



UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL NORTE

FACULTAD DE CIENCIAS

Departamento de Matemáticas

Cotas inferiores para la energía de matrices y grafos

Tesis para optar al grado de Magíster en Ciencias Mención Matemáticas

GERALDINE MARCELA INFANTE RUEDA

Profesor Tutor: Dra. María Rosario Robbiano Bustamante

Antofagasta, Chile

2019

Agradecimientos.

Quiero agradecer a la profesora María Rosario Robbiano Bustamante, mi directora de tesis, por sus enseñanzas, su constante supervisión y asesoría en este trabajo de investigación. También quisiera agradecer a mi familia y amigos por su constante apoyo y colaboración.

Tabla de contenido

Agradecimientos	II
Resumen	IV
Introducción	1
1. Notaciones y conceptos	4
1.1. Teoría de Grafos	4
1.2. Teoría de Matrices	8
1.3. Teoría Espectral de Grafos	10
2. Cotas inferiores para la energía	13
3. Casos donde la cota inferior $2\sqrt{m}$ es mejorada	23
4. Conclusiones	30
Bibliografía	31

Resumen

La energía de una matriz Hermítica R , $\mathcal{E}(R)$, está dada por la suma de los valores absolutos de sus autovalores. En este trabajo se obtuvieron dos cotas inferiores para la energía $\mathcal{E}(R)$ de una matriz Hermítica R . La primera generaliza una cota inferior obtenida por McClellands en 1971 para el caso de matrices Hermíticas y grafos con una nulidad dada. La segunda generaliza una cota inferior obtenida por K. Das, S. A. Mojallal y I. Gutman en 2013 para matrices simétricas no negativas y grafos con una nulidad dada. También para cada cota son discutidos los casos de igualdad. También se encontraron algunos ejemplos donde estas nuevas cotas inferiores no son comparables con la conocida cota inferior para la energía $2\sqrt{m}$. Además se construyó otra familia de cotas inferiores obtenidas a partir de una sucesión creciente de cotas inferiores para el radio espectral de un grafo, estas cotas se tienen tanto para grafos singulares y no-singulares.

Introducción

La Teoría de Grafos es una rama de las matemáticas que estudia los grafos, los cuales son estructuras que consisten de un conjunto de puntos, también llamados vértices, y un conjunto de líneas, también llamados lados que unen los puntos bajo alguna condición dada. La resolución del problema de los 7 puentes de Königsberg en 1736 por Euler es considerado uno de los primeros estudios en Teoría de Grafos. Luego en 1852, Francis Guthrie planteó el problema de los cuatro colores, problema que no fue resuelto sino hasta un siglo después. El estudio de este problema dio como resultado el desarrollo de definiciones, términos y conceptos fundamentales de la Teoría de Grafos [46], además de resultados que son usados actualmente en el estudio de los grafos.

La Teoría Espectral de Grafos estudia propiedades de un grafo basado en la información obtenida del polinomio característico, autovalores y autovectores de matrices asociadas a este, tales como la matriz de adyacencia, la matriz Laplaciana, la matriz de Randić, entre otras.

El concepto de la *energía del grafo*, el cual es un concepto trabajado en la Teoría Espectral de grafos, tiene su origen en el área de la química. En 1930 Erich Hückel presentó un método para encontrar soluciones aproximadas de la ecuación de Schrödinger de una clase de moléculas orgánicas, los llamados hidrocarburos conjugados. Esta aproximación se conoce como "Teoría del modelo orbital de Hückel (HMO)". Si consideramos los autovalores λ_i de la matriz de adyacencia de un grafo G con n vértices, correspondientes a los átomos de carbono de la molécula conjugada entonces dentro de la aproximación HMO, los niveles de energía de los π -electrones en moléculas de hidrocarburos conjugados están relacionados a los autovalores λ_i de la siguiente forma:

$$\mathcal{E}_i = \alpha + \beta\lambda_i$$

donde α y β son parámetros del modelo HMO, y para nuestras consideraciones

es suficiente con decir que α y β son constantes. Por razones, de origen químico explicadas con mayor detalle en [15, 21, 51] y dado que la suma sobre todos los autovalores del grafo es igual a cero, se llega a la siguiente ecuación:

$$\mathcal{E}_\pi = n\alpha + \beta \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \quad (1)$$

Como n, α y β son constantes, el único término no trivial en el lado derecho de la ecuación es la suma de los valores absolutos de los autovalores del grafo molecular. En 1970 Ivan Gutman reconoció que la cantidad

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \quad (2)$$

puede ser vista como un invariante basado en el espectro de cualquier grafo (de forma general \mathcal{E} no tiene ninguna interpretación química), con propiedades matemáticas interesantes y que vale la pena estudiar. Dicho invariante se conoce con el nombre *energía del grafo*.

La energía como invariante espectral ha sido un tema ampliamente trabajado y ha sido de particular interés encontrar tanto cotas superiores como inferiores para este valor. Actualmente se conocen una gran cantidad de cotas superiores, contrario a la cantidad de cotas inferiores conocidas, probablemente debido a su dificultad para deducirlas. Algunas de estas, recientemente determinadas, pueden ser vistas en [2, 4, 8, 10, 33, 34, 39, 40, 50].

Por ejemplo Caporossi, Cvetković, Gutman y Hansen en [10] encontraron la siguiente cota inferior simple para un grafo G con m lados

$$\mathcal{E}(G) \geq 2\sqrt{m}, \quad (3)$$

Con igualdad si y sólo si G es un grafo completo bipartito $K_{a,b}$ tal que $ab = m$ junto con una cantidad arbitraria de vértices aislados.

McClellands obtuvo en [40] que para un grafo arbitrario G con m lados y n vértices

$$\mathcal{E}(G) \geq \sqrt{2m + n(n-1)} |\det(A)|^{2/n}. \quad (4)$$

donde $\det(A)$ denota el determinante de la matriz de adyacencia del grafo G .

Das, Mojallal y Gutman en [20] obtuvieron la siguiente cota inferior para la energía de grafo conexo no singular con m lados y n vértices,

$$\mathcal{E}(G) \geq \frac{2m}{n} + (n-1) + \ln |\det A| - \ln \frac{2m}{n}. \quad (5)$$

donde $\det(A)$ denota el determinante de la matriz de adyacencia del grafo G . En este caso la igualdad se tiene si y solo si G es el grafo completo K_n . Para obtener esta última cota, los autores mostraron que para un grafo conexo con n vértices se tiene la siguiente relación

$$\mathcal{E}(G) \geq \lambda_1 + (n-1) + \ln |\det A| - \ln \lambda_1. \quad (6)$$

Este trabajo se divide en 4 capítulos. En el Capítulo 1 se dan algunos conceptos y notaciones de Teoría de Grafos, Teoría de Matrices y Teoría Espectral de Grafos importantes para el desarrollo del trabajo. En el Capítulo 2 se muestran las dos cotas inferiores obtenidas para la energía $\mathcal{E}(R)$ de una matriz R . Específicamente, los Teoremas 1 y 3 extienden cotas inferiores dadas por McClellands, [40] y Das, Gutman, Mojallal, [20], respectivamente, a cotas a la energía de matrices simétricas con nulidad κ , caracterizando, además, las matrices donde las cotas son alcanzadas. Los Teoremas 2 y 4 extienden las mismas cotas inferiores: McClellands y Das, Gutman, Mojallal a cotas para la energía de grafos con nulidad κ . También para cada cota son discutidos los casos de igualdad. Adicionalmente, en el Capítulo 3, se muestra que la cota para grafos en el Teorema 2 no es comparable con la cota $2\sqrt{m}$ dada por G. Caporossi, D. Cvetković, I. Gutman, P. Hansen, [10]. En este capítulo, también se presenta una sucesión de cotas inferiores que converge a las cotas obtenidas en el capítulo 3, las cotas en esta sucesión son en función de invariantes estructurales del grafo. Finalmente el Capítulo 4 muestra las conclusiones obtenidas en este trabajo.

