



MEDIDAS DE IRREGULARIDADE EM GRAFOS

Joelma Ananias de Oliveira

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia de Produção, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia de Produção.

Orientadores: Nair Maria Maia de Abreu
Carla Silva Oliveira
Claudia Justel

Rio de Janeiro
Novembro de 2012

MEDIDAS DE IRREGULARIDADE EM GRAFOS

Joelma Ananias de Oliveira

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA DE PRODUÇÃO.

Examinada por:

Profa. Nair Maria Maia de Abreu, D. Sc.

Profa. Carla Silva Oliveira , D. Sc.

Profa. Claudia Justel, D. Sc.

Prof. Paulo Oswaldo Boaventura Netto, D.Ing.

Profa. Laura Silvia Bahiense da Silva Leite, D. Sc.

Profa. Andréa Soares Bonifácio, D.Sc.

Prof. Fábio Protti, D. Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
NOVEMBRO DE 2012

Oliveira, Joelma Ananias de

Medidas de Irregularidade em Grafos/Joelma Ananias de Oliveira. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2012.

X, 87 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Nair Maria Maia de Abreu

Carla Silva Oliveira

Claudia Justel

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia de Produção, 2012.

Referências Bibliográficas: p. 85 – 87.

1. Grafos irregulares. 2. Índice de um grafo. 3. Medidas de irregularidade. I. Abreu, Nair Maria Maia de *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia de Produção. III. Título.

Agradecimentos

A meu marido Aroldo e aos meus filhos pela paciência e pelo incentivo.

Às minhas orientadoras Nair M. N. de Abreu, Carla S. Oliveira e Claudia Justel pelo tempo e atenção que me dedicaram.

Aos meus colegas de curso Aroldo, Luciana Lee, Laura Patuzzi e Leonardo Pessoa.

À minha mãe Vergínia, pela ajuda magnífica que me proporcionou.

À Universidade Federal de Mato Grosso, que possibilitou o meu afastamento para realização do doutorado.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo suporte financeiro.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

MEDIDAS DE IRREGULARIDADE EM GRAFOS

Joelma Ananias de Oliveira

Novembro/2012

Orientadores: Nair Maria Maia de Abreu
Carla Silva Oliveira
Claudia Justel

Programa: Engenharia de Produção

Um grafo é regular se todos os seus vértices possuem o mesmo grau. Caso contrário, o grafo é irregular. Existem algumas medidas propostas na literatura para medir a irregularidade de um grafo, utilizando alguns parâmetros discretos. Essas medidas são, em geral, determinadas em função ou da média ou da variância dos graus dos vértices do grafo ou do índice do grafo. Este último é um parâmetro espectral que corresponde ao maior autovalor da matriz de adjacência. Neste trabalho reunimos os principais resultados existentes para tais medidas, especialmente aqueles relacionados a grafos extremais. Além disso, determinamos os valores máximos dessas medidas e caracterizamos grafos extremais em algumas classes especiais. Finalmente, obtemos expressões matemáticas para o top, para o gap e para o conjunto equilibrador (conceitos relacionados com os graus dos vértices de um grafo) para grafos de algumas famílias que são extremais para as medidas de irregularidade.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

MEASURES OF IRREGULARITY OF GRAPHS

Joelma Ananias de Oliveira

November/2012

Advisors: Nair Maria Maia de Abreu
Carla Silva Oliveira
Claudia Justel

Department: Production Engineering

A graph is said regular if all of its vertices have the same degree. Otherwise, it is said an irregular graph. There are some measures proposed in the literature for the irregularity of a graph, using some discrete parameters. These measures are generally determined as a function of either the average, the variance of the vertex degrees or the index of the graph. The latter is a spectral invariant which corresponds to the largest eigenvalue of the adjacency matrix of the graph. In this work we survey the main results for such measures, especially those relative to extremal graphs. Furthermore, we determine the maximum values of those measures and characterize their extremal graphs in some special classes. Finally, we obtain mathematical expressions for the top, gap and tuner set (parameters that involve the degrees of the vertices of a graph) of graph families that are extremal for the measure of irregularity studied.

Sumário

Lista de Figuras	viii
Lista de Tabelas	x
1 Introdução	1
2 Preliminares	4
2.1 Teoria dos Grafos	4
2.2 Teoria Espectral de Grafos	6
3 Medidas de Irregularidade de Grafos	19
3.1 A Medida Espectral	20
3.2 Medida da Variância	26
3.3 Medida não-balanceada	31
3.4 Medida do Desvio dos Graus	36
4 Irregularidade de Grafos em Classes Especiais	39
4.1 Grafos Caminho-Completos	40
4.2 Grafos Split Completos	46
5 Uma nova Medida de Irregularidade	57
5.1 A medida $I(G)$	57
6 Conjunto Equilibrador em Grafos de Classes Especiais	62
6.1 Média dos Graus e Conceitos Relacionados	62
6.2 Grafos $H_{n,k}$ e $G_{n,k}$	68
6.3 Grafos Abacaxi, Quase-Estrela, Abano Split Completo e Caminho Completo	74
7 Considerações Finais	83
Referências Bibliográficas	85

Lista de Figuras

2.1	Grafos splits com 6 vértices.	6
2.2	Grafos cujas respectivas matrizes de adjacência escada são $A(G)$ e $A(H)$ dadas acima.	8
2.3	Grafos que não possuem matriz de adjacência escada.	9
2.4	Grafos $QC(5, 5)$, $QC(6, 7)$ e $QC(6, 13)$	10
2.5	Grafos $G_{6,0}$, $G_{7,1}$ e $G_{7,2}$	11
2.6	Grafos $H_{8,3}$, $H_{9,4}$ e $H_{10,5}$	11
2.7	Grafos $G_{n,0}$, $G_{n,1}$ e $G_{n,2}$ com índice máximo em $\mathcal{H}(n, m)$	12
2.8	Grafos $H_{n,n+3}$, $H_{n,n+4}$, $H_{n,n+5}$ com índice máximo em $\mathcal{H}(n, m)$	12
2.9	Grafos conexos G_1 e G_2 com n vértices e $n + 3$ arestas com matriz adjacência escada.	13
2.10	Grafo com índice máximo em $\mathcal{G}(6)$	16
2.11	Grafo com índice máximo em $\mathcal{H}(6, 11)$	17
2.12	Grafos com índice máximo em $\mathcal{H}(80, 85)$ com $\lambda_1(G_{80,5}) = \lambda_1(H_{80,5}) = 9$	18
2.13	Grafo com índice máximo em $\mathcal{H}(90, 95)$	18
3.1	Grafos não conexos em que $irr(G) = 0$	20
3.2	Grafo extremal em $\mathcal{G}(6)$ para $\varepsilon(G)$	21
3.3	Grafos extremais para $\varepsilon(G)$ em $\mathcal{G}(7)$ e $\mathcal{G}(11)$	22
3.4	Grafos extremais para $\varepsilon(G)$ em $\mathcal{G}(6)$	22
3.5	Grafos mais irregulares que não pertencem a família $H_{n,k}$	24
3.6	Grafos $PA(6, 4)$, $PA(9, 5)$ e $PA(9, 6)$	25
3.7	Grafos abacaxi com 8 vértices isomorfos a $G_{8,k}$	25
3.8	Grafos $QS(5, 5)$, $QS(6, 7)$ e $QS(6, 13)$	27
3.9	$QS(6, 9) \cong H_{6,3}$	28
3.10	Grafos extremais para a medida da variância em $\mathcal{G}(6, 8)$	29
3.11	Respectivos grafos extremais para $\sigma(G)$ em $\mathcal{G}(6)$, $\mathcal{G}(7)$ e $\mathcal{G}(8)$	30
3.12	Grafos extremais em $\mathcal{H}(6, 10)$ para $\sigma(G)$	31
3.13	Grafos $SC(6, 2)$, $SC(7, 3)$ e $SC(9, 4)$	32
3.14	Grafos $SCF(6, 2, 1)$, $SCF(7, 3, 2)$ e $SCF(10, 4, 3)$	33
3.15	Grafos conexos antiregulares com $2 \leq n \leq 12$ vértices.	35

4.1	$PC_{n,p,t}$ -caminho-completo.	40
5.1	Grafos irregulares em que $I(G) = 0$	59
5.2	O grafo mais irregular com relação à $I(G)$ na classe $\mathcal{G}(5, 6)$	59
5.3	Valores maximais de $I(G)$ em $\mathcal{H}(5, m)$, para $4 \leq m \leq 10$	59
5.4	Grafos mais irregulares com relação a $I(G)$	60
6.1	Grafo G com $\mu(G) = 3$ e $h(G) = 1$	63
6.2	Grafos com gap nulo.	63
6.3	Grafo com $B(G)$, $L(G)$ e $U(G)$ não vazios.	64
6.4	Grafo G irregular e balanceado.	64
6.5	Grafo G balanceado.	65
6.6	Grafos não-balanceados com $\Delta(G) = n - 1$ e $\mu(G) \leq n - 2$	65
6.7	Grafo conexo, não-balanceado, com gap nulo e top $n - 2$	66
6.8	Grafo G com conjunto equilibrador próprio $\Psi = \{2\}$	67
6.9	Grafo que não possui conjunto equilibrador.	67
6.10	Grafo que possui mais de um conjunto equilibrador.	68
6.11	Grafos $G_{5,k}$, $0 \leq k \leq 4$	69
6.12	Grafos $H_{7,k}$, $0 \leq k \leq 4$	71
6.13	$PC_{6,p,1}$ -caminho-completos para $1 \leq p \leq 4$	78

Lista de Tabelas

3.1	Grafos Extremais para medidas de irregularidade $\varepsilon(G)$, $\sigma(G)$ e $irr(G)$.	38
4.1	Grafos extremais para $irr(PC_{n,p,1})$, $4 \leq n \leq 12$.	41
4.2	Grafos caminho-completos extremais para $s(G)$, $irr(G)$, $\sigma(G)$ e $\varepsilon(G)$.	55
4.3	Grafos split completo extremais para $s(G)$, $irr(G)$, $\sigma(G)$ e $\varepsilon(G)$.	56
5.1	Grafos extremais em $\mathcal{H}(n)$ para $I(G)$, $5 \leq n \leq 14$.	60
6.1	Valores das medidas de irregularidade para $G_{12,k}$ balanceados.	70
6.2	Grafos abano split completo balanceados.	77
6.3	Valores das medidas de irregularidade para os grafos $SCF(8, k, t)$ balanceados.	77
6.4	Grafos extremais para $\varepsilon(G)$, $\sigma(G)$ e $irr(G)$ balanceados.	81
6.5	Grafos não-balanceados.	82

Capítulo 1

Introdução

Um dos principais objetivos da Teoria Espectral de Grafos é deduzir as propriedades de um grafo através da informação espectral fornecida por uma ou mais matrizes a ele associadas, como a matriz de adjacência, a laplaciana e a matriz laplaciana sem sinal, esta última mais recentemente estudada.

