



Sofia Alexandra
Marques Jorge Pinheiro

Majorantes para a ordem de subgrafos induzidos
 k -regulares



**Sofia Alexandra
Marques Jorge Pinheiro**

**Majorantes para a ordem de subgrafos induzidos
 k -regulares**

Tese apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Doutor em Matemática, realizada sob a orientação científica de Domingos Moreira Cardoso, Professor Catedrático do Departamento de Matemática da Universidade de Aveiro.

Apoio financeiro de fundos nacionais através do CIDMA-Centro de Investigação e Desenvolvimento em Matemática e Aplicações (Universidade de Aveiro) e da FCT-Fundação para a Ciência e a Tecnologia, no âmbito do projeto PEst-OE/MAT/UI4106/2014.

Ao Miguel, ao Tomás e à Maria Luísa.

o júri

presidente

Prof. Doutor Carlos Alberto Diogo Soares Borrego
Professor Catedrático da Universidade de Aveiro

Prof. Doutor João Filipe Cortez Rodrigues Queiró
Professor Catedrático da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade
de Coimbra

Prof. Doutor Jorge Orestes Lasbarréres Cerdeira
Professor Catedrático da Universidade Nova de Lisboa

Prof. Doutor Domingos Moreira Cardoso (orientador)
Professor Catedrático da Universidade de Aveiro

Prof. Doutora Maria Leonor Nogueira Coelho Moreira
Professora Auxiliar da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto

Prof. Doutora Enide Cascais Silva Andrade Martins
Professora Auxiliar da Universidade de Aveiro

agradecimentos

Ao meu orientador, Professor Domingos Moreira Cardoso, pelo incentivo, disponibilidade, partilha de conhecimentos e interesse demonstrados no decurso da elaboração da tese.

À Universidade de Aveiro, ao Departamento de Matemática e ao Centro de Investigação e Desenvolvimento em Matemática e Aplicações pelos diversos apoios concedidos.

À Paula Rama pelos conselhos, pela motivação e leitura atenta da tese.

Aos meus colegas e amigos do Departamento de Matemática da Universidade de Aveiro, pelo companheirismo e amizade sempre demonstrados.

À minha família pelo afeto, compreensão e apoio incondicional sempre presentes.

palavras-chave

Teoria espectral dos grafos, matriz de adjacência, matriz laplaciana, matriz laplaciana sem sinal, majorantes espectrais, estáveis máximos, valores próprios principais e não principais, conjuntos k -regulares.

resumo

Muitos dos problemas de otimização em grafos reduzem-se à determinação de um subconjunto de vértices de cardinalidade máxima que induza um subgrafo k -regular. Uma vez que a determinação da ordem de um subgrafo induzido k -regular de maior ordem é, em geral, um problema NP-difícil, são deduzidos novos majorantes, a determinar em tempo polinomial, que em muitos casos constituam boas aproximações das respectivas soluções ótimas. Introduzem-se majorantes espectrais usando uma abordagem baseada em técnicas de programação convexa e estabelecem-se condições necessárias e suficientes para que sejam atingidos. Adicionalmente, introduzem-se majorantes baseados no espectro das matrizes de adjacência, laplaciana e laplaciana sem sinal. É ainda apresentado um algoritmo não polinomial para a determinação de um subconjunto de vértices de um grafo que induz um subgrafo k -regular de ordem máxima para uma classe particular de grafos. Finalmente, faz-se um estudo computacional comparativo com vários majorantes e apresentam-se algumas conclusões.

keywords

Spectral graph theory, maximum stable sets, adjacency matrix, Laplacian matrix, signless Laplacian matrix, main and non-main eigenvalues, k -regular sets.

abstract

Many optimization problems on graphs are reduced to the determination of a subset of vertices of maximum cardinality inducing a k -regular subgraph. Since the determination of the order of a k -regular induced subgraph of highest order is in general a NP-hard problem, new upper bounds, determined in polynomial time which in many cases are good approximations of the respective optimal solutions are deduced. Using convex programming techniques, spectral upper bounds were introduced jointly with necessary and sufficient conditions for those upper bounds be achieved. Additionally, upper bounds based on adjacency, Laplacian and signless Laplacian spectrum are introduced. Furthermore, a non-polynomial time algorithm for determining a subset of vertices of a graph which induces a maximum k -regular induced subgraph for a particular class is presented. Finally, a comparative computational study is provided jointly with a few conclusions.

Índice

Lista de símbolos	iii
1 Introdução	1
2 Conceitos e resultados preliminares	5
3 Subgrafos induzidos k-regulares de ordem máxima	17
3.1 Caso particular de subgrafos induzidos 0-regulares	18
3.2 Caso geral	25
3.2.1 Resultados previamente conhecidos	25
3.2.2 Generalizações a programas quadrático não necessariamente convexos	28
4 Majorantes baseados em programação convexa	45
4.1 Técnicas de programação quadrática convexa	45
4.2 Majorantes espectrais	49
4.3 Resultados complementares	54
4.4 Comparação dos majorantes	56
5 Majorantes baseados no espectro das matrizes A_G, L_G e Q_G	59
5.1 Extensões do majorante de Haemers	61
5.1.1 Majorante usando a matriz de adjacência	62
5.1.2 Majorante usando a matriz laplaciana	63
5.1.3 Majorante usando a matriz laplaciana sem sinal	68
5.2 Comparação dos majorantes	75
6 Estudo computacional comparativo	77
7 Conclusões	85
Índice remissivo	93

Lista de símbolos

$\partial(S)$	conjunto das arestas de corte com um extremo em S ;
$\alpha(G)$	número de independência de um grafo G ;
$\alpha_k(G)$	ordem de subgrafo induzido k -regular máximo;
$\Delta(G)$	maior grau dos vértices de um grafo G ;
$\delta(G)$	menor grau dos vértices de um grafo G ;
$\varepsilon_G(\lambda)$	subespaço próprio associado ao valor próprio λ de um grafo G ;
$\sigma(A_G)$	espectro de A_G ;
$\chi(G)$	número cromático de um grafo G ;
$\omega(G)$	número de clique de um grafo G ;
A_G	matriz de adjacência de um grafo G ;
$e(v)$	excentricidade do vértice v de um grafo G ;
$d_G(v)$	grau do vértice v ;
$\text{diam}(G)$	diâmetro de um grafo G ;
$\text{dist}_G(x, y)$	distância entre os vértices x e y de um grafo G ;
\hat{e}	vetor com componentes todas iguais a 1;
$E(G)$	conjunto das arestas de um grafo G ;
$g(G)$	cintura de um grafo G ;
$G[S]$	subgrafo induzido por $S \subseteq V(G)$;
$G - \{v\}$	subgrafo de G onde é removido $v \in V(G)$ e as arestas que lhe são incidentes;
G^c	complementar de um grafo G ;
I_n	matriz identidade de ordem n ;
$\text{MainSp}(G)$	conjunto dos valores próprios principais de um grafo G ;
$N_G(v)$	vizinhança do vértice v ;
K_n	grafo completo de ordem n ;
$K_{n,m}$	grafo bipartido completo;
L_G	matriz laplaciana de um grafo G ;
$L(G)$	grafo linha de um grafo G ;
Q_G	matriz laplaciana sem sinal de um grafo G ;
$V(G)$	conjunto dos vértices de um grafo G ;
\hat{u}^\perp	subespaço próprio gerado pelos vetores ortogonais a \hat{u} ;
uv	aresta entre os vértices u e v de um grafo G .

Capítulo 1

Introdução

Este trabalho enquadra-se no contexto da teoria espectral dos grafos, teoria que estuda propriedades de um grafo a partir de informação fornecida pelo espectro de uma matriz que lhe esteja associada. O início desta teoria é usualmente atribuído ao primeiro artigo matemático publicado sobre este assunto por L. Collatz e U. Sinogowitz em 1957. Contudo, as suas verdadeiras origens estão ligadas ao trabalho, em química teórica, desenvolvido em 1931 por E. Hückel, o qual só veio a ser reconhecido quatro décadas depois. Ainda como trabalho pioneiro neste tópico é indispensável destacar o trabalho desenvolvido por A. J. Hoffman e seus colaboradores em 1960 sobre grafos com menor valor próprio -2 e, adicionalmente, entre muitos outros, podemos realçar a caracterização de esquemas associativos, a caracterização de grafos por valores próprios e a introdução dos grafos de Moore. No conjunto dos principais investigadores sobre espectros de grafos das décadas de 60 e 70 devem ainda incluir-se os nomes de J. J. Seidel e de H. Sachs. O primeiro livro acessível sobre este tópico “Spectra of Graphs - Theory and Applications”, da autoria de D. Cvetković, M. Doob e H. Sachs, foi publicado em 1980 e pode afirmar-se que praticamente todos os resultados da teoria espectral dos grafos obtidos antes de 1978 aparecem resumidos nesta monografia. Nas últimas duas décadas, o número de artigos científicos publicados sobre espectros de grafos cresceu de modo exponencial. Recentemente publicaram-se as monografias [CRS10] e [BH12]. Existem muitas ligações da teoria espectral dos grafos com outras partes da combinatória, bem como com a álgebra e a geometria. Esta teoria pode classificar-se também

como parte da teoria algébrica dos grafos e da combinatória algébrica. É muito usada em química teórica e tem também relevância em outras áreas mais aplicadas, como por exemplo a física e a ciência da computação.

O trabalho desenvolvido teve como principal motivação o facto de muitos problemas de otimização em grafos se reduzirem à determinação de um subconjunto de vértices de cardinalidade máxima que induza um subgrafo k -regular. Conjuntos independentes de vértices, emparelhamentos induzidos, ciclos de comprimento mínimo e cliques, são exemplos de subgrafos induzidos 0-regulares, 1-regulares, 2-regulares e $(\omega - 1)$ -regulares, respetivamente (onde ω denota o número de clique). O problema da existência de um ciclo de Hamilton num grafo G de ordem n , muito comum em otimização combinatória, pode reduzir-se à verificação da existência de um subgrafo 2-regular de ordem $2n$ no grafo obtido de G por subdivisão das arestas, ou seja, por inserção de um vértice em cada aresta. Estes exemplos põem em evidência a importância do problema geral da determinação da ordem de subgrafos induzidos k -regulares de ordem máxima e da determinação do conjunto de vértices que o induz. Porém, uma vez que em geral a determinação da ordem de um grafo induzido k -regular de maior ordem é um problema NP-difícil, é da maior relevância encontrar majorantes, a determinar em tempo polinomial, que constituam boas aproximações das respetivas soluções ótimas bem como condições necessárias e suficientes para serem atingidos.

O principal objetivo deste trabalho é a dedução de majorantes, a determinar em tempo polinomial, para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares de cardinalidade máxima assim como a determinação de condições necessárias e suficientes para que estes majorantes sejam atingidos.

Muitos são os majorantes para o número de estabilidade de um grafo apresentados na literatura. Destacam-se, nomeadamente, o número de Lovász [Lov79], o majorante de Hoffman para o caso particular de grafos regulares (introduzido num manuscrito não publicado), referido em [Lov79] e posteriormente estendido para grafos arbitrários em [Hae80], o majorante introduzido em [Luz95] baseado em programação quadrática convexa e o majorante introduzido, independentemente, em [LLT07] e [GN08] que depende do maior valor próprio da matriz laplaciana. No caso geral do estudo de majorantes para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares os trabalhos publicados conhecidos são [CKL07, CP09, CR10, Luz11].

Em [CKL07] foi obtido um majorante para a ordem de um subgrafo induzido com grau médio d recorrendo a técnicas de programação quadrática convexa. Em [CP09] foram introduzidos majorantes espectrais recorrendo aos valores e vetores próprios da matriz de adjacência. Foi deduzido, nomeadamente, um majorante dependente do menor valor próprio quando este é não principal e do correspondente espaço próprio. Em [CR10], este majorante foi reformulado em termos de ângulos principais e melhorado no sentido em que não depende do menor valor próprio ser não principal. Finalmente, em [Luz11] foi introduzido um novo majorante para a ordem de um subgrafo induzido de cardinalidade máxima melhorando o introduzido em [CKL07].

A restante dissertação está organizada como se apresenta de seguida.

O Capítulo 2 introduz algumas definições, notações e resultados úteis no decorrer dos capítulos que lhe seguem. Os resultados aqui apresentados dizem respeito, essencialmente, a propriedades do espectro das matrizes de adjacência, laplaciana e laplaciana sem sinal.

No Capítulo 3 é apresentada uma pesquisa bibliográfica identificando as contribuições mais significativas no que diz respeito à determinação de majorantes para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares de ordem máxima, em particular no que se refere a majorantes para o número de estabilidade de um grafo que resultam da utilização de programas quadráticos não necessariamente convexos. São também introduzidos alguns resultados novos para o caso geral de subgrafos induzidos k -regulares. Por último, propõe-se um algoritmo de natureza combinatória para a determinação de um subconjunto de vértices de um grafo arbitrário G que induz um subgrafo k -regular de ordem máxima, caso este exista.

Seguidamente, no Capítulo 4 são analisados majorantes quadráticos convexos para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares e introduzidas condições necessárias e suficientes para que estes majorantes sejam atingidos. Com base nesta abordagem são deduzidos novos majorantes espectrais para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares de ordem máxima. Apresentam-se também alguns resultados complementares introduzidos em [CR10] que têm como base o artigo [CP09]. Incluem-se ainda algumas experiências computacionais com o intuito de comparar os majorantes apresentados neste capítulo.

No Capítulo 5 são inicialmente introduzidos alguns conceitos e resultados relevantes para

o restante capítulo que não foram incluídos no Capítulo 2. Nas Secções 5.1.1 e 5.1.2 determinam-se extensões dos majorantes para o número de estabilidade de um grafo introduzidos em [Hae80] e em [LLT07] para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares de ordem máxima, baseados no espectro da matrizes de adjacência e laplaciana, respetivamente. Na Secção 5.1.3 introduz-se um majorante para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares de ordem máxima baseado no espectro da matriz laplaciana sem sinal. Finalmente, faz-se uma comparação dos majorantes introduzidos neste capítulo.

O Capítulo 6 apresenta um estudo computacional comparativo entre os novos majorantes e alguns majorantes previamente publicados. Considera-se o caso particular de $k = 0$ tendo em conta alguns grafos da coleção DIMACS para os quais é conhecido o número de clique. Para o caso de $k \in \mathbb{N}$ comparam-se os majorantes introduzidos em [CKL07, CR10] e os introduzidos neste trabalho, com recurso a grafos da coleção DIMACS.

Finalmente, no Capítulo 7, são apresentadas as conclusões desta dissertação, onde são referidos os aspetos mais relevantes do trabalho realizado.

Capítulo 2

Conceitos e resultados preliminares

Neste capítulo são introduzidas algumas definições e notações. São ainda apresentados alguns resultados da teoria dos grafos a utilizar nos capítulos subsequentes.

Ao longo do texto considera-se $G = (V(G), E(G))$ como sendo um grafo não orientado simples, ou seja, sem lacetes nem arestas múltiplas, onde $V(G) \neq \emptyset$ e $E(G)$ denotam, respetivamente, o conjunto finito de vértices e o conjunto de arestas de G . Cada elemento de $E(G)$ é um subconjunto de dois elementos de $V(G)$. Por simplicidade de notação, uma aresta entre os vértices u e v será representada por uv . Dois vértices $u, v \in V(G)$ dizem-se *vértices adjacentes* se $uv \in E(G)$ e a aresta uv diz-se incidente nos vértices u e v . Duas arestas dizem-se *arestas adjacentes* se têm um vértice em comum. Se o número de vértices de G é n , ou seja, se $|V(G)| = n$, diz-se que G é um *grafo de ordem n* . Dado um grafo G e um vértice $v \in V(G)$, a *vizinhança* de v , denotada por $N_G(v)$, é o subconjunto de vértices adjacentes a v que se designam por *vizinhos* de v . O número de vizinhos de $v \in V(G)$ designa-se *grau* ou *valência* do vértice v e denota-se por $d_G(v)$, ou seja, $d_G(v) = |N_G(v)|$. O maior grau dos vértices do grafo G denota-se por $\Delta(G)$, ou seja, $\Delta(G) = \max_{v \in V(G)} \{d_G(v)\}$ e o menor grau dos vértices de G denota-se por $\delta(G)$, ou seja, $\delta(G) = \min_{v \in V(G)} \{d_G(v)\}$. Se o número de arestas de G é m , ou seja, se $|E(G)| = m$, diz-se que G é um *grafo de dimensão m* . Repare-se que ao

adicionar os graus de todos os vértices do grafo G cada aresta é contada duas vezes, pelo que

$$\sum_{v \in V(G)} d_G(v) = 2|E(G)|.$$

Dados dois grafos G e H , diz-se que H é um *subgrafo* de G e que G é um *supergrafo* de H quando $V(H) \subseteq V(G)$ e $E(H) \subseteq E(G)$. Designa-se por subgrafo abrangente de G todo o subgrafo de G que contém todos os seus vértices. Por sua vez, designa-se por *subgrafo induzido* pelo subconjunto de vértices S e denota-se por $G[S]$ o subgrafo obtido de G tal que $V(G[S]) = S$ e $E(G[S]) = \{uv : u, v \in S \wedge uv \in E(G)\}$.

Um grafo G diz-se *p-regular* se todos os seus vértices têm grau p . Se G tem ordem n e é $(n - 1)$ -regular, então G é um *grafo completo* denotado por K_n . Por outro lado, designa-se por *grafo nulo* e denota-se por N_n o grafo com n vértices não adjacentes, ou seja, N_n é 0-regular. Um subconjunto de vértices $S \subseteq V(G)$ diz-se (k, τ) -regular se induz um subgrafo k -regular tal que

$$\forall v \in V(G) \setminus S, |N_G(v) \cap S| = \tau.$$

O *complementar* de G , denotado por G^c , é um grafo tal que $|V(G)| = |V(G^c)|$ e $uv \in E(G^c)$ se e só se $uv \notin E(G)$.

Dado um grafo G , designa-se por *passeio* em G , entre os vértices x e y , toda a sequência não vazia de vértices e arestas da forma:

$$x = v_0, v_0v_1, v_1, \dots, v_{k-1}, v_{k-1}v_k, v_k = y,$$

com eventual repetição de vértices e arestas, onde os vértices v_0 e v_k são os *vértices extremos* do passeio. Os vértices v_0 e v_k designam-se por *vértice inicial* e *vértice final* do passeio, respetivamente. Por sua vez os vértices v_1, \dots, v_{k-1} designam-se por *vértices intermédios* do passeio. Se o grafo é simples (grafo sem lacetes nem arestas múltiplas) então um passeio fica completamente determinado pela sequência dos sucessivos vértices. Um *trajeto* num grafo é um passeio sem arestas repetidas e um *caminho* é um passeio sem vértices repetidos com eventual exceção dos vértices inicial e final. Um *trajeto fechado* ou *circuito* é um trajeto com pelo menos uma aresta e tal que os vértices inicial e final coincidem. Um *ciclo* é um

caminho fechado.

Designa-se por *comprimento* de um passeio P e denota-se por $\text{comp}(P)$ o número de arestas, com eventual repetição, que o constitui. No caso particular dos caminhos e dos trajetos o respetivo comprimento coincide com o número de arestas. Dados dois vértices x e y de um grafo G de ordem n e, denotando por $\mathcal{P}_{x,y}$ o conjunto de todos os caminhos entre os vértices x e y , designa-se por *distância* entre vértices de G a função $\text{dist}_G : V(G) \times V(G) \mapsto \{0, \dots, n-1\} \cup \{\infty\}$ tal que

$$\text{dist}_G(x, y) = \begin{cases} \min\{\text{comp}(P) : P \in \mathcal{P}_{x,y}\} & \text{se } \mathcal{P}_{x,y} \neq \emptyset \\ \infty & \text{se } \mathcal{P}_{x,y} = \emptyset \end{cases}$$

Dado um grafo G designa-se por *cintura* de G e denota-se por $g(G)$ o comprimento do circuito de menor comprimento em G , caso tal circuito exista. Caso contrário, diz-se que o grafo tem cintura infinita e escreve-se $g(G) = \infty$. Se G é um grafo e v um vértice de G , então a maior das distâncias entre v e os restantes vértices de G designa-se por *excentricidade* de v e denota-se por $e_G(v)$ ou simplesmente por $e(v)$. Mais formalmente,

$$e(v) = \max_{u \in V(G)} \text{dist}_G(u, v).$$

Dado um grafo G , a maior excentricidade dos seus vértices designa-se por *diâmetro* e denota-se por $\text{diam}(G)$. Por sua vez, a menor excentricidade dos vértices de G designa-se por *raio* e denota-se por $r(G)$.

Um ciclo C com $V(C) = V(G)$ diz-se *ciclo hamiltoniano* e um grafo que admite tal ciclo diz-se um *grafo hamiltoniano*.

Um grafo G diz-se *conexo* se entre cada par de vértices existe um caminho que os une. Caso contrário diz-se *não conexo* ou *desconexo*. Dado um grafo desconexo G , uma *componente conexa* ou simplesmente *componente* de G é um subgrafo conexo de G tal que, sendo induzido pelo subconjunto de vértices S , $\forall x \in V(G) \setminus S$, o subgrafo $G[S \cup \{x\}]$ é desconexo.

Um grafo G diz-se *bipartido* se existe uma partição do seu conjunto de vértices nos subconjuntos X e Y tal que não existem arestas entre qualquer par de vértices de X nem entre

qualquer par de vértices de Y , ou seja, cada aresta de G tem um extremo em X e outro em Y . Esta partição (X, Y) do conjunto dos vértices de G designa-se por bipartição dos vértices e, neste caso, G denota-se pelo terno (X, Y, E) onde $E = E(G)$. Em particular, diz-se que G é um grafo *bipartido semi-regular* se $V(G)$ é partido em dois subconjuntos X e Y e existem constantes a e b , com $a \neq b$, tais que cada vértice de X tem grau a e cada vértice de Y tem grau b . Se $|X| = m$, $|Y| = n$ e, para quaisquer $v \in X$ e $u \in Y$, $vu \in E(G)$ o grafo diz-se *bipartido completo* e denota-se por $K_{m,n}$. *Árvores* são grafos conexos acíclicos e constituem uma classe especial de grafos bipartidos.

Um *estável* (ou *conjunto independente*) é um subconjunto de vértices dois a dois não adjacentes. Um estável S de um grafo G diz-se *estável maximal* se não existe $T \subseteq V(G)$ tal que $S \subset T$ e T é um estável de G . Um estável diz-se *estável máximo* se não existe outro estável com maior número de vértices. Ao número de vértices de um estável máximo de um grafo G chama-se *número de estabilidade* (ou *número de independência*) de G e denota-se por $\alpha(G)$. Por sua vez, uma *clique* é um subconjunto de vértices tal que qualquer par dos seus vértices é adjacente. Uma clique C de um grafo G diz-se uma *clique maximal* se não existe $T \subseteq V(G)$ tal que $C \subset T$ e T é uma clique de G . Uma clique diz-se *clique máxima* se não existe outra clique com maior número de vértices. Ao número de vértices de uma clique máxima de um grafo G chama-se *número de clique* de G e denota-se por $\omega(G)$. Das definições dadas conclui-se que a determinação do número de estabilidade é equivalente à determinação do número de clique, ou seja, $\alpha(G) = \omega(G^c)$. O número mínimo de cliques cuja união é igual a $V(G)$ denota-se por $\theta(G)$. Uma família de cliques com $\theta(G)$ elementos designa-se por *cobertura mínima de G por cliques*. Uma vez que qualquer cobertura de G por cliques tem pelo menos $\alpha(G)$ cliques, conclui-se que para um grafo arbitrário G verifica-se a desigualdade $\alpha(G) \leq \theta(G)$. O *número cromático* de um grafo, $\chi(G)$, representa o menor número de cores necessárias para colorir os vértices de um grafo sem que vértices adjacentes tenham a mesma cor. Assim, os vértices coloridos com uma dada cor formam um estável, pelo que $\chi(G)$ se pode definir como o número mínimo de estáveis cuja união é igual a $V(G)$. Esta família de conjuntos designa-se por *cobertura mínima de G por estáveis*. Deste modo, tem-se a igualdade $\chi(G) = \theta(G^c)$.

O problema de determinar se um dado grafo G de ordem n admite um estável de cardinali-

dade $k \leq n$ é um problema NP-completo [Kar72] (para definição formal desta e de outras noções da teoria da complexidade computacional ver [GJ79]), pelo que a determinação de um estável máximo de G é um problema difícil.

Um *emparelhamento* num grafo G é um subconjunto de arestas $M \subseteq E(G)$ sem vértices comuns. Um *emparelhamento perfeito* é um emparelhamento M tal que, qualquer vértice $u \in V(G)$ é incidente numa única aresta de M . Um emparelhamento de máxima cardinalidade designa-se por *emparelhamento máximo*. Um *emparelhamento induzido* é um emparelhamento em que entre quaisquer duas arestas não há uma aresta a uni-las, ou seja, é um subgrafo induzido 1-regular. Um *emparelhamento induzido* $M \subseteq E(G)$ de um grafo G diz-se *maximal* se não existe $T \subseteq E(G)$ tal que $M \subset T$ e T é um emparelhamento induzido de G . A determinação de um emparelhamento induzido máximo é um problema NP-difícil. Mais geralmente, a determinação de um subgrafo induzido k -regular máximo é um problema NP-difícil para qualquer valor fixo k [CKL07]. De facto, em [CKL07], provou-se que se o problema se restringir à determinação de um subgrafo bipartido k -regular máximo, este continua a ser um problema NP-difícil.

Ao longo do texto denota-se por \hat{e} o vetor com todas as componentes iguais a 1 e por I_n a matriz identidade de ordem n . Quando não existem dúvidas quanto à ordem do grafo, a matriz identidade pode ser identificada simplesmente por I .

A *matriz de adjacência* de um grafo G de ordem n é uma matriz $n \times n$ denotada por A_G com entradas a_{ij} dadas por

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } ij \in E(G); \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Os valores próprios de um grafo G são os valores próprios da sua matriz de adjacência. A matriz A_G é simétrica e tem n valores próprios reais ordenados do seguinte modo,

$$\lambda_{\max}(A_G) = \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n = \lambda_{\min}(A_G).$$

$\lambda_{\max}(A_G) = \lambda_1$ é também designado por *índice* do grafo G .

