CEFET/RJ
DIRETORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO

POLINÔMIO CARACTERÍSTICO E COTAS PARA ALGUNS AUTOVALORES DA MATRIZ A_α

João Domingos Gomes da Silva Junior

Tese de Doutorado apresentado ao Programa de Pós-graduação em Engenharia de Produção e Sistemas, Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca CEFET/RJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de doutor.

Orientadores: Carla Silva Oliveira
Liliana Manuela Gaspar Cerveira da Costa

Rio de Janeiro,

2 de Abril de 2024

Polinômio característico e cotas para alguns autovalores da matriz A_α

Tese de Doutorado em Engenharia de Produção e Sistemas, Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca, CEFET/RJ.

João Domingos Gomes da Silva Junior

Aprovada por:

Profª. Carla Silva Oliveira, D.Sc. (orientadora)

Profª. Liliana Manuela Gaspar Cerveira da Costa, D.Sc. (coorientadora)

Prof. Carlos Hoppen, PhD (UFRGS)

Prof. Celso Marques da Silva Junior, D.Sc. (CEFET/RJ)

Profª. Claudia Marcela Justel, D.Sc. (IME)

Prof. Gabriel Coutinho, D.Sc. (UFMG)

Prof. Germain Aliro Pastén Tabilo, D. Sc. (UA)

Rio de Janeiro,

2 de Abril de 2024

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central do CEFET/RJ

S586 Silva Junior, João Domingos Gomes da
Polinômio característico e cotas para alguns autovalores da matriz Aα / João Domingos Gomes da Silva Junior. — 2024.
131f. : il. color. , enc.

Tese (Doutorado) Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca, 2024.
Bibliografia : f. 123-131
Orientadora: Carla Silva Oliveira
Coorientadora: Liliana Manuela Gaspar Cerveira da Costa

1. Matrizes (Matemática). 2. Polinômios. 3. Autovalores. 4. Teoria dos grafos. I. Oliveira, Carla Silva. (Orient.). II. Costa, Liliana Manuela Gaspar Cerveira da (Coorient.) III. Título.

CDD 512.9

Elaborada pela bibliotecária Tania Mello – CRB/7 nº 5507/04

DEDICATÓRIA

À minha esposa Aline Gomes, à minha filha Maria Luíza e ao meu filho João Miguel.

AGRADECIMENTOS

Agradeço sinceramente a Deus, cuja graça e orientação foram fundamentais em todos os momentos deste percurso.

À minha amada família, pelo apoio incondicional, compreensão e amor que sempre me deram. Sem vocês, nada disso seria possível.

Às minhas orientadoras e amigas, Carla Oliveira e Liliana Manuela, pela paciência, dedicação e orientação precisa ao longo de todo o processo. Suas contribuições foram inestimáveis para o desenvolvimento deste trabalho.

Aos membros da banca examinadora, por aceitarem o convite para fazer parte deste importante momento da minha trajetória acadêmica. Suas sugestões e críticas foram valiosas para aprimorar este trabalho.

Ao amigo TR por ter transformado completamente o rumo da minha jornada acadêmica. Seu "empurrão" foi fundamental para que eu pudesse enxergar novas oportunidades e alcançar os objetivos deste trabalho.

Ao Colégio Pedro II, por fornecer a licença e o suporte necessários para que eu pudesse me dedicar integralmente a esta pesquisa, pelo menos por um período de tempo.

A todos que de alguma forma contribuíram para este trabalho, o meu mais sincero agradecimento.

RESUMO

Polinômio característico e cotas para alguns autovalores da matriz A_α

João Domingos Gomes da Silva Junior

Orientadoras:
Carla Silva Oliveira
Liliana Manuela Gaspar Cerveira da Costa

Seja G um grafo de ordem n, cujas matrizes de adjacência e diagonal de graus são $A(G)$ e $D(G)$, respectivamente. Nikiforov [2017] definiu a matriz $A_\alpha(G)$, para qualquer α no intervalo $[0, 1]$, como a combinação linear convexa $\alpha D(G) + (1 - \alpha)A(G)$. Nesta tese, exploramos o polinômio característico da matriz A_α quando G é obtido pela coalescência de dois grafos. No caso de G ser um grafo bipartido semirregular, obtemos o polinômio característico de A_α do grafo linha associado a G, $A_\alpha(l(G))$. Além disso, para G sendo um grafo regular, apresentamos o polinômio característico de A_α para os grafos obtidos por meio de operações específicas. Outrossim, são apresentados novos limites superiores e inferiores para o maior, o segundo maior e o menor autovalor da matriz A_α, caracterizando grafos extremais para alguns desses limites. Realizamos comparações entre as cotas estabelecidas e aquelas já existentes na literatura. Além disso, conduzimos uma análise preliminar da matriz A_α para grafos linha, apresentando algumas cotas para o maior e segundo maior autovalores dessa matriz.

Palavras-chave:
Matriz A_α, Polinômio Característico, Autovalores, Cotas, Grafo linha.

Rio de Janeiro,

2 de Abril de 2024

ABSTRACT

Characteristic polynomial and bounds for some eigenvalues of the matrix A_α

João Domingos Gomes da Silva Junior

Advisors:
Carla Silva Oliveira
Liliana Manuela Gaspar Cerveira da Costa

Consider a graph G of order n, with the adjacency matrix $A(G)$ and the diagonal degree matrix $D(G)$. For any α in the interval $[0, 1]$, the matrix $A_\alpha(G)$, defined by Nikiforov [2017], is given by $\alpha D(G) + (1 - \alpha)A(G)$. In this thesis, we explore the characteristic polynomial of the matrix A_α when G is obtained by the coalescence of two graphs. In the case where G is a semirregular bipartite graph, we derive the characteristic polynomial of A_α for the line graph associated with G, denoted as $A_\alpha(l(G))$. Additionally, for G being a regular graph, we present the characteristic polynomial of A_α for graphs obtained through specific operations. Furthermore, we provide new upper and lower bounds for the largest, second-largest, and smallest eigenvalues of the matrix A_α, characterizing extremal graphs for some of these bounds. We conduct comparisons between the established bounds and those already existing in the literature. Additionally, we perform an initial analysis of the matrix A_α for line graphs, presenting some bounds for its largest and second-largest eigenvalues.

Keywords:
A_α-matrix, Characteristic Polynomial, Eigenvalues, Bounds, Line graphs.

Rio de Janeiro,

2 de Abril de 2024

Sumário

Introdução **13**

I Preliminares **16**

I.1 Álgebra Linear 16

I.2 Teoria dos Grafos 21

I.2.1 Operações em grafos 24

I.2.2 Famílias de grafos 26

I.3 Teoria Espectral dos Grafos 30

I.3.1 Matriz de Adjacência 30

I.3.2 Matriz de Incidência, Laplaciana e Laplaciana sem sinal 33

II Matriz A_α **35**

II.1 Conceitos Fundamentais 35

II.2 A_α-espectro para algumas famílias de grafos 36

II.3 Polinômio Característico 43

II.4 Cotas para autovalores da matrix A_α 45

III Polinômio característico da matriz A_α para algumas operações em grafos **60**

III.1 Espectro de submatrizes principais de alguns grafos 60

III.2 Polinômios Característicos 63

IV Cotas para os autovalores da matriz A_α **83**

IV.1 Cotas para $\lambda_1(A_\alpha(G))$ 83

IV.2 Cotas para $\lambda_2(A_\alpha(G))$ 94

IV.3 Cotas para $\lambda_n(A_\alpha(G))$ 97

V Comparação entre as cotas do maior autovalor da matriz A_α **99**

V.1 Comparação entre as novas cotas obtidas na tese 100

V.1.1 Cotas inferiores 100

V.1.2 Cotas superiores 103

V.2 Comparação entre as novas cotas e algumas cotas existentes na literatura 104
V.2.1 Cotas inferiores 104
V.2.2 Cotas superiores 112

VI Resultados da matriz A_α para grafos linha 125
VI.1 Um pouco de história 125
VI.2 Cotas para os autovalores da matriz A_α do grafo linha 126

VII Conclusões e Trabalhos futuros 131

Índice Remissivo 132

Referências 135

Lista de figuras

I.1 Grafos P_7, $K_{4,3}$ e $\widetilde{P_7}$. 24

I.2 Grafo roda W_6. 25

I.3 Grafo G e $l(G)$. 25

I.4 Grafos G, $S(G)$, $R(G)$, $\mathscr{C}(G)$ e $T(G)$. 26

I.5 Exemplo de uma árvore *starlike*. 27

I.6 Grafo dupla estrela $D(m,n)$. 27

I.7 Grafo vassoura dupla $B(3,n,m)$. 27

I.8 Grafo *pineapple* K_8^4. 28

I.9 Grafos dupla pipa. 28

I.10 Grafo KK_7^3. 28

I.11 Grafo H_7^5. 29

I.12 Grafo $\mathbf{F}_{4,2,3}$. 29

I.13 Grafo L_5. 30

I.14 Grafo H_6. 30

I.15 Grafos referidos no Exemplo 1. 31

III.1 G_{v_1,v_3,v_5,v_6} onde $G \cong K_6$. 63

III.2 Grafo Octaédrico ($l(K_4)$). 74

V.1 O gráfico representa o tempo necessário para calcular $\lambda_1(A_\alpha(K_n))$ para valores de α no intervalo $[0, 0.9]$, começando com $\alpha = 0$, com incrementos de 0.1, à medida que o número de vértices n do grafo K_n aumenta. 101

V.2 Diferença entre $\lambda_1(A_\alpha(P_n))$ e as cotas inferiores para crescentes valores de n e α. 105

V.3 Gráficos da função $h'(x)$ considerando diferentes valores de Δ e δ. 108

V.4 Diferença entre $\lambda_1(A_\alpha(K_{1,n-1}))$ e as cotas inferiores para crescentes valores de n e de α. 109

V.5 Diferença entre cotas dos Teoremas IV.1.3 e II.4.9 em diferentes famílias de grafos, para diferentes valores de n e α. 111

V.6 Diferença entre cotas dos Teoremas IV.1.7 e II.4.59 em diferentes famílias de grafos, para diferentes valores de n e α. 112

V.7 Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(KK_s^l))$ para crescentes valores de n e de α. 114
V.8 Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(L_n))$ para crescentes valores de n e de α. 115
V.9 Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(K_{1,n-1}))$ para crescentes valores de n e de α. 118
V.10 Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(K_{1,n-1}))$ para crescentes valores de n e de α. 119
V.11 Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(W_n))$ para crescentes valores de n e de α. 120
V.12 Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(KK_s^l))$ para crescentes valores de n e de α. 121
V.13 Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(L_n))$ para crescentes valores de n e de α. 121
V.14 Contraexemplo para a Proposição V.2.13 sobre a igualdade das cotas. 124

Lista de tabelas

II.1 Confirmação da incoerência da cota apresentada por Pizarda. 54

V.1 Comparação de cotas inferiores dos Teoremas IV.1.7 e IV.1.1 para o grafo P_n. 102

V.2 Comparação de cotas inferiores dos Teoremas IV.1.3 e IV.1.7 para o grafo W_n. 102

V.3 Comparação entre as cotas inferiores. 103

V.4 Comparação das cotas superiores para o grafo estrela aumentando o número de vértices. 103

V.5 Comparação das cotas superiores para o grafo friendship aumentando o número de vértices. 104

V.6 Comparação entre as cotas superiores. 104

V.7 Solução numérica para encontrar a raiz da função $h'(x)$ no intervalo $(0, 1)$ para diferentes valores de Δ e δ. 108

Introdução

A Teoria Espectral de Grafos (TEG) resulta da necessidade de representar, em Química, moléculas de hidrocarbonetos por um grafo. Hückel [1931] verificou, então, que os autovalores da matriz de adjacência desses grafos estavam relacionados com a energia de certos elétrons associados a essas moléculas.

A TEG combina a Teoria dos Grafos e a Álgebra Linear e teve seu grande desenvolvimento após a publicação da tese de Doutorado de Cvetković (Cvetković [1971]) e, desde então, tem sido de muita relevância em diversas áreas. Outrossim, ela vem não só atraindo um maior interesse por parte de estudiosos e pesquisadores, como também dando origem a uma vasta variedade de estudos e resultados. Aplicações em Química (Cvetković e Stevanovic [2004]; Mnukhin *et al.* [1996]; Cvetković *et al.* [1997]), Ciência da Computação (Hoory *et al.* [2006]; Arsić *et al.* [2012]; Cvetković e Davidović [2008]; Spielman [2007a]), Probabilidade (McKinley [2020]), Redes Complexas (Jovanović *et al.* [2017]; Sarkar e Jalan [2018]; Mieghem [2010]) são algumas das possibilidades de inserção dessa teoria.

É possível dizer que no Brasil a TEG deu seus primeiros passos em 1985 com os estudos realizados pela Prof.ª Nair Abreu sobre o livro *Algebraic Graph Theory* (Biggs [1974]), tendo em 1995 o início da primeira orientação de doutorado sobre esse assunto. Em 1996, um grupo de pesquisa nessa área liderado pela Prof.ª Nair Abreu foi criado, iniciando suas pesquisas na determinação de expressões para os coeficientes dos polinômios característico da matriz de adjacência e da matriz laplaciana de um grafo, no estudo da conectividade algébrica e de outros invariantes espectrais, com o objetivo de compará-los a outros resultados clássicos da Teoria dos Grafos na tentativa de utilizá-los como medida de Vulnerabilidade de Redes. Em 2001, ocorreu o evento *EURO Workshop on Algebraic Graph Theory*, que reuniu pesquisadores de vários países e que contou com a participação da Prof.ª Nair Abreu e da Prof.ª Carla Oliveira, então sua orientanda, abrindo assim uma via de contato com os mais diversos pesquisadoras da área. Posteriormente, em 2006, decorreu em Portugal, o *Aveiro Workshop on Graph Theory*, que contou com a participação de vários pesquisadores brasileiros incluido professores e alunos. Desde então a TEG só vem crescendo no Brasil.

O principal objetivo da TEG consiste em estudar como o espectro de uma matriz associada a um grafo e que representa a sua estrutura geométrica, pode refletir propriedades intrínsecas desse mesmo grafo. E, em determinadas famílias de grafos, investigar se é possível caracterizar o grafo conhecendo

o espectro de uma matriz associada a ele. Alguns exemplos das matrizes que é possível associar a um grafo são: adjacência ($A(G)$), diagonal dos graus ($D(G)$), laplaciana ($L(G)$) e laplaciana sem sinal ($Q(G)$). Resumindo, a TEG investiga como os autovalores, de tais representações matriciais, se relacionam com propriedades estruturais do grafo.

Em 2017, Nikiforov definiu, para qualquer $\alpha \in [0, 1]$, a matrix $A_\alpha(G)$, obtida pela combinação linear convexa de $A(G)$ (matriz de adjacência) e $D(G)$ (matriz diagonal dos graus), ou seja, $A_\alpha(G) = \alpha D(G) + (1 - \alpha)A(G)$. Com essa definição os problemas envolvendo essa matriz englobaram os da matriz de adjacência e os da matriz laplaciana sem sinal. Entre os vários problemas estudados que envolvem a matriz A_α, podemos apontar: obtenção do menor valor de α para o qual A_α seja positiva semidefinida (Nikiforov [2017]; Nikiforov e Rojo [2017]; Brondani *et al.* [2022]), obtenção do A_α-espectro para determinadas famílias de grafos (Nikiforov [2017]; Brondani *et al.* [2019]; Tahir e Zhang [2020]), determinação do A_α-espectro para o grafo resultante de operações entre outros grafos (Nikiforov [2017]; Lin *et al.* [2018b]; Li e Wang [2019a]; Chen *et al.* [2019]), procurar grafos determinados pelo seu A_α-espectro (Lin *et al.* [2017], Tahir e Zhang [2018], Liu e Liu [2018], Chen *et al.* [2019]) e, além desses, obter cotas inferiores e superiores para os autovalores da matriz A_α (Lin *et al.* [2018a], Lin *et al.* [2018b], Wang *et al.* [2020], Liu *et al.* [2020a], Liu *et al.* [2020b], Pirzada [2022]).

Nesta linha, esta tese tem como objetivos abordar os seguinte problemas:

(*i*) apresentar o polinômio característico da matriz A_α de algumas operações entre grafos e de algumas famílias;

(*ii*) obter cotas superiores e cotas inferiores para alguns autovalores da matriz A_α de um grafo e de seu grafo linha e quando possível, exibir grafos extremais para as referidas cotas;

(*iii*) comparar as cotas obtidas entre si e com algumas já existentes na literatura.

Esta tese está estruturado da seguinte maneira: no Capítulo I, são fornecidas definições de Álgebra Linear, Teoria dos Grafos e TEG, juntamente com resultados relevantes da literatura. Em seguida, o Capítulo II se dedica a apresentar definições e resultados relacionados à matriz A_α. Este capítulo inclui uma revisão dos resultados envolvendo essa matriz que são pertinentes ao presente estudo. Posteriormente, no Capítulo III, são discutidos os principais resultados obtidos para o polinômio característico da matriz A_α em grafos obtidos pela coalescência de dois grafos, em grafos linha e em grafos resultantes de outras operações sobre um grafo regular. No Capítulo IV, são apresentadas cotas superiores e inferiores para o maior, segundo maior e menor autovalores da matriz A_α, juntamente com a caracterização de alguns grafos extremais. Comparativos entre as novas cotas e as existentes na literatura são abordados no Capítulo V. Em seguida, os resultados

sobre grafos linha são discutidos no Capítulo VI. Por fim, no Capítulo VII, são apresentadas algumas considerações finais sobre a tese e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo I Preliminares

Com o objetivo de tornar este documento o mais autocontido possível, são apresentados neste capítulo resultados fundamentais e essenciais para a compreensão do texto. Os temas abordados são sobre Álgebra Linear, Teoria dos Grafos e Teoria Espectral dos Grafos. Todos os resultados estão devidamente referenciados, e as respectivas demonstrações não serão fornecidas aqui, uma vez que estão disponíveis nas referências mencionadas. É importante observar que algumas referências são utilizadas apenas para consulta do resultado, não sendo o(s) referido(s) autor(es) o(s) responsável(is) direto do mesmo.

Para um aprofundamento nas definições e notações sobre Teoria dos Grafos, sugerimos Harary [1969], Godsil e Royle [2001], Diestel [2005] e Merris [2011]; para as relacionadas à Álgebra Linear, incluindo a Teoria de Matrizes, sugerimos Goldberg [1959], Bueno [2006] e Horn e Johnson [2013]; e, por fim, para aquelas relativas à Teoria Espectral de Grafos, sugerimos Cvetković *et al.* [1980], Cvetković *et al.* [1997] e Cvetković *et al.* [2010].

I.1 Álgebra Linear

Uma matriz A, $n \times m$ (lê-se "n por m") é uma coleção de escalares de um corpo F dispostos em n linhas e m colunas. Costuma representar-se a matriz A como um quadro numérico no qual o elemento a_{ij} situa-se no cruzamento da i-ésima linha com a j-ésima coluna:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix}$$

Neste trabalho adotamos $F = \mathbb{R}$ e, por isso, dizemos que A é uma matriz real. Denotamos por $M_{n\times m}(\mathbb{R})$ o conjunto de todas as matrizes reais $n \times m$ e, quando $n = m$, por $M_{n\times n}(\mathbb{R})$, ou apenas M_n, e nesse caso dizemos que $A = [a_{ij}] \in M_n$ é uma matriz quadrada de ordem n. O vetor $(a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{im}) \in \mathbb{R}^m$ é o $i-$ésimo vetor-linha da matriz A e o vetor $(a_{1j}, a_{2j}, \dots, a_{nj}) \in \mathbb{R}^n$ é o $j-$ésimo vetor-coluna da matriz A. As entradas a_{ii} são ditas entradas diagonais de $A \in M_n$ e o conjunto de todas as suas entradas diagonais é a diagonal principal de A. Dados $1 \leq i, j \leq n$, se para $i \neq j, a_{ij} = 0$, então A é chamada de matriz diagonal . Denotamos a matriz de ordem n cujas

entradas são iguas a 1 por $\mathbf{J}_n$ e a matriz identidade de ordem n, que é uma matriz diagonal tal que todas as entradas diagonais são iguais a 1, por I_n.

Uma matriz $A \in M_n$ diz-se simétrica quando $a_{ij} = a_{ji}$ para todo $1 \leq i, j \leq n$ e é dita não negativa se para todo i e j, $a_{ij} \geq 0$.

Definição 1. (Goldberg [1959]) *A submatriz principal de uma matriz é uma matriz obtida, da matriz original, pela remoção de linhas e de colunas com os mesmos índices.*

A seguir é apresentada a definição da função determinante.

Definição 2. (Bueno [2006]) *Sejam $c_1, \ldots, c_n \in \mathbb{R}^n$. O determinante $\det(c_1, \ldots, c_n)$ é uma função*

$$\begin{aligned} \det : \mathbb{R}^n \times \ldots \times \mathbb{R}^n &\to \mathbb{R} \\ (c_1, \ldots, c_n) &\mapsto \det(c_1, \ldots, c_n) \end{aligned}$$

satisfazendo as seguintes propriedades:

(d_1) $\det$ *é uma função alternada, isto é, se $c_i = c_j$ para $i \neq j$, $i, j \in \{1, \ldots, n\}$, então*

$$\det(c_1, \ldots, c_n) = 0;$$

(d_2) $\det(c_1, \ldots, c_n)$ *é uma função n-linear, isto é, é uma aplicação linear em cada coordenada, as outras sendo mantidas fixas; ou seja, se todos os c_j com $j \neq i$ estiverem fixos,*

$$\det(c_1, \ldots, \lambda c_i + c_i', \ldots, c_n) = \lambda \det(c_1, \ldots, c_i, \ldots, c_n) + \det(c_1, \ldots, c_i', \ldots, c_n);$$

(d_3) $\det(e_1, \ldots, e_n) = 1$, *em que $\{e_1, \ldots, e_n\}$ é a base canônica do $\mathbb{R}^n$.*

É claro que a definição de uma função satisfazendo as propriedades da Definição 2 pode ser expressa em termos de matrizes: se $A = (c_1, c_2, \ldots, c_n)$ for uma matriz $n \times n$ (com colunas $c_1, c_2, \ldots, c_n$), então $\det(A) = \det(c_1, c_2, \ldots, c_n)$. Além disso, outras propriedades da função determinante seguem imediatamente da Definição 2, as quais se encontram no Lema I.1.1.

Lema I.1.1. (Bueno [2006]) *Uma função que satisfaz as propriedades (d_1) e (d_2) também satisfaz as propriedades*

(d_4) $\det$ *é uma função antissimétrica, isto é, se trocarmos c_i por c_j, então o valor de* $\det$ *é multiplicado por -1. Sendo mais preciso,*

$$\det(c_1, \ldots, c_i, \ldots, c_j, \ldots, c_n) = -\det(c_1, \ldots, c_j, \ldots, c_i, \ldots, c_n);$$

(d_5) Se somarmos a um vetor c_i um múltiplo do vetor c_j, o valor de det *não se altera;*

(d_6) Se $c_1, \ldots, c_n$ forem linearmente dependentes, então $\det(c_1, \ldots, c_n) = 0$.

Uma matriz de blocos é uma matriz cujas entradas são matrizes. Para mais detalhes sobre esse tipo de matrizes e como operá-las indicamos Horn e Johnson [2013] e Golub e Van Loan [1996]. O Teorema I.1.2 apresenta como calcular o determinante de uma matriz de blocos.

Teorema I.1.2. (Horn e Johnson [2013]; Silvester [2000]) *Seja M uma matriz de blocos dada por*

$$M = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}.$$

Se A e D forem matrizes quadradas, então

$$\det(M) = \begin{cases} \det(A)\det(D - CA^{-1}B), & \text{se } A^{-1} \text{ existe} \\ \det(D)\det(A - BD^{-1}C), & \text{se } D^{-1} \text{ existe.} \end{cases}$$

Uma matriz quadrada S é uma matriz de permutação se exatamente uma entrada em cada linha e coluna é igual a 1 e todas as outras entradas são 0. A multiplicação por tais matrizes produz uma permutação das linhas ou colunas da matriz multiplicada.

Definição 3. (Horn e Johnson [2013]) *Uma matriz $A \in M_n$ é redutível se existe uma matriz permutação $S \in M_n$ tal que*

$$S^T A S = \begin{pmatrix} B & C \\ \mathbf{0}_{n-r,r} & D \end{pmatrix}, \ e\ 1 \leq r \leq n-1.$$

Caso contrário dizemos que A é irredutível.

Na definição anterior, não se exige que os blocos B, C e D tenham entradas não nulas. Quer-se apenas que o bloco inferior esquerdo nulo de ordem $(n-r) \times r$ possa ser criado por uma sequência de trocas de linhas e/ou colunas.

Definição 4. *Um escalar $\lambda \in \mathbb{R}$ é chamado autovalor de $A \in M_n$ se existe um vetor $x \in \mathbb{R}^n$ não nulo, tal que $Ax = \lambda x$. O vetor x é chamado de autovetor de A associado ao autovalor λ. Quando necessário, escrevemos $\lambda = \lambda(A)$ para destacar que λ é um autovalor associado à matriz A.*

Tais autovalores são indexados em ordem não crescente e denotados por $\lambda_1(A) \geq \ldots \geq \lambda_n(A)$.

Definição 5. *O polinômio característico de $A \in M_n$ é definido por*

$$P_A(\lambda) = |\lambda I_n - A| = \det(\lambda I_n - A).$$

Note que as raízes desse polinômio são os autovalores de A e, quando esta é simétrica, são todos reais. A multiplicidade algébrica de um autovalor $\lambda_i(A)$ é sua multiplicidade como raiz do polinômio característico. Quando a multiplicidade algébrica do autovalor $\lambda_i(A)$ é s, denotamos tal fato por $\lambda_i^{(s)}(A)$. O conjunto de autovalores de A, juntamente com as respectivas multiplicidades, é chamado de espectro de A ou A-espectro e denotado por $\sigma(A)$. Já a multiplicidade geométrica de um autovalor $\lambda_i(A)$ é a dimensão do subespaço gerado pelos autovetores a ela associados.

O teorema abaixo estabelece uma relação entre os autovalores das matrizes resultantes do produto de duas outras matrizes. Essa relação é detalhada no Teorema 1.3.22 de Horn e Johnson [2013].

Teorema I.1.3. (Horn e Johnson [2013]) *Sejam $A \in M_{m,n}(\mathbb{R})$ e $B \in M_{n,m}(\mathbb{R})$ com $m \leq n$. Então, os n autovalores de BA são os m autovalores de AB junto com $n - m$ zeros; ou seja, $P_{BA}(\lambda) = \lambda^{n-m} P_{AB}(\lambda)$.*

O próximo lema permite obter uma cota inferior para o maior autovalor de uma matriz não negativa, em função das entradas dessa matriz.

Lema I.1.4. (Kolotilina [1993]; Chen e Wang [2010]) *Sejam $A = (a_{ij})$ uma matriz de ordem $n \geq 2$ não negativa, $\lambda_1(A)$ o maior autovalor de A e $\theta = \min\limits_{1 \leq i \leq n} \{a_{ii}\}$. Então,*

$$\lambda_1(A) \geq \max_i \left\{ \frac{a_{ii} + \theta}{2} + \sqrt{\frac{(a_{ii} - \theta)^2}{4} + \sum_{i \neq j} a_{ij} a_{ji}} \right\}. \tag{I.1}$$

Além disso, se A é irredutível com $n \geq 3$, e pelo menos duas linhas (duas colunas) de A contém mais de uma entrada nula fora da diagonal, a desigualdade é estrita.

Seja $A \in M_{m \times n}$. Definimos $S_i(A)$ como a soma dos elementos da i-ésima linha de A, dada por $S_i(A) = \sum\limits_{j=1}^{n} a_{ij}$, onde $1 \leq i \leq m$. O Teorema 8.1.21 de Horn e Johnson [2013], referido nesta tese como Teorema I.1.5, utiliza a função S_i para estabelecer cotas inferiores e superiores para o maior autovalor de uma matriz quadrada não negativa.

Teorema I.1.5. (Horn e Johnson [2013]) *Seja $A \in M_n$ não negativa. Então*

$$\min_{1 \leq i \leq n} S_i(A) \leq \lambda_1(A) \leq \max_{1 \leq i \leq n} S_i(A).$$

O Teorema I.1.6, conhecido como o *Teorema de Perron-Frobenius*, desempenha um papel significativo na TEG. Esse teorema estabelece que uma matriz não negativa e irredutível possui um raio espectral positivo. Sua formalização pode ser consultada em Horn e Johnson [2013], no Teorema 8.4.4.

Teorema I.1.6 (Perron-Frobenius)**. (Horn e Johnson [2013])** *Se $A \in M_n$ é uma matriz irredutível e não negativa, então*

(i) $\lambda_1(A) > 0$.

(ii) $\lambda_1(A)$ *é um autovalor simples de* A.

(iii) Existe um único vetor positivo x*, a menos de multiplicação por escalar positivo tal que* $Ax = \lambda_1(A)x$.

Seja P um conjunto e $\pi = \{P_1, \ldots, P_k\}$ uma partição de P. Suponha que a matriz A tenha suas linhas e colunas indexadas por P. A partição de A com relação a π é considerada uma partição equilibrada se cada submatriz A_{ij}, formada pelas linhas cujos índices estão em P_i e as respectivas colunas cujos índices estão em P_j, tiver uma soma de linhas constante igual a q_{ij}. Além disso, a matriz $N = [q_{ij}]_{1 \leq i,j \leq k}$ é chamada de matriz quociente de A com relação a π. O Teorema I.1.7 relaciona os autovalores de A com os da sua matriz quociente.

Teorema I.1.7. (Francis *et al.* [2018]) *Seja A uma matriz quadrada de ordem n e suponha que A tenha uma partição equilibrada $\pi = \{P_1, P_2, \ldots, P_k\}$. Seja N a matriz quociente de A com relação à partição π. Então, os autovalores de N são autovalores de A.*

Um dos teoremas clássicos da Álgebra Linear e muito utilizado em TEG é o Teorema de Weyl. Neste contexto, as desigualdades de Weyl para os autovalores de matrizes simétricas de grafos são fundamentais. Essas desigualdades se encontram no Teorema I.1.8, mencionado nesta tese e detalhadas em Horn e Johnson [2013], no Teorema 4.3.1.

Teorema I.1.8 (Weyl)**. (Horn e Johnson [2013])** *Sejam $A, B \in M_n$ matrizes simétricas e os espectros de A, de B, e de $A+B$ dados por $\sigma(A) = \{\lambda_1(A), \ldots, \lambda_n(A)\}$, $\sigma(B) = \{\lambda_1(B), \ldots, \lambda_n(B)\}$ e $\sigma(A+B) = \{\lambda_1(A+B), \ldots, \lambda_n(A+B)\}$, respectivamente. Então,*

$$\lambda_{i+j-1}(A+B) \leq \lambda_i(A) + \lambda_j(B), \quad j = 1, \ldots, n-i+1 \tag{I.2}$$

para cada $i = 1, \ldots, n$, com igualdade para algum par i, j se e só se existir um vetor não nulo x tal que $Ax = \lambda_i x$, $Bx = \lambda_j x$ e $(A+B)x = \lambda_{i+j-1}x$. Além disso,

$$\lambda_i(A) + \lambda_j(B) \leq \lambda_{i+j-n}(A+B), \quad j = i, \ldots, n \tag{I.3}$$

para cada $i = 1, \ldots, n$, com igualdade para algum par i, j se e só se existir um vetor não nulo x tal que $Ax = \lambda_i x$, $Bx = \lambda_j x$ e $(A+B)x = \lambda_{i+j-n}x$. Se A e B não tiverem um autovetor comum, então as desigualdades em (I.2) e (I.3) são estritas.

Como resultado direto do Teorema I.1.8, surge o seguinte corolário, disponível em Horn e Johnson [2013], no Corolário 4.3.15.

Corolário I.1.9. (Horn e Johnson [2013]) *Sejam $A, B \in M_n$ simétricas. Então,*

$$\lambda_i(A) + \lambda_n(B) \leq \lambda_i(A+B) \leq \lambda_i(A) + \lambda_1(B), \tag{I.4}$$

com $i = 1, \ldots, n$. A igualdade na cota superior ocorre se, e somente se, existe um vetor não nulo x que é autovetor de A, B e $A+B$ com autovalores correspondentes $\lambda_i(A)$, $\lambda_1(B)$ e $\lambda_i(A+B)$. Analogamente, a igualdade na cota inferior ocorre se, e somente se, existe um vetor não nulo x que é autovetor de A, B e $A+B$ com autovalores correspondentes $\lambda_i(A)$, $\lambda_n(B)$ e $\lambda_i(A+B)$.

Os menores e os maiores autovalores de uma matriz simétrica A podem ser caracterizados como as soluções para problemas de mínimo e de máximo envolvendo o quociente de Rayleigh, $\frac{x^TAx}{x^Tx}$, como é possível ver no Teorema I.1.10, cuja demonstração pode ser encontrada em Horn e Johnson [2013] no Teorema 4.2.2.

Teorema I.1.10 (Rayleigh)**. (Horn e Johnson [2013])** *Seja $A \in M_n$ uma matriz simétrica, cujos autovalores são ordenados de forma não crescente. Então $\lambda_n(A) \leq \frac{x^TAx}{x^Tx} \leq \lambda_1(A)$ para todo vetor unitário $x \in \mathbb{R}^n$, com a igualdade do lado esquerdo (direito) ocorrendo se e somente se $Ax = \lambda_n(A)x$ (respectivamente, $Ax = \lambda_1(A)x$). Além disso,*

$$\lambda_n(A) = \min_{x \neq 0} \frac{x^TAx}{x^Tx} \text{ e } \lambda_1(A) = \max_{x \neq 0} \frac{x^TAx}{x^Tx}$$

O resultado a seguir é conhecido como Teorema do Entrelaçamento e sua demonstração pode ser encontrada em Marcus e Minc [1964]. As desigualdades nele presentes são conhecidas como desigualdades de Cauchy e são muito utilizadas em TEG.

Teorema I.1.11 (Entrelaçamento)**. (Marcus e Minc [1964])** *Sejam A uma matriz simétrica com autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_n$ e B uma de suas matrizes principais. Se os autovalores de B são $\nu_1 \geq \nu_2 \geq \ldots \geq \nu_m$ então $\lambda_{n-m+i} \leq \nu_i \leq \lambda_i$ $(i = 1, \ldots, m)$.*

I.2 Teoria dos Grafos

Um grafo finito consiste em um par de objetos constituídos por um conjunto finito não vazio $V = V(G)$ e um subconjunto (possivelmente vazio) $E = E(G)$ de pares não ordenados de elementos de V. Normalmente escrito por $G = (V, E)$, os elementos de V são os vértices de G e os elementos de E são suas arestas. Se u e v denotarem vértices de G, na maioria das vezes, usaremos uv em vez de $\{u, v\}$ para denotar a aresta que incide em u e em v. As cardinalidades dos conjuntos V

e E são denotadas, na devida ordem, por $n = |V|$ e $m = |E|$ onde a primeira indica a ordem do grafo e a segunda seu tamanho. Um grafo G é simples quando não tem mais de uma aresta entre dois vértices e nenhuma aresta começa e termina no mesmo vértice. Em outras palavras, um grafo simples é um grafo sem loops e sem arestas múltiplas.

Se $v_iv_j \in E$ dizemos que v_i é adjacente a v_j (ou v_j é adjacente a v_i) e denotamos por $v_i \sim v_j$; caso contrário, $v_i \nsim v_j$. Para cada $v \in V$, o conjunto dos vértices que são vizinhos a v é denotado por N_v e $|N_v|$ a sua cardinalidade. Um subgrafo de um grafo G é um grafo H tal que $V(H) \subset V(G)$ e $E(H) \subset E(G)$. O subgrafo H do grafo G é dito induzido quando dois vértices que pertencem $V(H)$ são adjacentes em H se e somente se também são adjacentes em G. Uma clique em G é um subconjunto de vértices adjacentes dois a dois. O número de clique, $\omega(G)$, de G é definido como a ordem da maior clique em G.

O grau de $v \in V$, denotado por $d(v)$, é o número de vizinhos de v, ou seja, $|N_v|$. O grau mínimo de G é $\delta(G) := \min\{d(v) : v \in V\}$ e o grau máximo de G é $\Delta(G) := \max\{d(v) : v \in V\}$. Eventualmente, usamos d_i, Δ e δ para representar $d(v_i)$, $\Delta(G)$ e $\delta(G)$, respectivamente. Assumimos que os vértices estão rotulados de forma que $\Delta = d_1 \geq d_2 \geq \ldots \geq d_n = \delta$ e a sequência de graus é definida por $d(G) = (d_1, \ldots, d_n)$. A matriz de graus de G, denotada por $D(G)$, é a matriz diagonal que possui o grau do vértice v_i, $d(v_i)$, na i-ésima posição. Denotamos por m_i o grau médio dos vértices adjacentes ao vértice v_i, ou seja, $m_i = \dfrac{\sum\limits_{v_j \sim v_i} d_j}{d_i}$ e por $\overline{d}$ o grau médio do grafo, ou seja, $\overline{d} = \dfrac{\sum\limits_{i=1}^{n} d_i}{n} = \dfrac{2m}{n}$. O grafo G é chamado de r-regular se cada vértice de G possui grau igual a r e é chamado de birregular se e somente se sua sequência de graus possui apenas dois valores diferentes.

Um passeio de comprimento k em G, de v_i a v_j, é uma sequência de seus vértices $v_i = u_0, u_1, u_2, \ldots, u_k = v_j$ tal que $u_{i-1}u_i \in E$, $1 \leq i \leq k$. Um caminho é um passeio no qual os vértices são todos distintos. Um grafo G é conexo se G possui um vértice isolado ou para todo par de seus vértices, existe um caminho que os liga. Denotamos o grafo *caminho* com n vértices por P_n, o grafo *completo* por K_n, o grafo *estrela* por $K_{1,n-1}$ e o grafo *bipartido completo* de ordem $n = n_1 + n_2$ por K_{n_1,n_2}. Um grafo G é chamado de *bipartido semirregular*, com parâmetros (n_1, n_2, r_1, r_2), se G for bipartido de forma que $V = V_1 \cup V_2$ onde $n_1 = |V_1|$ e $n_2 = |V_2|$, e os vértices na mesma partição têm o mesmo grau, em outras palavras, os vértices de V_1 têm grau r_1 e os vértices de V_2 têm grau r_2, tais que $n_1r_1 = n_2r_2$. Um grafo livre de triângulo é um grafo tal que quaisquer três vértices não formam um grafo K_3. Sejam u e w vértices de um grafo conexo G. A distância, $d(u, w)$, é o comprimento do caminho mais curto em G de u a w. O diâmetro de G, denotado por $diam(G)$, é a maior distância entre dois vértices de G, isto é, $diam(G) = \max\limits_{u,w \in V(G)} d(u, w)$.

Sejam G um grafo e $k \geq 3$ um número inteiro. Um ciclo, em G, de comprimento k é uma

sequência $v_1, v_2, \ldots, v_k$ de vértices distintos tais que $\{v_i v_{i+1} : 1 \leq i \leq k-1\} \subset E$ e $e_k = v_k v_1$. O grafo *ciclo* de comprimento n, denotado por C_n, é um grafo conexo 2-regular. A cintura de G, $g(G)$, é o comprimento do ciclo mais curto em G. Um grafo sem ciclos é chamado de floresta. Uma floresta com uma única componente conexa é uma árvore.

Um subconjunto não vazio $I \subset V$ é denominado *independente* se e somente se os seus elementos não são adjacentes dois a dois. O *número de independência* de G, $\gamma(G)$, é a maior cardinalidade entre todos os conjuntos independentes de G.

O primeiro e segundo *índices de Zagreb*, definidos por

$$Z_1(G) := \sum_{i=1}^{n} d^2(v_i) \text{ e}$$
$$Z_2(G) := \sum_{uv \in E(G)} d(u)d(v),$$

respectivamente, foram introduzidos por Gutman e Trinajstić [1972]. O primeiro índice geral de Zagreb é definido por $Z^{(p)}(G) = \sum_{i=1}^{n} d^p(v_i)$, para $p \in \mathbb{R}$, $p \neq 0$ e $p \neq 1$, e parece ter sido considerado pela primeira vez por Li e Zhao [2004] e Li e Zheng [2005]. Para $p = 2$, temos $Z^{(2)}(G) = Z_1(G)$ e o estudo de seus limites e propriedades pode ser encontrado em Nikolić *et al.* [2003]; Das [2004]; Cioabă [2006] e Das *et al.* [2015]. Para $p = 3$, temos $Z^{(3)}(G) = F(G)$, chamado de índice topológico "esquecido" ou índice F, cujo estudo aparece em Gutman e Trinajstić [1972]; Furtula e Gutman [2015]; Javaid *et al.* [2021]. Os dois próximos teoremas apresentam um limite inferior e superior, respectivamente, para $Z_1(G)$ usando apenas Δ, δ, m e n.

Teorema I.2.1. (Das [2003]) *Seja G um grafo simples com n vértices, m arestas, grau mínimo δ e grau máximo Δ. Então, para $n \geq 3$, $Z_1(G) \geq \Delta^2 + \delta^2 + \frac{(2m - \Delta - \delta)^2}{n-2}$. Além disso, a igualdade ocorre se, e somente se, $d_2 = \cdots = d_{n-1}$.*

Teorema I.2.2. (Das [2003]) *Seja G um grafo conexo com n vértices, m arestas e grau mínimo δ. Então, $Z_1(G) \leq 2mn - n(n-1)\delta + 2m(\delta - 1)$. Além disso, a igualdade ocorre se, e somente se, G é um grafo estrela ou um grafo regular.*

A proposição a seguir, mostra uma cota inferir para o índice F de um grafo G em função do $Z_1(G)$.

Proposição I.2.3. (Furtula e Gutman [2015]) *Seja G um grafo com m arestas, cujo primeiro índice de Zagreb é $Z_1(G)$. Então,*

$$F(G) \geq \frac{Z_1(G)^2}{2m}$$

A igualdade é atingida no caso em que G é regular.

O índice geral de Randić é definido por $R_a(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d(u)d(v))^a$, com $a \in \mathbb{R}^*$ e foi introduzido em Bollobás e Erdös [1998]. Um estudo sobre as cotas do índice de Randić pode ser encontrado em Zhou e Luo [2009] e não é difícil observar que existe um relação entre esses índices topológicos, por exemplo, $R_1(G) = Z_2(G)$. O próximo teorema apresenta uma cota inferior para $R_a(G)$ em função do número de arestas e do grau médio do grafo G.

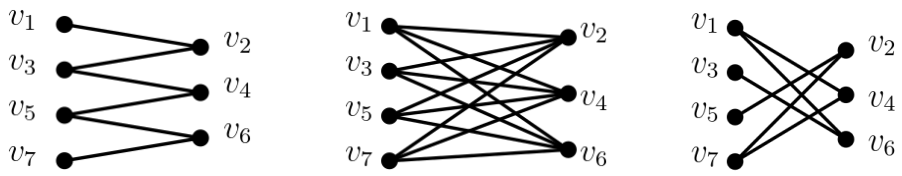
Teorema I.2.4. (Zhou e Luo [2009]; Ilić e Stevanović [2011]; Elphick e Wocjan [2015]) *Seja G um grafo com n vértices e $m \geq 1$ arestas. Então, para $a \geq 0$,*

$$R_a \geq m\overline{d}^{2a}$$

com a igualdade se e somente se G é regular.

I.2.1 Operações em grafos

O complemento de G, denotado por $\overline{G} = (\overline{V}, \overline{E})$, é o grafo obtido de G com o mesmo conjunto de vértices, $\overline{V} = V$, e $v_iv_j \in \overline{E}$ se e somente se $v_iv_j \notin E$. O complemento bipartido de um grafo bipartido conexo G com partições V_1 e V_2 é um grafo bipartido, denotado por $\widetilde{G}$, tal que $\widetilde{G}$ possui arestas entre V_1 e V_2 exatamente onde G não possui, ou seja, $V(\widetilde{G}) = V(K_{|V_1|,|V_2|})$ e $E(\widetilde{G}) = E(K_{|V_1|,|V_2|}) - E(G)$. Na Figura I.1 é possivel ver os grafos P_7 e $\widetilde{P_7}$.



(a) *Grafo P_7.* (b) Grafo $K_{4,3}$. (c) Grafo $\widetilde{P_7}$.

Figura I.1: Grafos P_7, $K_{4,3}$ e $\widetilde{P_7}$.

Sejam $G = (V, E)$ e $H = (W, F)$ grafos disjuntos, ou seja, $V \cap W = \varnothing$. A união de G e H é o grafo, denotado por $G \cup H$, de modo que $G \cup H = (V \cup W, E \cup F)$. Uma coalescência de G e H, denotada por $G \cdot H$, é um grafo de ordem $|V|+|W|-1$ que resulta de identificar algum vértice de G com algum vértice de H.

O *join* de G e H, denotado por $G \vee H$, é o grafo obtido de $G \cup H$ pela adição de arestas de cada vértice de G a todo vértice de H, isto é, $V(G \vee H) = V \cup W$ e $E(G \vee H) = E \cup F \cup \{vw : v \in V \text{ e } w \in W\}$. Considere o grafo obtido por $K_s \vee (n-s)K_1$ e denotado por $CS_{s,n-s}$. Esse grafo é denominado de grafo *split completo*[1]. Considere agora o grafo obtido por $C_n \vee K_1$. Esse grafo é denotado por W_n e recebe o nome de grafo *roda*. Na Figura I.2 é possivel observar o $W_6 \cong C_6 \vee K_1$.

[1] Um grafo é dito *Split completo* se o conjunto dos seus vértices puder ser particionado em um conjunto independente e uma clique, de modo que cada vértice no conjunto independente seja adjacente a cada vértice na clique

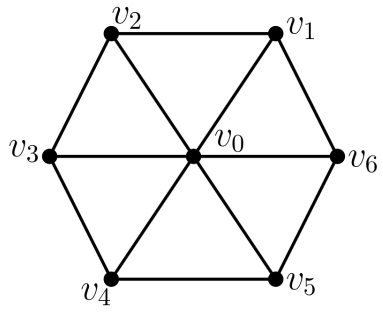


Figura I.2: Grafo roda W_6.

O grafo linha de G, denotado por $l(G)$, é obtido da seguinte maneira: cada aresta em G é um vértice em $l(G)$ e, duas arestas que em G incidem num mesmo vértice originam uma aresta em $l(G)$. É possivel observar na Figura I.3 um grafo G e seu grafo linha.

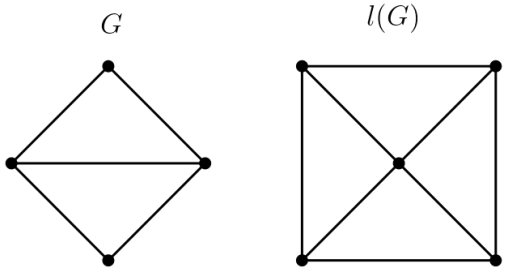


Figura I.3: Grafo G e $l(G)$.

Observação I.2.5. *A caracterização do grafo e de seu grafo linha é estabelecida pela condição de que, se G é um grafo conexo com n vértices, então $l(G)$ é um grafo completo se e somente se G é isomorfo a $K_{1,n-1}$ ou K_3. Uma demonstração para este fato pode ser encontrada em Yan [2002].*

Na Proposição I.2.6 temos uma condição suficiente para caracterizar grafos a partir de seu grafo linha.

Proposição I.2.6. (Cvetkovic *et al.* [2004]) *Se G é um grafo conexo e $l(G)$ é regular, então G é regular ou semirregular bipartido.*

Observação I.2.7. *É importante destacar que é possível obter relações entre o grau dos vértices de G e de $l(G)$, ou seja, se G um grafo não vazio com m arestas e cujo conjunto de vértices é $V(G) = \{v_1, \ldots, v_n\}$. Então:*

- *$l(G)$ possui m vértices e $\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} d^2(v_i) - m$ arestas.*
- *O grau de um vértice $e = v_i v_j$ em $l(G)$ é $d(e) = d(v_i) + d(v_j) - 2$.*
- *$\delta(l(G)) \geq 2\delta(G) - 2$ com a igualdade se e somente se G possui dois vértices adjacentes de grau $\delta(G)$.*

- $\Delta(l(G)) \leq 2\Delta(G) - 2$ *com a igualdade ocorrendo se e somente se* G *possui dois vértices adjacentes de grau* $\Delta(G)$.

Uma fonte de consulta para esses resultados é Beineke e Bagga [2021].

A Proposição I.2.8 relaciona um subgrafo de um grafo e seus respectivos grafos linha.

Proposição I.2.8. (Beineke e Bagga [2021]) *Se* H *é um subgrafo não vazio de* G*, então* $l(H)$ *é um subgrafo induzido de* $l(G)$.

Agora vamos apresentar grafos obtidos de G por inserção de vértices e/ou arestas, começando pelo grafo subdivisão de G, $S(G)$, é o grafo obtido pela inserção de um novo vértice em cada uma das arestas de G. O grafo $R(G)$ é obtido a partir de G adicionando, para cada aresta $uv \in E$, um novo vértice cujos vizinhos são u e v. Denotamos por $\mathscr{Q}(G)$ o grafo obtido de G inserindo um novo vértice em cada aresta de G, unindo por arestas os pares de novos vértices que se encontram em arestas adjacentes de G. O grafo total de G, denotado por $T(G)$, é o grafo cujos vértices são os vértices e as arestas de G, de modo que dois vértices de $T(G)$ são adjacentes se, e somente se, os elementos correspondentes de G forem adjacentes ou incidentes. Um exemplo de cada um desses grafos pode ser observado na Figura I.4.

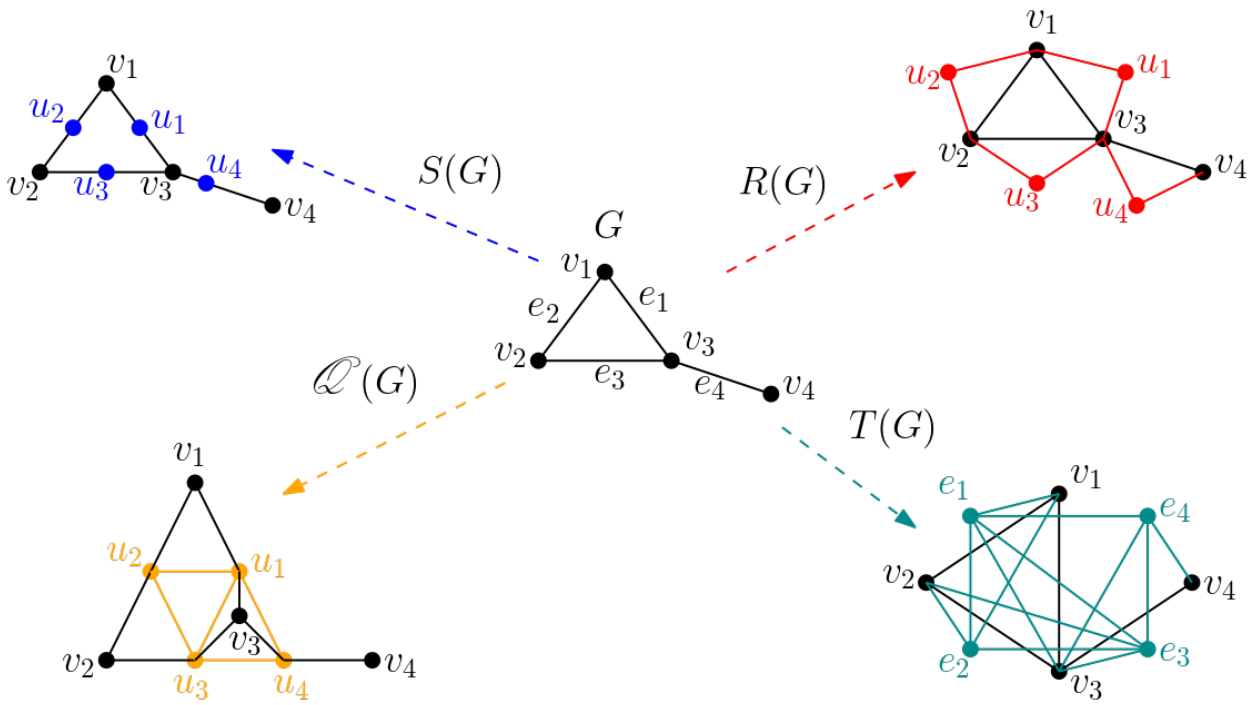


Figura I.4: Grafos G, $S(G)$, $R(G)$, $\mathscr{Q}(G)$ e $T(G)$.

I.2.2 Famílias de grafos

Algumas das famílias de grafos exploradas neste trabalho são amplamente conhecidas na literatura, e, por essa razão, foram previamente mencionadas. No entanto, dado que outras famílias que

serão referenciadas ao longo do texto podem não ser familiares a todos os leitores, nesta seção se introduzem as respectivas definições.

Definição 6. (Watanabe e Schwenk [1979]) *Uma árvore é dita starlike se possui exatamente um vértice de grau maior que dois.*

Na Figura I.5, apresentamos um exemplo de *starlike*.

