

Universidade Federal Fluminense

ALLAN JOSÉ AMARAL RIBEIRO

Um estudo de autovalores principais em grafos
químicos

Volta Redonda, RJ

2024

ALLAN JOSÉ AMARAL RIBEIRO

Um estudo de autovalores principais em grafos químicos

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia. Área de Concentração: Otimização e pesquisa operacional.

Orientadora:

Dra. Francisca Andrea Macedo França

Coorientador:

Dr. André Ebling Brondani

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

Volta Redonda, RJ

2024

Ficha catalográfica automática - SDC/BEM
Gerada com informações fornecidas pelo autor

R484e Ribeiro, Allan José Amaral
Um estudo de autovalores principais em grafos químicos /
Allan José Amaral Ribeiro. - 2024.
78 p.

Orientador: Francisca Andrea Macedo França.
Coorientador: André Ebling Brondani.
Dissertação (mestrado)-Universidade Federal Fluminense,
Escola de Engenharia Industrial e Metalúrgica de Volta
Redonda, Volta Redonda, 2024.

1. Autovalores principais de grafos químicos. 2. Espectro
principal das faixas benzenoide. 3. Produção intelectual. I.
França, Francisca Andrea Macedo, orientadora. II. Brondani,
André Ebling, coorientador. III. Universidade Federal
Fluminense. Escola de Engenharia Industrial e Metalúrgica de
Volta Redonda. IV. Título.

CDD - XXX

Um estudo de autovalores principais em grafos químicos

Allan José Amaral Ribeiro

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia.

Aprovada por:



Documento assinado digitalmente
FRANCISCA ANDREA MACEDO FRANCA
Data: 02/08/2024 14:46:10-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof^ª. Francisca Andrea Macedo França (Orientadora), D.Sc. / PPG-MCCT, UFF



Documento assinado digitalmente
ANDRE EBLING BRONDANI
Data: 05/08/2024 10:55:50-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. André Ebling Brondani (Coorientador), D.Sc. / PPG-MCCT, UFF



Documento assinado digitalmente
CYBELE TAVARES MAIA VINAGRE
Data: 31/07/2024 22:54:31-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof^ª. Cybele Tavares Maia Vinagre, D.Sc. / IME, UFF

**LUIS MEDINA
CAAMAÑO**

Firmado digitalmente
por LUIS MEDINA
CAAMAÑO
Fecha: 2024.07.31
16:01:24 -04'00'

Prof. Luis Adrián Medina Caamaño, D.Sc. / PMMPA, UA



Documento assinado digitalmente
PANTERS RODRIGUEZ BERMUDEZ
Data: 05/08/2024 01:56:24-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Panters Rodriguez Bermudez, D.Sc. / PPG-MCCT, UFF

Volta Redonda, 29 de julho de 2024.

Dedico este trabalho a minha mãe que me ajudou ao longo desta caminhada.

Agradecimentos

Agradeço a Deus pela vida que Ele me concedeu.

Agradeço aos meus pais por todo o esforço investido na minha educação.

Deixo um agradecimento especial a minha orientadora e ao meu coorientador, pelo incentivo e pelo tempo que dedicaram ao meu projeto de pesquisa.

Por último, quero agradecer também à Universidade Federal Fluminense e a todo o seu corpo docente.

Resumo

Os autovalores principais de um grafo são os autovalores de sua matriz de adjacência que estão relacionados com a contagem de cadeias no grafo. Neste trabalho, apresentamos os resultados mais conhecidos da literatura sobre tais autovalores. Além disso, investigamos uma subclasse de grafos benzenoides e, como resultados originais, exibimos os espectros destes grafos e expressamos a quantidade de seus autovalores principais em termos de sua estrutura.

Palavras-chave: Matriz de adjacência. Autovalores principais. Grafos benzenoides.

Abstract

The main eigenvalues of a graph are the eigenvalues of its adjacency matrix, which are related to the number of walks in the graph. In this work, we present the best-known results in the literature on such eigenvalues. Furthermore, we investigate a subclass of benzenoid graphs and, as original results, we display the spectra of these graphs and express the quantity of their main eigenvalues in terms of their structure.

Keywords: Adjacency matrix. Main eigenvalues. Benzenoid graphs.

Sumário

Lista de Figuras	vii
1 Introdução	9
2 Conceitos iniciais	11
2.1 Teoria de Matrizes	11
2.2 Teoria de Grafos	19
2.3 Teoria Espectral de Grafos	24
3 Autovalores principais	37
3.1 Resultados iniciais	37
3.2 Grafos com exatamente k autovalores principais	42
4 Aplicação em Grafos Químicos	47
4.1 Grafos Benzenoides	47
4.2 Espectro	50
4.3 Espectro Principal	54
5 Conclusão e Trabalhos Futuros	67
5.1 Conclusão	67
5.2 Trabalhos Futuros	68
Referências	69
Apêndice	72

Lista de Figuras

2.1	Grafo com 8 vértices e 14 arestas.	19
2.2	Grafo G e o seu complementar \overline{G}	20
2.3	Grafos completos K_1 , K_2 , K_3 e K_4	21
2.4	Grafos conexo e grafo desconexo.	22
2.5	Grafos C_3 , C_4 e C_5	22
2.6	Grafos roda W_4 e W_5	23
2.7	Grafo bipartido completo $K_{3,4}$	23
2.8	Estrela S_4 e S_5	23
2.9	Caminho P_8	24
2.10	Emparelhamento perfeito.	24
2.11	Grafo <i>cocktail party</i>	24
2.12	Matriz de adjacência.	25
2.13	Matriz de adjacência $A(K_4)$	27
2.14	O grafo G_2	28
2.15	Grafo 3-regular.	30
2.16	$diam(G) + 1 = 7$, G possui 12 autovalores distintos	34
2.17	Partição equilibrada $\pi = \{V_1, V_2, V_3, V_4\}$	36
3.1	Grafo $K_{3,3}$	39
3.2	Grafo bipartido.	39
3.3	Estrela S_5	43
3.4	G é um grafo 2-cadeia $(3, -2)$ -linear.	45
4.1	Molécula de Benzeno.	47

4.2	Grafo químico da molécula de benzeno.	48
4.3	Grafos benzenoides.	48
4.4	Faixa benzenoide F_2	49
4.5	Faixas benzenoides.	49
4.6	Faixa benzenoide F_3	50
4.7	Rotulação L_1 de $F_h \in \mathcal{F}$	50
4.8	Grafo F_3 com a rotulação L_1	51
4.9	Grafo F_4 com a rotulação L_1	51
4.10	Rotulação L_2 de $F_h \in \mathcal{F}$	54
4.11	Grafos F_3 e F_4 com a rotulação L_2 , respectivamente.	54
4.12	Código em <i>Python</i> das operações elementares em W_h	62

Capítulo 1

Introdução

A Teoria dos Grafos é um ramo da matemática discreta que estuda as relações entre os objetos de um determinado conjunto. Para tal, são empregadas estruturas denominadas grafos e comumente denotadas por $G = (V, E)$, onde V é um conjunto não vazio de objetos, denominados vértices, e E é um conjunto de pares não ordenados dos elementos de V , denominados arestas. Estruturas que podem ser representadas por grafos estão em toda parte e muitos problemas de interesse prático podem ser modelados por um grafo, por exemplo relações entre estações de metrô e os trilhos que as unem, relações de amizade de pessoas numa rede social ou redes de abastecimento de água. Outra razão do grande interesse na Teoria de Grafos é porque redes complexas, em vários ramos da ciência e da engenharia, tais como engenharia elétrica, rede de computadores e moléculas bioquímicas podem ser modelados por grafos e suas propriedades podem ser obtidas por algoritmos computacionais.

A representação geométrica de um grafo é extremamente útil para a sua visualização. Entretanto, extrair propriedades topológicas ou estruturais de um grafo apenas por visualização, de modo geral, é um trabalho inviável. Porém, um grafo pode ser representado algebricamente por uma matriz e dessa forma, várias operações e propriedades estruturais do grafo podem ser realizadas. O ramo de pesquisa que dedica-se ao estudo de grafos via representação matricial denomina-se Teoria Espectral de Grafos.

O surgimento da Teoria Espectral de Grafos teve suas motivações nas áreas de Química e Física. De acordo com Cvetković e Gutman [7], o primeiro trabalho no qual autovalores de um grafo aparecem, de forma implícita, é no artigo de Hückel [28], datado em 1931 e voltado para Química Quântica. Neste, Huckel propõe um modelo de representação de uma molécula de hidrocarboneto não saturada por um grafo, no qual os níveis de energia da molécula estariam relacionados com os autovalores deste.

Embora a Teoria Espectral de Grafos tenha como marco inicial o trabalho de Huckel em 1931, sua fundamentação teórica teve início somente em 1957 com o artigo de Collatz e Sinogowitz [5], consolidando-se com a tese de doutorado de Cvetković, em 1971. Desde então, várias representações matriciais de grafos foram propostas e muitos trabalhos relacionados aos autovalores de matrizes associadas a grafos foram publicados em diversas áreas como Matemática, Física, Ciência da Computação, Biologia, Ciências Sociais e Economia.

Em 1971, Cvetković [9] mostrou que certos autovalores da matriz de adjacência de um grafo estão relacionados com a contagem de suas cadeias. Tais autovalores foram denominados autovalores principais do grafo e correspondem ao principal objeto de estudo deste trabalho. Em 1978, Cvetković [6] caracterizou os grafos regulares como aqueles que possuem exatamente um autovalor principal e propôs o problema de caracterização de grafos com exatamente $s \geq 2$ autovalores principais.

Nessa dissertação, fazemos uma coletânea de resultados da literatura relacionados ao conceito introduzido por Cvetković e determinamos todos os autovalores principais de uma classe de grafos químicos, cujos elementos são denominados faixas benzenoides. O trabalho está organizado da seguinte forma: no Capítulo 2 apresentamos resultados básicos sobre Teoria de Matrizes, Teoria de Grafos e Teoria Espectral de Grafos que são necessários para a compreensão dos capítulos seguintes. O Capítulo 3 contém uma revisão sobre os principais resultados da literatura que tratam sobre autovalores principais de grafos, em especial, resultados que tratam sobre grafos com exatamente dois autovalores principais. No Capítulo 4, estudamos os grafos benzenoides e mostramos o espectro de uma subclasse desses grafos. Finalmente, no Capítulo 5, apresentamos as conclusões e os trabalhos futuros.

Capítulo 2

Conceitos iniciais

Neste capítulo, além de fixarmos algumas notações, são revistos alguns resultados e conceitos básicos sobre Teoria de Matrizes, Teoria de Grafos e Teoria Espectral de Grafos que são necessários para a compreensão do texto.

2.1 Teoria de Matrizes

Nesta seção recordamos algumas definições e resultados básicos sobre matrizes reais. Para mais detalhes e demonstrações sugerimos [14], [16], [24], [29], [31] e [32].

Dados dois inteiros positivos $n, m \geq 1$, uma *matriz* A é uma aplicação $\{1, 2, \dots, n\} \times \{1, 2, \dots, m\}$ em \mathbb{R} ou \mathbb{C} . Neste trabalho consideramos apenas matrizes definidas sobre o corpo dos números reais cujos elementos (entradas) são denotados por a_{ij} para $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ e $j \in \{1, 2, \dots, m\}$. Fixados i e j , a_{ij} é o elemento na interseção da i -ésima linha com a j -ésima coluna. Esta matriz é de ordem $n \times m$ e é representada por

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nm} \end{bmatrix}.$$

Por simplicidade, indicamos $A = [a_{ij}]$ para designar a matriz A e seus elementos. Uma matriz A é não negativa se $a_{ij} \geq 0$ para $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ e $j \in \{1, 2, \dots, m\}$. No caso em que $n = m$, A é denominado de *matriz quadrada* de ordem n . O conjunto de todas matrizes de ordem $n \times m$ é denotado por $\mathbb{M}_{n \times m}(\mathbb{R})$ ou, simplesmente, $\mathbb{M}_n(\mathbb{R})$, quando $n = m$. Se todos os elementos da matriz A são iguais a zeros, dizemos que A é a *matriz nula*.

Dado a matriz $A = [a_{ij}]$ onde $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$, as entradas do tipo a_{ii} são ditas *entradas diagonais* de A e o conjunto de todas as entradas diagonais é a *diagonal principal* de A . Já a *diagonal secundária* da matriz $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ é formada pelos elementos a_{ij} , onde $i + j = n + 1$. Dados $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$, se para quaisquer $i \neq j$, $a_{i,j} = 0$, A é chamada *matriz diagonal*. Uma matriz diagonal A com entradas diagonais constantes, ou seja, $a_{ii} = \alpha \in \mathbb{R}$ para $i \in \{1, \dots, n\}$ é chamada de *matriz escalar*. A *matriz identidade* de ordem n , I_n , é uma matriz escalar em que $a_{ii} = 1$ para $i \in \{1, \dots, n\}$. O *traço* de $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ é a soma das entradas de sua diagonal principal.

A matriz A é denominada de *matriz coluna* se possuir somente uma coluna e n linhas. Enquanto uma *matriz linha* é a matriz com n colunas e uma linha. A matriz coluna e matriz linha também são chamadas respectivamente de *vetor coluna* e *vetor linha*. Ao longo do texto, $J_{n \times m}$ representa a matriz de ordem $n \times m$ cujas entradas são iguais a 1 e j_n é o vetor coluna cujas entradas são iguais a 1.

As matrizes $A = [a_{ij}]$, $B = [b_{ij}] \in \mathbb{M}_{n \times m}(\mathbb{R})$ são iguais se, e somente se, $a_{ij} = b_{ij}$ para $i \in \{1, \dots, n\}$ e $j \in \{1, \dots, m\}$. Agora definiremos as operações elementares entre matrizes e a operação de matriz com os números reais.

Definição 2.1. *Sejam $A = [a_{ij}]$ e $B = [b_{ij}]$ duas matrizes de ordem $n \times m$. Definimos a soma das matrizes A e B , que denotamos por $A + B$, como sendo a matriz $C = [c_{ij}]$, de ordem $n \times m$, onde cada elemento é definido da seguinte forma:*

$$c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}; \quad i \in \{1, \dots, n\} \quad e \quad j \in \{1, \dots, m\}.$$

por simplicidade, indicamos $A+B = [a_{ij}+b_{ij}]$ para denotar a soma das matrizes A e B . De forma análogo, definimos a diferença das matrizes, que denotamos por $A - B = [a_{ij} - b_{ij}]$.

Definição 2.2. *Sejam $A = [a_{ij}]$ uma matriz de ordem $n \times m$ e um escalar $\lambda \in \mathbb{R}$. A multiplicação escalar de λ por A é a matriz $(\lambda A) = [c_{ij}]$ cujas entradas são dadas por*

$$c_{ij} = \lambda a_{ij}; \quad i \in \{1, \dots, n\} \quad e \quad j \in \{1, \dots, m\}.$$

Definição 2.3. *Sejam A uma matriz de ordem $n \times p$ e B uma matriz de ordem $p \times m$. O produto AB , nesta ordem, é a matriz C de ordem $n \times m$ cujas entradas são definidas por:*

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^p a_{ik} b_{kj}; \quad i \in \{1, \dots, n\} \quad e \quad j \in \{1, \dots, m\}.$$

isto é, o elemento c_{ij} é o produto da i -ésima linha de A pela j -ésima coluna de B . Assim, podemos definir o produto AB somente quando o número de colunas de A é igual ao

número de linhas de B .

Considere $A = [a_{ij}]$ uma matriz de ordem n . A matriz A é uma *matriz triangular superior* se os elementos abaixo da diagonal principal são todos nulos, isto é, $a_{ij} = 0$ para $j < i$. No caso em que os elementos acima da diagonal principal são todos nulos, isto é, $a_{ij} = 0$ para $j > i$, dizemos que a matriz $A = [a_{ij}]$ de ordem n é uma *matriz triangular inferior*. A matriz $A = [a_{ij}]$ é uma matriz tridiagonal se $a_{ij} = 0$ sempre que $|i - j| > 1$. A matriz A de ordem n é *invertível ou não singular* se existe uma matriz quadrada $B \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ tal que $AB = BA = I$. Neste caso, denotamos B por A^{-1} . As matrizes A e B de mesma ordem são *semelhantes* se existir uma matriz invertível P tal que $A = P^{-1}BP$.

Dado a matriz A de ordem $n \times m$. A matriz A^T é denominamos *matriz transposta* de $A = [a_{ij}]$ quando a matriz A^T é obtida trocando-se as linhas pela colunas de A , onde A^T é de ordem $m \times n$. Uma matriz quadrada de ordem n é *matriz simétrica* se $A^T = A$, é *antissimétrica* quando $A^T = -A$ e é *ortogonal* se $A^T = A^{-1}$. A matriz A de ordem n é uma *matriz de permutação* se cada linha e coluna possuem $n - 1$ elementos nulos e um único elemento igual a 1. A seguir enunciamos alguns resultados importantes sobre operações entre matrizes. Para mais detalhes sobre as propriedades das operações de matrizes, sugerimos as seguintes referências [24] e [31].

A *potenciação* de uma matriz quadrada A de ordem n determinado da seguinte forma:

$$A^0 = I, \quad A^1 = A, \quad A^2 = AA \text{ e } A^{k+1} = AA^k, \quad k \in \mathbb{N}.$$

A matriz $A \in \mathbb{M}_{n \times m}$ é chamada de *matriz idempotente*, se $A^2 = A$. A matriz A de ordem n é uma *matriz nilpotente* se existe um $p \in \mathbb{N}$ e p é o menor inteiro positivo tal que $A^p = 0_n$.

Seja a matriz A de ordem $n \times m$. A matriz obtida pela eliminação de todos os elementos de uma ou mais linhas (ou colunas) de A é chamado de *submatriz de A* . Uma *matriz de Vandermonde* é um matriz quadrada com a ordem maior ou igual a dois e que tem a seguinte forma

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1^1 & x_2^1 & \dots & x_n^1 \\ x_1^2 & x_2^2 & \dots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & \dots & x_n^{n-1} \end{bmatrix}.$$

Dado uma matriz quadrada A , se existem uma matriz permutação P e matrizes quadradas C e D tais que

$$P^T A P = \begin{bmatrix} C & X \\ 0 & D \end{bmatrix},$$

dizemos que A é uma *matriz redutível*. Caso contrário, a matriz A é denominado de *matriz irredutível*.

O *posto* de $A \in \mathbb{M}_{n \times m}(\mathbb{R})$, denotado por $\text{rank}(A)$, é o número de linhas (ou colunas) linearmente independentes de A . O *determinante* de uma matriz $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ será definido de maneira recorrente, em relação a ordem da matriz, da seguinte maneira: Para $n = 1$ e $n = 2$, temos: $\det(A) = a_{11}$ e $\det(A) = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$, respectivamente. Agora, suponha que o determinante está definido sobre $A \in \mathbb{M}_{n-1}(\mathbb{R})$. Então,

$$\det(A) = \sum_{i=1}^n (-1)^{i+j} a_{ij} \det(A_{i,j}),$$

onde $A_{i,j}$ é uma submatriz de A , sendo que a i -ésima linha e j -ésima coluna foram retiradas. O termo $(-1)^{i+j} \det(A_{i,j})$ é chamado *cofator ou complemento algébrico* do elemento a_{ij} da matriz $A = [a_{ij}]$. Os resultados seguintes podem ser encontrados na seguinte referência [31].

Teorema 2.1. *Se $A, B \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$, então $\det(AB) = \det(A) \det(B)$.*

Corolário 2.1. *Se $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ é invertível, então, $\det(A^{-1}) = \det(A)^{-1}$.*

Corolário 2.2. *A matriz $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ é invertível se e somente se $\det(A) \neq 0$.*

Teorema 2.2. *Se A é uma matriz de ordem n então $\det(A^T) = \det(A)$.*

Teorema 2.3. *Se A é uma matriz diagonal, então o determinante de A é o produto dos elementos da diagonal principal.*

Teorema 2.4. *Se A é uma matriz triangular superior ou inferior, então o determinante de A é o produto dos elementos da diagonal principal.*

Teorema 2.5. *Se duas linhas ou duas colunas são permutadas de uma matriz A de ordem n , então o determinante da nova matriz é igual ao determinantes da matriz A , mas com sinais opostos.*

Teorema 2.6. *Se uma linha ou coluna de uma matriz A de ordem n for substituída pela soma de seus elementos com os elementos correspondentes de outra linha ou coluna de A multiplicados por uma constante real, gerando assim uma matriz B , logo temos $\det(B) = \det(A)$.*

O Teorema 2.7 sobre a matriz de Vandermonde e os próximos resultados podem ser consultados em [24] e [31].

Teorema 2.7. *Se A é uma matriz de Vandermonde de ordem n então $\det(A) = \prod(x_j - x_i)$, onde $1 \leq i \leq j \leq n$.*

Dada a matriz $A \in \mathbb{M}_{n \times m}(\mathbb{R})$, dizemos que A é uma *matriz em blocos* quando podemos particionar linhas e colunas da seguinte forma:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1r} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{q1} & \dots & A_{qr} \end{bmatrix}.$$

onde a matriz $A_{\alpha\beta}$ é de ordem $m_\alpha \times n_\beta$, com $m_1 + \dots + m_q = m$ e $n_1 + \dots + n_q = n$, isto é, $A_{\alpha\beta}$ é uma submatriz de A . As submatrizes $A_{\alpha\beta}$ de A são chamadas blocos de A . A matriz A é uma *matriz quadrada em blocos* quando:

- (i) A é uma matriz quadrada;
- (ii) Os blocos formam uma matriz quadrada;
- (iii) O blocos diagonais são matrizes quadradas.