Um invariante de um grafo é um valor numérico que é preservado por isomorfismo, ou seja, grafos isomorfos possuem os mesmos invariantes. Como invariantes naturais podemos citar: número de vértices, número de arestas e o grau dos vértices. No entanto, há diversos outros invariantes muito utilizados e aplicados a problemas práticos tais como número cromático, tamanho da maior clique, conectividade de vértices e de arestas, etc. Encontrar uma lista completa de invariantes capaz de caracterizar grafos isomorfos ainda é um problema em aberto. O espectro de um grafo associado a uma dada matriz é o multiconjunto dos autovalores daquela matriz. Como as matrizes associadas a grafos isomorfos são semelhantes, os espectros desses grafos são iguais. Desta forma, os espectros de tais matrizes são também importantes invariantes do grafo.

Um grafo é regular se e somente se todos os vértices têm o mesmo grau. Caso contrário, dizemos que o grafo é irregular. Quando desejamos medir quão irregular é um grafo, utilizamos parâmetros cujo valor seja nulo quando o grafo é regular. Em verdade, baseado em tal propriedade, poderíamos definir como medida de irregularidade de um grafo toda função $F : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}$ que tem como domínio o

conjunto dos grafos \mathcal{G} e como contra-domínio o conjunto dos números reais \mathbb{R} tal que $F(G) = 0$ se e somente se $\forall G \in \mathcal{G}$, G é um grafo regular.

Em 1957, Collatz e Sinogowitz [10] provaram que o índice de um grafo (o maior autovalor da matriz de adjacência) é maior ou igual à média dos graus com a igualdade sendo válida se e somente se o grafo é regular. A partir deste fato, eles definiram a diferença entre esses dois invariantes como uma medida de irregularidade de um grafo. Surgiram então outras três medidas de irregularidade sendo que nenhuma dessas envolve parâmetros espectrais. A primeira, definida por Bell [8], é a variância dos graus dos vértices. A segunda medida, definida por Alberston [4], corresponde a soma em valor absoluto da diferença entre os graus dos vértices e, a terceira, deve-se a Nikiforov [27], que optou pelo somatório da diferença entre o grau de cada um dos vértices e a média dos graus.

Neste trabalho reunimos os principais resultados já conhecidos na Teoria Espectral de Grafos relacionados às medidas de irregularidade de grafos e determinamos os valores máximos para tais medidas em grafos de determinadas classes, caracterizando os respectivos grafos extremais. Além disso, investigamos os invariantes *top*, *gap* e *conjunto equilibrador* em grafos das famílias que são extremais para as medidas de irregularidade. Todos estes invariantes estão relacionados com a média e distribuição dos vértices e foram estudados por Rodrigues [34] e Damas *et al.* [14]. Com isto, conseguimos verificar se os grafos extremais para as medidas de irregularidade estudadas são não-balanceados. Este trabalho se desenvolve da seguinte maneira: no Capítulo 2, encontram-se os conceitos básicos da literatura de grafos necessários à compreensão deste texto. O Capítulo 3 é dedicado aos resultados existentes na literatura relativos às medidas de irregularidade de um grafo. Mostramos que a Conjectura 3.3.4 é válida para algumas classes de grafos, sendo uma das nossas contribuições da tese. No Capítulo 4, apresentamos algumas contribuições da tese como, por exemplo, analisamos o comportamento de algumas medidas de irregularidade em grafos de classes especiais. No Capítulo 5, definimos uma nova medida de irregularidade, que envolve dois parâmetros espectrais, a energia de um

grafo e a energia laplaciana sem sinal. No Capítulo 6, apresentamos os conceitos dos invariantes *top*, *gap*, *grafos balanceados*, *grafos não-balanceados* e *conjunto equilibrador* de um grafo. Neste mesmo capítulo, descrevemos os resultados encontrados por Damas *et al.* [14] e apresentamos os resultados originais que obtivemos em relação a tais invariantes. Finalmente, no Capítulo 7, nossas considerações finais e propostas de trabalho futuro para a continuação desta pesquisa são apresentadas.

Capítulo 2

Preliminares

2.1 Teoria dos Grafos

Seja $G = (V, E)$ um grafo simples (sem arestas múltiplas e sem laços), não orientado e finito, onde $V(G) = V$ é um conjunto de n vértices e $E(G) = E$ é o conjunto das m arestas de G . Cada aresta $\{i, j\}$ é um subconjunto a dois elementos i e $j \in V$, caso em que i e j são adjacentes. O *grau* de um vértice i , denotado por d_i , é o número de arestas a ele incidentes. Os graus mínimo e máximo de G , são respectivamente, denotados por $\delta(G)$ e $\Delta(G)$. A média dos graus $\bar{d}(G) = \sum_{i=1}^n \frac{d_i}{n}$ é igual a $\frac{2m}{n}$, dado que $\sum_{i=1}^n d_i = 2m$. O *complementar* de G é o grafo \bar{G} que possui o mesmo conjunto de vértices de G tal que $\{i, j\} \in E(\bar{G})$ se, e somente se, $\{i, j\} \notin E(G)$. Uma *cadeia* de comprimento k é uma sequência de vértices v_1, \dots, v_k tal que $\forall 1 \leq j \leq k-1, \{v_j, v_{j+1}\} \in E(G)$. Se os vértices forem todos distintos, a cadeia é denominada *caminho simples*. A *distância* $d(i, j)$ de um vértice i ao vértice j , em um grafo G , é o comprimento do menor caminho entre i e j ; caso não exista um caminho entre i e j , dizemos que a distância é infinita. Por *excentricidade* de um vértice i entende-se o valor real da maior distância entre i e j , para todo $j \in V$, ou seja, $exc(i) = \max_{j \in V(G)} \{d(i, j)\}$. O *raio* r de um grafo é o valor da excentricidade mínima, isto é, $r = \min_{i \in V(G)} \{exc(i)\}$.

O grafo que é constituído apenas por um caminho simples de comprimento k

é chamado caminho P_k . O ciclo C_k é uma cadeia fechada v_1, \dots, v_k , $k \geq 4$, onde v_1, \dots, v_k , é um caminho simples e $v_1 = v_k$. Um grafo G é dito *conexo* se existe um caminho simples entre todos os pares de seus vértices; caso contrário, G é denominado *desconexo*. Um *grafo completo* K_n com n vértices é aquele em que todos os vértices são adjacentes entre si e um *grafo* é *k-regular* se todos os seus vértices possuem o mesmo grau k . Caso contrário, é chamado irregular. Um *subgrafo* de G é um grafo cujo conjunto de vértices é subconjunto de $V(G)$ e o conjunto de arestas é um subconjunto de $E(G)$. Um *subgrafo induzido* por um subconjunto de vértices $H \subset V(G)$ em G , denotado por $G[H]$, é um subgrafo de G tal que, dados $i, j \in H$, se $\{i, j\} \in E(G)$ implica $\{i, j\} \in E(G[H])$. Um *subgrafo gerador* H de G é um subgrafo tal que $V(H) = V(G)$.

Se $G_1 = (V_1, E_1)$ e $G_2 = (V_2, E_2)$ são dois grafos tais que $V(G_1) \cap V(G_2) = \emptyset$, seu *grafo soma* é $G_1 + G_2 = (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2)$. O *join* de G_1 e G_2 denotado por $G_1 \vee G_2$ é o grafo obtido pelo *grafo soma* $G_1 + G_2$ adicionando-se novas arestas de cada vértice de G_1 para todos os vértice de G_2 . Dizemos que dois grafos G_1 e G_2 são isomorfos, $G_1 \cong G_2$, quando existe uma bijeção $f : V(G_1) \mapsto V(G_2)$ tal que $\{i, j\} \in E(G_1)$ se, e somente se, $\{f(i), f(j)\} \in E(G_2)$.

Uma *clique* de um grafo G é um subconjunto de vértices que induz um subgrafo completo. O *número clique* de um grafo $\omega(G)$ é a ordem da maior clique contida em G . Um *conjunto independente* é um conjunto de vértices não adjacentes entre si. O *número de independência* de um grafo $\alpha(G)$ é a cardinalidade do maior conjunto independente de um grafo. O *número cromático* de um grafo $\chi(G)$ é o menor número de cores necessárias para colorir os vértices de um grafo sem que vértices adjacentes sejam coloridos com a mesma cor. Um grafo G é *bipartido* se seu conjunto de vértices pode ser particionado em dois subconjuntos disjuntos independentes A e B tais que as arestas de G unem somente vértices de A a vértices de B . Uma *estrela* com n vértices, denotada por S_n , é um grafo bipartido em que um dos conjuntos independentes possui apenas um único vértice e o outro possui $n - 1$ vértices. Um grafo é *bipartido completo* se ele é um grafo bipartido tal que todo vértice de

um subconjunto é adjacente a todos os vértices do outro subconjunto. Um grafo é *bipartido semiregular* se todos os vértices do mesmo subconjunto independente possuem o mesmo grau. Um grafo é *split* se e somente se ele pode ser particionado em um conjunto independente e uma clique. Um grafo *split completo* é um grafo split tal que todo vértice do conjunto independente é adjacente a todos os vértices da clique. Um grafo é *cordal* se não contém um subgrafo induzido isomorfo a C_k , com $k \geq 4$. A seguir, enunciaremos um resultado que caracteriza grafos *splits*, cuja prova está em [25]. A Figura 2.1 exhibe grafos split.