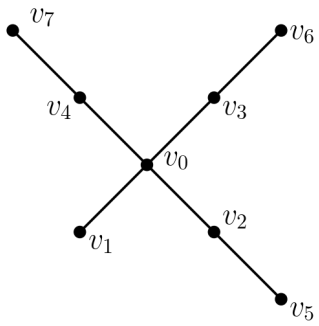


Figura I.5: Exemplo de uma árvore *starlike*.

Definição 7. (Grossman *et al.* [1979]) *Considere $G \cong K_{1,n}$, $H \cong K_{1,m+1}$. Seja $G \cdot H$ o grafo obtido pela coalescência, identificando um vértice de grau 1 de H com o vértice de grau n de G. Esse grafo, representado na Figura I.6, é denominado de dupla estrela e é denotado por $D(m, n)$.*

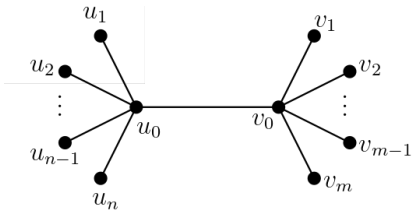


Figura I.6: Grafo dupla estrela $D(m, n)$.

Definição 8. *Considere $G \cong K_{1,n+1}$ e $H \cong K_{1,m+1}$ com $m \neq n$. O grafo obtido pela coalescência de G e H $(G \cdot H)$, identificando dois vértices de grau 1, pode ser observado na Figura I.7. Esse grafo é denominado vassoura dupla e é denotado por $B(3, n, m)$.*

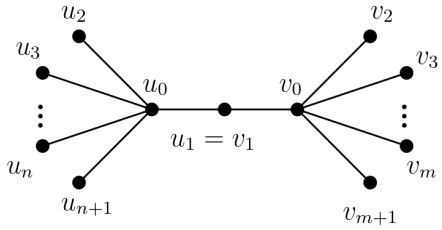


Figura I.7: Grafo vassoura dupla $B(3, n, m)$.

Definição 9. (Zhang e Zhang [2009]) *O grafo pineapple,denotado por K_p^q, é obtido pela adição de q arestas pendentes a um vértice do grafo K_p, onde $q \geq 1$ e $p \geq 3$.*

A Figura I.8, apresenta um exemplo do grafo *pineapple*.

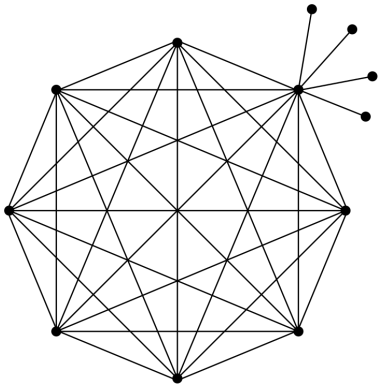
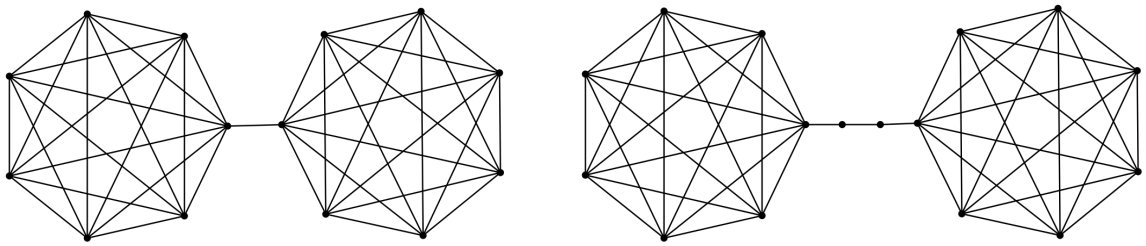


Figura I.8: Grafo *pineapple* K_8^4.

Definição 10. (Brondani [2017]) *Dados os inteiros não negativos s e l, o grafo dupla pipa (double kite), denotado por $DK(s;l)$, é o grafo obtido pela coalescência de um dos vértices pendentes do caminho P_{l+2} com um vértice do grafo completo K_s e o outro vértice pendente do mesmo caminho com um vértice de outro grafo completo K_s. Tais grafos têm ordem $n = 2s + l$.*

A Figura I.9, apresenta dois exemplos do grafo dupla pipa.



(a) $DK(7,0)$ (b) $DK(7,2)$

Figura I.9: Grafos dupla pipa.

Definição 11. (Stanković *et al.* [2009]; Freitas *et al.* [2010]) *Seja KK_n^l o grafo obtido de duas cópias do grafo completo K_n pela adição de l arestas entre um vértice de uma cópia de K_n a l vértices na outra cópia de K_n, onde $1 \leq l \leq n$.*

A Figura I.10, apresenta o grafo KK_7^3.

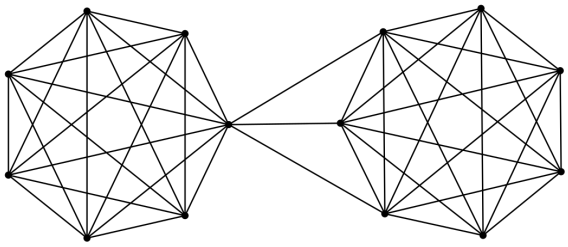


Figura I.10: Grafo KK_7^3.

Definição 12. (Brondani *et al.* [2022]) *Dados inteiros n e l tais que $n \geq 3$ e $1 \leq l \leq n$. Seja H_n^l o grafo obtido de duas cópias do grafo completo K_n pela adição l arestas entre l vértices de uma cópia de K_n a seus correspondentes vértices na outra cópia.*

A Figura I.11, exibe o grafo H_7^5.

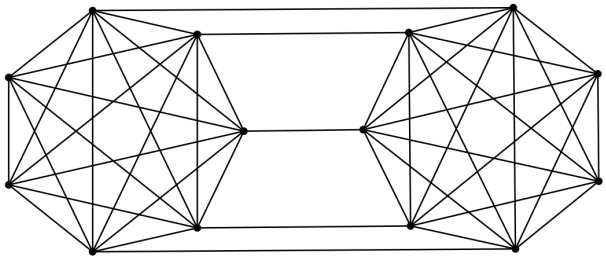


Figura I.11: Grafo H_7^5.

Observação I.2.9. *Vale destacar que $KK_n^1 \cong H_n^1 \cong DK(n, 0)$.*

Definição 13. (Aouchiche *et al.* [2011]) *Um grafo firefly, denotado por $\boldsymbol{F}_{s,r,t}$, é um grafo com $n = 2r + s + 2t + 1$ vértices que consiste em s arestas pendentes, r triângulos e t caminhos pendentes de comprimento 2, todos compartilhando um mesmo vértice. Além disso, $\mathscr{F}_n$ representa o conjunto de todos os grafos firefly com n vértices.*

A Figura I.12, apresenta o grafo *firefly* $\mathbf{F}_{4,2,3}$.

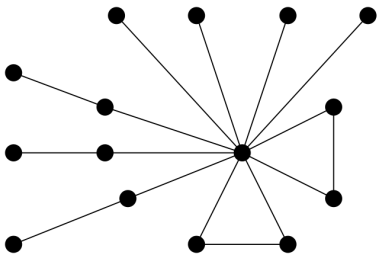


Figura I.12: Grafo $\mathbf{F}_{4,2,3}$.

Definição 14. (Rényii e Sós [1966]) *Um grafo friendship é aquele em que cada par de vértices tem exatamente um vizinho em comum.*

O grafo *friendship* é um caso particular do grafo $\mathbf{F}_{s,r,t}$ com $s = 0$, $t = 0$ e $r \neq 0$.

Definição 15. (Hosoya e Harary [1993]; Noy e Ribó [2004]) *Um grafo escada L_n é constituído por duas cópias disjuntas do grafo P_n, cada uma denominada "trilho". Cada vértice em um trilho está conectado ao seu vértice correspondente no outro trilho por uma única aresta, resultando em n arestas de interconexão entre os trilhos. Essa estrutura cria uma representação visual de uma escada. Este grafo possui $2n$ vértices e $3n - 2$ arestas.*

A Figura I.13, exibe o grafo escada L_5.

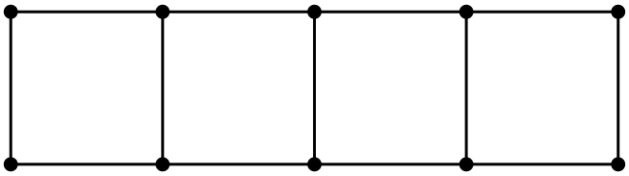


Figura I.13: Grafo L_5.

Definição 16. (Siddiqui *et al.* [2013]) *Um grafo de Helm, denotado por H_n é um grafo simples obtido de um grafo roda com $n+1$ vértices adicionando uma aresta pendente a cada vértice de seu ciclo C_n.*

A Figura I.14, apresenta o grafo H_6.

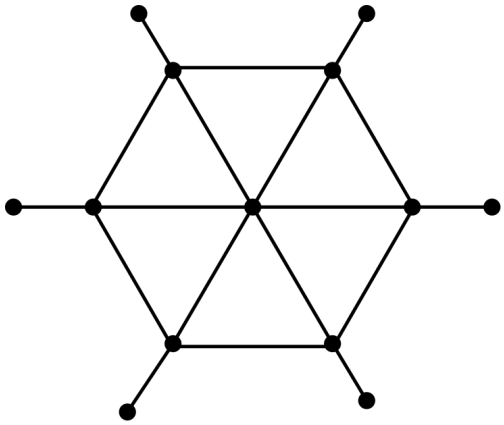


Figura I.14: Grafo H_6.

I.3 Teoria Espectral dos Grafos

Nesta seção são apresentadas as definições de matriz de adjacência, matriz de incidência, matriz Laplaciana e matriz Laplaciana sem sinal. Além disso, são enunciados e referenciados resultados relacionados a essas matrizes e seus autovalores, e que são fundamentais para a compreensão deste texto. Ademais, resultados que envolvem o polinômio característico também são apresentados nesta seção.

I.3.1 Matriz de Adjacência

A matriz de adjacência de G, denotada por $A = A(G) = [a_{ij}]$, é uma matriz quadrada e simétrica de ordem n, tal que $a_{ij} = 1$ se $v_i \sim v_j$ e $a_{ij} = 0$ caso contrário. O maior autovalor $\lambda_1(A)$ é chamado *raio espectral* ou *índice* de G.

O Teorema I.3.1 caracteriza os grafos bipartidos em função de seus autovalores e na sequência a Proposição I.3.2 exibe algumas propriedades sobre o espectro de um grafo r-regular.

Teorema I.3.1. (Cvetković *et al.* [2010]) *Um grafo G é bipartido se e só se o espectro da matriz de adjacência for simétrico em relação à origem.*

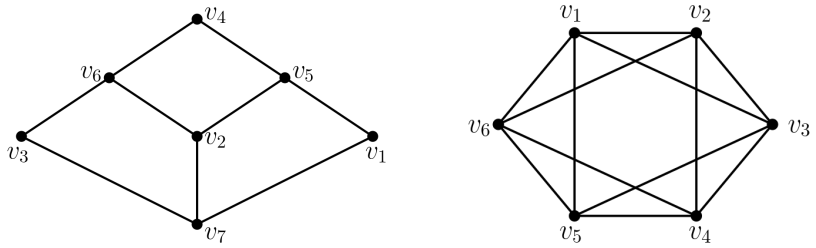
Proposição I.3.2. (Biggs [1974]; Cvetković *et al.* [2010]) *Seja G um grafo r-regular. Então*

(i) r é um autovalor de $A(G)$;

(ii) G é um grafo conexo se, e somente se, a multiplicidade algébrica de r é 1;

(iii) todo autovalor λ de $A(G)$ satisfaz $|\lambda| \leq r$.

Exemplo 1. *Na Figura I.15a temos um grafo bipartido com partições $V_1 = \{v_1, v_2, v_3, v_4\}$ e $V_2 = \{v_5, v_6, v_7\}$ cujo espectro é $\sigma(A(G)) = \{-2,6458; -1^{(2)}; 0; 1^{(2)}; 2,6458\}$ e na Figura I.15b temos um grafo 4-regular cujo espectro é $\sigma(A(H)) = \{4, 0^{(3)}, -2^{(2)}\}$*



(a) Grafo bipartido G. (b) Grafo regular H.

Figura I.15: Grafos referidos no Exemplo 1.

A proposição I.3.3 exibe dois autovalores de $A(G)$, quando G é um grafo semirregular bipartido.

Proposição I.3.3. (Runge [1976]; Cvetković *et al.* [1980]) *Seja G um grafo semirregular bipartido com parâmetros inteiros positivos n_1, n_2, r_1 e r_2, tais que $n_1 \geq n_2$. Então $\pm\sqrt{r_1 r_2}$ são autovalores de $A(G)$.*

No Teorema I.3.4 é apresentada uma relação entre $P_{A(l(G))}$ e $P_{A(G)}$, quando G é um grafo bipartido semirregular. Este resultado foi obtido por Cvetković em 1971, e sua demonstração se encontra em Cvetković *et al.* [2010].

Teorema I.3.4. (Cvetković [1971]) *Seja G um grafo bipartido semirregular com n_1 vértices independentes de grau r_1, n_2 vértices independentes de grau r_2, com $n_1 \geq n_2$. Então,*

$$P_{A(l(G))}(\lambda) = (\lambda + 2)^{\beta} P_{A(G)}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2}) \sqrt{\left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right)^{n_1 - n_2}},$$

onde $\alpha_i = \lambda - r_i + 2$ para $i = 1, 2$ e $\beta = n_1 r_1 - n_1 - n_2$.

A seguir, no Teorema I.3.5, temos um resultado que relaciona as raízes do polinômio característico do grafo G, bipartido conexo r-regular, com seu complemento bipartido.

Teorema I.3.5. (Tamara e Zoran [2013]) *Seja G um grafo bipartido conexo r-regular com $2n$ vértices e $\widetilde{G}$ seja o seu complemento bipartido. Então,*

$$\frac{P_{A(G)}(\lambda)}{\lambda^2 - r^2} = \frac{P_{A(\widetilde{G})}(\lambda)}{\lambda^2 - (n-r)^2}.$$

Observe que, se G é um grafo regular bipartido desconexo, então o seu complemento bipartido não é unicamente determinado, mas mesmo assim a relação acima permanece inalterada.

Como consequência dos Teoremas I.1.5 e I.1.6 resulta o Lema I.3.6.

Lema I.3.6. (Ellingham e Zha [2000]) *Seja G um grafo conexo com n vértices. Sejam $P(x)$ uma função polinomial qualquer e $S_v(P(A(G)))$ a soma da linha de $P(A(G))$ correspondentes a cada vértice v. Então*

$$\min_{v \in V} S_v(P(A)) \leq P(\lambda_1(A(G)) \leq \max_{v \in V} S_v(P(A)).$$

Além disso, a igualdade ocorre se, e somente se, as somas das linhas de $P(A(G))$ forem todas iguais.

A seguir enunciamos o Lema I.3.7, cuja prova é também apresentada, uma vez que no artigo original ela é feita no decorrer da demonstração de um teorema.

Lema I.3.7. (Hong *et al.* [2001]) *Seja G um grafo com n vértices, m arestas e grau mínimo δ. Então, $S_v(A^2(G) - (\delta - 1)A(G)) \leq 2m - \delta(n-1)$.*

Demonstração. Note-se que $S_v(A^k(G))$ é exatamente o número de passeios de comprimento k em G que começam em v. Em particular, $S_v(A(G))$ é $d(v)$ e $S_v(A^2(G)) = \sum_{u \sim v} d(u)$. Portanto,

$$\begin{aligned} S_v(A^2(G)) &= \sum_{u \sim v} d(u) \\ &= 2m - d(v) - \sum_{u \nsim v, u \neq v} d(u) \\ &\leq 2m - d(v) - (n - d(v) - 1)\delta \\ &= 2m + (\delta - 1)d(v) - \delta(n-1). \end{aligned}$$

Daí,

$$S_v(A^2(G) - (\delta - 1)A(G)) \leq 2m - \delta(n-1).$$

□

Os próximos três resultados apresentam cotas para $\lambda_2(A)$ e para $\lambda_n(A)$, que envolvem o número de independência do grafo. Haemers [2021] explica sobre como o resultado presente no Teorema I.3.10 foi obtido por Hoffman, mas não publicado.

Teorema I.3.8. (Nikiforov [2006]) *Seja G um grafo r-regular de ordem n e número de independência $\gamma(G)$, então*

$$\lambda_2(A(G)) \geq -1 + \frac{2(n-1-r)^{\gamma(G)}}{\gamma(G)n^{\gamma(G)-1}}.$$

Teorema I.3.9. (Haemers [1980]) *Seja G um grafo de ordem n com grau mínimo $\delta \neq 0$ e número de independência $\gamma(G)$, então*

$$\lambda_n(A(G)) \leq \frac{\gamma(G)\delta^2}{\lambda_1(A(G))(\gamma(G)-n)}.$$

Teorema I.3.10. (Cvetković *et al.* [2010]; Haemers [2021]) *Se G é um grafo r-regular de ordem n com número de independência $\gamma(G)$, então*

$$\lambda_n(A(G)) \leq \frac{\gamma(G)r}{\gamma(G)-n}.$$

Em seguida, são apresentados alguns resultados diversos que também envolvem cotas para alguns autovalores da matriz de adjacencia de um grafo.

Lema I.3.11. (Csikvári [2022]) *Seja G um grafo livre de triângulos com n vértices. Então,*

$$\lambda_n(A(G)) \leq \frac{\lambda_1^2(A(G))}{\lambda_1(A(G))-n}.$$

Teorema I.3.12. (Tamara e Zoran [2013]) *Seja G um grafo bipartido conexo r-regular com n vértices. Então, $\lambda_2(A(G)) \leq \frac{n}{2} - r$.*

Corolário I.3.13. (Tamara e Zoran [2013]) *Seja G um grafo bipartido r-regular com n vértices. Então, $\lambda_1(A(G)) + \lambda_2(A(G)) \leq \frac{n}{2}$. Além disso, $\lambda_1(A(G)) + \lambda_2(A(G)) = \frac{n}{2}$ se, e somente se, o complemento bipartido de G é desconexo.*

Teorema I.3.14. (Ebrahimi B *et al.* [2008]) *Se G é um grafo regular de ordem n, então $\lambda_1(A(G)) + \lambda_2(A(G)) \leq n-2$. Além disso, $\lambda_1(A(G)) + \lambda_2(A(G)) = n-2$ se, e somente se, o complemento de G possui uma componente que é um grafo bipartido.*

Para finalizar, apresentamos um resultado sobre o espectro dos grafos linha.

Teorema I.3.15. (Biggs [1974]) *Sejam G um grafo com m arestas e $\lambda_i(A(l(G)))$, para todo $i \in \{1, \ldots, m\}$, os autovalores da matriz de adjacência do grafo linha $l(G)$. Então $\lambda_i(A(l(G)) \geq -2$.*

I.3.2 Matriz de Incidência, Laplaciana e Laplaciana sem sinal

A matriz de incidência de G, denotada por $B = B(G) = [b_{ij}]$, é uma matriz de ordem $n \times m$, de modo que $b_{ij} = 1$ se e_j for uma aresta incidente em v_i e $b_{ij} = 0$ caso contrário. As matrizes

Laplaciana e Laplaciana sem sinal de G são definidas por $L = L(G) = D(G) - A(G)$ e $Q = Q(G) = A(G) + D(G)$, respectivamente.

Os dois primeiros Lemas, a seguir apresentados, são clássicos na literatura e envolvem a matriz de incidência. Serão utiizados neste trabalho, principalmente em resultados que envolvem grafos linha.

Lema I.3.16. (Cvetković *et al.* [2010]) *Sejam G um grafo com m arestas e $B(G)$ a matriz de incidência de G. Então, $B^TB = 2I_m + A(l(G))$.*

Lema I.3.17. (Cvetković *et al.* [2010]) *Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Considere B e D a matriz de incidência e a matriz de graus de G, respectivamente. Então, $BB^T = D(G)+A(G)$.*

As duas próximas proposições permitem caracterizar o grafo G, na primeira apenas pelo menor autovalor da sua matriz Laplaciana sem sinal, e na segunda pela relação entre $P_{L(G)}$ e $P_{Q(G)}$.

Proposição I.3.18. (Cvetković *et al.* [1997]) *O menor autovalor da matriz Laplaciana sem sinal de um grafo conexo é igual a 0 se e somente se o grafo é bipartido. Nesse caso 0 possui multiplicidade algébrica igual a 1.*

Proposição I.3.19. (Cvetković *et al.* [2007]) *$L(G)$ e $Q(G)$ possuem o mesmo polinômio característico se, e somente se, G é bipartido.*

Capítulo II Matriz A_α

A ideia principal da TEG consiste em procurar e estudar propriedades intrínsecas de um grafo através do espectro de diversas matrizes a ele associada. Como visto no Capítulo I, algumas dessas matrizes provém de relações com outras, como a matriz Laplaciana e a Laplaciana sem sinal, sendo esta introduzida por Cvetkovic [2005] e estudada extensivamente desde então. Vale destacar que, mesmo possuindo uma definição simples, o estudo sobre $Q(G)$ revelou similaridades e diferenças entre $L(G)$ e $A(G)$ como podemos ver em Lin *et al.* [2013] e Jahanbani e Sheikholeslami [2022].

Confluindo a esse raciocínio, Nikiforov [2017] propôs o estudo da família de matrizes $A_\alpha(G)$ definida pela combinação linear convexa de $A(G)$ e $D(G)$, da seguinte forma:

$$A_\alpha(G) := \alpha D(G) + (1-\alpha)A(G), \quad \alpha \in [0,1].$$

É imediato que $A_0(G) = A(G)$, $A_1(G) = D(G)$ e $2A_{\frac{1}{2}}(G) = Q(G)$. Desta forma, a família de matrizes $A_\alpha(G)$ fundamenta também uma teoria unificada das matrizes $A(G)$ e $Q(G)$. Assim, $A(G)$, $Q(G)$ e $D(G)$ podem ser vistas sob um novo enfoque e continuam gerando situações e problemas estudados por diversos pesquisadores. É importante destacar que a matriz $A_\alpha(G)$ é um subconjunto das matrizes de adjacência generalizadas, referidas em van Dam e Haemers [2003] e da matriz de adjacência universal definidas em Haemers e Omidi [2011].

Uma análise mais aprofundada sobre as cotas dos autovalores da referida matriz é abordada neste capítulo. Neste contexto, conduz-se uma pesquisa bibliográfica, explorando o estado da arte relacionado a essa matriz. Além disso, é apresentada uma síntese de resultados significativos e definições pertinentes associadas a ela.

II.1 Conceitos Fundamentais

Nesta primeira seção são apresentados alguns resultados introdutórios sobre a matriz A_α. Como $A_\alpha(G)$ é uma matriz real e simétrica, a Proposição II.1.1 decorre diretamento do princípio de Rayleigh.

Proposição II.1.1. (Nikiforov [2017]) *Se $\alpha \in [0,1]$ e G é um grafo de ordem n, então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) = \max_{x\neq 0} \frac{x^T A_\alpha(G) x}{x^T x} \quad e \quad \lambda_n(A_\alpha(G)) = \min_{x\neq 0} \frac{x^T A_\alpha(G) x}{x^T x}. \tag{II.1}$$

Além do mais, se x é um vetor unitário, então $\lambda_1(A_\alpha(G)) = x^T A_\alpha(G)x$ se, e somente se, x é um autovetor de $\lambda_1(A_\alpha(G))$, e $\lambda_n(A_\alpha(G)) = x^T A_\alpha(G)x$ se, e somente se, x é um autovetor $\lambda_n(A_\alpha(G))$.

O Lema II.1.2 mostra que, para grafos regulares, existe uma correspondência linear entre $\lambda_k(A_\alpha(G))$ e $\lambda_k(A(G))$ para $k = 1, \ldots, n$ e para todo $\alpha \in [0, 1]$.

Lema II.1.2. (Nikiforov [2017]) *Se $\alpha \in [0, 1]$, $k = 1, \ldots, n$ e G é um grafo r-regular de ordem n, então existe uma correspondência linear entre os autovalores de $A_\alpha(G)$ e $A(G)$, da seguinte forma*

$$\lambda_k(A_\alpha(G)) = \alpha r + (1 - \alpha)\lambda_k(A(G)) \text{ e } \lambda_1(A_\alpha(G)) = r, \quad \forall \alpha \in [0, 1]. \tag{II.2}$$

O Proposição II.1.3 é uma adaptação do Teorema I.1.6 para as matrizes A_α.

Proposição II.1.3. (Nikiforov [2017]) *Sejam $\alpha \in [0, 1)$, G um grafo e x um autovetor não negativo associado a $\lambda_1(A_\alpha(G))$.*

(i) Se G é conexo, então x é positivo e único, a menos de multiplicação por escalar positivo;

(ii) Se G é desconexo e P é o conjunto dos vértices com entradas positivas de x, então o subgrafo induzido por P é uma união de componentes H de G com $\lambda_1(A_\alpha(H)) = \lambda_1(A_\alpha(G))$;

(iii) Se G é conexo e μ é um autovalor de $A_\alpha(G)$ com um autovetor não negativo, então $\mu = \lambda_1(A_\alpha(G))$;

(iv) Se G é conexo e H é um subgrafo próprio de G, então $\lambda_1(A_\alpha(H)) < \lambda_1(A_\alpha(G))$.

II.2 A_α-espectro para algumas famílias de grafos

Nesta seção, apresentamos os espectros de algumas famílias de grafos. Inicialmente, destacamos os espectros exibidos por Nikiforov [2017], que são empregados em alguns dos resultados desta tese. Os A_α-espectros que ele exibe incluem: do grafo completo (Proposição II.2.1), do grafo bipartido completo (Proposição II.2.2) e do grafo estrela (Corolário II.2.3).

Proposição II.2.1. (Nikiforov [2017]) *Os autovalores de $A_\alpha(K_n)$ são $\lambda_1(A_\alpha(K_n)) = n - 1$ e $\lambda_k(A_\alpha(K_n)) = \alpha n - 1$ para $2 \leq k \leq n$.*

Proposição II.2.2. (Nikiforov [2017]) *Sejam $a \geq b \geq 1$. Se $\alpha \in [0,1]$, os autovalores de $A_\alpha(K_{a,b})$ são*

$$\begin{aligned}
\lambda_1(A_\alpha(K_{a,b})) &= \frac{1}{2}\left(\alpha(a+b) + \sqrt{\alpha^2(a+b)^2 + 4ab(1-2\alpha)}\right), \\
\lambda_{\min}(A_\alpha(K_{a,b})) &= \frac{1}{2}\left(\alpha(a+b) - \sqrt{\alpha^2(a+b)^2 + 4ab(1-2\alpha)}\right), \\
\lambda_k(A_\alpha(K_{a,b})) &= \alpha a \text{ para } 1 < k \leq b, \\
\lambda_k(A_\alpha(K_{a,b})) &= \alpha b \text{ para } b < k < a+b.
\end{aligned}$$

Corolário II.2.3. (Nikiforov [2017]) *Os autovalores de $A_\alpha(K_{1,n-1}))$ são*

$$\begin{aligned}
\lambda_1(A_\alpha(K_{1,n-1})) &= \frac{1}{2}\left(\alpha n + \sqrt{\alpha^2 n^2 + 4(n-1)(1-2\alpha)}\right), \\
\lambda_n(A_\alpha(K_{1,n-1})) &= \frac{1}{2}\left(\alpha n - \sqrt{\alpha^2 n^2 + 4(n-1)(1-2\alpha)}\right), \\
\lambda_k(A_\alpha(K_{1,n-1})) &= \alpha \text{ para } 1 < k < n.
\end{aligned}$$

Lin *et al.* [2018b] determinaram todos ou autovalores da matriz A_α do grafo $CS_{s,n-s}$.

Proposição II.2.4. (Lin *et al.* [2018b]) *O A_α-espectro do grafo $CS_{s,n-s}$ é:*

$$\begin{aligned}
\sigma(A_\alpha(G)) = \Bigg\{ & n\alpha - 1^{(s-1)}, \quad s\alpha^{(n-s-1)}, \\
& \frac{n\alpha + s - 1 - \sqrt{(n\alpha+s-1)^2 - 4s\alpha(s-1) + 4s(n-s)(1-2\alpha)}}{2}, \\
& \frac{n\alpha + s - 1 + \sqrt{(n\alpha+s-1)^2 - 4s\alpha(s-1) + 4s(n-s)(1-2\alpha)}}{2} \Bigg\}
\end{aligned}$$

Na Proposição II.2.5, Brondani *et al.* [2019] exibiram alguns autovalores do grafo *firefly*.

Proposição II.2.5. (Brondani *et al.* [2019]) *Dados inteiros não negativos r, s e t, seja $G \cong \mathbf{F}_{s,r,t}$ e $\alpha \in (0,1)$. Se $t \geq 2$, então $\theta_1 = \dfrac{3\alpha + \sqrt{5\alpha^2 - 8\alpha + 4}}{2}$ e $\theta_2 = \dfrac{3\alpha - \sqrt{5\alpha^2 - 8\alpha + 4}}{2}$ são autovalores de G, ambos com multiplicidade de no mínimo $t-1$. Além disso, se $r \geq 2$ então $\alpha+1$ é um autovalor de G com multiplicidade de no mínimo $r-1$.*

Seguindo a mesma notação utilizada por Brondani *et al.* [2019], usamos nos próximos resultados θ_1 e θ_2 para representar as raízes do polinômio $\lambda^2 - 3\alpha\lambda + \alpha^2 + 2\alpha - 1$. Nos resultados a seguir, os autores apresentam o espectro dos grafos da família $\mathscr{F}_n$.

Proposição II.2.6. (Brondani *et al.* [2019]) *Seja* $G \cong \mathbf{F}_{0,r,0}$[1]. *Se* $r \geq 1$ *e* $\alpha \in (0,1)$ *então*

$$P_{A_\alpha(G)}(\lambda) = (\lambda - \alpha - 1)^{r-1}(\lambda - 3\alpha + 1)^r(\lambda^2 - (2\alpha r + \alpha + 1)\lambda + (6\alpha - 2)r)$$

Além disso, se x_1 *e* x_2 *denotam as raízes do fator de grau dois de* $P_{A_\alpha(G)}(\lambda)$ *então*

$$\begin{cases} x_2 \leq 3\alpha - 1 < \alpha + 1 < x_1, & se\ 0 < \alpha \leq \dfrac{1}{3}, \\ 3\alpha - 1 \leq x_2 < \alpha + 1 < x_1, & se\ \dfrac{1}{3} < \alpha < 1. \end{cases}$$

Proposição II.2.7. (Brondani *et al.* [2019]) *Seja* $G \cong \mathbf{F}_{0,0,t}$[2]. *Se* $t \geq 1$ *e* $\alpha \in (0,1)$ *então*

$$P_{A_\alpha(G)}(\lambda) = (\lambda^2 - 3\alpha\lambda + \alpha^2 + 2\alpha - 1)^{t-1}h(\lambda),$$

onde $h(\lambda)$ *é um polinômio de grau 3 em* λ. *Se* x_1, x_2 *e* x_3 *são as raízes de* $h(\lambda)$ *então* $x_3 < \theta_2 < x_2 < \theta_1 < x_1$.

Proposição II.2.8. (Brondani *et al.* [2019]) *Seja* $G \cong \mathbf{F}_{s,r,0}$. *Se* $s \geq 1$, $r \geq 1$ *e* $\alpha \in (0,1)$ *então*

$$P_{A_\alpha(G)}(\lambda) = (\lambda - \alpha)^{s-1}(\lambda - 3\alpha + 1)^r(\lambda - \alpha - 1)^{r-1}h(\lambda),$$

onde $h(\lambda)$ *é um polinômio de grau 3 em* λ. *Se* x_1, x_2 *e* x_3 *são as raízes de* $h(\lambda)$ *então*

$$\begin{cases} x_3 < 3\alpha - 1 < \alpha < x_2 < \alpha + 1 < x_1, & se\ 0 < \alpha \leq \dfrac{1}{3}, \\ \min\{x_3, 3\alpha - 1\} < \max\{x_3, 3\alpha - 1\} < \alpha < x_2 < \alpha + 1 < x_1, & se\ \dfrac{1}{3} < \alpha < \dfrac{1}{2}, \\ x_3 < \alpha < 3\alpha - 1 < x_2 < \alpha + 1 < x_1, & se\ \dfrac{1}{2} \leq \alpha < 1. \end{cases}$$

Proposição II.2.9. (Brondani *et al.* [2019]) *Seja* $G \cong \mathbf{F}_{s,0,t}$[2]. *Se* $s \geq 1$, $t \geq 1$ *e* $\alpha \in (0,1)$ *então*

$$P_{A_\alpha(G)}(\lambda) = (\lambda - \alpha)^{s-1}(\lambda^2 - 3\alpha\lambda + \alpha + 2\alpha - 1)^{t-1}h(\lambda),$$

onde $h(\lambda)$ *é um polinômio de grau 4 em* λ. *Além disso* $h(\lambda)$ *possui quatro raízes distintas* x_1, x_2, x_3 *e* x_4, *tais que* $x_4 < \theta_2 < x_3 < \alpha < x_2 < \theta_1 < x_1$.

Proposição II.2.10. (Brondani *et al.* [2019]) *Seja* $G \cong \mathbf{F}_{0,r,t}$. *Se* $r \geq 1$, $t \geq 1$ *e* $\alpha \in (0,1)$ *então*

$$P_{A_\alpha(G)}(\lambda) = (\lambda - 3\alpha + 1)^r(\lambda - \alpha - 1)^{r-1}(\lambda^2 - 3\alpha\lambda + \alpha + 2\alpha - 1)^{t-1}h(\lambda),$$

[1]Como já definido anteriormente, esse grafo recebe o nome de grafo *friendship* e é um caso particular da família de grafos de *Dutch windmill*.

[2]Observe que $\mathbf{F}_{0,0,t}$ e $\mathbf{F}_{s,0,t}$ são árvores starlike.

onde $h(\lambda)$ é um polinômio de grau 4 em λ. Se x_1, x_2, x_3 e x_4 são raízes de $h(\lambda)$, então

$$\begin{cases} x_4 < \theta_2 < \min\{x_3, 3\alpha - 1\} < \max\{x_3, 3\alpha - 1\} < \theta_1 < x_2 < \alpha + 1 < x_1, & se\ 0 < \alpha < \dfrac{1}{3}, \\ x_4 < \theta_2 < 3\alpha - 1 < x_3 < \theta_1 < x_2 < \alpha + 1 < x_1, & se\ \dfrac{1}{3} < \alpha < 1. \end{cases}$$

Proposição II.2.11. (Brondani *et al.* [2019]) *Seja $G \cong \mathbf{F}_{s,r,t}$. Se $s \geq 1$, $r \geq 1$, $t \geq 1$ e $\alpha \in (0, 1)$ então*

$$P_{A_\alpha(G)}(\lambda) = (\lambda - \alpha)^{s-1}(\lambda - 3\alpha + 1)^r(\lambda - \alpha - 1)^{r-1}(\lambda^2 - 3\alpha\lambda + \alpha + 2\alpha - 1)^{t-1}h(\lambda),$$

onde $h(\lambda)$ é polinômio de grau 5 em λ, cujas raízxes são x_1, x_2, x_3, x_4 e x_5 tais que

$$x_5 < \theta_2 < x_4 < \min\{\alpha, 3\alpha - 1\} < \max\{\alpha, 3\alpha - 1\} < x_3 < \theta_1 < x_2 < \alpha + 1 < x_1.$$

Além desse espectros, Brondani *et al.* [2022] exibiram alguns autovalores da matriz A_α para as famílias de grafos K_p^q, H_n^l e KK_n^l.

Teorema II.2.12. (Brondani *et al.* [2022]) *Se $\alpha \in [0, 1)$ então*

$$P_{A_\alpha(K_p^q)}(\lambda) = (\lambda - \alpha p + 1)^{p-2}(\lambda - \alpha)^{q-1}f(\lambda),$$

onde $f(\lambda)$ é um polinômio de grau 3 em λ. Se x_1, x_2 e x_3 são raízes de $f(\lambda)$ então

$$\begin{cases} x_3 < \alpha p - 1 \leq \alpha < x_2 < x_1, & \text{se } 0 \leq \alpha \leq \dfrac{1}{p-1} \\ x_3 < \alpha < \alpha p - 1 < x_2 < x_1, & \text{se } \dfrac{1}{p-1} < \alpha < 1. \end{cases}$$

E, como consequência do teorema anterior, Brondani *et al.* [2022] exibem uma cota para $\lambda_2(A_\alpha(K_p^q))$.

Corolário II.2.13. (Brondani *et al.* [2022]) *Se $\alpha \in [0, 1)$, então*

$$\max\{\alpha, \alpha p - 1\} < \lambda_2(A_\alpha(K_p^q)) < p - 1.$$

Teorema II.2.14. (Brondani *et al.* [2022]) *Se $\alpha \in [0, 1)$, então*

$$P_{A_\alpha(H_n^l)}(\lambda) = (\lambda - \alpha n + 1)^{2n-2l-2}(\lambda - \alpha n)^{l-1}(\lambda - \alpha n - 2\alpha + 2)^{l-1}h_1(\lambda)h_2(\lambda),$$

onde $h_1(\lambda) = \lambda^2 - (\alpha n + n - 1)\lambda + \alpha n^2 - \alpha n - (1 - \alpha)l$ e $h_2(\lambda) = \lambda^2 - (\alpha n + n + 2\alpha - 3)\lambda + n(\alpha n - 1) + (\alpha - 1)[(2\alpha - 1)l + n - 2]$.

Teorema II.2.15. (Brondani *et al.* [2022]) *Seja $\alpha \in [0,1)$. Então*

$$P_{A_\alpha(KK_n^l)}(\lambda) = (\lambda - \alpha n + 1)^{2n-l-3}(\lambda - \alpha n - \alpha + 1)^{l-1} g(\lambda)$$

onde

$$g(\lambda) = \lambda^4 - [(2n+\ell+1)\alpha + 2n - 4]\,\lambda^3 + \left\{[(n+2)l + n(n+1)]\,\alpha^2 + (2n-3)(2n+l+1)\alpha + (n-3)^2 - (l-3)\right\}\lambda^2$$
$$- \left\{2nl\alpha^3 + 2\left[l^2 + n(n-1)(n+l+1) - l\right]\alpha^2 + \left[-3l^2 + (n^2-2n)\ell + 2n^3 - 7n^2 + 2n + 3\right]\alpha - l^2 + (2n-3)l + 2n^2\right.$$
$$\left. -6n + 4\right\}\lambda + 2l(n^2 - n + l)\alpha^3 + \left\{(2n-7)l^2 + (n-1)n[(n-3)l + n^2 - 1]\right\}\alpha^2 + \left[(7-3n)l^2 + (n-2)(n-1)l\right.$$
$$\left. -(2n+1)(n-1)^2\right]\alpha + (n-2)\ell^2 - (n-2)(n-1)\ell + (n-1)^2.$$

Corolário II.2.16. (Brondani *et al.* [2022]) *Se $\alpha \in \left(\frac{1}{2}, 1\right)$ então $\lambda_{2n}(A_\alpha(KK_n^l)) = \alpha n - 1$.*

A seguir, são fornecidos os espectros de duas famílias de grafos, os quais foram determinados no âmbito deste trabalho. Apesar de terem sido previamente apresentados por outros autores, optamos por abordá-los de maneira distinta. Na Proposição II.2.17, apresentamos o espectro de um tipo específico de grafo dupla pipa além dos autovetores correspondentes. Já na Proposição II.2.18, desceveremos o espectro de um grafo bipartido de ordem $2n$ e $(n-1)$-regular.

Proposição II.2.17. *Seja e_i o i-ésimo vetor da base canônica de $\mathbb{R}^n$. O espectro de $A_\alpha(DK(n,0))$ é:*

$$\sigma(A_\alpha(DK(n,0))) = \left\{\frac{\Upsilon_1}{2}, \frac{\Upsilon_2}{2}, \frac{\Upsilon_3}{2}, \frac{\Upsilon_4}{2}, n\alpha - 1^{(2n-4)}\right\},$$

tal que

$$\Upsilon_1 = n\alpha + n - 1 - \sqrt{(n\alpha + n - 1)^2 - 4(\alpha - 1)}$$
$$\Upsilon_2 = n\alpha + n - 1 + \sqrt{(n\alpha + n - 1)^2 - 4(\alpha - 1)}$$
$$\Upsilon_3 = n(\alpha+1) + 2\alpha - 3 - \sqrt{(n\alpha - n)^2 + (2n\alpha + 1)(2n-3) - 4\alpha(n^2 - \alpha(n+1) - 2)} \text{ e}$$
$$\Upsilon_4 = n(\alpha+1) + 2\alpha - 3 - \sqrt{(n\alpha - n)^2 + (2n\alpha + 1)(2n-3) - 4\alpha(n^2 - \alpha(n+1) - 2)}.$$

Além disso os autovetores são:

$$\left(\underbrace{1,\ldots,1}_{n-1},\frac{\alpha+n-2}{\alpha-1}-\frac{\Upsilon_1}{2(\alpha-1)},\frac{\alpha+n-2}{\alpha-1}-\frac{\Upsilon_1}{2(\alpha-1)},\underbrace{1,\ldots,1}_{n-1}\right),$$
$$\left(\underbrace{1,\ldots,1}_{n-1},\frac{\alpha+n-2}{\alpha-1}-\frac{\Upsilon_2}{2(\alpha-1)},\frac{\alpha+n-2}{\alpha-1}-\frac{\Upsilon_2}{2(\alpha-1)},\underbrace{1,\ldots,1}_{n-1}\right),$$
$$\left(\underbrace{-1,\ldots,-1}_{n-1},\frac{-\alpha-n+2}{\alpha-1}+\frac{\Upsilon_3}{2(\alpha-1)},\frac{\alpha+n-2}{\alpha-1}-\frac{\Upsilon_3}{2(\alpha-1)},\underbrace{1,\ldots,1}_{n-1}\right),$$
$$\left(\underbrace{-1,\ldots,-1}_{n-1},\frac{-\alpha-n+2}{\alpha-1}+\frac{\Upsilon_4}{2(\alpha-1)},\frac{\alpha+n-2}{\alpha-1}-\frac{\Upsilon_4}{2(\alpha-1)},\underbrace{1,\ldots,1}_{n-1}\right),$$
$$e_i-e_1,\quad \forall i,\quad 1\leq i\leq n-1\ e$$
$$e_j-e_{n+2},\quad \forall j,\quad n+3\leq j\leq 2n.$$

Demonstração. Utilizando uma rotulação conveniente para os vértices de $DK(n,0)$ podemos representar $A_\alpha(DK(n,0))$ da seguinte maneira:

$$A_\alpha(DK(n,0))=\left[\begin{array}{c:c:c:c} B_{11} & (1-\alpha)\mathbf{J}_{(n-1)\times 1} & \mathbf{0}_{(n-1)\times 1} & \mathbf{0}_{(n-1)\times(n-1)} \\ \hdashline (1-\alpha)\mathbf{J}^T_{(n-1)\times 1} & n\alpha & 1-\alpha & \mathbf{0}_{1\times(n-1)} \\ \hdashline \mathbf{0}^T_{(n-1)\times 1} & 1-\alpha & n\alpha & (1-\alpha)\mathbf{J}_{1\times(n-1)} \\ \hdashline \mathbf{0}^T_{(n-1)\times(n-1)} & \mathbf{0}^T_{1\times(n-1)} & (1-\alpha)\mathbf{J}^T_{1\times(n-1)} & B_{44} \end{array}\right]$$

onde $B_{11}=B_{44}$ são de ordem $(n-1)\times(n-1)$ definidas por:

$$b_{ij}=\begin{cases}(n-1)\cdot\alpha & ,\ \text{se}\ \ i=j\\ 1-\alpha & ,\ \text{caso contrário.}\end{cases},$$

Tomando uma partição equilibrada do conjunto de vértices de $DK(n,0)$, obtemos a matriz quociente de $A_\alpha(DK(n,0))$ com relação a essa partição dada por

$$M=\begin{bmatrix} \alpha+(n-2) & 1-\alpha & 0 & 0 \\ (1-\alpha)(n-1) & n\alpha & 1-\alpha & 0 \\ 0 & 1-\alpha & n\alpha & (1-\alpha)(n-1) \\ 0 & 0 & 1-\alpha & \alpha+(n-2). \end{bmatrix}$$

Calculando os autovalores de M, obtemos:

$$\frac{1}{2}\left(n\alpha+n-1-\sqrt{(n\alpha+n-1)^2-4(\alpha-1)}\right),$$

$$\frac{1}{2}\left(n\alpha+n-1+\sqrt{(n\alpha+n-1)^2-4(\alpha-1)}\right),$$

$$\frac{1}{2}\left(n(\alpha+1)+2\alpha-3-\sqrt{(n\alpha-n)^2+(2n\alpha+1)(2n-3)-4\alpha(n^2-\alpha(n+1)-2)}\right) \quad \text{e}$$

$$\frac{1}{2}\left(n(\alpha+1)+2\alpha-3-\sqrt{(n\alpha-n)^2+(2n\alpha+1)(2n-3)-4\alpha(n^2-\alpha(n+1)-2)}\right).$$

Pelo Teorema I.1.7, estes também são autovalores de $A_\alpha\left(DK\left(n,0\right)\right)$.

Tomemos os vetores $e_i-e_1, \quad \forall i, \quad 1\leq i\leq n-1$ e $e_j-e_{n+2}, \quad \forall j, \quad n+3\leq j\leq 2n$. É fácil ver que e_i-e_1 e e_j-e_{n+2} são autovetores de $A_\alpha\left(DK\left(n,0\right)\right)$ associados ao autovalor $n\alpha-1$. Portanto $n\alpha-1$ é autovalor com multiplicidade algébrica no mínimo $2n-4$. Vale ressaltar que a multiplicidade de cada autovalor obtido através da matriz M é igual a 1, o que implica que a multiplicidade do autovalor $(n\alpha-1)$ é igual a $2n-4$. Os outros quatro autovetores foram obtidos com o auxílio do Python e assim concluímos o resultado. □

Proposição II.2.18. *Seja G um grafo bipartido de ordem $2n$ e $(n-1)$-regular com $A_\alpha(G)=A_\alpha$. Então*

$$\sigma(A_\alpha(G))=\left\{(n-1)(2\alpha-1),n-1,\alpha(n-2)+1^{(n-1)},\alpha n-1^{(n-1)}\right\}. \tag{II.3}$$

Demonstração. Seja G um grafo bipartido de ordem $2n$ e $(n-1)$-regular. Sabemos que a matriz de adjacência do grafo $K_{n,n}$ é dada por

$$A(K_{n,n})=\begin{bmatrix}\mathbf{0}_n & \mathbf{J}_n\\ \mathbf{J}_n & \mathbf{0}_n\end{bmatrix}.$$

Como G é $(n-1)$-regular, a menos de rotulação, a matriz de adjacência de G pode ser obtida por $A(G)=A(K_{n,n})-M_{2n}$, onde $M_{2n}=[m_{ij}]$ ortogonal, tal que

$$m_{ij}=\begin{cases}1, & \text{se} \quad i+j=2n+1\\ 0, & \text{caso contrário}\end{cases}$$

É fácil ver que os vetores $\mathbf{1}_{2n}$ e $v_{2n}=(\underbrace{1,\ldots,1}_{n},\underbrace{-1,\ldots,-1}_{n})$ são autovetores de $A(K_{n,n})$ associados aos autovalores n e $-n$ respectivamente. Além disso, como G é bipartido, seus autovalores aparecem aos pares, ou seja, se λ é autovalor, $-\lambda$ também é. Podemos observar que $M_{2n}\cdot\mathbf{1}_{2n}=1\cdot\mathbf{1}_{2n}$ e que $M_{2n}\cdot v_{2n}=-1\cdot v_{2n}$. Logo 1 e -1 são autovalores de M_{2n}.

Como M é ortogonal com suas linhas e suas colunas formadas por vetores ortogonais, concluí-se que seu posto é $2n$. Seja $\beta=\{\mathbf{1}_{2n},v_2,v_3,\ldots,v_{2n}\}$ uma base ortogonal de autovetores de M. É importante observar que $\{v_2,\ldots,v_{2n-1}\}\in\ker\left(A(K_{n,n})\right)$, uma vez que $A(K_{n,n})$ possui posto igual a 2.

A partir das Equações (II.2) podemos concluir o espectro de $A_\alpha(G)$. Assim, para $k = 1$, temos $\lambda_1(A_\alpha(G)) = \alpha(n-1) + (1-\alpha)(n-1) = n-1$. Para $k = 2n$, temos $\lambda_{2n}(A_\alpha(G)) = \alpha(n-1) + (1-\alpha)(-n+1) = (n-1)(2\alpha-1)$. Para $2 \leq k \leq 2n-1$, temos dois casos a considerar, pois dependem apenas do autovalor de M. Se o autovalor de M for 1, temos $\lambda_k(A_\alpha(G)) = \alpha(n-1) + (1-\alpha)1 = \alpha(n-2) + 1$, com multiplicidade $n-1$. Por outro lado, se o autovalor de M for -1, temos $\lambda_k(A_\alpha(G)) = \alpha(n-1) + (1-\alpha)(-1) = \alpha n - 1$, com multiplicidade $n-1$. □

Além destes resultados, vale destacar que Basunia *et al.* [2021] e Li e Wang [2019b] exibiram o espectro de alguns grafos obtidos através de operações, diferentes das referidas nesta tese.

II.3 Polinômio Característico

Nikiforov *et al.* [2017] apresentaram o polinômio característico das árvores de *Bethe generalizadas*[3] e para isso eles precisaram introduzir algumas definições e notações específicas. Seja B_k uma árvore de Bethe generalizada com k níveis e seja n_{k-j+1} o número de vértices do nível j e d_{k-j+1} seus graus para $j \in \{1, \ldots, k\}$. Em particular $d_1 = 1$ e $n_k = 1$. Além disso, para $j \in \{1, \ldots, k-1\}$, seja $m_j = \dfrac{n_j}{n_{j+1}}$. Então, para $j \in \{1, \ldots, k-2\}$ temos que $n_j = (d_{j+1} - 1)n_{j+1}$ e, em particular, $n_{k-1} = d_k = m_{k-1}$.

Os polinômios $P_0(\lambda), \ldots, P_k(\lambda)$ são definidos por:

$$P_0(\lambda) = 1, \quad P_1(\lambda) = \lambda - \alpha,$$

e

$$P_j(\lambda) = (\lambda - \alpha d_j)P_{j-1}(\lambda) - (1-\alpha)^2 m_{j-1} P_{j-2}(\lambda)$$

para $j \in \{2, \ldots, k\}$.

Teorema II.3.1. (Nikiforov *et al.* [2017]) *O polinômio característico $P_{A_\alpha(B_k)}(\lambda)$ satisfaz*

$$P_{A_\alpha(B_k)}(\lambda) = P_k(\lambda) \prod_{j=1}^{k-1} P_j(\lambda)^{n_j - n_{j+1}}. \tag{II.4}$$

Em seu artigo, Liu e Liu [2018] calcularam os quatro primeiros coeficientes do polinômio característico da matriz A_α de G, onde t_G representa o número de triângulos de G.

Teorema II.3.2. (Liu e Liu [2018]) *Seja G um grafo com n vértices, m arestas e seja $(d_1, d_2, \ldots, d_n)$*

[3] Uma árvore de Bethe generalizada é uma árvore enraizada na qual os vértices do mesmo nível têm o mesmo grau.

sua sequência de graus. Suponha que $P_{A_\alpha(G)}(\lambda) = \sum_j c_{\alpha j}(G)\lambda^{n-j}$. *Então,*

$$c_{\alpha 0}(G) = 1, \quad c_{\alpha 1}(G) = -2\alpha m, \quad c_{\alpha 2}(G) = 2\alpha^2 m^2 - (1-\alpha)^2 m - \frac{1}{2}\alpha^2 \sum_r d_r^2,$$
$$c_{\alpha 3}(G) = -\frac{1}{3}\left(6(1-\alpha)^3 t_G - 6\alpha(1-\alpha)^2 m^2 + 3\alpha(1-\alpha)^2 \sum_r d_r^2 + \alpha^3\left(4m^3 - 3m\sum_r d_r^2 + \sum_r d_r^3\right)\right).$$

Em Tahir e Zhang [2018] é apresentada uma relação entre o polinômio característico de $A_\alpha(G)$ e o polinômio característico de $A_\alpha(\overline{G})$ para qualquer grafo. Sendo assim, como definido em Cui e Tian [2012] e Hahn e Sabidussi [1997], considerando $\Gamma_M(x) = \mathbf{1}_n^T(xI_n - M)^{-1}\mathbf{1}_n$, temos o seguinte:

Teorema II.3.3. (Tahir e Zhang [2018]) *Para qualquer grafo* G *com* n *vértices, o* $P_{A_\alpha(\overline{G})}(\lambda)$ *é igual a*

$$P_{A_\alpha(\overline{G})}(\lambda) = (-1)^n P_{A_\alpha(G)}(n\alpha - 1 - \lambda)(1 + (1-\alpha)\Gamma_{A_\alpha(G)}(n\alpha - 1 - \lambda)). \tag{II.5}$$

Em particular, a Proposição II.3.4 apresenta essa relação para grafos regulares.