Capítulo 1

Notaciones y conceptos

Definiremos los conceptos que serán usados a lo largo de esta tesis. Primero mencionaremos conceptos de Teoría de Grafos, después de Teoría de Matrices y por último conceptos relaciones a la Teoría Espectral de Grafos.

1.1. Teoría de Grafos

Un *grafo* G es un par $(V(G), E(G))$ donde $V(G)$ es un conjunto no vacío de elementos llamados vértices y $E(G)$ es el conjunto de segmentos que unen dos elementos en $V(G)$, llamados lados o aristas, es decir $E(G) = \{uv : u \in V(G), v \in V(G)\}$. Los grafos se suelen denotar con una letra mayúscula y representar mediante una figura, con puntos etiquetados para los vértices y líneas para los lados. Un grafo (n, m) es un grafo con n vértices y m lados.

Si un par de vértices pueden estar conectados por más de una arista, decimos que el grafo posee aristas múltiples y si un vértice se conecta a sí mismo mediante una arista decimos que el grafo posee un lazo o bucle. En este trabajo se consideran únicamente *grafos simples*, es decir, aquellos que no poseen aristas múltiples ni bucles.

Dos vértices u y v se dicen *adyacentes* si existe un lado $e = uv \in E(G)$ que los una y en este caso decimos que el lado e es *incidente* al vértice u y al vértice v . Para un vértice v el número de lados incidentes a v es llamado el *grado* de v y es denotado por $d(v)$ o d_v .

El conjunto $N_G(v)$ se define como el conjunto de vecinos de un vértice $v \in V(G)$ y en el caso de grafos simples su cardinalidad coincide con el grado del vértice v .

Un *vértice pendiente* es un vértice que es incidente a un único lado. Es decir v es un vértice pendiente si y sólo si $d(v) = 1$. Un *vértice aislado* es un vértice v que no tiene vecinos, es decir, v es aislado si y solo si $d(v) = 0$. Un grafo es llamado *q-regular* si cada vértice tiene q vecinos.

Un *isomorfismo* entre dos grafos G y H es una biyección f entre los conjuntos de sus vértices $f : V(G) \rightarrow V(H)$ que preserva la relación de adyacencia es decir, si v y w están conectados en G , entonces $f(v)$ y $f(w)$ están conectados en H . Si G y H son isomorfos, escribimos $G \cong H$.

Un *camino* de longitud n , denotado por P_{n+1} , es un grafo isomorfo al grafo con el conjunto de vértices $\{1, \dots, n + 1\}$, donde i es adyacente a $i + 1$ para $1 \leq i \leq n$. Un camino P_{n+1} se dice que va de u a v si sus vértices pueden ser etiquetados empezando con u y terminando con v . Si hay un camino entre cualesquiera dos vértices de un grafo G , entonces G es un *grafo conexo*, si esto no ocurre es llamado *disconexo*.

El número de caminos de longitud k de G empezando en i es referido como el k -grado del vértice i y es denotado por $d_k(i)$, de donde tenemos que

$$d_0(i) = 1, d_1(i) = d(i), \text{ y}$$

$$d_{k+1}(i) = \sum_{j \in N_G(i)} d_k(j)$$

Un *ciclo* de longitud n , denotado por C_n , es cualquier grafo con n vértices, isomorfo a un grafo conexo donde cada vértice tiene exactamente dos vecinos. Un grafo *acíclico* es un grafo sin ciclos. Un *árbol* es un grafo acíclico conexo y un *bosque* es una unión

disjunta de árboles.

Un grafo con n vértices se llama *grafo completo* si cualesquiera dos vértices en este son adyacentes y es denotado por K_n . Un *conjunto independiente* es un conjunto de vértices donde ninguno de ellos es adyacente a otro, es decir, es un conjunto de vértices que induce un subgrafo vacío. Un conjunto de vértices pendientes es un ejemplo de un conjunto independiente (con la excepción de los vértices de m copias de un grafo K_2 .)

Un grafo es *bipartito* si su conjunto de vértices puede ser subdividido en dos subconjuntos no vacíos X e Y tales que cada lado de G tiene un extremo en X y el otro en Y . El par (X, Y) es llamado una bipartición. Denotamos $G(X, Y)$ el grafo con bipartición (X, Y) . Un grafo bipartito $G(X, Y)$ es completo si cada vértice de X es adyacente a todos los vértices de Y . Denotamos por $K_{p,q}$ el grafo bipartito completo con bipartición (X, Y) tal que $|X| = p$ y $|Y| = q$. Se define la *estrella* S_{n+1} como grafo bipartito completo $K_{1,n}$.

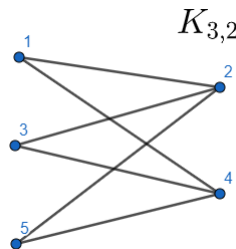


Figura 1.1: Grafo bipartito $K_{3,2}$ con $X = \{1, 3, 5\}$, $Y = \{2, 4\}$

Un grafo H es un *subgrafo* de un grafo G si conjunto $V(H) \subseteq V(G)$, $E(H) \subseteq E(G)$.

Un subgrafo H de G es llamado un *subgrafo inducido* si se cumple que dos vértices en $V(H)$ son adyacentes en H si y solo si son adyacentes en G . Entonces, un subgrafo inducido es determinado por su conjunto de vértices.

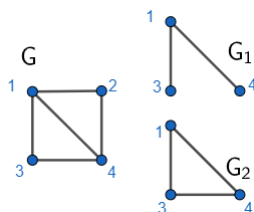


Figura 1.2: G_1 es un subgrafo de G y G_2 es un subgrafo inducido de G

Un subgrafo inducido de G que es conexo maximal (es decir un vértice adicional induce un subgrafo no conectado) es llamado una *componente conexa* de G o simplemente una componente de G .

El *join* de dos grafos G_1 y G_2 con conjuntos de vértices disjuntos, denotado por $G_1 \vee G_2$, es un grafo G tal que

$$V(G) = V(G_1) \cup V(G_2)$$

$$E(G) = E(G_1) \cup E(G_2) \cup \{ij | i \in V(G_1), j \in V(G_2)\}.$$

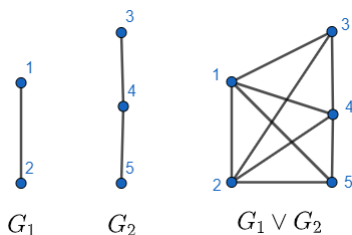


Figura 1.3: *join* de G_1 y G_2

Considerando una familia de grafos \mathcal{F} y un grafo H con k vértices, el H -*join* generalizado de $\{G_1, \dots, G_k\}$ es el grafo $G = \bigvee_H \{G_j, j \in V(H)\}$ tal que

$$V(G) = \bigcup_{i=1}^k V(G_i)$$

$$E(G) = \left(\bigcup_{i=1}^k E(G_i) \right) \cup \left(\bigcup_{uv \in E(H)} \{ij | i \in V(G_u), j \in V(G_v)\} \right).$$

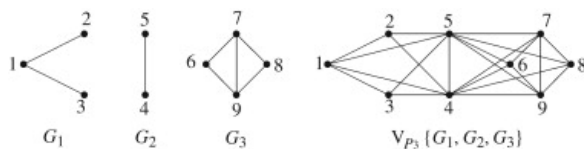


Figura 1.4: H -join de $\mathcal{F} = \{G_1, G_2, G_3\}$ con $H = P_3$

1.2. Teoría de Matrices

Para una matriz A de orden n , un *autovalor* λ asociado a un *autovector* \mathbf{x} es un escalar que cumple

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}; \mathbf{x} \neq 0$$

La anterior igualdad da origen a la siguiente ecuación, conocida como ecuación autovalor-autovector

$$(A - \lambda I)\mathbf{x} = 0.$$

La cual nos da un sistema de ecuaciones que tiene solución no nula si $\det(A - \lambda I) = 0$, igualdad conocida como la ecuación característica de A y sus correspondientes raíces son los denominados autovalores de A .