Teorema 2.1.1 [25] *Seja G um grafo com n vértices. Então as seguintes condições são equivalentes:*

- i) G é um grafo split;*
- ii) G e \overline{G} são cordais;*
- iii) G não contém subgrafo induzido isomorfo a $2K_2$, C_4 ou C_5 .*

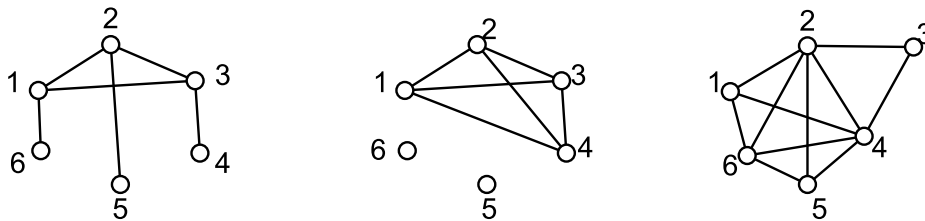


Figura 2.1: Grafos splits com 6 vértices.

2.2 Teoria Espectral de Grafos

Uma das matrizes mais investigadas na Teoria Espectral de Grafos é a *matriz de adjacência* que denotamos por $A(G) = [a_{ij}]$. Trata-se de uma matriz quadrada de ordem igual ao número de vértices do grafo, em que $a_{ij} = 1$, se os vértices i e j são adjacentes e $a_{ij} = 0$, caso contrário. O *polinômio característico* de $A(G)$ é

chamado polinômio característico de G , e denotado por $p_G(\lambda)$. Os autovalores de G são os autovalores de $A(G)$, os quais são as raízes de $p_G(\lambda)$, e que denotaremos por $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. O *raio espectral* de G é o número real não negativo $\rho(G) = \max_i |\lambda_i|$. O maior autovalor de G , $\lambda_1(G)$, é chamado *índice* de G . Pelo Teorema de Perron-Frobenius (veja [22]), se G é um grafo conexo então $\rho(G) = \lambda_1(G)$. A *matriz laplaciana* de uma grafo G é a matriz $L(G) = D(G) - A(G)$, onde $D(G)$ é a matriz diagonal dos graus dos vértices de G . A *conectividade algébrica* do grafo G é o segundo menor autovalor da matriz laplaciana, que denotamos por $a(G)$. A *matriz laplaciana sem sinal* é dada por $Q(G) = D(G) + A(G)$. Q -spread é a diferença entre o maior e o menor autovalor da matriz laplaciana sem sinal.

Seja M uma matriz de ordem $n \times n$. O espectro de M , $spect(M)$, é o multiconjunto constituído pelos n autovalores $\lambda_1 > \lambda_2 \dots > \lambda_n$ de M , dispostos em ordem decrescente. A multiplicidade algébrica de λ_i , $m(\lambda_i)$, é o número de vezes em que λ_i aparece como elemento do multiconjunto.

O Teorema 2.2.1 relaciona os graus dos vértices com o índice de um grafo, e sua prova pode ser encontrada em [12].

Teorema 2.2.1 [12] *Seja G um grafo e $\bar{d}(G)$, a média dos graus dos vértices de G . Então,*

$$\bar{d}(G) \leq \lambda_1 \leq \Delta(G).$$

Pelo Teorema 2.2.1 é imediato verificar que se G é k -regular então $\lambda_1(G) = k$.

A seguir apresentamos o Teorema 2.2.2, provado por Yuan [36], que apresenta um limite superior para o índice de G , em função do número de vértices e arestas do grafo.

Teorema 2.2.2 [36] *Se G é um grafo com n vértices e m arestas então $\lambda_1(G) \leq \sqrt{2m - n + 1}$.*

O Teorema 2.2.3 dá um limite inferior para o índice de um grafo em função do seu grau máximo.

Teorema 2.2.3 [29] *Se G é um grafo com grau máximo $\Delta(G)$, $\lambda_1(G) \geq \sqrt{\Delta(G)}$.*

O lema seguinte relaciona o índice de um grafo com o índice de qualquer um de seus subgrafos.

Lema 2.2.4 [16] *Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Se H é um subgrafo de G então $\lambda_1(G) \geq \lambda_1(H)$, com a desigualdade estrita se G é conexo e H é um subgrafo próprio de G .*

Definição 2.2.5 *Uma matriz de adjacência $A = [a_{ij}]$ é chamada escada quando satisfaz a seguinte condição: se $i < j$ e $a_{ij} = 1$ então, $\forall k, h$ tais que $h < k \leq j$ e $h \leq i$, $a_{hk} = 1$.*

As matrizes de adjacência dos grafos da Figura 2.2 são exemplos de matrizes escada.

$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad A(H) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Para tais matrizes, observa-se que todas as entradas não diagonais acima e à esquerda do último 1 de cada linha, são iguais a 1. Assim, os elementos 1's são separados dos 0's ao longo de cada linha, formando uma configuração de escada.

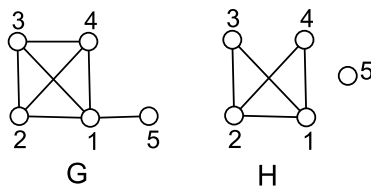


Figura 2.2: Grafos cujas respectivas matrizes de adjacência escada são $A(G)$ e $A(H)$ dadas acima.

É evidente que nem todo grafo possui matriz de adjacência escada. Por exemplo, na Figura 2.3, exibimos dois grafos que não possuem matriz de adjacência escada, pois não existe nenhuma rotulação possível para a qual as matrizes de adjacências sejam como aquela da Definição 2.2.5.

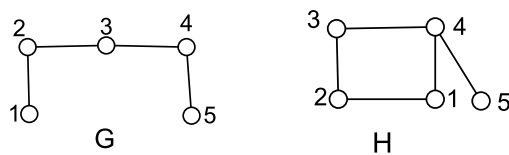


Figura 2.3: Grafos que não possuem matriz de adjacência escada.

Notação 2.2.6 Vamos denotar $\mathcal{G}(n)$ o conjunto formado por todos os grafos com n vértices; $\mathcal{G}(m)$ o conjunto de todos os grafos com m arestas; $\mathcal{G}(n, m)$ o conjunto dos grafos com n vértices e m arestas e $\mathcal{H}(n, m)$ o conjunto de todos os grafos conexos com n vértices e m arestas.

Os resultados que seguem podem ser encontrados em [7, 9, 11, 35], e envolvem o índice de um grafo cuja matriz de adjacência é da forma escada.

Teorema 2.2.7 [9] *Todo grafo em $\mathcal{H}(n, m)$, que possui índice máximo dentre todos os índices dos grafos em $\mathcal{H}(n, m)$, possui a matriz de adjacência escada.*

Corolário 2.2.8 [9] *Se $G \in \mathcal{H}(n, m)$ é tal que G possui índice máximo, então G possui a estrela S_n como subgrafo gerador.*

Prova: Suponha que G não possua uma estrela S_n como subgrafo gerador. Assim, a matriz $A(G)$ não possui uma linha com todos os elementos iguais a 1, exceto o zero da diagonal. Como G é conexo, $A(G)$ não possui uma linha toda nula ou uma coluna toda nula. Assim, existe uma aresta unindo o vértice n e algum vértice r tal que $r < n$. Como G possui índice máximo dentre todos os demais índices dos grafos em $\mathcal{H}(n, m)$, pelo Teorema 2.2.7, G possui matriz de adjacência escada. Considerando $A(G)$ uma matriz adjacência escada, como $a_{rn} = 1$, segue que existe $i, i < r$, tal que $a_{ik} = 1, \forall k = 2, \dots, n$. Portanto, G possui a estrela S_n como subgrafo gerador. ■

No que segue, apresentamos duas classes especiais de grafos que são extremais em relação ao índice. O grafo $H_{n,k}$, introduzido por Brualdi *et al.* [9], e o grafo $G_{n,k}$, por Cvetiković *et al.* [11]. Para isto, precisaremos apresentar a definição de um grafo quase-completo, dado em [3], por Ahlswede e Katona.

Definição 2.2.9 [3] Um grafo com n vértices e m arestas é chamado quase-completo e denotado por $QC(n, m)$, quando é obtido da seguinte forma:

- i) Primeiramente rotulam-se os vértices de $1, \dots, n$;
- ii) Determina-se d e t inteiros, para $2 \leq d$ e $0 \leq t < d$, tais que $m = \binom{d}{2} + t$;
- iii) Os vértices rotulados $1, \dots, d$ formam a maior clique do grafo;
- iv) O vértice $d+1$ é adjacente aos vértices rotulados $1, \dots, t$ e os $n - (d+1)$ vértices restantes são isolados.

Podemos observar que os valores de t e d são únicos, dado que t deve ser menor que d . Por construção, d deve ter o maior valor possível (menor ou igual a m), de modo a representar a maior clique do grafo, e o vértice $d + 1$ deve ser adjacente aos t primeiros vértices da clique. Desta forma, temos que o grafo possui, a menos de isomorfismo, uma única representação. A Figura 2.4 exibe grafos quase-completos. Um deles, o grafo $QC(5, 5)$, tem 5 vértices e 5 arestas, logo $d = 3$ e $t = 2$. Rotulamos os cinco vértices de 1 até 5, e formamos uma clique com os vértices 1, 2 e 3 para, em seguida, ligarmos o vértice 4 aos vértices numerados 1 e 2. O vértice restante, no caso o vértice 5, é isolado. De forma análoga, construímos o grafo $QC(6, 7)$, com $d = 4$ e $t = 1$. O grafo mais à direita é o $QC(6, 13)$ que, por conter 13 arestas, tem $d = 5$ e $t = 3$. Estas 3 arestas ligam o vértice 6 a 3 vértices da clique. Portanto, o grafo $QC(6, 13)$ não tem vértice isolado.

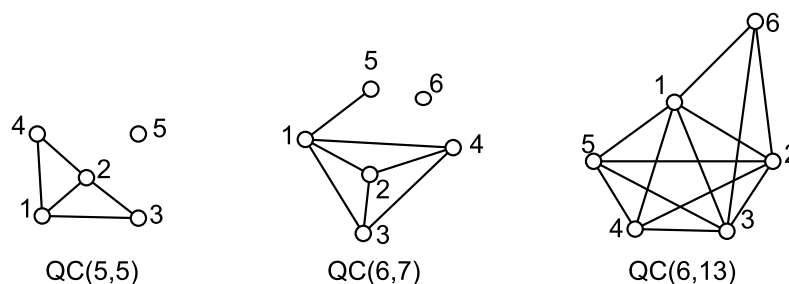


Figura 2.4: Grafos $QC(5, 5)$, $QC(6, 7)$ e $QC(6, 13)$.