O polinómio característico da matriz de adjacência de A_G de um grafo G de ordem n designa-

-se por *polinómio característico de G* e denota-se por $P_G(\lambda) = |A_G - \lambda I_n|$. Os seus zeros constituem o conjunto dos valores próprios de A_G designado por *espectro* de A_G e denotado por $\sigma(A_G)$ que, por simplicidade de notação, por vezes aparece $\sigma(G)$. Assim, se A_G tem r valores próprios distintos, $\sigma(A_G) = \{[\lambda_1]^{n_1}, \dots, [\lambda_r]^{n_r}\}$, onde n_i representa a multiplicidade do valor próprio λ_i , com $i = 1, \dots, r$. Se G é um grafo conexo a matriz de adjacência é não negativa e irredutível, pelo que o teorema de Perron-Frobenius permite concluir que λ_1 tem multiplicidade um e um vetor próprio associado com todas as componentes positivas. Se G tem pelo menos uma aresta, então $\lambda_{\min}(A_G) \leq -1$. Se G é um grafo nulo, todos os valores próprios de A_G são nulos. Por sua vez, no caso particular de um grafo completo de ordem n , K_n , o seu polinómio característico é dado por:

$$P_{K_n}(\lambda) = |A_{K_n} - \lambda I_n| = \det \begin{pmatrix} -\lambda & 1 & \dots & 1 \\ 1 & -\lambda & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & -\lambda \end{pmatrix}$$

pelo que $-1 \in \sigma(A_{K_n})$. Por outro lado, tendo em conta que $A_{K_n}\hat{e} = (n-1)\hat{e}$ conclui-se que $(n-1) \in \sigma(A_{K_n})$. Estes são os únicos valores próprios de A_{K_n} e têm multiplicidades iguais a $(n-1)$ e 1, respetivamente. Dado $S \subseteq V(G)$, o vetor $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $x_v = 1$ se $v \in S$ e $x_v = 0$ se $v \notin S$ designa-se por *vetor característico* de S , denotado por $x(S)$. O subespaço próprio associado a cada valor próprio $\lambda \in \sigma(A_G)$ denota-se por $\varepsilon_G(\lambda)$. Cada valor próprio λ tal que $\varepsilon_G(\lambda)$ é não ortogonal ao vetor \hat{e} diz-se *principal*. Os restantes valores próprios distintos dizem-se *não principais*. Denota-se por $MainSp(G)$ o conjunto dos valores próprios principais de G . Os conceitos de valor próprio principal e não principal foram introduzidos em [CDS95]. Em [Row07] foi publicado um artigo de revisão sobre estes conceitos e resultados relacionados. Para cada vetor \hat{u} , \hat{u}^\perp denota o subespaço próprio gerado pelos vetores ortogonais a \hat{u} .

Seguem-se alguns resultados relativos à estrutura dos grafos, obtidos a partir da análise dos valores próprios da respetiva matriz de adjacência. O espectro de um grafo contém muita informação sobre o grafo, nomeadamente informação que determina se um grafo é ou não bipartido ou regular, mas em geral não determina o grafo.

Teorema 2.1 [CS57] *Seja \bar{d} o valor médio dos graus dos vértices de um grafo G . Então*

$$\bar{d} \leq \lambda_{\max}(A_G) \leq \Delta(G).$$

A igualdade verifica-se se e só se G é regular.

Teorema 2.2 [Gan59] *Dado um grafo conexo G , a matriz de adjacência de G tem pelo menos $\text{diam}(G) + 1$ valores próprios distintos.*

Dada uma matriz arbitrária A de ordem n com entradas reais ou complexas, o *raio espectral* de A denotado por $\rho(A)$ define-se por $\rho(A) = \max\{|\lambda| : \lambda \in \sigma(A)\}$.

Teorema 2.3 [CDS95] *Um grafo é conexo se e só se o seu raio espectral é um valor próprio simples ao qual está associado um vetor próprio com todas as suas componentes positivas.*

O resultado que se segue relaciona o espectro de um grafo G e o espectro do seu complementar, G^c .

Teorema 2.4 [Cve71] *Se o espectro de um grafo G contém um valor próprio λ_0 com multiplicidade $r > 1$, então o espectro do complementar G^c , contém o valor próprio $-\lambda_0 - 1$ com multiplicidade s , onde $r - 1 \leq s \leq r + 1$.*

Se o grafo G é regular, então o polinómio característico de G^c relaciona-se com o polinómio característico de G da seguinte forma:

Teorema 2.5 [Sac62] *Se G é um grafo p -regular de ordem n , então*

$$P_{G^c}(\lambda) = (-1)^n \frac{\lambda - n + p + 1}{\lambda + p + 1} P_G(-\lambda - 1) \quad (2.1)$$

ou seja, se o espectro de G contém os valores próprios $\lambda_1 = p, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, então o espectro de G^c contém os valores próprios $n - 1 - p, -\lambda_2 - 1, \dots, -\lambda_n - 1$.

O *grafo linha* de um grafo G , denotado por $L(G)$, obtém-se de G considerando como vértices as arestas de G e como relação de adjacência entre os seus vértices a respectiva relação de adjacência entre arestas. Tendo em conta esta definição e a definição de emparelhamento máximo conclui-se que, a determinação de um emparelhamento máximo em G é equivalente à determinação de um estável máximo em $L(G)$. O grafo G da Figura 2.1 tem emparelhamento máximo $\{12, 35, 46\}$ e $L(G)$ tem o estável máximo $\{a, c, e\}$.

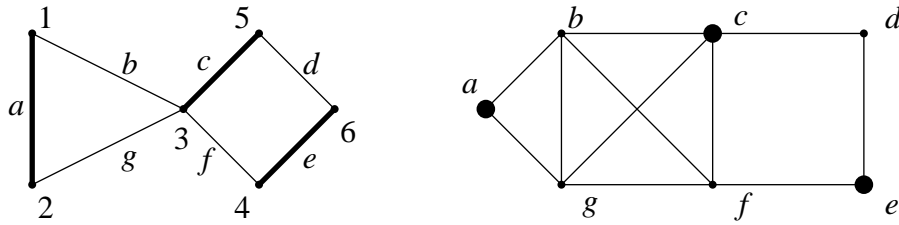


Figura 2.1: Grafo G com emparelhamento máximo $\{12, 35, 46\}$ e $L(G)$ com estável máximo $\{a, c, e\}$.

Designa-se por *matriz de incidência aresta-vértice* ou simplesmente *matriz de incidência* de um grafo simples, de ordem n e dimensão m , e denota-se por $R = (m_{ij})$ a matriz de dimensão $n \times m$ tal que

$$m_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } e_j = v_i v_k \text{ com } k \neq i; \\ 0, & \text{se } e_j = v_p v_q \text{ com } i \notin \{p, q\}. \end{cases}$$

A transposta da matriz R , R^T , designa-se por *matriz de incidência vértice-aresta*. As igualdades (ver [CDS95])

$$RR^T = A_G + D_G, \quad R^T R = A_{L(G)} + 2I_n, \quad (2.2)$$

onde D_G é a matriz diagonal com entradas da diagonal principal iguais aos graus dos vértices de G , permitem relacionar o espetro da matriz laplaciana sem sinal (ver definição mais adiante) de um grafo com o da matriz de adjacência do seu grafo linha. De facto, no caso particular de G ser um grafo p -regular tem-se $D_G = pI_n$ e, tendo em conta as igualdades (2.2) e que os valores próprios não nulos destas matrizes coincidem, obtém-se a seguinte relação entre os polinómios característicos de G e $L(G)$:

Teorema 2.6 [Sac67] *Se G é um grafo p -regular de ordem n e m arestas, então*

$$P_{L(G)}(\lambda) = (\lambda + 2)^{m-n} P_G(\lambda - p + 2). \quad (2.3)$$

Outras matrizes representativas de grafos são, nomeadamente, a matriz laplaciana e a matriz laplaciana sem sinal.

Dado um grafo G com matriz de adjacência A_G e matriz diagonal D_G , define-se *matriz laplaciana* de G e denota-se por L_G a matriz $L_G = D_G - A_G$. Esta é uma matriz semidefinida positiva e, como $L_G \hat{e} = 0$, os seus valores próprios podem ser ordenados do seguinte modo, $0 = \mu_n \leq \dots \leq \mu_1$, onde o valor próprio zero tem multiplicidade igual ao número de componentes de G . Um vetor próprio associado ao menor valor próprio, $\mu_n = 0$, é o vetor de componentes unitárias \hat{e} .

Apresentam-se de seguida algumas propriedades espectrais da matriz laplaciana. Em 1985, Anderson e Morley [AM85] obtiveram o primeiro majorante para o maior valor próprio da matriz laplaciana.

Teorema 2.7 [AM85] *Seja G um grafo simples não orientado. Se μ_1 é o maior valor próprio da matriz laplaciana L_G , então*

$$\mu_1 \leq \max\{d_G(u) + d_G(v) : uv \in E(G)\}, \quad (2.4)$$

onde $d_G(u)$ é o grau do vértice u .

Em 1997, este resultado foi melhorado por Li e Zhang [LZ97].

Teorema 2.8 [LZ97] *Seja G um grafo simples não orientado. Denote-se $r = \max\{d_G(u) + d_G(v) : uv \in E(G)\}$ e $s = \max\{d_G(u) + d_G(v) : uv \in E(G) - \{xy\}\}$ com $xy \in E(G)$ tal que $d_G(x) + d_G(y) = r$. Então,*

$$\mu_1 \leq 2 + \sqrt{(r-2)(s-2)}.$$

O primeiro minorante para o maior valor próprio da matriz laplaciana foi introduzido por

Fiedler [Fie73].

Teorema 2.9 [Fie73] *Seja G um grafo de ordem $n > 1$ e máximo grau $\Delta = \Delta(G)$. Então,*

$$\mu_1 \geq \frac{n}{n-1}\Delta. \quad (2.5)$$

Grone e Merris em [GM94] melhoraram o minorante (2.5). Por outro lado, Zhang e Luo em [ZL02] apresentaram uma nova prova para este resultado e caracterizaram a igualdade.

Teorema 2.10 [GM94, ZL02] *Seja G um grafo conexo simples com pelo menos uma aresta e máximo grau $\Delta = \Delta(G)$. Então,*

$$\mu_1 \geq \Delta + 1, \quad (2.6)$$

verificando-se a igualdade se e só se existe um vértice que é adjacente a todos os outros.

Designa-se por *matriz laplaciana sem sinal* a matriz definida por $Q_G = D_G + A_G$. Tendo em conta que os valores próprios não nulos das matrizes em (2.2) coincidem, conclui-se que

$$P_{L(G)}(\lambda) = (\lambda + 2)^{m-n} P_{Q_G}(\lambda + 2), \quad (2.7)$$

onde $P_{Q_G}(\lambda)$ é o polinómio característico da matriz laplaciana sem sinal Q_G . É claro que a matriz Q_G é semidefinida positiva e os seus valores próprios podem ser ordenados do seguinte modo, $0 \leq q_n \leq \dots \leq q_1$.

Ao longo do texto os valores próprios da matriz de adjacência, λ_i , laplaciana, μ_i , e laplaciana sem sinal, q_i , são também denotados por $\lambda_i(G)$, $\mu_i(G)$ e $q_i(G)$, respetivamente.

Relativamente à matriz Q_G apresentam-se algumas propriedades no que diz respeito ao seu espetro que serão usadas em capítulos seguintes.

Teorema 2.11 [CRS07] *O menor valor próprio da matriz laplaciana sem sinal de um grafo conexo é igual a zero se e só se o grafo é bipartido. Neste caso, zero é um valor próprio simples.*

Assim, se G é um grafo conexo, o menor valor próprio de Q_G é positivo se e só se G não é bipartido.

Teorema 2.12 [CRS07] *Seja G um grafo de ordem n . Então,*

$$2\delta(G) \leq q_1 \leq 2\Delta(G). \quad (2.8)$$

Teorema 2.13 [Das10] *Sejam G um grafo de ordem n . Então,*

$$q_n < \delta(G). \quad (2.9)$$

Segue-se uma relação entre os maiores valores próprios das matrizes laplaciana e laplaciana sem sinal de um grafo G .

Lema 2.14 [ZL02] *Seja G um grafo. Então,*

$$\mu_1 \leq q_1. \quad (2.10)$$

Mais, se G é um grafo conexo, então a desigualdade verifica-se em forma de igualdade se e só se o grafo é bipartido.

De facto, é conhecido que se G é um grafo bipartido, então os espetros das matrizes laplaciana e laplaciana sem sinal coincidem (ver [GM90], por exemplo).

Capítulo 3

Subgrafos induzidos k -regulares de ordem máxima

Neste capítulo procura fazer-se um levantamento de vários resultados apresentados sobre subgrafos induzidos k -regulares, em particular trabalhos que consistem em, dado um grafo G , determinar majorantes para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares de maior ordem, designados por subgrafos induzidos k -regulares máximos.

Em [CKL07] provou-se que o problema da determinação de um subgrafo induzido k -regular máximo é NP-difícil, mesmo no caso particular da determinação de subgrafos bipartidos k -regulares máximos. Neste sentido, foram efetuados diversos estudos no que diz respeito à determinação de majorantes para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares que constituam boas aproximações das respetivas soluções ótimas. No caso particular da ordem de subgrafos induzidos 0-regulares máximos, ou seja, estáveis máximos, desenvolveram-se vários majorantes determinados em tempo polinomial. São referidos alguns majorantes espectrais para o número de estabilidade de um grafo, nomeadamente o majorante de Hoffman referido em [Lov79], o majorante introduzido em [Hae80] baseado nos menor e maior valores próprios da matriz de adjacência e o majorante baseado no maior valor próprio da matriz laplaciana introduzido em [LLT07]. Refere-se a formulação quadrática para a determinação de um estável máximo introduzida por Motzkin e Straus em [MS65] inicialmente orientada para a determinação do número de clique. Apresenta-se também o majorante para o nú-

mero de estabilidade introduzido em [Luz95] calculado através da resolução de um problema de programação quadrática convexa com restrições de não negatividade. Para o caso geral referem-se os majorantes introduzidos em [CKL07] e em [Luz11]. São ainda introduzidos alguns resultados adicionais para o caso de subgrafos induzidos k -regulares. Em particular são feitas algumas generalizações para programas quadráticos não necessariamente convexos.

No final do capítulo propõe-se um algoritmo de natureza combinatória para a determinação de subgrafos induzidos de ordem máxima (quando estes existem).

3.1 Caso particular de subgrafos induzidos 0-regulares

Nesta secção pretende-se identificar alguns majorantes para o número de estabilidade. São referidos, nomeadamente, alguns majorantes que estão na base do restante trabalho desenvolvido.

Hoffamn introduziu num manuscrito não publicado, mais tarde apresentado em [Lov79], um majorante para grafos regulares, posteriormente estendido por Haemers a grafos arbitrários [Hae80].

O teorema que se segue introduz o majorante de Hoffman que, pela sua facilidade de cálculo, é o mais popular. Relativamente à segunda parte do teorema, a condição necessária está provada em [Hae95] e a condição suficiente em [CKL07].

Teorema 3.1 [CKL07, Hae95, Lov79] *Seja G um grafo regular de ordem n com pelo menos uma aresta. Então,*

$$\alpha(G) \leq n \frac{-\lambda_n(G)}{\lambda_1(G) - \lambda_n(G)}. \quad (3.1)$$

Adicionalmente, a cardinalidade de um estável S atinge este majorante se e só se S é um conjunto $(0, \tau)$ -regular com $\tau = -\lambda_n(G)$.

O teorema a seguir estende o majorante (3.1) a grafos arbitrários.

Teorema 3.2 [Hae80] *Seja G um grafo de ordem n com pelo menos uma aresta. Então,*

$$\alpha(G) \leq \frac{-n \lambda_n(G) \lambda_1(G)}{\delta^2(G) - \lambda_n(G) \lambda_1(G)}. \quad (3.2)$$

Igualmente simples de determinar é o majorante proposto por Cvetković (ver [CDS95]).

Teorema 3.3 [CDS95] *Seja G um grafo de ordem n . Sejam ainda p_- , p_0 e p_+ o número de valores próprios da matriz A_G menores, iguais e maiores que zero, respetivamente. Então,*

$$\alpha(G) \leq p_0 + \min\{p_-, p_+\}. \quad (3.3)$$

Existem grafos para os quais a desigualdade (3.3) se verifica na forma de igualdade.

Os grafos completos e as árvores são exemplos de grafos em que (3.3) se verifica na forma de igualdade.

Um outro majorante para o número de estabilidade de um grafo resulta da desigualdade $\chi(G) \leq \lambda_{\max}(G) + 1$ provada em [Wil67] conjuntamente com a desigualdade $\omega(G) \leq \chi(G)$ e tendo em conta que $\alpha(G) = \omega(G^c)$. Assim,

$$\alpha(G) \leq \lambda_{\max}(G^c) + 1. \quad (3.4)$$

Em [LLT07] e em [GN08] foi obtido, independentemente, um majorante espectral para o número de estabilidade dependente do maior valor próprio da matriz laplaciana.

Teorema 3.4 [LLT07, GN08] *Seja G um grafo de ordem n com pelo menos uma aresta. Então,*

$$\alpha(G) \leq n \frac{\mu_1 - \delta(G)}{\mu_1}. \quad (3.5)$$

Segue-se a apresentação de majorantes para o número de estabilidade baseados em técnicas de programação quadrática. Em [MS65], a partir da formulação do programa quadrático não

convexo,

$$f(G) = \max \left\{ \frac{1}{2} x^T A_G x : x \in \Delta \right\}, \quad (3.6)$$

conhecida por formulação de Motzkin-Straus, onde $\Delta = \{x \geq 0 : \mathbf{e}^T x = 1\}$, prova-se que dado um grafo arbitrário G com número de clique $\omega(G)$, $f(G) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\omega(G)}\right)$. Tendo em conta que $\alpha(G) = \omega(G^c)$ pode concluir-se que a formulação de Motzkin-Straus para a determinação do número de clique do complementar de um grafo G de ordem n é equivalente à formulação quadrática para a determinação do número de estabilidade de G , isto é,

$$\frac{1}{\alpha(G)} = \min \left\{ x^T (A_G + I_n) x : x \in \Delta \right\}. \quad (3.7)$$

Em [Luz95] foi introduzido o programa quadrático convexo

$$\nu(G) = \max \left\{ 2\mathbf{e}^T x - x^T \left(\frac{A_G}{-\lambda_{\min}(A_G)} + I_n \right) x : x \geq 0 \right\}, \quad (3.8)$$

e provou-se que, sendo G um grafo com pelo menos uma aresta, o valor ótimo de (3.8) é um majorante para o número de estabilidade, $\alpha(G)$, ou seja, que se verifica a desigualdade $\alpha(G) \leq \nu(G)$. Se G é regular, $\nu(G)$ reduz-se ao majorante de Hoffman, ou seja,

$$\nu(G) = \frac{-n\lambda_{\min}(A_G)}{\lambda_{\max}(A_G) - \lambda_{\min}(A_G)}.$$

Adicionalmente em [Luz95], prova-se que $\alpha(G) = \nu(G)$ se e só se para qualquer estável máximo S de G se verifica a seguinte desigualdade,

$$-\lambda_{\min}(A_G) \leq \min\{|N_G(i) \cap S| : i \notin S\}. \quad (3.9)$$

Cardoso e Cvetković em [CC06] melhoraram esta condição provando que $\alpha(G) = \nu(G)$ se e só se existir um estável S de G que verifique (3.9).

Um grafo G tal que $\nu(G) = \alpha(G)$ diz-se um grafo com número de estabilidade quadrático convexo [Car01] e a classe de grafos tal $\nu(G) = \alpha(G)$ é denotada por \mathcal{Q} .

Seguem-se alguns resultados que permitem a identificação de grafos que pertencem a esta

classe.

Teorema 3.5 [Car01] *Um grafo conexo G com pelo menos uma aresta tal que o seu grafo linha, $L(G)$, não é completo tem um emparelhamento perfeito se e só se $L(G) \in \mathcal{Q}$.*

Como consequência imediata tem-se o seguinte corolário.

Corolário 3.6 [Car01] *Se G é um grafo conexo com um número par de arestas, então $L(L(G)) \in \mathcal{Q}$.*

Do corolário pode concluir-se que existe uma infinidade de grafos com número de estabilidade quadrático convexo.

Outras propriedades que relacionam a classe \mathcal{Q} e os conjuntos (k, τ) -regulares foram introduzidas em [Car03] e em [Ram05].

Teorema 3.7 [Car03] *Seja G um grafo regular. Então, $G \in \mathcal{Q}$ se e só se existe um conjunto $S \subseteq V(G)$ que é $(0, \tau)$ -regular, em que $\tau = -\lambda_{\min}(A_G)$.*

Teorema 3.8 [Ram05] *Seja G um grafo com pelo menos uma aresta e S um estável de G que é $(0, \tau)$ -regular. Então $G \in \mathcal{Q}$ se e só se $\tau = -\lambda_{\min}(A_G)$.*

Há diversos grafos com número de estabilidade quadrático convexo bem conhecidos, nomeadamente o grafo de Petersen P , para o qual $\lambda_{\min}(A_P) = -2$ e $\alpha(P) = \nu(P) = 4$ e o grafo Hoffman-Singleton HS , para o qual $\lambda_{\min}(A_{HS}) = -3$ e $\alpha(HS) = \nu(HS) = 15$, entre outros.

Existem alguns resultados apresentados em [CL01] que permitem o reconhecimento de grafos com número de estabilidade quadrático convexo. Considerando um grafo G e tendo em conta que, dado um conjunto de vértices $U \subset V(G)$, $G - U$ denota o grafo tal que $V(G - U) = V(G) \setminus U$ e $E(G - U) = \{ij : i, j \in V(G - U), ij \in E(G)\}$, tem-se que

1. Se existe $U \subset V(G)$ tal que $\nu(G) = \nu(G - U)$ e $\lambda_{\min}(A_G) < \lambda_{\min}(A_{G-U})$, então $\alpha(G) = \nu(G)$;

2. Se existe $i \in V(G)$ tal que $\nu(G) \neq \max\{\nu(G - \{i\}), \nu(G - N_G(i))\}$, então $G \notin \mathcal{Q}$;
3. Se existe $i \in V(G)$ tal que $\nu(G - \{i\}) \neq \nu(G - N_G(i))$, então
 - (a) Se $\nu(G) = \nu(G - \{i\})$, então $G \in \mathcal{Q}$ se e só se $G - \{i\} \in \mathcal{Q}$;
 - (b) Se $\nu(G) = \nu(G - N_G(i))$, então $G \in \mathcal{Q}$ se e só se $G - N_G(i) \in \mathcal{Q}$.

Estes resultados permitem o reconhecimento de grafos com número de estabilidade quadrático convexo, exceto para grafos que contenham um subgrafo induzido G que seja adverso, ou seja, um subgrafo que não tem vértices isolados, $\nu(G)$ e $\lambda_{\min}(A_G)$ são inteiros e para todo o vértice $i \in V(G)$ $\nu(G) = \nu(G - N_G(i))$ e $\lambda_{\min}(A_G) = \lambda_{\min}(A_{G-N_G(i)})$.

Em [CL01], considera-se o programa quadrático,

$$\nu_G(\tau) = \max \left\{ 2\hat{e}^T x - x^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x : x \geq 0 \right\}, \quad (3.10)$$

onde $\tau > 0$, e estabelece-se o seguinte resultado no que diz respeito às componentes de uma solução ótima para (3.10).

Teorema 3.9 [CL01] *Para todo $\tau > 0$, se x^* é uma solução ótima para (3.10), então*

$$\forall i \in V(G) [x^*]_i = \max \left\{ 0, 1 - \frac{a_G^i x^*}{\tau} \right\}, \quad (3.11)$$

onde $[x^*]_i$ é a i -ésima componente de $x^*(\tau)$ e a_G^i é a i -ésima linha da matriz A_G .

Como consequência, conclui-se que $\forall \tau > 0$ $1 \leq \nu_G(\tau) \leq n$, com $\nu_G(\tau) = 1$ se G é um grafo completo e $\nu_G(\tau) = n$ se G é um grafo nulo. Deste modo, provam-se algumas propriedades para a função $\nu_G :]0, +\infty[\mapsto [1, n]$, nomeadamente que $\nu_G(\tau)$ é um majorante para $\alpha(G)$.

Teorema 3.10 [CL01] *Dado um grafo G , a função $\nu_G :]0, +\infty[\mapsto [1, n]$ tem as seguintes propriedades:*

- a) $\forall \tau > 0$ $\alpha(G) \leq \nu_G(\tau)$.

b) $0 < \tau_1 < \tau_2 \Rightarrow \nu_G(\tau_1) \leq \nu_G(\tau_2)$.

c) $\forall \tau \geq -\lambda_{\min}(A_G)$ (3.10) é um programa convexo.

d) Supondo $\tau^* > 0$, as seguintes afirmações são equivalentes:

i. $\exists \bar{\tau} \in]0, \tau^*[$ tal que $\nu_G(\bar{\tau}) = \nu_G(\tau^*)$;

ii. $\nu_G(\tau^*) = \alpha(G)$ e $\forall \tau \in]0, \tau^*[$ (3.10) não tem soluções espúrias¹;

iii. $\forall \tau \in]0, \tau^*[$ $\nu_G(\tau) = \alpha(G)$.

e) $\forall U \subset V(G) \forall \tau > 0 \nu_{G-U}(\tau) \leq \nu_G(\tau)$.

Apresenta-se de seguida a generalização da condição necessária e suficiente para a obtenção da igualdade $\alpha(G) = \nu_G(\tau)$.

Teorema 3.11 [CL01] *Seja G um grafo com pelo menos uma aresta. Então para todo $\tau \geq -\lambda_{\min}(A_G)$, $\alpha(G) = \nu_G(\tau)$ se e só se para um estável S de G ,*

$$\tau \leq \min\{N_G(i) \cap S : i \notin S\}.$$

Ainda em [CL01], considerando o programa quadrático,

$$\nu_G(\tau) = \min \left\{ z^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) z : \hat{e}^T z = 1, z \geq 0 \right\}, \quad (3.12)$$

onde $\tau > 0$, estabelece-se a seguinte relação entre os programas quadráticos (3.10) e (3.12).