La *multiplicidad* de un autovalor λ es el número de veces que aparece como raíz del denominado polinomio característico de A dado por $\det(A - \lambda I)$.

Si \mathbf{x} es autovector de A asociado al autovalor λ , diremos que el par (λ, \mathbf{x}) es un *autopar* de A . El conjunto de autovalores $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ se conoce como el *espectro* de la matriz y se denota por $\sigma(A)$.

El *radio espectral* de una matriz cuadrada A , denotado por $\rho(A)$ está definido como

$$\rho(A) = \max\{|\lambda_i| : \lambda_i \in \sigma(A)\}$$

Los *valores singulares* $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$ de una matriz A son las raíces positivas de los autovalores distintos de cero de la matriz A^*A .

Una matriz compleja R se dice *Hermítica* si $R = R^*$. Para matrices Hermíticas sus

valores singulares y los módulos de sus autovalores coinciden.

La *norma matricial* de Frobenius para matrices complejas de orden n , denotada por $|M|$ es definida como

$$|M| = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2}$$

donde $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$ son los valores singulares de M . Si R es una matriz simétrica entonces la norma de Frobenius de R está dada por

$$|R|^2 = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2.$$

donde $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ son los autovalores de R .

La k -ésima *suma simétrica* de los autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ de una matriz M de orden n es definida como

$$\Upsilon_k(M) = \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq n} \lambda_{i_1} \lambda_{i_2} \dots \lambda_{i_k}. \quad (1.1)$$

Notemos que $\Upsilon_k(M)$, posee $\binom{n}{k}$ sumandos. Además, se tiene que $\Upsilon_n(M) = \det(M)$ y $\Upsilon_1(M) = \text{tr}(M)$.

Para una matriz M de $n \times n$ la notación $M[i_1, i_2, \dots, i_k]$ significa la submatriz principal de M cuya j -ésima fila y columna están indexadas por i_j , para $1 \leq j \leq k$. Por otro lado, el determinante $\det(M[i_1, i_2, \dots, i_k])$ es un menor principal de $k \times k$ de M o un menor principal de orden k de M y es denotado por $\Delta_M[i_1, i_2, \dots, i_k]$. En [41], por comparación de los coeficientes de la ecuación característica, se muestra que el modulo de la k -ésima función simétrica de $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ y la suma de todos menores principales de $k \times k$ coinciden. Esto significa que

$$|\Upsilon_k(M)| = \left| \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq n} \Delta_M[i_1, i_2, \dots, i_k] \right|. \quad (1.2)$$

Una matriz X se dice *cogrediente* a una matriz Y si existe una matriz de permutación P , tal que $X = P^T Y P$. Una matriz cuadrada no negativa A es llamada *reducible* si

es cogrediente a una matriz de la forma

$$\begin{pmatrix} B & C \\ 0 & D \end{pmatrix}$$

donde B y D son submatrices cuadradas. En otro caso, A es llamada *irreducible*.

Por el Teorema de Perron-Frobenius([42]), sabemos que si A es una matriz irreducible con entradas no negativas, entonces A posee un autovalor maximal.

Si A una matriz irreducible no negativa con autovalor maximal λ_1 y A tiene exactamente h autovalores de módulo λ_1 , entonces el número h es llamado el *índice de imprimitividad* de A .

1.3. Teoría Espectral de Grafos

Hay muchas matrices asociadas a los grafos que nos permiten estudiarlos, entre ellas se encuentran, la matriz de adyacencia, la matriz Laplaciana, la matriz Laplaciana sin signo, la matriz de Randić, la matriz Laplaciana Normalizada, entre otras, ver [17], [14]. En nuestro trabajo vamos a considerar la *matriz de adyacencia*.

Después de etiquetar los vértices de un grafo, $V(G) = \{1, \dots, n\}$, procedemos a definir matriz de adyacencia, $A(G)$ de la siguiente forma:

$$(A(G))_{u,v} = \begin{cases} 1, & \text{if } uv \in E(G); \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Es decir que la matriz de adyacencia, $A(G)$, es una matriz cuadrada de $n \times n$, compuesta de de 0's y 1's donde cada fila y columna representa un vértice del conjunto $V(G)$.

El espectro o conjunto de autovalores de $A(G)$ se refiere también al espectro de G y es denotado por $\sigma(G)$. El i -ésimo autovalor más grade de $A(G)$ es llamado el

i -ésimo autovalor más grande de G y es denotado por $\lambda_i(G)$, para $1 \leq i \leq n$.

Como A es una matriz simétrica entonces los autovalores de G son reales y por tanto se pueden ordenar

$$\alpha_1 \geq \cdots \geq \alpha_n.$$

Note que si R es una matriz no negativa, como en el caso de la matriz de adyacencia donde todas sus entradas son reales y no negativas, entonces R es simétrica y su radio espectral coincide con su autovalor más grande.

Recordemos que en el caso de una matriz cuadrada simétrica M con autovalores $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$, su nulidad, denotada por $\eta(M)$, corresponde a la multiplicidad del autovalor nulo. Para cualquier grafo G , la nulidad de $A(G)$ es llamada la nulidad de G y es denotada por $\eta(G)$. Consecuentemente, un grafo es llamado no-singular si $\eta(G) = 0$. En caso contrario G es llamado un grafo singular.

Si G es un grafo conexo, entonces $A(G)$ es una matriz irreducible no negativa.

La matriz de adyacencia A de un grafo bipartito completo es cogrediente a una matriz de la forma

$$\begin{pmatrix} 0 & S \\ S^T & 0 \end{pmatrix} \tag{1.3}$$

Por ejemplo la matriz de adyacencia A del grafo bipartito completo $K_{3,2}$ tal que $X = \{1, 3, 5\}$, $Y = \{2, 4\}$ donde

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

se cumple que

$$P^T AP = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

La energía de un grafo G , denotada por $\mathcal{E}(G)$ está definida de la siguiente forma

$$\mathcal{E}(G) = \sum_{i=1}^n |\alpha_i| \tag{1.4}$$

donde $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ son los autovalores de G .

Es sabido que para matrices Hermíticas sus valores singulares y los valores absolutos (o módulos) de sus autovalores coinciden, por lo tanto la energía de R , es decir $\mathcal{E}(R)$, es la suma de sus valores singulares.

Capítulo 2

Cotas inferiores para la energía

A continuación presentamos nuestro primer resultado el cual extiende a matrices simétricas la desigualdad presentada en (4).

Teorema 1 *Sea R una matriz simétrica tal que $\eta(R) = \kappa$. Entonces*

$$\mathcal{E}(R) \geq \sqrt{|R|^2 + (n - \kappa)(n - \kappa - 1) |\Upsilon_{n-\kappa}(R)|^{2/n-\kappa}}, \quad (2.1)$$

La igualdad se tiene si y solo si los autovalores distintos de cero de R tienen el mismo valor absoluto. Más aún, si R es irreducible la igualdad se tiene si y sólo si R es equivalente mediante permutaciones a una matriz bloque de la forma

$$\begin{pmatrix} 0 & S \\ S^T & 0 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

donde $\kappa = n - 2$ y S es una matriz de rango uno.

Demostración.

