Universidade de São Paulo
Instituto de Matemática e Estatística
Bacharelado em Ciência da Computação

Teoria Espectral de Grafos

Uma breve introdução

Rafaella Ferreira Nunes

Monografia Final

mac 499 — Trabalho de
Formatura Supervisionado

Supervisora: Profª. Drª. Nataliia Goloshchapova

São Paulo
2021

Para a minha família.

Agradecimentos

Agradeço à minha mãe e ao meu irmão pelo eterno apoio. Agradeço também à minha orientadora pelas contribuições ao longo da graduação.

Resumo

Rafaella Ferreira Nunes. **Teoria Espectral de Grafos: *Uma breve introdução***. Monografia (Bacharelado). Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2021.

O objetivo desse Trabalho de Conclusão de Curso é explorar, de forma introdutória, a Teoria Espectral de Grafos. Em particular, analisou-se como o espectro associado à matriz Laplaciana de um grafo está relacionado à outras invariantes do grafo e, consequentemente, como ele pode revelar informações sobre a estrutura do próprio grafo. O método de estudo utilizado foi a análise do livro "Spectral Graph Theory" da matemática estadunidense Fan Rong King Chung Graham. Os principais temas abordados foram: Autovalores da matriz Laplaciana, problemas isoperimétricos, diâmetros, caminhos, fluxos e roteamento.

Palavras-chave: Grafos. Álgebra Linear. Espectro do grafo.

Abstract

Rafaella Ferreira Nunes. **Spectral Graph Theory: *A short introduction***. Capstone Project Report (Bachelor). Institute of Mathematics and Statistics, University of São Paulo, São Paulo, 2021.

The purpose of this Final Course Paper is to explore, in an introductory way, the Spectral Theory of Graphs. In particular, it was analyzed how the spectrum associated with the Laplacian matrix of a graph is related to other invariants of the graph and, consequently, how it can reveal information about the structure of the graph itself. The study method used was the analysis of the book "Spectral Graph Theory" by the American mathematician Fan Rong King Chung Graham. The main topics covered were: Laplacian matrix eigenvalues, isoperimetric problems, diameters, paths, flows and routing.

Keywords: Graphs. Linear Algebra. Graph spectrum.

Sumário

Capítulo 1

Introdução à Teoria Espectral de Grafos

1.1 Introdução histórica

A Teoria dos Grafos surgiu, aproximadamente, há 250 anos, quando o matemático Leonhard Euler iniciou os seus estudos em busca de uma solução para o famoso problema das Sete Pontes de Königsberg. Neste problema, questionava-se a existência de um percurso que passasse somente uma vez por cada uma das sete pontes da cidade Königsberg. Desde então, a Teoria dos Grafos evoluiu, deixando de ser apenas o estudo de redes entendidas de modo elementar, isto é, como interconexões entre os objetos.

Ao longo dos anos, os grafos têm desempenhado diversas funções em áreas teóricas do conhecimento e em atividades humanas. Entre esses grafos, destacam-se: Grafos planares, que são grafos desenhados de forma que as arestas não se cruzam no plano; grafos de intervalo, com destaque na programação; grafos simétricos (hipercubos, sólidos platônicos e grafos presentes na Teoria dos Grupos); redes de roteamento, presentes nas redes de comunicação, e grafos computacionais, utilizados na concepção de algoritmos, simulações e modelagens.

1.2 Perspectivas da Teoria Espectral de Grafos

A Teoria Espectral de Grafos é o estudo de propriedades dos grafos através da análise do espectro associado à matriz Laplaciana ou à matriz de adjacência dos grafos. Neste trabalho, optou-se pela abordagem de utilização do espectro da matriz Laplaciana associada ao grafo. Essa análise emprega, principalmente, ferramentas matemáticas herdadas da Álgebra Linear, tais como polinômio característico, autovetores e autovalores associados às matrizes. Atualmente, a Teoria Espectral de Grafos também tem forte apelo geométrico – com efeito, conceitos associados à Geometria Espectral geram resultados interessantes no estudo da Teoria Espectral de Grafos (Chung, 1997).

1.3 Aplicações na Ciência da Computação

Na Ciência da Computação, a Teoria Espectral de Grafos encontra várias aplicações. Entre tais aplicações, destacam-se (Cvetković e Simić, 2011, Arsić *et al.*, 2012):

- Balanceamento de carga e redes de interconexão de multiprocessadores;
- Bancos de dados estatísticos;
- Computação Quântica;
- Mineração de dados;
- Motores de busca na Internet;
- Otimização combinatória;
- Redes complexas e topologia da Internet;
- Teoria de Controle;
- Visão computacional e processamento de imagens.

A título de exemplo, métodos de mineração de dados (em particular, o método de agrupamento espectral de grafo) aparecem em visão computacional, redes sociais e pesquisa na Internet, enquanto problemas de otimização combinatória são relevantes para mineração de dados.

1.4 Sobre a estrutura do trabalho

O segundo capítulo é uma recapitulação de noções elementares tanto de Teoria de Grafos quanto da Álgebra Linear que são utilizadas de forma recorrente durante todo o trabalho.

O terceiro capítulo introduz as noções fundamentais da Teoria Espectral de Grafos, como matriz Laplaciana e espectro do grafo. Além disso, é no primeiro capítulo que são abordados os primeiros teoremas relacionados às cotas inferiores e superiores dos autovalores da matriz Laplaciana dos grafos.

O quarto capítulo é responsável pela abordagem dos problemas isoperimétricos. Nele, encontram-se as definições da Constante de Cheeger clássica e da Constante de Cheeger modificada. Os problemas isoperimétricos são vistos sob o ponto de vista de expansão de vértices e sob o ponto de vista de expansão de arestas.

O quinto capítulo aborda a relação entre autovalores da matriz Laplaciana do grafo e o diâmetro do grafo. É tratada a questão entre autovalores e distância entre dois subconjuntos para, em seguida, ser tratada a questão entre autovalores e distância entre mais de dois subconjuntos.

O sexto capítulo envolve os conceitos de caminho, fluxo e roteamento. A abordagem inicial do capítulo é a retomada dos conceitos de caminho e conjuntos de caminhos. Em seguida, é tratada a relação entre fluxo e Constante de Cheeger para, finalmente, serem tratadas as questões de roteamento em grafos e comparação entre autovalores.

O sétimo capítulo aborda brevemente a propriedade da discrepância e a propriedade do desvio de um grafo.

A bibliografia aborda livros de Teoria Espectral de Grafos (Chung, 1997, Brouwer e Haemers, 2012), Teoria de Grafos (Feofiloff *et al.*, 2011, Graham *et al.*, 1995), Álgebra Linear (Horn e Johnson, 2013) e aborda artigos de aplicações da Teoria Espectral de Grafos na Ciência da Computação (Arsić *et al.*, 2012, Cvetković e Simić, 2011).

Capítulo 2

Noções preliminares

2.1 Introdução

O objetivo desse capítulo inicial é a introdução de conceitos técnicos relacionados à Teoria dos Grafos que serão abordados de forma recorrente ao longo desse trabalho. Por meio dessa sistematização inicial, espera-se evitar a repetição de definições de conceitos que serão trabalhados em pontos distintos do trabalho. Tendo-se em vista que ferramentas algébricas são indispensáveis para a Teoria Espectral de Grafos, conceitos da Álgebra Linear também serão abordados nesse capítulo. As definições e teoremas utilizados nesse capítulo são baseados nos estudos encontrados em Chung, 1997, Feofiloff *et al.*, 2011 e Horn e Johnson, 2013.

2.2 Álgebra Linear

A Teoria Espectral de Grafos faz intensa utilização de ferramentas da Álgebra Linear, algumas das quais serão utilizadas de maneira recorrente durante todos os capítulos a seguir. Assim, essa seção será utilizada para definir alguns dos conceitos primordiais da Álgebra Linear que serão usados a seguir. Entre essas ferramentas, encontram-se as noções de matriz, polinômio característico, autovalor e autovetor.

2.2.1 Autovalor e autovetor

Definição 2.2.1. *Seja considerada a matriz quadrada A de ordem n. Se existem um escalar λ e um vetor $\vec{x}$ que satisfazem a igualdade $A\vec{x} = \lambda\vec{x}$, então λ é chamado de autovalor da matriz A e $\vec{x}$ é chamado de autovetor da matriz A.*

2.2.2 Espectro da matriz

Definição 2.2.2. *O espectro de uma matriz quadrada A é definido como o conjunto de autovalores λ de A.*

2.2.3 Polinômio característico

Definição 2.2.3. *O polinômio característico de uma matriz quadrada A de ordem n é o polinômio em t definido como*

$$p_A(t) = \det(tI - A).$$

O polinômio característico p_A possui grau n e a equação

$$p_A(t) = 0$$

é chamada de equação característica de A.

2.2.4 Matriz transposta

Definição 2.2.4. *Seja considerada a matriz A de ordem $m \times n$. A matriz transposta de A, denotada por A^T, é definida como a matriz de ordem $n \times m$ cujo termo localizado na linha i e na coluna j é dado por a_{ji}.*

2.2.5 Matriz conjugada

Definição 2.2.5. *Seja considerada a matriz A. A matriz conjugada de A, denotada por $\bar{A}$, é a matriz em que cada termo é obtido por meio da conjugação complexa de cada termo de A.*

2.2.6 Matriz hermitiana

Definição 2.2.6. *Define-se como matriz hermitiana toda matriz quadrada e complexa que é igual à sua transposta conjugada.*

Os dois teoremas a seguir são de vital importância para o desenvolvimento da teoria nos capítulos a diante,a saber, o Teorema de Rayleigh e o Teorema de Courant-Fischer. Eles não serão provados, apenas exibidos.