Teorema 3.12 [CL01] *Considerem-se os programas quadráticos (3.10) e (3.12) e sejam x^* e z^* soluções ótimas para (3.10) e (3.12), respetivamente. Então, $\frac{z^*}{\nu_G(\tau)}$ e $\frac{x^*}{\nu_G(\tau)}$ são soluções ótimas para (3.10) e (3.12), respetivamente e $\nu_G(\tau) = \frac{1}{\nu_G(\tau)}$.*

O número de Lovász [Lov79] está entre os majorantes para o número de estabilidade que melhor se aproximam da solução ótima. Este número é também conhecido como a função

¹uma solução ótima x^* de (3.10) designa-se por solução espúria se $\nu_G(\tau) = \alpha(G)$ e x^* não define um vetor característico de um estável máximo.

theta de Lovász denotada por $\vartheta(G)$ e é, em geral, considerado o mais famoso majorante para $\alpha(G)$ pelas diferentes formulações que lhe foram estabelecidas (ver, por exemplo, [GLS88, Knu94, Lov79]). Uma formulação possível para o número de Lovász é a seguinte:

$$\vartheta(G) = \min_Q \lambda_{\max}(\hat{e}\hat{e}^T + Q), \quad (3.13)$$

onde Q é uma matriz de adjacência ponderada de G , ou seja, é uma matriz $Q = [q_{ij}]$ tal que q_{ij} toma qualquer número real se $ij \in E(G)$ e $q_{ij} = 0$ se $i = j$ ou $ij \notin E(G)$. Tem-se então que

$$\alpha(G) \leq \vartheta(G).$$

Mais tarde, este majorante foi reformulado por Luz e Schrijver [LS05] em termos de uma família de programas quadráticos convexos. Estes, redefiniram o número de Lovász do seguinte modo:

$$\vartheta(G) = \min_C \nu(G, C), \quad (3.14)$$

onde $\nu(G, C) = \max \left\{ 2\hat{e}^T x - x^T \left(\frac{C}{-\lambda_{\min}(C)} + I_n \right) x : x \geq 0 \right\}$ e C é uma matriz de adjacência ponderada de G , ou seja, é uma matriz $C = [c_{ij}]$ tal que c_{ij} toma qualquer número real se $ij \in E(G)$ e $c_{ij} = 0$ se $i = j$ ou $ij \notin E(G)$ e provaram que $\alpha(G) \leq \nu(G, C)$. Por outro lado, é claro que $\vartheta(G) \leq \nu(G, C)$ qualquer que seja a matriz C nas condições definidas. Como consequência,

$$\alpha(G) \leq \vartheta(G) \leq \nu(G).$$

Um majorante que se tem revelado (computacionalmente) ainda mais próximo da solução ótima de (3.14) do que o número de Lovász é o majorante $\vartheta'(G)$ obtido, independentemente, em [MRR78] e em [Sch79]:

$$\vartheta'(G) = \min_C \lambda_{\max}(\hat{e}\hat{e}^T - C),$$

onde C é uma matriz ponderada estendida de G , isto é, $C = [c_{ij}]$ é uma matriz não nula com

entradas

$$c_{ij} = \begin{cases} \text{qualquer número real,} & \text{se } ij \in E(G) \\ 0, & \text{se } i = j \\ \text{qualquer número real não positivo,} & \text{se } ij \notin E(G) \end{cases}$$

Este majorante foi caracterizado em [Luz06] com base em programação quadrática convexa como se segue:

$$\vartheta'(G) = \min_C v(G, C),$$

com $v(G, C)$ definida anteriormente e C é uma qualquer matriz ponderada estendida de G .

3.2 Caso geral

Nesta secção referem-se alguns resultados que consistem, em particular, na determinação de um subconjunto de vértices de cardinalidade máxima que induz um subgrafo k -regular. Seguindo a notação introduzida em [Luz11] este máximo é denotado por $\alpha_k(G)$ para um qualquer grafo G . Note-se que no caso particular de $k = 0$ e $k = 1$ tem-se, respetivamente, o número de estabilidade, $\alpha_0(G) = \alpha(G)$, e o número de vértices de um emparelhamento induzido de G de máxima cardinalidade, $\alpha_1(G)$.

3.2.1 Resultados previamente conhecidos

Seja G um grafo de ordem n com pelo menos uma aresta. Em [CKL07] foi introduzida a seguinte família de problemas quadráticos convexos:

$$v_k(G) = \max \left\{ 2\hat{e}^T x - \frac{\tau}{k + \tau} x^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x : x \geq 0 \right\}, \quad (3.15)$$

onde $\tau = -\lambda_{\min}(A_G)$ e k um inteiro não negativo. Repare-se que se $k = 0$, $v_0(G) = v(G)$. De facto, o majorante (3.8) é um caso particular do majorante (3.15). Em [CKL07] provou-se que se S induz um subgrafo de G tal que a média dos graus dos vértices de G é k , tem-se um majorante quadrático convexo de cardinalidade máxima para um subgrafo induzido k -

regular, ou seja,

$$|S| \leq \nu_k(G). \quad (3.16)$$

Foram ainda caracterizados os grafos para os quais este majorante é atingido.

Teorema 3.13 [CKL07] *Seja G um grafo com pelo menos uma aresta e S um subconjunto de $V(G)$ que induz um subgrafo k -regular. Então, $|S| = \nu_k(\tau)$ se e só se*

$$\tau + k \leq |N_G(i) \cap S| \quad \forall i \notin S. \quad (3.17)$$

Se G é p -regular, então $|S| \leq n \frac{k - \lambda_{\min}(A_G)}{p - \lambda_{\min}(A_G)}$ e a igualdade verifica-se se e só se S é um conjunto $(k, k + \tau)$ -regular com $\tau = -\lambda_{\min}(A_G)$.

Recentemente, em [Luz11] foi introduzido o seguinte resultado:

Teorema 3.14 [Luz11] *Seja x^* uma solução ótima para o programa quadrático convexo (3.8). Então $\frac{k+\tau}{\tau}x^*$ é uma solução ótima para (3.15) e conseqüentemente,*

$$\nu_k(G) = \frac{k + \tau}{\tau} \nu(G), \quad \forall k \in \mathbb{N}. \quad (3.18)$$

Considerando a seguinte generalização de $\nu_k(G)$ introduzida em [Luz11],

$$\nu_k(G, C) = \max \left\{ 2\hat{e}^T x - \frac{\tau_C}{k + \tau_C} x^T \left(\frac{C}{\tau_C} + I_n \right) x : x \geq 0 \right\}, \quad (3.19)$$

onde C é uma matriz de adjacência ponderada de G e $\tau_C = -\lambda_{\min}(C)$, tem-se o seguinte resultado:

Teorema 3.15 [Luz11] *Seja G um grafo com pelo menos uma aresta, A_G a respetiva matriz de adjacência, C uma matriz de adjacência ponderada tal que $C \leq A_G$, isto é, qualquer entrada de C é não superior à respetiva entrada em A_G . Então,*

$$\alpha_k(G) \leq \nu_k(G, C). \quad (3.20)$$

Nas condições do teorema anterior, em [Luz11] prova-se que para cada k inteiro não negativo o número

$$\vartheta_k(G) = \min_{C \leq A_G} \nu_k(G, C) \quad (3.21)$$

é um majorante para $\alpha_k(G)$. Conclui-se ainda que $\vartheta_k(G)$ nunca é pior do que $\nu_k(G)$, ou seja, tem-se as seguintes desigualdades:

$$\alpha_k(G) \leq \vartheta_k(G) \leq \nu_k(G).$$

No entanto, devido à dificuldade do cálculo de $\vartheta_k(G)$ foram desenvolvidos, em [Luz11], dois métodos de aproximação deste número. Refira-se um dos métodos que consiste na obtenção de uma aproximação para $\vartheta_k(G)$ usando o número de Lovász. Para tal, tendo em conta que (3.19) pode ser reescrito como

$$\nu_k(G, C) = \frac{\tau_C}{k + \tau_C} \max \left\{ 2 \frac{k + \tau_C}{\tau_C} e^T x - x^T \left(\frac{C}{\tau_C} + I_n \right) x : x \geq 0 \right\}, \quad (3.22)$$

considera-se a seguinte generalização do Teorema 3.14.

Teorema 3.16 [Luz11] *Seja x^* uma solução ótima para (3.19). Então $\frac{k + \tau_C}{\tau_C} x^*$ é uma solução ótima para (3.22) e conseqüentemente,*

$$\nu_k(G, C) = \frac{k + \tau_C}{\tau_C} \nu(G, C), \quad \forall k \in \mathbb{N}.$$

Deste modo tem-se a seguinte aproximação para $\vartheta_k(G)$.

Teorema 3.17 [Luz11] *Seja G um grafo com pelo menos uma aresta. Se $\nu_k(G, C^*) = \min_{C \leq A_G} \nu(G, C)$, onde C^* é uma matriz de adjacência ponderada de G tal que $C^* \leq A_G$, então $\vartheta(G) = \nu(G, C^*)$ e conseqüentemente,*

$$\vartheta_k(G) \leq \frac{k + \tau_{C^*}}{\tau_{C^*}} \vartheta(G).$$

3.2.2 Generalizações a programas quadrático não necessariamente convexos

Apresentam-se de seguida algumas generalizações de resultados apresentados na secção anterior para programas não necessariamente convexos. Para tal considerem-se os seguintes programas quadráticos:

$$v_G(k, \tau) = \max \left\{ 2\hat{e}^T x - \frac{\tau}{k + \tau} x^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x : x \geq 0 \right\}, \quad (3.23)$$

e

$$v_G(k, \tau) = \min \left\{ \frac{\tau}{k + \tau} x^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x : \hat{e}^T x = 1, x \geq 0 \right\} \quad (3.24)$$

onde $\tau > 0$ e k um inteiro não negativo.

Observe-se que quando $k = 0$, $v_G(k, \tau)$ e $v_G(k, \tau)$ coincidem, respetivamente, com (3.10) e (3.12), ou seja,

$$v_G(0, \tau) = v_G(\tau) = \max \left\{ 2\hat{e}^T x - x^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x : x \geq 0 \right\} \quad (3.25)$$

e

$$v_G(0, \tau) = v_G(\tau) = \min \left\{ x^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x : x \in \Delta \right\}, \quad (3.26)$$

onde $\Delta = \{x \geq 0 : \hat{e}^T x = 1\}$.

O teorema que se segue estabelece uma relação entre os programas (3.24) e (3.23) e permite concluir que $|S| \leq \frac{1}{v_G(k, \tau)}$.

Teorema 3.18 *Considerem-se os programas quadráticos (3.23) e (3.24) e sejam x^* e z^* soluções ótimas para (3.23) e (3.24), respetivamente. Então, $\frac{z^*}{v_G(k, \tau)}$ e $\frac{x^*}{v_G(k, \tau)}$ são soluções ótimas para (3.23) e (3.24), respetivamente, e $v_G(k, \tau) = \frac{1}{v_G(k, \tau)}$.*

Prova. Sejam x^* e z^* soluções ótimas para (3.23) e (3.24), respetivamente. Da otimalidade de x^* para (3.23), pelas condições de Karush-Kuhn-Tucker (ver por exemplo [PSUJ93]),

existe $y^* \geq 0$ tal que

$$\begin{aligned} A_G x^* &= \tau(\hat{e} - x^*) + k\hat{e} + y^*; \\ x^{*T} y^* &= 0. \end{aligned}$$

Então,

$$\begin{aligned} \frac{\tau}{k+\tau} x^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x^* &= \frac{1}{k+\tau} x^{*T} A_G x^* + \frac{\tau}{k+\tau} x^{*T} I_n x^* \\ &= \frac{1}{k+\tau} x^{*T} [\tau(\hat{e} - x^*) + k\hat{e} + y^*] + \frac{\tau}{k+\tau} \|x^*\|^2 \\ &= \frac{\tau}{k+\tau} x^{*T} \hat{e} - \frac{\tau}{k+\tau} x^{*T} x^* + \frac{k}{k+\tau} x^{*T} \hat{e} + \frac{1}{k+\tau} x^{*T} y^* + \frac{\tau}{k+\tau} \|x^*\|^2 \\ &= \frac{\tau}{k+\tau} x^{*T} \hat{e} - \frac{\tau}{k+\tau} \|x^*\|^2 + \frac{k}{k+\tau} x^{*T} \hat{e} + \frac{\tau}{k+\tau} \|x^*\|^2 \\ &= x^{*T} \hat{e} \left(\frac{\tau}{k+\tau} + \frac{k}{k+\tau} \right) \\ &= x^{*T} \hat{e} = \hat{e}^T x^* \\ &= v_G(k, \tau), \end{aligned} \tag{3.27}$$

ou seja,

$$\frac{\tau}{k+\tau} x^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x^* = v_G(k, \tau). \tag{3.28}$$

Logo,

$$\frac{1}{v_G(k, \tau)} = \frac{\tau}{k+\tau} \frac{x^{*T}}{v_G(k, \tau)} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) \frac{x^*}{v_G(k, \tau)}. \tag{3.29}$$

Sendo $\frac{x^{*T}}{v_G(k, \tau)}$ admissível para (3.24) (repare-se que $\hat{e}^T \frac{x^*}{v_G(k, \tau)} = 1$ e $\frac{x^{*T}}{v_G(k, \tau)} \geq 0$) e z^* uma solução ótima para (3.24), vem:

$$\frac{\tau}{k+\tau} z^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) z^* \leq \frac{\tau}{k+\tau} \frac{x^{*T}}{v_G(k, \tau)} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) \frac{x^*}{v_G(k, \tau)}$$

logo,

$$v_G(k, \tau) z^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) v_G(k, \tau) z^* \leq x^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x^*. \tag{3.30}$$

Tendo em conta que $v_G(k, \tau) = 2\hat{e}^T x^* - \frac{\tau}{k+\tau} x^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x^*$, aplicando a desigualdade (3.30),

tem-se

$$v_G(k, \tau) \leq 2\hat{e}^T x^* - \frac{\tau}{k + \tau} v_G(k, \tau) z^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) v_G(k, \tau) z^*.$$

Uma vez que $\hat{e}^T x^* = v_G(k, \tau)$ e $\hat{e}^T z^* = 1$,

$$\begin{aligned} v_G(k, \tau) &\leq 2v_G(k, \tau) \hat{e}^T z^* - \frac{\tau}{k + \tau} v_G(k, \tau) z^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) v_G(k, \tau) z^* \\ &= 2\hat{e}^T v_G(k, \tau) z^* - \frac{\tau}{k + \tau} v_G(k, \tau) z^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) v_G(k, \tau) z^*. \end{aligned}$$

Pelo que se conclui que $v_G(k, \tau) z^*$ é solução ótima para (3.23) e, juntamente com (3.27), vem

$$\begin{aligned} v_G(k, \tau) &= \frac{\tau}{k + \tau} v_G(k, \tau) z^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) v_G(k, \tau) z^* \\ &= \frac{\tau}{k + \tau} (v_G(k, \tau))^2 z^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) z^* \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_G(k, \tau)} &= \frac{\tau}{k + \tau} z^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) z^* \Leftrightarrow \\ v_G(k, \tau) &= \frac{1}{v_G(k, \tau)}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Tendo em conta as igualdades (3.31) e (3.29) conclui-se que $\frac{x^*}{v_G(k, \tau)}$ é solução ótima para (3.24). Finalmente, da igualdade (3.31), e uma vez que $v_G(k, \tau) z^*$ é solução ótima para (3.23) conclui-se que $\frac{z^*}{v_G(k, \tau)}$ é solução ótima para (3.23). ■

Segue-se uma generalização do Teorema 3.9. Antes porém, convém definir a família de funções

$$\begin{aligned} f_{k, \tau}^G : \mathbb{R}_+^n &\rightarrow \mathbb{R} \\ x &\rightsquigarrow f_{k, \tau}^G(x) = 2\hat{e}^T x - \frac{\tau}{k + \tau} x^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x, \end{aligned}$$

onde \mathbb{R}_+^n denota o ortante de n -uplos de escalares não negativos.

Teorema 3.19 *Considere-se o programa quadrático (3.23). Se x^* é uma solução ótima para*

(3.23), então para todo $\tau > 0$

$$\forall i \in V(G) \quad x_i^* = \max \left\{ 0, \frac{k + \tau}{\tau} - \frac{\sum_{j \in N_G(i)} x_j^*}{\tau} \right\}.$$

Prova. Considere-se x^* uma solução ótima para (3.23) e sejam \bar{e} , \bar{x} e \bar{x}^* os subvetores de \hat{e} , x e x^* , respetivamente, sem a i -ésima componente.

Note-se que, sendo

$$f_{k,\tau}^{G-\{i\}}(\bar{x}) = 2\bar{e}^T \bar{x} - \frac{\tau}{k + \tau} \bar{x}^T \left(\frac{A_{G-\{i\}}}{\tau} + I_{n-1} \right) \bar{x}$$

tem-se,

$$\begin{aligned} v_G(k, \tau) &= \max_{\bar{x} \geq 0, x_i \geq 0, x \geq 0} \left(f_{k,\tau}^{G-\{i\}}(\bar{x}) + 2x_i - \frac{2}{k + \tau} x_i a_G^i x - \frac{\tau}{k + \tau} x_i^2 \right) \\ &= f_{k,\tau}^{G-\{i\}}(\bar{x}^*) + 2x_i^* - \frac{2}{k + \tau} x_i^* a_G^i x^* - \frac{\tau}{k + \tau} x_i^{*2} \\ &= f_{k,\tau}^{G-\{i\}}(\bar{x}^*) + \max_{x_i \geq 0} \varphi(x_i), \end{aligned}$$

onde $\varphi(x_i) = 2x_i - \frac{2}{k + \tau} x_i a_G^i x^* - \frac{\tau}{k + \tau} x_i^2$ e a_G^i é a i -ésima linha de A_G . Considerando a função φ tem-se $\frac{d}{dx_i} \varphi(x_i) = 2 - \frac{2}{k + \tau} a_G^i x^* - \frac{2\tau}{k + \tau} x_i$ e $\frac{d^2}{dx_i^2} \varphi(x_i) = -\frac{2\tau}{k + \tau} < 0$, $\forall \tau > 0, k \geq 0$. Assim, φ é côncava e atinge o seu máximo na solução de

$$\frac{d}{dx_i} \varphi(x_i) = 0.$$

ou seja,

$$\begin{aligned} 1 - \frac{1}{k + \tau} a_G^i x^* - \frac{\tau}{k + \tau} x_i &= 0 \\ -\frac{\tau}{k + \tau} x_i &= -1 + \frac{1}{k + \tau} a_G^i x^* \\ x_i &= \frac{k + \tau}{\tau} - \frac{a_G^i x^*}{\tau}. \end{aligned}$$

Como $\varphi(x_i^*) = \max_{x_i \geq 0} \varphi(x_i)$, conclui-se que, para todo $i \in V(G)$,

$$x_i^* = \max \left\{ 0, \frac{k + \tau}{\tau} - \frac{a_G^i x^*}{\tau} \right\} = \max \left\{ 0, \frac{k + \tau}{\tau} - \frac{\sum_{j \in N_G(i)} x_j^*}{\tau} \right\}.$$

■

Dado um grafo G e sendo $S \subseteq V(G)$ um subconjunto que induz um subgrafo k -regular de cardinalidade máxima, conclui-se que

$$|S| = \alpha_k(G) \leq \nu_G(k, \tau). \quad (3.32)$$

De facto, para qualquer vetor característico, $x(S)$, de um subconjunto k -regular máximo de G , $x(S)^T A_G x(S) = k|S|$. Assim, se $x(S)$ é vetor característico de um subconjunto k -regular máximo, então

$$\begin{aligned} \forall \tau > 0 \quad 2\hat{e}^T x(S) - \frac{\tau}{k + \tau} x(S)^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x(S) &= 2|S| - \frac{\tau}{k + \tau} \left(\frac{k|S|}{\tau} + \|x(S)\|^2 \right) \\ &= 2|S| - \frac{k}{k + \tau} |S| - \frac{\tau}{k + \tau} |S| \\ &= |S| \\ &\leq \nu_G(k, \tau). \end{aligned}$$

O próximo teorema relaciona $\nu_G(k, \tau)$ e $\nu_G(\tau)$.

Teorema 3.20 *Seja x^* uma solução ótima para (3.25) e considerem-se os programas (3.23) e (3.25). Então,*

$$\nu_G(k, \tau) = \frac{k + \tau}{\tau} \nu_G(\tau) \quad (3.33)$$

e x^ é solução ótima para (3.25) se e só se $\frac{k + \tau}{\tau} x^*$ é solução ótima para (3.23).*

Prova. Seja x^* uma solução ótica para (3.25) e faça-se $\bar{x} = \frac{k+\tau}{\tau}x^*$. Então,

$$\begin{aligned} v_G(\tau) &= 2\hat{e}^T x^* - x^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x^* \\ &= 2\hat{e}^T \frac{\tau}{k+\tau} \bar{x} - \left(\frac{\tau}{k+\tau} \right)^2 \bar{x}^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) \bar{x} \\ &= \frac{\tau}{k+\tau} \left(2\hat{e}^T \bar{x} - \frac{\tau}{k+\tau} \bar{x}^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) \bar{x} \right) \\ &\leq \frac{\tau}{k+\tau} v_G(k, \tau), \end{aligned}$$

ou seja, $v_G(\tau) \leq \frac{\tau}{k+\tau} v_G(k, \tau)$.

Suponhamos $v_G(\tau) < \frac{\tau}{k+\tau} v_G(k, \tau)$ e seja $\bar{\bar{x}}$ uma solução ótica para (3.23). Então,

$$\begin{aligned} v_G(\tau) &< \frac{\tau}{k+\tau} \left(2\hat{e}^T \bar{\bar{x}} - \frac{\tau}{k+\tau} \bar{\bar{x}}^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) \bar{\bar{x}} \right) \\ &= 2\hat{e}^T \frac{\tau}{k+\tau} \bar{\bar{x}} - \left(\frac{\tau}{k+\tau} \right)^2 \bar{\bar{x}}^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) \bar{\bar{x}} \\ &= 2\hat{e}^T x^{**} - x^{**T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x^{**}, \text{ com } x^{**} = \frac{\tau}{k+\tau} \bar{\bar{x}} \\ &\leq v_G(\tau), \end{aligned}$$

o que é uma contradição. Logo, $v_G(\tau) = \frac{\tau}{k+\tau} v_G(k, \tau)$.

Adicionalmente, x^* ser solução ótica para (3.25) é equivalente a $v_G(\tau) = 2\hat{e}^T x^* - x^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x^*$,

o que equivale a escrever

$$\begin{aligned} v_G(k, \tau) &= 2\hat{e}^T \left(\frac{k+\tau}{\tau} x^* \right) - \frac{k+\tau}{\tau} x^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x^* \\ &= 2\hat{e}^T \left(\frac{k+\tau}{\tau} x^* \right) - \frac{\tau}{k+\tau} \left(\frac{k+\tau}{\tau} \right)^2 x^{*T} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x^* \\ &= 2\hat{e}^T \left(\frac{k+\tau}{\tau} x^* \right) - \frac{\tau}{k+\tau} \left(\frac{k+\tau}{\tau} x^* \right)^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) \left(\frac{k+\tau}{\tau} x^* \right), \end{aligned}$$

ou seja, $\frac{k+\tau}{\tau} x^*$ é solução ótica para (3.23). ■

Tendo em conta a igualdade (3.33) conclui-se que para todo $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$

$$\alpha_k(G) \leq (k + 1)\alpha(G). \quad (3.34)$$

Com efeito, de (3.32) e (3.33) vem

$$\alpha_k(G) \leq \nu_G(k, \tau) = \frac{k + \tau}{\tau} \nu_G(\tau).$$

Logo, para $\tau = 1$ vem $\alpha_k(G) \leq (k + 1)\nu_G(1)$. Dado que, de acordo com [CL01], $\nu_G(1) = \alpha(G)$, obtém-se o resultado pretendido.

A desigualdade (3.34) foi obtida em [Luz11] utilizando a abordagem de Motzkin-Straus.

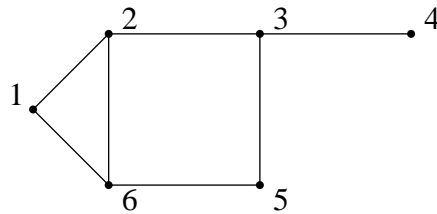


Figura 3.1: Grafo G para o qual $\nu_G(1) = 3$, $\nu_G(1, 1) = 6 = (1 + 1)\nu_G(1)$ e $\nu_G(2, 1) = 9 = (2 + 1)\nu_G(1)$.

A Figura 3.2 ilustra o gráfico da função $\nu_G(0, \tau) = \nu_G(\tau)$ para o grafo da Figura 3.1. Observe-se que, tal como provado em [CL01], a função $\nu_G(\tau)$ é não decrescente para todo valor de $\tau > 0$ e, para valores de $\tau \leq 1$, $\nu_G(\tau) = \alpha(G) = 3$.

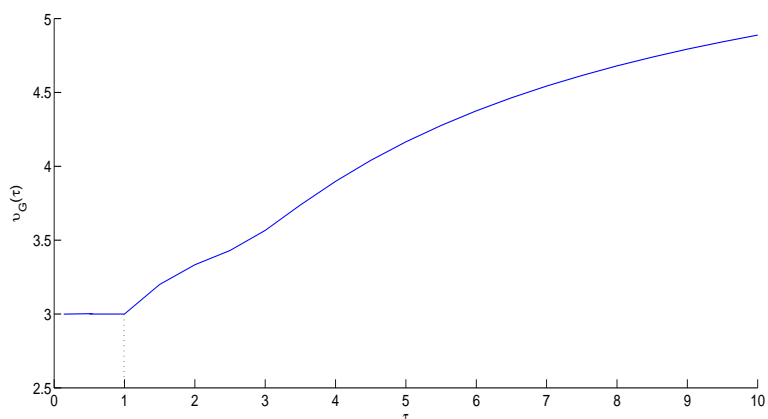
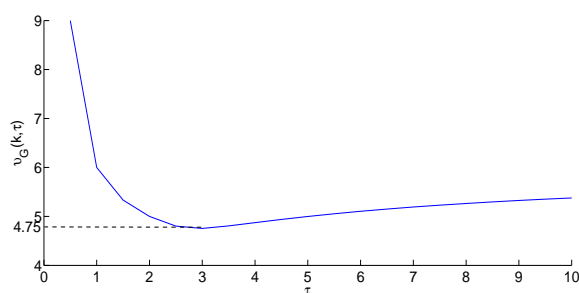
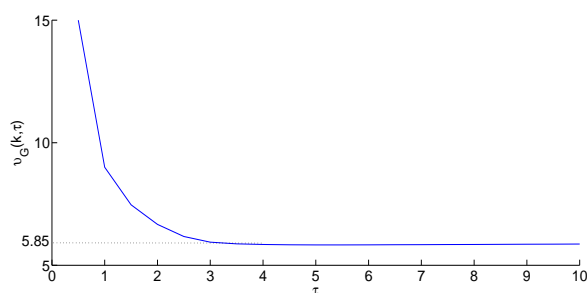


Figura 3.2: Gráfico de $\nu_G(\tau)$, onde G é o grafo da Figura 3.1.

