo  $(l_1)$  de  $(l_j)$  para cada  $j = 2, \dots, d-1$

$$(1 - n)w_{l_j} - (1 - n)w_{l_1} + (n - 1)w_{n-d+1+j} + (1 - n)w_{n-d+2} - 2\alpha(n-1)(w_{l_j} - w_{l_1}) = 0$$

Simplificando a equação acima obtemos, para cada  $j = 2, \dots, d-1$ :

$$w_{n-d+1+j} - w_{n-d+2} - (2\alpha + 1)(w_{l_j} - w_{l_1}) = 0$$

A equação  $(n - d + 2)$  é dada por:

$$(n - p_1)p_1 w_{l_1} + (1 - p_1) \sum_{j=2}^{d-1} p_j w_{l_j} + [(1 - p_1)^2 - (n - 1)(p_1 + 1)]w_{n-d+2} + [(p_1 - 1)p_2 + n - 1]w_{n-d+3} + (p_1 - 1) \sum_{j=3}^{d-2} p_j w_{n-d+1+j} + (1 - p_1)(1 - p_{d-1})w_n = 2\alpha(n-1)w_{n-d+2}$$

Multiplicando a equação  $(l_1)$  por  $(p_1 - 1)$  e adicionando à equação  $(n - d + 2)$  obtemos:

$$- [2\alpha(1 - p_1) + 1]w_{l_1} + (2\alpha + 3)w_{n-d+2} + w_{n-d+3} = 0$$

Para cada  $j = 2, \dots, d-2$ , a equação  $(n-d+j+1)$  é dada por:

$$(n-p_j-1)p_j\mathbf{w}_j - p_j \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{d-1} p_k\mathbf{w}_k + (p_1-1)p_j\mathbf{w}_{n-d+2} + p_j \sum_{\substack{k=2 \\ k \neq j-1 \\ k \neq j \\ k \neq j+1}}^{d-2} p_k\mathbf{w}_{n-d+1+k} \\ + (p_j p_{j-1} + n-1)\mathbf{w}_{n-d+j} + [p_j^2 - (n-1)(p_j+2)]\mathbf{w}_{n-d+1+j} + (p_j p_{j+1} + n-1)\mathbf{w}_{n-d+j+2} \\ + (p_{d-1}-1)p_j\mathbf{w}_n = 2\alpha(n-1)\mathbf{w}_{n-d+1+j}$$

Para cada  $j = 2, \dots, d-2$ , multiplicando a equação  $(l_1)$  por  $-p_j$  e adicionando à equação  $(n-d+j+1)$  obtemos:

$$-p_j(2\alpha+1)\mathbf{w}_1 + p_j\mathbf{w}_j + p_j\mathbf{w}_{n-d+2} + \mathbf{w}_{n-d+j} - (2\alpha+p_j+2)\mathbf{w}_{n-d+j+1} + \mathbf{w}_{n-d+j+2} = 0$$

A equação  $(n)$  é dada por:

$$(n-p_{d-1})p_{d-1}\mathbf{w}_{d-1} + (1-p_{d-1}) \sum_{j=1}^{d-2} p_j\mathbf{w}_j + (1-p_1)(1-p_{d-1})\mathbf{w}_{n-d+2} \\ + (p_{d-1}-1) \sum_{j=2}^{d-3} p_j\mathbf{w}_{n-d+1+j} + [(p_{d-1}-1)p_{d-2} + n-1]\mathbf{w}_{n-1} \\ + [(1-p_{d-1})^2 - (n-1)(p_{d-1}+1)]\mathbf{w}_n = 2\alpha(n-1)\mathbf{w}_n$$

Multiplicando a equação  $(l_1)$  por  $(p_{d-1}-1)$  e adicionando a equação  $(n)$  obtemos:

$$p_{d-1}\mathbf{w}_{d-1} + (1-p_{d-1})(2\alpha+1)\mathbf{w}_1 - (1-p_{d-1})\mathbf{w}_{n-d+2} + \mathbf{w}_{n-1} - (p_{d-1}+2\alpha+1)\mathbf{w}_n = 0$$

Com todas as operações feitas chegamos a um sistema linear homogêneo de  $2d-2$  equações e  $2d-2$  variáveis, cuja matriz de coeficientes é dada abaixo:

$$\left[ \begin{array}{cccccccc|cccccc} d_1^* & p_2 & p_3 & \dots & p_{d-2} & p_{d-1} & n-p_1 & -p_2 & -p_3 & \dots & -p_{d-3} & -p_{d-2} & 1-p_{d-1} \\ d^* & -d^* & 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ d^* & 0 & -d^* & \dots & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ d^* & 0 & 0 & \dots & -d^* & 0 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ d^* & 0 & 0 & \dots & 0 & -d^* & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ d_d^* & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 2\alpha+3 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \hline -p_2 d^* & p_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & p_2+1 & d_{d+1}^* & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -p_3 d^* & 0 & p_3 & \dots & 0 & 0 & p_3 & 1 & d_{d+2}^* & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ -p_{d-2} d^* & 0 & 0 & \dots & p_{d-2} & 0 & p_{d-2} & 0 & 0 & \dots & 1 & d_{2d-3}^* & 1 \\ d_{2d-2}^* & 0 & 0 & \dots & 0 & p_{d-1} & p_{d-1}-1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & d_{2d-2}^* \end{array} \right]$$

onde  $d^* = 2\alpha+1$ ,  $d_1^* = p_1 - (2\alpha+1)(n-1)$ ,  $d_d^* = 2\alpha(1-p_1)+1$ ,  $d_{2d-2}^* = (1-p_{d-1})(2\alpha+1)$ ,  $d_{d+1}^* = -p_2-2-2\alpha$ ,  $d_{d+2}^* = -p_3-2-2\alpha$ ,  $d_{2d-3}^* = -p_{d-2}-2-2\alpha$  e  $d_{2d-2}^* = -p_{d-1}-1-2\alpha$ .

Como  $\frac{1}{\alpha}$  é autovalor de  $D^{-1}$ , o sistema estudado é possível e indeterminado com no mínimo uma variável livre, ou seja, o posto da matriz  $D^*$  é no máximo  $2d - 3$ . Consideremos as submatrizes de  $D^*$  abaixo:

$$D_{1,d}^* = \begin{bmatrix} d_1^* & p_2 & p_3 & \cdots & p_{d-2} & p_{d-1} & n - p_1 \\ d^* & -d^* & 0 & \cdots & 0 & 0 & -1 \\ d^* & 0 & -d^* & \cdots & 0 & 0 & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ d^* & 0 & 0 & \cdots & -d^* & 0 & -1 \\ d^* & 0 & 0 & \cdots & 0 & -d^* & -1 \\ d^* & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 2\alpha + 3 \end{bmatrix}$$

e

$$D_{d+1,2d-2}^* = \begin{bmatrix} -d_{d+1}^* & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -d_{d+2}^* & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & -d_{2d-3}^* & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & d_{2d-2}^* \end{bmatrix}$$

A submatriz  $D_{1,d}^*$  é não singular, pois suas linhas são linearmente independentes. Pela Observação 2.1.2, a submatriz tridiagonal  $D_{d+1,2d-2}^*$  tem posto no mínimo  $d - 3$ . Assim o posto de  $D^*$  é, exatamente,  $2d - 3$ . Isto prova que  $\frac{1}{\alpha} \neq -2$  é um  $D$ -autovalor simples de  $C(p)$ . ■

Agora podemos determinar o número de  $D$ -autovalores distintos de um grafo *caterpillar* da classe  $\mathcal{C}'$ .

**Teorema 3.1.19.** *Seja  $C(p) \in \mathcal{C}'$ . Então  $\mathfrak{N}_D(C(p)) = d + n'_1$  onde  $n'_1$  é o número de quase-folhas de  $C(p)$ .*

**Demonstração:** Pelo Teorema 3.1.18 os  $D$ -autovalores de  $C(p) \in \mathcal{C}'$  distintos de  $-2$  são simples e pelo Teorema 3.1.11 temos que a multiplicidade  $-2$  é  $n - d - n'_1 - 1$ . Assim temos  $n - (n - d - n'_1 + 1) = d + n'_1 - 1$   $D$ -autovalores simples e, portanto, um total de  $d + n'_1$   $D$ -autovalores distintos. ■

Em toda árvore podemos encontrar, pelo menos, um subgrafo *caterpillar* induzido. Na busca por uma cota ainda mais próxima do número de  $D$ -autovalores distintos de uma árvore, estudamos subgrafos *caterpillar* especiais. Pretendemos verificar as consequências dos resultados que temos acerca de grafos *caterpillar* sobre a árvore em que ele se encontra.

**Definição 3.1.20.** *Seja  $T$  uma árvore qualquer com  $n$  vértices e diâmetro  $d$ . Dentre todos os subgrafos *caterpillar* induzidos de diâmetro  $d$  com o número máximo de vértices, chamemos de uma coluna de  $T$  a qualquer *caterpillar*  $C_T(p)$  que possui o maior número possível de quase-folhas.*

**Exemplo 3.1.21.** *Consideremos a árvore  $T$  de  $n = 31$  vértices e diâmetro  $d = 8$  na Figura 3.15:*

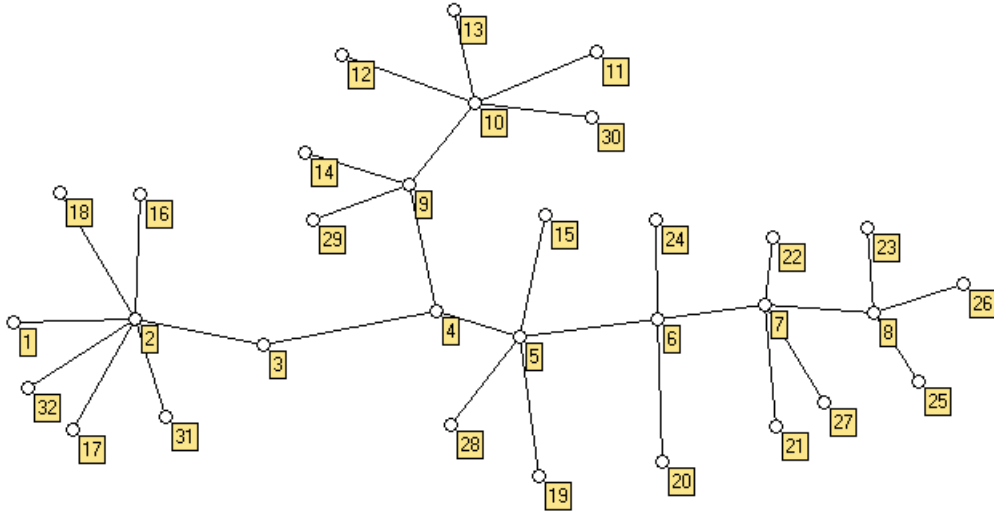


Figura 3.15: Árvore  $T$

*O caterpillar  $C(6, 0, 1, 3, 2, 3, 3)$  abaixo é um subgrafo induzido de  $T$  que possui 25 vértices, diâmetro  $d = 8$ ,  $n_1 = 18$  folhas e  $n'_1 = 6$  quase-folhas:*

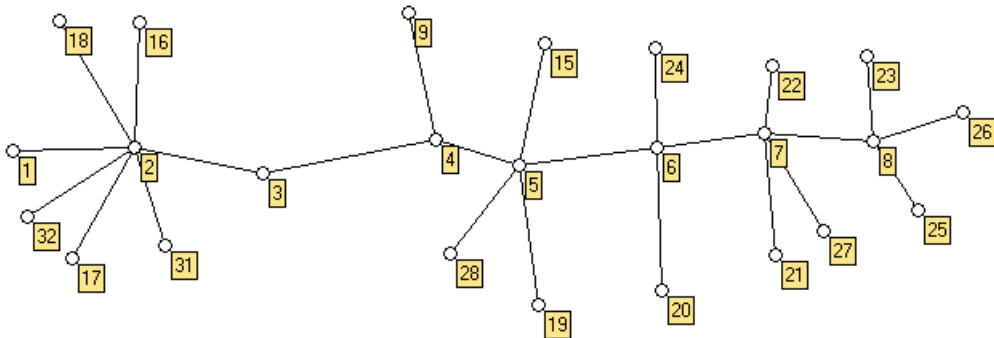


Figura 3.16:  $C(6, 0, 1, 3, 2, 3, 3)$

*$C(6, 0, 1, 3, 2, 3, 3)$  não é uma coluna de  $T$  porque existe outro subgrafo caterpillar induzido que possui um número maior de quase-folhas, a saber o grafo exibido na Figura 3.17, que tem  $n = 25$  vértices, diâmetro  $d = 8$ ,  $n_1 = 18$  folhas e  $n'_1 = 7$  quase-folhas:*

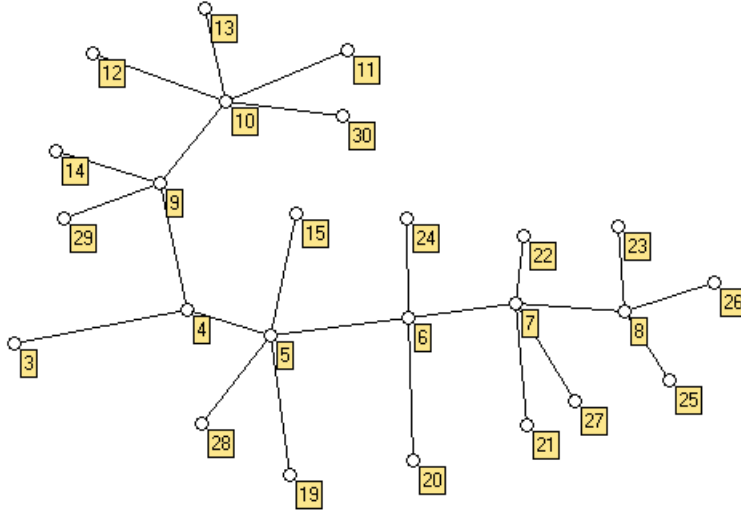


Figura 3.17:  $C(4, 2, 1, 3, 2, 3, 3)$

E ainda, podemos verificar que  $T$  possui 18  $D$ -autovalores distintos pelo software Newgraph. Como  $C(4, 2, 1, 3, 2, 3, 3)$  possui 15  $D$ -autovalores distintos, temos que  $\left\lfloor \frac{d + n'_1}{2} \right\rfloor = 8$  é uma cota inferior melhor que  $\left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor = 4$  para os números de  $D$ -autovalores distintos de  $T$ .

Isto nos permite apresentar a seguinte conjectura, que aumenta a cota de  $D$ -autovalores apresentada em [8]:

**Conjectura 3.1.22.** *Sejam  $T$  uma árvore de diâmetro  $d$  e  $C_T(p)$  uma coluna de  $T$ . Então  $T$  tem no mínimo  $\left\lfloor \frac{d + n'_1}{2} \right\rfloor$   $D$ -autovalores distintos, onde  $n'_1$  é o número de quase-folhas de  $C_T(p)$ .*

A matriz distância de  $C_T(p)$  é uma submatriz principal da matriz distância de  $T$ , logo podemos aplicar o Teorema do Entrelaçamento (2.1.7) e teremos que:

$$\alpha_{n-n'+i} \leq \alpha'_i \leq \alpha_i \text{ para todo } i = 1, \dots, n'.$$

onde  $\alpha_i$  pertence ao  $D$ -espectro de  $T$  e  $\alpha'_i$  pertence ao  $D$ -espectro de  $C_T(p)$ . Contudo, o Teorema do Entrelaçamento (2.1.7) não garante o número mínimo de  $D$ -autovalores distintos de uma árvore qualquer, a menos que estejamos no caso abaixo:

**Teorema 3.1.23.** *Seja  $T$  uma árvore com  $n$  vértices e diâmetro  $d$ . Se uma coluna de  $T$  possui  $n - 1$  vértices então  $T$  tem no mínimo  $\left\lfloor \frac{d + n'_1}{2} \right\rfloor$   $D$ -autovalores distintos, onde  $n'_1$  é o número de quase-folhas dessa coluna de  $T$ .*

**Demonstração:** Notemos que a coluna  $C_T(p)$  de  $T$  também é uma árvore e, portanto, é um grafo conexo. Então a diferença entre  $T$  e  $C_T(p)$  está em uma folha. Logo, a matriz distância de  $C_T(p)$  é uma submatriz principal de ordem  $n - 1$  da matriz distância de  $T$  e o Teorema do Entrelaçamento garante o seguinte resultado:

$$\alpha_n \leq \alpha'_{n-1} \leq \alpha_{n-1} \dots \leq \alpha'_2 \leq \alpha_2 \leq \alpha'_1 \leq \alpha_1$$

onde  $\text{Spec}_D(G) = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$  e  $\text{Spec}_D(C(p)) = (\alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_{n-1})$ . ■



### 3.2 Grafos *caterpillar* de diâmetros 3 ou 4

Nesta seção, aplicamos os resultados anteriores para determinar ou localizar o  $D$ -espectro de grafos *caterpillar* de diâmetros  $d = 3$  ou  $d = 4$ . No caso de um grafo *caterpillar* de diâmetro 3, estudamos as duplas vassouras e no caso de diâmetro 4, estudamos as duplas vassouras e os *caterpillar*  $C(t, t, t)$  com  $t$  inteiro positivo. Nosso primeiro resultado localiza os autovalores da matriz distância de uma dupla vassoura de diâmetro 3.

