

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

Índice e Energia de Randić

por

Munique dos Santos Lima

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Luiz Emilio Allem
Orientador

Porto Alegre, janeiro de 2023.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

dos Santos Lima, Munique

Índice e Energia de Randić / Munique dos Santos Lima.—
Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2023.

95 p.: il.

Dissertação (mestrado)— Universidade Federal do Rio
Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática
Aplicada, Porto Alegre, 2023.

Orientador: Allem, Luiz Emilio

Dissertação: Matemática Aplicada, Matemática Discreta
Teoria Espectral de Grafos, Matriz de Randić, Índice de Ran-
dić, Energia de Randić

Índice e Energia de Randić

por

Munique dos Santos Lima

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática e Estatística da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Matemática Discreta

Orientador: Prof. Dr. Luiz Emilio Allem

Banca examinadora:

Prof. Dr. Marcelo Fiori
Universidad de la República

Prof. Dr. Elismar da Rosa Oliveira
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Prof. Dr. Vilmar Trevisan
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Dissertação apresentada e aprovada em
Dezembro de 2022.

Prof. Dr. Lucas da Silva Oliveira
Coordenador

AGRADECIMENTOS

Ao meu professor orientador Luiz Emilio Allem, por me receber como sua aluna de mestrado. Agradeço pelas valiosas orientações, pela dedicação, apoio e incentivo que foram tão importantes. Aos demais professores que tive a oportunidade de conhecer, por contribuírem com a minha formação, por toda inspiração e conhecimento compartilhado.

A minha mãe por sempre acreditar em mim, por todo o suporte e amor incondicional. Ao meu pai (*in memoriam*), que se faz presente em todos os dias da minha vida e que me inspira a continuar.

Aos meus colegas por todos os momentos de parceria, estudos e apoio. À Universidade Federal do Rio Grande do Sul pela educação gratuita e de excelência. À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela bolsa de estudos em todo período do curso de mestrado.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	vi
LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS	viii
RESUMO	x
ABSTRACT	xi
1 INTRODUÇÃO	1
2 MATRIZES E ENERGIAS ASSOCIADAS A GRAFOS	6
2.1 Algumas representações matriciais	6
2.2 Energia de matrizes associadas a grafos	12
3 ÍNDICE DE RANDIĆ	16
3.1 Definição e exemplos	16
3.2 Cotas para $R_{-1}(G)$	18
3.3 Efeito de deletar arestas em $R_{-1}(G)$	54
4 MATRIZ DE RANDIĆ	58
4.1 Algumas propriedades da matriz de Randić	58
4.2 Maior autovalor da matriz de Randić	63
5 ENERGIA DE RANDIĆ	67
5.1 Algumas cotas para a energia de Randić	67
5.2 Energia de Randić máxima para grafos desconexos	71

5.3	Energia de Randić máxima para grafos conexos	74
6	SOL DUPLO COM A MAIOR ENERGIA DE RANDIĆ	78
6.1	Polinômio característico dos grafos sol e sol duplo	78
6.2	Sol duplo com a maior energia de Randić	85
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	89
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	95

LISTA DE FIGURAS

2.1	Grafo G .	8
2.2	Grafo H .	10
3.1	Grafo P_n ponderado.	17
3.2	Árvore T_r obtida da estrela $K_{1,r}$.	21
3.3	Árvores com índice de Randić máximo para $n = 9$.	23
3.4	$(t, s + t)$ -sistema centrado em r .	24
3.5	$(k, t, s + k)$ -sistema centrado em R .	25
3.6	Caso (i).	28
3.7	Caso (ii), (a).	29
3.8	Caso (ii), (b).	30
3.9	Grafo G do caso (iii), (a).	32
3.10	Grafo G do caso (iii), $d_x = 1$ e $d_y \leq 4$.	33
3.11	Grafo G do caso (iii), $d_y \geq d_x \geq 2$.	33
3.12	Grafo G do caso (iii), $x \sim y$ e $d_y \geq d_x \geq 2$.	34
3.13	Grafos G do caso (iv) para $t = 1$ e $t = 2$, respectivamente.	36
3.14	Grafo G do caso (v).	37
3.15	Grafos G do caso (vi) com $k = 1$ e $k = 2$, respectivamente.	39
3.16	Grafo G do caso (vii).	40

3.17	Grafo G do caso (viii), (a).	42
3.18	Grafo G do caso (viii), (b).	44
3.19	Sistema $(1, d)$ com $3 \leq d \leq 13$.	46
3.20	Sistema $(2, d)$ com $4 \leq d \leq 13$.	47
3.21	Sistema $(3, d)$ com $5 \leq d \leq 13$.	47
3.22	Sistema $(k, 2, d)$ com $d \geq k + 2$.	47
3.23	Sistema $(k, 3, d)$ com $d \geq k + 1$.	48
3.24	Grafos G e $G - e$, respectivamente.	57
3.25	Grafo G .	57
4.1	Subgrafos induzidos H_1, H_2, H_3 e H_4 , respectivamente.	65
5.1	Grafos com 5 vértices com caminho suspenso.	73
5.2	Exemplos de que $RE(G)$ pode diminuir, aumentar ou permanecer igual quando excluimos arestas.	74
5.3	p -sol.	75
5.4	(p, q) -sol duplo.	76
5.5	Grafos conexos de ordem $n = 7$ até $n = 12$ que possuem a maior energia de Randić, segundo a Conjectura 5.3.2.	76
6.1	p -sol inicializado com $a(v) = \mu - 1$, para todo vértice v .	80
6.2	(p, q) -sol duplo inicializado com $a(v) = \mu - 1$, para todo vértice v .	82

LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS

Lista de Símbolos

ℓ_{ij}	Entrada da linha i e coluna j da matriz Laplaciana normalizada.
$\mathcal{L}(G)$	Matriz laplaciana normalizada do grafo G .
$A(G)$	Matriz de adjacência do grafo G .
a_{ij}	Entrada da linha i e coluna j da matriz de adjacência.
$D(G)$	Matriz diagonal dos graus dos vértices de G .
$D^{p,q}$	Grafo sol duplo de ordem $n = 2(p + q + 1)$.
d_v	Grau do vértice v .
$E_{\mathcal{L}}(G)$	Energia laplaciana normalizada do grafo G .
$E_A(G)$	Energia da matriz de adjacência do grafo G .
$E_L(G)$	Energia laplaciana do grafo G .
I_n	Matriz identidade de ordem n .
K_n	Grafo completo de n vértices.
$K_{p,q}$	Grafo bipartido completo de $p + q$ vértices.
$L(G)$	Matriz laplaciana do grafo G .
l_{ij}	Entrada da linha i e coluna j da matriz Laplaciana.
$N(S)$	Conjunto formado pelos vértices vizinhos do subconjunto S .
P_n	Grafo caminho de n vértices.

$R(G)$	Matriz de Randić do grafo G .
$R_{-1}(G)$	Índice de Randić do grafo G .
$R_{-\frac{1}{2}}(G)$	Índice de ramificação do grafo G .
r_{ij}	Entrada da linha i e coluna j da matriz de Randić.
$RE(G)$	Energia de Randić do grafo G .
S^p	Grafo sol de ordem $n = 2p + 1$.
$tr(M)$	Traço de uma matriz M .
$G \setminus S$	Grafo resultante da exclusão dos vértices do subconjunto S do grafo G .
$G - e$	Grafo resultante da exclusão da aresta e do grafo G .
$u \sim v$	Vértices u e v são adjacentes.

RESUMO

Neste trabalho estudamos os principais resultados sobre o índice e a energia de Randić. Apresentamos a melhor cota superior conhecida do índice de Randić para grafos conexos feita por Cavers, Fallat e Kirkland [11]. Buscamos escrever essa demonstração da melhor forma possível, procurando deixar clara a sua construção, a fim de facilitar o entendimento. Além disso, abordamos o problema da energia de Randić máxima para grafos conexos e desconexos. Para a classe de grafos desconexos, esse problema já está resolvido. Mas, para o caso de grafos conexos, Gutman, Furtula e Bozkurt [23] conjecturaram que os grafos com a maior energia de Randić são os grafos sol e sol duplo. Como contribuição original, mostramos que dentre a classe de grafos dos sóis duplos, o que atinge a maior energia de Randić é o $(\lceil \frac{n-2}{4} \rceil, \lfloor \frac{n-2}{4} \rfloor)$ -sol duplo.

Palavras-chave: Teoria Espectral de Grafos; Matriz de Randić; Energia de Randić; Índice de Randić.

ABSTRACT

In this work we study the main results of the Randić index and energy. We present the best known upper bound of the Randić index for connected graphs given by Cavers, Fallat and Kirkland [11]. We detail this demonstration to facilitate its understanding. Moreover, we approach the problem of the maximum Randić energy for connected and disconnected graphs. For the class of disconnected graphs this problem is already solved. But, for connected graphs, Gutman, Furtula and Bozkurt [23] conjectured that the graphs with largest Randić energy are the sun and the double sun graphs. As original contribution, we prove that among the double suns graphs, the $(\lceil \frac{n-2}{4} \rceil, \lfloor \frac{n-2}{4} \rfloor)$ -double sun attains the largest Randić energy.

Keywords: Spectral Graph Theory; Randić matrix; Randić energy; Randić index.

1 INTRODUÇÃO

A Teoria Espectral de Grafos investiga a relação entre propriedades estruturais de grafos e propriedades espectrais das suas representações matriciais. De acordo com Abreu *et al.* [1], o marco inicial da Teoria Espectral de Grafos foi em 1931, com o trabalho de Hückel [28] em Química Quântica. Mas seu grande desenvolvimento se deu a partir da tese de doutorado de Cvetković [15], em 1971. Desde então, é uma área que desperta o interesse de pesquisadores do mundo todo e inúmeros trabalhos já foram publicados nesse âmbito. O livro *Spectra of Graphs* de Cvetković, Doob e Sachs [14] de 1980 foi o primeiro livro sobre Teoria Espectral de Grafos publicado e reúne quase todos os resultados relacionados à área publicados antes de 1978.

Dentre as representações matriciais de grafos mais importantes, destacamos a matriz de adjacência $A(G)$, vastamente estudada e com ampla bibliografia. A matriz de adjacência é formada por zeros e uns e é construída a partir das relações de adjacência entre os vértices do grafo G . Entre outras matrizes associadas a grafos estão a matriz Laplaciana $L(G)$, a matriz Laplaciana normalizada $\mathcal{L}(G)$ e a matriz de Randić $R(G)$, que tem papel fundamental neste trabalho. Para cada uma dessas matrizes, podemos atribuir seu respectivo espectro, que está diretamente relacionado com as propriedades estruturais do grafo.

A primeira referência à matriz de Randić foi no livro de Cvetković, Doob e Sachs [14], que mencionamos anteriormente, onde foi denotada por A^* , mas sem referência a Randić. Já em 2005, foi definida por Rodríguez em [38] sob o nome de matriz de adjacência ponderada. No mesmo ano, Rodríguez e Sigarreta em [39] definiram a mesma matriz sob o nome de matriz de grau adjacência. Em 2010, foi definida sob o nome de matriz de Randić por Bozkurt *et al.* em [8]. A **matriz de Randić** é uma matriz quadrada simétrica de ordem n e têm as entradas definidas

por

$$r_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}}, & \text{se } v_i \text{ e } v_j \text{ são adjacentes,} \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (1.1)$$

onde d_i e d_j denotam os graus dos vértices v_i e v_j , respectivamente.

A definição da matriz de Randić foi motivada pelo índice de ramificação (*branching index* em inglês) proposto por Milan Randić [?] em 1975. Esse índice é um descritor de estrutura molecular (ou índice topológico), que é um parâmetro numérico associado a uma estrutura química que correlaciona essa à propriedades físicas, químicas e biológicas. O **índice de ramificação**, é definido por

$$R_{-\frac{1}{2}}(G) = \sum_{u \sim v} \frac{1}{\sqrt{d_u d_v}}, \quad (1.2)$$

onde G é um grafo molecular e a soma é feita sobre todas as arestas uv de G . Um grafo molecular representa a estrutura bidimensional de uma molécula. Os vértices desse grafo correspondem aos átomos da molécula e as arestas correspondem às ligações químicas entre os átomos.

O índice de ramificação é um índice topológico baseado nos graus dos vértices de G . Em [?], Randić estava preocupado com o problema de caracterizar o grau de ramificação de hidrocarbonetos¹. Mas, de acordo com ele, não existia um consenso de o que deveria ser entendido como ramificação molecular. Assim, a ideia de Randić foi ordenar componentes de séries homólogas² em uma sequência de ramificação de esqueletos moleculares e em seguida, associar cada estrutura individual com um índice. Para obter uma ordenação de ramificação, Randić analisou as relações de adjacências do grafo molecular e classificou as arestas do grafo de acordo

¹Hidrocarbonetos são compostos químicos constituídos por átomos de carbono e hidrogênio, onde os átomos são unidos por ligação covalente do tipo simples, dupla ou tripla.

²Em química, série homóloga é uma série de compostos orgânicos com propriedades químicas similares, que se diferenciam pela quantidade de grupos metileno (CH_2).

com as valências das extremidades, isto é, de acordo com os graus dos vértices. Desta forma, definiu o índice de ramificação como a soma de todos os pesos de todas as arestas do grafo molecular, como na expressão (1.2).

Em 1998, Bollobás e Erdős [6] generalizaram o índice de ramificação de Randić substituindo $-\frac{1}{2}$ por um número real α não nulo, isto é,

$$R_\alpha(G) = \sum_{x \sim y} (d_x d_y)^\alpha. \quad (1.3)$$

Esse índice generalizado é chamado de **índice geral de Randić**. Nesta dissertação vamos trabalhar com $\alpha = -1$, vamos chamá-lo simplesmente de **índice de Randić** e denotá-lo por $R_{-1}(G)$.

Em 1931, o físico-químico Hückel [28] associou a molécula de um hidrocarboneto a um grafo e usou os autovalores desse grafo (isto é, os autovalores da matriz de adjacência) para representar os níveis de energia de elétrons π . Em 1978, Gutman [20], motivado pelo trabalho de Hückel em Química Quântica, foi o primeiro a definir a energia de um grafo como a soma dos valores absolutos dos autovalores da matriz de adjacência. Assim, a **energia da matriz de adjacência** de um grafo G é dada por

$$E_A(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|, \quad (1.4)$$

onde λ_i são os autovalores da matriz de adjacência do grafo G . A partir daí, a energia de grafos se tornou um tópico popular de pesquisa tanto em Química Matemática quanto em Teoria Espectral de Grafos. De acordo com o *Survey of Graph Energies* [22], o conceito de energia foi estendido a outras matrizes e de 1996 a 2016 mais de 600 artigos foram publicados.

Visto que para determinar a energia é necessário conhecer os autovalores da matriz em questão, e para isso, é preciso encontrar as raízes de um polinômio de grau n , uma das questões fundamentais no estudo da energia é estimar limites

inferiores e superiores para esse parâmetro. Um dos primeiros limites para a energia da matriz de adjacência foi estabelecido por McClelland em [33] e é dado por $E_A(G) \leq \sqrt{2mn}$, onde m é o número de arestas do grafo G . Nesse sentido, muitos pesquisadores buscam por grafos que atingem essas cotas, e além disso, buscam melhorar os limites que já são conhecidos. Recomendamos a leitura de [30] para conhecer outros limites para a energia da matriz de adjacência.

O problema de encontrar grafos com energia mínima e máxima tem sido amplamente estudado para diversas matrizes. Usualmente, costuma-se olhar para determinadas classes de grafos e encontrar, dentro delas, quais são os grafos com mínima ou máxima energia. Gutman [19], foi o primeiro a provar um resultado desse tipo. Para a matriz de adjacência, ele mostrou que dentre as árvores de n vértices, a estrela S_n tem menor energia e o caminho P_n tem maior energia. O problema de caracterizar o grafo com a energia da matriz de adjacência máxima dentre todos os grafos de ordem n ainda está em aberto.

Em 2010, Bozkurt *et al.* [8] definiram a **energia de Randić** associada a matriz de Randić de um grafo G como

$$RE(G) = \sum_{i=1}^n |\rho_i|, \quad (1.5)$$

onde ρ_i são os autovalores da matriz de Randić do grafo G . O limite inferior da energia de Randić para grafos com pelo menos uma aresta é 2. Além disso, o grafo que atinge essa cota é formado por um grafo multipartido completo e todas as outras componentes (se houver) são vértices isolados. Para além do trabalho [8], que introduziu a energia de Randić, destacamos outros artigos da literatura sobre a energia de Randić, são alguns exemplos [23], [16], [4], [3] e [2].

Neste trabalho reunimos os principais resultados sobre a matriz de Randić, o índice de Randić e sobre a energia de Randić. Além disso, discutimos o problema da energia Randić máxima para grafos conexos e desconexos. Esse problema já está resolvido para a classe de grafos desconexos e sabemos quais são os grafos

maximais. Mas, para o caso de grafos conexos, existe uma Conjectura de que o grafo com a maior energia de Randić é uma árvore. Mais precisamente, se n for ímpar essa árvore é o grafo sol e se n for par é o grafo sol duplo. Além disso, contribuímos mostrando que dentre a classe de grafos dos sóis duplos, o que atinge a maior energia de Randić é o $(\lceil \frac{n-2}{4} \rceil, \lfloor \frac{n-2}{4} \rfloor)$ -sol duplo.

Optamos por não fazer um Capítulo de preliminares neste trabalho, pois os conceitos clássicos de Teoria de Grafos e de Teoria Espectral de Grafos podem ser facilmente encontrados na literatura. Deixamos como indicação de leitura para Teoria de Grafos os livros de Bollóbas [7] e de Diestel [17]. E para Teoria Espectral de Grafos nossas indicações são os livros de Godsil e Royle [18] e de Beineke, Wilson e Cameron [5]. As definições que consideramos importantes estão dispostas ao longo desta dissertação.

A organização deste trabalho está distribuída em sete capítulos, sendo essa Introdução o primeiro deles. No Capítulo 2, apresentamos algumas matrizes associadas a grafos e as suas respectivas energias. O Capítulo 3 é destinado ao índice de Randić, suas propriedades e cotas. No Capítulo 4, abordamos alguns tópicos sobre a matriz de Randić. O Capítulo 5 é destinado a energia de Randić, onde apresentamos cotas para tal e discutimos o problema de encontrar o grafo com energia máxima. Reservamos o Capítulo 6 para calcular o polinômio característico dos grafos sol e sol duplo. Além disso, mostramos que o $(\lceil \frac{n-2}{4} \rceil, \lfloor \frac{n-2}{4} \rfloor)$ -sol duplo tem a maior energia de Randić dentre os sóis duplos. No último Capítulo apresentamos nossas considerações finais e trabalhos futuros.

2 MATRIZES E ENERGIAS ASSOCIADAS A GRAFOS

Como falamos na Introdução deste trabalho, existem diversas matrizes que estão naturalmente associadas a grafos. Neste Capítulo, vamos apresentar quatro dessas representações matriciais, a matriz de adjacência, a matriz Laplaciana, a matriz Laplaciana normalizada e a matriz de Randić. Mesmo que já definimos a matriz de adjacência e a matriz de Randić na Introdução, apresentaremos suas definições novamente por completude.

Propriedades e resultados sobre as matrizes de adjacência, Laplaciana e Laplaciana normalizada podem ser encontrados com facilidade na literatura e por isso não abordamos aqui. Para a matriz de adjacência e Laplaciana, deixamos como recomendação a leitura de [1]. Mais informações sobre o espectro e propriedades da matriz Laplaciana normalizada são encontradas na tese do Cavers [10]. Já para a matriz de Randić, dedicamos o Capítulo 4 para falar um pouco mais sobre suas propriedades e resultados. Ainda neste Capítulo, vamos apresentar a energia associada a cada uma dessas matrizes.

2.1 Algumas representações matriciais

Começamos apresentando algumas notações. Neste trabalho, todos os grafos $G = (V, E)$ são simples, isto é, sem laços, sem arestas múltiplas e sem orientação. V é o conjunto de vértices e E é conjunto de arestas do grafo G . Vamos assumir que $V = \{v_1, \dots, v_n\}$ e que o número total de arestas de G é m . O grau de um vértice v_i será denotado por d_{v_i} ou por d_i .

Para cada matriz quadrada $M(G)$ de ordem n associada a G , podemos calcular seu polinômio característico e seus autovalores. Iniciaremos definindo

o polinômio característico. Chamaremos de M -polinômio característico do grafo G o seguinte polinômio

$$\phi_M(G, \beta) = \det(\beta I_n - M),$$

onde I_n denota a matriz identidade de ordem n .

Sempre que estiver claro no contexto o grafo do qual estamos falando, denotaremos $M(G)$ simplesmente por M . Além disso, chamaremos de M -espectro de G o conjunto

$$S_M(G) = \{\beta_1^{(m(\beta_1))}, \dots, \beta_j^{(m(\beta_j))}\},$$

formado pelos autovalores distintos de $M(G)$, com suas respectivas multiplicidades $m(\beta_1), \dots, m(\beta_j)$.

Começaremos apresentando a matriz de adjacência, uma das mais conhecida e estudada, que tem vasta bibliografia. A matriz de adjacência, denotada por $A(G)$, é formada por zeros e uns e é construída a partir das relações de adjacência entre os vértices do grafo G .

Definição 2.1.1. A **matriz de adjacência** associada ao grafo G , é uma matriz quadrada de ordem n , cujas entradas são dadas por

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

$A(G)$ é uma matriz real, simétrica e todos os seus autovalores são reais. Denotaremos por $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ os autovalores de $A(G)$. Além disso, a soma dos seus autovalores é zero, pois seu traço é zero.

Na sequência, apresentamos a definição da matriz Laplaciana. A matriz Laplaciana, denotada por $L(G)$, também é uma matriz simétrica e com entradas reais. Em $L(G)$, os graus dos vértices aparecem na diagonal da matriz.

Definição 2.1.2. A **matriz Laplaciana** associada ao grafo G é uma matriz quadrada de ordem n , cujas entradas são definidas como

$$l_{ij} = \begin{cases} d_{v_i}, & \text{se } i = j, \\ -1, & \text{se } i \neq j \text{ e } v_i \text{ é adjacente a } v_j, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

onde d_{v_i} é o grau do vértice v_i .

$L(G)$ é uma matriz semidefinida positiva e tem todos os autovalores maiores ou iguais a zero. Além disso, 0 é sempre autovalor da matriz Laplaciana e sua multiplicidade é igual ao número de componentes conexas do grafo. Denotaremos por $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ os autovalores de $L(G)$.

A matriz Laplaciana e a matriz de adjacência estão intimamente relacionadas. Podemos escrever L como

$$L = D - A, \tag{2.1}$$

onde D é a matriz diagonal dos graus dos vértices de G .

Exemplo 2.1.1. *Seja G o grafo da Figura 2.1.*

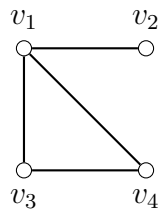


Figura 2.1: Grafo G .

A matriz de adjacência e a matriz Laplaciana do grafo G estão apresentadas abaixo. Note que, a linha i e a coluna i correspondem as adjacências do

vértice v_i , onde $i \in \{1, \dots, n\}$.

$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad e \quad L(G) = \begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Seu A -polinômio característico é $\phi_A(G, \lambda) = \lambda^4 - 4\lambda^2 - 2\lambda + 1$ e seu A -espectro é $S_A(G) = \{-1.481, -1, 0.311, 2.17\}$. Já para $L(G)$, temos $\phi_L(G, \alpha) = \alpha^4 - 8\alpha^3 + 19\alpha^2 - 12\alpha$ e $S_L(G) = \{0, 1, 3, 4\}$.

Veremos agora a definição da matriz Laplaciana normalizada, denotada por $\mathcal{L}(G)$.

Definição 2.1.3. A **matriz Laplaciana normalizada** associada ao grafo G é uma matriz quadrada de ordem n , cujas entradas são dadas por

$$\ell_{ij} = \begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{d_i d_j}}, & \text{se } v_i \text{ e } v_j \text{ são adjacentes,} \\ 1, & \text{se } i = j \text{ e } d_j \neq 0, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Os autovalores de $\mathcal{L}(G)$ são todos não negativos, mais especificamente estão no intervalo $[0, 2]$. Além disso, 0 também é sempre um autovalor dessa matriz e sua multiplicidade também indica o número de componentes conexas do grafo G . Denotaremos por μ_1, \dots, μ_n os autovalores de $\mathcal{L}(G)$.

Para grafos sem vértices isolados, podemos escrever \mathcal{L} como

$$\mathcal{L} = D^{-\frac{1}{2}} L D^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.2)$$

onde $D^{-\frac{1}{2}}$ é a matriz diagonal com entradas não nulas e iguais a $d_i^{-\frac{1}{2}}$, $i \in \{1, \dots, n\}$ e L é a matriz Laplaciana de G . Note que a relação definida em (2.2) só é válida para grafos sem vértices isolados, pois caso contrário, $D^{-\frac{1}{2}}$ não estaria bem definida.

A definição da matriz de Randić foi motivada pelo índice de Randić, que abordaremos com mais detalhes no Capítulo 3. Sua definição foi proposta por Bozkurt *et al.* [8] em 2010.

Definição 2.1.4. A **matriz de Randić** associada ao grafo G , denotada por $R(G)$, é uma matriz quadrada simétrica de ordem n e têm as entradas definidas por

$$r_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}}, & \text{se } v_i \text{ e } v_j \text{ são adjacentes,} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.3)$$

Denotaremos por ρ_1, \dots, ρ_n os autovalores de $R(G)$. Se G não tem vértices isolados, podemos escrever a matriz de Randić como

$$R = D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.4)$$

onde $D^{-\frac{1}{2}}$ é a matriz diagonal com entradas não nulas e iguais a $d_{v_i}^{-\frac{1}{2}}$, $i \in \{1, \dots, n\}$ e A é a matriz de adjacência de G .