Exemplificando o cálculo de $\nu_G(k, \tau)$ para o grafo da Figura 3.1 para valores de $k = 1, 2$ em função de $\nu_G(\tau)$, obtém-se os gráficos da Figura 3.3.



(a) Gráfico de $\nu_G(1, \tau)$.



(b) Gráfico de $\nu_G(2, \tau)$.

Figura 3.3: Gráficos de $\nu_G(k, \tau)$, para $k = 1, 2$, onde G é o grafo da Figura 3.1.

De acordo com os gráficos da Figura 3.3 observe-se que o mínimo de $\nu_G(1, \tau)$ é obtido para valores próximos de 3, obtendo-se $\nu_G(1, 3) = 4.75$. No caso da Figura 3.3b verifica-se que

$\nu_G(2, \tau)$ atinge o mínimo para valores não inferiores a 4, obtendo-se $\nu_G(2, 4) = 5.85$. Com efeito, tem-se $\nu_G(2, 5) = 5.83$.

O próximo teorema permite concluir que a desigualdade (3.34) se verifica na forma de igualdade para uma certa família de grafos.

Teorema 3.21 *Seja G um grafo e $S \subseteq V(G)$ um estável. Seja ainda $T \subseteq V(G)$ tal que $T \cap S = \emptyset$ e $G[T]$ é um subgrafo $(k - 1)$ -regular. Então, $G[T \cup S]$ é k -regular se e só se a família de subconjuntos de vértices $N_G(i) \cap T$, com $i \in S$, é uma partição de T com $|N_G(i) \cap T| = k \quad \forall i \in S$. Adicionalmente, se S é um estável máximo, então $\alpha_k(G) = (k + 1)\alpha(G)$.*

Prova. Suponhamos que $G[T \cup S]$ é k -regular. Uma vez que $G[T]$ é $(k - 1)$ -regular, $G[T \cup S]$ é tal que $\forall j \in T \quad |N_G(j) \cap S| = 1$, logo $\forall p, q \in S, p \neq q \quad (N_G(p) \cap N_G(q)) = \emptyset$, caso contrário existiria $i \in S$ tal que $|N_G(i) \cap S| \geq 2$. Como todos os vértices de T têm um vizinho em S e S é um estável, $\bigcup_{i \in S} (N_G(i) \cap T) = T$. Tendo ainda em conta que $N_G(i) \cap T \neq \emptyset \quad \forall i \in S$, pois por hipótese $G[T \cup S]$ é k -regular, conclui-se que a família de subconjuntos $N_G(i) \cap T$, com $i \in S$, é uma partição de T com $|N_G(i) \cap T| = k \quad \forall i \in S$.

Reciprocamente, sendo a família de subconjuntos de vértices $N_G(i) \cap T, i \in S$ uma partição de T tal que $\forall i \quad |N_G(i) \cap T| = k$, então cada vértice de S tem exatamente k vizinhos em T . Assim, o subgrafo induzido por $T \cup S$ é tal que cada vértice de T tem $k - 1$ vizinhos em T e um vizinho em S , pelo que $G[T \cup S]$ é k -regular.

Adicionalmente, $|(N_G(i) \cap T) \cup \{i\}| = k + 1 \quad \forall i \in S$ e, sendo S é um estável máximo, $|T \cup S| = (k + 1)|S| = (k + 1)\alpha(G)$. Assim, $(k + 1)\alpha(G) = |T \cup S| \leq \alpha_k(G) \leq (k + 1)\alpha(G)$ (onde a última desigualdade decorre de (3.34)), pelo que se conclui que $\alpha_k(G) = (k + 1)\alpha(G)$. ■

Este teorema permite a construção de grafos k -regulares como extensões de alguns grafos $(k - 1)$ -regulares para os quais se verifica a igualdade $\alpha_k(G) = (k + 1)\alpha(G)$, nos casos em que o conjunto de vértices isolados acrescentados é um estável máximo. Admitindo que o grafo $(k - 1)$ -regular tem ordem n_{k-1} , é condição necessária e suficiente para a existência desta extensão que k divida n_{k-1} . Com efeito, basta partir o conjunto de vértices do grafo

$(k - 1)$ -regular em $\frac{n_{k-1}}{k} = p$ subconjuntos de cardinalidade k , acrescentar p vértices isolados e ligar cada um destes p vértices a k vértices de subconjuntos distintos da partição. Observe-se que, de acordo com esta técnica, o grafo k -regular G_k terá ordem $n_k = n_{k-1} + \frac{n_{k-1}}{k}$, produzindo-se a equação de recorrência $kn_k = (k + 1)n_{k-1}$, $n_0 \in \mathbb{N}$, que resulta na fórmula fechada $n_k = n_0(k + 1)$, com $n_0 \in \mathbb{N}$.

Como exemplo considere-se a seguinte sequência de grafos obtida com recurso a esta técnica. Parte-se do grafo 0-regular representado na Figura 3.4 e obtém-se o grafo 1-regular da Figura 3.5. Posteriormente, este grafo 1-regular é estendido ao grafo 2-regular da Figura 3.6 que por sua vez é estendido ao grafo 3-regular da Figura 3.7.



Figura 3.4: Grafo 0-regular G_0

1. Determinação do grafo 1-regular G_1 como extensão do grafo G_0 :

Considerando o conjunto $\{1, 2\}$ obtém-se a partição em $p = \frac{2}{1} = 2$ subconjuntos de cardinalidade $k = 1$, $\{\{1\}, \{2\}\}$. Acrescentando o conjunto de vértices isolados $\{3, 4\}$ e as arestas de acordo com o procedimento anteriormente descrito, obtém-se o grafo 1-regular G_1 .

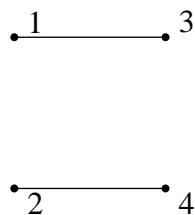


Figura 3.5: Grafo 1-regular G_1

2. Determinação do grafo 2-regular G_2 como extensão do grafo G_1 :

Dado que $V(G_1) = \{1, 2, 3, 4\}$, considerando a partição em $p = \frac{4}{2} = 2$ subconjuntos de cardinalidade $k = 2$, $\{\{1, 2\}, \{3, 4\}\}$, acrescentando o conjunto de vértices isolados de

cardinalidade p , $\{5,6\}$ e acrescentando, de acordo com o procedimento, as arestas 51 e 52 e 63 e 64, por exemplo, obtém-se o grafo 2-regular G_2 .

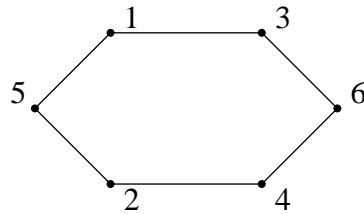


Figura 3.6: Grafo 2-regular G_2

Note-se que se podiam ter acrescentado, por exemplo, as arestas 52 e 54 e 61 e 63, obtendo-se também um grafo 2-regular formado, neste caso, por dois triângulos.

3. Determinação do grafo 3-regular G_3 como extensão do grafo G_2 :

Considerando o conjunto $\{1,2,3,4,5,6\}$, obtém-se a partição com $p = \frac{6}{3} = 2$ subconjuntos de cardinalidade $k = 3$, $\{\{2,4,5\}, \{1,3,6\}\}$. Acrescentando o conjunto de vértices isolados $\{7,8\}$ e as arestas de acordo com o procedimento descrito, obtém-se o grafo 3-regular G_3 .

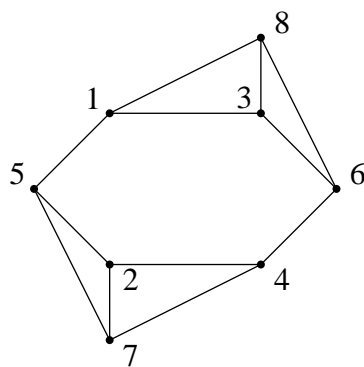


Figura 3.7: Grafo 3-regular G_3

Note-se que em G_1 se verifica a igualdade $\alpha_1(G_1) = 2\alpha(G_1)$. Porém, para G_2 e G_3 já não se verifica, pois o conjunto de vértices isolados acrescentados não constitui um estável máximo.

Determinação de subgrafos induzidos k -regulares de ordem máxima para uma classe particular de grafos

Seguidamente apresenta-se um algoritmo não polinomial que se baseia no Teorema 3.19 e que permite resolver o problema da determinação de um subconjunto de vértices de um grafo arbitrário G que induz um subgrafo k -regular de ordem máxima. No caso em que os grafos verificam a igualdade $\nu_G(k, \tau) = \alpha_k(G)$ o algoritmo determina o conjunto de vértices de cardinalidade máxima que induz um subgrafo k -regular, caso esta igualdade não se verifique o algoritmo permite concluir a não existência de um subgrafo nas condições pretendidas. O algoritmo foi implementado em MatLab (versão R2012a) e tem como dados de entrada um grafo G de ordem n com pelo menos uma aresta e o valor pretendido para k ($0 \leq k \leq n - 1$).

Descrição do algoritmo

O algoritmo tem como dados de entrada a matriz de adjacência de um grafo de ordem n e o valor de k correspondente ao valor pretendido para a regularidade do subgrafo induzido de cardinalidade máxima. Inicialmente, considera-se um vetor x com n componentes iguais a dois, pois com a implementação em MatLab houve necessidade de inicializar o vetor com n componentes diferentes de zero e um, tal que $x(i)$ corresponde à i -ésima componente de x . O algoritmo começa por fazer $x(1) = 1$ e, enquanto $i \leq n$, prossegue com o preenchimento das restantes componentes com um ou zero dependendo dos testes que vai efetuando.

De facto, em cada iteração o algoritmo testa se existe alguma componente em x com valor um tal que o correspondente vértice tem mais do que k vizinhos. Tendo em conta o Teorema 3.19, se existir tal componente, a solução dir-se-á não admissível pelo que é executado o procedimento VoltaAtras explicado mais à frente. No caso das componentes em x iguais a zero o $\max \left\{ 0, \frac{k+\tau}{\tau} - \frac{\sum_{j \in N_G(v)} x_j}{\tau} \right\}$ do Teorema 3.19 deverá ser zero. Assim, se o número de vizinhos do vértice correspondente é menor do que $k + \tau$, onde $\tau = \lceil -\lambda_{\min}(A_G) \rceil$, averigua se há possibilidade de este número ser superior ou igual a $k + \tau$. Se sim, o algoritmo prossegue, caso contrário a solução dir-se-á não admissível e é executado o procedimento VoltaAtras.

Ao longo do algoritmo são efetuados alguns cálculos. Sempre que é analisada a admissibilidade de uma solução, para cada vértice com componente em x igual a zero ou um, é

calculado o respetivo número de vizinhos cuja componente em x é igual a um denotado por *som*. Para cada vértice com componente em x igual a zero, é ainda calculado o respetivo número de vizinhos com componente em x igual a dois que se denota por *contaresto*. Refiram-se ainda as variáveis globais *reinicio*, *paragem*, *ultimo* e *b*. A variável *reinicio*, inicializada a zero, toma o valor um sempre que é executado o procedimento *VoltaAtras*, passando de seguida a retomar o valor zero. A variável *paragem* funciona como critério de paragem do algoritmo. Esta é inicializada a zero e altera o seu valor para um quando são analisados todos os casos como não viáveis, indicando não haver garantias de solução ótima e o algoritmo pára. Por outro lado, se no final esta variável tiver o valor zero, indica que a solução ótima foi encontrada. Finalmente, as variáveis *ultimo* e *b* indicam a posição da última componente em x alterada, sendo *b* introduzida no procedimento *VoltaAtras*.

No final, se a solução ótima é encontrada, x é o vetor característico correspondente ao subconjunto de vértices do subgrafo induzido k -regular de ordem máxima.

Resta descrever o procedimento *VoltaAtras* que é executado sempre que não há admissibilidade da solução que está a ser analisada. Se a última componente em x diferente de dois é igual a um altera-a para zero e testa o vetor x resultante de acordo com o anteriormente descrito, prosseguindo ou não com o preenchimento das restantes componentes e testes aos vetores resultantes, dependendo da admissibilidade da solução gerada. No caso de a última componente em x diferente de dois ser igual a zero procura a última componente igual a um altera-a para zero e as componentes em posições superiores tomam o valor dois. Segue-se novo teste ao vetor x resultante e, caso este seja admissível, continua com o preenchimento das restantes componentes em x e testes aos vetores resultantes.

Segue-se a descrição formal deste algoritmo.

Algoritmo**Entradas:** A_G e k **Cálculos iniciais:** $\tau = \lceil -\lambda_{\min}(A_G) \rceil$ e n .**Inicializações:** $i = 1$; x : vetor com n componentes iguais a 2; $paragem = 0$; $reinicio = 0$.

1. Enquanto $i \leq n$
 - 1.1 Se $x(i) = 2$ fazer $x(i) = 1$; $ultimo = i$.
 - 1.2 Para $j = 1$ até $ultimo$ calcular som
 - Se $x(j) = 1$ e $som > k$ escrever 'solução não admissível' e executar procedimento VoltaAtras.
 - Se $x(j) \neq 1$ e $som < k + \tau$ calcular $contaresto$ e se $som + contaresto < k + \tau$ escrever 'solução não admissível' e executar procedimento VoltaAtras.
 - 1.3 Fazer $i = i + 1$.
 - Se $reinicio = 1$ fazer $i = b + 1$ e $reinicio = 0$.
 - Se $paragem = 1$ escrever 'Não há garantias de solução ótima' e PARAR.
2. Se $paragem = 0$, escrever 'solução ótima encontrada' e o vetor x .

Onde o procedimento VoltaAtras é descrito no seguinte quadro:

Procedimento VoltaAtras

1. Se $x(ultimo) = 1$ fazer $x(ultimo) = 0$, $b = ultimo - 1$, $reinicio = 1$ e voltar a 1.3.
2. Se $x(ultimo) \neq 1$ e $ultimo \neq 1$ fazer $b = ultimo$.
 - 2.1 Enquanto $x(b) \neq 1$ fazer $b = b - 1$; se $b = 0$ escrever 'Não há garantias de solução ótima' e PARAR.
 - 2.2 Fazer $x(b) = 0$ e para todo $v \in V(G)$ tal que $v > b$ fazer $x(v) = 2$.
 - 2.3 Fazer $reinicio = 1$.
3. Se $x(ultimo) \neq 1$ e $ultimo = 1$ fazer $paragem = 1$.

Exemplo

O algoritmo aqui descrito pode ser explicado como um procedimento que gera uma árvore de pesquisa que é percorrida em profundidade, em que a interrupção da exploração de um ramo da árvore se deve à não admissibilidade da solução relativa a esse ramo. Sendo G um grafo

de ordem n , na raiz da árvore está o vetor x inicial que é aqui representado como um vetor com n componentes vazias ($_$) correspondentes às componentes iguais a dois anteriormente referidas. Depois, em cada um dos seguintes i níveis da árvore, com $i \in \{1, \dots, n\}$, indicam-se os vetores x resultantes do preenchimento da i -ésima componente de x com um ou zero nos ramos da esquerda e direita, respetivamente.

A título de ilustração seguem-se dois exemplos muito simples de aplicação deste algoritmo. Considere-se para um primeiro exemplo o grafo da Figura 3.8,

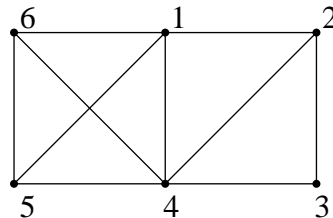


Figura 3.8: Grafo G com $\nu_G(1,2) = 4$.

A árvore que se segue ilustra os diferentes passos do algoritmo considerando, para o grafo da Figura 3.8, $k = 1$ e $\tau = 2$.

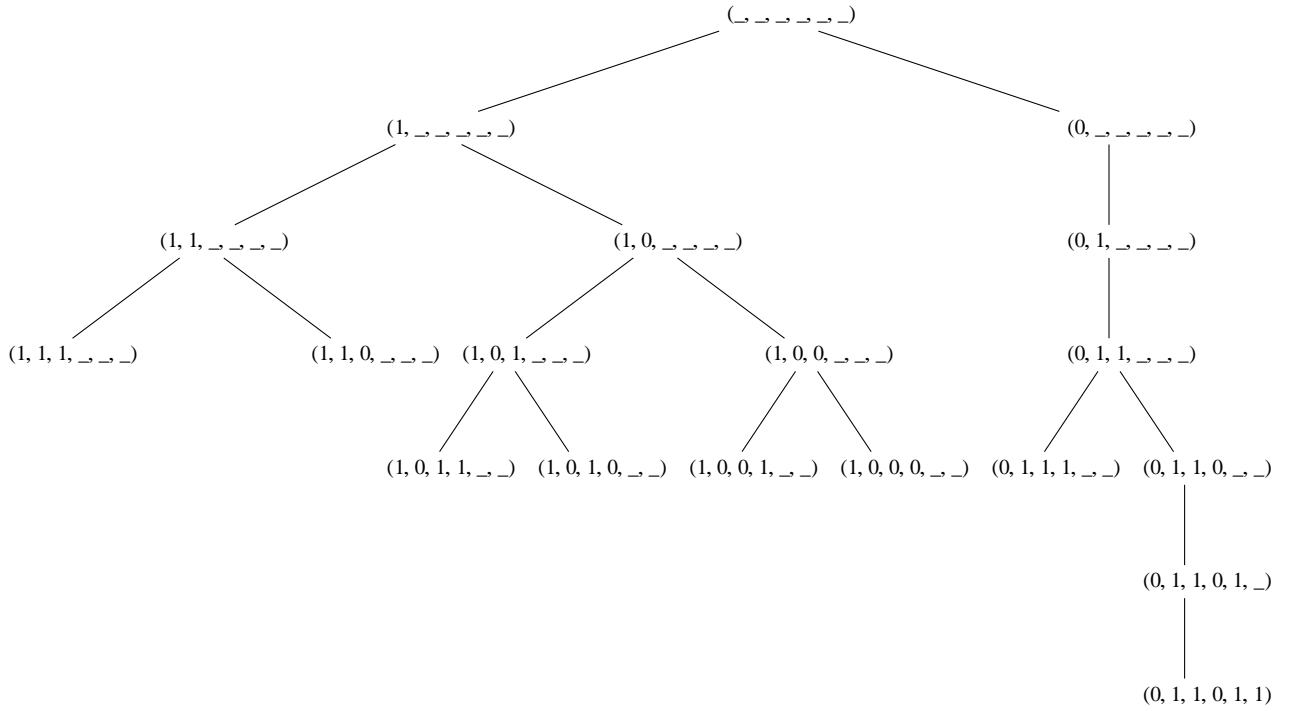


Figura 3.9: Árvore ilustrativa do algoritmo para o grafo da Figura 3.8

Da análise da árvore da Figura 3.9 é possível observar algumas soluções não admissíveis. Por exemplo, nas soluções do tipo $x^* = (1, 1, 1, _, _, _)$, $x_2^* = \max \left\{ 0, \frac{k+\tau}{\tau} - \frac{\sum_{j \in N_G(2)} x_j}{\tau} \right\} \leq \max \left\{ 0, \frac{3-2}{2} \right\} = 0.5 < 1$ nunca sendo possível obter $x_2^* = 1$. Um outro exemplo de soluções não admissíveis são as soluções do tipo $x^* = (1, 0, 1, 0, _, _)$, em que $x_2^* = \max \left\{ 0, \frac{k+\tau}{\tau} - \frac{\sum_{j \in N_G(2)} x_j}{\tau} \right\} \leq \max \left\{ 0, \frac{3-2}{2} \right\} = 0.5$ e o número de vizinhos do vértice 2 não poderá ser aumentado de modo a que este máximo dê zero. No final, o vetor característico correspondente a um subgrafo induzido 1-regular máximo é $(0, 1, 1, 0, 1, 1)$, ou seja o subconjunto de vértices $\{2, 3, 5, 6\}$ induz um subgrafo de G 1-regular máximo.

Para um segundo exemplo considere-se o grafo da Figura 3.10 e $k = 1$.

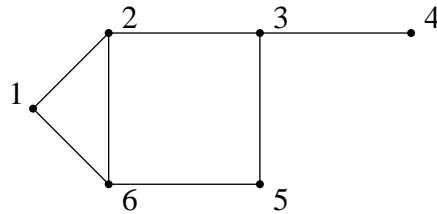


Figura 3.10: Grafo G com $v_G(1,2) = 5$.

Neste caso, tem-se a seguinte árvore:

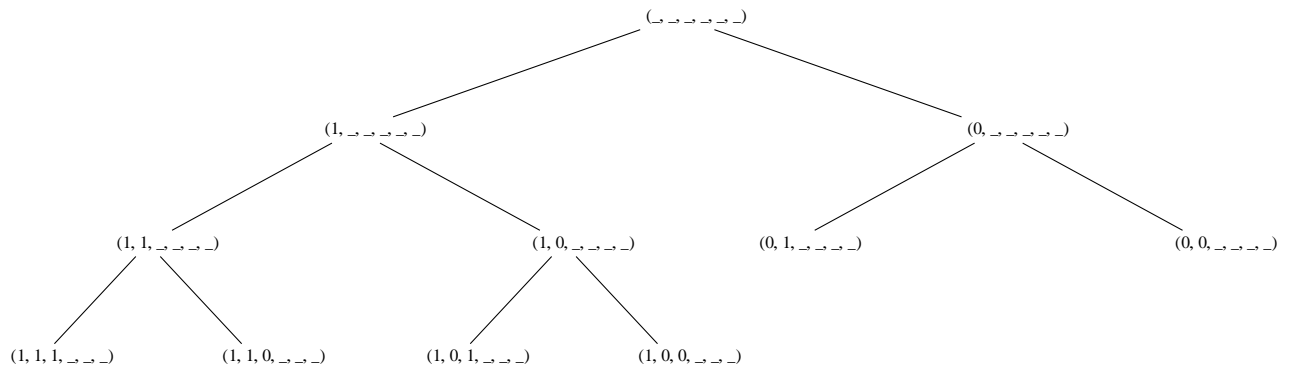


Figura 3.11: Árvore ilustrativa do algoritmo para o grafo da Figura 3.10

Pela análise da árvore da Figura 3.11 conclui-se que não existe vetor característico correspondente a um subgrafo induzido 1-regular de ordem máxima que seja solução ótima do problema da determinação de um subgrafo induzido 1-regular de máxima cardinalidade no grafo da Figura 3.10.

Capítulo 4

Majorantes baseados em programação convexa

Neste capítulo são introduzidos novos majorantes espectrais para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares baseados em programação quadrática convexa. Na Secção 4.1 são analisados majorantes quadráticos convexos e apresentadas condições necessárias e suficientes para que estes majorantes sejam atingidos. Tendo em conta esta abordagem, na Secção 4.2 introduzem-se majorantes espectrais para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares. Na Secção 4.3 são apresentados alguns resultados complementares introduzidos em [CR10]. Finalmente, apresentam-se alguns resultados experimentais de modo a estabelecer comparações entre os majorantes introduzidos neste capítulo. Ao longo deste capítulo considera-se G um grafo tal que $E(G) \neq \emptyset$.

4.1 Técnicas de programação quadrática convexa

Considere-se a família de funções quadráticas dependentes dos parâmetros $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ e $\tau > 0$, $f_{k,\tau}^G : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, tal que

$$f_{k,\tau}^G(x) = 2\hat{e}^T x - \frac{\tau}{k + \tau} x^T \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x. \quad (4.1)$$

A função $f_{k,\tau}^G$ é côncava para valores de $\tau \geq -\lambda_{\min}(A_G)$, pois a respetiva matriz hessiana, $-\frac{2}{k+\tau}(A_G + \tau I_n)$, é semidefinida negativa para estes valores de τ . Assim, $f_{k,\tau}^G$ admite um máximo global em x^* se e só se $\nabla f_{k,\tau}^G(x^*) = 0$, ou seja, se e só se $f_{k,\tau}^G(x^*) = e^T x^*$. Adicionalmente, uma vez que, de acordo com [CKL07] $\max_{x \geq 0} f_{k,\tau}^G(x)$, com $\tau = -\lambda_{\min}(A_G)$, é um majorante para a ordem de um subgrafo induzido k -regular, conclui-se que se mantém um majorante para valores de $\tau > 0$ arbitrários. De facto, se S é um subconjunto de vértices de G que induz um subgrafo k -regular e $x = x(S)$ é o vetor característico de S ,

$$\begin{aligned} f_{k,\tau}^G(x) &= 2|S| - \frac{\tau}{k+\tau} \left(\frac{k|S|}{\tau} + |S| \right) \\ &= \left(2 - \frac{\tau}{k+\tau} \frac{k+\tau}{\tau} \right) |S| \\ &= |S| \end{aligned}$$

e portanto, $\forall \tau > 0$

$$\begin{aligned} |S| &\leq \max_{x \geq 0} f_{k,\tau}^G(x) \\ &\leq \max f_{k,\tau}^G(x), \end{aligned}$$

pelo que $\max f_{k,\tau}^G(x)$ é também um majorante para a cardinalidade de um subgrafo induzido k -regular, se tal subgrafo induzido existir.

O próximo teorema estabelece uma caracterização dos grafos que contêm subgrafos induzidos k -regulares de cardinalidade igual a $\max_{x \geq 0} f_{k,\tau}^G(x)$ e $\max f_{k,\tau}^G(x)$, respetivamente.