**Proposição 3.2.1.** *Sejam  $n, t$  e  $s$  inteiros positivos tais que  $t \leq \frac{n-2}{2}$  e  $t+s+2 = n$ . Os autovalores distintos de  $-2$  da matriz distância da dupla vassoura  $V(t, s, 3)$  podem ser localizados da seguinte maneira:*

$$\begin{aligned} 2(n-4) < \alpha_1 &\leq 3(n-2) \\ -2 < \alpha_3 < -1 < \alpha_2 < 0 &\text{ se } t = 1 \\ -1 < \alpha_3 < -0,5 < \alpha_2 < 0 &\text{ se } t \neq 1 \\ \alpha_n &\leq -(2 + \sqrt{2}) \end{aligned}$$

**Demonstração:** Pelo Corolário 3.1.7 temos que  $m_D(-2) = n-4$ , então,  $V(t, s, 3)$  tem, exatamente, quatro  $D$ -autovalores de  $V(t, s, 3)$  distintos de  $-2$ . Pela Proposição 2.3.10, temos:

$$\alpha_n \leq \frac{-1}{1 - \cos\left(\frac{\pi}{d+1}\right)} = -(2 + \sqrt{2}).$$

Logo,  $\alpha_n \neq -2$ . Assim falta localizar os outros três  $D$ -autovalores.

Consideremos a seguinte rotulação para  $V(t, s, 3)$ :

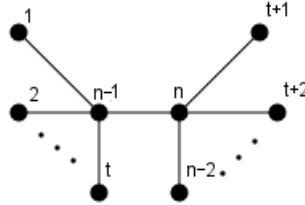


Figura 3.18: Dupla vassoura  $V(t, s, 3)$

Assim a matriz distância de  $V(t, s, 3)$  pode ser descrita como a seguir:

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 2 & \dots & 2 & 3 & 3 & \dots & 3 & 1 & 2 \\ 2 & 0 & \dots & 2 & 3 & 3 & \dots & 3 & 1 & 2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \\ 2 & 2 & \dots & 2 & 3 & 3 & \dots & 3 & 1 & 2 \\ \hline 3 & 3 & \dots & 3 & 0 & 2 & \dots & 2 & 2 & 1 \\ 3 & 3 & \dots & 3 & 2 & 0 & \dots & 2 & 2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 3 & 3 & \dots & 3 & 2 & 2 & \dots & 0 & 2 & 1 \\ \hline 1 & 1 & \dots & 1 & 2 & 2 & \dots & 2 & 0 & 1 \\ \hline 2 & 2 & \dots & 2 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Pelo Teorema 3.1.5 sabemos que  $-2$  é  $D$ -autovalor de  $V(t, s, 3)$  com multiplicidade  $n - 4$  e, usando o Teorema 2.1.4, reduziremos  $D$  a uma matriz de ordem 4 para encontrar os demais  $D$ -autovalores:

$$M = \begin{pmatrix} 2t - 2 & 3s & 1 & 2 \\ 3t & 2s - 2 & 2 & 1 \\ t & 2s & 0 & 1 \\ 2t & s & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Logo, o polinômio característico de  $M$  é:

$$p(\lambda) = \lambda^4 - 2(n - 4)\lambda^3 - (5ts + 9n - 21)\lambda^2 - (4ts + 12n - 20)\lambda - 4n + 4$$

Suponhamos que  $t = 1$ . Como  $n = t + s + 2$  com  $n \geq 4$ , segue que:

$$\begin{aligned} p(0) &= -4n + 4 < 0 \\ p(-1) &= 1 > 0 \\ p(-2) &= -12n + 36 < 0 \end{aligned}$$

Portanto, temos que os dois  $D$ -autovalores negativos que faltam são  $\alpha_2$  e  $\alpha_3$  e pelas contas acima temos que se  $t = 1$  então  $-2 < \alpha_3 < -1 < \alpha_2 < 0$ .

Agora assumamos  $t > 1$ . Como  $t \leq \frac{n-2}{2}$  temos que  $s \geq 2$ . Então:

$$ts \geq 2 > \frac{5}{12} \Rightarrow \frac{3}{4}ts > \frac{5}{16} \Rightarrow p\left(\frac{-1}{2}\right) = \frac{3ts}{4} - \frac{5}{16} > 0$$

E ainda:

$$p(-1) = -(t-1)(n-t-3) + 1 < 0$$

Portanto, temos que  $-1 < \alpha_3 < -0,5 < \alpha_2 < 0$ .

O traço de  $D$  é nulo, então  $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + (-2)(n-4) + \alpha_n = 0$ . Como  $\alpha_2, \alpha_3$  e  $\alpha_n$  são negativos temos que  $\alpha_1 > 2(n-4)$ .

Sabemos que  $V(t, s, 3)$  tem pelo menos duas folhas, então  $\delta = \delta_2 = 1$  são os menores graus de vértice de  $V(t, s, 3)$  e pelo Teorema 2.3.4 temos que:

$$\alpha_1 \leq \sqrt{\left(dn - \frac{d(d-1)}{2} - 1 - \delta_1(d-1)\right)\left(dn - \frac{d(d-1)}{2} - 1 - \delta_2(d-1)\right)} = 3(n-2)$$

Logo,  $2(n-4) < \alpha_1 \leq 3(n-2)$ .

E ainda, pela Proposição 2.3.10, temos:

$$\alpha_n \leq \frac{-1}{1 - \cos\left(\frac{\pi}{d+1}\right)} = -(2 + \sqrt{2}).$$

Assim temos todas as desigualdades. ■

Em [6], COLLINS enunciou e demonstrou o corolário a seguir.

**Corolário 3.2.2.** *Seja a dupla vassoura  $V(t, t, 3)$ . O polinômio característico da matriz distância de  $V(t, t, 3)$  possui a seguinte fatoração:*

$$p(\lambda) = (\lambda + 2)^{n-4}(\lambda + 1)(\lambda + t)(\lambda^2 - (5t - 1)\lambda - 9t)$$

Contudo, encontramos um contra-exemplo: seja a dupla vassoura  $V(3, 3, 3)$ , representada na Figura 3.19 e sua matriz distância  $D$ :

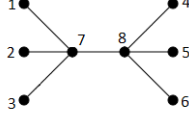


Figura 3.19:  $V(3, 3, 3)$

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

Usando o Teorema 2.1.4 temos como reduzir a matriz distância de  $V(3, 3, 3)$  e encontrar o polinômio característico de  $D$  relativo a esse grafo, que é dado por:

$$p(\lambda) = (\lambda + 2)^4(\lambda^2 + 6\lambda + 2)(\lambda^2 - 14\lambda - 14).$$

Já se usarmos o Corolário 3.2.2 temos que o polinômio característico seria:  $p(\lambda) = (\lambda + 2)^4(\lambda + 1)(\lambda + 8)(\lambda^2 - 39\lambda - 72)$ .

Nossa próxima proposição determina os  $D$ -autovalores da dupla vassoura equilibrada de diâmetro 3, corrigindo o equívoco ocorrido em [6].

**Proposição 3.2.3.** *Seja  $V(t, t, 3)$  a dupla vassoura equilibrada com  $n = 2t + 2$  vértices, então o polinômio característico da matriz distância de  $V(t, t, 3)$  é dado por:*

$$p(\lambda) = (\lambda + 2)^{n-4}(\lambda^2 + (t + 3)\lambda + 2)(\lambda^2 - (5t - 1)\lambda - 4t - 2)$$

Assim suas raízes são:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{5t - 1 + \sqrt{25t^2 + 6t + 9}}{2} \\ \alpha_2 &= \frac{-t - 3 + \sqrt{t^2 + 6t + 1}}{2} \\ \alpha_3 &= \frac{5t - 1 - \sqrt{25t^2 + 6t + 9}}{2} \\ \alpha_n &= \frac{-t - 3 - \sqrt{t^2 + 6t + 1}}{2}. \end{aligned}$$

**Demonstração:** Seguindo a mesma rotulação dada na Figura 3.18 e o método empregado na prova da Proposição 3.2.1, temos que os  $D$ -autovalores de  $V(t, t, 3)$ , distintos de  $-2$ , são autovalores da matriz reduzida:

$$M = \begin{pmatrix} 2t - 2 & 3t & 1 & 2 \\ 3t & 2t - 2 & 2 & 1 \\ t & 2t & 0 & 1 \\ 2t & t & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

cujo polinômio característico é dado por:

$$p(\lambda) = (\lambda^2 + (t+3)\lambda + 2)(\lambda^2 - (5t-1)\lambda - 4t - 2).$$

Suas raízes são:  $\frac{5t-1 + \sqrt{25t^2 + 6t + 9}}{2}$ ,  $\frac{5t-1 - \sqrt{25t^2 + 6t + 9}}{2}$ ,  
 $\frac{-t-3 + \sqrt{t^2 + 6t + 1}}{2}$  e  $\frac{-t-3 - \sqrt{t^2 + 6t + 1}}{2}$ .

Como o único valor positivo é  $\frac{5t-1 + \sqrt{25t^2 + 6t + 9}}{2}$ , temos que esse é o raio espectral,

$$\alpha_1 = \frac{5t-1 + \sqrt{25t^2 + 6t + 9}}{2}$$

Observe que  $\frac{5t-1 - \sqrt{25t^2 + 6t + 9}}{2} < \frac{-t-3 + \sqrt{t^2 + 6t + 1}}{2}$  pois, caso contrário,

$$\begin{aligned} 5t-1 - \sqrt{25t^2 + 6t + 9} &\geq -t-3 + \sqrt{t^2 + 6t + 1} \\ \Rightarrow 6t+2 &\geq \sqrt{t^2 + 6t + 1} + \sqrt{25t^2 + 6t + 9} \\ \Rightarrow (6t+2)^2 &\geq t^2 + 6t + 1 + 25t^2 + 6t + 9 + 2\sqrt{t^2 + 6t + 1}\sqrt{25t^2 + 6t + 9} \\ \Rightarrow 36t^2 + 24t + 4 &\geq 26t^2 + 12t + 10 + 2\sqrt{t^2 + 6t + 1}\sqrt{25t^2 + 6t + 9} \\ \Rightarrow 10t^2 + 12t - 6 &\geq 2\sqrt{t^2 + 6t + 1}\sqrt{25t^2 + 6t + 9} \\ \Rightarrow 5t^2 + 6t - 3 &\geq \sqrt{t^2 + 6t + 1}\sqrt{25t^2 + 6t + 9} \\ \Rightarrow 25t^4 + 60t^3 + 6t^2 - 36t + 9 &\geq 25t^4 + 156t^3 + 270t^2 + 108t + 81 \\ \Rightarrow -96t^3 - 264t^2 - 72t - 72 &\geq 0 \end{aligned}$$

o que é um absurdo, pois  $t$  é um inteiro positivo.

E ainda, como  $25t^2 + 6t + 9 < (5t+3)^2$  para todo  $t$  inteiro positivo, temos que  $\frac{5t-1 - \sqrt{25t^2 + 6t + 9}}{2} > -2$ . Logo  $\alpha_2 = \frac{-t-3 + \sqrt{t^2 + 6t + 1}}{2}$  e  $\alpha_3 = \frac{5t-1 - \sqrt{25t^2 + 6t + 9}}{2}$ .

Por fim, como  $-\sqrt{t^2 + 6t + 1} < t+1$  para todo  $t$  inteiro positivo, então  $\frac{-t-3 - \sqrt{t^2 + 6t + 1}}{2} < -2$  e, portanto,  $\alpha_n = \frac{-t-3 - \sqrt{t^2 + 6t + 1}}{2}$ . ■

Nosso próximo resultado refina ainda mais a localização dos  $D$ -autovalores de uma dupla vassoura  $V(t, s, 3)$ , pois as cotas usadas são  $D$ -autovalores de dupla vassouras equilibradas.

**Proposição 3.2.4.** *O  $D$ -espectro de  $V(t, s, 3)$  está localizado em intervalos que dependem apenas de  $t$  e  $s$  ( $s > t$ ):*

$$\begin{aligned} \frac{-t-3 + \sqrt{t^2 + 6t + 1}}{2} &\leq \alpha_2 \leq \frac{-s-3 - \sqrt{s^2 + 6s + 1}}{2} \\ \frac{5t-1 - \sqrt{25t^2 + 6t + 9}}{2} &\leq \alpha_3 \leq \frac{5s-1 - \sqrt{25s^2 + 6s + 9}}{2} \\ \frac{-s-3 + \sqrt{s^2 + 6s + 1}}{2} &\leq \alpha_n \leq \frac{-t-3 - \sqrt{t^2 + 6t + 1}}{2} \end{aligned}$$

**Demonstração:** Considere as três duplas vassouras  $V(t, t, 3)$ ,  $V(t, s, 3)$  e  $V(s, s, 3)$ , suas matrizes distância  $D'$ ,  $D$  e  $D''$ , assim como seus espectros  $(\alpha'_1, \alpha'_2, \alpha'_3, -2^{n-4}, \alpha'_n)$ ,  $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, -2^{n-4}, \alpha_n)$  e  $(\alpha''_1, \alpha''_2, \alpha''_3, -2^{n-4}, \alpha''_n)$ , respectivamente.

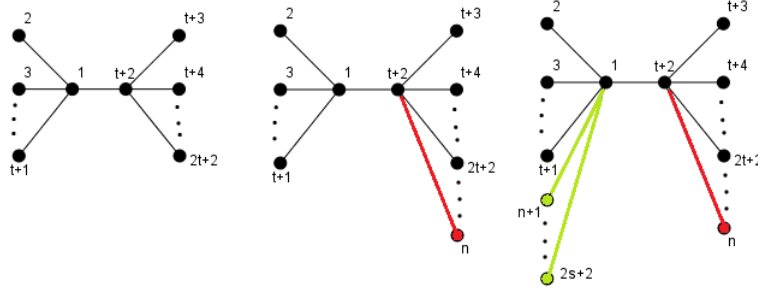


Figura 3.20:  $V(t, t, 3)$ ,  $V(t, s, 3)$  e  $V(s, s, 3)$

Pela Proposição 3.2.2, são conhecidos os valores abaixo:

$$\begin{aligned} \alpha'_1 &= \frac{5t - 1 + \sqrt{25t^2 + 6t + 9}}{2}, \\ \alpha'_2 &= \frac{-t - 3 + \sqrt{t^2 + 6t + 1}}{2}, \\ \alpha'_3 &= \frac{5t - 1 - \sqrt{25t^2 + 6t + 9}}{2}, \\ \alpha'_n &= \frac{-t - 3 - \sqrt{t^2 + 6t + 1}}{2}, \\ \alpha''_1 &= \frac{5s - 1 + \sqrt{25s^2 + 6s + 9}}{2}, \\ \alpha''_2 &= \frac{-s - 3 + \sqrt{s^2 + 6s + 1}}{2}, \\ \alpha''_3 &= \frac{5s - 1 - \sqrt{25s^2 + 6s + 9}}{2} \text{ e} \\ \alpha''_n &= \frac{-s - 3 - \sqrt{s^2 + 6s + 1}}{2}. \end{aligned}$$

Como  $t \leq s$ , é simples verificar que a dupla vassoura equilibrada  $V(t, t, 3)$  é um subgrafo induzido de  $V(t, s, 3)$  e, pela rotulação dada na Figura 3.20, temos que a matriz distância  $D'$  é uma submatriz principal da matriz  $D$ . Então, podemos aplicar o Teorema do Entrelaçamento (2.1.7) para as matrizes  $D'$  e  $D$ . Assim para todo  $i \in \{1, 2, \dots, 2t + 2\}$ :

$$\alpha_{n-2t-2+i} \leq \alpha'_i \leq \alpha_i$$

Analogamente, verificamos que  $D$  é uma submatriz principal da matriz  $D''$  e, portanto, também podemos aplicar o Teorema do Entrelaçamento para essas duas matrizes. Então para todo  $j \in \{1, 2, \dots, n\}$ :

$$\alpha''_{n-2t-2+j} \leq \alpha_j \leq \alpha''_j$$

Concluimos assim que:

$$\begin{aligned} \frac{-t-3+\sqrt{t^2+6t+1}}{2} &\leq \alpha_2 \leq \frac{-s-3+\sqrt{s^2+6s+1}}{2} \\ \frac{5t-1-\sqrt{25t^2+6t+9}}{2} &\leq \alpha_3 \leq \frac{5s-1-\sqrt{25s^2+6s+9}}{2} \\ \frac{-s-3-\sqrt{s^2+6s+1}}{2} &\leq \alpha_n \leq \frac{-t-3-\sqrt{t^2+6t+1}}{2}, \end{aligned}$$

**Observação 3.2.5.** *Pela Proposição 3.2.1, tem-se que  $2(n-4) < \alpha_1 < 3(n-2)$  e, pelo estudo anterior,  $\frac{5t-1+\sqrt{25t^2+6t+9}}{2} \leq \alpha_1 \leq \frac{5(n-t)-11+\sqrt{25(n-t)^2-94(n-t)+97}}{2}$ , então o raio espectral pertence à interseção dos intervalos  $(2(n-4), 3(n-2)]$  e  $[\frac{5t-1+\sqrt{25t^2+6t+9}}{2}, \frac{5(n-t)-11+\sqrt{25(n-t)^2-94(n-t)+97}}{2}]$ .*

No caso de diâmetro 4 temos, pelo Teorema 3.1.5, que  $-2$  é um  $D$ -autovalor de  $V(t, s, 4)$  com multiplicidade  $n-5$  e, pelo Teorema 3.1.16,  $V(t, s, 4)$  possui 6  $D$ -autovalores distintos. Nosso próximo resultado estuda os outros cinco  $D$ -autovalores, distintos de  $-2$ :

**Proposição 3.2.6.** *Seja  $V(t, s, 4)$  a dupla vassoura de diâmetro 4 e com  $n = t+s+3$  vértices. Os  $D$ -autovalores de  $V(t, s, 4)$ , distintos de  $-2$ , são as raízes do polinômio:*

$$\begin{aligned} p(\lambda) = \lambda^5 - (2n-10)\lambda^4 - (12ts+18n-52)\lambda^3 - (24ts+44n-104)\lambda^2 \\ - (8ts+36n-68)\lambda - 8n+8. \end{aligned}$$

**Demonstração:** Consideremos a rotulação abaixo para a dupla vassoura  $V(t, s, 4)$ :

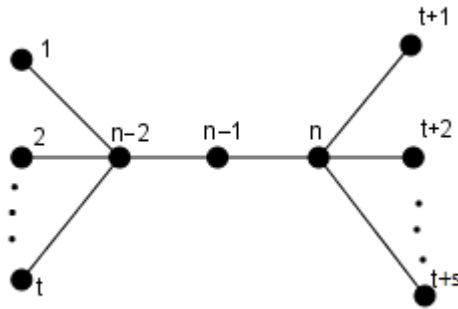


Figura 3.21: Dupla Vassoura  $V(t, s, 4)$

Então, sua matriz distância  $D$  é dada por:

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 2 & \dots & 2 & 4 & 4 & \dots & 4 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 0 & \dots & 2 & 4 & 4 & \dots & 4 & 1 & 2 & 3 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 2 & 2 & \dots & 0 & 4 & 4 & \dots & 4 & 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & 4 & \dots & 4 & 0 & 2 & \dots & 2 & 3 & 2 & 1 \\ 4 & 4 & \dots & 4 & 2 & 0 & \dots & 2 & 3 & 2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 4 & 4 & \dots & 4 & 2 & 2 & \dots & 0 & 3 & 2 & 1 \\ \hline 1 & 1 & \dots & 1 & 3 & 3 & \dots & 3 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & \dots & 2 & 2 & 2 & \dots & 2 & 1 & 0 & 1 \\ \hline 3 & 3 & \dots & 3 & 1 & 1 & \dots & 1 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

A reduzida da matriz distância  $D$  é dada por:

$$D^* = \begin{pmatrix} 2t - 2 & 4s & 1 & 2 & 3 \\ 4t & 2s - 2 & 3 & 2 & 1 \\ t & 3s & 0 & 1 & 2 \\ 2t & 2s & 1 & 0 & 1 \\ 3t & s & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

cujo polinômio característico de  $D^*$  é:

$$p(\lambda) = \lambda^5 - (2n - 10)\lambda^4 - (12ts + 18n - 52)\lambda^3 - (24ts + 44n - 104)\lambda^2 - (8ts + 36n - 68)\lambda - 8n + 8.$$

Pelo Teorema 2.1.4 temos que os autovalores de  $D^*$  são  $D$ -autovalores. Como  $p(-2) = 16ts \neq 0$  temos que os cinco outros autovalores são as raízes de  $p(\lambda) = 0$ . ■

Seguindo o mesmo percurso feito para dupla vassouras de diâmetro 3, estudamos o  $D$ -espectro da dupla vassoura equilibrada de diâmetro 4.