O teorema a seguir é conhecido como *Teorema de Rayleigh.*

Teorema 2.2.1. *Seja A uma matriz hermitiana de ordem n e sejam*

$$\lambda_{\min} = \lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \ldots \leq \lambda_{n-2} \leq \lambda_{n-1} = \lambda_{\max}$$

os autovalores de A arranjados em ordem não-decrescente. Sejam $i_1, \ldots, i_k$ números inteiros tais que

$$1 \leq i_1 \leq \ldots \leq i_k \leq n$$

e sejam $x_{i_1}, \ldots, x_{i_k}$ autovetores ortonormais e tais que

$$Ax_{i_p} = \lambda_{i_p} x_{i_p}$$

para cada $p \in \{1, ..., k\}$. Finalmente, seja $S = span\{x_{i_1}, ..., x_{i_k}\}$. Então, é verdade que:

$$\lambda_{i_1} = \min_{\{x\,:\,0\neq x\in S\}} \frac{\langle x, Ax\rangle}{\langle x, x\rangle} = \min_{\{x\,:\,x\in S, \|x\|=1\}} \langle x, Ax\rangle \leq \max_{\{x\,:\,x\in S, \|x\|=1\}} \max\langle x, Ax\rangle = \max_{\{x\,:\,0\neq x\in S\}} \frac{\langle x, Ax\rangle}{\langle x, x\rangle} = \lambda_{i_k}.$$

Ou seja, para todo vetor unitário $x \in S$, tem-se que

$$\lambda_{\min} \leq \langle x, Ax\rangle \leq \lambda_{\max}.$$

Já o teorema a seguir é conhecido como *Teorema de Courant-Fischer.*

Teorema 2.2.2. *Seja A uma matriz hermitiana de ordem n cujos autovalores são*

$$\lambda_1 \leq ... \leq \lambda_n.$$

Seja considerado $k \in \{1, ..., n\}$ e seja considerado o subespaço S de $\mathbb{C}^n$. Então,

$$\lambda_k = \min_{\{S\,:\,\dim S = k\}} \max_{\{x\,:\,0\neq x\in S\}} \frac{\langle x, Ax\rangle}{\langle x, x\rangle}.$$

Por outro lado,

$$\lambda_k = \max_{\{S\,:\,\dim S = n-k+1\}} \min_{\{x\,:\,0\neq x\in S\}} \frac{\langle x, Ax\rangle}{\langle x, x\rangle}.$$

2.3 Teoria de Grafos: definições básicas

A seguir, encontram-se as definições primordiais que envolvem a ideia de *grafo.*

Definição 2.3.1. *Dado um conjunto arbitrário V, a notação $V^{(2)}$ denota o conjunto formado por todos os pares não-ordenados de elementos de V. Em outras palavras, os elementos de $V^{(2)}$ são os conjuntos de cardinalidade igual a 2. Consequentemente, todo elemento de $V^{(2)}$ é da forma $\{u, v\}$, sendo $u, v \in V$ tais que $u \neq v$.*

Definição 2.3.2. *Seja V um conjunto arbitrário. Por grafo, entende-se um par da forma (V, A), sendo $A \subset V^{(2)}$. Todo elemento do conjunto V é chamado de vértice do grafo e todo elemento do conjunto A é chamado de aresta do grafo.*

Seja considerada a aresta arbitrária $\{u, v\} \in A$. A aresta $\{u, v\}$ *incide* em u e em v e os vértices $u, v \in V$, nesse caso, são *adjacentes.*

Se um grafo (V, A) é denominado G, então é conveniente denotar o conjunto de vértices do grafo G por $V(G)$ e o conjunto de arestas do grafo G por $A(G)$. No entanto, quando não há ambiguidade, denota-se o conjunto de vértices e o conjunto de arestas do grafo G simplesmente por V e A respectivamente. Similarmente, a quantidade de vértices e a quantidade de arestas de G é denotada por $n(G)$ e $m(G)$ respectivamente; quando não ambiguidade, esses conjuntos são representados, respectivamente, pelos símbolos n e m.

Definição 2.3.3. *Seja considerado o grafo $G = (V, A)$. O complemento do grafo G é o grafo*

$(V, V^{(2)} \setminus A)$, *denotado por* $\bar{G}$.

Definição 2.3.4. *Seja considerado o grafo* $G = (V, A)$. G *é um grafo completo se e somente se* $A = V^{(2)}$.

Definição 2.3.5. *Seja considerado o grafo* $G = (V, A)$. G *é um grafo vazio se e somente se* $A = \emptyset$.

2.3.1 Vizinhança

Os termos técnicos dessa seção englobam, principalmente, a noção de vértice. Em particular, deve-se ressaltar que a noção de *grau* aqui definida será de grande importante nos capítulos a seguir, pois será aplicado em definições de matrizes importantes para a Teoria Espectral de Grafos.

Definição 2.3.6. *Dado o grafo* $G = (V, A)$, *seja considerado o conjunto* $X \subset V$. *Por vizinhança de* X, *entende-se o conjunto de todos os vértices que são adjacentes a algum vértice contido em* X. *A vizinhança de* X *é denotada por* $\Gamma_G(X)$.

Definição 2.3.7. *Dado o grafo* $G = (V, A)$, *seja considerado o conjunto* $X \subset V$. *Por corte associado ao conjunto* X, *entende-se o conjunto de arestas que possui um dos vértices contido em* X *e o outro vértice contido em* $V \setminus X$.

Definição 2.3.8. *Dado o grafo* $G = (V, A)$, *seja considerado* $v \in V$. *O grau do vértice* v *é definido como o número de arestas incidentes em* v.

Definição 2.3.9. *Diz que o grafo* $G = (V, A)$ *é regular se e somente se todos os vértices possuem grau idêntico.*

2.3.2 Caminho

Definição 2.3.10. *Por caminho, entende-se um grafo* $(\{v_1, ..., v_n\}, \{\{v_i, v_{i+1}\} : 1 \leq i < n\})$. *Os vértices* v_1 *e* v_n *são chamados de extremos do caminho.*

Definição 2.3.11. *O comprimento de um caminho é definido como o número de arestas presente no grafo.*

2.3.3 Circuito

A seguir, são dadas as principais definições relacionadas ao conceito de *circuito*.

Definição 2.3.12. *Por circuito, entende-se um grafo* $(\{v_1, ..., v_n\}, \{\{v_i, v_{i+1}\} : 1 \leq i < n\} \cup \{v_n, v_1\})$ *dado que* $3 \leq n$.

Definição 2.3.13. *O comprimento de um circuito é definido como o número de arestas presente no grafo.*

2.3.4 Subgrafo

Definição 2.3.14. *Sejam considerados os grafos* $G = (V(G), A(G))$ *e* $H = (V(H), A(H))$. H *é subgrafo de* G *se e somente se* $V(H) \subset V(G)$ *e* $A(H) \subset A(G)$.

2.3.5 Grafo conexo

Definição 2.3.15. *Seja considerado o grafo $G = (V, A)$. Diz-se que G é um grafo conexo se e somente se, para todos $u, v \in V$, existe um caminho cujos extremos são u e v.*

2.3.6 Grafo bipartido

Definição 2.3.16. *Por grafo bipartido, entende-se um grafo cujo conjunto de vértices pode ser decomposto em dois conjuntos disjuntos U e V de tal modo que toda aresta conecta um vértice de U a um vértice de V.*

2.3.7 Grafo regular

Definição 2.3.17. *Por grafo regular, entende-se um grafo em que todos os vértices possuem grau com valor idêntico.*

2.4 Noções mescladas

Uma das principais noções que envolve tanto Álgebra Linear quanto Teoria de Grafos é a noção de *matriz de adjacência.*

2.4.1 Matriz de adjacência

Definição 2.4.1. *Seja considerado o grafo $G = (V, A)$ tal que $|V| = n$. A matriz de adjacência M do grafo G é a matriz quadrada de ordem n tal que*

$$M(u, v) = \begin{cases} 1 & \textit{se } u, v \textit{ são adjacentes} \\ 0 & \textit{caso contrário.} \end{cases}$$

Capítulo 3

Autovalores e Matriz Laplaciana

3.1 Introdução

O propósito da Teoria Espectral de Grafos é a obtenção de propriedades dos grafos por meio da análise do espectro associado ao grafo, isto é, do conjunto de autovalores da matriz Laplaciana do grafo, que será definida neste capítulo. Conforme será demonstrado posteriormente, esses autovalores estão relacionados a outras invariantes dos grafos. As definições, teoremas e demonstrações utilizados nesse capítulo são baseados nos estudos encontrados em Chung, 1997 (Capítulo 1).

3.2 A matriz Laplaciana

Seja considerado o grafo $G = (V, A)$ tal que G é um grafo simples, ou seja, G não possui laços nem arestas múltiplas. Para cada $v \in V$, d_v denota o grau do vértice v (d do inglês $degree$). Sem perda de generalidade, assume-se que $|V| = n$ para algum $n \in \mathbb{N}$.

A *matriz Laplaciana* do grafo G é a matriz quadrada de ordem n cujos termos são definidos da seguinte forma:

$$L(u, v) = \begin{cases} d_v & \text{se } u = v \\ -1 & \text{se } u, v \text{ são vértices adjacentes} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Ademais, seja considerada a matriz quadrada de ordem n denominada $\mathcal{L}$ cujos termos são definidos como

$$\mathcal{L}(u, v) = \begin{cases} 1 & \text{se } u = v \text{ e } d_v \neq 0 \\ \frac{-1}{\sqrt{d_u d_v}} & \text{se } u, v \text{ são vértices adjacentes} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}.$$

A matriz $\mathcal{L}$ é chamada de matriz *Laplaciana simétrica normalizada.*

Seja considerada também a matriz diagonal de ordem n denominada D e definida como

$$D(u, v) = \begin{cases} d_v & \text{se } u = v \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Convencionando-se que $D^{-1}(u, u) = 0$ caso $d_u = 0$, observa-se que as matrizes $\mathcal{L}$, L e D podem ser relacionadas por meio da seguinte igualdade:

$$\mathcal{L} = D^{-1/2} L D^{-1/2}.$$

3.3 Espectro da matriz Laplaciana

A matriz Laplaciana $\mathcal{L}$ é simétrica, portanto hermitiana, o que significa que a matriz $\mathcal{L}$ possui n autovalores reais e não-negativos. De acordo com o Teorema de Rayleigh e com o Teorema de Courant-Fischer, os autovalores de $\mathcal{L}$ podem ser caracterizados através do quociente de Rayleigh. Com efeito, seja $g : V \longrightarrow \mathbb{R}$ uma função arbitrária. O quociente de Rayleigh, por definição, é

$$\frac{\langle g, \mathcal{L} g \rangle}{\langle g, g \rangle}.$$

Sabe-se que $\mathcal{L} = D^{-1/2} L D^{-1/2}$. Tomandos-se $g = D^{1/2} f$, observa-se que

$$\frac{\langle g, \mathcal{L} g \rangle}{\langle g, g \rangle} = \frac{\langle D^{1/2} f, D^{-1/2} L D^{-1/2} D^{1/2} f \rangle}{\langle D^{1/2} f, D^{1/2} f \rangle} = \frac{\langle D^{1/2} f, D^{-1/2} L f \rangle}{\langle D^{1/2} f, D^{1/2} f \rangle} = \frac{\langle f, L f \rangle}{\langle D^{1/2} f, D^{1/2} f \rangle},$$

ou seja,

$$\frac{\langle g, \mathcal{L} g \rangle}{\langle g, g \rangle} = \frac{\sum\limits_{u \sim v} [f(u) - f(v)]^2}{\sum\limits_{v} [f(v)]^2 d_v},$$

sendo $\sum\limits_{u \sim v}$ o somatório sobre os vértices adjacentes u, v.