Proposição II.3.4. (Tahir e Zhang [2018]) *Seja* G *um grafo* r*-regular com* n *vértices. Então*

$$P_{A_\alpha(\overline{G})}(\lambda) = (-1)^n \frac{\lambda + r + 1 - n}{\lambda + r + 1 - n\alpha} P_{A_\alpha(G)}(n\alpha - 1 - \lambda).$$

Se $r, \lambda_2(A_\alpha(G)), \ldots, \lambda_n(A_\alpha(G))$ *são os autovalores de* $A_\alpha(G)$*, então os autovalores de* $A_\alpha(\overline{G})$ *são* $n - r - 1, n\alpha - 1 - \lambda_2(A_\alpha(G)), \ldots, n\alpha - 1 - \lambda_n(A_\alpha(G))$.

No próximo resultado, Tahir e Zhang [2018] exibem o polinômio característico de um grafo que é obtido a partir da união e do *join* de três grafos regulares.

Teorema II.3.5. (Tahir e Zhang [2018]) *Seja* G_i *um grafo* k_i*-regular com* n_i *vértices, para* $i = 1, 2, 3$. *Então* $P_{A_\alpha(G)}(\lambda)$ *do grafo* $G = G_1 \vee (G_2 \cup G_3)$ *é*

$$P_{A_\alpha(G)}(\lambda) = \frac{P_{A_\alpha(G_1)}(\lambda - \alpha n_2 - \alpha n_3) P_{A_\alpha(G_2)}(\lambda - \alpha n_1) P_{A_\alpha(G_3)}(\lambda - \alpha n_1)}{(\lambda - k_1 - \alpha n_2 - \alpha n_3)(\lambda - k_2 - \alpha n_1)(\lambda - k_3 - \alpha n_1)} f(\lambda),$$

onde $f(\lambda) = (\lambda - k_1 - \alpha n_2 - \alpha n_3)(\lambda - k_2 - \alpha n_1)(\lambda - k_3 - \alpha n_1) + (\lambda - k_2 - \alpha n_1)(1-\alpha)^2 n_1 n_3$.

Finalmente, no Lema II.3.6, Chen *et al.* [2019] obtêm o polinômio característico da matriz A_α relativo ao grafo $G = G_1 u : v G_2$, obtido de dois grafos disjuntos G_1 e G_2 pela união por uma aresta do vértice $u \in V(G_1)$ com o vértice $v \in V(G_2)$.

Lema II.3.6. (Chen *et al.* [2019]) *Seja* $G = G_1 u : v G_2$*, então*

$$\begin{aligned} P_{A_\alpha(G)}(\lambda) = {} & P_{A_\alpha(G_1)}(\lambda) P_{A_\alpha(G_2)}(\lambda) - \alpha\left(P_{A_\alpha(G_1)}(\lambda) P_{A_\alpha(G_2)_v}(\lambda) + P_{A_\alpha(G_1)_u}(\lambda) P_{A_\alpha(G_2)}(\lambda)\right) \\ & + (2\alpha - 1) P_{A_\alpha(G_1)_u}(\lambda) P_{A_\alpha(G_2)_v}(\lambda). \end{aligned}$$

II.4 Cotas para autovalores da matrix A_α

A busca e a análise de cotas para os autovalores de matrizes associadas a grafos constitui um campo extensivamente estudado por pesquisadores. Nesta seção, realizamos uma revisão bibliográfica para compilar e organizar cronologicamente diversas dessas cotas, visando melhor estruturar esta tese e facilitar futuras pesquisas. As demonstrações desses resultados são omitidas, pois podem ser encontradas nas referências mencionadas. No entanto, alguns comentários sobre as técnicas utilizadas em algumas demonstrações são fornecidos, reservando esses comentários apenas para aquelas cotas que são utilizadas nas comparações do Capítulo IV.

Iniciamos este levantamento com as cotas propostas por Nikiforov [2017], afinal elas foram as primeiras presentes na literatura relativas à matriz A_α. Segundo o autor, "não é um exagero dizer que as cotas baseadas nos graus são as mais utilizadas na Teoria Espetral dos Grafos."

Proposição II.4.1. (Nikiforov [2017]) *Seja G um grafo com n vértices e graus $d_1 \geq \ldots \geq d_n$. Se $k \in \{1, \ldots, n\}$, então $\lambda_k(A_\alpha(G)) \leq d_k$. Em particular, $\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \Delta$.*

Lema II.4.2. (Nikiforov [2017]) *Seja G um grafo de ordem n com grau mínimo δ. Então, $\lambda_n(A_\alpha(G)) \leq \alpha\delta$. Se $\alpha \in [0, 1)$, então $\lambda_n(A_\alpha(G)) < \alpha\delta$.*

Além disso, utilizando o Teorema I.1.8 se obtém a proposição abaixo que fornece cotas inferior e superior para qualquer autovalor.

Proposição II.4.3. (Nikiforov [2017]) *Se $\alpha \in [0, 1]$ e G um grafo, então*

$$\alpha\delta + (1-\alpha)\lambda_k(A(G)) \leq \lambda_k(A_\alpha(G)) \leq \alpha\Delta + (1-\alpha)\lambda_k(A(G)),$$

paa todo $1 \leq k \leq n$.

A cota inferior apresentada na Proposição II.4.4 generaliza um resultado de Lovász e é, segundo o autor, uma cota mais justa do que as anteriores. Esta cota foi obtida utilizando o Teorema II.1.3.

Proposição II.4.4. (Nikiforov [2017]) *Se G é um grafo com grau máximo Δ, então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \frac{1}{2}\left(\alpha(\Delta+1) + \sqrt{\alpha^2(\Delta+1)^2 + 4\Delta(1-2\alpha)}\right). \tag{II.6}$$

Se $\alpha \in [0, 1)$ e G é conexo, a igualdade ocorre se e somente se $G \cong K_{1,\Delta}$.

Corolário II.4.5. (Nikiforov [2017]) *Seja G grafo com grau máximo Δ. Se $\alpha \in \left[0, \frac{1}{2}\right]$, então $\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \alpha(\Delta+1)$. Se $\alpha \in \left[\frac{1}{2}, 1\right)$, então $\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \alpha\Delta + \frac{(1-\alpha)^2}{\alpha}$.*

Na sequência, são apresentadas várias outras cotas que Nikiforov estabeleceu para o maior autovalor, $\lambda_1(A_\alpha(G))$.

Proposição II.4.6. (Nikiforov [2017]) *Seja G um grafo com grau máximo Δ, matriz de adjacência $A(G)$. As seguintes desigualdades ocorrem para $\lambda_1(A_\alpha(G))$:*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \lambda_1(A(G)), \tag{II.7}$$

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \alpha\Delta + (1-\alpha)\lambda_1(A(G)) \tag{II.8}$$

Se a igualdade em (II.7) *ocorre, então G possui uma componente $\lambda_1(A(G))$-regular. A igualdade em* (II.8) *ocorre se e somente se G possui uma componente Δ-regular.*

Corolário II.4.7. (Nikiforov [2017]) *Seja G um grafo com $A_\alpha(G) = A_\alpha$. Se G possui n vértices e m arestas, então*

$$\lambda_1(A_\alpha) \geq \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{u\in V(G)} d^2(u)} \quad e \quad \lambda_1(A_\alpha) \geq \frac{2m}{n}.$$

A igualdade ocorre na segunda desigualdade se e somente se G é regular. Se $\alpha > 0$, a igualdade ocorre na primeira desiguladade se e somente se G é regular.

Proposição II.4.8. (Nikiforov [2017]) *Se G é um grafo sem vértices isolados, então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \max_{v_i\in V(G)} \{\alpha d_i + (1-\alpha)m_i\} \tag{II.9}$$

e

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \min_{v_i\in V(G)} \{\alpha d_i + (1-\alpha)m_i\}. \tag{II.10}$$

Se $\alpha \in \left(\frac{1}{2}, 1\right)$ e G é conexo, as igualdades ocorrem se e somente se G é regular.

O Teorema II.4.9 foi originalmente apresentado por Nikiforov sem os grafos extremais. Nós reescrevemos o referido teorema apresentando os grafos extremais. Esta versão revisada foi submetida à revista *Special Matrices*. Para a obtenção desta cota, foi utilizada basicamete a expressão da matriz $A_\alpha^2(G)$.

Teorema II.4.9. (Nikiforov [2017]) *Sejam G um grafo com n vértices e $\alpha \in [0,1]$. Então,*

$$\min_{v_i\in V}\left\{\sqrt{\alpha d^2(v_i) + (1-\alpha)\sum_{v_j\sim v_i} d(v_j)}\right\} \leq \lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \max_{v_i\in V}\left\{\sqrt{\alpha d^2(v_i) + (1-\alpha)\sum_{v_j\sim v_i} d(v_j)}\right\}. \tag{II.11}$$

Além disso, as igualdades ocorrem se e somente se G é regular.

No mesmo ano, Nikiforov *et al.* [2017] obtiveram cotas para o maior autovalor da matriz A_α de algumas famílias de grafos. Iniciamos pelo Teorema II.4.10 que exibe uma cota superior para $\lambda_1(A_\alpha(T))$, onde T é uma árvore de ordem n.

Teorema II.4.10. (Nikiforov *et al.* [2017]) *Se T uma árvore de ordem n e $\alpha \in [0,1]$, então*

$$\lambda_1(A_\alpha(T)) \leq \frac{\alpha n + \sqrt{\alpha^2 n^2 + 4(n-1)(1-2\alpha)}}{2}. \tag{II.12}$$

A igualdade ocorre se e somente se $T \cong K_{1,n-1}$.

Além disso, no Teorema II.4.11 é obtido que P_n possui o menor raio espectral dentre todos os grafos conexos de ordem n, e uma cota superior para este valor está presente na Proposição II.4.12.

Teorema II.4.11. (Nikiforov *et al.* [2017]) *Se G é um grafo conexo de ordem n e $\alpha \in [0,1]$, então $\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \lambda_1(A_\alpha(P_n))$. A igualdade ocorre se e somente se $G \cong P_n$.*

Proposição II.4.12. (Nikiforov *et al.* [2017]) *O maior autovalor de $A_\alpha(P_n)$ satisfaz*

$$\lambda_1(A_\alpha(P_n)) \leq \begin{cases} 2\alpha + 2(1-\alpha)\cos\left(\dfrac{\pi}{n+1}\right), & \text{se } \ 0 \leq \alpha < \dfrac{1}{2}; \\ 2\alpha + 2(1-\alpha)\cos\left(\dfrac{\pi}{n}\right), & \text{se } \ \dfrac{1}{2} \leq \alpha \leq 1. \end{cases}$$

A igualdade ocorre se e somente se $\alpha = 0$, $\alpha = \dfrac{1}{2}$ ou $\alpha = 1$.

Finalizando, nos próximos resultados, Nikiforov *et al.* [2017] exibem cotas superiores e inferiores para $\lambda_1(A_\alpha(G))$ que utilizam os autovalores da matriz Laplaciana sem sinal ($Q(G)$) e da matriz de adjacência ($A(G)$).

Proposição II.4.13. (Nikiforov *et al.* [2017]) *Sejam G um grafo com grau máximo Δ e $\alpha \in [0,1]$.*

(i) Se $\alpha \in \left[0, \dfrac{1}{2}\right]$, então

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \alpha\lambda_1(Q(G)) + (1-2\alpha)\lambda_1(A(G)). \tag{II.13}$$

Se G é conexo e não regular, a igualdade em (II.13) *ocorre se e somente se $\alpha = 0$ ou $\alpha = \dfrac{1}{2}$.*

(ii) Se $\alpha \in \left[\dfrac{1}{2}, 1\right]$, então

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq (1-\alpha)\lambda_1(Q(G)) + (2\alpha-1)\Delta. \tag{II.14}$$

Se G é conexo e irregular, a igualdade em (II.14) *ocorre se e somente se $\alpha = \dfrac{1}{2}$ ou $\alpha = 1$.*

Proposição II.4.14. (Nikiforov *et al.* [2017]) *Seja G um grafo com grau máximo Δ e $\alpha \in [0,1]$.*

(i) Se $\alpha \in \left[0, \dfrac{1}{2}\right]$, então

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq (1-\alpha)\lambda_1(Q(G)) + (2\alpha-1)\Delta. \tag{II.15}$$

Se G é conexo e irregular, a igualdade em (II.15) *ocorre se e somente se* $\alpha = \frac{1}{2}$.

(ii) Se $\alpha \in \left[\frac{1}{2}, 1\right]$, *então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \alpha\lambda_1(Q(G)) + (1-2\alpha)\lambda_1(A(G)). \tag{II.16}$$

Se G é conexo e não regular, a igualdade em (II.16) *ocorre se e somente se* $\alpha = \frac{1}{2}$.

Chen *et al.* [2019] obtiveram cotas superiores e inferiores para $\lambda_2(A_\alpha(G))$. Inicialmente, eles mostram no Teorema II.4.15 uma cota superior para o referido autovalor em termos do número de vértices (n) e do parâmetro α.

Teorema II.4.15. (Chen *et al.* [2019]) *Sejam G um grafo de ordem n e grau máximo $\Delta < n-1$. Se $\alpha \in \left(\frac{1}{2}, 1\right)$, então $\lambda_2(A_\alpha(G)) \leq (n-2)\alpha$. Se a igualdade ocorre, então o complemento de G tem no mínimo uma componente isomorfa a K_2.*

Prosseguindo, no Teorema II.4.16, Chen *et al.* [2019] apresentam uma cota inferior para $\lambda_2(A_\alpha(G))$ que utiliza apenas o grau máximo, o segundo maior grau de G (Δ_2) e o parâmetro α.

Teorema II.4.16. (Chen *et al.* [2019]) *Seja G um grafo conexo de ordem n e $\Delta < n-1$. Se $\alpha \in [0, 1)$, então*

$$\lambda_2(A_\alpha(G)) \geq \frac{\alpha(\Delta + \Delta_2) - \sqrt{\alpha^2(\Delta - \Delta_2)^2 + 4(1-\alpha)^2}}{2} \tag{II.17}$$

Corolário II.4.17. (Chen *et al.* [2019]) *Seja G um grafo conexo de ordem n. Se $\alpha \in \left[\frac{1}{2}, 1\right)$, então $\lambda_2(A_\alpha(G)) \geq \alpha(\Delta_2 - 1)$. Se a igualdade ocorre, então $\Delta = \Delta_2$ e $\alpha = \frac{1}{2}$.*

Teorema II.4.18. (Chen *et al.* [2019]) *Seja G um grafo conexo de ordem $n \geq 4$. Se $\alpha \in \left(\frac{1}{2}, 1\right)$, então $\lambda_2(A_\alpha(G)) \geq \lambda_2(A_\alpha(K_{1,n-1}))$. A igualdade ocorre se e somente se $G \cong K_{1,n-1}$.*

Zhang e Zhu [2019] apresentaram cotas para o segundo maior autovalor da matriz A_α.

Proposição II.4.19. (Zhang e Zhu [2019]) *Seja G um grafo com n vértices. Se $G \ncong K_n$, então $\lambda_2(A_\alpha(G)) \geq 0$.*

Proposição II.4.20. (Zhang e Zhu [2019]) *Seja G um grafo não isomorfo a K_n com m arestas e número de clique ω. Então*

$$\lambda_2(A_\alpha(G)) \leq \frac{\frac{\alpha^2}{2}\sum_{i=1}^{n} d_i^2 + (1-\alpha)^2 m}{\omega - 1} \tag{II.18}$$

Como Corolário imediato da Proposição II.4.20 propomos o seguinte corolário.

Corolário II.4.21. *Seja G um grafo não isomorfo a K_n com m arestas e número de clique ω. Então*

$$\lambda_2(A_\alpha(G)) \leq \frac{\alpha^2(2mn - n(n-1)\delta + 2m(\delta-1)) + 2m(1-\alpha)^2}{2(\omega-1)} \tag{II.19}$$

Demonstração. A demonstração segue imediatamente da Proposição II.4.20 e do Teorema I.2.2. □

Note que dessa forma é possivel obter uma cota superior para $\lambda_2(A_\alpha(G))$ usando apenas o número de vértices, o número de arestas, o grau mínimo e o número de clique.

O Teorema II.4.22 foi proposto por Huang *et al.* [2020] e apresenta uma cota superior para $\lambda_1(A_\alpha(G))$ em termos do número de vértices, do número de arestas e dos graus máximo e mínimo de G. Para obter esta cota, os autores utilizaram a espressão da matriz $A_\alpha^2(G)$ juntamente com o Lema I.3.6.

Teorema II.4.22. (Huang *et al.* [2020]) *Seja G um grafo de ordem n e tamanho m. Suponha que o grau máximo e o grau mínimo de G sejam Δ e δ, respectivamente. Se $\alpha \in [0,1)$, então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \frac{(1-\alpha)(\delta-1) + \sqrt{(1-\alpha)^2(\delta-1)^2 + 4(\alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(2m-(n-1)\delta))}}{2} \tag{II.20}$$

A igualdade ocorre se e somente se as seguintes afirmações ocorrem:

(1) para $\alpha = 0$, G é uma união disjunta de um grafo δ-regular e um birregular de ordem $\Delta+1$ e graus δ ou Δ.

(2) para $0 < \alpha < 1$, G é um grafo Δ-regular se G é conexo, e G é a união de um grafo completo de ordem $\Delta+1$ e um grafo δ-regular se G é desconexo.

Os próximos resultados, que foram propostos por Liu *et al.* [2020b], apresentam cotas superiores para o menor autovalor, $\lambda_n(A_\alpha(G))$, em termos do número de vértices, dos graus dos vértices, do diâmetro de G, da cintura de G e do parâmetro α.

Proposição II.4.23. (Liu *et al.* [2020b]) *Seja G um grafo de ordem n, com sequência de graus $d(G) = (d_1 = \Delta, d_2, \ldots, d_{n-1}, d_n = \delta)$. Então temos as seguintes afirmações:*

(a) $\lambda_n(A_\alpha(G)) \leq \min_{v_iv_j \in E(G)} \left\{ \frac{\alpha(d_i+d_j) - \sqrt{\alpha^2(d_i-d_j)^2 + 4(1-\alpha)^2}}{2} \right\}$,

(b) $\lambda_n(A_\alpha(G)) \leq \frac{\alpha(\delta+\Delta) - \sqrt{\alpha^2(\Delta-\delta)^2 + 4(1-\alpha)^2}}{2}$ *se* $\delta > 0$,

(c) $\lambda_n(A_\alpha(G)) \leq \frac{\alpha(\delta+n-1) - \sqrt{\alpha^2(n-1-\delta)^2 + 4(1-\alpha)^2}}{2}$ *se* $\delta > 0$

Teorema II.4.24. (Liu *et al.* [2020b]) *Seja G um grafo conexo de ordem $n > 2$ e diâmetro $diam(G)$. Então,*

$$\lambda_n(A_\alpha(G)) \leq \frac{\alpha(3n + diam(G) - 3) - 2diam(G)}{diam(G)+1} \tag{II.21}$$

com a igualdade ocorrendo se e somente se $G \cong K_n$ *com* $\alpha = 0$ *ou* $G \cong P_n$ *com* $\alpha = \frac{1}{2}$.

Teorema II.4.25. (Liu *et al.* [2020b]) *Seja* G *um grafo de ordem* n *e* $m \neq 0$. *Então,* $\lambda_n(A_\alpha(G)) \leq n\alpha - 1$, *com a igualdade ocorrendo se e somente se* $G \cong K_n$ *com* $\alpha > 0$ *ou cada componente de* G *é um grafo completo com* $\alpha = 0$.

Teorema II.4.26. (Liu *et al.* [2020b]) *Seja* G *um grafo conexo de ordem* n *e cintura* g. *Então,*

(a) Se $g \geq 6$ *é par, então*

$$\lambda_n(A_\alpha(G)) \leq \frac{\alpha(3g+n) - 2g}{g} \tag{II.22}$$

com a igualdade ocorrendo se e somente se $G \cong C_n$, *onde* n *é par.*

(b) Se $g \geq 5$ *é ímpar, então*

$$\lambda_n(A_\alpha(G)) \leq \frac{\alpha(n+3g-4) - 2(g-2)}{g} \tag{II.23}$$

com a igualdade ocorrendo se e somente se $G \cong C_n$, *onde* n *é ímpar, com* $\alpha = 1$ *ou* G *é isomorfo ao grafo de Petersen*[4] *com* $\alpha = 1$.

Proposição II.4.27. (Liu *et al.* [2020b]) *Suponha* G *um grafo conexo com cintura igual a 4. Então* $\lambda_n(A_\alpha(G)) \leq \frac{(n+4)\alpha}{2} - 2$

Wang *et al.* [2020] propuseram uma cota superior para o maior autovalor da matrix A_α utilizando apenas os graus dos vértices, como podemos ver no Teorema II.4.28. A demonstração deste teorema utiliza a Proposição II.1.3 e a definição de autovalor e autovetor.

Teorema II.4.28. (Wang *et al.* [2020]) *Para qualquer grafo* G *e* $\alpha \in [0, 1)$. *Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \max_{u \sim v} \left\{ \frac{\alpha(d(u)+d(v)) + \sqrt{\alpha^2(d(u)+d(v))^2 + 4(1-2\alpha)d(u)d(v)}}{2} \right\}. \tag{II.24}$$

Se G *é conexo, a igualdade ocorre se e somente se* G *é regular ou bipartido semirregular.*

Alem disso, Wang *et al.* [2020] propuseram uma cota inferior para o menor autovalor da matriz A_α quando G é um grafo bipartido.

Teorema II.4.29. (Wang *et al.* [2020]) *Seja* G *um grafo bipartido sem vértices isolados e* $\alpha \in [0, 1)$. *Então,*

$$\lambda_n(A_\alpha(G)) \geq \min_{u \sim v} \left\{ \frac{\alpha(d(u)+d(v)) - \sqrt{\alpha^2(d(u)+d(v))^2 + 4(1-2\alpha)d(u)d(v)}}{2} \right\}. \tag{II.25}$$

[4]O *grafo de Petersen* é um grafo não direcionado composto por 10 vértices e 15 arestas. Recebe esse nome em homenagem ao matemático Julius Petersen, que o descreveu em 1898. Esse grafo possui a peculiaridade de possuir ciclos de comprimento 5 e é composto por pentágonos regulares menores que são inseridos em cada aresta de um pentágono maior. Cada vértice está conectado a exatamente três outros vértices.

Se G é conexo e $\alpha \neq \frac{1}{2}$, a igualdade ocorre se e somente se G é regular ou semirregular.

Liu *et al.* [2020a] apresentaram uma cota superior (Teorema II.4.30) e duas cotas inferiores (Teoremas II.4.31 e II.4.32) para $\lambda_k(A_\alpha(G))$.

Teorema II.4.30. (Liu *et al.* [2020a]) *Seja G um grafo de ordem n. Então, $\lambda_k(A_\alpha(G)) \leq \alpha d_k + (1-\alpha)(n-k), \forall k$, tal que $1 \leq k \leq n$. Se a igualdade ocorre e $\alpha \in (0,1)$, então G possui um subgrafo induzido $H \cong K_{n-k+1}$ tal que $d_G(v_i) = \delta$ para todo $v_i \in V(H)$.*

Teorema II.4.31. (Liu *et al.* [2020a]) *Seja G um grafo. Então $\lambda_k(A_\alpha(G)) \geq \alpha d_k - (1-\alpha)\sqrt{\left\lceil \frac{k}{2} \right\rceil \left\lfloor \frac{k}{2} \right\rfloor}, \forall k$, tal que $1 \leq k \leq n$. Se a igualdade ocorre e $\alpha \in (0,1)$, então G possui um subgrafo induzido $H \cong K_{\left\lceil \frac{k}{2} \right\rceil, \left\lfloor \frac{k}{2} \right\rfloor}$ tal que $d_G(v_i) = \Delta$ para todo $v_i \in V(H)$.*

Teorema II.4.32. (Liu *et al.* [2020a]) *Seja G um grafo cujo número de clique é ω. Então, $\lambda_k(A_\alpha(G)) \geq \alpha(d_\omega + 1) - 1$, onde $1 \leq k \leq \omega$ e $d_\omega = \min\{d_G(v_i) : v_i \in V(K_\omega)\}$.*

Após esses três Teoremas, Liu *et al.* [2020a] apresentam cotas superiores para $\lambda_1(A_\alpha(G))$ em termos da ordem, do tamanho, do grau máximo (Δ), do grau mínimo (δ) e de outras propriedades topológicas do grafo, além de caracterizar os respectivos grafos extremais. Para obterem a cota do Teorema II.4.33, os autores dividiram a demosntração em dois casos: para $\alpha = 0$ e para $\alpha \neq 0$. Para o primeiro caso, utilizaram uma cota já existente para matriz de adjacência obtendo diretamente o resultado. Para o segundo caso, utilizaram a definição de autovalor e autovetor.

Teorema II.4.33. (Liu *et al.* [2020a]) *Seja G um grafo conexo tal que $\alpha \in [0,1)$. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \max_{v_i \in V(G)} \left\{ \frac{\alpha d(v_i) + \sqrt{\alpha^2 d^2(v_i) + 4(1-\alpha)d(v_i)m_i}}{2} \right\} \tag{II.26}$$

com a igualdade ocorrendo se e somente se G é um grafo regular ou G é um grafo semirregular bipartido com $\alpha = 0$.

Para a cota do Corolário II.4.34, os autores utilizaram basicamente o Teorema II.4.33.

Corolário II.4.34. (Liu *et al.* [2020a]) *Seja G um grafo de ordem n com m arrestas, grau máximo Δ, grau mínimo δ e $\alpha \in [0,1)$. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \frac{\alpha\Delta + \sqrt{\alpha^2\Delta^2 + 4(1-\alpha)(2m - (n-1)\delta + (\delta-1)\Delta)}}{2}. \tag{II.27}$$

A iguladade ocorre se e somente se G é regular ou um grafo estrela com $\alpha = 0$.

Como $\Delta \leq n-1$, a partir do Corolário II.4.34, foi obtido, diretamente, o seguinte resultado

Corolário II.4.35. (Liu *et al.* [2020a]) *Seja G um grafo conexo de ordem n com m arestas e $\alpha \in [0,1)$. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \frac{\alpha(n-1) + \sqrt{\alpha^2(n-1)^2 + 4(1-\alpha)(2m-n+1)}}{2}. \tag{II.28}$$

A igualdade ocorre se e somente se G é um grafo completo ou um grafo estrela com $\alpha = 0$.

No Teorema II.4.36, Liu *et al.* [2020a] melhoram o resultado da Proposição II.4.8 apresentada por Nikiforov [2017].

Teorema II.4.36. (Liu *et al.* [2020a]) *Seja G um grafo. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \max_{v_k v_l \in E(G)} \left\{ \frac{\alpha(d_k + d_l) + \sqrt{\alpha^2(d_k - d_l)^2 + 4(1-\alpha)^2 m_k m_l}}{2} \right\}. \tag{II.29}$$

Além disso, se G é regular, então G satisfaz a igualdade

Adaptando a técnica de demonstração de um resultado sobre uma cota para o maior autovalor da matriz Laplaciana sem sinal, Liu *et al.* [2020a] obtiveram no Teorema II.4.37 o resultado apresentado.

Teorema II.4.37. (Liu *et al.* [2020a]) *Seja G um grafo conexo de ordem n. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \max_{v_i \in V(G)} \left\{ \alpha d_i + (1-\alpha)\sqrt{d_i m_i} \right\}. \tag{II.30}$$

Além disso, se G é regular então a igualdade é satisfeita.

Guo e Zhou [2020] apresentam uma cota superior para $\lambda_1(A_\alpha)$. Essa cota foi obtida diretamente do Teorema 2.1, presente em Duan e Zhou [2013], sobre matrizes não negativas.

Proposição II.4.38. (Guo e Zhou [2020]) *Seja G um grafo de ordem $n \geq 2$ cuja sequencia de graus é ordenada da seguinte forma $\Delta = d_1 \geq d_2 \geq \ldots \geq d_n$. Então para $\alpha \in [0,1) \quad e \quad 1 \leq l \leq n$,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \frac{d_l + \alpha\Delta - (1-\alpha) + \sqrt{(d_l - \alpha\Delta + 1 - \alpha)^2 + 4(1-\alpha)\sum_{i=1}^{l-1}(d_i - d_l)}}{2}. \tag{II.31}$$

Se G é conexo a igualdade ocorre se e somente se G é regular ou G é um grafo com $d_1 = \ldots = d_{t-1} = n-1 > d_t = \ldots = d_n$, para algum $t \in \{2, \ldots, l\}$.

A próxima cota, proposta por Guo e Zhou [2020], é uma cota superior para o maior autovalor de árvores ou grafos unicíclicos. Este resultado é uma extensão do Teorema 1 obtido por Nikiforov *et al.* [2017], sendo assim optamos por apresentar apenas este último pois é o mais geral.

Teorema II.4.39. (Nikiforov *et al.* [2017]; Guo e Zhou [2020]) *Seja G uma árvore ou um grafo unicíclico com grau máximo $\Delta \geq 2$ e $\alpha \in [0,1]$, então $\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \alpha\Delta + 2(1-\alpha)\sqrt{\Delta - 1}$, com a igualdade ocorrendo para $\alpha \in [0,1)$ se e somente se G é um ciclo.*

Seguindo com os resultados obtidas por Guo e Zhou [2020], os três próximos Teoremas são cotas superiores para $\lambda_1(A_\alpha)$ em termos do diâmetro do grafo, da ordem do grafo, do grau máximo, do grau mínimo e do grau médio do grafo ($\overline{d}$).

Teorema II.4.40. (Guo e Zhou [2020]) *Seja G um grafo conexo e irregular com n vértices, grau máximo Δ e diâmetro $diam(G)$. Para $\alpha \in [0,1)$, temos*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) < \Delta - \frac{2(1-\alpha)}{(2diam(G) - \alpha)n}. \tag{II.32}$$

Teorema II.4.41. (Guo e Zhou [2020]) *Seja G um grafo conexo e irregular com n vértices, grau máximo Δ, grau mínimo δ, diâmetro $diam(G)$ e grau médio $\overline{d}$. Para $\alpha \in [0,1)$, temos*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) < \Delta - \frac{1}{\dfrac{diam(G)(n-\delta)}{1-\alpha} - \dfrac{\binom{diam(G)}{2}}{1-\alpha} + \dfrac{1}{\Delta - \overline{d}}}. \tag{II.33}$$

Teorema II.4.42. (Guo e Zhou [2020]) *Seja G um grafo irregular k-conexo[5] com n vértices, m arestas e grau máximo Δ. Para $\alpha \in [0,1)$, temos*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) < \Delta - \frac{(1-\alpha)(n\Delta - 2m)k^2}{(n\Delta - 2m)(n^2 - (\Delta - k + 2)(n-k)) + (1-\alpha)nk^2}. \tag{II.34}$$

Guo e Zhang [2022] adaptaram, para a matriz A_α, um resultado presente em Liu *et al.* [2015] e relativo à matriz Laplaciana sem sinal, tendo obtido o seguinte Teorema.

Teorema II.4.43. (Guo e Zhang [2022]) *Seja G um grafo conexo com $n \geq 4$ vértices, m arestas e grau máximo Δ. Se $\alpha \in \left[\frac{1}{2}, 1\right)$, então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \max\left\{\alpha\Delta, \quad (1-\alpha)\left(m - \frac{n-1}{2}\right)\right\} + 2\alpha. \tag{II.35}$$

A igualdade ocorre se e somente se $\alpha = \dfrac{n-1}{n+1}$ e $G \cong K_n$.

Pirzada [2022] obteve uma cota superior para $\lambda_1(A_\alpha(G))$ que envolve o número de clique e o grau máximo de G.

[5]Um grafo k-conexo é um grafo tal que a exclusão de até $k-1$ vértices, juntamente com suas arestas incidentes, não resulta na desconexão do grafo. Em outras palavras, a conectividade do grafo permanece preservada mesmo após a remoção de um número específico de vértices e arestas.

Teorema II.4.44. (Pirzada [2022]) *Seja G um grafo com número de clique ω, número de arestas m e grau máximo Δ. Se $\alpha \in [0,1]$, então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \alpha\Delta + (1-\alpha)\sqrt{2m\left(1-\frac{1}{\omega}\right)}. \tag{II.36}$$

Observação II.4.45. *Além da cota obtida no teorema anterior, no Teorema 2 de Pirzada [2022] há um outra cota superior, sem grafo extremal, que está descrita abaixo:*

Seja G um grafo conexo de ordem n. Se $\alpha \in [0,1]$, então

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \frac{1}{2}\max_{\substack{1\leq i\leq n,\\ v_j\sim v_i}}\left(\alpha d(v_i) + \sqrt{\alpha^2 d^2(v_i) + 4m_i(1-\alpha)(\alpha+(1-\alpha)m_j)}\right). \tag{II.37}$$

Após alguns testes computacionais foi possível perceber que a referida cota apresenta algumas inconsistências, como podemos ver na Tabela II.1.

$\mathbf{G \cong P_n}$											
α		0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 100$	$\lambda_1(A_\alpha)$	1.999	1.999	1.999	1.999	1.999	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0
	(II.37)	2.0	1.95203	1.9088	1.87162	1.84222	1.82288	1.81655	1.82694	1.8583	1.91489

Tabela II.1: Confirmação da incoerência da cota apresentada por Pizarda.

Uma cota equivalente, e correta, foi exibida por Alhevaz et al. [2022] (Teorema 3.2) que é exibida nesta tese no Teorema II.4.51.

A seguir, são apresentadas cotas superior e inferior para $\lambda_1(A_\alpha(G))$ propostas por Alhevaz *et al.* [2022]. Os autores nas demonstrações dos teoremas utilizam o grau de um vértice, o grau médio desse vértice e um parâmetro β, o qual é o coeficiente de $\lambda_1(A_\alpha(G))$ na expressão quadrática $\left(\lambda_1^2(A_\alpha(G)) + \beta\lambda_1(A_\alpha(G))\right)x$. Além disso, usam a Proposição II.1.3 e a expressão para a matriz $A_\alpha^2(G)$.

Teorema II.4.46. (Alhevaz *et al.* [2022]) *Seja G um grafo conexo de ordem n, com grau médio do vértice v_i dado por por m_i, $i \in \{1,\ldots,n\}$ e seja $\alpha \in [0,1)$. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \max_{1\leq i\leq n}\left\{\frac{-\beta+\sqrt{\beta^2+4d_i(\alpha d_i+(1-\alpha)m_i+\beta)}}{2}\right\}, \tag{II.38}$$

onde $\beta \geq 0$ é um parâmetro indeterminado. A igualdade ocorre se e somente se G é um grafo regular.

Teorema II.4.47. (Alhevaz *et al.* [2022]) *Seja G um grafo conexo de ordem n, com grau médio*

do vértice v_i dado por por m_i, $i \in \{1, \ldots, n\}$ e seja $\alpha \in [0, 1)$. Então,

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \frac{-\beta + \sqrt{\beta^2 + 4d_i(\alpha d_i + (1-\alpha)m_i + \beta)}}{2} \right\}, \tag{II.39}$$

onde $\beta \geq 0$ é um parâmetro indeterminado. A igualdade ocorre se e somente se G é um grafo regular.

Observação II.4.48. *Pelo fato de Alhevaz et al. [2022] utilizar um parâmetro indeterminado (β), a substituição desse parâmetro por um valor específico em suas cotas, faz com que seja aberta uma discussão sobre qual o melhor valor a ser utilizado. Segundo os autores, dependendo do valor β, geram-se cotas incomparáveis. Além disso, se o parâmetro β for igual ao número de cobertura de vértices ou de arestas*[6] *número de clique, número de independência, número de dominação, etc, é possível obter cotas que dependem desses parâmetros.*

No próximo resultado, proposto por Alhevaz *et al.* [2022] é apresentada uma cota superior para $\lambda_1(A_\alpha(G))$ em termos do número de vértices, do número de arestas e do parâmetro α.

Teorema II.4.49. (Alhevaz *et al.* [2022]) *Seja G um grafo de ordem n com m arestas, sem vértices isolados e seja $\alpha \in \left[\frac{1}{2}, 1\right]$. Então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \frac{2m(1-\alpha)}{n-1} + \alpha n - 1. \tag{II.40}$$

Se $\alpha \in \left(\frac{1}{2}, 1\right)$ e G é conexo, a igualdade ocorre se e somente se $G \cong K_n$.

O resultado seguinte, proposto por Alhevaz *et al.* [2022] exibe, também, uma cota superior para $\lambda_1(A_\alpha(G))$ em termos do número de vértices, do número de arestas, do grau máximo, do grau mínimo e do parâmetro α.

Teorema II.4.50. (Alhevaz *et al.* [2022]) *Seja G um grafo de ordem n com m arestas e seja $\alpha \in \left[\frac{1}{2}, 1\right]$. Sejam Δ e δ, respectivamente, os graus máximo e mínimo de G. Então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \frac{2m(1-\alpha)}{n-1} + \frac{\alpha n - 1}{n-1}\Delta + (1-\alpha)\left(1 - \frac{\Delta}{n-1}\right)(\Delta - \delta). \tag{II.41}$$

Se $\alpha \in \left(\frac{1}{2}, 1\right)$ e G é conexo, a igualdade ocorre se e somente se $G \cong K_n$.

[6] O *número de cobertura de vértices* de um grafo é o menor número de vértices necessários para cobrir todas as arestas do grafo. Em outras palavras, é o tamanho mínimo de um conjunto de vértices tal que cada aresta do grafo incide em pelo menos um vértice desse conjunto. Já o número de cobertura de arestas de um grafo é o menor número de arestas que são necessárias para cobrir todos os vértices do grafo. Em outras palavras, é o tamanho mínimo de um conjunto de arestas tal que cada vértice do grafo é incidente em pelo menos uma aresta desse conjunto.

O resultado a seguir fornece uma cota superior para $\lambda_1(A_\alpha(G))$, em termos do grau dos vértices e de números reais positivos arbitrários b_i, os quais são elementos da diagonal principal de uma matriz diagonal. Em seguida, são enunciados corolários que resultam da atribuição de valores específicos a b_i.

Teorema II.4.51. (Alhevaz *et al.* [2022]) *Seja G um grafo conexo de ordem n e $0 < \alpha < 1$. Seja $d(G) = (d_1, d_2, \ldots, d_n)$ a sequência de graus de G. Então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \max_{1\leq i\leq n}\left\{\frac{\alpha d_i + \sqrt{\alpha^2 d_i^2 + \frac{4}{b_i}\sum_{j\sim i} b_j(1-\alpha)(\alpha d_j + (1-\alpha)b'_j)}}{2}\right\}, \tag{II.42}$$

onde $b_i \in \mathbb{R}^+$ e $b'_j = \frac{1}{b_i}\sum_{v_j\sim v_i} b_j$. Além disso, a igualdade ocorre se e somente se $\alpha d_1 + (1-\alpha)b'_1 = \alpha d_2 + (1-\alpha)b'_2 = \ldots = \alpha d_n + (1-\alpha)b'_n$.

O primeiro caso particular resulta de tomar $b_i = d_i$ e, consequentemente, $b'_i = \frac{1}{b_i}\sum_{v_j\sim v_i} b_j = \frac{1}{d_i}\sum_{j\sim i} d_j = m_i$. Assim, obtem-se o seguinte corolário.

Corolário II.4.52. (Alhevaz *et al.* [2022]) *Seja G um grafo conexo de ordem n, grau médio do vértice d_i dado por m_i, $i \in \{1, \ldots, n\}$, e $0 < \alpha < 1$. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \max_{1\leq i\leq n}\left\{\frac{\alpha d_i + \sqrt{\alpha^2 d_i^2 + \frac{4(1-\alpha)}{d_i}\sum_{v_j\sim v_i} d_j(\alpha d_j + (1-\alpha)m_j)}}{2}\right\}, \tag{II.43}$$

A igualdade ocorre se e somente se $\alpha d_1 + (1-\alpha)m_1 = \alpha d_2 + (1-\alpha)m_2 = \ldots = \alpha d_n + (1-\alpha)m_n$.

Agora, tomando $b_i = \sqrt{d_i}$, temos que $b'_i = \frac{1}{b_i}\sum_{v_j\sim v_i} b_j = \frac{1}{\sqrt{d_i}}\sum_{v_j\sim v_i}\sqrt{d_j} = m'_i$. Assim,

Corolário II.4.53. (Alhevaz *et al.* [2022]) *Seja G um grafo conexo de ordem n, $m'_i = \frac{1}{\sqrt{d_i}}\sum_{v_j\sim v_i}\sqrt{d_j}$, $i \in \{1, \ldots, n\}$, e $0 < \alpha < 1$. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \max_{1\leq i\leq n}\left\{\frac{\alpha d_i + \sqrt{\alpha^2 d_i^2 + \frac{4(1-\alpha)}{\sqrt{d_i}}\sum_{v_j\sim v_i}\sqrt{d_j}(\alpha d_j + (1-\alpha)m'_j)}}{2}\right\}, \tag{II.44}$$

A igualdade ocorre se e somente se $\alpha d_1 + (1-\alpha)m'_1 = \alpha d_2 + (1-\alpha)m'_2 = \ldots = \alpha d_n + (1-\alpha)m'_n$.

Finalmente, fazendo $b_i = 1$, temos que $b'_i = d_i$, obtendo assim a cota exibida no Teorema II.4.33. Por outro lado, se $b_i = m_i$, temos que $b'_i = \dfrac{1}{b_i}\sum_{v_j \sim v_i} b_j = \dfrac{1}{m_i}\sum_{v_j \sim v_i} m_j = \overline{m_i}$. Assim,

Corolário II.4.54. (Alhevaz *et al.* [2022]) *Seja G um grafo conexo de ordem n, grau médio do vértice d_i dado por m_i, $i \in \{1, \ldots, n\}$, e $0 < \alpha < 1$.*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \frac{\alpha d_i + \sqrt{\alpha^2 d_i^2 + \dfrac{4(1-\alpha)}{m_i} \sum_{v_j \sim v_i} m_j(\alpha d_j + (1-\alpha)\overline{m_j})}}{2} \right\}, \tag{II.45}$$

Onde $\overline{m_i} = \dfrac{1}{m_i}\sum_{v_j \sim v_i} m_j$. A igualdade ocorre se e somente se $\alpha d_1 + (1-\alpha)\overline{m_1} = \alpha d_2 + (1-\alpha)\overline{m_2} = \ldots = \alpha d_n + (1-\alpha)\overline{m_n}$.

A cota a seguir, apresentada por Cheng *et al.* [2022], depende apenas do número de vértices, do número de arestas, do grau máximo e do grau mínimo do grafo. Para esta demonstração, os autores utilizam o Lema I.3.6 e a expressão para $A^2_\alpha(G)$.

Teorema II.4.55. (Cheng *et al.* [2022]) *Seja G um grafo conexo de ordem n e tamanho m com grau máximo Δ e grau mínimo δ. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \frac{\alpha\Delta + (1-\alpha)(\delta - 1) + \sqrt{(\alpha\Delta + (1-\alpha)(\delta-1))^2 + 4(1-\alpha)(2m - (n-1)\delta)}}{2} \tag{II.46}$$

para $\alpha \in [0, 1)$. A igualdade ocorre se e somente se G é regular, ou $\alpha = 0$ e todo vértice de G possui grau $n-1$ ou δ.

Para as cotas que iremos apresentar em seguida, e que são de autoria de Alhevaz *et al.* [2023], é necessário definir alguns parâmetros por eles propostos. Iniciamos com os parâmetros w_1 e w_2 que são, respectivamente, o número máximo de vizinhos comuns a um par de vértices adjacentes e o número máximo de vizinhos comuns a um par de vértices não adjacentes do grafo G. Além disso, um grafo G é considerado fortemente regular com parâmetros (n, Δ, w_1, w_2), se o número de vértices de G for n, cada vértice de G tiver o mesmo grau Δ, cada par escolhido de vértices adjacentes e cada par escolhido de vértices distintos não adjacentes tiver o mesmo número w_1 e w_2 de vizinhos comuns, respectivamente.

No Teorema II.4.56, é exibida uma cota superior para $\lambda_1(A_\alpha(G))$ que utiliza o grau máximo (Δ), os parâmetros w_1 e w_2 e o maior autovalor da matriz Laplaciana sem sinal do grafo G, $\lambda_1(Q(G))$.

Teorema II.4.56. (Alhevaz *et al.* [2023]) *Seja G um grafo com n vértices e grau máximo Δ.*

Então,

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \alpha\Delta + (1-\alpha)\sqrt{\Delta + w_1\Delta + w_2\left(n - 1 - \lambda_1\left(\frac{1}{2}Q(G)\right)\right)}, \tag{II.47}$$

onde $\alpha \in [0,1)$. *A igualdade ocorre se e somente se* G *é um grafo fortemente regular com parâmetros* (n, Δ, w_1, w_2).

Além da cota anterior, Alhevaz *et al.* [2023] obtiveram outras cotas para $\lambda_1(A_\alpha(G))$, em termos do grau máximo (Δ), do segundo grau máximo (Δ_2), dos graus dos vértices, do número de vértices, do número de arestas e do parâmetro α, e que são descritas a seguir. Ademais, também caracterizaram os grafos extremais que atingem essas cotas.

Seja Γ a classe de grafos conexos $H = (V, E)$ tais que $V(H) = \{v_1\} \cup V_1 \cup V_2$, $d(v_1) = \Delta$, $V_1 = \{v_k \in N_{v_1}, d(v_k) = \delta\}$, $V_2 = \{v_k \notin N_{v_1}, d(v_k) = \Delta_2\}$ e $(\Delta_2 - \delta)(\Delta_2 - \alpha\Delta) = (1-\alpha)(\Delta - \Delta_2)$. Denote por H_{n-1,Δ_2} o grafo conexo tal que $\Delta = n-1$ e $\Delta_2 = \delta$. Para demonstrar o Teorema II.4.57 os autores utilizam a Proposição II.1.3 e a definição de autovalores e aotovetores.

Teorema II.4.57. (Alhevaz *et al.* [2023]) *Seja* G *um grafo conexo com* n *vértices e sejam* $\Delta = d_1 \geq \Delta_2 = d_2 \geq d_3 \geq \ldots \geq d_n$ *os graus dos vértices de* G. *Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \max_{v_i \sim v_j}\left\{\frac{\alpha d_i + d_j + \alpha - 1 + \sqrt{(\alpha d_i + d_j + \alpha - 1)^2 - 4\alpha d_i d_j + 4(1-\alpha)d_i}}{2}\right\} \tag{II.48}$$

Se a igualdade em (II.48) *ocorre, então* G *é isomorfo a um grafo regular ou* $G \cong H_{n-1,\Delta_2}$ *ou* $G \in \Gamma$.

O Teorema II.4.58 exibe uma cota inferior para $\lambda_1(A_\alpha(G))$ em termos do grau máximo (Δ), o segundo maior grau (Δ_2) e o parâmetro α. Para a demonstração deste teorema há a divisão em dois casos: se $v_1 \nsim v_2$ e se $v_1 \sim v_2$. Em ambos os casos é utilizada a submatriz principal da matriz $A_\alpha(G)$ correspondente aos dois vértices.

Teorema II.4.58. (Alhevaz *et al.* [2023]) *Seja* G *um grafo conexo com* $n \geq 3$ *vértices, grau máximo* Δ *e segundo grau máximo* Δ_2. *Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \begin{cases} \alpha\Delta & \text{se } v_1 \nsim v_2, \\ \dfrac{\alpha(\Delta + \Delta_2) + \sqrt{\alpha^2(\Delta - \Delta_2) + 4(1-\alpha)^2}}{2} & \text{se } v_1 \sim v_2, \end{cases} \tag{II.49}$$

onde v_1 *e* v_2 *são os vértices que possuem o grau máximo e o segundo maior grau em* G, *respectivamente.*

Analogamente ao Teorema II.4.58, a demonstração do Teorema II.4.59 utiliza também a submatriz principal da matriz $A_\alpha(G)$ correspondente a dois vértices v_i e v_j.

Teorema II.4.59. (Alhevaz *et al.* [2023]) *Seja G um grafo conexo com n vértices e $v_i, v_j \in V(G)$. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \max_{v_i \sim v_j} \left\{ \frac{\alpha(d_i + d_j) + \sqrt{\alpha^2(d_i - d_j)^2 + 4(1-\alpha)^2}}{2} \right\} \tag{II.50}$$

Corolário II.4.60. (Alhevaz *et al.* [2023]) *Seja G um grafo conexo com n vértices e seja $\alpha \in [0, 1)$. Suponha que Δ e Δ_2 são respectivamente o grau máximo e o segundo grau máximo de G. Se os vértices v_1 e v_2 são tais que $d(v_1) = \Delta$, $d(v_2) = \Delta_2$ e $v_1 \sim v_2$, então $\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \alpha(\Delta_2 - 1) + 1$. Se a igualdade ocorre, então $\alpha = 0$ ou $\alpha \neq 0$ e $\Delta = \Delta_2$.*

O próximo resultado nos dá uma cota inferior para $\lambda_1(A_\alpha(G))$ em termos do número de vértices n, do número de arestas m e do parâmetro α. A demonstração deste resultado consiste em utilizar a desigualdade $2m \leq \Delta + (n-1)\Delta_2$, onde Δ_2 é o segundo maior grau do grafo, e o Teorema II.4.58.

Teorema II.4.61. (Alhevaz *et al.* [2023]) *Seja G um grafo conexo com $n \geq 3$ vértices, m arestas e $\alpha \in [0, 1)$. Se os vértices v_1 e v_2 são tais que $d(v_1) = \Delta$, $d(v_2) = \Delta_2$ e $v_1 \sim v_2$, então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \frac{2\alpha m}{n} + 1 - \alpha. \tag{II.51}$$

Se a igualdade ocorre em (II.51)*, então $\alpha = 0$ e G possui um vértice de grau Δ e $n-1$ vértices de grau Δ_2 ou $\alpha \neq 0$ e G é um grafo regular.*

No próximo teorema, Sahir e Nayeem [2023] apresentam uma cota superior para $\lambda_1(A_\alpha)$ para grafos com cintura igual a 5 em termos do grau máximo, do grau mínimo, número de vértices e do parâmtro α.

Teorema II.4.62. (Sahir e Nayeem [2023]) *Para um grafo conexo G com n vértices, grau mínimo δ, grau máximo Δ e cintura no mínimo 5,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \frac{-1 + \alpha + 2\alpha\Delta + \sqrt{(1 - \alpha - 2\alpha\Delta)^2 - 4\alpha^2\delta^2 + 4(1-\alpha)\Delta + 4(10\alpha)^2(n-1)}}{2}. \tag{II.52}$$

A igualdade ocorre se e somente se $G \cong C_5$.

Nesse mesmo artigo, Sahir e Nayeem [2023] apresentam outras cotas para alguns grafos com características muito específicas.

Capítulo III Polinômio característico da matriz A_α para algumas operações em grafos

Neste capítulo são apresentados resultados originais envolvendo o polinômio característico associado à matriz A_α para coalescência de dois grafos. Além disso, são também apresentados resultados sobre o polinômio característico associado à matriz A_α para o grafo linha e para os grafos $S(G), R(G)$, $\mathscr{C}(G)$ e $T(G)$, quando G é um grafo regular. São mostrados também alguns resultados envolvendo os autovalores de $A_\alpha(G)_u$, submatriz principal de $A_\alpha(G)$ obtida pela remoção da linha e da coluna associadas ao vértice u, quando G é um grafo bipartido completo, um grafo estrela ou um grafo completo. Esses resultados estão publicados em Silva Junior *et al.* [2023b].

III.1 Espectro de submatrizes principais de alguns grafos

Nesta seção são apresentados resultados referentes ao espectro das submatrizes principais dos grafos $K_{a,b}$, $K_{1,n-1}$ e K_n.

Proposição III.1.1. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Seja $G \cong K_{a,b}$, $a \leq b$, e $\alpha \in [0,1]$. Então $\sigma(A_\alpha(G)_u)$ é*

(i) $\left\{ a\alpha^{(n-1-a)}, b\alpha^{(n-2-b)}, \frac{1}{2}\left(\alpha(a+b) + \sqrt{\alpha^2(a+b)^2 - 4b(\alpha^2 + (a-1)(2\alpha-1))}\right), \right.$
$\left. \frac{1}{2}\left(\alpha(a+b) - \sqrt{\alpha^2(a+b)^2 - 4b(\alpha^2 + (a-1)(2\alpha-1))}\right) \right\}$ *quando u pertence à partição de cardinalidade a.*

(ii) $\left\{ a\alpha^{(n-2-a)}, b\alpha^{(n-1-b)}, \frac{1}{2}\left(\alpha(a+b) + \sqrt{\alpha^2(a+b)^2 - 4a(\alpha^2 + (b-1)(2\alpha-1))}\right), \right.$
$\left. \frac{1}{2}\left(\alpha(a+b) - \sqrt{\alpha^2(a+b)^2 + 4a(\alpha^2 + (b-1)(2\alpha-1))}\right) \right\}$ *quando u pertence à partição de cardinalidade b.*

Demonstração. Seja $G \cong K_{a,b}$ com $a+b=n$ e $a \leq b$. Portanto,

$$A_\alpha(G) = \begin{bmatrix} b\alpha I_a & (1-\alpha)\mathbf{J}_{a\times b} \\ (1-\alpha)\mathbf{J}_{b\times a} & a\alpha I_b \end{bmatrix}.$$

Suponha, inicialmente, que $A_\alpha(G)_u$ seja a submatriz principal de $A_\alpha(G)$ obtida pela remoção da linha e da respectiva coluna referentes ao vértice u pertencente à partição com cardinalidade a.