Sean $\alpha_{j_1} \geq \alpha_{j_2} \geq \dots \geq \alpha_{j_{n-\kappa}}$ los autovalores de R distintos de cero. Es claro que

$$\mathcal{E}(R) = |\alpha_{j_1}| + |\alpha_{j_2}| + \dots + |\alpha_{j_{n-\kappa}}|.$$

Así

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(R)^2 &= (|\alpha_{j_1}| + |\alpha_{j_2}| + \cdots + |\alpha_{j_{n-\kappa}}|)^2 \\ &= \sum_{\ell=1}^{n-\kappa} |\alpha_{j_\ell}|^2 + \sum_{\ell_1 \neq \ell_2} |\alpha_{j_{\ell_1}}| |\alpha_{j_{\ell_2}}|. \end{aligned}$$

Recordemos que $\Delta_R[i_1, i_2, \dots, i_{n-\kappa}]$ denota los menores principales $k \times k$ de R . Debido a la desigualdad media aritmética-media geométrica para un conjunto de números positivos, obtenemos la siguiente desigualdad

$$\begin{aligned} \frac{1}{(n-\kappa)(n-\kappa-1)} \sum_{\ell_1 \neq \ell_2} |\alpha_{j_{\ell_1}}| |\alpha_{j_{\ell_2}}| &\geq \left(\prod_{\ell_1 \neq \ell_2} |\alpha_{j_{\ell_1}}| |\alpha_{j_{\ell_2}}| \right)^{\frac{1}{(n-\kappa)(n-\kappa-1)}} \\ &= \left(\prod_{\ell=1}^{n-\kappa} |\alpha_{j_\ell}| \right)^{\frac{2}{n-\kappa}} \\ &= \left| \prod_{\ell=1}^{n-\kappa} \alpha_{j_\ell} \right|^{\frac{2}{n-\kappa}} \\ &= |\Upsilon_{n-\kappa}(R)|^{\frac{2}{n-\kappa}}. \end{aligned}$$

Por la igualdad en (1.2), el término $|\Upsilon_{n-\kappa}(R)|^{\frac{2}{n-\kappa}}$ cambia de ser un invariante espectral a un invariante de la matriz. Finalmente la igualdad se tiene si y sólo si

$$|\alpha_{j_1}| = |\alpha_{j_2}| = \cdots = |\alpha_{j_{n-\kappa}}|. \quad (2.3)$$

De (2.3), tenemos que el índice de imprimitividad h es $h = n - \kappa$. Además, como R es no negativa y simétrica, R es cogrediente a una matriz de la forma en (2.2) y por lo tanto su índice de imprimitividad debe ser $h = 2$, de donde se obtiene $\kappa = n - 2$ y en consecuencia el bloque S es una matriz de rango uno.

Para la otra dirección, basta con notar $\rho(R)$ y $-\rho(R)$ son los únicos autovalores distintos de cero de R . □

Observación 1 *Note que la igualdad*

$$\left| \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_{n-\kappa} \leq n} \Delta_R[i_1, i_2, \dots, i_{n-\kappa}] \right| = \left| \prod_{l=1}^{n-\kappa} \alpha_{j_l} \right|$$

se tiene considerando los autovalores nulos y no nulos de R .

Si en el resultado anterior la matriz simétrica R es reemplazada por la matriz de adyacencia de un grafo G se obtiene el siguiente resultado.

Teorema 2 *Sea G un grafo (n, m) sin vértices aislados, con nulidad κ . Entonces*

$$\mathcal{E}(G) \geq \sqrt{2m + (n - \kappa)(n - \kappa - 1) |\Upsilon_{n-\kappa}(G)|^{2/n-\kappa}}, \quad (2.4)$$

donde

$$\Upsilon_{n-\kappa}(G) = \Upsilon_{n-\kappa}(A(G)).$$

La igualdad en (2.4) se tiene si y solo si los autovalores distintos de cero de G tienen el mismo valor absoluto. Más aún si G es conexo la igualdad se tiene si y solo si $G = K_{a,b}$ es el grafo bipartito completo, con $a + b = \kappa + 2$. En otro caso $G = \cup_{j=1}^{\ell} K_{a_j, b_j}$, con $a_j b_j = a_i b_i$, para $i \neq j$, $\ell = \frac{n-\kappa}{2}$ y $n = \sum_{j=1}^{\ell} (a_j + b_j)$.

Demostración.

El resultado es obtenido siguiendo los mismos pasos de la prueba del Teorema 1 reemplazando la matriz Hermitiana R por la matriz de adyacencia de G . Si G es conexo entonces $A(G)$ es irreducible y del caso de igualdad en el Teorema 1 se tiene necesariamente que $G = K_{a,b}$. Si G no es conexo, cada componente tiene la condición (2.3) por lo tanto es un grafo bipartito completo y las condiciones descritas para G en el enunciado se mantienen. \square

Ejemplo 2.1 *Veamos un ejemplo usando el teorema anterior. Consideremos el siguiente grafo*

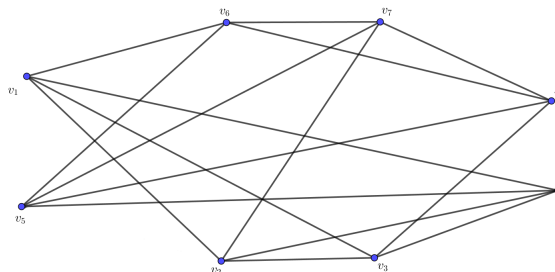


Figura 2.1: Grafo G con $\mathcal{E}(G) = 12$

Calculando el polinomio característico del grafo G de la Figura 2.1, obtenemos

$$p_G(\lambda) = \lambda^8 - 16\lambda^6 - 16\lambda^5 + 48\lambda^4 + 64\lambda^3$$

Del grafo junto con la información de polinomio obtenemos que

$$n = 8, \kappa = 3, m = 16, |\Upsilon_5| = 64$$

Entonces calculando la cota obtenida en el Teorema 2

$$\sqrt{2m + (n - \kappa)(n - \kappa - 1) |\Upsilon_{n-\kappa}(G)|^{2/n-\kappa}} \approx 11,728$$

Observamos además que esta cota mejora considerablemente la cota $2\sqrt{m} = 8$.

El Teorema a continuación extiende la cota en (6) para el caso de matrices simétricas no negativas con una nulidad dada.

Teorema 3 Sea R una matriz simétrica no negativa de $n \times n$ con radio espectral ρ tal que $\eta(R) = \kappa$. Entonces

$$\mathcal{E}(R) \geq \rho + n - \kappa - 1 + \ln |\Upsilon_{n-\kappa}(R)| - \ln \rho. \quad (2.5)$$

La igualdad en (2.5) se tiene si y sólo si los autovalores distintos de cero, exceptuando tal vez el autovalor más grande de R , tienen todos sus módulos iguales a 1. Mas aún, si el autovalor más grande de R es mayor a 1 y $\text{tr}(R) = 0$ entonces κ , el número c de autovalores iguales a -1 y, el número f de autovalores igual a 1 satisfacen

$$1. c = \frac{|R|^2 - \rho^2 + \rho}{2}$$

$$2. f = \frac{|R|^2 - \rho^2 - \rho}{2}$$

$$3. \kappa = n - 1 + \rho^2 - |R|^2$$

Más aún, la desigualdad (2.5) es estricta si R tiene una submatriz de 3×3 , digamos R_1 , donde

$$1. R_1 = \begin{pmatrix} 0 & a & 0 \\ a & 0 & b \\ 0 & b & 0 \end{pmatrix} \text{ con } \sqrt{a^2 + b^2} > 1, \text{ o}$$

$$2. R_1 = \begin{pmatrix} 0 & a & c \\ a & 0 & b \\ c & b & 0 \end{pmatrix} \text{ con un vector } (\alpha, \beta, \gamma)^T \text{ tal que}$$

$$\frac{2(a\alpha\beta + b\beta\gamma + c\alpha\gamma)}{\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2} < -1.$$

Demostración.