Como os autovalores da matriz Laplaciana são números reais não-negativos, eles podem ser arranjados em ordem não-decrescente. Sem perda de generalidade, eles serão denotados por λ_i, $i \in \{0, ..., n-1\}$, e ordenados da seguinte forma:

$$\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq ... \leq \lambda_{n-1}.$$

O conjunto $\{\lambda_0, \lambda_1, ..., \lambda_{n-1}\}$ é denominado *espectro* de $\mathcal{L}$ ou *espectro associado ao grafo G*.

Seja $\overrightarrow{1}$ a função que associa o valor 1 para cada vértice. Segue-se que $D^{1/2}\overrightarrow{1}$ é uma autofunção de $\mathcal{L}$ com autovalor 0. Ademais,

$$\lambda_1 = \inf_{f \perp D\vec{1}} \frac{\sum\limits_{u \sim v} [f(u) - f(v)]^2}{\sum\limits_{v} f(v)^2 d_v}.$$

A autofunção, nesse caso, é $g = D^{1/2}f$, e f é chamada de *autofunção harmônica* de $\mathcal{L}$.

Todos os autovalores de $\mathcal{L}$ podem ser caracterizados por meio do quociente de Rayleigh de acordo com o Teorema de Courant-Fischer. De fato, para todo $i \in \{0, ..., n-1\}$, tem-se que

$$\lambda_i = \inf_f \sup_{g \in P_{i-1}} \frac{\sum\limits_{u \sim v} [f(u) - f(v)]^2}{\sum\limits_{v} [f(v) - g(v)]^2 d_v},$$

sendo P_i o subespaço gerado pelas autofunções ϕ_i correspondentes a cada λ_i.

3.4 Propriedades espectrais

As propriedades espectrais se referem, sobretudo, às atribuições de cotas inferiores e superiores ao espectro do grafo. Os teoremas aqui apresentados mostrarão algumas destes cotas.

Teorema 3.4.1. *Seja considerado o grafo $G = (V, A)$ tal que $|V| = n$ para algum $n \in \mathbb{N}$. As afirmações a seguir são verdadeiras:*

(i) $\sum\limits_{i=0}^{n-1} \lambda_i \leq n$ *e a igualdade é válida se e somente se G não possui vértices isolados.*

(ii) Para $n \geq 2$, $\lambda_1 \leq \frac{n}{n-1}$ e a igualdade é válida se e somente se G é um grafo completo em n vértices. Além disso, $\lambda_{n-1} \geq \frac{n}{n-1}$ se G é um grafo sem vértices isolados.

(iii) $\lambda_1 \leq 1$ se G não é um grafo completo.

(iv) Se G é um grafo conexo então $\lambda_1 > 0$. Se $\lambda_i = 0$ e $\lambda_{i+1} \neq 0$ então G possui exatamente $i + 1$ componentes conectados.

(v) $\lambda_i \leq 2$ para todo i.

(vi) O espectro do grafo é a união dos espectros dos seus componentes.

Demonstração. (i) Esta afirmação segue observando o valor do traço de $\mathcal{L}$.

(ii) Esta afirmação segue da afirmação em (i) e do fato que $\lambda_0 = 0$.

(iii) Seja G um grafo não-completo. Existem, pelo menos, dois vértices não-adjacentes. Sem perda de generalidade, esses vértices serão denominados a e b. Seja considerada também a função f definida como

$$f_1(v) = \begin{cases} d_b & \text{se } v = a \\ -d_a & \text{se } v = b \\ 0 & \text{se } v \neq a, b. \end{cases}$$

Considerando que a expressão de λ_1 é dada por $\lambda_1 = \inf_{f \perp T\vec{1}} \frac{\sum_{u \sim v} [f(u)-f(v)]^2}{\sum_v f(v)^2 d_v}$, conclui-se que $\lambda_1 \leq 1$.

(iv) Seja G um grafo conexo. Então, o autovalor 0 possui multiplicidade 1 porque qualquer autofunção harmômica com autovalor 0 tem o mesmo valor em cada vértice. Portanto, esta afirmação segue devido ao fato de que a união de dois grafos disjuntos possui, como espectro, a união dos espectros dos grafos que deram origem a ele.

(v) Para $n-1$, tem-se que $\lambda_{n-1} = \sup_f \frac{\sum_{u \sim v} [f(u)-f(v)]^2}{\sum_v [f(v)]^2 d_v}$. É claro que $\big(f(u)-f(v)\big)^2 \leq 2\big(f^2(u)+f^2(v)\big)$. Consequentemente,

$$\lambda_i \leq \sup_f \frac{\sum_{x \sim y}(f(x) - f(y))^2}{\sum_x (f(x))^2 d_x} \leq 2.$$

A igualdade é possível no caso $i = n - 1$, quando $f(x) = -f(y)$ para toda aresta $\{x, y\}$. Tendo-se em vista que $f \neq 0$, G possui um componente bipartido conexo. Logo, fato de G possuir um componente compnente conexo bipartido significa que é possível escolher uma função f de forma que $\lambda_{n-1} = 2$.

(vi) Esta afirmação segue imediatamente da definição. □

Conforme será demonstrado no teorema a seguir, também existem resultados para grafos bipartidos.

Teorema 3.4.2. *Seja considerado o grafo $G = (V, A)$. As seguintes afirmações são equivalentes:*

(i) G é um grafo bipartido.

(ii) G possui $i + 1$ componentes conectados. Ademais, $\lambda_{n-j} = 2$ para todo $1 \leq j \leq i$.

(iii) Para cada autovalor λ_i, tem-se que $2 - \lambda_i$ também é um autovalor do grafo G.

Demonstração. Para efeitos de demonstração, é suficiente assumir que G é um grafo conexo. Conforme o enunciado do teorema, assume-se, claramente, que G é um grafo bipartido. Sem perda de generalidade, sejam A e B os conjuntos de vértices disjuntos do grafo G. Para uma autofunção harmônica e arbitrária f, seja considerada a função g definida como

$$g(x) = \begin{cases} f(x) & \text{se } x \in A \\ -f(x) & \text{se } x \in B \end{cases}$$

Segue-se que g é uma autofunção harmônica com autovalor $2 - \lambda$. □

Para grafos conexos, é possível obter mais uma aproximação para λ_1. Essa aproximação, por sua vez, depende da noção de diâmetro e de volume de um grafo. Sejam u e v vértices quaisquer do grafo $G = (V, A)$. A distância entre u e v é a quantidade de arestas no menor caminho entre esses dois vértices. Por diâmetro de G, entende-se a maior distância entre quaisquer dois vértices do grafo G. Finalmente, o volume do grafo G é denotado por $\operatorname{vol} G$ e definido como $\operatorname{vol} G = \sum\limits_v d_v$; em outras palavras, o voume do grafo G é a soma dos graus de todos os vértices de G.

Teorema 3.4.3. *Seja considerado o grafo $G = (V, A)$ cujo diâmetro corresponde ao valor D. Segue-se que $\frac{1}{D \operatorname{vol} G} \leq \lambda_1$.*

Demonstração. Seja considerada a autofunção harmônica f tal que $\lambda_1 = \inf\limits_{f \perp D\vec{1}} \frac{\sum_{u \sim v} [f(u) - f(v)]^2}{\sum_v f(v)^2 d_v}$. Seja considerado também o vértice v_0 tal que $|f(v_0)| = \max\limits_v |f(v)|$. Como $\sum\limits_v f(v) = 0$, existe um vértice u_0 tal que $f(u_0)f(v_0) < 0$. Se P é o menor caminho em G que une os vértices u_0 e v_0, então, com auxílio da Desigualdade de Cauchy-Schwarz, observa-se que

$$\lambda_1 = \frac{\sum\limits_{u \sim v} [f(u) - f(v)]^2}{\sum\limits_u [f(u)]^2 d_u} \geq \frac{\sum\limits_{\{u,v\} \in P} [f(u) - f(v)]^2}{\operatorname{vol} G [f(v_0)]^2} \geq \frac{[f(v_0) - f(u_0)]^2}{D \operatorname{vol} G [f(v_0)]^2} \geq \frac{1}{D \operatorname{vol} G},$$

ou seja, $\lambda_1 \geq \frac{1}{D \operatorname{vol} G}$. □

Os três teoremas demonstrados anteriormente formam uma ínfima amostra de relações básicas que podem ser obtidas entre os autovalores da matriz Laplaciana de um grafo e outras propriedades do grafo, como volume e caminho mínimo. Sobretudo, as demonstrações destes teoremas fazem uso de ferramentas oriundas da Álgebra Linear, como Desigualdade de Cauchy-Schwarz e os teoremas relacionados à caracterização variacional dos autovalores de uma matriz hermitiana (Rayleigh e Courant-Fischer), o que ilustra a relação estreita existente entre a Álgebra Linear e a Teoria Espectral de Grafos.

3.5 Grafos ponderados

Quando grafos ponderados são analisados sob a perspectiva espectral até então desenvolvida, algumas adaptações devem ser feitas. O peso de um grafo não-direcionado $G = (V, A)$ é uma função $w : V \times V \longrightarrow \mathbb{R}$ tal que $w(u, v) = w(v, u)$ e $w(u, v) \geq 0$ para quaisquer vértices $u, v \in V$. Convenciona-se que $w(u, v) = 0$ caso $\{u, v\}$ não pertença ao conjunto A. Imediatamente, observa-se que grafos não-ponderados, isto é, grafos que não possuem peso, podem ser tratados como um caso especial de grafos ponderados ao se considerar a função w que atribui pesos 0 ou 1 para as arestas do grafo.