Então, temos

$$A_\alpha(G)_u = \begin{bmatrix} b\alpha I_{a-1} & (1-\alpha)\mathbf{J}_{(a-1)\times b} \\ (1-\alpha)\mathbf{J}_{b\times(a-1)} & a\alpha I_b \end{bmatrix}.$$

Tomando uma partição equilibrada das linhas da matriz $A_\alpha(G)_u$, obtemos a sua matriz quociente com relação a essa partição dada por:

$$A'_\alpha(G)_u = \begin{bmatrix} b\alpha & b(1-\alpha) \\ (a-1)(1-\alpha) & a\alpha \end{bmatrix}.$$

Então,

$$\begin{aligned} P_{A'_\alpha(G)_u}(\lambda) = |\lambda I - A'_\alpha(G)_u| &= (\lambda - b\alpha)(\lambda - a\alpha) - b(a-1)(\alpha-1)^2 \\ &= \lambda^2 - (a+b)\alpha\lambda + ab(2\alpha-1) + b(\alpha-1)^2 \\ &= \lambda^2 - n\alpha\lambda + b\left((\alpha-1)^2(1-a) + \alpha^2 a\right) \end{aligned}$$

cujas raízes são:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\left(\alpha(a+b) + \sqrt{\alpha^2(a+b)^2 - 4b(\alpha^2 + (a-1)(2\alpha-1))}\right) \\ &\text{e} \\ &\frac{1}{2}\left(\alpha(a+b) - \sqrt{\alpha^2(a+b)^2 - 4b(\alpha^2 + (a-1)(2\alpha-1))}\right). \end{aligned} \tag{III.1}$$

Pelo Teorema I.1.7, essas raízes são também raízes de $P_{A_\alpha(G)_u}$.

Seja e_i o i-ésimo vetor da base canônica de $\mathbb{R}^{n-1}$. Tomemos os vetores $e_j - e_a$, $j = a+1, \ldots, n-1$. Podemos observar que $e_j - e_a$ são autovetores da matriz $A'_\alpha(G)_u$ cujo autovalor é $a\alpha$. Por conseguinte, a multiplicidade algébrica de $a\alpha$ é de, pelo menos, $n-1-a$. Agora, tomemos os vetores $e_i - e_1$, $i = 2, \ldots, a-1$. Podemos observar que $e_i - e_1$ são autovetores da matriz $A_\alpha(G)_u$ cujo autovalor é $b\alpha$, com multiplicidade algébrica de, pelo menos, $n-2-b$.

Suponhamos, agora, que $A_\alpha(G)_u$ é uma submatriz de $A_\alpha(G)$ obtida pela remoção da linha e da respectiva coluna referentes ao vértice u pertencente a partição com cardinalidade b. Então temos

$$A_\alpha(G)_u = \begin{bmatrix} b\alpha I_a & (1-\alpha)\mathbf{J}_{a\times(b-1)} \\ (1-\alpha)\mathbf{J}_{(b-1)\times a} & a\alpha I_{(b-1)} \end{bmatrix}.$$

Tomando uma partição equilibrada das linhas da matriz $A_\alpha(G)_u$, obtemos a sua matriz quociente com relação a essa partição dada por:

$$A'_\alpha(G)_u = \begin{bmatrix} b\alpha & (1-\alpha)(b-1) \\ a(1-\alpha) & a\alpha \end{bmatrix}.$$

Então,

$$\begin{aligned} P_{A'_\alpha(G)_u}(\lambda) = |\lambda I - A'_\alpha(G)_u| &= (\lambda - a\alpha)(\lambda - b\alpha) - a(b-1)(\alpha-1)^2 \\ &= \lambda^2 - (a+b)\alpha\lambda + ab(2\alpha-1) + a(\alpha-1)^2 \\ &= \lambda^2 - n\alpha\lambda + a\left((\alpha-1)^2(1-b) + \alpha^2 b\right) \end{aligned}$$

cujas raízes são

$$\frac{1}{2}\left(\alpha(a+b) + \sqrt{\alpha^2(a+b)^2 - 4a(\alpha^2 + (b-1)(2\alpha-1))}\right)$$

e (III.2)

$$\frac{1}{2}\left(\alpha(a+b) - \sqrt{\alpha^2(a+b)^2 - 4a(\alpha^2 + (b-1)(2\alpha-1))}\right).$$

Seja e_i o i-ésimo vetor da base canônica de $\mathbb{R}^{n-1}$. Tomemos os vetores $e_j - e_{a+1}$, $j = a+2, \ldots, n-1$. É facil ver que $e_j - e_{a+1}$ são os autovetores da matriz $A_\alpha(G)_u$ associados ao autovalor $a\alpha$. Portanto, a multiplicidade algébrica de $a\alpha$ é, no mínimo, $n-2-a$. Considere os vetores $e_i - e_1$, $i = 2, \ldots, a$. Podemos observar que $e_i - e_1$ são os autovetores da matriz $A_\alpha(G)_u$ associados ao autovalor $b\alpha$, cuja multiplicidade algébrica é, no mínimo, $n-1-b$, obtendo assim o resultado. □

Como consequência da proposição anterior, obtemos o espectro da matriz $A_\alpha(K_{1,n-1})_u$.

Corolário III.1.2. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Sejam $G \cong K_{1,n-1}$ e $\alpha \in [0,1]$. Então $\sigma(A_\alpha(G)_u)$ é:*

(i) $\{\alpha^{(n-1)}\}$ *quando se removem de $A_\alpha(G)$, a linha e a coluna referentes ao vértice de grau $n-1$.*

(ii) $\left\{\frac{1}{2}\left(\alpha n + \sqrt{\alpha^2(n^2-4) - 2(2\alpha-1)(n-2)}\right), \frac{1}{2}\left(\alpha n - \sqrt{\alpha^2(n^2-4) - 2(2\alpha-1)(n-2)}\right), \alpha^{(n-3)}\right\}$ *quando se removem de $A_\alpha(G)$, a linha e a coluna referentes a um vértice de grau 1.*

Proposição III.1.3. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Sejam $G \cong K_n$ e $\alpha \in [0,1]$. Então, $\sigma(A_\alpha(G)_u) = \{\alpha + n - 2, n\alpha - 1^{(n-2)}\}$.*

Demonstração. Sejam $G \cong K_n$ e $\alpha \in [0,1]$. Suponhamos que a matriz $A_\alpha(G)_u$ seja a submatriz

principal de $A_\alpha(G)$ obtida removendo a linha e sua respectiva coluna referente ao vértice u. Então,

$$A_\alpha(G)_u = \begin{bmatrix} (n-1)\alpha & 1-\alpha & \dots & 1-\alpha \\ 1-\alpha & (n-1)\alpha & \dots & 1-\alpha \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1-\alpha & 1\alpha & \dots & (n-1)\alpha) \end{bmatrix}.$$

É simples verificar que o vetor $\mathbf{1}_{n-1}$, cujas entradas são todas iguais a 1, é um autovetor associado ao autovalor $\alpha + (n-2)$.

Seja e_i o i-ésimo vetor da base canônica de $\mathbb{R}^{n-1}$ e considere os vetores $e_j - e_1$, para $j = 2, \dots, n-1$. Então, $e_j - e_1$ são autovetores da matriz $A_\alpha(G)_u$ associados ao autovalor $n\alpha - 1$, cuja multiplicidade algébrica é, pelo menos, $n-2$, e o resultado segue. □

III.2 Polinômios Característicos

Nesta seção, apresentamos o polinômio característico resultante da coalescência de dois grafos, além dos polinômios característicos dos grafos $S(G)$, $R(G)$, $\mathscr{Q}(G)$ e $T(G)$, considerando G como um grafo regular. Também estabelecemos relações entre o polinômio característico associado à matriz A_α para o grafo linha de um grafo G e a matriz $A_\alpha(G)$, assim como entre o polinômio característico associado à matriz A_α para o grafo linha de um grafo G e a matriz $A(G)$.

Considere G_u o grafo obtido a partir de G adicionando uma aresta pendente ao vértice $u \in V$, e $G_{v_1,\dots,v_s}$ o grafo obtido a partir de G adicionando apenas uma aresta pendente em cada um dos vértices $v_1, \dots, v_s \in V$. Na Figura III.1 mostramos G_{v_1,v_3,v_5,v_6} quando $G \cong K_6$.

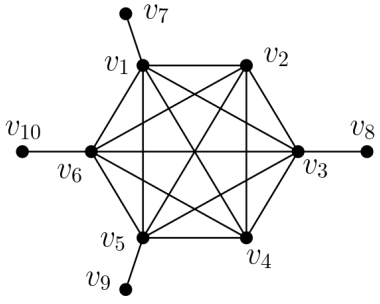


Figura III.1: G_{v_1,v_3,v_5,v_6} onde $G \cong K_6$.

A Proposição III.2.1, devida a Chen *et al.* [2019], apresenta o polinômio característico de um grafo obtido adicionando um número finito de arestas num mesmo vértice do grafo original.

Proposição III.2.1. (Chen *et al.* [2019]) *Sejam H um grafo conexo com $|V(H)| \geq 2$, $v \in V(H)$ e $\alpha \in [0,1]$. Seja G um grafo obtido a partir de H adicionando s arestas pendentes em $v \in V(H)$. Então,*

$$P_{A_\alpha(G)}(\lambda) = (\lambda - \alpha)^s P_{A_\alpha(H)}(\lambda) - s(\alpha\lambda - 2\alpha + 1)(\lambda - \alpha)^{s-1} P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda).$$

A partir da Proposição III.2.1 foi obtido o corolário abaixo que apresenta o polinômio característico da matriz $A_\alpha(G_{v_1,\ldots,v_s})$.

Corolário III.2.2. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Sejam G um grafo com n vértices, $1 \leq s \leq n$ e $\alpha \in [0,1]$. Então,*

$$P_{A_\alpha(G_{v_1,\ldots,v_s})}(\lambda) = (\lambda-\alpha)^s P_{A_\alpha(G)}(\lambda) - (\alpha\lambda - 2\alpha + 1)\sum_{j=1}^{s}(\lambda-\alpha)^{s-j} P_{A_\alpha(G)_{v_j}}(\lambda).$$

Demonstração. Vamos provar este resultado por indução em s. Para $s = 1$, o resultado segue da Proposição III.2.1. Suponha que o resultado seja válido para $s-1$, $s \geq 3$, ou seja,

$$P_{A_\alpha(G_{v_1,\ldots,v_{s-1}})}(\lambda) = (\lambda-\alpha)^{s-1} P_{A_\alpha(G)}(\lambda) - (\alpha\lambda - 2\alpha + 1)\sum_{j=1}^{s-1}(\lambda-\alpha)^{s-1-j} P_{A_\alpha(G)_{v_j}}(\lambda). \quad \text{(III.3)}$$

Considere $H \cong G_{v_1,\ldots,v_{s-1}}$. A partir da Proposição III.2.1, temos que

$$P_{A_\alpha(H_{v_s})}(\lambda) = (\lambda-\alpha) P_{A_\alpha(H)}(\lambda) - (\alpha\lambda - 2\alpha + 1) P_{A_\alpha(H)_{v_s}}(\lambda). \quad \text{(III.4)}$$

Substituindo (III.3) em (III.4), o resultado segue. □

Os Exemplos 2 e 3 são aplicações de resultados obtidos anteriormente e neles exibimos o polinômio característico da matriz A_α para determinadas famílias de grafos.

Exemplo 2. *Sejam $G \cong K_n$, $1 \leq s \leq n$ e $\alpha \in [0,1]$. Considere o grafo $G_{v_1,\ldots,v_s}$. É fácil ver que $P_{A_\alpha(G)_{v_i}}(\lambda) = P_{A_\alpha(G)_{v_j}}(\lambda)$, $\forall 1 \leq i,j \leq n$. Fazendo $s = n$ e aplicando o Corolário III.2.2 juntamente com as Proposições III.1.3 e II.2.1, temos*

$$\begin{aligned} P_{A_\alpha(G_{v_1,\ldots,v_n})} &= (\lambda-\alpha)^n(\lambda-n+1)(\lambda-\alpha n+1)^{n-1} \\ &\quad - (\alpha\lambda-2\alpha+1)\left(\frac{(\lambda-\alpha)^{n-1}-1}{\lambda-\alpha-1}\right)(\lambda-\alpha-n+2)(\lambda-\alpha n+1)^{n-2} \\ &= (\lambda-\alpha n-1)^{n-2}\left[(\lambda-\alpha)^n g(\lambda) - \left(\frac{(\lambda-\alpha)^{n-1}-1}{\lambda-\alpha-1}\right) f(\lambda)\right], \end{aligned}$$

onde $g(\lambda) = (\lambda-n+1)(\lambda-\alpha n+1)$ e $f(\lambda) = (\alpha\lambda-2\alpha+1)(\lambda-\alpha-n+1)$.

Exemplo 3. *Sejam $G \cong K_{1,n-1}$, $1 \leq s \leq n-1$ e $\alpha \in [0,1]$. Considere o grafo $G_{v_1,\ldots,v_s}$ obtido de G adicionando apenas uma aresta pendente a cada vértice de grau 1. É fácil ver que se $d(v_i) = d(v_j) = 1$ $\forall 1 \leq i,j \leq n-1$, então temos $P_{A_\alpha(G)_{v_i}}(\lambda) = P_{A_\alpha(G)_{v_j}}(\lambda)$. Tomando $s = n-1$, o grafo $G_{v_1,\ldots,v_s}$ é uma starlike tree. Aplicando os Corolários III.1.2 e III.2.2 juntamente com a Proposição*

II.2.3 temos

$$\begin{aligned}
P_{A_\alpha(G_{v_1,\ldots,v_s})} &= (\lambda-\alpha)^{n-1}(\lambda-c_1)(\lambda-c_2)(\lambda-\alpha)^{n-2} \\
&\quad -(\alpha\lambda-2\alpha+1)\left(\frac{(\lambda-\alpha)^{n-1}-1}{\lambda-\alpha-1}\right)(\lambda-\alpha)^{n-3}(\lambda-c_3)(\lambda-c_4) \\
&= (\lambda-\alpha)^{n-3}\Bigg[(\lambda-\alpha)^{n}(\lambda-c_1)(\lambda-c_2) \\
&\quad -(\alpha\lambda-2\alpha+1)\left(\frac{(\lambda-\alpha)^{n-1}-1}{\lambda-\alpha-1}\right)(\lambda-c_3)(\lambda-c_4)\Bigg] \\
&= (\lambda-\alpha)^{n-3}\left[(\lambda-\alpha)^{n}f(\lambda)+\left(\frac{(\lambda-\alpha)^{n-1}-1}{\lambda-\alpha-1}\right)g(\lambda)\right],
\end{aligned}$$

onde $f(\lambda)=\lambda^2-\alpha n\lambda+(n-1)(2\alpha-1)$, $g(\lambda)=(-\alpha\lambda+2\alpha-1)(\lambda^2-\alpha n\lambda+(n-2)(2\alpha-1)+\alpha^2)$, $c_1=\frac{1}{2}\left(\alpha n+\sqrt{\alpha^2n^2+4(n-1)(1-2\alpha)}\right)$, $c_2=\frac{1}{2}\left(\alpha n-\sqrt{\alpha^2n^2+4(n-1)(1-2\alpha)}\right)$, $c_3=\frac{1}{2}\left(\alpha n+\sqrt{\alpha^2(n^2-4)-2(2\alpha-1)(n-2)}\right)$ *e* $c_4=\frac{1}{2}\left(\alpha n-\sqrt{\alpha^2(n^2-4)-2(2\alpha-1)(n-2)}\right)$.

No Teorema III.2.3 é apresentado o polinômio característico da matriz A_α do grafo resultante da coalescência de dois outros grafos.

Teorema III.2.3. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Considere $G\cdot H$ o grafo obtido pela coalescência de G e H identificando os vértices $u\in V(G)$ e $v\in V(H)$. Então,*

$$P_{A_\alpha(G\cdot H)}(\lambda)=P_{A_\alpha(G)}(\lambda)P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda)+P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda)P_{A_\alpha(H)}(\lambda)-\lambda P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda)P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda).$$

Demonstração. Sabemos que

$$P_{A_\alpha(G\cdot H)}(\lambda)=|\lambda I-A_\alpha(G\cdot H)|=\begin{vmatrix}\lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & \nu^T & \rho^T \\ \nu & \lambda I-A_\alpha(G)_u & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I-A_\alpha(H)_v\end{vmatrix},$$

onde ν e ρ são vetores cujas coordenadas não nulas são $\alpha-1$ para todos os vértices adjacentes a u em G e a v em H, respectivamente. Como o determinante é uma função multilinear nas colunas,

temos que:

$$
\begin{aligned}
|\lambda I - A_\alpha(G\cdot H)| &= \begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & \nu^T & \rho^T \\ \nu & 0 & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I - A_\alpha(H)_v \end{vmatrix} \\
&\quad + \begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & 0 & \rho^T \\ \nu & \lambda I - A_\alpha(G)_u & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I - A_\alpha(H)_v \end{vmatrix} \\
&= \begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & \nu^T & \rho^T \\ \nu & 0 & 0 \\ \rho & 0 & 0 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & \nu^T & 0 \\ \nu & 0 & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I - A_\alpha(H)_v \end{vmatrix} \\
&\quad + \begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & 0 & \rho^T \\ \nu & \lambda I - A_\alpha(G)_u & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I - A_\alpha(H)_v \end{vmatrix} \\
&= \begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & \nu^T & 0 \\ \nu & 0 & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I - A_\alpha(H)_v \end{vmatrix} \\
&\quad + \begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & 0 & \rho^T \\ \nu & \lambda I - A_\alpha(G)_u & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I - A_\alpha(H)_v \end{vmatrix}
\end{aligned} \tag{III.5}
$$

Somando e subtraindo $\begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & 0 & 0 \\ \nu & \lambda I - A_\alpha(G)_u & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I - A_\alpha(H)_v \end{vmatrix}$ em (III.5) e usando, novamente, a multilinearidade da função determinante, temos

$$
\begin{aligned}
|\lambda I - A_\alpha(G\cdot H)| &= \begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & 0 & \rho^T \\ \nu & \lambda I - A_\alpha(G)_u & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I - A_\alpha(H)_v \end{vmatrix} \\
&\quad + \begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & \nu^T & 0 \\ \nu & \lambda I - A_\alpha(G)_u & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I - A_\alpha(H)_v \end{vmatrix} \\
&\quad - \begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & 0 & 0 \\ \nu & \lambda I - A_\alpha(G)_u & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I - A_\alpha(H)_v \end{vmatrix}
\end{aligned} \tag{III.6}
$$

Além disso, sabemos que:

$$\begin{aligned}
&\begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & 0 & \rho^T \\ \nu & \lambda I-A_\alpha(G)_u & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I-A_\alpha(H)_v \end{vmatrix} \\
&= |\lambda I-A_\alpha(G)_u| \begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & \rho^T \\ \rho & \lambda I-A_\alpha(H)_v \end{vmatrix} \\
&= |\lambda I-A_\alpha(G)_u| \begin{vmatrix} \lambda-d_H(v)\alpha & \rho^T \\ \rho & \lambda I-A_\alpha(H)_v \end{vmatrix} + |\lambda I-A_\alpha(G)_u| \begin{vmatrix} -d_G(u)\alpha & \rho^T \\ 0 & \lambda I-A_\alpha(H)_v \end{vmatrix} \\
&= P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda)P_{A_\alpha(H)}(\lambda) - \alpha d_G(u)P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda)P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda), \qquad \text{(III.7)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & \nu^T & 0 \\ \nu & \lambda I-A_\alpha(G)_u & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I-A_\alpha(H)_v \end{vmatrix} \\
&= |\lambda I-A_\alpha(H)_v| \begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & \nu^T \\ \nu & \lambda I-A_\alpha(G)_u \end{vmatrix} \\
&= |\lambda I-A_\alpha(H)_v| \begin{vmatrix} \lambda-d_G(u)\alpha & \nu^T \\ \nu & \lambda I-A_\alpha(G)_u \end{vmatrix} + |\lambda I-A_\alpha(H)_v| \begin{vmatrix} -d_H(v)\alpha & \nu^T \\ 0 & \lambda I-A_\alpha(G)_u \end{vmatrix} \\
&= P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda)P_{A_\alpha(G)}(\lambda) - \alpha d_H(v)P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda)P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda) \qquad \text{(III.8)}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{vmatrix} \lambda-(d_G(u)+d_H(v))\alpha & 0 & 0 \\ \nu & \lambda I-A_\alpha(G)_u & 0 \\ \rho & 0 & \lambda I-A_\alpha(H)_v \end{vmatrix} = (\lambda-\alpha d_G(u)-\alpha d_H(v))P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda)P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda) \qquad \text{(III.9)}$$

Substituindo (III.7), (III.8) e (III.9) em (III.6) temos

$$\begin{aligned}
P_{A_\alpha(G\cdot H)}(\lambda) &= P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda)P_{A_\alpha(H)}(\lambda) - \alpha d_G(u)P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda)P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda) \\
&\quad + P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda)P_{A_\alpha(G)}(\lambda) - \alpha d_H(v)P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda)P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda) \\
&\quad - \lambda P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda)P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda) + \alpha d_G(u)P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda)P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda) \\
&\quad + \alpha d_H(v)P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda)P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda)
\end{aligned}$$

e, consequentemente,

$$P_{A_\alpha(G\cdot H)}(\lambda) = P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda)P_{A_\alpha(H)}(\lambda) + P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda)P_{A_\alpha(G)}(\lambda) - \lambda P_{A_\alpha(G)_u}(\lambda)P_{A_\alpha(H)_v}(\lambda).$$

□

Nos exemplos a seguir são aprensentadas aplicações do Teorema III.2.3 e de outros resultados. Inicialmente, o Exemplo 4 apresenta o polinômio característico $P_{A_\alpha(K_m^n)}(\lambda)$. É importante ressaltar que o Teorema II.2.12 exibe esse mesmo polinômio utilizando uma outra técnica de demosntração. Em seguida, nos Exemplos 5, 6 e 7, são apresentados os polinômios característicos $P_{A_\alpha(D(m,n))}(\lambda)$, $P_{A_\alpha(B(3,n,m))}(\lambda)$ e $P_{A_\alpha(K_{n_1}\cdot K_{n_2})}(\lambda)$.

Exemplo 4. *Seja K_m^n o grafo pineapple. Aplicando o Corolário III.1.2, as Proposições II.2.1, II.2.3 e III.1.3 no Teorema III.2.3, temos*

$$\begin{aligned}
P_{A_\alpha(K_m^n)}(\lambda) &= (\lambda - m + 1)(\lambda - \alpha m + 1)^{m-1}(\lambda - \alpha)^n \\
&\quad + (\lambda - \alpha - m + 2)(\lambda - m\alpha + 1)^{m-2}(\lambda - c_1)(\lambda - c_2)(\lambda - \alpha)^{n-1} \\
&\quad - \lambda(\lambda - \alpha - m + 2)(\lambda - m\alpha + 1)^{m-2}(\lambda - \alpha)^n \\
&= (\lambda - \alpha)^{n-1}(\lambda - m\alpha + 1)^{m-2}\Big[(\lambda - m + 1)(\lambda - m\alpha + 1)(\lambda - \alpha) \\
&\quad + (\lambda - \alpha - m + 2)(\lambda - c_1)(\lambda - c_2) - \lambda(\lambda - \alpha - m + 2)(\lambda - \alpha)\Big] \\
&= (\lambda - \alpha)^{n-1}(\lambda - m\alpha + 1)^{m-2} f(\lambda)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\textit{onde } f(\lambda) &= (\lambda - m + 1)(\lambda - m\alpha + 1)(\lambda - \alpha) - n(\lambda - \alpha - m + 2)(\lambda\alpha - 2\alpha + 1), \\
c_1 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(n+1) + \sqrt{\alpha^2(n+1)^2 + 4n(1-2\alpha)}\right) \textit{ e} \\
c_2 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(n+1) - \sqrt{\alpha^2(n+1)^2 + 4n(1-2\alpha)}\right).
\end{aligned}$$

Exemplo 5. *Considere a dupla estrela $D(m,n)$. Aplicando o Corolário III.1.2, a Proposição II.2.3 e o Teorema III.2.3, temos*

$$\begin{aligned}
P_{A_\alpha(D(m,n))}(\lambda) &= (\lambda - \alpha)^n(\lambda - \alpha)^m(\lambda - c_3)(\lambda - c_4) + (\lambda - \alpha)^{m-1}(\lambda - c_5)(\lambda - c_6)(\lambda - \alpha)^{n-1}(\lambda - c_1)(\lambda - c_2) \\
&\quad - \lambda(\lambda - \alpha)^n(\lambda - \alpha)^{m-1}(\lambda - c_5)(\lambda - c_6) \\
&= (\lambda - \alpha)^{m+n-2}\Big[(\lambda - \alpha)^2(\lambda - c_3)(\lambda - c_4) + (\lambda - c_5)(\lambda - c_6)(\lambda - c_1)(\lambda - c_2) \\
&\quad - \lambda(\lambda - \alpha)(\lambda - c_5)(\lambda - c_6)\Big] \\
&= (\lambda - \alpha)^{m+n-2} f(\lambda)
\end{aligned}$$

onde $f(\lambda) = \lambda^4 - \alpha(m+n+4)\lambda^3 + [\alpha^2(mn + 2m + 2n + 5) + (2\alpha - 1)(m + n + 1)]\lambda^2 + [\alpha^2(m +$

$n+2)+2(2\alpha-1)(m+1)(n+1)]\lambda+(2\alpha-1)[\alpha^2(m+1)(n+1)+mn(\alpha-1)^2]$,

$$
\begin{aligned}
c_1 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(n+1)+\sqrt{\alpha^2(n+1)^2+4n(1-2\alpha)}\right),\\
c_2 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(n+1)-\sqrt{\alpha^2(n+1)^2+4n(1-2\alpha)}\right),\\
c_3 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(m+2)+\sqrt{\alpha^2(m+2)^2+4(m+1)(1-2\alpha)}\right),\\
c_4 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(m+2)-\sqrt{\alpha^2(m+2)^2+4(m+1)(1-2\alpha)}\right),\\
c_5 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(m+2)+\sqrt{\alpha^2((m+2)^2-4)+2m(1-2\alpha)}\right) \ e\\
c_6 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(m+2)-\sqrt{\alpha^2((m+2)^2-4)+2m(1-2\alpha)}\right).
\end{aligned}
$$

Observação III.2.4. *Tomando $m=n$ no Exemplo 5, obtemos a dupla estrela equilibrada $D(n,n)$. Assim, temos*

$$P_{A_\alpha(D(n,n))}(\lambda)=(\lambda-\alpha)^{2n-2}g(\lambda),$$

onde $g(\lambda)=(-\lambda^2+\lambda(\alpha n+3\alpha-1)-2\alpha^2+\alpha+n)(-\lambda^2+\lambda(\alpha n+\alpha+1)-2n\alpha-\alpha+n)$, cujas raízes são

$$
\begin{aligned}
r_1 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(n+3)-1-\sqrt{\alpha^2(n+3)^2-2\alpha(4\alpha+n)-(2\alpha-1)(4n+1)}\right),\\
r_2 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(n+3)-1+\sqrt{\alpha^2(n+3)^2-2\alpha(4\alpha+n)-(2\alpha-1)(4n+1)}\right),\\
r_3 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(n+1)+1-\sqrt{\alpha^2(n+1)^2-2n(3\alpha+2)-(2\alpha-1)}\right) \ e\\
r_4 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(n+1)+1+\sqrt{\alpha^2(n+1)^2-2n(3\alpha+2)-(2\alpha-1)}\right).
\end{aligned}
$$

Obtendo o espectro do referido grafo. Esse resultado encontra-se publicado em Silva Junior et al. [2023b].

Exemplo 6. *Considere $B(3,n,m)$ o grafo obtido pela coalescência de $G\cong K_{1,n+1}$ e $H\cong K_{1,m+1}$, com $m\neq n$, por dois vértices de grau 1. Aplicando o Corolário III.1.2, Proposição II.2.3 e Teorema III.2.3 temos*

$$
\begin{aligned}
P_{A_\alpha(B(3,n,m))}(\lambda) &= (\lambda-\alpha)^{m+n-2}((\lambda-\alpha)(\lambda-c_1)(\lambda-c_2)(\lambda-c_7)(\lambda-c_8)\\
&\quad+(\lambda-\alpha)(\lambda-c_5)(\lambda-c_6)(\lambda-c_3)(\lambda-c_4)\\
&\quad-\lambda(\lambda-c_5)(\lambda-c_6)(\lambda-c_7)(\lambda-c_8))\\
&= (\lambda-\alpha)^{m+n-2}f(\lambda)
\end{aligned}
$$

onde $f(\lambda)=\lambda^5-\alpha(m+n+6)\lambda^4+((m+4)(n+4)-4\alpha^2+(2\alpha-1)(m+n+2))\lambda^3$

$$-\left(\frac{a(4a^2(m+2)(n+2)+4a^2+(2a-1)(4mn+9m+9n+12))}{2}\right)\lambda^2+\Bigg(\alpha^4(m+n+3)+3\alpha^3(2mn+3m+3n+4)-\frac{\alpha}{2}(5m+5n+12)-\frac{(4\alpha-1)(3mn+2m+2n)}{2}\Bigg)\lambda-\alpha(2\alpha-1)^2(2mn+m+n)+2\alpha^2(m+n+2),$$

$$\begin{aligned}
c_1 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(n+2)+\sqrt{\alpha^2(n+2)^2+4(n+1)(1-2\alpha)}\right),\\
c_2 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(n+2)-\sqrt{\alpha^2(n+2)^2+4(n+1)(1-2\alpha)}\right),\\
c_3 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(m+2)+\sqrt{\alpha^2(m+2)^2+4(m+1)(1-2\alpha)}\right),\\
c_4 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(m+2)-\sqrt{\alpha^2(m+2)^2+4(m+1)(1-2\alpha)}\right),\\
c_5 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(n+2)+\sqrt{\alpha^2((n+2)^2-4)+2n(1-2\alpha)}\right),\\
c_6 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(n+2)-\sqrt{\alpha^2((n+2)^2-4)+2n(1-2\alpha)}\right),\\
c_7 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(m+2)+\sqrt{\alpha^2((m+2)^2-4)+2m(1-2\alpha)}\right)\ \ e\\
c_8 &= \frac{1}{2}\left(\alpha(m+2)-\sqrt{\alpha^2((m+2)^2-4)+2m(1-2\alpha)}\right).
\end{aligned}$$

Caso $m=n$ temos

$$P_{A_\alpha(B(3,n,n))}(\lambda)=(\lambda-\alpha)^{2n-2}g(\lambda),$$

onde $g(\lambda)=\lambda^5-2\alpha(n+3)\lambda^4+(\alpha^2(n+2)(n+6)+2(2\alpha-1)(n+1))\lambda^3+(-2\alpha^3(n^2+4n+5)-\alpha(2\alpha-1)(2n^2+9n+6))\lambda^2+\left(\frac{(4\alpha^2n+6\alpha^22+2\alpha n-n)(2\alpha^2+6\alpha n+8\alpha-3n-4)}{4}\right)\lambda-\alpha(2\alpha-1)(n+1)(2\alpha^2+2\alpha n-n)$.

Exemplo 7. *Considere $G\cong K_{n_1}\cdot K_{n_2}$, com $n_1\neq n_2$. Pelas Proposições II.2.1 e III.1.3 temos que $\sigma(A_\alpha(K_n))=\{n-1,n\alpha-1^{(n-1)}\}$ e $\sigma(A_\alpha(K_n)_u)=\{\alpha+n-2,n\alpha-1^{(n-2)}\}$, respectivamente. Segue do Teorema III.2.3 que,*

$$P_{A_\alpha(G)}(\lambda)=P_{A_\alpha(K_{n_1})}(\lambda)P_{A_\alpha(K_{n_2})_v}(\lambda)+P_{A_\alpha(K_{n_1})_u}(\lambda)P_{A_\alpha(K_{n_2})}(\lambda)-\lambda P_{A_\alpha(K_{n_1})_u}(\lambda)P_{A_\alpha(K_{n_2})_v}(\lambda) \quad \textit{(III.10)}$$

onde cada um dos polinômios é dado por

$$\begin{aligned}
P_{A_\alpha(K_{n_1})}(\lambda) &= (\lambda-n_1+1)(\lambda-\alpha n_1+1)^{n_1-1}\\
P_{A_\alpha(K_{n_2})}(\lambda) &= (\lambda-n_2+1)(\lambda-\alpha n_2+1)^{n_2-1}\\
P_{A_\alpha(K_{n_1})_u}(\lambda) &= (\lambda-\alpha-n_1+2)(\lambda-n_1\alpha+1)^{n_1-2}\\
P_{A_\alpha(K_{n_2})_v}(\lambda) &= (\lambda-\alpha-n_2+2)(\lambda-n_2\alpha+1)^{n_2-2}.
\end{aligned}$$

Substituindo esses polinômios em (III.10) e após algumas manipulações algébricas, obtemos

$$P_{A_\alpha(K_{n_1}\cdot K_{n_2})}(\lambda) = (\lambda - n_1\alpha + 1)^{n_1-2}(\lambda - n_2\alpha + 1)^{n_2-2}\left[(\lambda - n_1 + 1)(\lambda - \alpha n_1 + 1)(\lambda - \alpha - n_2 + 2)\right.$$
$$\left. + (\lambda - \alpha - n_1 + 2)(\lambda - n_2 + 1)(\lambda - \alpha n_2 + 1) - \lambda(\lambda - \alpha - n_1 + 2)(\lambda - \alpha - n_2 + 2)\right]. \quad \textit{(III.11)}$$

Logo $\sigma(A_\alpha(G)) = \left\{(\lambda - n_1\alpha + 1)^{(n_1-2)}, (\lambda - n_2\alpha + 1)^{(n_2-2)}, r_1, r_2, r_3\right\}$, *onde* r_1, r_2, r_3 *são raízes do polinômio*

$$\begin{aligned} q(\lambda) = {} & (\lambda - n_1 + 1)(\lambda - \alpha n_1 + 1)(\lambda - \alpha - n_2 + 2) \\ & + (\lambda - \alpha - n_1 + 2)(\lambda - n_2 + 1)(\lambda - \alpha n_2 + 1) - \lambda(\lambda - \alpha - n_1 + 2)(\lambda - \alpha - n_2 + 2). \end{aligned} \quad \textit{(III.12)}$$

Caso $n_1 = n_2 = n$ *temos que* $G \cong K_n \cdot K_n$ *e consequentemente*

$$P_{A_\alpha(G)}(\lambda) = (\lambda - n\alpha + 1)^{2n-4}(\lambda - \alpha - n + 2)\left[2(\lambda - n + 1)(\lambda - \alpha n + 1) - \lambda(\lambda - \alpha - n + 2)\right]. \quad \textit{(III.13)}$$

Portanto

$$\begin{aligned} \sigma(A_\alpha(G)) = \Bigg\{ & n\alpha - 1^{(2n-4)}, n + \alpha - 2, \alpha\left(n - \frac{1}{2}\right) + \frac{n}{2} - 1 \\ & - \frac{\sqrt{\alpha^2(4n^2 - 4n + 1) - \alpha(4n^2 + 2n - 4) + n^2 + 4n - 4}}{2}, \alpha\left(n - \frac{1}{2}\right) + \frac{n}{2} - 1 \\ & + \frac{\sqrt{\alpha^2(4n^2 - 4n + 1) - \alpha(4n^2 + 2n - 4) + n^2 + 4n - 4}}{2} \Bigg\} \end{aligned} \quad \textit{(III.14)}$$

Cabe ressaltar que Najiya e Chithra [2023] fazem a k-coalescencia[1] entre dois grafos e como exemplo particular, é feita a coalescencia entre dois grafos completos, cujo resultado é o mesmo que o aqui obtido.

Os dois próximos resultados apresentam $P_{A_\alpha(l(G))}$ em função do $P_{A_\alpha(G)}$, do $P_{A(G)}$ e do $P_{Q(G)}$, quando G é um grafo regular.

Teorema III.2.5. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Sejam G um grafo r-regular com n vértices e m arestas tal que $r \geq 2$ e $\alpha \in [0, 1)$. Então,*

$$P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) = (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n} P_{A_\alpha(G)}(\lambda - r + 2)$$

e

$$P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) = (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n}(1 - \alpha)^n P_{A(G)}\left(\frac{\lambda - r(\alpha + 1) + 2}{1 - \alpha}\right).$$

[1]Considere os grafos conexos G_1 e G_2, com n_1 e n_2 vértices e m_1 e m_2 arestas, respectivamente, que possuem um subgrafo completo induzido de ordem k com $n_1; n_2 \geq k$. O gráfico obtido ao unir k vértices em kC_2 arestas do subgrafo completo induzido K_k é chamado de k-coalescência, denotado por $G_1 \cdot_k G_2$. O gráfico $G_1 \cdot_k G_2$ tem ordem $n_1 + n_2 - k$ com $m_1 + m_2 - kC_2$ arestas. Para maiores detalhes sugerimos Jog e Patil [2021] e Najiya e Chithra [2023].

Demonstração. Sejam G um grafo r-regular com n vértices e m arestas e B sua matriz de incidência. A partir do Lema I.3.17, temos que

$$(1-\alpha)BB^T = (1-\alpha)D(G) + (1-\alpha)A(G) = (1-\alpha)D(G) + A_\alpha(G) - \alpha D(G) = (1-2\alpha)D(G) + A_\alpha(G). \tag{III.15}$$

Por outro lado, $A_\alpha(l(G)) = \alpha D(l(G)) + (1-\alpha)A(l(G))$.

Considerando as matrizes U e V definidas da seguinte forma:

$$U = \begin{bmatrix} \lambda I_n & -B \\ 0 & I_m \end{bmatrix} \text{ e } V = \begin{bmatrix} I_n & B \\ (1-\alpha)B^T & \lambda I_m \end{bmatrix}.$$

Então,

$$UV = \begin{bmatrix} \lambda I_n & -B \\ 0 & I_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_n & B \\ (1-\alpha)B^T & \lambda I_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda I_n - (1-\alpha)BB^T & 0 \\ (1-\alpha)B^T & \lambda I_m \end{bmatrix}$$

e

$$VU = \begin{bmatrix} I_n & B \\ (1-\alpha)B^T & \lambda I_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda I_n & -B \\ 0 & I_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda I_n & 0 \\ (1-\alpha)\lambda B^T & \lambda I_m - (1-\alpha)B^TB \end{bmatrix}$$

Como $|UV| = |VU|$, temos

$$\lambda^m |\lambda I_n - (1-\alpha)BB^T| = \lambda^n |\lambda I_m - (1-\alpha)B^TB|. \tag{III.16}$$

Por definição

$$P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) = |\lambda I_m - A_\alpha(l(G))| = |\lambda I_m - \alpha D(l(G)) - (1-\alpha)A(l(G))|$$

e usando o Lema I.3.16, temos

$$\begin{aligned} P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) &= |\lambda I_m - \alpha D(l(G)) + (1-\alpha)(2I_m - B^TB)| \\ &= |(\lambda + 2(1-\alpha))I_m - (1-\alpha)B^TB - \alpha \underbrace{D(l(G))}_{2(r-1)I_m}| \\ &= |(\lambda + 2 - 2\alpha - 2\alpha r + 2\alpha)I_m - (1-\alpha)B^TB| \\ &= |(\lambda - 2r\alpha + 2)I_m - (1-\alpha)B^TB|. \end{aligned}$$

Aplicando a Equação (III.16), temos que

$$P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) = (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n} |(\lambda - 2r\alpha + 2)I_n - (1-\alpha)BB^T| \tag{III.17}$$

Finalmente, pela Equação (III.15), temos

$$\begin{aligned}
P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) &= (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n}|(\lambda - 2r\alpha + 2)I_n - [(1-2\alpha)D(G) + A_\alpha(G)]| \\
&= (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n}|(\lambda - 2r\alpha + 2)I_n - (1-2\alpha)rI_n - A_\alpha(G)| \\
&= (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n}|(\lambda - r + 2)I_n - A_\alpha(G)| \\
&= (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n}P_{A_\alpha(G)}(\lambda - r + 2).
\end{aligned}$$

Pela equação (III.17), sabemos que

$$\begin{aligned}
P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) &= (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n}|(\lambda - 2r\alpha + 2)I_n - (1-\alpha)BB^T| \\
&= (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n}|(\lambda - 2r\alpha + 2)I_n - (1-\alpha)(A(G) + rI_n)| \\
&= (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n}|(\lambda - r\alpha - r + 2)I_n - (1-\alpha)A(G)| \\
&= (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n}(1-\alpha)^n P_{A(G)}\left(\frac{\lambda - r(\alpha+1) + 2}{1-\alpha}\right)
\end{aligned}$$

e o resultado segue. □

Corolário III.2.6. *Sejam G um grafo r-regular com n vértices e m arestas tal que $r \geq 2$ e $\alpha \in [0, 1)$. Então,*

$$P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) = (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n}(1-\alpha)^n P_{Q(G)}\left(\frac{\lambda - 2r\alpha + 2}{1-\alpha}\right).$$

Demonstração. O resultado segue da Equação (III.17), ou seja,

$$\begin{aligned}
P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) &= (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n}|(\lambda - 2r\alpha + 2)I_n - (1-\alpha)BB^T| \\
&= (\lambda - 2r\alpha + 2)^{m-n}(1-\alpha)^n P_{Q(G)}\left(\frac{\lambda - 2r\alpha + 2}{1-\alpha}\right).
\end{aligned}$$

□

Observação III.2.7. *Seja G um grafo r-regular com $\sigma(Q(G)) = \{q_1, \ldots, q_n\}$ e $m > n$. Do Corolário III.2.6 temos que $\alpha(2r - q_i) + q_i - 2$ para $i = 1, \ldots, n$ e $(2r\alpha - 2)^{m-n}$ pertencem a $\sigma(A_\alpha(l(G)))$.*

Exemplo 8. *Considere $G \cong K_n$. Da Proposição II.2.2 segue que $\sigma(A_\alpha(K_n)) = \{n-1, \alpha n - 1^{(n-1)}\}$. Portanto, do Teorema III.2.5, $\sigma(A_\alpha(l(K_n))) = \left\{2n-4, n(\alpha+1) - 4^{(n-1)},\ 2\alpha(n-1) - 2^{(\frac{n(n-3)}{2})}\right\}$. Em particular, tomando $n = 4$ obtemos $l(K_4)$, que é o grafo octaédrico mostrado na Figura III.2, e consequentemente $\sigma(A_\alpha(l(K_4))) = \{4, 4\alpha^{(3)}, 6\alpha - 2^{(2)}\}$.*

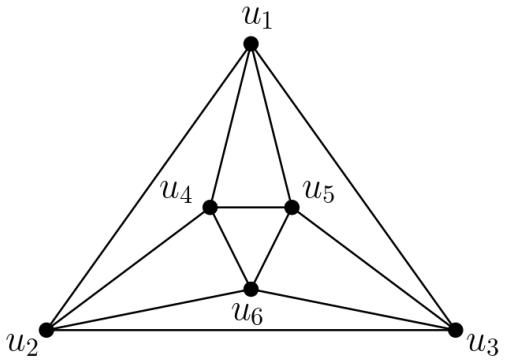


Figura III.2: Grafo Octaédrico ($l(K_4)$).

Exemplo 9. *Podemos ver que $l(K_5)$ é um grafo de ordem 10 e 6-regular. Do Teorema III.2.5, temos que $\sigma(A_\alpha(l(K_5))) = \{6, 5\alpha + 1^{(4)}, 8\alpha - 2^{(5)}\}$. Além disso, sabemos que $\overline{l(K_5)}$ é o grafo de Petersen e, a partir da Proposição II.3.4 obtemos $\sigma(A_\alpha(\overline{l(K_5)})) = \{3, 5\alpha - 2^{(4)}, 2\alpha + 1^{(5)}\}$.*

Corolário III.2.8. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Se $\alpha \in [0, 1]$, então*

$$\sigma(A_\alpha(l(K_{n,n}))) = \left\{2n - 2, n(\alpha + 1) - 2^{(2n-2)}, 2\alpha n - 2^{(n^2-2n+1)}\right\}.$$

Demonstração. De Malathy e Desikan [2017] e Cvetkovic *et al.* [2004] sabemos que $\sigma(L(K_{n,n})) = \{2n, n^{(2n-2)}, 0\}$. Além disso, da Proposição I.3.19 temos que $\sigma(L(K_{n,n})) = \sigma(Q(K_{n,n}))$. Portanto, a partir do Corolário III.2.6, obtemos o resultado. □

O Teorema III.2.9 e o Corolário III.2.10 apresentam $P_{A_\alpha(l(G))}$ quando G é um grafo semirregular bipartido. Nestes dois resultados, e apenas neles, usaremos m_G e n_G para denotar o número de arestas e o número de vértices do grafo G.

Teorema III.2.9. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Sejam G um grafo bipartido semirregular, com parâmetros inteiros positivos n_1, n_2, r_1 e r_2, tal que $n_1 \geq n_2$, e $\alpha \in [0, 1)$. Então,*

$$P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) = (1 - \alpha)^\gamma(\lambda - \alpha(r_1 + r_2) + 2)^\beta P_{A(G)}(\sqrt{\alpha_1\alpha_2})\sqrt{\left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right)^{n_1 - n_2}},$$

onde $\alpha_1 = \dfrac{\lambda - \alpha r_2 - r_1 + 2}{1 - \alpha}$, $\alpha_2 = \dfrac{\lambda - \alpha r_1 - r_2 + 2}{1 - \alpha}$, $\beta = n_1 r_1 - n$ *e* $\gamma = \dfrac{n_2 r_2 - n_1 r_1 + 2n}{2}$.

Demonstração. Seja G um grafo bipartido semirregular com partições V_1 e V_2 tais que $|V_1| = n_1$ e $|V_2| = n_2$, onde $n_1 \geq n_2$ e $n_1 + n_2 = n$. Sabemos que para todo $v \in V_1$, $d(v) = r_1$ e para todo $u \in V_2$, $d(u) = r_2$. Além disso, sabemos que $A(l(G)) = \dfrac{1}{1 - \alpha}\left(A_\alpha(l(G)) - \alpha D(l(G))\right)$.

Como $m_G = n_{l(G)} = \dfrac{n_1 r_1 + n_2 r_2}{2}$, segue que

$$\lambda I_{n_{l(G)}} - A(l(G)) = \lambda I_{n_{l(G)}} - \frac{1}{1-\alpha} A_\alpha(l(G)) + \frac{\alpha}{1-\alpha} D(l(G))$$
$$\lambda I_{n_{l(G)}} - A(l(G)) = \frac{(1-\alpha)\lambda I_{n_{l(G)}}}{1-\alpha} - \frac{1}{1-\alpha} A_\alpha(l(G)) + \frac{\alpha}{1-\alpha} D(l(G)). \tag{III.18}$$

Passando ao determinante, obtemos que

$$\left|\lambda I_{n_{l(G)}} - A(l(G))\right| = \left|\frac{(1-\alpha)\lambda I_{n_{l(G)}}}{1-\alpha} - \frac{1}{1-\alpha} A_\alpha(l(G)) + \frac{\alpha}{1-\alpha} D(l(G))\right| \Leftrightarrow$$

$$(1-\alpha)^{n_{l(G)}} \left|\lambda I_{n_{l(G)}} - A(l(G))\right| = \left|(1-\alpha)\lambda I_{n_{l(G)}} - A_\alpha(l(G)) + \alpha D(l(G))\right|.$$

Como G é um grafo semirregular bipartido temos $D(l(G)) = (r_1 + r_2 - 2) I_{n_{l(G)}}$, o que implica que

$$\left|((1-\alpha)\lambda + \alpha(r_1 + r_2 - 2)) I_{n_{l(G)}} - A_\alpha(l(G))\right| = (1-\alpha)^{n_{l(G)}} \left|\lambda I_{n_{l(G)}} - A(l(G))\right|.$$

Então,

$$P_{A_\alpha(l(G))}((1-\alpha)\lambda + \alpha(r_1 + r_2 - 2)) = (1-\alpha)^{n_{l(G)}} P_{A(l(G))}(\lambda) \Leftrightarrow$$
$$P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) = (1-\alpha)^{n_{l(G)}} P_{A(l(G))}\left(\frac{\lambda - \alpha(r_1 + r_2 - 2)}{1-\alpha}\right). \tag{III.19}$$

Aplicando o Teorema I.3.4 em (III.19), obtemos

$$P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) = (1-\alpha)^{\gamma} (\lambda - \alpha(r_1 + r_2) + 2)^{\beta} P_{A(G)}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2}) \sqrt{\left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right)^{n_1 - n_2}},$$

onde $\alpha_1 = \dfrac{\lambda - \alpha r_2 - r_1 + 2}{1-\alpha}$, $\alpha_2 = \dfrac{\lambda - \alpha r_1 - r_2 + 2}{1-\alpha}$, $\beta = n_1 r_1 - n_1 - n_2 = n_1 r_1 - n$ and $\gamma = \dfrac{n_2 r_2 - n_1 r_1 + 2(n_1 + n_2)}{2} = \dfrac{n_2 r_2 - n_1 r_1 + 2n}{2}$ e o resultado segue. □

Corolário III.2.10. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Sejam G um grafo bipartido semirregular com parâmetros inteiros positivos n_1, n_2, r_1 e r_2, tal que $n_1 \geq n_2$ e $\alpha \in [0, 1)$. Sejam $\lambda_1(A(G)), \ldots, \lambda_{n_2}(A(G))$ os n_2 maiores autovalores de $A(G)$. Então,*

$$P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) = (\lambda - \alpha(r_1 + r_2) + 2)^{\beta+1} (\lambda - (r_1 + r_2) + 2)(1-\alpha)^{\gamma-2} \alpha_1^{n_1 - n_2} \prod_{i=2}^{n_2} (\alpha_1 \alpha_2 - \lambda_i^2) \tag{III.20}$$

onde $\alpha_1 = \dfrac{\lambda - \alpha r_2 - r_1 + 2}{1-\alpha}$, $\alpha_2 = \dfrac{\lambda - \alpha r_1 - r_2 + 2}{1-\alpha}$, $\beta = n_1 r_1 - n$ *e* $\gamma = \dfrac{n_2 r_2 - n_1 r_1 + 2n}{2}$.

Demonstração. Seja G um grafo bipartido semirregular com parâmetros inteiros positivos n_1, n_2, r_1 e r_2 tais que $n_1 \geq n_2$. Suponha que os n_2 maiores autovalores de $A(G)$ sejam $\lambda_1(A(G)), \ldots, \lambda_{n_2}(A(G))$. Sabemos que $A(G) = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & B \\ B^T & \mathbf{0} \end{bmatrix}$ e, a partir do Teorema I.3.3, segue que $\lambda_1(A(G)) = \sqrt{r_1 r_2}$. Além disso, como o posto de B é no máximo n_2, $A(G)$ tem o autovalor 0 com multiplicidade pelo menos $n_1 - n_2$. Assim, a partir do Teorema III.2.9, temos que:

$$P_{A_\alpha(l(G))}(\lambda) = (1-\alpha)^\gamma(\lambda - \alpha(r_1+r_2)+2)^\beta \alpha_1^{n_1-n_2} \prod_{i=1}^{n_2}(\alpha_1\alpha_2 - \lambda_i^2) \tag{III.21}$$

onde $\alpha_1 = \dfrac{\lambda - \alpha r_2 - r_1 + 2}{1-\alpha}$, $\alpha_2 = \dfrac{\lambda - \alpha r_1 - r_2 + 2}{1-\alpha}$, $\beta = n_1 r_1 - n$ e $\gamma = \dfrac{n_2 r_2 - n_1 r_1 + 2n}{2}$.

Como $\alpha_1\alpha_2 - \lambda_1^2 = \alpha_1\alpha_2 - r_1 r_2$, temos

$$\alpha_1\alpha_2 - r_1 r_2 = \frac{(\lambda - (r_1+r_2)+2)(\lambda - \alpha(r_1+r_2)+2)}{(1-\alpha)^2}. \tag{III.22}$$

O resultado segue ao substituir (III.22) em (III.21). □

Os próximos teoremas apresentam os polinômios característicos da matriz A_α dos seguintes grafos: $S(G)$, $R(G)$, $\mathscr{C}(G)$ e $T(G)$, quando G é um grafo r-regular.