**Proposição 3.2.7.** *Seja  $V(t, t, 4)$  dupla vassoura equilibrada com  $t > 1$ . Então seus  $D$ -autovalores, distintos de  $-2$ , são  $-t - 2 - \sqrt{t^2 + 4t}$  e  $-t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t}$ , e as raízes do polinômio  $q(\lambda) = \lambda^3 - 6t\lambda^2 - (12t + 6)\lambda - 4t - 4$ . Além disso,*

$$\alpha_3 = -t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t},$$

$$\alpha_i = -2 \text{ para todo } i = 5, \dots, 2t + 2 \text{ e}$$

$$\alpha_{2t+3} = -t - 2 - \sqrt{t^2 + 4t}.$$

**Demonstração:** Considerando a mesma rotulação feita na Figura 3.21 temos que a matriz reduzida de  $D$  é dada por:

$$D^* = \begin{pmatrix} 2t - 2 & 4t & 1 & 2 & 3 \\ 4t & 2t - 2 & 3 & 2 & 1 \\ t & 3t & 0 & 1 & 2 \\ 2t & 2t & 1 & 0 & 1 \\ 3t & t & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Então, o polinômio característico da matriz acima é:

$$p(\lambda) = (\lambda^2 + (2t + 4)\lambda + 4)(\lambda^3 - 6t\lambda^2 - (12t + 6)\lambda - 4t - 4),$$

e, portanto,  $-t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t}$  e  $-t - 2 - \sqrt{t^2 + 4t}$  são  $D$ -autovalores de  $V(t, t, 4)$ . Observemos que  $-t - 2 - \sqrt{t^2 + 4t} < -2 < -t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t} < 0$ .

Estudemos o polinômio  $q(\lambda) = \lambda^3 - 6t\lambda^2 - (12t + 6)\lambda - 4t - 4$  para estabelecer uma ordenação para os autovalores.

Sua primeira derivada é  $q'(\lambda) = 3\lambda^2 - 12t\lambda - (12t + 6)$  e os pontos críticos de  $q(\lambda)$  são  $2t - \sqrt{4t^2 + 4t + 2}$  e  $2t + \sqrt{4t^2 + 4t + 2}$ . Pelo teste da derivada segunda, temos que  $2t + \sqrt{4t^2 + 4t + 2}$  é mínimo local e  $2t - \sqrt{4t^2 + 4t + 2}$  é máximo local da curva descrita pelo gráfico de  $q(\lambda)$ .

Como  $-2 < 2t - \sqrt{4t^2 + 4t + 2} < 0$ ,  $q(-2) = -4t < 0$  e  $q(0) = -4t - 4 < 0$ , existe uma raiz de  $q(\lambda)$  entre  $-2$  e  $2t - \sqrt{4t^2 + 4t + 2}$  e outra entre  $2t - \sqrt{4t^2 + 4t + 2}$  e  $0$  (sabemos que  $\alpha_1 > 0$ ). Portanto, todas as raízes de  $q(\lambda)$  são maiores que  $-2$ . Assim,  $\alpha_{2t+3} = -t - 2 - \sqrt{t^2 + 4t}$  e  $\alpha_i = -2$ , para todo  $i = 5, \dots, 2t + 2$ .

Observemos ainda que  $q(-t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t}) = -14t^3 - 60t^2 - 34t + (16t^2 + 28t + 2)\sqrt{t^2 + 4t} > 0$ , pois caso contrário teríamos a inequação:

$$\begin{aligned} -14t^3 - 60t^2 - 34t + (16t^2 + 28t + 2)\sqrt{t^2 + 4t} &\leq 0 \\ \Rightarrow (16t^2 + 28t + 2)\sqrt{t^2 + 4t} &\leq 14t^3 + 60t^2 + 34t \\ \Rightarrow (16t^2 + 28t + 2)^2(t^2 + 4t) &\leq (14t^3 + 60t^2 + 34t)^2 \end{aligned}$$

Os dois membros da última inequação são funções crescentes em  $t$  inteiro positivo e para  $t = 2$  temos que  $178.608 \leq 176.400$  o que é um absurdo! Então,  $q(-t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t}) > 0$  e existe uma raiz de  $q(\lambda)$  entre  $-t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t}$  e  $0$ . E isso prova que  $\alpha_3 = -t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t}$ . ■

Mesmo não conseguindo uma expressão por radicais para os demais autovalores de  $V(t, t, 4)$  ainda podemos estimar alguns  $D$ -autovalores da dupla vassoura  $V(t, s, 4)$  usando a Proposição 3.2.7.

**Corolário 3.2.8.** *Seja  $V(t, s, 4)$  uma dupla vassoura com  $n = t + s + 3$  vértices. Se  $\alpha_3$  e  $\alpha_n$  são, respectivamente, o terceiro maior e o menor  $D$ -autovalor de  $V(t, s, 4)$ , então:*

$$\begin{aligned} -t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t} &< \alpha_3 < -s - 2 + \sqrt{s^2 + 4s} \\ -t - 2 - \sqrt{t^2 + 4t} &< \alpha_n < -s - 2 - \sqrt{s^2 + 4s} \end{aligned}$$

**Demonstração:** É claro que  $V(t, t, 4)$  é subgrafo induzido de  $V(t, s, 4)$ , que por sua vez, é subgrafo induzido de  $V(s, s, 4)$ , e com a rotulação da Figura 3.22 temos que as respectivas matrizes distância são uma submatriz da outra.

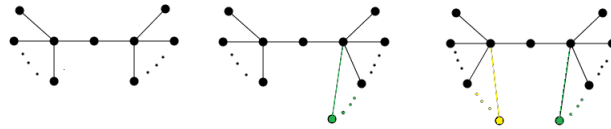


Figura 3.22:  $V(t, t, 4)$ ,  $V(t, s, 4)$  e  $V(s, s, 4)$



Portanto, se  $\alpha'_3$  e  $\alpha'_{2t+2}$  são  $D$ -autovalores de  $V(t, t, 4)$  e  $\alpha''_3$  e  $\alpha''_{2s+3}$  são  $D$ -autovalores de  $V(s, s, 4)$ , pelo Teorema do Entrelaçamento (2.1.7) e pela Proposição 3.2.7 temos as desigualdades abaixo:

$$\begin{aligned} \alpha'_3 &< \alpha_3 < \alpha''_3 \\ \alpha''_{2s+3} &< \alpha_n < \alpha'_{2t+3}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} -t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t} &< \alpha_3 < -s - 2 + \sqrt{s^2 + 4s} \\ -t - 2 - \sqrt{t^2 + 4t} &< \alpha_n < -s - 2 - \sqrt{s^2 + 4s} \end{aligned}$$

■

Agora passemos ao estudo do *caterpillar*  $C(t, t, t)$ . Para este grafo também não conseguimos descrever todos os seus  $D$ -autovalores por meio de radicais, porém encontramos interseção de seu  $D$ -espectro com o  $D$ -espectro da dupla vassoura equilibrada  $V(t, t, 4)$  que é um de seus subgrafos induzidos.

**Proposição 3.2.9.** *Seja o grafo caterpillar  $C(p)$  onde  $p = (t, t, t)$  e  $t \geq 1$  é um inteiro positivo. O  $D$ -espectro de  $C(p)$  é dado por  $\alpha_3 = -t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t}$ ,  $\alpha_i = -2$  para todo  $i = 5, \dots, 3t + 1$ ,  $\alpha_{3t+3} = -t - 2 - \sqrt{t^2 + 4t}$  e os demais autovalores são as raízes de  $q_2(\lambda) = \lambda^4 - (8t - 2)\lambda^3 - (6t^2 + 33t + 6)\lambda^2 - (6t^2 + 40t + 16)\lambda - 12t - 8$ .*

**Demonstração:** Consideremos a rotulação abaixo para  $C(t, t, t)$ :

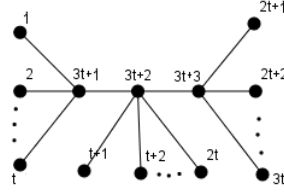


Figura 3.23:  $C(t, t, t)$

A matriz distância de  $C(t, t, t)$  pode ser descrita da seguinte maneira:

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 & \dots & 2 & 3 & 3 & \dots & 3 & 4 & 4 & \dots & 4 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 0 & \dots & 2 & 3 & 3 & \dots & 3 & 4 & 4 & \dots & 4 & 1 & 2 & 3 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 2 & 2 & \dots & 0 & 3 & 3 & \dots & 3 & 4 & 4 & \dots & 4 & 1 & 2 & 3 \\ \hline 3 & 3 & \dots & 3 & 0 & 2 & \dots & 2 & 3 & 3 & \dots & 3 & 2 & 1 & 2 \\ 3 & 3 & \dots & 3 & 2 & 0 & \dots & 2 & 3 & 3 & \dots & 3 & 2 & 1 & 2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 3 & 3 & \dots & 3 & 2 & 2 & \dots & 0 & 3 & 3 & \dots & 3 & 2 & 1 & 2 \\ \hline 4 & 4 & \dots & 4 & 3 & 3 & \dots & 3 & 0 & 2 & \dots & 2 & 3 & 2 & 1 \\ 4 & 4 & \dots & 4 & 3 & 3 & \dots & 3 & 2 & 0 & \dots & 2 & 3 & 2 & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 4 & 4 & \dots & 4 & 3 & 3 & \dots & 3 & 2 & 2 & \dots & 0 & 3 & 2 & 1 \\ \hline 1 & 1 & \dots & 1 & 2 & 2 & \dots & 2 & 3 & 3 & \dots & 3 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & \dots & 2 & 1 & 1 & \dots & 1 & 2 & 2 & \dots & 2 & 1 & 0 & 1 \\ \hline 3 & 3 & \dots & 3 & 2 & 2 & \dots & 2 & 1 & 1 & \dots & 1 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Pelo Teorema 3.1.11 tem-se que  $-2$  é autovalor de multiplicidade  $3t - 3$ . Reduzindo a matriz  $D$  temos a matriz  $D'$  abaixo:

$$\begin{pmatrix} 2t-2 & 3t & 4t & 1 & 2 & 3 \\ 3t & 2t-2 & 3t & 2 & 1 & 2 \\ 4t & 3t & 2t-2 & 3 & 2 & 1 \\ t & 2t & 3t & 0 & 1 & 2 \\ 2t & t & 2t & 1 & 0 & 1 \\ 3t & 2t & t & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

cujos polinômios característicos são dados por  $q_2(\lambda) \cdot (\lambda^2 + (2t+4)\lambda + 4)$ . Assim, temos que os  $D$ -autovalores de  $C(t, t, t)$  são  $-2$ ,  $-t - 2 \pm \sqrt{t^2 + 4t}$  e as raízes de  $q_2(\lambda)$ .

Pelo corolário 2.3.4 temos que:

$$\begin{aligned} \alpha_n &\leq \frac{-1}{1 - \cos(\frac{\pi}{5})} \simeq -5,23606\dots \\ \alpha_2 &> -1 \\ \alpha_3 &> -1 \\ \alpha_{3t+2} &< -2 \\ \alpha_{3t} &\geq -2 \\ \alpha_5 &\leq -2. \end{aligned}$$

Então  $\alpha_i = -2$  para todo  $i = 5, \dots, 3t$ . Vamos provar que  $\alpha_3 = -t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t}$ ,  $\alpha_n = -t - 2 - \sqrt{t^2 + 4t}$  e que  $\alpha_4 > -2$ . De fato, para todo inteiro positivo  $t$  temos:

- $q_2(-t - 2 - \sqrt{t^2 + 4t}) = 28t^4 + 140t^3 + 400t^2 + 36t + 8 + (28t^3 + 84t^2 + 40t)\sqrt{t^2 + 4t} > 0$ ;
- $q_2(-2) = -12t^2 < 0$ ;
- $q_2(-1) = 3t + 1 > 0$ ;
- $q_2(-t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t}) = 28t^4 + 140t^3 + 152t^2 + 24t - (28t^3 + 84t^2 + 40t)\sqrt{t^2 + 4t} > 0$ , pois caso contrário, teríamos que:

$$28t^4 + 140t^3 + 152t^2 + 24t \leq (28t^3 + 84t^2 + 40t)\sqrt{t^2 + 4t}.$$

Como ambos os membros da inequação são funções crescentes em  $t$  se as avaliarmos em  $t = 1$  temos que  $344 \leq 152\sqrt{5} \approx 339,8823$  o que é um absurdo!

- $q_2(0) = -12t - 8 < 0$ .

Notemos ainda que  $-t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t} > -1$ . De fato, para todo  $t$  inteiro positivo, temos:

$$\begin{aligned} 2t &> 1 \\ \Rightarrow 4t &> 2t + 1 \\ \Rightarrow \sqrt{t^2 + 4t} &> t + 1 \\ \Rightarrow -t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t} &> -1 \end{aligned}$$

Assim, existe alguma raiz de  $q_2(\lambda)$  em cada um dos intervalos:

$$\begin{aligned} &(-t - 2 - \sqrt{t^2 + 4t}, -2), \\ &(-2, -1) \\ &(-t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t}, 0) \text{ e} \\ &(0, +\infty). \end{aligned}$$

Logo  $\alpha_3 = -t - 2 + \sqrt{t^2 + 4t}$  e  $\alpha_{3t+3} = -t - 2 - \sqrt{t^2 + 4t}$ . ■

# Capítulo 4

## Os $D$ -autovalores de grafos *threshold*

### 4.1 Resultados

Neste Capítulo estudamos o  $D$ -espectro de um grafo *threshold*. Já é conhecido que dado um grafo *threshold* todos seus  $D$ -autovalores, distintos de  $-2$  e  $-1$ , são simples (Teorema 2.3.12). Para realizar nosso estudo, definiremos um novo parâmetro que, junto com o algoritmo  $diagonalize(G, y)$ , serão importantes para determinar as multiplicidades de  $-2$  e  $-1$  como  $D$ -autovalores de um grafo *threshold* qualquer. Como consequência deste resultado, determinamos o número de  $D$ -autovalores distintos de um grafo *threshold*. Além disso, vemos o significado estrutural deste parâmetro. Por abuso de linguagem escrevemos que o grafo *threshold* é igual a sequência binária que o define.