Seja $D \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$, D é uma *matriz diagonal em blocos* se os blocos não diagonais são matrizes nulas. Denotamos a matriz diagonal em blocos da seguinte maneira:

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D_{22} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & D_{rr} \end{bmatrix},$$

onde cada matriz $D_{\alpha\alpha}$ é de ordem $n_\alpha \times n_\alpha$ com $\sum_{\alpha=1}^r n_\alpha = n$. A matriz quadrada em blocos $L \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ é uma *matriz triangular superior em blocos* se os blocos abaixo da diagonal principal são matrizes nulas e $L \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ é uma *matriz triangular inferior em blocos* se os blocos acima da diagonal principal são matrizes nulas. A seguir, apresentamos resultados referentes ao determinante de matrizes em blocos.

Proposição 2.1. *Seja P uma matriz em blocos da forma $P = \begin{bmatrix} A & B \\ 0 & C \end{bmatrix}$ ou $P = \begin{bmatrix} A & 0 \\ B & C \end{bmatrix}$, sendo A e C matrizes quadradas. Então, $\det(P) = \det(A) \det(C)$,*

Proposição 2.2. *Se A e D são matrizes quadradas, então*

$$\det \left(\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \right) = \begin{cases} \det(A) \det(D - CA^{-1}B), & \text{quando } A^{-1} \text{ existe;} \\ \det(D) \det(A - BD^{-1}C), & \text{quando } D^{-1} \text{ existe.} \end{cases}$$

As matrizes $\det(D - CA^{-1}B)$ e $\det(A - BD^{-1}C)$ são chamados de complementos de Schur de A e D .

Demonstração. Se A^{-1} existir, então

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ CA^{-1} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ 0 & D - CA^{-1}B \end{bmatrix}.$$

Pela Proposição 2.1, temos

$$\det \left(\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \right) = \det(I^2) \det(A(D - CA^{-1}B)) = \det(A) \det(D - CA^{-1}B).$$

Para segunda fórmula, se D^{-1} existir, então

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & BD^{-1} \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A - BD^{-1}C & 0 \\ C & D \end{bmatrix}.$$

Pela Proposição 2.1, temos

$$\det \left(\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \right) = \det(I^2) \det(D(A - BD^{-1}C)) = \det(D) \det(A - BD^{-1}C).$$

□

Seja $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$. Um escalar $\lambda \in \mathbb{R}$ é um *autovalor* de A se existe um vetor não nulo $\mathbf{v} \in \mathbb{M}_{n \times 1}(\mathbb{R})$ tal que $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$. Nesse caso, \mathbf{v} é chamado *autovetor* de A associado ao *autovalor* λ . O *polinômio característico* de A é o polinômio mônico definido por $p(x) = \det(xI_n - A)$ e suas raízes são exatamente os autovalores de A . O *espectro* de A , denotado por $\text{Spec}(A)$, é o multiconjunto de todos os autovalores da matriz A . O *raio espectral* de A é o número real não negativo $\rho(A) = \max\{|\lambda| \mid \lambda \in \text{Spec}(A)\}$. O autoespaço formado pelos autovetores associados a um autovalor λ de A é denotado por $E(\lambda)$.

A *multiplicidade algébrica* de um autovalor λ de $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$, $\text{alg}(\lambda)$, é o número de vezes que λ é raiz do polinômio característico da matriz A . Já *multiplicidade geométrica* de λ , $\text{geo}(\lambda)$, é o número máximo de autovetores associados a λ que são linearmente

independentes. O autovalor λ é denominado *simples* se $\text{alg}(\lambda) = 1$. No caso de $\text{geo}(\lambda) = \text{alg}(\lambda)$, o autovalor λ é dito *semisimples* e sua multiplicidade é denotada por $m_G(\lambda)$.

O teorema a seguir estabelece algumas propriedades sobre o raio espectral de uma matriz simétrica A , $\rho(A)$.

Teorema 2.8 (Teorema de Perron-Frobenius). *Seja A uma matriz simétrica de ordem n . Se A é não negativa e irredutível, então*

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

O próximo resultado refere-se aos autovalores e autovetores de algumas matrizes tri-diagonais simétricas.

Teorema 2.9 (FIEDLER [14]). *Seja $A = [a_{ij}]$ uma matriz tridiagonal e simétrica de ordem n . Se $a_{ij} = 0$ sempre que $|i - j| = 1$ então os autovalores de A são distintos. Além disso, a primeira e a última coordenadas de todos os autovetores de A são não nulas.*

A seguir, apresentamos resultados referentes ao espectro de matrizes em blocos.

Proposição 2.3 (NATH e PAUL [32]). *Se A e B são matrizes quadradas e $P = \begin{bmatrix} A & B \\ B & A \end{bmatrix}$, então $\text{Spec}(P) = \text{Spec}(A + B) \cup \text{Spec}(A - B)$.*

Teorema 2.10 (NATH e PAUL [32]). *Seja $P = \begin{bmatrix} A & B \\ 0 & C \end{bmatrix}$ uma matriz em blocos de ordem n , sendo A e C matrizes quadradas. Então,*

$$\text{Spec}(P) = \text{Spec}(A) \cup \text{Spec}(C).$$

Demonstração. Vamos encontrar o polinômio característico de P . Pela Proposição 2.1, temos

$$p_P(x) = \det(xI_n - P) = \begin{vmatrix} xI_n - A & -B \\ 0 & xI_n - C \end{vmatrix} = \det(xI_n - A) \det(xI_n - C) = p_A(x)p_C(x)$$

Assim, $p_P(x) = 0$ se e somente se $p_A(x) = 0$ ou $p_C(x) = 0$. Logo, o espectro de P é multiconjuntos formado por autovalores de A ou B . \square

Teorema 2.11. *Se $A, B \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ são semelhantes, então $\text{Spec}(A) = \text{Spec}(B)$.*

Demonstração. Como A e B são semelhantes, existe $P \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ tal que $A = P^{-1}BP$. Assim,

$$\begin{aligned} p_A(x) &= \det(A - xI) \\ &= \det(P^{-1}(B - xI)P) \\ &= \det(P^{-1}) \det(B - xI) \det(P) \\ &= \det(B - xI) \\ &= p_B(x). \end{aligned}$$

□

A matriz $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ é *diagonalizável* se existe matriz P tal que $D = P^{-1}AP$ onde D é matriz diagonal. Os Teoremas 2.12, 2.13 e 2.14 apresentam resultados referentes a matrizes diagonalizáveis.

Teorema 2.12. *Seja A uma matriz quadrada de ordem n . Então A é diagonalizável se e somente se todos os autovalores de A são semissimples.*

Teorema 2.13. *Uma matriz quadrada de ordem n é diagonalizável se e somente se tem n autovetores linearmente independentes.*

Teorema 2.14. *Sejam B diagonalizável com $B = P^{-1}DP$ e $n \in \mathbb{N}$. Então $B^n = P^{-1}D^nP$.*

Teorema 2.15. *Se $A \in M_n(\mathbb{R})$ é simétrica, então $\text{tr}(A) = \sum_{i=1}^n \lambda_i(A)$.*

Teorema 2.16. *Se $A \in M_n(\mathbb{R})$ é simétrica, então $\det(A) = \prod_{i=1}^n \lambda_i(A)$.*

O próximo teorema apresenta uma decomposição para as matrizes simétricas em função do seu espectro, cuja demonstração pode ser encontrada em [31].

Teorema 2.17 (Teorema da Decomposição Espectral). *Seja A uma matriz quadrada de ordem n com m autovalores distintos $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$. Se existe uma matriz ortogonal P tal que P^TAP é uma matriz diagonal então existem matrizes P_1, P_2, \dots, P_m tais que A pode ser descrita como*

$$A = \lambda_1 P_1 + \lambda_2 P_2 + \dots + \lambda_m P_m. \quad (2.1)$$

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

- (i) $P_i^2 = P_i = P_i^T$ e $P_i P_j = 0$ para quaisquer $i \neq j$;

- (ii) $P_1 + P_2 + \dots + P_m = I$, onde I é matriz identidade;
- (iii) $P_i = \mathbf{x}_{i1}v_{i1}^T + \mathbf{x}_{i2}v_{i2}^T + \dots + \mathbf{x}_{id}v_{id}^T$ e $\{\mathbf{x}_{i1}, \dots, \mathbf{x}_{id}\}$ é uma base ortonormal para o autoespaço λ_i ;
- (iv) P_i é a matriz da projeção ortogonal de \mathbb{R}^n sobre $E(\lambda_i)$ com respeito à base ortonormal canônica de \mathbb{R}^n .

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

Corolário 2.3. *Toda matriz simétrica possui uma decomposição espectral.*

Corolário 2.4. *Seja A uma matriz simétrica de ordem n com m autovalores distintos $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$. Então \mathbb{R}^n decompõe-se como soma direta dos subespaços $\mathbb{R}^n = E_G(\lambda_1) \oplus E_G(\lambda_2) \oplus E_G(\lambda_3) \oplus \dots \oplus E_G(\lambda_k)$.*

2.2 Teoria de Grafos

Nesta seção, abordaremos os conceitos e resultados fundamentais sobre grafos. Para mais detalhes sugerimos as seguintes referências [13], [16], [19], [23], [30] e [33].

Um *grafo simples*, simplesmente dito um grafo, é uma estrutura $G = (V, E)$, onde V é um conjunto finito não vazio, cujos elementos são denominados de *vértices* e o conjunto $E \subset \{\{v, u\} | u \neq v, u, v \in V\}$, onde os elementos são chamados de *arestas*. A notação adotada para dizer se uma aresta pertence ao grafo G é $uv \in E$, onde $u, v \in V$. Exemplificamos esta definição na figura a seguir.

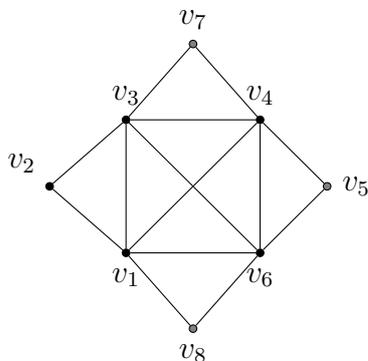


Figura 2.1: Grafo com 8 vértices e 14 arestas.

A *ordem* de um grafo $G = (V, E)$ é o número de vértices de G , denotado por $|V|$, e o *tamanho* de G é a cardinalidade do conjunto de arestas, cujo a notação $|E|$. Se o grafo

G não possui arestas dizemos que G é um *grafo vazio*. No caso em que V é um conjunto unitário e $E = \emptyset$, G é denominado de *grafo trivial*.

Seja o grafo $G = (V, E)$ e $u, v \in V$, diz que u é *adjacente* v se $e = uv \in E$. Neste caso, dizemos que e incide em u e em v . O vértice $u \in V$ é *universal* se é adjacente a todos os outros vértices de V . O *grafo complementar* de $G = (V, E)$, denotado por \overline{G} , é o grafo em que $V(\overline{G}) = V(G)$ e dois vértices que são adjacentes em \overline{G} , não são adjacentes em G . Veja o grafo G e seu complementar exposto na Figura 2.2.

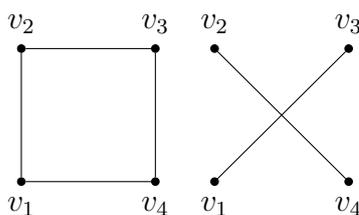


Figura 2.2: Grafo G e o seu complementar \overline{G} .

Dado um grafo $G = (V, E)$, um subconjunto de vértices $M \subset V$ é dito uma *clique*, se dados dois vértices distintos de M , eles são adjacentes em G . Por outro lado, um subconjunto $N \subset V$ é dito *estável* se para quaisquer dois vértices distintos de N , eles não são adjacentes em G . A *vizinhança aberta* de um vértice $v_i \in V$ é o conjunto definido por $N_G(v_i) = \{v_j \in V; v_i \text{ e } v_j \text{ são adjacentes}\}$ e $N_G[v_i] = N_G(v_i) \cup \{v_i\}$ é denominado de *vizinhança fechada*. O *grau de um vértice* $v_i \in V$, denotado por $d(v_i)$, é a cardinalidade de $N_G(v_i)$, ou seja, $d(v_i) = |N_G(v_i)|$. Os *vértices pendentes* são os vértices com grau 1. O *mínimo* e o *máximo* de um grafo G são indicados por $\delta(G) = \min\{d(u_i); u_i \in V\}$ e $\Delta(G) = \max\{d(u_i); u_i \in V\}$, respectivamente. A *sequência de graus* de G , indicado por d_G , é uma n -upla cujas coordenadas, dadas em ordem não crescente, correspondem aos graus dos vértices de G . O Teorema 2.18 relaciona somatório dos graus dos vértices de grafo G com tamanho de G .

Teorema 2.18. *Seja G um grafo de ordem n e tamanho m então*

$$\sum_{i=1}^n d(u_i) = 2m.$$

Demonstração. Para cada $i \in \{1, \dots, n\}$, $d(u_i)$ é o número de arestas que incidem no vértice u_i . Como $d(u_i)$ conta cada aresta duas vezes, uma para cada vez que é incidente a um vértice. □

Corolário 2.5. *O número de vértices com grau ímpar em todo grafo $G = (V, E)$ é par.*

Demonstração. Sejam P o conjunto de todos os vértices de grau par, I o conjunto de todos os vértices de grau ímpar e m o número de arestas de G , portanto, $\sum_{v \in V} d(v) = \sum_{v \in P} d(v) + \sum_{v \in I} d(v) = 2m$. Logo, $\sum_{v \in I} d(v) = 2m - \sum_{v \in P} d(v)$. Como $2m - \sum_{v \in P} d(v)$ é par e a soma das parcelas ímpares é par somente se o número de parcelas for par. Portanto, o número de elementos de I é par. \square

Dados os grafos $H = (V', E')$ e $G = (V, E)$, dizemos que H é *subgrafo* de G se $V' \subseteq V$ e $E' \subseteq E$, neste caso, denotamos $H \subseteq G$. O subgrafo H é um *subgrafo induzido* de G , se dois vértices de H , adjacentes em G , são necessariamente adjacentes em H . Quando todos os vértices de um grafo G possuem grau r diz-se que G é *regular*. O grafo G é *completo* se todo vértice $v \in V$ é adjacente a todos os outros vértices. O grafo completo de ordem n é denotado por K_n . A Figura 2.3 ilustra exemplos de grafos completos.

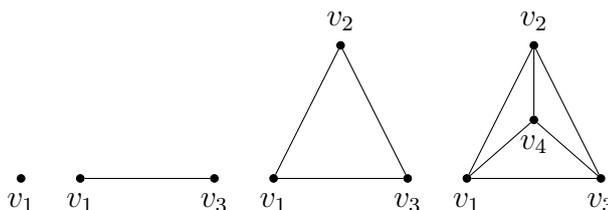


Figura 2.3: Grafos completos K_1 , K_2 , K_3 e K_4 .

O grafo $G = (V, E)$ é designado de grafo *split* se o conjunto de vértices V pode ser particionado em dois conjuntos disjuntos, de modo que um deles é clique e outro é um conjunto estável. O grafo *split* é completo, cuja notação é dada por $CS(n, r)$, quando todos os vértices de clique são adjacentes a todos os vértices de estável, sendo que n e r são as ordens respectivamente dos conjuntos clique e estável. Sejam os grafos $G_1 = (V_1, E_1)$ e $G_2 = (V_2, E_2)$, onde V_1 e V_2 são disjuntos. O grafo $G = (V, E)$, onde $V = V_1 \cup V_2$ e $E = E_1 \cup E_2$ é chamado *união* de G_1 e G_2 e indicado por $G_1 \cup G_2$.

Seja $G = (V, E)$ um grafo. Uma *cadeia* em G é uma sequência de vértices (v_1, v_2, \dots, v_k) tal que $v_i v_{i+1} \in E$, onde $1 \leq i \leq k - 1$. A cadeia é *fechada* se $v_i = v_k$, caso contrário a cadeia é *aberta*. Uma *cadeia simples* é uma cadeia em que $v_i \neq v_j$, para quaisquer $i, j \in \{1, 2, \dots, k\}$. Um *ciclo* é uma cadeia simples e fechada. Por outro lado, um *caminho* é uma cadeia simples e aberta.

Sejam $G = (V, E)$ um grafo e $w = (v_1, v_2, \dots, v_k)$ uma cadeia em G . O *comprimento* de w é a quantidade de suas arestas. O vértice $v_i \in V$ é um vértice *interior* de w se $i \in \{2, 3, 4, \dots, k - 1\}$, caso contrário, dizemos v_i é *extremo*. A *distância* entre os vértices

$v_i, v_j \in E$, denotado por $d(v_i, v_j)$, é o comprimento do menor caminho com extremos v_i e v_j em G . O máximo das distâncias entre dois vértices quaisquer de G é chamado diâmetro de G , que é denotado por $diam(G)$.

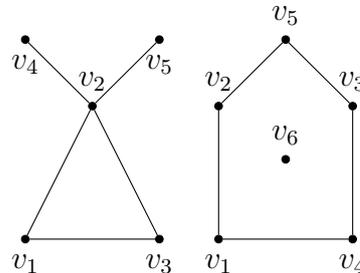


Figura 2.4: Grafos conexo e grafo desconexo.

O grafo G é *conexo* se o grafo possui somente um vértice ou se existe um caminho entre quaisquer par de vértices em G . Caso contrário, G é dito *desconexo*. Indicaremos $diam(G) = \infty$, quando o grafo G for desconexo. Um subgrafo conexo maximal de G é chamado de componente conexa ou simplesmente componente de G . Um grafo G de ordem n é denominado de *ciclo* quando G é regular de grau 2 e conexo, denotado por C_n . Exemplificamos tais grafos na Figura 2.5 a seguir.

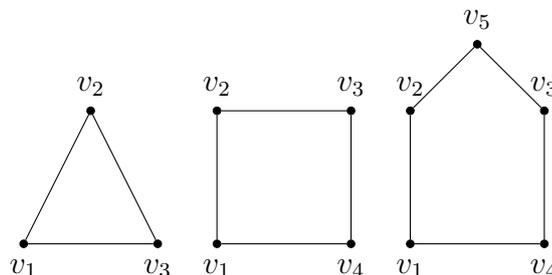


Figura 2.5: Grafos C_3 , C_4 e C_5 .

Seja um grafo $G = (V, E)$. Dizemos que G é um *grafo roda*, cuja notação é W_n , se possuir $n + 1$ vértices que são obtidos acrescentando um vértice ao grafo ciclo C_n , $n \geq 3$, e este novo vértice é adjacente a todos os n vértices de C_n . A Figura 2.6 exibimos dois grafos roda.

Uma *partição* de um conjunto não vazio K é uma coleção \mathcal{P}_m constituída por $m \in \mathbb{N}$ subconjuntos não vazios e dois a dois disjuntos de K cuja união é K . Denominamos os elementos de \mathcal{P}_m por *células*. O grafo $G = (V, E)$ é *k-partido* se V pode ser dividido em $k \in \mathbb{N}$ subconjuntos disjuntos e cada k subconjuntos são não vazios e Y_1, Y_2, \dots, Y_k são os subconjuntos denominados de *partições*, nos quais não há arestas conectando vértices de uma mesma partição. Cujas a notação é $G = G(Y_1, Y_2, \dots, Y_k)$. Quando $k = 2$, o grafo G

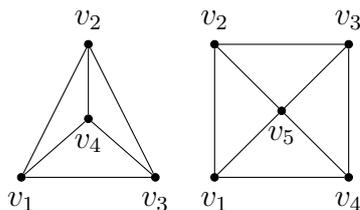


Figura 2.6: Grafos roda W_4 e W_5 .

é denominado *bipartido*. Um grafo G é denominado de *bipartido completo* se cada vértice do subconjunto Y_1 está ligado a todos os vértices do subconjunto Y_2 . O grafo bipartido completo que contenha m vértices no subconjunto Y_1 e n vértices no subconjunto Y_2 é denotado por $K_{m,n}$. Na Figura 2.7, exibimos o grafo bipartido completo $K_{3,4}$.

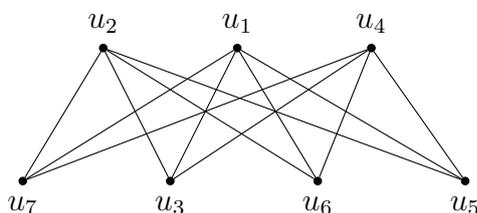


Figura 2.7: Grafo bipartido completo $K_{3,4}$.

Os grafos G e H , são *isomorfos* se existe uma bijeção $f : V(G) \rightarrow V(H)$ tal que quaisquer dois vértices $u, v \in V(G)$ são adjacentes em G se e somente se $f(u)$ e $f(v)$ são adjacentes em H , $G \simeq H$ é notação para grafos isomorfos. Grafos isomorfos têm o mesmo número de vértices, arestas, ciclos e grau.

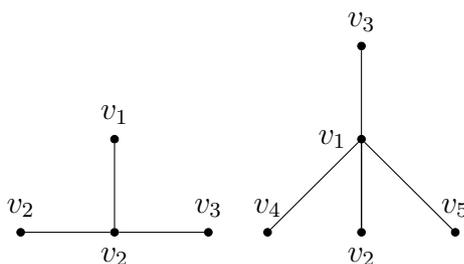
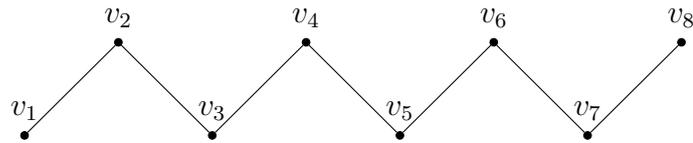


Figura 2.8: Estrela S_4 e S_5 .

Uma *árvore* é um grafo conexo que não possui ciclos. Em particular, tais vértices são denominados *folhas* nas árvores. Uma árvore de ordem n , com $n - 1$ folhas e um vértice de grau $n - 1$ é denominada estrela e é denotada por S_n . A Figura 2.8 exhibe as estrelas S_4 e S_5 . O grafo *caminho* P_n é uma árvore de ordem maior ou igual a dois vértices com exatamente dois vértices pendentos e os demais de grau dois. A Figura 2.9 ilustra o caminho P_8 .

Figura 2.9: Caminho P_8 .