Teorema III.2.11. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Se G é r-regular e $\alpha \in [0,1)$, então*

$$P_{A_\alpha(S(G))}(\lambda) = (\lambda - 2\alpha)^{m-n}(1-\alpha)^n P_{A_\alpha(G)}\left(\frac{\lambda^2 - \alpha(r+2)\lambda + r(3\alpha - 1)}{(1-\alpha)}\right)$$

e

$$P_{A_\alpha(S(G))}(\lambda) = (\lambda - 2\alpha)^{m-n}(1-\alpha)^{2n} P_{A(G)}\left(\frac{\lambda^2 - \alpha(r+2)\lambda + r(\alpha^2 + 2\alpha - 1)}{(1-\alpha)^2}\right).$$

Demonstração. Sejam G um grafo r-regular com n vértices, m arestas e B sua matriz de incidência. Sabemos que $A_\alpha(S(G)) = \alpha D(S(G)) + (1-\alpha)A(S(G))$. Como $A(S(G)) = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & B^T \\ B & \mathbf{0} \end{bmatrix}$, temos

$$P_{A_\alpha(S(G))}(\lambda) = |\lambda I_{m+n} - A_\alpha(S(G))| = \begin{vmatrix} (\lambda - 2\alpha)I_m & -(1-\alpha)B^T \\ -(1-\alpha)B & (\lambda - \alpha r)I_n \end{vmatrix}.$$

Do Teorema I.1.2, segue que

$$P_{A_\alpha(S(G))}(\lambda) = (\lambda - 2\alpha)^m \left|(\lambda - \alpha r)I_n - \frac{(1-\alpha)^2}{\lambda - 2\alpha} BB^T\right|$$
$$= (\lambda - 2\alpha)^{m-n} \left|(\lambda - \alpha r)(\lambda - 2\alpha)I_n - (1-\alpha)^2 BB^T\right|. \quad \text{(III.23)}$$

Pelo Lema I.3.17 e pela Equação (III.23), temos

$$P_{A_\alpha(S(G))}(\lambda) = (\lambda - 2\alpha)^{m-n}|((\lambda - \alpha r)(\lambda - 2\alpha) - r(1-\alpha)^2)I_n - (1-\alpha)^2 A(G)|$$
$$= (\lambda - 2\alpha)^{m-n}(1-\alpha)^{2n} P_{A(G)}\left(\frac{\lambda^2 - \alpha(r+2)\lambda + r(\alpha^2 + 2\alpha - 1)}{(1-\alpha)^2}\right).$$

Além disso,

$$(1-\alpha)^2 BB^T = (1-\alpha)^2 r I_n + (1-\alpha)^2 A(G) = (1-\alpha)^2 r I_n + (1-\alpha)(A_\alpha(G) - \alpha r I_n)$$
$$= (1 - 3\alpha + 2\alpha^2) r I_n + (1-\alpha) A_\alpha(G). \quad \text{(III.24)}$$

De (III.23) e (III.24) resulta

$$P_{A_\alpha(S(G))}(\lambda) = (\lambda - 2\alpha)^{m-n}|(\lambda^2 - (2+r)\alpha\lambda + r(3\alpha - 1))I_n - (1-\alpha)A_\alpha(G)|$$
$$= (\lambda - 2\alpha)^{m-n}(1-\alpha)^n P_{A_\alpha(G)}\left(\frac{\lambda^2 - \alpha(r+2)\lambda + r(3\alpha-1)}{(1-\alpha)}\right)$$

e o resultado segue. □

Teorema III.2.12. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Se G é r-regular e $\alpha \in [0, 1)$, então*

$$P_{A_\alpha(R(G))}(\lambda) = (\lambda - 2\alpha)^{m-n}(\lambda - 3\alpha + 1)^n P_{A_\alpha(G)}\left(\frac{\lambda^2 - \alpha(r+2)\lambda + r(-3\alpha+1)}{\lambda - 3\alpha + 1}\right)$$

e

$$P_{A_\alpha(R(G))}(\lambda) = (\lambda - 2\alpha)^{m-n}((1-\alpha)(\lambda - 3\alpha + 1))^n P_{A(G)}\left(\frac{\lambda^2 - 2\alpha(r+1)\lambda + r(3\alpha^2 + 2\alpha - 1)}{(1-\alpha)(\lambda - 3\alpha + 1)}\right).$$

Demonstração. Sejam G um grafo r-regular com n vértices, m arestas e B sua matriz de incidência. Sabe-se que $A_\alpha(R(G)) = \alpha D(R(G)) + (1-\alpha)A(R(G))$. Como $A(R(G)) = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & B^T \\ B & A(G) \end{bmatrix}$ temos

$$P_{A_\alpha(R(G))}(\lambda) = |\lambda I_{n+m} - A_\alpha(R(G))| = \begin{vmatrix} (\lambda - 2\alpha)I_m & -(1-\alpha)B^T \\ -(1-\alpha)B & (\lambda - 2\alpha r)I_n - (1-\alpha)A(G) \end{vmatrix}.$$

Do Teorema I.1.2 segue que

$$P_{A_\alpha(R(G))}(\lambda) = (\lambda-2\alpha)^m \left|(\lambda-2\alpha r)I_n - (1-\alpha)A(G) - \frac{(1-\alpha)^2BB^T}{\lambda-2\alpha}\right|$$
$$= (\lambda-2\alpha)^{m-n}\left|(\lambda-2\alpha)((\lambda-2\alpha r)I_n-(1-\alpha)A(G)) - (1-\alpha)^2BB^T\right|. \quad \text{(III.25)}$$

Da equação (III.25) e do Lema I.3.17, temos

$$P_{A_\alpha(R(G))}(\lambda) = (\lambda-2\alpha)^{m-n}\left|(\lambda-2\alpha)((\lambda-2\alpha r)I_n-(1-\alpha)A(G)) - (1-\alpha)^2(A(G)+rI_n)\right|$$
$$= (\lambda-2\alpha)^{m-n}\left|(\lambda^2-2\alpha(r+1)\lambda+r(3\alpha^2+2\alpha-1))I_n - ((1-\alpha)(\lambda-3\alpha+1))A(G)\right|$$
$$= (\lambda-2\alpha)^{m-n}((1-\alpha)(\lambda-3\alpha+1))^n P_{A(G)}\left(\frac{\lambda^2-2\alpha(r+1)\lambda+r(3\alpha^2+2\alpha-1)}{(1-\alpha)(\lambda-3\alpha+1)}\right).$$

Assim, é possível reescrever $P_{A_\alpha(R(G))}(\lambda)$ usando $A_\alpha(G)$ da seguinte forma

$$P_{A_\alpha(R(G))}(\lambda) = |\lambda I_{n+m} - A_\alpha(R(G))| = \begin{vmatrix}(\lambda-2\alpha)I_m & -(1-\alpha)B^T \\ -(1-\alpha)B & (\lambda-\alpha r)I_n - A_\alpha(G)\end{vmatrix}.$$

Portanto, segue do Teorema I.1.2 que

$$P_{A_\alpha(R(G))}(\lambda) = (\lambda-2\alpha)^m \left|(\lambda-\alpha r)I_n - A_\alpha(G) - \frac{(1-\alpha)^2BB^T}{\lambda-2\alpha}\right|$$
$$= (\lambda-2\alpha)^{m-n}\left|(\lambda-2\alpha)((\lambda-\alpha r)I_n-A_\alpha(G)) - (1-\alpha)^2BB^T\right|. \quad \text{(III.26)}$$

Pelo Lema I.3.17 e pela Equação (III.26), temos

$$P_{A_\alpha(R(G))}(\lambda) = (\lambda-2\alpha)^{m-n}\left|(\lambda^2-(r+2)\alpha\lambda-3\alpha r+r)I_n - (\lambda-3\alpha+1)A_\alpha(G)\right|$$
$$= (\lambda-2\alpha)^{m-n}(\lambda-3\alpha+1)^n P_{A_\alpha(G)}\left(\frac{\lambda^2-\alpha(r+2)\lambda+r(-3\alpha+1)}{\lambda-3\alpha+1}\right)$$

e o resultado segue. □

Teorema III.2.13. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Se G é r-regular e $\alpha \in [0,1]$, então*

$$P_{A_\alpha(\mathscr{L}(G))}(\lambda) = (\lambda-\alpha r)^{n-m}(\lambda-(r+1)\alpha+1)^m P_{A_\alpha(l(G))}\left(\frac{\lambda^2-\alpha r\lambda-\alpha^2+2\alpha(r+1)-2}{\lambda-(r+1)\alpha+1}\right).$$

Demonstração. Sejam G um grafo r-regular com n vértices, m arestas e B sua matriz de incidência. Pela definição, temos que $A_\alpha(\mathscr{L}(G)) = \alpha D(\mathscr{L}(G)) + (1-\alpha)A(\mathscr{L}(G))$, onde $A(\mathscr{L}(G)) =$

$\begin{bmatrix} \mathbf{0} & B \\ B^T & A(l(G)) \end{bmatrix}$, então

$$P_{A_\alpha(\mathscr{C}(G))}(\lambda) = |\lambda I_{n+m} - A_\alpha(\mathscr{C}(G))| = \begin{vmatrix} (\lambda - r\alpha)I_n & -(1-\alpha)B \\ -(1-\alpha)B^T & \lambda I_m - A_\alpha(l(G)) \end{vmatrix}.$$

Pelo Teorema I.1.2 temos

$$\begin{aligned} P_{A_\alpha(\mathscr{C}(G))}(\lambda) &= (\lambda - \alpha r)^n \left| \lambda I_m - A_\alpha(l(G)) - \frac{(1-\alpha)^2 B^T B}{\lambda - \alpha r} \right| \\ &= (\lambda - \alpha r)^{n-m} |(\lambda - \alpha r)(\lambda I_m - A_\alpha(l(G))) - (1-\alpha)^2 B^T B|. \end{aligned} \tag{III.27}$$

Aplicando o Lema I.3.16, obtemos

$$\begin{aligned} (1-\alpha)^2 B^T B &= (1-\alpha)^2 A(l(G)) + 2(1-\alpha)^2 I_m = (1-\alpha)(A_\alpha(l(G)) - 2\alpha(r-1)I_m) + 2(1-\alpha)^2 I_m \\ &= (1-\alpha)A_\alpha(l(G)) + (\alpha^2 - 2\alpha(r+1) + 2)I_m. \end{aligned} \tag{III.28}$$

Pelas Equações (III.27) e (III.28),

$$\begin{aligned} P_{A_\alpha(\mathscr{C}(G))}(\lambda) &= (\lambda - \alpha r)^{n-m} \left| (\lambda^2 - \alpha r\lambda - \alpha^2 + 2\alpha(r+1) - 2)I_m - (\lambda - \alpha(r+1) + 1)A_\alpha(l(G)) \right| \\ &= (\lambda - \alpha r)^{n-m}(\lambda - (r+1)\alpha + 1)^m P_{A_\alpha(l(G))}\left(\frac{\lambda^2 - \alpha r\lambda - \alpha^2 + 2\alpha(r+1) - 2}{\lambda - (r+1)\alpha + 1} \right). \end{aligned}$$

□

Como consequência dos Teoremas III.2.13 e III.2.5, obtemos o Corolário III.2.14

Corolário III.2.14. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Se G é r-regular e $\alpha \in [0, 1)$, então*

$$\begin{aligned} P_{A_\alpha(\mathscr{C}(G))}(\lambda) = &\left(\frac{\lambda^2 + (2 - 3\alpha r)\lambda + \alpha^2(2r^2 - 1) - 2r\alpha(1-\alpha)}{(\lambda - \alpha r)(\lambda - \alpha(r+1) + 1)} \right)^{m-n} (\lambda - (r+1)\alpha + 1)^m \\ &\cdot P_{A_\alpha(G)}\left(\frac{\lambda^2 - (\alpha r + r - 2)\lambda - \alpha^2 + \alpha r^2 + \alpha r - r}{\lambda - \alpha(r+1) + 1} \right) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} P_{A_\alpha(\mathscr{C}(G))}(\lambda) = &\left(\frac{\lambda^2 + (2 - 3\alpha r)\lambda + \alpha^2(2r^2 - 1) - 2r\alpha(1-\alpha)}{(\lambda - \alpha r)(\lambda - \alpha(r+1) + 1)} \right)^{m-n} (\lambda - (r+1)\alpha + 1)^m \\ &\cdot (1-\alpha)^n P_{A(G)}\left(\frac{\lambda^2 - (2 - r(2\alpha+1))\lambda + r(\alpha+1)(r\alpha + \alpha - 1) - \alpha^2}{(1-\alpha)(\lambda - \alpha(r+1) + 1)} \right). \end{aligned}$$

Os próximos resultados relacionam os autovalores de $A_\alpha(T(G))$ com os autovalores de $A_\alpha(G)$ e

$A(G)$.

Teorema III.2.15. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Seja G um grafo r-regular ($r > 1$) com n vértices e m arestas. Se os autovalores de $A_\alpha(G)$ são $\lambda_1(A_\alpha(G)), \ldots, \lambda_n(A_\alpha(G))$ e $\alpha \in [0,1]$, então $A_\alpha(T(G))$ possui $m-n$ autovalores iguais a $2\alpha(r+1)-2$ e os outros $2n$ autovalores são*

$$\frac{1}{2}\left(2(\alpha+\lambda_i(A_\alpha(G))-1)+r(\alpha+1) \pm \sqrt{(\alpha-1)(\alpha(r+2)^2-r^2-4(1+\lambda_i(A_\alpha(G))))}\right)$$

para $i = 1, \ldots, n$.

Demonstração. Sejam G um grafo r-regular com n vértices, m arestas e B sua matriz de incidência. Como $A_\alpha(T(G)) = \alpha D(T(G)) + (1-\alpha)A(T(G))$ e $A(T(G)) = \begin{bmatrix} A(G) & B \\ B^T & A(l(G)) \end{bmatrix}$, temos

$$P_{A_\alpha(T(G))}(\lambda) = |\lambda I_{n+m} - A_\alpha(T(G))| = \begin{vmatrix} (\lambda - 2r\alpha)I_n - (1-\alpha)A(G) & -(1-\alpha)B \\ -(1-\alpha)B^T & (\lambda-2r\alpha)I_m - (1-\alpha)A_\alpha(l(G)) \end{vmatrix}.$$

Pelos Lemas I.3.16 e I.3.17 obtemos

$$\begin{aligned} P_{A_\alpha(T(G))}(\lambda) &= \begin{vmatrix} (\lambda-2r\alpha)I_n - (1-\alpha)(BB^T - rI_n) & -(1-\alpha)B \\ -(1-\alpha)B^T & (\lambda-2r\alpha)I_m - (1-\alpha)(B^TB - 2I_m) \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} (\lambda-3r\alpha+r)I_n - (1-\alpha)BB^T & -(1-\alpha)B \\ -(1-\alpha)B^T & (\lambda-2r\alpha+2-2\alpha)I_m - (1-\alpha)B^TB \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} (\lambda+r(1-3\alpha))I_n - (1-\alpha)BB^T & -(1-\alpha)B \\ -((1-\alpha)+\lambda+r(1-3\alpha))B^T + (1-\alpha)B^TBB^T & (\lambda-2\alpha(r+1)+2)I_m \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} F_{11} & F_{12} \\ F_{21} & F_{22} \end{vmatrix} \end{aligned}$$

onde $F_{11} = (\lambda + r(1-3\alpha))I_n - (1-\alpha)BB^T + \dfrac{(1-\alpha)B}{\lambda+2-2\alpha(r+1)}(-((1-\alpha)+\lambda+r(1-3\alpha))B^T + (1-\alpha)B^TBB^T)$, $F_{12} = \mathbf{0}$, $F_{21} = -((1-\alpha)+\lambda+r(1-3\alpha))B^T + (1-\alpha)B^TBB^T$ e $F_{22} =$

$(\lambda - 2\alpha(r+1)+2)I_m$. Então,

$$\begin{aligned}
P_{A_\alpha(T(G))}(\lambda) &= (\lambda+2-2\alpha(r+1))^m \Bigg| (\lambda + r(1-3\alpha))I_n - (1-\alpha)BB^T \\
&\quad + \frac{(1-\alpha)B}{\lambda+2-2\alpha(r+1)} \left(-((1-\alpha)+\lambda+r(1-3\alpha))B^T + (1-\alpha)B^TBB^T \right) \Bigg| \\
&= (\lambda+2-2\alpha(r+1))^{m-n} \Bigg| ((\lambda + r(1-3\alpha))I_n - (1-\alpha)BB^T)(\lambda+2-2\alpha(r+1)) \\
&\quad + (1-\alpha) \left(-((1-\alpha)+\lambda+r(1-3\alpha))BB^T + (1-\alpha)BB^TBB^T \right) \Bigg| \\
&= (\lambda+2-2\alpha(r+1))^{m-n} \Bigg| ((\lambda + r(1-3\alpha))I_n - (1-\alpha)BB^T)(\lambda+2-2\alpha(r+1)) \\
&\quad + (1-\alpha) \left(-((1-\alpha)+\lambda+r(1-3\alpha))I_n + (1-\alpha)BB^T \right) BB^T \Bigg|. \qquad \text{(III.29)}
\end{aligned}$$

Substituindo (III.15) em (III.29) temos

$$\begin{aligned}
P_{A_\alpha(T(G))}(\lambda) &= (\lambda+2-2\alpha(r+1))^{m-n} \Big| (\lambda+2-2\alpha(r+1))((\lambda-\alpha r)I_n - A_\alpha(G)) \\
&\quad + ((-\lambda+\alpha r-1+\alpha)I_n + A_\alpha(G))((r-2\alpha r)I_n + A_\alpha(G)) \Big| \\
&= (\lambda+2-2\alpha(r+1))^{m-n} \Big| A_\alpha(G)^2 + (\alpha(r+3) - 2\lambda + r - 3)A_\alpha(G) \\
&\quad + (\lambda^2 + (-\alpha(r+2) - r + 2)\lambda + \alpha r(r+1) - r)I_n \Big|.
\end{aligned}$$

Se $\sigma(A_\alpha(G)) = \{\lambda_1(A_\alpha(G)), \ldots, \lambda_n(A_\alpha(G))\}$, segue que

$$\begin{aligned}
P_{A_\alpha(T(G))}(\lambda) &= (\lambda+2-2\alpha(r+1))^{m-n} \prod_{i=1}^{n} \Big(\lambda_i(A_\alpha(G))^2 + (\alpha(r+3) - 2\lambda + r - 3)\lambda_i(A_\alpha(G)) \\
&\quad + \lambda^2 + (-\alpha(r+2) - r + 2)\lambda + \alpha r(r+1) - r \Big) \\
&= (\lambda+2-2\alpha(r+1))^{m-n} \prod_{i=1}^{n} \Big(\lambda^2 + (-\alpha(r+2) - 2\lambda_i(A_\alpha(G)) - r + 2)\lambda \\
&\quad + \lambda_i(A_\alpha(G))^2 + (\alpha(r+3) + r - 3)\lambda_i(A_\alpha(G)) + \alpha r(r+1) - r \Big)
\end{aligned}$$

cujas raízes são

$$\frac{1}{2}\left(2(\alpha + \lambda_i(A_\alpha(G)) - 1) + r(\alpha+1) \pm \sqrt{(\alpha-1)(\alpha(r+2)^2 - r^2 - 4(1+\lambda_i(A_\alpha(G))))} \right)$$

para $i = 1, \ldots, n$, obtendo assim o resultado. □

Teorema III.2.16. (Silva Junior *et al.* [2023b]) *Seja G um grafo r-regular ($r > 1$) com n vértices e m arestas. Se os autovalores de $A(G)$ são $\lambda_1(A(G)), \ldots, \lambda_n(A(G))$ e $\alpha \in [0, 1]$, então $A_\alpha(T(G))$ possui $m - n$ autovalores iguais a $2\alpha(r + 1) - 2$ e os outros $2n$ autovalores são:*

$$\frac{1}{2}\left(-2(\alpha-1)(\lambda_i(A(G))-1) + r(3\alpha+1) \pm (\alpha-1)\sqrt{4\lambda_i(A(G)) + r^2 + 4}\right)$$

para $i = 1, \ldots, n$.

Demonstração. Do Lema I.3.17 e da Equação (III.29) temos que

$$P_{A_\alpha(T(G))}(\lambda) = (\lambda + 2 - 2\alpha(r+1))^{m-n}\Big|(1-\alpha)^2 A(G)^2 + (1-\alpha)(-3\alpha(r+1) + 2\lambda - r + 3)A(G) + (\lambda^2 - (r(3\alpha+1) + 2(\alpha-1))\lambda + 2\alpha r^2(\alpha+1) + r(3\alpha^2 - 2\alpha - 1))I_n\Big|.$$

Se $\sigma(A(G)) = \{\lambda_1(A(G)), \ldots, \lambda_n(A(G))\}$, conclui-se que

$$\begin{aligned}
P_{A_\alpha(T(G))}(\lambda) &= (\lambda + 2 - 2\alpha(r+1))^{m-n} \prod_{i=1}^{n}\Big((1-\alpha)^2\lambda_i(A(G))^2 + (\alpha-1)(-3\alpha(r+1) + 2\lambda \\
&\quad - r + 3)\lambda_i(A(G)) + \lambda^2 - (r(3\alpha+1) + 2(\alpha-1))\lambda + 2\alpha r^2(\alpha+1) + r(3\alpha^2 - 2\alpha - 1)\Big) \\
&= (\lambda + 2 - 2\alpha(r+1))^{m-n} \prod_{i=1}^{n}\Big(\lambda^2 + ((\alpha-1)(2\lambda_i(A(G)) - 2) - r(3\alpha+1))\lambda \\
&\quad + (1-\alpha)^2\lambda_i(A(G))^2 - (\alpha-1)(3r\alpha + 3\alpha + r - 3)\lambda_i(A(G)) + 2\alpha r^2(\alpha+1) \\
&\quad + r(3\alpha^2 - 2\alpha - 1)\Big)
\end{aligned}$$

cujas raízes são,

$$\frac{1}{2}\left(-2(\alpha-1)(\lambda_i(A(G))-1) + r(3\alpha+1) \pm (\alpha-1)\sqrt{4\lambda_i(A(G)) + r^2 + 4}\right)$$

para $i = 1, \ldots, n$, obtendo assim o resultado. □

Capítulo IV Cotas para os autovalores da matriz A_α

Neste Capítulo apresentamos algumas cotas para o maior autovalor, para o segundo maior autovalor e para o menor autovalor associado à matriz A_α. Em cada seção subsequente, iniciamos com as cotas inferiores, para então avançarmos às superiores e quando possível, exibiremos os grafos extremais. Vale ressaltar que a maioria dos resultados apresentados neste capítulo estão publicados em Silva Junior *et al.* [2023a]. O resultados não referenciados já foram submetidos para a revista *Special Matrices*.

IV.1 Cotas para $\lambda_1(A_\alpha(G))$

A cota apresentada no Teorema IV.1.1 foi obtida através da aplicação direta do Lema I.1.4 para a matriz $A_\alpha(G)$. Esse lema, cuja demonstração pode ser vista em Kolotilina [1993], tem como base da demonstração o Teorema I.1.6. Além disso, ao substituírmos $\alpha = \frac{1}{2}$ nesta cota, obtemos a mesma cota para a matriz laplaciana sem sinal apresentada no Teorema 3.3 em Chen e Wang [2010].

Teorema IV.1.1. *Sejam G um grafo de ordem $n \geq 2$, Δ e δ, respectivamente, o grau máximo e o grau mínimo de G e $\alpha \in [0,1]$. Então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \frac{\alpha(\Delta+\delta) + \sqrt{\alpha^2(\Delta-\delta)^2 + 4(1-\alpha)^2\Delta}}{2} \tag{IV.1}$$

Se G é conexo, a igualdade ocorre se e somente se $G \cong K_{1,n-1}$.

Demonstração. Pelo Lema I.1.4 temos que

$$\begin{aligned}
\lambda_1(A_\alpha(G))) &\geq \max_{1\leq i\leq n}\left\{\frac{A_\alpha(G)_{ii}+\alpha\delta}{2} + \sqrt{\frac{(A_\alpha(G)_{ii}-\alpha\delta)^2}{4} + \sum_{i\neq j} A_\alpha(G)_{ij}A_\alpha(G)_{ji}}\right\} \\
&= \frac{\alpha\Delta+\alpha\delta}{2} + \sqrt{\frac{(\alpha\Delta-\alpha\delta)^2}{4} + \max_{1\leq i\leq n}\left\{\sum_{i\neq j} A_\alpha(G)_{ij}A_\alpha(G)_{ji}\right\}} \\
&= \frac{\alpha(\Delta+\delta) + \sqrt{\alpha^2(\Delta-\delta)^2 + 4\max_{1\leq i\leq n}\left\{\sum_{i\neq j} A_\alpha(G)_{ij}A_\alpha(G)_{ji}\right\}}}{2}
\end{aligned}$$

Como $A_\alpha(G) = \alpha D(G) + (1-\alpha)A(G)$, segue que

$$\sum_{i\neq j} A_\alpha(G)_{ij} A_\alpha(G)_{ji} = (1-\alpha)^2 \sum_{i\neq j} a_{ij}a_{ji}$$

e então

$$\lambda_1(A_\alpha(G))) \geq \frac{\alpha(\Delta+\delta) + \sqrt{\alpha^2(\Delta-\delta)^2 + 4(1-\alpha)^2\Delta}}{2}.$$

Se $G \cong K_{1,n-1}$ temos que $\Delta = n-1$ e $\delta = 1$, portanto a igualdade segue do Corolário II.2.3. Suponha agora que a igualdade em (IV.1) ocorra. Como G é conexo, $A_\alpha(G)$ é irredutível. Pela condição de igualdade presente no Lema I.1.4, existe apenas uma linha(coluna) de $A_\alpha(G)$ contendo mais do que uma entrada não nula fora da diagonal. Então, existe apenas um vértice v com $d(v) \geq 2$. Portanto, $G \cong K_{1,n-1}$. □

Observação IV.1.2. *Uma vez que a cota apresentada no Teorema IV.1.1 é baseada em cotas para o maior autovalor da matriz Laplacina sem sinal, vale destacar que ao substituir $\alpha = 0$ obtemos a cota para o maior autovalor da matriz de adjacência apresentada por Favaron et al. [1993],*

As cotas apresentadas nos Teorema IV.1.3 e IV.1.6 foram obtidas através de adaptações da cota para a matriz de adjacência presente no Teorema 3.2 em Pintu Bhunia e Paul [2019] e utilizam como base da demonstração o Teorema I.1.10.

Teorema IV.1.3. (Silva Junior *et al.* [2023a]) *Sejam $\alpha \in [0,1]$ e G um grafo com $m \neq 0$ arestas, $n \geq 3$ vértices, Δ e δ o maior e o menor grau dos vértices, respectivamente. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \left(\Delta^2 + \delta^2 + \frac{(2m-\Delta-\delta)^2}{n-2}\right)\frac{\alpha}{2m} + \frac{1-\alpha}{m}\sum_{v_iv_j\in E}\sqrt{d_id_j}. \tag{IV.2}$$

A igualdade ocorre se, e somente se, G é regular ou existe r com a propriedade de que $G \cong \bigcup_{k=1}^{l-1} G_k \cup K_1$ tal que G_k é r-regular para todo $1 \leq k \leq l-1$.

Demonstração. Pela Proposição II.1.1 sabemos que existe um autovetor $x \in \mathbb{R}^n$ associado a $\lambda_1(A_\alpha(G))$ que satisfaz $\lambda_1(A_\alpha(G)) = \max_{x\in\mathbb{R}^n} \frac{x^T A_\alpha(G) x}{x^T x}$. Portanto, para todo $y \neq kx, \quad k \in \mathbb{R}$, temos

$$\begin{aligned}\lambda_1(A_\alpha(G)) &\geq \frac{y^T A_\alpha(G) y}{y^T y} = \frac{y^T(\alpha D(G) + (1-\alpha)A(G))y}{y^T y} \\ &= \frac{\alpha y^T D(G) y + (1-\alpha) y^T A(G) y}{y^T y}.\end{aligned}$$

Tomando $y = (\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2}, \ldots, \sqrt{d_n})$, temos que

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \frac{\alpha\sum_{i=1}^{n} d_i^2 + (1-\alpha)y^T A(G))y}{2m} = \frac{\alpha\sum_{i=1}^{n} d_i^2}{2m} + \frac{(1-\alpha)\sum_{v_i\sim v_j} 2\sqrt{d_i d_j}}{2m}$$
$$= \frac{\alpha\sum_{i=1}^{n} d_i^2}{2m} + \frac{(1-\alpha)}{m}\sum_{v_iv_j\in E}\sqrt{d_i d_j}.$$

Aplicando o Teorema I.2.1, temos

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \frac{\alpha}{2m}\left[\Delta^2 + \delta^2 + \frac{(2m-\Delta-\delta)^2}{n-2}\right] + \frac{(1-\alpha)}{m}\sum_{v_iv_j\in E}\sqrt{d_i d_j}. \tag{IV.3}$$

Para o estudo dos grafos extremais, comecemos por supor que G é um grafo r-regular. Logo, $\Delta = \delta = r$ e $m = \frac{nr}{2}$. Além disso, pelo Lema II.1.2 temos que $\lambda_1(A_\alpha(G)) = r$. Então,

$$\frac{\alpha}{2m}\left[\Delta^2 + \delta^2 + \frac{(2m-\Delta-\delta)^2}{n-2}\right] + \frac{(1-\alpha)}{m}\sum_{v_iv_j\in E}\sqrt{d_i d_j} =$$
$$\frac{\alpha}{nr}\left[r^2 + r^2 + \frac{(nr-r-r)^2}{n-2}\right] + \frac{(1-\alpha)}{m}mr = \frac{\alpha}{nr}\left[2r^2 + \frac{r^2(n-2)^2}{n-2}\right] + (1-\alpha)r =$$
$$\frac{\alpha}{nr}r^2\left[2+n-2\right] + (1-\alpha)r = \alpha r + (1-\alpha)r = r.$$

Suponha, agora, que $G \cong \bigcup_{k=1}^{l-1} G_k \cup K_1$ tal que G_k é r-regular. Temos $\sum_{k=1}^{l-1}|V(G_k)|+1 = n$, $\Delta = r$, $\delta = 0$, $m = \frac{(n-1)r}{2}$ e novamente pelo Lema II.1.2 temos que $\lambda_1(A_\alpha(G)) = r$. Portanto,

$$\frac{\alpha}{2m}\left[\Delta^2 + \delta^2 + \frac{(2m-\Delta-\delta)^2}{n-2}\right] + \frac{(1-\alpha)}{m}\sum_{v_iv_j\in E}\sqrt{d_i d_j} =$$
$$\frac{\alpha}{(n-1)r}\left[r^2 + \frac{((n-1)r-r)^2}{n-2}\right] + \frac{(1-\alpha)}{m}mr =$$
$$\frac{\alpha}{(n-1)r}\left[r^2 + \frac{r^2(n-2)^2}{n-2}\right] + (1-\alpha)r = \frac{\alpha}{(n-1)r}r^2(n-1) + (1-\alpha)r =$$
$$\alpha r + (1-\alpha)r = r.$$

Vamos agora provar que os grafos definidos anteriormente são os únicos que verificam a igualdade. Para isso, consideremos que exista um grafo G que satisfaz

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) = \left(\Delta^2 + \delta^2 + \frac{(2m-\Delta-\delta)^2}{n-2}\right)\frac{\alpha}{2m} + \frac{1-\alpha}{m}\sum_{v_iv_j\in E}\sqrt{d_i d_j}.$$

Isso implica que $x = (\sqrt{d_1}, \ldots, \sqrt{d_n})$ é um autovetor de $A_\alpha(G)$ associado a $\lambda_1(A_\alpha(G))$, isto é $A_\alpha(G)x = \lambda_1(A_\alpha(G))x$. Inicialmente, suponhamos que G é conexo. Logo, pela definição de autovetor segue que

$$\alpha d_i + (1-\alpha)\frac{\sum\limits_{v_iv_j \in E} \sqrt{d_i d_j}}{d_i} = \lambda_1(A_\alpha(G)),$$

para todo $i = 1, \ldots n$. Portanto, para i e s arbitrários, tais que $i \neq s$, temos

$$\alpha d_i + (1-\alpha)\frac{\sum\limits_{v_iv_j \in E} \sqrt{d_i d_j}}{d_i} = \alpha d_s + (1-\alpha)\frac{\sum\limits_{v_sv_j \in E} \sqrt{d_s d_j}}{d_s}, \tag{IV.4}$$

sendo válida a igualdade (IV.4) para todo $\alpha \in [0,1]$.

Considere a função afim $f_{is} : [0,1] \longrightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$f_{is}(\alpha) = \left(d_i - d_s + \frac{\sum\limits_{v_sv_j \in E} \sqrt{d_s d_j}}{d_s} - \frac{\sum\limits_{v_iv_j \in E} \sqrt{d_i d_j}}{d_i} \right) \alpha - \frac{\sum\limits_{v_sv_j \in E} \sqrt{d_s d_j}}{d_s} + \frac{\sum\limits_{v_iv_j \in E} \sqrt{d_i d_j}}{d_i}.$$

Como a Equação (IV.4) ocorre para todo $\alpha \in [0,1]$, temos que a função $f_{is} \equiv 0$. Portanto,

$$\frac{\sum\limits_{v_sv_j \in E} \sqrt{d_s d_j}}{d_s} - \frac{\sum\limits_{v_iv_j \in E} \sqrt{d_i d_j}}{d_i} = 0$$

e

$$d_i - d_s + \frac{\sum\limits_{v_sv_j \in E} \sqrt{d_s d_j}}{d_s} - \frac{\sum\limits_{v_iv_j \in E} \sqrt{d_i d_j}}{d_i} = 0,$$

consequentemete temos que $d_i = d_s$.

Como i e s são arbitrários e tomando $d_i = d_s$ em (IV.4) temos que a identidade é verificada para todo $\alpha \in [0,1]$ o que implica que G é regular.

Agora, suponhamos que G é desconexo, ou seja, $G \cong \bigcup\limits_{k=1}^{l} G_k$ tal que $\sum\limits_{k=1}^{l} |V(G_k)| = n$. Assim, para cada componente temos

$$\alpha d_i + (1-\alpha)\frac{\sum\limits_{v_iv_j \in E} \sqrt{d_i d_j}}{d_i} = \lambda_1(A_\alpha(G_k)),$$

para todo $i = 1, \ldots, |V(G_k)|$. Portanto, para i e s arbitrários, tais que $i \neq s$ temos

$$\alpha d_i + (1-\alpha)\frac{\sum\limits_{v_iv_j \in E}\sqrt{d_i d_j}}{d_i} = \alpha d_s + (1-\alpha)\frac{\sum\limits_{v_sv_j \in E}\sqrt{d_s d_j}}{d_s}.$$

Utilizando uma justificativa semelhante à anterior, temos que $d_i = d_s$ e então G_k, $\forall k$, é regular. Pelo Teorema I.2.1 temos que $Z_1(G) = \Delta^2 + \delta^2 + \dfrac{(2m-\Delta-\delta)^2}{n-2}$ ocorre se, e somente se, $d_2 = \cdots = d_{n-1}$. Então, $G \cong \bigcup\limits_{k=1}^{l} G_k$ ou $G \cong \bigcup\limits_{k=1}^{l-1} G_k \cup K_1$ tal que existe r com a propriedade de que G_k é r-regular. □

Observação IV.1.4. *Ao substituir $\alpha = 0$ na desigualdade* (IV.2) *obtemos a mesma cota para matriz de adjacência presente em Pintu Bhunia e Paul [2019].*

Corolário IV.1.5. *Sejam $\alpha \in [0,1]$ e G um grafo com $m \neq 0$ arestas, $n \geq 3$ vértices, Δ e δ o maior e o menor grau dos vértices, respectivamente. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \left(\Delta^2 + \delta^2 + \frac{(2m-\Delta-\delta)^2}{n-2}\right)\frac{\alpha}{2m} + (1-\alpha)\overline{d}. \tag{IV.5}$$

A igualdade ocorre se, e somente se, G é regular.

Demonstração. O resultado segue diretamente do Teorema IV.1.3 e tomando $a = \dfrac{1}{2}$ no Teorema I.2.4. □

Teorema IV.1.6. *Sejam $\alpha \in [0,1]$ e G um grafo com $m \neq 0$ arestas, $n \geq 3$ vértices, Δ e δ o grau máximo e mínimo, respectivamente. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \alpha\frac{(\Delta^2+\delta^2)(n-2) + (2m-\Delta-\delta)^2}{2m(n-2)} + (1-\alpha)\frac{8m^3}{n^2(2\delta m + (n-1)(2m-n\delta))}. \tag{IV.6}$$

A igualdade ocorre se G é um grafo regular.

Demonstração. Sabemos pela Proposição II.1.1 que existe um autovetor $x \in \mathbb{R}^n$ associado ao autovalor $\lambda_1(A_\alpha(G))$ que satisfaz $\lambda_1(A_\alpha(G)) = \max\limits_{x \in \mathbb{R}^n} \dfrac{x^T A_\alpha(G) x}{x^T x}$. Portanto para todo $y \neq kx$, onde $k \in \mathbb{R}$, temos

$$\begin{aligned}\lambda_1(A_\alpha(G)) &\geq \frac{y^T A_\alpha(G) y}{y^T y} = \frac{y^T(\alpha D(G) + (1-\alpha)A(G))y}{y^T y} \\ &= \frac{\alpha y^T D(G) y + (1-\alpha) y^T A(G) y}{y^T y}.\end{aligned}$$

Tomando $y = (d(v_1), d(v_2), \ldots, d(v_n)) = (d_1, d_2, \ldots, d_n)$, temos

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \frac{\alpha\sum_{i=1}^{n} d_i^3 + (1-\alpha)y^T A(G))y}{\sum_{i=1}^{n} d_i^2} = \frac{\alpha\sum_{i=1}^{n} d_i^3}{\sum_{i=1}^{n} d_i^2} + \frac{(1-\alpha)2\sum_{v_i\sim v_j} d_i d_j}{\sum_{i=1}^{n} d_i^2}$$
$$= \alpha\frac{\sum_{i=1}^{n} d_i^3}{\sum_{i=1}^{n} d_i^2} + (1-\alpha)\frac{2\sum_{v_i\sim v_j} d_i d_j}{\sum_{i=1}^{n} d_i^2} = \alpha\frac{F(G)}{Z_1(G)} + (1-\alpha)\frac{2R_1(G)}{Z_1(G)}.$$

Segue da Proposição I.2.3 e do Teorema I.2.4 que

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \alpha\frac{\frac{Z_1^2(G)}{2m}}{Z_1(G)} + (1-\alpha)\frac{8\frac{m^3}{n^2}}{Z_1(G)} = \alpha\frac{Z_1(G)}{2m} + (1-\alpha)\frac{8m^3}{n^2 Z_1(G)}.$$

Usando os Lemas I.2.1 e I.2.2 e após alguma manipulação algébrica o resultado segue.

Para provar a igualdade, suponha que G seja um grafo r-regular. Logo $\Delta = \delta = r$ e $m = \frac{nr}{2}$. Pelo Lema II.1.2 temos que $\lambda_1(A_\alpha(G)) = r$. Então,

$$\alpha\frac{n((\Delta+\delta)^2 - 4m(\Delta+\delta-m) + (\Delta^2+\delta^2)(n-2))}{2m} + (1-\alpha)\frac{8m^3}{n^2(2\delta m - (n-1)(2m-n\delta))} =$$
$$\frac{n((r+r)^2 - 4\frac{nr}{2}\left(r+r-\frac{nr}{2}\right) + (r^2+r^2)(n-2))}{2\frac{nr}{2}} + (1-\alpha)\frac{8\left(\frac{nr}{2}\right)^3}{n^2\left(2r\frac{nr}{2} - (n-1)\left(2\frac{nr}{2} - nr\right)\right)} =$$
$$\alpha r - \frac{2r\alpha}{n} + \frac{2r^2\alpha}{nr} - \alpha r + r = r$$

□

O Teorema IV.1.7 apresenta outra cota inferior de $\lambda_1(A_\alpha(G))$. Esta cota é obtida de forma semelhante à cota inferior para $\lambda_1(A(G))$, presente no Teorema 1 em Kumar [2010], e utiliza submatrizes principais da matriz $A_\alpha(G)$ para obter uma cota para o seu maior autovalor. Denotemos por $(\mathbf{A}_\alpha)_i$, $\mathbf{A}_i$ e $\mathbf{D}_i$ o i-ésimo vetor coluna das matrizes $A_\alpha(G)$, $A(G)$ e $D(G)$, respetivamente. Além disso, definimos $c_{ij} = |N_{v_i} \cap N_{v_j}|$.

Teorema IV.1.7. (Silva Junior *et al.* [2023a]) *Seja G um grafo com $n \geq 2$ vértices e $\alpha \in [0,1]$. Então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \max\left\{\max_{j<i}\sqrt{\frac{\alpha^2(d_i^2+d_j^2) + (1-\alpha)^2(d_i+d_j) + \sqrt{C_1}}{2}}, \max_{j<i}\sqrt{\frac{\alpha^2(d_i^2+d_j^2) + (1-\alpha)^2(d_i+d_j) + \sqrt{C_2}}{2}}\right\}, \tag{IV.7}$$

onde $C_1 = \Theta(\alpha^4)$ e $C_2 = \Theta(\alpha^4)$.

Demonstração. Sabemos que $\lambda_1(M)$, para toda a matriz simétrica M, é maior ou igual ao maior autovalor de qualquer submatriz principal de M. Além disso, é fácil ver que qualquer submatriz principal de ordem dois de $A_\alpha^2(G)$ é da forma

$$B = \begin{bmatrix} (\mathbf{A}_\alpha^T)_i(\mathbf{A}_\alpha)_i & (\mathbf{A}_\alpha^T)_i(\mathbf{A}_\alpha)_j \\ (\mathbf{A}_\alpha^T)_j(\mathbf{A}_\alpha)_i & (\mathbf{A}_\alpha^T)_j(\mathbf{A}_\alpha)_j \end{bmatrix}.$$

Então,

$$\begin{bmatrix} (\mathbf{A}_\alpha^T)_i(\mathbf{A}_\alpha)_i & (\mathbf{A}_\alpha^T)_i(\mathbf{A}_\alpha)_j \\ (\mathbf{A}_\alpha^T)_j(\mathbf{A}_\alpha)_i & (\mathbf{A}_\alpha^T)_j(\mathbf{A}_\alpha)_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\alpha\mathbf{D}_i^T + (1-\alpha)\mathbf{A}_i^T)(\alpha\mathbf{D}_i + (1-\alpha)\mathbf{A}_i) & (\alpha\mathbf{D}_i^T + (1-\alpha)\mathbf{A}_i^T)(\alpha\mathbf{D}_j + (1-\alpha)\mathbf{A}_j) \\ (\alpha\mathbf{D}_j^T + (1-\alpha)\mathbf{A}_j^T)(\alpha\mathbf{D}_i + (1-\alpha)\mathbf{A}_i) & (\alpha\mathbf{D}_j^T + (1-\alpha)\mathbf{A}_j^T)(\alpha\mathbf{D}_j + (1-\alpha)\mathbf{A}_j) \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \alpha^2\mathbf{D}_i^T\mathbf{D}_i + \alpha(1-\alpha)(\mathbf{D}_i^T\mathbf{A}_i + \mathbf{A}_i^T\mathbf{D}_i) + (1-\alpha)^2\mathbf{A}_i^T\mathbf{A}_i & \alpha^2\mathbf{D}_i^T\mathbf{D}_j + \alpha(1-\alpha)(\mathbf{D}_i^T\mathbf{A}_j + \mathbf{A}_i^T\mathbf{D}_j) + (1-\alpha)^2\mathbf{A}_i^T\mathbf{A}_j \\ \alpha^2\mathbf{D}_j^T\mathbf{D}_i + \alpha(1-\alpha)(\mathbf{D}_j^T\mathbf{A}_i + \mathbf{A}_j^T\mathbf{D}_i) + (1-\alpha)^2\mathbf{A}_j^T\mathbf{A}_i & \alpha^2\mathbf{D}_j^T\mathbf{D}_j + \alpha(1-\alpha)(\mathbf{D}_j^T\mathbf{A}_j + \mathbf{A}_j^T\mathbf{D}_j) + (1-\alpha)^2\mathbf{A}_j^T\mathbf{A}_j \end{bmatrix} \quad \text{(IV.8)}$$

Assim, temos duas situações a considerar. Primeiro, suponhamos que $v_i \sim v_j$. Logo, de (IV.8) temos que

$$\begin{bmatrix} (\mathbf{A}_\alpha^T)_i(\mathbf{A}_\alpha)_i & (\mathbf{A}_\alpha^T)_i(\mathbf{A}_\alpha)_j \\ (\mathbf{A}_\alpha^T)_j(\mathbf{A}_\alpha)_i & (\mathbf{A}_\alpha^T)_j(\mathbf{A}_\alpha)_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha^2 d_i^2 + (1-\alpha)^2 d_i & \alpha(1-\alpha)(d_i+d_j) + (1-\alpha)^2 c_{ij} \\ \alpha(1-\alpha)(d_i+d_j) + (1-\alpha)^2 c_{ij} & \alpha^2 d_j^2 + (1-\alpha)^2 d_j \end{bmatrix}.$$

Como $\lambda_1(A_\alpha^2(G)) \geq \lambda_1(B)$ segue-se

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\alpha^2(d_i^2+d_j^2) + (1-\alpha)^2(d_i+d_j) + \sqrt{C_1}}$$

onde $C_1 = \alpha^4(d_i^2-d_j^2)^2 + 4c_{ij}(\alpha-1)^3(c_{ij}(\alpha-1) - 2\alpha(d_i+d_j)) + (d_i-d_j)^2(\alpha^4 - 4\alpha^3 + 2\alpha^2 + 1) + 2\alpha^2(\alpha-1)^2(d_i+d_j)(d_i^2 - 2d_id_j + 2d_i + d_j^2 + 2d_j)$

Agora, suponhamos que $v_i \nsim v_j$. Assim, segue de (IV.8) que

$$B = \begin{bmatrix} (\mathbf{A}_\alpha^T)_i(\mathbf{A}_\alpha)_i & (\mathbf{A}_\alpha^T)_i(\mathbf{A}_\alpha)_j \\ (\mathbf{A}_\alpha^T)_j(\mathbf{A}_\alpha)_i & (\mathbf{A}_\alpha^T)_j(\mathbf{A}_\alpha)_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha^2 d_i^2 + (1-\alpha)^2 d_i & (1-\alpha)^2 c_{ij} \\ (1-\alpha)^2 c_{ij} & \alpha^2 d_j^2 + (1-\alpha)^2 d_j \end{bmatrix}.$$

Então,

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \geq \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\alpha^2(d_i^2+d_j^2) + (1-\alpha)^2(d_i+d_j) + \sqrt{C_2}}$$

onde $C_2 = \alpha^4(d_i^2-d_j^2)^2 + 4c_{ij}^2(\alpha-1)^4 + (d_i-d_j)^2(1-4\alpha) + \alpha^2(d_i-d_j)^2(\alpha^2(2d_i+2d_j+1) - 4\alpha(d_i + d_j+1) + 2(d_i+d_j) + 6)$, obtendo assim a desigualdade desejada. □

A cota apresentada no Teorema IV.1.8 foi alcançada pela adaptação das cotas superiores de matriz de adjacência presentes em Stanley [1987] e Yuan [1988]. Para a demonstração desta cota, utilizamos a definição de autovalor e autovetor junto com a desigualdade de Cauchy-Schwarz.

Teorema IV.1.8. (Silva Junior *et al.* [2023a]) *Se G é um grafo conexo com n vértices, m arestas, grau máximo Δ, grau mínimo δ e $\alpha \in [0,1]$, então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \sqrt{\alpha^2(2mn - n(n-1)\delta + 2m(\delta-1)) + 2m(1-\alpha)^2 + \delta(\alpha^2\delta + (1-\alpha)^2)(\Delta - n + 1)}. \tag{IV.9}$$

Demonstração. Denote por $(A_\alpha)_i$ a i-ésima linha da matriz $A_\alpha(G)$. Da Proposição II.1.3, seja $X = (x_1, \ldots, x_n)$ o autovetor positivo unitário associado a $\lambda_1(A_\alpha(G))$. Denote X^i o vetor obtido de X substituindo x_j por 0 se v_j não é adjacente a v_i. Como $A_\alpha(G)X = \lambda_1(A_\alpha(G))X$, temos que $\lambda_1(A_\alpha(G))x_i = (A_\alpha)_i X = (A_\alpha)_i X^i$.

Da desigualdade de Cauchy-Schwarz, temos

$$\lambda_1^2(A_\alpha(G))x_i^2 = |(A_\alpha)_i X^i|^2 \leq |(A_\alpha)_i|^2 |X^i|^2 = \left(d_i^2\alpha^2 + (1-\alpha)^2 d_i\right)\left(1 - \sum_{v_i \nsim v_j} x_j^2\right). \tag{IV.10}$$

Tomando a Desigualdade (IV.10) para todo i, temos

$$\lambda_1^2(A_\alpha(G)) \leq \alpha^2 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (1-\alpha)^2 \sum_{i=1}^n d_i - \sum_{i=1}^n \left(d_i^2\alpha^2 + (1-\alpha)^2 d_i\right)\left(\sum_{v_i \nsim v_j} x_j^2\right). \tag{IV.11}$$

Notemos que

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^n \left(d_i^2\alpha^2 + (1-\alpha)^2 d_i\right)\left(\sum_{v_i \nsim v_j} x_j^2\right) &= \alpha^2 \sum_{i=1}^n d_i^2 \left(\sum_{v_j \nsim v_i} x_j^2\right) + (1-\alpha)^2 \sum_{i=1}^n d_i \left(\sum_{v_j \nsim v_i} x_j^2\right) \\
&\geq \alpha^2\delta^2 \sum_{i=1}^n \left(\sum_{v_j \nsim v_i} x_j^2\right) + (1-\alpha)^2\delta \sum_{i=1}^n \left(\sum_{v_j \nsim v_i} x_j^2\right) \\
&= \alpha^2\delta^2 \sum_{i=1}^n (n - d_i - 1)x_i^2 + (1-\alpha)^2\delta \sum_{i=1}^n (n - d_i - 1)x_i^2 \\
&= \alpha^2\delta^2(n-1) + (1-\alpha)^2\delta(n-1) - \alpha^2\delta^2 \sum_{i=1}^n d_i x_i^2 - (1-\alpha)^2\delta \sum_{i=1}^n d_i x_i^2.
\end{aligned} \tag{IV.12}$$

Assim, substituindo (IV.12) em (IV.11), temos

$$\begin{aligned}
\lambda_1^2(A_\alpha(G)) &\leq \alpha^2 \sum_{i=1}^n d_i^2 + (1-\alpha)^2 \sum_{i=1}^n d_i - \delta(n-1)(\alpha^2\delta + (1-\alpha)^2) + \alpha^2\delta^2 \sum_{i=1}^n d_i x_i^2 + (1-\alpha)^2\delta \sum_{i=1}^n d_i x_i^2 \\
&\leq \alpha^2 \sum_{i=1}^n d_i^2 + 2m(1-\alpha)^2 + \delta(\alpha^2\delta + (1-\alpha)^2)(\Delta - n + 1).
\end{aligned}$$

Pelo Teorema I.2.2 temos

$$\lambda_1^2(A_\alpha(G)) \leq \alpha^2(2mn - n(n-1)\delta + 2m(\delta-1)) + 2m(1-\alpha)^2 + \delta(\alpha^2\delta + (1-\alpha)^2)(\Delta - n + 1).$$

Logo,

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \sqrt{\alpha^2(2mn - n(n-1)\delta + 2m(\delta-1)) + 2m(1-\alpha)^2 + \delta(\alpha^2\delta + (1-\alpha)^2)(\Delta - n + 1)} \quad \text{(IV.13)}$$

obtendo assim o resultado. □

A cota superior obtida no Teorema IV.1.9 é baseada na cota superior para matriz de adjacência presente no Teorema 2.3 em Hong *et al.* [2001] e no Teorema 4.1 em Nikiforov [2002]. A demonstração desta cota utiliza basicamente expressões que envolvem a soma das linhas de uma matriz e os Lemas I.3.6 e I.3.7

Teorema IV.1.9. (Silva Junior *et al.* [2023a]) *Sejam G um grafo com n vértices, $m \neq 0$ arestas, grau máximo Δ, grau mínimo δ e $\alpha \in [0,1]$. Então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \frac{1}{2}\left(\delta - 1 + \sqrt{(\delta-1)^2 + 4(\alpha\Delta^2 - \alpha(\delta-1)\delta + (1-\alpha)(2m - \delta(n-1))}\right). \quad \text{(IV.14)}$$

A igualdade ocorre se, e somente se, G é regular.