A primeira diferença que é observada nos grafos ponderados em contraste aos grafos não-ponderados é a definição de grau de vértice. De fato, se $G = (V, A)$ é um grafo ponderado e $v \in V$, então o grau do vértice v é definido como

$$d_v = \sum_u w(u, v).$$

Esta alteração impacta diretamente a definição de matriz laplaciada do grafo G. Assumindo-se, sem perda de generalidade, que $|V| = n$ para algum $n \in \mathbb{N}$, então a matriz Laplaciana normalizada de G passa a ser a matriz quadrada de ordem n definida da seguinte forma:

$$\mathcal{L}(u, v) = \begin{cases} 1 - \frac{w(u,v)}{d_v} & \text{se } u = v \text{ e } d_v \neq 0 \\ \frac{-w(u,v)}{\sqrt{d_u d_v}} & \text{se } u, v \text{ são vértices adjacentes} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Analogamente, a matriz L é também é alterada e passa a ser a matriz quadrada de ordem n cujos termos são definidos como

$$L(u, v) = \begin{cases} d_v - w(u, v) & \text{se } u = v \\ -w(u, v) & \text{se } u, v \text{ são vértices adjacentes} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Finalmente, para completar a analogia, a matriz D é a matriz diagonal de ordem n cujos termos são definidos como

$$D(u, v) = \begin{cases} d_v & \text{se } u = v \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

A matriz Laplaciana $\mathcal{L}$ ainda pode ser obtida através da relação

$$\mathcal{L} = D^{-1/2} L D^{-1/2}.$$

Em relação aos autovalores de $\mathcal{L}$, a caracterização variacional expressa por meio de quocientes de Rayleigh continua válida. Em particular, de modo simplificado, é possível expressar

$$\lambda_1 = \inf_{g \perp D^{1/2}\vec{1}} \frac{\langle g, \mathcal{L} g \rangle}{\langle g, g \rangle}.$$

Genericamente, para todo $i \in \{0, 1, ..., n-1\}$, tem-se que

$$\lambda_i = \inf_f \sup_{g \in P_{i-1}} \frac{\sum_{u \sim v} [f(u) - f(v)]^2}{\sum_v [f(v) - g(v)]^2 d_v}.$$

Capítulo 4

Isoperimetria em Grafos

4.1 Introdução

O problema isoperimétrico para grafos envolve a remoção mínima de elementos de um grafo de modo a obter um subconjunto de vértices de determinada medida. Esta ideia de remoção dá origem ao conceito de corte.

Para efeitos de estudo, há dois tipos de corte que devem ser considerados: corte de vértice e corte de aresta. *Por corte de vértice*, entende-se um subconjunto de vértices cuja remoção desconecta o grafo. Já *por corte de aresta*, entende-se um subconjunto de arestas cuja remoção separa o grafo. As definições, teoremas e demonstrações utilizados nesse capítulo são baseados nos estudos encontrados em Chung, 1997 (Capítulo 2).

4.2 Constantes de Cheeger

Antes da análise e das definições das constantes de Cheeger, alguns conceitos básicos devem ser abordados.

Dado o grafo $G = (V, A)$, seja $S \subset V$, isto é, seja S um subconjunto de vértices do grafo G. O volume de S é denotado por $\operatorname{vol} S$ e é definido como

$$\operatorname{vol} S = \sum_{x \in S} d_x.$$

Em outras palavras, o volume de S é a soma dos graus dos vértices que pertencem a S.

O *fronteira de arestas* de S é o conjunto denotado por ∂S e definido como

$$\partial S = \{\{u, v\} \in A : u \in S, v \notin S\}.$$

Seja $\bar{S}$ o complemento em V do conjunto S, ou seja, $\bar{S} = V - S$. Segue-se que

$$\partial \bar{S} = \{\{u, v\} \in A : u \in \bar{S}, v \notin \bar{S}\},$$

ou seja,

$$\partial \bar{S} = \{\{v, u\} \in A \, : \, v \in S, u \notin S\}.$$

Portanto, $\partial S = \partial \bar{S}$.

Por $E(S, \bar{S})$, denomina-se o conjunto de arestas que possui um vértice em S e o outro vértice em $\bar{S}$.

O *fronteira de vértices* de S é o conjunto denotado por δS e definido como

$$\delta S = \{v \notin S \, : \, \{u, v\} \in A, u \in S\}.$$

A partir das definições anteriores, é possível definir as constantes de Cheeger.

Seja

$$h_G(S) = \frac{|E(S, \bar{S})|}{min\{\operatorname{vol} S, \operatorname{vol} \bar{S}\}}.$$

A constante de Cheeger do grafo G é definida como

$$h_G = \min_S h_G(S).$$

A seguir, será introduzida a *constante de Cheeger modificada.* Seja

$$g_G(S) = \frac{\operatorname{vol} \delta(S)}{min\{\operatorname{vol} S, \operatorname{vol} \bar{S}\}}.$$

A constante de Cheeger modificada do grafo G é

$$g_G = \min_S g_G(S).$$

4.3 Expansão de arestas de um grafo

Esta parte é dedicada às relações entre os autovalores da matriz Laplaciana associada ao grafo e a constante de Cheeger h_G (não-modificada). Aqui, já é possível salientar a importância do espectro no grafo uma vez que o espectro é associado a diversos invariantes importantes.

Teorema 4.3.1. *Para qualquer grafo $G = (V, A)$, tem-se que $\lambda_1 \leq 2h_G$.*

Demonstração. Seja C um corte de aresta que satisfaz h_G e que divide o grafo em duas partes; sem perda de generalidade, essas partes serão denotadas por A e B. Seja $f \, : \, V \longrightarrow \mathbb{R}$ a função definida como

$$f(v) = \begin{cases} \frac{1}{\operatorname{vol} A} & \text{se } v \in A \\ \frac{-1}{\operatorname{vol} B} & \text{se } v \in B \end{cases}.$$

Conforme visto anteriormente, a expressão do autovalor λ_1 corresponde à expressão

$$\lambda_1 = \inf_{f \perp T\overrightarrow{1}} \frac{\sum\limits_{u \sim v} [f(u) - f(v)]^2}{\sum\limits_{v} [f(v)]^2 d_v}.$$

Substituindo-se f na expressão de λ_1, obtém-se

$$\lambda_1 \leq \frac{|C|(\operatorname{vol} A + \operatorname{vol} B)}{\operatorname{vol} A \operatorname{vol} B} \leq \frac{2|C|}{\min\{\operatorname{vol} A, \operatorname{vol} B\}} = 2h_G,$$

ou seja, $\lambda_1 \leq 2h_G$. □

O teorema apresentado a seguir mostra uma desigualdade, assim como o teorema anterior, envolve λ_1 e h_G. Todavia, a desigualdade do próximo teorema é oposta à desigualdade do Teorema 4.3.1.

Teorema 4.3.2. *Seja considerado o grafo conexo G. Segue-se que* $\lambda_1 > \frac{h_G^2}{2}$.

Demonstração. Dado o grafo conexo $G = (V, A)$, seja f a autofunção harmônica de $\mathcal{L}$ com autovalor λ_1. Os vértices do grafo G são arranjados de modo que $f(v_i) \leq f(v_{i+1})$ para todo $i \in \{1, ..., n-1\}$. É possível assumir, genericamente, que

$$\sum_{f(u) \geq 0} d_u \leq \sum_{f(v) < 0} d_v.$$

Para todo $i \in \{1, ..., |V|\}$, seja considerado o corte C_i definido como

$$C_i = \Big\{ \{v_j, v_k\} \in A \, : \, 1 \leq j \leq i \leq k \leq n \Big\}.$$

Define-se α como

$$\alpha = \min_{1 \leq i \leq n} \frac{|C_i|}{\min\{\sum\limits_{j \leq i} d_j, \sum\limits_{j > i} d_j\}}.$$

Conforme a definição de h_G, deduz-se que $h_G \leq \alpha$.

A seguir, seja considerado o subconjunto de V denotado V_+ que contém todos os vértices de G tais que $0 \leq f(v)$. Seja considerado também o subconjunto de $E(G)$ denotado por E_+ que contém as arestas $\{u, v\}$ de G tais que ou u ou v pertence ao conjunto V_+.

Seja considerada a função g definida como

$$g(x) = \begin{cases} f(x) & \text{se } u \in V_+ \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}.$$

As implicações a seguir são verdadeiras:

$$
\begin{aligned}
\lambda_1 &= \frac{\sum\limits_{v \in V_+} f(v) \sum\limits_{\{u,v\} \in E_+} (f(u) - f(v))}{\sum\limits_{v \in V_+} f(v)^2 d_v} \implies \\
&> \frac{\sum\limits_{\{u,v\} \in E_+} (g(u) - g(v))^2}{\sum\limits_{v \in V} g(v)^2 d_v} \implies \\
&= \frac{\sum\limits_{\{u,v\} \in E_+} (g(u) - g(v))^2 \sum\limits_{\{u,v\} \in E_+} (g(u) + g(v))^2}{\sum\limits_{v \in V} g(v)^2 d_v \sum\limits_{\{u,v\} \in E_+} (g(u) + g(v))^2} \implies \\
&\geq \frac{(\sum\limits_{u \sim v} |g(u)^2 - g(v)^2|)^2}{2(\sum\limits_{v} g(v)^2 d_v)^2} \implies \\
&\geq \frac{(\sum\limits_{i} |g(v_i)^2 - g(v_{i+1})^2||C_i|)^2}{2(\sum\limits_{v} g(v)^2 d_v)^2} \implies \\
&\geq \frac{(\sum\limits_{i} (g(v_i) - g(v_{i+1})^2) \alpha \sum\limits_{j \leq i} d_j)^2}{2(\sum\limits_{v} g(v)^2 d_v)^2} \implies \\
&\geq \frac{\alpha^2}{2} \implies \\
&\geq \frac{h_G^2}{2}.
\end{aligned}
$$