Teorema 4.1 [CP09] *Seja G um grafo simples, $\tau \geq -\lambda_{\min}(A_G)$ e $S \subseteq V(G)$ um subconjunto de vértices que induz um subgrafo de G k -regular. Então,*

$$(i) \quad |S| = \max_{x \geq 0} f_{k,\tau}^G(x) \text{ se e só se } \tau + k \leq |N_G(i) \cap S| \quad \forall i \notin S.$$

$$(ii) \quad |S| = \max f_{k,\tau}^G(x) \text{ se e só se } S \text{ é um conjunto } (k, k + \tau)\text{-regular.}$$

Prova. Seja $S \subseteq V(G)$ um subconjunto que induz um subgrafo k -regular de máxima cardinalidade e $x^* = x(S)$ o vetor característico de S .

- (i) A demonstração é semelhante à demonstração do Teorema 3.2 apresentada em [CKL07] para valores de $\tau = -\lambda_{\min}(A_G)$.
- (ii) $|S|$ é o valor ótimo de $\max f_{k,\tau}^G(x)$ se e só se x^* é solução do sistema $\nabla f_{k,\tau}^G(x) = 0 \Leftrightarrow \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n\right)x = \frac{k+\tau}{\tau}\hat{e}$, ou seja, se $A_G x^* = \tau \left(\frac{k+\tau}{\tau}\hat{e} - x^*\right)$. Tendo em conta que $(A_G x^*)_i = |N_G(i) \cap S|$ com $i \in V(G)$, tem-se que
- se $i \in S$, então $x_i = 1$ e conseqüentemente $(A_G x^*)_i = \tau \left(\frac{k+\tau}{\tau} - 1\right) = k$;
 - se $i \notin S$, então $x_i = 0$ e conseqüentemente $(A_G x^*)_i = \tau \left(\frac{k+\tau}{\tau} - 0\right) = k + \tau$.

Conclui-se assim que

$$|N_G(i) \cap S| = \begin{cases} k + \tau & \text{se } i \notin S \\ k & \text{se } i \in S, \end{cases} \quad (4.2)$$

ou seja, S é um conjunto $(k, k + \tau)$ -regular. ■

O lema a seguir é utilizado na demonstração do Teorema 4.4.

Lema 4.2 [CP09] *Seja G um grafo e $\bar{\lambda} \in \text{MainSp}(G^c)$ tal que $\bar{\lambda} \neq -1$. Se $\hat{u} \in \varepsilon_{G^c}(\bar{\lambda}) \setminus \hat{e}^\perp$, então $x^* = \frac{k+\bar{\lambda}+1}{\hat{e}^T \hat{u}} \hat{u}$ é um ponto crítico da função quadrática $f_{k,\bar{\lambda}+1}^G$.*

Prova. Seja G um grafo de ordem n e $J = A_G + A_{G^c} + I_n$, ou seja J é a matriz de ordem n com todas as entradas iguais a 1 tal que $\sigma(J) = \{[n], [0]^{n-1}\}$. Os vetores próprios de J são \hat{e} e $\hat{e}_1 - \hat{e}_j$, para $j = 2, \dots, n$, onde \hat{e}_i denota o i -ésimo vetor da base canónica. Sendo $\hat{u} \in \varepsilon_{G^c}(\bar{\lambda}) \setminus \hat{e}^\perp$, existem escalares, não todos nulos, $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$ tais que

$$\hat{u} = \beta_1 \hat{e} + \sum_{j=2}^n \beta_j (\hat{e}_1 - \hat{e}_j) = \beta_1 \hat{e} + \left(\sum_{j=2}^n \beta_j \right) \hat{e}_1 - \sum_{j=2}^n \beta_j \hat{e}_j.$$

Considerando $\hat{u}_1, \dots, \hat{u}_n$ componentes do vetor próprio \hat{u} , obtêm-se as igualdades $\hat{u}_j = \beta_1 -$

$\beta_j, j = 2, \dots, n$ e $\hat{u}_1 = \beta_1 + \sum_{j=2}^n \beta_j$, a partir das quais se tem as seguintes igualdades:

$$\begin{aligned}
 \beta_n &= \beta_1 - \hat{u}_n \\
 \beta_{n-1} &= \beta_1 - \hat{u}_{n-1} \\
 &\vdots \\
 \beta_2 &= \beta_1 - \hat{u}_2 \\
 \beta_1 &= \hat{u}_1 - \sum_{j=2}^n \beta_j.
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Consequentemente, substituindo em (4.3) os β_j , com $j = 2, \dots, n$, obtidos nas $(n - 1)$ desigualdades anteriores tem-se:

$$\begin{aligned}
 \beta_1 &= \hat{u}_1 - ((\beta_1 - \hat{u}_2) + \dots + (\beta_1 - \hat{u}_n)) \\
 \Leftrightarrow \beta_1 &= \hat{u}_1 - (n - 1)\beta_1 + \sum_{j=2}^n \hat{u}_j \\
 \Leftrightarrow \beta_1 &= \hat{u}_1 - n\beta_1 + \beta_1 + \sum_{j=2}^n \hat{u}_j \\
 \Leftrightarrow n\beta_1 &= \hat{u}_1 + \sum_{j=2}^n \hat{u}_j \\
 \Leftrightarrow n\beta_1 &= \sum_{j=1}^n \hat{u}_j \\
 \Leftrightarrow n\beta_1 &= \hat{e}^T \hat{u}.
 \end{aligned}$$

Assim, supondo $\beta_1 \neq 0$ (ou seja, $\hat{e}^T \hat{u} \neq 0$) e $\bar{\lambda} \neq -1$,

$$\begin{aligned}
 J\hat{u} = n\beta_1 \hat{e} &\Leftrightarrow (\bar{\lambda} + 1)\hat{u} + A_G \hat{u} = n\beta_1 \hat{e} \\
 &\Leftrightarrow \left(\frac{A_G}{\bar{\lambda} + 1} + I_n \right) \hat{u} = \frac{n\beta_1}{\bar{\lambda} + 1} \hat{e} \\
 &\Leftrightarrow \left(\frac{A_G}{\bar{\lambda} + 1} + I_n \right) \frac{\bar{\lambda} + 1}{\hat{e}^T \hat{u}} \hat{u} = \hat{e} \\
 &\Leftrightarrow \left(\frac{A_G}{\bar{\lambda} + 1} + I_n \right) \frac{k + \bar{\lambda} + 1}{\bar{\lambda} + 1} \frac{\bar{\lambda} + 1}{\hat{e}^T \hat{u}} \hat{u} = \frac{k + \bar{\lambda} + 1}{\bar{\lambda} + 1} \hat{e} \\
 &\Leftrightarrow \left(\frac{A_G}{\bar{\lambda} + 1} + I_n \right) \frac{k + \bar{\lambda} + 1}{\hat{e}^T \hat{u}} \hat{u} = \frac{k + \bar{\lambda} + 1}{\bar{\lambda} + 1} \hat{e}.
 \end{aligned}$$

e portanto $\frac{k+\bar{\lambda}+1}{\hat{e}^T \hat{u}} \hat{u}$ é solução do sistema $\nabla f_{k,\bar{\lambda}+1}^G(x) = 0 \Leftrightarrow \left(\frac{A_G}{\bar{\lambda}+1} + I_n\right) x = \frac{k+\bar{\lambda}+1}{\bar{\lambda}+1} \hat{e}$, ou seja, é ponto crítico da função $f_{k,\bar{\lambda}+1}^G$. ■

4.2 Majorantes espectralis

Uma vez que $\max_{x \geq 0} f_{k,\tau}^G(x) \leq \max f_{k,\tau}^G(x)$, tem-se o seguinte resultado.

Teorema 4.3 [CP09] *Se $S \subseteq V(G)$ induz um subgrafo k -regular, $\bar{\lambda} \in \text{MainSp}(G^c)$ e $\bar{\lambda}+1 \geq -\lambda_{\min}(A_G)$, então*

$$|S| \leq k + \bar{\lambda} + 1. \quad (4.4)$$

Prova. Suponha-se $\bar{\lambda} \in \text{MainSp}(G^c)$ e $\bar{\lambda} + 1 \geq -\lambda_{\min}(A_G)$. A hessiana da função $f_{k,\tau}^G$, $-\frac{\tau}{k+\tau} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n\right)$, é semidefinida negativa para valores de $\tau \geq -\lambda_{\min}(A_G)$. Assim, fazendo $\tau = \bar{\lambda} + 1$, tem-se que a função $f_{k,\tau}^G$ é côncava e, de acordo com o Lema 4.2, atinge o seu máximo em $x^* = \frac{k+\bar{\lambda}+1}{\hat{e}^T \hat{u}} \hat{u}$. Consequentemente,

$$|S| \leq \max_{x \geq 0} f_{k,\tau}^G(x) \leq \max f_{k,\tau}^G(x) = f_{k,\tau}^G(x^*) = f_{k,\tau}^G\left(\frac{k+\bar{\lambda}+1}{\hat{e}^T \hat{u}} \hat{u}\right) = k + \bar{\lambda} + 1. \quad \blacksquare$$

Como consequência imediata deste teorema tem-se a seguinte desigualdade,

$$|S| \leq k + 1 + \min\{\bar{\lambda} : \bar{\lambda} \in \text{MainSp}(G^c), \bar{\lambda} + 1 \geq -\lambda_{\min}(A_G)\}, \quad (4.5)$$

onde $S \subseteq V(G)$ induz um subgrafo k -regular.

Torna-se assim importante saber se, dado um grafo G , existe $\bar{\lambda} \in \text{MainSp}(G^c)$ tal que $\bar{\lambda} + 1 \geq -\lambda_{\min}(A_G)$ assim como saber se existe $\bar{\lambda} \in \sigma(G^c) \setminus \text{MainSp}(G^c)$ tal que $\bar{\lambda} + 1 \leq -\lambda_{\min}(A_G)$.

Teorema 4.4 [CP09] *Dado um grafo arbitrário G de ordem n , verificam-se as seguintes desigualdades*

$$i) \lambda_{\max}(A_{G^c}) + 1 \geq -\lambda_{\min}(A_G).$$

ii) Se $\bar{\lambda} \in \sigma(G^c) \setminus \text{MainSp}(G^c)$ ou $\bar{\lambda} \in \text{MainSp}(G^c)$ com multiplicidade superior a um, então

$$\bar{\lambda} + 1 \leq -\lambda_{\min}(A_G).$$

Prova.

i) Considere-se o grafo completo de ordem n , K_n .

$$\begin{aligned} \lambda_{\min}(A_G) &= \min_{\|\hat{u}\|=1} \hat{u}^T A_G \hat{u} \\ &= \min_{\|\hat{u}\|=1} \hat{u}^T (A_{K_n} - A_{G^c}) \hat{u} \\ &\geq \min_{\|\hat{u}\|=1} \hat{u}^T A_{K_n} \hat{u} + \min_{\|\hat{u}\|=1} (-\hat{u}^T A_{G^c} \hat{u}) \\ &= -1 - \max_{\|\hat{u}\|=1} \hat{u}^T A_{G^c} \hat{u} \\ &= -1 - \lambda_{\max}(A_{G^c}). \end{aligned}$$

Logo, $\lambda_{\max}(A_{G^c}) + 1 \geq -\lambda_{\min}(A_G)$.

ii) Sendo $\bar{\lambda} \in \sigma(G^c) \setminus \text{MainSp}(G^c)$ ou $\bar{\lambda} \in \text{MainSp}(G^c)$ com multiplicidade superior a um, existe $\hat{u} \in \varepsilon_{G^c}(\bar{\lambda})$ tal que $\hat{e}^T \hat{u} = 0$ e

$$\begin{aligned} (A_G + A_{G^c} + I_n)\hat{u} = 0 &\Leftrightarrow A_G \hat{u} = -(A_{G^c} + I_n)\hat{u} \\ &\Leftrightarrow A_G \hat{u} = -(\bar{\lambda} + 1)\hat{u}. \end{aligned}$$

Então, $-(\bar{\lambda} + 1) \in \sigma(G)$ e conseqüentemente $-(\bar{\lambda} + 1) \geq \lambda_{\min}(A_G)$, ou seja, $\bar{\lambda} + 1 \leq -\lambda_{\min}(A_G)$.

■

Uma vez que o maior valor próprio de um grafo G é valor próprio principal, tendo em conta a desigualdade (i) do Teorema 4.4, é imediato que $\lambda_{\max}(A_{G^c})$ verifica as condições

do Teorema 4.3. Logo,

$$|S| \leq \lambda_{\max}(A_{G^c}) + k + 1. \quad (4.6)$$

Um k -fator de um grafo G , com $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, é um subgrafo abrangente k -regular. Em particular, um 1-fator é um emparelhamento perfeito e um 2-fator é um subgrafo 2-regular que contém todos os vértices de G , ou seja, é um subgrafo abrangente tal que todas as suas componentes são ciclos. Assim, tem-se o seguinte corolário.

Corolário 4.5 [CP09] *Seja G um grafo de ordem n que admite um 2-fator. Então,*

$$n - 3 \leq \lambda_{\max}(A_{L(G)^c}).$$

Prova. Se G é um grafo de ordem n que admite um 2-fator $C \subseteq E(G)$, então C define um subgrafo abrangente 2-regular de G . Assim, C induz um subgrafo de ordem n em $L(G)$ que é um subgrafo induzido 2-regular de cardinalidade máxima. Conclui-se então que, de acordo com (4.5), $|C| \leq \lambda_{\max}(A_{L(G)^c}) + 2 + 1$. ■

A figura que se segue exemplifica um grafo G de ordem 6 que admite um 2-fator $C = \{a, b, c, d, e, f\}$ que induz em $L(G)$ um subgrafo 2-regular de cardinalidade máxima. Sendo $\lambda_{\max}(A_{L(G)^c}) = 3.24$, verifica-se que $|C| - 3 = 6 - 3 = 3 \leq 3.24$.

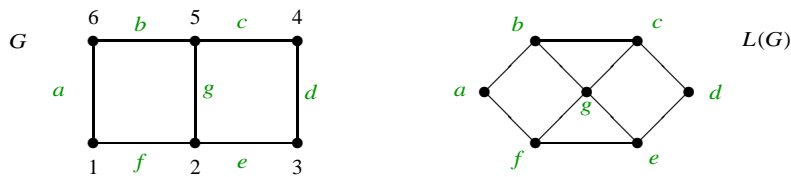


Figura 4.1: Grafo G com um 2-fator $C = \{a, b, c, d, e, f\}$ que induz em $L(G)$ um subgrafo 2-regular de cardinalidade máxima.

O próximo teorema estabelece um novo majorante para a ordem de um subgrafo induzido k -regular no caso em que o $\lambda_{\min}(A_G)$ é um valor próprio não principal.

Teorema 4.6 [CP09] *Seja G um grafo de ordem n com pelo menos uma aresta tal que $\lambda_{\min}(A_G) = \lambda_n = \dots = \lambda_{n-(p-1)} \in \sigma(G) \setminus \text{MainSp}(G)$, ou seja, $\lambda_{\min}(A_G)$ é um valor*

próprio não principal com multiplicidade p . Suponha-se que os vetores próprios $\hat{u}_1, \dots, \hat{u}_n$, associados aos valores próprios $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \sigma(G)$, respetivamente, são unitários e mutuamente ortogonais. Se $S \subseteq V(G)$ induz um subgrafo k -regular de G , então

$$|S| \leq \sum_{j=1}^{n-p} \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_j} (\hat{e}^T \hat{u}_j)^2. \quad (4.7)$$

Prova. Sejam $\tau = -\lambda_n = \dots = -\lambda_{n-p+1}$ e $S \subseteq V(G)$ um subconjunto que induz um subgrafo k -regular. Uma vez que $|S| \leq \max f_{k;\tau}^G(x)$, se $f_{k;\tau}^G$ admite um ponto crítico, ou seja, se existe um x tal que

$$\left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x = \frac{k + \tau}{\tau} \hat{e}, \quad (4.8)$$

então, $|S| \leq \hat{e}^T x$. Como o subespaço próprio associado $-\tau$ é ortogonal a \hat{e} , é imediato que o sistema (4.8) tem solução e portanto que tal x existe. Tendo em conta que os vetores próprios $\hat{u}_1, \dots, \hat{u}_n$, associados aos valores próprios $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, respetivamente, são unitários e mutuamente ortogonais, existem escalares $\gamma_1, \dots, \gamma_n$ tais que $\hat{e} = \sum_{j=1}^n \gamma_j \hat{u}_j$ e, uma vez que $\hat{u}_{n-p+1}, \dots, \hat{u}_n$ são ortogonais a \hat{e} , $\gamma_{n-p+1} = \dots = \gamma_n = 0$. Assim,

$$\hat{e} = \sum_{i=1}^{n-p} \gamma_i \hat{u}_i \Leftrightarrow \hat{e} = U \hat{\gamma} \Leftrightarrow \hat{\gamma} = U^T \hat{e},$$

onde $\hat{\gamma}$ é um vetor com componentes γ_i , para $i = 1, \dots, n$ e U é uma matriz com colunas \hat{u}_j , para $j = 1, \dots, n$.

Fazendo $x^* = \sum_{j=1}^{n-p} \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_j} \gamma_j \hat{u}_j = U \text{diag} \left(\frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_1}, \dots, \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_{n-p}}, 0, \dots, 0 \right) U^T \hat{e}$, vem que

$$\begin{aligned} \left(\frac{A_G}{\tau} + I_n \right) x^* &= \sum_{j=1}^{n-p} \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_j} \gamma_j \left(\frac{A_G}{-\lambda_n} + I_n \right) \hat{u}_j \\ &= \sum_{j=1}^{n-p} \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_j} \gamma_j \frac{\lambda_j - \lambda_n}{-\lambda_n} \hat{u}_j \\ &= \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n} \sum_{j=1}^{n-p} \gamma_j \hat{u}_j = \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n} \hat{e}. \end{aligned}$$

Então, $x^* = U \text{diag} \left(\frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_1}, \dots, \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_{n-p}}, 0, \dots, 0 \right) U^T \hat{e}$ é solução do sistema (4.8) e portanto

$$\begin{aligned} |S| \leq \hat{e}^T x^* &= \hat{e}^T U \text{diag} \left(\frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_1}, \dots, \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_{n-p}}, 0, \dots, 0 \right) U^T \hat{e} \\ &= \sum_{j=1}^{n-p} \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_j} (\hat{e}^T \hat{u}_j)^2. \end{aligned}$$

■

Corolário 4.7 [CP09] *A desigualdade (4.7) verifica-se na forma de igualdade se e só se S é um conjunto $(k, k + \tau)$ -regular, com $\tau = -\lambda_{\min}(A_G)$.*

Prova. Suponha-se

$$|S| = \sum_{j=1}^{n-p} \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_j} (\hat{e}^T \hat{u}_j)^2.$$

Tendo em conta a concavidade da função $f_{k,\tau}^G$, conclui-se que o vetor característico de S , $x(S)$, é um ponto crítico de $f_{k,\tau}^G$, ou seja, é solução do sistema (4.8). Logo S é um conjunto $(k, k + \tau)$ -regular. Reciprocamente, se S é um conjunto $(k, k + \tau)$ -regular, então o vetor característico de S , $x(S)$, é uma solução do sistema (4.8), ou seja, é um ponto crítico de $f_{k,\tau}^G$. Assim, uma vez que $x^* = \sum_{j=1}^{n-p} \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_j} \gamma_j \hat{u}_j$ é também um ponto crítico tal que $\hat{e}^T x^* = \sum_{j=1}^{n-p} \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_j} (\hat{e}^T \hat{u}_j)^2$ e $\hat{e}^T x(S) = \hat{e}^T x^*$, conclui-se que $|S| = \sum_{j=1}^{n-p} \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \lambda_j} (\hat{e}^T \hat{u}_j)^2$. ■

No caso particular de G ser um grafo regular, todos os vetores próprios com exceção de $\hat{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{e}$ são ortogonais a \hat{e} e, fazendo $k = 0$ em (4.7), obtém-se

$$\begin{aligned} |S| \leq \alpha(G) &\leq \sum_{j=1}^{n-(n-1)} \frac{-\lambda_n}{-\lambda_n + \lambda_j} (\hat{e}^T \hat{u}_j)^2 \\ &= \frac{-\lambda_n}{-\lambda_n + \lambda_1} \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \hat{e}^T \hat{e} \right)^2 \\ &= \frac{-\lambda_n}{-\lambda_n + \lambda_1}. \end{aligned}$$

que coincide com o majorante de Hoffman referido em (3.1).

Corolário 4.8 *Seja G um grafo de ordem n com m arestas tal que o seu grafo linha, $L(G)$ tem $\lambda_{\min}(A_{L(G)}) = \lambda_m = -2$ com multiplicidade q . Sejam ainda $\hat{u}_1, \dots, \hat{u}_m$ os vetores próprios associados aos valores próprios $\lambda_1, \dots, \lambda_m \in \sigma(L(G))$, respetivamente, unitários e mutuamente ortogonais. Se G admite um emparelhamento perfeito, então*

$$n = \sum_{j=1}^{m-q} \frac{2}{2 + \lambda_j} (\hat{e}^T \hat{u}_j)^2. \quad (4.9)$$

Prova. O grafo G tem um emparelhamento perfeito M se e só se M define um conjunto $(0, 2)$ -regular em $L(G)$. A função $f_{0,2}^{L(G)}$ é côncava uma vez que -2 é o menor valor próprio de $L(G)$. Por outro lado, $\lambda_{\min}(A_{L(G)}) = -2$ é valor próprio não principal, logo, pelo Corolário 4.7, conclui-se a igualdade pretendida. ■

4.3 Resultados complementares

Nesta secção são apresentados alguns resultados complementares introduzidos em [CR10], alguns dos quais serão posteriormente usados no estudo computacional comparativo entre alguns majorantes. Em [CR10] o majorante (4.7) é reformulado em termos de ângulos principais. Os *ângulos principais* de um grafo G são os cossenos dos ângulos entre os espaços próprios da matriz de adjacência de G e o vetor de uns (para mais detalhes consultar [CRS97], Secção 4.5).

Considerando μ_1, \dots, μ_s os valores próprios principais de G tais que

$$\mu_1 \geq \dots \geq \mu_s,$$

tem-se que $\hat{e} = u_1 + \dots + u_s$, ($u_i \in \mathcal{E}_G(\mu_i)$).

O maior valor próprio de G é valor próprio principal uma vez que existe um correspondente vetor próprio com todas as componentes não negativas [CDS95]. Deste modo, $\mu_1 = \lambda_1$, $\mu_s = \lambda_n$ e os ângulos principais não nulos são β_1, \dots, β_s com $\sqrt{n}\beta_i = \|u_i\|$, $i = 1, \dots, s$.

Os resultados são apresentados em termos de subgrafos induzidos k -regulares, no entanto podem ser aplicados a subgrafos induzidos com média dos graus dos vértices igual a k .

Teorema 4.9 [CR10] *Seja G um grafo de ordem n e $S \subseteq V(G)$ um conjunto que induz um subgrafo k -regular ($0 \leq k \leq n - 1$). Se $t > -\lambda_n$ então,*

$$|S| \leq n \sum_{i=1}^s \frac{t+k}{t+\mu_i} \beta_i^2; \quad (4.10)$$

Equivalentemente,

$$|S| \leq h_k^G(t), \quad (4.11)$$

onde

$$h_k^G(t) = (k+t) \left\{ 1 - \frac{P_{G^c}(t-1)}{(-1)^n P_G(-t)} \right\}. \quad (4.12)$$

No caso em que λ_n é um valor próprio principal a função $h_k^G(t)$ tem $t = -\lambda_n$ como assíntota e conseqüentemente,

Corolário 4.10 [CR10] *Se S induz um subgrafo de G k -regular, então*

$$|S| \leq \inf\{h_k^G(t) : t > -\lambda_n\}. \quad (4.13)$$

Adicionalmente, $|S| = h_k^G(t_0)$ se e só se $|S|$ é um conjunto $(k, k+t_0)$ -regular.

Por outro lado, se λ_n é não principal, $G \neq K_n^c$ e, tomando $t = -\lambda_n$, tem-se a seguinte reformulação do Teorema 4.6.

Teorema 4.11 [CR10] *Seja G um grafo de ordem n e S um subconjunto de vértices de G que induz um subgrafo k -regular ($0 \leq k \leq n - 1$). Se λ_n é um valor próprio não principal então,*

$$|S| \leq n \sum_{i=1}^s \frac{-\lambda_n + k}{-\lambda_n + \mu_i} \beta_i^2. \quad (4.14)$$

4.4 Comparação dos majorantes

Nesta secção apresentam-se alguns resultados computacionais fazendo-se a comparação dos majorantes (4.6), (4.7) e (4.10). Os resultados são aplicados a G^c com $k = 0$, $k = 1$ e $k = 2$. Os grafos apresentados são da coleção Second DIMACS Implementation [JT96]. O majorante $h_k^{G^c}(t^*)$ é calculado de acordo com o Teorema 4.9 sendo o valor de t^* estimado usando sucessivas bissecções de intervalos com início em $[-\lambda_{\min}(A_{G^c})+10^{-6}, \lambda_{\max}(A_G)+1]$. Note-se que todos os grafos da tabela verificam a hipótese do Teorema 4.6, ou seja, são tais que $\lambda_{\min}(A_{G^c})$ é um valor próprio não principal. Os testes foram realizados com recurso à linguagem interativa MATLAB (versão R2012a). Na tabela que se segue foram registados os seguintes dados relativos a cada grafo: a designação do grafo, a ordem do grafo, o valor obtido para t^* e, nas últimas colunas, os resultados obtidos para os majorantes (4.6), (4.7) e $h_k^{G^c}(t^*)$ para valores de $k = 0, 1, 2$.