Exemplo 2.1.2. Seja H o grafo da Figura 2.2.

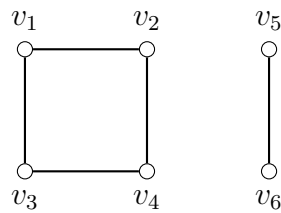


Figura 2.2: Grafo H .

Sua matriz Laplaciana normalizada e sua matriz de Randić são dadas

por

$$\mathcal{L}(H) = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & 1 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad e \quad R(H) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Seu \mathcal{L} -polinômio característico é $\phi_{\mathcal{L}}(H, \mu) = \mu^6 - 6\mu^5 + 13\mu^4 - 12\mu^3 + 4\mu^2$ e seu \mathcal{L} -espectro é $S_{\mathcal{L}}(H) = \{0^{(2)}, 1^{(2)}, 2^{(2)}\}$. E para $R(H)$, temos que $\phi_R(H, \rho) = \rho^6 - 2\rho^4 + \rho^2$ e $S_R(H) = \{-1^{(2)}, 0^{(2)}, 1^{(2)}\}$.

Se G é um grafo sem vértices isolados, das relações (2.2) e (2.4), a matriz Laplaciana normalizada e a matriz Randić de G estão relacionadas como

$$\mathcal{L} = I_n - R. \quad (2.5)$$

A equação (2.5) fornece uma relação entre os autovalores de $\mathcal{L}(G)$ e de $R(G)$ de um grafo G sem vértices isolados. Seja λ autovalor de uma matriz quadrada M de ordem n associado ao autovetor $\vec{v} \neq \vec{0}$, isto é, $M\vec{v} = \lambda\vec{v}$. Seja I a matriz identidade de ordem n . Temos que,

$$(I + M)\vec{v} = I\vec{v} + M\vec{v} = \vec{v} + \lambda\vec{v} = (1 + \lambda)\vec{v},$$

isto é, \vec{v} é autovetor de $I + M$ associado ao autovalor $1 + \lambda$. Dessa forma, concluímos que se $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ são autovalores de M , então $\lambda_1 + 1, \dots, \lambda_n + 1$ são autovalores de $M + I$. Portanto, os autovalores de \mathcal{L} e de R de um grafo G sem vértices isolados estão relacionados da seguinte maneira

$$\mu_i = 1 - \rho_i, \quad (2.6)$$

para $i \in \{1, \dots, n\}$.

No exemplo seguinte, apresentamos o \mathcal{L} -espectro e o R -espectro do grafo completo K_n e do grafo bipartido completo $K_{p,q}$.

Exemplo 2.1.3. *Seja G o grafo completo com n vértices K_n . Os autovalores da matriz Laplaciana normalizada de K_n são*

$$S_{\mathcal{L}}(K_n) = \left\{ 0, \left(\frac{n}{n-1} \right)^{(n-1)} \right\},$$

dessa forma, os autovalores da matriz de Randić de K_n são

$$S_R(K_n) = \left\{ 1, \left(-\frac{1}{n-1} \right)^{(n-1)} \right\}.$$

Se G for o grafo bipartido completo $K_{p,q}$, temos que os autovalores da matriz Laplaciana normalizada de $K_{p,q}$ são

$$S_{\mathcal{L}}(K_{p,q}) = \{0, 1^{(p+q-2)}, 2\}$$

então, os autovalores da matriz de Randić de $K_{p,q}$ são

$$S_R(K_{p,q}) = \{-1, 0^{(p+q-2)}, 1\}.$$

Essa relação entre os autovalores da matriz Laplaciana normalizada e da matriz de Randić nos fornecerá outra relação, que diz respeito às energias associadas a essas matrizes. Veremos na Seção seguinte que se G é um grafo sem vértices isolados, a energia Laplaciana normalizada e a energia de Randić de G são iguais.

2.2 Energia de matrizes associadas a grafos

A energia de grafos foi introduzida por Gutman em seu artigo “The energy of a graph” [20] publicado em 1978 e se tornou um tópico muito estudado na

Química Matemática e na Teoria Espectral de Grafos. Ele definiu a energia de um grafo G , baseada nos autovalores da sua matriz de adjacência.

Definição 2.2.1. A energia da matriz de adjacência de um grafo G é dada por

$$E_A(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|. \quad (2.7)$$

A partir daí, muitos trabalhos foram publicados com resultados e propriedades sobre essa energia, alguns são [21], [19] e [30]. Diante do sucesso, uma ideia natural foi procurar energias associadas a outras matrizes. A primeira candidata foi a matriz Laplaciana. Então, em 2006 Gutman e Zhou [25] definiram a energia Laplaciana conforme a definição abaixo.

Definição 2.2.2. A energia da matriz Laplaciana de um grafo G é dada por

$$E_L(G) = \sum_{i=1}^n \left| \alpha_i - \frac{2m}{n} \right|, \quad (2.8)$$

onde m é o número de arestas de G .

Depois da energia Laplaciana, outras energias associadas a diferentes matrizes foram sendo definidas, como a energia da matriz distância, energia da matriz Laplaciana sem sinal, energia da matriz Laplaciana normalizada, energia de Randić, entre muitas outras. Em [22], Gutman e Furtula citam mais de 60 diferentes energias de grafos. Nikiforov [35], em 2007, estendeu o conceito de energia para qualquer matriz. A primeira matriz não quadrada à qual o conceito de Nikiforov foi aplicado foi a matriz de incidência. A definição de Nikiforov envolve os valores singulares da matriz M , que são as raízes quadradas dos autovalores de MM^* , onde M^* é a conjugada transposta de M .

Definição 2.2.3. Seja M uma matriz $p \times q$ com entradas reais, a energia de M é dada por

$$E_M(G) = \sum_{i=1}^p \sigma_i(M) \quad (2.9)$$

onde $\sigma_1(M), \sigma_2(M), \dots, \sigma_p(M)$ são os valores singulares de M .

Em 2008, Consonni e Todeschini [13] definiram a **energia de qualquer matriz real simétrica** $M_{n \times n}$ como

$$E_M(G) = \sum_{i=1}^n \left| \xi_i(M) - \frac{\text{tr}(M)}{n} \right|, \quad (2.10)$$

onde ξ_1, \dots, ξ_n são os autovalores de M e $\text{tr}(M)$ denota o traço de M .

Em [11], Cavers *et al.* (2010) definiram a **energia Laplaciana normalizada** de um grafo G sem vértices isolados como

$$E_{\mathcal{L}}(G) = \sum_{i=1}^n |\mu_i - 1|. \quad (2.11)$$

A **energia de Randić** associada a matriz de Randić de um grafo G é definida como

$$RE(G) = \sum_{i=1}^n |\rho_i|. \quad (2.12)$$

Note que a energia definida em (2.10) unifica as energias associadas a diferentes matrizes. Isto é, conseguimos obter a energia da matriz de adjacência, a energia Laplaciana, a energia Laplaciana normalizada e a energia de Randić usando a equação (2.10), pois todas são matrizes quadradas, reais e simétricas. Para $A(G)$ e $R(G)$ temos que $\text{tr}(A) = 0$ e $\text{tr}(R) = 0$, o que resulta em (2.7) e (2.12). Já para $L(G)$ temos que $\text{tr}(L) = 2m$ e para $\mathcal{L}(G)$ temos que $\text{tr}(\mathcal{L}) = n$, então seguem as fórmulas em (2.8) e (2.11).

Como mencionamos na Seção anterior, se G é um grafo com n vértices e sem vértices isolados, temos o seguinte resultado sobre as energias de Randić e Laplaciana normalizada

$$E_{\mathcal{L}}(G) = RE(G). \quad (2.13)$$

De fato, basta usar que os autovalores de $\mathcal{L}(G)$ são da forma $\mu_i = 1 - \rho_i$, como vimos em (2.6), assim temos que

$$E_{\mathcal{L}}(G) = \sum_{i=1}^n |1 - \rho_i - 1| = \sum_{i=1}^n |-\rho_i| = \sum_{i=1}^n |\rho_i| = RE(G).$$

Essa relação pode facilitar o cálculo da energia de Randić para algumas classes de grafos, visto que podemos usar o que já se sabe sobre os autovalores da matriz Laplaciana normalizada.

Exemplo 2.2.1. *No Exemplo 2.1.3, apresentamos o \mathcal{L} -espectro e o R -espectro do grafo completo K_n . Temos que a energia de Randić de K_n é 2,*

$$RE(K_n) = E_{\mathcal{L}}(K_n) = |1| + \left| -\frac{1}{n-1} \right| (n-1) = 2.$$

Também apresentamos o \mathcal{L} -espectro e o R -espectro do grafo bipartido completo $K_{p,q}$. Para $K_{p,q}$ também temos que

$$RE(K_{p,q}) = E_{\mathcal{L}}(K_{p,q}) = |-1| + |1| = 2.$$

Veremos no Capítulo 5 que a cota inferior para a energia de Randić de grafos com pelo menos uma aresta é 2 e a igualdade é alcançada se, e somente se, G é formado por um grafo multipartido completo e todas as outras componentes (se houver) são vértices isolados. No Capítulo seguinte, vamos ver as melhores cotas conhecidas para o índice de Randić para grafos conexos e também para árvores.

3 ÍNDICE DE RANDIĆ

Neste Capítulo, estudaremos o índice de Randić $R_{-1}(G)$ para certas classes de grafos e também apresentaremos cotas para esse parâmetro. Vamos demonstrar a melhor cota conhecida de $R_{-1}(G)$ para grafos conexos de ordem $n \geq 3$ (Teorema 3.2.6). Terminamos observando como $R_{-1}(G)$ muda quando uma aresta é excluída de G .

3.1 Definição e exemplos

Como vimos na Introdução, em 1975, Milan Randić [?], propôs o índice de ramificação de um grafo molecular G , definido por

$$R_{-\frac{1}{2}}(G) = \sum_{x \sim y} \frac{1}{\sqrt{d_x d_y}},$$

onde a soma é feita sobre todas as arestas xy de G .

Já mencionamos que nesta dissertação iremos trabalhar com $\alpha = -1$ na expressão do índice geral de Randić, que apresentamos na Introdução. Vamos usá-lo frequentemente ao longo deste trabalho, pois este está associado a energia de Randić, como veremos no Lema 5.1.1 do Capítulo 5. Chamaremos então de **índice de Randić** a seguinte expressão

$$R_{-1}(G) = \sum_{x \sim y} \frac{1}{d_x d_y}. \quad (3.1)$$

Podemos reescrever a soma (3.1) como uma soma dupla, usando a seguinte equação

$$2 \sum_{x \sim y} f(x, y) = \sum_{y \in V} \sum_{\substack{x \\ x \sim y}} f(x, y)$$

onde $\sum_{\substack{x \\ x \sim y}} f(x, y)$ representa a soma sobre todas as arestas xy em G que são incidentes a um vértice fixo y no conjunto de vértices V de G . Assim, podemos reescrever (3.1)

como

$$R_{-1}(G) = \frac{1}{2} \sum_{y \in V} \frac{1}{d_y} \sum_{\substack{x \\ x \sim y}} \frac{1}{d_x}. \quad (3.2)$$

Note que a quantidade $R_{-1}(G)$ em (3.1) pode ser obtida colocando um peso de $\frac{1}{d_x d_y}$ em cada aresta xy de G e em seguida somando os pesos sobre todas as arestas de G . Alternativamente, usando (3.2), $R_{-1}(G)$ pode ser encontrado colocando um peso de

$$\frac{1}{2d_y} \sum_{\substack{x \\ x \sim y}} \frac{1}{d_x}$$

em cada vértice $y \in G$, que chamamos de peso do vértice y , e então somando os pesos sobre todos os vértices de G .

Para algumas classes de grafos, conseguimos estimar de forma fácil $R_{-1}(G)$ usando um grafo ponderado por arestas, como descrito acima. Nos exemplos a seguir, vamos calcular $R_{-1}(G)$ para o grafo caminho, bipartido completo e regular.

Exemplo 3.1.1. *Seja G o caminho P_n de n vértices. As duas arestas dos extremos de P_n têm peso $\frac{1}{2}$, já as demais arestas têm peso $\frac{1}{4}$. Assim, como P_n tem $n - 1$ arestas, há $n - 3$ arestas com peso $\frac{1}{4}$ e duas arestas com peso $\frac{1}{2}$, conforme a Figura 3.1. Então,*

$$R_{-1}(P_n) = (n - 3) \cdot \frac{1}{4} + 2 \cdot \frac{1}{2} = \frac{n + 1}{4}.$$

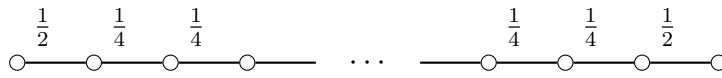


Figura 3.1: Grafo P_n ponderado.

Exemplo 3.1.2. *Seja G o grafo bipartido completo $K_{p,q}$. Note que todas as arestas de $K_{p,q}$ terão peso $\frac{1}{pq}$. Assim, como há pq arestas, temos que*

$$R_{-1}(K_{p,q}) = pq \cdot \frac{1}{pq} = 1.$$

Exemplo 3.1.3. *Seja G um grafo r -regular de ordem n . Note que todas as arestas de G terão peso $\frac{1}{r^2}$. Assim, como há $\frac{nr}{2}$ arestas, temos que*

$$R_{-1}(G) = \frac{nr}{2} \cdot \frac{1}{r^2} = \frac{n}{2r}.$$

Em particular, para o grafo completo K_n temos

$$R_{-1}(K_n) = \frac{n}{2(n-1)}.$$

3.2 Cotas para $R_{-1}(G)$

Nesta Seção, serão apresentados alguns limites inferiores e superiores para $R_{-1}(G)$. No Teorema abaixo, Shi [40] obteve cotas para $R_{-1}(G)$ considerando os graus mínimo e máximo de um grafo G .

Teorema 3.2.1. *Seja G um grafo com n vértices e sem vértices isolados. Sejam d_{min} e d_{max} o grau mínimo e o grau máximo de G , respectivamente. Então,*

$$\frac{n}{2d_{max}} \leq R_{-1}(G) \leq \frac{n}{2d_{min}}.$$

Demonstração. Por (3.2), temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &= \frac{1}{2} \sum_{y \in V} \frac{1}{d_y} \sum_{x \sim y} \frac{1}{d_x} \\ &\leq \frac{1}{2} \sum_{y \in V} \frac{1}{d_y} \sum_{x \sim y} \frac{1}{d_{min}} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{y \in V} \frac{1}{d_y} \frac{d_y}{d_{min}} \\ &= \frac{n}{2d_{min}}. \end{aligned}$$

Similarmente,

$$R_{-1}(G) \geq \frac{1}{2} \sum_{y \in V} \frac{1}{d_y} \sum_{x \sim y} \frac{1}{d_{max}} = \frac{n}{2d_{max}}.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, G é regular, pois $d_{min} = d_{max}$. \square

Se $G = G_1 \cup G_2 \cup \dots \cup G_p$ e $G_1 \cong G_2 \cong \dots \cong G_p$, então escrevemos $G = pG_1$ e dizemos que G é o grafo formado por p cópias de G_1 ou que G é a união disjunta de p grafos G_1 . Além disso, se $G = G_1 \cup G_2 \cup \dots \cup G_k$ é um grafo com k componentes, então

$$R_{-1}(G) = \sum_{i=1}^k R_{-1}(G_i).$$

No Teorema a seguir, Li e Yang [31] estabeleceram cotas para $R_{-1}(G)$ em termos da ordem do grafo G .

Teorema 3.2.2. *Seja G um grafo de ordem n e sem vértices isolados. Então,*

$$\frac{n}{2(n-1)} \leq R_{-1}(G) \leq \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor,$$

com igualdade na cota inferior se, e somente se, G é o grafo completo e igualdade na cota superior se, e somente se,

- (a) n é par e $G \cong \frac{n}{2}P_2$;
- (b) n é ímpar e $G \cong \left(\frac{n-3}{2}P_2 \right) \cup P_3$.

Demonstração. A cota inferior segue do Teorema 3.2.1 e do fato que $d_{max} \leq n-1$ para qualquer grafo G de ordem n . Para provar a igualdade da cota inferior, note que, se G é o grafo completo com n vértices, então todos os vértice têm grau $n-1$. Assim, pelo Teorema 3.2.1, temos que

$$\frac{n}{2(n-1)} \leq R_{-1}(G) \leq \frac{n}{2(n-1)},$$

então $R_{-1}(G) = \frac{n}{2(n-1)}$. Por outro lado, se $R_{-1}(G) = \frac{n}{2(n-1)}$, pelo Teorema 3.2.1 temos que

$$\frac{n}{2d_{max}} \leq \frac{n}{2(n-1)} \leq \frac{n}{2d_{min}},$$

o que implica $d_{max} = d_{min} = n - 1$. Portanto, G é o grafo completo.

Agora vamos olhar para a cota superior. Para n par, temos que n tem pelo menos uma aresta. Então $d_{min} \geq 1$ e pelo Teorema 3.2.1 a cota superior vale. Para provar a igualdade nesse caso, note que, se $G \cong \frac{n}{2}P_2$ então $R_{-1}(G) = \frac{n}{2}$. Por outro lado, se $R_{-1}(G) = \frac{n}{2}$, pelo Teorema 3.2.1 temos que

$$\frac{n}{2d_{max}} \leq \frac{n}{2} \leq \frac{n}{2d_{min}},$$

o que implica $d_{max} = d_{min} = 1$. Portanto, G é a união disjunta de $\frac{n}{2}$ caminhos de tamanho 1.

Se n é ímpar, vamos mostrar que $R_{-1}(G) \leq \frac{n-1}{2}$. Como G não tem vértices isolados, existe $x \in V$ tal que $d_x \geq 2$. Suponhamos que x é adjacente aos vértices $\{y_1, y_2, \dots, y_{d_x}\}$. Assim, por (3.2) temos

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &\leq \frac{n - (d_x + 1)}{2} + \frac{1}{2d_x} \sum_{i=1}^{d_x} \frac{1}{d_{y_i}} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{d_x} \frac{1}{d_{y_i}} \left(\frac{1}{d_x} + \sum_{\substack{u \sim y_i \\ u \neq x}} \frac{1}{d_{min}} \right) \\ &\leq \frac{n-1}{2} + \left(\frac{1}{d_x} - \frac{1}{2} \right) \left(\sum_{i=1}^{d_x} \frac{1}{d_{y_i}} \right) \\ &\leq \frac{n-1}{2}. \end{aligned}$$

A igualdade ocorre se, e somente se, G tem um vértice de grau 2 e os outros $n - 1$ vértices tem grau 1, ou seja, G é união disjunta de um caminho de tamanho 2 com $\frac{n-3}{2}$ caminhos de tamanho 1. \square

O Teorema a seguir é um resultado de Clark e Moon [12] e fornece um limite inferior e um limite superior de $R_{-1}(G)$ para árvores. A cota inferior é alcançada pela estrela $K_{1,n-1}$, mas de acordo com os autores, a cota superior não é a melhor possível.

Teorema 3.2.3. *Seja T uma árvore de ordem $n \geq 2$. Então*

$$1 \leq R_{-1}(T) \leq \frac{5n+8}{18}.$$

A demonstração do Teorema 3.2.3 pode ser encontrada em [12] na página 224. Optamos por não fazê-la, pois vamos demonstrar a cota para o caso de grafos conexos (Teorema 3.2.6). No mesmo artigo, Clark e Moon [12] definiram o valor máximo de $R_{-1}(T)$ como $f(n)$, para uma árvore T de ordem n , com $n \geq 2$. Isto é,

$$f(n) = \max\{R_{-1}(T) : T \text{ é uma árvore de ordem } n\}.$$

Além disso, definiram $f(0) = f(1) = 0$. Assim, $f(2) = 1$ e $f(n) = \frac{n+1}{4}$ para $3 \leq n \leq 9$. Chama-se de árvore máxima qualquer árvore T de ordem n com $R_{-1}(T) = f(n)$. Os autores provaram que $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f(n)}{n}$ existe e é um número real não negativo K . No mesmo trabalho, os autores encontraram uma cota superior e inferior para K , como mostraremos a seguir. Eles construíram uma sequência infinita de árvores T_r , obtidas da estrela $K_{1,r}$ anexando três caminhos disjuntos de comprimento 2 para cada um dos r vértices de $K_{1,r}$, ver Figura 3.2.

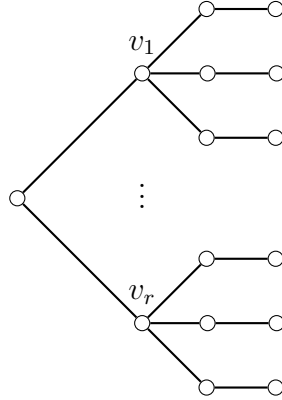


Figura 3.2: Árvore T_r obtida da estrela $K_{1,r}$.

Então, $R_{-1}(T_r) = \frac{15r+2}{8}$. E o número de vértices de T_r é dado por $n = 7r + 1$, dessa forma

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{R_{-1}(T_r)}{7r+1} = \frac{15}{56}.$$

Assim, como $R_{-1}(T) \leq f(n)$ para toda árvore T , em particular temos $R_{-1}(T_r) \leq f(n)$, para a classe de árvores T_r . Então, obtemos a cota inferior para K

$$\frac{15}{56} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{R_{-1}(T_r)}{7r + 1} \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f(n)}{n} = K.$$

A cota superior para K é obtida pelo Teorema 3.2.3, pois $f(n) \leq \frac{5n + 8}{18}$. Então,

$$K = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f(n)}{n} \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{5n + 8}{18n} = \frac{5}{18}.$$

Portanto, as cotas para K são $\frac{15}{56} \leq K \leq \frac{5}{18}$. Segundo os autores, isso implica que os caminhos não são árvores com índice máximo para todos os n suficientemente grandes, pois $R_{-1}(P_n) = \frac{n + 1}{4}$, como vimos no Exemplo 3.1.1. Então, $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{R_{-1}(P_n)}{n} = \frac{1}{4} < \frac{5}{18}$.

Ao final de [12], Clark e Moon propuseram duas questões interessantes:

1. Encontrar $K = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f(n)}{n}$, sabendo que $\frac{15}{56} \leq K \leq \frac{5}{18}$ (os autores acreditam que o limite inferior está mais próximo de K do que o limite superior);
2. Refinar o limite superior de $R_{-1}(T)$ do Teorema 3.2.3.

Hu, Li e Yuan [27] tentaram responder as duas questões propostas acima, mas alguns erros foram encontrados em sua demonstração e apontados em [36]. Então, Pavlović, Stojanović e Li [37] provaram o seguinte resultado

Teorema 3.2.4. *Para uma árvore T de ordem $n \geq 103$,*

$$R_{-1}(T) \leq \frac{15n - 1}{56}.$$

A demonstração do Teorema 3.2.4 pode ser encontrada em [37]. A classe de árvores T_r fornecida em [12] satisfaz a igualdade no Teorema 3.2.4 para infinitos

valores de n . Basta notar que

$$\frac{15n - 1}{56} = \frac{15(7r + 1) - 1}{56} = \frac{105r + 14}{56} = \frac{15r + 2}{8} = R_{-1}(T_r).$$

Assim, para $n = 7r + 1$ e $r \geq 15$, a árvore máxima é T_r , mas pode ser que ela não seja a única para esses valores de n . Então, $R_{-1}(T) \leq \frac{15n - 1}{56}$ é um limite nítido para infinitos valores de n . Assim, o Teorema 3.2.4 junto com o resultado em [12] implica que $K = \frac{15}{56}$ para a primeira questão proposta por Clark e Moon.

Em [24], Gutman *et al.* determinaram todas as árvores de ordem $n \leq 20$ com valor máximo de $R_{-1}(T)$ dentre todas as árvores de ordem n . Para $n \leq 9$, as árvores máximas estão citadas abaixo:

- (a) $n = 2$: Caminho P_2 ;
- (b) $n = 3$: Caminho P_3 ;
- (c) $n = 4$: Caminho P_4 ;
- (d) $n = 5$: Caminho P_5 ;
- (e) $n = 6$: Caminho P_6 ;
- (f) $n = 7$: Caminho P_7 e 3-sol;
- (g) $n = 8$: Caminho P_8 e (2, 1)-sol duplo;
- (h) $n = 9$: Caminho P_9 , 4-sol e as árvores da Figura 3.3.



Figura 3.3: Árvores com índice de Randić máximo para $n = 9$.

Vamos definir os grafos sol e sol duplo no Capítulo 5. Já para $n \geq 10$, as árvores com índice máximo diferem significativamente das citadas acima. Em [24], são apresentadas as árvores máximas para $10 \leq n \leq 20$. Vale destacar que, para $n = 16$ e $n = 19$ a árvore máxima também não é única. Hu *et al.* em [26], determinaram os valores máximos para $R_{-1}(T)$ de todas as árvores de ordem $10 \leq n \leq 102$. Como não se tem certeza da unicidade, eles forneceram uma das árvores com valor máximo do índice para cada n .