Conclui-se que

$$\lambda_1 > \frac{h_G^2}{2}.$$

□

De acordo com o Teorema 4.3.1, tem-se que $\lambda_1 \leq 2h_G$. Já o Teorema 4.3.2 garante que $\lambda_1 > \frac{h_G^2}{2}$. Consequentemente, é possível afirmar que

$$\tfrac{h_G^2}{2} < \lambda_1 \leq 2h_G,$$

o que é conhecido como *Desigualdade de Cheeger.*

Observação 4.3.3. *A Constante de Cheeger modificada g_G também está associada a cotas superiores e inferiores. No entanto, um breve exame à literatura existente a respeito de Teoria Espectral de Grafos é suficiente para demonstrar que as demonstrações envolvendo a expansão de arestas de um grafo são mais complexas do que as demonstrações que envolvem a Constante de Cheeger não-modificada, isto é, a constante associada à expansão de arestas de um grafo, e os limitantes inferiores e superiores.*

De todo modo, é possível identificar uma relação envolvendo cotas e a Constante de

Cheeger modificada g_G *a partir das considerações feitas na seção anterior. Com efeito, as definições de* h_G *e* g_G *mostram que*

$$g_G \geq h_G,$$

o que significa que

$$2g_G \geq 2h_G.$$

Além disso, o Teorema 4.3.1 prova que

$$2h_G \geq \lambda_1.$$

Portanto, é verdade que

$$2g_G \geq \lambda_1.$$

Capítulo 5

Diâmetros de grafos

5.1 Introdução

Seja considerado o grafo $G = (V, A)$. Define-se a *distância entre os vértices* $u, v \in V$ como o comprimento do menor caminho no grafo G que une u e v; esta distância é denotada por $d(u, v)$. *O diâmetro do grafo* G é definido como a distância máxima entre todos os pares de vértices existentes no grafo G; o diâmetro de G é denotado por $D(G)$. Neste capítulo, será provada a relação entre diâmetro e autovalores de um grafo. As definições, teoremas e demonstrações utilizados nesse capítulo são baseados nos estudos encontrados em Chung, 1997 (Capítulo 3).

Sem perda de generalidade, seja suposto que $|V| = n$ para algum $n \in \mathbb{N}$. Seja considerada a matriz quadrada M de ordem n cujas linhas e colunas são indexadas, respectivamente, pelos vértices do grafo G. Aqui, assume-se que $M(u, v) = 0$ se u e v não são adjacentes. Assume-se também que existem um número inteiro t e um polinômio $p_t(x)$ de grau t tais que $p_t M(u, v) \neq 0$ para quaisquer $u, v \in V$. A partir dessas hipóteses, é possível deduzir que $D(G) \leq t$.

5.2 O problema da distância entre dois subconjuntos

O desenvolvimento das ideias desse capítulo depende da noção de distância entre dois subconjuntos de vértices de um grafo. Dado o grafo $G = (V, A)$, sejam considerados os subconjuntos $X, Y \subset V$. *A distância entre os conjuntos* X e Y, denotada por $d(X, Y)$, é definida como

$$d(X, Y) = \min\{d(x, y) \ : \ x \in X, y \in Y\};$$

em outras palavras, a distância entre X e Y é definida como a distância mínima entre um vértice de X e um vértice de Y.

Além disso, esse capítulo requer a introdução da notação $\bar{X}$, que indica o complemento de X em relação ao conjunto V.

Seguindo a proposta adotada pelos capítulos anteriores de estabelecer relações entre autovalores e grandezas importantes associadas aos grafos, o teorema a seguir estabelece uma relação de desigualdade entre a distância de dois conjuntos e autovalores da matriz Laplaciana associada ao grafo.

Teorema 5.2.1. *Seja $G = (V, A)$ um grafo não-completo. Então,*

$$d(X,Y) \leq \left\lceil \frac{\log \sqrt{\frac{\operatorname{vol}\bar{X} \operatorname{vol}\bar{Y}}{\operatorname{vol}X \operatorname{vol}Y}}}{\log \frac{\lambda_{n-1}+\lambda_1}{\lambda_{n-1}-\lambda_1}} \right\rceil$$

dado que $X, Y \subset V$.

Demonstração. Dado o conjunto $X \subset V$, seja considerada a função $\psi \longrightarrow \mathbb{R}$ definida como

$$\psi_X(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \in X \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Espera-se estabelecer a desigualdade

$$\langle T^{1/2}\psi_Y, p_t(\mathcal{L})(T^{1/2}\psi_X)\rangle > 0$$

para algum número inteiro t e para algum polinômio p_t de grau t. Esta desigualdade implica, necessariamente, a existência de um caminho que une um vértice de X a um vértice de Y e cujo tamanho máximo é t . Logo, $d(X, Y) \leq t$. É possível escrever $T^{1/2}\psi_X$ da seguinte forma:

$$T^{1/2}\psi_X = \sum_{i=0}^{n-1} a_i\phi_i,$$

sendo que $\{\phi_i\}_{i=0}^{n-1}$ é uma base ortonormal de autofunções de $\mathcal{L}$ para cada i. Além disso,

$$a_0 = \frac{\operatorname{vol} X}{\sqrt{\operatorname{vol} G}} = \frac{\langle T^{1/2}\psi_X, T^{1/2}\vec{1}\rangle}{\langle T^{1/2}\vec{1}, T^{1/2}\vec{1}\rangle}.$$

Analogamente, é possível escrever $T^{1/2}\psi_Y$ da seguinte forma:

$$T^{1/2}\psi_Y = \sum_{i=0}^{n-1} b_i\phi_i.$$

Sem perda de generalidade, seja adotado o polinômio

$$p_t(z) = (1 - \frac{2z}{\lambda_1 + \lambda_{n-1}})^t.$$

O fato de G não ser um grafo completo significa que $\lambda_{n-1} \neq \lambda_1$ e, denotando-se $\lambda = \frac{2\lambda_1}{\lambda_1+\lambda_{n-1}}$, observa-se que

$$|p_t(\lambda_i)| \leq (1-\lambda)^t$$

para todo $i \in \{1, ..., n-1\}$. Consequentemente, as implicações a seguir são verdadeiras:

$$\langle T^{1/2}\psi_Y, p_t(\mathcal{L})(T^{1/2}\psi_X)\rangle = a_0 b_0 + \sum_{i>0} p_t(\lambda_i) a_i b_i \implies$$

$$\langle T^{1/2}\psi_Y, p_t(\mathcal{L})(T^{1/2}\psi_X)\rangle \geq a_0 b_0 - (1-\lambda)^t \sqrt{\sum_{i>0} a_i^2 \sum_{i>0} b_i^2} \implies$$

$$\langle T^{1/2}\psi_Y, p_t(\mathcal{L})(T^{1/2}\psi_X)\rangle \geq \frac{\operatorname{vol} X \operatorname{vol} Y}{\operatorname{vol} G} - (1-\lambda)^t \frac{\sqrt{\operatorname{vol} X \operatorname{vol} \bar{X} \operatorname{vol} Y \operatorname{vol} \bar{Y}}}{\operatorname{vol} G}.$$

Portanto,

$$\langle T^{1/2}\psi_Y, p_t(\mathcal{L})(T^{1/2}\psi_X)\rangle > \frac{\operatorname{vol} X \operatorname{vol} Y}{\operatorname{vol} G} - (1-\lambda)^t \frac{\sqrt{\operatorname{vol} X \operatorname{vol} \bar{X} \operatorname{vol} Y \operatorname{vol} \bar{Y}}}{\operatorname{vol} G}.$$

Ademais, observa-se que

$$\sum_{i>0} a_i^2 = ||T^{1/2}\psi_X||^2 - \frac{(\operatorname{vol} X)^2}{\operatorname{vol} G} = \frac{\operatorname{vol} X \operatorname{vol} \bar{X}}{\operatorname{vol} G}.$$

Tomando-se

$$t \leq \frac{\log \sqrt{\frac{\operatorname{vol} \bar{X} \operatorname{vol} \bar{Y}}{\operatorname{vol} X \operatorname{vol} Y}}}{\log \frac{1}{1-\lambda}},$$

observa-se que $\langle T^{1/2}\psi_Y, p_t(\mathcal{L})(T^{1/2}\psi_X)\rangle > 0$. Portanto, a demonstração está completo, pois a desigualdade anterior implica $d(X, Y) \leq t$. □

Imediatamente, observa-se que se G é um grafo regular e não-completo, então a desigualdade do Teorema 5.2.1 implica que o diâmetro de G possui a seguinte relação de desigualdade com os autovalores laplacianos:

$$D(G) \leq \left\lceil \frac{\log(n-1)}{\log \frac{\lambda_1 + \lambda_{n-1}}{\lambda_{n-1} - \lambda_1}} \right\rceil.$$

O teorema a seguir é similar ao teorema anterior. Entretanto, utiliza-se o conceito de Polinômios de Chebyshev para obter a estimativa da distância entre os subconjuntos de vértices X e Y.

Teorema 5.2.2. *Seja $G = (V, A)$ um grafo não-completo. Então,*

$$d(X, Y) \leq \left\lceil \frac{\cosh^{-1} \sqrt{\frac{\operatorname{vol} \bar{X} \operatorname{vol} \bar{Y}}{vol X vol Y}}}{\cosh^{-1} \frac{\lambda_{n-1}+\lambda_1}{\lambda_{n-1}-\lambda_1}} \right\rceil$$

para os conjuntos $X, Y \subset V$ tais que $X \neq \bar{Y}$.