Sean $\alpha_{j_1} \geq \alpha_{j_2} \geq \dots \geq \alpha_{j_{n-\kappa}}$, with $\alpha_{j_1} = \rho$, los autovalores distintos de cero de R . En [20] se probó que la función con valores reales $f(x) = x - 1 - \ln x$, $x > 0$ es una función estrictamente creciente para $x \geq 1$ y estrictamente decreciente en $0 < x \leq 1$. Por lo tanto, $f(x) \geq f(1) = 0$, implicando que $x \geq 1 + \ln x$, $x > 0$. Note que la

igualdad se tiene si y sólo si $x = 1$. Usando el hecho anterior, tenemos

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}(R) &= \rho + \sum_{i=2}^{n-\kappa} |\alpha_{j_i}| \\
 &\geq \rho + n - \kappa - 1 + \sum_{i=2}^{n-\kappa} \ln |\alpha_{j_i}| \\
 &= \rho + n - \kappa - 1 + \ln \prod_{i=2}^{n-\kappa} |\alpha_{j_i}| \\
 &= \rho + n - \kappa - 1 + \ln \left| \prod_{i=2}^{n-\kappa} \alpha_{j_i} \right| \\
 &= \rho + n - \kappa - 1 + \ln |\Upsilon_{n-\kappa}(R)| - \ln \rho,
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

Note que la igualdad en $x \geq 1 + \ln x$ se tiene si y sólo si $x = 1$, implicando que la igualdad en (2.6) se tiene si y sólo si

$$1 = |\alpha_{j_2}| = |\alpha_{j_3}| = \cdots = |\alpha_{j_{n-\kappa}}|.$$

Las primeras igualdades son obtenidas mediante la búsqueda de soluciones κ , c and f en función de n , ρ y $|R|$ en el siguiente sistema

$$\begin{aligned}
 1 + c + f + \kappa &= n \\
 \rho + f - c &= 0 \\
 \rho^2 + f + c &= |R|^2
 \end{aligned}$$

Veamos la condición de suficiencia. En (1) de la condición

$$\sqrt{a^2 + b^2} > 1.$$

obtenemos que el menor autovalor de R_1 es más pequeño que -1 . Usando el hecho de que el autovalor más pequeño de una matriz simétrica es a los más el cociente de Rayleigh de la matriz y de la condición dada en (2)

$$\frac{2(a\alpha\beta + b\beta\gamma + c\alpha\gamma)}{\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2} < -1.$$

y obtenemos que el menor autovalor de R_1 es más pequeño que -1 .

De esta forma, usando el Teorema de Intercalamiento considerando los autovalores más pequeños de R y R_1 respectivamente hemos impuesto tanto en (1) como en (2) que el módulo del menor autovalor de R es mayor a 1 y por lo tanto no se satisface la condición para la igualdad. \square

En el siguiente teorema se establece la generalización para cualquier grafo, incluyendo grafos singulares, del resultado en (6).

Teorema 4 *Sea G un grafo con n vértices tal que $\eta(G) = \kappa$ cuyo autovalor más grande es λ_1 . Entonces*

$$\mathcal{E}(G) \geq \lambda_1 + n - \kappa - 1 + \ln |\Upsilon_{n-\kappa}(G)| - \ln \lambda_1 \quad (2.7)$$

La igualdad en (2.7) se tiene si y solo si los autovalores distintos de cero de G , excepto quizás su autovalor más grande, tienen módulo igual a 1. Si el autovalor más grande de G es 1 entonces $G = \lfloor \frac{n-\kappa}{2} \rfloor K_2 \cup \kappa K_1$. Por el contrario si $\rho > 1$ entonces $G = K_{n-\ell} \cup \kappa K_1 \cup \lfloor \frac{\ell-\kappa}{2} \rfloor K_2$ con $\kappa \leq \ell \leq n - 3$.

Demostración.

La demostración se sigue de forma sencilla de los argumentos usados en la prueba del Teorema 3, reemplazando la matriz simétrica no negativa R por la matriz de adyacencia del grafo G . Si $\rho = 1$, estamos en las condiciones del Teorema 2 y por lo tanto cualquier componente conexa de G tiene autovalores no nulos 1 y -1 que corresponden a lados aislados y por lo tanto G es la unión de vértices aislados y lados aislados, esto es

$$G = \left\lfloor \frac{n-\kappa}{2} \right\rfloor K_2 \cup \kappa K_1.$$

Por otro lado, si $\rho > 1$ entonces G debe tener una componente conexa con al menos tres vértices y en estas componentes se ve que un subgrafo inducido con tres vértices de esta componente debe ser un ciclo o por el contrario sería un camino y por 1. en las afirmaciones del Teorema 3 (y usando intercalamiento) el menor autovalor no

sería -1 , luego si existe una componente conexa de G con al menos tres vértices, este debe ser un grafo completo y por lo tanto así

$$G = K_{n-\ell} \cup \kappa K_1 \cup \left\lfloor \frac{\ell - \kappa}{2} \right\rfloor K_2$$

con $\kappa \leq \ell \leq n - 3$. □

Como consecuencia del Teorema 3 podemos obtener el siguiente resultado.

Corolario 1 *Sea R una matriz simétrica no negativa de orden n con mayor autovalor ρ y tal que $\eta(R) = \kappa$ y sea \mathbf{x} vector no negativo tal que*

$$\mu = \frac{\mathbf{x}^T R \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} \geq 1.$$

Entonces

$$\mathcal{E}(R) \geq \mu + n - \kappa - 1 + \ln |\Upsilon_{n-\kappa}(R)| - \ln \mu. \quad (2.8)$$

La igualdad se tiene en (2.8) si y solo si \mathbf{x} es un autovector de R asociado a ρ y todos los autovalores distintos de cero de R tienen valor absoluto igual a 1, excepto tal vez su mayor autovalor.

Demostración.

Recordemos que del cociente de Rayleigh $\rho = \alpha_1 \geq \frac{\mathbf{x}^T R \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$ con igualdad si y solo si (ρ, \mathbf{x}) es un autopar de R (ver e.g. [42]). Recordemos que, como en la prueba del Teorema 3 la función de valores reales $f(x) = x - 1 - \ln x$, $x > 0$ es estrictamente creciente para $x \geq 1$ y estrictamente decreciente en $0 < x \leq 1$ ([20]) entonces $f(x) \geq f(1) = 0$, lo cual implica $x \geq 1 + \ln x$, $x > 0$. Más aún, la función de valores reales $g(x) = x + n - \kappa + \ln |\Upsilon|$ es una función estrictamente creciente, entonces la función compuesta $h = g \circ f$ es estrictamente creciente para $x \geq 1$. De la condición $\frac{\mathbf{x}^T R \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} \geq 1$ tenemos $h(\rho) \geq h(\frac{\mathbf{x}^T R \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}})$, que es la desigualdad deseada dado que $h(\rho)$ corresponde a la cota inferior obtenida en el Teorema 3. Si la igualdad se tiene entonces para todo los autovalores α de R distintos de cero de , digamos, y

diferentes del más grande la igualdad $|\alpha| = 1 + \ln|\alpha|$ ocurre sólo cuando $|\alpha| = 1$ implicando que $\alpha = \pm 1$ y $\rho = \frac{\mathbf{x}^T R \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$, dado que h es estrictamente creciente. \square

Observación 2 *Si una matriz reducible R es particionada en bloques irreducibles con un bloque principal, digamos W , cuyo radio espectral es el radio espectral de R , digamos ρ , tal que $W\mathbf{y} = \rho\mathbf{y}$, entonces R tiene un autovector asociado $\mathbf{x} = (\mathbf{y}, \mathbf{0}, \dots, \mathbf{0})^T$. Si todos los autovalores distintos de cero de R tienen módulo igual a 1, excepto tal vez para su mayor autovalor, la igualdad en (2.8) es también obtenida.*

Por lo tanto para grafos, el resultado anterior puede ser reescrito de la siguiente forma:

Corolario 2 *Sea G un grafo (m, n) con mayor autovalor ρ y sea G_1 un subgrafo inducido (n_1, m_1) una componente conexa con $n_1 \geq 2$. Entonces*

$$\mathcal{E}(G) \geq \frac{2m_1}{n_1} + n - \kappa - 1 + \ln |\Upsilon_{n-\kappa}(G)| - \ln \frac{2m_1}{n_1}. \quad (2.9)$$

En particular, si G_1 es r_1 -regular obtenemos que

$$\mathcal{E}(G) \geq r_1 + n - \kappa - 1 + \ln |\Upsilon_{n-\kappa}(G)| - \ln r_1. \quad (2.10)$$

Si $\rho = 1$ entonces la igualdad se tiene si y solo si $G = \lfloor \frac{n-\kappa}{2} \rfloor K_2 \cup \kappa K_1$. Si $\rho > 1$ entonces la igualdad se tiene si y solo si $G = K_{n-\ell} \cup \kappa K_1 \cup \lfloor \frac{\ell-\kappa}{2} \rfloor K_2$ con $\kappa \leq \ell \leq n-3$, tomando $G_1 = K_{n-\ell}$.