Definição 2.2.10 Os grafos $G_{n,k}$ e $H_{n,k} \in \mathcal{H}(n, n+k)$ são assim definidos:

i) Para $0 \leq k \leq \frac{n(n-3)}{2} - 1$, $G_{n,k} = K_1 \vee QC(n-1, k+1)$;

ii) Para $0 \leq k \leq n-3$, $H_{n,k}$ é assim construído: primeiro rotulamos os vértices de 1 a n e ligamos o vértice 1 a cada um dos demais vértices para construir a estrela S_n cujo centro é 1. A seguir, ligamos o vértice 2 aos vértices numerados de 3 até $k+3$.

Os grafos $H_{n,k}$ resultam do seguinte join $H_{n,k} = K_1 \vee (K_{1,k+1} \cup \overline{K}_{n-k-3})$. Nas Figuras 2.5 e 2.6 exibimos grafos $G_{n,k}$ para valores de $n = 6$ ou 7 e $k = 0, 1, 2$. Também exibimos grafos $H_{n,k}$ para $n = 8, 9$ e 10 e $k = 3, 4$ e 5 .

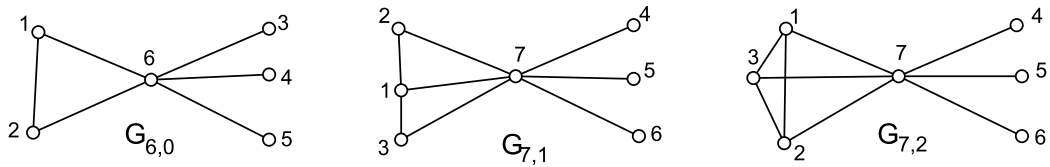


Figura 2.5: Grafos $G_{6,0}$, $G_{7,1}$ e $G_{7,2}$.

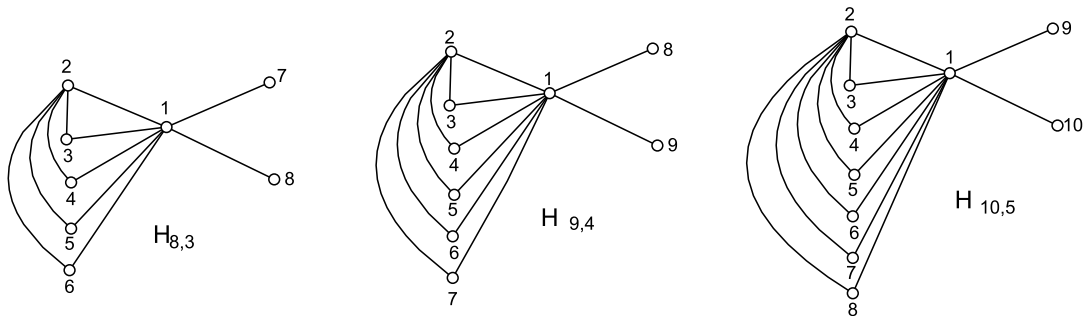


Figura 2.6: Grafos $H_{8,3}$, $H_{9,4}$ e $H_{10,5}$.

Os Teoremas 2.2.11 e 2.2.12, mostram que os grafos $G_{n,k}$ e $H_{n,k}$ são extremais em relação ao índice. A prova dada para o Teorema 2.2.12 é aqui reescrita de modo mais didática que aquela apresentada no artigo [9].

Teorema 2.2.11 [9] *Os grafos em $\mathcal{H}(n, m)$ com $m = n, n + 1$ e $n + 2$ arestas, possuem índice máximo se são isomorfos aos respectivos grafos $G_{n,0}, G_{n,1}$ e $G_{n,2}$ da Figura 2.7.*

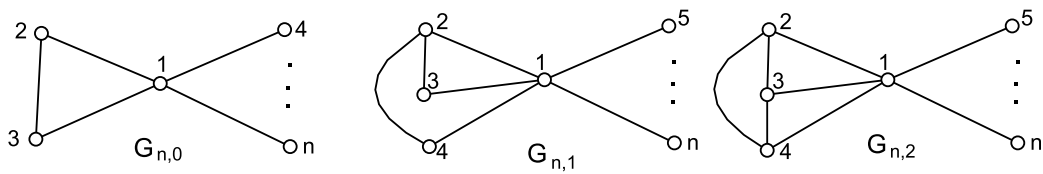


Figura 2.7: Grafos $G_{n,0}, G_{n,1}$ e $G_{n,2}$ com índice máximo em $\mathcal{H}(n, m)$.

Teorema 2.2.12 [9] *Os grafos em $\mathcal{H}(n, m)$, com $n \geq 123$ e $m = n + 3$; $n \geq 216$ e $m = n + 4$, e $n \geq 51$ e $m = n + 5$, possuem índice máximo se são respectivamente isomorfos a $H_{n,n+3}, H_{n,n+4}, H_{n,n+5}$ da Figura 2.8.*

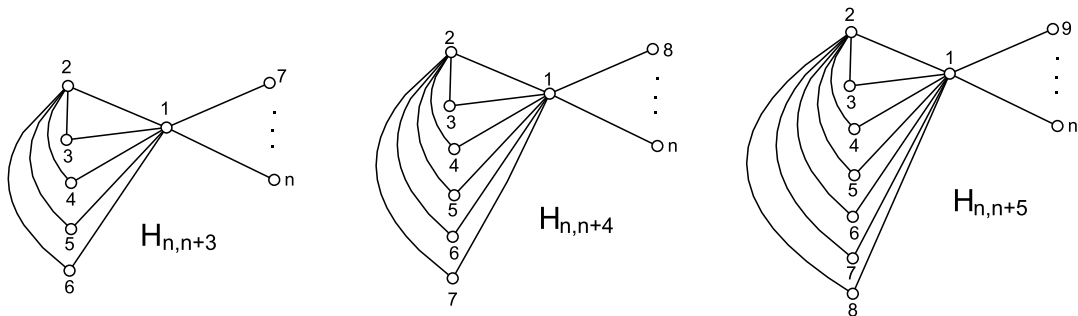


Figura 2.8: Grafos $H_{n,n+3}, H_{n,n+4}, H_{n,n+5}$ com índice máximo em $\mathcal{H}(n, m)$.

Prova: Do Teorema 2.2.7 é suficiente encontrar quais grafos em $\mathcal{H}(n, n + k)$, com matriz de adjacência escada, possuem o maior raio espectral. Vamos fazer a demonstração apenas para $m = n + 3$, os outros casos prosseguem de forma similar. Pelo Corolário 2.2.8, os grafos com índice máximo possuem a estrela S_n como subgrafo gerador. Desta forma, existem apenas dois grafos não isomorfos em $\mathcal{H}(n, n + 3)$ que possuem matriz de adjacência escada. Estes são exibidos na Figura 2.9.

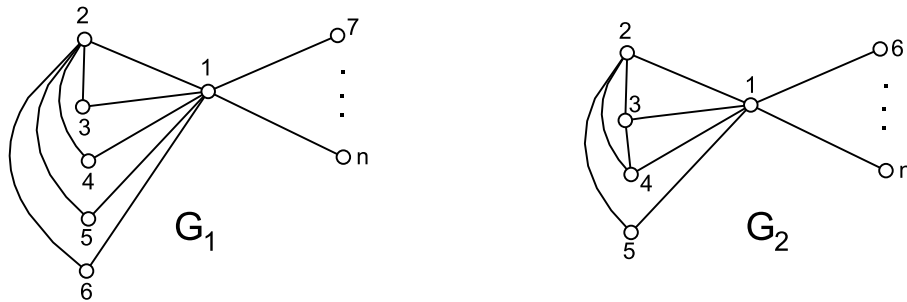


Figura 2.9: Grafos conexos G_1 e G_2 com n vértices e $n + 3$ arestas com matriz adjacência escada.

Para completar a prova, vamos determinar os polinômios característicos de G_1 e G_2 . Suas respectivas matrizes de adjacência são

$$A(G_1) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

e

$$A(G_2) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}.$$

Vamos primeiro mostrar que 0 é um autovalor de $A(G_1)$ com multiplicidade algébrica no mínimo $n - 4$. De fato, seja e_i o i -ésimo vetor da base canônica e, para $3 \leq i \leq 5$, tomemos o vetor $v = (e_i - e_6)$ e, para $7 \leq j \leq n - 1$, tomemos $v = (e_j - e_n)$. Daí, $A(G_1)v = 0$. Portanto, 0 é autovalor de $A(G_1)$ com multiplicidade algébrica no mínimo $n - 4$. Como $A(G_1)$ possui uma base ortogonal constituída por autovetores, segue-se que existem autovetores de $A(G_1)$ da forma $x^T = (a, b, c, c, c, c, d, \dots, d)$.