Demonstração. Primeiramente, sejam considerados os Polinômios de Chebyshev, isto é, os polinômios da forma

$$T_0(z) = 1, \;\; T_1(z) = z, \;\; T_{t+1}(z) = 2zT_t(z) - T_{t-1}(z), t > 1.$$

De forma equivalente, é possível escrever

$$T_t(z) = \cosh(t \cosh^{-1}(z)).$$

No lugar de $p_t(\mathcal{L})$, será utilizada a expressão $S_t(\mathcal{L})$, definida como

$$S_t(x) = \frac{T_t(\frac{\lambda_1+\lambda_{n-1}-2x}{\lambda_{n-1}-\lambda_1})}{T_t(\frac{\lambda_{n-1}+\lambda_1}{\lambda_{n-1}-\lambda_1})}.$$

Segue-se que

$$\max_{x\in[\lambda_1,\lambda_{n-1}]} S_t(\lambda_1) \geq \frac{1}{T_t(\frac{\lambda_{n-1}+\lambda_1}{\lambda_{n-1}-\lambda_1})}.$$

Tomando-se t de modo que

$$t \geq \frac{\cosh^{-1} \sqrt{\frac{\operatorname{vol} \bar{X} \operatorname{vol} \bar{Y}}{\operatorname{vol} X \operatorname{vol} Y}}}{\cosh^{-1}(\frac{\lambda_{n-1}+\lambda_1}{\lambda_{n-1}-\lambda_1})},$$

conclui-se que

$$\langle T^{1/2}\psi_Y, S_t(\mathcal{L})T^{1/2}\psi_X \rangle > 0,$$

concluindo o teorema. □

5.3 O problema da distância entre mais de dois subconjuntos

É possível generalizar os resultados encontrados na seção anterior para situações que envolvem mais de dois suconjuntos, conforme os resultados a seguir mostrarão. Especificamente, é possível generalizar o Teorema 5.2.1 da seção anterior para situações envolvendo k subconjuntos de vértices de um grafo. Para provar essa generalização, o resultado a seguir é indispensável.

Teorema 5.3.1. *Sejam $x_1, x_2, \ldots, x_{d+2}$ um total de $d+2$ vetores quaisquer em um espaço euclidiano de dimensão d. Existem dois vetores entre eles, x_i e x_j, $i \neq j$, tais que $\langle x_i, x_j \rangle \geq 0$.*

Demonstração. A demonstração do Teorema 5.3.1 será realizada por meio do Princípio de Indução Matemática. O caso para $d = 1$ é óbvio. Em seguida, assume-se que o teorema é verdadeiro para o espaço euclidiano de dimensão $d - 1$ dado que $1 < d$. Finalmente, supõe-se que todo par dos vetores dados acima possui produto escalar menor do que 0. Seja P o hiperplano ortogonal para x_{d+2} e seja x_i' a projeção de x_i em P dado que $i \in \{1, \ldots, d+1\}$. De acordo com a suposição, tem-se que

$$\langle x_i', x_j' \rangle < 0$$

dado que $i \neq j$. Como

$$\langle x_i, x_{d+2} \rangle < 0$$

dado que $i \leq d+1$, conclui-se que os vetores x_i estão no mesmo espaço-metade com respeito a P, de modo que cada vetor x_i pode ser escrito como

$$x_i = x_i' + a_i e,$$

sendo $a_i > 0$ e e é o vetor unitário ortogonal a P e direcionado ao mesmo espaço-metade de todo x_i. Consequentemente,

$$\langle x_i', x_j' \rangle + a_i a_j = \langle x_i' - a_i e, x_j' - a_j e \rangle = \langle x_i, x_j \rangle < 0.$$

Daí, concluí-se que $\langle x_i', x_j' \rangle < 0$. Todavia, a hipótese de indução garante a existência de dois vetores x_i', $i \in \{i, \ldots, d+1\}$, com produto escalar não-negativo no espaço P de dimensão $d - 1$, o que é uma contradição. Portanto, o teorema está provado. □

A partir do Teorema 5.3.1, é possível introduzir os teoremas principais dessa seção.

Teorema 5.3.2. *Seja $G = (V, A)$ um grafo não-completo. Para cada $i \in \{0, 1, \ldots, k\}$, seja $X_i \subset V$, ou seja, um subconjunto do conjunto de vértices de G. Então,*

$$\min_{i \neq j} d(X_i, X_j) \leq \max_{i \neq j} \left\lceil \frac{\log \sqrt{\frac{\operatorname{vol} \bar{X}_i \operatorname{vol} \bar{X}_j}{\operatorname{vol} X_i \operatorname{vol} X_j}}}{\log(\frac{1}{1-\lambda_k})} \right\rceil$$

se $1 - \lambda_k \geq \lambda_{n-1} - 1$.

Demonstração. Entre os sunconjuntos X_i, sejam X e Y subconjuntos distintos. Utilizando a notação do Teorema 5.2.1, considera-se

$$\langle T^{1/2} \psi_Y, (I - \mathcal{L})^t T^{1/2} \psi_X \rangle \geq a_0 b_0 + \sum_{i=0}^{k-1} (1 - \lambda_i)^t a_i b_i - \sum_{i \geq k} (1 - \lambda_k)^t |a_i b_i|.$$

Para cada X_i, $i \in \{0, 1, \ldots, k\}$, considera-se o vetor que consiste nos coeficientes de Fourier das autofunções $\phi_i, ..., \phi_{k-1}$ na expansão da autofunção de X_i. Definindo-se o produto escalar dos vetores $(a_1, ..., a_{k-1})$ e $(b_1, ..., b_{k-1})$ como

$$\sum_{i=1}^{k-1}(1-\lambda_i)^t a_i b_i,$$

sabe-se, pelo Teorema 5.3.1, que é possível escolher dois subconjuntos X e Y com seus respectivos vetores de forma que

$$\sum_{i=1}^{k-1}(1-\lambda_i)^t a_i b_i \geq 0.$$

Consequentemente,

$$\langle T^{1/2}\psi_Y, (1-\mathcal{L})^t T^{1/2}\psi_X\rangle > \frac{\operatorname{vol} X \operatorname{vol} Y}{\operatorname{vol} G} - (1-\lambda_k^t)\frac{\sqrt{\operatorname{vol} X \operatorname{vol} \bar{X} \operatorname{vol} Y \operatorname{vol} \bar{Y}}}{\operatorname{vol} G},$$

o que prova este teorema. □

O teorema a seguir é similar ao Teorema 5.3.2.

Teorema 5.3.3. *Para $X_i \subset V$, $i \in \{0, 1, ..., k\}$, tem-se que*

$$\min_{i \neq j} d(X_i, X_j) \leq \min_{0 \leq j < k} \max_{i \neq j} \left\lceil \frac{\log \sqrt{\frac{\operatorname{vol} \bar{X}_i \operatorname{vol} \bar{X}_j}{\operatorname{vol} X_i \operatorname{vol} X_j}}}{\log \frac{\lambda_{n-j-1}+\lambda_{k-j}}{\lambda_{n-j-1}-\lambda_{k-j}}} \right\rceil,$$

de modo que j satisfaz $\lambda_{k-j} \neq \lambda_{n-j-1}$ e e $X_i \neq \bar{X}_j$.

Demonstração. Para todo $j, j \in \{1, ..., k-1\}$, para mostrar que existem dois dos subconjuntos com os seus respectivos vetores satisfazendo

$$\sum_{i \in S}(1-\lambda_i)^t a_i b_i \geq 0,$$

sendo

$$S = \{i \,:\, 1 \leq i \leq k-j \text{ ou } n-j+1 \leq i \leq n-1\}.$$

A prova segue com o mesmo molde do Teorema 5.3.2. □

Capítulo 6

Caminhos, fluxos e roteamento

6.1 Caminhos

A Teoria de Grafos envolve diversos problemas relacionados a caminhos entre pares de vértices. O problema do caminho hamiltoniano, por exemplo, diz respeito à existência de um caminho simples que contenha todos os vértices do grafo. Esses problemas se relacionam naturalmente com diversas questões importantes da Ciência da Computação, como comunicações em redes, fluxos de dados e roteamento. Deve-se mencionar que esses problemas não são triviais. Assim, o objetivo desse capítulo é a utilização de autovalores para a resolução de problemas que envolvem caminhos. As definições, teoremas e demonstrações utilizados nesse capítulo são baseados nos estudos encontrados em CHUNG, 1997 (Capítulo 4).

Será considerado o grafo $G = (V, A)$. Serão considerados, também, os conjuntos X e Y tais que $X, Y \subset V$ possuem a mesma cardinalidade.

Se $|X| = |Y| = m$ para algum inteiro não-negativo m, define-se como *fluxo* F de X para Y os m caminhos em G que unem os vértices de X aos vértices de Y. X é chamado de *entrada* do fluxo F e Y é chamado de *saída* do fluxo F.

Por *conjunto da rota*, entende-se um fluxo com atribuição de entrada-saída. Especificamente, para a atribuição

$$A = \{(x_i, y_i) : x_i \in X, y_i \in Y\},$$

o conjunto da rota consiste em caminhos P_i que unem x_i a y_i para todo i. Aqui, a ordem é importante.

Conforme será observado ao longo do capítulo, tanto fluxos quanto rotas são úteis no estabelecimento de cotas inferiores para as constantes de Cheeger e para os os autovalores laplacianos.

6.2 Relações entre a Constante de Cheeger e fluxos

Teorema 6.2.1. *Seja considerado o grafo $G = (V, A)$ tal que $|V| = n$. Seja suposta a existência de um conjunto com $\binom{n}{2} = \frac{n!}{2!(n-2)!}$ (coeficiente binomial) caminhos unindo todos os pares de vértices de tal forma que cada aresta de G está contida em, no máximo, m caminhos. Segue-se que*

$$h'_G = \inf_S \frac{|E(S, \bar{S})|}{\min(|S|, |\bar{S}|)} \geq \frac{n}{2m},$$

onde $E(S, \bar{S})$ é a notação empregada para denotar o conjunto de arestas que possui um dos vértices em S e o outro vértice em $\bar{S}$.

Demonstração. Para todo conjunto $S \subset V$ tal que $|S| \leq |\bar{S}|$, tem-se que

$$|E(S, \bar{S})| m \geq |S||\bar{S}| \geq |S| \frac{n}{2}.$$

A prova segue da desigualdade acima. □

O teorema abaixo segue imediatamente do teorema acima.

Teorema 6.2.2. *Seja G um grafo k-regular com n vértices, seja suposto que existe um conjunto P de $\binom{n}{2}$ caminhos unindo todos os pares de vértices de forma que cada aresta de G está contida em, no máximo, m caminhos em P. Conclui-se que a Constante de Cheeger não-modificada satisfaz*

$$h_G = \inf_S \frac{|E(S, \bar{S})|}{k \min(|S|, |\bar{S}|)} \geq \frac{n}{2mk}.$$

É possível encontrar cotas inferiores para autovalores de grafos regulares a partir da Desigualdade de Cheeger abordada anteriormente e as considerações acima.