Demostración.

La demostración se sigue directamente de la prueba del Corolario 1 cambiando la matriz simétrica no negativa R por la matriz de adyacencia del grafo G . En este punto recordemos que si \mathbf{x} es como en el enunciado de la Observación 2, entonces $\frac{\mathbf{x}^T A(G) \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} = \frac{2m_1}{n_1}$, con igualdad si y sólo si G_1 es un grafo regular (ver [17]). Más aún, la función de valores reales $g(x) = x + n - \kappa + \ln|\Upsilon|$ es estrictamente creciente, entonces la función compuesta $h = g \circ f$ es estrictamente creciente para $x \geq 1$. De

la condición $\frac{2m_1}{n_1} \geq 1$ tenemos $h(\rho) \geq h(\frac{2m_1}{n_1})$, que es la desigualdad en (2.9). Si la igualdad se tiene para todos los autovalores λ de G distintos de cero y del mayor autovalor, la igualdad $|\lambda| = 1 + \ln |\lambda|$ ocurre sólo cuando $|\lambda| = 1$ implicando que $\lambda = \pm 1$ y $\lambda_1 = \frac{2m_1}{n_1}$. Por lo tanto, G_1 es una componente conexa regular y por lo tanto los grafos en el enunciado proceden. □

Capítulo 3

Casos donde la cota inferior $2\sqrt{m}$ es mejorada

Vamos a presentar algunos casos donde la cota inferior $2\sqrt{m}$ obtenida en (4) es mejorada por la cota inferior en (2.4) presentada en el Teorema 2.

1. Consideremos T como uno de los árboles de n vértices en [30, Theorem 2] , entonces

$$p_T(x) = x^{n-4}(x^4 - (n-1)x^2 + (n-3)) \quad (3.1)$$

es el polinomio característico de T . Es claro que $\kappa = n - 4$, $\Upsilon_4(T) = n - 3$ y $m = n - 1$, entonces dado que queremos ver cuando se tiene que

$$2\sqrt{m} \leq \sqrt{2m + (n - \kappa)(n - \kappa - 1)|\Upsilon|^{\frac{2}{n-\kappa}}} \quad (3.2)$$

obtenemos que

$$\begin{aligned}
 2\sqrt{n-1} &\leq \sqrt{2(n-1) + (4)(3)(n-3)^{\frac{1}{2}}} \\
 4(n-1) &\leq 2(n-1) + 12\sqrt{(n-3)} \\
 (n-1) &\leq 6\sqrt{(n-3)} \\
 (n-1)^2 &\leq 36(n-3)
 \end{aligned}$$

Por lo tanto, para $4 \leq n \leq 34$, cota en (2.4) supera la conocida cota $2\sqrt{m}$.

2. Ahora, si consideramos el espectro del join generalizado para dos grafos bipartitos regulares tenemos que:

$$\sigma(K_{r_1, r_1} \vee K_{r_2, r_2}) = \{0^{2r_1-2+2r_2-2}, -r_1, -r_2\} \cup \sigma(F)$$

donde

$$F = \begin{pmatrix} r_1 & 2\sqrt{r_1 r_2} \\ 2\sqrt{r_1 r_2} & r_2 \end{pmatrix}$$

De donde obtenemos que

$$p_F(x) = x^2 - x(r_1 + r_2) - 3r_1 r_2$$

Entonces

$$\lambda_1, \lambda_2 = \frac{(r_1 + r_2) \pm \sqrt{(r_1 + r_2)^2 + 12r_1 r_2}}{2}$$

Luego, tenemos que

$$\begin{aligned}
 \lambda_1 \lambda_2 &= \left(\frac{(r_1 + r_2) + \sqrt{(r_1 + r_2)^2 + 12r_1 r_2}}{2} \right) \left(\frac{(r_1 + r_2) - \sqrt{(r_1 + r_2)^2 + 12r_1 r_2}}{2} \right) \\
 &= \frac{(r_1 + r_2)^2 - [(r_1 + r_2)^2 + 12r_1 r_2]}{4} = -3r_1 r_2
 \end{aligned}$$

De lo anterior se obtiene que:

$$\begin{aligned} n &= 2r_1 + 2r_2, \\ m &= r_1^2 + r_2^2 + 4r_1r_2, \\ \kappa &= 2r_1 + 2r_2 - 4 = n - 4, \\ \Upsilon &= (\lambda_1)(\lambda_2)(-r_1)(-r_2) = -3r_1^2r_2^2. \end{aligned}$$

De donde tenemos que

$$\begin{aligned} 2\sqrt{m} &\leq \sqrt{2m + (n - \kappa)(n - \kappa - 1)|\Upsilon|^{\frac{2}{n-\kappa}}} \\ 2\sqrt{r_1^2 + r_2^2 + 4r_1r_2} &\leq \sqrt{2(r_1^2 + r_2^2 + 4r_1r_2) + (4)(3)|-3r_1^2r_2^2|^{\frac{1}{2}}} \\ 4(r_1^2 + r_2^2 + 4r_1r_2) &\leq 2(r_1^2 + r_2^2 + 4r_1r_2) + 12\sqrt{3}r_1r_2 \\ r_1^2 + r_2^2 &\leq r_1r_2(6\sqrt{3} - 4) \end{aligned}$$

Revisemos esta última desigualdad obtenida por casos

a) Si $r_1 = r_2$, entonces

$$\begin{aligned} r_1^2 + r_1^2 &\leq r_1r_1(6\sqrt{3} - 4) \\ 2r_1^2 &\leq r_1^2(6\sqrt{3} - 4) \\ 0 &\leq r_1^2(6\sqrt{3} - 6) \\ 0 &\leq r_1^2 \end{aligned}$$

lo cual es cierto siempre. Por lo tanto tenemos un caso donde nuestra cota supera la cota $2\sqrt{m}$.

b) Por otro lado, si fijamos r_1 , tenemos que

$$\begin{aligned} r_2 &= \frac{r_1(6\sqrt{3} - 4) \pm \sqrt{r_1^2(4 - 6\sqrt{3})^2 - 4r_1^2}}{2} \\ r_2 &= \frac{r_1 \left[(6\sqrt{3} - 4) \pm \sqrt{(4 - 6\sqrt{3})^2 - 4} \right]}{2} \end{aligned}$$

Por lo tanto la cota en el Teorema 2 mejora la cota $2\sqrt{m}$ siempre que

$$\frac{r_1 \left[(6\sqrt{3} - 1) - \sqrt{(1 - 6\sqrt{3})^2 - 4} \right]}{2} \leq r_2 \leq \frac{r_1 \left[(6\sqrt{3} - 1) + \sqrt{(1 - 6\sqrt{3})^2 - 4} \right]}{2}$$

$$r_1(0,11) \leq r_2 \leq r_1(9,29)$$

3. Si tomamos el grafo G con n vértices y consideramos el grafo H-join, $H = G[\bar{K}_t, \dots, \bar{K}_t]$, se tiene que

$$\begin{aligned} \sigma(H) &= \bigcup_{v \in V(G)} (\sigma(\bar{K}_t) \setminus 0) \cup \sigma(tA(G)) \\ &= \{0^{n(t-1)}\} \cup \{t\lambda : \lambda \in \sigma(A)\} \end{aligned}$$

En consecuencia,

$$\mathcal{E}(H) = \sum_{\lambda \in \sigma(G)} |t\lambda| = t\mathcal{E}(G)$$

Así, si suponemos que $0 \in \sigma(G)$ tiene multiplicidad κ entonces $0 \in \sigma(H)$ tiene multiplicidad $n(t-1) + \kappa$. En el cual sabemos que

$$\bar{n} = n(H) = nt,$$

$$\bar{m} = m(H) = mt^2,$$

$$\bar{\kappa} = \kappa(H) = n(t-1) + \kappa,$$

$$\Upsilon_{\bar{n}-\bar{\kappa}}(H) = t^{n-\kappa} \cdot \Upsilon_{n-\kappa}(G)$$