Grafo G	n	t^*	$k = 0$			$k = 1$			$k = 2$		
			(4.6)	(4.7)	$h_0^{G^c}(t^*)$	(4.6)	(4.7)	$h_1^{G^c}(t^*)$	(4.6)	(4.7)	$h_2^{G^c}(t^*)$
c-fat200-1	200	17.27	17.81	17.43	17.43	18.81	18.44	18.44	19.81	19.45	19.45
c-fat200-5	200	64.80	85.78	73.21	72.91	86.78	74.34	74.03	87.78	75.48	75.16
hamming6-2	64	6	58	32	32	59	37.33	37.33	60	42.67	42.67
hamming6-4	64	11	23	13.54	13.54	24	14.77	14.77	25	16	16
hamming8-2	256	8	248	128	128	249	144	144	250	160	160
hamming8-4	256	36	164	72	72	165	74	74	166	76	76
johnson8-2-4	28	2	16	4	4	17	6	6	18	8	8
johnson8-4-4	70	4	54	14	14	55	17.50	17.50	56	21	21
johnson16-2-4	120	2	92	8	8	93	12	12	94	16	16
johnson32-2-4	496	2	436	16	16	437	24	24	438	32	32
MANN-a9	45	2.39	41.80	19.71	19.71	42.80	27.96	27.96	43.80	36.21	36.21
MANN-a27	378	7.71	374.30	326.75	277.79	375.30	411.71	319.09	376.30	496.66	351.00
keller4	171	17.72	111.82	41.16	41.16	112.82	43.48	43.48	112.82	45.80	45.80

Da análise da tabela resulta que o majorante (4.6) é, para esta seleção de grafos, sempre maior do que os restantes majorantes apresentados. Quando comparados, os majorantes (4.7) e $h_k^{G^c}(t^*)$ são, na maioria dos casos, iguais para qualquer dos valores de k testados. Destacam-se apenas os complementares dos grafos c-fat200-5 e MANN-a27 para os quais o majorante $h_k^{G^c}(t^*)$ é menor para todos os valores de k . De realçar que, para o caso particular de $k = 0$ e, uma vez que é conhecido o valor do número de clique para esta coleção de grafos, os valores obtidos para os majorantes (4.7) e $h_k^{G^c}(t^*)$ dos grafos complementares de hamming6-2, hamming8-2, johnson8-2-4, johnson8-4-4, johnson16-2-4 e johnson32-2-4 coincidem com o número de clique.

Capítulo 5

Majorantes baseados no espectro das matrizes A_G , L_G e Q_G

Neste capítulo apresentam-se inicialmente algumas definições e resultados relevantes para as restantes secções não incluídos no capítulo 2. Tendo em conta o majorante (3.2) introduzido por Haemers em [Hae80], nas Secções 5.1.1, 5.1.2 e 5.1.3 determinam-se extensões deste majorante para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares máximos, baseados nos espectros das matrizes de adjacência, laplaciana e laplaciana sem sinal, respetivamente.

Dado um grafo G de ordem n diz-se $\pi = (V_1, V_2, \dots, V_r)$, ($1 \leq r \leq n$) é uma *partição* do seu conjunto de vértices, $V(G)$, se é uma família de subconjuntos não vazios V_j , para $j = 1, 2, \dots, r$ de $V(G)$ tais que $\bigcup_{j=1}^r V_j = V(G)$ e, para quaisquer $i, j \in \{1, 2, \dots, r\}$, com $i \neq j$, $V_i \cap V_j = \emptyset$. Se $r \in \{1, n\}$, π diz-se uma *partição trivial*. Se para quaisquer $i, j \in \{1, 2, \dots, r\}$ existe $d_{ij} \in \mathbb{N}_0$ tal que

$$\forall v \in V_i, |N_G(v) \cap V_j| = d_{ij},$$

ou seja, o número de vizinhos de cada vértice $v \in V_i$ num subconjunto V_j é constante e igual a d_{ij} , independentemente da escolha do vértice em V_i , π diz-se uma *partição equilibrada* [Sch74]. No caso particular de $r = 2$, π diz-se uma *bipartição equilibrada*. Equivalentemente, uma partição π de $V(G)$ é equilibrada se os subgrafos induzidos $G[V_i]$ são regulares com graus d_{ii} e as arestas que unem vértices de dois subconjuntos disjuntos (V_i e V_j) formam,

juntamente com estes vértices, um subgrafo bipartido semi-regular com parâmetros d_{ij} e d_{ji} .

Seja A uma matriz simétrica com entradas reais cujas linhas e colunas estão indexadas por $X = \{1, \dots, n\}$ e seja $\{X_1, \dots, X_t\}$ com $t \leq n$ uma partição de X tal que A se escreve, de acordo com esta partição, como

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1t} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{t1} & \dots & A_{tt} \end{bmatrix}.$$

A *matriz quociente* B é a matriz de ordem $t \times t$ com entradas iguais às médias das somas das entradas das linhas dos blocos A_{ij} de A , ou seja $(B)_{ij} = \frac{1}{|X_i|} \hat{e}^T A_{ij} \hat{e}$, onde \hat{e} é o vetor com componentes unitárias.

O próximo teorema é conhecido como o teorema do entrelaçamento (ver por exemplo [CDS95, pág. 19]).

Teorema 5.1 *Seja A uma matriz $n \times n$ real e simétrica com valores próprios $\theta_n \leq \dots \leq \theta_1$ e B uma sua submatriz principal de ordem $t \times t$ com valores próprios $\rho_t \leq \dots \leq \rho_1$. Então, para $i = 1, \dots, t$,*

$$\theta_{n-t+i} \leq \rho_i \leq \theta_i. \quad (5.1)$$

Teorema 5.2 [HH71] *Seja A uma matriz real simétrica com valores próprios $\theta_n \leq \dots \leq \theta_1$. Dada uma partição do conjunto $X = \{1, 2, \dots, n\}$, $X = X_1 \cup X_2 \cup \dots \cup X_t$ com $|X_i| = n_i > 0$ considere-se a matriz A partida em blocos tal que A_{ij} é um bloco $n_i \times n_j$. Seja e_{ij} a soma das entradas de A_{ij} e $B = \left(\frac{e_{ij}}{n_i}\right)$, ou seja, $\frac{e_{ij}}{n_i}$ é a média das somas das entradas das linhas em A_{ij} . Então, o espectro de B está contido no intervalo $[\theta_n, \theta_1]$.*

No caso particular de em cada bloco A_{ij} a soma em linha (e coluna) ser igual estabelece-se o resultado seguinte.

Teorema 5.3 [Hay59] *Seja A uma matriz partida em blocos como no teorema anterior. Se*

os blocos A_{ij} são tais que a soma das entradas de cada linha é constante e igual a b_{ij} , então o espectro de $B = (b_{ij})$ está contido no espectro de A .

Em [Hae78] Haemers provou um caso mais geral.

Teorema 5.4 [Hae78] *Seja A uma matriz complexa hermitiana de ordem n partida em blocos da seguinte forma*

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1t} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{t1} & \dots & A_{tt} \end{bmatrix}$$

tal que A_{ii} é uma matriz quadrada para todo $1 \leq i \leq t$. Seja B a matriz de ordem t com entradas iguais às médias das somas das entradas das linhas dos blocos A_{ij} . Sejam ainda $\theta_n \leq \dots \leq \theta_1$ e $\rho_t \leq \dots \leq \rho_1$ os valores próprios de A e B , respetivamente. Então, para todo $1 \leq i \leq t$

$$\theta_{n-t+i} \leq \rho_i \leq \theta_i. \quad (5.2)$$

5.1 Extensões do majorante de Haemers

O objetivo desta secção é estender o majorante (3.2) de modo a obter um majorante para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares com recurso ao espectro da matriz de adjacência. No caso particular de grafos regulares esta extensão foi já publicada em [Hae80]. A segunda parte do teorema está provada em [CKL07].

Teorema 5.5 [CKL07, Hae80] *Se G é um grafo p -regular ($p > 0$) de ordem n com pelo menos uma aresta e $S \subseteq V(G)$ induz um subgrafo k -regular, então*

$$|S| \leq n \frac{k - \lambda_n}{p - \lambda_n}. \quad (5.3)$$

Adicionalmente, a desigualdade (5.3) verifica-se na forma de igualdade se e só se S é um conjunto $(k, k + \tau)$ -regular, com $\tau = -\lambda_n$.

Com o objetivo de estender este resultado a grafos arbitrários, considere-se o grafo G de ordem n com $V(G) = S \cup S^c$ onde $S \subseteq V(G)$ denota um conjunto de vértices que induz um subgrafo k -regular e S^c denota o seu complementar. Denote-se por $\partial(S)$ o conjunto de arestas de corte, ou seja, o conjunto de arestas com um vértice extremo em S e outro em S^c , isto é

$$|\partial(S)| = \sum_{i \in S} (d_G(i) - k) = |S| \left(\frac{\sum_{i \in S} d_G(i)}{|S|} - k \right) = |S|(\bar{d}_S - k), \quad (5.4)$$

onde $\bar{d}_S = \frac{1}{|S|} \sum_{i \in S} d_G(i)$. Por sua vez a média dos graus dos vértices em $G[S]$ e em $G[S^c]$ denota-se por $\bar{d}_{G[S]}$ e $\bar{d}_{G[S^c]}$, respetivamente. Se $S \subseteq V(G)$ denote-se por $d_S(i)$ o grau do vértice i em $G[S]$.

5.1.1 Majorante usando a matriz de adjacência

Em [Hae80] Haemers introduziu o seguinte resultado.

Teorema 5.6 [Hae80] *Seja G um grafo com n vértices com média dos graus \bar{d} . Considere-se uma bipartição do conjunto dos seus vértices tal que G_1 e G_2 são os subgrafos induzidos por estes dois conjuntos. Para $i = 1, 2$, seja n_i o número de vértices de G_i , \bar{d}_i a média dos graus de G_i e \tilde{d}_i a média dos graus de G_i em G . Então,*

$$(i) \quad \lambda_1 \lambda_2 \geq \frac{n \bar{d}_i \bar{d} - n_i \bar{d}_i^2}{n - n_i} \geq \lambda_1 \lambda_n, \quad i = 1, 2;$$

(ii) *se alguma das desigualdades em (i) se verifica na forma de igualdade, então G_1 e G_2 são regulares e os graus dos vértices de G_1 e G_2 em G são constantes.*

Como consequência do Teorema 5.6 tem-se uma extensão do majorante de Haemers para a ordem de um subgrafo induzido k -regular.

Corolário 5.7 *Se G é um grafo de ordem n com pelo menos uma aresta e $S \subseteq V(G)$ um*

subconjunto que induz um subgrafo k -regular, então

$$|S| \leq \frac{2k|E(G)| - n\lambda_1\lambda_n}{\delta(G)^2 - \lambda_1\lambda_n}. \quad (5.5)$$

Prova. Seja G um grafo de ordem n com a partição dos vértices $V(G) = S \cup S^c$. Fazendo $n_1 = |S|$, $\bar{d}_1 = k$ e $\tilde{d}_1 \geq \delta(G)$ na segunda desigualdade do Teorema 5.6–(i) tem-se,

$$\begin{aligned} \frac{k\bar{d}_1 n - \tilde{d}_1^2 |S|}{n - |S|} &\geq \lambda_1 \lambda_n \\ \lambda_1 \lambda_n (n - |S|) &\leq k\bar{d}_1 n - \tilde{d}_1^2 |S| \\ |S|(\tilde{d}_1^2 - \lambda_1 \lambda_n) &\leq k\bar{d}_1 n - n\lambda_1 \lambda_n \\ |S| &\leq \frac{k\bar{d}_1 n - n\lambda_1 \lambda_n}{\tilde{d}_1^2 - \lambda_1 \lambda_n} \end{aligned}$$

Uma vez que $\tilde{d}_1 \geq \delta(G)$ e $\bar{d} = \frac{2|E(G)|}{n}$, vem

$$|S| \leq \frac{2k|E(G)| - n\lambda_1\lambda_n}{\delta(G)^2 - \lambda_1\lambda_n}.$$

■

5.1.2 Majorante usando a matriz laplaciana

Nesta secção introduz-se a extensão do majorante (3.2) baseado no maior valor próprio da matriz laplaciana $L_G = D_G - A_G$, onde $D_G = \text{diag}(d_G(1), d_G(2), \dots, d_G(n))$, com $0 = \mu_n \leq \dots \leq \mu_1$ os respetivos valores próprios.

Este majorante teve como principal motivação o artigo [LLT07] onde foi introduzido o majorante (3.5) para o número de estabilidade de um grafo G . De facto, o teorema que se segue é uma generalização deste majorante para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares.

Teorema 5.8 *Seja G um grafo de ordem n com pelo menos uma aresta e $S \subseteq V(G)$ um*

conjunto que induz um subgrafo k -regular. Então,

$$|S| \leq n \frac{k + \mu_1 - \delta(G)}{\mu_1}. \quad (5.6)$$

Prova. Considere-se a partição dos vértices de G , $V(G) = S \cup S^c$ e os subgrafos induzidos $G[S]$ e $G[S^c]$. Suponha-se L_G partida em blocos da seguinte forma

$$L_G = \begin{bmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_{11} - A_{G[S]} & -A_{12} \\ -A_{21} & D_{22} - A_{G[S^c]} \end{bmatrix}$$

Esta partição conduz à matriz quociente $B = (b_{ij})_{2 \times 2}$ com entradas

$$\begin{aligned} b_{11} &= \frac{\sum_{i \in S} d_G(i) - \sum_{i \in S} d_S(i)}{|S|} \\ &= \frac{1}{|S|} \sum_{i \in S} d_G(i) - \frac{1}{|S|} \sum_{i \in S} d_S(i) \\ &= \bar{d}_S - k, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_{12} &= -\frac{|\partial(S)|}{|S|} \\ &= -(\bar{d}_S - k) \quad (\text{por (5.4)}) \\ &= k - \bar{d}_S, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_{21} &= -\frac{|\partial(S)|}{n - |S|} \\ &= -\frac{|S|\bar{d}_S - |S|k}{n - |S|} \quad (\text{por (5.4)}) \\ &= -\frac{|S|}{n - |S|}(\bar{d}_S - k), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{22} &= \frac{1}{n - |S|} \sum_{i \in S^c} d_G(i) - \frac{1}{n - |S|} \sum_{i \in S^c} d_{S^c}(i) \\
&= \frac{1}{n - |S|} \sum_{i \in S^c} d_G(i) - \frac{1}{n - |S|} \left(\sum_{i \in S^c} d_G(i) - |\partial(S)| \right) \\
&= \frac{|\partial(S)|}{n - |S|} \\
&= \frac{|S|\bar{d}_S - |S|k}{n - |S|} \\
&= \frac{|S|}{n - |S|} (\bar{d}_S - k),
\end{aligned}$$

ou seja,

$$B = \begin{bmatrix} \bar{d}_S - k & k - \bar{d}_S \\ -\frac{|S|}{n - |S|} (\bar{d}_S - k) & \frac{|S|}{n - |S|} (\bar{d}_S - k) \end{bmatrix}.$$

Assim, os valores próprios de B podem ser determinados da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
&\begin{vmatrix} \bar{d}_S - k - \lambda & k - \bar{d}_S \\ -\frac{|S|}{n - |S|} (\bar{d}_S - k) & \frac{|S|}{n - |S|} (\bar{d}_S - k) - \lambda \end{vmatrix} = 0 \\
&\frac{|S|}{n - |S|} (\bar{d}_S - k) (\bar{d}_S - k - \lambda) - \lambda \bar{d}_S + \lambda k + \lambda^2 - \frac{|S|}{n - |S|} (\bar{d}_S - k)^2 = 0 \\
&-\frac{|S|}{n - |S|} \bar{d}_S \lambda + \frac{|S|}{n - |S|} k \lambda - \lambda \bar{d}_S + \lambda k + \lambda^2 = 0 \\
&\lambda \left(-\frac{|S|}{n - |S|} \bar{d}_S + \frac{|S|}{n - |S|} k - \bar{d}_S + k + \lambda \right) = 0.
\end{aligned}$$

Obtêm-se assim os valores próprios $\lambda = 0$ e $\lambda = n \frac{\bar{d}_S - k}{n - |S|}$.

Pelo Teorema 5.4 conclui-se que

$$n \frac{\bar{d}_S - k}{n - |S|} \leq \mu_1.$$

Assim,

$$\begin{aligned}
n(\bar{d}_S - k) &\leq \mu_1(n - |S|) \\
-\mu_1|S| &\geq n(\bar{d}_S - k) - n\mu_1 \\
|S| &\leq n \frac{k + \mu_1 - \bar{d}_S}{\mu_1}.
\end{aligned}$$

Como $\bar{d}_S \geq \delta(G)$, conclui-se finalmente que

$$|S| \leq n \frac{k + \mu_1 - \delta(G)}{\mu_1}.$$

■

O próximo teorema estabelece uma relação entre os valores próprios da matriz laplaciana e de adjacência de um grafo.

Teorema 5.9 *Dado um grafo arbitrário G , verificam-se as desigualdades*

$$\delta(G) \leq \mu_1 + \lambda_n \leq \Delta(G).$$

Prova. Comece-se por demonstrar em primeiro lugar a desigualdade da esquerda (i) e seguidamente a desigualdade da direita (ii). Assim, seja G um grafo de ordem n .

(i) Se λ é um valor próprio de A_G e \hat{v} um vetor de norma unitária do correspondente subespaço próprio, então

$$\begin{aligned} \hat{v}^T L_G \hat{v} &= \hat{v}^T (D_G - A_G) \hat{v} \\ &= \hat{v}^T D_G \hat{v} - \hat{v}^T A_G \hat{v} \\ &= \sum_{j=1}^n d_G(j) \hat{v}_j^2 - \lambda. \end{aligned}$$

Assim, se $\lambda = \lambda_n$, $\hat{v}^T L_G \hat{v} = \sum_{j=1}^n d_G(j) \hat{v}_j^2 - \lambda_n$. Logo, pelo quociente de Rayleigh,

$$\begin{aligned} \mu_1 \geq \hat{v}^T L_G \hat{v} &= \sum_{j=1}^n d_G(j) \hat{v}_j^2 - \lambda_n \\ &\geq \hat{v}_1^2 \delta(G) + \hat{v}_2^2 \delta(G) + \cdots + \hat{v}_n^2 \delta(G) - \lambda_n \\ &= \|\hat{v}\|^2 \delta(G) - \lambda_n \\ &= \delta(G) - \lambda_n. \end{aligned}$$

Consequentemente,

$$\delta(G) - \mu_1 \leq \lambda_n. \quad (5.7)$$

(ii) Seja μ um valor próprio de L_G e \hat{u} um vetor de norma unitária do correspondente subespaço próprio. Então,

$$\begin{aligned} \mu &= \hat{u}^T L_G \hat{u} \\ &= \hat{u}^T (D_G - A_G) \hat{u} \\ &= \hat{u}^T D_G \hat{u} - \hat{u}^T A_G \hat{u} \\ &= \sum_{j=1}^n d_G(j) \hat{u}_j^2 - \hat{u}^T A_G \hat{u}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\hat{u}^T A_G \hat{u} = \sum_{j=1}^n \hat{u}_j^2 (d_G(j) - \mu).$$

No caso de $\mu = \mu_1$, obtém-se

$$\hat{u}^T A_G \hat{u} = \sum_{j=1}^n \hat{u}_j^2 d_G(j) - \mu_1.$$

Logo, pelo quociente de Rayleigh,

$$\begin{aligned} \lambda_n \leq \hat{u}^T A_G \hat{u} &= \sum_{j=1}^n \hat{u}_j^2 d_G(j) - \mu_1 \\ &\leq \hat{u}_1^2 \Delta(G) + \hat{u}_2^2 \Delta(G) + \cdots + \hat{u}_n^2 \Delta(G) - \mu_1 \\ &= \|\hat{u}\|^2 \Delta(G) - \mu_1 \\ &= \Delta(G) - \mu_1. \end{aligned}$$

■

Assim, se G é um grafo p -regular, pelo Teorema (5.9), tem-se $\mu_1 + \lambda_n = p$ e, consequentemente, os majorantes (5.5) e (5.6) coincidem com o majorante (5.3).

5.1.3 Majorante usando a matriz laplaciana sem sinal

Esta secção inicia-se com um resultado que estabelece uma relação entre os menores valores próprios das matrizes de adjacência e laplaciana sem sinal.

Teorema 5.10 *Seja G um grafo de ordem n e considerem-se as matrizes de adjacência, A_G , e laplaciana sem sinal, $Q_G = D_G + A_G$, onde $D_G = \text{diag}(d_G(1), d_G(2), \dots, d_G(n))$. Se λ_n e q_n são os menores valores próprios de A_G e de Q_G , respetivamente, então*

$$\delta \leq q_n - \lambda_n \leq \Delta, \quad (5.8)$$

onde $\delta = \delta(G)$ e $\Delta = \Delta(G)$ são o menor e o maior grau em G , respetivamente.

Prova.

i) Prova da desigualdade $q_n - \lambda_n \leq \Delta$:

Seja λ um valor próprio de A_G e \hat{v} um vetor próprio do correspondente subespaço próprio tal que $\|\hat{v}\| = 1$. Então,

$$\begin{aligned} \hat{v}^T Q \hat{v} &= \hat{v}^T (D + A_G) \hat{v} \\ &= \hat{v}^T D \hat{v} + \hat{v}^T A_G \hat{v} \\ &= \sum_{i=1}^n d_G(i) \hat{v}_i^2 + \lambda. \end{aligned}$$

Fazendo $\lambda = \lambda_n$, obtém-se $\hat{v}^T Q \hat{v} = \sum_{i=1}^n d_G(i) \hat{v}_i^2 + \lambda_n$. Como, pelo quociente de

Rayleigh, $\hat{v}^T Q \hat{v} \geq q_n$,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n d_G(i) \hat{v}_i^2 + \lambda_n &\geq q_n \\ q_n - \lambda_n &\leq \sum_{i=1}^n d_G(i) \hat{v}_i^2 \\ &\leq \Delta \hat{v}_1^2 + \Delta \hat{v}_2^2 + \cdots + \Delta \hat{v}_n^2 \\ &= \Delta (\hat{v}_1^2 + \hat{v}_2^2 + \cdots + \hat{v}_n^2) \\ &= \Delta \|\hat{v}\|^2 \\ &= \Delta. \end{aligned}$$

Assim,

$$q_n - \lambda_n \leq \Delta. \quad (5.9)$$

ii) Prova da desigualdade $\delta \leq q_n - \lambda_n$:

Seja q um valor próprio de Q e \hat{u} um vetor próprio do correspondente subespaço próprio tal que $\|\hat{u}\| = 1$. Então,

$$\begin{aligned} q &= \hat{u}^T Q \hat{u} \\ &= \hat{u}^T (D + A_G) \hat{u} \\ &= \hat{u}^T D \hat{u} + \hat{u}^T A_G \hat{u} \\ &= \sum_{i=1}^n d_G(i) \hat{u}_i^2 + \hat{u}^T A_G \hat{u}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\hat{u}^T A_G \hat{u} = q - \sum_{i=1}^n d_G(i) \hat{u}_i^2.$$

Uma vez que, pelo quociente de Rayleigh, $\hat{u}^T A_G \hat{u} \geq \lambda_n$,

$$q - \sum_{i=1}^n d_G(i) \hat{u}_i^2 \geq \lambda_n.$$

Fazendo $q = q_n$, obtém-se

$$q_n - \lambda_n \geq \sum_{i=1}^n d_G(i) \hat{u}_i^2 \geq \delta. \quad (5.10)$$

Por (5.9) e (5.10) conclui-se as desigualdades pretendidas.

■

Antes da introdução do novo majorante para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares em função dos maior e menor valores próprios da matriz laplaciana sem sinal é conveniente considerar o seguinte lema necessário ao Teorema 5.12.

Lema 5.11 *Seja G um grafo de ordem n e sejam q_1 e q_n o maior e o menor valor próprio da matriz laplaciana sem sinal Q_G , respetivamente. Sejam ainda $\delta = \delta(G)$ e $\Delta = \Delta(G)$. Se G verifica pelo menos uma das seguintes condições: G é bipartido sem vértices isolados ou $\delta \geq \frac{\Delta}{2}$ ou $q_1 < 4\delta$, então $4\delta^2 - q_n q_1 > 0$.*

Prova. Seja G um grafo de ordem n e q_1 (resp. q_n) o maior (resp. menor) valor próprio de Q_G .

1. Se G é bipartido, pelo Teorema 2.11, $q_n = 0$. Por outro lado, uma vez que G não tem vértices isolados, $\delta > 0$. Consequentemente, $4\delta^2 - q_n q_1 > 0$.
2. Se $\delta \geq \frac{\Delta}{2}$, tem-se $\delta^2 \geq \frac{\delta \Delta}{2} \Leftrightarrow 4\delta^2 \geq 2\delta \Delta$ e, uma vez que por (2.8) e (2.9) $q_1 \leq 2\Delta$ e $\delta > q_n$, respetivamente, conclui-se que $4\delta^2 - q_n q_1 > 0$.
3. Finalmente, se $q_1 < 4\delta$, então $q_1 q_n \leq 4\delta q_n$. Como, pelo Teorema 2.9, $q_n < \delta$, conclui-se que $q_1 q_n < 4\delta^2$ e, consequentemente, $4\delta^2 - q_n q_1 > 0$.

■

Note-se que há grafos G , com $\delta = \delta(G)$, tais que $4\delta^2 - q_n q_1 \leq 0$. O grafo da Figura 5.1 tal que $\delta = 2$, $q_n = 1.4991$ e $q_1 = 10.8517$ verifica a desigualdade anterior estritamente: $4\delta^2 - q_n q_1 = -0.2675 < 0$. O grafo da Figura 5.2 tal que $\delta = 1$, $q_n = \frac{7-\sqrt{33}}{2}$ e $q_1 = \frac{7+\sqrt{33}}{2}$ verifica a igualdade $4\delta^2 - q_n q_1 = 0$.

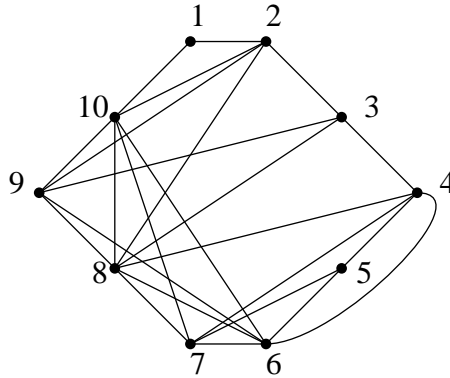


Figura 5.1: Grafo que verifica $4\delta^2 - q_n q_1 < 0$.