Assim, podemos concluir que os autovalores da matriz $B = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 4 & n - 6 \\ 1 & 0 & 4 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ são

também autovalores de $A(G_1)$. Portanto,

$$p_{G_1}(\lambda) = \lambda^{n-4}(\lambda^4 - (n+3)\lambda^2 - 8\lambda + 4(n-6)) = \lambda^{n-4}\phi_1(\lambda),$$

onde $\phi_1(\lambda) = \lambda^4 - (n+3)\lambda^2 - 8\lambda + 4(n-6)$. Vamos agora, determinar $P_{G_2}(\lambda)$. Considere $\forall i, 6 \leq i \leq n - 1$, o vetor $v = e_i - e_n$. Temos, analogamente ao caso anterior, $A(G_2)v = 0$, acarretando 0 como autovalor de $A(G_2)$ com multiplicidade algébrica no mínimo $n - 6$, e que $A(G_2)$ possui uma base ortogonal constituída por autovetores da forma $y^T = (a, b, c, d, e, f, \dots, f)$. Consequentemente, os autovalores

da matriz

$$C = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & n-5 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

são iguais aos autovalores de $A(G_2)$. Daí, $p_{G_2}(\lambda) = \lambda^{n-6}(\lambda^6 - (n+3)\lambda^4 - 10\lambda^3 + (4n-21)\lambda^2 + (2n-8)\lambda - (n-5)) = \lambda^{n-6}\phi_2(\lambda)$, para $\phi_2(\lambda) = \lambda^6 - (n+3)\lambda^4 - 10\lambda^3 + (4n-21)\lambda^2 + (2n-8)\lambda - (n-5)$. Assim, a raiz máxima de $\phi_1(\lambda) = \lambda^4 - (n+3)\lambda^2 - 8\lambda + 4(n-6)$ é igual ao raio espectral $\rho(G_1)$, e a raiz máxima de $\phi_2(\lambda) = \lambda^6 - (n+3)\lambda^4 - 10\lambda^3 + (4n-21)\lambda^2 + (2n-8)\lambda - (n-5)$ é igual a $\rho(G_2)$. Do Teorema 2.2.2, $\rho(G_1) \leq \sqrt{n+7} \leq \sqrt{n+8}$ e $\rho(G_2) \leq \sqrt{n+8}$, e do Teorema 2.2.3, $\rho(G_1) \geq \sqrt{n-1}$ e $\rho(G_2) \geq \sqrt{n-1}$.

Tomando-se $f(\lambda) = \phi_2(\lambda) - \lambda^2\phi_1(\lambda) = -2\lambda^3 + 3\lambda^2 + 2(n-4)\lambda - (n-5)$, para $n > 20$, $f(\sqrt{n-1}) = -6\sqrt{n-1} + 2n + 2 > 0$, e, para $n \geq 123$, $f(\sqrt{n+8}) > 0$. Calculando-se a derivada de f e igualando-a a zero, temos

$$f'(\lambda) = -6\lambda^2 + 6\lambda + 2(n-4) = 0,$$

para $\lambda = \frac{3 \pm \sqrt{12n-39}}{6}$. Como $\frac{3 + \sqrt{12n-39}}{6} < \sqrt{n-1}$, para n suficientemente grande, $\lambda \geq \sqrt{n-1}$ e $f'(\lambda) < 0$. Assim, $f(\lambda) > 0$, $\sqrt{n-1} \leq \lambda \leq \sqrt{n+8}$, também para n suficientemente grande. Como $f(\lambda) > 0$, no intervalo acima, dado que $\sqrt{n-1} \leq \rho(G_1) \leq \sqrt{n+8}$ e $\sqrt{n-1} \leq \rho(G_2) \leq \sqrt{n+8}$, obtemos que $\phi_1(\rho(G_2)) < 0$. Portanto, $\rho(G_1) > \rho(G_2)$. Logo para $n \geq 123$, $G_1 = H_{n,n+k}$ é o grafo que possui o maior índice dentre todos aqueles em $\mathcal{H}(n, n+k)$. ■

Em 1986, Brualdi et al. [9], foi apresentada uma conjectura provada dois anos mais tarde por Cvetković et al. [11], e que transcrevemos a seguir.

Teorema 2.2.13 [11] *Para $n > (k+3)^2(k+1)^2$ e $k \geq 6$, a menos de isomorfismo, o grafo $H_{n,k}$ é o único grafo com índice máximo dentre todos aqueles em $\mathcal{H}(n, n+k)$.*

O Teorema 2.2.14, provado por P. Rowlinson [35], determina os grafos com índice máximo dentre todos os grafos com m arestas.

Teorema 2.2.14 [35] *Seja $\mathcal{G}(m)$ o conjunto de todos os grafos com m arestas.*

Sejam $t, d \in \mathbb{N}$ tais que

$$m = \binom{d}{2} + t, \quad 0 < t < d,$$

e G_m o grafo obtido de K_d adicionando-se um novo vértice de grau t a K_d . Seja $G \in \mathcal{G}(m)$ um grafo com índice máximo dentre todos os índices dos grafos com m arestas. Então G possui uma única componente não trivial isomorfa a G_m . Além disso, temos que $\lambda_1(G) = d - 1 + \xi$, onde $0 < \xi < 1$ e é raiz do polinômio $\xi^3 + (2d - 1)\xi^2 + (d^2 - d - t)\xi - t^2 = 0$.

A Figura 2.10 exibe um grafo com índice máximo em $\mathcal{G}(6)$ para o qual se tem $d = 5$ e $t = 1$. Assim, $\xi^3 + (2d - 1)\xi^2 + (d^2 - d - t)\xi - t^2 = \xi^3 + 9\xi^2 + 19\xi - 1 = 0$, cujas raízes são $-5,5341; 5,1374 \times 10^{-2}; -3,5173$. Logo, $\lambda_1(G) = d - 1 + \xi = 4,05137$;

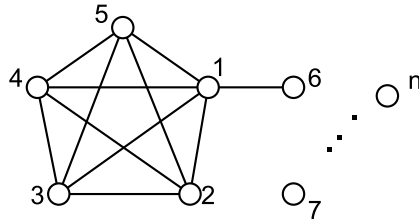


Figura 2.10: Grafo com índice máximo em $\mathcal{G}(6)$.

Para um dado n e $k = \binom{d-1}{2} - 1$, o Teorema 2.2.15, devido a Bell [7], caracteriza os grafos que possuem índice máximo em $\mathcal{H}(n, n + k)$.

Teorema 2.2.15 [7] Dado n , seja a função

$$g(d) = \frac{1}{2}d(d+5) + 7 + \frac{32}{d-4} + \frac{16}{(d-4)^2},$$

definida para $4 < d < n$ e $k = \binom{d-1}{2} - 1$. Se G é um grafo com índice máximo em $\mathcal{H}(n, n+k)$, então,

1. para $n < g(d)$, $G = G_{n,k}$;
2. para $n = g(d)$, $G = G_{n,k}$ ou $H_{n,k}$, com $\lambda_1(G_{n,k}) = \lambda_1(H_{n,k})$;
3. e para $n > g(d)$, $G = H_{n,k}$.

Como exemplo, para o caso $d = 5$, mostramos os grafos determinados por Bell. Os casos a serem considerados são:

- i) para $5 < n < 80$, o grafo $G_{n,5}$ é o grafo com índice máximo em $\mathcal{H}(n, n+5)$. Veja Figura 2.11.

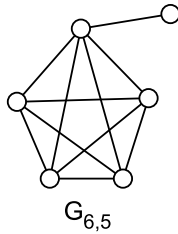


Figura 2.11: Grafo com índice máximo em $\mathcal{H}(6, 11)$.

ii) para $n = 80$ e $m = 85$, os grafos $G_{80,5}$ e $H_{80,5}$, exibidos na Figura 2.12, são os que possuem índice máximo em $\mathcal{H}(80, 85)$.

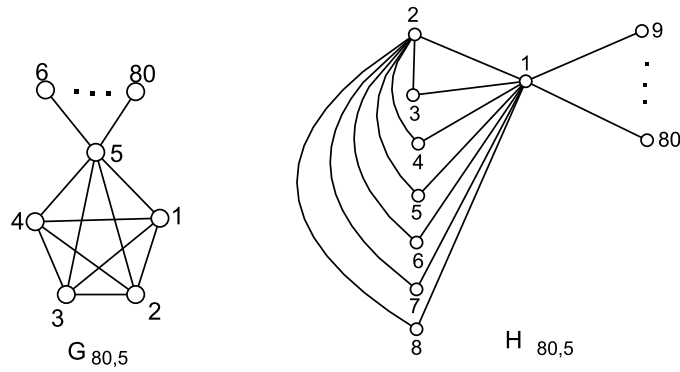


Figura 2.12: Grafos com índice máximo em $\mathcal{H}(80, 85)$ com $\lambda_1(G_{80,5}) = \lambda_1(H_{80,5}) = 9$.

iii) para $n > 80$, o grafo $H_{n,5}$ é o único grafo com índice máximo dentre todos os grafos em $\mathcal{H}(n, n + 5)$.

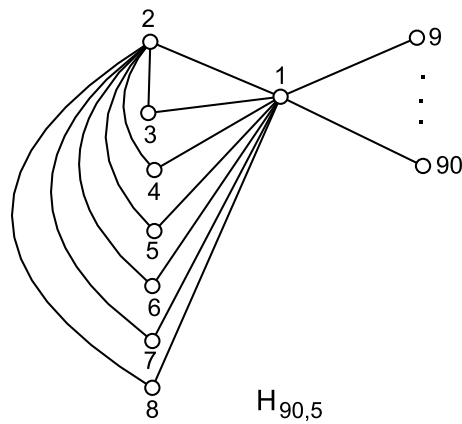


Figura 2.13: Grafo com índice máximo em $\mathcal{H}(90, 95)$.

Capítulo 3

Medidas de Irregularidade de Grafos

No capítulo anterior definimos como medida de irregularidade uma função $F : \mathcal{G}(n) \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $F(G) = 0$ se e somente se G é regular. Neste capítulo apresentamos algumas das principais medidas existentes na literatura para medir a irregularidade de um grafo. Assim, para o caso de um grafo regular, todas as medidas a ele relacionadas assumem o valor nulo. Em 1957, em [10], Collatz e Sino-gowitz definiram a função $\varepsilon(G) = \lambda_1(G) - \bar{d}(G)$, dada pelo desvio do índice de G em relação à média de seus graus, $\bar{d}(G) = \sum_{i=1}^n \frac{d_i}{n}$, como uma medida de irregularidade de grafos. Vamos referi-la aqui como *medida espectral*. Neste mesmo artigo, eles determinaram o valor máximo de $\varepsilon(G)$ para os grafos com número de vértices até 5, obtendo o grafo estrela S_n como o grafo extremal. Muitos anos depois, em 1990, Bell [8], considerou a variância dos graus dos vértices $\sigma(G) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i^2 - \frac{1}{n^2} \left(\sum_{i=1}^n d_i \right)^2$ de um grafo como medida da irregularidade do grafo, a qual vamos chamar de *medida da variância*. Neste artigo, Bell comparou as medidas $\varepsilon(G)$ e $\sigma(G)$ e determinou grafos extremais que as satisfazem.