Um *emparelhamento* é um subgrafo de $G = (V, E)$ no qual o conjunto de arestas deste subgrafo não existem duas arestas adjacentes de G . Um emparelhamento é *perfeito* se todo vértice do grafo é incidente a apenas uma aresta do grafo. O emparelhamento perfeito é a união de grafos K_2 que será denotado por tK_2 , onde t é a quantidade de grafos K_2 na união. A Figura 2.10 ilustra um emparelhamento perfeito de ordem 8.

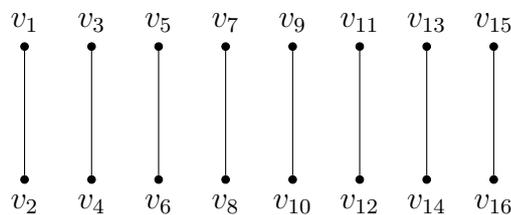
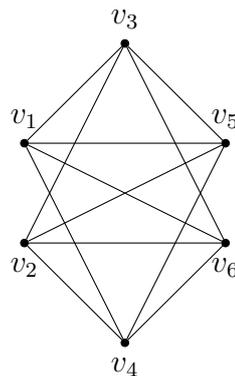


Figura 2.10: Emparelhamento perfeito.

O grafo G é denominado de *hiperoctaedro* ou *cocktail party*, cuja a notação é dado por $CP(n)$, se G é o grafo complementar de um emparelhamento perfeito. Na Figura 2.11 exibimos um hiperoctaedro $CP(3)$.

Figura 2.11: Grafo *cocktail party*.

2.3 Teoria Espectral de Grafos

A Teoria Espectral de Grafos aplica álgebra linear para resolver problemas da Teoria de Grafos. Esta seção tem como objetivo fazer uma introdução dos conceitos e resultados

relacionados a Teoria Espectral de Grafos. Para maiores detalhes sugerimos a leitura das seguintes referências: [2], [4], [6], [8], [11], [12], [16] e [18].

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

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } v_i \text{ e } v_j \text{ são adjacentes;} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Para ajudar na compreensão, também podemos denotar as entradas de $A(G)$ por $[A(G)]_{ij}$ ou $[A(G)]_{v_i v_j}$, onde $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$ e v_i e v_j são vértices do grafo G . A matriz de adjacência permite explicitar algumas propriedades de um grafo sem a necessidade de utilizar sua representação gráfica para esta finalidade.

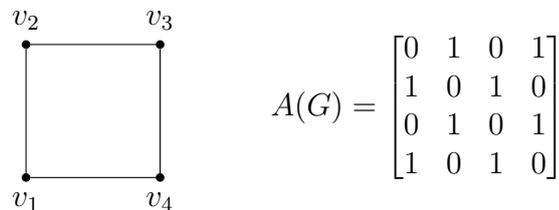


Figura 2.12: Matriz de adjacência.

A matriz $A(G)$ é uma matriz real e simétrica e portanto, os seus autovalores são reais, denotado por λ_i , $i \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, e dados em ordem não crescente. Observe que o traço da matriz adjacência é nulo, portanto, o somatório de seus autovalores é igual a zero. A proposição a seguir determina o grau dos vértices de grafo G em função da sua matriz adjacência. As demonstrações das Proposições 2.4, 2.5, 2.6, 2.7 e 2.8 podem ser encontradas nas seguintes referências [2] e [18].

Proposição 2.4. *Dado um grafo G , a soma dos elementos de cada linha da sua matriz de adjacência é igual ao grau do vértice correspondente.*

O resultado seguinte exhibe a relação entre as matrizes adjacências de um grafo G e \overline{G} .

Proposição 2.5. *Se \overline{G} é o grafo complementar do grafo G de ordem n então a sua matriz de adjacência é $A(\overline{G}) = J - I - A(G)$, onde I é matriz identidade e J é matriz quadrada cujo as entradas são iguais a 1.*

Demonstração. Seja $A(G)$ a matriz adjacência de $G = (V, E)$. Como as entradas da

matriz adjacência de $\overline{G} = (\overline{V}, \overline{E})$ é definido por

$$\overline{a}_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{se } (v_i \text{ e } v_j \text{ são adjacentes}) \wedge (v_i v_j \in E); \\ 1, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Note que a soma de $A(G) + A(\overline{G}) = [a_{ij} + \overline{a}_{ij}] = [c_{ij}]$ é dado por

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

Logo, $(A(G) + A(\overline{G})) + I = J$, onde I é matriz identidade. Portanto, $A(\overline{G}) = J - I - A(G)$. \square

Dado um grafo $G = (V, E)$, o *polinômio característico de G* é o polinômio característico da matriz de adjacência de G , isto é, $p_{A(G)}(x) = \det(A(G) - xI)$. As raízes de $p_{A(G)}(x)$ são chamados *autovalores de G* . O multiconjunto constituído pelos autovalores de G é denominado *espectro de G* e é denotado por $\sigma(G)$. Dois grafos que têm o mesmo espectro são chamados de *grafos coespectrais* e o maior autovalor de G é denominado de *índice do grafo G* , cuja a notação é $ind(G)$. O grafo G da Figura 2.12 tem como polinômio característico dado por $p_{A(G)}(x) = x^2(x^2 - 4)$, $\sigma(A(G)) = \{-2, 0, 0, 2\}$ e $ind(G) = 2$. A Proposição 2.6 mostra como encontrar os coeficientes do polinômio característico de um grafo G a partir do tamanho e número de ciclos de G .

Proposição 2.6. *Seja $G = (V, E)$ um grafo com n vértices de m arestas e sejam a_1, a_2, \dots, a_n os coeficientes do polinômio característico de $A(G)$.*

$$p_{A(G)}(x) = x^n + a_1x^{n-1} + a_2x^{n-2} + \dots + a_{n-1}x + a_n.$$

Então, $a_1 = 0$, $a_2 = -m$ e $a_3 = -2t$, onde t é o número de ciclos de comprimento 3 em G .

Demonstração. Seja G um grafo com n vértices e m arestas e sejam a_1, a_2, \dots, a_n os coeficientes do polinômio característico de $A(G)$. Por [24], a soma dos menores principais de $A(G)$ com i linhas e i colunas é igual a $(-1)^i a_i$, para cada $i \in \{1, 2, \dots, n\}$. Como todos os elementos da diagonal de $A(G)$ são iguais a 0, todos os menores principais de $A(G)$ com 1 linha e 1 coluna são iguais a 0. Portanto, $a_1 = 0$. Como $A(G)$ é simétrica,

qualquer menor principal de $A(G)$ com 2 linhas e 2 colunas é

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} = 0 \quad \text{ou} \quad \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = -1.$$

Note que o menor não nulo corresponde a submatriz no qual temos um par de vértices adjacentes, ou seja, para cada par deste, temos um menor principal igual a -1 . Assim, $(-1)^2 a_2 = (-1)|E(G)| = -m$. Agora, analisaremos os possíveis menores principais de $A(G)$, são eles:

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = 0, \quad \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = 0 \quad e \quad \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 2.$$

Note que a única possibilidade não nula corresponde a submatriz no qual temos três vértices mutuamente adjacentes, ou seja, para cada ciclo de comprimento 3 temos um menor principal igual a 2. Portanto, $(-1)^3 a_3 = 2t$ implica que $a_3 = 2t$, onde t é o número de ciclos de comprimento 3 em G . \square

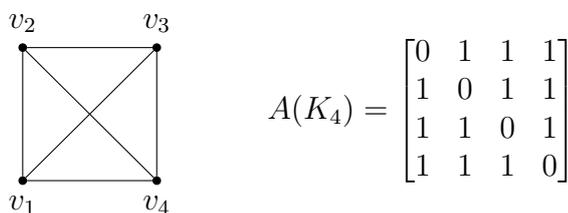


Figura 2.13: Matriz de adjacência $A(K_4)$.

O grafo completo K_4 ilustrado na Figura 2.13 tem 6 arestas e 2 ciclos de comprimento 3. Aplicando a Proposição 2.6, K_4 tem como polinômio característico $p_{A(K_4)}(x) = x^4 - 6x^2 - 8x - 3$. A Proposição 2.7 determina o número de cadeias de um grafo $G = (V, E)$ em função da cardinalidade de V .

Proposição 2.7. *Dado um grafo G , o número de cadeias de comprimento l ligando o vértice v_i ao vértice v_j em G é dado pela (i, j) -ésima entrada da matriz $A(G)^l$.*

Demonstração. Provaremos por indução sobre l . Para $l = 1$, é imediato, pois se existe um cadeia de comprimento $l = 1$ ligando o vértice v_i ao v_j em G , então a (i, j) -ésima entrada de $A(G)$ é igual a 1. Esta cadeia é única e é dada pela aresta $v_i v_j$. Agora, suponha que o resultado vale para um certo $l = k$. Note que o número de cadeias de comprimento $k + 1$ ligando o vértice v_i ao vértice v_j em G é o mesmo número de cadeias de comprimento k

ligando o vértice v_i à algum vértice v_h adjacente ao vértice v_j em G . Assim, o número de cadeias é dado por

$$\sum_{v_h v_j \in E(G)} [A(G)^{k+1}]_{ih} = \sum_{h=1}^n [A(G)^k]_{ih} [A(G)]_{hj} = [A(G)^{k+1}]_{ij}.$$

Portanto, o número de cadeias de comprimento $k + 1$ ligando o vértice v_i ao vértice v_j em G é igual a (i, j) -ésima entrada de $A(G)^k$, $[A(G)^{k+1}]_{ij}$. \square

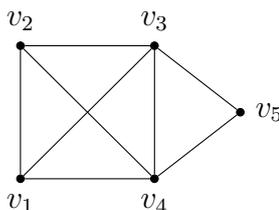


Figura 2.14: O grafo G_2 .

Seja o grafo G_2 da Figura 2.14, o número de cadeias de comprimento 4 entre quaisquer dois vértices de G_2 é dado pela seguinte matriz

$$A(G_2)^4 = \begin{bmatrix} 25 & 24 & 26 & 26 & 18 \\ 24 & 25 & 26 & 26 & 18 \\ 26 & 26 & 34 & 33 & 17 \\ 26 & 26 & 33 & 34 & 17 \\ 18 & 18 & 17 & 17 & 14 \end{bmatrix}.$$

Proposição 2.8. *Se i é um vértice de um grafo G então o número de cadeias de comprimento 2 que começa no vértice i é a soma dos graus dos seus vizinhos, isto é, $d_2(i) = \sum_{j \in N_G(i)} d(j)$.*

Os próximos resultados permite obter o número de cadeias fechados de um grafo G em função dos seus autovalores.

Teorema 2.19. *Seja G um grafo com n vértices e m arestas e sejam $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ autovalores de $A(G)$. Se T_k é o número de cadeias fechadas de comprimento k em G então, $T_k = \text{tr}(A^k) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k$.*

Demonstração. Como A é uma matriz simétrica, então A é diagonalizada. Note que o número de cadeias fechadas de comprimento k em G é determinado a partir do traço de $A(G)^k$. Pelo Teorema 2.14 temos $A^k = Q^T D^k Q$, onde Q é uma matriz ortogonal e D é uma matriz diagonal cujos elementos são os autovalores de A . Assim,

$$\begin{aligned}
tr(A^k) &= \sum_{i=1}^n a_{ii}^k \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n q_{ji}^T \lambda_i^k q_{ji} \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i^k q_{ji}^T q_{ji} \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i^k (q_{ji}^{-1} q_{ji}).
\end{aligned}$$

$$\text{Mas, } q_{ji}^{-1} q_{ji} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}, \text{ onde } i, j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}.$$

Logo,

$$\begin{aligned}
tr(A^k) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i^k (q_{ji}^{-1} q_{ji}) \\
&= \sum_{i=1}^n \lambda_i^k 1 \\
&= \sum_{i=1}^n \lambda_i^k.
\end{aligned}$$

□

Corolário 2.6. *Seja G um grafo com n vértices e m arestas e sejam $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ os autovalores de $A(G)$. Então,*

- (i) $T_2 = tr(A(G)^2) = \sum_i^n \lambda_i^2 = 2m$;
- (ii) Se G é r -regular, $T_2 = tr(A(G)^2) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2m = rn$.

Demonstração. Primeiro vamos provar o item (i). Seja matriz adjacência $A = [a_{ij}]$ do grafo $G = (V, E)$, onde $a_{ii} = 0$, $a_{ij} = 0$ ou 1 para $i \neq j$ e $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$. Agora considere $A^2 = [c_{ij}] \in \mathbb{M}_n$ tal que $c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik} a_{kj}$ para $i, j \in \{1, \dots, n\}$. Em particular, $c_{ii} = \sum_{k=1}^n a_{ik} a_{ki}$ para $i \in \{1, \dots, n\}$. Como A é uma matriz simétrica, então $c_{ii} = \sum_{k=1}^n a_{ik} a_{ki} = \sum_{k=1}^n a_{ik} a_{ik} = \sum_{k=1}^n a_{ik}^2$ para $i \in \{1, \dots, n\}$. Note que $tr(A^2) = \sum_{i=1}^n c_{ii} = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n a_{ik}^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n a_{ik}$, pois, $a_{ij}^2 = a_{ij} = 0$ e $a_{ij}^2 = a_{ij} = 1$ para $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$. Mas, pela Proposição 2.4 temos que $\sum_{k=1}^n a_{ik} = d(v_i)$, onde $d(v_i)$ é grau do vértice $v_i \in V$. Assim, $tr(A^2) = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n a_{ik} = \sum_{i=1}^n d(v_i)$ e pelos Teorema 2.18 e Teorema 2.19 podemos que afirmar que $T_2 = tr(A(G)^2) = \sum_i^n \lambda_i^2 = 2m$.

Agora vamos provar o item (ii). Por hipótese $G = (V, E)$ é r -regular, isto é, $d(v_i) = r$ para qualquer $v_i \in V$. Pelo item (i) do Corolário 2.6 temos $T_2 = \text{tr}(A(G)^2) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2m$. Mas, pelo Teorema 2.18 podemos afirmar $\sum_{i=1}^n d(v_i) = rn = 2m$, onde $v_i \in V$. Logo, $T_2 = \text{tr}(A(G)^2) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2m = rn$. \square

Corolário 2.7. *Seja G um grafo com n vértices e m arestas e sejam λ_1, λ_2 autovalores de $A(G)$. Então, $T_3 = \text{tr}(A(G)^3) = 6t$, onde t é o número de ciclos de comprimento três em G .*

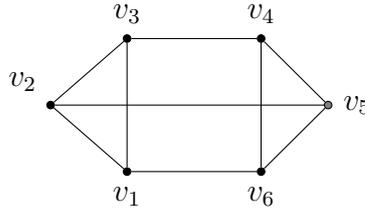


Figura 2.15: Grafo 3-regular.

Podemos verificar o Teorema 2.19 e o Corolário 2.6 para o grafo G da Figura 2.15, como as matrizes $A(G)$ e $A(G)^2$ são representados respectivamente por

$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad e \quad A(G)^2 = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 1 & 2 & 2 & 0 \\ 1 & 3 & 1 & 2 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 3 & 0 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 0 & 3 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 2 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 2 & 2 & 1 & 1 & 3 \end{bmatrix},$$

e, os seus autovalores são $\sigma(A(G)) = \{-3, 0, 0, 0, 0, 3\}$. Logo,

- (i) $T_1 = \sum_{i=1}^6 \lambda_i = 3 + (-3) = 0$;
- (ii) $\text{tr}(A(G)^2) = 18$ e $T_2 = (3)^2 + (-3)^2 = 18$;
- (iii) $2m = 2 \times 9 = 18 = T_2$;
- (iv) $rn = 3 \times 6 = 18 = T_2$.

A Proposição 2.8 mostra que o polinômio característico da união dos grafos é igual ao produto dos polinômios característicos de cada grafo da união. A demonstração da Proposição 2.9 e do Corolário 2.8 podem ser encontradas nas seguintes referências [2] e [4].

Proposição 2.9. *Se o grafo G é a união de dois grafos G_1 e G_2 então $p_G(\lambda) = p_{G_1}(\lambda)p_{G_2}(\lambda)$.*

Corolário 2.8. *Se G_1, \dots, G_r são as componentes conexas de um grafo $G = G_1 \cup \dots \cup G_r$, então $p_G(\lambda) = p_{G_1}(\lambda)p_{G_2}(\lambda) \dots p_{G_r}(\lambda)$.*

As Proposições 2.10, 2.11 e 2.12 mostram a relação entre um grafo regular G e seus autovalores.

Proposição 2.10. *Seja G um grafo regular de grau r , então k é um autovalor de G .*

Demonstração. Seja o vetor coluna $j = [1 \ 1 \ \dots \ 1]^T$. Como a soma das entradas de cada linha da matriz de adjacência $A(G)$ de G é k , o grau de cada vértice, temos que $Aj = kj$. Portanto, k é um autovalor de G . \square

Proposição 2.11. *Seja G um grafo regular de grau r , então para todos os autovalores λ de G temos que $|\lambda| \leq r$.*

Proposição 2.12. *Seja G um regular grafo k -regular com n vértices e autovalores $k, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n$. Então os autovalores de \overline{G} são $n - k - 1, -1 - \lambda_2, -1 - \lambda_3, \dots, -1 - \lambda_n$, respectivamente, associados aos mesmos autovetores de G .*

Demonstração. Seja $\{j, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$ uma base ortogonal de autovetores de $A(G)$ associados, respectivamente, aos autovalores $k, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. Como $A(G)j = kj$ e pela Proposição 2.5 temos que $A(\overline{G}) = J - I - A(G)$. Então

$$A(\overline{G})j = (J - I - A(G))j = (n - k - 1)j,$$

e portanto, j é autovetor de \overline{G} associado ao autovalor $n - k - 1$. Além disso, para cada $i, 2 \leq i \leq n$,

$$A(\overline{G})\mathbf{v}_i = (J - I - A(G))\mathbf{v}_i = -\mathbf{v}_i - \lambda_i\mathbf{v}_i = (-1 - \lambda_i)\mathbf{v}_i,$$

de onde segue que \mathbf{v}_i é autovetor de \overline{G} associado ao autovalor $-1 - \lambda_i$. \square

Considere o grafo G da Figura 2.15. Como $p_G(\lambda) = \lambda^6 - 9\lambda^4$ e os autovalores $\lambda_1 = 3, \lambda_2 = 0, \lambda_3 = 0, \lambda_4 = 0, \lambda_5 = 0$ e $\lambda_6 = -3$. Pela Proposição 2.12, obtemos os seguintes autovalores do complementar deste grafo que são: $\overline{\lambda}_1 = n - k - 1 = 2, \overline{\lambda}_2 = -1 - \lambda_n = 2, \overline{\lambda}_3 = -1 - \lambda_{n-1} = -1, \overline{\lambda}_4 = -1 - \lambda_{n-2} = -1, \overline{\lambda}_5 = -1 - \lambda_{n-3} = -1$ e $\overline{\lambda}_6 = -1 - \lambda_{n-4} = -1$. Para averiguar o resultado anteriormente, podemos recorrer a matriz de adjacência do

complementar do grafo G que é dada por

$$A(\overline{G}) = J - I - A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

O polinômio característico do complementar \overline{G} é dado por

$$p_{\overline{G}}(\overline{\lambda}) = (\overline{\lambda})^6 - 6(\overline{\lambda})^4 - 4(\overline{\lambda})^3 + 9(\overline{\lambda})^2 + 12\overline{\lambda} + 4,$$

sendo que seus autovalores são: $\overline{\lambda}_1 = 2$, $\overline{\lambda}_2 = 2$, $\overline{\lambda}_3 = -1$, $\overline{\lambda}_4 = -1$, $\overline{\lambda}_5 = -1$ e $\overline{\lambda}_6 = -1$.

Os próximos resultados relacionam os grafos conexos e desconexos com seus os autovalores e autovetores.

Teorema 2.20 (CVETKOVIĆ [12]). *Um grafo G é conexo se e somente se o índice de G é um autovalor simples, cujo autovetor correspondente possui todas as coordenadas positivas.*

Corolário 2.9 (CVETKOVIĆ [12]). *Seja G um grafo desconexo. O índice de G possui um autovetor correspondente com coordenadas não negativas.*

Demonstração. Seja G um grafo desconexo com índice $\lambda_1(G)$. Pelo Corolário 2.8, $\lambda_1(G)$ é um autovalor de uma componente C de G . Pelo Teorema 2.20, existe um autovetor \mathbf{u} de C com todas as coordenadas positivas associado a $\lambda_1(G)$. O vetor \mathbf{v} que possui as mesmas coordenadas de \mathbf{u} nas entradas correspondentes aos vértices de C e coordenadas nulas em caso contrário, é um autovetor de G associado a $\lambda_1(G)$. Logo, o índice de G possui um autovetor com todas as entradas não negativas. \square

Proposição 2.13 (CVETKOVIĆ [12]). *Um grafo G possui um único autovalor se e somente se G é um grafo sem arestas.*

Demonstração. Seja G um grafo de ordem n e matriz de adjacência A . Suponha que G possui um único autovalor λ , associado ao autovetor \mathbf{v} . Pelo Corolário 2.19, temos

$$T = \text{tr}(A) = n\lambda = 0.$$

Pelo item (i) do Corolário 2.6, temos que

$$\lambda^2 = 2m = 0.$$

Logo, $m = 0$.

Reciprocamente, suponha que G é um grafo sem arestas. Neste caso, sua matriz de adjacência possui todas entradas nulas. Logo, $\lambda = 0$ é o único autovalor de G . \square

O Teorema 2.21 afirma que os grafos bipartidos possuem espectro simétrico em relação à origem. Além disso, cada autovalor e seu simétrico têm a mesma multiplicidade.