Já para grafos conexos, em 2010, Cavers, Fallat e Kirkland [11], provaram que $R_{-1}(G) \leq \frac{15(n+1)}{56}$ para qualquer grafo conexo G de ordem $n \geq 3$, Teorema 3.2.6 a seguir. Essa é a melhor cota conhecida até então, mas os autores suspeitam que um limite mais refinado pode ser encontrado. Para a demonstração do Teorema 3.2.6 precisaremos das definições a seguir e do Lema 3.2.5 que relaciona $R_{-1}(G)$ com $R_{-1}(G \setminus S)$, onde S é um subconjunto de vértices de G . Note que $G \setminus S$ denota o grafo obtido de G excluindo todos os vértices do subconjunto S .

Definição 3.2.1. Dizemos que G tem **caminho suspenso** de u a w , se uvw é um caminho tal que $d_u = 1$ e $d_w = 2$.

Definição 3.2.2. Um $(t, s + t)$ -sistema centrado em r é um subgrafo induzido de G , tal que existem t caminhos suspensos no vértice r e $d_r = s + t$. Ver Figura 3.4.

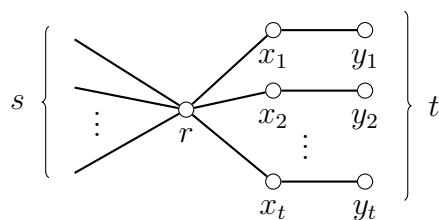


Figura 3.4: $(t, s + t)$ -sistema centrado em r .

Definição 3.2.3. Um $(k, t, s + k)$ -sistema centrado em R é um subgrafo induzido de G que tem k vértices disjuntos e $(t, t + 1)$ -sistemas centrados em r_1, r_2, \dots, r_k , tal que R é adjacente a cada r_i e $d_R = s + k$. Ver Figura 3.15.

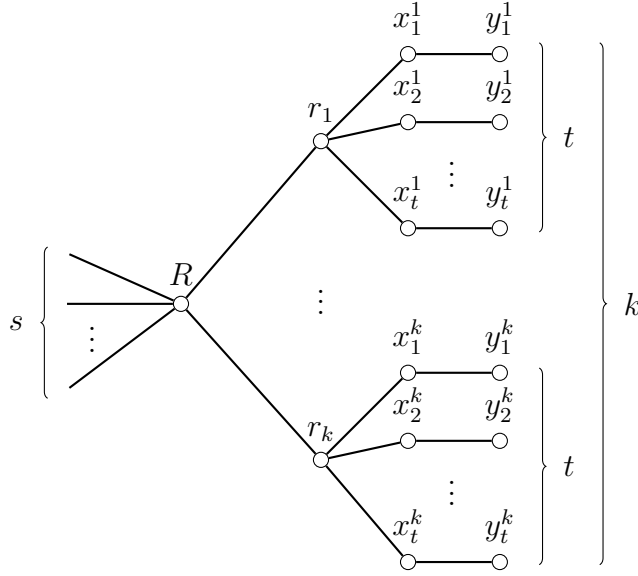


Figura 3.5: $(k, t, s + k)$ -sistema centrado em R .

Lema 3.2.5. *Seja S um subconjunto de vértices de G , então*

$$R_{-1}(G) \leq R_{-1}(G \setminus S) + \sum_{\substack{x \sim y \\ x \in S, y \notin S}} \frac{1}{d_x d_y} + \sum_{\substack{x \sim y \\ x, y \in S}} \frac{1}{d_x d_y},$$

onde d_x e d_y denotam os graus dos vértices x e y do grafo G .

Demonstração. Seja S um subconjunto de vértices de G não vazio. Denotamos por $N(S)$ o conjunto de vértices vizinhos dos vértices de S e $N(N(S))$ o conjunto formado pelos vértices vizinhos de $N(S)$. Além disso, definimos o conjunto Q , formado pelos vértices que não estão em nenhum dos subconjuntos mencionados anteriormente, isto é, $x \in Q$, se e somente se, $x \notin S, N(S), N(N(S))$. Seja m_x a quantidade de vizinhos de x que estão em S e m_y a quantidade de vizinhos de y que estão em S . Denotaremos por d_x e d_y os graus dos vértices x e y do grafo G . Assim, temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &= \sum_{\substack{x \sim y \\ x, y \in S}} \frac{1}{d_x d_y} + \sum_{\substack{x \sim y \\ x \in S, y \in N(S)}} \frac{1}{d_x d_y} + \sum_{\substack{x \sim y \\ x, y \in N(S)}} \frac{1}{d_x d_y} + \sum_{\substack{x \sim y \\ x \in N(S) \\ y \in N(N(S))}} \frac{1}{d_x d_y} \\ &+ \sum_{\substack{x \sim y \\ x, y \in Q}} \frac{1}{d_x d_y} \end{aligned}$$

e

$$R_{-1}(G \setminus S) = \sum_{\substack{x \sim y \\ x, y \in N(S)}} \frac{1}{(d_x - m_x)(d_y - m_y)} + \sum_{\substack{x \sim y \\ x \in N(S) \\ y \in N(N(S))}} \frac{1}{(d_x - m_x)d_y} + \sum_{\substack{x \sim y \\ x, y \in Q}} \frac{1}{d_x d_y}.$$

Assim,

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) - R_{-1}(G \setminus S) &= \sum_{\substack{x \sim y \\ x, y \in S}} \frac{1}{d_x d_y} + \sum_{\substack{x \sim y \\ x \in S, y \in N(S)}} \frac{1}{d_x d_y} + \sum_{\substack{x \sim y \\ x \in N(S) \\ y \in N(N(S))}} \frac{1}{d_y} \left(\frac{1}{d_x} - \frac{1}{d_x - m_x} \right) \\ &+ \sum_{\substack{x \sim y \\ x, y \in N(S)}} \left(\frac{1}{d_x d_y} - \frac{1}{(d_x - m_x)(d_y - m_y)} \right). \end{aligned}$$

Mas

$$\frac{1}{d_x} - \frac{1}{d_x - m_x} = -\frac{m_x}{d_x(d_x - m_x)} < 0$$

e

$$\begin{aligned} \frac{1}{d_x d_y} - \frac{1}{(d_x - m_x)(d_y - m_y)} &= \frac{-d_x m_y - m_x d_y + m_x m_y}{d_x d_y (d_x - m_x)(d_y - m_y)} \\ &= \frac{-m_y(d_x - m_x) - m_x d_y}{d_x d_y (d_x - m_x)(d_y - m_y)} < 0. \end{aligned}$$

Então,

$$R_{-1}(G) \leq R_{-1}(G \setminus S) + \sum_{\substack{x \sim y \\ x \in S, y \notin S}} \frac{1}{d_x d_y} + \sum_{\substack{x \sim y \\ x, y \in S}} \frac{1}{d_x d_y}.$$

□

O Teorema 3.2.6 a seguir tem uma prova um tanto extensa. A demonstração é dividida em 10 casos e é feita por indução, com exceção do caso final. A fim de facilitar o entendimento da construção da demonstração, apresentamos abaixo um resumo de como os casos estão divididos:

$$(0) \quad d_{\min}(G) \geq 2;$$

- (i) Vértice x de grau 1 adjacente a um vértice y com $d_y \geq 4$;
- (ii) Vértice z de grau 2 e suas possibilidades de adjacências;
- (iii) Vértice v de grau 3 e suas possibilidades de adjacências;
- (iv) Sistema $(t, s + t)$ de G com $t \geq 1$ e $s + t \geq 14$;
- (v) Sistema $(t, s + t)$ de G com $s \geq 0$ e $t \geq 4$;
- (vi) Sistema $(k, 3, s + k)$ de G com $k \geq 1$ e $s + k \leq 14$;
- (vii) Sistema $(k, 2, k + 1)$ de G com $k \geq 2$;
- (viii) Sistemas $(k, 2, k + t + 1)$ e $(t, k + t + 1)$ de G centrados no mesmo vértice, onde $k \geq 1$ e $t \in [1, 3]$. E sistemas $(k, 2, k + t)$ e $(t, k + t)$ também centrados no mesmo vértice, com $k \geq 1$ e $t \in [1, 3]$.

O caso final do Teorema 3.2.6 aborda as possibilidades que não foram consideradas nos casos (0) a (viii). A demonstração desse caso é feita calculando $R_{-1}(G)$ e verificando que o resultado vale.

Teorema 3.2.6. *Seja G um grafo conexo com $n \geq 3$ vértices. Temos que*

$$R_{-1}(G) \leq \frac{15(n+1)}{56}.$$

Demonstração. A prova é feita por indução no número de vértices. Se $n = 3$, então os grafos conexos de 3 vértices são o caminho P_3 e o triângulo K_3 . Então,

$$R_{-1}(P_3) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 < \frac{15 \cdot 4}{56} = \frac{15}{14}$$

e

$$R_{-1}(K_3) = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{3}{4} < \frac{15}{14}.$$

Agora, seja G um grafo conexo com $n \geq 4$ vértices e suponhamos que o resultado vale para grafos conexos com menos de n vértices. A partir daqui, a prova será dividida em casos.

Caso (0): Se G tem grau mínimo pelo menos 2, isto é, $d_{\min}(G) \geq 2$, então pelo Teorema 3.2.1, temos que

$$R_{-1}(G) \leq \frac{n}{2d_{\min}} \leq \frac{n}{4} \leq \frac{15(n+1)}{56}.$$

Note que o caso (0) cobre os grafos que têm $d_{\min}(G) \geq 2$, assim, precisamos olhar para grafos que tenham $d_{\min}(G) = 1$. Um vértice de grau 1 pode ser vizinho de um vértice de grau 2 ou de um vértice de grau 3 ou ainda de um vértice de grau maior ou igual a 4, veremos essa última situação no caso a seguir.

Caso (i): Seja x um vértice de grau 1, adjacente a um vértice y com $d_y \geq 4$.

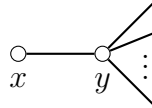


Figura 3.6: Caso (i).

Considere $S = \{x\}$. Note que, como $G \setminus S$ é conexo e tem $n - 1$ vértices, então vale a hipótese de indução, isto é, $R_{-1}(G \setminus S) \leq \frac{15n}{56}$. Dessa forma, usando o Lema 3.2.5 temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &\leq R_{-1}(G \setminus \{x\}) + \frac{1}{d_y} \\ &\leq \frac{15n}{56} + \frac{1}{4} \\ &< \frac{15}{56}(n+1). \end{aligned}$$

Agora, vamos analisar o caso em que o vértice de grau 1 é vizinho de um vértice de grau 2 e este é vizinho de um vértice de grau 1 ou 2 (primeira parte do item (a) abaixo).

Caso (ii): Seja z um vértice de grau 2 tal que $z \sim x, z \sim y$ e $d_x \leq d_y$.

(a) Suponha que $x \approx y$ e $d_x = 1, d_y \leq 2$ ou que $d_y \geq d_x \geq 2$.



Figura 3.7: Caso (ii), (a).

Forme um grafo H , excluindo o vértice z e adicionando a aresta xy (isso garante que H seja conexo). Note que $d_x^H = d_x^G$ e $d_y^H = d_y^G$. Assim, temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &= R_{-1}(H) + \frac{1}{2d_x} + \frac{1}{2d_y} - \frac{1}{d_x d_y} \\ &= R_{-1}(H) + \frac{d_y + d_x - 2}{2d_x d_y}. \end{aligned}$$

Desde que H é conexo, vale a hipótese de indução, então temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &\leq \frac{15n}{56} + \frac{d_y + d_x - 2}{2d_x d_y} \\ &= \frac{15n}{56} + \frac{d_y + d_x - 2}{2d_x d_y} + \frac{15}{56} - \frac{15}{56} \\ &= \frac{15}{56}(n+1) + \frac{28d_y + 28d_x - 56 - 15d_x d_y}{56d_x d_y} \\ &= \frac{15}{56}(n+1) + \frac{2d_y + 2d_x - 4 - \frac{15}{14}d_x d_y}{4d_x d_y} \\ &< \frac{15}{56}(n+1) + \frac{2d_y + 2d_x - 4 - d_x d_y}{4d_x d_y} \\ &= \frac{15}{56}(n+1) + \frac{(d_x - 2)(2 - d_y)}{4d_x d_y}. \end{aligned}$$

Portanto, se $d_x = 1$ e $d_y \leq 2$ ou $d_y \geq d_x \geq 2$ temos que $R_{-1}(G) < \frac{15}{56}(n+1)$.

(b) Suponha que $x \sim y$ em G (então $d_y \geq d_x \geq 2$).

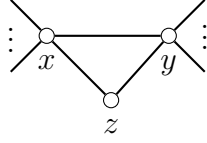


Figura 3.8: Caso (ii), (b).

Forme um grafo H , excluindo o vértice z . Denotamos por x_1, \dots, x_k os vizinhos de x diferentes de y e z , e y_1, \dots, y_m os vizinhos de y diferentes de x e z . Além disso, sejam u e v vértices de G que são diferentes dos vértices x, y, z e dos vértices x_1, \dots, x_k e y_1, \dots, y_m . Assim, temos que

$$R_{-1}(G) = \sum_{u \sim v} \frac{1}{d_u d_v} + \sum_{\substack{x \sim x_i \\ x_i \neq y, z}} \frac{1}{d_x d_{x_i}} + \sum_{\substack{y \sim y_i \\ y_i \neq x, z}} \frac{1}{d_y d_{y_i}} + \frac{1}{d_x d_y} + \frac{1}{2d_x} + \frac{1}{2d_y}$$

e

$$R_{-1}(H) = \sum_{u \sim v} \frac{1}{d_u d_v} + \sum_{\substack{x \sim x_i \\ x_i \neq y}} \frac{1}{(d_x - 1) d_{x_i}} + \sum_{\substack{y \sim y_i \\ y_i \neq x}} \frac{1}{(d_y - 1) d_{y_i}} + \frac{1}{(d_x - 1)(d_y - 1)}.$$

Dessa forma temos,

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) - R_{-1}(H) &= \sum_{\substack{x \sim x_i \\ x_i \neq y, z}} \frac{1}{d_{x_i}} \left(\frac{1}{d_x} - \frac{1}{d_x - 1} \right) + \sum_{\substack{y \sim y_i \\ y_i \neq x, z}} \frac{1}{d_{y_i}} \left(\frac{1}{d_y} - \frac{1}{d_y - 1} \right) \\ &\quad + \frac{1}{d_x d_y} + \frac{1}{2d_x} + \frac{1}{2d_y} - \frac{1}{(d_x - 1)(d_y - 1)}. \end{aligned}$$

Então,

$$R_{-1}(G) \leq R_{-1}(H) + \frac{1}{d_x d_y} + \frac{1}{2d_x} + \frac{1}{2d_y} - \frac{1}{(d_x - 1)(d_y - 1)}.$$

Como H é conexo, vale a hipótese de indução, então

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &\leq \frac{15n}{56} + \frac{1}{d_x d_y} + \frac{1}{2d_x} + \frac{1}{2d_y} - \frac{1}{(d_x - 1)(d_y - 1)} \\ &= \frac{15n}{56} + \frac{15}{56} - \frac{15}{56} + \frac{1}{d_x d_y} + \frac{1}{2d_x} + \frac{1}{2d_y} - \frac{1}{(d_x - 1)(d_y - 1)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{15}{56}(n+1) \\
&\quad - \frac{(y^2(x-1)(15x-28) - y(43x^2 - 71x - 28) + 28(x-1)(x+2))}{56xy(x-1)(y-1)} \\
&= \frac{15}{56}(n+1) \\
&\quad - \frac{\left(y^2(x-1)\left(\frac{15x}{14} - \frac{28}{14}\right) - y\left(\frac{43}{14}x^2 - \frac{71}{14}x - \frac{28}{14}\right) + \frac{28}{14}(x-1)(x+2)\right)}{4xy(x-1)(y-1)} \\
&= \frac{15}{56}(n+1) \\
&\quad - \frac{\left(y^2(x-1)\left(\frac{15x}{14} - 2\right) - y\left(\frac{43}{14}x^2 - \frac{71}{14}x - 2\right) + 2(x-1)(x+2)\right)}{4xy(x-1)(y-1)} \\
&< \frac{15}{56}(n+1) - \frac{(y^2(x-1)(x-2) - y(3x^2 - 5x - 2) + 2(x-1)(x+2))}{4xy(x-1)(y-1)} \\
&= \frac{15}{56}(n+1) - \frac{(y^2(x-1)(x-2) - y(3x+1)(x-2) + 2(x-1)(x+2))}{4xy(x-1)(y-1)}
\end{aligned}$$

Denotamos $f(x, y) = y^2(x-1)(x-2) - y(3x+1)(x-2) + 2(x-1)(x+2)$. Precisamos mostrar que $f(x, y) \geq 0$ para $y \geq x \geq 2$, onde x, y são inteiros. Note que $f(2, y) = 8$, para todo y . Então, fixe $x = x_0 \geq 3$ e olhamos f como uma parábola voltada para cima em y . Temos que a coordenada horizontal do vértice da parábola é $\frac{3}{2} + \frac{2}{x_0 - 1} \leq 2,5$. Assim, como a partir do vértice a função é crescente e $y \geq x$, vamos analisar a função quando $y = 3$, isto é, $f(x_0, 3)$. Temos que $f(x_0, 3) = 2x_0^2 - 10x_0 + 20 \geq 0$, para $x_0 \geq 3$. Então, $f(x_0, y) \geq 0$ para $y \geq 3$.

Portanto,

$$R_{-1}(G) < \frac{15}{56}(n+1).$$

Dessa forma, finalizamos o caso (ii).

Note que ainda falta cobrir o caso de que um vértice de grau 1 é vizinho de um vértice de grau 2 e este é vizinho de um vértice de grau maior ou igual a 3. Mas isso significa que todo vértice de grau 1 ou 2 está contido em um sistema de G , isso será feito a partir do caso (iv) e também no caso final.

O caso abaixo discute as possibilidades de um vértice de grau 1 ser vizinho de um vértice de grau 3.

Caso (iii): Assuma que temos vértices u, v, x, y com $d_u = 1$, $d_v = 3$, $u \sim v$, $v \sim y$, $v \sim x$ e $d_x \leq d_y$.

(a) Se $d_x = 1$ e $d_y \geq 5$ em G , então denote por H o grafo obtido excluindo os vértices x, v e u .

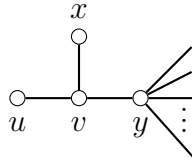


Figura 3.9: Grafo G do caso (iii), (a).

Pelo Lema 3.2.5 temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &\leq R_{-1}(H) + \frac{1}{d_y d_v} + \frac{1}{d_u d_v} + \frac{1}{d_x d_v} \\ &\leq R_{-1}(H) + \frac{1}{15} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3}. \end{aligned}$$

Pela hipótese de indução segue que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &\leq \frac{15}{56}(n-2) + \frac{11}{15} \\ &< \frac{15}{56}(n-2) + \frac{3}{4} \\ &= \frac{15n}{56} - \frac{15}{28} + \frac{3}{4} \\ &= \frac{15n}{56} + \frac{3}{14} \\ &< \frac{15}{56}(n+1). \end{aligned}$$

(b) Suponhamos que $x \approx y$ em G e além disso, $d_x = 1$, $d_y \leq 4$ ou $d_y \geq d_x \geq 2$.

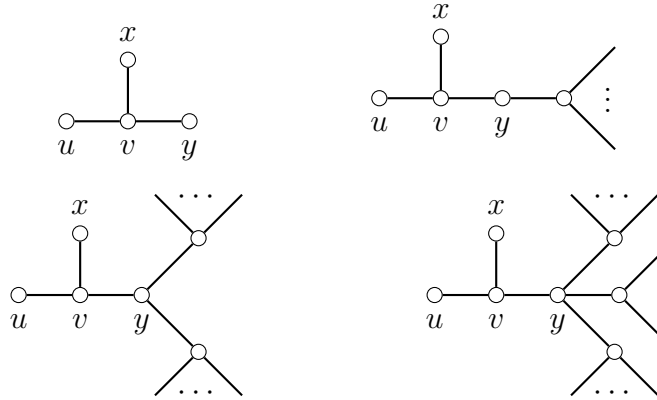


Figura 3.10: Grafo G do caso (iii), $d_x = 1$ e $d_y \leq 4$.

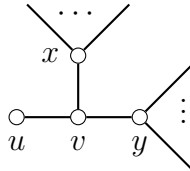


Figura 3.11: Grafo G do caso (iii), $d_y \geq d_x \geq 2$.

Formamos um grafo H obtido de G excluindo u e v e adicionando a aresta xy . Note que $d_x^H = d_x^G$ e $d_y^H = d_y^G$. Então,

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &= R_{-1}(H) + \frac{1}{d_y d_v} + \frac{1}{d_x d_v} + \frac{1}{d_u d_v} - \frac{1}{d_x d_y} \\ &= R_{-1}(H) + \frac{1}{3d_y} + \frac{1}{3d_x} + \frac{1}{3} - \frac{1}{d_x d_y} \end{aligned}$$

Se $d_x = d_y = 1$, então G é a estrela de 4 vértices e a desigualdade vale.

Caso contrário, H é um grafo conexo com $n - 2$ vértices e por indução temos

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &\leq \frac{15}{56}(n-1) + \frac{1}{3d_y} + \frac{1}{3d_x} + \frac{1}{3} - \frac{1}{d_x d_y} \\ &= \frac{15}{56}(n-1) + \frac{d_x d_y + d_y + d_x - 3}{3d_x d_y} \\ &= \frac{15}{56}(n-1) + \frac{2d_x d_y + 2d_y + 2d_x - 6}{6d_x d_y} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&< \frac{15}{56}(n+1) + \frac{2d_y + 2d_x - d_x d_y - 6}{6d_x d_y} \\
&= \frac{15}{56}(n+1) + \frac{d_y(2-d_x) + 2(d_x-3)}{6d_x d_y}
\end{aligned}$$

Se $d_x = 1$ e $d_y \leq 4$, então o numerador do segundo termo é não positivo, isto é,

$$d_y(2-d_x) + 2(d_x-3) = d_y - 4 \leq 0.$$

Se $d_x = 2$ ou $d_x = 3$, então o numerador do segundo termo é negativo, ou seja, respectivamente temos

$$d_y(2-d_x) + 2(d_x-3) = -2 < 0$$

e

$$d_y(2-d_x) + 2(d_x-3) = -d_y < 0.$$

Se $d_y \geq d_x \geq 4$, então

$$\begin{aligned}
d_y(2-d_x) + 2(d_x-3) &\leq d_y(2-4) + 2(d_y-3) \\
&= -2d_y + 2(d_y-3) \\
&< 0
\end{aligned}$$

Então, vale $R_{-1}(G) < \frac{15}{56}(n+1)$.

(c) Suponhamos que $x \sim y$ e $d_y \geq d_x \geq 2$ em G .

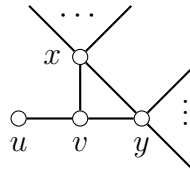


Figura 3.12: Grafo G do caso (iii), $x \sim y$ e $d_y \geq d_x \geq 2$.

Forme um grafo H excluindo os vértices u e v . Sejam x_1, \dots, x_k vértices vizinhos de x , diferentes de v e y . E sejam y_1, \dots, y_m vértices vizinhos de y , diferentes de v e x . Além disso, sejam a e b vértices de G que são diferentes dos vértices u, v, x, y e dos vértices x_1, \dots, x_k e y_1, \dots, y_m . Note que $d_x^H = d_x^G - 1$ e $d_y^H = d_y^G - 1$. Temos que

$$R_{-1}(G) = \sum_{a \sim b} \frac{1}{d_a d_b} + \sum_{\substack{x \sim x_i \\ x_i \neq v, y}} \frac{1}{d_x d_{x_i}} + \sum_{\substack{y \sim y_i \\ y_i \neq x, v}} \frac{1}{d_y d_{y_i}} + \frac{1}{d_x d_y} + \frac{1}{3d_x} + \frac{1}{3d_y} + \frac{1}{3}$$

e

$$R_{-1}(H) = \sum_{a \sim b} \frac{1}{d_a d_b} + \sum_{\substack{x \sim x_i \\ x_i \neq v, y}} \frac{1}{(d_x - 1) d_{x_i}} + \sum_{\substack{y \sim y_i \\ y_i \neq x, v}} \frac{1}{(d_y - 1) d_{y_i}} + \frac{1}{(d_x - 1)(d_y - 1)}.$$

Então,

$$R_{-1}(G) < R_{-1}(H) + \frac{1}{d_x d_y} + \frac{1}{3d_x} + \frac{1}{3d_y} + \frac{1}{3} - \frac{1}{(d_x - 1)(d_y - 1)}.$$

Assim, pela hipótese de indução temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &< \frac{15}{56}(n-1) + \frac{1}{d_x d_y} + \frac{1}{3d_x} + \frac{1}{3d_y} + \frac{1}{3} - \frac{1}{(d_x - 1)(d_y - 1)} \\ &= \frac{15}{56}(n-1) + \frac{30}{56} - \frac{30}{56} + \frac{1}{d_x d_y} + \frac{1}{3d_x} + \frac{1}{3d_y} + \frac{1}{3} - \frac{1}{(d_x - 1)(d_y - 1)} \\ &= \frac{15}{56}(n+1) - \frac{30}{56} + \frac{1}{d_x d_y} + \frac{1}{3d_x} + \frac{1}{3d_y} + \frac{1}{3} - \frac{1}{(d_x - 1)(d_y - 1)} \\ &= \frac{15}{56}(n+1) \\ &\quad - \frac{\left(y^2(x-1) \left(\frac{17x}{14} - 2 \right) - y \left(\frac{43x^2}{14} - \frac{73x}{14} - 4 \right) + 2(x-1)(x+3) \right)}{6xy(x-1)(y-1)} \\ &< \frac{15}{56}(n+1) - \frac{(y^2(x-1)(x-2) - y(3x^2 - 5x - 4) + 2(x-1)(x+3))}{6xy(x-1)(y-1)}. \end{aligned}$$

Denotamos $f(x, y) = y^2(x-1)(x-2) - y(3x^2 - 5x - 4) + 2(x-1)(x+3)$. Precisamos mostrar que $f(x, y) \geq 0$ para $y \geq x \geq 2$, onde x, y são inteiros. Note que $f(2, y) \geq 0$, para $y \geq 2$. Então, fixe $x = x_0 \geq 3$ e olhamos f como uma parábola

voltada para cima em y . Temos que a coordenada horizontal do vértice da parábola é $\frac{3}{2} + \frac{4x_0 - 10}{2(x_0 - 1)(x_0 - 2)} \leq 2$, para $x_0 = 2$ e $x_0 \geq 3$. Assim, como a partir do vértice a função é crescente e $y \geq x$, vamos analisar a função quando $y = 3$, isto é, $f(x_0, 3)$. Temos que $f(x_0, 3) = 2x_0^2 - 8x_0 + 24 \geq 0$, para $x_0 \geq 3$. Então, $f(x_0, y) \geq 0$ para $y \geq 3$.