Teorema 6.2.3. *Seja G um grafo k-regular com n vértices. Seja suposto que existe um conjunto P de $\binom{n}{2} = \frac{n!}{2!(n-2)!}$ (coeficiente binomial) caminhos unindo todos os pares de vértices de forma que cada caminho em P possui comprimento l no máximo e cada aresta de G está contida em, no máximo, m caminhos de P. Segue-se que*

$$\lambda_1 \geq \frac{n}{klm}.$$

Demonstração. Utilizando-se a definição de autovalor

$$\lambda_1 = \operatorname{vol} G \inf_f \frac{\sum_{u \sim v} (f(u) - f(v))^2}{\sum_{u,v} (f(u) - (f(v))^2 d_u d_v},$$

seja considerada a autofunção harmônica $f : V(G) \longrightarrow \mathbf{R}$ relacionada a λ_1. Segue-se que

$$\lambda_1 = \frac{n \sum_{\{x,y \in E(G)\}} (f(x) - f(y))^2}{k \sum_{x,y} (f(x) - f(y))^2}.$$

Para $x, y \in V(G)$ e para o caminho $P(x, y)$ que une x e y, segue-se que

$$(f(x) - f(y))^2 \leq |P(x, y)| \sum_{e \in P(x,y)} f^2(e) \leq l \sum_{e \in P(x,y)} f^2(e),$$

sendo

$$f^2(e) = (f(x) - f(y))^2$$

para $e = \{x, y\}$. Aqui $|P(x, y)|$ denota a quantidade de arestas em $P(x, y)$. Consequentemente,

$$m \sum_{e \in E(G)} f^2(e) \geq \sum_{x,y} \sum_{e \in P(x,y)} f^2(e) \geq \frac{1}{l} \sum_{x,y} (f(x) - f(y))^2.$$

Portanto,

$$\lambda_1 \geq \frac{n}{klm}.$$

□

O caso acima pode ser generalizado para grafos não-direcionados.

Teorema 6.2.4. *Seja G um grafo não-direcionado. Substitua cada aresta $\{u, v\}$ por duas arestas direcionadas (u, v) e (v, u). Ademais, seja suposto que existe um conjunto P com $4e^2$ (aqui, e denota o número de arestas) caminhos de modo que, para cada par ordenado de arestas direcionadas, existe um caminho direcionado que une o par. Seja suposto também que cada aresta direcionada de G está contida em, no máximo, m caminhos direcionados em P. Conclui-se que a Constante de Cheeger não-modificada satisfaz a seguinte relação:*

$$h_G = \min_S \frac{|E(S, \bar{S})|}{\min(\operatorname{vol} S, \operatorname{vol} \bar{S})} \geq \frac{\operatorname{vol} G}{2m}.$$

Demonstração. A demonstração segue da observação de que, para todo $S \subset V(G)$, tem-se que

$$m|E(S, \bar{S})| \geq \operatorname{vol} S \operatorname{vol} \bar{S} \geq \frac{\operatorname{vol} S \operatorname{vol} G}{2}.$$

□

6.3 Roteamento

Seja considerado o grafo conexo $G = (V, A)$. Cada vértice $v \in V$ de G está ocupado por um marcador p_v. A cada marcador p_v, está associado um vértice-destino $\pi(v) \in V$ de modo que marcadores distintos possuem vértices-destinos distintos. Os marcadores p_v podem ser movidos para vértices-destinos do seguinte modo: A cada passo, uma coleção disjunta de arestas de G é escolhida e os marcadores pertencentes a cada aresta têm as suas posições alternadas. Com essa movimentação, espera-se rotear os marcadores para os seus respectivos destinos na menor quantidade possível de passos.

Os passos são marcados com o tempo assumido como grandeza discreta e $p_v(t) \in V$ é a localização do marcador com posição inicial v no tempo $t = 0, 1, \ldots$. Segue-se que, para cada unidade de tempo t, o conjunto $\{p_v(t) \,:\, v \in V\}$ é uma permutação de V. A permutação alvo que leva v para $\pi(v)$ será denotada por π. Finalmente, $rt(G, \pi)$ denota a quantidade mínima de passos para alcançar π e $rt(G)$, *o número de roteamento do grafo* G, é definido como

$$rt(G) = \max_{\pi} rt(G, \pi),$$

de forma que π varre todas as permutações-destino em G.

Mais uma vez, a utilização de autovalores permite a obtenção de boas aproximações para o problema de determinação do número de roteamento.

Teorema 6.3.1. *Dado o grafo regular G com n vértices, assume-se que $l \geq \log \frac{n}{\lambda_1}$. Para todo $v \in V$, seja $W(v)$ a caminhada aleatória de comprimento l que tem início em v. Seja $I(v)$ a quantidade total de outras caminhadas $W(u)$ tais que existe um vértice x e dois índices $0 \leq i, j \leq l$, $|i - j| \leq 5$, de modo que $W(v)$ visita x no tempo i e $W(u)$ visita x no tempo j. Então, com probabilidade tendendo a 1 quando n tende ao infinito, conclui-se que não existe vértice v tal que $I(v) > 100l$.*

Demonstração. A demonstração, por ser quase idêntica à demonstração do teorema anterior, será omitida. □

6.4 Comparação entre autovalores de grafos distintos

Teorema 6.4.1. *Sejam G e G' dois grafos conexos e regulares com autovalores λ_1 e λ_1' e graus k e k' respectivamente. Seja suposto que $V(G) = V(G')$ e que, para cada aresta $\{x, y\}$ em G, existe um caminho $P(x, y)$ em G' unindo x e y com comprimento, no máximo, igual a l. Seja suposto também que cada aresta em G' está contida em, no máximo, m caminhos $P(x, y)$. Então, é verdade que*

$$\lambda_1' \geq \frac{k\lambda_1}{k' l m}.$$

Demonstração. Seguindo a definição de autovalores, seja considerada a autofunção harmônica f relacionada a λ_1 do grafo G, ou seja, λ_1'. Nota-se que

$$\lambda_1' = \frac{\sum\limits_{\{x,y\}\in E(G')} (f(x)-f(y))^2}{k' \sum f^2(x)} = \frac{k \sum\limits_{\{x,y\}\in E(G')} (f(x)-f(y))^2}{k' \sum\limits_{\{x,y\}\in E(G)} (f(x)-f(y))^2} \frac{\sum\limits_{\{x,y\}\in E(G)} (f(x)-f(y))^2}{k \sum f^2(x)}.$$

Observa-se que para $\{x, y\} \in E(G)$ e para o caminho $P(x, y)$ unindo x e y em G', tem-se que

$$(f(x)-f(y))^2 \leq |P(x,y)| \sum_{e\in P(x,y)} f^2(e) \leq l \sum_{e\in P(x,y)} f^2(e),$$

sendo $f^2(e) = (f(x)-f(y))^2$ para $e = \{x, y\}$, e $|P(x, y)|$ denota a quantidade de arestas de G' em $P(x, y)$. Logo,

$$m \sum_{e\in E(G')} f^2(e) \geq \sum_{\{x,y\}\in E(G)} \sum_{e\in P(x,y)} f^2(e) \geq \frac{1}{l} \sum_{\{x,y\}\in E(G)} (f(x)-f(y))^2.$$

Portanto,

$$\lambda_1' \geq \frac{k}{k'ml} \frac{\sum\limits_{\{x,y\}\in E(G)} (f(x)-f(y))^2}{\sum f^2(x) k} \geq \frac{k}{k'ml} \lambda_1,$$

o que prova o teorema. $\square$

Capítulo 7

Discrepância e desvio do grafo

7.1 Introdução

As definições, teoremas e demonstrações utilizados nesse capítulo são baseados nos estudos encontrados em Chung, 1997 (Capítulo 5).

7.2 A propriedade da discrepância

Seja $G = (V, A)$ um grafo tal que $|V| = n$ e $|A| = e$. Define-se *a densidade de arestas* do grafo G como

$$\rho = \frac{2e}{n^2}.$$

Ademais, conforme abordado anteriormente, dados os conjuntos $X, Y \subset V$, a notação $E(X, Y)$ denota o conjunto de pares ordenados correspondentes a arestas que possuem um dos vértices em X e o outro vértice em Y; resumidamente, tem-se que

$$E(X, Y) = \{(u, v) : u \in X, v \in Y, (u, v) \in A\}.$$

O valor $|E(X, Y)|$ é denotado pelo símbolo $e(X, Y)$.

Seja $S \subset V$. *A discrepância* do conjunto S é denotada por $disc(G, S)$ e é definida como

$$disc(G, S) = |e(S, S) - \rho|S|^2|.$$

Já a *α-discrepância* de G é definida como a discrepância máxima de $S \in V$ levando-se em consideração todos os conjuntos S tais que $|S| = n\alpha$ para $0 < \alpha \leq 1$, ou seja,

$$disc(G; \alpha) = \max_{|S|=\lfloor n\alpha \rfloor} disc(G, S).$$

A partir das considerações acima, é possível definir a discrepância do grafo G:

$$discG = \max_{\alpha} disc(G; \alpha).$$

Ainda tomando $S \subset V$, seja considerado ψ_S definido como

$$\psi_S(u) = \begin{cases} 1 & \text{se } u \in S \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Levando-se em consideração a matriz de adjacência A do grafo G, observa-se que

$$e(S, S) = \sum_{u \in S} \sum_{v \in S} A_{uv} = \langle \psi_S, A\psi_S \rangle.$$

Nota-se também que a densidade de arestas ρ satisfaz a igualdade

$$\rho = \frac{\langle \vec{1}, A\vec{1} \rangle}{\langle \vec{1}, J\vec{1} \rangle}$$

dado que J é a matriz composta, exclusivamente, por 1, e que

$$|S| = \langle \psi_S, \vec{1} \rangle.$$

Quando grafos regulares são considerados, sabe-se que $\vec{1}$ é um autovetor de A. Isso significa que é possível utilizar as estimativas para os autovalores da matriz de adjacência para estimar a discrepância. Geralmente $\vec{1}$ não é autovetor de A. Essa dificuldade pode ser contornada com o auxílio dos autovalores da matriz Laplaciana conforme será ilustrado pelo primeiro teorema desse capítulo.