Teorema 2.21 (CVETKOVIĆ [12]). *Se G é um grafo bipartido e λ é um autovalor de G , então $-\lambda$ é um autovalor de G com a mesma multiplicidade.*

Demonstração. Dado $G = (V, E)$ um grafo bipartido cujo conjunto de vértices de G é particionado em dois subconjuntos V_1 e V_2 , com $|V_1| = n_1$, $|V_2| = n_2$ e $V_1 \cap V_2 = \emptyset$. Se primeiro rotulamos os vértices de V_1 e depois os de V_2 , obtemos a seguinte matriz adjacência

$$A(G) = \begin{bmatrix} 0_{n_1 \times n_2} & B \\ B^T & 0_{n_2 \times n_1} \end{bmatrix},$$

onde B é matriz $n_1 \times n_2$. Seja λ um autovalor de G associado ao autovetor $\mathbf{x} = [x_1 \dots x_{n_1} y_1 \dots y_{n_2}]^T$. Assim,

$$\begin{bmatrix} \lambda x_1 & \dots & \lambda x_{n_1} & \lambda y_1 & \dots & \lambda y_{n_2} \end{bmatrix}^T = A(G)\mathbf{x} = \begin{bmatrix} B \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_{n_2} \end{bmatrix} \\ B^T \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{n_1} \end{bmatrix} \end{bmatrix}. \quad (2.2)$$

Vamos agora mostrar, que $-\lambda$ é o autovalor de G , exibindo um dos seus autovetores associados. Dado o vetor $\bar{\mathbf{x}} = [x_1 \dots x_{n_1} -y_1 \dots -y_{n_2}]^T$, da equação em (4.2),

$$\begin{aligned} A(G)\bar{\mathbf{x}} &= \begin{bmatrix} B \begin{bmatrix} -y_1 \\ \vdots \\ -y_{n_2} \end{bmatrix} \\ B^T \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{n_1} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -\lambda x_1 & \dots & -\lambda x_{n_1} & y_1 & \dots & y_{n_2} \end{bmatrix}^T \\ &= -\lambda \bar{\mathbf{x}}^T. \end{aligned}$$

Logo, $-\lambda$ é um autovalor de $A(G)$.

Além disso, para o autovetor $\mathbf{x} = [x_1 \dots x_{n_1} y_1 \dots y_{n_2}]^T$ com algum $y_i \neq 0$, obtemos um autovetor $\bar{\mathbf{x}} = [x_1 \dots x_{n_1} -y_1 \dots -y_{n_2}]^T$ linearmente independente, garantindo que os autovalores λ e $-\lambda$ possuem mesma multiplicidade. Se existirem autovetores da

forma $\mathbf{x} = [x_1 \dots x_{n_1} y_1 \dots y_{n_2}]^T$ com $y_i = 0$ para todo i , estes devem ser autovetores associados ao autovalor igual a zero. \square

Proposição 2.14 (CVETKOVIĆ [12]). *Se G é um grafo conexo, então $A(G)$ tem, no mínimo, $\text{diam}(G) + 1$ autovalores distintos.*

Demonstração. Seja G um grafo conexo de ordem n e sejam $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ os distintos autovalores de $A(G)$. Sabemos que a matriz de adjacência de um grafo simples é uma matriz simétrica e real, portanto o seu polinômio mínimo tem grau k , isto é

$$(A(G) - \lambda_1 I_n)(A(G) - \lambda_2 I_n) \dots (A(G) - \lambda_k I_n) = 0.$$

Com isto concluímos que $A(G)^k$ é uma combinação linear de $I_n, A(G), A(G)^2, \dots, A(G)^{k-1}$. Suponhamos agora que $k < \text{diam}(G)$ e tomemos u e v dois vértices de G tais que $d(u, v) = k$. Como $d(v, u) = k$, o número de cadeias de comprimento menor que k entre v e u é nulo, então, pela Proposição 2.7, $[A(G)^i]_{vu} = 0$, para todo $i \in \{0, 1, \dots, k-1\}$, o que é uma contradição, pois $A(G)^k$ é combinação linear de $I_n, A(G), A(G)^2, \dots, A(G)^{k-1}$. Portanto, $k \geq \text{diam}(G) + 1$. \square

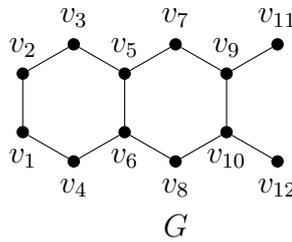


Figura 2.16: $\text{diam}(G) + 1 = 7$, G possui 12 autovalores distintos

Se G é o grafo sem arestas com n vértices então $P_G(\lambda) = \lambda^n$ e, portanto, temos que o espectro de G é 0 com multiplicidade n . As Proposições seguintes mostram os espectros dos grafos completos e bipartidos completos. As demonstrações da Proposição 2.15 e da Proposição 2.16 podem ser encontrados nas seguintes referências [2] e [4].

Proposição 2.15. *Seja G um grafo completo K_n , então, os autovalores de K_n são $\lambda_1 = n - 1$ e $\lambda_2 = -1$ com as respectivas multiplicidades 1 e $n - 1$.*

Proposição 2.16. *O espectro de um grafo bipartido completo $K_{m,n}$ é $\{\lambda, 0, 0, \dots, 0, -\lambda\}$, sendo que $\lambda = \sqrt{mn}$.*

Dado G um grafo com n vértices, sejam v_i e v_j vértices distintos de G . Dizemos que v_i e v_j são *vértices gêmeos* quando $N_G(v_i) - \{v_j\} = N_G(v_j) - \{v_i\}$, o que implica $d(v_i) = d(v_j)$.

Seja $G = (V, E)$ um grafo com n vértices. Como $d_k(i)$ é o número de cadeias do grafo G de comprimento k que começam no vértice i e para todo $i \in V$, temos que $d_0(i) = 1$, $d_1(i) = d(i)$ e $d_{k+1}(i) = \sum_{j \in N_G(i)} d_k(j)$ para todo inteiro $k \geq 0$. A *matriz cadeia* de um grafo $G = (V, E)$ de ordem igual a n é a matriz $W = [w_{ij}] \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ tal que $w_{ij} = d_{j-1}(i)$. De acordo com a Proposição 2.7, a matriz cadeia de um grafo G pode ser escrita da seguinte maneira:

$$W(G) = \begin{bmatrix} J & A & A^2 & J & \dots & A^{n-1} & J \end{bmatrix}.$$

Exemplo 2.1. A matriz cadeia do grafo G , exibido na Figura 2.16, é dada a seguir:

$$W(G) = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 & 47 & 109 & 258 & 607 & 1438 & 3399 & 8053 \\ 1 & 2 & 4 & 9 & 20 & 47 & 109 & 258 & 607 & 1438 & 3399 & 8053 \\ 1 & 2 & 5 & 11 & 27 & 62 & 149 & 349 & 831 & 1961 & 4654 & 11012 \\ 1 & 2 & 5 & 11 & 27 & 62 & 149 & 349 & 831 & 1961 & 4654 & 11012 \\ 1 & 3 & 7 & 18 & 42 & 102 & 240 & 573 & 1354 & 3216 & 7613 & 18054 \\ 1 & 3 & 7 & 18 & 42 & 102 & 240 & 573 & 1354 & 3216 & 7613 & 18054 \\ 1 & 2 & 6 & 13 & 33 & 76 & 184 & 432 & 1031 & 2436 & 5787 & 13702 \\ 1 & 2 & 6 & 13 & 33 & 76 & 184 & 432 & 1031 & 2436 & 5787 & 13702 \\ 1 & 3 & 6 & 15 & 34 & 82 & 192 & 458 & 1082 & 2571 & 6089 & 14447 \\ 1 & 3 & 6 & 15 & 34 & 82 & 192 & 458 & 1082 & 2571 & 6089 & 14447 \\ 1 & 1 & 3 & 6 & 15 & 34 & 82 & 192 & 458 & 1082 & 2571 & 6089 \\ 1 & 1 & 3 & 6 & 15 & 34 & 82 & 192 & 458 & 1082 & 2571 & 6089 \end{bmatrix}. \quad (2.3)$$

Para explicar a construção da matriz cadeia do grafo G (Figura 2.17), vamos analisar as entradas w_{22} e w_{33} de G . As cadeias de comprimento 1 que começam no vértice v_2 são: v_2v_1 e v_2v_3 , temos que $w_{22} = d_1(2) = 2$. Já as cadeias de comprimento 2 que começam no vértice v_3 são: $v_3v_2v_3$, $v_3v_2v_1$, $v_3v_5v_3$, $v_3v_5v_6$ e $v_3v_5v_7$, conseqüentemente, $w_{33} = d_2(3) = 5$.

Uma *partição equilibrada* $\pi = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$ de $G = (V, E)$ é uma partição de V com a seguinte propriedade: dadas duas células, V_i e V_j de π , existe uma constante q_{ij} , tal que cada vértice $v \in V_i$ tem exatamente q_{ij} vizinhos em V_j . A matriz $Q(\pi) = [q_{ij}] \in M_k(\mathbb{R})$ é denominada *matriz quociente* de G com respeito a partição π .

Teorema 2.22 (SCHWENK [35]). *Seja G um grafo com uma partição equilibrada $\pi = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$. Dado $i \in \{1, 2, \dots, r\}$, os vértices da célula V_i possuem grau $d_{ii} + \sum_{t=1}^r d_{it}$.*

Todo grafo G possui pelo menos uma partição equilibrada, suas células são subconjuntos unitários de vértices disjuntos dois a dois. Denominamos tal partição de *partição equilibrada simples*. Ilustramos na figura a seguir tal definição.

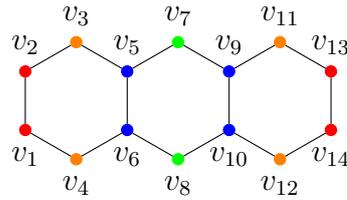


Figura 2.17: Partição equilibrada $\pi = \{V_1, V_2, V_3, V_4\}$.

Uma partição equilibrada para o grafo exibido na Figura 2.17 é $\pi = \{V_1, V_2, V_3, V_4\}$, onde $V_1 = \{v_1, v_2, v_{13}, v_{14}\}$, $V_2 = \{v_3, v_4, v_{11}, v_{12}\}$, $V_3 = \{v_5, v_6, v_9, v_{10}\}$ e $V_4 = \{v_7, v_8\}$. Como $d_{11} = 1$, $d_{12} = 1$, $d_{13} = 0$, $d_{14} = 0$, $d_{21} = 1$, $d_{22} = 0$, $d_{23} = 1$, $d_{24} = 0$, $d_{31} = 0$, $d_{32} = 1$, $d_{33} = 1$, $d_{34} = 1$, $d_{41} = 0$, $d_{42} = 0$, $d_{43} = 2$ e $d_{44} = 0$, cuja matriz quociente de π é

$$Q(\pi) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}.$$

O Teorema 2.23 estabelece que $\sigma(G/\pi) \subseteq \sigma(G)$, onde G/π é o grafo quociente G em relação a partição π .

Teorema 2.23 (FINCK e SACHS [15]). *Se π é uma partição equilibrada de um grafo G , então o polinômio característico da matriz de adjacência do grafo quociente G/π divide o polinômio característico de G .*

Capítulo 3

Autovalores principais

Neste capítulo, abordaremos o tema autovalores principais e demonstraremos os principais teoremas relacionados a este assunto. Foram utilizadas no desenvolvimento deste capítulo as seguintes referências [9], [10], [11], [16], [22], [25], [26], [27] e [34].

3.1 Resultados iniciais

Sejam $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ os autovalores distintos de um grafo G de ordem n e seja P_i a projeção ortogonal de \mathbb{R}^n sobre o autoespaço $E(\lambda_i)$ com respeito a base canônica de \mathbb{R}^n . Pelo Corolário 2.3, a matriz de adjacência A de G possui a decomposição espectral

$$A = \lambda_1 P_1 + \lambda_2 P_2 + \dots + \lambda_m P_m.$$

Dado $i \in \{1, 2, \dots, m\}$, se $\{\mathbf{x}_{i1}, \dots, \mathbf{x}_{id_i}\}$ é uma base ortonormal para $E(\lambda_i)$ então $P_i = \sum_{\ell=1}^{d_i} \mathbf{x}_{i\ell} \mathbf{x}_{i\ell}^T$ e as matrizes P_1, P_2, \dots, P_m são simétricas, idempotentes e mutuamente ortogonais. Assim, $A^k = (\lambda_1)^k P_1 + (\lambda_2)^k P_2 + \dots + (\lambda_m)^k P_m$ para $k \geq 0$. Então,

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

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

Pela equação 3.1, o número de cadeias de comprimento k no grafo G depende dos autovalores λ_i tais que $\|P_i j\|^2 \neq 0$, onde $i \in \{1, 2, \dots, m\}$. Em vista disto, Cvetković [9] definiu um *autovalor principal de G* como um autovalor λ_i para o qual $\|P_i j\|^2 \neq 0$, ou seja, λ é um autovalor principal de G se existe um autovetor \mathbf{x} associado a λ que não é ortogonal a j . Caso contrário, dizemos que λ é um *autovalor não principal de G* . Note que na contagem dos autovalores principais de um grafo são considerados somente aqueles que

são distintos. O subconjunto do $\text{Spec}(G)$ formado pelos autovalores principais distintos de G é chamado *espectro principal de G* e denotado por $\text{MainSpec}(G)$. Dado um grafo G com n autovalores principais, chamamos de polinômio característico principal de G como sendo o polinômio mônico cujas raízes são os autovalores principais de G , definido da seguinte maneira

$$M(G, x) = \prod_{i=1}^n (x - \lambda_i) = x^n - c_0 x^{n-1} - c_1 x^{n-2} - \cdots - c_{n-2} x - c_{n-1},$$

onde $c_p \in \mathbb{R}$ para todo $p \in \{0, 1, \dots, n-1\}$.

A Proposição 3.1 afirma que o maior autovalor de um grafo G pertence ao espectro principal de G .

Proposição 3.1 (CVETKOVIĆ [9]). *O índice de um grafo G pertence a $\text{MainSpec}(G)$.*

Demonstração. Se G é um grafo conexo então pelo Teorema 2.20 temos que o autovetor \mathbf{v}_1 correspondente ao índice λ_1 não é ortogonal a j , pois, o autovetor \mathbf{v}_1 possui todas as suas coordenadas positivas. Logo, o índice de todo grafo conexo é um autovalor principal. No caso do grafo G ser desconexo, basta observar que seu espectro pode ser determinado pela união dos espectros de suas componentes conexas. \square

O próximo resultado afirma que os grafos regulares são os únicos grafos em que o seu espectro principal é conjunto unitário.

Teorema 3.1 (CVETKOVIĆ [11]). *Um grafo é regular se e somente se possui um único autovalor principal.*

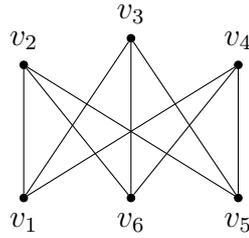
Demonstração. Seja G um grafo de ordem n que possui k autovalores distintos. O conjunto dos autovalores distintos de G é $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k\}$ tal que λ_1 é o índice de G . Pela Proposição 2.10 temos que o G é regular se e somente se $j \in E_G(\lambda_1)$. Então,

$$j \in (E_G(\lambda_2) \oplus E_G(\lambda_3) \oplus \cdots \oplus E_G(\lambda_k))^\perp.$$

Portanto, o grafo G é regular se e somente se possui um único autovalor principal. \square

A Figura 3.1 mostra o grafo bipartido completo $K_{3,3}$. Como $K_{3,3}$ é um grafo regular de grau 3, podemos aplicar o Teorema 3.1 para determinar o número de autovalores principais de $K_{3,3}$. Assim, o grafo $K_{3,3}$ tem apenas um autovalor principal.

Proposição 3.2 (CVETKOVIĆ [11]). *Se G é um grafo com n autovalores principais distintos então os coeficientes c_p de $M(G, x) = \prod_{i=1}^n (x - \lambda_i) = x^n - c_0 x^{n-1} - c_1 x^{n-2} - \cdots - c_{n-2} x - c_{n-1}$ são números inteiros, para todo $p \in \{0, 1, \dots, n-1\}$.*

Figura 3.1: Grafo $K_{3,3}$.

HAGOS [22], em seu artigo, mostrou que existe uma relação entre o número de autovalores principais e o posto da matriz cadeia de um grafo G . Este fato, será aplicado no próximo capítulo para encontrar o espectro principal dos grafos benzenóides.

Teorema 3.2 (HAGOS [22]). *O posto da matriz cadeia de um grafo G é igual ao número de seus autovalores principais.*

Demonstração. Sejam $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_m$ autovetores ortonormais correspondentes aos autovalores principais $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ de G tais que $j^T \mathbf{x}_i > 0$ ($i = 1, \dots, m$). Podemos então expressar j como uma combinação linear $j = \sum_{i=1}^m c_i \mathbf{x}_i$. Para $j \geq 0$ temos que $A^j j = \sum_{i=1}^m c_i \lambda_i^j \mathbf{x}_i$. Assim, $\text{Span}(j, A j, A^2 j, \dots, A^{n-1} j) \subseteq \text{Span}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_m)$ e o $\text{rank}(W(G)) \leq m$.

Para terminar a demonstração, vamos mostrar que $\text{rank}(W(G)) \geq m$ provando que $j, A j, \dots, A^{n-1} j$ são vetores linearmente independentes. Seja c_1, \dots, c_m constantes e suponha que $\sum_{l=1}^m c_l A^{l-1} j = 0$. Tomando o produto escalar desta equação com \mathbf{x}_i , $i = 1, \dots, m$, e notando que $j^T \mathbf{x}_i \neq 0$, obtemos,

$$\sum_{l=1}^m c_l \lambda_i^{l-1} = 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (3.2)$$

Como os autovalores principais são distintos, a matriz $m \times m$ de coeficientes com (i, l) entrada igual a λ_i^{l-1} é uma matriz de Vandermonde não singular. Assim, a equação (3.2) implica $c_l = 0$ para $l = 1, \dots, m$. Portanto, $j, A j, \dots, A^{m-1} j$ são vetores linearmente independentes. \square

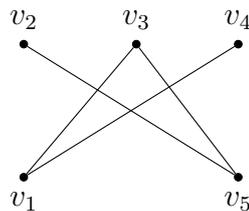


Figura 3.2: Grafo bipartido.

Considere o grafo bipartido $G(Y_1, Y_2)$ da Figura 3.2, onde $Y_1 = \{v_2, v_3, v_4\}$ e $Y_2 = \{v_1, v_5\}$. Queremos determinar o número de autovalores principais de $G(Y_1, Y_2)$. Sejam a matriz cadeia $W(G(Y_1, Y_2))$ e a matriz equivalente $S_{G(Y_1, Y_2)}$ representadas respectivamente por

$$W(G(Y_1, Y_2)) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 3 & 6 \\ 1 & 2 & 3 & 6 & 9 \\ 1 & 2 & 4 & 6 & 12 \\ 1 & 1 & 2 & 3 & 6 \\ 1 & 2 & 3 & 6 & 9 \end{bmatrix} \quad e \quad S_{G(Y_1, Y_2)} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 3 & 6 \\ 0 & 1 & 1 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Logo, o posto da matriz cadeia de $G(Y_1, Y_2)$ é igual a 3. Do Teorema 3.2, o grafo $G(Y_1, Y_2)$ possui três autovalores principais.

Lema 3.1 (HAGOS [22]). *Se $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ são os autovalores principais de G e $P = \prod_{i=1}^m (A - \lambda_i I)$, então $Pj_n = \mathbf{0}$.*

Demonstração. Para $i = 1, \dots, m$ temos \mathbf{x}_i o autovetor correspondente ao autovalor principal λ_i . Podemos escrever j_n como uma combinação linear $j_n = \sum_{i=1}^m c_i \mathbf{x}_i$. Então,

$$\begin{aligned} Pj_n &= \left(\prod_{k=1}^m (A - \lambda_k I) \right) \sum_{i=1}^m c_i \mathbf{x}_i \\ Pj_n &= \left(\prod_{k=1}^m (A - \lambda_k I) \right) c_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \left(\prod_{k=1}^m (A - \lambda_k I) \right) c_m \mathbf{x}_m \\ Pj_n &= c_1 \left(\prod_{k=1}^{m-1} (A - \lambda_k I) \right) (A - \lambda_m I) \mathbf{x}_1 + \dots + c_m \left(\prod_{k=1}^{m-1} (A - \lambda_k I) \right) (A - \lambda_m I) \mathbf{x}_m \\ Pj_n &= c_1 \left(\prod_{k=1}^{m-1} (A - \lambda_k I) \right) (A \mathbf{x}_1 - \lambda_m I \mathbf{x}_1) + \dots + c_m \left(\prod_{k=1}^{m-1} (A - \lambda_k I) \right) (A \mathbf{x}_m - \lambda_m I \mathbf{x}_m) \\ Pj_n &= c_1 \left(\prod_{k=1}^{m-1} (A - \lambda_k I) \right) (\lambda_1 \mathbf{x}_1 - \lambda_m \mathbf{x}_1) + \dots + c_m \left(\prod_{k=1}^{m-1} (A - \lambda_k I) \right) (\lambda_m \mathbf{x}_m - \lambda_m \mathbf{x}_m) \\ Pj_n &= c_1 \left(\prod_{k=1}^{m-1} (A - \lambda_k I) \right) (\lambda_1 - \lambda_m) \mathbf{x}_1 + \dots + c_m \left(\prod_{k=1}^{m-1} (A - \lambda_k I) \right) (\lambda_m - \lambda_m) \mathbf{x}_m \\ Pj_n &= c_1 (\lambda_1 - \lambda_m) \left(\prod_{k=1}^{m-1} (A - \lambda_k I) \right) \mathbf{x}_1 + \dots + c_m (\lambda_m - \lambda_m) \left(\prod_{k=1}^{m-1} (A - \lambda_k I) \right) \mathbf{x}_m \\ Pj_n &= c_1 [(\lambda_1 - \lambda_m) \dots (\lambda_1 - \lambda_1)] \mathbf{x}_1 + \dots + c_m [(\lambda_m - \lambda_m) \dots (\lambda_1 - \lambda_m)] \mathbf{x}_m \\ Pj_n &= c_1 \mathbf{0} \mathbf{x}_1 + \dots + c_m \mathbf{0} \mathbf{x}_m \\ Pj_n &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

□

A Proposição 3.3, o Teorema 3.4 e o Corolário 3.1 estabelecem relações entre o espectro principal do grafo G e de seu grafo complementar \bar{G} .