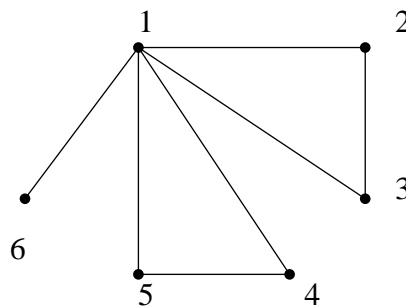


Figura 5.2: Grafo que verifica $4\delta^2 - q_n q_1 = 0$.

O próximo teorema é o principal resultado desta secção.

Teorema 5.12 *Seja G um grafo não regular de ordem n com pelo menos uma aresta e $S \subseteq V(G)$ um conjunto que induz um subgrafo k -regular. Sejam ainda q_1 e q_n o maior e o menor valor próprio da matriz laplaciana sem sinal, respetivamente, $\delta = \delta(G)$ e $\Delta = \Delta(G)$. Se G está nas condições do Lema 5.11, então*

$$\frac{2k|E(G)| - n\lambda_1\lambda_n}{\delta^2 - \lambda_1\lambda_n} \leq \frac{4|E(G)|(\Delta + k) - nq_nq_1}{4\delta^2 - q_nq_1} \quad (5.11)$$

e, conseqüentemente

$$|S| \leq \frac{4|E(G)|(\Delta + k) - nq_nq_1}{4\delta^2 - q_nq_1}. \quad (5.12)$$

Prova. Considere-se $\varepsilon = |E(G)|$ e assumamos que a desigualdade (5.11) é satisfeita. Assim,

$$\begin{aligned} \frac{2k\varepsilon - n\lambda_1\lambda_n}{\delta^2 - \lambda_1\lambda_n} - \frac{\varepsilon(\Delta + k) - n\frac{q_1}{4}q_n}{\delta^2 - \frac{q_1}{4}q_n} &\leq 0 \\ \Downarrow \\ 2k\varepsilon\delta^2 - \frac{q_1}{2}q_nk\varepsilon - n\delta^2\lambda_1\lambda_n - \delta^2\Delta\varepsilon - \delta^2k\varepsilon + n\delta^2\frac{q_1}{4}q_n + \lambda_1\lambda_n\varepsilon\Delta + \lambda_1\lambda_n\varepsilon k &\leq 0 \\ \Downarrow \\ k(\delta^2\varepsilon - \frac{q_1}{2}q_n\varepsilon + \lambda_1\lambda_n\varepsilon) - n\delta^2\lambda_1\lambda_n - \delta^2\Delta\varepsilon + n\delta^2\frac{q_1}{4}q_n + \lambda_1\lambda_n\varepsilon\Delta &\leq 0 \end{aligned}$$

Seja $f(k) = k(\delta^2\varepsilon - \frac{q_1}{2}q_n\varepsilon + \lambda_1\lambda_n\varepsilon) - n\delta^2\lambda_1\lambda_n - \delta^2\Delta\varepsilon + n\delta^2\frac{q_1}{4}q_n + \lambda_1\lambda_n\varepsilon\Delta$. Então,

$$\begin{aligned} f'(k) &= \delta^2\varepsilon - \frac{q_1}{2}q_n\varepsilon + \lambda_1\lambda_n\varepsilon \\ &= \varepsilon(\delta^2 - \frac{q_1}{2}q_n + \lambda_1\lambda_n). \end{aligned}$$

Pelo Teorema 5.10,

$$\delta + \lambda_n < q_n \Leftrightarrow \delta^2 + \delta\lambda_n < \delta q_n \Leftrightarrow \delta^2 - \delta q_n + \delta\lambda_n < 0.$$

Uma vez que, de (2.8), $\frac{q_1}{2} \geq \delta$ e como $\lambda_1 \geq \delta$, tem-se $\delta^2 - \frac{q_1}{2}q_n + \lambda_1\lambda_n \leq \delta^2 - \delta q_n + \delta\lambda_n < 0$, ou seja, $f'(k) < 0$. Conclui-se assim que, $f(k)$ é uma função estritamente decrescente.

Considerando a função $f(k)$ e fazendo $k = 0$ e $\Delta = \delta + \xi$ com ξ inteiro não negativo, pode definir-se a função

$$g(\delta, \xi) = -n\delta^2\lambda_1\lambda_n - \delta^2(\delta + \xi)\varepsilon + n\delta^2\frac{q_1}{4}q_n + \lambda_1\lambda_n\varepsilon(\delta + \xi),$$

tal que

$$\begin{aligned}\frac{\partial g(\delta, \xi)}{\partial \xi} &= -\delta^2 \varepsilon + \lambda_1 \lambda_n \varepsilon \\ &= \varepsilon(-\delta^2 + \lambda_1 \lambda_n) \\ &< 0.\end{aligned}$$

Deste modo, $g(\delta, \xi)$ é uma função estritamente decrescente em ordem a ξ . Note-se que $g(\delta, 0) = -n\delta^2 \lambda_1 \lambda_n - \delta^3 \varepsilon + n\delta^2 \frac{q_1}{4} q_n + \lambda_1 \lambda_n \varepsilon \delta$ e que $\lambda_1 = \delta$. Adicionalmente, de (2.8) tem-se que $\frac{q_1}{2} = \delta$ e de (5.8) $q_n = \delta + \lambda_n$, pelo que

$$\begin{aligned}g(\delta, 0) &= -n\delta^3 \lambda_n - \delta^3 \varepsilon + n\frac{\delta^3}{2}(\delta + \lambda_n) + \lambda_n \varepsilon \delta^2 \\ &= -n\delta^3 \lambda_n - \delta^3 \varepsilon + n\frac{\delta^4}{2} + n\frac{\delta^3}{2} \lambda_n + \lambda_n \varepsilon \delta^2.\end{aligned}$$

Finalmente, uma vez que $\varepsilon = \frac{n\delta}{2}$ obtém-se $g(\delta, 0) = -n\delta^3 \lambda_n - n\frac{\delta^4}{2} + n\frac{\delta^4}{2} + n\frac{\delta^3}{2} \lambda_n + n\frac{\delta^3}{2} \lambda_n = 0$ pelo que, para todos os inteiros não negativos δ e ξ , $g(\delta, \xi) \leq 0$. Assim, $f(0) \leq 0$ e, como $f(k)$ é uma função estritamente decrescente, conclui-se que para todo $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, $f(k) \leq 0$.

Consequentemente conclui-se que o majorante (5.5) é sempre menor ou igual ao majorante (5.12), ou seja,

$$\frac{2k|E(G)| - n\lambda_1 \lambda_n}{\delta^2 - \lambda_1 \lambda_n} \leq \frac{4|E(G)|(\Delta + k) - nq_n q_1}{4\delta^2 - q_n q_1}. \quad (5.13)$$

Uma vez que $|S| \leq \frac{2k|E(G)| - n\lambda_1 \lambda_n}{\delta^2 - \lambda_1 \lambda_n}$, conclui-se finalmente que,

$$|S| \leq \frac{4|E(G)|(\Delta + k) - nq_n q_1}{4\delta^2 - q_n q_1}. \quad (5.14)$$

■

Como consequência, se G é bipartido sem vértices isolados, pelo Teorema 2.11, $q_n = 0$ e o majorante é dado por,

$$|S| \leq |E(G)| \frac{\Delta + k}{\delta^2}. \quad (5.15)$$

No caso particular de G ser p -regular tem-se o seguinte resultado apresentado em [CRS07].

Teorema 5.13 [CRS07] *Seja G um grafo com n vértices e ε arestas e seja q_1 o maior valor próprio da matriz laplaciana sem sinal $Q_G = A_G + D_G$. Então G é regular se e só se $4\varepsilon = nq_1$. Se G é regular então tem grau igual a $\frac{q_1}{2}$ e o número de componentes é igual à multiplicidade de q_1 .*

Do Teorema 5.13, se o grafo G é p -regular então $q_1 < 4\delta$, logo de (5.12) vem

$$\begin{aligned} |S| &\leq \frac{4|E(G)|(\Delta + k) - nq_nq_1}{4\delta^2 - q_nq_1} \\ &= \frac{nq_1(p + k - q_n)}{2pq_1 - q_nq_1} \quad (\text{pois } \Delta = \delta = p = \frac{q_1}{2} \text{ e } 4|E(G)| = nq_1) \\ &= \frac{n(p + k - q_n)}{2p - q_n}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$|S| \leq \frac{n(p + k - q_n)}{2p - q_n}. \quad (5.16)$$

Tendo ainda em conta (5.8), para o caso de grafos p -regulares tem-se $q_n - \lambda_n = p$, pelo que pode reescrever-se o majorante (5.16) do seguinte modo,

$$\begin{aligned} |S| &\leq \frac{n(q_n - \lambda_n + k - q_n)}{2p - p - \lambda_n} \\ &= n \frac{k - \lambda_n}{p - \lambda_n}. \end{aligned}$$

Assim, à semelhança de (5.5) e (5.6), também neste caso o majorante coincide com o majorante (5.3).

Conclui-se assim que, no caso de grafos regulares, os majorantes (5.5), (5.6) e (5.12), resultantes da extensão do majorante de Haemers (3.2), são todos coincidentes e, em particular, coincidentes com o majorante (5.3). Por exemplo, considerando um grafo completo $G = K_n$, com $\lambda_1 = n - 1$ e $\lambda_n = -1$, e supondo que $S \subseteq V(K_n)$ induz um subgrafo k -regular, obtém-se

$$\begin{aligned} n \frac{k - \lambda_n}{\lambda_1 - \lambda_n} &= n \frac{k + 1}{n - 1 + 1} \\ &= k + 1 \\ &= |S|, \end{aligned}$$

ou seja, verifica-se que o majorante (5.3) é atingido.

5.2 Comparação dos majorantes

Nesta secção faz-se uma comparação entre os diferentes majorantes introduzidos neste capítulo. No caso particular de grafos regulares provou-se que os majorantes (5.5), (5.6) e (5.12) coincidem. Provou-se ainda, na secção anterior, que o majorante (5.5) nunca é superior ao majorante (5.12), pelo que se conclui que o majorante (5.12) é sempre maior ou igual que o menor dos majorantes (5.5) e (5.6), ou seja, fazendo $\delta = \delta(G)$ e $\Delta = \Delta(G)$,

$$\frac{|E(G)|(\Delta + k) - n\frac{q_1}{4}q_n}{\delta^2 - \frac{q_1}{4}q_n} \geq \min \left\{ \frac{2k|E(G)| - n\lambda_1\lambda_n}{\delta^2 - \lambda_1\lambda_n}, n\frac{k + \mu_1 - \delta}{\mu_1} \right\}. \quad (5.17)$$

No caso particular de $k = 0$ verifica-se a seguinte desigualdade entre os majorantes (5.5) e (5.6).

$$\frac{-n\lambda_1\lambda_n}{\delta^2 - \lambda_1\lambda_n} \leq n\frac{\mu_1 - \delta}{\mu_1}. \quad (5.18)$$

Com efeito, uma vez que para $\delta = 0$ esta desigualdade se verifica trivialmente, considere-se $\delta > 0$. Então,

$$\begin{aligned} \frac{-\lambda_1\lambda_n}{\delta^2 - \lambda_1\lambda_n} &\leq \frac{\mu_1 - \delta}{\mu_1} \\ &\Leftrightarrow \\ -\lambda_1\lambda_n\mu_1 - (\delta^2 - \lambda_1\lambda_n)(\mu_1 - \delta) &\leq 0 \\ &\Leftrightarrow \\ \delta(\delta^2 - \delta\mu_1 - \lambda_1\lambda_n) &\leq 0 \\ &\Leftrightarrow \\ \delta^2 - \delta\mu_1 - \lambda_1\lambda_n &\leq 0. \end{aligned}$$

Uma vez que, pelo Teorema 5.9, $\delta - \mu_1 \leq \lambda_n \Leftrightarrow \delta^2 - \delta\mu_1 \leq \delta\lambda_n$, tendo em conta que $\delta \leq \lambda_1$ resulta $\delta^2 - \delta\mu_1 - \lambda_1\lambda_n \leq 0$.

Como consequência, para $k = 0$ deve considerar-se o majorante (5.5).

No que diz respeito à comparação dos majorantes (5.5) e (5.6) e também dos majorantes (5.6) e (5.12) conclui-se que nenhum é melhor do que o outro. Considerando, por exemplo, o grafo c-fat200-1 da coleção DIMACS tem-se que para $k = 1$ o majorante (5.5) é igual a 83.87 e o majorante (5.6) é igual a 90.72. No entanto, para $k = 6$ o majorante (5.6) é inferior ao majorante (5.5), pois os valores são iguais a 133.18 e 132.75, respetivamente. O mesmo sucede quando se comparam os majorantes (5.6) e (5.12). Considerando um outro grafo da coleção DIMACS, MANN-a9, para valores de $k = 1$ obtém-se o majorante (5.6) igual a 5.47 e o majorante (5.12) igual a 5.32. Já para valores de $k = 8$ obtém-se (5.6) igual a 23.72 e (5.12) igual a 24.93.

Capítulo 6

Estudo computacional comparativo

Neste capítulo faz-se um estudo computacional comparativo entre majorantes para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares já publicados e os que são introduzidos neste trabalho. Estes testes foram efetuados utilizando alguns dos grafos da coleção DIMACS (ver [JT96]) e foram realizados com recurso ao MatLab (versão R2012a). As tabelas que se seguem, onde se apresentam resultados para diferentes valores de k , incluem a designação do grafo G , o número de vértices n e os valores obtidos para diferentes majorantes. O valor t^* do majorante $h_k^{G^c}(t^*)$ é estimado pelo método da bissecções sucessivas a partir do intervalo $[-\lambda_{\min}(A_{G^c}) + 10^{-6}, \lambda_{\max}(A_G) + 1]$. Dado que, de acordo com o Teorema 5.12, o majorante (5.12) é sempre maior ou igual do que o menor dos majorantes (5.5) e (5.6), o majorante (5.12) foi excluído dos testes computacionais.

Na primeira tabela apresentam-se os resultados obtidos para os majorantes (3.3), (3.2), (4.7) e para os majorantes (4.13), (3.8) e (3.13) denotados por $h_0^{G^c}(t^*)$, $v(G^c)$ e $\vartheta(G^c)$, respetivamente. Uma vez que a coleção DIMACS disponibiliza o número de clique dos seus grafos G , os testes apresentados para $k = 0$ referem-se aos complementares destes grafos, G^c . Nesta tabela também não se apresentam resultados relativos ao majorante (5.6) uma vez que se provou (ver Secção 5.2) que, no caso particular de $k = 0$, o majorante (5.6) é sempre maior ou igual ao majorante (5.5), que, neste caso, é igual ao majorante (3.2).

Grafo G	n	$\alpha(G^c)$	(3.2)	(4.7)	$h_0^{G^c}(t^*)$	$\nu(G^c)$	$\vartheta(G^c)$
brock200-1	200	21	69.36	-	43.34	40.99	<u>27.46</u>
brock200-2	200	12	32.32	-	26.55	25.31	<u>14</u>
brock200-3	200	15	41.30	-	32.67	31.58	<u>18</u>
brock200-4	200	17	50.78	-	35.40	34.65	<u>21</u>
brock400-1	400	27	86.91	-	62.84	61.47	*
brock400-2	400	29	103.05	-	62.82	61.93	*
brock400-3	400	31	91.42	-	63.94	61.92	*
brock400-4	400	33	99.07	-	63.32	62.07	*
c-fat200-1	200	12	17.48	17.43	<u>17.27</u>	17.39	*
c-fat200-2	200	24	33.10	-	32.95	<u>32.73</u>	*
c-fat200-5	200	58	73.11	73.21	72.91	72.59	<u>60</u>
c-fat500-1	500	14	20.59	20.60	20.60	20.55	*
c-fat500-2	500	26	38.32	38.27	38.27	<u>38.24</u>	*
c-fat500-5	500	64	91.09	-	91.03	<u>90.56</u>	*
hamming6-2	64	32	<u>32</u>	<u>32</u>	<u>32</u>	<u>32</u>	<u>32</u>
hamming6-4	64	4	13.54	13.54	13.54	13.54	<u>5.33</u>
hamming8-2	256	128	<u>128</u>	<u>128</u>	<u>128</u>	<u>128</u>	*
hamming8-4	256	16	<u>45.25</u>	<u>45.25</u>	<u>45.25</u>	<u>45.25</u>	*
johnson8-2-4	28	4	<u>4</u>	<u>4</u>	<u>4</u>	<u>4</u>	<u>4</u>
johnson8-4-4	70	14	<u>14</u>	<u>14</u>	<u>14</u>	<u>14</u>	<u>14</u>
johnson16-2-4	120	8	<u>8</u>	<u>8</u>	<u>8</u>	<u>8</u>	<u>8</u>
johnson32-2-4	496	16	<u>16</u>	<u>16</u>	<u>16</u>	<u>16</u>	*
keller4	171	11	57.63	41.16	41.16	41.15	<u>14.01</u>
MANN-a9	45	16	20.79	19.71	19.71	19.71	<u>17.48</u>
MANN-a27	378	126	253.10	326.75	277.79	230.92	<u>132</u>

Notas: (-) $\lambda_{\min}(A_{G^c})$ é valor próprio principal, (*) terminou por falta de memória.

Tabela 6.1: Resultados computacionais considerando G^c e $k = 0$.

Dos resultados apresentados na Tabela 6.1 pode concluir-se que, no caso particular dos grafos das famílias Ham e Joh, que são grafos regulares, todos os majorantes coincidem com número de clique, com exceção de um caso, hamming6-4. Relativamente aos majorantes (4.7) e $h_0^{G^c}(t^*)$, considerando os grafos em que é possível determinar estes dois valores, os resultados são na sua maioria iguais, exceto os obtidos para os grafos c-fat200-1, c-fat200-5 em que (4.7) apresenta valores um pouco superiores. Observe-se ainda que o majorante $\vartheta(G^c)$, nos casos em que é possível determiná-lo, é sempre melhor do que os restantes. No entanto, há muitos grafos desta coleção para os quais não foi possível determinar $\vartheta(G^c)$ e, nestes casos, $\nu(G^c)$ é quase sempre o melhor dos majorantes. Destaca-se apenas o grafo c-fat200-1 para o qual $h_0^{G^c}(t^*)$ é menor do que $\nu(G)$.

Nas próximas tabelas continua a considerar-se os grafos da coleção DIMACS, mas agora considera-se G em vez de G^c . Os majorantes testados são $\nu_k(G)$, (4.6), (4.7), $h_k^G(t^*)$, (5.5) e (5.6), apresentando-se os resultados para $k = 1, 2, 3$ e alguns valores para os quais (5.6) é não superior a (5.5).

Graph	n	$\delta(G)$	$\Delta(G)$	k	$\nu_k(G)$	(4.6)	(4.7)	$h_k^G(t^*)$	(5.5)	(5.6)
brock200-1	200	130	165	1	<u>17.58</u>	53.33	-	17.82	21.82	46.02
				2	<u>18.86</u>	54.33	-	19.11	23.40	47.22
				3	<u>20.13</u>	55.33	-	20.39	24.98	48.41
				64	<u>97.79</u>	116.33	-	98.19	121.22	121.22
				70	<u>105.42</u>	122.33	-	105.78	130.69	128.38
brock200-2	200	78	114	1	<u>28.02</u>	102.67	-	29.04	40.12	70.87
				2	<u>29.87</u>	103.67	-	30.91	42.75	72.54
				3	<u>31.72</u>	104.67	-	32.79	45.39	74.22
				33	<u>87.24</u>	134.67	-	88.48	124.54	124.53
				34	<u>89.09</u>	135.67	-	90.30	127.18	126.21
brock200-3	200	98	134	1	<u>23.01</u>	81.04	-	23.25	31.51	59.23
				2	<u>24.55</u>	82.04	-	24.79	33.61	60.66
				3	<u>26.08</u>	83.04	-	26.34	35.70	62.10
				43	<u>87.51</u>	123.04	-	87.96	119.58	119.56
				44	<u>89.04</u>	124.04	-	89.50	121.68	121.00
brock200-4	200	112	147	1	<u>21.00</u>	70.73	-	21.75	26.76	53.05
				2	<u>22.44</u>	71.73	-	23.21	28.59	54.38
				3	<u>23.88</u>	72.73	-	24.67	30.42	55.70
				54	<u>97.14</u>	123.73	-	97.92	123.58	123.22
				60	<u>105.76</u>	129.73	-	106.39	134.54	131.16
brock400-1	400	272	320	1	<u>24.55</u>	103.08	-	24.85	28.70	66.45
				2	<u>25.84</u>	104.08	-	26.15	30.20	67.68
				3	<u>27.13</u>	105.08	-	27.45	31.71	68.91
				139	<u>113.43</u>	172.08	-	114.11	236.35	236.30
				200	<u>280.90</u>	302.08	-	<u>280.64</u>	328.14	311.38
brock400-2	400	274	328	1	<u>24.23</u>	102.73	-	24.54	28.01	70.10
				2	<u>25.52</u>	103.73	-	25.85	29.50	71.31
				3	<u>26.80</u>	104.73	-	27.14	30.99	72.52
				153	<u>228.86</u>	261.73	-	229.23	254.05	253.78
				165	<u>235.30</u>	266.73	-	235.62	271.89	268.28
brock400-3	400	275	322	1	<u>23.93</u>	103.27	-	24.31	27.31	63.79
				2	<u>25.22</u>	104.27	-	25.63	28.78	65.02
				3	<u>26.52</u>	105.27	-	26.94	30.26	66.25
				148	<u>216.85</u>	252.27	-	217.31	244.34	244.17
				170	<u>242.75</u>	272.27	-	242.85	278.82	271.16

(-) $\lambda_{min}(A_G)$ é valor próprio principal.

Tabela 6.2: Resultados computacionais para diferentes valores de k .

Graph	n	$\delta(G)$	$\Delta(G)$	k	$\nu_k(G)$	(4.6)	(4.7)	$h_k^G(t^*)$	(5.5)	(5.6)
brock400-4	400	275	326	1	<u>24.08</u>	102.87	-	24.78	27.59	67.15
				2	<u>25.38</u>	103.87	-	26.08	29.06	68.36
				3	<u>26.67</u>	104.87	-	27.38	30.54	69.58
				152	<u>209.00</u>	253.87	-	219.66	250.67	250.58
				160	<u>229.33</u>	261.87	-	229.86	262.49	260.30
c-fat200-1	200	14	17	1	<u>71.11</u>	185.67	-	71.23	83.87	90.72
				2	<u>80.17</u>	186.67	-	80.28	93.73	99.13
				3	<u>89.24</u>	187.67	-	89.33	103.59	107.53
				6	<u>116.42</u>	190.67	-	116.48	133.18	132.75
				7	<u>125.48</u>	191.67	-	125.53	143.04	141.16
c-fat200-2	200	32	34	1	<u>59.05</u>	168.65	<u>59.05</u>	<u>59.05</u>	60.28	61.75
				2	<u>63.55</u>	169.65	<u>63.55</u>	<u>63.55</u>	64.83	66.21
				3	<u>68.04</u>	170.65	<u>68.04</u>	<u>68.04</u>	69.39	70.67
				16	<u>126.52</u>	183.65	<u>126.52</u>	<u>126.52</u>	128.65	128.65
				17	<u>131.01</u>	184.63	<u>131.01</u>	<u>131.01</u>	133.21	133.10
c-fat200-5	200	83	86	1	<u>46.24</u>	116.28	<u>46.24</u>	<u>46.24</u>	47.74	50.39
				2	<u>48.08</u>	117.28	<u>48.08</u>	<u>48.08</u>	49.64	52.21
				3	<u>49.92</u>	118.28	<u>49.92</u>	<u>49.92</u>	51.54	54.04
				39	<u>116.06</u>	154.28	<u>116.06</u>	<u>116.06</u>	119.79	119.72
				40	<u>117.90</u>	155.28	<u>117.90</u>	<u>117.90</u>	121.69	121.55
c-fat500-1	500	17	20	1	<u>173.23</u>	483.17	<u>173.23</u>	<u>173.23</u>	195.86	212.83
				2	<u>192.72</u>	484.17	<u>192.72</u>	<u>192.72</u>	215.86	230.78
				3	<u>212.20</u>	485.17	<u>212.20</u>	<u>212.20</u>	235.87	248.73
				10	<u>348.59</u>	492.17	<u>348.59</u>	<u>348.59</u>	375.90	374.36
				11	<u>368.08</u>	493.17	<u>368.08</u>	<u>368.08</u>	395.91	392.31
c-fat500-2	500	35	38	1	<u>147.28</u>	464.45	<u>147.28</u>	<u>147.28</u>	159.95	171.57
				2	<u>157.21</u>	465.45	<u>157.21</u>	<u>157.21</u>	170.41	181.23
				3	<u>167.14</u>	466.45	<u>167.14</u>	<u>167.14</u>	180.87	190.89
				16	<u>296.27</u>	479.45	<u>296.27</u>	<u>296.27</u>	316.84	316.47
				20	<u>336.00</u>	483.45	<u>336.00</u>	<u>336.00</u>	358.68	355.11
c-fat500-5	500	92	95	1	<u>133.05</u>	408.24	<u>133.05</u>	<u>133.05</u>	134.90	137.08
				2	<u>137.05</u>	409.24	<u>137.05</u>	<u>137.05</u>	138.95	141.07
				3	<u>141.05</u>	410.24	<u>141.05</u>	<u>141.05</u>	143.00	145.06
				45	<u>309.02</u>	452.24	<u>309.02</u>	<u>309.02</u>	312.91	312.56
				50	<u>329.02</u>	457.24	<u>329.02</u>	<u>329.02</u>	333.15	332.50

Tabela 6.3: Continuação dos resultados computacionais para diferentes valores de k .