Demonstração. Seja M uma matriz qualquer associada a um grafo G e $S_v(M)$ a soma da linha de M correspondente ao vértice v. É fácil ver que

$$S_v(A_\alpha^2(G) - (\delta-1)A_\alpha(G)) = S_v(A_\alpha^2(G)) - (\delta-1)S_v(A_\alpha(G)).$$

De Nikiforov [2017], temos

$$S_v(A_\alpha^2(G)) = \alpha S_v(D^2(G)) + (1-\alpha)S_v(A^2(G))$$

e portanto,

$$\begin{aligned} S_v(A_\alpha^2(G) - (\delta-1)A_\alpha(G)) &= \alpha S_v(D^2(G)) + (1-\alpha)S_v(A^2(G)) - \alpha(\delta-1)S_v(D(G)) - (1-\alpha)(\delta-1)S_v(A(G)) \\ &= \alpha S_v(D^2(G)) - \alpha(\delta-1)S_v(D(G)) + (1-\alpha)S_v(A^2(G) - (\delta-1)A(G)). \end{aligned}$$

Pelo Lema I.3.7, temos

$$S_v(A_\alpha^2(G) - (\delta-1)A_\alpha(G)) \leq \alpha S_v(D^2(G)) - \alpha(\delta-1)S_v(D(G)) + (1-\alpha)(2m - \delta(n-1)). \quad \text{(IV.15)}$$

A Desigualdade (IV.15), é verificada para todos os vértices $v \in V(G)$ e para $\alpha \in [0,1]$. Assim,

segue do Lema I.3.6 que

$$\begin{aligned}\lambda_1^2(A_\alpha(G)) - (\delta-1)\lambda_1(A_\alpha(G)) &\leq \alpha d^2(v) - \alpha(\delta-1)d(v) + (1-\alpha)(2m - \delta(n-1)) \\ &\leq \alpha\Delta^2 - \alpha(\delta-1)\delta + (1-\alpha)(2m-\delta(n-1)) \qquad \text{(IV.16)}\end{aligned}$$

Resolvendo a inequação quadrática acima, obtemos

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \frac{1}{2}\left(\delta - 1 + \sqrt{(\delta-1)^2 + 4(\alpha\Delta^2 - \alpha(\delta-1)\delta + (1-\alpha)(2m-\delta(n-1))}\right).$$

Agora, suponha que G seja um grafo r-regular. Pelo Lema II.1.2 temos que $\lambda_1(A_\alpha(G)) = r$ e como $\delta = \Delta = r$ e $m = \dfrac{nr}{2}$ segue que $\dfrac{1}{2}\left(\delta - 1 + \sqrt{(\delta-1)^2 + 4(\alpha\Delta^2 - \alpha(\delta-1)\delta + (1-\alpha)(2m-\delta(n-1))}\right) = r = \lambda_1(A_\alpha(G))$. Agora, suponhamos que a igualdade se verifica. Então, todas as desigualdades acima têm de ser igualdades. Pelo Lema I.3.7 temos que

$$\sum_{u\sim v, u\neq v} d(u) = (n - d(v) - 1)\delta,$$

para todo $v \in V(G)$. Logo, ou $d(v) = n-1$ ou $d(u) = \delta$, para todo $u \in V(G)$ e $u \nsim v$, o que implica que ou G é um grafo regular ou G é um grafo birregular em que cada vértice tem grau δ ou $n-1$. Como a segunda não pode ocorrer devido à Desigualdade (IV.16) obtemos o resultado. □

Observação IV.1.10. *Do Teorema IV.1.9 temos que a igualdade em (IV.14) ocorre se e somente se G é regular. Tomando este grafo extremal e o aplicando na Desigualdade (IV.9), obtemos*

$$\begin{aligned}&\alpha^2(2mn - n(n-1)\delta + 2m(\delta-1)) + 2m(1-\alpha)^2 + \delta(\alpha^2\delta + (1-\alpha)^2)(\Delta - n + 1) = \\ &\alpha^2(r^3 + 2r^2 + r) + (1-2\alpha)(r^2 + r) \geq r^2.\end{aligned}$$

Dessa forma, temos que para os grafos regulares a cota superior obtida em (IV.9) é maior, e consequentemente pior, do que a cota superior obtida em (IV.14).

A cota superior obtida no Teorema IV.1.11 é baseada na cota superior para matriz de adjacência presente no Teorema 2 em Cao [1998]. A demonstração desta cota utiliza expressões que envolvem a soma das linhas de uma matriz e o Lema I.3.6.

Teorema IV.1.11. *Sejam G um grafo com n vértices, $m \neq 0$ arestas, Δ seu grau máximo, δ seu grau mínimo e $\alpha \in [0,1]$. Então,*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \sqrt{\alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(\Delta(\delta-1) - \delta(n-1) + 2m)}. \qquad \text{(IV.17)}$$

Além disso, a igualdade ocorre se e somente se G é um grafo regular.

Demonstração. Seja $S_v(M)$ a soma da linha de M correspondente a cada vértice v. Como $A_\alpha(G) = \alpha D(G) + (1-\alpha)A(G)$, temos que $S_v(A_\alpha(G)) = d(v)$ e $S_v(A(G)D(G)) = S_v(A^2(G)) = \sum_{u\sim v} d(u) = 2m - d(v) - \sum_{\substack{u\nsim v \\ u\neq v}} d(u)$. Então,

$$\begin{aligned}
S_v(A_\alpha^2(G)) &= S_v\left((\alpha D(G) + (1-\alpha)A(G))^2\right) = S_v\left(\alpha D(G)A_\alpha(G) + \alpha(1-\alpha)A(G)D(G) + (1-\alpha)^2A^2(G)\right) \\
&= \alpha S_v\left(D(G)A_\alpha(G)\right) + \alpha(1-\alpha)S_v\left(A(G)D(G)\right) + (1-\alpha)^2 S_v\left(A^2(G)\right) \\
&= \alpha d^2(v) + \alpha(1-\alpha)\left(2m - d(v) - \sum_{\substack{u\nsim v \\ u\neq v}} d(u)\right) + (1-\alpha)^2\left(2m - d(v) - \sum_{\substack{u\nsim v \\ u\neq v}} d(u)\right) \\
&= \alpha d^2(v) + (1-\alpha)\left(2m - d(v) - \sum_{\substack{u\nsim v \\ u\neq v}} d(u)\right) \\
&\leq \alpha d^2(v) + (1-\alpha)(2m - d(v) - (n - d(v) - 1)\delta) \\
&= \alpha d^2(v) + (1-\alpha)(2m + (\delta-1)d(v) - \delta(n-1)) \\
&\leq \alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(2m + (\delta-1)\Delta - \delta(n-1))
\end{aligned}$$

Portanto, para todo $v \in V$, temos

$$S_v(A_\alpha^2(G)) \leq \alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(2m + (\delta-1)\Delta - \delta(n-1)).$$

Pelo Lema I.3.6,

$$\lambda_1^2(A_\alpha(G)) \leq \alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(2m + (\delta-1)\Delta - \delta(n-1))$$

Resolvendo a inequação quadrática, obtemos o resultado.

Suponha inicialmente que G seja um grafo r-regular, assim

$$\begin{aligned}
\sqrt{\alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(\Delta(\delta-1) - \delta(n-1) + 2m)} &= \sqrt{\alpha r^2 + (1-\alpha)\left(r(r-1) - r(n-1) + 2\frac{nr}{2}\right)} \\
&= \sqrt{\alpha r^2 + (1-\alpha)\left(r^2 - r - rn + r + nr\right)} = r
\end{aligned}$$

Suponha, agora, qua a igiualdade em (IV.17) ocorra. Isso implica que todas as desigualdades apresentadas anteriormente na demosntração sejam igualdades. Portanto, $d(v) = \Delta$ para todo $v \in V$, o que implica que G é um grafo regular. □

No Capítulo V, as cotas apresentadas nesta seção são analisadas em comparações umas com as outras, bem como com outras cotas encontradas na literatura, devidamente separadas de acordo com os critérios estabelecidos.

IV.2 Cotas para $\lambda_2(A_\alpha(G))$

Nesta seção, apresentamos algumas cotas para o segundo maior autovalor de $A_\alpha(G)$. Os dois últimos resultados dizem respeito a cotas da soma dos dois maiores autovalores da matriz $A_\alpha(G)$. Todos os resultados apresentados dizem respeito a classes particulares de grafos.

Proposição IV.2.1. (Silva Junior *et al.* [2023a]) *Sejam G um grafo r-regular com n vértices, número de independência $\gamma(G)$ e $\alpha \in [0,1]$. Então,*

$$\lambda_2(A_\alpha(G)) \geq \alpha r + (1-\alpha)\left(-1 + \frac{2(n-1-r)^{\gamma(G)}}{\gamma(G)n^{\gamma(G)-1}}\right). \tag{IV.18}$$

A igualdade é obtida se $G \cong K_n$.

Demonstração. Do Teorema I.1.8 sabemos que

$$\lambda_2(A_\alpha(G)) = \lambda_2(\alpha D(G) + (1-\alpha)A(G)) \geq \alpha\lambda_n(D(G)) + (1-\alpha)\lambda_2(A(G)) = \alpha r + (1-\alpha)\lambda_2(A(G))$$

e do Teorema I.3.8 o resultado segue.

Agora, suponhamos que $G \cong K_n$. Então $\gamma(G) = 1$, $r = n-1$ e, consequentemente,

$$\alpha r + (1-\alpha)\left(-1 + \frac{2(n-1-r)^{\gamma(G)}}{\gamma(G)n^{\gamma(G)-1}}\right) = \alpha n - 1$$

e da Proposição II.2.1 a igualdade é obtida. □

A proposição abaixo estabelece uma relação entre os autovalores de um grafo bipartido e os autovalores de seu complemento bipartido. Este resultado foi fundamentado em estudos anteriores descritos em Alazemi *et al.* [2019].

Proposição IV.2.2. (Silva Junior *et al.* [2023a]) *Considere G um grafo bipartido conexo com n vértices. Sejam $K_{p,q}$ $(1 \leq p \leq q)$ o grafo bipartido completo cujas partições são as mesmas que as de G, $\widetilde{G}$ o complemento bipartido de G e $\alpha \in [0,1]$. Então,*

$$q\alpha - \lambda_{3-j}(A_\alpha(\widetilde{G})) \leq \lambda_j(A_\alpha(G)) \leq q\alpha - \lambda_{2-j+n}(A_\alpha(\widetilde{G}))$$

para $j = 1, 2$.

Demonstração. Sabemos que $A_\alpha(G) + A_\alpha(\widetilde{G}) = A_\alpha(K_{p,q})$. Segue do Teorema I.1.8 que

$$\lambda_j(A_\alpha(G)) + \lambda_{i-j+n}(A_\alpha(\widetilde{G})) \leq \lambda_i(A_\alpha(K_{p,q})), \quad 1 \leq i \leq j \leq n \tag{IV.19}$$

e

$$\lambda_i(A_\alpha(K_{p,q})) \leq \lambda_j(A_\alpha(G)) + \lambda_{i-j+1}(A_\alpha(\widetilde{G})), \quad 1 \leq j \leq i \leq n. \tag{IV.20}$$

Das Desigualdades (IV.19) e (IV.20), temos

$$\lambda_j(A_\alpha(G)) \leq \lambda_i(A_\alpha(K_{p,q})) - \lambda_{i-j+n}(A_\alpha(\widetilde{G})) \tag{IV.21}$$

e

$$\lambda_i(A_\alpha(K_{p,q})) - \lambda_{i-j+1}(A_\alpha(\widetilde{G})) \leq \lambda_j(A_\alpha(G)) \tag{IV.22}$$

Segue da Proposição II.2.2 que $\lambda_2(A_\alpha(K_{p,q})) = \alpha q$ e tomando $i = 2$ nas Desigualdades (IV.21) e (IV.22), obtemos

$$\lambda_j(A_\alpha(G)) \leq q\alpha - \lambda_{2-j+n}(A_\alpha(\widetilde{G})).$$

e

$$q\alpha - \lambda_{3-j}(A_\alpha(\widetilde{G})) \leq \lambda_j(A_\alpha(G)).$$

Então,

$$q\alpha - \lambda_{3-j}(A_\alpha(\widetilde{G})) \leq \lambda_j(A_\alpha(G)) \leq q\alpha - \lambda_{2-j+n}(A_\alpha(\widetilde{G})), \quad j = 1, 2$$

e assim obtemos o resultado. □

Corolário IV.2.3. (Silva Junior *et al.* [2023a]) *Sejam G um grafo bipartido conexo e r-regular com n vértices e $\alpha \in [0, 1]$, então*

$$\lambda_2(A_\alpha(G)) \leq \frac{n}{2}(\alpha + 1) - r. \tag{IV.23}$$

Demonstração. Sejam G um grafo bipartido conexo e r-regular, tal que $V = V_1 \cup V_2$, onde $|V_1| = p$ e $|V_2| = q$ $(p \leq q)$ e $\widetilde{G}$ o seu complemento bipartido. Pela da Proposição IV.2.2, sabemos que

$$\lambda_j(A_\alpha(G)) \leq q\alpha - \lambda_{2-j+n}(A_\alpha(\widetilde{G})), \quad j = 1, 2.$$

Tomando $j = 2$, temos

$$\lambda_2(A_\alpha(G)) \leq q\alpha - \lambda_n(A_\alpha(\widetilde{G}))$$

Como G é um grafo bipartido r-regular, segue que $q = \dfrac{n}{2}$. Além disso, sabemos que o grafo $\widetilde{G}$ também é bipartido e $\left(\dfrac{n}{2} - r\right)$-regular, o que implica que $\lambda_1(A_\alpha(\widetilde{G})) = \dfrac{n}{2} - r$ e $\left(\dfrac{n}{2} - r\right) \geq -\lambda_n(A_\alpha(\widetilde{G}))$. Consequentemente o resultado segue. □

A cota superior obtida pelo Corolário IV.2.3 pode ser melhorada, como podemos ver na Proposição IV.2.4. Esta proposição foi baseada no Teorema 3.1 em Stanić e Koledin [2013], que exibe

uma cota superior para o segundo maior autovalor da matriz de adjacência de um grafo bipartido r-regular.

Proposição IV.2.4. (Silva Junior *et al.* [2023a]) *Seja G um grafo bipartido conexo e r-regular com n vértices e $\alpha \in [0,1]$. Então*

$$\lambda_2(A_\alpha(G)) \leq \alpha\left(2r - \frac{n}{2}\right) + \frac{n}{2} - r. \tag{IV.24}$$

Demonstração. Como G é bipartido e r-regular, do Teorema I.3.1 e da Proposição I.3.2 segue que $\lambda_1(A(G)) = r$ e $\lambda_n(A(G)) = -r$ são autovalores de $A(G)$. Além disso, temos que $\widetilde{G}$ é $\left(\frac{n}{2} - r\right)$-regular e bipartido, então $\lambda_1(A(\widetilde{G})) = \frac{n}{2} - r$ e $\lambda_n(A(\widetilde{G})) = -\frac{n}{2} + r$ são autovalores de $A(\widetilde{G})$. Do Lema II.1.2 segue que

$$\lambda_k(A_\alpha(G)) = \alpha r + (1-\alpha)\lambda_k(A(G)), \text{ para } 1 \leq k \leq n \tag{IV.25}$$

e

$$\lambda_k(A_\alpha(\widetilde{G})) = \alpha\left(\frac{n}{2} - r\right) + (1-\alpha)\lambda_k(A(\widetilde{G})), \text{ para } 1 \leq k \leq n. \tag{IV.26}$$

Como, $\lambda_1(A_\alpha(G)) = r$ e $\lambda_1(A_\alpha(\widetilde{G})) = \frac{n}{2} - r$, segue das Equações (IV.25) e (IV.26) que $\lambda_n(A_\alpha(G)) = r(2\alpha - 1)$ e $\lambda_n(A_\alpha(\widetilde{G})) = \left(\frac{n}{2} - r\right)(2\alpha - 1)$. Por outro lado, subtraindo a Equação (IV.26) da (IV.25) e usando o Teorema I.3.5 temos que $\lambda_k(A_\alpha(G)) = \lambda_k(A_\alpha(\widetilde{G}))$, $\forall k$, $2 \leq k \leq n-1$ obtendo

$$\lambda_k(A_\alpha(G)) = \alpha\left(2r - \frac{n}{2}\right) + \lambda_k(A_\alpha(\widetilde{G})) \tag{IV.27}$$

Tomando $k = 2$ e considerando $\lambda_1(A_\alpha(\widetilde{G})) \geq \lambda_2(A_\alpha(\widetilde{G}))$, temos que

$$\lambda_2(A_\alpha(G)) \leq \alpha\left(2r - \frac{n}{2}\right) + \frac{n}{2} - r = \frac{n}{2}(1-\alpha) + r(2\alpha - 1) \tag{IV.28}$$

e o resultado segue. □

Observação IV.2.5. *Vale ressaltar que se G é um grafo regular, conexo e bipartido, e a regularidade é $\frac{n}{2}$, então as cotas superiores mostradas nas equações (IV.23) e (IV.24) são iguais.*

Os próxios resultados, Proposiçãoes IV.2.6 e IV.2.7, foram baseadas no Corolário 3.2 presente em Ebrahimi B *et al.* [2008] e no Corolário 3.1 presente em Stanić e Koledin [2013].

Proposição IV.2.6. (Silva Junior *et al.* [2023a]) *Sejam G um grafo r-regular de ordem n. Então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) + \lambda_2(A_\alpha(G)) \leq 2r\alpha + (1-\alpha)(n-2).$$

A igualdade ocorre se, e somente se, G possui uma componente conexa que é um grafo bipartido.

Demonstração. Seja G um grafo r-regular de ordem n. Através do Teorema I.3.14 e do Lema II.1.2, temos

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) + \lambda_2(A_\alpha(G)) = 2\alpha r + (1-\alpha)(\lambda_1(A(G)) + \lambda_2(A(G))) \leq 2\alpha r + (1-\alpha)(n-2). \quad \text{(IV.29)}$$

A igualdade ocorre se, e somente se, G possui uma componente conexa que é um grafo bipartido, e o resultado segue. □

Proposição IV.2.7. (Silva Junior *et al.* [2023a]) *Seja G um grafo bipartido r-regular de ordem n e $\alpha \in [0,1)$. Então, $\lambda_1(A_\alpha(G)) + \lambda_2(A_\alpha(G)) \leq 2r\alpha + (1-\alpha)\frac{n}{2}$. A igualdade ocorre se, e somente se, $\widetilde{G}$ é desconexo.*

Demonstração. Seja G um grafo bipartido r-regular. Pelo Lema II.1.2, temos $\lambda_1(A_\alpha(G)) = r$. Além disso, pela Proposição IV.2.4, temos

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) + \lambda_2(A_\alpha(G)) \leq r + \alpha\left(2r - \frac{n}{2}\right) + \frac{n}{2} - r = \alpha\left(2r - \frac{n}{2}\right) + \frac{n}{2} = 2r\alpha + (1-\alpha)\frac{n}{2}.$$

Agora, suponhamos que $\lambda_1(A_\alpha(G)) + \lambda_2(A_\alpha(G)) = 2r\alpha + (1-\alpha)\frac{n}{2}$. Como G é r-regular, temos que

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) = \alpha r + (1-\alpha)\lambda_1(A(G)) \text{ e } \lambda_2(A_\alpha(G)) = \alpha r + (1-\alpha)\lambda_2(A(G))$$

e, consequentemente,

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) + \lambda_2(A_\alpha(G)) = 2\alpha r + (1-\alpha)(\lambda_1(A(G)) + \lambda_2(A(G))).$$

Assim,

$$\lambda_1(A(G)) + \lambda_2(A(G)) = \frac{n}{2}$$

e segue do Corolário I.3.13 que $\widetilde{G}$ é desconexo.

Agora, suponha que $\widetilde{G}$ é desconexo. Do Corolário I.3.13, temos $\lambda_1(A(G)) + \lambda_2(A(G)) = \frac{n}{2}$. Como G é r-regular, temos

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) + \lambda_2(A_\alpha(G)) = 2\alpha r + (1-\alpha)(\lambda_1(A(G)) + \lambda_2(A(G))) = 2\alpha r + (1-\alpha)\frac{n}{2}.$$

e o resultado segue. □

IV.3 Cotas para $\lambda_n(A_\alpha(G))$

Para finalizar este capítulo, apresentamos duas cotas para o menor autovalor de $A_\alpha(G)$.

Proposição IV.3.1. (Silva Junior *et al.* [2023a]) *Sejam G um grafo com n vértices, grau mínimo $\delta \neq 0$, grau máximo Δ, número de independência $\gamma(G)$ e $\alpha \in [0,1]$. Então,*

$$\lambda_n(A_\alpha(G)) \leq \alpha\Delta + (1-\alpha)\frac{\gamma(G)\delta^2}{\lambda_1(A(G))(\gamma(G)-n)}. \tag{IV.30}$$

Em particular, se G é um grafo r-regular, temos

$$\lambda_n(A_\alpha(G)) \leq \alpha r + (1-\alpha)\frac{\gamma(G)r}{\gamma(G)-n}. \tag{IV.31}$$

A igualdade ocorre se $G \cong K_n$ ou, quando n é par, $G \cong \bigcup_{i=1}^{\frac{n}{2}} K_2$, ou $G \cong K_{\frac{n}{2}} \cup K_{\frac{n}{2}}$.

Demonstração. Através do Corolário I.1.9 e do Teorema I.3.9, obtemos a cota (IV.30) e, a partir do Corolário I.1.9 e do Teorema I.3.10, conclui-se a cota (IV.31). Inicialmente, suponhamos que $G \cong K_n$. Então, $\gamma(G) = 1$ e, a partir da Proposição II.2.1, temos que $\lambda_n(A_\alpha(G)) = \alpha n - 1$. Portanto, $\alpha r + (1-\alpha)\frac{\gamma(G)r}{\gamma(G)-n} = \alpha n - 1$.

Agora, suponha que n é par e $G \cong \bigcup_{i=1}^{\frac{n}{2}} K_2$. Sabemos que $\gamma(G) = \frac{n}{2}$, $r = 1$, $\lambda_n(A_\alpha(G)) = 2\alpha - 1$ e, consequentemente, $\alpha r + (1-\alpha)\frac{\gamma(G)r}{\gamma(G)-n} = 2\alpha - 1$. Por fim, suponha que n é par e $G \cong K_{\frac{n}{2}} \cup K_{\frac{n}{2}}$. Nesse caso, $\gamma(G) = 2$, $r = \frac{n}{2} - 1$ e $\lambda_n(A_\alpha(G)) = \frac{n}{2}\alpha - 1$. Portanto, $\alpha r + (1-\alpha)\frac{\gamma(G)r}{\gamma(G)-n} = \alpha\frac{n}{2} - 1$, e o resultado segue. □

Proposição IV.3.2. (Silva Junior *et al.* [2023a]) *Seja G um grafo sem triângulos com n vértices e número de independência $\gamma(G)$. Então,*

$$\lambda_n(A_\alpha(G)) \leq \alpha\Delta + (1-\alpha)\frac{\lambda_1^2(A(G))}{\lambda_1(A(G))-n}.$$

Demonstração. Através do Corolário I.1.9, temos que $\lambda_n(A_\alpha(G)) \leq \alpha\Delta + (1-\alpha)\lambda_n(A(G))$ e, aplicando o Teorema I.3.11, o resultado segue. □

Capítulo V Comparação entre as cotas do maior autovalor da matriz A_α

A determinação de cotas para os autovalores de matrizes associadas a um grafo G tem sido tema de interesse em diversas áreas, como por exemplo na TEG, Matemática Aplicada (Gutman e Polansky [1986]), Ciência da Computação (Spielman [2007b]), Física (Estrada [2011]) e Engenharia (Estrada e Hatano [2006]). Obter cotas para os autovalores de matrizes associadas a grafos com grafos extremais é um desafio, pois sua elaboração requer a aplicação de técnicas de demonstração e métodos computacionais. Muitos autores têm contribuído para esse campo, desenvolvendo técnicas inovadoras e algoritmos para melhorar a precisão das cotas. No entanto, a questão fundamental que surge é: o que define uma boa cota?

A resposta a essa pergunta não é trivial, uma vez que as cotas produzidas podem apresentar particularidades, tornando-as, muitas vezes, incomparáveis entre si. Uma "boa cota" está relacionada aos diferentes contextos nos quais os grafos são aplicados. Em algumas situações, a prioridade pode ser a precisão numérica, enquanto em outras, a importância recai sobre a interpretação ou a obtenção de grafos extremais para essas cotas. Em outros casos, a rapidez na obtenção das cotas pode prevalecer sobre a precisão.

Portanto, a busca por cotas eficazes para os autovalores das matrizes associadas a um grafo G é um desafio contínuo. Por ser um processo complexo em alguns casos, vale destacar a importância da pesquisa e do desenvolvimento de novos métodos para a obtenção de cotas que se adequem às necessidades de cada aplicação.

No decorrer deste capítulo, utilizamos predominantemente a biblioteca Networkx[1] do Python para construir grande parte dos teste apresentados. Além disso, implementamos manualmente algumas rotinas para a construção de famílias de grafos não existentes no Networkx. Para as cotas do maior autovalor da matriz A_α, variamos o número de vértices e os valores de α em nossas análises, explorando assim o comportamento dessas cotas em vários cenários. Desta forma, todos os testes realizados neste capítulo envolveram as seguintes famílias de grafos: P_n, C_n, K_n, $K_{1,n-1}$ e K_{n_1,n_2}, juntamente com todas as famílias de grafos mencionadas na Subseção I.2.2. Dada a diversidade de grafos, optamos por destacar apenas os resultados mais relevantes, ou seja, aqueles que apresentam de forma clara a relação entre as cotas que desejamos comparar.

[1]NetworkX é um pacote Python para a criação, manipulação e estudo da estrutura, dinâmica e funções de redes complexas. Para mais informações sugerimos consultar Hagberg *et al.* [2008].

As comparações entre as diferentes cotas são apresentadas de maneira organizada, seja por meio de tabelas ou gráficos. Além disso, optamos por representar as diferenças entre os valores exatos dos autovalores e as cotas analisadas utilizando gráficos, destacando visualmente como esses valores se comportam variando o número de vértices.

É relevante salientar que duas cotas para um autovalor de um grafo nesta tese são denominadas como incomparáveis quando não é possível determinar com certeza qual cota é maior ou menor em relação à outra para um mesmo grafo. Em outras palavras, se não há garantia de que uma cota seja superior ou inferior em relação à outra.

Além disso, ao compararmos as cotas entre diferentes famílias de grafos, é possível estabelecer uma relação de ordem entre algumas cotas, enquanto em outras situações, as cotas podem ser incomparáveis devido às diferentes relações de ordem que surgem entre as distintas famílias de grafos.

V.1 Comparação entre as novas cotas obtidas na tese

Nesta seção, apresentamos as comparações entre as cotas inferiores e entre as cotas superiores do maior autovalor da matriz A_α obtidas no Capítulo IV.

V.1.1 Cotas inferiores

Para realizarmos as comparações entre as cotas inferiores, primeiramente separamos aquelas que possuem os mesmos grafos extremais com as que não os possuem, visto que as que possuem grafos extremais distintos, como por exemplo as cotas dos Teoremas IV.1.1 e IV.1.3, do Teorema IV.1.1 e do Corolário IV.1.5 e dos Teoremas IV.1.1 e IV.1.6, são incomparáveis.

Os resultados computacionais com diferentes tipos de famílias de grafos sugeriram que a cota do Teorema IV.1.3 é melhor que a cota do Teorema IV.1.6. Isso nos levou a uma comparação entre essas duas cotas, conforme descrito na Proposição V.1.1.

Proposição V.1.1. *Sejam $\alpha \in [0,1]$ e G um grafo com $m \neq 0$ arestas, $n \geq 3$ vértices, Δ e δ o grau máximo e mínimo, respectivamente. Então, a cota do Teorema IV.1.3 é melhor que a cota do Teorema IV.1.6*

Demonstração. Tendo em consideração a forma de obtenção da cota do Corolário IV.1.5, sabemos que ela é pior do que a cota do Teorema IV.1.3. Para mostrar esse resultado, basta provarmos que a cota do Teorema IV.1.6 é pior do que a cota do referido corolário. Para isto, precisamos mostrar a seguinte desigualdade

$$\overline{d} - \frac{8m^3}{n^2(2\delta m + (n-1)(2m - n\delta))} \geq 0,$$

onde $\overline{d}$ é o grau médio. De fato,

$$\overline{d} - \frac{8m^3}{n^2(2\delta m + (n-1)(2m - n\delta))} = \overline{d}\left(1 - \frac{\overline{d}^2}{\delta\overline{d} + (n-1)(\overline{d} - \delta)}\right).$$

Como, $\delta\overline{d} + (n-1)(\overline{d} - \delta) \geq \delta\overline{d} + d(d - \delta)$, temos que

$$\overline{d}\left(1 - \frac{\overline{d}^2}{\delta\overline{d} + (n-1)(\overline{d} - \delta)}\right) \geq \overline{d}\left(1 - \frac{\overline{d}^2}{\delta\overline{d} + \overline{d}(\overline{d} - \delta)}\right) = 0,$$

concluindo assim o resultado. □

Conforme mostrado na Proposição V.1.1, a cota fornecida pelo Teorema IV.1.3 é superior (melhor) à do Corolário IV.1.5, pela forma como esta foi obtida. Por sua vez, a estimativa do Corolário IV.1.5 é melhor que a do Teorema IV.1.6. Após testes computacionais, observamos que o tempo necessário para o cálculo usando essas últimas cotas é menor do que para a cota do Teorema IV.1.3. Isso é evidenciado na Figura V.1 para o grafo completo, sugerindo que em algumas circunstâncias, o uso dessas cotas pode ser mais vantajoso.

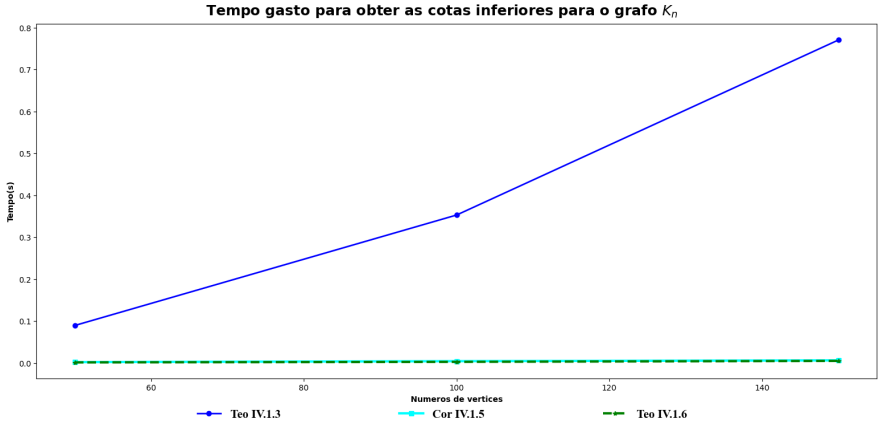


Figura V.1: O gráfico representa o tempo necessário para calcular $\lambda_1(A_\alpha(K_n))$ para valores de α no intervalo $[0, 0.9]$, começando com $\alpha = 0$, com incrementos de 0.1, à medida que o número de vértices n do grafo K_n aumenta.

Faremos agora a comparação entre as cotas que possuem grafos extremais e as que não têm. Os primeiros testes foram realizados para as cotas dos Teoremas IV.1.1 e IV.1.7, utilizando o grafo P_n. Os resultados obtidos estão apresentados na Tabela V.1.

Comparação das cotas inferiores para $\mathbf{G \cong P_n}$											
α		0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 100$	$\lambda_1(A_\alpha)$	1.999	1.999	1.999	1.999	1.999	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0
	Teo. IV.1.1	1.414	1.424	1.436	1.451	1.472	1.5	1.54	1.6	1.69	1.822
	Teo. IV.1.7	1.732	1.572	1.442	1.476	1.523	1.581	1.649	1.726	1.811	1.903
$n = 500$	$\lambda_1(A_\alpha)$	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0
	Teo. IV.1.1	1.414	1.424	1.436	1.451	1.472	1.5	1.54	1.6	1.69	1.822
	Teo. IV.1.7	1.732	1.572	1.442	1.476	1.523	1.581	1.649	1.726	1.811	1.903
$n = 1000$	$\lambda_1(A_\alpha)$	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0
	Teo. IV.1.1	1.414	1.424	1.436	1.451	1.472	1.5	1.54	1.6	1.69	1.822
	Teo. IV.1.7	1.732	1.572	1.442	1.476	1.523	1.581	1.649	1.726	1.811	1.903

Tabela V.1: Comparação de cotas inferiores dos Teoremas IV.1.7 e IV.1.1 para o grafo P_n.

Podemos observar que os valores obtidos pela cota do Teorema IV.1.7 são sempre maiores que os valores obtidos pela cota do Teoremas IV.1.1. Como o grafo estrela é extremal para o Teorema IV.1.1, podemos concluir que essas duas cotas são incomparáveis.

Para a comparação entre as cotas dos Teoremas IV.1.3 e IV.1.7 utilizamos o grafo W_n, cujos resultados se encontram na Tabela V.2. Nela, observamos que independentemento do número de vértices, os valores obtidos usando a cota do Teorema IV.1.7 são sempre maiores do que os valores obtidos pela cota do Teorema IV.1.3, exceto para $\alpha = 0$. Como a cota do Teorema IV.1.3 possui como extremal o grafo regular, podemos concluir que essas duas cotas são também incomparáveis. Atendendo à Proposição V.1.1, também a cota do Teorema IV.1.7 é incomparável com as cotas do Corolário IV.1.5 e do Teorema IV.1.6.

Comparação das cotas inferiores para $\mathbf{G \cong W_n}$											
α		0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 100$	$\lambda_1(A_\alpha)$	11.0	15.767	22.866	31.369	40.535	50.021	59.678	69.434	79.252	89.111
	Teo. IV.1.3	10.117	11.805	13.493	15.182	16.87	18.558	20.247	21.935	23.623	25.312
	Teo. IV.1.7	7.28	13.033	21.307	30.505	40.05	49.752	59.535	69.365	79.225	89.106
$n = 500$	$\lambda_1(A_\alpha)$	23.361	57.231	102.969	151.341	200.507	250.004	299.669	349.43	399.25	449.111
	Teo. IV.1.3	20.846	31.461	42.076	52.692	63.307	73.923	84.538	95.154	105.769	116.385
	Teo. IV.1.7	15.906	53.674	101.378	150.514	200.05	249.75	299.534	349.364	399.225	449.106
$n = 1000$	$\lambda_1(A_\alpha)$	32.623	107.572	202.984	301.337	400.503	500.002	599.668	699.429	799.25	899.111
	Teo. IV.1.3	28.872	51.185	73.498	95.811	118.123	140.436	162.749	185.062	207.374	229.687
	Teo. IV.1.7	22.428	103.802	201.389	300.515	400.05	499.75	599.533	699.364	799.225	899.106

Tabela V.2: Comparação de cotas inferiores dos Teoremas IV.1.3 e IV.1.7 para o grafo W_n.

Na Tabela V.3 encontra-se um resumo das comparações realizadas entre as cotas inferiores. A notação I indica que as cotas são incomparáveis, enquanto, em outros casos, uma seta aponta sempre para a cota que origina os melhores resultados.

Resumo comparativo					
	Teo. IV.1.1	Teo. IV.1.3	Cor. IV.1.5	Teo. IV.1.6	Teo. IV.1.7
Teo. IV.1.1		I	I	I	I
Teo. IV.1.3	I		$\leftarrow$	$\leftarrow$	I
Cor. IV.1.5	I	$\uparrow$		$\leftarrow$	I
Teo. IV.1.6	I	$\uparrow$	$\uparrow$		I
Teo. IV.1.7	I	I	I	I	

Tabela V.3: Comparação entre as cotas inferiores.

V.1.2 Cotas superiores

As comparações nesta subseção seguem os mesmos critérios da anterior. A primeira comparação realizada foi entre as cotas dos Teoremas IV.1.9 e IV.1.11. Após testes computacionais, constatou-se que sob certas condições essas cotas são iguais, conforme demonstrado na Proposição V.1.2.

Proposição V.1.2. *Sejam G um grafo com n vértices, $m \neq 0$ arestas, grau máximo Δ, grau mínimo $\delta = 1$ e $\alpha \in [0, 1]$. Então as cotas presentes nos Teoremas IV.1.9 e IV.1.11 são iguais.*

Demonstração. Substituindo $\delta = 1$ nas desigualdades (IV.14) e (IV.17) obtemos em ambas a desigualdade

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \sqrt{\alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(2m - n + 1)}, \tag{V.1}$$

concluindo assim o resultado. □

Agora façamos uma comparação entre os Teoremas IV.1.8, IV.1.9 e IV.1.11 usando a estrela $K_{1,n-1}$. Neste caso, pela Proposição V.1.2 as cotas dos Teoremas IV.1.9 e IV.1.11 são iguais. Pela Tabela V.4 podemos observar que, para $\alpha \neq 0$, a cota do Teorema IV.1.8 é melhor que as cotas dos Teoremas IV.1.9 e IV.1.11. Por outro lado, as duas últimas cotas têm o grafo regular como extremal, o que permite concluir que elas são incomparáveis com a cota do Teorema IV.1.8.

Comparação das cotas superiores para $\mathbf{G \cong K_{1,n-1}}$											
α		0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 100$	$\lambda_1(A_\alpha)$	9.95	15.208	22.625	31.267	40.489	50.0	59.668	69.43	79.25	89.111
	Teo. IV.1.8	14.071	16.105	22.863	31.433	40.685	50.244	59.964	69.777	79.649	89.56
	Teo. IV.1.9	9.95	32.699	45.16	54.86	63.086	70.356	76.943	83.008	88.66	93.972
	Teo. IV.1.11	9.95	32.699	45.16	54.86	63.086	70.356	76.943	83.008	88.66	93.972
$n = 500$	$\lambda_1(A_\alpha)$	22.338	57.003	102.909	151.319	200.498	250.0	299.667	349.429	399.25	449.111
	Teo. IV.1.8	31.591	57.475	103.047	151.473	200.697	250.249	299.966	349.778	399.65	449.561
	Teo. IV.1.9	22.338	159.214	224.052	273.952	316.069	353.2	386.782	417.673	446.431	473.446
	Teo. IV.1.11	22.338	159.214	224.052	273.952	316.069	353.2	386.782	417.673	446.431	473.446
$n = 1000$	$\lambda_1(A_\alpha)$	31.607	107.439	202.953	301.326	400.499	500.0	599.667	699.429	799.25	899.111
	Teo. IV.1.8	44.699	107.742	203.073	301.478	400.698	500.249	599.966	699.778	799.65	899.561
	Teo. IV.1.9	31.607	317.331	447.66	547.813	632.297	706.753	774.08	836.003	893.645	947.787
	Teo. IV.1.11	31.607	317.331	447.66	547.813	632.297	706.753	774.08	836.003	893.645	947.787

Tabela V.4: Comparação das cotas superiores para o grafo estrela aumentando o número de vértices.

Para continuar analisando o comportamento das cotas provenientes dos Teoremas IV.1.9 e IV.1.11, escolhemos outra classe de grafos: o grafo friendship, $F_{0,r,0}$, no qual $\delta \neq 1$. Na Tabela V.5, ob-

servamos que a proximidade, em relação a $\lambda_1(A_\alpha(G)$, dos valores obtidos pelas duas cotas, varia dependendo do parâmetro α e da quantidade de vértices. Logo essas cotas são incomparáveis.

Comparação das cotas superiores para $\mathbf{G \cong F_{0,r,0}}$											
α		0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
$n = 101$ $(r = 50)$	$\lambda_1(A_\alpha)$	10.512	15.59	22.943	31.616	40.911	50.51	60.273	70.132	80.051	90.011
	Teo. IV.1.9	10.512	33.516	46.105	55.904	64.214	71.558	78.211	84.338	90.047	95.413
	Teo. IV.1.11	14.142	34.351	46.476	56.036	64.187	71.414	77.974	84.024	89.666	94.974
$n = 501$ $(r = 250)$	$\lambda_1(A_\alpha)$	22.866	57.217	103.139	151.63	200.902	250.502	300.268	350.129	400.05	450.011
	Teo. IV.1.9	22.866	160.031	224.999	274.999	317.201	354.406	388.055	419.008	447.824	474.893
	Teo. IV.1.11	31.623	160.935	225.389	275.136	317.175	354.26	387.814	418.688	447.437	474.447
$n = 1001$ $(r = 500)$	$\lambda_1(A_\alpha)$	32.127	107.605	203.169	301.632	400.901	500.501	600.267	700.129	800.05	900.011
	Teo. IV.1.9	32.127	318.148	448.607	548.861	633.429	707.96	775.354	837.339	895.038	949.235
	Teo. IV.1.11	44.721	319.061	448.999	548.999	633.404	707.814	775.113	837.019	894.651	948.789

Tabela V.5: Comparação das cotas superiores para o grafo friendship aumentando o número de vértices.

Na Tabela V.6, apresentamos um resumo das comparações entre as cotas superiores, utilizando a mesma notação do quadro resumo apresentado na Tabela V.3.

Resumo comparativo considerando $\delta \neq 1$			
	Teo. IV.1.8	Teo. IV.1.9	Teo. IV.1.11
Teo. IV.1.8		I	I
Teo. IV.1.9	I		I
Teo. IV.1.11	I	I	

Tabela V.6: Comparação entre as cotas superiores.

V.2 Comparação entre as novas cotas e algumas cotas existentes na literatura

Nesta seção, iremos comparar as cotas apresentadas no Capítulo IV com algumas das cotas existentes na literatura. O critério para selecionar as cotas para as comparações é optar por aquelas que envolvem parâmetros semelhantes aos utilizados em nossas cotas. Além disso, organizamos as cotas em grupos, considerando aquelas que compartilham os mesmos grafos extremais. É importante ressaltar que as cotas que não possuem grafos extremais serão incluídas em todos os grupos de comparação. Optamos, também, por apresentar os resultados recorrendo a gráficos, em que para a variação dos valores de α se calculam as diferenças entre $\lambda_1(A_\alpha(G))$ e os valores dados pelas cotas.

V.2.1 Cotas inferiores

Começamos a análise entre as cotas da Proposição II.4.4 e dos Teoremas IV.1.1, IV.1.7 e II.4.59. Cabe observar que as cotas da Proposição II.4.4 e do Teorema IV.1.1 têm o mesmo grafo extremal.

Na Figura V.2 se encontram os gráficos referentes ao grafo P_n. A escolha deste grafo foi devida à necessidade de evidenciar a existência de uma família de grafos onde a cota dos Teoremas IV.1.7 e II.4.59 supere total ou parcialmente as cotas do Teorema IV.1.1 e da Proposição II.4.4.

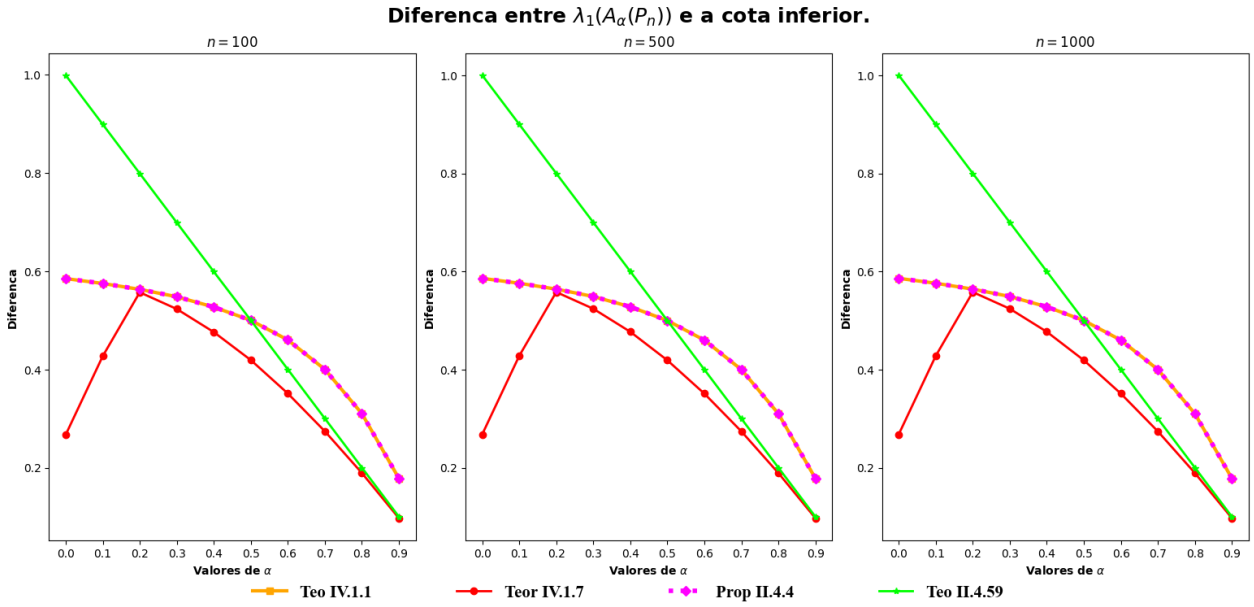


Figura V.2: Diferença entre $\lambda_1(A_\alpha(P_n))$ e as cotas inferiores para crescentes valores de n e α.

Pelos gráficos presentes na Figura V.2 é possível concluir que, para o grafo P_n, a cota dada pelo Teorema IV.1.7 é melhor do que as cotas dadas pela Proposição II.4.4 e pelo Teorema IV.1.1 (sendo que ambas originam o mesmo valor) e do que a cota dada pelo Teorema II.4.59. Além disso, o gráfico referente ao Teorema II.4.59 intersecta os gráficos referentes à Proposição II.4.4 e ao Teorema IV.1.1, não sendo possível, para esta família de grafos, dizer qual destas três cotas é a melhor, podendo afirmar que estas três cotas são incomparáveis. No entanto, quanto às cotas referentes aos Teoremas IV.1.7 e II.4.59 nada podemos garantir, o que leva a procurar comparar estas duas cotas utilizando outros grafos.

A partir dos resultados obtidos por todos os testes feitos, foi possível observar alguns fatos que originaram resultados que apresentamos a seguir.

Proposição V.2.1. *Sejam G um grafo de ordem $n \geq 2$, Δ o grau máximo, $\delta = 1$ e $\alpha \in [0, 1)$. Então as cotas apresentadas no Teorema IV.1.1 e na Proposição II.4.4 são iguais.*

Demonstração. Tomando $\delta = 1$ em (IV.1) temos

$$\begin{aligned}\lambda_1(A_\alpha(G)) &\geq \frac{\alpha(\Delta+1) + \sqrt{\alpha^2(\Delta-1)^2 + 4(1-\alpha)^2\Delta}}{2} \\ &= \frac{\alpha(\Delta+1) + \sqrt{\alpha^2\Delta^2 - 2\Delta\alpha^2 + \alpha^2 + 4\Delta - 8\alpha\Delta + 4\alpha^2\Delta}}{2} \\ &= \frac{\alpha(\Delta+1) + \sqrt{\alpha^2(\Delta+1)^2 + 4\Delta(1-2\alpha)}}{2}\end{aligned}$$

e o resultado segue. □

Para grafos regulares, obtemos a seguinte Proposição V.2.2.

Proposição V.2.2. *Se G é um grafo r-regular e $\alpha \in [0,1]$, então a cota inferior obtida no Teorema IV.1.1 é melhor que a cota inferior da Proposição II.4.4.*

Demonstração. Dado que $r \in \mathbb{N}^*$ e $\alpha \in [0,1]$, temos

$$\left(r^{\frac{3}{2}} - r^{\frac{1}{2}}\right)\alpha(1-\alpha) \geq 0$$
$$-\alpha^2 r^{\frac{3}{2}} + \alpha^2 r^{\frac{1}{2}} + \alpha r^{\frac{3}{2}} - \alpha r^{\frac{1}{2}} \geq 0$$
$$-\alpha^2 r^{\frac{3}{2}} + \alpha^2 r^{\frac{1}{2}} + \alpha r^{\frac{3}{2}} - \alpha r^{\frac{1}{2}} + \frac{\alpha^2 r^2}{4} + \frac{\alpha^2 r}{2} + \frac{\alpha^2}{4} - 2r\alpha + r - \frac{\alpha^2 r^2}{4} - \frac{\alpha^2 r}{2} - \frac{\alpha^2}{4} + 2r\alpha - r \geq 0$$
$$-\alpha^2 r^{\frac{3}{2}} + \alpha^2 r^{\frac{1}{2}} + \alpha r^{\frac{3}{2}} - \alpha r^{\frac{1}{2}} + \frac{\alpha^2 r^2}{4} + \frac{\alpha^2 r}{2} + \frac{\alpha^2}{4} - 2r\alpha + r \geq +\frac{\alpha^2 r^2}{4} + \frac{\alpha^2 r}{2} + \frac{\alpha^2}{4} - 2r\alpha + r$$
$$\left(\frac{2r\alpha + 2(1-\alpha)r^{\frac{1}{2}} - \alpha(r+1)}{2}\right)^2 \geq \left(\frac{\sqrt{\alpha^2(r+1)^2 + 4r(1-2\alpha)}}{2}\right)^2$$

Assim,

$$\frac{2r\alpha + 2(1-\alpha)r^{\frac{1}{2}} - \alpha(r+1)}{2} \geq \frac{\sqrt{\alpha^2(r+1)^2 + 4r(1-2\alpha)}}{2}.$$

Como

$$\frac{2r\alpha + 2(1-\alpha)r^{\frac{1}{2}}}{2} \geq \frac{2r\alpha + 2(1-\alpha)r^{\frac{1}{2}} - \alpha(r+1)}{2},$$

então o resultado segue. □

Após alguns testes computacionais com famílias de grafos não regulares e/ou com $\delta > 1$, verificou-se que os resultados obtidos pela cota do Teorema IV.1.1, são sempre melhores ou iguais aos resultados obtidos pela cota do Teorema II.4.4. No entanto, a análise algébrica desse fato resultante desses testes computacionais implica em resolver uma equação que envolve expressões complexas, conforme as definições que são apresentadas abaixo.

Consideremos as funções $f, g : [0,1] \to \mathbb{R}$ definidas por:

$$f(x) = \frac{x(\Delta+\delta) + \sqrt{x^2(\Delta-\delta)^2 + 4(1-x)^2\Delta}}{2}$$

e

$$g(x) = \frac{x(\Delta+1) + \sqrt{x^2(\Delta+1)^2 + 4\Delta(1-2x)}}{2},$$

onde $2 \leq \delta < \Delta$. Seja $h(x) = f(x) - g(x)$. O objetivo é mostrar que $h(x) \geq 0$ para todo $x \in [0,1]$. Se por um lado temos $h(0) = h(1) = 0$, por outro lado, queremos verificar que $h\left(\frac{1}{2}\right) \geq 0$. Como

$\Delta \geq \delta + 1$ e $\delta > 1$ temos que $2\Delta - \delta - 1 \geq 0$. Assim,

$$h\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\left[\sqrt{\frac{1}{4}(\Delta-\delta)^2 + \Delta} - \left(\frac{1}{2}(\Delta-\delta)+1\right)\right] \geq 0 \Leftrightarrow$$
$$\frac{1}{4}(\Delta-\delta)^2 + \Delta - \frac{1}{4}(\Delta-\delta)^2 + \Delta - \delta - 1 \geq 0 \Leftrightarrow$$
$$\frac{1}{4}(\Delta-\delta)^2 + \Delta \geq \frac{1}{4}(\Delta-\delta)^2 - \Delta + \delta + 1,$$

ou seja,

$$\frac{1}{4}(\Delta-\delta)^2 + \Delta \geq \left(\frac{1}{2}(\Delta-\delta)+1\right)^2.$$

Portanto,

$$\sqrt{\frac{1}{4}(\Delta-\delta)^2 + \Delta} \geq \frac{1}{2}(\Delta-\delta)+1,$$

o que implica que $h\left(\frac{1}{2}\right) \geq 0$.

Como h é contínua em $[0,1]$ e diferenciável em $(0,1)$, cuja derivada é

$$h'(x) = \frac{1}{2}\left[(\delta-1) + \frac{x(\Delta-\delta)^2 - 4\Delta(x-1)}{\sqrt{x^2(\Delta-\delta)^2 + 4\Delta(1-x)^2}} - \frac{x(\Delta+1)^2 - 4\Delta}{\sqrt{x^2(\Delta+1)^2 + 4\Delta(1-2x)}}\right],$$

temos pelo Teorema de Rolle que existe pelo menos um $\alpha_0 \in (0,1)$ tal que $h'(\alpha_0) = 0$. Se esse ponto crítico for único, ele é um ponto de máximo e a função h é não negativa no intervalo.

Resolver a equação $h'(x) = 0$ em $(0,1)$ não é tarefa simples. Recorrendo a meios computacionais, ao variar os valores de Δ e δ, obtivemos sempre um único valor para $\alpha_0 \in (0,1)$, tal que $h'(\alpha_0) = 0$. Assim, constata-se que nesses casos, a equação apresenta uma única solução no referido intervalo, como podemos ver na Figura V.3.