Proposição 3.3 (CVETKOVIĆ [10]). *Um grafo G e o seu complementar \overline{G} possuem o mesmo número de autovalores principais.*

Teorema 3.3 (CVETKOVIĆ [10]). *Se λ é um autovalor principal de um grafo G então $-1 - \lambda$ é um autovalor não principal de \overline{G} .*

Corolário 3.1 (HAGOS [22]). *Se λ é um autovalor simples e principal de um grafo G então $-1 - \lambda$ não pertence ao espectro do complementar de G .*

O próximo resultado pode ser encontrado nas seguintes referências bibliográficas [10] e [22].

Teorema 3.4. *Seja G um grafo de ordem n e $\lambda \in \sigma(G)$. As seguintes afirmações são equivalentes:*

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

Demonstração. Seja o grafo $G = (V, E)$, onde $|V| = n$, e λ um autovalor de G .

(i) \implies (ii): Se λ é um autovalor não principal então pela definição de autovalores principais temos que o item (ii) é verdadeiro. No caso do λ ser um autovalor principal que possui multiplicidade algébrica maior do que um então existem ao menos dois autovetores linearmente independentes associados a λ , digamos, \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 . No caso de um dos autovetores \mathbf{v}_1 ou \mathbf{v}_2 ser ortogonal ao vetor j então obtemos o resultado esperado. Em caso contrário, o vetor $\mathbf{v}_3 = \mathbf{v}_1 - \frac{(j^T \mathbf{v}_1)}{(j^T \mathbf{v}_2)} \mathbf{v}_2$, que também é um autovetor de λ visto que é combinação linear de \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 . Assim,

$$j^T \mathbf{v}_3 = j^T \left(\mathbf{v}_1 - \frac{(j^T \mathbf{v}_1)}{(j^T \mathbf{v}_2)} \mathbf{v}_2 \right) = j^T \mathbf{v}_1 - \frac{(j^T \mathbf{v}_1)}{(j^T \mathbf{v}_2)} (j^T \mathbf{v}_2) = 0.$$

Logo, o vetor \mathbf{v}_3 é ortogonal ao vetor j , provando o item (ii).

(ii) \implies (iii): Seja λ o autovetor \mathbf{v}_1 tal que $j^T \mathbf{v}_1 = 0$. Como $A(\overline{G}) = J - I - A(G)$ segue que $J\mathbf{v}_1 = (A(\overline{G}) + A(G) + I)\mathbf{v}_1 = A(\overline{G})\mathbf{v}_1 + A(G)\mathbf{v}_1 + I\mathbf{v}_1 = A(\overline{G})\mathbf{v}_1 + \lambda\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_1 = A(\overline{G})\mathbf{v}_1 + (1 + \lambda)\mathbf{v}_1$. Mas, $J\mathbf{v}_1 = \mathbf{0}$, então $A(\overline{G})\mathbf{v}_1 = (-1 - \lambda)\mathbf{v}_1$. Portanto, $-1 - \lambda$ é um autovalor de \overline{G} .

(iii) \implies (i): Se $-1 - \lambda$ é um autovalor do grafo \overline{G} então, pelo Corolário 3.1, λ é autovalor não principal de G ou λ é autovalor principal com multiplicidade algébrica maior do que 1.

□

Proposição 3.4 (ROWLINSON [34]). *Se os autovalores principais de G são λ e $-\lambda$ então G é um grafo bipartido e λ é o seu índice.*

3.2 Grafos com exatamente k autovalores principais

Nesta seção, apresentamos alguns resultados da literatura relacionado a dois autovalores principais e a 2-cadeia (a, b) -linear de um grafo. Para maiores detalhes sugerimos [1, 3, 17, 22, 26, 27, 34, 36] e suas referências.

O Teorema 3.5 fornece um critério que permite determinar quando o grafo G possui exatamente dois autovalores principais.

Teorema 3.5 (HAGOS [22]). *Sejam u e v dois vértices de um grafo G com graus diferentes $d(u)$ e $d(v)$, respectivamente. Se $S(x)$ denota a soma dos graus dos vértices adjacentes a x ,*

$$a = \frac{S(u) - S(v)}{d(u) - d(v)} \quad e \quad b = \frac{d(v)S(u) - d(u)S(v)}{d(u) - d(v)},$$

então G tem exatamente dois autovalores principais se e somente se $A^2j - aA_j + bj = 0$.

Demonstração. Suponha que $A^2j - aA_j + bj = 0$. Assim, $A^2j = aA_j + (-b)j$ com $a, b \in \mathbb{R}$. Logo o conjunto $\{j, A_j, A^2j\}$ é linearmente dependente. A partir do Teorema 3.2 podemos afirmar que $rank(W(G)) \leq 2$. Assim, o $rank(W(G)) = 1$ ou $rank(W(G)) = 2$. Por hipótese u, v são vértices de um grafo G com $d(u) \neq d(v)$. Logo, G não é um grafo regular e, portanto, do Teorema 3.2, G possui dois autovalores principais.

Por outro lado, se G tem exatamente dois autovalores principais, λ_1 e λ_2 , do Lema 3.1 temos

$$\begin{aligned} P_j = 0 &\Leftrightarrow \left(\prod_{i=1}^2 (A - \lambda_i I) \right) j = 0 \\ &\Leftrightarrow [(A - \lambda_1 I)(A - \lambda_2 I)]j = 0 \\ &\Leftrightarrow A^2j - (\lambda_1 + \lambda_2)A_j + \lambda_1\lambda_2j = 0. \end{aligned}$$

Como as componentes dos vetores A^2j e A_j são $S(w)$ e $d(w)$, para w variando em $V(G)$, para qualquer par de vértices u e v com graus diferentes, obtemos

$$S(u) - (\lambda_1 + \lambda_2)d(u) + \lambda_1\lambda_2 = 0; \tag{3.3}$$

$$S(v) - (\lambda_1 + \lambda_2)d(v) + \lambda_1\lambda_2 = 0. \tag{3.4}$$

Subtraindo a equação (3.4) da equação (3.3), obtemos

$$\lambda_1 + \lambda_2 = \frac{S(u) - S(v)}{d(u) - d(v)}. \quad (3.5)$$

Das equações (3.3) e (3.5), obtemos

$$\begin{aligned} \lambda_1 \lambda_2 &= d(u) \frac{(S(u) - S(v))}{d(u) - d(v)} - S(u) \\ &= \frac{d(v)S(u) - d(u)S(v)}{d(u) - d(v)}, \end{aligned}$$

o que completa a demonstração. \square

Corolário 3.2 (HAGOS [22]). *Se G é um grafo com exatamente dois autovalores principais, λ_1 e λ_2 , então*

$$\lambda_1 = \frac{a + \sqrt{a^2 - 4b}}{2} \quad e \quad \lambda_2 = \frac{a - \sqrt{a^2 - 4b}}{2},$$

onde a e b são dados no Teorema 3.5.

Demonstração. Seja G um grafo com exatamente dois autovalores principais, digamos λ_1 e λ_2 . Do Teorema 3.5, $a = \lambda_1 + \lambda_2$ e $b = \lambda_1 \lambda_2$. Logo, λ_1 e λ_2 são as raízes da equação $x^2 - ax + b = 0$ e, portanto, obtemos o resultado. \square

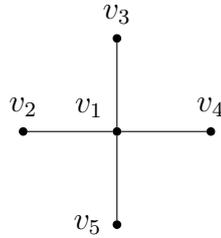


Figura 3.3: Estrela S_5 .

Dado o grafo da Figura 3.3. O grafo estrela S_5 tem exatamente dois autovalores principais. De fato, pelo Teorema 3.5, temos que

$$a = \frac{S(v_1) - S(v_5)}{d(v_1) - d(v_5)} = \frac{4 - 4}{4 - 1} = 0 \quad e \quad b = \frac{d(v_5)S(v_1) - d(v_1)S(v_5)}{d(v_1) - d(v_5)} = \frac{4 - 16}{4 - 1} = \frac{-12}{3} = -4.$$

Logo, $A^2j - 4j = 0$ e portanto, S_5 tem apenas dois autovalores principais. A partir do Corolário 3.2, temos

$$\lambda_1 = \frac{a + \sqrt{a^2 - 4b}}{2} = 2 \quad e \quad \lambda_2 = \frac{a - \sqrt{a^2 - 4b}}{2} = -2.$$

Os autovalores de S_5 são $\lambda_1 = 2$ e $\lambda_2 = -2$.

Teorema 3.6 (HAGOS [22]). *Sejam $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ os autovalores principais de G . Para $i = 1, \dots, m$, seja $P_i = I$ se $m = 1$ e $P_i = \prod_{j=1, j \neq i}^m (A - \lambda_j I)$ caso contrário. Então $P_{i,j} / \|P_{i,j}\|$ é um autovetor unitário correspondente a λ_i .*

Demonstração. Fixemos $i \in \{1, 2, \dots, s\}$. Pelo Lema 3.1, $(A - \lambda_i I)P_{i,j} = 0$. Só temos que mostrar que $P_{i,j} \neq 0$. Como $P_{i,j}$ é uma combinação linear dos vetores linearmente independentes $j, Aj, \dots, A^{s-1}j$ e G possui exatamente m autovalores principais temos que pelo menos um dos coeficientes na combinação linear é diferente de zero. \square

Dado um grafo G com exatamente dois autovalores principais, o Teorema 3.7 permite encontrar os autovetores associados a estes autovalores.

Teorema 3.7 (HAGOS [22]). *Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Se G tem exatamente dois autovalores principais λ_1 e λ_2 então*

$$\mathbf{v}_1 = \frac{d_G - \lambda_2 j}{\sqrt{(\lambda_1 - \lambda_2)(2m - n\lambda_2)}} \text{ e } \mathbf{v}_2 = \frac{d_G - \lambda_1 j}{\sqrt{(\lambda_2 - \lambda_1)(2m - n\lambda_1)}},$$

são autovetores normalizados associados a λ_1 e λ_2 , respectivamente, sendo que d_G é o vetor dos graus do grafo G .

Demonstração. Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Suponhamos que G possua exatamente dois autovalores principais λ_1 e λ_2 . Do Teorema 3.6, $P_{1,j} = (A - \lambda_2 I)j$ e $P_{2,j} = (A - \lambda_1 I)j$ são autovetores associados aos autovalores principais λ_1 e λ_2 , respectivamente. Por outro lado, $Aj = d_G$, então podemos reescrever esses autovetores como $P_{1,j} = d_G - \lambda_2 j$ e $P_{2,j} = d_G - \lambda_1 j$.

A norma de $P_{1,j}$ é $\|P_{1,j}\| = \sqrt{(P_{1,j})^T P_{1,j}}$. Temos:

$$\begin{aligned} (P_{1,j})^T P_{1,j} &= j^T (A - \lambda_2 I)^T (A - \lambda_2 I) j \\ (P_{1,j})^T P_{1,j} &= j^T (A(A - \lambda_2 I)j - \lambda_2 (A - \lambda_2 I)j). \end{aligned}$$

Como $AP_{1,j} = \lambda_1 P_{1,j}$ segue que $A(A - \lambda_2 I)j = \lambda_1 (A - \lambda_2 I)j$. Deste modo,

$$\begin{aligned} \|P_{1,j}\| &= \sqrt{j^T (\lambda_1 (A - \lambda_2 I)j - \lambda_2 (A - \lambda_2 I)j)} \\ \|P_{1,j}\| &= \sqrt{(\lambda_1 - \lambda_2) j^T (A - \lambda_2 I)j}. \end{aligned}$$

Por outro lado, $j^T Aj = \sum_{i \in V} d(i) = 2m$ e $j^T j = n$. Portanto, $\mathbf{v}_1 = \frac{d_G - \lambda_2 j}{\sqrt{(\lambda_1 - \lambda_2)(2m - n\lambda_2)}}$ é um autovetor associado a λ_1 .

De modo análogo, mostramos que $\mathbf{v}_2 = \frac{d_G - \lambda_1 j}{\sqrt{(\lambda_2 - \lambda_1)(2m - n\lambda_1)}}$ é um autovetor associado a λ_2 . \square

Considere o grafo $G = (V, E)$, dizemos que G é uma 2-cadeia (a, b) -linear se existem $a, b \in \mathbb{Q}$ tais que $d_2(v) = ad(v) + b$ para todo vértice $v \in V$.

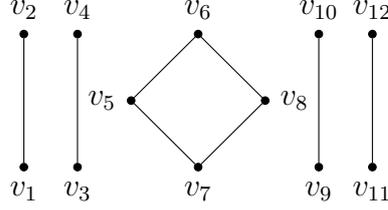


Figura 3.4: G é um grafo 2-cadeia $(3, -2)$ -linear.

O grafo $G = (V, E)$ da Figura 3.4 é um grafo 2-cadeia $(3, -2)$ -linear, pois $d_2(v) = 3d(v) - 2$ para $\forall v \in V$, lembrando que $d_2(v_5) = \sum_{v \in N_G(v_5)} d(v) = d(v_6) + d(v_7) = 2 + 2 = 3 \cdot 2 - 2 = 4$, $d_2(v_6) = d_2(v_7) = d_2(v_8) = 3 \cdot 2 - 2 = 4$ e $d_2(v_1) = d_2(v_2) = d_2(v_3) = d_2(v_4) = d_2(v_9) = d_2(v_{10}) = d_2(v_{11}) = d_2(v_{12}) = 3 \cdot 1 - 2 = 1$.

O Teorema 3.8 mostra a relação entre autovalores principais e o grafo 2-cadeia $(3, -2)$ -linear.

Teorema 3.8 (HOU e TIAN [26]). *Um grafo $G = (V, E)$ tem exatamente dois autovalores principais se e somente se existem a e b racionais tais que G é um grafo 2-cadeia (a, b) -linear. Além disso, os dois autovalores principais de G são $\lambda_1 = \frac{a + \sqrt{a^2 + 4b}}{2}$ e $\lambda_2 = \frac{a - \sqrt{a^2 + 4b}}{2}$.*

Demonstração. Suponhamos que G possua exatamente dois autovalores principais distintos λ_1 e λ_2 . Pelo Teorema 3.5, existem únicos a e b não simultaneamente nulos tais que $A^2j - aAj - bj = 0$. Assim, $\sum_{v \in N_G(u)} d(v) - ad(u) - b = 0$ para todo $u \in V$, ou seja, $d_2(u) = ad(u) + b$ para todo $u \in V$. Logo, G é um grafo 2-cadeia (a, b) -linear. Agora, suponhamos que G seja um grafo 2-cadeia (a, b) -linear, onde a e b são racionais. Temos $d_2(u) = ad(u) + b$ para todo $u \in V$. Pela Proposição 2.8, $ad(u) + b = \sum_{v \in N_G(u)} d(v)$ para todo $u \in V$, ou seja,

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

Desse modo,

$$A^2j - aAj - bj = 0, \tag{3.6}$$

e, portanto, o posto da matriz cadeia de G é menor ou igual a 2. Do Teorema 3.2, G possui no máximo dois autovalores principais. Como não é um grafo regular segue que G possui exatamente dois autovalores principais. Sejam λ_1 e λ_2 os autovalores principais

distintos de G . Do Lema 3.1, temos

$$A^2j - (\lambda_1 + \lambda_2)A_j + (\lambda_1\lambda_2)j = 0. \quad (3.7)$$

Igualando as equações (3.6) e (3.7), obtemos $\{a - (\lambda_1 + \lambda_2)\}A_j + \{b + (\lambda_1\lambda_2)\}j = 0$. Pelo Teorema 3.1, o posto da matriz cadeia de G é 2. Assim, as colunas j e A_j de W são linearmente independentes e, portanto, $\lambda_1 + \lambda_2 = a$ e $\lambda_1\lambda_2 = -b$. \square

Proposição 3.5 (HOU e TIAN [26]). *Se G é um grafo 2-cadeia (a, b) -linear então a e b são inteiros.*

Demonstração. Por hipótese G é um grafo 2-cadeia (a, b) -linear, então, G tem dois autovalores principais, λ_1 e λ_2 . Pela Proposição 3.2, $M(G, x) = (x - \lambda_1)(x - \lambda_2)$ é um polinômio inteiro e, portanto, a e b devem ser números inteiros. \square

Teorema 3.9 (HOU e TIAN [26]). *Se G é um grafo conexo 2-cadeia (a, b) -linear então a é um número inteiro não negativo.*

Demonstração. Como grafo G é um grafo 2-cadeia (a, b) -linear segue, do Teorema 3.8, que o grafo G possui dois autovalores principais distintos $\lambda_1 > \lambda_2$ tais que $a = \lambda_1 + \lambda_2$ e $-b = \lambda_1\lambda_2$. O Teorema 3.5 garante que a é um número inteiro. Basta somente provar que $a \geq 0$. Da Proposição 3.1 temos que λ_1 é o índice de G . Pelo Teorema 2.8 e como G é um grafo conexo segue que $\lambda_1 \geq |\lambda_2|$. Portanto, $a \geq 0$. \square

Proposição 3.6 (HOU e TIAN [26]). *Seja $G = (V, E)$ um grafo conexo 2-cadeia (a, b) -linear. Se $d(u) = 1$ para algum $u \in V$ então $d(v) = a + b$ para todo $v \in N_G(u)$.*

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

O Teorema seguinte diz que a cardinalidade do espectro principal é igual ao posto da matriz cadeia de Q , onde Q é matriz quociente de uma partição equilibrada $\pi(G)$.

Teorema 3.10 (HUANG [27]). *Sejam $\pi(G)$ e Q uma partição equilibrada de um grafo G e a matriz quociente de G com respeito a $\pi(G)$, respectivamente. Então o número de autovalores principais de G é igual ao posto da matriz $W(Q)$.*

Capítulo 4

Aplicação em Grafos Químicos

4.1 Grafos Benzenoides

Os hidrocarbonetos benzenoides formam uma importante classe da química orgânica e que possui diversas aplicações, principalmente como matéria-prima para fabricação de uma variedade de produtos. Os hidrocarbonetos benzenoides são bastante utilizados como solvente, devido a sua capacidade de dissolver uma diversidade de substâncias orgânicas. Além disso, os hidrocarbonetos benzenoides estão presentes em vários medicamentos, resinas e outros produtos químicos.

Segundo [20], no ano de 1825 foi descoberto o composto básico dos hidrocarbonetos benzenoides, denominado benzeno. O benzeno é um composto que possui seis átomos de carbono, ligados entre si com duplas ligações alternadas, formando um hexágono e tendo ligado a cada um deles um átomo de hidrogênio, ou seja, sua fórmula molecular é dada por C_6H_6 . A Figura 4.1 exibe a molécula do benzeno.

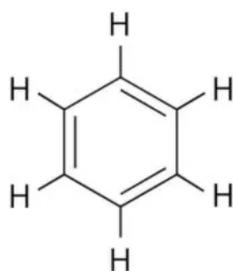


Figura 4.1: Molécula de Benzeno.

Fonte: <https://mundoeducacao.uol.com.br/quimica/benzeno.htm>

A modelagem das moléculas (orgânica ou inorgânica) utilizando a Teoria dos Grafos, onde os vértices representam átomos e arestas as ligações químicas entre átomos, é de-

nominado de *grafo químico*. De acordo com Gutman [20], existem algumas maneiras de representar as moléculas químicas utilizando a Teoria de Grafos, dentre dessas maneiras temos a *skeleton graph* e a *complete graph*.

Na modelagem *skeleton graph* para moléculas orgânicas considera os átomos de carbonos como vértices e as ligações (simples, duplas e triplas) representam apenas uma aresta. Nesta modelagem são desconsiderados todos os átomos que não seja o átomo de carbono. Note que na modelagem *skeleton graph* o grafo que representa a molécula orgânica é um grafo simples. Na Figura 4.2 temos o grafo químico da molécula de benzeno (Figura 4.1) aplicando a modelagem *skeleton graph*.

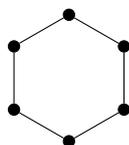


Figura 4.2: Grafo químico da molécula de benzeno.

De acordo com [20], os *grafos benzenoides* são redes obtidas pelo arranjo de hexágonos regulares congruentes no plano de modo que dois hexágonos são disjuntos ou possuem uma aresta em comum. Na Figura 4.3 temos alguns exemplos de grafos benzenoides.

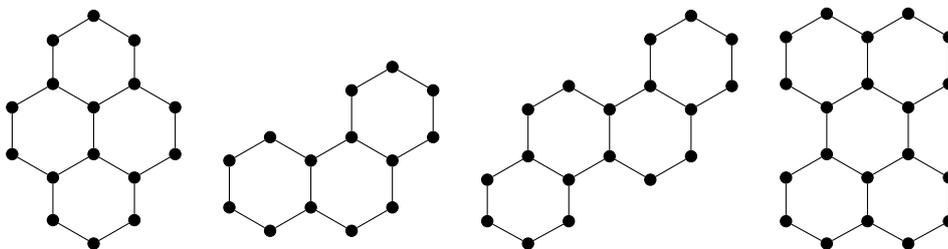


Figura 4.3: Grafos benzenoides.

Denominam-se *arestas internas* dos grafos benzenoides as arestas compartilhadas por dois hexágonos. As *arestas externas* são arestas que pertencentes a um único hexágono. Na Figura 4.4 temos como arestas internas $V_i = \{v_3v_8\}$ e arestas externas $V_e = \{v_1v_6, v_1v_2, v_2v_3, v_3v_4, v_4v_5, v_5v_{10}, v_{10}v_9, v_9v_8, v_8v_7, v_7v_6\}$.

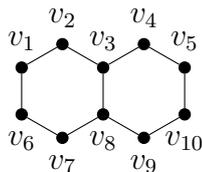


Figura 4.4: Faixa benzenoide F_2 .