Em [4], Jacobs et al descreveram um algoritmo que localiza os  $D$ -autovalores de um grafo *threshold* qualquer, chamado  $diagonalize(G, y)$ . Neste algoritmo, tendo como entradas a sequência binária que define o grafo *threshold*  $G$  e um número real  $y$ , obtemos o número de  $D$ -autovalores localizados nos intervalos  $(-\infty, -y)$  e  $(-y, +\infty)$  e, ainda, a multiplicidade de  $-y$  como  $D$ -autovalor. O algoritmo  $diagonalize(D, y)$  está apresentado abaixo:

---

**Algorithm 1** Algoritmo de Diagonalização

---

**Require:** Grafo  $G$  e  $y \in \mathbb{R}$ **Ensure:** Matriz diagonal  $D$ 

```
1: procedure Diagonaliza( $G, y$ )
2:   for all  $i$  do  $d_i \leftarrow y$ 
3:   end for
4:   for  $m \leftarrow n$  to 2 do
5:      $\alpha \leftarrow d_m$ 
6:     if  $b_{m-1} = 1$  and  $b_m = 1$  then
7:       if  $\alpha + y \neq 2$  then ▷ subcaso 1a
8:          $d_{m-1} \leftarrow \frac{\alpha y - 1}{\alpha + y - 2}$ 
9:          $d_m \leftarrow \alpha + y - 2$ 
10:      else
11:        if  $y = 1$  then ▷ subcaso 1b
12:           $d_{m-1} \leftarrow 1$ 
13:           $d_m \leftarrow 0$ 
14:        else ▷ subcaso 1c
15:           $d_{m-1} \leftarrow 1$ 
16:           $d_m \leftarrow -(1 - y)^2$ 
17:           $b_{m-1} \leftarrow 0$ 
18:        else
19:          if  $b_{m-1} = 0$  and  $b_m = 1$  then
20:            if  $y = 0$  then ▷ subcaso 2a
21:               $d_{m-1} \leftarrow 1$ 
22:               $d_m \leftarrow -1$ 
23:            else ▷ subcaso 2b
24:               $d_{m-1} \leftarrow \alpha - \frac{1}{y}$ 
25:               $d_m \leftarrow y$ 
26:               $d_{m-1} \leftarrow 1$ 
27:          end for
        end for
```

---

**Exemplo 4.1.1.** Relembremos o grafo threshold visto no exemplo 2.2.2.

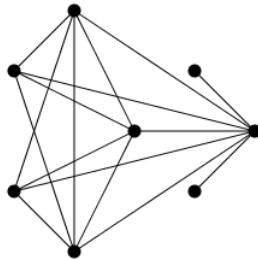


Figura 4.1: Grafo threshold  $(0, 0, 1, 1, 1, 0, 0, 1)$

Observemos que aplicando o algoritmo  $diagonalize(G, 1)$  teremos:

$$\left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 1 & \frac{1}{4} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & \frac{4}{3} \\ 0 & -\frac{4}{3} \\ 1 & \frac{4}{4} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & -\frac{2}{3} \\ 0 & -\frac{3}{3} \\ 1 & \frac{4}{4} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & -\frac{2}{3} \\ 0 & -\frac{3}{3} \\ 1 & \frac{4}{4} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & -\frac{2}{3} \\ 0 & -\frac{3}{3} \\ 1 & \frac{4}{4} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & -\frac{2}{3} \\ 0 & -\frac{3}{3} \\ 1 & \frac{4}{4} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & -\frac{2}{3} \\ 0 & -\frac{3}{3} \\ 1 & \frac{4}{4} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & -\frac{2}{3} \\ 0 & -\frac{3}{3} \\ 1 & \frac{4}{4} \end{array} \right|$$

Aplicando o algoritmo  $diagonalize(D, 2)$  temos:

$$\left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 2 \\ 0 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 0 & 2 \\ 0 & 2 \\ 1 & 2 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 2 \\ 0 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 0 & 2 \\ 0 & 2 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 2 \\ 0 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 2 \\ 0 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 2 \\ 0 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 2 \\ 0 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 2 \\ 0 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 2 \\ 0 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline 0 & 2 \\ 0 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{array} \right|$$

Como consequência do algoritmo, temos que  $-2$  e  $-1$  são  $D$ -autovalores de  $G$ , ambos com multiplicidade igual a dois (dois zeros na última sequência em cada caso). Generalizamos esse raciocínio para estudar a multiplicidade de  $-2$  e  $-1$  em qualquer grafo *threshold*. Para tal definimos um novo parâmetro: a variação binária.

**Definição 4.1.2.** *Seja  $G$  um grafo *threshold* e  $(b_1, b_2, \dots, b_n)$  sua sequência binária. A variação binária  $\xi$  de  $G$  é o número de elementos do conjunto  $\{i | b_i = 0, b_{i+1} = 1, 1 \leq i \leq n - 1\}$ .*

Observemos que  $1 \leq \xi \leq \tau$  onde  $\tau$  é o traço de  $G$ .

Nosso próximo resultado determina, exatamente, a multiplicidade de  $-2$  e  $-1$  como  $D$ -autovalores de um grafo *threshold*, levando em consideração que essa multiplicidade pode ser nula, ou seja,  $-2$  ou  $-1$  podem não ser  $D$ -autovalores do grafo em questão.

**Teorema 4.1.3.** *Seja  $G = (b_1, b_2, \dots, b_n)$  um grafo *threshold* com traço  $\tau$  e variação binária  $\xi$ . Então  $m_D(-2) = n - \tau - \xi$  e  $m_D(-1) = \tau - \xi$  se  $b_2 = 0$  ou  $m_D(-1) = \tau - \xi + 1$  se  $b_2 = 1$ .*

**Demonstração:** Seja  $G = (b_1, b_2, \dots, b_n)$ . Toda sequência binária é formada por blocos de zeros e uns, vamos contar o número de entradas de cada bloco da seguinte maneira: consideremos  $r_1$  o número de entradas do primeiro bloco de zeros da sequência binária,  $s_1$  o número de entradas do primeiro bloco de uns,  $r_2$  o número de entradas do segundo bloco de zeros da sequência binária,  $s_2$  o número de entradas do segundo bloco de uns, e assim sucessivamente, até que  $r_\xi$  seja o número de

entradas do último bloco de zeros e  $s_\xi$  o número de entradas do último bloco de uns da sequência binária. Então:

- $\sum_{i=1}^{\xi} r_i = n - \tau$
- $\sum_{i=1}^{\xi} s_i = \tau$
- $b_j = 0$  se  $1 \leq j \leq r_1$
- $b_j = 1$  se  $r_1 < j \leq r_1 + s_1$
- $b_j = 0$  se  $r_1 + s_1 < j \leq r_1 + s_1 + r_2$
- $b_j = 1$  se  $r_1 + s_1 + r_2 < j \leq r_1 + s_1 + r_2 + s_2$
- $\vdots$
- $b_j = 0$  se  $n - r_\xi - s_\xi < j \leq n - s_\xi$
- $b_j = 1$  se  $n - s_\xi < j \leq n$

Aplicaremos o algoritmo *diagonalize*( $D, 2$ ) por etapas, primeiro para o último bloco de  $s_\xi$  unidades:

$$\begin{array}{c}
 \left| \begin{array}{c} b_i \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} d_i \\ \vdots \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ \vdots \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} b_i \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} d_i \\ \vdots \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ \vdots \\ 2 \\ 4 \\ 3 \\ 2 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} b_i \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} d_i \\ \vdots \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ \vdots \\ 5 \\ 4 \\ 3 \\ 2 \end{array} \right| \dots \left| \begin{array}{c} b_i \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} d_i \\ \vdots \\ 2 \\ \frac{s_\xi + 1}{s_\xi} \\ \frac{s_\xi}{s_\xi} \\ s_\xi - 1 \\ \vdots \\ 5 \\ 4 \\ 3 \\ 2 \end{array} \right|
 \end{array}$$

Para realizar o próximo passo do algoritmo precisamos garantir que  $\frac{s_\xi + 1}{s_\xi} + \frac{2}{4} \neq 1$ , o que é claro pois  $s_\xi$  é um inteiro positivo. Assim:

$$\begin{array}{c|c} b_i & d_i \\ \hline \vdots & \vdots \\ 0 & 2 \\ 1 & \frac{s_\xi + 2}{s_\xi} \\ 1 & \frac{2s_\xi}{s_\xi} \\ & s_\xi - 1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 5 \\ 1 & 4 \\ 1 & 3 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{array}$$

Agora apliquemos o algoritmo para a última sequência de  $r_\xi$  zeros

$$\begin{array}{c|c|c|c|c|c} b_i & d_i & b_i & d_i & b_i & d_i & b_i & d_i & b_i & d_i \\ \hline \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 2 & 1 & 2 & 1 & 2 & 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{array}$$

Observemos que se realizarmos apenas mais um passo do algoritmo, ele recomeçará em algum dos passos anteriores, pois caímos no caso em que  $b_m = 1$ ,  $b_{m-1} = 1$ ,  $\alpha = 0$  com  $y = 2$  então  $d_m \leftarrow -(1-y)^2 = -1$  e  $d_{m-1} \leftarrow 1$  e  $m \leftarrow m-1$  ou  $b_{m-1} = 0$ ,  $\alpha = 0$  com  $y = 2$  então  $d_m \leftarrow \alpha + \frac{y}{4} - 1 = -\frac{1}{2}$  e  $d_{m-1} \leftarrow 2$ :

$$\begin{array}{c|c|c|c} b_i & d_i & b_i & d_i \\ \hline \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 2 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{array} \quad \text{ou} \quad \begin{array}{c|c|c|c} b_i & d_i & b_i & d_i \\ \hline \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 2 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{array}$$

Assim cada sequência de  $r_i$  zeros da sequência binária nos garante  $r_i - 1$  entradas nulas no algoritmo, logo temos:

$$m_D(-2) = \sum_{i=1}^{\xi} (r_i - 1) = n - \tau - \xi$$



Apliquemos o algoritmo  $diagonalize(G, 1)$  na seqüência binária começando pelo último bloco de unidades:

$b_1$	$d_i$	$b_1$	$d_i$	$b_1$	$d_i$	$b_1$	$d_i$	$b_1$	$d_i$	$b_1$	$d_i$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
0	1	0	1	0	1	0	1	0	$0^{(*)}$	1	$\frac{1}{4}$
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$\frac{4}{4}$
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	0
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	0
1	1	1	1	1	1	1	0	1	0	1	0
1	1	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0

Apliquemos o algoritmo para a seqüência de zeros anterior:

$b_1$	$d_i$	$b_1$	$d_i$	$b_1$	$d_i$	$b_1$	$d_i$	$b_1$	$d_i$	$b_1$	$d_i$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
1	1	0	1	0	1	0	1	0	1	1	1
0	1	0	1	0	1	0	1	0	$\frac{11 - 26r_\xi}{32r_\xi - 16}$	0	$\frac{75 - 154r_\xi}{128r_\xi - 64}$
0	1	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	0	$\frac{-3 - 2(r_\xi - 1)}{4 + 8(r_\xi - 1)}$	0	$\frac{-3 - 2(r_\xi - 1)}{4 + 8(r_\xi - 1)}$
$\vdots$	$\vdots$	0	1	0	1	0	1	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
0	1	0	1	0	1	0	1	0	$\frac{12}{7}$	0	$\frac{9}{28}$
0	1	0	1	0	1	0	1	0	$-\frac{7}{20}$	0	$-\frac{28}{7}$
0	1	0	1	0	1	0	1	0	$-\frac{5}{20}$	0	$-\frac{20}{5}$
0	0	0	1	0	1	0	1	0	$-\frac{12}{3}$	0	$-\frac{12}{3}$
$\vdots$	$\vdots$	0	1	0	1	0	1	0	$-\frac{4}{4}$	0	$-\frac{4}{4}$

Observemos que para a próxima seqüência de unidades o algoritmo recomeça. Então, cada seqüência de  $s_i$  unidades da seqüência binária determina uma seqüência de  $s_i - 1$  zeros no resultado do algoritmo.

E ainda, se  $r_1 = 1$ , isto é,  $b_2 = 1$ , temos que o último passo do algoritmo (\*) garante mais uma entrada nula e assim:

$$m_D(-1) = \sum_{i=1}^{\xi} (s_i - 1) + 1 = \tau - \xi + 1$$

E se  $r_1 \neq 1$ , isto é,  $b_2 = 0$ , a entrada nula do passo (\*) é substituída por uma entrada não nula, logo:

$$m_D(-1) = \sum_{i=1}^{\xi} (s_i - 1) = \tau - \xi$$

■

**Exemplo 4.1.4.** *Vejamos os seguintes grafos threshold:*

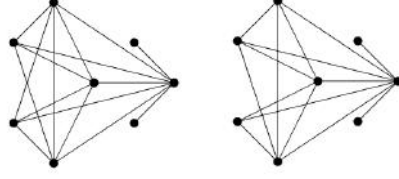


Figura 4.2: Grafo threshold  $G_1$  e  $G_2$

Os grafos  $G_1 = (0, 0, 1, 1, 1, 0, 0, 1)$  e  $G_2 = (0, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 1)$  possuem  $n = 8$  vértices e traço  $\tau = 4$ . A variação binária de  $G_1$  é  $\xi = 2$ , então  $m_D(-1) = \tau - \xi = 2$  e  $m_D(-2) = n - \tau - \xi = 2$ . Já a variação binária de  $G_2$  é  $\xi = 3$  então  $m_D(-1) = \tau - \xi + 1 = 2$  e  $m_D(-2) = n - \tau - \xi = 1$ .

Observemos que a partir do Teorema 4.1.3 temos uma propriedade do  $D$ -espectro de um grafo *threshold* discutida no corolário a seguir:

**Corolário 4.1.5.** *Seja  $G$  um grafo threshold. Então  $-1$  ou  $-2$  sempre será um  $D$ -autovalor de  $G$ .*

**Demonstração:** De fato, suponha que o traço de  $G$  é  $\tau$  e sua variação binária é  $\xi$ . Se  $-2$  e  $-1$  não fossem  $D$ -autovalores de  $G$  então pelo teorema 4.1.3 temos que  $m_D(-2) = n - \tau - \xi = 0$  e  $m_D(-1) = \tau - \xi = 0$  ou  $m_D(-1) = \tau - \xi + 1 = 0$ . Se  $m_D(-1) = \tau - \xi + 1 = 0$  teríamos que  $\xi = \tau + 1$  o que é um absurdo pois  $\xi \leq \tau$ . Se  $m_D(-2) = n - \tau - \xi = 0$  e  $m_D(-1) = \tau - \xi = 0$  então  $\xi = n - \tau = \tau$ . Isso significa que  $\xi$  é igual ao número de entradas nulas e de entradas unitárias da sequência binária que define  $G$ .

Então, pela definição de  $\xi$ , a sequência binária de  $G$  não possui zeros nem uns consecutivos, ou seja,  $G = (0, 1, 0, 1, 0, 1, \dots, 1)$ , isto é,  $b_2 = 1$ . Mas pelo o que foi desenvolvido no Teorema 4.1.3 temos que  $m_D(-1) = \tau - \xi + 1 = 1$ , absurdo! ■

A partir do Teorema 4.1.3 podemos determinar o número de  $D$ -autovalores distintos de um grafo *threshold*, em função da variação binária.

**Corolário 4.1.6.** *Seja  $G$  um grafo threshold com variação binária  $\xi$ . Então:*

$$\mathfrak{N}_D(G) = \begin{cases} 2\xi, & \text{se } b_2 = 1 \text{ e não tem zeros consecutivos;} \\ 2\xi + 2, & \text{se } b_2 = 0 \text{ e tem unidades consecutivas;} \\ 2\xi + 1, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

**Demonstração:** Seja  $G = (b_1, b_2, \dots, b_n)$  um grafo threshold com  $n$  vértices, traço  $\tau$  e variação binária  $\xi$ .

Se  $b_2 = 1$  então, pelo Teorema 4.1.3  $-1$  é um  $D$ -autovalor de  $G$  com multiplicidade  $\tau - \xi + 1$ .

Se  $-2$  também é um  $D$ -autovalor de  $G$ , então, pelo Teorema 2.3.12 temos que  $G$  possui  $n - m_D(-1) - m_D(-2) = n - (\tau - \xi + 1) - (n - \tau - \xi) = 2\xi - 1$   $D$ -autovalores simples e distintos de  $-1$  e  $-2$ . Portanto, temos  $2\xi + 1$   $D$ -autovalores distintos.

Se  $-2$  não é um  $D$ -autovalor de  $G$ , então,  $\xi = n - \tau$  e o número de autovalores simples de  $G$  é  $n - m_D(-1) = n - (\tau - \xi + 1) = 2\xi - 1$ . Logo, temos  $2\xi$   $D$ -autovalores distintos.

Se  $b_2 = 0$  temos que  $-2$  é um  $D$ -autovalor de  $G$  com multiplicidade  $m_D(-2) = n - \tau - \xi$ .

Se  $-1$  também é um  $D$ -autovalor de  $G$  então  $m_D(-1) = \tau - \xi$ . Portanto, o número de  $D$ -autovalores distintos é  $n - m_D(-1) - m_D(-2) + 2 = 2\xi + 2$ .

Se  $-1$  não é um  $D$ -autovalor de  $G$ , então  $\tau = \xi$  e o número de  $D$ -autovalores distintos é  $n - m_D(-2) + 1 = 2\xi + 1$ . ■

**Exemplo 4.1.7.** *Sejam os grafos  $G_1 = (0, 0, 1, 1, 1, 0, 0, 1)$ ,  $G_2 = (0, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 1)$ ,  $G_3 = (0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1)$  e  $G_4 = (0, 0, 1, 0, 1, 0, 1)$ . Temos que seus  $D$ -espectros têm, respectivamente,  $2\xi_1 + 2 = 6$ ,  $2\xi_2 + 1 = 7$ ,  $2\xi_3 = 8$  e  $2\xi_4 + 1 = 7$ ,  $D$ -autovalores distintos, onde  $\xi_i$  é a variação binária de  $G_i$  para cada  $i = 1, 2, 3, 4$ . A saber, seus respectivos espectros são:*

- $\text{spec}_D(G_1) = (5 + \sqrt{29}; \frac{\sqrt{13} - 3}{2}; 5 - \sqrt{29}; -1^2; -2^2; \frac{-\sqrt{13} - 3}{2})$ ,
- $\text{spec}_D(G_2) = (10, 563; -0, 349; -0, 645; -1^2; -2, -2, 351; -3, 218)$ ,
- $\text{spec}_D(G_3) = (10, 312; -0, 267; -0, 679; -0, 776; -1; -2, 237; -2, 374; -2, 977)$
- $\text{spec}_D(G_4) = (7, 618; 0, 382; -0, 581; -0, 767; -2; -2, 148; -2, 503)$ .