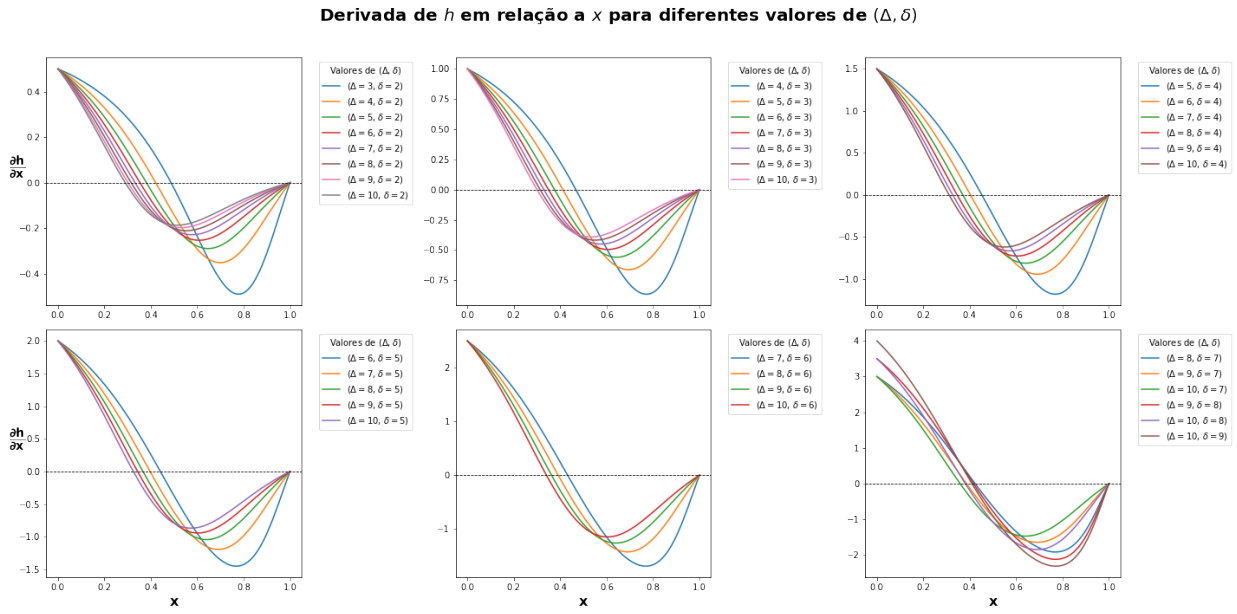


Figura V.3: Gráficos da função $h'(x)$ considerando diferentes valores de Δ e δ.

Na Tabela V.7 apresentamos a solução numérica do zero da função $h'(x)$ no intervalo $(0,1)$ para os diferentes valores de Δ e δ. Com isso, é possível intuir que $f(x) > g(x)$, para todo $x \in (0,1)$ e consequentemente obtemos que a cota do Teorema IV.1.1 é melhor que a cota do Teorema II.4.4. Sendo assim, apresentamos a seguinte conjectura.

δ \ Δ	3	4	5	6	7	8	9
2	0,487	0,421	0,381	0,353	0,332	0,315	0,301
3		0,467	0,411	0,375	0,349	0,329	0,313
4			0,453	0,404	0,371	0,346	0,327
5				0,441	0,397	0,336	0,343
6					0,432	0,391	0,362
7						0,423	0,386
8							0,416

Tabela V.7: Solução numérica para encontrar a raiz da função $h'(x)$ no intervalo $(0,1)$ para diferentes valores de Δ e δ.

Conjectura 1. *Sejam G um grafo e $\alpha \in [0,1)$. Então, a cota do Teorema IV.1.1 é melhor que a cota do Teorema II.4.4.*

Agora, analisamos as cotas inferiores dos Teoremas IV.1.3, II.4.9, II.4.47 e II.4.61, cujo grafo extremal é regular, além das cotas dos Teoremas IV.1.7 e II.4.59 que não possuem grafo extremal. Inicialmente consideremos o grafo $K_{1,n-1}$ e observando a Figura V.4, torna-se evidente que as cotas provenientes deste dois últimos teoremas superam as restantes cotas e, apesar da cota do Teorema IV.1.7 ser melhor, apresentam comportamentos bastante semelhantes, e que seus valores mostram uma melhoria significativa com o aumento do valor de n.

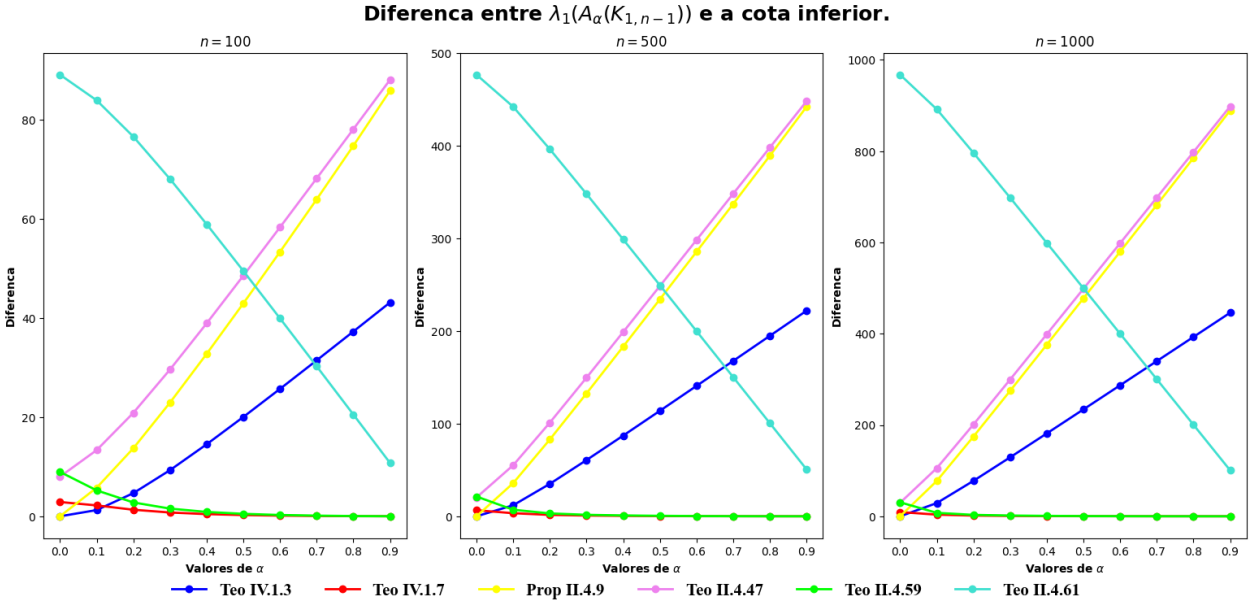


Figura V.4: Diferença entre $\lambda_1(A_\alpha(K_{1,n-1}))$ e as cotas inferiores para crescentes valores de n e de α.

Além disso, podemos concluir que as cotas dos Teoremas IV.1.3, II.4.9, II.4.47 e II.4.61 são incomparáveis entre si e também quando comparadas com a cota do Teoremas IV.1.7 e II.4.59. Também é notório que o gráfico do Teorema II.4.61 intercepta os gráficos das cotas dos Teoremas IV.1.3, II.4.9 e II.4.47, não havendo como definir, para esta família de grafo, qual cota é a melhor.

Dentre todos os testes computacionais realizados, percebemos que a cota do Teorema II.4.9 é sempre maior que a cota do Teorema II.4.47, quando $\beta = \Delta$, o que nos levou a Proposição V.2.4. Para a demonstração da referida proposição, precisamos inicialmente do Lema V.2.3.

Lema V.2.3. *Sejam G um grafo conexo de ordem n, com grau médio do vértice v_i dado por por m_i, $i \in \{1, \ldots, n\}$ e $\alpha \in [0, 1)$. Então,*

$$\min_{v_i \in V} \left\{ \sqrt{\alpha d_i^2 + (1-\alpha) \sum_{v_j \sim v_i} d_j} \right\} - \delta \geq 0.$$

Demonstração. Sabemos que,

$$\min_{v_i \in V} \left\{ \sqrt{\alpha d_i^2 + (1-\alpha) \sum_{v_j \sim v_i} d_j} \right\} - \delta \geq \min_{v_i \in V} \left\{ \sqrt{\alpha d_i^2 + (1-\alpha)\delta d_i} \right\} - \delta =$$
$$\min_{v_i \in V} \left\{ \sqrt{\alpha d_i^2 + \delta d_i - \alpha \delta d_i} \right\} - \delta = \min_{v_i \in V} \left\{ \sqrt{\alpha d_i (d_i - \delta) + \delta d_i} \right\} - \delta.$$

Como $d_i \geq \delta$ temos que

$$\min_{v_i \in V} \left\{ \sqrt{\alpha d_i(d_i - \delta) + \delta d_i} \right\} - \delta \geq \min_{v_i \in V} \left\{ \sqrt{\delta d_i} \right\} - \delta = 0,$$

concluindo assim o resultado. □

Proposição V.2.4. *Sejam G um grafo conexo de ordem n, com grau médio do vértice v_i dado por por m_i, $i \in \{1, \ldots, n\}$ e $\alpha \in [0, 1)$. Então, a cota do Teorema II.4.9 é melhor que a cota do Teorema II.4.47.*

Demonstração. Consideremos que

$$\mathscr{D} = \min_{v_i \in V} \left\{ \sqrt{\alpha d_i^2 + (1-\alpha) \sum_{v_j \sim v_i} d_j} \right\} \text{ e } \mathscr{C} = \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \frac{-\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4d_i(\alpha d_i + (1-\alpha)m_i + \Delta)}}{2} \right\},$$

que são as cotas dos Teoremas II.4.9 e II.4.47, respectivamente. Queremos mostrar que $\mathscr{D} \geq \mathscr{C}$. Efetuando algumas manipulações algébricas, temos

$$\begin{aligned}
\mathscr{C} &= \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \frac{-\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4d_i(\alpha d_i + (1-\alpha)m_i + \Delta)}}{2} \right\} \\
&= \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \frac{-\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4(\alpha d_i^2 + (1-\alpha) \sum_{v_j \sim v_i} d_j) + 4d_i\Delta)}}{2} \right\} \\
&= \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \frac{-\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\mathscr{D}^2 + 4d_i\Delta)}}{2} \right\} \\
&= \min_{1 \leq i \leq n} \left\{ \frac{-\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 4\mathscr{D}\Delta + 4\mathscr{D}^2 + 4d_i\Delta - 4\mathscr{D}\Delta)}}{2} \right\} \\
&= \frac{-\Delta + \sqrt{(\Delta + 2\mathscr{D})^2 - 4\Delta(\mathscr{D} - \delta)}}{2}.
\end{aligned}$$

Pelo Lema V.2.3 temos que $\mathscr{D} - \delta \geq 0$ e portanto

$$\frac{-\Delta + \sqrt{(\Delta + 2\mathscr{D})^2 - 4\Delta(\mathscr{D} - \delta)}}{2} \geq \frac{-\Delta + \sqrt{(\Delta + 2\mathscr{D})^2}}{2} = \frac{-\Delta + \Delta + 2\mathscr{D}}{2} = \mathscr{D},$$

obtendo o resultado, □

Na análise computacional realizada, observamos que em todos os testes a cota do Teorema IV.1.3 produz resultados iguais ou superiores à cota do Teorema II.4.9. Na Figura V.5, apresentamos

gráficos que mostram a diferença entre essas cotas para diversas famílias de grafos, com variações no número de vértices em cada uma delas. Com base nesses dados, propomos a seguinte conjectura:

Conjectura 2. *Sejam G um grafo com $m \neq 0$ arestas, $n \geq 3$ vértices, Δ e δ o maior e o menor grau dos vértices, respectivamente e $\alpha \in [0, 1]$. Então, a cota do Teorema IV.1.3 é maior ou igual do que a cota do Teorema II.4.9.*

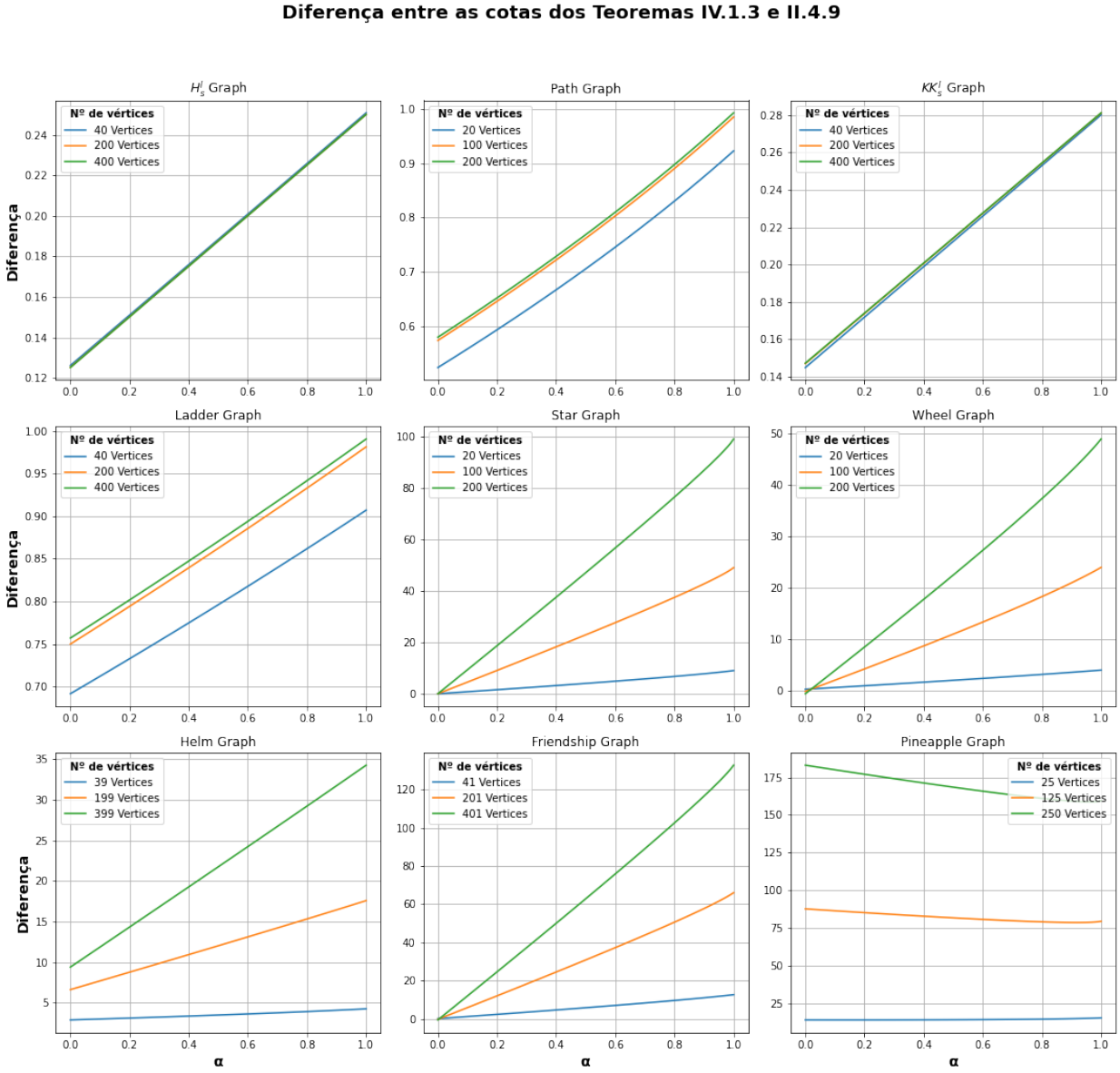


Figura V.5: Diferença entre cotas dos Teoremas IV.1.3 e II.4.9 em diferentes famílias de grafos, para diferentes valores de n e α.

Também observamos em todos os testes computacionais que a cota do Teorema IV.1.7 produziu resultados iguais ou superiores à cota do Teorema II.4.59. Na Figura V.6, são apresentados gráficos que mostram a diferença entre essas cotas para diversas famílias de grafos, variando o valor de n e α.

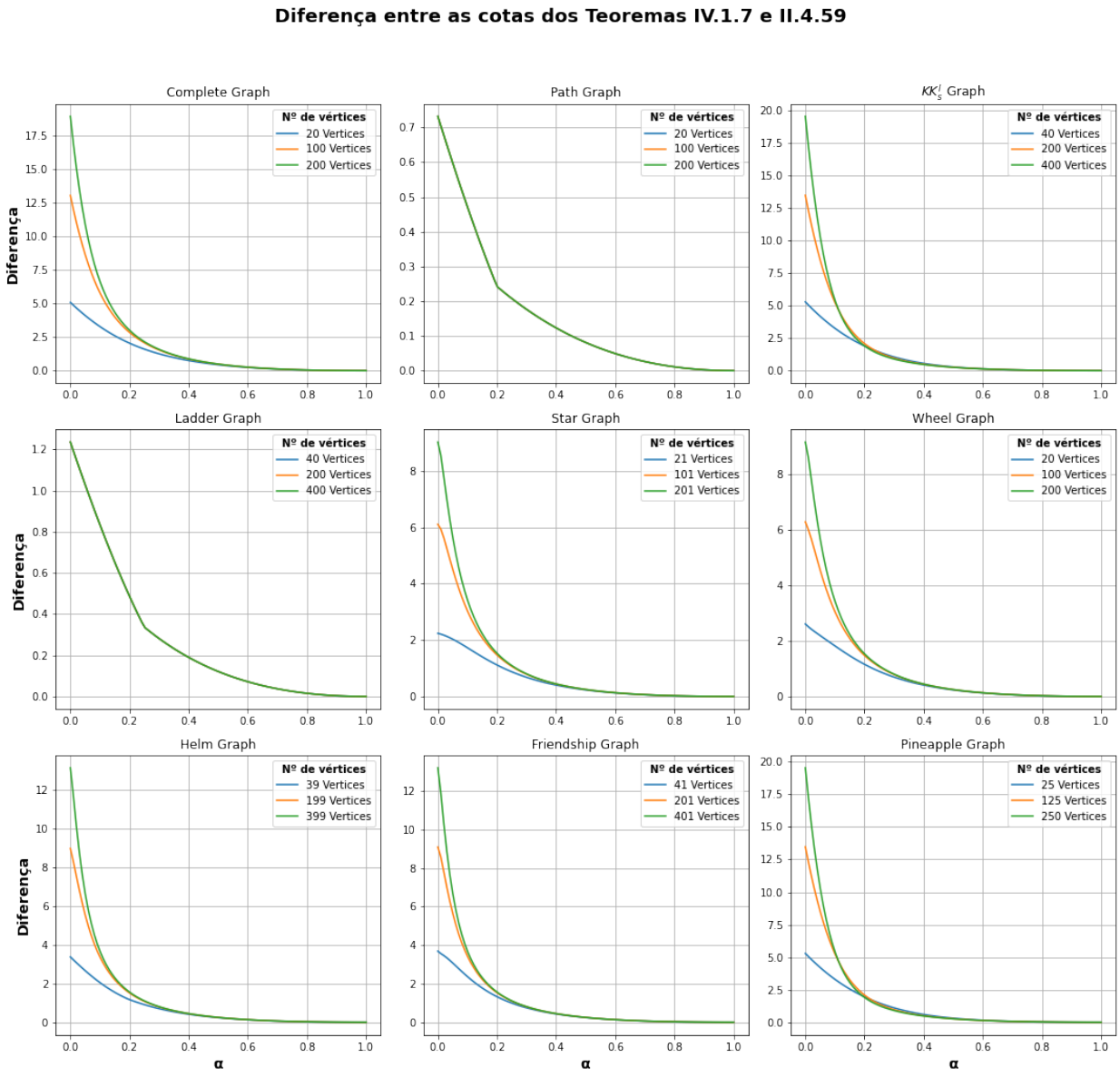


Figura V.6: Diferença entre cotas dos Teoremas IV.1.7 e II.4.59 em diferentes famílias de grafos, para diferentes valores de n e α.

Com base nesses resultados, propomos a seguinte conjectura:

Conjectura 3. *Sejam G um grafo com $n \geq 2$ vértices e $\alpha \in [0, 1]$. Então a cota do Teorema IV.1.7 é maior ou igual a cota do Teorema II.4.59*

V.2.2 Cotas superiores

Nesta subseção são comparadas as cotas dos Teoremas IV.1.9, IV.1.11, II.4.22, II.4.33 e II.4.55 e do Corolário II.4.34. Iniciamos com a Proposição V.2.5 que garante a igualdade de três cotas quando $\delta = 1$.

Proposição V.2.5. *Sejam G um grafo com n vértices, $m \neq 0$ arestas, grau máximo Δ, grau mínimo $\delta = 1$ e $\alpha \in [0, 1)$. Então as cotas presentes nos Teoremas IV.1.9, IV.1.11 e II.4.22 são iguais.*

Demonstração. Pela Proposição V.1.2 garantimos que as cotas dos Teoremas IV.1.9, IV.1.11 são iguais. Assim basta verificarmos que obtemos a mesma a cota para o Teorema II.4.22 quando substituímos $\delta = 1$. Assim, ao fazer a substituição obtemos

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \sqrt{\alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(2m - n + 1)},$$

concluindo o resultado. □

A Proposição V.2.6 garante a igualdade entre duas outras cotas quando $\delta = 1$.

Proposição V.2.6. *Sejam G um grafo de ordem n com m arrestas, grau máximo Δ, grau mínimo $\delta = 1$ e $\alpha \in [0, 1)$. Então as cotas do Teoremas II.4.55 e do Corolário II.4.34 são iguais.*

Demonstração. Substituindo inicialmente $\delta = 1$ na cota do Corolário II.4.34, obtemos

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) \leq \frac{\alpha\Delta + \sqrt{\alpha^2\Delta^2 + 4(1-\alpha)(2m - n + 1)}}{2}.$$

Por outro lado, ao substituir $\delta = 1$ na cota do Teoremas II.4.55 obtemos o mesmo resultado, concluíndo o resultado. □

Observação V.2.7. *É importante destacar que as cotas dos Teoremas IV.1.9, IV.1.11, II.4.22, II.4.55 e do Corolário II.4.34 representam a mesma cota para a matriz de adjacência quando $\delta = 1$, ou seja, $\lambda_1(A(G)) \leq \sqrt{2m - n + 1}$. A referida cota superior para $\lambda_1(A(G))$ foi obtida por Yuan [1988].*

Para darmos continuidade a análise do comportamento das cotas dos Teoremas IV.1.9, IV.1.11, II.4.22, II.4.33 e II.4.55, além do Corolário II.4.34 optamos por escolher um grafo que não tenha $\delta = 1$ e que não seja extremal dessas cotas. Sendo assim escolhemos o grafo KK_s^l, cujo valor de l é 60% do valor de s. O valor de 60% foi escolhido aleatoriamente, mantendo a proporção com o aumento no número de vértices.

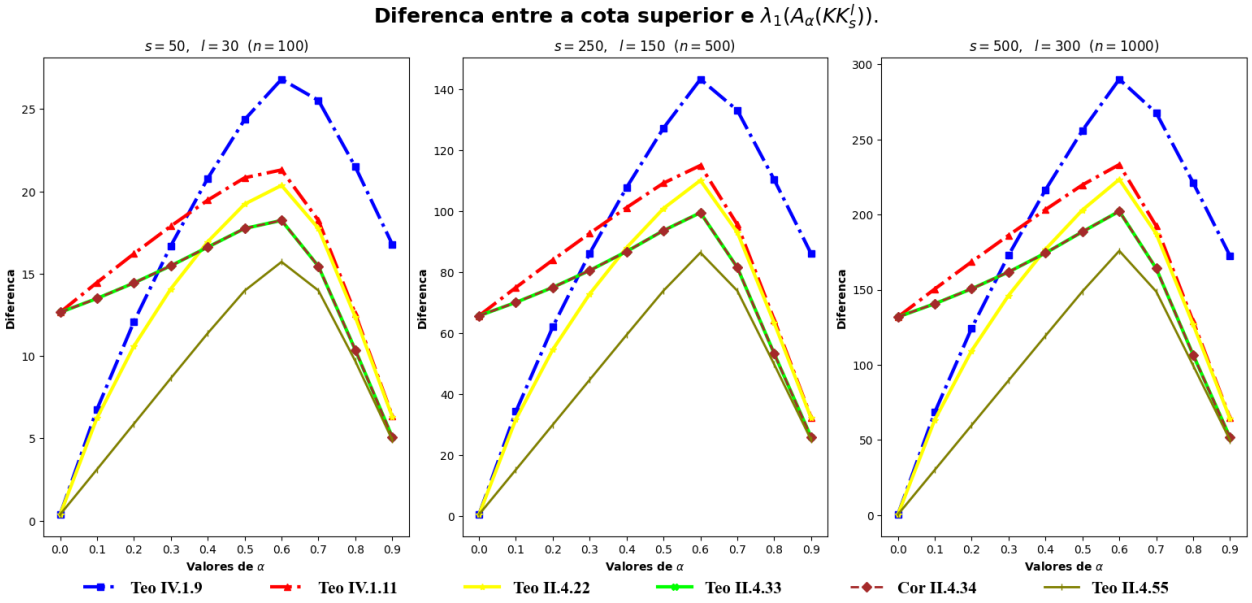


Figura V.7: Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(KK_s^l))$ para crescentes valores de n e de α.

Na Figura V.7, podemos observar que a cota do Teorema II.4.55 é melhor do que as demais e que a cota do Teorema II.4.22 é melhor que as cotas dos Teoremas IV.1.9 e IV.1.11. Além disso, podemos concluir que a cota do Teorema II.4.22 é incomparável com as cotas do Teorema II.4.33 e do Corolário II.4.34. O mesmo tipo de argumento é possível utilizar para a cota do Teorema IV.1.9 com a cota do Teorema II.4.33 e do Corolário II.4.34, afinal os gráficos correspondentes também se interceptam. Vale destacar também que a cota do Teorema II.4.33 e do Corolário II.4.34 é melhor que a cota do Teorema IV.1.11.

Dando prosseguimento às análises, foi escolhido o grafo L_n pela necessidade de evidenciar uma família de grafos cujos resultados fossem diferentes dos resultados obtidos para o grafo KK_s^l. Na Figura V.8 é notória que a cota do Teorema II.4.33 é a melhor dentre todas as cotas e se observarmos as Figuras V.7 e V.8 podemos concluir que as cotas dos Teoremas II.4.33 e II.4.55 são incomparáveis. O mesmo acontece com as cotas do Corolário II.4.34 e do Teorema II.4.55.

Seguindo com a análise da Figura V.8, temos que a cota do Teorema IV.1.11 é melhor que a cota dos Teoremas II.4.22 e II.4.55 e do Corolário II.4.34 e observando novamente as Figuras V.7 e V.8 concluímos que estas últimas são incomparáveis com a primeira. Ao prosseguir com as comparações, analisando a Figura V.8, observa-se que a cota do Teorema IV.1.9 supera a do Teorema II.4.55 para os maiores valores de n, enquanto seus gráficos interceptam o da cota do Corolário II.4.34, tornando difícil determinar qual cota é a melhor. Portanto, a cota do Teorema IV.1.9 é incomparável com as cotas do Teorema II.4.55 e do Corolário II.4.34.

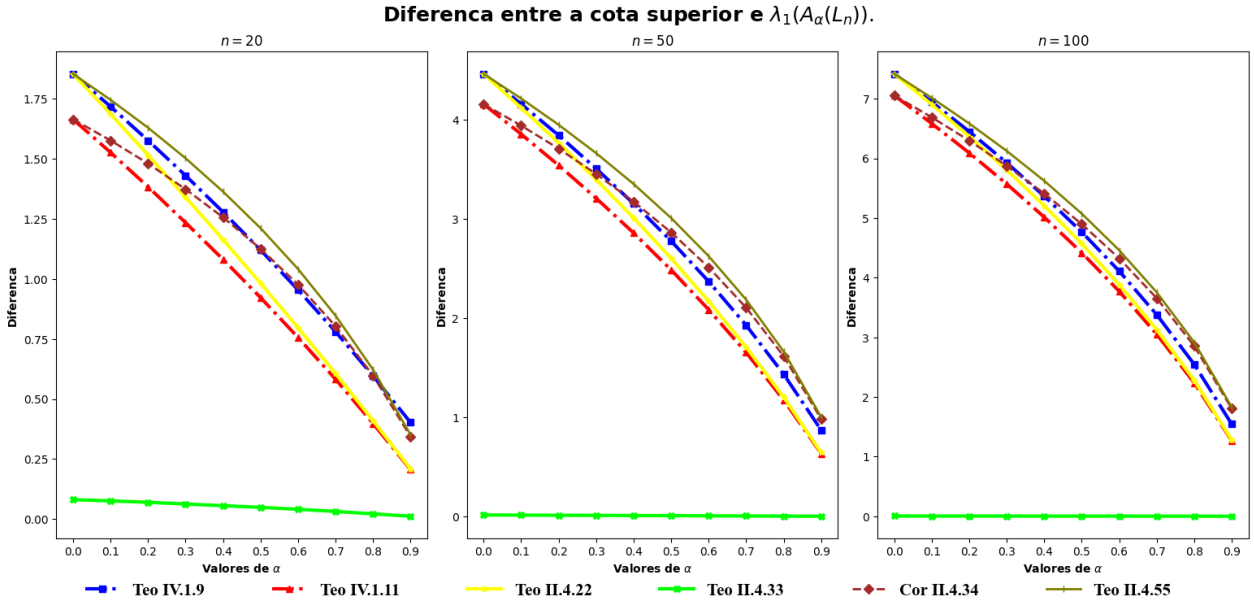


Figura V.8: Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(L_n))$ para crescentes valores de n e de α.

Após alguns testes computacionais envolvendo as cotas dos Teoremas II.4.33 e IV.1.11 foi possivel obter o seguinte resultado.

Proposição V.2.8. *Sejam G um grafo com n vértices, $m \neq 0$ arestas, Δ seu grau máximo, δ seu grau mínimo e $\alpha \in [0,1)$. Então, a cota do Teoremas II.4.33 é igual ou menor do que a cota do Teorema IV.1.11.*

Demonstração. Consideremos inicialmente a cota do Teorema II.4.33, temos que

$$\mathscr{D} = \max_{v_i \in V(G)} \left\{ \frac{\alpha d_i + \sqrt{\alpha^2 d_i^2 + 4(1-\alpha) d_i m_i}}{2} \right\} = \max_{v_i \in V(G)} \left\{ \frac{\alpha d_i + \sqrt{\alpha^2 d_i^2 + 4(1-\alpha) \sum_{v_j \sim v_i} d_j}}{2} \right\}.$$

Agora, com relação à cota do Teorema IV.1.11, façamos

$$\mathscr{C} = \sqrt{\alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(\Delta(\delta-1) - \delta(n-1) + 2m)}.$$

Logo,

$$\mathscr{C}^2 - \alpha\Delta^2 = (1-\alpha)(\Delta(\delta-1) - \delta(n-1) + 2m).$$

Para mostrar o resultado, precisamos concluir que $\mathscr{D} \leq \mathscr{C}$. Sabemos,

$$\begin{aligned}
\mathscr{D} &= \max_{v_i \in V(G)} \left\{ \frac{\alpha d_i + \sqrt{\alpha^2 d_i^2 + 4(1-\alpha)\left(2m - d_i - \sum\limits_{\substack{v_i \nsim v_j \\ v_i \neq v_j}} d_j\right)}}{2} \right\} \\
&\leq \max_{v_i \in V(G)} \left\{ \frac{\alpha d_i + \sqrt{\alpha^2 d_i^2 + 4(1-\alpha)\left(2m - d_i - (n - d_i - 1)\delta\right)}}{2} \right\} \\
&= \max_{v_i \in V(G)} \left\{ \frac{\alpha d_i + \sqrt{\alpha^2 d_i^2 + 4(1-\alpha)\left(2m + d_i(\delta - 1) - \delta(n-1)\right)}}{2} \right\} \\
&= \frac{\alpha\Delta + \sqrt{\alpha^2\Delta^2 + 4\mathscr{C}^2 - 4\alpha\Delta^2}}{2} = \frac{\alpha\Delta + \sqrt{\Delta^2(\alpha^2 - 4\alpha + 4) + 4\mathscr{C}^2 - 4\Delta^2}}{2} \\
&\leq \frac{\alpha\Delta + \sqrt{\Delta^2(\alpha-2)^2 + 4\mathscr{C}^2}}{2} \leq \frac{\alpha\Delta + \sqrt{\Delta^2(\alpha-2)^2} + \sqrt{4\mathscr{C}^2}}{2} \\
&= \frac{\alpha\Delta + \Delta(\alpha - 2) + 2\mathscr{C}}{2} = \alpha\Delta - \Delta + \mathscr{C} \leq \mathscr{C},
\end{aligned}$$

concluindo assim o resultado. □

Observando os resuldados de diversos testes computacionais, percebemos que os valores resultantes da cota do Teorema II.4.22 eram sempre menores do que os valores obtidos pela cota do Teorema IV.1.9. Para provar esse fato, precisamos inicialmente do lema a seguir.

Lema V.2.9. *Sejam G um grafo com n vértices, $m \neq 0$ arestas, grau máximo Δ e grau mínimo δ, tais que $\Delta > \delta$, e $\alpha \in [0,1]$. Então,*

$$\frac{\delta - 1 + \sqrt{(\delta-1)^2 + 4(\alpha\Delta^2 - \alpha(\delta-1)\delta + (1-\alpha)(2m - \delta(n-1))}}{2} - \delta \geq 0.$$

Demonstração. Sabemos que

$$\begin{aligned}
&\frac{\delta - 1 + \sqrt{(\delta-1)^2 + 4(\alpha\Delta^2 - \alpha(\delta-1)\delta + (1-\alpha)(2m - \delta(n-1))}}{2} - \delta = \\
&\frac{-(\delta+1) + \sqrt{(\delta-1)^2 + 4(\alpha\Delta^2 - \alpha\delta^2 + \alpha\delta + 2m(1-\alpha) + (-\delta + \alpha\delta)(n-1))}}{2} = \\
&\frac{-(\delta+1) + \sqrt{(\delta-1)^2 + 4(\alpha\Delta^2 - \alpha\delta^2 + \alpha\delta + 2m(1-\alpha) + -\delta n + \delta + n\alpha\delta - \alpha\delta)}}{2} = \\
&\frac{-(\delta+1) + \sqrt{(\delta-1)^2 + 4(\alpha(\Delta^2 - \delta^2) + 2m(1-\alpha) - \delta n(1-\alpha)) + 4\delta}}{2} = \\
&\frac{-(\delta+1) + \sqrt{(\delta+1)^2 + 4(\alpha(\Delta^2 - \delta^2) + (1-\alpha)(2m - \delta n))}}{2} \geq 0,
\end{aligned}$$

pois como $2m - \delta n \geq 0$ e $\Delta^2 - \delta^2 \geq 0$ segue que $\sqrt{(\delta+1)^2 + 4(\alpha(\Delta^2 - \delta^2) + (1-\alpha)(2m - \delta n))} \geq \delta + 1$, concluindo assim o resultado. □

Proposição V.2.10. *Sejam G um grafo com n vértices, $m \neq 0$ arestas, grau máximo Δ e grau mínimo δ, tais que $\Delta > \delta$, e $\alpha \in [0,1]$. Então a cota do Teorema II.4.22 é melhor do que a cota do Teorema IV.1.9.*

Demonstração. Chamemos inicialmente a cota do Teorema II.4.22 por $\mathscr{C}$, ou seja,

$$\mathscr{C} = \frac{(1-\alpha)(\delta-1) + \sqrt{(1-\alpha)^2(\delta-1)^2 + 4(\alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(2m - (n-1)\delta))}}{2} \tag{V.2}$$

e a cota do Teorema IV.1.9 por $\mathscr{D}$, ou seja,

$$\mathscr{D} = \frac{\delta - 1 + \sqrt{(\delta-1)^2 + 4(\alpha\Delta^2 - \alpha(\delta-1)\delta + (1-\alpha)(2m - \delta(n-1))}}{2}. \tag{V.3}$$

Reescrevendo a Igualdade (V.3), temos

$$(2\mathscr{D} - (\delta-1))^2 + 4\alpha\delta(\delta-1) = (\delta-1)^2 + 4(\alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(2m - \delta(n-1))). \tag{V.4}$$

Substituindo (V.4) em (V.2) obtemos

$$\begin{aligned}
&\frac{(1-\alpha)(\delta-1) + \sqrt{-2\alpha(\delta-1)^2 + \alpha^2(\delta-1)^2 + (2\mathscr{D} - (\delta-1))^2 + 4\alpha\delta(\delta-1)}}{2} = \\
&\frac{(1-\alpha)(\delta-1) + \sqrt{-2\alpha(\delta-1)^2 + \alpha^2(\delta-1)^2 + 4\mathscr{D}^2 - 4\mathscr{D}(\delta-1) + (\delta-1)^2 + 4\alpha\delta(\delta-1)}}{2} = \\
&\frac{(1-\alpha)(\delta-1) + \sqrt{(1-\alpha)^2(\delta-1)^2 + 4\mathscr{D}^2 - 4\mathscr{D}(\delta-1) + 4\alpha\delta(\delta-1)}}{2} = \\
&\frac{(1-\alpha)(\delta-1) + \sqrt{(2\mathscr{D} - (1-\alpha)(\delta-1))^2 - 4\mathscr{D}(\delta-1) + 4\alpha\delta(\delta-1) + 4\mathscr{D}(1-\alpha)(\delta-1)}}{2} = \\
&\frac{(1-\alpha)(\delta-1) + \sqrt{(2\mathscr{D} - (1-\alpha)(\delta-1))^2 - 4\alpha(\delta-1)(\mathscr{D} - \delta)}}{2}.
\end{aligned}$$

Pelo Lema V.2.9, temos que $\mathscr{D} - \delta \geq 0$, portanto

$$\begin{aligned}
&\frac{(1-\alpha)(\delta-1) + \sqrt{(2\mathscr{D} - (1-\alpha)(\delta-1))^2 - 4\alpha(\delta-1)(\mathscr{D} - \delta)}}{2} \leq \\
&\frac{(1-\alpha)(\delta-1) + \sqrt{(2\mathscr{D} - (1-\alpha)(\delta-1))^2}}{2} = \\
&\frac{(1-\alpha)(\delta-1) + 2\mathscr{D} - (1-\alpha)(\delta-1)}{2} = \mathscr{D},
\end{aligned}$$

concluíndo assim o resultado. □

A Figura V.9 diz respeito à comparação das cotas dos Teoremas IV.1.8, II.4.33, II.4.55 e Corolário II.4.34 considerando o grafo $K_{1,n-1}$. Analisando os respectivos gráficos torna-se evidente a impossibilidade de comparar a cota do Teorema IV.1.8 com as demais. Cabe destacar que para este grafo, há de fato uma igualdade entre as cotas dos Teoremas II.4.33 e II.4.55 e do Corolário II.4.34. A igualdade dos dois últimos vem da Proposição V.2.6, enquanto que para a cota do Teorema II.4.33 basta utilizar as informações do grafo estrela considerando v_i o vértice de grau máximo, uma vez que o máximo para esta cota é atingido nesse vértice, como podemos observar na proposição a seguir.

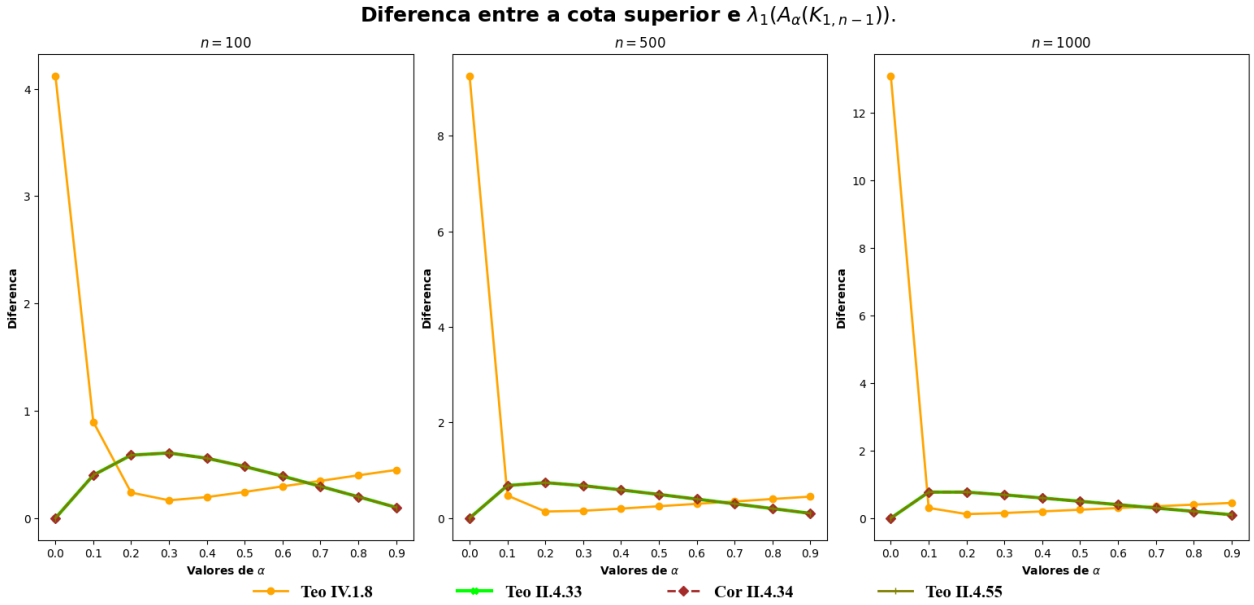


Figura V.9: Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(K_{1,n-1}))$ para crescentes valores de n e de α.

Proposição V.2.11. *Sejam G um grafo conexo de ordem n e tamanho m com grau máximo $\Delta = n-1$ e grau mínimo $\delta = 1$ e $\alpha \in [0,1)$. Se o máximo da cota do Teorema II.4.33 ocorrer num vértice $v_i \in V(G)$, de grau máximo, então as cotas dos Teoremas II.4.33 e II.4.55 são iguais.*

Demonstração. De fato, substituondo as informações dadas na cota do Teorema II.4.55 obtemos

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

Por outro lado, ao substituirmos na cota do Teorema II.4.33, obtemos

$$\frac{\alpha(n-1)+\sqrt{\alpha^2(n-1)^2+4(1-\alpha)\sum_{v_j\sim v_i} d_j}}{2} = \frac{\alpha(n-1)+\sqrt{\alpha^2(n-1)^2+4(1-\alpha)\left(\sum_{v_i\in V(G)} d_i - n + 1\right)}}{2}$$
$$= \frac{\alpha(n-1)+\sqrt{\alpha^2(n-1)^2+4(1-\alpha)(2m-n+1)}}{2}.$$

Obtendo assim o resultado. □

Como a cota do Teorema II.4.22 não foi incluída nos testes feitos anteriormente, vamos utilizar novamente o grafo $K_{1,n-1}$ para evidenciar a variação das cotas presentes nesse teorema e no Teorema IV.1.8. Os gráficos presentes na Figura V.10 mostram que esta segunda cota é significativamente melhor em quase todo o intervalo de variação de α. Esse fato as torna incomparáveis, o que é reforçado quando se tem em atenção que a cota do Teorema II.4.22 admite o grafo regular como extremal.

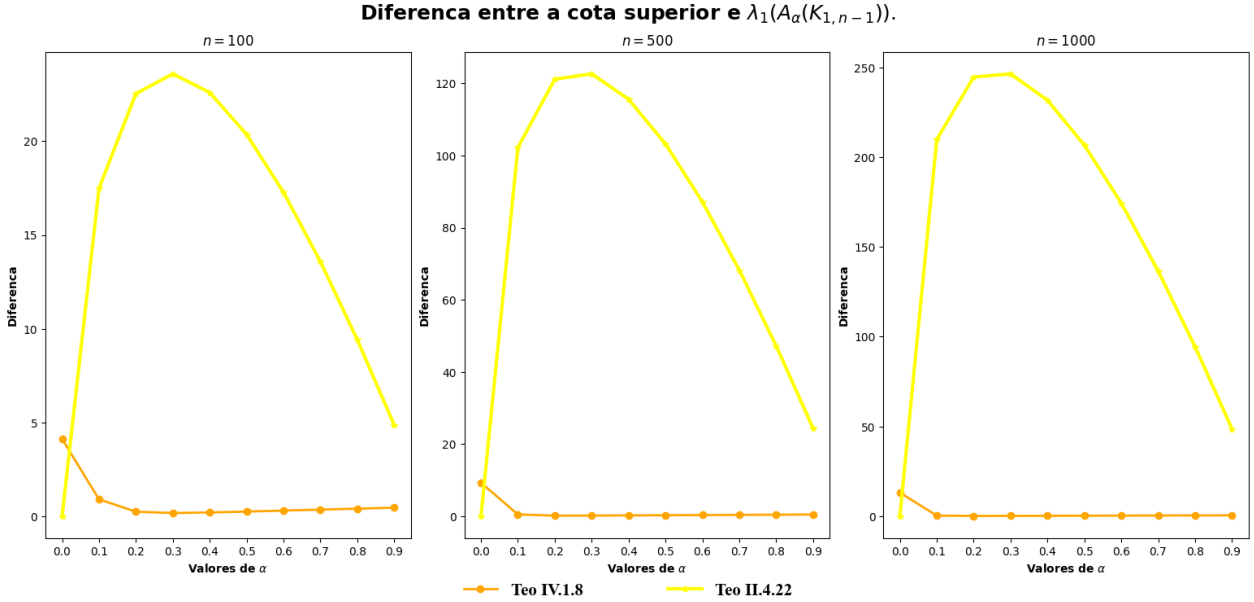


Figura V.10: Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(K_{1,n-1}))$ para crescentes valores de n e de α.

Ao considerar as outras cotas superiores selecionadas para comparação, especificamente as cotas dos Teoremas II.4.9, II.4.28, II.4.36, II.4.46 e II.4.57, podemos observar na Figura V.11 que a cota estabelecida pelo Teorema II.4.57 se destaca como a melhor. Tal fato é devido a que W_n é um dos grafos extremais dessa cota. No entanto, destaca-se a dificuldade em determinar qual é a melhor cota. Apesar das cotas dos Teoremas II.4.28 e II.4.36 terem, para n grande e α próximo de 1, um comportamento semelhante e próximo dos valores da cota do Teorema II.4.57, concluímos que a cota estabelecida pelo Teorema IV.1.8 é incomparável com as restantes, acontecendo o mesmo com a cota apresentada pelo Teorema IV.1.9.

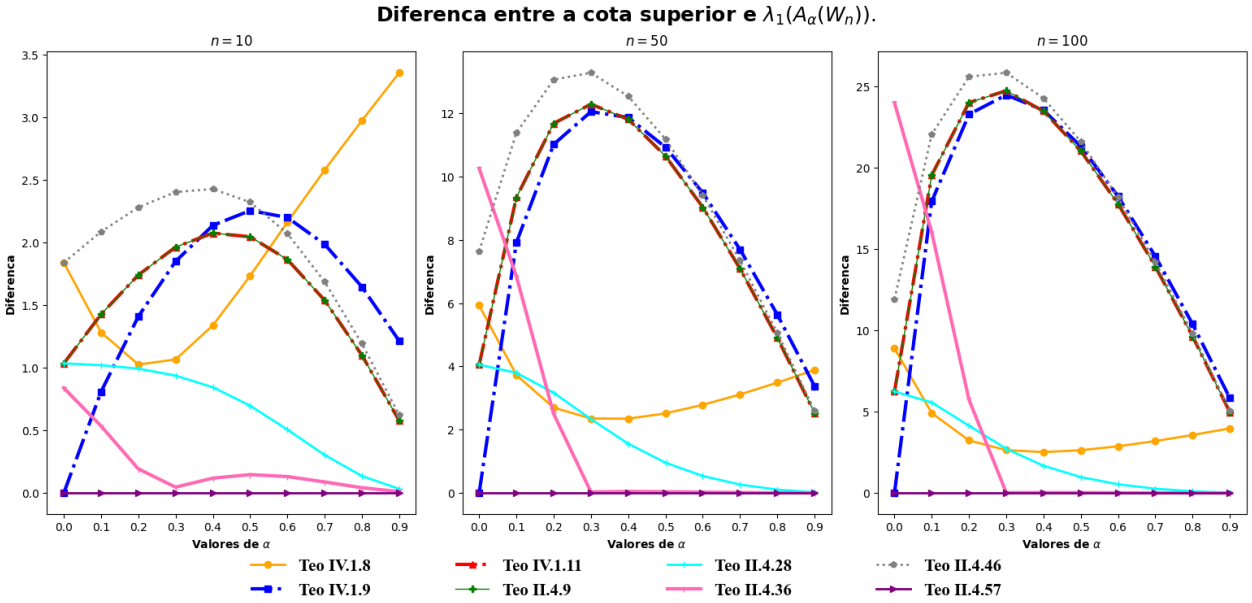


Figura V.11: Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(W_n))$ para crescentes valores de n e de α.

Considerando os gráficos apresentados na Figura V.11, pode-se observar que a cota estabelecida pelo Teorema IV.1.11 em relação a essa família W_n, é incomparável com a cota do Teoremas IV.1.8, IV.1.9, II.4.36, sendo apenas superior à cota do Teorema II.4.46, igual à cota do Teorema II.4.9 e inferior as outras restantes. A partir desses testes temos a Observação V.2.12.

Observação V.2.12. *As cotas dos Teoremas II.4.9 e IV.1.11 são de fato iguais para a família de grafos W_n, pois ao substituir $\Delta = n-1$, $m = 2n-2$ e $\delta = 3$ na inequação* (IV.17)*, obtemos*

$$\lambda_1(A_\alpha(W_n)) \leq \sqrt{\alpha(n-1)^2 + (1-\alpha)(3n-3)}.$$

Por outro lado, o máximo da cota do Teorema II.4.9 é obtido no vértice v_i cujo grau é $n-1$. Assim,

$$\lambda_1(A_\alpha(W_n)) \leq \max_{v_i \in V} \left\{ \sqrt{\alpha d^2(v_i) + (1-\alpha) \sum_{v_j \sim v_i} d(v_j)} \right\} = \sqrt{\alpha(n-1)^2 + (1-\alpha)(3n-3)}.$$

Prosseguindo o estudo, visando esclarecer alguns pontos, escolhemos o grafo KK_s^l, cujo valor de l é 60% do valor de s. O valor de 60% foi escolhido aleatoriamente, mantendo proporção com o aumento no número de vértices.

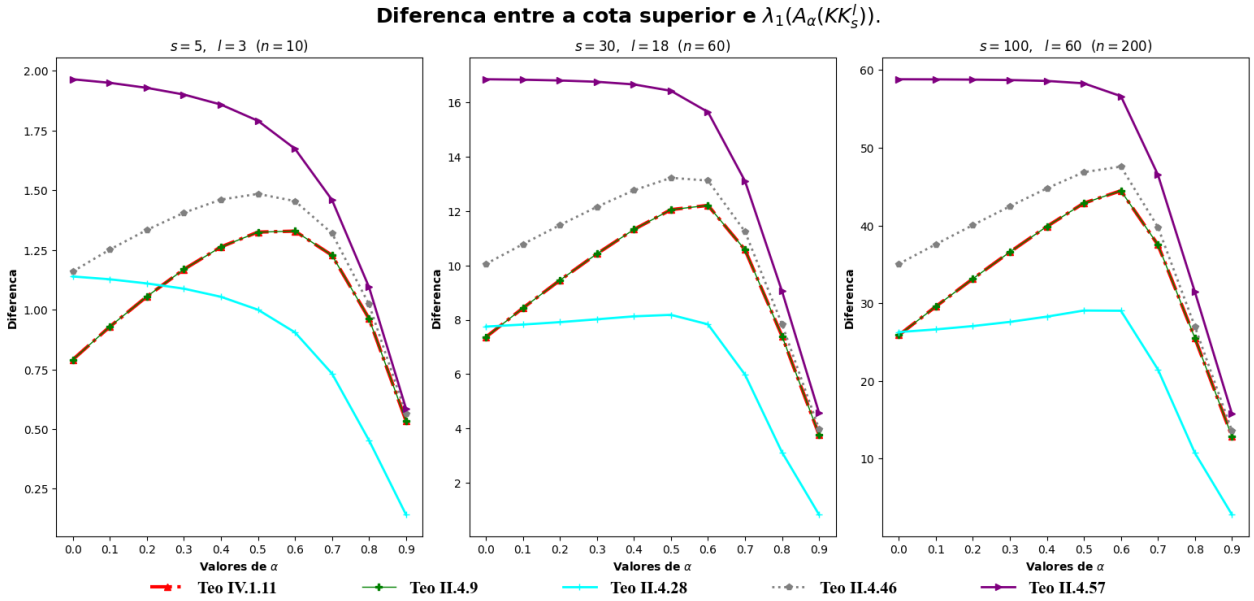


Figura V.12: Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(KK_s^l))$ para crescentes valores de n e de α.

Nos gráficos da Figura V.12, observamos que a cota do Teorema IV.1.11 é superior à cota do Teorema II.4.57. Como W_n é o grafo extremal da cota do Teorema II.4.57 concluímos que as referidas cotas são incomparáveis. Por outro lado, como os gráficos da cota do Teorema II.4.28 e da cota do Teorema IV.1.11 se interceptam, podemos concluir que essas cotas são incomparáveis. Além disso, são incomparáveis com a cota do Teorema II.4.57, as cotas dos Teoremas II.4.9, II.4.28 e II.4.46.