Portanto,

$$R_{-1}(G) < \frac{15}{56}(n + 1).$$

No caso abaixo vamos começar a cobrir o caso de que um vértice de grau 1 é vizinho de um vértice de grau 2 e este é vizinho de um vértice de grau maior ou igual a 3, como comentamos anteriormente. Por enquanto, vamos restringir o grau do vértice r em $d_r \geq 14$, ver Figura 3.14. Note que o caso (iv) também cobre a possibilidade do grafo G ter mais de um caminho suspenso.

Caso (iv): Seja $t \geq 1$ e suponha que temos um $(t, s + t)$ -sistema de G com $s + t \geq 14$. Seja H o grafo obtido de G excluindo os vértices x_1 e y_1 .

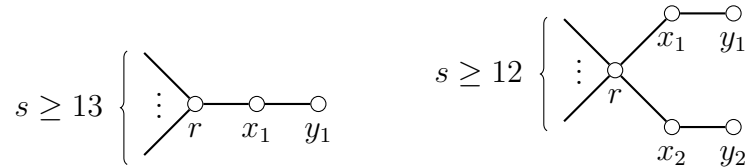


Figura 3.13: Grafos G do caso (iv) para $t = 1$ e $t = 2$, respectivamente.

Pelo Lema 3.2.5 temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &\leq R_{-1}(H) + \frac{1}{d_{x_1}d_r} + \frac{1}{d_{x_1}d_{y_1}} \\ &= R_{-1}(H) + \frac{1}{2d_r} + \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Assim, pela hipótese de indução, temos

$$R_{-1}(G) \leq \frac{15}{56}(n - 1) + \frac{1}{2d_r} + \frac{1}{2}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \frac{15}{56}(n+1) - \frac{30}{56} + \frac{1}{28} + \frac{1}{2} \\
&= \frac{15}{56}(n+1)
\end{aligned}$$

O caso abaixo considera que G tenha pelo menos 4 caminhos suspensos e $d_r \geq 4$.

Caso (v): Suponha que há um $(t, s+t)$ -sistema de G com $s \geq 0$ e $t \geq 4$. Observe que esse sistema tem um subgrafo que é um $(4, 4)$ -sistema (que inclui os vértices x_1 e y_1).

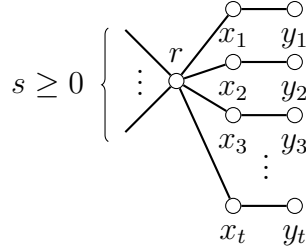


Figura 3.14: Grafo G do caso (v).

Seja H o grafo obtido de G deletando os vértices x_1 e y_1 . Sejam a_1, \dots, a_s os outros vizinhos de r diferentes de x_1, \dots, x_t . Além disso, sejam u e v vértices diferentes de $x_1, \dots, x_t, y_1, \dots, y_t, a_1, \dots, a_s$. Temos que,

$$R_{-1}(G) = \frac{1}{2} \cdot 4 + \frac{1}{2}(t-4) + \frac{1}{2d_r} \cdot 4 + \frac{1}{2d_r}(t-4) + \sum_{a_i \sim r} \frac{1}{d_{a_i} d_r} + \sum_{u \sim v} \frac{1}{d_u d_v}$$

e

$$\begin{aligned}
R_{-1}(H) &= \frac{1}{2} \cdot 3 + \frac{1}{2}(t-4) + \frac{1}{2(d_r-1)} \cdot 3 + \frac{1}{2(d_r-1)}(t-4) + \sum_{a_i \sim r} \frac{1}{d_{a_i}(d_r-1)} \\
&\quad + \sum_{u \sim v} \frac{1}{d_u d_v}.
\end{aligned}$$

Então,

$$R_{-1}(G) - R_{-1}(H) = 2 + \frac{4}{2d_r} + \frac{t-4}{2d_r} - \frac{3}{2} - \frac{3}{2(d_r-1)} - \frac{t-4}{2(d_r-1)}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{a_i \sim r} \frac{1}{d_{a_i}} \left(\frac{1}{d_r} - \frac{1}{d_r - 1} \right) \\
\leq & 2 + \frac{4}{2d_r} - \frac{3}{2} - \frac{3}{2(d_r - 1)}.
\end{aligned}$$

Assim, pela hipótese de indução temos

$$\begin{aligned}
R_{-1}(G) & \leq R_{-1}(H) + \left(2 + \frac{4}{2d_r} \right) - \left(\frac{3}{2} + \frac{3}{2(d_r - 1)} \right) \\
& \leq \frac{15}{56}(n - 1) + \left(2 + \frac{4}{2d_r} \right) - \left(\frac{3}{2} + \frac{3}{2(d_r - 1)} \right) \\
& = \frac{15}{56}(n - 1) + \frac{30}{56} - \frac{30}{56} + \left(2 + \frac{4}{2d_r} \right) - \left(\frac{3}{2} + \frac{3}{2(d_r - 1)} \right) \\
& = \frac{15}{56}(n + 1) - \frac{30}{56} + \left(2 + \frac{4}{2d_r} \right) - \left(\frac{3}{2} + \frac{3}{2(d_r - 1)} \right) \\
& = \frac{15}{56}(n + 1) - \frac{d_r^2 - 15d_r + 56}{28d_r(d_r - 1)} \\
& = \frac{15}{56}(n + 1) - \frac{(d_r - 7)(d_r - 8)}{28d_r(d_r - 1)} \\
& \leq \frac{15}{56}(n + 1).
\end{aligned}$$

Os casos (vi) ao (viii) tratam de sistemas que estão na Definição 3.2.3.

Caso (vi): Suponha que há um $(k, 3, s + k)$ -sistema com $s + k \leq 14$ e $k \geq 1$. Esse sistema tem como subgrafo um $(1, 3, 1)$ -sistema com centro R (que inclui os vértices x_1^1 e y_1^1).

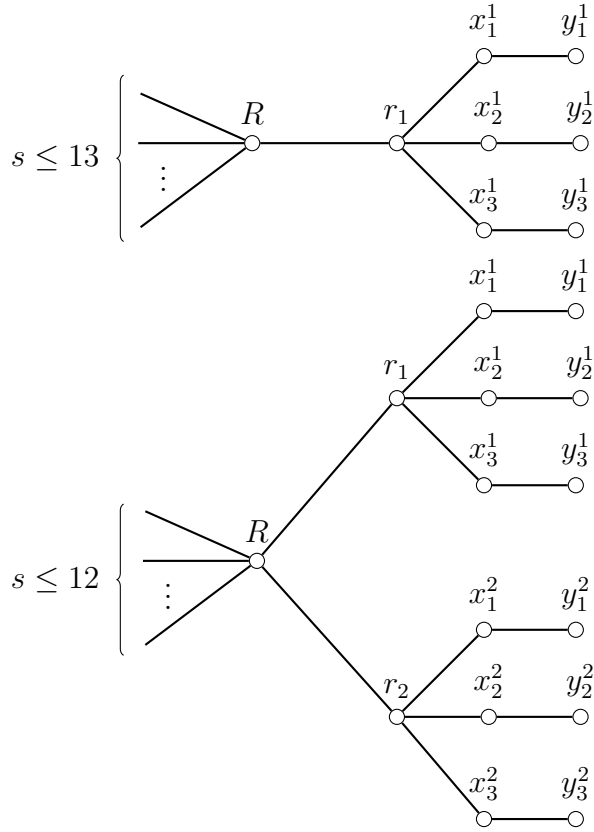


Figura 3.15: Grafos G do caso (vi) com $k = 1$ e $k = 2$, respectivamente.

Seja H o grafo obtido de G deletando x_1^1 e y_1^1 . Sejam a_1, \dots, a_s os outros vizinhos de R diferentes de r_1, \dots, r_k . Além disso, sejam u e v vértices diferentes de $x_1^k, x_2^k, x_3^k, y_1^k, y_2^k, y_3^k, r_1, \dots, r_k, a_1, \dots, a_s$. Temos que

$$\begin{aligned}
 R_{-1}(G) &= \frac{3}{2} + \frac{3}{8} + \frac{1}{4d_R} + \frac{3}{2}(k-1) + \frac{3}{8}(k-1) + \frac{1}{4d_R}(k-1) + \sum_{a_i \sim R} \frac{1}{d_{a_i}d_R} \\
 &\quad + \sum_{u \sim v} \frac{1}{d_u d_v}
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 R_{-1}(H) &= \frac{1}{2} \cdot 2 + \frac{1}{3 \cdot 2} \cdot 2 + \frac{1}{3d_R} + \frac{3}{2}(k-1) + \frac{3}{8}(k-1) + \frac{k-1}{4d_R} \sum_{a_i \sim R} \frac{1}{d_{a_i}d_R} \\
 &\quad + \sum_{u \sim v} \frac{1}{d_u d_v}.
 \end{aligned}$$

Assim,

$$R_{-1}(G) - R_{-1}(H) = \frac{3}{2} + \frac{3}{8} + \frac{1}{4d_R} - \left(1 + \frac{1}{3} + \frac{1}{3d_R}\right).$$

Pela hipótese de indução, temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &= R_{-1}(H) + \frac{3}{2} + \frac{3}{8} + \frac{1}{4d_R} - \left(1 + \frac{1}{3} + \frac{1}{3d_R}\right) \\ &\leq \frac{15}{56}(n-1) + \frac{3}{2} + \frac{3}{8} + \frac{1}{4d_R} - \left(1 + \frac{1}{3} + \frac{1}{3d_R}\right) \\ &\leq \frac{15}{56}(n-1) + \frac{30}{56} - \frac{30}{56} + \frac{3}{2} + \frac{3}{8} + \frac{1}{4d_R} - \left(1 + \frac{1}{3} + \frac{1}{3d_R}\right) \\ &= \frac{15}{56}(n+1) + \frac{d_R - 14}{168d_R} \\ &\leq \frac{15}{56}(n+1), \end{aligned}$$

desde que $d_R = s + k \leq 14$.

Caso (vii): Suponha que há um $(k, 2, k+1)$ -sistema de G para algum $k \geq 2$ fixado. Seja $u \neq r_j$, $1 \leq j \leq k$, um vértice adjacente ao vértice R .

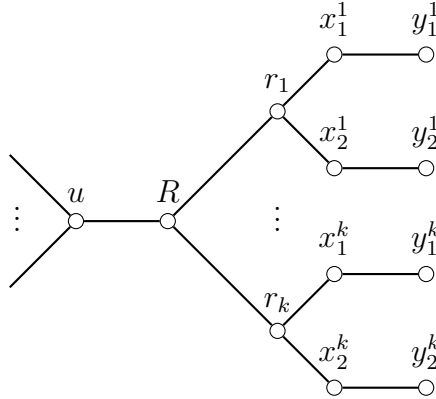


Figura 3.16: Grafo G do caso (vii).

Forme um grafo H obtido de G deletando os vértices de cada $(2, 3)$ -sistema com centro r_j para $j \geq 2$, deletando R e adicionando uma aresta entre os vértices u e r_1 . Note que $d_u^G = d_u^H$ e $d_{r_1}^G = d_{r_1}^H$. Sejam a_1, \dots, a_s os outros vizinhos

de u diferentes de R . Além disso, sejam a, b vértices de G diferentes dos vértices $u, R, r_1, \dots, r_k, x_1^k, x_2^k, y_1^k, y_2^k$. Assim, temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &= \frac{1}{2} \cdot 2 + \frac{1}{6} \cdot 2 + \frac{1}{3d_R} + \frac{1}{2} \cdot 2(k-1) + \frac{1}{6} \cdot 2(k-1) + \frac{1}{3d_R}(k-1) + \frac{1}{d_u d_R} \\ &\quad + \sum_{a_i \sim u} \frac{1}{d_{a_i} d_u} + \sum_{a \sim b} \frac{1}{d_a d_b} \\ &= 1 + \frac{2}{6} + \frac{1}{3d_R} + \frac{4(k-1)}{3} + \frac{k-1}{3d_R} + \frac{1}{d_u d_R} + \sum_{a_i \sim u} \frac{1}{d_{a_i} d_u} + \sum_{a \sim b} \frac{1}{d_a d_b} \end{aligned}$$

e

$$R_{-1}(H) = \frac{1}{2} \cdot 2 + \frac{1}{6} \cdot 2 + \frac{1}{3d_u} + \sum_{a_i \sim u} \frac{1}{d_{a_i} d_u} + \sum_{a \sim b} \frac{1}{d_a d_b}.$$

Então,

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) - R_{-1}(H) &= \frac{1}{3d_R} + \frac{4(k-1)}{3} + \frac{k-1}{3d_R} + \frac{1}{d_u d_R} - \frac{1}{3d_u} \\ &= \frac{k}{3d_R} + \frac{4(k-1)}{3} + \frac{1}{d_u d_R} - \frac{1}{3d_u}. \end{aligned}$$

Como $d_R = k + 1$, temos

$$R_{-1}(G) - R_{-1}(H) = \frac{k}{3(k+1)} + \frac{4(k-1)}{3} + \frac{1}{d_u(k+1)} - \frac{1}{3d_u}.$$

Assim, pela hipótese de indução, como deletamos $5(k-1) + 1$ vértices para formar H , temos

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &\leq \frac{15}{56}(n - 5k + 5) + \frac{k}{3(k+1)} + \frac{4(k-1)}{3} + \frac{1}{d_u(k+1)} - \frac{1}{3d_u} \\ &= \frac{15}{56}(n - 5k + 5) + \frac{15}{56}(5k - 4) - \frac{15}{56}(5k - 4) + \frac{k}{3(k+1)} + \frac{4(k-1)}{3} \\ &\quad + \frac{1}{d_u(k+1)} - \frac{1}{3d_u} \\ &= \frac{15}{56}(n + 1) + \frac{11kd_u + 224d_u k^2 - 269d_u - 56k + 112}{168d_u(k+1)} \\ &= \frac{15}{56}(n + 1) - \frac{d_u(-224k^2 - 11k + 269) + 56(k-2)}{168d_u(k+1)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&< \frac{15}{56}(n+1) - \frac{d_u(k^2 - 11k + 44) + 56(k-2)}{168d_u(k+1)} \\
&< \frac{15}{56}(n+1)
\end{aligned}$$

desde que $k^2 - 11k + 44 > 0$ e $k \geq 2$.

Caso (viii): Seja $k \geq 1$ e $t \in [1, 3]$.

(a) Suponha que há um $(k, 2, k+t+1)$ -sistema de G com centro R tal que R é também o centro de um $(t, k+t+1)$ -sistema (note que $d_R = k+t+1$). Seja u um vértice adjacente a R que não é um vértice de um dos sistemas com centro em R .

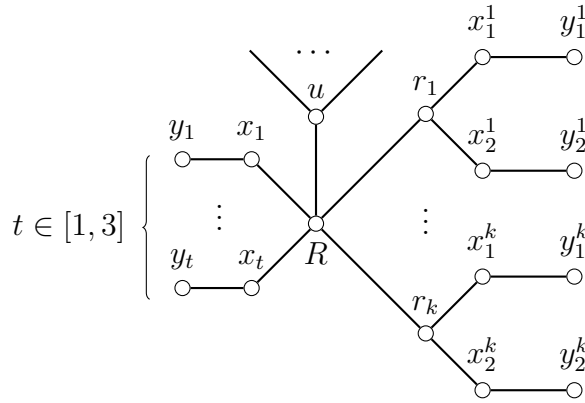


Figura 3.17: Grafo G do caso (viii), (a).

Seja H um grafo obtido de G deletando o vértice R e os vértices de todos os sistemas com centro em R e adicione um $(1, 2, d_u)$ -sistema com centro no vértice u . Sejam a_1, \dots, a_s os outros vizinhos de u diferentes de R . Além disso, sejam a, b vértices de G diferentes dos vértices $u, R, r_1, \dots, r_k, x_1^k, x_2^k, y_1^k, y_2^k, x_1, x_2, x_3, y_1, y_2, y_3$. Assim, temos que

$$\begin{aligned}
R_{-1}(G) &= \frac{1}{2} \cdot 2 + \frac{1}{2} \cdot 2(k-1) + \frac{1}{6} \cdot 2 + \frac{1}{6} \cdot 2(k-1) + \frac{1}{3(k+t+1)} \cdot k + \frac{1}{2} \cdot t \\
&+ \frac{1}{2(k+t+1)} \cdot t + \frac{1}{d_u(k+t+1)} + \sum_{a_i \sim u} \frac{1}{d_{a_i} d_u} + \sum_{a \sim b} \frac{1}{d_a d_b}
\end{aligned}$$

e

$$R_{-1}(H) = \frac{1}{2} \cdot 2 + \frac{1}{6} \cdot 2 + \frac{1}{3d_u} + \sum_{a_i \sim u} \frac{1}{d_{a_i} d_u} + \sum_{a \sim b} \frac{1}{d_a d_b}.$$

Então,

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) - R_{-1}(H) &= k - 1 + \frac{k-1}{3} + \frac{k}{3(k+t+1)} + \frac{t}{2} + \frac{t}{2(k+t+1)} \\ &\quad + \frac{1}{d_u(k+t+1)} - \frac{1}{3d_u} \\ &= \frac{4k}{3} + \frac{k}{3(k+t+1)} + \frac{t}{2} + \frac{t}{2(k+t+1)} + \frac{1}{d_u(k+t+1)} \\ &\quad - \frac{4}{3} - \frac{1}{3d_u}. \end{aligned}$$

Um total de $5(k-1) + 2t + 1$ vértices foram deletados. Então, pela hipótese de indução, temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &\leq \frac{15}{56}(n - 5k - 2t + 5) + \frac{4k}{3} + \frac{k}{3(k+t+1)} + \frac{t}{2} + \frac{t}{2(k+t+1)} \\ &\quad + \frac{1}{d_u(k+t+1)} - \frac{4}{3} - \frac{1}{3d_u} \\ &= \frac{15}{56}(n - 5k - 2t + 5) + \frac{15}{56}(5k + 2t - 4) - \frac{15}{56}(5k + 2t - 4) + \frac{4k}{3} \\ &\quad + \frac{k}{3(k+t+1)} + \frac{t}{2} + \frac{t}{2(k+t+1)} + \frac{1}{d_u(k+t+1)} - \frac{4}{3} - \frac{1}{3d_u} \\ &= \frac{15}{56}(n+1) - \frac{d_u(k^2 - 11k + 44 + 6t^2 + 7kt - 34t) + 56(k+t-2)}{168d_u(k+t+1)} \\ &< \frac{15}{56}(n+1) \end{aligned}$$

para $t \in [1, 3]$ e $k \geq 1$.

(b) Suponha que G tem um $(k, 2, k+t)$ -sistema com centro em R tal que R também é o centro de um $(t, k+t)$ -sistema. Note que $d_R = k+t$. Então, $n = 5k + 2t + 1$ e todo vértice de G pertence ao $(k, 2, k+t)$ -sistema ou ao $(t, k+t)$ -sistema.

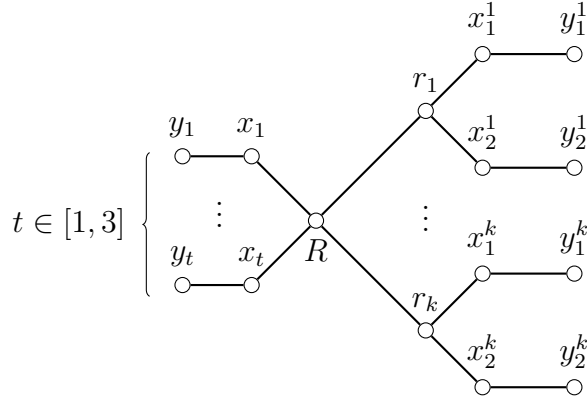


Figura 3.18: Grafo G do caso (viii), (b).

Temos que

$$\begin{aligned}
R_{-1}(G) &= \frac{2k}{2} + \frac{2k}{6} + \frac{k}{3(k+t)} + \frac{t}{2} + \frac{t}{2(k+t)} \\
&= \frac{4k}{3} + \frac{k}{3(k+t)} + \frac{t}{2} + \frac{t}{2(k+t)} \\
&= \frac{15}{56}(5k+2t+2) - \frac{15}{56}(5k+2t+2) + \frac{4k}{3} + \frac{k}{3(k+t)} + \frac{t}{2} + \frac{t}{2(k+t)} \\
&= \frac{15}{56}(n+1) + \frac{(-6t^2 - k^2 - 6t - 7kt - 34k)}{168(t+k)} \\
&= \frac{15}{56}(n+1) - \frac{k^2 + 7kt + 34k + 6t^2 + 6t}{168(t+k)} \\
&< \frac{15}{56}(n+1)
\end{aligned}$$

para $t \in [1, 3]$ e $k \geq 1$.

Até aqui conseguimos demonstrar o resultado por indução, mas não é possível demonstrar por indução as possibilidades que ainda não foram consideradas nos casos anteriores. Dessa forma, o caso final abaixo aborda os casos que faltam e o resultado é obtido de forma direta, calculando $R_{-1}(G)$.

Caso final: Podemos assumir que todo vértice de grau 1 em G é adjacente a um vértice de grau 2, pois os casos de um vértice de grau 1 ser adjacente a um vértice de grau 3 ou ser adjacente a um vértice de grau pelo menos 4 foram

abordados nos casos (i)-(iii). Além disso, todo vértice de grau 2 em G é adjacente a um vértice de grau 1 e a um vértice de grau pelo menos 3. Dessa forma, todo vértice de grau 1 ou 2 está contido em um sistema de G .

Se G é um sistema (t, t) então $n = 2t + 1$ e $R_{-1}(G) < \frac{15(n+1)}{56}$. De fato, temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &= \frac{t}{2} + \frac{t}{2t} = \frac{t+1}{2} \\ &= \frac{t+1}{2} + \frac{15}{56}(2t+2) - \frac{15}{56}(2t+2) \\ &= \frac{15}{56}(n+1) - \frac{t+1}{28} \\ &< \frac{15}{56}(n+1). \end{aligned}$$

Pelos casos (iv) e (v) temos que qualquer sistema $(t, s+t)$ de G com $s \neq 1$ deve ter $s \geq 2$, $s+t \leq 13$ e $t \leq 3$. Mas se $s = 1$, então qualquer sistema $(t, t+1)$ pertence a um sistema (k, t, d) de G .

Qualquer sistema $(k, t, s+k)$ de G deve ter $2 \leq t \leq 3$, pois se $t = 1$ então estamos no caso (ii) item (a) e se $t \geq 4$ então estamos no caso (v) com $s = 1$. Assim, temos que

- $t = 3$: Para sistemas $(k, 3, d)$, devemos ter $d \geq 15$, pois isso completa o caso (vi). Além disso, se $d = k$, então o grafo é um sistema $(k, 3, k)$ e $R_{-1}(G) < \frac{15(n+1)}{56}$. De fato, temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) &= \frac{3k}{2} + \frac{3k}{8} + \frac{k}{4k} = \frac{15k+2}{8} \\ &= \frac{15k+2}{8} + \frac{15}{56}(7k+2) - \frac{15}{56}(7k+2) \\ &= \frac{15}{56}(n+1) - \frac{2}{7} \\ &< \frac{15}{56}(n+1). \end{aligned}$$

- $t = 2$: Se G é um sistema $(k, 2, k)$ então $R_{-1}(G) < \frac{15(n+1)}{56}$. De fato, temos que

$$\begin{aligned}
R_{-1}(G) &= \frac{2k}{2} + \frac{2k}{6} + \frac{k}{3k} = \frac{4k+1}{3} \\
&= \frac{4k+1}{3} + \frac{15}{56}(5k+2) - \frac{15}{56}(5k+2) \\
&= \frac{15}{56}(n+1) - \frac{k+34}{168} \\
&< \frac{15}{56}(n+1).
\end{aligned}$$

Se G tem um sistema $(1, 2, 2)$, então o centro desse sistema tem grau 2 forçando G ser um sistema $(3, 3)$, que já vimos que vale o resultado. Então, para sistemas $(k, 2, s+k)$ devemos ter $s \geq 2$.

Note que, em G o vértice central de um sistema $(k, 2, d)$ e $(k', 3, d)$ pode coincidir, assim como o vértice central de um sistema $(k, 2, d)$ e um sistema (t, d) . Mas não o vértice central de um sistema $(k, 3, d)$ e um sistema (t, d) , pois conseguimos reduzir o sistema $(k, 3, d)$ para um $(k, 2, d)$ pelo caso (vi).

Dessa forma, podemos particionar os vértices do grafo G para separar os sistemas. Pelo Caso (0), G tem pelo menos um sistema.