Ainda podemos usar o algoritmo  $\text{diagonalize}(G, y)$  para localizar os  $D$ -autovalores distintos de  $-2$  e  $-1$  em intervalos:

**Proposição 4.1.8.** *Seja  $G$  um grafo threshold com variação binária  $\xi$ . Então o número de  $D$ -autovalores no intervalo  $(-\infty, -2)$  é  $\xi - 1$  e no intervalo  $(-1, +\infty)$  é  $\xi$  se  $b_2 = 1$  ou  $\xi + 1$  se  $b_2 = 0$ .*

**Demonstração:**

Observemos que no algoritmo  $\text{diagonalize}(G, -2)$  realizado na demonstração do Teorema 4.1.3 aparecem  $\xi - 1$  entradas iguais a  $-1$  e as demais entradas não nulas são positivas. Logo, existem  $\xi - 1$   $D$ -autovalores menores que  $-2$ . De maneira análoga, no algoritmo  $\text{diagonalize}(G, -1)$ , também realizado na demonstração do Teorema 4.1.3, aparecem  $\xi$  entradas iguais a  $\frac{1}{4}$ , uma entrada igual a  $\frac{4}{3}$  e as demais entradas não nulas são negativas, quando  $r_1 \neq 1$ . Logo, existem  $\xi + 1$   $D$ -autovalores maiores que  $-1$ . Agora, se  $r_1 = 1$  temos que as estradas positivas são apenas as iguais a  $\frac{1}{4}$ , o que garante existem  $\xi$   $D$ -autovalores maiores que  $-1$ . ■

**Observação 4.1.9.** *Não existem  $D$ -autovalores de  $G$  no intervalo  $(-2, -1)$ .*

Dado um grafo *threshold* com  $n$  vértices temos que a variação binária  $\xi$  está entre  $1$  e  $\frac{n}{2}$ . Vamos caracterizar nas duas próximas seções os grafos com variação binária máxima e mínima.

## 4.2 Grafos com variação binária mínima

Iniciamos caracterizando os grafos com variação binária mínima, isto é,  $\xi = 1$ . Neste caso temos os grafos *split-completo*.

Observe ainda que se o traço de um grafo *split-completo*  $G$  é  $\tau = 1$  então  $G$  é a estrela  $K_{1,n-1}$  e se  $\tau = n - 1$  temos que  $G$  é o completo  $K_n$ . Em ambos os casos conhecemos o  $D$ -espectro dos grafos:

$$\begin{aligned} \text{spec}_D(K_{1,n-1}) &= (n - 2 + \sqrt{n^2 - 3n + 5}, n - 2 - \sqrt{n^2 - 3n + 5}, -2^{n-2}) \\ \text{spec}_D(K_n) &= (n - 1, -1^{n-1}). \end{aligned}$$

Encontramos na literatura uma descrição do  $D$ -espectro do *join* de grafos regulares que nos auxilia na determinação do  $D$ -espectro de um grafo *split-completo*.

**Teorema 4.2.1.** [21] Para  $i = 1, 2$ , sejam  $G_i$  um grafo  $k_i$ -regular com  $n_i$  vértices e  $\lambda_{i,1} = k_i, \lambda_{i,2}, \dots, \lambda_{i,n_i}$  o espectro da matriz adjacência de  $G_i$ . O  $D$ -espectro de  $G_1 \vee G_2$  consiste em  $\lambda_{i,j_i} - 2$ ,  $2 \leq j_i \leq n_i$ , e

$$n_1 + n_2 - 2 - \frac{k_1 + k_2}{2} \pm \sqrt{(n_1 - n_2 - \frac{k_1 - k_2}{2})^2 + n_1 n_2}$$

Em [16] foi descrito o  $D$ -espectro de um grafo *split-completo* utilizando o Teorema 4.2.1, como se segue:

**Corolário 4.2.2.** [16] Seja  $K_q \vee (n - q)K_1$  um grafo *split-completo* então seu  $D$ -espectro contém  $-1$  com multiplicidade  $q - 1$ ,  $-2$  com multiplicidade  $n - q - 1$  e

$$n - \frac{q + 3}{2} \pm \sqrt{\frac{(n - 3q + 1)^2}{4} + q(n - q)}$$

É imediato ver que os grafos  $K_n$  e  $K_{1,n-1}$  não satisfazem tal Corolário ( $q = 1$  e  $q = n - 1$ ). Mais ainda, nenhum grafo *split-completo* satisfaz o corolário. Vejamos o contra-exemplo:

**Exemplo 4.2.3.** Considere o grafo  $K_2 \vee 3K_1$ , seu  $D$ -espectro é dado por  $-1$  com multiplicidade 1,  $-2$  com multiplicidade 2 e  $\frac{5 \pm \sqrt{33}}{2}$ . Porém fazendo  $q = 2$  e  $n = 5$  no corolário acima temos os seguintes  $D$ -autovalores (além de  $-1$  e  $-2$ ):

$$\begin{aligned} 5 - \frac{2 + 3}{2} \pm \sqrt{\frac{(5 - 3 \cdot 2 + 1)^2}{4} + 2(5 - 2)} &= \\ \frac{5}{2} \pm \sqrt{\frac{(0)^2}{4} + 2 \cdot 3} &= \\ \frac{5}{2} \pm \sqrt{6} &\neq \frac{5 \pm \sqrt{33}}{2}. \end{aligned}$$

O erro ocorreu em alguma substituição algébrica ao utilizar o Teorema 4.2.1. Para reparar tal erro podemos utilizar o Teorema 4.2.1, porém escolhemos utilizar o conteúdo exposto nesse trabalho para obter o resultado.

**Corolário 4.2.4.** Seja  $G$  um grafo *split-completo* com  $n$  vértices,  $G \neq K_n$  e  $G \neq K_{1,n-1}$ . Então  $\mathfrak{N}_D(G) = 4$ , e os  $D$ -autovalores são:  $-1$ ,  $-2$  e

$$\frac{(2n - \tau - 3) \pm \sqrt{(2n - \tau - 3)^2 + 8\tau(n - \tau)(n - 1)}}{2}.$$

**Demonstração:** Por hipótese temos que  $\xi = 1$ ,  $\tau \neq 1$  e  $\tau \neq n - 1$  então, pelo Teorema 4.1.3,  $-2$  e  $-1$  são  $D$ -autovalores de  $G$  e, pelo Corolário 4.1.6, temos  $2(\xi + 1) = 4$   $D$ -autovalores distintos de  $G$ .

Também podemos representar  $G$  por  $(n - \tau)K_1 \vee K_\tau$ . Assim, a matriz distância de  $G$  é dada por:

$$\begin{bmatrix} 2(J - I)_{n-\tau} & J_{n-\tau, \tau} \\ J_{\tau, n-\tau} & (J - I)_\tau \end{bmatrix}$$

Usando a reduzida da matriz  $D$  e o Teorema 2.1.4, temos que os  $D$ -autovalores distintos de  $-1$  e  $-2$  são os autovalores da matriz  $D'$  abaixo:

$$\begin{bmatrix} 2(n - \tau - 1) & \tau \\ n - \tau & \tau - 1 \end{bmatrix}$$

O polinômio característico de  $D'$  é dado por:

$$p(\lambda) = \lambda^2 - (2n - \tau - 3)\lambda + \tau(n - \tau) - 2(n - 1).$$

E suas raízes são:

$$\frac{(2n - \tau - 3) \pm \sqrt{(2n - \tau - 3)^2 + 8\tau(n - \tau)(n - 1)}}{2}.$$

■

**Exemplo 4.2.5.** Seja  $G = (0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1)$  o grafo split-completo, com  $n = 9$  vértices, traço  $\tau = 5$ , variação binária  $\xi = 1$ . O  $D$ -espectro de  $G$  é  $(5 + \sqrt{21}, 5 - \sqrt{21}, -1^4, -2^3)$ .

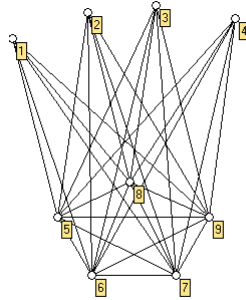


Figura 4.3: Grafo split-completo

### 4.3 Grafos com variação binária máxima

O outro extremo de  $\xi$  é  $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ , ou seja,  $\xi = \frac{n}{2}$  se  $n$  é par e  $\xi = \frac{n-1}{2}$  se  $n$  é ímpar. Ambos os casos só são possíveis quando temos o máximo de unidades não consecutivas.

1º caso:  $n$  par. Temos  $\xi = \frac{n}{2}$  e  $\tau = \xi$ . Neste caso o grafo que realiza esta cota é  $G_1 = (0, 1, 0, 1, \dots, 0, 1)$ .

**Exemplo 4.3.1.** O grafo threshold abaixo tem  $n = 6$  vértices e  $\tau = \xi = 3$ .

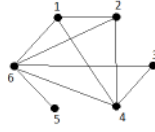


Figura 4.4: Grafo threshold  $G = (0, 1, 0, 1, 0, 1)$

Pelos resultados já vistos, temos que  $G_1$  tem  $n$   $D$ -autovalores simples e  $-1$  é um deles.

2º caso:  $n$  ímpar,  $\xi = \frac{n-1}{2}$ . Temos duas possibilidades para o traço:  $\tau = \xi$  ou  $\tau = \xi + 1$ .

- $n$  ímpar,  $\xi = \frac{n-1}{2}$  e  $\tau = \xi$ : temos uma família de grafos onde todas as unidades são não consecutivas e em algum momento existem dois zeros consecutivos:  $\mathbb{G}_2 = \{G = \underbrace{(0, 1, \dots, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 1, \dots, 0, 1)}_{2j} \text{ com } 0 \leq j < \tau\}$ . Pelos resultados anteriores, o grafo  $G' = (0, 0, 1, 0, 1, \dots, 0, 1) \in \mathbb{G}_2$  tem  $n$   $D$ -autovalores simples e  $-2$  é um deles (caso  $j = 0$ ). Já os demais grafos  $G \in \mathbb{G}_2$  e  $G \neq G'$  tem  $n$   $D$ -autovalores simples com  $-1$  e  $-2$  pertencentes ao seu  $D$ -espectro.

**Exemplo 4.3.2.** O grafo threshold abaixo tem  $n = 7$  vértices e  $\tau = \xi = 3$ .

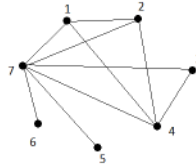


Figura 4.5: Grafo threshold  $G = (0, 1, 0, 1, 0, 0, 1)$

- $n$  ímpar,  $\xi = \frac{n-1}{2}$  e  $\tau = \xi + 1$ : temos uma família de grafos onde todos os zeros são não consecutivos e em algum momento existem duas unidades consecutivas:  $\mathbb{G}_3 = \{G = \underbrace{(0, 1, \dots, 0, 1, 1, 0, 1, \dots, 0, 1)}_{2j} \text{ com } 1j < \tau\}$ . Pelos resultados anteriores, os grafos  $G \in \mathbb{G}_3$  tem  $n - 2$   $D$ -autovalores simples e  $-1$  é sempre um  $D$ -autovalor duplo.

**Exemplo 4.3.3.** O grafo threshold abaixo tem  $n = 7$  vértices, traço  $\tau = 4$  e  $\xi = 3$ .

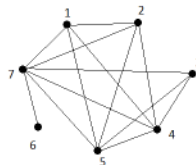


Figura 4.6: Grafo threshold  $G = (0, 1, 0, 1, 1, 0, 1)$

Os grafos *threshold* aqui caracterizados são aqueles que possuem o número máximo de  $D$ -autovalores distintos, já que possuem variação binária máxima.

## 4.4 Índice de Wiener

O índice de Wiener é um parâmetro associado à matriz distância do grafo.

**Definição 4.4.1.** [16] *O índice de Wiener de um grafo é a metade da soma de todas as entradas da matriz distância  $D = [d_{ij}]_n$  de um grafo  $G$ , ou seja, a soma de todas as distâncias entre dois vértices de  $G$ , isto é,*

$$W(G) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} d_{ij}.$$

Veremos agora o índice de Wiener dos grafos extremais em relação à variação binária.

**Proposição 4.4.2.** *O índice de Wiener do grafo split-completo  $G$  com  $n$  vértices e traço  $\tau$  é dado por:*

$$W(G) = (n - \tau)(n - 1) + \frac{(\tau - 1)\tau}{2}$$

**Demonstração:** De fato, como  $G$  tem  $n$  vértices e traço  $\tau$  podemos escrever  $G = (n - \tau)K_1 \vee K_\tau$  e sua matriz distância é dada por:

$$\begin{bmatrix} 2(J - I)_{n-\tau} & J_{(n-\tau) \times \tau} \\ J_{\tau \times (n-\tau)} & (J - I)_\tau \end{bmatrix}$$

Logo, o índice de Wiener de  $G$  é:

$$\begin{aligned} W(G) &= \frac{2(n - \tau - 1)(n - \tau) + 2(n - \tau)\tau + (\tau - 1)\tau}{2} \\ &= \frac{2(n - \tau)[n - \tau - 1 + \tau] + (\tau - 1)\tau}{2} \\ &= (n - \tau)(n - 1) + \frac{(\tau - 1)\tau}{2} \end{aligned}$$

■

**Proposição 4.4.3.** *O índice de Wiener de  $G_1 = (0, 1, 0, 1, \dots, 0, 1)$  é  $W(G_1) = \tau(3\tau - 2)$ .*

**Demonstração:**

Observemos que  $\tau = \frac{n}{2}$ . Provemos por indução sobre  $\tau$  que  $W(G_1) = \tau(3\tau - 2)$ .

Para  $\tau = 1$ , temos que  $G_1$  tem como matriz distância a matriz  $(J - I)_2$ , logo,  $W(G_1) = \frac{2}{2} = 1(3 \cdot 1 - 2)$ .

Suponhamos que  $G_1$  tem traço  $\tau = k$  então  $W(G_1) = k(3k - 2)$ . Consideremos  $H = (G_1 \cup K_1) \vee K_1$ , ou seja,  $H = (0, 1, 0, 1, \dots, 0, 1)$  com  $n + 2$  vértices e traço  $\tau = k + 1$ . Então:

$$D(G'_1) = \begin{bmatrix} D(G_1) & \mathbf{2}_{2k} & \mathbf{1}_{2k} \\ \mathbf{2}_{2k}^t & 0 & 1 \\ \mathbf{1}_{2k}^t & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Assim teremos:

$$\begin{aligned} W(G'_1) &= \frac{2W(G_1) + 2(2k) + 1(2k) + 2(2k) + 1(2k) + 1 + 1}{2} \\ &= \frac{2k(3k - 2) + 6(2k) + 2}{2} \\ &= \frac{6k^2 + 8k + 2}{2} \\ &= \frac{2(k + 1)(3k + 1)}{2} \\ &= (k + 1)(3(k + 1) - 2) \end{aligned}$$

Assim para qualquer  $\tau$  temos  $W(G_1) = \tau(3\tau - 2)$ . ■

**Proposição 4.4.4.** *O índice de Wiener de  $G \in \mathbb{G}_2$  é  $W(G) = 3j^2 + (3j + 1)(\tau - j)$ .*

**Demonstração:** Para determinar o índice de Wiener de  $G$  observemos que os  $2j$  primeiros vértices formam o subgrafo induzido  $G_1 = (0, 1, 0, 1, \dots, 0, 1)$  e os  $2(\tau - j)$  últimos vértices formam outro subgrafo induzido  $G'_1 = (0, 1, 0, 1, \dots, 0, 1)$ . Então sua matriz distância pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} D(G_1) & \mathbf{2}_{2j} & \mathbf{2}_{2j}^t & \mathbf{1}_{2j} & \dots & \mathbf{2}_j & \mathbf{1}_j \\ \mathbf{2}_{2j}^t & 0 & 2 & 1 & & 2 & 1 \\ \mathbf{2}_{2j}^t & 2 & & & & & \\ \mathbf{1}_{2j}^t & 1 & & & & & \\ \vdots & & & & D(G'_1) & & \\ \mathbf{2}_{2j}^t & 2 & & & & & \\ \mathbf{1}_{2j}^t & 1 & & & & & \end{bmatrix}$$

Então, usando a Proposição 4.4.3 para calcular  $W(G_1)$  e  $W(G'_1)$ , temos:

$$\begin{aligned} W(G_3) &= W(G_1) + W(G'_1) + \frac{4j + 6j(\tau - j) + 6(\tau - j)}{2} \\ &= (3j - 2)j + [3(\tau - j) - 2](\tau - j) + 2j + 3j(\tau - j) + 3(\tau - j) \\ &= 3j^2 - j - 3j\tau + \tau + 3\tau^2 \\ &= 3j^2 + (3j + 1)(\tau - j) \end{aligned}$$

■

**Proposição 4.4.5.** *O índice de Wiener de  $G \in \mathbb{G}_3$  é dado por  $W(G) = 3j^2 + 3\tau^2 - 3j\tau + j + 5\tau + 2$ .*

**Demonstração:** Para determinar o índice de Wiener de  $G$  observemos que os  $2j$  primeiros vértices formam o subgrafo induzido  $G_1 = (0, 1, 0, 1, \dots, 0, 1)$  e os  $2(\tau - j - 1)$  últimos vértices formam outro subgrafo induzido  $G'_1 = (0, 1, 0, 1, \dots, 0, 1)$ . Então sua matriz distância pode ser escrita da seguinte maneira:



$$\begin{bmatrix} D(G_1) & \mathbf{1}_{2j} & \mathbf{2}_{2j}^t & \mathbf{1}_{2j} & \cdots & \mathbf{2}_j & \mathbf{1}_j \\ \mathbf{1}_{2j}^t & 0 & 2 & 1 & & 2 & 1 \\ \mathbf{2}_{2j}^t & 2 & & & & & \\ \mathbf{1}_{2j}^t & 1 & & & & & \\ \vdots & & & & D(G'_1) & & \\ \mathbf{2}_{2j}^t & 2 & & & & & \\ \mathbf{1}_{2j}^t & 1 & & & & & \end{bmatrix}$$

Então, usando a Proposição 4.4.3 para calcular  $W(G_1)$  e  $W(G'_1)$ , temos:

$$\begin{aligned} W(G_3) &= W(G_1) + W(G'_1) + \frac{2j + 6j(\tau - j - 1) + 6(\tau - j - 1)}{2} \\ &= (3j - 2)j + [3(\tau - j - 1) - 2](\tau - j - 1) + j + 3j(\tau - j - 1) + 3(\tau - j - 1) \\ &= 3j^2 + 3\tau^2 - 3j\tau + j + 5\tau + 2 \end{aligned}$$

■

## 4.5 Caracterização de grafos threshold com 4 e 5 $D$ -autovalores distintos

Como consequência do Corolário 4.1.6 temos que para um grafo *threshold*  $G$ :

- $b_2 = 0$  se e, somente se,  $m_D(-2) = n - \tau - \xi > 0$  e  $\mathfrak{N}_D(G) = \begin{cases} 2\xi + 1 & \text{se } \tau = \xi \\ 2\xi + 2 & \text{caso contrário} \end{cases}$ ;
- $b_2 = 1$  se e, somente se,  $m_D(-1) = \tau - \xi + 1 > 0$  e  $\mathfrak{N}_D(G) = \begin{cases} 2\xi & \text{se } n = \tau + \xi \\ 2\xi + 1 & \text{caso contrário.} \end{cases}$

Usaremos a análise acima para estudar grafos *threshold* com  $\mathfrak{N}_D(G) = 4$  e  $\mathfrak{N}_D(G) = 5$ .