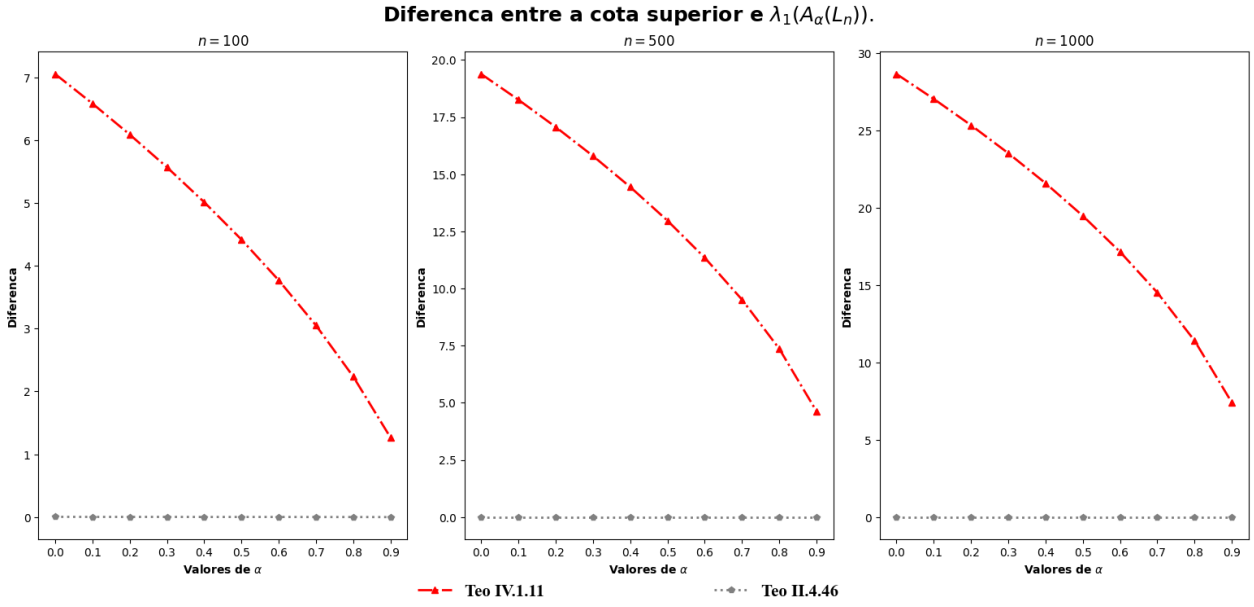


Figura V.13: Diferença entre as cotas superiores e $\lambda_1(A_\alpha(L_n))$ para crescentes valores de n e de α.

Na Figura V.13, são apresentados os gráficos das cotas referentes aos Teoremas II.4.46 e IV.1.11, quando se considera o grafo escada e podemos concluir que a cota do primeiro teorema supera a do

segundo teorema. Além disso, observando as Figuras V.12 e V.13 conclui-se a incomparabilidade entre elas.

Após alguns testes computacionais envolvendo as cotas dos Teoremas II.4.9 e IV.1.11 foi possivel estabelecer o seguinte resultado.

Proposição V.2.13. *Sejam G um grafo com n vértices, $m \neq 0$ arestas, Δ seu grau máximo, δ seu grau mínimo e $\alpha \in [0,1]$. Então, a cota do Teoremas II.4.9 é igual ou menor do que a cota do Teorema IV.1.11. Além disso, se a igualdade das cotas dos referidos teoremas ocorrer, então o máximo da cota do Teoremas II.4.9 é alcançado quando $d_i = \Delta$.*

Demonstração. Considerando a cota do Teorema IV.1.11, façamos

$$\mathscr{C} = \sqrt{\alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(\Delta(\delta-1) - \delta(n-1) + 2m)}.$$

Daí temos

$$\mathscr{C}^2 - \alpha\Delta^2 = (1-\alpha)(\Delta(\delta-1) - \delta(n-1) + 2m).$$

Agora, tomemos a cota do Teorema II.4.9 e fazendo algumas manipulações algébricas, temos

$$\begin{aligned}
\max_{v_i \in V(G)} \left\{ \sqrt{\alpha d_i^2 + (1-\alpha) \sum_{v_j \sim v_i} d_j} \right\} &= \max_{v_i \in V(G)} \left\{ \sqrt{\alpha d_i^2 + (1-\alpha) \left(2m - d_i - \sum_{\substack{v_i \nsim v_j \\ v_i \neq v_j}} d_j \right)} \right\} \\
&\leq \max_{v_i \in V(G)} \left\{ \sqrt{\alpha d_i^2 + (1-\alpha)\left(2m - d_i - (n - d_i - 1)\delta\right)} \right\} \\
&= \max_{v_i \in V(G)} \left\{ \sqrt{\alpha d_i^2 + (1-\alpha)\left(2m + d_i(\delta-1) - \delta(n-1)\right)} \right\} \\
&= \sqrt{\alpha\Delta^2 + (1-\alpha)\left(2m + \Delta(\delta-1) - \delta(n-1)\right)} \\
&= \sqrt{\alpha\Delta^2 + \mathscr{C}^2 - \alpha\Delta^2} = \mathscr{C},
\end{aligned}$$

obtendo o resultado. Suponha agora que

$$\max_{v_i \in V(G)} \left\{ \sqrt{\alpha d_i^2 + (1-\alpha) \sum_{v_j \sim v_i} d_j} \right\} = \sqrt{\alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(\Delta(\delta-1) - \delta(n-1) + 2m)}$$

e que $\max\limits_{v_i \in V(G)} \left\{ \sqrt{\alpha d_i^2 + (1-\alpha) \sum\limits_{v_j \sim v_i} d_j} \right\}$ seja atingido no vértice $v_i \in V(G)$. Assim, temos que

$$\alpha\Delta^2 + (1-\alpha)(\Delta(\delta-1) - \delta(n-1) + 2m) = \alpha d_i^2 + (1-\alpha) \sum_{v_j \sim v_i} d_j$$

para todo $\alpha \in [0,1]$. Considerando ambos os membros da igualdade anterior como polinômios em

α e levando em conta a igualdade de polinômios, temos que

$$\Delta^2 - d_i^2 - \sum_{v_j \sim v_i} d_j + \Delta(\delta - 1) - \delta(n-1) + 2m = 0 \tag{V.5}$$

e

$$\Delta(\delta - 1) - \delta(n-1) + 2m - \sum_{v_j \sim v_i} d_j = 0. \tag{V.6}$$

Segue da equação (V.6) que

$$\Delta(\delta - 1) - \delta(n-1) + \sum_{v_j \nsim v_i} d_j + d_i = 0.$$

Como $\sum_{v_j \nsim v_i} d_j \geq \delta(n - 1 - d_i)$ e substituindo na igualdade anterior, temos

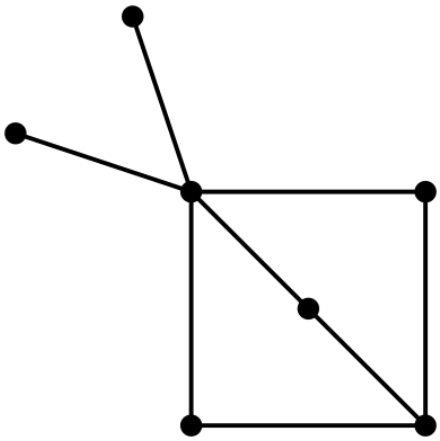
$$0 \geq \Delta(\delta - 1) - \delta(n-1) + \delta(n - 1 - d_i) + d_i.$$

Após algumas manipulações algébricas, obtemos

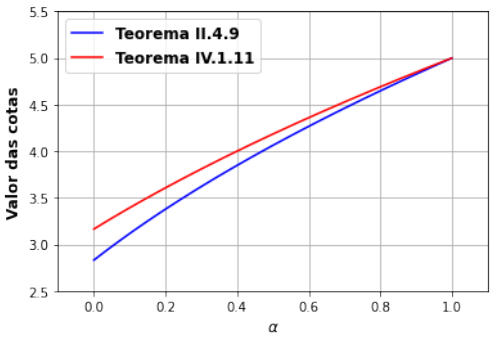
$$0 \geq (\delta - 1)(\Delta - d_i)$$

Como $\delta \geq 1$ e $\Delta \geq d_i$, devemos obrigatoriamente ter que $(\delta - 1)(\Delta - d_i) = 0$. Portanto, isso implica que $\delta = 1$ ou $d_i = \Delta$. Para que as duas Equações, (V.5) e (V.6), sejam satisfeitas precisamos ter $d_i = \Delta$, concluindo assim o resultado. □

Observação V.2.14. *É importante ressaltar que a igualdade na Proposição V.2.13 não se verifica sob o seguinte enunciado: se o máximo da cota do Teorema II.4.9 é alcançado quando $d_i = \Delta$, então a igualdade das cotas dos Teoremas II.4.9 e IV.1.11 ocorre. Um exemplo que ilustra essa situação é apresentado abaixo. Ao substituirmos as informações do grafo exibido na Figura V.14a nas cotas dos Teoremas II.4.9 e IV.1.11, obtemos as respectivas funções em α dadas por $\sqrt{17\alpha + 8}$ e $\sqrt{15\alpha + 10}$.*



(a) Exemplo ilustrativo da não reciprocidade da igualdade na Proposição V.2.13.



(b) Gráfico das cotas para o grafo da Figura V.14a, referidas na Proposição V.2.13.

Figura V.14: Contraexemplo para a Proposição V.2.13 sobre a igualdade das cotas.

É importante ressaltar que caso o máximo da cota dos Teoremas II.4.9 ocorra em um vértice v_i*, tal que* $d_i = \Delta = n - 1$*, temos a igualdade das duas cotas.*

Capítulo VI Resultados da matriz A_α para grafos linha

Neste capítulo apresentamos alguns resultados sobre a matriz A_α de um grafo linha. Iniciamos, na Seção VI.1 com um breve apanhado histórico sobre a evolução do estudo dos grafos linha, adaptado do livro escrito por Beineke e Bagga [2021]. Na Seção VI.2 apresentamos alguns resultados sobre cotas para os autovalores da matriz A_α de um grafo linha.

VI.1 Um pouco de história

A Teoria dos Grafos tem evoluído desde o livro fundamental de König [1936] até os inúmeros volumes disponíveis atualmente, abrangendo tanto obras gerais quanto especializadas. Nesse contexto, uma área de relevância é a dos grafos linha. É difícil precisar a sua origem exata pois provavelmente a ideia de direcionar o foco de estudo para as arestas de um grafo, em detrimento dos vértices, surgiu em momentos distintos.

Um avanço notável ocorreu em 1880, quando o físico matemático escocês P. G. Tait transformou o problema das quatro cores, originalmente sobre a coloração dos vértices de um grafo, em um problema equivalente de colorir as arestas de um grafo diferente. Esse trabalho pioneiro pode ser encontrado Tait [1880], e representa um marco importante na história da Teoria dos Grafos. Outro avanço significativo na coloração das arestas dos grafos ocorreu no artigo de König [1916], mas pensa-se que foi o trabalho de Hassler Whitney sobre isomorfismos de arestas, publicado nos artigos Whitney [1932] e Whitney [1933], que desempenhou o papel de catalisador para o estudo de grafos linha, conforme conhecemos hoje.

Até onde se sabe, um artigo posterior sobre grafos linha foi escrito em húngaro e surgiu uma década depois, em 1943. O autor, Krausz [1943], incluiu uma caracterização dos grafos que são grafos linha, sendo esta sua única publicação conhecida. Um período ainda mais longo se passou antes de outro marco, quando Harary e Norman [1960] apresentaram os dígrafos linha. Nessa época, a Teoria dos Grafos já havia se consolidado como um campo independente de pesquisa, despertando interesse nos grafos linha e nos dígrafos linha. Dentre os marcos dessa jornada, destacam-se os seguintes: a primeira dissertação de doutorado sobre grafos linha da qual se tem conhecimento foi a de Chartrand [1964] na Universidade Estadual de Michigan; o primeiro capítulo em um livro, sobre grafos linha, apareceu em "Graph Theory" de Harary [1969], e o primeiro livro sobre um tópico

ostensivamente relacionado a grafos linha foi "Edge-colourings of Graphs", de Fiorini e Wilson [1977].

Dentre as diversas operações de grafos exploradas pelos matemáticos, o grafo linha destaca-se como uma das mais intrigantes. Retomando aqui a ideia, mas de maneira informal, temos que o grafo linha ($l(G)$) de um grafo G surge ao considerar as arestas desse grafo como os vértices de um novo grafo, estabelecendo uma conexão entre dois desses vértices se as arestas correspondentes em G compartilham um vértice.

VI.2 Cotas para os autovalores da matriz A_α do grafo linha

O estudo da matriz A_α é bem recente e, após uma pesquisa bibliográfica, não foram encontrados, pelo menos até o presente momento, trabalhos que envolvam grafos linha e essa matriz. À vista disto, mesmo que de forma inicial, apresentamos nesta seção alguns resultados sobre alguns autovalores da matrix A_α do grafo linha de um grafo.

Inicialmente apresentamos o espectro da matriz A_α do grafo linha da estrela.

Proposição VI.2.1. *Sejam $G \cong K_{1,n-1}$ e $\alpha \in [0,1]$. Então*

$$\sigma(A_\alpha(l(G))) = \left\{ n-2^{(1)}, (n-1)\alpha - 1^{(n-2)} \right\}.$$

Demonstração. Segue da Observação I.2.5 que $l(G)$ é um grafo completo com $n-1$ vértices, assim pela Proposição II.2.1 o resultado é obtido. □

Agora, apresentamos alguns resultados que dizem respeito às cotas para autovalores da matriz A_α do grafo linha. O primeiro resultado é um lema que decorre diretamente do Teorema I.1.11 e da Proposição I.2.8.

Lema VI.2.2. *Seja G um grafo com n vértices e $m \neq 0$ arestas. Se $e \in E(G)$, então,*

$$\lambda_i(A_\alpha(l(G))) \geq \lambda_i(A_\alpha(l(G-e))) \geq \lambda_{i+1}(A_\alpha(l(G))), \tag{VI.1}$$

$\forall i = 0, \ldots, m-1$ *e* $\alpha \in [0,1]$.

A partir do Teorema I.3.15, foi estabelecida uma cota inferior para o menor autovalor da matriz $A_\alpha(l(G))$, que apresentamos a seguir.

Teorema VI.2.3. *Seja G um grafo com m arestas e $\delta(G)$ o grau mínimo de G. Então,*

$$\lambda_m(A_\alpha(l(G))) \geq 2\alpha\delta(G) - 2 \tag{VI.2}$$

para $\alpha \in [0,1)$.

Demonstração. Seja B a matriz de incidência de G. Segue do Lema I.3.16 e da definição da matriz A_α que

$$(1-\alpha)B^TB = (1-\alpha)A(l(G)) + 2(1-\alpha)I_m = A_\alpha(l(G)) - \alpha D(l(G)) + 2(1-\alpha)I_m. \qquad \text{(VI.3)}$$

Seja $\{w_1, \ldots, w_m\}$ a base ortonormal de autovetores associados aos autovalores do conjunto $\sigma(A_\alpha(l(G)))$ tais que $A_\alpha(l(G))w_i = \lambda_i(A_\alpha(l(G)))w_i, \ \ \forall i = 1, \ldots, m$. Então

$$\begin{aligned}(1-\alpha)w_m^TB^TBw_m &= w_m^TA_\alpha(l(G))w_m + 2(1-\alpha)w_m^Tw_m - \alpha w_m^TD(l(G))w_m \\ &\leq \lambda_m(A_\alpha(l(G))) + 2(1-\alpha) - \alpha\delta(l(G)).\end{aligned}$$

Como B^TB é semidefinida positiva, temos

$$0 \leq w_m^TB^TBw_m \leq \frac{\lambda_m(A_\alpha(l(G))) + 2(1-\alpha) - \alpha\delta(l(G))}{1-\alpha}.$$

Portanto,

$$0 \leq \lambda_m(A_\alpha(l(G))) + 2(1-\alpha) - \alpha\delta(l(G)).$$

Pela Observação I.2.7 segue que

$$0 \leq \lambda_m(A_\alpha(l(G))) + 2(1-\alpha) - \alpha(2\delta(G) - 2).$$

Logo

$$\lambda_m(A_\alpha(l(G))) \geq 2\alpha\delta(G) - 2,$$

obtendo, assim, o resultado. □

Corolário VI.2.4. *Se G é um grafo r-regular com n vértices, $m \neq 0$ arestas, $r \geq 2$ e $\alpha \in [0, 1)$, então $\lambda_m(A_\alpha(l(G))) = 2r\alpha - 2$ se e somente se $m > n$ ou G é bipartido.*

Demonstração. Seja G um grafo r-regular. Suponhamos inicialmente que $\lambda_m(A_\alpha(l(G))) = 2r\alpha - 2$. Do Corolário III.2.6 temos que ou $m > n$ ou 0 é raiz do polinômio $P_{Q(G)}(\lambda)$ e, da Proposição I.3.18, segue que G é um grafo bipartido.

Se $m > n$, pelo Teorema III.2.5, $2r\alpha - 2$ é um autovalor de $A_\alpha(l(G))$ e pelo Teorema VI.2.3 esse valor é o menor possível. Se G é um grafo bipartido, pela Proposição I.3.18 temos que $0 \in \sigma(Q(G))$ e, aplicando o Corolário III.2.6, o resultado é obtido. □

Exemplo 10. *Se $G \cong C_n$ e n é par, segue do Corolário VI.2.4 que $\lambda_m(A_\alpha(l(G))) = 4\alpha - 2$.*

As próximas proposições apresentam algumas cotas para o maior autovalor da matriz $A_\alpha(l(G))$.

Proposição VI.2.5. *Sejam G um grafo conexo com n vértices e $\alpha \in [0,1)$. Então, $\lambda_1(A_\alpha(l(G))) < 2$ se e somente se $G \cong P_n$.*

Demonstração. Suponha que $G \cong P_n$. Segue da Proposição II.4.12 que

$$\lambda_1(A_\alpha(l(P_n))) = \lambda_1(A_\alpha(P_{n-1})) < 2.$$

Agora, suponhamos que $\lambda_1(A_\alpha(l(G))) < 2$. Por absurdo suponhamos que $G \ncong P_n$. Então $l(G)$ contém no mínimo um ciclo C. Do Teorema I.1.11 e do Lema II.1.2 temos que

$$\lambda_1(A_\alpha(l(G))) \geq \lambda_1(A_\alpha(C)) = 2,$$

o que é uma contradição. Logo, $G \cong P_n$. □

O Teorema VI.2.6 apresenta cotas superior e inferior para $\lambda_1(A_\alpha(l(G))$ em função de $\lambda_1(A_\alpha(G))$, dos graus máximo e mínimo de G e dos graus dos vértices das arestas. Para obtermos o resultado desejado, vale observar que se tomarmos $U = [u_{ij}] = -\alpha D(l(G)) + 2(1-\alpha)I_m$, a qual é uma matriz diagonal de ordem n, e substituirmos na equação (VI.3), temos

$$(1-\alpha)B^TB = A_\alpha(l(G)) + U. \tag{VI.4}$$

Segue da Observação I.2.7 que, para todo $k \in \{1,\ldots,m\}$ e $e_k = v_iv_j$, temos que $u_{kk} = -\alpha d(e_k) + 2 - 2\alpha = -\alpha(d(v_i) + d(v_j) - 2) + 2 - 2\alpha = 2 - \alpha(d(v_i) + d(v_j))$.

Teorema VI.2.6. *Sejam G um grafo com grau máximo Δ, grau mínimo δ e $\alpha \in [0,1]$. Então*

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) + (1-2\alpha)\delta - \max_{v_iv_j \in E(G)}\{2 - \alpha(d(v_i) + d(v_j))\} \leq \lambda_1(A_\alpha(l(G))) \tag{VI.5}$$

e

$$\lambda_1(A_\alpha(l(G))) \leq \lambda_1(A_\alpha(G)) + (1-2\alpha)\Delta - \min_{v_iv_j \in E(G)}\{2 - \alpha(d(v_i) + d(v_j))\} \tag{VI.6}$$

Demonstração. Seja B a matriz de incidência do grafo G. Sabemos do Teorema I.1.3 que $\lambda_1(BB^T) = \lambda_1(B^TB)$ e aplicando o Corolário I.1.9 na equação (VI.4) obtemos

$$\lambda_1(A_\alpha(l(G))) + \min_{v_iv_j \in E(G)}\{2 - \alpha(d(v_i) + d(v_j))\} \leq \lambda_1(A_\alpha(l(G)) + U) \leq \lambda_1(A_\alpha(l(G))) + \max_{v_iv_j \in E(G)}\{2 - \alpha(d(v_i) + d(v_j))\} \tag{VI.7}$$

Seja x um autovetor unitário associado ao autovalor $\lambda_1(A_\alpha(G))$ e z um autovetor unitário associado

a $\lambda_1(BB^T)$. Segue do Teorema I.1.10, da Proposição II.1.1 e da equação (III.15) que

$$(1-\alpha)\lambda_1(BB^T) = (1-\alpha)\max_{|z|=1} z^T BB^T z \geq (1-\alpha)x^T BB^T x = x^T A_\alpha(G)x + (1-2\alpha)x^T D(G)x$$
$$= \lambda_1(A_\alpha(G)) + (1-2\alpha)\sum_{i=1}^{n} d(v_i)x_i^2 \geq \lambda_1(A_\alpha(G)) + (1-2\alpha)\delta. \quad \text{(VI.8)}$$

Portanto, levando em consideração a igualdade em (VI.4) e substituindo (VI.8) em (VI.7), temos

$$\lambda_1(A_\alpha(l(G))) + \max_{v_iv_j\in E(G)}\{2-\alpha(d(v_i)+d(v_j))\} \geq \lambda_1(A_\alpha(G)) + (1-2\alpha)\delta,$$

obtendo assim a desigualdade (VI.5).

Por outro lado, segue novamente do Teorema I.1.10, da Proposição II.1.1 e da equação (III.15) que

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) = \max_{|x|=1} x^T A_\alpha(G)x \geq z^T A_\alpha(G)z = z^T(1-\alpha)BB^T z - (1-2\alpha)z^T D(G)z$$
$$\geq \lambda_1(A_\alpha(l(G))) + \min_{v_iv_j\in E(G)}\{2-\alpha(d(v_i)+d(v_j))\} - (1-2\alpha)\sum_{i=1}^{n} d_i z_i^2$$
$$\geq \lambda_1(A_\alpha(l(G))) + \min_{v_iv_j\in E(G)}\{2-\alpha(d(v_i)+d(v_j))\} - (1-2\alpha)\Delta. \quad \text{(VI.9)}$$

Levando novamente em consideração a igualdade em (VI.4) e substituindo (VI.9) em (VI.7), obtemos, de forma análoga, a desigualdade (VI.6) e consequentemente o resultado. □

Corolário VI.2.7. *Sejam G um grafo r-regular e $\alpha \in [0,1]$. Então $\lambda_1(A_\alpha(l(G))) = 2r-2$.*

Demonstração. Pelo Teorema VI.2.6 temos que

$$\lambda_1(A_\alpha(G)) + (1-2\alpha)r - 2 + 2r\alpha \leq \lambda_1(A_\alpha(l(G))) \leq \lambda_1(A_\alpha(G)) + (1-2\alpha)r - 2 + 2r\alpha.$$

Então, $\lambda_1(A_\alpha(l(G))) = \lambda_1(A_\alpha(G)) + (1-2\alpha)r - 2 + 2r\alpha$. Como $\lambda_1(A_\alpha(G)) = r$, obtemos o resultado. □

Proposição VI.2.8. *Seja G um grafo com n vértices, $m \neq 0$ arestas. Então, $\lambda_1(A_\alpha(l(G))) \leq 2n-4$ e $\lambda_i(A_\alpha(l(G))) \leq n(\alpha+1)-4$, $\forall i = 2,\dots m$ e $\alpha \in [0,1]$.*

Demonstração. Como G é um subgrafo de K_n, o resultado segue da Proposição I.2.8, do Corolário VI.2.2 e do Exemplo 8 do Capítulo III. □

Corolário VI.2.9. *Sejam G um grafo r-regular com $n \geq 2$ vértices, $m \neq 0$ arestas e $\alpha \in [0,1)$. Então $\lambda_1(A_\alpha(l(G))) = 2n-4$ se e somente se $G \cong K_n$.*

Demonstração. Se $G \cong K_n$, segue do Exemplo 8 do Capítulo III que $\lambda_1(A_\alpha(l(K_n))) = 2n-4$. Por outro lado, se $\lambda_1(A_\alpha(l(G))) = 2n-4$ temos que $P_{A_\alpha(l(G))}(2n-4) = 0$. Assim, pelo Teorema III.2.5 temos que $(2n-2-2r\alpha)^{m-n}P_{A_\alpha(G)}(2n-2-r) = 0$, para $\alpha \in [0,1)$. Portanto, há dois casos a considerar:

(i) suponha que $2n-2-2r\alpha = 0$. Se $\alpha \in (0,1)$, então $r = \dfrac{n-1}{\alpha} > n-1$, o que é impossível. Se $\alpha = 0$, então $n = 1$ o que é um absurdo.

(ii) suponha que $P_{A_\alpha(G)}(2n-2-r) = 0$. Como G é r-regular, temos que a multiplicidade $\lambda_1(A_\alpha(G)) = r$ é 1, e portanto temos que $2n-2-r = r$. Dessa forma, $r = n-1$, o que completa a demonstração.

□

Para finalizar, na Proposição VI.2.10 são apresentadas cotas para $\lambda_2(A_\alpha(l(G))$.

Proposição VI.2.10. *Seja G um grafo conexo com n vértices, $n \geq 3$. Então*

$$2\alpha - 1 \leq \lambda_2(A_\alpha(l(G))) \leq n(\alpha+1) - 4.$$

A igualdade ocorre quando $G \cong P_3$, para a cota inferior, e quando $G \cong K_n$, para a cota superior.

Demonstração. Como $n \geq 3$, segue da Proposição I.2.8 que $l(P_3)$ é subgrafo de $l(G)$. Do Teorema I.1.11 e da Proposição VI.2.1 temos que $2\alpha - 1 \leq \lambda_2(A_\alpha(l(G)))$ e então obtemos a cota inferior. Se $G \cong P_3$, segue da Proposição VI.2.1 que a igualdade é atingida. Já a cota superior e sua igualdade seguem diretamente da Proposição VI.2.8. □

Capítulo VII Conclusões e Trabalhos futuros

Desde sua introdução por Nikiforov [2017], o estudo da matriz A_α tem sido um tópico de destaque na TEG, avançando continuamente. Nikiforov, ao propor esta matriz, abriu caminho para uma nova abordagem na análise espectral de grafos, explorando conjuntamente as propriedades da matriz de adjacência e da matriz Laplaciana sem sinal, além de suas relações com outras estruturas topológicas.

Nesta pesquisa, conduzimos uma análise abrangente dos avanços relacionados à matriz A_α, desde quando ela foi definida por Nikiforov até as recentes contribuições que reforçam sua importância na Teoria Espectral de Grafos (TEG). Esta revisão aborda a obtenção do espectro de diversas famílias de grafos, a determinação dos polinômios característicos e a obtenção de cotas para alguns de seus autovalores. Ao examinar esses aspectos, buscamos não apenas compreender a evolução histórica da matriz A_α, mas também elucidar sua relevância atual na análise estrutural e no estudo das propriedades espectrais dos grafos. Essa abordagem pode proporcionar insights que podem orientar futuras pesquisas e aplicações na área de TEG.

Após revisarmos alguns dos resultados importantes existentes na literatura, exploramos no Capítulo III o polinômio característico da matriz A_α para diferentes tipos de grafos, bem como suas conexões com outras matrizes que os representam, como a matriz de adjacência, a matriz laplaciana sem sinal e a matriz do grafo linha. Adicionalmente, apresentamos resultados sobre o polinômio característico de um grafo obtido por uma coalescência de outros grafos, e discutimos os autovalores das submatrizes principais da matriz $A_\alpha(G)$.

No Capítulo IV, apresentamos algumas das contribuições desta tese para o estudo da matriz A_α e suas propriedades espectrais. Em particular, introduzimos novas cotas para o maior autovalor (Teoremas IV.1.1, IV.1.3, IV.1.6, IV.1.7, IV.1.8, IV.1.9 e IV.1.11 e o Corolário IV.1.5), para o segundo maior autovalor (Proposições IV.2.1 e IV.2.4) e para o menor autovalor desta matriz (Proposições IV.3.1 e IV.3.1). As cotas propostas estão relacionadas, principalmente, ao número de vértices, o número de arestas, o grau máximo e o grau mínimo do grafo. Além disso, consideramos o grau médio de um vértice, os graus dos vértices que compõem uma aresta, o número de independência e os autovalores da matriz $A(G)$.

Em sequência, no Capítulo V, realizamos uma análise comparativa entre as cotas introduzidas no Capítulo IV e algumas já estabelecidas na literatura. A seleção das cotas baseou-se no critério

de utilização dos mesmos parâmetros apresentados nas novas cotas da tese. Utilizamos gráficos e tabelas para tornar os resultados mais acessíveis e fáceis de serem analisados. Durante as comparações, observamos que algumas das cotas desenvolvidas superaram muitas das cotas presentes na literatura, enquanto outras foram consideradas incomparáveis. Nosso objetivo foi não apenas expandir o conhecimento existente, mas também estabelecer uma base sólida para futuras pesquisas nessa área. Desta forma, essa análise comparativa proporcionou insights sobre o desempenho das novas cotas.

É importante destacar que, em relação a algumas comparações de cotas, não conseguimos obter demonstrações algébricas. Diante dessa limitação, optamos por uma abordagem computacional, explorando diversas famílias de grafos. Essa estratégia revelou-se produtiva, levando à formulação de conjecturas que têm o potencial de orientar investigações futuras. As conjecturas propostas são as seguintes:

- **Conjectura 1:** *Para um grafo G e um valor α pertencente ao intervalo $[0, 1)$, a cota estabelecida pelo Teorema IV.1.1 é superior à cota fornecida pelo Teorema II.4.4.*

- **Conjectura 2:** *Considerando um grafo G com $m \neq 0$ arestas, $n \geq 3$ vértices, Δ e δ como o maior e o menor grau dos vértices, respectivamente, e $\alpha \in [0, 1]$, a cota estipulada pelo Teorema IV.1.3 é maior ou igual à cota estabelecida pelo Teorema II.4.9.*

- **Conjectura 3:** *Para um grafo G com $n \geq 2$ vértices e $\alpha \in [0, 1]$, a cota dada pelo Teorema IV.1.7 é maior ou igual à cota apresentada pelo Teorema II.4.59.*

Um dos aspectos mais interessantes do nosso estudo é a aplicação da matriz A_α aos grafos linha, uma classe especial de grafos cujas relações com a referida matriz ainda não foram exploradas. Nesta linha, apresentamos no Capítulo VI um estudo inédito sobre a matriz A_α para os grafos linha, investigando cotas para alguns de seus autovalores sob algumas condições específicas. Essa análise abre novas perspectivas para a compreensão da estrutura e do comportamento dos grafos linha, usando essa matriz.

Apesar dos avanços significativos alcançados nesta pesquisa, é importante reconhecer que ainda existem diversas questões em aberto e áreas que requerem investigação futura. Deixamos algumas dessas questões em aberto como sugestões para trabalhos futuros, como as conjecturas apresentadas no Capítulo V. Além disso, problemas como: a obtenção de novas cotas pela utilização de outras cotas existentes na literatura referentes a alguns parâmetros utilizados (índice de Zagreb, índice de Randìc, índice topológico "esquecido", por exemplo); exploração de propriedades adicionais da matriz A_α; sua aplicação em contextos práticos. Esperamos que esta tese possa servir como uma fonte de consulta importante e bem fundamentada para os atuais e futuros pesquisadores interessados na TEG e na matriz A_α.

Índice Remissivo

autovalor, 18
autovetor, 18

caminho, 22
ciclo, 22
conjunto
    cardinalidade, 21

diâmetro, 22

função
    determinante, 17

grafo, 21
    árvore, 23
    bipartido, 22
    bipartido completo, 22
    bipartido semirregular, 22
    birregular, 22
    caminho, 22
    ciclo, 23
    cintura, 23
    clique, 22
    coalescência, 24
    complemento, 24
    complemento bipartido, 24
    completo, 22
    conexo, 22
    disjuntos, 24
    dupla estrela, 27
    dupla pipa, 28
    escada, 29
    estrela, 22
    firefly, 29
    floresta, 23
    friendship, 29
    grau médio, 22
    Helm, 30
    join, 24
    linha, 25
    livre de triângulo, 22
    número de clique, 22
    número de cobertura de arestas, 55
    número de cobertura de vértice, 55
    número de independência, 23
    pineapple, 27
    raio espectral, 30
    regular, 22
    roda, 24
    simples, 22
    split completo, 24
    starlike, 27
    subdivisão, 26
    total, 26
    vassoura dupla, 27
    índice, 30

indice topológico “esquecido”, 23

matriz, 16
    A_α, 35
    adjacância generalizada, 35
    adjacância universal, 35

adjacência, 30
diagonal, 16
diagonal dos graus, 22
em blocos, 18
espectro, 19
identidade, 17
incidência, 33
irredutível, 18
Laplaciana, 34
Laplaciana sem sinal, 34
não negativa, 17
permutação, 18
quadrada, 16
quociente, 20
redutível, 18
simétrica, 17
submatriz principal, 17
multiplicidade algébrica, 19
multiplicidade geométrica, 19

partição equlibrada, 20
passeio, 22
polinômio característico, 18

quociente de Rayleigh, 21

Randić
índice geral, 24

subgrafo, 22
subgrafo induzido, 22

Teorema
Entrelaçamento de Cauchy, 21
Perron-Frobenius, 20
Rayleigh, 21
Rolle, 107
Weyl, 20

vertice
grau, 22
grau máximo, 22
grau médio, 22
grau mínimo, 22
vertices
adjacentes, 22
distância, 22
sequência de graus, 22

Zagreb
primeiro índice, 23
primeiro índice geral, 23
segundo índice, 23

Referências

Alazemi, A., Anđelić, M., e Simić, S. On eigenvalue inequalities of a matrix whose graph is bipartite. *Journal of Inequalities and Applications*, 2019.

Alhevaz, A., Baghipur, M., e Ahmad, H. Bounds for the spectral radius of the A_α-matrix of graphs. *Indian Journal of Pure and Applied Mathematics*, 2023.

Alhevaz, A., Baghipur, M., Ahmad, H., e Das, K. On the A_α-spectral radius of connected graphs. *Ars Mathematica Contemporanea*, 23(1), 2022.

Aouchiche, M., Hansen, P., e Lucas, C. On the extremal values of the second largest q-eigenvalue. *Linear Algebra and its Applications*, 435(10):2591–2606, 2011.

Arsić, B., Cvetković, D., Simić, S. K., e Škarić, M. Graph spectral techniques in computer sciences. *Applicable Analysis and Discrete Mathematics*, 6(1):1–30, 2012.

Basunia, M., Mahato, I., e Rajesh Kannan, M. On the A_α-spectra of some join graphs. *Bulletin of the Malaysian Mathematical Sciences Society*, 44, 2021.

Beineke, L. e Bagga, J. *Line Graphs and Line Digraphs*. Developments in Mathematics. Springer International Publishing, 2021.

Biggs, N. *Algebraic Graph Theory*. Cambridge Mathematical Library. Cambridge University Press, 1974.

Bollobás, B. e Erdös, P. Graphs of extremal weights. *Ars Comb.*, 50, 1998.

Brondani, A., França, F., e Oliveira, C. Positive semidefiniteness of $A_\alpha(G)$ on some families of graphs. *Discrete Applied Mathematics*, 323:113–123, 2022.

Brondani, A., França, F., Oliveira, C., e de Lima, L. A_α-spectrum of a firefly graph. *Electronic Notes in Theoretical Computer Science*, 346:209–219, 2019.

Brondani, A. E. *Sobre o Segundo maior Autovalor de um Grafo*. PhD thesis, Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia de Produção, 2017.

Bueno, H. P. *Álgebra Linear - Um Sugundo Curso*. Textos Universitários. Sociedade Brasileira de Matemática - SBM, 2006.

Cao, D. Bounds on eigenvalues and chromatic numbers. *Linear Algebra and its Applications*, 270(1):1–13, 1998.

Chartrand, G. *On the Line-Digraphs of a Finite Graph*. PhD thesis, Michigan State University, 1964.

Chen, Y., Li, D., e Meng, J. On the second largest A_α(G)-eigenvalues of graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 580:343–358, 2019.

Chen, Y. e Wang, L. Sharp bounds for the largest eigenvalue of the signless laplacian of a graph. *Linear algebra and its applications*, 433(5):908–913, 2010.

Cheng, Y.-J., Kao, L., e Weng, C.-w. Corrigendum of a theorem on new upper bounds for the α-indices. comment on lenes et al. new bounds for the α-indices of graphs. mathematics 2020, 8, 1668. *Mathematics*, 10:2619, 2022.

Cioabă, S. M. Sums of powers of the degrees of a graph. *Discrete Mathematics*, 306(16):1959–1964, 2006.

Csikvári, P. Note on the sum of the smallest and largest eigenvalues of a triangle-free graph. *Linear Algebra and its Applications*, 650:92–97, 2022.

Cui, S.-Y. e Tian, G.-X. The spectrum and the signless laplacian spectrum of coronae. *Linear Algebra and its Applications*, 437(7):1692–1703, 2012.

Cvetković, D., Rowlinson, P., e Simic, S. *Eigenspaces of Graphs*. Encyclopedia of Mathematics and its Applications. Cambridge University Press, 1997.

Cvetkovic, D., Rowlinson, P., e Simic, S. *Spectral Generalizations of Line Graphs: On Graphs with Least Eigenvalue -2*. London Mathematical Society Lecture Note Series. Cambridge University Press, 2004.

Cvetković, D., Rowlinson, P., e Simić, S. *An Introduction to the Theory of Graph Spectra*. London Mathematical Society Student Texts. Cambridge University Press, Cambridge, 2010.

Cvetkovic, D. M. Signless laplacians and line graphs. *Bulletin: Classe Des Sciences Mathematiques Et Natturalles*, 131:85–92, 2005.

Cvetković, D. M., Doob, M., e Sachs, H. *Spectra of Graphs: Theory and Application*. Academic Press, New York, 1980.

Cvetković, D. M., Rowlinson, P., e Simic, S. K. Eigenvalue bounds for the signless laplacian. *Publications De L'institut Mathematique*, 81:11–27, 2007.

Cvetković, D. e Davidović, T. Application of some graph invariants to the analysis of multiprocessor interconnection networks. *Yugoslav Journal of Operations Research*, 18, 2008.

Cvetković, D. e Stevanovic, D. Spectral moments of fullerene graphs. *MATCH - Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 50, 2004.

Cvetković, D. M. Graphs and their spectra. *Publikacije Elektrotehničkog fakulteta. Serija Matematika i fizika*, (354/356):1–50, 1971.

Das, C. Sharp bounds for the sum of the squares of the degrees of a graph. In *Kragujevac Journal of Mathematics*, 2003.

Das, K., Xu, K., e Nam, J. Zagreb indices of graphs. *Frontiers of Mathematics in China*, 10:567–582, 2015.

Das, K. C. Maximizing the sum of the squares of the degrees of a graph. *Discrete Mathematics*, 285(1):57–66, 2004.

Diestel, R. *Graph Theory (Graduate Texts in Mathematics)*. Springer, 2005.

Duan, X. e Zhou, B. Sharp bounds on the spectral radius of a nonnegative matrix. *Linear Algebra and its Applications*, 439(10):2961–2970, 2013.

Ebrahimi B, J., Mohar, B., Nikiforov, V., e Ahmady, A. S. On the sum of two largest eigenvalues of a symmetric matrix. *Linear Algebra and its Applications*, 429(11):2781–2787, 2008.

Ellingham, M. e Zha, X. The spectral radius of graphs on surfaces. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, 78(1):45–56, 2000.

Elphick, C. e Wocjan, P. Bounds and power means for the general randic index. *arXiv: Combinatorics*, 2015.

Estrada, E. *The Structure of Complex Networks: Theory and Applications*. Oxford University Press, 2011.

Estrada, E. e Hatano, N. Communicability in complex networks. *Physical Review E*, 74(6):066132, 2006.

Favaron, O., Mahéo, M., e Saclé, J.-F. Some eigenvalue properties in graphs (conjectures of graffiti — ii). *Discrete Mathematics*, 111(1):197–220, 1993.

Fiorini, S. e Wilson, R. *Edge-colourings of Graphs*. Pitman, 1977.

Francis, A., Smith, D., e Webb, B. General equitable decompositions for graphs with symmetries, 2018.

Freitas, M., Del-Vecchio, R., e Abreu, N. Spectral properties of kk_n^j graphs. *Matemática Contemporânea*, 39:129–134, 2010.

Furtula, B. e Gutman, I. A forgotten topological index. *Journal of Mathematical Chemistry*, 53:1184–1190, 2015.

Godsil, C. e Royle, G. F. *Algebraic Graph Theory*. Number Book 207 in Graduate Texts in Mathematics. Springer, 2001.

Goldberg, K. Principal sub-matrices of a full-rowed non-negative matrix. *Journal of Research of the National Bureau of Standards, Section B: Mathematics and Mathematical Physics*, 63B(1):19–20, 1959.

Golub, G. H. e Van Loan, C. F. *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press, third edition, 1996.

Grossman, J. W., Harary, F., e Klawe, M. Generalized ramsey theory for graphs, x: double stars. *Discrete Mathematics*, 28(3):247–254, 1979.

Guo, H. e Zhou, B. On the A_α-spectral radius of graphs. *Applicable Analysis and Discrete Mathematics*, 14:431–458, 2020.

Guo, S.-G. e Zhang, R. Ordering graphs by their largest (least) Aα-eigenvalues. *Linear and Multilinear Algebra*, 70(21):7049–7056, 2022.

Gutman, I. e Polansky, O. E. *Mathematical Concepts in Organic Chemistry*. Springer, 1986.

Gutman, I. e Trinajstić, N. Graph theory and molecular orbitals. total ϕ-electron energy of alternant hydrocarbons. *Chemical Physics Letters*, 17(4):535–538, 1972.

Haemers, W. *Eigenvalue techniques in design and graph theory*, volume 121. Mathematich Centrum, Amsterdan, 1980.

Haemers, W. e Omidi, G. Universal adjacency matrices with two eigenvalues. *Linear Algebra and its Applications*, 435(10):2520–2529, 2011.

Haemers, W. H. Hoffman's ratio bound. *Linear Algebra and its Applications*, 617:215–219, 2021.

Hagberg, A. A., Schult, D. A., e Swart, P. J. Exploring network structure, dynamics, and function using networkx. In Varoquaux, G., Vaught, T., e Millman, J., editors, *Proceedings of the 7th Python in Science Conference*, pages 11 – 15, Pasadena, CA USA, 2008.

Hahn, G. e Sabidussi, G. *Graph Symmetry: Algebraic Methods and Applications*. Nato Science Series C:. Springer Netherlands, 1997.

Harary, F. *Graph Theory*. Addison-Wesley, Reading, MA, 1969.

Harary, F. e Norman, R. Z. Some properties of line digraphs. *Rendiconti del Circolo Matematico di Palermo*, 9(1):161–168, 1960.

Hong, Y., Shu, J.-L., e Fang, K. A sharp upper bound of the spectral radius of graphs. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, 81(2):177–183, 2001.

Hoory, S., Linial, N., e Wigderson, A. Expander graphs and their applications. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 43:439–561, 2006.

Horn, R. e Johnson, C. *Matrix Analysis*. Matrix Analysis. Cambridge University Press, New York, 2013.

Hosoya, H. e Harary, F. On the matching properties of three fence graphs. *Journal of Mathematical Chemistry*, 12:211–218, 1993.

Huang, X., Lin, H., e Xue, J. The nordhaus–gaddum type inequalities of A_α-matrix. *Applied Mathematics and Computation*, 365:124716, 2020.

Hückel, E. Quantentheoretische Beiträge zum Benzolproblem. *Zeitschrift fur Physik*, 70(3-4):204–286, 1931.

Ilić, A. e Stevanović, D. On comparing zagreb indices. *Match*, 62, 2011.

Jahanbani, A. e Sheikholeslami, S. On the spectral radius of the adjacency matrix and signless laplacian matrix of a graph. *Linear and Multilinear Algebra*, 70(21):6846–6851, 2022.

Javaid, M., Javed, S., Memon, S., e Alanazi, A. Forgotten index of generalized operations on graphs. *Journal of Chemistry*, 2021:1–14, 2021.

Jog, S. R. e Patil, S. L. Spectra of k coalescence of complete graphs. *Asia Mathematika*, 5(1):113 – 118, 2021.

Jovanović, N., Jovanović, Z., e Jevremović, A. Complex networks analysis by spectral graph theory. In *Sinteza 2017 - International Scientific Conference on Information Technology and Data Related Research*, pages 182–185, 2017.

Kolotilina, L. Lower bounds for the perron root of a nonnegative matrix. *Linear Algebra and its Applications*, 180:133–151, 1993.

Krausz, J. Démonstration nouvelle d'une théorème de whitney sur les réseaux. *Matematikai és Fizikai Lapok*, 50:129–133, 1943.

Kumar, R. Bounds for eigenvalues of a graph. *Journal of Mathematical Inequalities*, 4:399–404, 2010.

König, D. Über graphen und ihre anwendung auf determinantentheorie und mengenlehre. *Mathematische Annalen*, 77(3):453–465, 1916.

König, D. *Theorie der endlichen und unendlichen Graphen*. Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1936.

Li, S. e Wang, S. The A_α- spectrum of graph product. *The Electronic Journal of Linear Algebra*, 35:473–481, 2019a.

Li, S. e Wang, S. The A_α-spectrum of graph product. *Electronic Journal of Linear Algebra*, 35:473–481, 2019b.

Li, X. e Zhao, H. Trees with the first three smallest and largest generalized topological indices. *MATCH - Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 50:57–62, 2004.

Li, X. e Zheng, J. A unified approach to the extremal trees for different indices. *MATCH - Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 54:195–208, 2005.

Lin, H., Hong, Y., e Shu, J. Some relations between the eigenvalues of adjacency, laplacian and signless laplacian matrix of a graph. *Graphs and Combinatorics*, 31, 2013.

Lin, H., Huang, X., e Xue, J. A note on the A_α-spectral radius of graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 557:430–437, 2018a.

Lin, H., Liu, X., e Xue, J. Graphs determined by their A_α-spectra. *arXiv: Combinatorics*, 2017.

Lin, H., Xue, J., e Shu, J. On the A_α-spectra of graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 556:210–219, 2018b.

Liu, M., Liu, B., e Cheng, B. Ordering (signless) laplacian spectral radii with maximum degrees of graphs. *Discrete Mathematics*, 338(2):159–163, 2015.

Liu, S., Das, K. C., e Shu, J. On the eigenvalues of A_α-matrix of graphs. *Discrete Mathematics*, 343(8):111917, 2020a.

Liu, S., Das, K. C., Sun, S., e Shu, J. On the least eigenvalue of A_α-matrix of graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 586:347–376, 2020b.

Liu, X. e Liu, S. On the A_α-characteristic polynomial of a graph. *Linear Algebra and its Applications*, 546:274–288, 2018.

Malathy e Desikan, K. Bounds for laplacian spectral radius of the complete bipartite graph. *International Journal of Pure and Applied Mathematics*, 115(9):343 – 351, 2017.

Marcus, M. e Minc, H. *A Survey of Matrix Theory and Matrix Inequalities*. Allyn and Bacon series in advanced mathematics. Allyn and Bacon, 1964.

McKinley, G. G. A. *Probabilistic and extremal behavior in graphs and matrices*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2020.

Merris, R. *Graph Theory*. Wiley Series in Discrete Mathematics and Optimization. Wiley, 2011.

Mieghem, P. v. *Frontmatter*, pages i–iv. Cambridge University Press, 2010.

Mnukhin, V., Stankevich, I., Skvortsov, M., Kolmykov, V., e Subbotin, V. *Spectral graph theory in Chemistry*, pages 101–141. Gordon and Breach Publisher, 1996.

Najiya, V. K. e Chithra, A. V. A study on k-coalescence of two graphs, 2023.

Nikiforov, V. Some inequalities for the largest eigenvalue of a graph. *Combinatorics, Probability and Computing*, 11(2):179–189, 2002.

Nikiforov, V. The smallest eigenvalue of kr-free graphs. *Discrete Mathematics*, 306(6):612–616, 2006.

Nikiforov, V. Merging the A- and Q- spectral theories. *Applicable Analysis and Discrete Mathematics*, 11(1):81–107, 2017.

Nikiforov, V., Pastén, G., Rojo, O., e Soto, R. L. On the A_α-spectra of trees. *Linear Algebra and its Applications*, 520:286–305, 2017.

Nikiforov, V. e Rojo, O. A note on the positive semidefiniteness of A_α. *Linear Algebra and its Applications*, 519:156–163, 2017.

Nikolić, S., Kovačević, G., Miličević, A., e Trinajstić, N. The zagreb indices 30 years after. *Croatica Chemica Acta*, 76:113–124, 2003.

Noy, M. e Ribó, A. Recursively constructible families of graphs. *Advances in Applied Mathematics*, 32(1):350–363, 2004.

Pintu Bhunia, S. B. e Paul, K. Bounds for eigenvalues of the adjacency matrix of a graph. *Journal of Interdisciplinary Mathematics*, 22(4):415–431, 2019.

Pirzada, S. Two upper bounds on the A_α-spectral radius of a connected graph. *Communications in Combinatorics and Optimization*, 7(1):53–57, 2022.

Rényii, A. e Sós, T. On a problem of graph theory, 1966.

Runge, F. *Beitrage zur Theorie der Spektren von Graphen und Hypergraphen*. PhD thesis, TH Ilmenau, 1976.

Sahir, M. A. e Nayeem, S. M. A. Bounds of the largest A_α eigenvalue of a graph of girth 5 or more. *International Journal of Applied and Computational Mathematics*, 9(91), 2023.

Sarkar, C. e Jalan, S. Spectral properties of complex networks. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 28(10), 2018.

Siddiqui, M. K., Nurdin, N., e Baskoro, E. T. Total edge irregularity strength of the disjoint union of helm graphs. *Journal of Mathematical and Fundamental Sciences*, 45(2):163–171, 2013.

Silva Junior, J. D. G. d., Oliveira, C. S., e Costa, L. M. G. C. d. Bounds for A_α-eigenvalues. *RAIRO-Oper. Res.*, 57(5):2783–2798, 2023a.

Silva Junior, J. D. G. d., Oliveira, C. S., e Costa, L. M. G. C. d. On the characteristic polynomial of the A_α-matrix for some operations of graphs. *Computational and Applied Mathematics*, 42(5), 2023b.

Silvester, J. R. Determinants of block matrices. *The Mathematical Gazette*, 84(501):460–467, 2000.

Spielman, D. A. Spectral graph theory and its applications. In *48th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS'07)*, pages 29–38, 2007a.

Spielman, D. A. Spectral graph theory and its applications. *Proceedings of the International Congress of Mathematicians*, pages 1813–1836, 2007b.

Stanić, Z. e Koledin, T. Some spectral inequalities for triangle-free regular graphs. *Filomat*, 27:1561–1567, 2013.

Stanković, I., Stevanović, D., e Milošević, M. More on the relation between energy and laplacian energy of graphs. *Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 61:395–401, 2009.

Stanley, R. P. A bound on the spectral radius of graphs with e edges. *Linear Algebra and its Applications*, 87:267–269, 1987.

Tahir, M. A. e Zhang, X.-D. Graphs with three distinct α-eigenvalues. *Acta Mathematica Vietnamica*, 43(4):649–659, 2018.

Tahir, M. A. e Zhang, X.-D. Coronae graphs and their α-eigenvalues. *Bulletin of the Malaysian Mathematical Sciences Society*, 43:2911–2927, 2020.

Tait, P. G. Note on the colourings of maps. *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*, 10:553–557, 1880.

Tamara, K. e Zoran, S. Some spectral inequalities for triangle-free regular graphs. *Filomat*, 27(8):1561–1567, 2013.

van Dam, E. R. e Haemers, W. H. Which graphs are determined by their spectrum? *Linear Algebra and its Applications*, 373:241–272, 2003.

Wang, S., Wong, D., e Tian, F. Bounds for the largest and the smallest A_α eigenvalues of a graph in terms of vertex degrees. *Linear Algebra and its Applications*, 590:210–223, 2020.

Watanabe, M. e Schwenk, A. Integral starlike trees. *Journal of the Australian Mathematical Society*, 28:120 – 128, 1979.

Whitney, H. Congruent graphs and the connectivity of graphs. *American Journal of Mathematics*, 54(1):150–168, 1932.

Whitney, H. 2-isomorphic graphs. *American Journal of Mathematics*, 55(1):245–254, 1933.

Yan, C. Properties of spectra of graphs and line graphs. *Applied Mathematics: A Journal of Chinese Universities*, 17:371–376, 2002.

Yuan, H. A bound on the spectral radius of graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 108:135–139, 1988.

Zhang, S. e Zhu, Y. Some spectral properties of A_α-matrix. *Discrete Mathematics, Algorithms and Applications*, 11(6):1–7, 2019.

Zhang, X. e Zhang, H. Some graphs determined by their spectra. *Linear Algebra and its Applications*, 431(9):1443–1454, 2009.

Zhou, B. e Luo, W. A note on general randić index. *MATCH - Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 62:155–162, 2009.