- Seja A_1 a coleção de centros de sistemas $(1, d)$ com $3 \leq d \leq 13$ que não compartilham um centro com nenhum sistema $(2, d)$ ou (k, t, d) .

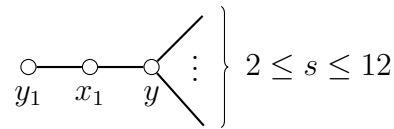


Figura 3.19: Sistema $(1, d)$ com $3 \leq d \leq 13$.

- Seja A_2 a coleção de centros de sistemas $(2, d)$ com $4 \leq d \leq 13$ que não compartilham um centro com nenhum sistema $(3, d)$ ou (k, t, d) .

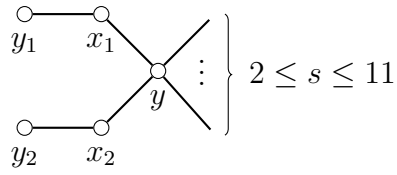


Figura 3.20: Sistema $(2, d)$ com $4 \leq d \leq 13$.

- Seja A_3 a coleção de centros de sistemas $(3, d)$ com $5 \leq d \leq 13$ que não compartilham um centro com nenhum sistema (k, t, d) .

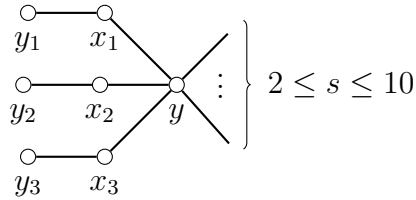


Figura 3.21: Sistema $(3, d)$ com $5 \leq d \leq 13$.

- Para $k \geq 1$, seja B_k a coleção de centros de sistemas $(k, 2, d)$ com $d \geq k+2$ que não compartilham um centro com nenhum sistema $(k+1, 2, d)$, $(k', 3, d)$ ou (i, d) , para $k', i \geq 1$.

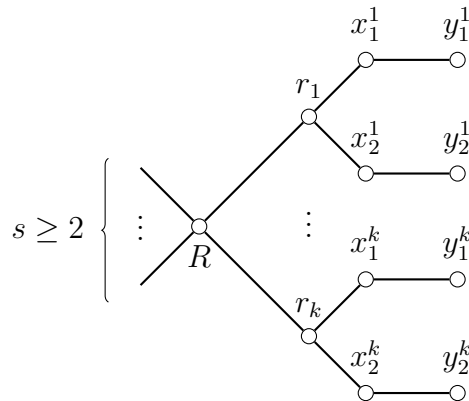


Figura 3.22: Sistema $(k, 2, d)$ com $d \geq k + 2$.

- Para $k \geq 1$, seja C_k a coleção de centros de sistemas $(k, 3, d)$ com $d \geq k+1$ que não compartilham um centro com nenhum sistema $(k+1, 3, d)$ ou $(k', 2, d)$ para $k' \geq 1$.

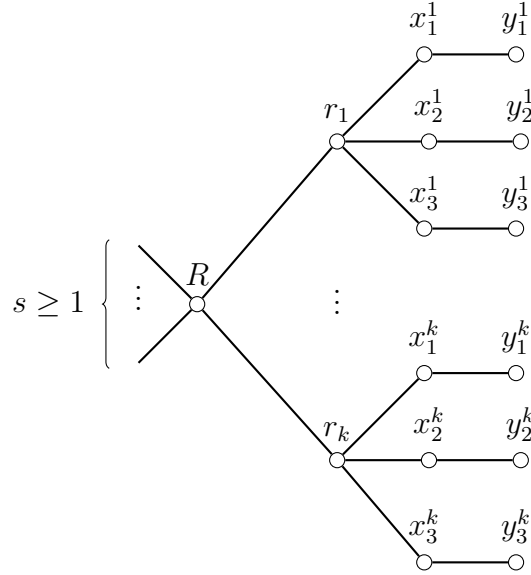


Figura 3.23: Sistema $(k, 3, d)$ com $d \geq k + 1$.

- Para $k_1, k_2 \geq 1$ seja D_{k_1, k_2} a coleção de centros R , tal que os sistemas $(k_1, 2, d)$ e $(k_2, 3, d)$ tem centro R , mas R não é centro de um sistema $(k_1 + 1, 2, d)$ ou de um sistema $(k_2 + 1, 3, d)$.
- Para $i \in [1, 3]$ e $k \in [1, 13 - i]$, seja E_k^i a coleção de centros R tal que os sistemas $(k, 2, d)$ e (i, d) tem centro R , mas R não é o centro de $(k + 1, 2, d)$ ou $(i + 1, d)$.

Os conjuntos acima fornecem uma partição de G em seus sistemas. Se um vértice z é o centro de um sistema de G , então ou z aparece exatamente em um conjunto descrito acima ou z é o centro de um sistema $(t, t + 1)$ que pertence a um sistema (k, t, d) (cujo centro pertence a exatamente um conjunto descrito acima).

Consideramos Q o conjunto de vértices de G que tem grau pelo menos 3 e não é centro de um sistema de G . Assim, temos que o número de vértices de G

é dado por

$$\begin{aligned}
n &= |Q| + 3|A_1| + 5|A_2| + 7|A_3| + \sum_{k \geq 1} (5k + 1)|B_k| + \sum_{k \geq 1} (7k + 1)|C_k| \\
&+ \sum_{k_1 \geq 1} \sum_{k_2 \geq 1} (5k_1 + 7k_2 + 1)|D_{k_1, k_2}| + \sum_{k=1}^{12} (5k + 3)|E_k^1| + \sum_{k=1}^{11} (5k + 5)|E_k^2| \\
&+ \sum_{k=1}^{10} (5k + 7)|E_k^3|.
\end{aligned}$$

Usando (3.2), contaremos o peso em cada vértice de G . Isto é,

$$R_{-1}(G) = \frac{1}{2} \sum_{y \in V} \frac{1}{d_y} \sum_{\substack{x \\ x \sim y}} \frac{1}{d_x}.$$

Se S é um subconjunto de vértices de G , escrevemos $w(S)$ para denotar a soma dos pesos dos vértices em S . Então, se $y \in S$, então

$$w(y) = \frac{1}{2d_y} \sum_{\substack{x \\ x \sim y}} \frac{1}{d_x}.$$

Seja $y \in Q$. Como y não é centro de nenhum sistema de G , então y não pode ser adjacente a vértices de grau 1 ou 2, então

$$w(y) \leq \frac{1}{2d_y} \sum_{\substack{x \\ x \sim y}} \frac{1}{d_x} \leq \frac{1}{2d_y} \sum_{\substack{x \\ x \sim y}} \frac{1}{3} = \frac{1}{2d_y} \cdot \frac{d_y}{3} = \frac{1}{6} < \frac{15}{56}.$$

Seja $y \in A_1$ e S_y o conjunto de vértices de $(1, d_y)$ com centro em y . Como $d_y \geq 3$, contando o peso do vértice de grau 1, grau 2 e y , respectivamente, temos

$$w(y_1) = \frac{1}{2d_{y_1}} \sum_{\substack{x \\ x \sim y_1}} \frac{1}{d_x} = \frac{1}{2d_{y_1}} \cdot \frac{1}{d_{x_1}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{4},$$

$$w(x_1) = \frac{1}{2d_{x_1}} \left(\frac{1}{d_{y_1}} + \frac{1}{d_y} \right) = \frac{1}{4} \left(1 + \frac{1}{d_y} \right),$$

$$w(y) = \frac{1}{2d_y} \left(\frac{1}{d_{x_1}} + \sum_{i=1}^{12} \frac{1}{d_{y_i}} \right) \leq \frac{1}{2d_y} \left(\frac{1}{2} + \frac{d_y - 1}{3} \right).$$

Então, temos

$$\begin{aligned} \frac{w(S_y)}{3} &\leq \frac{1}{3} \left[\frac{1}{4} + \frac{1}{4} \left(1 + \frac{1}{d_y} \right) + \frac{1}{2d_y} \left(\frac{1}{2} + \frac{d_y - 1}{3} \right) \right] = \frac{1}{3} \left(\frac{2d_y + 1}{3d_y} \right) \\ &= \frac{2d_y + 1}{9d_y} < \frac{15}{56}. \end{aligned}$$

Seja $y \in A_2$ e S_y o conjunto de vértices de $(2, d_y)$ com centro em y .

Como $d_y \geq 4$, temos

$$\begin{aligned} \frac{w(S_y)}{5} &\leq \frac{1}{5} \left[2 \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4} \left(1 + \frac{1}{d_y} \right) \right) + \frac{1}{2d_y} \left(1 + \frac{d_y - 2}{3} \right) \right] = \frac{1}{5} \left(\frac{7d_y + 4}{6d_y} \right) \\ &= \frac{7d_y + 4}{30d_y} < \frac{15}{56}. \end{aligned}$$

Seja $y \in A_3$ e S_y o conjunto de vértices de $(3, d_y)$ com centro em y .

Como $d_y \geq 5$, temos

$$\begin{aligned} \frac{w(S_y)}{7} &\leq \frac{1}{7} \left[3 \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4} \left(1 + \frac{1}{d_y} \right) \right) + \frac{1}{2d_y} \left(\frac{3}{2} + \frac{d_y - 3}{3} \right) \right] = \frac{1}{7} \left(\frac{5d_y + 3}{3d_y} \right) \\ &= \frac{5d_y + 3}{21d_y} < \frac{15}{56}. \end{aligned}$$

Seja $y \in B_k$ e S_y o conjunto de vértices de um sistema $(k, 2, d_y)$ com centro em y . Então,

$$\begin{aligned} \frac{w(S_y)}{5k+1} &\leq \frac{1}{5k+1} \left[k \left(\frac{7}{6} + \frac{1}{6} \left(1 + \frac{1}{d_y} \right) \right) + \frac{1}{2d_y} \left(\frac{k}{3} + \frac{d_y - k}{3} \right) \right] \\ &= \frac{8kd_y + d_y + k}{6d_y(5k+1)}. \end{aligned}$$

Subtraindo $\frac{15}{56}$ de ambos os lados, temos

$$\frac{w(S_y)}{5k+1} - \frac{15}{56} \leq \frac{-17d_y - kd_y + 28k}{168d_y(5k+1)}.$$

Como $d_y \geq k + 2$, temos que

$$-17d_y - kd_y + 28k \leq -k^2 + 9k - 34 = -(k^2 - 9k + 34).$$

Quando $k = 4$ ou $k = 5$ temos que $k^2 - 9k + 34 = 14$. Então,

$$\frac{w(S_y)}{5k+1} < \frac{15}{56}.$$

Seja $y \in C_k$ e S_y o conjunto de vértices do sistema $(k, 3, d_y)$ com centro em y . Então,

$$\begin{aligned} \frac{w(S_y)}{7k+1} &\leq \frac{1}{7k+1} \left[k \left(\frac{27}{16} + \frac{1}{8} \left(\frac{3}{2} + \frac{1}{d_y} \right) \right) + \frac{1}{2d_y} \left(\frac{k}{4} + \frac{d_y - k}{3} \right) \right] \\ &= \frac{4d_y + 45d_y k + 2k}{24d_y(7k+1)}. \end{aligned}$$

Subtraindo $\frac{15}{56}$ de ambos os lados, temos

$$\frac{w(S_y)}{7k+1} - \frac{15}{56} \leq \frac{-17d_y + 14k}{168d_y(7k+1)}.$$

Como $d_y \geq k$, temos que

$$\frac{w(S_y)}{7k+1} < \frac{15}{56}.$$

Seja $y \in D_{k_1, k_2}$ e S_y o conjunto de vértices de sistemas $(k_1, 2, d_y)$ e $(k_2, 3, d_y)$ com centro em y . Então,

$$\begin{aligned} \frac{w(S_y)}{5k_1 + 7k_2 + 1} &\leq \frac{1}{5k_1 + 7k_2 + 1} \left[k_1 \left(\frac{4}{3} + \frac{1}{6d_y} \right) + k_2 \left(\frac{15}{8} + \frac{1}{8d_y} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2d_y} \left(\frac{k_1}{3} + \frac{k_2}{4} + \frac{d_y - k_1 - k_2}{3} \right) \right] \\ &= \frac{32k_1 d_y + 4k_1 + 45k_2 d_y + 2k_2 + 4d_y}{24d_y(5k_1 + 7k_2 + 1)}. \end{aligned}$$

Subtraindo $\frac{15}{56}$ de ambos os lados, temos

$$\frac{w(S_y)}{5k_1 + 7k_2 + 1} - \frac{15}{56} \leq \frac{-k_1 d_y + 28k_1 - 17d_y + 14k_2}{168d_y(5k_1 + 7k_2 + 1)}$$

$$= -\frac{k_1 d_y - 28k_1 + 17d_y - 14k_2}{168d_y(5k_1 + 7k_2 + 1)}.$$

Como $d_y \geq k_1 + k_2$, temos

$$k_1 d_y - 28k_1 + 17d_y - 14k_2 \geq k_1^2 + k_1 k_2 - 11k_1 + 3k_2.$$

Mas $k_2 \geq 15 - k_1$, então

$$k_1^2 + k_1 k_2 - 11k_1 + 3k_2 \geq k_1 + 45 > 0.$$

Portanto,

$$\frac{w(S_y)}{5k_1 + 7k_2 + 1} < \frac{15}{56}.$$

Fixe $t \in [1, 3]$. Seja $y \in E_k^t$ e S_y o conjunto de vértices de um sistema $(k, 2, d_y)$ e de um sistema (t, d_y) com centro y . Então,

$$\begin{aligned} \frac{w(S_y)}{5k + 2t + 1} &\leq \frac{1}{5k + 2t + 1} \left[k \left(\frac{4}{3} + \frac{1}{6d_y} \right) + t \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4d_y} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2d_y} \left(\frac{t}{2} + \frac{d_y - t}{3} \right) \right] \\ &= \frac{8kd_y + k + 3td_y + 2t + d_y}{6d_y(5k + 2t + 1)}. \end{aligned}$$

Subtraindo $\frac{15}{56}$ de ambos os lados, temos

$$\begin{aligned} \frac{w(S_y)}{5k + 2t + 1} - \frac{15}{56} &\leq \frac{-kd_y + 28k - 6d_y t - 17d_y + 56t}{168d_y(2t + 5k + 1)} \\ &= -\frac{kd_y - 28k + 6d_y t + 17d_y - 56t}{168d_y(2t + 5k + 1)}. \end{aligned}$$

Desde que $d_y = k + t + s$ com $s \geq 2$ (pelo caso (viii)), podemos verificar que para $t \in [1, 3]$, $k \in [1, 13 - t]$ e $s \in [2, 13 - t - k]$

$$kd_y - 28k + 6d_y t + 17d_y - 56t > 0.$$

Então,

$$\frac{w(S_y)}{5k + 2t + 1} < \frac{15}{56}.$$

Dessa forma, temos que $R_{-1}(G)$ pode ser calculado da seguinte forma

$$\begin{aligned}
R_{-1}(G) &= \sum_{y \in Q} w(y) + \sum_{y \in A_1} w(S_y) + \sum_{y \in A_2} w(S_y) + \sum_{y \in A_3} w(S_y) + \sum_{k \geq 1} \sum_{y \in B_k} w(S_y) \\
&\quad + \sum_{k \geq 1} \sum_{y \in C_k} w(S_y) + \sum_{k_1 \geq 1} \sum_{k_2 \geq 1} \sum_{y \in D_{k_1, k_2}} w(S_y) + \sum_{t=1}^3 \sum_{k=1}^{13-t} \sum_{y \in E_k^t} w(S_y) \\
&< \sum_{y \in Q} \frac{15}{56} + \sum_{y \in A_1} \frac{15}{56} \cdot 3 + \sum_{y \in A_2} \frac{15}{56} \cdot 5 + \sum_{y \in A_3} \frac{15}{56} \cdot 7 + \sum_{k \geq 1} \sum_{y \in B_k} \frac{15}{56} \cdot (5k + 1) \\
&\quad + \sum_{k \geq 1} \sum_{y \in C_k} \frac{15}{56} \cdot (7k + 1) + \sum_{k_1 \geq 1} \sum_{k_2 \geq 1} \sum_{y \in D_{k_1, k_2}} \frac{15}{56} \cdot (5k_1 + 7k_2 + 1) \\
&\quad + \sum_{t=1}^3 \sum_{k=1}^{13-t} \sum_{y \in E_k^t} \frac{15}{56} \cdot (5k + 2t + 1) \\
&= \frac{15}{56} |Q| + \frac{15}{56} \cdot 3 |A_1| + \frac{15}{56} \cdot 5 |A_2| + \frac{15}{56} \cdot 7 |A_3| + \frac{15}{56} \sum_{k \geq 1} (5k + 1) |B_k| \\
&\quad + \frac{15}{56} \sum_{k \geq 1} (7k + 1) |C_k| + \frac{15}{56} \sum_{k_1 \geq 1} \sum_{k_2 \geq 1} (5k_1 + 7k_2 + 1) |D_{k_1, k_2}| \\
&\quad + \frac{15}{56} \sum_{t=1}^3 \sum_{k=1}^{13-t} (5k + 2t + 1) |E_k^t| \\
&= \frac{15}{56} \left(|Q| + 3 |A_1| + 5 |A_2| + 7 |A_3| + \sum_{k \geq 1} (5k + 1) |B_k| + \sum_{k \geq 1} (7k + 1) |C_k| \right. \\
&\quad \left. + \sum_{k_1 \geq 1} \sum_{k_2 \geq 1} (5k_1 + 7k_2 + 1) |D_{k_1, k_2}| + \sum_{t=1}^3 \sum_{k=1}^{13-t} (5k + 2t + 1) |E_k^t| \right) \\
&= \frac{15}{56} n < \frac{15}{56} (n + 1)
\end{aligned}$$

o que conclui a demonstração. \square

Do Teorema 3.2.6 consegue-se uma cota melhor para o caso de grafos sem caminhos suspensos. Usando $\frac{n}{4}$ ao invés de $\frac{15(n+1)}{56}$ nos casos (0)-(iii) o resultado abaixo é válido (com exceção da primeira possibilidade do caso (ii) item (a), que possui caminho suspenso).

Corolário 3.2.1. *Seja G um grafo conexo com $n \geq 3$ vértices. Se G não tem caminhos suspensos, então*

$$R_{-1}(G) \leq \frac{n}{4}.$$

3.3 Efeito de deletar arestas em $R_{-1}(G)$

Nesta Seção, vamos ver o que acontece com $R_{-1}(G)$ quando deletamos uma aresta de G . Chamamos uma aresta $e = uv$ de folha de G , se $d_u = 1$ ou $d_v = 1$, e de aresta não folha caso contrário. Note que, a exclusão de uma aresta folha de G produz um vértice isolado em G . Denotaremos por $G - e$ o grafo obtido de G excluindo a aresta e . Assim, nos dois próximos resultados estamos considerando que a aresta deletada não é uma aresta folha. O Lema 3.3.1 abaixo é um resultado de Li e Yang [31].

Lema 3.3.1. *Seja G um grafo e seja $e = uv$ uma aresta com o menor peso possível sobre todas as arestas de G . Se e não é uma aresta folha, então*

$$R_{-1}(G - e) > R_{-1}(G).$$

Demonstração. Seja S_u a soma de todos os pesos das arestas que são incidentes ao vértice u , exceto a aresta e e seja S_v a soma de todos os pesos das arestas que são incidentes ao vértice v , exceto e . Isto é

$$S_u = \sum_{\substack{i \sim u \\ i \neq v}} \frac{1}{d_i d_u} \quad \text{e} \quad S_v = \sum_{\substack{j \sim v \\ j \neq u}} \frac{1}{d_j d_v}.$$

Como $d_i \leq d_v$ e $d_j \leq d_u$, pois uv é uma aresta com o menor peso possível, temos que

$$S_u \geq \frac{d_u - 1}{d_u d_v} \quad \text{e} \quad S_v \geq \frac{d_v - 1}{d_u d_v}.$$

Dessa forma, temos

$$R_{-1}(G - e) - R_{-1}(G) = S_u \cdot \frac{d_u}{d_u - 1} + S_v \cdot \frac{d_v}{d_v - 1} - S_u - S_v = \frac{1}{d_u d_v}$$

$$\begin{aligned}
&= S_u \left(\frac{d_u}{d_u - 1} - 1 \right) + S_v \left(\frac{d_v}{d_v - 1} - 1 \right) - \frac{1}{d_u d_v} \\
&\geq \frac{d_u - 1}{d_u d_v} \cdot \frac{1}{d_u - 1} + \frac{d_v - 1}{d_u d_v} \cdot \frac{1}{d_v - 1} - \frac{1}{d_u d_v} \\
&= \frac{1}{d_u d_v} + \frac{1}{d_u d_v} - \frac{1}{d_u d_v} \\
&= \frac{1}{d_u d_v} > 0.
\end{aligned}$$

Portanto,

$$R_{-1}(G - e) > R_{-1}(G).$$

□

O próximo Teorema determina a mudança máxima que pode ocorrer ao excluir uma aresta de G , este também é um resultado de Cavers, Fallat e Kirkland [11].

Teorema 3.3.2. *Seja G um grafo e seja $e = uv$ uma aresta que não é folha de G . Então,*

$$R_{-1}(G) - \frac{1}{4} < R_{-1}(G - e) \leq R_{-1}(G) + \frac{3}{4}.$$

Além disso, se $G - e$ é conexo, então

$$R_{-1}(G - e) \leq R_{-1}(G) + \frac{7}{18}.$$

Demonstração. Temos que

$$\begin{aligned}
R_{-1}(G) - R_{-1}(G - e) &= \frac{1}{d_u} \sum_{\substack{i \sim u \\ i \neq v}} \frac{1}{d_i} + \frac{1}{d_v} \sum_{\substack{i \sim v \\ i \neq u}} \frac{1}{d_i} + \frac{1}{d_u d_v} - \frac{1}{d_u - 1} \sum_{\substack{i \sim u \\ i \neq v}} \frac{1}{d_i} \\
&\quad - \frac{1}{d_v - 1} \sum_{\substack{i \sim v \\ i \neq u}} \frac{1}{d_i} \\
&= \frac{1}{d_u d_v} - \frac{1}{d_u(d_u - 1)} \sum_{\substack{i \sim u \\ i \neq v}} \frac{1}{d_i} - \frac{1}{d_v(d_v - 1)} \sum_{\substack{i \sim v \\ i \neq u}} \frac{1}{d_i}.
\end{aligned}$$

Como e não é uma aresta folha, temos que $d_u, d_v \geq 2$, então

$$R_{-1}(G) - R_{-1}(G - e) < \frac{1}{d_u d_v} \leq \frac{1}{4}.$$

Portanto,

$$R_{-1}(G) - \frac{1}{4} < R_{-1}(G - e).$$

Da mesma forma, como $d_i \geq 1$, temos que

$$\begin{aligned} R_{-1}(G) - R_{-1}(G - e) &= \frac{1}{d_u d_v} - \frac{1}{d_u(d_u - 1)} \sum_{\substack{i \sim u \\ i \neq v}} \frac{1}{d_i} - \frac{1}{d_v(d_v - 1)} \sum_{\substack{i \sim v \\ i \neq u}} \frac{1}{d_i} \\ &\geq \frac{1}{d_u d_v} - \frac{1}{d_u(d_u - 1)} \cdot (d_u - 1) - \frac{1}{d_v(d_v - 1)} \cdot (d_v - 1) \\ &= \frac{1}{d_u d_v} - \frac{1}{d_u} - \frac{1}{d_v}. \end{aligned}$$

Note que o lado direito da desigualdade acima é mínimo quando $d_u = d_v = 2$, assim temos que

$$R_{-1}(G) - R_{-1}(G - e) \geq -\frac{3}{4}.$$

Portanto,

$$R_{-1}(G - e) \leq R_{-1}(G) + \frac{3}{4}.$$

Agora, se $G - e$ é conexo, então existem vértices $\hat{i} \neq v$ e $\hat{j} \neq u$ (com a possibilidade de $\hat{i} = \hat{j}$) tais que $\hat{i} \sim u$, $\hat{j} \sim v$, $d_{\hat{i}} > 1$ e $d_{\hat{j}} > 1$. Então,

$$R_{-1}(G) - R_{-1}(G - e) \geq \frac{1}{d_u d_v} - \frac{1}{2d_u(d_u - 1)} - \frac{d_u - 2}{d_u(d_u - 1)} - \frac{1}{2d_v(d_v - 1)} - \frac{d_v - 2}{d_v(d_v - 1)}.$$

Para $d_u, d_v \geq 2$ temos que o lado direito da desigualdade acima é mínimo quando $d_u = d_v = 3$. Então, no caso que $G - e$ é conexo, temos que

$$R_{-1}(G) - R_{-1}(G - e) \geq -\frac{7}{18}.$$

□

Os exemplos abaixo ilustram a igualdade das cotas do Teorema 3.3.2.

Exemplo 3.3.1. *Seja G o caminho P_4 . Temos que $R_{-1}(G) = 2 \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{4} = \frac{5}{4}$. Se removermos a aresta $e = uv$ de G , que não é folha, obtemos um grafo desconexo, ver Figura 3.24. Assim, temos que $R_{-1}(G - e) = 2$. Dessa forma,*

$$R_{-1}(G - e) = R_{-1}(G) + \frac{3}{4}.$$



Figura 3.24: Grafos G e $G - e$, respectivamente.