**Corolário 4.5.1.** *Seja  $G$  um grafo threshold com  $n$  vértices e 4  $D$ -autovalores distintos. Então  $G$  é um grafo split-completo diferente do grafo completo  $K_n$  e da estrela  $K_{1,n-1}$  ou  $G = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_i, 0, 1, \dots, 1)$  com  $1 \leq i \leq n - 3$ .*

**Demonstração:** Suponha que  $\mathfrak{N}_D(G) = 4$ . Pelo Corolário 4.1.6 temos que  $2\xi = 4$  ou  $2\xi + 1 = 4$  ou  $2\xi + 2 = 4$ . Como  $\xi$  é um inteiro positivo temos que  $2\xi + 1 \neq 4$ .

Se  $2\xi = 4$  então  $\xi = 2$  e, pelo o que foi visto acima,  $b_2 = 1$  e  $n = \tau + \xi$ , isto é,  $\tau = n - 2$ . Portanto, não temos zeros consecutivos. Assim,  $G = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_i, 0, 1, \dots, 1)$

com  $1 \leq i \leq n - 3$ .

Se  $2\xi + 2 = 4$  então  $\xi = 1$  então  $G = (0, \underbrace{\dots, 0}_i, 1, \dots, 1)$  é um grafo split-completo com  $i \neq 1$  e  $i \neq n - 1$  pois  $K_n$  e  $K_{1,n-1}$  tem apenas 3  $D$ -autovalores distintos. ■

O  $D$ -espectro de um grafo *split-completo* foi descrito no Corolário 4.2.4. Em nossa próxima proposição obtemos o  $D$ -espectro do grafo  $G = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_i, 0, 1, \dots, 1)$  com  $n$  vértices e  $1 \leq i \leq n - 3$ .

**Proposição 4.5.2.** *Seja  $G = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_i, 0, 1, \dots, 1)$  o grafo *threshold* com  $n$  vértices e  $1 \leq i \leq n - 3$ . Os  $D$ -autovalores de  $G$  são  $(-1)^{n-3}$  e as raízes do polinômio abaixo:*

$$p(\lambda) = \lambda^3 - (n - 3)\lambda^2 + (2n - 3i)\lambda + (n - 2 - i)(7i + 8) - 4(i + 1).$$

**Demonstração:** Pelo Teorema 4.1.3 temos que  $-2$  não é um  $D$ -autovalor de  $G$  e que  $m_D(-1) = \tau - \xi + 1 = n - 2 - i = 1 = n - 3$ . Para descrever os demais  $D$ -autovalores vamos precisamos da matriz distância  $D$  de  $G$ :

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \dots & 1 & 2 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 0 & \dots & 1 & 2 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & 0 & 2 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \hline 2 & 2 & \dots & 2 & 0 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \hline 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 0 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 & 0 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Pelo Teorema 2.1.4 temos que os  $D$ -autovalores de  $G$  distintos de  $-1$  são os autovalores da matriz:

$$D' = \begin{bmatrix} i & 2 & n - 2 - i \\ 2(i + 1) & 0 & n - 2 - i \\ i + 1 & 1 & n - 3 - i \end{bmatrix}$$

E o polinômio característico de  $D'$  é dado por:

$$p(\lambda) = \lambda^3 - (n - 3)\lambda^2 + (2n - 3i)\lambda + (n - 2 - i)(7i + 8) - 4(i + 1)$$

■

Agora podemos provar que se dois grafos *threshold* com 4  $D$ -autovalores distintos são co-espectrais então eles são isomorfos.

**Teorema 4.5.3.** *Se  $G$  é um grafo *threshold* com 4  $D$ -autovalores distintos então  $G$  é unicamente determinado pelo seu espectro.*

**Demonstração:** Sejam  $G_1$  e  $G_2$  grafos *threshold* co-espectrais tais que  $\mathfrak{N}_D(G_1) = \mathfrak{N}_D(G_2) = 4$ . Se  $G_1$  é *split-completo* e  $G_2 = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_i, 0, 1, \dots, 1)$

com  $1 \leq i \leq \tau$  então eles não podem ser co-espectrais, pois, pelo Corolário 4.2.4 e pela Proposição 4.5.2,  $-2 \in \text{Spec}_D(G_1)$  e  $-2 \notin \text{Spec}_D(G_2)$ . Então ou  $G_1$  e  $G_2$  são ambos *split-completos* ou  $G_1 = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_j, 0, 1, \dots, 1)$  e  $G_2 = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_i, 0, 1, \dots, 1)$

para algum  $j < n - 2$  e  $i < n - 2$ .

Se  $G_1$  e  $G_2$  são ambos split-completos co-espectrais com 4  $D$ -autovalores distintos, então temos que  $-2$  é um desses  $D$ -autovalores com multiplicidade  $n - \tau_1 - 1 = n - \tau_2 - 1$ , portanto,  $\tau_1 = \tau_2$ . Logo,  $G_1$  é isomorfo a  $G_2$  pois são representados pela mesma sequência binária.

Se  $G_1 = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_j, 0, 1, \dots, 1)$  e  $G_2 = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_i, 0, 1, \dots, 1)$  são co-espectrais então temos que os três  $D$ -autovalores, distintos de  $-1$ , são raízes de um mesmo polinômio. Como pela Proposição 4.5.2 tais polinômios dependem de  $i$  e  $j$  temos que  $i = j$  e  $G_1$  é isomorfo a  $G_2$  pois são representados pela mesma sequência binária.

■

A próxima proposição caracteriza os grafos com cinco  $D$ -autovalores distintos.

**Proposição 4.5.4.** *Seja  $G$  um grafo threshold com  $n$  vértices, traço  $\tau$  e  $\mathfrak{N}_D(G) = 5$ . Então  $G = (0, \dots, 0, \underbrace{1, 0, \dots, 0}_i, 1)$  com  $2 \leq i \leq n - 3$  ou  $G = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_i, 0, \dots, 0, 1, \dots, 1)$  para algum  $1 \leq i \leq \tau - 1$*

**Demonstração:** Se  $G$  possui cinco  $D$ -autovalores distintos temos duas situações: ou  $b_2 = 0$  e  $\tau = \xi$  ou  $b_2 = 1$  e  $n > \tau + \xi$ . Em ambos os casos temos que  $\xi = 2$ .

Se  $b_2 = 0$  e  $\tau = \xi$  temos duas unidades não consecutivas, ou seja,  $G = (0, \underbrace{0, \dots, 0}_i, 1, 0, \dots, 0, 1)$ . Os  $D$ -autovalores de  $G$  são  $-2^{n-4}$  e os autovalores da matriz reduzida da matriz distância abaixo:

$$\begin{bmatrix} 2i - 2 & 1 & 2n - 2i - 4 & 1 \\ i & 0 & 2n - 2i - 4 & 1 \\ 2i & 2 & 2n - 2i - 6 & 1 \\ i & 1 & n - j - 2 & 0 \end{bmatrix}$$

O polinômio característico da matriz acima é dado por:

$$\lambda^4 - (2n - 8)\lambda^3 - (9n - 3i - 21)\lambda^2 + (2in - 2i^2 - 12n + 4i + 20)\lambda + in - i^2 - 4n + 2i + 4$$

Se  $b_2 = 1$  e  $n > \tau + \xi$  temos  $G = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_i, 0, \dots, 0, 1, \dots, 1)$  com  $1 \leq i \leq \tau - 1$ .

E ainda, os  $D$ -autovalores de  $G = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_i, 0, \dots, 0, 1, \dots, 1)$ , onde  $1 \leq i \leq \tau - 1$ , são  $-1^{\tau-1}$ ,  $-2^{n-\tau-1}$  e os autovalores da matriz  $D'$  abaixo que é a reduzida da matriz distância  $D$  de  $G$ :

$$\begin{bmatrix} i & 2n - 2\tau - 2 & \tau - i \\ 2i + 2 & 2n - 2\tau - 4 & \tau - i \\ i + 1 & n - \tau - 1 & \tau - i - 1 \end{bmatrix}$$

O polinômio característico da matriz acima é dado por:

$$\lambda^3 - (2n - \tau - 5)\lambda^2 + [(n - \tau + 1)(\tau - 3i) + \tau + 8]\lambda - i^2(n - \tau - 1) + \tau i + 2(n - \tau) - 4(i + 1)(n - 1) - 3i\tau$$

■

Observe que os grafos acima tem  $D$ -espectros distintos pois, por exemplo,  $-1$  sempre será um  $D$ -autovalor do grafo  $G = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_i, 0, \dots, 0, 1, \dots, 1)$  com  $1 \leq i \leq \tau - 1$  e nunca será um  $D$ -autovalor do grafo  $G = (0, \underbrace{0, \dots, 0}_i, 1, 0, \dots, 0, 1)$  com  $2 \leq i \leq n - 3$ .

Assim como no caso  $\mathfrak{N}_D(G) = 4$ , temos que os grafos com cinco  $D$ -autovalores distintos são determinados pelo seu espectro.

**Teorema 4.5.5.** *Seja  $G$  um grafo threshold com 5  $D$ -autovalores distintos então  $G$  é determinado por seu espectro.*

**Demonstração:** Sejam  $G_1$  e  $G_2$  grafos threshold com 5  $D$ -autovalores distintos e co-espectrais. Já sabemos que para ambos os grafos temos que  $b_2 = 0$  ou  $b_2 = 1$ .

Suponha que para  $G_1$  e  $G_2$  temos que  $b_2 = 0$  então  $G_1 = (0, \underbrace{0, \dots, 0}_i, 1, 0, \dots, 0, 1)$  e  $G_2 = (0, \underbrace{0, \dots, 0}_j, 1, 0, \dots, 0, 1)$  para algum  $i$  e  $j$  entre 2 e  $n - 3$ . Porém podemos

perceber que os demais  $D$ -autovalores de  $G_1$  e  $G_2$  são raízes de polinômios que dependem de  $i$  e  $j$ , respectivamente. Logo, se  $G_1$  e  $G_2$  são co-espectrais  $i = j$ . Portanto,  $G_1$  e  $G_2$  são isomorfos pois são definidos pela mesma sequência binária.

Agora suponha que para  $G_1$  e  $G_2$  com traço  $\tau_1 > 1$  e  $\tau_2 > 1$ , respectivamente, tenhamos que  $b_2 = 1$ . Então  $G_1 = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_i, 0, \dots, 0, 1, \dots, 1)$  e

$G_2 = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_j, 0, \dots, 0, 1, \dots, 1)$  com  $1 \leq i \leq \tau_1$  e  $1 \leq j \leq \tau_2$ . Pelo Teorema

4.1.3 temos que  $m_D(-1) = \tau_1 - 2 = \tau_2 - 2$ , então  $\tau_1 = \tau_2$ . E ainda, podemos perceber que os demais  $D$ -autovalores de  $G_1$  e  $G_2$  são raízes de polinômios que dependem de  $i$  e  $j$ , respectivamente. Logo, se  $G_1$  e  $G_2$  são co-espectrais  $i = j$ . Portanto,  $G_1$  e  $G_2$  são isomorfos pois são definidos pela mesma sequência binária. ■

## 4.6 Duas famílias de grafos threshold

Veremos agora alguns resultados para duas famílias específicas de grafos *thresholds*, também estudadas em [10].

**Definição 4.6.1.** *Sejam  $n$  e  $\tau$  inteiros positivos tais que  $n \geq 7$  e  $3 \leq \tau \leq n - 3$ . O grafo *pineapple*  $P_{n,\tau}$  com  $n$  vértices e traço  $\tau$  é o grafo threshold definido pela sequência binária  $(0, \underbrace{1, \dots, 1}_{\tau-1}, 0, \dots, 0, 1)$ , ou seja, é o grafo obtido acrescentando vértices pendentes a um mesmo vértice de um grafo completo  $K_{\tau+1}$ .*

**Exemplo 4.6.2.** *Sejam  $n = 9$  e  $\tau = 5$  então o grafo *pineapple*  $P_{9,5}$  será definido por  $(0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 1)$ :*

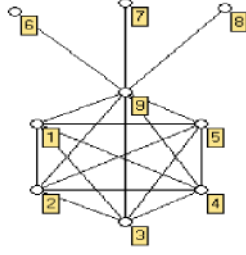


Figura 4.7: Pineapple

No que se segue consideremos  $n$  e  $\tau$  inteiros tais que  $n \geq 5$  e  $4 \leq \tau \leq n - 2$ .

Em [10] os autores construíram uma família  $\mathcal{G}$  de grafos *threshold*  $G_{s,r}$  com  $n$  vértices e traço  $\tau$ , onde  $G_{0,0}$  é o *pineapple* e para cada  $r$  e  $s$  inteiros tais que  $1 \leq s \leq n - \tau - 2$  e  $1 \leq r \leq \tau - 1$ ,  $G_{s,r}$  é obtido a partir de  $G_{0,0}$  acrescentando  $r(n - \tau - 1) + s$  arestas entre vértices específicos de  $G_{0,0}$  de modo que as sequências binárias obtidas são:

$$G_{s,r} = (0, \underbrace{1, \dots, 1}_{\tau-r-2}, \underbrace{0, \dots, 0}_s, 1, 0, \dots, 0, \underbrace{1, \dots, 1}_{r+1})$$

Observemos que cada grafo  $G_{s,r}$  é obtido a partir do *pineapple* ligando um vértice fixo da maior clique do *pineapple* a um vértice pendente do mesmo até que se esgotem os vértices pendentes, quando fixamos novo vértice da clique e repetimos o processo, até que encontremos o grafo *split-completo*  $(n - \tau)K_1 \vee K_\tau$ .

Em [9] foi definida uma outra família de grafos *threshold* também a partir do grafo *pineapple*  $P_{n,\tau}$ , a família  $\mathcal{F}$  de grafos  $F_{s,r}$  com  $n$  vértices e traço  $\tau$ , onde  $F_{0,0}$  é o *pineapple* e para cada  $r$  e  $s$  inteiros tais que  $1 \leq s \leq \tau - 2$  e  $1 \leq r \leq n - \tau - 1$ ,  $F_{s,r}$  é obtido a partir de  $F_{0,0}$  acrescentando  $r(\tau - 1) + s$  arestas entre vértices específicos de  $F_{0,0}$  de modo que as sequências binárias obtidas são:

$$F_{s,r} = (\underbrace{0, \dots, 0}_{r+1}, \underbrace{1, \dots, 1}_{\tau-s-1}, 0, \underbrace{1, \dots, 1}_s, 0, \dots, 0, 1)$$

Observemos que cada grafo  $F_{s,r}$  é obtido a partir do *pineapple* ligando um vértice pendente fixo do *pineapple* a um vértice da maior clique do mesmo, até que se reste apenas um vértice da clique sem ligação, quando fixamos novo vértice pendente e repetimos o processo, até que encontremos o grafo *split-completo*  $(n - \tau)K_1 \vee K_\tau$ .