Graph	n	$\delta(G)$	$\Delta(G)$	k	$v_k(G)$	(4.6)	(4.7)	$h_k^G(t^*)$	(5.5)	(5.6)
c-fat500-10	500	185	188	1	<u>129.00</u>	314.49	<u>129.00</u>	<u>129.00</u>	130.58	132.08
				2	<u>131.00</u>	315.49	<u>131.00</u>	<u>131.00</u>	132.61	134.08
				3	<u>133.00</u>	316.49	<u>133.00</u>	<u>133.00</u>	134.63	136.08
				70	<u>267.00</u>	383.49	<u>267.00</u>	<u>267.00</u>	270.25	270.05
				100	<u>327.00</u>	413.49	<u>327.00</u>	<u>327.00</u>	330.98	330.04
Keller4	171	102	124	1	<u>32.94</u>	62.70	32.95	32.95	36.20	46.96
				2	<u>34.26</u>	63.70	34.27	34.27	37.65	48.19
				3	<u>35.58</u>	64.70	35.59	35.59	39.09	49.42
				51	<u>98.96</u>	112.70	98.98	98.98	108.46	108.37
				65	<u>117.44</u>	126.70	117.47	117.46	128.69	125.56
MANN-a9	45	40	41	1	<u>4.64</u>	5.24	<u>4.64</u>	<u>4.64</u>	4.81	5.47
				2	<u>5.66</u>	6.24	<u>5.66</u>	<u>5.66</u>	5.86	6.48
				3	<u>6.67</u>	7.24	<u>6.67</u>	<u>6.67</u>	6.92	7.50
				19	<u>22.92</u>	23.24	<u>22.92</u>	<u>22.92</u>	23.74	23.72
				20	<u>23.93</u>	24.24	<u>23.93</u>	<u>23.93</u>	24.79	24.73
MANN-a27	378	364	374	1	<u>5.93</u>	6.74	<u>5.93</u>	<u>5.93</u>	6.22	14.43
				2	<u>6.93</u>	7.74	<u>6.93</u>	<u>6.93</u>	7.27	15.43
				3	<u>7.94</u>	8.74	<u>7.94</u>	<u>7.94</u>	8.32	16.44
				170	175.37	175.74	<u>175.36</u>	175.37	183.73	183.69
				175	<u>180.38</u>	180.74	<u>180.38</u>	<u>180.38</u>	188.99	188.70
p-hat300-1	300	23	132	1	<u>82.70</u>	230.45	-	99.55	221.09	250.73
				2	<u>87.83</u>	231.45	-	104.75	233.70	252.97
				3	<u>92.97</u>	232.45	-	109.16	246.31	255.21
				5	<u>103.24</u>	234.45	-	117.96	271.53	259.69
				10	<u>128.91</u>	239.45	-	139.25	334.58	270.89
p-hat300-2	300	59	229	1	<u>60.27</u>	166.15	-	87.65	139.27	224.48
				2	<u>63.55</u>	167.15	-	90.02	146.31	225.79
				3	<u>66.83</u>	168.15	-	92.40	153.36	227.09
				16	<u>109.48</u>	181.15	-	122.82	244.96	244.01
				20	<u>122.60</u>	185.15	-	131.56	273.14	249.22
p-hat500-1	500	52	204	1	<u>114.50</u>	378.45	-	148.27	261.65	376.72
				2	<u>120.01</u>	379.45	-	152.91	273.33	379.13
				3	<u>125.52</u>	380.45	-	157.55	285.00	381.55
				14	<u>186.14</u>	391.45	-	206.57	413.44	408.14
				20	<u>219.21</u>	397.45	-	232.17	483.50	422.65

Tabela 6.4: Continuação dos resultados computacionais para diferentes valores de k .

Graph	n	$\delta(G)$	$\Delta(G)$	k	$\nu_k(G)$	(4.6)	(4.7)	$h_k^G(t^*)$	(5.5)	(5.6)
san200-0.9-2	200	169	189	1	<u>11.49</u>	22.77	-	11.77	12.59	23.93
				2	<u>12.57</u>	23.77	-	12.86	13.77	24.98
				3	<u>13.65</u>	24.77	-	13.95	14.96	26.03
				86	<u>103.25</u>	107.77	-	103.35	113.11	113.01
				100	<u>118.37</u>	121.77	-	<u>118.32</u>	129.67	127.69
san200-0.9-3	200	166	187	1	<u>11.46</u>	22.57	-	11.57	13.05	26.60
				2	<u>12.53</u>	23.57	-	12.65	14.27	27.65
				3	<u>13.61</u>	24.57	-	13.74	15.50	28.70
				80	<u>96.32</u>	101.57	-	96.44	109.67	109.62
				100	<u>117.80</u>	121.57	-	117.84	134.13	130.64
san400-0.7-1	400	257	301	1	<u>25.43</u>	122.16	-	25.86	29.27	64.60
				2	<u>26.80</u>	123.16	-	27.24	30.84	65.92
				3	<u>28.17</u>	124.16	-	28.62	32.42	67.23
				135	<u>208.87</u>	256.16	-	209.38	240.23	240.16
				140	<u>215.72</u>	261.16	-	216.19	248.10	246.71
san400-0.7-2	400	257	304	1	<u>27.96</u>	122.15	-	28.22	32.24	67.69
				2	<u>29.32</u>	123.15	-	29.58	33.80	68.90
				3	<u>30.68</u>	124.15	-	30.94	35.36	70.20
				136	<u>211.00</u>	257.15	-	211.38	243.07	242.89
				140	<u>216.42</u>	261.15	-	216.79	249.32	248.08
san400-0.7-3	400	250	307	1	<u>32.08</u>	122.45	-	32.59	38.81	82.12
				2	<u>33.42</u>	123.45	-	33.95	40.43	83.40
				3	<u>34.76</u>	124.45	-	35.30	42.05	84.68
				127	<u>201.26</u>	248.45	-	201.88	243.10	242.98
				130	<u>205.29</u>	251.45	-	205.89	247.96	246.81

Tabela 6.5: Continuação dos resultados computacionais para diferentes valores de k .

A tabela que se segue é a continuação das tabelas anteriores, mas neste caso os grafos apresentados são grafos regulares, $\delta(G) = \Delta(G)$.

Graph	n	$\delta(G) = \Delta(G)$	k	$\nu_k(G)$	(4.6)	(4.7)	$h_k^G(t^*)$	(5.5)	(5.6)
hamming6-2	64	57	1	<u>6.19</u>	8	<u>6.19</u>	<u>6.19</u>	<u>6.19</u>	<u>6.19</u>
			2	<u>7.23</u>	9	<u>7.23</u>	<u>7.23</u>	<u>7.23</u>	<u>7.23</u>
			3	<u>8.26</u>	10	<u>8.26</u>	<u>8.26</u>	<u>8.26</u>	<u>8.26</u>
			10	<u>15.48</u>	17	<u>15.48</u>	<u>15.48</u>	<u>15.48</u>	<u>15.48</u>
			15	<u>20.65</u>	22	<u>20.65</u>	<u>20.65</u>	<u>20.65</u>	<u>20.65</u>
hamming6-4	64	22	1	<u>22</u>	43	<u>22</u>	<u>22</u>	<u>22</u>	<u>22</u>
			2	<u>24</u>	44	<u>24</u>	<u>24</u>	<u>24</u>	<u>24</u>
			3	<u>26</u>		45	<u>26</u>	<u>26</u>	<u>26</u>
			12	<u>44</u>	54	<u>44</u>	<u>44</u>	<u>44</u>	<u>44</u>
			18	<u>56</u>	60	<u>56</u>	<u>56</u>	<u>56</u>	<u>56</u>
hamming8-2	256	247	1	<u>8.06</u>	10	<u>8.06</u>	<u>8.06</u>	<u>8.06</u>	<u>8.06</u>
			2	<u>9.07</u>	11	<u>9.97</u>	<u>9.07</u>	<u>9.07</u>	<u>9.07</u>
			3	<u>10.08</u>	12	<u>10.08</u>	<u>10.08</u>	<u>10.08</u>	<u>10.08</u>
			50	<u>57.45</u>	59	<u>57.45</u>	<u>57.45</u>	<u>57.45</u>	<u>57.45</u>
			60	<u>67.53</u>	69	<u>67.53</u>	<u>67.53</u>	<u>67.53</u>	<u>67.53</u>
hamming8-4	256	163	1	<u>46.55</u>	165	<u>46.55</u>	<u>46.55</u>	<u>46.55</u>	<u>46.55</u>
			2	<u>47.84</u>	166	<u>47.84</u>	<u>47.84</u>	<u>47.84</u>	<u>47.84</u>
			3	<u>49.13</u>	167	<u>49.13</u>	<u>49.13</u>	<u>49.13</u>	<u>49.13</u>
			20	<u>71.11</u>	184	<u>71.11</u>	<u>71.11</u>	<u>71.11</u>	<u>71.11</u>
			45	<u>103.43</u>	209	<u>103.43</u>	<u>103.43</u>	<u>103.43</u>	<u>103.43</u>
johnson8-2-4	28	15	1	<u>8.4</u>	14	<u>8.4</u>	<u>8.4</u>	<u>8.4</u>	<u>8.4</u>
			2	<u>9.8</u>	15	<u>9.8</u>	<u>9.8</u>	<u>9.8</u>	<u>9.8</u>
			3	<u>11.20</u>	16	<u>11.20</u>	<u>11.20</u>	<u>11.20</u>	<u>11.20</u>
			5	<u>14</u>	18	<u>14</u>	<u>14</u>	<u>14</u>	<u>14</u>
			10	<u>21</u>	23	<u>21</u>	<u>21</u>	<u>21</u>	<u>21</u>
johnson8-4-4	70	53	1	<u>11.29</u>	18	<u>11.29</u>	<u>11.29</u>	<u>11.29</u>	<u>11.29</u>
			2	<u>12.42</u>	19	<u>12.42</u>	<u>12.42</u>	<u>12.42</u>	<u>12.42</u>
			3	<u>13.55</u>	20	<u>13.55</u>	<u>13.55</u>	<u>13.55</u>	<u>13.55</u>
			14	<u>25.97</u>	31	<u>25.97</u>	<u>25.97</u>	<u>25.97</u>	<u>25.97</u>
			20	<u>32.74</u>	37	<u>32.74</u>	<u>32.74</u>	<u>32.74</u>	<u>32.74</u>
johnson16-2-4	120	91	1	<u>16.15</u>	30	<u>16.15</u>	<u>16.15</u>	<u>16.15</u>	<u>16.15</u>
			2	<u>17.31</u>	31	<u>17.31</u>	<u>17.31</u>	<u>17.31</u>	<u>17.31</u>
			3	<u>18.46</u>	32	<u>18.46</u>	<u>18.46</u>	<u>18.46</u>	<u>18.46</u>
			30	<u>49.62</u>	59	<u>49.62</u>	<u>49.62</u>	<u>49.62</u>	<u>49.62</u>
			35	<u>55.38</u>	64	<u>55.38</u>	<u>55.38</u>	<u>55.38</u>	<u>55.38</u>
johnson32-2-4	496	435	1	<u>32.07</u>	62	<u>32.07</u>	<u>32.07</u>	<u>32.07</u>	<u>32.07</u>
			2	<u>33.14</u>	63	<u>33.14</u>	<u>33.14</u>	<u>33.14</u>	<u>33.14</u>
			3	<u>34.21</u>	64	<u>34.21</u>	<u>34.21</u>	<u>34.21</u>	<u>34.21</u>
			110	<u>148.59</u>	171	<u>148.59</u>	<u>148.59</u>	<u>148.59</u>	<u>148.59</u>
			200	<u>244.79</u>	261	<u>244.79</u>	<u>244.79</u>	<u>244.79</u>	<u>244.79</u>

Tabela 6.6: Continuação dos resultados computacionais para diferentes valores de k .

Das experiências computacionais efetuadas conclui-se que para os grafos das famílias CFat (com menor valor próprio não principal), Ham, Joh e MANN os majorantes $\nu_k(G)$, (4.7) e $h_k^G(t^*)$ coincidem. Para os restantes grafos verifica-se que $\nu_k(G)$ é quase sempre melhor do que qualquer um dos restantes majorantes, com exceção do grafo brock400-1 em que, para $k = 200$, $h_k^G(t^*)$ é melhor. Observe-se ainda que, considerando os maiores inteiros não superiores aos valores obtidos são muitos os grafos em que (4.7) (no caso em que é possível calculá-lo), $\nu_k(G)$ e $h_k^G(t^*)$ coincidem. No entanto, convém referir que o cálculo de $\nu_k(G)$ obriga a resolver um problema de otimização quadrática convexa enquanto os restantes majorantes recorrem apenas parâmetros do grafo e alguns valores próprios.

Note-se finalmente que, apesar de não serem apresentados os valores para o majorante (5.12), há grafos em que o seu valor é inferior ao valor obtido para (5.6), como acontece nomeadamente com os grafos MANN-a9 e MANN-a27 para $k = 1$.

Capítulo 7

Conclusões

Muitos problemas de otimização em grafos reduzem-se à determinação de um subconjunto de vértices que induza um subgrafo k -regular de ordem máxima. Este problema é NP-difícil, pelo que se introduziram neste trabalho majorantes para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares que são determinados em tempo polinomial.

A revisão bibliográfica efetuada no Capítulo 3 refletiu a existência de vários majorantes para o número de estabilidade de um grafo. O estudo da existência de majorantes para o caso geral da ordem de subgrafos induzidos k -regulares de ordem máxima é mais recente e os trabalhos publicados são ainda em número reduzido. Neste capítulo são ainda efetuadas algumas generalizações tendo em conta programas quadráticos não necessariamente convexos, nomeadamente, no que diz respeito às componentes de uma solução ótima de um dado programa quadrático. Apresenta-se um resultado que relaciona $\nu_G(k, \tau)$ e $\nu_G(\tau)$ a partir do qual se deduz um majorante para $\alpha_k(G)$ dependente de $\alpha(G)$ e se estabelece uma condição necessária e suficiente para que este majorante seja atingido para uma certa classe de grafos. Ainda neste capítulo, com base no Teorema 3.19, foi proposto um algoritmo de natureza combinatória que permite a determinação de subgrafos induzidos k -regulares de cardinalidade máxima para uma classe particular de grafos.

No Capítulo 4 foi analisado um majorante para a ordem de um subgrafo induzido k -regular usando programação quadrática convexa e determinadas condições necessárias e suficientes

para que este majorante seja atingido. Baseados nesta técnica de programação quadrática deduziram-se alguns majorantes espectrais. Deduziu-se nomeadamente um majorante dependente do máximo valor próprio da matriz de adjacência do complementar de um dado grafo e um majorante que supõe que o mínimo valor próprio da matriz de adjacência é não principal com uma dada multiplicidade. Este último foi posteriormente melhorado em [CR10] usando uma técnica de programação quadrática juntamente com os ângulos principais do grafo.

Procedeu-se ainda à determinação de três novos majorantes espectrais para a ordem de subgrafos induzidos k -regulares de ordem máxima, (5.5), (5.6) e (5.12) baseados, respetivamente, no espectro das matrizes de adjacência, laplaciana e laplaciana sem sinal de um grafo. Para o caso particular de grafos regulares concluiu-se que estes majorantes são iguais ao majorante obtido em [CKL07] como extensão do majorante de Hoffman (5.3). Com vista a comparar analiticamente estes majorantes foi efetuado um estudo que concluiu que o majorante baseado no espectro da matriz de adjacência é sempre menor do que o majorante que depende do espectro da matriz laplaciana sem sinal, pelo que o majorante (5.12) é sempre maior do que o menor dos majorantes (5.5) e (5.6). Assim, os resultados apresentados no estudo computacional comparativo não contemplam o majorante (5.12). No entanto, verifica-se a existência de alguns grafos para os quais este majorante apresenta valores menores do que o majorante (5.6). Refira-se ainda que os resultados demonstram que, para a seleção de grafos considerada, há um número significativo de grafos para os quais o majorante $\nu_k(G)$ é menor do que os restantes majorantes. Mas, considerando os maiores inteiros não superiores aos valores obtidos, há muitos grafos em que os valores de alguns majorantes coincidem.

Referências bibliográficas

- [AM85] W. N. Anderson and T. D. Morley. Eigenvalues of the Laplacian of a graph. *Linear and Multilinear Algebra*, 18:141–145, 1985. {13}
- [BH12] A. E. Brouwer and W. Haemers. *Spectra of graphs*. Springer, New York, 2012. {1}
- [Car01] D. M. Cardoso. Convex quadratic programming approach to the maximum matching problem. *J. Global. Optim.*, 21:91–106, 2001. {20,21}
- [Car03] D. M. Cardoso. On graphs with stability number equal to the optimal value of a convex quadratic programming. *Matemática Contemporânea*, 25:9–24, 2003. {21}
- [CC06] D. M. Cardoso and D. M. Cvetković. Graphs with least eigenvalue -2 attaining a convex quadratic upper bound for the stability number. *Bull. Acad. Serbe Sci. Arts, CI. Sci. Math. Natur. Sci. Math.*, 23:41–55, 2006. {20}
- [CDS95] D. M. Cvetković, M. Doob, and H. Sachs. *Spectra of Graphs - Theory and Applications*. III revised and enlarged edition, Johan Ambrosius Bart. Verlag, Leipzig, Heidelberg, 1995. {10,11,12,19,54,60}
- [CKL07] D. M. Cardoso, M. Kamiński, and V. Lozin. Maximum k -regular induced subgraphs. *J. Comb. Optim.*, 14:455–463, 2007. {2,3,4,9,17,18,25,26,46,47,61,86}
- [CL01] D. M. Cardoso and C. J. Luz. Extensions of the Motzkin–Straus result on the stability number of graphs. Technical report, Cadernos de Matemática CM01/I-17, Departamento de Matemática da Universidade de Aveiro, 2001. {21,22,23,34}

- [CP09] D. M. Cardoso and S. J. Pinheiro. Spectral upper bounds on the size of k -regular induced subgraphs. *Electron. Notes Discrete Math.*, 32:3–10, 2009. {2,3,46,47,49,51,53}
- [CR10] M. Cardoso, D. and P. Rowlinson. Spectral upper bounds for the order of a k -regular induced subgraph. *Linear Algebra Appl.*, 433:1031–1037, 2010. {2,3,4,45,54,55,86}
- [CRS97] D. M. Cvetković, P. Rowlinson, and S. K. Simić. *Eigenspaces of Graphs*. Cambridge University Press, Cambridge, 1997. {54}
- [CRS07] D. M. Cvetković, P. Rowlinson, and S. K. Simić. Signless Laplacians of finite graphs. *Linear Algebra Appl.*, 423:155–171, 2007. {14,15,73,74}
- [CRS10] D. M. Cvetković, P. Rowlinson, and S. K. Simić. *An Introduction to the Theory of Graph Spectra*. Cambridge University Press, Cambridge, 2010. {1}
- [CS57] L. Collatz and U. Sinogowitz. Spektren endlicher grafen. *Abhandlungen aus dem Mathematischen Seminar der Universität Hamburg*, 21:63–77, 1957. {11}
- [Cve71] D. M. Cvetković. Graphs and their spectra. *Publ. Elektrotehn. Fak. Ser. Mat. Fiz.*, 354-356:1–50, 1971. {11}
- [Das10] K. C. Das. On conjectures involving second largest signless Laplacian eigenvalue of graphs. *Linear Algebra Appl.*, 432:3018–3029, 2010. {15}
- [Fie73] M. Fiedler. Algebraic connectivity of graphs. *Czechoslovak Mathematical Journal*, 23(98):298–305, 1973. {14}
- [Gan59] F. R. Gantmacher. *The Theory of Matrices II*. Chelsea Publishing Company, New York, 1959. {11}
- [GJ79] M. R. Garey and D. S. Johnson. *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness*. Freeman, San Francisco, 1979. {9}
- [GLS88] M. Grötschel, L. Lovász, and A. Schrijver. *Geometric Algorithms and Combinatorial Optimization*. Springer, Berlin, 1988. {24}

- [GM90] R. Grone and Sunder V. S. Merris, R. The Laplacian spectrum of a graph. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 11:218–238, 1990. {15}
- [GM94] R. Grone and R. Merris. The Laplacian spectrum of a graph ii. *SIAM J. Discrete Math.*, 7(2):221–229, 1994. {14}
- [GN08] C. D. Godsil and M. W. Newman. Eigenvalue bounds for independent sets. *J. Comb. Theory, Ser. B*, 98(4):721–734, 2008. {2,19}
- [Hae78] W. Haemers. A generalization of the Higman–Sims technique. *Proc. Kon. Ned. Akad. Wet.*, 81:445–447, 1978. {61}
- [Hae80] W. Haemers. *Eigenvalue techniques in design and graph theory*. PhD thesis, Technical University Eindhoven, 1980. {2,4,17,18,19,59,61,62}
- [Hae95] W. Haemers. Interlacing eigenvalues and graphs. *Linear Algebra Appl.*, 226/228:593–616, 1995. {18}
- [Hay59] E. V. Haynsworth. Applications of a theorem on partitioned matrices. *J. Res. Nat. Bureau Stand.*, 62B:73–78, 1959. {60}
- [HH71] M. D. Hestenes and D. G. Higman. Rank 3 groups and strongly regular graphs. *SIAM AMS Proc.*, 4:141–160, 1971. {60}
- [JT96] D. S. Johnson and M. A. Trick. *Cliques, coloring, and satisfiability: second DIMACS challenge*. DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, American Mathematical Society, Providence, 1996. {56,77}
- [Kar72] R. M. Karp. Reducibility among combinatorial problems. *Complexity of Computer Computations*, R.E. Miller and J. W. Thatcher (eds.), Plenum Press, New York:85–104, 1972. {9}
- [Knu94] D. E. Knuth. The sandwich theorem. *Electronic Journal of Combinatorics*, 1:Article 1, 1994. {24}
- [LLT07] M. Lu, H. Liu, and F. Tian. New Laplacian spectral bounds for clique and independence numbers of graphs. *J. Combin. Theory Ser. B*, 97:726–732, 2007. {2,4,17,19,63}

- [Lov79] L. Lovász. On the Shannon capacity of a graph. *IEEE Transactions on Information Theory*, 25:1–7, 1979. {2,17,18,23,24}
- [LS05] C. J. Luz and A. Schrijver. A convex quadratic characterization of the Lovász theta number. *Discrete Math.*, 19:382–387, 2005. {24}
- [Luz95] C. J. Luz. An upper bound on the independence number of a graph computable in polynomial time. *Operations Research Letters*, 18:139–145, 1995. {2,18,20}
- [Luz06] C. J. Luz. A convex quadratic characterization of the Schrijver and McEliece–Rodemich–Rumsey upper bound on the stability number of a graph. Technical report, Cadernos de Matemática CM 05/I-21, Departamento de Matemática da Universidade de Aveiro, 2006. {25}
- [Luz11] C. J. Luz. Improving an upper bound on the size of k -regular induced subgraphs. *J. Comb. Optim.*, 22:882–894, 2011. {2,3,18,25,26,27,34}
- [LZ97] J. S. Li and X. D. Zhang. A new upper bound for eigenvalues matrix of a graph. *Linear Algebra Appl.*, 265:93–100, 1997. {13}
- [MRR78] R. J. McEliece, E. R. Rodemich, and H. C. Jr Rumsey. The Lovász bound and some generalizations. *J. Combinatorics, Information and System Science*, 3:134–152, 1978. {24}
- [MS65] T. Motzkin and E. G. Straus. Maxima for graphs and a new proof of a theorem of Turan. *Canad. J. Math.*, 17:533–540, 1965. {17,19}
- [PSUJ93] A. L. Peressini, F. E. Sullivan, and J. J. Uhl Jr. *The Mathematics of Nonlinear programming*. Springer, New York, 1993. {28}
- [Ram05] P. Rama. *Propriedades Combinatórias e Espectrais de Grafos com Restrições de Regularidade*. PhD thesis, Universidade de Aveiro, 2005. {21}
- [Row07] P. Rowlinson. The main eigenvalues of a graph: a survey. *Applicable Analysis and Discrete Mathematics*, 1:445–471, 2007. {10}
- [Sac62] H. Sachs. Über selbstkomplementäre Graphen. *Publ. Math. Debrecen*, 9:270–288, 1962. {11}

- [Sac67] H. Sachs. Über Teiler, Faktoren und charakteristische Polynome von Graphen II. *Wiss. Z. TH Ilmenau*, 13:405–412, 1967. {13}
- [Sch74] A. J. Schwenk. *Computing the characteristic polynomial of a graph*. Graphs and Combinatorics, R. Bari and Harary (eds), Springer, Berlin, 1974. {59}
- [Sch79] A. Schrijver. A comparison of Delsarte and Lovász bounds. *IEEE Transactions on Information Theory*, 25:425–429, 1979. {24}
- [Wil67] H. S. Wilf. The eigenvalues of a graph and its chromatic number. *J. London Math. Soc.*, 42:330–332, 1967. {19}
- [ZL02] X. D. Zhang and R. Luo. The spectral radius of triangle-free graphs. *Australas. J. Combin.*, 26:33–39, 2002. {14,15}

Índice remissivo

- árvore, 8
- ângulo principal, 54
- arestas
 - adjacentes, 5
 - incidentes, 5
- caminho, 6
- ciclo, 6
 - hamiltoniano, 7
- cintura, 7
- circuito, 6
- clique, 8
 - máxima, 8
 - maximal, 8
- cobertura mínima por estáveis, 8
- complementar, 6
- componente, 7
- comprimento, 7
- diâmetro, 7
- dimensão, 5
- distância, 7
- emparelhamento, 9
 - induzido, 9
 - induzido maximal, 9
 - máximo, 9
 - perfeito, 9
- espectro, 10
- estável, 8
 - máximo, 8
 - maximal, 8
- excentricidade, 7
- grafo
 - (k, τ) -regular, 6
 - bipartido, 7
 - bipartido completo, 8
 - bipartido semi-regular, 8
 - completo, 6
 - conexo, 7
 - desconexo, 7
 - hamiltoniano, 7
 - linha, 12
 - nulo, 6
 - regular, 6
 - simples, 5
- matriz
 - de adjacência, 9
 - de incidência, 12
 - laplaciana, 13
 - laplaciana sem sinal, 14
 - quociente, 60

número

 cromático, 8

 de clique, 8

 de estabilidade, 8

ordem, 5

partição, 59

 equilibrada, 59

 trivial, 59

passeio, 6

polinómio característico, 10

raio, 7

raio espectral, 11

subgrafo, 6

 abrangente, 6

 induzido, 6

supergrafo, 6

trajeto, 6

vértice

 grau do, 5

vértices adjacentes, 5

valor próprio

 não principal, 10

 principal, 10

vetor característico, 10

vizinhança, 5