Em 1997, Alberston [4] definiu desbalanceamento de uma aresta $\{i, j\}$ como $imb_{ij} = |d_i - d_j|$, para introduzir uma outra medida de irregularidade $irr(G)$ de um grafo G ,

$$irr(G) = \sum_{\{i,j\} \in E} imb_{ij} = \sum_{\{i,j\} \in E} |d_i - d_j|. \quad (3.1)$$

Aqui a chamaremos de *medida não-balanceada*. Neste mesmo artigo, Albertson [4]

mostrou que $irr(G) < \frac{4n^3}{27}$. Em 2000, Hansen *et al.*, em [18], apresentaram um limite para esta medida, dado em função do número de vértices e número de arestas de um grafo que pode ser visto no Teorema 3.3.3, e também caracterizaram grafos extremais para tal medida.

Mais recentemente, em 2006, Nikiforov [27] introduziu o invariante $s(G) = \sum_{i \in V(G)} |d_i - \frac{2m}{n}|$, para medir a irregularidade dos grafos, à qual aqui nos referimos por *medida do desvio dos graus*. Também, naquele artigo, Nikiforov mostrou desigualdades envolvendo as três medidas $\varepsilon(G)$, $\sigma(G)$ e $s(G)$.

Não é difícil verificar que $\varepsilon(G)$, $\sigma(G)$ e $s(G)$ podem ser dadas por $F(G)$, pois $\varepsilon(G) = \sigma(G) = s(G) = 0$ se e somente se G é um grafo regular. Entretanto $irr(G)$ é considerada na literatura como uma medida de irregularidade, e pode assumir o valor nulo para G irregular. Neste caso, $irr(G) = 0$ se e somente se G é regular ou um grafo desconexo com componentes regulares. A Figura 3.1 exibe grafos desconexos não regulares para os quais $irr(G) = 0$.

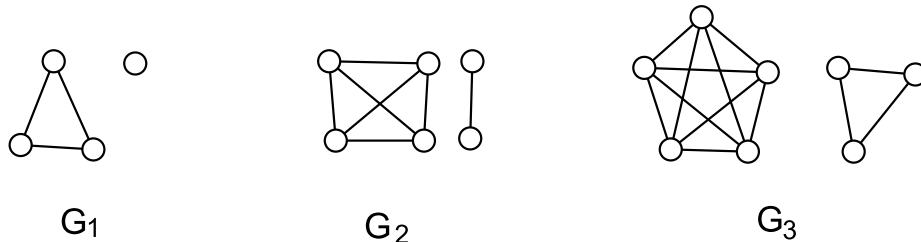


Figura 3.1: Grafos não conexos em que $irr(G) = 0$.

Nas seções seguintes trataremos dos resultados relativos a todos estes invariantes.

3.1 A Medida Espectral

Em [10], Collatz e Sinogowitz provaram que, para $n \leq 5$, o valor máximo para a medida espectral $\varepsilon(G)$ é igual a $\sqrt{n-1} - \frac{2(n-1)}{n}$, sendo este limite atingido unicamente pela estrela S_n . Nesta ocasião, eles indagaram se, para $n > 5$, a estrela também seria o grafo mais irregular. Tal questão foi respondida mais tarde por

Cevetković *et al.*, em [11], onde foi mostrada que para $\varepsilon(G)$ existe pelo menos um grafo com 6 vértices mais irregular que a estrela. Este grafo está representado na Figura 3.2. Em verdade, tal grafo é extremal para a medida de irregularidade $\varepsilon(G)$ dentre todos os grafos com 6 vértices.

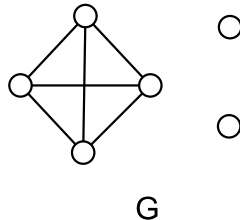


Figura 3.2: Grafo extremal em $\mathcal{G}(6)$ para $\varepsilon(G)$.

Em [8], Bell determinou os grafos mais irregulares para $\varepsilon(G)$ quando $G \in \mathcal{G}(n)$ ou $G \in \mathcal{G}(n, m)$. No que segue, apresentamos os principais resultados por ele encontrados.

Proposição 3.1.1 [8] *Sejam n e m dados tal que $m \leq \binom{n}{2}$. Então, $\max\{\varepsilon(G) : G \in \mathcal{G}(n, m)\}$ é atingido somente pelo grafo $QC(n, m)$.*

Prova: Como n e m são fixos, a média dos graus é fixa. Logo, maximizar $\varepsilon(G)$ é equivalente a maximizar $\lambda_1(G)$. De acordo com o Teorema 2.2.14, $QC(n, m)$ é o grafo que possui o maior índice. Portanto, $QC(n, m)$ possui a maior irregularidade para a medida $\varepsilon(G)$. ■

Dados n vértices e $0 \leq m \leq \binom{n}{2}$, a próxima proposição determina os grafos mais irregulares para $\varepsilon(G)$.

Proposição 3.1.2 [8] *Dentre todos os grafos em $\mathcal{G}(n)$, o valor máximo para $\varepsilon(G)$ é dado por*

i) $\frac{1}{4}n - \frac{1}{2}$, se n é par;

ii) $\frac{1}{4}n - \frac{1}{2} + \frac{1}{4n}$, se n é ímpar.

No caso ímpar, o grafo que atinge a irregularidade máxima é $QC(n, m)$, para $m = \binom{\lfloor \frac{1}{2}(n+1) \rfloor}{2}$. No caso par, o valor máximo é atingido tanto pelo grafo $QC(n, m)$ quanto pelo $QC(n, m')$, para $m' = \binom{\lfloor \frac{1}{2}(n+1) \rfloor + 1}{2}$.

As Figuras 3.3 e 3.4 exibem grafos maximais para $\varepsilon(G)$. Dentre todos os grafos com n vértices e m arestas, $0 \leq m \leq \binom{n}{2}$, temos os seguintes grafos maximais :

- i) Quando $n = 6$, os grafos maximais são $QC(6, 3)$ e $QC(6, 6)$ para os quais $\varepsilon(QC(6, 3)) = \varepsilon(QC(6, 6)) = 1$;
- ii) Quando $n = 7$, o grafo maximal é $QC(7, 6)$ tendo $\varepsilon(QC(7, 6)) = 1, 285$;
- iii) Quando $n = 11$, o grafo maximal é $QC(11, 15)$ para este caso $\varepsilon(QC(11, 15)) = 2, 181$.

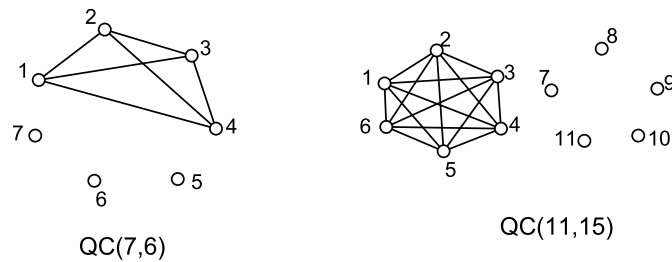


Figura 3.3: Grafos extremais para $\varepsilon(G)$ em $\mathcal{G}(7)$ e $\mathcal{G}(11)$.

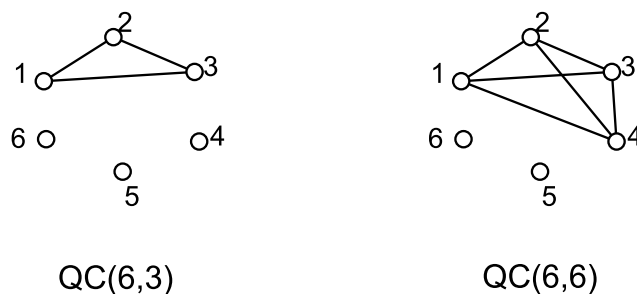


Figura 3.4: Grafos extremais para $\varepsilon(G)$ em $\mathcal{G}(6)$.

Podemos perceber que, ao fixarmos o número de arestas, determinar o grafo mais irregular, segundo $\varepsilon(G)$, significa determinar o grafo que possui índice máximo. Assim, quando o valor da diferença entre n e m é estabelecido, ou seja, o valor de k é dado, os grafos mais irregulares, para a medida espectral, são os grafos das classes $H_{n,k}$ e $G_{n,k}$, definidas em 2.2.10. O resultado é dado a seguir.

Proposição 3.1.3 [8] *Sejam $5 \leq d \leq n$, $k = \binom{d-1}{2} - 1$, e*

$$g(d) = \frac{1}{2}d(d+5) + 7 + \frac{32}{d-4} + \frac{16}{(d-4)^2}.$$

O $\max\{\varepsilon(G) : G \in \mathcal{H}(n, n+k)\}$ é atingido unicamente pelos seguintes grafos:

1. $G = G_{n,k}$ se $n < g(d)$;
2. $G = G_{n,k}$ ou $H_{n,k}$, com $\varepsilon(G_{n,k}) = \varepsilon(H_{n,k})$, se $n = g(d) \Leftrightarrow d \in \{5, 6, 8\}$;
3. $G = H_{n,k}$, se $n > g(d)$.

Para valores de n e k , e para a medida espectral $\varepsilon(G)$, a proposição a seguir nos mostra que, a menos de isomorfismo, $H_{n,k}$ é o único extremal.

Proposição 3.1.4 [8] *O $\max\{\varepsilon(G) : G \in \mathcal{H}(n, n+k)\}$ é atingido unicamente por $H_{n,k}$ nos seguintes casos:*

1. Se $k \in \{0, 1\}$, o valor máximo é atingido para qualquer n ;
2. Se $k = 3$, $n \geq 123$;
3. Se $k = 4$, $n \geq 216$;
4. Se $k = 5$, $n \geq 51$;
5. Finalmente, se $k \geq 6$, tem-se que $n > (k+3)^2(k+1)^2$.

Para os valores de n menores do que estabelecido no Teorema 3.1.4, os grafos que possuem maior irregularidade não pertencem à família $H_{n,k}$. Por exemplo, para

$k = 4$ e $n = 16$, o grafo G_1 , dado na Figura 3.5, é tal que $\varepsilon(G_1) = 3,2247$, enquanto que $\varepsilon(H_{16,4}) = 3,2205$. Logo, G_1 é mais irregular que $H_{16,4}$. Para $k = 5$ e $n = 30$, $\varepsilon(G_2) = 3,439 > \varepsilon(H_{30,5}) = 3,419$. Logo G_2 é mais irregular que $H_{30,5}$.