**Exemplo 4.6.3.** *Sejam  $n = 9$  e  $\tau = 5$ . Então alguns dos grafos da família  $\mathcal{G}$  são:*

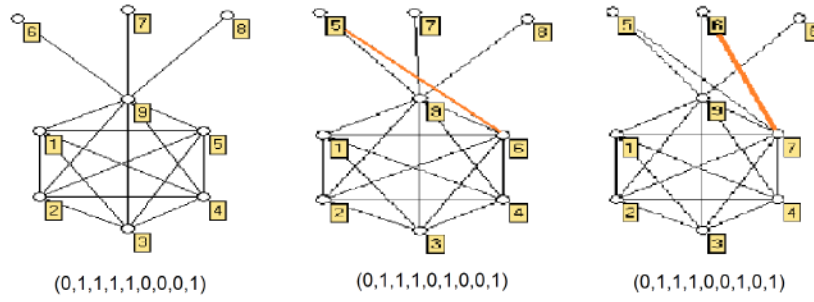


Figura 4.8: Pineapple,  $G_{1,0} = (0, 1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 1)$ ,  $G_{2,0} = (0, 1, 1, 1, 0, 0, 1, 0, 1)$

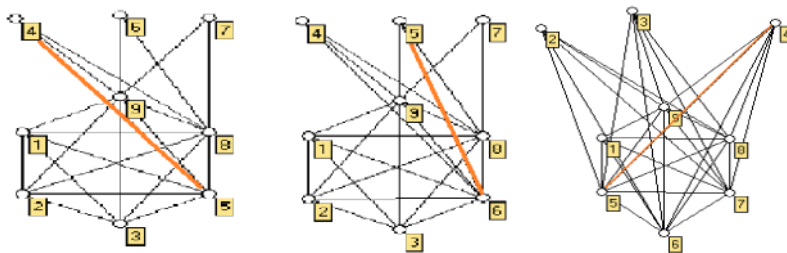


Figura 4.9:  $G_{1,1} = (0, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 1, 1)$ ,  $G_{2,1} = (0, 1, 1, 0, 0, 1, 0, 1, 1)$  e  $G_{0,5} = (0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1)$

**Exemplo 4.6.4.** *Sejam, ainda,  $n = 9$  e  $\tau = 5$ , então alguns grafos da família  $\mathcal{F}$  são:*

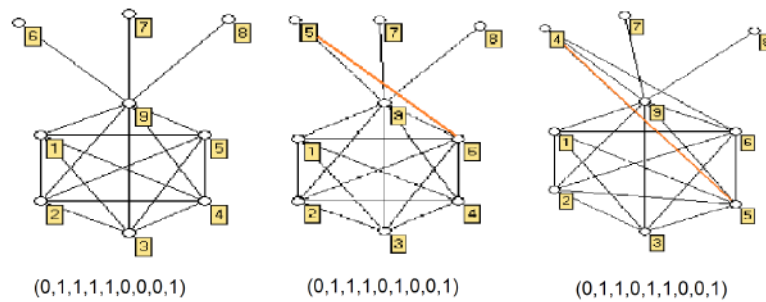


Figura 4.10: Pineapple,  $F_{1,0} = (0, 1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 1)$ ,  $F_{2,0} = (0, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 1)$

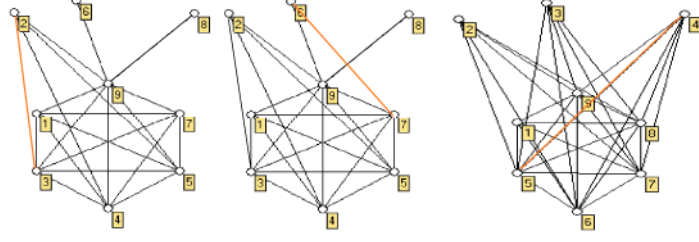


Figura 4.11:  $F_{0,1} = (0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 1)$ ,  $F_{1,1} = (0, 0, 1, 1, 1, 0, 1, 0, 1)$  e  $F_{0,3} = (0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1)$

**Teorema 4.6.5.** *Seja  $\mathcal{G}$  família de grafos threshold com  $n \geq 7$  vértices e traço  $\tau$  e considere  $0 \leq r \leq \tau - 1$ ,  $0 \leq s \leq n - \tau - 2$  e  $r(n - \tau - 1) + s \leq (\tau - 1)(n - \tau - 1)$ . Então qualquer  $G_{s,r} \in \mathcal{G}$  pode ser escrito como join e união de grafos completos da seguinte maneira:*

$$G_{s,r} = K_{r+1} \vee [(n - \tau - s - 1)K_1 \cup (K_1 \vee (sK_1 \cup K_{\tau-r-1}))].$$

**Demonstração:** De fato,  $G_{s,r}$  é definida pela seguinte sequência binária:

$$(0, \underbrace{1, \dots, 1}_{\tau-r-2}, \underbrace{0, \dots, 0}_s, 1, \underbrace{0, \dots, 0}_{n-\tau-s-1}, \underbrace{1, \dots, 1}_{r+1})$$

Estudemos cada parte da sequência, levando em consideração que uma entrada nula representa um vértice isolado acrescido ao grafo e uma unidade representa o acréscimo de um vértice que estará ligado a todos os vértices anteriores.

As  $(\tau - r - 1)$  primeiras entradas formam o completo  $K_{\tau-r-1}$ ; os  $s$  zeros seguintes unem  $s$  vértices isolados ao grafo, formando  $sK_1 \cup K_{\tau-r-1}$ ; A  $(\tau - r + s)$ -ésima entrada, que é uma unidade, representa um *join* de um vértice com o grafo que foi formado até agora, logo,  $K_1 \vee (sK_1 \cup K_{\tau-r-1})$ . Os  $(n - \tau - s - 1)$  zeros seguintes representa a união de  $(n - \tau - s - 1)$  vértices isolados:  $(n - \tau - s - 1)K_1 \cup (K_1 \vee (sK_1 \cup K_{\tau-r-1}))$ . E por fim, as  $(r + 1)$  últimas unidades representam um *join* com o completo  $K_{r+1}$ , ou seja,  $K_{r+1} \vee [(n - \tau - s - 1)K_1 \cup (K_1 \vee (sK_1 \cup K_{\tau-r-1}))]$ . ■

**Exemplo 4.6.6.** *Seja  $G_{1,3} = (0, 0, 1, 0, 0, 1, 1, 1, 1)$ , temos que  $n = 9$  e  $\tau = 5$  então  $G_{1,3}$  será reescrito da seguinte maneira:*

$$K_4 \vee [2K_1 \cup (K_1 \vee 2K_1)]$$

**Teorema 4.6.7.** *Seja  $\mathcal{G}$  família de grafos threshold com  $n$  vértices e traço  $\tau$  e considere  $0 \leq r < \tau - 1$ ,  $0 < s \leq n - \tau - 2$  e  $r(n - \tau - 1) + s \leq (\tau - 1)(n - \tau - 1)$ . O espectro da matriz distância do grafo  $G_{s,r} \in \mathcal{G}$  é formado por  $-2$  com multiplicidade no mínimo  $n - \tau - 3$ ,  $-1$  com multiplicidade mínima  $\tau - 2$  e os autovalores da matriz  $M$  abaixo:*

$$\begin{pmatrix} r & n - \tau - s - 1 & 1 & s & \tau - r - 1 \\ r + 1 & 2(n - \tau - s - 2) & 2 & 2s & 2(\tau - r - 1) \\ r + 1 & 2(n - \tau - s - 1) & 0 & s & \tau - r - 1 \\ r + 1 & 2(n - \tau - s - 1) & 1 & 2(s - 1) & 2(\tau - r - 1) \\ r + 1 & 2(n - \tau - s - 1) & 1 & 2s & \tau - r - 2 \end{pmatrix}$$

E ainda:

- quando  $s = 0$  teremos que a multiplicidade de  $-1$  será  $\tau - 1$ ;
- quando  $s = 0$  e  $0 \leq r \leq \tau - 3$  ou  $s \neq 0$  e  $r = \tau - 2$  teremos que a multiplicidade de  $-2$  será  $n - \tau - 2$ ;
- quando  $s = 0$  e  $r = \tau - 1$  teremos que a multiplicidade de  $-2$  será  $n - \tau - 1$ ;
- em todos os outros casos a multiplicidade de  $-1$  será  $\tau - 2$  e a de  $-2$  será  $n - \tau - 3$ .

**Demonstração:** Pelo Teorema 4.1.3 para determinar a multiplicidade de  $-2$  e  $-1$  precisamos apenas determinar  $\xi$ . Então:

- Quando  $s = 0$  e  $0 \leq r < \tau - 1$  o grafo  $G_{0,r}$  é definido pela sequência binária:

$$(0, \underbrace{1, \dots, 1}_{\tau-r-2}, \underbrace{0, \dots, 0}_{n-\tau-1}, \underbrace{1, \dots, 1}_{r+1})$$

Logo,  $\xi = 2$  e a multiplicidade de  $-1$  será  $\tau - \xi + 1 = \tau - 1$  (pois  $r_1 = 1$ ).

- Quando  $s = 0$  e  $0 \leq r \leq \tau - 3$  ou  $s \neq 0$  e  $r = \tau - 2$  teremos  $\xi = 2$  e a multiplicidade de  $-2$  será  $n - \tau - \xi = n - \tau - 2$ .
- Quando  $s = 0$  e  $r = \tau - 1$  teremos  $\xi = 1$  então a multiplicidade de  $-2$  será  $n - \tau - \xi = n - \tau - 1$ .
- Em todos os outros casos  $\xi = 3$  e  $r_1 = 1$ , então a multiplicidade de  $-1$  será  $\tau - \xi + 1 = \tau - 2$  e a de  $-2$  será  $n - \tau - \xi = n - \tau - 3$ .

Pela 4.6.5 podemos representar a matriz distância  $D$  da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} (J - I)_{r+1} & J_{r+1, n-\tau-s-1} & J_{r+1, 1} & J_{r+1, s} & J_{r+1, \tau-r-1} \\ J_{n-\tau-s-1, r+1} & 2(J - I)_{n-\tau-s-1} & 2J_{n-\tau-s-1, 1} & 2J_{n-\tau-s-1, s} & 2J_{n-\tau-s-1, \tau-r-1} \\ J_{1, r+1} & 2J_{1, n-\tau-s-1} & 0 & J_{1, s} & J_{1, \tau-r-1} \\ J_{s, r+1} & 2J_{s, n-\tau-s-1} & J_{s, 1} & 2(J - I)_s & 2J_{s, \tau-r-1} \\ J_{\tau-r-1, r+1} & 2J_{\tau-r-1, n-\tau-s-1} & J_{\tau-r-1, 1} & 2J_{\tau-r-1, s} & (J - I)_{\tau-r-1} \end{bmatrix}$$

Os autovalores  $-2$  e  $-1$  com suas multiplicidades representam no mínimo  $\tau - 2 + n - \tau - 3 = n - 5$  dos autovalores de  $D$ , pelo Teorema 2.1.4 os outros  $D$ -autovalores são os autovalores da matriz  $5 \times 5$  do enunciado, pois ela é resultado de particionar  $D$  em blocos de matrizes com soma de linhas constantes.

■

Observe que se  $s = 0$  então  $G_{0,r}$  é tal que um vértice da maior clique do *pineapple* está ligado a uma folha se e somente se esse vértice está ligado a todas as folhas. Se  $s \neq 0$  e  $r = \tau - 2$  então  $G_{s, \tau-2}$  tem  $\tau - 1$  cliques de tamanho  $\tau$ . E se  $s = 0$  e  $r = \tau - 1$  temos que  $G_{0, \tau-1}$  é o grafo split-completo  $K_\tau \vee \overline{K_{n-\tau}}$ .

**Teorema 4.6.8.** *Seja  $\mathcal{F}$  família de grafos threshold com  $n$  vértices e traço  $\tau$  e considere  $0 \leq r \leq n - \tau - 2$  e  $0 \leq s \leq \tau - 2$ . Então qualquer  $F_{s,r} \in \mathcal{F}$  pode ser escrito como joins e uniões de grafos completos da seguinte maneira:*



$$F_{s,r} : K_1 \vee \{(n - \tau - r - 2)K_1 \cup [K_s \vee (K_1 \cup (K_{\tau-s-1} \vee (r+1)K_1))]\}.$$

**Demonstração:** De fato, a sequência binária que define  $F_{s,r}$  é dada por

$$\underbrace{(0, \dots, 0)}_{r+1}, \underbrace{(1, \dots, 1)}_{\tau-s-1}, 0, \underbrace{(1, \dots, 1)}_s, \underbrace{(0, \dots, 0)}_{n-\tau-r-2}, 1$$

As  $(r+1)$  primeiras entradas nulas representam  $r+1$  vértices isolados:  $(r+1)K_1$ . As  $(\tau-s-1)$  entradas unitárias seguintes formam um *join* com o completo  $K_{\tau-s-1}$ :  $K_{\tau-s-1} \vee (r+1)K_1$ . A  $(\tau-s+r+1)$ -ésima entrada nula acrescenta um vértice isolado:  $K_1 \cup (K_{\tau-s-1} \vee (r+1)K_1)$ . As  $s$  entradas unitárias seguintes representam um *join* com o completo  $K_s$ :  $K_s \vee (K_1 \cup (K_{\tau-s-1} \vee (r+1)K_1))$ . As  $(n-\tau-r-2)$  últimas entradas nulas acrescentam  $(n-\tau-r-2)$  vértices isolados:  $(n-\tau-r-2)K_1 \cup [K_s \vee (K_1 \cup (K_{\tau-s-1} \vee (r+1)K_1))]$ . E por fim, a última unidade representa um *join* com um vértice:  $K_1 \vee \{(n-\tau-r-2)K_1 \cup [K_s \vee (K_1 \cup (K_{\tau-s-1} \vee (r+1)K_1))]\}$ .

■

**Teorema 4.6.9.** *Seja  $\mathcal{F}$  família de grafos threshold com  $n$  vértices e traço  $\tau$  e considere  $0 \leq r \leq n - \tau - 1$ ,  $0 \leq s \leq \tau - 2$  e  $r(\tau - 1) + s \leq (n - \tau - 1)(\tau - 1)$ . O espectro da matriz distância do grafo  $F_{s,r} \in \mathcal{F}$  é formado por  $-2$  com multiplicidade no mínimo  $n - \tau - 3$ ,  $-1$  com multiplicidade mínima  $\tau - 3$  e os autovalores da matriz  $N$  abaixo:*

$$\begin{bmatrix} 0 & n - \tau - r - 2 & s & 1 & \tau - s - 1 & r + 1 \\ 1 & 2(n - \tau - r - 3) & 2s & 2 & 2(\tau - s - 1) & 2(r + 1) \\ 1 & 2(n - \tau - r - 2) & s - 1 & 1 & \tau - s - 1 & r + 1 \\ 1 & 2(n - \tau - r - 2) & s & 0 & 2(\tau - s - 1) & 2(r + 1) \\ 1 & 2(n - \tau - r - 2) & s & 2 & \tau - s - 2 & r + 1 \\ 1 & 2(n - \tau - r - 2) & s & 2 & \tau - s - 1 & 2r \end{bmatrix}$$

E ainda:

- Se  $s = 0$  e  $r = 0$  ou  $r = n - \tau - 1$  então a multiplicidade de  $-1$  será  $\tau - 1$ ;
- Se  $s = 0$  e  $r = n - \tau - 2$  então a multiplicidade de  $-1$  será  $\tau - 2$ ;
- Se  $s = 0$  e  $0 \leq r \leq n - \tau - 3$  ou  $s \neq 0$  e  $r = n - \tau - 2$  teremos que a multiplicidade de  $-2$  será  $n - \tau - 2$ ;
- quando  $s = 0$  e  $r = n - \tau - 1$  teremos que a multiplicidade de  $-2$  será  $n - \tau - 1$ ;
- em todos os outros casos a multiplicidade de  $-1$  será  $\tau - 3$  e a de  $-2$  será  $n - \tau - 3$ .

**Demonstração:** Pelo Teorema 4.1.3 para determinar a multiplicidade de  $-2$  e  $-1$  precisamos apenas determinar  $\xi$ . Então:

- Se  $s = 0$  e  $r = 0$  temos que  $\xi = 2$  e  $r_1 = 1$  então a multiplicidade de  $-1$  será  $\tau - \xi + 1 = \tau - 1$ . Se  $s = 0$  e  $r = n - \tau - 1$  e temos que  $\xi = 1$  com  $r_1 \neq 1$  então a multiplicidade de  $-1$  será  $\tau - \xi = \tau - 1$ .
- Se  $s = 0$  e  $r = n - \tau - 2$  temos que  $\xi = 2$  então a multiplicidade de  $-1$  será  $\tau - \xi = \tau - 2$ ;

- Se  $s = 0$  e  $0 \leq r \leq n - \tau - 3$  ou  $s \neq 0$  e  $r = n - \tau - 2$  temos que  $\xi = 2$  e a multiplicidade de  $-2$  será  $n - \tau - \xi = n - \tau - 2$ .
- Se  $s = 0$  e  $r = n - \tau - 1$  teremos que  $\xi = 1$  a multiplicidade de  $-2$  será  $n - \tau - \xi = n - \tau - 1$ ;
- Em todos os outros casos temos que  $\xi = 3$ , então a multiplicidade de  $-1$  será  $\tau - 3$  e a de  $-2$  será  $n - \tau - 3$ .

Pelo Teorema 4.6.8 podemos representar a matriz distancia  $D$  da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} 0 & J_{1,n-\tau-r-2} & J_{1,s} & 1 & J_{1,\tau-s-1} & J_{1,r+1} \\ J_{n-\tau-r-2,1} & 2(J-I)_{n-\tau-r-2} & 2J_{n-\tau-r-2,s} & 2J_{n-\tau-r-2,1} & 2J_{n-\tau-r-2,\tau-s-1} & 2J_{n-\tau-r-2,r+1} \\ J_{s,1} & 2J_{s,n-\tau-r-2} & (J-I)_s & J_{s,1} & J_{s,\tau-s-1} & J_{s,r+1} \\ 1 & 2J_{1,n-\tau-r-2} & J_{1,s} & 0 & 2J_{1,\tau-s-1} & 2J_{1,r+1} \\ J_{\tau-s-1,1} & 2J_{\tau-s-1,n-\tau-r-2} & J_{\tau-s-1,s} & 2J_{\tau-s-1,1} & (J-I)_{\tau-s-1} & J_{\tau-s-1,r+1} \\ J_{r+1,1} & 2J_{r+1,n-\tau-r-2} & J_{r+1,s} & 2J_{r+1,1} & J_{r+1,\tau-s-1} & 2(J-I)_{r+1} \end{bmatrix}$$

Os autovalores  $-2$  e  $-1$  com suas multiplicidades representam no mínimo  $\tau - 3 + n - \tau - 3 = n - 6$  dos autovalores de  $D$ , pelo Teorema 2.1.4 os outros  $D$ -autovalores são os autovalores da matriz  $6 \times 6$  do enunciado, pois ela é resultado de particionar  $D$  em blocos de matrizes com soma de linhas constantes. ■

Observe que se  $s = 0$  e  $r = 0$  temos que  $F_{0,0}$  é o *pineapple*. Se  $s = 0$  e  $r = n - \tau - 1$  então  $F_{0,n-\tau-1}$  é o grafo split-completo  $K_\tau \vee \overline{K_{n-\tau}}$ . Se  $s = 0$  e  $0 \leq r \leq n - \tau - 3$  então temos  $r + 1$  cliques de tamanho  $\tau + 1$ . E se  $s$  é qualquer e  $r = n - \tau - 2$  temos  $s$  cliques de tamanho  $\tau$  e  $n - \tau - 1$  cliques de tamanho  $\tau + 1$ .