Chamamos de *perímetro* de grafo benzenoide como sendo um ciclo formado pelas arestas externas. Por fim, *vértices externos* são os vértices do perímetro, enquanto *vértices internos* são todos os vértices que não são externos. A Proposição a seguir permite determinar o número de vértices e arestas de um grafo benzenoide em função do número de hexágonos.

Proposição 4.1 (GUTMAN [21]). *Seja G um grafo benzenoide de ordem n com m arestas. Se h é o número de hexágonos de G , n_i é o número de vértices internos de G , n_2 e n_3 o número de vértices de grau dois e três em G , respectivamente, então*

- (i) $n = 4h + 2 - n_i$;
- (ii) $m = 5h + 1 - n_i$;
- (iii) $n_2 = 2h + 4 - n_i$;
- (iv) $n_3 = 2h - 2$.

Na Figura 4.3 temos alguns exemplos de subclasses de grafos benzenoides e dentre essas subclasses, foi selecionada uma subclasse para estudo. Especificamente, nosso objetivo nas seções seguintes é determinar o espectro e espectro principal destes grafos. Considere a subclasse de grafos benzenoides definida da seguinte maneira

$$\mathcal{F} = \{F_h \mid (h = \text{número de hexágonos}) \wedge (h \geq 1)\}.$$

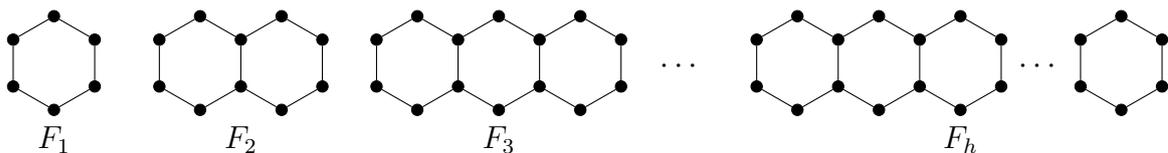


Figura 4.5: Faixas benzenoides.

Os elementos de \mathcal{F} são denominados *faixas benzenoide*. O grafo $F_h \in \mathcal{F}$, para $h > 0$, é um grafo bipartido e não possui nenhum vértice interno. O grau máximo de uma faixa

benzenoide é igual a 3 e o grau mínimo é igual a 2, sendo que vértices ligados por arestas internas têm grau máximo. Por outro lado, vértices ligados por arestas externas têm grau mínimo.

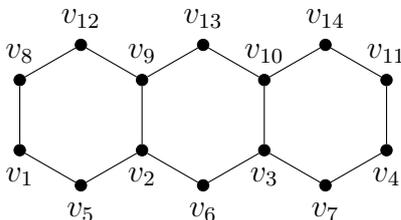


Figura 4.6: Faixa benzenoide F_3 .

Proposição 4.2 (GUTMAN [21]). *Seja $F_h \in \mathcal{F}$ de ordem n , tamanho m e com h hexágonos. Então, $n = 4h + 2$ e $m = 5h + 1$.*

Demonstração. Pelo Teorema 4.1, como $F_h \in \mathcal{F}$ não possui vértices internos segue que $n = 4h + 2 - n_i = (4h + 2) - 0 = 4h + 2$ e $m = 5h + 1 - n_i = (5h + 1) - 0 = 5h + 1$, onde n_i é o número de vértices internos. Portanto, $n = 4h + 2$ e $m = 5h + 1$. \square

4.2 Espectro

Para que possamos analisar o espectro da classe \mathcal{F} temos que primeiramente escolher uma rotulação o grafo $F_h \in \mathcal{F}$. Como o espectro é invariante, isto é, independente da rotulação feita para o grafo $F_h \in \mathcal{F}$ sempre encontramos o mesmo espectro para o grafo F_h . Isto quer dizer que, se alterarmos a rotulação apresentada na Figura 4.7, teremos o mesmo multiconjunto de autovalores. Denotaremos a primeira rotulação utilizada de F_h por L_1 , onde $h \geq 2$, a qual apresentamos na Figura 4.7.

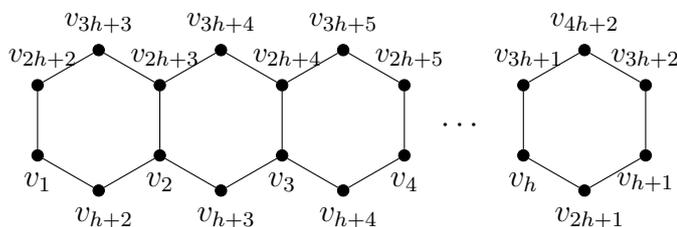


Figura 4.7: Rotulação L_1 de $F_h \in \mathcal{F}$.

A Proposição 4.3 apresenta a matriz de adjacência para uma Faixa benzenoide com rotulação L_1 .

Proposição 4.3. *Dado $h > 1$, se $F_h \in \mathcal{F}$ está com a rotulação L_1 então a matriz de adjacência é dada por*

$$A(F_h) = \begin{bmatrix} 0_{h+1} & C_{(h+1) \times h} & I_{h+1} & 0_{(h+1) \times h} \\ C_{h \times (h+1)}^T & 0_h & 0_{h \times (h+1)} & 0_h \\ I_{h+1} & 0_{(h+1) \times h} & 0_{h+1} & C_{(h+1) \times h} \\ 0_{h \times (h+1)} & 0_h & C_{h \times (h+1)}^T & 0_h \end{bmatrix}, \quad (4.1)$$

onde $C = [c_{ij}] \in \mathbb{M}_{(h+1) \times h}(\mathbb{R})$ tal que $c_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i \in \{j, j+1\}; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$

As Figuras 4.8 e 4.9 exibem os grafos F_3 e F_4 com a rotulação L_1 e suas respectivas matrizes de adjacência.

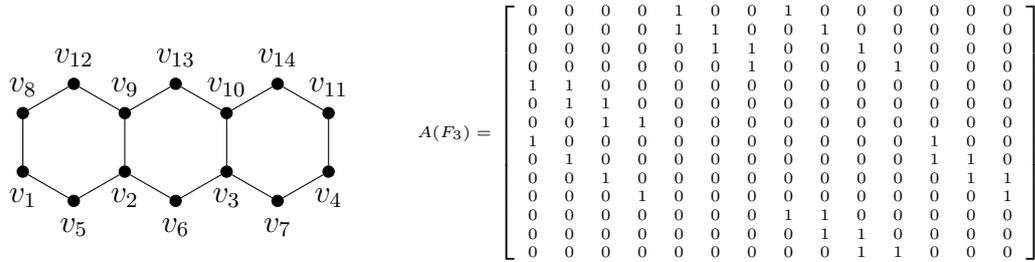


Figura 4.8: Grafo F_3 com a rotulação L_1 .

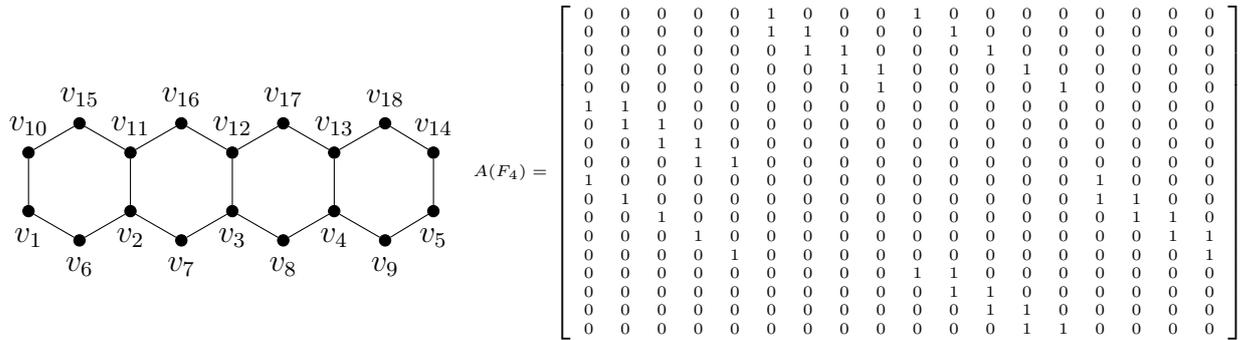


Figura 4.9: Grafo F_4 com a rotulação L_1 .

A Proposição 4.4 explicita o espectro de algumas subclasses de matrizes tridiagonais. A partir dessa proposição podemos demonstrar o Lema 4.1.

Proposição 4.4 (LOSONCZI [29]). *Considere a seguinte matriz tridiagonal de ordem n :*

$$T_n = \begin{bmatrix} b - \alpha & c & 0 & \cdots & 0 \\ a & b & c & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & a & b & c \\ 0 & \cdots & 0 & a & b - \beta \end{bmatrix}.$$

(i) Se $\alpha = \beta = \sqrt{ac} \neq 0$, então $\sigma(T_n) = \left\{ b + 2\sqrt{ac} \cos\left(\frac{j\pi}{n}\right); 1 \leq j \leq n \right\}$.

(ii) Se $\alpha = \beta = 0$, então $\sigma(T_n) = \left\{ b + 2c\sqrt{\frac{a}{c}} \cos\left(\frac{j\pi}{n+1}\right); 1 \leq j \leq n \right\}$.

Lema 4.1. *Seja C a submatriz de $A(F_h)$, definida na Proposição 4.3. Se $E_{h+1} = CC^T \in \mathbb{M}_{h+1}(\mathbb{R})$ e $Z_h = C^TC \in \mathbb{M}_h(\mathbb{R})$, então*

$$\sigma(E_{h+1}) = \left\{ 2 + 2 \cos\left(\frac{j\pi}{h+1}\right); 1 \leq j \leq h+1 \right\} \text{ e } \sigma(Z_h) = \left\{ 2 + 2 \cos\left(\frac{j\pi}{h+1}\right); 1 \leq j \leq h \right\}.$$

Demonstração. De fato, basta notar que as matrizes E_{h+1} e Z_h têm a forma da matriz dada na Proposição 4.4, com $a = c = 1$ e $b = 2$. Para E_{h+1} tem-se $\alpha = \beta = 1$ e para Z_h , $\alpha = \beta = 0$. \square

O Teorema 4.1 determina o espectro de F_h , para cada $F_h \in \mathcal{F}$.

Teorema 4.1. *Para cada inteiro positivo h , o espectro do grafo $F_h \in \mathcal{F}$ é dado por*

$$\sigma(F_h) = \left\{ -1, 1, \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{9 + 8 \cos\left(\frac{j\pi}{h+1}\right)} \right), \frac{1}{2} \left(-1 \pm \sqrt{9 + 8 \cos\left(\frac{j\pi}{h+1}\right)} \right); 1 \leq j \leq h \right\}.$$

Demonstração. Inicialmente, note que a matriz $A(F_h)$, definida na Proposição 4.3, tem a forma

$$A(F_h) = \begin{bmatrix} M & N \\ N & M \end{bmatrix}, \text{ onde } M = \begin{bmatrix} 0_{h+1} & C_{(h+1) \times h} \\ C_{h \times (h+1)}^T & 0_h \end{bmatrix} \text{ e } N = \begin{bmatrix} I_{h+1} & 0_{(h+1) \times h} \\ 0_{h \times (h+1)} & 0_h \end{bmatrix}.$$

Da Proposição 2.3, o espectro de $A(F_h)$ é a união dos espectros das matrizes

$$R_1 = M + N = \begin{bmatrix} I_{h+1} & C_{(h+1) \times h} \\ C_{h \times (h+1)}^T & 0_h \end{bmatrix} \text{ e } R_2 = M - N = \begin{bmatrix} -I_{h+1} & C_{(h+1) \times h} \\ C_{h \times (h+1)}^T & 0_h \end{bmatrix}.$$

Sejam $E_{h+1} = CC^T \in \mathbb{M}_{h+1}(\mathbb{R})$ e $Z_h = C^TC \in \mathbb{M}_h(\mathbb{R})$. Do Lema 4.1, $\det(Z_h) \neq 0$ e da Proposição 2.2, $\det(R_1) = (-1)^h \det(Z_h)$ e $\det(R_2) = (-1)^{h+1} \det(Z_h)$. Portanto, $x = 0$ não é autovalor para R_1 e nem para R_2 . Aplicando a Proposição 2.2 e visto que o determinante de uma matriz simétrica corresponde ao produto de seus autovalores (Proposição 2.16), para $x \neq 0$, obtemos:

$$\begin{aligned}
 p_{R_1}(x) &= \det \begin{bmatrix} (x-1)I_{h+1} & -C_{(h+1) \times h} \\ -C_{h \times (h+1)}^T & xI_h \end{bmatrix} \\
 &= x^h \det \left[(x-1)I_{h+1} - \frac{1}{x}E_{h+1} \right] \\
 &= \frac{1}{x} \det [x(x-1)I_{h+1} - E_{h+1}] \\
 &= \frac{1}{x} \prod_{j=1}^{h+1} (x^2 - x - \mu_j), \tag{4.2}
 \end{aligned}$$

onde $\mu_j = 2 + 2 \cos\left(\frac{j\pi}{h+1}\right)$, $1 \leq j \leq h+1$, é um autovalor de E_{h+1} , pelo Lema 4.1. Como $x \neq 0$, da equação (4.2), temos:

$$\sigma(R_1) = \left\{ 1, \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{9 + 8 \cos\left(\frac{j\pi}{h+1}\right)} \right); 1 \leq j \leq h \right\}.$$

Agora, vamos mostrar para o $\sigma(R_2)$. Aplicando as Proposições 2.2 e 2.16, para $x \neq 0$, obtemos:

$$\begin{aligned}
 p_{R_2}(x) &= \det \begin{bmatrix} -(x-1)I_{h+1} & -C_{(h+1) \times h} \\ -C_{h \times (h+1)}^T & xI_h \end{bmatrix} \\
 &= x^h \det \left[-(x-1)I_{h+1} - \frac{1}{x}E_{h+1} \right] \\
 &= \frac{1}{x} \det [-x(x-1)I_{h+1} - E_{h+1}] \\
 &= \frac{1}{x} \prod_{j=1}^{h+1} (-x^2 + x - u_j), \tag{4.3}
 \end{aligned}$$

onde $\mu_j = 2 + 2 \cos\left(\frac{j\pi}{h+1}\right)$, $1 \leq j \leq h+1$, é um autovalor de E_{h+1} , pelo Lema 4.1.

Como $x \neq 0$ segue da equação (4.3) que

$$\sigma(R_2) = \left\{ -1, \frac{1}{2} \left(-1 \pm \sqrt{9 + 8 \cos\left(\frac{j\pi}{h+1}\right)} \right); 1 \leq j \leq h \right\}.$$

□

Aplicando o Teorema 4.1, obtemos o espectro da Faixa benzenoide da Figura 4.8:

$$\sigma(F_3) = \left\{ -1, 1, \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{9 + 8 \cos \left(\frac{j\pi}{h+1} \right)} \right), \frac{1}{2} \left(-1 \pm \sqrt{9 + 8 \cos \left(\frac{j\pi}{h+1} \right)} \right); 1 \leq j \leq 3 \right\}.$$

4.3 Espectro Principal

Os autovalores principais, como já discutido no texto, contribuem para a contagem do número de cadeias de comprimento k em um grafo. Em 1978, Cvetković propôs o problema de caracterização dos grafos com exatamente $s > 1$ autovalores principais. Tal caracterização permanece em aberto para muitas classes de grafos.

Para que possamos determinar o espectro principal da classe \mathcal{F} temos que utilizar uma nova rotulação para $F_h \in \mathcal{F}$, que será denotada por L_2 . Essa mudança na rotulação foi necessária, devido ao fato da matriz cadeia da matriz quociente (obtida a partir da matriz de adjacência obtida na Proposição 4.3) assumir uma forma muito complexa quando é utilizado a rotulação L_1 . Na Figura 4.10 apresentamos a rotulação L_2 de $F_h \in \mathcal{F}$. Em seguida, exemplificamos na Figura 4.11 as Faixas benzenoides F_3 e F_4 com a rotulação L_2 .

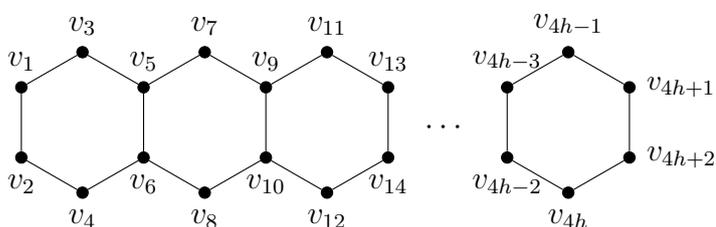


Figura 4.10: Rotulação L_2 de $F_h \in \mathcal{F}$.

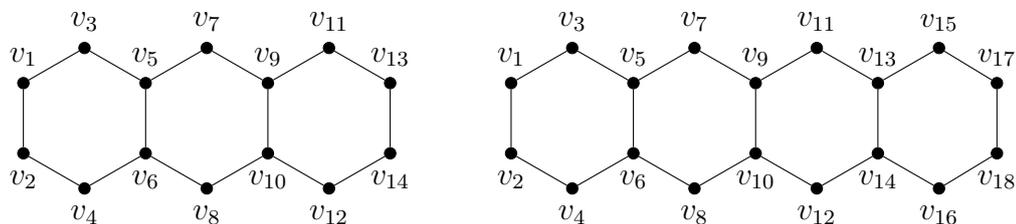


Figura 4.11: Grafos F_3 e F_4 com a rotulação L_2 , respectivamente.

Depois que fixamos a rotulação para determinar o espectro principal de $F_h \in \mathcal{F}$, apresentamos na Definição 4.1 uma partição para F_h .

Definição 4.1. Dado $h > 1$, seja $F_h = (V, E) \in \mathcal{F}$ com a rotulação L_2 . Definimos uma partição $\pi(F_h) = \{V_1, V_2, \dots, V_{h+1}\}$ por

$$V_i = \begin{cases} U_1 \cup \{v_{4h+1}, v_{4h+2}\}, & \text{se } i = 1; \\ U_2 \cup W_0, & \text{se } i = 2; \\ U_i \cup W_{i-2}, & \text{se } 3 \leq i \leq h; \\ U_{h+1}, & \text{se } i = h + 1, \end{cases}$$

onde $U_i = \{v_{2i-1}, v_{2i}\}$ e $W_j = \{v_{4h-2j-1}, v_{4h-2j}\}$ são subconjuntos de V para todo $i \in \{1, 2, \dots, h+1\}$ e $j \in \{0, 1, \dots, h-2\}$.

Lema 4.2. Para $h > 1$, a partição $\pi(F_h)$ da Definição 4.1 é uma partição equilibrada de F_h .

Demonstração. Considere a rotulação da Figura 4.10. Para averiguar se uma partição $\pi(F_h)$ é equilibrada basta considerar duas células V_i e V_j e mostrar que existe uma constante q_{ij} entre a célula V_i e V_j . Vamos analisar os seguintes casos:

Se $i = 1$ e para qualquer $v \in V_j$ temos

$$q_{1,j} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j; \\ 1, & \text{se } j = 2; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Se $i = 2$ e para qualquer $v \in V_j$ temos

$$q_{2,j} = \begin{cases} 1, & \text{se } j = 1; \\ 1, & \text{se } j = 3; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Se h for par e $V_i \in \pi(F_h)$ com $i = h+1$. Para qualquer $v \in V_j$ temos

$$q_{h+1,j} = \begin{cases} 1, & \text{se } j = h+1; \\ 2, & \text{se } j = h; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Se h for ímpar e $V_i \in \pi(F_h)$ com $i = h + 1$. Para qualquer $v \in V_j$ temos

$$q_{h+1,j} = \begin{cases} 2, & \text{se } j = h; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Se $k \in \{1, 2, 3, \dots, h - 2\}$ e $V_i \in \pi(F_h)$ com $i \in \{3, \dots, h\}$. Para qualquer $v \in V_j$ temos

$$q_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{se } (i = 2k + 1) \wedge (j = 2k) \wedge (i \neq h + 1); \\ 1, & \text{se } (i = 2k + 1) \wedge (j = 2k + 2) \wedge (i \neq h + 1); \\ 1, & \text{se } (i = j) \wedge (j \text{ é ímpar}); \\ 1, & \text{se } (i = 2k + 2) \wedge (j = 2k + 1) \wedge (i \neq h + 1); \\ 1, & \text{se } (i = 2k + 2) \wedge (j = 2k + 3) \wedge (i \neq h + 1); \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

□

Por exemplo, de acordo com a Definição 4.1, uma partição para a Faixa benzenoide F_4 é determinada da seguinte maneira:

$$V_i = \begin{cases} U_1 \cup \{v_{17}, v_{18}\}, & \text{se } i = 1; \\ U_2 \cup W_0, & \text{se } i = 2; \\ U_3 \cup W_1, & \text{se } i = 3; \\ U_4 \cup W_2, & \text{se } i = 4; \\ U_5, & \text{se } i = 5. \end{cases}$$

Assim,

$$V_i = \begin{cases} \{v_1, v_2\} \cup \{v_{17}, v_{18}\}, & \text{se } i = 1; \\ \{v_3, v_4\} \cup \{v_{15}, v_{16}\}, & \text{se } i = 2; \\ \{v_5, v_6\} \cup \{v_{13}, v_{14}\}, & \text{se } i = 3; \\ \{v_7, v_8\} \cup \{v_{11}, v_{12}\}, & \text{se } i = 4; \\ \{v_9, v_{10}\}, & \text{se } i = 5, \end{cases}$$

isto é, $V_1 = \{v_1, v_2, v_{17}, v_{18}\}$, $V_2 = \{v_3, v_4, v_{15}, v_{16}\}$, $V_3 = \{v_5, v_6, v_{13}, v_{14}\}$, $V_4 = \{v_7, v_8, v_{11}, v_{12}\}$ e $V_5 = \{v_9, v_{10}\}$. Pelo Lema 4.2, $\pi(F_4) = \{V_1, V_2, V_3, V_4, V_5\}$ é uma partição equilibrada para F_4 .