Exemplo 3.3.2. *Seja G o grafo formado pelo caminho P_7 com $V = \{v_1, v_2, \dots, v_7\}$ e pela aresta e que liga v_2 a v_6 , ver Figura 3.25.*

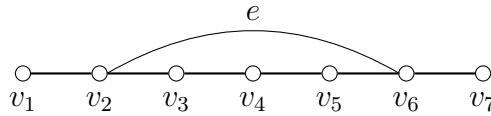


Figura 3.25: Grafo G .

Temos que

$$R_{-1}(G) = 2 \cdot \frac{1}{3} + 2 \cdot \frac{1}{6} + 2 \cdot \frac{1}{4} + \frac{1}{9} = \frac{29}{18}$$

e

$$R_{-1}(G - e) = 2 \cdot \frac{1}{2} + 4 \cdot \frac{1}{4} = 2.$$

Como $G - e$ é conexo, temos que $R_{-1}(G - e) = R_{-1}(G) + \frac{7}{18}$.

No Capítulo a seguir, veremos algumas propriedades da matriz de Randić, suas relações com a matriz de adjacência e o maior autovalor de $R(G)$.

4 MATRIZ DE RANDIĆ

Vimos no Capítulo 2 a definição da matriz de Randić e sua relação com a matriz Laplaciana normalizada. Neste Capítulo, serão apresentadas algumas propriedades da matriz de Randić, que serão úteis para falarmos sobre a energia de Randić no Capítulo 5. Também observaremos que $R(G)$ e $A(G)$ tem o mesmo número de autovalores positivos, zeros e negativos. Além disso, vamos ver que o determinante de $R(G)$ pode ser escrito em função do determinante de $A(G)$. Por fim, vamos demonstrar o resultado de que 1 é o maior autovalor da matriz de Randić para grafos com pelo menos uma aresta, associado ao autovetor $(\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2}, \dots, \sqrt{d_n})^T$.

4.1 Algumas propriedades da matriz de Randić

O espectro de um grafo G é formado somente por zeros se, e somente se, G for o grafo com n vértices isolados. O Teorema 4.1.1 a seguir fornece esse resultado.

Teorema 4.1.1. *Seja K_n o grafo completo com n vértices e $\overline{K_n}$ seu complementar. Então, $S_R(G) = \{0^{(n)}\}$ se, e somente se, $G \cong \overline{K_n}$.*

Demonstração. Como $S_R(G) = \{0^{(n)}\}$, o polinômio mínimo de $R(G)$ é $q_R(\lambda) = \lambda - 0 = \lambda$. Assim, como o polinômio mínimo satisfaz $q_R(R) = 0$, obtemos que $R(G)$ deve ser a matriz nula $n \times n$. Portanto, G é o grafo com n vértices isolados.

Por outro lado, a matriz de Randić de um grafo que consiste em n vértices isolados é a matriz nula $n \times n$, pois não há adjacências entre nenhum par de vértices. Assim, $\lambda I_n - R = \lambda I_n$. Como $\phi_R(G, \lambda) = \det(\lambda I_n - R)$ e sabemos que o determinante de uma matriz diagonal é o produto dos elementos da diagonal principal, então $\phi_R(G, \lambda) = \lambda^n$. Dessa forma, $S_R(G) = \{0^{(n)}\}$. \square

Se G é um grafo desconexo com p componentes G_1, G_2, \dots, G_p , isto é, $G = G_1 \cup G_2 \cup \dots \cup G_p$, o R -espectro e o A -espectro de G são dados por

$$\begin{aligned} S_R(G) &= S_R(G_1) \cup S_R(G_2) \cup \dots \cup S_R(G_p), \\ S_A(G) &= S_A(G_1) \cup S_A(G_2) \cup \dots \cup S_A(G_p). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Os dois Teoremas a seguir relacionam a matriz de adjacência com a matriz de Randić de um grafo G .

Teorema 4.1.2. *Seja G um grafo com n vértices e sejam $A(G)$ e $R(G)$ sua matriz de adjacência e de Randić, respectivamente. Se $A(G)$ tem n_+ , n_0 e n_- , autovalores positivos, zeros e negativos, respectivamente, então $R(G)$ tem n_+ , n_0 e n_- autovalores positivos, zeros e negativos, respectivamente. Note que $(n_+ + n_0 + n_- = n)$.*

Demonstração. Vamos dividir em dois casos: quando G tem vértices isolados e quando G não tem vértices isolados. No caso em que G tem vértices isolados, podemos escrever G como $G \cong G' \cup \overline{K}_\ell$, onde G' não tem vértices isolados. Assim, pelo Teorema 4.1.1 e pela equação (4.1), vale que $S_R(G) = S_R(G') \cup \{0^{(\ell)}\}$ e $S_A(G) = S_A(G') \cup \{0^{(\ell)}\}$. Dessa forma, $R(G)$ e $A(G)$ tem $n_+(G')$ autovalores positivos e $n_-(G')$ autovalores negativos, além disso possuem $n_0(G') + \ell$ autovalores zero.

Vimos no Capítulo 2 que quando G não tem vértices isolados, podemos escrever a matriz de Randić da forma $R = D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$. Como a matriz D é simétrica, $D^T = D$, assim obtemos que $(D^{-\frac{1}{2}})^T = D^{-\frac{1}{2}}$, de forma que podemos reescrever R como $R = D^{-\frac{1}{2}}A(D^{-\frac{1}{2}})^T$. Isto é, R e A são congruentes. A Lei da inércia de Sylvester estabelece que matrizes simétricas congruentes têm a mesma inércia. Portanto, R também tem n_+ , n_0 e n_- autovalores positivos, zeros e negativos, respectivamente. \square

Teorema 4.1.3. *Seja G um grafo com n vértices. Se G possui vértices isolados, então $\det(A(G)) = \det(R(G)) = 0$. Se G não possui vértices isolados, então*

$$\det(R(G)) = \frac{1}{d_1 d_2 \dots d_n} \cdot \det(A(G)),$$

onde d_1, d_2, \dots, d_n são os graus dos vértices de G .

Demonstração. Se G possui vértices isolados, pelo Teorema 4.1.2, as matrizes $A(G)$ e $R(G)$ possuem autovalores zeros. Como o determinante de uma matriz é a multiplicação de todos os seus autovalores, concluímos que $\det(A(G)) = \det(R(G)) = 0$.

Se G não tem vértices isolados, podemos escrever a matriz de Randić da forma $R = D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}}$. Observe que

$$\begin{aligned} R &= D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}} \\ D^{-\frac{1}{2}} R &= D^{-\frac{1}{2}} D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}} \\ D^{-\frac{1}{2}} R &= D^{-1} A D^{-\frac{1}{2}} \\ \Rightarrow D^{-\frac{1}{2}} R D^{\frac{1}{2}} &= D^{-1} A D^{-\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} \\ \Rightarrow D^{-\frac{1}{2}} R D^{\frac{1}{2}} &= D^{-1} A. \end{aligned}$$

Isto é, as matrizes R e $D^{-1}A$ são similares, então têm os mesmos autovalores e seus determinantes são iguais. Dessa forma,

$$\begin{aligned} \det(R) &= \det(D^{-1}A) \\ &= \det(D^{-1}) \det(A) \\ &= \frac{1}{\det(D)} \det(A) \\ &= \frac{1}{d_1 d_2 \dots d_n} \det(A). \end{aligned}$$

□

Vimos no Capítulo 3 duas formulações para o índice de Randić $R_{-1}(G)$. O Teorema 4.1.4 a seguir nos fornece outra forma para determinar $R_{-1}(G)$, que

envolve o traço da matriz R^2 . Usaremos esse resultado para determinar uma cota superior para a energia de Randić no próximo Capítulo.

Teorema 4.1.4. *Seja G um grafo com n vértices. Então,*

$$R_{-1}(G) = \frac{\text{tr}(R^2)}{2}.$$

Demonstração. Vamos olhar para as entradas da diagonal da matriz R^2 . Para $i = j$, temos que

$$(R^2)_{ii} = \sum_{j=1}^n R_{ij}R_{ji} = \sum_{j=1}^n (R_{ij})^2 = \sum_{i \sim j} (R_{ij})^2 = \sum_{i \sim j} \left(\frac{1}{\sqrt{d_i d_j}} \right)^2 = \sum_{i \sim j} \frac{1}{d_i d_j}.$$

Portanto,

$$\text{tr}(R^2) = \sum_{i=1}^n \sum_{i \sim j} \frac{1}{d_i d_j} = 2 \sum_{i \sim j} \frac{1}{d_i d_j} = 2R_{-1}(G).$$

□

O Teorema 4.1.5 ([39]) abaixo fornece informações sobre os três primeiros coeficientes do polinômio característico de $R(G)$.

Teorema 4.1.5. *Seja G um grafo com n vértices e seja*

$$\phi_R(G, \rho) = \rho^n + c_1 \rho^{n-1} + c_2 \rho^{n-2} + \cdots + c_{n-1} \rho + c_n$$

o polinômio característico de $R(G)$. Os coeficientes de $\phi_R(G, \rho)$ satisfazem

$$(a) \quad c_1 = 0;$$

$$(b) \quad -c_2 = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^n \rho_l^2 = \sum_{i \sim j} \frac{1}{d_i d_j} = R_{-1}(G);$$

$$(c) \quad c_3 = \sum_{\langle i,j,k \rangle \cong K_3} \frac{-2}{d_i d_j d_k},$$

onde $\langle i, j, k \rangle \cong K_3$ percorre todos os subgrafos de G induzidos por $\{v_i, v_j, v_k\}$ e isomorfo a K_3 .

Demonstração. Da teoria de matrizes temos que, para cada r , $1 \leq r \leq n$, o número $(-1)^r c_r$ é a soma dos menores principais de $R(G)$ com r linhas e r colunas. Um menor principal de $R(G)$ com r linhas e r colunas é o determinante de qualquer submatriz principal de $R(G)$.

(a) Como $R(G)$ tem todas as entradas da diagonal zero, então todos os seus menores principais com 1 linha e 1 coluna são iguais a zero. Portanto, $c_1 = 0$.

(b) Qualquer menor principal de $R(G)$ não nulo de 2 linhas e 2 colunas é da forma

$$\begin{vmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}} \\ \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}} & 0 \end{vmatrix} = -\frac{1}{d_i d_j}.$$

Assim, como existe um menor principal destes para cada par de vértices adjacentes temos que

$$(-1)^2 c_2 = c_2 = -\sum_{i \sim j} \frac{1}{d_i d_j}.$$

Além disso, como o traço de R^2 é igual à soma de seus autovalores, temos

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^n \rho_l^2 &= \text{tr}(R^2) = 2 \sum_{i \sim j} \frac{1}{d_i d_j} \\ \Rightarrow \frac{1}{2} \sum_{l=1}^n \rho_l^2 &= \sum_{i \sim j} \frac{1}{d_i d_j}. \end{aligned}$$

Portanto,

$$-c_2 = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^n \rho_l^2 = \sum_{i \sim j} \frac{1}{d_i d_j} = R_{-1}(G).$$

(c) O único menor principal não nulo de ordem 3 de $R(G)$ é

$$\begin{vmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}} & \frac{1}{\sqrt{d_i d_k}} \\ \frac{1}{\sqrt{d_j d_i}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{d_j d_k}} \\ \frac{1}{\sqrt{d_k d_i}} & \frac{1}{\sqrt{d_k d_j}} & 0 \end{vmatrix} = \frac{2}{d_i d_j d_k}.$$

Note que este menor principal corresponde a três vértices mutuamente adjacentes, ou seja, um triângulo. Logo,

$$(-1)^3 c_3 = \sum_{\langle i,j,k \rangle \cong K_3} \frac{-2}{d_i d_j d_k}.$$

□

4.2 Maior autovalor da matriz de Randić

O Teorema 4.2.1 a seguir nos fornece uma cota superior para os autovalores de um grafo que possui pelo menos uma aresta, isto é, se um grafo G possui pelo menos uma aresta, então seu maior autovalor é 1.

Teorema 4.2.1. *Sejam G um grafo com n vértices, $n \geq 1$ e ρ_1 o maior autovalor da matriz de Randić. Então $\rho_1 = 0$ se, e somente se, $G \cong \overline{K}_n$. Se G possui pelo menos uma aresta, então $\rho_1 = 1$.*

Demonstração. O caso $\rho_1 = 0$ é simples. Se $G \cong \overline{K}_n$, sabemos que $S_R(G) = \{0^{(n)}\}$, então $\rho_1 = 0$. Agora, se $\rho_1 = 0$ temos que os outros autovalores $\rho_2, \rho_3, \dots, \rho_n$ são negativos ou zero. Mas note que eles devem ser todos iguais a zero, pois caso fossem negativos teríamos

$$\underbrace{\rho_1}_0 + \underbrace{\rho_2 + \rho_3 + \dots + \rho_n}_{<0} = \text{tr}(R) = 0,$$

o que é absurdo. Então, todos os autovalores são zero e portanto $G \cong \overline{K}_n$.

Vamos provar o caso que se G possui pelo menos uma aresta, então $\rho_1 = 1$. Seja \vec{e} o vetor formado somente por uns, isto é, $\vec{e} = (1, 1, \dots, 1)^T$. Temos que $\sigma = 0$ é autovalor da matriz Laplaciana associado ao autovetor \vec{e} , ou seja, $L\vec{e} = 0$. De fato, note que cada linha de $L\vec{e}$ é a soma das entradas de cada linha de L , mas a soma de cada linha de L resulta em zero, pois estamos somando o grau do vértice com um -1 para cada vizinho. Agora, observe que

$$\mathcal{L}(D^{\frac{1}{2}}\vec{e}) = D^{-\frac{1}{2}}L \underbrace{D^{-\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}}_{I_n} \vec{e} = D^{-\frac{1}{2}} \underbrace{L\vec{e}}_0 = 0.$$

Vamos mostrar agora que 1 é autovalor da matriz de Randić associado ao autovetor $D^{\frac{1}{2}}\vec{e}$. Note que $D^{\frac{1}{2}}\vec{e} = (\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2}, \dots, \sqrt{d_n})^T$. Temos que

$$\begin{aligned} R(D^{\frac{1}{2}}\vec{e}) &= D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}\vec{e} = D^{-\frac{1}{2}}A\vec{e} \\ &= D^{-\frac{1}{2}}(D - L)\vec{e} \\ &= (D^{-\frac{1}{2}}D - D^{-\frac{1}{2}}L)\vec{e} \\ &= D^{\frac{1}{2}}\vec{e} - \underbrace{D^{-\frac{1}{2}}L\vec{e}}_0 \\ &= D^{\frac{1}{2}}\vec{e}. \end{aligned}$$

Como $(\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2}, \dots, \sqrt{d_n})^T$ tem todas as entradas positivas, pelo Teorema de Perron Frobenius ([34]), o maior autovalor é 1 , isto é, $\rho_1 = 1$. \square

Teorema 4.2.2. *Seja G um grafo com n vértices. Então, $\rho_1 = 1$ é o único R -autovalor positivo de G se, e somente se, uma componente de G é um grafo multipartido completo e todos as outras componentes (se houver) são vértices isolados.*

Demonstração. Vamos provar a primeira direção por contraposição. Isto é, vamos supor que uma componente de G não é um grafo multipartido completo e concluir que $\rho_1 = 1$ não é o único R -autovalor positivo de G . Vamos ignorar os vértices isolados pois eles só contribuem com autovalores 0 . Note que em grafos multipartidos completos, a relação de não-adjacência entre os vértices é transitiva, isto é, para vértices a, b, c , vale $a \approx b, b \approx c$ então $a \approx c$.

Se isso não for verdade para G , então deve haver vértices a, b, c tais que $\{a, b\}$ e $\{b, c\}$ não sejam arestas, mas $\{a, c\}$ seja uma aresta. Dessa forma, se G não é um grafo multipartido completo, G deve conter um subgrafo induzido da figura abaixo.

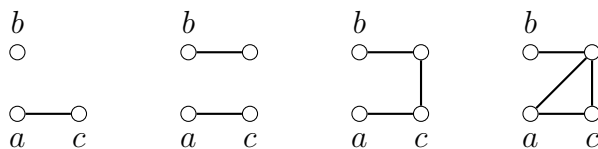


Figura 4.1: Subgrafos induzidos H_1, H_2, H_3 e H_4 , respectivamente.

Mas como estamos considerando G sem vértices isolados, G deve conter pelo menos um dos subgrafos H_2, H_3 ou H_4 . Sejam $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ os autovalores da matriz de adjacência do grafo G e $\beta_1 \geq \beta_2 \geq \dots \geq \beta_m$ os autovalores da matriz de adjacência do subgrafo induzido de G . Calculando os autovalores da matriz de adjacência dos grafos 2, 3, 4, obtemos que estes tem dois autovalores positivos β_1 e β_2 . Dessa forma, pelo Teorema de entrelaçamento para a matriz de adjacência, obtemos que $\lambda_1 \geq \beta_1$ e $\lambda_2 \geq \beta_2$. Isto é, G tem dois autovalores positivos, mas como pelo Teorema 4.1.2 A e R têm a mesma quantidade de autovalores positivos, negativos e zeros, concluímos que $\rho_1 = 1$ não é o único R -autovalor positivo de G .

Agora, supomos que uma componente de G é um grafo multipartido completo. Aqui também vamos ignorar os vértices isolados. Seja $G = K_{t,t,\dots,t}$ um grafo p -partido completo de ordem $n = pt$. Os autovalores da matriz Laplaciana normalizada de G são

$$S_{\mathcal{L}}(G) = \left\{ 1^{(n-p)}, \left(\frac{p}{p-1} \right)^{(p-1)}, 0 \right\}.$$

Como conhecemos uma relação entre os autovalores de matriz Laplaciana normalizada e da matriz de Randić ($\mu_i = 1 - \rho_i$), os autovalores da matriz de

Randić de um grafo multipartido completo são

$$S_R(G) = \left\{ 0^{(n-p)}, 1, \left(-\frac{1}{p-1} \right)^{(p-1)} \right\}.$$

Portanto, $\rho_1 = 1$ é o único R -autovalor positivo de G . □

Visto que agora já conhecemos algumas propriedades da matriz de Randić e do índice Randić, veremos no próximo Capítulo algumas cotas para a energia de Randić e apresentaremos a Conjectura sobre a energia de Randić para grafos conexos.

5 ENERGIA DE RANDIĆ

Vimos no Capítulo 2 a definição da energia de Randić e a sua relação com a energia Laplaciana normalizada. Neste Capítulo, apresentaremos algumas cotas de $RE(G)$ em função de $R_{-1}(G)$ e também em função do número de vértices de G . Veremos que o problema da energia de Randić máxima para grafos desconexos já está resolvido. Já para grafos conexos, Gutman, Furtula e Bozkurt [23] conjecturaram que uma árvore é o grafo conexo com máxima energia de Randić. Mais especificamente, conjecturou-se que se n for ímpar essa árvore é o sol e se n for par é o sol duplo.

5.1 Algumas cotas para a energia de Randić

Nesta Seção, veremos cotas para $RE(G)$ em função do índice de Randić $R_{-1}(G)$ e do número de vértices do grafo G , além de uma cota inferior para $RE(G)$ para grafos com pelo menos uma aresta. O Lema 5.1.1 abaixo ([11]) é uma relação importante entre $RE(G)$ e $R_{-1}(G)$. Determinar como a estrutura de um grafo se relaciona com $R_{-1}(G)$ fornecerá informações sobre $RE(G)$.

Lema 5.1.1. *Seja G um grafo com n vértices e sem vértices isolados. Então,*

$$2R_{-1}(G) \leq RE(G) \leq \sqrt{2nR_{-1}(G)}.$$

Demonstração. Da desigualdade de Cauchy-Schwarz, temos

$$\left(\sum_{i=1}^n a_i b_i \right)^2 \leq \left(\sum_{i=1}^n a_i^2 \right) \left(\sum_{i=1}^n b_i^2 \right),$$

onde $a_i, b_i \in \mathbb{R}^n$. Usando $a_i = (1, 1, \dots, 1)^T$ e $b_i = (|\rho_1|, |\rho_2|, \dots, |\rho_n|)^T$, obtemos

$$\left(\sum_{i=1}^n |\rho_i| \right)^2 \leq \left(\sum_{i=1}^n 1 \right) \left(\sum_{i=1}^n |\rho_i|^2 \right)$$

$$\begin{aligned} (RE(G))^2 &\leq n \sum_{i=1}^n \rho_i^2 \\ RE(G) &\leq \sqrt{n \cdot tr(R^2)}. \end{aligned}$$

Além disso, pelo Teorema 4.1.4 temos que $2R_{-1}(G) = tr(R^2)$. Portanto,

$$RE(G) \leq \sqrt{2nR_{-1}(G)}.$$

Para provar a cota inferior, note que os autovalores de $R(G)$ estão no intervalo $[-1, 1]$. Dessa forma, temos que $(\rho_i)^2 \leq |\rho_i|$. Então,

$$RE(G) = \sum_{i=1}^n |\rho_i| \geq \sum_{i=1}^n (\rho_i)^2 = tr(R^2) = 2R_{-1}(G).$$

□

Lema 5.1.2. *Seja G um grafo com n vértices e $n \geq 1$. Temos que $RE(G) = 0$ se, e somente se, $G \cong \overline{K}_n$.*

Demonstração. Se $RE(G) = 0$ obtemos que todos os n autovalores da matriz de Randić associada ao grafo G são zero, então pelo Teorema 4.1.1 $G \cong \overline{K}_n$. Por outro lado, se $G \cong \overline{K}_n$, temos que $S_R(G) = \{0^{(n)}\}$. Então, $RE(G) = 0$. □

O Teorema 5.1.3 a seguir nos fornece uma cota inferior para a energia de Randić para grafos com pelo menos uma aresta. Esse é um resultado obtido em [11] para a energia Laplaciana normalizada e também publicado em [23] para a energia de Randić.

Teorema 5.1.3. *Seja G um grafo com n vértices, $n \geq 1$. Se G possui pelo menos uma aresta, então $RE(G) \geq 2$. A igualdade é alcançada se, e somente se, uma componente de G é um grafo multipartido completo e todas as outras componentes (se houver) são vértices isolados.*

Demonstração. Vamos provar que $RE(G) \geq 2$. Já sabemos pelo Teorema 4.2.1 que se G tem pelo menos uma aresta, $\rho_1 = 1$ é um autovalor da matriz de Randić. Como $\rho_1 + \rho_2 + \dots + \rho_n = 0$, então

$$\rho_2 + \dots + \rho_n = -1.$$

Assim,

$$\begin{aligned} RE(G) &= \sum_{i=1}^n |\rho_i| = 1 + \sum_{i=2}^n |\rho_i| \geq 1 + \left| \sum_{i=2}^n \rho_i \right| \\ &\geq 1 + |-1| = 2. \end{aligned}$$

Agora, para provar a igualdade, observe que, uma vez que a soma dos R -autovalores é zero, segue que

$$\sum_{\rho_i > 0} \rho_i = - \sum_{\rho_i < 0} \rho_i.$$

Além disso, temos que $\sum_{\rho_i > 0} \rho_i = \sum_{\rho_i > 0} |\rho_i|$. Sem perda de generalidade, vamos ordenar os autovalores de forma que os p primeiros são positivos e os $p + 1$ até n restantes são negativos. Assim,

$$\begin{aligned} RE(G) &= \sum_{i=1}^n |\rho_i| = \underbrace{|\rho_1| + \dots + |\rho_p|}_{= \sum_{\rho > 0} \rho_i} + \underbrace{|\rho_{p+1}| + \dots + |\rho_n|}_{= - \sum_{\rho < 0} \rho_i} \\ &= \sum_{\rho > 0} \rho_i + \left(- \sum_{\rho < 0} \rho_i \right) \\ &= 2 \sum_{\rho > 0} \rho_i \end{aligned}$$

Então, podemos escrever a energia de Randić como

$$RE(G) = 2 \sum_{\rho_i > 0} \rho_i.$$

Se uma componente de G é um grafo multipartido completo e todas as outras componentes (se houver) são vértices isolados, pelo Teorema 4.2.2, $\rho_1 = 1$ é o único R -autovalor positivo de G , então

$$RE(G) = 2 \sum_{\rho_i > 0} \rho_i = 2 \cdot 1 = 2.$$

Por outro lado, se $RE(G) = 2$, temos

$$2 = 2 \sum_{\rho_i > 0} \rho_i \Rightarrow \sum_{\rho_i > 0} \rho_i = 1.$$

Como G tem pelo menos uma aresta, pelo Teorema 4.2.1, $\rho_1 = 1$ é o maior autovalor da matriz de Randić. Mas como $\sum_{\rho_i > 0} \rho_i = 1$, concluímos que 1 deve ser o único R -autovalor positivo. Pelo Teorema 4.2.2, segue que G é um grafo multipartido completo. \square

Concluimos esta Seção com uma relação entre a energia Randić e a energia da matriz de adjacência para grafos regulares ([8]).

Teorema 5.1.4. *Se G é regular de grau r , $r > 0$, então*

$$RE(G) = \frac{1}{r} E_A(G).$$

Demonstração. Se G é regular de grau r , então $d_1 = d_2 = \dots = d_n = r$. Assim, todas as entradas não nulas de $R(G)$ são iguais a $\frac{1}{r}$, o que implica que $R(G) = \frac{1}{r} A(G)$. Então, $\rho_i = \frac{1}{r} \lambda_i$ para $i = 1, 2, \dots, n$. Portanto, temos que

$$RE(G) = \sum_{i=1}^n |\rho_i| = \sum_{i=1}^n \left| \frac{1}{r} \lambda_i \right| = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^n |\lambda_i| = \frac{1}{r} E_A(G).$$

\square

5.2 Energia de Randić máxima para grafos desconexos

Para determinar a energia de Randić de grafos desconexos, basta calcular a energia de cada componente e depois somá-las. Ou seja, se G tem p componentes conexas, em particular, G_1, G_2, \dots, G_p , então

$$RE(G) = \sum_{i=1}^p RE(G_i). \quad (5.1)$$

Como falamos na introdução deste Capítulo, o problema da energia de Randić máxima para grafos desconexos está completamente resolvido pelo Teorema 5.2.1 abaixo. Esse resultado foi apresentado inicialmente para a energia Laplaciana normalizada em [11], por Cavers, Fallat e Kirkland. Mas foi estendido para a energia de Randić por Gutman, Furtula e Bozkurt em [23], pois nesse caso podemos considerar vértices isolados no caso de grafos desconexos no item (b).