Teorema 7.2.1. *Dado o grafo $G = (V, A)$, sejam considerados os conjuntos $X, Y \subset V$. Definindo-se $\bar{\lambda} = \max_{i \neq 0} |1 - \lambda_i|$, tem-se que*

$$|e(X, Y) - \frac{\operatorname{vol} X \operatorname{vol} Y}{\operatorname{vol} G}| \leq \bar{\lambda} \sqrt{\operatorname{vol} X \operatorname{vol} Y}.$$

Demonstração. Dado que conforme as considerações feitas anteriormente,

$$e(X, Y) = \psi_X T^{1/2}(I - \mathcal{L})T^{1/2}\psi_Y^*,$$

supõe-se que

$$\sum_i a_i \phi_i = T^{1/2}\psi_X$$

e

$$\sum_i b_i \phi_i = T^{1/2}\psi_Y,$$

sendo ϕ_i os autovetores de $\mathcal{L}$; em particular, nota-se que

$$\phi_0 = T^{1/2}\frac{1}{\sqrt{\mathrm{vol}\, G}}.$$

Para todo $i \geq 1$, ϕ_i é ortogonal a ϕ_0, de modo que, para todo $i \geq 1$, é verdade que

$$JT^{1/2}\phi_i = 0.$$

Observa-se também que

$$\psi_X T^{1/2}(T^{1/2}JT^{1/2})T^{1/2}\psi_Y^* = \mathrm{vol}\, X\, \mathrm{vol}\, Y.$$

Portanto, a discrepância é tal que

$$disc(X,Y) = |e(X,Y) - a_0 b_0| = |\psi_X A \psi_Y^* - a_0 b_0| = |\psi_X T^{1/2}(I - \mathcal{L} - \frac{T^{1/2}JT^{1/2}}{\mathrm{vol}\, G})T^{1/2}\psi_Y^*| = |\sum_{i\geq 1} a_i b_i (1-\lambda_i)|,$$

ou seja,

$$disc(X,Y) = |\sum_{i\geq 1} a_i b_i (1-\lambda_i)| \leq \bar{\lambda}\sqrt{\sum_{i\geq 1} a_i^2 \sum_{i\geq 1} b_i^2} \leq \bar{\lambda}\frac{\sqrt{\mathrm{vol}\, X\, \mathrm{vol}\, \bar{X}\, \mathrm{vol}\, Y\, \mathrm{vol}\, \bar{Y}}}{\mathrm{vol}\, G}.$$

Com efeito, deve-se notar que

$$\mathrm{vol}\, X = \sum_i a_i^2,$$

$$a_0 = \frac{\mathrm{vol}\, X}{\sqrt{\mathrm{vol}\, G}}$$

e

$$\sum_{i\geq 1} a_i^2 = \mathrm{vol}\, G - \frac{(\mathrm{vol}\, X)^2}{\mathrm{vol}\, G} = \frac{\mathrm{vol}\, X\, \mathrm{vol}\, \bar{X}}{\mathrm{vol}\, G} \leq \mathrm{vol}\, X,$$

o que completa o teorema. □

A consequência a seguir é imediata.

Teorema 7.2.2. *Dado o grafo $G = (V, A)$, seja considerado o conjunto $X \subset V$. Segue-se que*

$$|e(X,X) - \frac{(\mathrm{vol}\, X)^2}{\mathrm{vol}\, G}| \leq \bar{\lambda}\frac{\mathrm{vol}\, X\, \mathrm{vol}\, \bar{X}}{\mathrm{vol}\, G} \leq \bar{\lambda}\, \mathrm{vol}\, X.$$

7.3 O desvio do grafo

Uma invariante do grafo relaciada aos autovalores que deve ser discutida juntamente com a discrepância é o desvio do grafo. De fato, a discrepância, embora importante em questões que envolvem extremos em grafos, não possui computação trivial, pois, por definição, exige a consideração de diversos subconjuntos. Por outro lado, além de o desvio do grafo estar associado à discrepância, a sua computação do grafo é de natureza menos complexa.

Seja considerado o grafo $G = (V, A)$ com densidade de arestas ρ. Define-se a função indicadora $\chi : X \times X \longrightarrow R$ como

$$\chi(x, y) = \begin{cases} 1 - \rho & \text{se } x \sim y \\ -\rho & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Para um 4−ciclo C, ou seja, um grafo de quatro vértices que consiste em um único ciclo, o desvio de do grafo G é definido como

$$devG = \frac{1}{\rho^4 n^4} \sum_C \chi(C) = \frac{1}{\rho^4 n^4} \chi(x, y)\chi(y, z)\chi(z, w)\chi(w, x),$$

sendo $\chi(C)$ definida como

$$\chi(C) = \prod_{\{x,y\} \in C} \chi(x, y).$$

Aqui, nota-se que x, y, x, w variam de forma independente sobre todos os vértices do grafo G.

O desvio do grafo G pode ser representado conforme o teorema a seguir.

Teorema 7.3.1. *Seja considerado o grafo $G = (V, A)$. O desvio de G é dado por*

$$devG = \frac{1}{\rho^4 n^4} \sum_{x,y} (|N_x \cap N_y| - \rho^2 n)^2,$$

onde $N_x = N(x) = \{y : y \sim x\}$ e $d_x = |N_x|$.

Demonstração. As igualdades a seguir são verdadeiras:

$$\rho^4 n^4 devG = \sum_{x,y,z,w} \chi(x, z)\chi(y, z)\chi(x, w)\chi(z, w) = \sum_{x,y} (\sum_z \chi(x, z)\chi(y, z))^2,$$

o que implica

$$\rho^4 n^4 devG = \sum_{x,y} \left[|N_x \cap N_y|(1 - \rho)^2 - (|N_x \cap \bar{N_y}| \cap |\bar{N_x} + N_y|)\rho(1 - \rho) + |\bar{N_x} \cap \bar{N_y}|\rho^2 \right].$$

Para x e y fixos, tem-se

$$\begin{aligned} &|N_x \cap N_y|(1 - \rho)^2 - |N_x \cap \bar{N_y}|\rho(1 - \rho) - |\bar{N_x} \cap N_y|\rho(1 - \rho) + |\bar{N_x} \cap \bar{N_y}|\rho^2 \\ &= (|N_x \cap N_y| - \rho^2 n)^2 - (|N_x| - \rho n)\rho - (|N_y| - \rho n)\rho. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\rho^4 n^4 devG = \sum_{x,y} (|N_x \cap N_y| - \rho^2 n)^2,$$

isto é,

$$devG = \frac{1}{\rho^4 n^4} \sum_{x,y} (|N_x \cap N_y| - \rho^2 n)^2.$$

Portanto, o teorema está provado. $\square$

Capítulo 8

Conclusão

8.1 Considerações finais sobre o Trabalho de Conclusão de Curso

A relação entre grafos e aplicações em áreas da Ciência da Computação é elementar. A título de exemplo, o *design* de redes de comunicações tem forte apelo à conceitos da Teoria de Grafos. Esse Trabalho de Conclusão de Curso buscou explorar essa associação entre grafos e Ciência da Computação por meio da perspectiva espectral da Teoria de Grafos, ou seja, buscou-se a obtenção de informações a respeito dos grafos por meio do estudo do espectro da matriz Laplaciana associada aos grafos.

A abordagem utilizada nesse trabalho foi a exploração, de forma introdutória, dos fundamentos teóricos da Teoria Espectral de Grafos. Através do estudo de algumas obras da literatura de Teoria Espectral de Grafos (em particular, distingue-se Chung, 1997), foram estudados tópicos fundamentais para a compreensão da teoria em questão. De posse dos fundamentos teóricos, torna-se possível o entendimento das aplicações dessa teoria em campos de estudo computacionais, conforme descrito porCvetković e Simić, 2011 e Arsić *et al.*, 2012. Embora a Teoria Espectral de Grafos tenha sido abordada de forma introdutória, deve-se mencionar que a abordagem não é trivial, pois engloba resultados e conceitos não-triviais de Álgebra e Teoria de Grafos.

O estudo das bases teórico-matemáticas de Teoria Espectral de Grafos nesse Trabalho de Conclusão de Curso permitiu o amadurecimento de princípios ligados à Teoria de Grafos de modo geral. O estudo também permitiu o descobrimento de novos métodos de aplicação de grafos na Ciência da Computação, como, por exemplo, a aplicação da Teoria Espectral em Computação Quântica e Segurança da Informação (Graham *et al.*, 1995). Portanto, é possível afirmar que o estudo introdutório aqui desenvolvido é apenas um ponto de partida para a compreensão de uma área com estruturas sofisticadas e capazes de contribuir com o desenvolvimento da Ciência da Computação.

Referências

[Arsić *et al.* 2012] Branko Arsić, Dragos Cvetković, Slobodan K. Simić e Milan Skarić. "Graph spectral techniques in computer science". Em: *Applicable Analysis and Discrete Mathematics* 6 (2012), pgs. 1–30 (citado nas pgs. 2, 3, 41).

[Brouwer e Haemers 2012] Andries E. Brouwer e Willem H. Haemers. *Spectra of Graphs*. 1ª ed. Springer, 2012 (citado na pg. 3).

[Chung 1997] Fan R. K. Chung. *Spectral Graph Theory*. 1ª ed. American Mathematical Society, 1997 (citado nas pgs. 1, 3, 5, 11, 17, 23, 29, 35, 41).

[Cvetković e Simić 2011] Dragos Cvetković e Slobodan K. Simić. "Graph spectra in computer science". Em: *Linear Algebra and Its Applications* 434.6 (2011), pgs. 1545–1562 (citado nas pgs. 2, 3, 41).

[Feofiloff *et al.* 2011] Paulo Feofiloff, Yoshiharu Kohayakawa e Yoshiko Wakabayashi. *Uma Introdução Sucinta à Teoria dos Grafos*. Jul. de 2011 (citado nas pgs. 3, 5).

[Graham *et al.* 1995] Ronald L. Graham, Martin Grötschel e László Lovász. *Handbook of Combinatorics*. 1ª ed. Elsevier Science B.V., 1995 (citado nas pgs. 3, 41).

[Horn e Johnson 2013] Roger A. Horn e Charles R. Johnson. *Matrix Analysis*. 2ª ed. Cambridge University Press, 2013 (citado nas pgs. 3, 5).