## 4.7 Variação binária como uma ferramenta estrutural

Nas seções anteriores obtivemos as multiplicidades de  $-1$  e  $-2$  como  $D$ -autovalores e o número de  $D$ -autovalores distintos, a partir da sequência binária do grafo *threshold*.

Veremos agora nos Corolários 4.7.9 e 4.7.11 como obter estes mesmos resultados a partir de parâmetros conhecidos, diretamente, do grafo.

Como já mencionamos, um grafo *threshold* é uma subclasse de grafos cordais (grafos que não possuem  $C_n$  como subgrafo induzido, para todo  $n \geq 4$ ), vamos estudar as consequências que esse fato acarreta a um grafo *threshold*. Para isso vamos a algumas definições e resultados:

**Definição 4.7.1.** [5] Um vértice  $v$  de  $G$  é dito *simplicial* quando o conjunto de vértices adjacentes a  $v$  formam uma clique em  $G$ . Denotaremos por  $N(v)$  o conjunto de vértices adjacentes a  $v$  e por  $N[v]$  o conjunto  $N(v) \cup \{v\}$ . Um subconjunto  $C \subset V$  é dito uma *clique maximal* de  $G$  quando  $C$  é uma clique e não existe outra clique  $C'$  tal que  $C \subset C'$ .

O Teorema a seguir liga a noção de vértice simplicial e clique maximal.

**Teorema 4.7.2.** [5] *Um vértice é simplicial em um grafo cordal  $G$  se e somente se pertence a exatamente uma clique maximal de  $G$ .*

Uma clique de um grafo é dita clique *simplicial* quando é uma clique maximal que contém pelo menos um vértice simplicial.

**Definição 4.7.3.** [5] *Um subconjunto  $S \subset V$  é um separador de vértices para vértices não adjacentes  $u$  e  $v$  (um  $uv$ -separador) se a remoção de  $S$  do grafo separa  $u$  e  $v$  em duas componentes conexas distintas. Se nenhum subconjunto próprio de  $S$  é um  $uv$ -separador então  $S$  é um  $uv$ -separador minimal. Se  $S$  é um  $uv$ -separador minimal para algum par de vértices  $u$  e  $v$  qualquer, ele é chamado de separador minimal de vértices.*

Usaremos mais dois resultados sobre grafos cordais:

**Teorema 4.7.4.** [5] *Um grafo  $G$  é cordal se e somente se todo separador minimal de vértices é uma clique.*

**Teorema 4.7.5.** [5] *Um conjunto  $S$  é um separador minimal de vértices de um grafo cordal  $G$  se e somente se existem cliques maximais  $C$  e  $C'$  de  $G$  tais que  $S = C \cap C'$ .*

**Exemplo 4.7.6.** *Retomemos o exemplo de grafo threshold da Figura 4.12.*

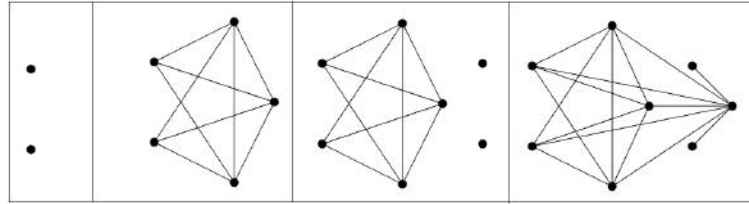


Figura 4.12: Grafo threshold  $(0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 1)$

Se rotularmos os vértices segundo sua inserção no grafo temos que os vértices  $v_1$ ,  $v_2$ ,  $v_6$  e  $v_7$  são vértices simpliciais,  $\{v_1, v_3, v_4, v_5, v_8\}$ ,  $\{v_2, v_3, v_4, v_5, v_6, v_8\}$ ,  $\{v_6, v_8\}$  e  $\{v_7, v_8\}$  formam cliques maximais e  $\{v_3, v_4, v_5, v_8\}$  e  $\{v_8\}$  são os separadores minimais de vértices de  $G$ .

Nesta seção relacionamos a variação binária com o número de separadores minimais de vértices de um grafo *threshold*, para isso expomos alguns resultados obtidos nesses trabalho.

**Proposição 4.7.7.** *Os vértices correspondentes aos zeros de um grafo threshold são vértices simpliciais de  $G$ .*

**Demonstração:** De fato, se  $v_i$  corresponde a  $b_i = 0$  na sequência binária de um grafo threshold  $G$ , então  $N(v_i) = \{v_j | b_j = 1 \text{ e } i < j\}$  forma uma clique por definição de vértices dominante. Assim  $v_i$  é simplicial. ■

Observemos que o único vértice de um grafo *threshold* que sempre é simplicial é o vértice  $v_2$  associado à  $b_2$ . De fato, se  $b_2 = 0$  temos que, pela proposição anterior,  $v_2$  é simplicial. Se  $b_2 = 1$  então temos que  $N(v_2) = \{v_1\} \cup \{v_i | b_i = 1, i > 2\}$  que é uma clique. Logo,  $v_2$  é simplicial. Nesse caso,  $N[v_1] = N[v_2]$ .

Seja  $v_i$  um vértice simplicial de  $G$  e  $N[v_i]$  a clique maximal que contém  $v_i$ . Se  $i = 1$  com  $b_2 = 1$  então  $N[v_1] \cap N[v_j] = N(v_j)$  para todo  $v_j$  vértice simplicial diferente de  $v_1$  e  $v_2$ . Se  $v_i$  e  $v_j$  são vértices simpliciais e não existe  $k$  entre  $i$  e  $j$  tal que  $b_k = 1$  então  $N[v_i] \cap N[v_j] = N(v_i) = N(v_j)$ . Por fim, se  $v_i$  e  $v_j$  são vértices simpliciais e existe  $k$  tal que  $i < k < j$  com  $b_k = 1$  então  $N[v_i] \cap N[v_j] = N(v_j)$ .

Como podemos notar até aqui, muitos resultados apresentados dependem do fato de  $b_2$  ser igual a 1 ou 0. O próximo teorema apresenta o que muda na estrutura do grafo nestes dois casos: a quantidade de separadores minimais de vértices.

**Teorema 4.7.8.** *Seja  $G = (b_1, b_2, \dots, b_n)$  um grafo threshold diferente do grafo completo com variação binária  $\xi$ . Então o número de separadores minimais de vértices de  $G$  é  $\xi - b_2$ .*

**Demonstração:** Pelo Teorema 4.7.5 temos que os separadores minimais de vértices são interseções de cliques maximais e como já vimos as cliques maximais de um grafo threshold são dadas por  $N[v_i]$  tais que  $v_i$  são vértices simpliciais de  $G$ . Pelo estudo feito anteriormente, cada sequência de zeros da sequência binária determina um separador minimal de vértices diferente, exceto,  $N(v_1)$  no caso em que  $b_2 = 1$  pois, nesse caso,  $N(v_1)$  não é interseção de cliques maximais. Como por definição de variação binária temos  $\xi$  sequências de zeros na sequência binária então:

- Se  $b_2 = 1$ , temos  $\xi$  sequências de zeros que definem  $\xi - 1$  separadores minimais de vértices de  $G$ .
- Se  $b_2 = 0$ , temos  $\xi$  sequências de zeros que definem  $\xi$  separadores minimais de vértices de  $G$ .

■

Observemos que, segundo a notação usada para quantificar as sequências de zeros e uns da sequência binária, temos que se  $v_{i_k}$  é um vértice simplicial de um grafo threshold  $G$  então  $|N(v_{i_k})| = \sum_{j=i_k}^{\xi} s_j$ . E ainda, se  $v_i$  e  $v_j$  são vértices simpliciais tais que  $i < j$  e  $N(v_i) \neq N(v_j)$  então  $N(v_i) \supset N(v_j)$ , ou seja, os separadores minimais de vértices formam uma cadeia decrescente de cliques, pelo Teorema 4.7.4.

Com o Teorema 4.1.3 e o Teorema 4.7.5 podemos enunciar os seguintes corolários que relacionam a estrutura do grafo com seu  $D$ -espectro:

**Corolário 4.7.9.** *Seja  $G$  um grafo threshold com  $n$  vértices, número clique  $\omega$  e  $s$  separadores minimais de vértices, então  $-1$  é um  $D$ -autovalor de  $G$  com multiplicidade  $\omega - s - 1$ .*

**Demonstração:** Basta usar o Teorema 4.1.3 e o Teorema 4.7.5 e o fato de o traço ser igual ao número clique menos um. ■

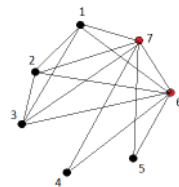


Figura 4.13: Grafo threshold  $G$

**Exemplo 4.7.10.**  $G$  é um grafo threshold com 7 vértices. A maior clique de  $G$  é formada pelos vértices  $\{1, 2, 3, 6, 7\}$ , portanto,  $\omega = 5$ . O separador minimal de vértices de  $G$  é dado pelo conjunto de vértices  $\{6, 7\}$ , pois ao retirar do grafo tais vértices temos que os vértices 1, 2 e 3 estão em componentes conexas distintas dos vértices 4 e 5. Então  $s = 1$ . Pelo Corolário 4.7.9, temos que  $m_D(-1) = 5 - 1 - 1 = 3$ . De fato, pois o  $D$ -espectro de  $G$  é, aproximadamente, dado por  $\text{Spec}_D(G) = (8.26352, -0.33002, -1^3, -2, -2.9335)$ .

**Corolário 4.7.11.** Seja  $G$  um grafo threshold com  $s$  separadores minimais de vértices. Então o número de  $D$ -autovalores distintos de  $G$  é no mínimo  $2s$  e no máximo  $2s + 2$ .

**Demonstração:** Basta usar o Teorema 4.7.5 e o Corolário 4.1.6, considerando  $b_2 = 0$  e  $b_2 = 1$ . ■

# Capítulo 5

## Conclusão

Nesta tese apresentamos alguns resultados originais sobre o espectro da matriz distância para duas famílias importantes de grafos: os grafos *caterpillar* e os grafos *threshold*. Neste capítulo destacamos alguns dos principais resultados e expomos possíveis trabalhos futuros.

No Capítulo 3, determinamos exatamente a multiplicidade de  $-2$  como autovalor da matriz distância de um grafo *caterpillar*. Estabelecer esse valor para a multiplicidade de  $-2$  foi importante pois auxiliou na determinação do número de autovalores distintos da matriz distância de um grafo *caterpillar*, respondendo, assim, uma importante questão da Teoria Espectral de Grafos. Além disso, verificamos que a família de grafos *Caterpillar* é um exemplo de família de grafos que alcança a cota mínima para a multiplicidade de  $-2$  estabelecida por MERRIS [7].

Ainda em relação aos grafos *caterpillar*, foi possível construir uma subfamília destes grafos com o mesmo número de vértices, mesmo diâmetro e o mesmo número de autovalores distintos da matriz distância. Para isso, bastou combinar a posição das folhas no grafo, sem que o diâmetro fosse alterado.

Na Seção 3.2, consideramos os grafos *caterpillar* com diâmetro 3 e 4, localizamos os autovalores da matriz distância em intervalos menores do que os apresentados por MERRIS em [7], pois os extremos dos intervalos são autovalores da matriz distância de duplas vassouras equilibradas.

Aproveitamos o estudo das duplas vassouras para corrigir um equívoco cometido por COLLINS em [6] ao descrever o polinômio característico para o caso das equilibradas.

Em [8] foi apresentada uma conjectura, estabelecendo uma cota mínima para o número de autovalores distintos da matriz distância de uma árvore, em função de seu diâmetro, questão estudada pela Teoria Espectral de Grafos. Neste trabalho conseguimos descrever, exatamente, o número de autovalores distintos de um grafo *caterpillar*. Uma proposta para trabalho futuro é determinar uma cota mínima para o número de autovalores distintos da matriz distância de uma árvore e verificar se tal cota também depende de seu diâmetro.

No Capítulo 4, através de um novo parâmetro, a variação binária, conseguimos descrever algumas propriedades espectrais de um grafo *threshold*, bem como algumas propriedades estruturais.

Em [4] Jacobs et al provaram que se  $\alpha \neq -1$  e  $-2$  é um autovalor da matriz distância de um grafo *threshold*, então  $\alpha$  é simples. Neste Capítulo vimos que  $-1$  ou  $-2$  sempre são autovalores da matriz distância de um grafo *threshold*. E mais,

as multiplicidades de  $-1$  e  $-2$  dependem apenas da sequência binária, já que nela obtemos informações sobre o número de vértices, traço, variação binária e  $b_2$ , sem a necessidade de conhecer mais sobre a estrutura do grafo. Para essa classe, também, descrevemos o número de autovalores distintos da matriz distância, pois esse depende da variação binária e de  $b_2$ .

Nas seções 4.2 e 4.3, caracterizamos os grafos *threshold* com variação binária máxima e mínima. Na seção 4.4, determinamos o índice de Wiener dos grafos descritos nas seções anteriores. Na seção 4.5, provamos que os grafos *threshold* com exatamente quatro ou cinco autovalores distintos da matriz distância são unicamente determinados pelo seu espectro, problema importante discutido pela Teoria Espectral de Grafos..

Constatamos, também, que a variação binária descreve aspectos estruturais do grafo como o número de  $ab$ -separadores minimais de vértices do grafo. Isso nos permite obter informações sobre o espectro diretamente da observação do grafo.

Como trabalho futuro pretendemos relacionar os autovalores da matriz distância de um grafo *threshold* com os autovalores da matriz de adjacência. Como todo grafo *threshold* tem diâmetro igual a 2 podemos escrever  $D = 2J - 2I - A$ , onde  $A$  e  $D$  são as matrizes de adjacência e distância do grafo, respectivamente. A partir dessa igualdade queremos verificar se existe relação entre a multiplicidade de  $-2$  como  $D$ -autovalor e 0 como  $A$ -autovalor e entre a multiplicidade de  $-1$  como  $A$  e  $D$ -autovalor.

# Referências Bibliográficas

- [1] GRAHAM, R. L., POLLAK, H. O. “On the addressing problem for loop switching”, *Bell System Technical Journal*, v. 50, n. 8, pp. 2495–2519, 1971.
- [2] GRAHAM, R., LOVÁSZ, L. “Distance matrix polynomials of trees”, *Advances in Mathematics*, v. 29, n. 1, pp. 60–88, 1978.
- [3] RUZIEH, S. N., POWERS, D. L. “The distance spectrum of the path  $P_n$  and the first distance eigenvector of connected graphs”, *Linear and Multilinear Algebra*, v. 28, n. 1-2, pp. 75–81, 1990.
- [4] JACOBS, D. P., TREVISAN, V., TURA, F. C. *Distance eigenvalue location in threshold graphs*. Tese de Doutorado, 2013.
- [5] BLAIR, J. R. S., PEYTON, B. W. “A Introduction to Chordal Graphs and Cliques Trees”, 1993.
- [6] COLLINS, K. L. “Factoring distance matrix polynomials”, *Discrete mathematics*, v. 122, n. 1-3, pp. 103–112, 1993.
- [7] MERRIS, R. “The distance spectrum of a tree”, *Journal of graph theory*, v. 14, n. 3, pp. 365–369, 1990.
- [8] AALIPOUR, G., ABIAD, A., BERIKKYZY, Z., et al. “On the distance spectra of graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 497, pp. 66–87, 2016.
- [9] DEL-VECCHIO, R., PEREIRA, G., VINAGRE, C. “Constructing pairs of Laplacian equienergetic threshold graphs”, *Matemática Contemporânea*, v. 44, pp. 1–10.
- [10] VINAGRE, C. T., DEL-VECCHIO, R. R., JUSTO, D. A., et al. “Maximum Laplacian energy among threshold graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 439, n. 5, pp. 1479–1495, 2013.
- [11] ABREU, N., DEL-VECCHIO, R., TREVISAN, V., et al. “Teoria Espectral de Grafos-Uma Introdução IIIo Colóquio de Matemática da Região Sul”. 2014.



- [12] HORN, R. A., JOHNSON, C. R. *Matrix analysis*. Cambridge University Press, 2012.
- [13] BROUWER, A. E., HAEMERS, W. H. *Spectra of graphs*. Springer Science & Business Media, 2011.
- [14] MAHADE, N. V. R., PELED, U. N. “Threshold graphs and related topics”, *Ann Disc. Maths*, v. 56, 1995.
- [15] M. D. KONIG, S. BATTISTON, M. N., SCHWEITZER, F. “The efficiency and stability of ReD networks”, *Games and Economic Behavior*, v. 75, pp. 694–713, 2012.
- [16] AOUCHE, M., HANSEN, P. “Distance spectra of graphs: A survey”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 458, pp. 301–386, 2014.
- [17] ATIK, F., PANIGRAHI, P. “Graphs with few distinct distance eigenvalues irrespective of the diameters”, *Electronic Journal of Linear Algebra*, v. 29, n. 1, pp. 194–205, 2016.
- [18] ZHOU, B., ILIC, A. “On Distance Spectral Radius and Distance Energy of Graphs”, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, v. 64, n. arXiv: 1101.4393, pp. 261–280, 2011.
- [19] WANG, Y., ZHOU, B. “On distance spectral radius of graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 438, n. 8, pp. 3490–3503, 2013.
- [20] ROJO, O., MEDINA, L., ABREU, N. M. D., et al. “Extremal algebraic connectivities of certain caterpillar classes and symmetric caterpillars”, *Electronic Journal of Linear Algebra*, v. 20, pp. 136–157, 2010.
- [21] STEVANOVIC, D., INDULAL, G. “The distance spectrum and energy of the compositions of regular graphs”, *Applied Mathematics Letters*, v. 22, pp. 1136–1140, 2009.