A matriz quociente de $\pi(F_h)$, $Q_h \in \mathbb{M}_{h+1}(\mathbb{R})$, é definida por $Q_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \end{bmatrix}$ e para

$h \geq 3$ é dada, recursivamente, por:

$$Q_3 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix} \text{ e } Q_h = \begin{bmatrix} Q_{h-1}[\{h\}, \{h\}] & P \\ P^T & S \end{bmatrix}, \quad (4.4)$$

onde $Q_{h-1}[\{h\}, \{h\}] \in \mathbb{M}_{h-1}(\mathbb{R})$ é obtida de Q_{h-1} excluindo-se a linha h e a coluna h ; $S = \begin{bmatrix} a & 1 \\ 2 & 1-a \end{bmatrix}$ com $a = \frac{1+(-1)^{h-1}}{2}$; $P = [p_{ij}] \in \mathbb{M}_{(h-1)2}(\mathbb{R})$ tal que $p_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } (i, j) = (h-1, 1); \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$

Novamente, considerando o grafo F_4 utilizamos a expressão (4.4) para encontrar as matrizes em blocos que compõem a matriz quociente Q_4 . Como $Q_4 = \begin{bmatrix} Q_3[\{4\}, \{4\}] & P \\ P^T & S \end{bmatrix}$

e $Q_3 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}$, sendo que as matrizes $Q_3[\{4\}, \{4\}]$, P , P^T e S são dados por

$$Q_3[\{4\}, \{4\}] = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad P^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ e } S = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}. \text{ Por-}$$

tanto,

$$Q_4 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

Seja $h \geq 3$, a matriz cadeia da matriz quociente Q_h associada a partição equilibrada $\pi(F_h)$ é dada por

$$W_h = W(Q_h) = \begin{bmatrix} J & Q_{hJ} & Q_h^2 J & \dots & Q_{hJ}^h \end{bmatrix} \in \mathbb{M}_{h+1}(\mathbb{R}). \quad (4.5)$$

Por exemplo, para as faixas benzenoides F_2 e F_3 suas respectivas matrizes quocientes são

Q_2 e Q_3 dadas por:

$$W_2 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 1 & 2 & 5 \\ 1 & 3 & 7 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad W_3 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 \\ 1 & 2 & 5 & 11 \\ 1 & 3 & 7 & 18 \\ 1 & 2 & 6 & 14 \end{bmatrix}.$$

Observação 4.1. Para $h \geq 4$, o termo geral da matriz cadeia $W_h = [w_{ij}]$ é definido por:

$$w_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } j = 1; \\ w_{1(j-1)} + w_{2(j-1)}, & \text{se } (i = 1) \wedge (2 \leq j \leq h + 1); \\ w_{(i-1)(j-1)} + w_{i(j-1)} + w_{(i+1)(j-1)}, & \text{se } (i \text{ é ímpar}) \wedge (2 \leq j \leq h + 1); \\ w_{(i-1)(j-1)} + w_{(i+1)(j-1)}, & \text{se } (i \text{ é par}) \wedge (2 \leq j \leq h + 1); \\ 2w_{h(j-1)} + w_{(h+1)(j-1)}, & \text{se } (i = h + 1) \wedge (i \text{ é ímpar}) \wedge (h \leq j \leq h + 1); \\ w_{h(j-1)} + w_{(h-1)(j-1)} + w_{(h-2)(j-1)}, & \text{se } (i = h + 1) \wedge (i \text{ é ímpar}) \wedge (2 \leq j \leq h - 1); \\ w_{h(j-1)} + w_{(h-2)(j-1)}, & \text{se } (i = h + 1) \wedge (i \text{ é par}) \wedge (2 \leq j \leq h - 1); \\ 2w_{h(j-1)}, & \text{se } (i = h + 1) \wedge (i \text{ é par}) \wedge (h \leq j \leq h + 1). \end{cases}$$

Exemplo 4.1. Vamos mostrar a matriz cadeia para a faixa benzenoide F_4 :

$$W_4 = \begin{bmatrix} 1 & w_{11} + w_{21} & w_{12} + w_{22} & w_{13} + w_{23} & w_{14} + w_{24} \\ 1 & w_{11} + w_{31} & w_{12} + w_{32} & w_{13} + w_{23} & w_{14} + w_{34} \\ 1 & w_{21} + w_{31} + w_{41} & w_{22} + w_{32} + w_{42} & w_{23} + w_{33} + w_{43} & w_{24} + w_{34} + w_{44} \\ 1 & w_{31} + w_{51} & w_{32} + w_{52} & w_{33} + w_{53} & w_{34} + w_{54} \\ 1 & 2w_{41} + w_{51} & w_{42} + w_{52} & w_{43} + w_{53} & w_{44} + w_{54} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 \\ 1 & 2 & 5 & 11 & 27 \\ 1 & 3 & 7 & 18 & 43 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 37 \\ 1 & 3 & 7 & 19 & 47 \end{bmatrix}$$

Lema 4.3. Para $h \geq 3$, considere a matriz cadeia $W_h = [w_{ij}]$. Dado o inteiro j tal que $1 \leq j \leq h - 1$, temos:

$$w_{ij} = w_{(i+2)j}, \quad \text{onde } j \leq i \leq h - 1.$$

Demonstração. Para $h = 3$, temos que $j \leq i \leq 2$, então, $i \in \{1, 2\}$. No caso de $i = 1$ temos que $j = 1$. Logo, $w_{11} = 1 = w_{31}$. Já para $i = 2$ temos que $j \in \{1, 2\}$. Logo, $w_{21} = 1 = w_{41}$ e $w_{22} = 2 = w_{42}$. O que mostra que a equação do Lema 4.3 é verdadeiro. Agora, suponhamos que a equação do Lema 4.3 é válida para h . Devido a hipótese de indução, basta verificar que $w_{ij} = w_{(i+2)j}$, onde $j \leq i \leq (h + 1) - 1 = h$. Para $i \in \{1, \dots, h - 1\}$ temos pela hipótese de indução que $w_{ij} = w_{(i+2)j}$. Neste caso temos que somente provar o caso que $i = (h + 1) - 1 = h$. Se $j = 1$ e $i = h$ temos: $w_{h1} = 1 = w_{(h+2)1}$. Se $i = h$ for par e $2 \leq j \leq h - 1$ temos

$$w_{hj} = w_{(h-1)(j-1)} + w_{(h+1)(j-1)} \quad \text{e} \quad w_{(h+2)j} = w_{(h+1)(j-1)} + w_{(h-1)(j-1)}.$$

Assim,

$$\begin{aligned} w_{(h+2)j} - w_{hj} &= w_{(h-1)(j-1)} + w_{(h+1)(j-1)} - w_{(h+1)(j-1)} - w_{(h-1)(j-1)} \\ w_{(h+2)j} - w_{hj} &= 0. \end{aligned}$$

Portanto, $w_{(h+2)j} = w_{hj}$. Agora se $i = h$ for ímpar e $2 \leq j \leq h - 1$ temos

$$w_{hj} = w_{(h-1)(j-1)} + w_{h(j-1)} + w_{(h+1)(j-1)} \quad e \quad w_{(h+2)j} = w_{h(j-1)} + w_{(h-1)(j-1)} + w_{(h+1)(j-1)}.$$

Assim,

$$\begin{aligned} w_{(h+2)j} - w_{hj} &= w_{h(j-1)} + w_{(h-1)(j-1)} + w_{(h+1)(j-1)} - w_{(h-1)(j-1)} - w_{h(j-1)} - w_{(h+1)(j-1)} \\ w_{(h+2)j} - w_{hj} &= 0. \end{aligned}$$

Portanto, $w_{(h+2)j} = w_{hj}$. Então $w_{ij} = w_{(i+2)j}$ para $j \leq i \leq h - 1$. □

Lema 4.4. Para $h \geq 3$, considere a matriz cadeia $W_h = [w_{ij}]$. Temos:

- (i) $w_{(j+1)j} - w_{(j-1)j} = 1$, $2 \leq j \leq h$;
- (ii) $w_{(h+1)(h+1)} - w_{(h-1)(h+1)} = \begin{cases} \frac{h+4}{2}, & \text{se } h \text{ é par;} \\ \frac{h+3}{2}, & \text{se } h \text{ é ímpar.} \end{cases}$

Demonstração. Primeiro será demonstrado o item (i) através de indução sobre h . Para $h = 3$, temos: $w_{32} - w_{12} = 1$ e $w_{43} - w_{23} = 1$, o que mostra que a equação do Lema 4.4 é verdadeira. Agora, suponhamos que a equação do Lema 4.4 é válida para h . Devido a hipótese de indução, basta verificar que $w_{(h+2)(h+1)} - w_{h(h+1)} = 1$. Vamos analisar os seguintes casos:

Se $h + 2$ é ímpar então

$$w_{(h+2)(h+1)} = 2w_{(h+1)h} + w_{(h+2)h} \quad e \quad w_{h(h+1)} = w_{(h-1)h} + w_{hh} + w_{(h+1)h}.$$

Assim,

$$\begin{aligned} w_{(h+2)(h+1)} - w_{h(h+1)} &= 2w_{(h+1)h} + w_{(h+2)h} - w_{(h-1)h} - w_{hh} - w_{(h+1)h} \\ w_{(h+2)(h+1)} - w_{h(h+1)} &= [w_{(h+1)h} - w_{(h-1)h}] + [w_{(h+2)h} - w_{hh}]. \end{aligned}$$

Mas pela hipótese de indução temos que $w_{(h+1)h} - w_{(h-1)h} = 1$. A partir do Lema 4.3 podemos afirmar que $w_{(h+2)h} = w_{hh}$, pois, $j \leq i \leq (h + 1) - 1 = h$. Logo,

$$w_{(h+2)(h+1)} - w_{h(h+1)} = 1 + 0 = 1.$$

Se agora $h + 2$ é par então

$$w_{(h+2)(h+1)} = 2w_{(h+1)h} \quad e \quad w_{h(h+1)} = w_{(h-1)h} + w_{(h+1)h}.$$

Assim,

$$w_{(h+2)(h+1)} - w_{h(h+1)} = 2w_{(h+1)h} - w_{(h-1)h} - w_{(h+1)h} = w_{(h+1)h} - w_{(h-1)h}.$$

Mas pela hipótese de indução temos que $w_{(h+1)h} - w_{(h-1)h} = 1$. Logo,

$$w_{(h+2)(h+1)} - w_{h(h+1)} = 1.$$

Então $w_{(j+1)j} - w_{(j-1)j} = 1$, $2 \leq j \leq h$.

Por último vou provar o item (ii) também através de indução sobre h . Para $h = 3$ temos que $w_{44} - w_{24} = 14 - 11 = 3 = \frac{3+3}{2}$, o que mostra que esta equação é verdadeira. Agora, suponhamos que a equação do item (ii) é válida para h . Devido a hipótese de indução basta verificar que $w_{(h+2)(h+2)} - w_{h(h+2)} = \begin{cases} \frac{(h+1)+4}{2}, & \text{se } (h+1) \text{ é par;} \\ \frac{(h+1)+3}{2}, & \text{se } (h+1) \text{ é ímpar.} \end{cases}$

Vamos analisar os seguintes casos:

Se $h + 2$ é par então

$$w_{(h+2)(h+2)} = 2w_{(h+1)(h+1)} \quad e \quad w_{h(h+2)} = w_{(h-1)(h+1)} + w_{(h+1)(h+1)}.$$

Assim,

$$w_{(h+2)(h+2)} - w_{h(h+2)} = 2w_{(h+1)(h+1)} - w_{(h-1)(h+1)} - w_{(h+1)(h+1)}$$

$$w_{(h+2)(h+2)} - w_{h(h+2)} = w_{(h+1)(h+1)} - w_{(h-1)(h+1)}.$$

Mas pela hipótese de indução temos $w_{(h+1)(h+1)} - w_{(h-1)(h+1)} = \frac{h+4}{2}$, onde h é par. Logo,

$$w_{(h+2)(h+2)} - w_{h(h+2)} = \frac{h+4}{2}$$

$$w_{(h+2)(h+2)} - w_{h(h+2)} = \frac{(h+1)+3}{2}.$$

Portanto, $w_{((h+1)+1)((h+1)+1)} - w_{h((h+1)+1)}$ é ímpar. Se $h+2$ é ímpar então

$$w_{(h+2)(h+2)} = 2w_{(h+1)(h+1)} + w_{(h+2)(h+1)} \quad e \quad w_{h(h+2)} = w_{(h-1)(h+1)} + w_{h(h+1)} + w_{(h+1)(h+1)}.$$

Assim,

$$w_{(h+2)(h+2)} - w_{h(h+2)} = 2w_{(h+1)(h+1)} + w_{(h+2)(h+1)} - w_{(h-1)(h+1)} - w_{h(h+1)} - w_{(h+1)(h+1)}$$

$$w_{(h+2)(h+2)} - w_{h(h+2)} = w_{(h+1)(h+1)} + w_{(h+2)(h+1)} - w_{(h-1)(h+1)} - w_{h(h+1)}.$$

Mas pela hipótese de indução temos $w_{(h+1)(h+1)} - w_{(h-1)(h+1)} = \frac{h+3}{2}$, onde h é ímpar. Logo,

$$w_{(h+2)(h+2)} - w_{h(h+2)} = \frac{h+4}{2} + [w_{(h+2)(h+1)} - w_{h(h+1)}].$$

Mas pelo *item(i)* temos que $w_{(h+2)(h+1)} - w_{h(h+1)} = 1$ para $j = h + 1$

$$\begin{aligned} w_{(h+2)(h+2)} - w_{h(h+2)} &= \frac{h+3}{2} + 1 \\ w_{(h+2)(h+2)} - w_{h(h+2)} &= \frac{h+5}{2} \\ w_{(h+2)(h+2)} - w_{h(h+2)} &= \frac{(h+1)+4}{2}. \end{aligned}$$

Portanto, $w_{((h+1)+1)((h+1)+1)} - w_{h((h+1)+1)}$ é par. □

Os testes computacionais foram realizados no servidor do site do Colab, com uma memória principal de 8 GB e um processador de 64-bits. Além disso, foram realizados testes no notebook da marca Positivo, com um processador Intel Dual Core de 64-bits, memória RAM de 4 GB, sistema operacional *Windows* e armazenamento de 128 GB. Os códigos dos testes, desenvolvidos na linguagem de programação *Python*, estão no apêndice deste trabalho. Através dos testes computacionais, podemos averiguar a matriz adjacência, matriz quociente, matriz cadeia e o determinante da matriz cadeia das faixas de benzenóides.

Na Tabela 4.1 temos o número máximo de hexágonos em função do tipo de arquitetura de processador e quantidade de memória RAM. Como dito no parágrafo anterior, os testes computacionais foram feitos numa arquitetura de processador de 64 bits e memórias de 4 GB e 8 GB. Estas limitações com relação à quantidade de hexágonos, se deve basicamente a quantidade de memória RAM e também a quantidade de dígitos dos elementos da matriz cadeia. A equação (4.6) exibe as operações elementares sobre a matriz cadeia e a Figura 4.12 mostra o código em Python correspondente a essas operações elementares.

Arquitetura (bits)	Memória RAM (GB)	Número de hexágonos
64	4	21
64	8	38

Tabela 4.1: Número máximo de hexágonos.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Uma das tentativas encontrada para demonstrar o Teorema 4.2 foi escalonar a matriz cadeia W_h . A matriz equivalente obtida é uma matriz triangular superior, S_h .

Seja a matriz cadeia W_h , $h \geq 3$, aplicamos as seguintes operações sobre as linhas de $W_h \in \mathbb{M}_{h+1}(\mathbb{R})$:

$$\mathbf{1^a Parte} \quad : \quad L_{h+3-i} \leftarrow L_{h+3-i} - L_{h+1-i}, \quad \text{onde } 2 \leq i \leq h. \quad (4.6)$$

Matriz resultante: $W'_h = [w'_{ij}] \in \mathbb{M}_{h+1}(\mathbb{R})$.

$$\mathbf{2^a Parte} \quad : \quad \begin{cases} 1^{\circ} \text{ caso: } w'_{ii} = 0 \implies L_i \leftrightarrow L_{i+1}; \\ 2^{\circ} \text{ caso: } w'_{ii} \neq 0 \implies L_{i+1} \leftarrow L_{i+1} - L_i. \end{cases} \quad \text{onde } 1 \leq i \leq h.$$

Matriz resultante: $S_h = [s_{ij}] \in \mathbb{M}_{h+1}(\mathbb{R})$.

O escalonamento da matriz cadeia aplicando as operações elementares definida na equação (4.6), permite fazer a seguinte afirmação: “O número de autovalores principais de uma Faixa benzenoide com número de hexágono $h \geq 3$, é igual a h ou $h + 1$ ”.

```
# primeira parte da operacoes com linhas
for i in range(-(numHexagono), -1):
    print(f"{WGR} L{-1 * i+1}<-L{-1 * i+1}-L{-1 * i-1}")
    WGR[-1 * i] = WGR[-1 * i] - WGR[-1 * i-2]
    print("")
# segunda parte da operacoes com linhas
for li in range (numHexagono):
    if li<=numHexagono+1:
        if WGR[li,li]==0 :
            print(f"{WGR} L{li+1}<->L{li+1+1}")
            WGR[[li, li+1]] = WGR[[li+1, li]]
            cont_linhas_pulada += 1
        else:
            print(f"{WGR} L{li+2}<-L{li+2}-L{li+1}")
            WGR[li+1] = WGR[li+1] - WGR[li]
```

Figura 4.12: Código em *Python* das operações elementares em W_h .

Fonte: Elaborado pelo autor.

Exemplo 4.2. *Aplicando as operações elementares sobre a matriz cadeia W_4 temos:*

$$W_4 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 \\ 1 & 2 & 5 & 11 & 27 \\ 1 & 3 & 7 & 18 & 33 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 37 \\ 1 & 3 & 7 & 19 & 47 \end{bmatrix} \xrightarrow{L_5 \leftarrow L_5 - L_3} \cong \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 \\ 1 & 2 & 5 & 11 & 27 \\ 1 & 3 & 7 & 18 & 33 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 37 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix} \xrightarrow{L_4 \leftarrow L_4 - L_2} \cong$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 \\ 1 & 2 & 5 & 11 & 27 \\ 1 & 3 & 7 & 18 & 33 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix} \xrightarrow{L_3 \leftarrow L_3 - L_1} \cong W'_4 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 \\ 1 & 2 & 5 & 11 & 27 \\ 0 & 1 & 3 & 9 & 23 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix} \xrightarrow{L_2 \leftarrow L_2 - L_1} \cong$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 7 \\ 0 & 1 & 3 & 9 & 23 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix} \xrightarrow{L_2 \leftrightarrow L_3} \cong \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 \\ 0 & 1 & 3 & 9 & 23 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 7 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix} \xrightarrow{L_4 \leftarrow L_4 - L_3} \cong$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 \\ 0 & 1 & 3 & 9 & 23 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix} \xrightarrow{L_5 \leftarrow L_5 - L_4} \cong S_4 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 \\ 0 & 1 & 3 & 9 & 23 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Exemplificamos a seguir mais matrizes resultantes:

$$W_5 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 & 47 \\ 1 & 2 & 5 & 11 & 27 & 63 \\ 1 & 3 & 7 & 18 & 33 & 107 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 37 & 90 \\ 1 & 3 & 7 & 19 & 47 & 122 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 38 & 94 \end{bmatrix} \cong S_5 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 & 47 \\ 0 & 1 & 3 & 9 & 23 & 60 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 7 & 16 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 3 & 11 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$W_6 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 & 47 & 110 \\ 1 & 2 & 5 & 11 & 27 & 63 & 154 \\ 1 & 3 & 7 & 18 & 33 & 107 & 260 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 37 & 90 & 229 \\ 1 & 3 & 7 & 19 & 47 & 122 & 306 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 38 & 94 & 245 \\ 1 & 3 & 7 & 19 & 47 & 123 & 311 \end{bmatrix} \cong S_6 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 & 47 & 110 \\ 0 & 1 & 3 & 9 & 23 & 60 & 150 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 7 & 16 & 44 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 3 & 11 & 31 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 4 & 15 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$W_7 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 5 & 11 & 27 & 63 & 154 & 370 \\ 1 & 3 & 7 & 18 & 43 & 107 & 260 & 643 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 37 & 90 & 229 & 566 \\ 1 & 3 & 7 & 19 & 47 & 122 & 306 & 780 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 38 & 94 & 245 & 617 \\ 1 & 3 & 7 & 19 & 47 & 123 & 311 & 802 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 38 & 94 & 246 & 622 \end{bmatrix}$$

$$\cong S_7 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 & 47 & 110 & 264 \\ 0 & 1 & 3 & 9 & 23 & 60 & 150 & 379 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 7 & 16 & 44 & 106 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 3 & 11 & 31 & 90 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 4 & 15 & 47 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 5 & 22 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$W_8 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 5 & 11 & 27 & 63 & 154 & 370 & 634 \\ 1 & 2 & 5 & 11 & 27 & 63 & 154 & 370 & 907 \\ 1 & 3 & 7 & 18 & 43 & 107 & 260 & 643 & 1579 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 37 & 90 & 229 & 566 & 1423 \\ 1 & 3 & 7 & 19 & 47 & 122 & 306 & 780 & 1963 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 38 & 94 & 245 & 617 & 1582 \\ 1 & 3 & 7 & 19 & 47 & 123 & 311 & 802 & 2041 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 38 & 94 & 246 & 622 & 1605 \\ 1 & 3 & 7 & 19 & 47 & 123 & 311 & 803 & 2047 \end{bmatrix}$$

$$\cong S_8 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 & 47 & 110 & 264 & 634 \\ 0 & 1 & 3 & 9 & 23 & 60 & 150 & 379 & 945 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 7 & 16 & 44 & 106 & 273 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 3 & 11 & 31 & 90 & 243 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 4 & 15 & 47 & 141 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 5 & 22 & 78 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 4 & 18 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$W_9 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 5 & 11 & 27 & 63 & 154 & 370 & 634 & 1541 \\ 1 & 2 & 5 & 11 & 27 & 63 & 154 & 370 & 907 & 2213 \\ 1 & 3 & 7 & 18 & 43 & 107 & 260 & 643 & 1579 & 3909 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 37 & 90 & 229 & 566 & 1423 & 3542 \\ 1 & 3 & 7 & 19 & 47 & 122 & 306 & 780 & 1963 & 4968 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 38 & 94 & 245 & 617 & 1582 & 4004 \\ 1 & 3 & 7 & 19 & 47 & 123 & 311 & 802 & 2041 & 5228 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 38 & 94 & 246 & 622 & 1605 & 4088 \\ 1 & 3 & 7 & 19 & 47 & 123 & 311 & 803 & 2047 & 5258 \\ 1 & 2 & 6 & 14 & 38 & 94 & 246 & 622 & 1606 & 4094 \end{bmatrix}$$

$$\cong S_9 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 9 & 20 & 47 & 110 & 264 & 634 & 1541 \\ 0 & 1 & 3 & 9 & 23 & 60 & 150 & 379 & 945 & 2368 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 7 & 16 & 44 & 106 & 273 & 672 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 3 & 11 & 31 & 90 & 243 & 657 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 4 & 15 & 47 & 141 & 402 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 5 & 22 & 78 & 260 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 4 & 18 & 60 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 5 & 24 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Observações 4.1. Para $h \geq 3$, considere a faixa F_h e sua respectiva matriz cadeia W_h definida em (4.5). Após a aplicação das operações elementares descritas em (4.6), observamos as seguintes propriedades sobre as matrizes W'_h e S_h :