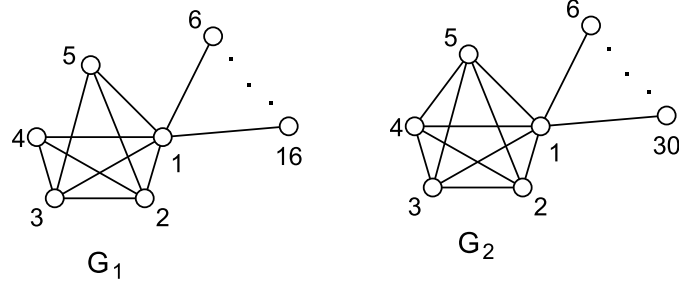


Figura 3.5: Grafos mais irregulares que não pertencem à família $H_{n,k}$

Proposição 3.1.5 [8] *Seja $\mathcal{H}(n)$ o conjunto de todos os grafos conexos com n vértices. Para $n \geq 3$, temos*

$$\frac{n}{4} - \frac{3}{2} + \frac{2}{n} < \max\{\varepsilon(G) : G \in \mathcal{H}(n)\} < \frac{n}{4} - 1 + \frac{1}{n}.$$

Na classe dos grafos conexos com n vértices $\mathcal{H}(n)$ o grafo abacaxi, dado na Definição 3.1.6, é um forte candidato ao mais irregular para $\varepsilon(G)$, conforme Conjectura 3.1.7 estabelecida por Aouchiche et al. em 2005.

Definição 3.1.6 [5] *Sejam n e q dados tais que $0 < q \leq n$. O grafo abacaxi, denotado por $PA(n, q)$, é aquele com n vértices consistindo de uma clique de tamanho q e um conjunto independente com $n - q$ vértices no qual cada vértice é ligado a um mesmo vértice da clique.*

Na Figura 3.6, exibimos os grafos abacaxi $PA(6, 4)$, $PA(9, 5)$ e $PA(9, 6)$ com 6 e 9 vértices, respectivamente. Cada qual, com sua clique de respectivos tamanhos 4, 5 e 6.

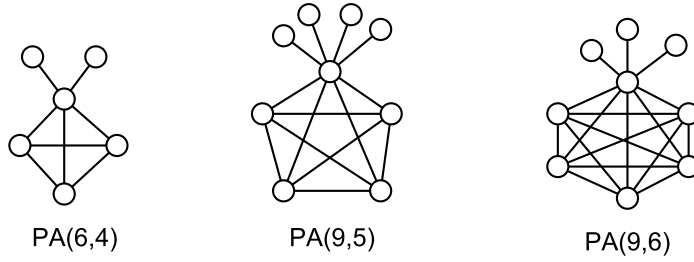


Figura 3.6: Grafos $PA(6, 4)$, $PA(9, 5)$ e $PA(9, 6)$.

Conjectura 3.1.7 [5] *Para a medida espectral $\varepsilon(G)$ e para todo $n \geq 10$, o grafo conexo com mais irregularidade em $\mathcal{H}(n)$ é o grafo abacaxi $PA(n, q)$, cujo tamanho da clique é $q = \lceil \frac{n}{2} \rceil + 1$.*

Para cada n e q , $3 \leq q \leq n$, $PA(n, q)$, é isomorfo a $G_{n,k}$ para $k = q(q-1)/2 - q$. A Figura 3.7 mostra todos os possíveis grafos abacaxi com 8 vértices isomorfos aos grafos $G_{8,k} = K_1 \vee QC(7, k+1)$, para $k = 0, 2, 5, 9$ e 14 .

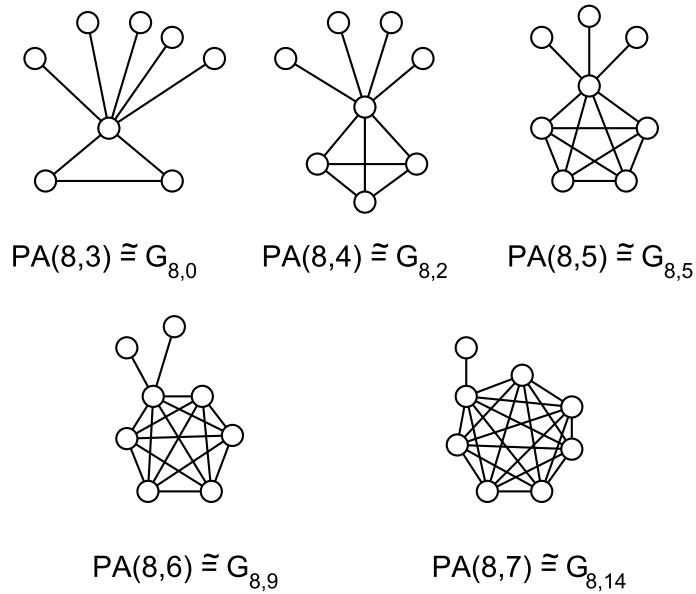


Figura 3.7: Grafos abacaxi com 8 vértices isomorfos a $G_{8,k}$.

3.2 Medida da Variância

Em [8], Bell considerou a variância dos graus $\sigma(G) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (d_i - \bar{d}(G))^2$ como medida de irregularidade e determinou os grafos mais irregulares para esta medida. Na sequência, ele comparou $\sigma(G)$ com a medida espectral de Collatz e Sinogowitz [10], mostrando que não há preferência entre uma e outra. Dentre todos os grafos com n vértices e m arestas, o grafo quase-estrela, definido a seguir, é um dos grafos extremais para a medida da variância como veremos na Proposição 3.2.4.

Definição 3.2.1 [3] *Um grafo com n vértices e m arestas é quase-estrela, denotado por $QS(n, m)$, se for construído segundo as regras abaixo:*

- i) Rotula-se os vértices de $1, \dots, n$;*
- ii) Determina-se inteiros d e t tais que $m = \binom{n}{2} - \binom{d}{2} - t$, onde $d \geq 2$ e $0 \leq t < d < n$;*
- iii) Os primeiros $n - d - 1$ vértices são adjacentes a todos os outros vértices do grafo.*
- iv) O vértice $n - d$ é adjacente aos vértices 1 até $n - t$.*

Para n vértices e m arestas, a menos de isomorfismo, um grafo quase-estrela possui uma única representação.

Na Figura 3.8, exibimos grafos quase-estrela com 5 e 6 vértices. O grafo $QS(5, 5)$ tem $d = 3$ e $t = 2$. Já $QS(6, 7)$ tem $d = 4$ e $t = 2$ e $QS(6, 13)$ que possui 13 arestas tem $d = 2$ e $t = 1$.

É fácil ver que um grafo quase-estrela é complementar de um grafo quase-completo para valores complementares de m . Aqui damos uma alternativa de prova para este fato.

Proposição 3.2.2 [3] *Um grafo quase-estrela $QS(n, m)$ é o complementar do grafo quase-completo $QC(n, \binom{n}{2} - m)$.*

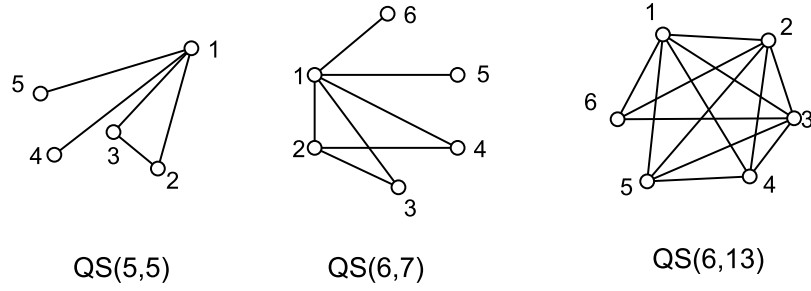


Figura 3.8: Grafos $QS(5,5)$, $QS(6,7)$ e $QS(6,13)$.

Prova: Considere o complementar do grafo quase-completo $QC(n, \binom{n}{2} - m)$, ou seja, $\overline{QC(n, \binom{n}{2} - m)}$. Este grafo terá o mesmo número de vértices que $QS(n, m)$ e $\{i, j\} \in \overline{QC(n, \binom{n}{2} - m)}$ se e somente se $\{i, j\} \notin QC(n, \binom{n}{2} - m)$. Seja $\{i, j\} \in E(QC(n, \binom{n}{2} - m))$. Por definição temos que:

1. Os vértices i, j pertencem ao conjunto de vértices rotulados de 1 até d que formam uma clique, ou
2. O vértice i é o vértice rotulado $d+1$ adjacente aos vértices rotulados de $1, \dots, t$.

Portanto, o grafo $QC(n, \binom{n}{2} - m)$ possui $n - (d + 1)$ vértices isolados. No caso 1, se $\{i, j\} \in E(QC(n, \binom{n}{2} - m))$, temos que em $\overline{QC(n, \binom{n}{2} - m)}$ os vértices rotulados de 1 até t são adjacentes aos vértices rotulados $d + 2$ até n , enquanto os vértices rotulados $t + 1$ até d são adjacentes aos vértices rotulados de $d + 1$ até n . No caso 2, se $\{i, j\} \in E(QC(n, \binom{n}{2} - m))$, obtemos que em $\overline{QC(n, \binom{n}{2} - m)}$ o vértice $d + 1$ é adjacente aos vértices $t+1$ até n . Em qualquer que seja o caso, temos que cada vértice rotulado $d + 2$ até n em $\overline{QC(n, \binom{n}{2} - m)}$ é adjacente a todos os outros vértices do grafo. Considerando uma nova rotulação para $\overline{QC(n, \binom{n}{2} - m)}$, de maneira inversa aquela dada para $QC(n, \binom{n}{2} - m)$, temos que os primeiros $n - (d+2) + 1 = n - (d+1)$ vértices são ligados a todos os outros vértices do grafo; o vértice $n - (d+1) + 1 = n - d$ é ligado aos vértices de 1 até $n - t$. Desta forma, o complementar de $QC(n, \binom{n}{2} - m)$ é isomorfo ao grafo $QS(n, m)$. ■

Não é difícil verificar que $QS(n, m)$ é isomorfo ao grafo $H_{n,k}$ quando $m = n + k$ e $k = n - 3$. Por exemplo, o grafo da Figura 3.9 é $QS(6, 9)$ que é isomorfo ao $H_{6,3}$.