Si H es un (n, m) -grafo con nulidad κ para el cual se tiene la desigualdad en (3.2) entonces el grafo $G = \bigvee_H \{G_j, j \in V(H)\}$ es un (\bar{n}, \bar{m}) -grafo con nulidad $\bar{\kappa}$ que cumple que

$$2\sqrt{\bar{m}} \leq \sqrt{2\bar{m} + (\bar{n} - \bar{\kappa})(\bar{n} - \bar{\kappa} - 1) |\Upsilon_{\bar{n}-\bar{\kappa}}(H)|^{\frac{2}{\bar{n}-\bar{\kappa}}}}.$$

Pues

$$\begin{aligned}
 & \sqrt{2\bar{m} + (\bar{n} - \bar{\kappa})(\bar{n} - \bar{\kappa} - 1)|\Upsilon_{\bar{n}-\bar{\kappa}}(H)|^{\frac{2}{\bar{n}-\bar{\kappa}}}} \\
 &= \sqrt{2mt^2 + (nt - (n(t-1) + \kappa))(nt - (n(t-1) + \kappa) - 1)|(t^{n-k}\Upsilon(G))^{\frac{2}{n-\kappa}}|} \\
 &= \sqrt{2mt^2 + (n - \kappa)(n - \kappa - 1)t^2|\Upsilon(G)^{\frac{2}{n-\kappa}}|} = t\sqrt{2m + (n - \kappa)(n - \kappa - 1)|\Upsilon(G)^{\frac{2}{n-\kappa}}|} \\
 &\geq 2t\sqrt{m} = 2\sqrt{\bar{m}}
 \end{aligned}$$

A continuación se obtiene una sucesión creciente de cotas inferiores para la energía de grafos. En [32], los autores construyen una sucesión creciente, $\{\gamma^{(k)}\}_{k \geq 0}$ de cotas inferiores para λ_1 , donde

$$\begin{aligned}
 \gamma^{(0)} &= \sqrt{\frac{\sum_{i \in V(G)} d^2(i)}{n}} \\
 \gamma^{(1)} &= \sqrt{\frac{\sum_{i \in V(G)} d_2^2(i)}{\sum_{i \in V(G)} d^2(i)}} \\
 &\vdots \\
 \gamma^{(k)} &= \sqrt{\frac{\sum_{i \in V(G)} d_{k+1}^2(i)}{\sum_{i \in V(G)} d_k^2(i)}}.
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Entonces los siguientes resultados fueron obtenidos.

Teorema 5 [32] *Sea G un grafo conexo con mayor autovalor λ_1 y $k \geq 0$. Entonces*

$$\lambda_1 \geq \gamma^{(k)},$$

con igualdad si y sólo si $A^{k+2}(G)\mathbf{e} = \lambda_1^2 A^k(G)\mathbf{e}$.

Teorema 6 [32] *Sea G un grafo conexo, entonces $\{\gamma^{(k)}\}_{k \geq 0}$ es una sucesión creciente*

y

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \gamma^{(k)} = \lambda_1.$$

Con estos resultados se obtuvo el siguiente teorema.

Teorema 7 *Sea G un grafo (n, m) con autovalor más grande ρ y $\eta(G) = \kappa$. Sea G_1 un subgrafo inducido (n_1, m_1) , esto es, cualquier componente conexa con radio espectral ρ tal que $\frac{2m_1}{n_1} \geq 1$. Sea $\{\gamma_1^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ la sucesión creciente definida en (3.3) para G_1 . Entonces $\{h(\gamma_1^{(k)})\}_{k=0}^{\infty}$ es una sucesión creciente convergente a $h(\rho)$ y, para todo $k \geq 0$,*

$$\mathcal{E}(G) \geq \gamma_1^{(k)} + n - \kappa - 1 + \ln |\Upsilon_{n-\kappa}(G)| - \ln \gamma_1^{(k)}. \quad (3.4)$$

En particular, si G_1 es r_1 -regular entonces

$$\mathcal{E}(G) \geq r_1 + n - \kappa - 1 + \ln |\Upsilon_{n-\kappa}(G)| - \ln r_1. \quad (3.5)$$

Si $\rho = 1$ entonces la igualdad se tiene si y sólo si $G = \lfloor \frac{n-\kappa}{2} \rfloor K_2 \cup \kappa K_1$. Por el contrario, si $\rho > 1$ entonces la igualdad se tiene si y sólo si $G = K_{n-\ell} \cup \kappa K_1 \cup \lfloor \frac{\ell-\kappa}{2} \rfloor K_2$ con $\kappa \leq \ell \leq n - 3$.

Demostración.

Observe que $\gamma_1^{(k)} \geq 1$, para todo $k \geq 0$. Esto es una consecuencia del Teorema 6 y que

$$\gamma_1^{(0)} = \sqrt{\frac{\sum_{i \in V(G_1)} d_1^2(i)}{n_1}} \geq \sqrt{\frac{2m_1}{n_1}} \geq 1,$$

dado que $\{\gamma_1^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ es una sucesión creciente y converge a ρ entonces, el primer enunciado se sigue de la continuidad de h . Si la igualdad se tiene en (3.4), entonces para todo autovalor λ distinto de cero (que no es igual al mayor autovalor de G) la igualdad $|\lambda| = 1 + \ln |\lambda|$ ocurre solo cuando $|\lambda| = 1$ implicando que $\lambda = \pm 1$. Adicionalmente, si la igualdad ocurre, $h(\gamma_1^{(k)}) = \mathcal{E}(G) \geq h(\rho) \geq h(\gamma_1^{(k)})$. Por tanto, $\mathcal{E}(G) = h(\rho) = h(\gamma_1^{(k)})$, y estamos en las condiciones del Teorema 4 implicando que G es como en el enunciado. La desigualdad en (3.5) se sigue del hecho de que G_1 es un grafo r_1 -regular, entonces $\gamma_1^{(k)} = r_1$, para todo $k \geq 0$. \square Recordando el resultado en (6) obtenido en [33], el siguiente resultado puede ser obtenido considerando $\kappa = 0$.

Corolario 3 *Sea G un grafo conexo no singular con n vértices. Definimos la sucesión $\{\gamma^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ como en (3.3). Entonces*

$$\mathcal{E}(G) \geq \gamma^{(k)} + n - 1 + \ln |\det A| - \ln \gamma^{(k)}, \quad (3.6)$$

con $k \geq 0$ con igualdad si y solo si $G = K_{n-\ell} \cup \lfloor \frac{\ell}{2} \rfloor K_2$ con $0 \leq \ell \leq n - 2$.

Capítulo 4

Conclusiones

En esta tesis se extendieron cotas inferiores para la energía de grafos no singulares a cotas para la energía de matrices y de grafos con nulidad $\kappa \geq 0$. Las constantes requeridas para estas cotas se pueden obtener a través de elementos ya conocidos, relacionados con el grafo y el polinomio característico de su matriz de adyacencia. Esto permitirá ampliar el campo de aplicación de las cotas inferiores mencionadas. En el capítulo 3, se presentó una sucesión de cotas inferiores que converge a las cotas obtenidas en el capítulo 2, las cotas en esta sucesión son en función de invariantes estructurales del grafo.

Los métodos usados en las demostraciones de los resultados obtenidos nos sugieren que estos pueden ser usados para buscar nuevas cotas superiores de la energía relacionada con la matriz de adyacencia, así como trabajar en busca de cotas tanto superiores como inferiores para la energía de otro tipo de matrices relacionadas con el grafo, como por ejemplo la matriz Laplaciana.