(i) Dos Lemas 4.3 e 4.4, temos que a matriz W'_h é da forma

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & \cdots & \star & \star \\ 1 & 2 & 5 & \cdots & \star & \star \\ 0 & 1 & 3 & \cdots & \star & \star \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & \star & \star \\ \vdots & \vdots & \cdots & \ddots & \star & \star \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \star \end{bmatrix};$$

(ii) A matriz S_h é uma matriz em bloco definida da seguinte forma: $S_h = \begin{bmatrix} S_{h-1} & C_{h \times 1} \\ 0_{1 \times h} & a \end{bmatrix}$, onde $a \in \mathbb{R}$;

(iii) De acordo com o algoritmo da Figura 4.12, $|\det(W_h)| = \begin{cases} 0, & \text{se } h \equiv 1 \pmod{4}, \\ 1, & \text{caso contrário.} \end{cases}$

Lema 4.5. *Considere a matriz cadeia $W_h = W(Q_h)$ e $h \geq 3$, então*

$$\det(W_h) = \begin{cases} -\det(W_h[\{h+1\}, \{h\}]) + \frac{(h+4)}{2} \det(W_{h-1}), & \text{se } h \text{ é par;} \\ -\det(W_h[\{h+1\}, \{h\}]) + \frac{(h+3)}{2} \det(W_{h-1}), & \text{se } h \text{ é ímpar.} \end{cases}$$

Demonstração. Para $h \geq 3$, considere a matriz cadeia W_h , onde $h \geq 3$. Vamos definir a seguinte matriz linha $R \in \mathbb{M}_{1 \times (h+1)}(\mathbb{R})$ que será dado por

$$R = [(w_{(h+1)1} - w_{(h-1)1}) (w_{(h+1)2} - w_{(h-1)2}) \dots (w_{(h+1)h} - w_{(h-1)h}) (w_{(h+1)(h+1)} - w_{(h-1)(h+1)})]$$

Pelos Lemas 4.3 e 4.4 podemos afirmar que $w_{(h+1)j} - w_{(h-1)j} = 0$ para $1 \leq j \leq h-1$, $w_{(h+1)h} - w_{(h-1)h} = 1$ e $w_{(h+1)(h+1)} - w_{(h-1)(h+1)} = \begin{cases} \frac{h+4}{2}, & \text{se } (h+1) \text{ é par;} \\ \frac{h+3}{2}, & \text{se } (h+1) \text{ é ímpar.} \end{cases}$

Seja $W'_h = [w'_{ij}] \in \mathbb{M}_{(h+1)}(\mathbb{R})$ definido por $w'_{ij} = \begin{cases} w_{ij}, & \text{se } i \in \{1, \dots, h\}; \\ v_{1j}, & \text{caso contrário.} \end{cases}$

Como $\det(W_h) = \det(W'_h)$ e aplicando a expansão de Laplace sobre a linha $i = h+1$ da matriz W'_h temos

$$\det(W'_h) = \sum_{j=1}^{h+1} (-1)^{(h+1)+j} w'_{(h+1)h} \det(W_h[\{h+1\}, \{j\}]).$$

Mas $w'_{(h+1)j} = 0$ para $j \in \{1, \dots, h-1\}$, então

$$\det(W'_h) = [(-1)^{(h+1)+h} w'_{(h+1)h} \det(W_h[\{h+1\}, \{h\}]) + [(-1)^{(h+1)+(h+1)} w'_{(h+1)(h+1)} \det(W_h[\{h+1\}, \{h+1\}])].$$

Observe que $W_h[\{h+1\}, \{h+1\}] = W_{h-1}$. Assim,

$$\det(W_h) = \det(W'_h) = [-\det(W_h[\{h+1\}, \{h\}])] + [(w_{(h+1)(h+1)} - w_{(h-1)(h+1)}) \det(W_{h-1})].$$

Logo,

$$\det(W_h) = \begin{cases} -\det(W_h[\{h+1\}, \{h\}]) + \frac{(h+4)}{2} \det(W_{h-1}), & \text{se } h \text{ é par;} \\ -\det(W_h[\{h+1\}, \{h\}]) + \frac{(h+3)}{2} \det(W_{h-1}), & \text{se } h \text{ é ímpar.} \end{cases}$$

□

O Teorema 4.2 determina a quantidade de autovalores principais em função do número de hexágonos de $F_h \in \mathcal{F}$.

Teorema 4.2. *O número de autovalores principais de $F_h \in \mathcal{F}$ é igual h , quando $h \equiv 1 \pmod{4}$ e é igual a $h+1$ nos demais casos.*

Demonstração. Sejam $F_h \in \mathcal{F}$ e $W_h \in \mathbb{M}_{(h+1)}(\mathbb{R})$, onde $h \geq 3$. Se $h \neq 4q + 1$, pelo item (iii) da Observação 4.1 temos que $\det(W_h) \neq 0$. Logo, $\text{posto}(W_h) = h + 1$. Do Teorema 3.10, o número de autovalores principais de $F_h \in \mathcal{F}$ é igual $h + 1$. No caso de $h = 4q + 1$, pelo item (iii) da Observação 4.1, temos que $\det(W_h) = 0$. Do Lema 4.5, temos

$$\det(W_{4q+2}) = (2q + 3) \det(W_{4q+1}) - \det(W_{4q+2}[\{4q + 3\}, \{4q + 2\}]).$$

Como $\det(W_{4q+2}) \neq 0$ e $\det(W_{4q+1}) = 0$, segue que $\det(W_{4q+2}[\{4q + 3\}, \{4q + 2\}]) \neq 0$. Logo, $\text{posto}(W_h) = h$. Do Teorema 3.10, o número de autovalores principais de $F_h \in \mathcal{F}$ é igual a h .

□

Capítulo 5

Conclusão e Trabalhos Futuros

5.1 Conclusão

Neste trabalho, pesquisamos as propriedades espectrais para uma determinada classe de grafos químicos. Inicialmente, modelamos as moléculas de hidrocarbonetos de benzenoides aplicando a modelagem *skeleton graph*. A partir dessa modelagem obtivemos uma subclasse de grafos químicos para estudos denominados de faixas benzenoides. Essa subclasse diferencia das demais subclasses dos grafos benzenoides com relação à quantidade de vértices internos, sendo que as faixas benzenoides não possuem nenhum vértice interno. Na primeira etapa da pesquisa determinamos expressões explícitas para os autovalores de F_h , para cada $h \geq 2$ de F_h . Para encontrar o espectro das faixas benzenoides tivemos que escolher uma rotulação, que denominamos de L_1 , para F_h , onde $h \geq 2$. Depois que estabelecemos a rotulação para as faixas benzenoides, mostramos a matriz adjacência de $F_h \in \mathcal{F}$. Com a matriz adjacência definida e aplicando as Proposições 2.16, 2.2 e 2.3 e o Lema 4.1 podemos demonstrar o Teorema 4.1, que determina o espectro de F_h , $h \geq 2$. A última etapa do trabalho apresentamos as possíveis quantidades de autovalores principais em tal subclasse de grafos benzenoides. Para chegar neste resultado foi necessário designar outra rotulação, chamada L_2 , para F_h , onde $h \geq 2$. A partir da rotulação L_2 , podemos estabelecer uma partição equilibrada para as faixas benzenoides e determinar a matriz quociente com relação a essa partição e a matriz cadeia da matriz quociente de $F_h \in \mathcal{F}$, para $h \geq 2$. Por meio dos testes computacionais, desenvolvido na linguagem de programação *python*, foi possível fazer uma análise da matriz cadeia da matriz quociente dessa subclasse de grafos benzenoides. Além disso, obtivemos resultados importantes sobre essa matriz que permitiu determinar o número de autovalores principais das faixas benzenoides.

5.2 Trabalhos Futuros

Durante o desenvolvimento da dissertação foi notada a imensa variedade de linhas de estudos a seguir. Como sugestões para trabalhos futuros, expandir esta análise para outras subclasses de grafos benzenoides com número de vértices internos maior do que zero, investigar as energias dessas subclasses de grafos e também pesquisar o espectro para esta subclasse de grafos benzenoides aplicando a modelagem *complete graph*.

Referências

- [1] ABREU, N., CARDOSO, D. M., FRANÇA, F. A. M., VINAGRE, C. Some new aspects of main eigenvalues of graphs. *Computational and Applied Mathematics* 39 (2020), 12.
- [2] ABREU, N. M. M., DEL-VECCHIO, R., VINAGRE, C., STEVANOVIC, D. Introdução a teoria espectral de grafos com aplicações. *Notas em Matemática Aplicada* 27 (2007), 25.
- [3] AKBARI, S., FRANÇA, F. A. M., GHASEMIAN, E., JAVARSINEH, M., DE LIMA, L. S. The main eigenvalues of signed graphs. *Linear Algebra and its Applications* (2020).
- [4] BROUWER, A. E., HAEMERS, W. H. *Spectra of graphs*. New York, Springer, 2012.
- [5] COLLATZ, L., SINOGOWITZ, U. Spektren endlicher grafen. *Abh.Math. Sem. Univ. Hamburg* 21 (1957), 63–67.
- [6] CVETKOVIĆ, D. The main part of the spectrum, divisors and switching of graphs. *Publ. Inst. Math.(Beograd)* 23, 37 (1978), 31–38.
- [7] CVETKOVIĆ, D., GUTMAN, I. Applications of graph spectra. *Journal Zbornik Radova* 21, 13 (2009).
- [8] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., SIMIĆ, S. An introduction to the theory of graph spectra. *United Kingdom, Cambridge University Press*, (2010).
- [9] CVETKOVIĆ, D. M. The generating function for variations with restrictions and paths of the graph and self-complementary graphs. *Publikacije Elektrotehničkog fakulteta. Serija Matematika i fizika* (1970), 27–34.
- [10] CVETKOVIĆ, D. M. Graphs and their spectra. *Univ. Beograd Publ. Elektrotehn. Fak.*, n. 354-356 (1971), pp.1–50.
- [11] CVETKOVIĆ, D. M., DOOB, M., SACHS, H. *Spectra of graphs. Theory and application*. 3 ed. Leipzig, Johann Ambrosius Barth, 1995.
- [12] CVETKOVIĆ, D. M., ROWLINSON, P., SIMIC, S. *Eigenspaces of graphs*. Cambridge University Press, 1997.
- [13] DIESTEL, R. *Graph Theory*. New York, Springer-Verlag Heidelberg, Electronic Edition, 2005.
- [14] FIEDLER, M. *Special matrices and their applications in numerical mathematics*. Courier Corporation, 2008.

- [15] FINCK, H.-J., SACHS, H. Über beziehungen zwischen struktur und spektrum regulärer graphen, wiss. 2. *TH Ilmenau 19* (1973), 83–99.
- [16] FRANÇA, F. A. M. *Autovalores Principais de Grafos*. PhD thesis, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2015.
- [17] FRANÇA, F. A. M., BRONDANI, A. E. On the main spectrum of generalized Bethe trees. *Linear Algebra and its Applications 628* (2021), 56–71.
- [18] FRITSCHER, E. Propriedades espectrais de um grafo.
- [19] GROSS, J. L., YELLEN, J. *Handbook of graph theory*. CRC press, 2014.
- [20] GUTMAN, I. Selected theorems in chemical graph theory. *Kragujevac: University of Kragujevac* (2017).
- [21] GUTMAN, I., POLANSKY, O. E. *Mathematical concepts in organic chemistry*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [22] HAGOS, E. M. Some results on graph spectra. *Linear algebra and its applications, 356*, 1-3 (2002), pp. 103–111.
- [23] HARARY, F. *Graph Theory*. Philippines, Addison-Wesley, 1969.
- [24] HORN, R. A., JOHNSON, C. R. *Matrix analysis*. Cambridge university press, 2013.
- [25] HOU, Y., TANG, Z., SHIU, W. C. Some results on graphs with exactly two main eigenvalues. *Applied Mathematics Letters 25*, 10 (2012), 1274–1278.
- [26] HOU, Y., TIAN, F. Unicyclic graphs with exactly two main eigenvalues. *Applied Mathematics Letters 19*, 11 (2006), 1143–1147.
- [27] HUANG, X., HUANG, Q., LU, L. Construction of graphs with exactly k main eigenvalues. *Linear Algebra and its Applications 486* (2015), 204–218.
- [28] HUCKEL, E. Quantentheoretische beiträge zum benzolproblem. *Zeitschrift für Physik a Hadrons 70*, 3-4 (2004), 204–286.
- [29] LOSONCZI, L. Eigenvalues and eigenvectors of some tridiagonal matrices. *Acta Mathematica Hungarica 60*, 3-4 (1992), 309–322.
- [30] MERRIS, R. *Graph theory*. John Wiley & Sons, 2001.
- [31] MEYER, C. D., STEWART, I. *Matrix analysis and applied linear algebra*. SIAM, 2000.
- [32] NATH, M., PAUL, S. On the distance laplacian spectra of graphs. *Linear Algebra and its Applications 460* (2014), 97–110.
- [33] NETTO, P. O. B. *Grafos: teoria, modelos, algoritmos*. Editora Blucher, 2012.
- [34] ROWLINSON, P. The main eigenvalues of a graph: a survey. *Applicable Analysis and Discrete Mathematics* (2007), 455–471.

-
- [35] SCHWENK, A. J. *Computing the characteristic polynomial of a graph*. In: *Graphs and Combinatorics*, n. 406, Lecture Notes in Mathematics, pp. 153–172, 1974.
- [36] YUEH, W.-C. Eigenvalues of several tridiagonal matrices. *Applied Mathematics E-Notes [electronic only]* 5 (2005), 66–74.

Apêndice

```
# importacao de bibliotecas
import igraph as ig
import matplotlib.pyplot as plt
import math
import numpy as np

numHexagono = 41 # alteracoes do numero de hexagono

# Variaveis de inicializacoes
numArestasTotal = 5* numHexagono +1
h = numHexagono
numArestasExternas = 4*numHexagono+2
numArestasInternos = numHexagono-1
listaArestasLigadas = []
contVertices = 0
list1 = []
V = []
P = []

for e in range(1,numArestasExternas):
    listaArestasLigadas.append([contVertices , contVertices+1])
    contVertices += 1

listaArestasLigadas.append([listaArestasLigadas[0][0] ,
    listaArestasLigadas[len(listaArestasLigadas)-1][1]])

for i in range(1,numArestasInternos+1):
    if i == numArestasInternos:
        k =0
    else:
        k = (3+2*numArestasInternos+5)+2*(i-1)
    listaArestasLigadas.append([5+(numArestasInternos-1)*2-2*(i-1) , k])

#conversao dos vertices
def conversaoVerticesRotulacao(v):
    for i in range(4*h+2):
        if(i == v):
            return list1[i]
def conversaoVertices(v):
    for i,vs in enumerate(list1):
        if(vs == v):
            return i

# transformacao de rotulacoes
def converterRotulacao(h):
```

```
n = 1
global list1
for i in range(4*h+2):
    if i == 0:
        list1.append(5)
    elif i == 5:
        list1.append(6)
    elif i == 1:
        list1.append(i)
    elif i == 2:
        list1.append(3)
    elif i == 3:
        list1.append(4)
    elif i == 4:
        list1.append(2)
    else:
        list1.append(-1)
for p in range(h-1):
    n+=1
    for a in range (4*(numHexagono)+2):
        if a != 1 or a != 3 or a != 4 or a != 2 or a !=5 or a != 0:
            if a == 2*n+1 and a !=5:
                list1[a] = 4*n-2
            elif a == 2*n+2:
                list1[a] = 4*n
            elif a == 2*n+3:
                list1[a] = 4*n+2
            elif a == 2*n+4:
                list1[a] = 4*n+1
            elif a == 2*n+5:
                list1[a] = 4*n-1
            elif a == 2*n+6:
                list1[a] = 4*n-3
s = -1
p =1
for valor in enumerate(list1[::-1]):
    ni = len(list1)+s
    if(valor[1] != -1):
        break;
    list1[ni] = 2*p +5
    s -=1
    p += 1
g.vs["rotulacao"] = list1
```

```

    return g.vs["rotulacao"]

# particao equilibrada no grafo benzenoicos
def U(i):
    return{2*i-1,2*i}
def W(i):
    return{4*h-2*i-1,4*h-2*i}
print(f"Particao equilibrada para o caso h = {h} e:")
for i in range(1,h+2):
    u = U(i)
    if(i==1):
        w = W(i-1)
        V.append(u.union(w))
    elif(i==2):
        V.append(u.union({4*h+1, 4*h+2}))
    elif i == h+1:
        V.append(u)
    else:
        w = W(i-2)
        V.append(u.union(w))
    print(f"V_{i} = {V[i-1]}")
    P.append(list(V[i-1]))

# Desenho do grafo benzenoico e sem a numeracao da rotulacao para
particao equilibrada
g = ig.Graph(n=4*(numHexagono)+2, edges=listaArestasLigadas)
novoRotulo = converterRotulacao(h)
layout = g.layout("kk")
fig, ax = plt.subplots()
ig.plot(g, layout=layout, target=ax, vertex_size=0.06, vertex_label_angle=
    math.radians(-150), edge_width=1, bbox=(1000,1000), edge_color=['red'],
    vertex_color=['blue'], novoRotulo_color=['yellow'], vertex_shape="
    circle")
plt.show()

#matriz adjacente
matAdj = g.get_adjacency()

# matriz quociente
MC = np.zeros((len(P),len(P)), dtype = int) # MC matriz quociente
for i in range(len(P)):
    p = conversaoVertices(P[i][0])
    vs_x = g.neighbors(p)

```

```

    for vx in vs_x:
        for j in range(len(P)):
            if g.vs[vx]['rotulacao'] in P[j]:
                MC[i][j] += 1
print(f"Matriz quociente para o caso M_{h}")

#A matriz cadeia de um grafo benzenoico

WG = [] # matriz cadeia
MCW = MC
tam = len(MCW)
e = np.ones(tam)
for i in range(tam):
    if i==0:
        WG.insert(i,e)
        continue
    elif i==1:
        m = np.dot(MCW,e)
    else:
        m = np.dot(MCW,k)
    k = m
    WG.insert(i, m)
print(f"A matriz cadeia W(G) para o caso h = {h}")
WG = np.array(WG,dtype=int).transpose()
WG[[0, 1]] = WG[[1, 0]]
WG

# operacoes com linhas sobre a matriz cadeia
WGR = np.array(WG) #converter uma lista num tipo numpy
cont_linhas_pulada = 0
# primeira parte da operacoes com linhas
print("-----)
for i in range(-(numHexagono),-1):
    print(f"{WGR} L{-1 * i+1}<-L{-1 * i+1}-L{-1 * i-1}")
    WGR[-1 * i] = WGR[-1 * i] - WGR[-1 * i-2]
    print("")
#segunda parte da operacoes com linhas
for li in range (numHexagono):
    if li<=numHexagono+1:
        if WGR[li,li]==0 :
            print(f"{WGR} L{li+1}<->L{li+1+1}")
            WGR[[li, li+1]] = WGR[[li+1, li]]
            cont_linhas_pulada += 1

```

```

        else:
            print(f"{WGR} L{li+2}<-L{li+2}-L{li+1}")
            WGR[li+1] = WGR[li+1] - WGR[li]
            print("")
print("-----)

#resultado da parte da matrz cadeia
print(f"Para W({numHexagono}) temos a matriz cadeia igual a:")
print(WGR)

# Determinante da matriz cadeia
elementoDiagonal = 1
for i in range(WGR.shape[0]):
    for j in range(WGR.shape[0]):
        if i==j:
            elementoDiagonal *= WGR[i,j]
print(f"O det(W({numHexagono})) = { (-1)**cont_linhas_pulada *
        elementoDiagonal}")

with open("grafoBezenoides.txt", "a") as arq:
    arq.write(f"\n Para h = {h} temos a matriz adjacencia: \n{matAdj
    }\n")
    arq.write(f"\n Para h = {h} temos a matriz quociente: \n{MC}\n")
    arq.write(f"\n Para h = {h} temos a matriz cadeia: \n{WG}\n")
    arq.write(f"\n Para h = {h} temos a matriz triangular superior da
    matriz cadeia: \n{WGR}\n")
    arq.write(f"\n Para h = {h} temos o determinante da matriz cadeia
    : \n{(-1)**cont_linhas_pulada * elementoDiagonal}\n")
    arq.write(f"\n -----n")

```