Teorema 5.2.1. *Seja G um grafo com n vértices, $n \geq 1$.*

(a) *Se n é par, então $RE(G) \leq n$. A igualdade vale se, e somente se,*

$$G \cong \frac{n}{2}K_2;$$

(b) *Se n é ímpar, então $RE(G) \leq n-1$. A igualdade vale se $G \cong \left(\frac{n-1}{2}K_2\right) \cup$*

$$K_1 \text{ ou } G \cong \left(\frac{n-3}{2}K_2\right) \cup K_3 \text{ ou } G \cong \left(\frac{n-3}{2}K_2\right) \cup P_3.$$

Demonstração. Parte (a): Provaremos primeiro que $RE(G) \leq n$. Do Teorema 3.2.1, temos que

$$R_{-1}(G) \leq \frac{n}{2d_{\min}}.$$

Se n é par, $d_{\min} \geq 1$, temos

$$R_{-1}(G) \leq \frac{n}{2} \Rightarrow 2R_{-1}(G) \leq n. \quad (5.2)$$

Além disso, do Lema 5.1.1, temos que

$$RE(G) \leq \sqrt{2nR_{-1}(G)}. \quad (5.3)$$

Portanto, substituindo (5.2) em (5.3), obtemos

$$RE(G) \leq \sqrt{n \cdot n} = n.$$

Para a segunda parte, se $G \cong \frac{n}{2}K_2$, pelo Teorema 5.1.3, temos que $RE(K_2) = 2$. Além disso, pela equação (5.1),

$$\begin{aligned} RE\left(\frac{n}{2}K_2\right) &= \underbrace{RE(K_2) + RE(K_2) + \cdots + RE(K_2)}_{\frac{n}{2} \text{ vezes}} \\ &= \frac{n}{2} \cdot 2 = n. \end{aligned}$$

Por outro lado, se $RE(G) = n$ então G não é o grafo com n vértices isolados. Assim, G possui pelo menos uma aresta. Pelo Lema 5.1.1 temos que

$$2R_{-1}(G) \leq n \leq \sqrt{2nR_{-1}(G)},$$

o que implica que $R_{-1}(G) = \frac{n}{2}$. Já pelo Teorema 3.2.1, temos

$$\frac{n}{2d_{max}} \leq \frac{n}{2} \leq \frac{n}{2d_{min}},$$

o que significa que G deve ser regular de grau 1. Como $RE(K_2) = 2$, então, G é a união disjunta de $\frac{n}{2}$ caminhos de tamanho 1, isto é, $G \cong \frac{n}{2}K_2$.

Parte (b): Primeiro vamos mostrar para grafos conexos. Seja G um grafo conexo com $n \geq 7$ vértices, pela equação (5.3) e pelo Teorema 3.2.6, temos que

$$RE(G) \leq \sqrt{n \cdot 2R_{-1}(G)} \leq \sqrt{2n \cdot \frac{15(n+1)}{56}} = \sqrt{\frac{15(n^2+n)}{28}} < n - 1.$$

Se $n = 5$ e G tem caminhos suspensos, então existem apenas três desses grafos que estão representados na Figura 5.1 e cada um tem $RE(G) < 4$.

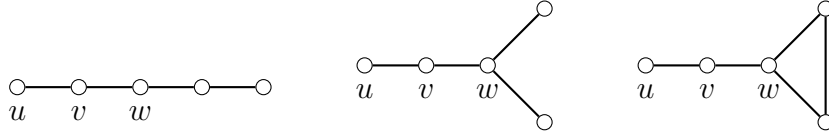


Figura 5.1: Grafos com 5 vértices com caminho suspenso.

Se $n = 5$ e G não tem caminhos suspensos, então pela equação (5.3) e pelo Corolário 3.2.1, temos

$$RE(G) \leq \sqrt{n \cdot 2R_{-1}(G)} \leq \sqrt{2n \cdot \frac{n}{4}} = \sqrt{\frac{n^2}{2}} = \frac{n}{\sqrt{2}} = \frac{5}{\sqrt{2}} < 4.$$

Se $n = 3$, o caminho P_3 e o grafo completo K_3 têm $RE(G) = n - 1 = 2$. Portanto, se n é ímpar e G é um grafo conexo de ordem n , concluímos que $RE(G) \leq n - 1$. A igualdade vale se, e somente se, $n = 3$ e $G \cong P_3$ ou $G \cong K_3$.

Agora vamos para o caso de G ser desconexo. Suponhamos que G tem $k \geq 2$ componentes G_1, G_2, \dots, G_k , onde cada componente G_i tem n_i vértices. Sem perda de generalidade, suponha que n_1, \dots, n_s são ímpares e n_{s+1}, \dots, n_k são pares. Como n é ímpar, $s \geq 1$. Pela equação (5.1), temos

$$\begin{aligned} RE(G) &= \sum_{i=1}^s RE(G_i) + \sum_{i=s+1}^k RE(G_i) \\ &\leq \sum_{i=1}^s (n_i - 1) + \sum_{i=s+1}^k n_i \\ &= (n_1 - 1) + \dots + (n_s - 1) + n_{s+1} + \dots + n_k \\ &= n - s \\ &\leq n - 1. \end{aligned}$$

Para provar a segunda parte de (b), note que $RE(K_1) = 0$ e $RE(K_3) = RE(K_2) = RE(P_3) = 2$. Assim, se $G \cong \frac{n-1}{2}K_2 \cup K_1$, temos

$$RE\left(\frac{n-1}{2}K_2 \cup K_1\right) = \frac{(n-1)}{2} \cdot 2 + 0 = n - 1.$$

Se $G \cong \frac{n-3}{2}K_2 \cup K_3$, temos

$$RE\left(\frac{n-3}{2}K_2 \cup K_3\right) = \frac{(n-3)}{2} \cdot 2 + 2 = n - 1.$$

E se $G \cong \frac{n-3}{2}K_2 \cup P_3$, temos

$$RE\left(\frac{n-3}{2}K_2 \cup P_3\right) = \frac{(n-3)}{2} \cdot 2 + 2 = n - 1.$$

□

5.3 Energia de Randić máxima para grafos conexos

Visto que os grafos que atingem as cotas da Seção anterior são grafos desconexos, a pergunta natural a ser fazer é: qual o grafo conexo com energia de Randić máxima? De acordo com Gutman, Furtula e Bozkurt [23], a busca por grafos com maior energia Randić seria mais fácil se existisse uma regularidade para a mudança de $RE(G)$ quando excluimos uma aresta de G . Na Figura 5.2, estão apresentados os menores exemplos que mostram que a energia de Randić pode diminuir, aumentar ou permanecer a mesma quando as arestas são deletadas.

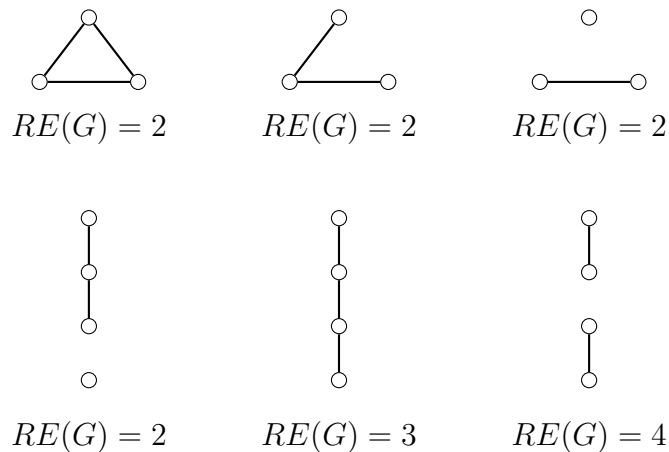


Figura 5.2: Exemplos de que $RE(G)$ pode diminuir, aumentar ou permanecer igual quando excluimos arestas.

Assim, no caso geral, $RE(G - e)$ pode ser menor, igual, ou maior que $RE(G)$. Mas, apesar dessas dificuldades, em 2014, Gutman, Furtula e Bozkurt [23], conjecturam, por meio de testes numéricos, que o grafo conexo de n vértices com máxima energia de Randić é uma árvore.

Conjectura 5.3.1. *O grafo conexo de n vértices com máxima energia de Randić é uma árvore.*

Os autores verificaram a validade dessa Conjectura até $n = 10$, calculando os valores da energia de Randić de todos os grafos conexos com $n \leq 10$ vértices. Para $n > 10$, eles assumiram que a Conjectura é verdadeira e calcularam os valores da energia de Randić de todas as árvores até $n = 21$. Feito isso, chegaram a Conjectura de que as árvores com energia de Randić máxima são os grafos sol e sol duplo.

Conjectura 5.3.2. *Se $n \geq 1$ é ímpar, o grafo conexo de n vértices que tem maior energia de Randić é o $(\frac{n-1}{2})$ -sol. E se $n \geq 2$ é par, então o grafo conexo de n vértices que tem maior energia de Randić é o $(\lceil \frac{n-2}{4} \rceil, \lfloor \frac{n-2}{4} \rfloor)$ -sol duplo.*

Apresentamos abaixo as definições dos grafos sol e sol duplo.

Definição 5.3.1. Seja $p \geq 0$. O p -sol é a árvore S^p de ordem $n = 2p + 1$ com p vértices pendentes, cada um ligado a um vértice de grau 2 e estes ligados a um vértice de grau p .

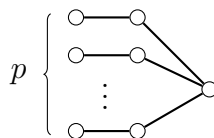


Figura 5.3: p -sol.

Note que $S^0 \cong P_1$, $S^1 \cong P_3$ e $S^2 \cong P_5$. Para $p \geq 3$, o p -sol não é mais um caminho.

Definição 5.3.2. Sejam $p, q \geq 0$. O (p, q) -sol duplo é a árvore $D^{p,q}$ de ordem $n = 2(p + q + 1)$, obtida de um p -sol e um q -sol, conectando seus vértices centrais. Se $|p - q| \leq 1$ então o respectivo sol duplo é dito balanceado.

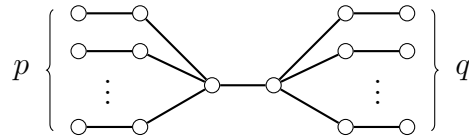


Figura 5.4: (p, q) -sol duplo.

Note que $D^{0,0} \cong P_2$, $D^{1,0} \cong P_4$ e $D^{1,1} \cong P_6$. Para $p \geq 2$ e/ou $q \geq 2$ o (p, q) -sol duplo não é mais um caminho.

Para $n \leq 10$, a Conjectura 5.3.2 foi validada entre todos os grafos conexos de ordem n . Já para $n \geq 11$ até $n = 21$ os autores assumiram a validade da Conjectura 5.3.1 e checaram todas as árvores de ordem n . Na Figura 5.5 abaixo estão representados os grafos com máxima energia de Randić segundo a Conjectura 5.3.2, para $n = 7$ a $n = 12$. Observe que para $n \leq 6$ o grafo extremal é o caminho P_n .

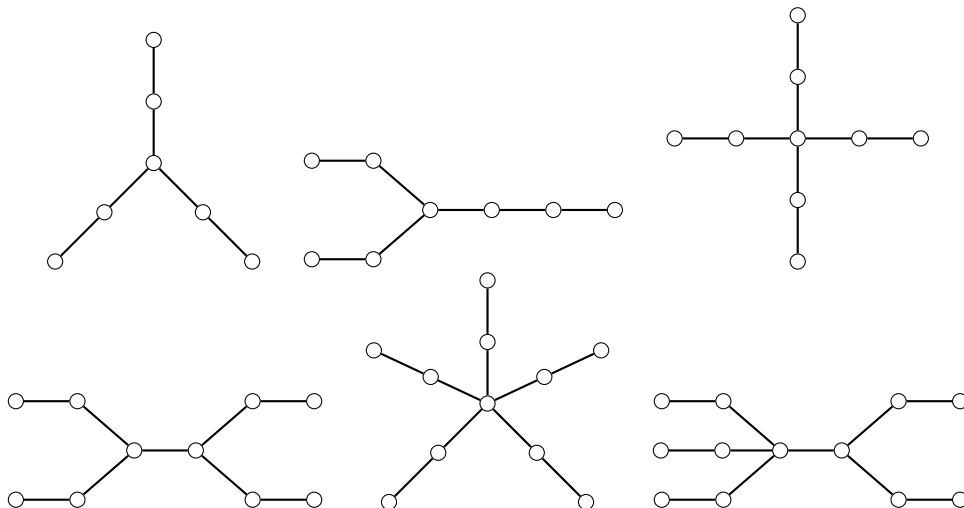


Figura 5.5: Grafos conexos de ordem $n = 7$ até $n = 12$ que possuem a maior energia de Randić, segundo a Conjectura 5.3.2.

No Capítulo 6, abordaremos um pouco mais sobre a Conjectura 5.3.2 e vamos apresentar um resultado parcial que demonstramos. Além disso, vamos calcular o polinômio característico dos grafos sol e do sol duplo.

6 SOL DUPLO COM A MAIOR ENERGIA DE RANDIĆ

Neste Capítulo, vamos calcular o polinômio característico dos grafos sol e sol duplo, usando o algoritmo de localização de autovalores da matriz Laplaciana normalizada para árvores [9]. Esse algoritmo é uma extensão do algoritmo de localização de autovalores da matriz de adjacência para árvores desenvolvido por Jacobs e Trevisan [29].

Além disso, vamos mostrar que dentre a classe de grafos dos sóis duplos, o que atinge a maior energia de Randić é o $(\lceil \frac{n-2}{4} \rceil, \lfloor \frac{n-2}{4} \rfloor)$ -sol duplo. Destacamos que este resultado foi apresentado no XLI Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional (CNMAC) de 2022 e seu resumo foi publicado no periódico *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics* sob o título *Double sun with largest Randić energy*, [32].

6.1 Polinômio característico dos grafos sol e sol duplo

Em [4], Allem, Molina e Pastine calcularam o polinômio característico dos grafos sol e do sol duplo. Nesta Seção, vamos fazer com detalhes os cálculos para obter tais polinômios e partir disso, determinar a energia de Randić desses grafos.

Na sequência apresentamos o algoritmo de Braga *et al.* para calcular o número de autovalores Laplacianos normalizados de qualquer árvore T dentro de um determinado intervalo real. Esse algoritmo é baseado na diagonalização da matriz $\mathcal{L}(T) + \alpha I$, onde I é a matriz identidade e α é um número real. Aqui, vamos nos deter em calcular o polinômio característico do sol e do sol duplo e recomendamos a leitura de [9] para mais detalhes.

Algoritmo 1: *Diagonalize* ($\mathcal{L}(T), \alpha$)

Entrada: Escalar α , árvore T

Saída: Matriz diagonal D congruente a $\mathcal{L}(T) + \alpha I$

```
1 inicializar  $a(v) := 1 + \alpha$ , para todos os vértices  $v$ 
2 ordenar vértices de baixo para cima
3 para  $k = 1$  até  $n$  faça
4   se  $v_k$  é uma folha então continue
5   senão se  $a(c) \neq 0$  para todo filho  $c$  de  $v_k$  então
6      $a(v_k) := a(v_k) - \sum_{c \text{ de } v_k} \frac{1}{a(c)d_c d_{v_k}}$ , somando sobre todos os filhos
7   senão
8     Selecione um filho  $v_j$  de  $v_k$  para qual  $a(v_j) = 0$ 
9      $a(v_k) := -\frac{1}{2d_{v_j}d_{v_k}}$ 
10     $a(v_j) := 2$ 
11    se  $v_k$  tem um pai  $v_l$  então
12      remova a aresta  $v_k v_l$ 
```

De acordo com Braga *et al.* [9], o algoritmo *Diagonalize* ($\mathcal{L}(T), \alpha$) pode ser usado para calcular o polinômio característico de qualquer árvore T . Para isso, cada vértice v é inicializado com $a(v) = \mu - 1$. Todas as folhas (uma folha é um vértice de grau um) são consideradas processadas. Feito isso, é atribuída a seguinte função racional ao vértice pai v das folhas

$$a(v) - \sum_{c \in C} \frac{1}{a(c)d_c d_v},$$

onde C é o conjunto de filhos de v , d_c é o grau do vértice filho c e d_v é o grau do vértice pai v . Depois de todos os vértices serem processados, obtemos o polinômio característico de $\mathcal{L}(T)$, tomando o produto de todas as funções racionais $a(v)$

$$\phi_{\mathcal{L}}(T, \mu) = \prod_{v \in V} a(v).$$

Usando esse procedimento, o p -sol será inicializado como na Figura 6.1.

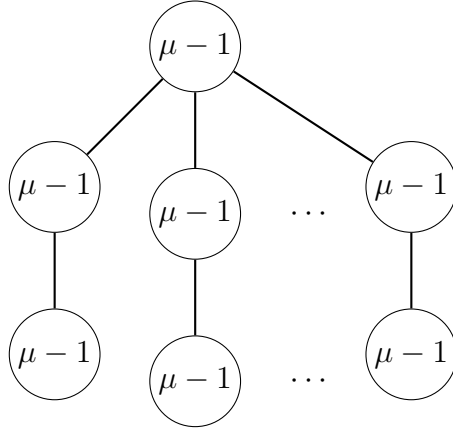


Figura 6.1: p -sol inicializado com $a(v) = \mu - 1$, para todo vértice v .

As folhas são consideradas processadas. Para os vértices de grau 2 será atribuído o seguinte valor

$$\begin{aligned}
 \mu - 1 - \left(\frac{1}{(\mu - 1) \cdot 1 \cdot 2} \right) &= (\mu - 1) - \frac{1}{2(\mu - 1)} \\
 &= \frac{2(\mu^2 - 2\mu + 1) - 1}{2(\mu - 1)} \\
 &= \frac{\mu^2 - 2\mu + 1/2}{\mu - 1}.
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

Isto é, para cada um dos vértices quase pendente será atribuído o valor (6.1). Agora só falta processar a raiz, que ficará da seguinte forma

$$(\mu - 1) - \underbrace{\frac{1}{(6.1) \cdot 2 \cdot p} - \frac{1}{(6.1) \cdot 2 \cdot p} - \dots - \frac{1}{(6.1) \cdot 2 \cdot p}}_{p \text{ vezes}}.$$

Então,

$$\begin{aligned}
 (\mu - 1) - \frac{p}{\frac{\mu^2 - 2\mu + 1/2}{\mu - 1} \cdot 2p} &= (\mu - 1) - \frac{\mu - 1}{2(\mu^2 - 2\mu + 1/2)} \\
 &= \frac{2(\mu^3 - 2\mu^2 + 1/2\mu - \mu^2 + 2\mu - 1/2) - \mu + 1}{2(\mu^2 - 2\mu + 1/2)} \\
 &= \frac{2\mu^3 - 6\mu^2 + 4\mu}{2(\mu^2 - 2\mu + 1/2)}
 \end{aligned}$$

$$= \frac{\mu(\mu-1)(\mu-2)}{\mu^2-2\mu+1/2}.$$

Portanto, o polinômio característico da matriz Laplaciana normalizada do p -sol é dado por

$$\begin{aligned} \phi_{\mathcal{L}}(S^p, \mu) &= (\mu-1)^p \left(\frac{\mu^2-2\mu+1/2}{\mu-1} \right)^p \left(\frac{\mu(\mu-1)(\mu-2)}{\mu^2-2\mu+1/2} \right) \\ &= (\mu^2-2\mu+1/2)^p \left(\frac{\mu(\mu-1)(\mu-2)}{\mu^2-2\mu+1/2} \right) \\ &= \mu(\mu-1)(\mu-2) \left(\mu - \left(\frac{2+\sqrt{2}}{2} \right) \right)^{p-1} \left(\mu - \left(\frac{2-\sqrt{2}}{2} \right) \right)^{p-1}. \end{aligned}$$

Assim, podemos calcular a energia Laplaciana normalizada de S^p

$$\begin{aligned} E_{\mathcal{L}}(S^p) &= \sum_{i=1}^n |\mu_i - 1| \\ &= \left| \frac{2+\sqrt{2}}{2} - 1 \right| (p-1) + \left| \frac{2-\sqrt{2}}{2} - 1 \right| (p-1) + |2-1| + |1-1| \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(p-1) + \frac{1}{\sqrt{2}}(p-1) + 2 \\ &= 2(p-1) \frac{\sqrt{2}}{2} + 2 \\ &= (2p-2) \frac{\sqrt{2}}{2} + 2 \\ &= \underbrace{(2p+1-1-2)}_n \frac{\sqrt{2}}{2} + 2 \\ &= (n-3) \frac{\sqrt{2}}{2} + 2. \end{aligned}$$

Como $E_{\mathcal{L}}(G) = RE(G)$, temos que

$$RE(S^p) = (n-3) \frac{\sqrt{2}}{2} + 2. \quad (6.2)$$

Para o (p, q) -sol duplo vamos considerar como raiz o vértice de grau $q+1$, como na Figura 6.2 abaixo.

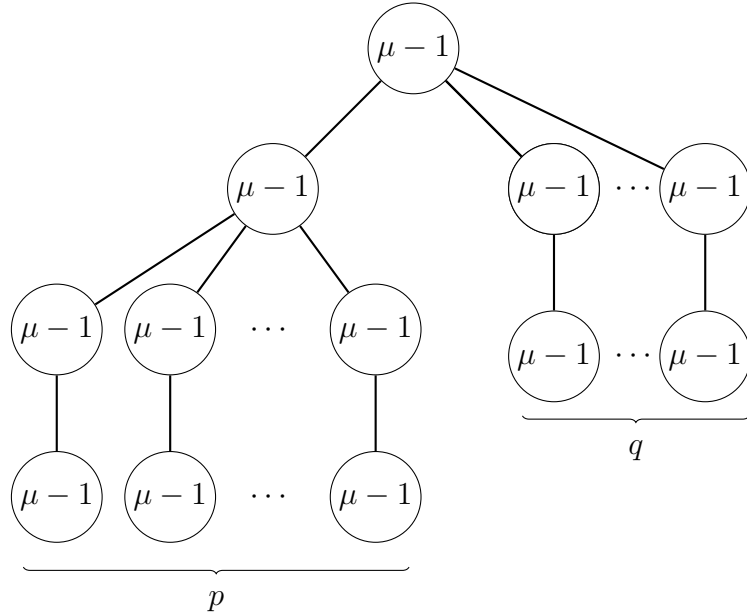


Figura 6.2: (p, q) -sol duplo inicializado com $a(v) = \mu - 1$, para todo vértice v .