Bibliografía

- [1] E. Andrade, J. Carmona, G. Infante, M. Robbiano. New lower bounds for the energy of matrices and graphs. Submitted arXiv:1903.01326. ILAS 2019.
- [2] N. Agudelo, J. Rada. Lower bounds of Nikiforov's energy over digraphs, *Linear Algebra Appl.* 494 (2016): 156-164.
- [3] M. Agueiras, M. Robbiano, A. Bonifacio. An improved upper bound of the energy of some graphs and matrices. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 74 (2015) 307-320.
- [4] E. Andrade, M. Robbiano, B. San Martín. A lower bound for the energy of symmetric matrices and graphs. *Linear Algebra Appl.* 513 (2017) 264-275.
- [5] M. Aouchiche, P. Hansen. A survey of Nordhaus-Gaddum type relations. *Discret Appl. Math* 161 (2013) 466-546.
- [6] F. Ashraf, B. Tayfeh-Rezaie. Nordhaus-Gaddum type inequalities for Laplacian and signless Laplacian eigenvalues. *The Electronic Journal of Combinatorics* 21 (3) (2014) 3-6.
- [7] R. Balakrishnan, K. Ranganathan. *A Textbook Of Graph Theory*. Springer Science+Business Media New York 2012.
- [8] Ş. B. Bozkurt Altındağ, D. Bozkurt. Lower bounds for the energy of (bipartite) graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 77 (2017): 9-14.

- [9] R. Bru, R. Cantó, R. Soto, A. M. Urbano. A Brauer's theorem and related results. *Cent. Eur. J. Math.* 10(1), (2012) 312-321.
- [10] G. Caporossi , D. Cvetković , I. Gutman , P. Hansen , Variable neighborhood search for extremal graphs. 2. Finding graphs with extremal energy, *J. Chem. Inf. Comput. Sci* 39 (1999) 984–996 .
- [11] D. M. Cardoso, M. A. de Freitas, E. A. Martins, M. Robbiano, Spectra of graphs obtained by a generalization of the join graph operation, *Discrete Mathematics* **313** (2013) 733–741.
- [12] J. Carmona, I. Gutman, N.J. Tamblay, M. Robbiano, A decreasing sequence of upper bounds for the Laplacian energy of a tree. *Linear Algebra Appl.* 446 (2014) 304-313.
- [13] H. Choi, K.Nakajima, Chong S. Rim, Graph bipartization and via minimization. *SIAM J. Disc. Math.*, Vol. 2, No. 1, (February 1989) 38-47.
- [14] F. Chung. *Spectral Graph Theory*, Am. Math. Soc., Providence, 1997.
- [15] C.A. Coulson, B. O'Leary, R.B. Mallion, *Hückel Theory for Organic Chemists* (Academic,London, 1978).
- [16] P. Csikvári. On a conjecture of V. Nikiforov. *Discrete Mathematics* 309 (2009) 4522-4526.
- [17] D. Cvetković, M. Doob and H. Sachs. *Spectra of Graphs - Theory and Application*. Academic Press, New York, 1980.
- [18] D. Cvetković, P. Rowlinson, S. Simić, *An Introduction to the Theory of Graph Spectra*, CambridgeUniv. Press, Cambridge, 2010.
- [19] D. Cvetković, P. Rowlinson, S. Simić. Signless Laplacians of finite graphs. *Lin. Algebra Appl.* 423 (2007) 155–171.

- [20] K. Das , S.A. Mojallal , I. Gutman , Improving McClellands lower bound for energy, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 70 (2013) 663–668.
- [21] M.J.S. Dewar, The Molecular Orbital Theory of Organic Chemistry (McGraw–Hill, New York, 1969).
- [22] A. Dress and I. Gutman, On the number of walks in a graph, Appl. Math. Lett., 16 (2003) 797–801.
- [23] E. Estrada. The Structure of Complex Networks – Theory and Applications. Oxford Univ. Press, New York, 2012.
- [24] S. Fallat, Yi-Zheng Fan. Bipartiteness and the least eigenvalue of signless Laplacian of graphs. Lin. Algebra Appl. 436 (2012) 3254-3267.
- [25] C. Godsil, G. Royle. Algebraic Graph Theory. 2001. Springer Verlag.
- [26] R. Grone, R. Merris. The Laplacian spectrum of a graph II. SIAM J. Discr. Math. 7 (1994) 221–229.
- [27] R. Grone, R. Merris, V. S. Sunder. The Laplacian spectrum of a graph. SIAM J. Matrix Anal. Appl. 11 (1990) 218–238.
- [28] I. Gutman, The energy of a graph: Old and new results, in: A. Betten, A. Kohnert, R. Laue, A. Wassermann (Eds.), Algebraic Combinatorics and Applications, Springer, Berlin, 2001, pp. 196–211.
- [29] W. Haemers. Interlacing Eigenvalues and Graphs. Linear Algebra Appl, 227-228 (1995) 593-616.
- [30] M. Hofmeister. On the two largest eigenvalues of trees. Linear Algebra and its Appl. 260 45-59 (1997).
- [31] Horn, R., Johnson, C., Matrix Analysis. Cambridge University Press.

- [32] Y. Hou, Z. Tang, C. Woo, On the spectral radius, k-degree and the upper bound of energy in a graph, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 57 (2007) 341–350.
- [33] A. Jahanbani, Lower bounds for the energy of graphs, *AKCE International Journal of Graphs and Combinatorics* Volume 15, Issue 1, April 2018, Pages 88-96.
- [34] S. Ji. On an unsolved problem about the minimal energies of bicyclic graphs, *Int. J. Graph Theory Appl.* 1 (2015): 77-81.
- [35] X. Li, Y. Shi, I. Gutman. *Graph Energy*, Springer, New York, 2012.
- [36] H. Liu, M. Lu, F. Tian. On the spectral radius of graphs with cut edges. *Lin. Algebra Appl* 389 (2004) 139–145.
- [37] H. Liu, M. Lu, F. Tian, Some upper bounds for the energy of graphs, *J. Math. Chem.* 41 (2007), 45–57.
- [38] G. Matsaglia, G. P. H. Styan. Equalities and Inequalities for Ranks of Matrices. *Linear and Multilinear Algebra* 2:3 (2008) 269-292.
- [39] C. A. Marin, J. Monsalve, J. Rada. Maximum and minimum energy trees with two and three branched vertices, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 74 (2015): 285-306.
- [40] B.J. McClelland, Properties of the latent roots of a matrix: The estimation of π -electron energies, *J. Chem. Phys.* 54 (1971) 640–643.
- [41] Meyer, C. *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*. SIAM.
- [42] H.Minc, *Nonnegative Matrices*, Wiley, New York, 1988.

- [43] V. Nikiforov. Eigenvalue problems of Nordhaus-Gaddum type. *Discrete Math.* 307 (2007) 774–780.
- [44] E. A. Nordhaus, J. Gaddum. On complementary graphs. *Amer. Math. Monthly* 63 (1956) 175-177.
- [45] E. Nosal. Eigenvalues of Graphs. Master Thesis. University of Calgary. 1970.
- [46] O. Ore. *The Four-Color Problem*. Academic Press, New York, London, 1967.
- [47] B. Reed, K. Smith and A. Vetta. Finding Odd Cycle Transversals. *Operations Research Letters* 32 (2004) 299-301.
- [48] V. Raman, S. Saurabh, S. Sikdar. Improved Exact Exponential Algorithms for Vertex Bipartization and Other Problems. *Lecture Notes in Computer Science* 3701, 375-389. Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2005.
- [49] T. Terpai. Proof of a conjecture of V. Nikiforov. *Combinatorica* 31 (2011) 739-754.
- [50] T. Tian, W. Yan, S. Li, On the minimal energy of trees with a given number of vertices of odd degree, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 73 (2015): 3-10.
- [51] K. Yates, *Hückel Molecular Orbital Theory* (Academic, New York, 1978)
- [52] A. Yu, M. Lu, F. Tian, On the spectral radius of graphs, *Lin. Algebra Appl.*, 387(2004) 41–49.
- [53] R. R., Wu, Y. Z. Fan. The signless Laplacian spectral radius of graphs with given number of cut edges. *J. Anhui Univ. Sci. Technology (Nat.Sci.)*, 29 (2) (2009) 66-69.