Como as folhas já são consideradas processadas, passamos os vértices de grau 2. Esses, recebem o mesmo valor que os vértices de grau 2 do p -sol, isto é,

$$\frac{\mu^2 - 2\mu + 1/2}{\mu - 1}.$$

O pai dos p vértices de grau 2 receberá o seguinte valor

$$(\mu - 1) - \underbrace{\frac{1}{(6.1) \cdot 2 \cdot (p + 1)} - \frac{1}{(6.1) \cdot 2 \cdot (p + 1)} - \dots - \frac{1}{(6.1) \cdot 2 \cdot (p + 1)}}_{p \text{ vezes}}.$$

Assim, temos que

$$\begin{aligned} \mu - 1 - \frac{p}{(6.1) \cdot 2 \cdot (p + 1)} &= \mu - 1 - \frac{p}{\frac{\mu^2 - 2\mu + 1/2}{\mu - 1} \cdot 2(p + 1)} \\ &= \mu - 1 - \frac{p(\mu - 1)}{2(p + 1)(\mu^2 - 2\mu + 1/2)} \\ &= \frac{2(\mu - 1)(p + 1)(\mu^2 - 2\mu + 1/2) - p(\mu - 1)}{2(p + 1)(\mu^2 - 2\mu + 1/2)} \end{aligned}$$

$$= \frac{(\mu - 1)(2p\mu^2 - 4p\mu + 2\mu^2 - 4\mu + 1)}{2(p + 1)(\mu^2 - 2\mu + 1/2)}. \quad (6.3)$$

E por fim, para a raiz será atribuído o valor

$$\begin{aligned} & (\mu - 1) - \frac{1}{(6.3) \cdot (p + 1) \cdot (q + 1)} - \frac{q}{(6.1) \cdot 2 \cdot (q + 1)} = \\ \mu - 1 - \frac{2\mu^2 - 4\mu + 1}{(\mu - 1)(2\mu^2 - 4\mu + 2p\mu^2 - 4p\mu + 1)(q + 1)} - \frac{q(\mu - 1)}{(2\mu^2 - 4\mu + 1)(q + 1)} = \\ & \frac{(\mu - 2) \cdot \mu \cdot (*)}{(q + 1)(\mu - 1)2(\mu^2 - 2\mu + 1/2)(2p\mu^2 - 4p\mu + 2\mu^2 - 4x + 1)}, \end{aligned} \quad (6.4)$$

onde

$$\begin{aligned} (*) &= 4pq\mu^4 - 16pq\mu^3 + 20pq\mu^2 - 8pq\mu + 4p\mu^4 - 16p\mu^3 + 22p\mu^2 - 12p\mu + \\ &+ 2p + 4q\mu^4 - 16q\mu^3 + 22q\mu^2 - 12q\mu + 2q + 4\mu^4 - 16\mu^3 + 20\mu^2 - 8\mu + 1. \end{aligned}$$

Assim, o polinômio característico do sol duplo é dado por

$$\begin{aligned} \phi_{\mathcal{L}}(D^{p,q}, \mu) &= (\mu - 1)^p(\mu - 1)^q \left(\frac{\mu^2 - 2\mu + 1/2}{\mu - 1} \right)^p \left(\frac{\mu^2 - 2\mu + 1/2}{\mu - 1} \right)^q (6.3) \cdot (6.4) \\ &= \frac{(\mu^2 - 2\mu + 1/2)^{p+q}}{(\mu^2 - 2\mu + 1/2)^2} \left(\frac{1}{2(p + 1)} \right) \left(\frac{(\mu - 2) \cdot \mu \cdot (*)}{2(q + 1)} \right) \\ &= (\mu^2 - 2\mu + 1/2)^{p+q-2} \left(\frac{\mu(\mu - 2)(*)}{4(p + 1)(q + 1)} \right). \end{aligned}$$

Temos que

$$\begin{aligned} \frac{(*)}{4(p + 1)(q + 1)} &= \frac{(20pq + 22p + 22q + 20)}{4(p + 1)(q + 1)}\mu^2 + \frac{(-8pq - 12p - 12q - 8)}{4(p + 1)(q + 1)}\mu \\ &+ \frac{2p + 2q + 1}{4(p + 1)(q + 1)} + \frac{(pq + p + q + 1)(4\mu^2 - 16\mu^3)}{4(pq + p + q + 1)} \\ &= \mu^4 - 4\mu^3 + \frac{(20pq + 22p + 22q + 20)}{4(p + 1)(q + 1)}\mu^2 \\ &+ \frac{(-8pq - 12p - 12q - 8)}{4(p + 1)(q + 1)}\mu + \frac{2p + 2q + 1}{4(p + 1)(q + 1)} \end{aligned}$$

Denotando

$$\alpha(\mu) = \mu^4 - 4\mu^3 + \frac{(20pq + 22p + 22q + 20)}{4(p + 1)(q + 1)}\mu^2 + \frac{(-8pq - 12p - 12q - 8)}{4(p + 1)(q + 1)}\mu$$

$$+ \frac{2p + 2q + 1}{4(p + 1)(q + 1)},$$

obtemos que o polinômio característico da matriz Laplaciana normalizada do (p, q) -sol duplo é dado por

$$\phi_{\mathcal{L}}(D^{p,q}, \mu) = \mu(\mu - 2) \left(\mu - \left(\frac{2 + \sqrt{2}}{2} \right) \right)^{p+q-2} \left(\mu - \left(\frac{2 - \sqrt{2}}{2} \right) \right)^{p+q-2} (\alpha(\mu)).$$

Assim, os autovalores da matriz Laplaciana normalizada do (p, q) -sol duplo são 0 e 2 com multiplicidade 1, $\frac{2+\sqrt{2}}{2}$ e $\frac{2-\sqrt{2}}{2}$ com multiplicidade $p + q - 2$ e as raízes de $\alpha(\mu)$, que são

$$\mu_1 = \frac{\sqrt{(p+1)(q+1)(2pq+p+q+2+\sqrt{4(q+1/2)^2p^2+(4q^2+6q)p+q^2})+(2q+2)p+2q+2}}{2(p+1)(q+1)},$$

$$\mu_2 = -\mu_1,$$

$$\mu_3 = \frac{\sqrt{(p+1)(q+1)(2pq+p+q+2-\sqrt{4(q+1/2)^2p^2+(4q^2+6q)p+q^2})+(2q+2)p+2q+2}}{2(p+1)(q+1)},$$

$$\mu_4 = -\mu_3.$$

Então, temos que

$$\begin{aligned} RE(D^{p,q}) &= \sum_{i=1}^n |\mu_i - 1| \\ &= 2 + \left| \frac{2 + \sqrt{2}}{2} - 1 \right| (p + q - 2) + \left| \frac{2 - \sqrt{2}}{2} - 1 \right| (p + q - 2) \\ &\quad + |\mu_1 - 1| + |\mu_2 - 1| + |\mu_3 - 1| + |\mu_4 - 1|. \end{aligned}$$

Note que

$$\mu_1 - 1 = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(p+1)(q+1)(2pq+p+q+2+\sqrt{4p^2q^2+4p^2q+4pq^2+p^2+6pq+q^2})}}{(p+1)(q+1)},$$

$$\mu_2 - 1 = -\frac{1}{2} \frac{\sqrt{(p+1)(q+1)(2pq+p+q+2+\sqrt{4p^2q^2+4p^2q+4pq^2+p^2+6pq+q^2})}}{(p+1)(q+1)},$$

$$\mu_3 - 1 = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(p+1)(q+1)(2pq+p+q+2 - \sqrt{4p^2q^2 + 4p^2q + 4pq^2 + p^2 + 6pq + q^2})}}{(p+1)(q+1)},$$

$$\mu_4 - 1 = -\frac{1}{2} \frac{\sqrt{(p+1)(q+1)(2pq+p+q+2 - \sqrt{4p^2q^2 + 4p^2q + 4pq^2 + p^2 + 6pq + q^2})}}{(p+1)(q+1)}.$$

Assim, obtemos

$$RE(D^{p,q}) = 2 + \sqrt{2}(p+q-2) + \frac{\sqrt{(p+1)(q+1)(2pq+p+q+2 + \sqrt{4(q+1/2)^2p^2 + (4q^2+6q)p+q^2})}}{(p+1)(q+1)}$$

$$+ \frac{\sqrt{(p+1)(q+1)(2pq+p+q+2 - \sqrt{4(q+1/2)^2p^2 + (4q^2+6q)p+q^2})}}{(p+1)(q+1)}.$$

6.2 Sol duplo com a maior energia de Randić

Na Seção 5.3 do Capítulo anterior, apresentamos a Conjectura 5.3.2 feita por Gutman, Furtula e Bozkurt em [23], de que os grafos sol e sol duplo são os grafos conexos com máxima energia de Randić. Desde então, algumas contribuições foram feitas, como nos trabalhos de Allem, Molina e Pastine [4], além de Allem, Braga e Pastine [3], onde os autores apresentaram algumas famílias de grafos que satisfazem a Conjectura 5.3.2. Nossa contribuição original foi mostrar que o $(\lceil \frac{n-2}{4} \rceil, \lfloor \frac{n-2}{4} \rfloor)$ -sol duplo atinge a maior energia de Randić entre os (p, q) -sóis duplos de ordem $n = 2(p+q+1)$, provando parcialmente a Conjectura 5.3.2. O seguinte resultado foi publicado em [32].

Teorema 6.2.1. *Para um número par $n = 2(p+q+1) \geq 8$ com $p, q \geq 0$, o (p, q) -sol duplo atinge a energia de Randić máxima quando $p = \lceil \frac{n-2}{4} \rceil$ e $q = \lfloor \frac{n-2}{4} \rfloor$.*

A prova do Teorema 6.2.1 consiste basicamente em utilizar o teste da primeira derivada para obter o ponto de máximo de $RE(D^{p,q})$. A seguir fazemos a prova detalhada.

Demonstração. Como vimos na Seção 6.1, a energia de Randić do (p, q) -sol duplo é dada por

$$RE(D^{p,q}) = 2 + \sqrt{2}(p + q - 2) + \frac{\sqrt{(p+1)(q+1)(2pq+p+q+2+\sqrt{4(q+1/2)^2p^2+(4q^2+6q)p+q^2})}}{(p+1)(q+1)} \\ + \frac{\sqrt{(p+1)(q+1)(2pq+p+q+2-\sqrt{4(q+1/2)^2p^2+(4q^2+6q)p+q^2})}}{(p+1)(q+1)}.$$

Para facilitar, podemos simplificar um pouco a expressão acima. Vamos reescrever $RE(D^{p,q})$ como

$$RE(D^{p,q}) = 2 + \sqrt{2}(p + q - 2) + \frac{\sqrt{(p+1)(q+1)}}{(p+1)(q+1)}(a + b), \quad (6.5)$$

onde

$$a = \sqrt{2pq + p + q + 2 + \sqrt{4(q+1/2)^2p^2 + (4q^2 + 6q)p + q^2}}$$

e

$$b = \sqrt{2pq + p + q + 2 - \sqrt{4(q+1/2)^2p^2 + (4q^2 + 6q)p + q^2}}.$$

Agora, note que $a + b = \sqrt{(a+b)^2} = \sqrt{a^2 + b^2 + 2ab}$. Dessa forma, temos que

$$a \cdot b = \sqrt{4pq + 4p + 4q + 4} = \sqrt{4(pq + p + q + 1)} = 2\sqrt{pq + p + q + 1}$$

e

$$a^2 = 2pq + p + q + 2 + \sqrt{4(q+1/2)^2p^2 + (4q^2 + 6q)p + q^2},$$

$$b^2 = 2pq + p + q + 2 - \sqrt{4(q+1/2)^2p^2 + (4q^2 + 6q)p + q^2}.$$

Então $a^2 + b^2 = 4pq + 2p + 2q + 4$. Portanto,

$$a + b = \sqrt{4pq + 2p + 2q + 4 + 4\sqrt{pq + p + q + 1}}.$$

Assim, podemos reescrever (6.5) como

$$RE(D^{p,q}) = 2 + \sqrt{2}(p + q - 2)$$

$$+ \frac{\sqrt{(p+1)(q+1)}}{(p+1)(q+1)} \sqrt{4pq + 2p + 2q + 4 + 4\sqrt{pq + p + q + 1}}. \quad (6.6)$$

Agora, como $n = 2(p + q + 1)$, vamos substituir $q = \frac{n-2p-2}{2}$ em (6.6).

Assim, obtemos

$$RE(p) = 2 + \sqrt{2} \left(\frac{n}{2} - 3 \right) + \frac{\sqrt{(p+1)\left(\frac{n}{2}-p\right)} \sqrt{4p\left(\frac{n}{2}-p-1\right)+n+2+4\sqrt{p\left(\frac{n}{2}-p-1\right)+\frac{n}{2}}}}{(p+1)\left(\frac{n}{2}-p\right)}.$$

Note que a expressão acima pode ser manipulada como uma função em p , pois o número de vértices n é fixo, assim denotaremos $RE(D^{p,q}) = RE(p)$. Além disso, $RE(p)$ tem domínio $0 \leq p \leq \frac{n-2}{2}$. Usando o teste da primeira derivada, podemos encontrar o ponto de máximo de $RE(D^{p,q})$. A derivada de $RE(p)$ com respeito a p é dada por

$$RE'(p) = -\frac{1}{2} \frac{\sqrt{2}(\sqrt{2}\sqrt{(p+1)(n-2p)n-4}\sqrt{2}\sqrt{(p+1)(n-2p)p-2}\sqrt{2}\sqrt{(p+1)(n-2p)-n^2+4pn+4n-8p-4})}{\sqrt{2\sqrt{2}\sqrt{(p+1)(n-2p)+2pn-4p^2+n-4p+2}\sqrt{(p+1)(n-2p)(p+1)(n-2p)}}.$$

Simplificando, obtemos

$$RE'(p) = -\frac{1}{2} \frac{\sqrt{2}(n-4p-2)(\sqrt{2}\sqrt{(p+1)(n-2p)-n+2})}{\sqrt{2\sqrt{2}\sqrt{(p+1)(n-2p)+2pn-4p^2+n-4p+2}\sqrt{(p+1)(n-2p)(p+1)(n-2p)}}.$$

Agora, vamos analisar o sinal de $RE'(p)$ observando o numerador e o denominador de $RE'(p)$. Quando retornamos às variáveis p e q , observamos que o denominador de $RE'(p)$ é dado por

$$4\sqrt{4pq + 4\sqrt{(p+1)(q+1)} + 2p + 2q + 4}\sqrt{2}\sqrt{(p+1)(q+1)}(p+1)(q+1)$$

que é sempre positivo.

Agora vamos analisar o numerador. Temos que

$$\underbrace{-\sqrt{2}}_{(-)}(n-4p-2) \overbrace{\left(\sqrt{2}\sqrt{(p+1)(n-2p)-n+2}\right)}^{(-) \text{ se } n > 6}.$$

Portanto, o sinal de $RE'(p)$ é dado pela função linear $f(p) = n - 4p - 2$. Temos que $f(p)$ é decrescente e $f(p) = 0$ quando $p = \frac{n-2}{4}$. Então concluímos que

$$\begin{aligned} RE'(p) &> 0 \quad \text{se } p < \frac{n-2}{4}, \\ RE'(p) &= 0 \quad \text{se } p = \frac{n-2}{4}, \\ RE'(p) &< 0 \quad \text{se } p > \frac{n-2}{4}. \end{aligned}$$

Assim, dado n par e $n \geq 8$, temos que $p = \frac{n-2}{4}$ é ponto de máximo de $RE(p)$. Observe que quando $p = \frac{n-2}{4}$ temos que $q = \frac{n-2}{4}$. Mas, note que p só é inteiro quando $n = 4k + 2$, para k inteiro e $k \geq 2$. Assim, temos que analisar o caso em que p não é inteiro, isto é, quando $n = 4k$. Se $n = 4k$ temos que $p = k - \frac{1}{2}$. O maior inteiro menor do que $p = k - \frac{1}{2}$ é $k - 1$ e o menor inteiro maior do que $p = k - \frac{1}{2}$ é k , em outras palavras, temos que

$$k - 1 = \left\lfloor k - \frac{1}{2} \right\rfloor \leq p = k - \frac{1}{2} \leq \left\lceil k - \frac{1}{2} \right\rceil = k.$$

Dessa forma, se $p = k - 1$ então $q = k$, e se $p = k$ então $q = k - 1$. Substituindo esses valores em (6.6) obtemos $RE(D^{k-1,k}) = RE(D^{k,k-1})$. Portanto, quando $n = 4k$, o inteiro que retorna a maior $RE(p)$ é $p = k$ ou $p = k - 1$. Assim, sem perda de generalidade, podemos assumir que $p \geq q$ e se $n = 4k$ o máximo de $RE(p)$ é atingido quando tomamos o teto de $p = \frac{n-2}{4}$ e o piso de $q = \frac{n-2}{4}$.

Portanto, $n = 2(p+q+1) \geq 8$ par com $p, q \geq 0$, o (p, q) -sol duplo atinge a energia de Randić máxima quando $p = \lceil \frac{n-2}{4} \rceil$ e $q = \lfloor \frac{n-2}{4} \rfloor$.

□

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nesta dissertação, estudamos propriedades da matriz de Randić, cotas para o índice de Randić e, principalmente, resultados sobre a energia de Randić máxima para grafos conexos e desconexos. Nesse sentido, trouxemos um apanhado de resultados já conhecidos da literatura sobre esses tópicos, e além disso, contribuimos mostrando que o grafo com máxima energia de Randić na classe dos sóis duplos é o $(\lceil \frac{n-2}{4} \rceil, \lfloor \frac{n-2}{4} \rfloor)$ -sol duplo.

Iniciamos apresentando a definição das matrizes de adjacência, Laplaciana, Laplaciana normalizada e de Randić. Além das energias associadas a cada uma dessas matrizes. Na sequência, calculamos o índice de Randić para os grafos caminho, bipartido completo e regular, e também apresentamos algumas cotas para esse parâmetro. Ainda, descrevemos como foi obtido o refinamento para o limite superior de $R_{-1}(T)$ para árvores. Além disso, demonstramos a melhor cota conhecida do índice de Randić para grafos conexos de Cavers, Fallat e Kirkland [11]. Procuramos escrever essa demonstração da melhor forma possível, buscando deixar claro todos os passos, para facilitar o entendimento.

Estudamos também a relação da matriz de Randić com a matriz Laplaciana normalizada e propriedades sobre seus autovalores. Inclusive, vimos que 1 é o maior autovalor de $R(G)$ quando G é um grafo com pelo menos uma aresta, associado ao autovetor $(\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2}, \dots, \sqrt{d_n})^T$. Além disso, apresentamos um resultado que fornece informações sobre os três primeiros coeficientes do polinômio característico de $R(G)$. Com destaque para o coeficiente $-c_2$, que é igual ao índice de Randić $R_{-1}(G)$.

Já para a energia de Randić, vimos que para grafos sem vértices isolados, $RE(G) = E_{\mathcal{L}}(G)$. Essa relação pode facilitar o cálculo de $RE(G)$ para classes de grafos que o espectro Laplaciano normalizado já é conhecido. Ainda, por conta

dessa relação, é possível utilizar o algoritmo de localização de autovalores da matriz Laplaciana normalizada para árvores, como fizemos no Capítulo 6, para calcular os polinômios característicos dos grafos sol e sol duplo e obter a expressão para suas energias. Além disso, discutimos o problema de energia máxima para grafos conexos e desconexos. Vimos que esse problema já está resolvido para os grafos desconexos, isto é, já são conhecidos os grafos desconexos que tem máxima energia de Randić. Dessa forma, a pergunta natural a se fazer é qual é o grafo conexo com energia de Randić máxima? Nessa perspectiva, apresentamos a Conjectura 5.3.2 de Gutman, Furtula e Bozkurt [23], de que os grafos conexos com a maior energia de Randić são o sol e o sol duplo, a depender da paridade do número de vértices.

Desde então, algumas contribuições já foram feitas para essa Conjectura, como nos trabalhos de Allem, Molina e Pastine [4], além de Allem, Braga e Pastine [3], onde os autores apresentaram algumas famílias de grafos que satisfazem a Conjectura 5.3.2. Alikhani e Ghanbari [2], também contribuíram calculando o polinômio característico e a energia de Randić para alguns grafos específicos, como os grafos chamados *friendship* e *Dutch Windmill*. Nesse sentido, contribuimos com um resultado original, colaborando parcialmente para a prova da Conjectura 5.3.2. Mostramos que o grafo com máxima energia de Randić na classe dos sóis duplos é o $(\lceil \frac{n-2}{4} \rceil, \lfloor \frac{n-2}{4} \rfloor)$ -sol duplo. Nossa demonstração consistiu em aplicar o teste da primeira derivada na expressão obtida para a energia de Randić do (p, q) -sol duplo e analisar o ponto de máximo dessa função. Ressaltamos que esse resultado foi apresentado no CNMAC de 2022 e seu resumo será publicado no periódico *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*.

Como trabalhos futuros, podemos investigar outras famílias de grafos que satisfaçam a Conjectura 5.3.2 como feito nos trabalhos [4], [3] e [2]. Além disso, provar a Conjectura 5.3.2 é um objetivo que almejamos. Outro ponto a ser explorado é melhorar a cota do índice de Randić para grafos conexos de Cavers, Fallat e Kirkland [11]. Para $n \geq 3$, os autores provaram que $R_{-1}(G) \leq \frac{15(n+1)}{56}$, mas

eles suspeitam que um limite mais refinado pode ser encontrado. Dessa forma, obter uma cota mais refinada e determinar classes de grafos que a satisfaçam para infinitos valores de n é um problema interessante e que pode ser investigado, como feito para o caso das árvores.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ABREU, N. M. M., DEL-VECCHIO, R. R., VINAGRE, C. T., AND STEVANOVIĆ, D. *Introdução à teoria espectral de grafos com aplicações*. SBMAC, São Carlos, 2012.
- [2] ALIKHANI, S., AND GHANBARI, N. Randić energy of specific graphs. *Applied Mathematics and Computation*, 269 (2015), 722–730.
- [3] ALLEM, L. E., BRAGA, R. O., AND PASTINE, A. Randić index and energy. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 83 (2020), 611–622.
- [4] ALLEM, L. E., MOLINA, G., AND PASTINE, A. Short note on Randić energy. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 82 (2019), 515–528.
- [5] BEINEKE, L., WILSON, R., AND CAMERON, P. *Topics in Algebraic Graph Theory*. Encyclopedia of Mathematics and its Applications. Cambridge University Press, 2004.
- [6] BOLLOBÁS, B., ERDÖS, P., AND SARKAR, A. Extremal graphs for weights. *Discrete Mathematics* 200, 1 (1999), 5–19.
- [7] BOLLOBÁS, B. *Graph Theory: An Introductory Course*. Springer, 1979.
- [8] BOZKURT, B., GÜNGÖR, A. D., GUTMAN, I., AND ÇEVİK A. S. Randić matrix and Randić energy. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 64 (2010), 239–250.
- [9] BRAGA, R. O., DEL-VECCHIO, R. R., RODRIGUES, V. M., AND TREVISAN, V. Trees with 4 or 5 distinct normalized Laplacian eigenvalues. *Linear Algebra and its Applications*, 471 (2015), 615–635.
- [10] CAVERS, M. S. *The normalized Laplacian matrix and general Randić index of graphs*. PhD thesis, University of Regina, Saskatchewan, 2010.

- [11] CAVERS, M. S., FALLAT, S., AND KIRKLAND, S. On the normalized Laplacian energy and general Randić index R_{-1} of graphs. *Linear Algebra and its Applications* 433, 1 (2010), 172–190.
- [12] CLARK, L. H., AND MOON, J. W. On the general Randić index for certain families of trees. *Ars Combinatoria*, 54 (2000), 223–235.
- [13] CONSONNI, V., AND TODESCHINI, R. New spectral indices for molecule description. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 60 (2008), 3–14.
- [14] CVETKOVIĆ, D., DOOB, M., AND SACHS, H. *Spectra of Graphs - Theory and Application*. Academic Press, New York, 1980.
- [15] CVETKOVIĆ, D. M. Graphs and their spectra. *Publikacije Elektrotehničkog fakulteta. Serija Matematika i fizika*, 354/356 (1971), 1–50.
- [16] DAS, K., AND SORGUN, S. On Randić energy of graphs. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 72 (01 2014), 227–238.
- [17] DIESTEL, R. *Graph Theory*, 5 ed. Springer Berlin, 2017.
- [18] GODSIL, C., AND ROYLE, G. F. *Algebraic Graph Theory*. No. Book 207 in Graduate Texts in Mathematics. Springer, 2001.
- [19] GUTMAN, I. Acyclic systems with extremal hückel π -electron energy. *Theoretica chimica acta* 45 (1977), 79–87.
- [20] GUTMAN, I. The energy of a graph. *Ber. Math. -Statist. Sect. Forsch. Graz.* 103 (1978), 1–22.
- [21] GUTMAN, I. The energy of a graph: Old and new results. In *Algebraic Combinatorics and Applications* (Berlin, Heidelberg, 2001), A. Betten, A. Kohnert, R. Laue, and A. Wassermann, Eds., Springer Berlin Heidelberg, pp. 196–211.
- [22] GUTMAN, I., AND FURTULA, B. Survey of graph energies. *Mathematics Interdisciplinary Research* 2 (2017), 85–129.

- [23] GUTMAN, I., FURTULA, B., AND BOZKURT, S. B. On Randić energy. *Linear Algebra and its Applications*, 442 (2014), 50–57.
- [24] GUTMAN, I., LEPOVIĆ, M., VIDOVIĆ, D., AND CLARK, L. H. Exponent-dependent properties of the connectivity index. *Indian Journal of Chemistry 41 A* (2002), 457–461.
- [25] GUTMAN, I., AND ZHOU, B. Laplacian energy of a graph. *Linear Algebra and its Applications 414* (2006), 29–37.
- [26] HU, Y., JIM, Y., LI, X., AND WANG, L. Maximum tree and maximum value for the Randić index r_{-1} of trees of order $n \leq 102$. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 55 (2006), 119–136.
- [27] HU, Y., LI, X., AND YUAN, Y. Solutions to two unsolved questions on the best upper bound for the Randić index r_{-1} of trees. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 54 (2005), 441–454.
- [28] HÜCKEL, E. Quantentheoretische beiträge zum benzolproblem. *Zeitschrift für Physik*, 70 (1931).
- [29] JACOBS, D. P., AND TREVISAN, V. Locating the eigenvalues of trees. *Linear Algebra and its Applications 434*, 1 (2011), 81–88.
- [30] LI, X., SHI, Y., AND GUTMAN, I. *Graph Energy*. Springer, 2012.
- [31] LI, X., AND YANG, Y. Sharp bounds for the general Randić index. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 51 (2004), 155–166.
- [32] LIMA, M. S., ALLEM, L. E., AND TREVISAN, V. Double sun with largest Randić energy. In *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics* (2022), vol. 9.
- [33] MCCLELLAND, B. J. Properties of the Latent Roots of a Matrix: The Estimation of π -Electron Energies. *J. Chem. Phys.* 54, 2 (Jan. 1971), 640–643.

- [34] MEYER, C. D. *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*. SIAM, 2001.
- [35] NIKIFOROV, V. The energy of graphs and matrices. *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 326 (2007), 1472–1475.
- [36] PAVLOVIĆ, L., AND STOJANOVIĆ, M. Comment on “solutions to two unsolved questions on the best upper bound for the Randić index r_{-1} of trees”. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 56 (2006), 409–414.
- [37] PAVLOVIĆ, L., STOJANOVIĆ, M., AND LI, X. More on “solutions to two unsolved questions on the best upper bound for the Randić index r_{-1} of trees”. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 56 (2007), 167–182.
- [38] RODRÍGUEZ, J. A. A spectral approach to the Randić index. *Linear Algebra and its Applications* 400 (2005), 339–344.
- [39] RODRÍGUEZ, J. A., AND SIGARRETA, J. M. On the Randić index and conditional parameters of a graph. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 54 (2005), 403–416.
- [40] SHI, L. Bounds on Randić indices. *Discrete Mathematics*, 309 (2009), 5238–5241.