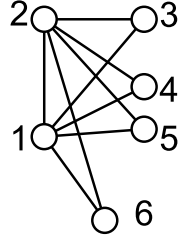


Figura 3.9: $QS(6, 9) \cong H_{6,3}$.

Um grafo é denominado *threshold* se e somente se não possui nenhum subgrafo induzido isomorfo a $2K_2 = K_2 \cup K_2$, P_4 ou C_4 . O complementar de um grafo *threshold* é também um grafo *threshold* [25]. Em 1978, Asklwed e Katona [3] mostraram que os grafos quase-completos e quase-estrelas são os que atingem o valor máximo da soma dos quadrados de seus graus dentre todos os grafos com n vértices e m arestas e, em 1999, Peled et al. [32] provaram que grafos extremais são thresholds. Logo, podemos afirmar que os grafos quase-completos e quase-estrelas são thresholds. No Lema 3.2.3, damos uma alternativa de prova para mostrar esta afirmação.

Lema 3.2.3 *Os grafos $QC(n, m)$ e $QS(n, m_1)$ são thresholds.*

Prova: Pela definição do grafo quase-completo $QC(n, m)$, podemos particionar seu conjunto de vértices em dois subconjuntos, um deles com os vértices da clique $C = \{1, \dots, d\}$ e o outro com um conjunto independente $S = \{d + 1, \dots, n\}$. Logo $QC(n, m)$ é um grafo split. Como o complementar de um grafo split é split, conclui-se da Proposição 3.2.2, que $QS(n, m_1)$ também é um grafo split. Assim, da caracterização dada pelo Teorema 2.1.1, $QC(n, m)$ e $QS(n, m_1)$ não possuem subgrafos induzidos isomorfos a $2K_2$ e C_4 ou C_5 . Portanto, para concluirmos que os grafos são thresholds, só falta mostrar que eles não possuem subgrafo induzido isomorfo a P_4 . Como $d + 1$ é o único vértice em $QC(n, m)$ que não pertence a clique e que possui grau diferente de zero, conclui-se que o grafo $QC(n, m)$ não contém um subgrafo

induzido isomorfo a P_4 . Logo $QC(n, m)$ é threshold. Como o complementar de P_4 é também P_4 , temos que $QS(n, m_1)$ também não possui subgrafo induzido isomorfo a P_4 . Portanto, $QC(n, m)$ e $QS(n, m_1)$ são thresholds. ■

A seguir, as Proposições 3.2.4 e 3.2.5 apresentam grafos extremais nas famílias $\mathcal{G}(n, m)$ e $\mathcal{G}(n)$ para a medida da variância.

Proposição 3.2.4 [8] *Sejam n e m dados tal que $m \leq \binom{n}{2}$. Então, $\max\{\sigma(G) : G \in \mathcal{G}(n, m)\}$ é atingido pelos seguintes grafos: $QC(n, m)$, se $m > \frac{1}{2}\binom{n}{2} + \frac{n}{2}$ e $QS(n, m)$, se $m < \frac{1}{2}\binom{n}{2} - \frac{n}{2}$.*

Observe que para $\frac{1}{2}\binom{n}{2} - \frac{n}{2} \leq m \leq \frac{1}{2}\binom{n}{2} + \frac{n}{2}$ não é possível afirmar qual é o grafo que possui a maior variância dentre aqueles apresentados na Proposição 3.2.4. Por exemplo, seja $n = 6$. De acordo com a Proposição 3.2.4, somente os grafos $QC(6, m)$, $m \geq 11$, atingem o máximo da irregularidade relativa à medida $\sigma(G)$, enquanto somente os grafos $QS(6, m)$, $m \leq 5$, são os que atingem o valor máximo esta medida. Que grafos atingiriam o valor máximo quando o número de arestas m é tal que $6 \leq m \leq 10$? Nesse caso, além dos grafos $QS(6, m)$ e $QC(6, m)$ ainda existem outros grafos que atingem o valor máximo para $\sigma(G)$. A Figura 3.10 exhibe os grafos com 6 vértices e 8 arestas que são maximais segundo $\sigma(G)$. Observe que H não é um grafo quase-estrela e nem é quase-completo.

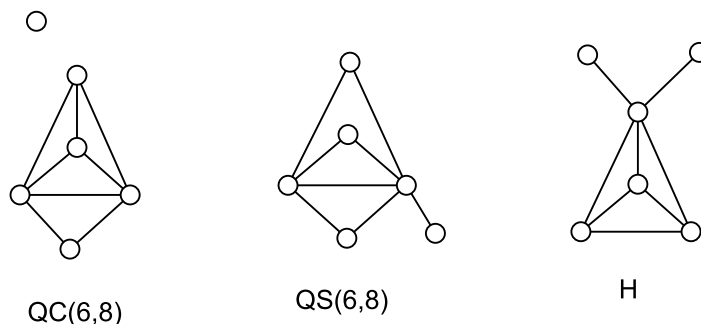


Figura 3.10: Grafos extremais para a medida da variância em $\mathcal{G}(6, 8)$.

Proposição 3.2.5 [8] *Sejam n, m e r dados tal que $r = \lfloor \frac{1}{4}(3n + 2) \rfloor$. Dentre todos os grafos $G \in \mathcal{G}(n)$, o valor máximo da variância de G é dado por $\sigma(G) = \frac{r}{n^2}(r - 1)^2(n - r)$. Este máximo é atingido somente se $G = QC(n, m)$ e $m = \binom{r}{2}$.*

Para $6 \leq n \leq 8$, a Figura 3.11 exibe grafos extremais para a medida da variância.

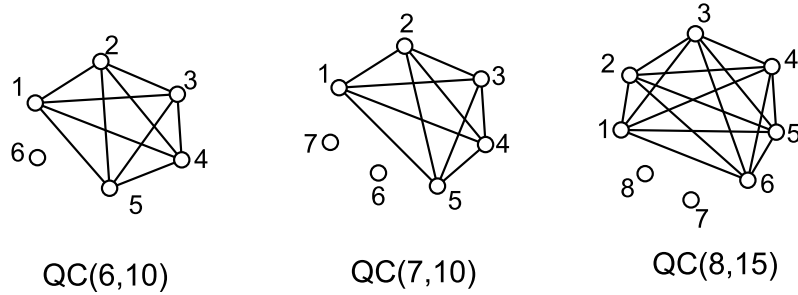


Figura 3.11: Respective grafos extremais para $\sigma(G)$ em $\mathcal{G}(6)$, $\mathcal{G}(7)$ e $\mathcal{G}(8)$.

Proposição 3.2.6 [8] *Para n e k , $0 \leq k \leq \binom{n}{2} - n$ dados, seja $m = n + k$. Tem-se que o $\max\{\sigma(G) : G \in \mathcal{H}(n, m)\}$ é atingido pelos seguintes grafos:*

1. $G_{n,k}$, se $m > \frac{1}{2}\binom{n}{2} + n - 1$;
2. $QS(n, m)$, se $m < \frac{1}{2}\binom{n}{2}$.

Observe que para $\frac{1}{2}\binom{n}{2} \leq m \leq \frac{1}{2}\binom{n}{2} + n - 1$ grafos extremais não foram caracterizados. Como exemplo, vamos analisar o que acontece se $n = 6$. Neste caso, temos $0 \leq k \leq 8$ e $8 \leq m \leq 12$. Neste intervalo, há grafos extremais além do grafo quase-estrela e do grafo $G_{n,k}$. De fato, para $k = 2$, além do grafo $QS(6, 8)$, o grafo H , da Figura 3.10, é extremal para $\sigma(G)$, para $k = 4$, o máximo é atingido tanto por $QS(6, 10)$ quanto por $G_{6,4}$. Estes dois últimos grafos estão na Figura 3.12.

Corolário 3.2.7 [8] *Sejam n, m e r dados tal que $r = \lfloor \frac{1}{4}(3n + 2) \rfloor$. Dentre todos os grafos $G \in \mathcal{H}(n)$, o valor máximo da variância de G é dado por $\sigma(G) = \frac{r}{n^2}(r - 1)^2(n - r)$. Este máximo é atingido somente se $G = QS(n, m)$, para $m = \binom{n}{2} - \binom{r}{2}$.*

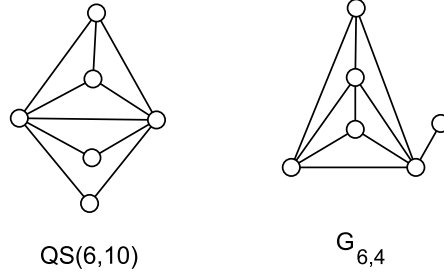


Figura 3.12: Grafos extremais em $\mathcal{H}(6, 10)$ para $\sigma(G)$.

Bell, em [8], mostrou que há pares de grafos cujas medidas $\varepsilon(G)$ e $\sigma(G)$ não são comparáveis. Consideremos os grafos $G_{n,k}$ e $H_{n,k}$ onde $n \geq d \geq 5$, $k = \binom{d-1}{2} - 1$ e $m = n + k$. Conseqüentemente, o grafo $H_{n,k}$ possui 1 vértice de grau $n - 1$; 1 vértice de grau $k + 2$; $k + 1$ vértices de grau 2 e $n - (k + 3)$ vértices de grau 1. Já o grafo $G_{n,k}$ possui 1 vértice de grau $n - 1$; $d - 1$ vértices de grau $d - 1$ e $n - d$ vértices de grau 1. Determinando-se a variância desses grafos e fazendo a diferença entre elas obtemos:

$$\sigma(H_{n,k}) - \sigma(G_{n,k}) = \frac{1}{4n}(d-1)(d-2)(d-3)(d-4).$$

Logo, $\sigma(H_{n,k}) - \sigma(G_{n,k}) > 0$, ou seja, $\sigma(H_{n,k}) > \sigma(G_{n,k})$. A Proposição 3.1.3 nos fornece $\varepsilon(H_{n,k}) < \varepsilon(G_{n,k})$ para $n < g(d)$. Portanto, para $n < g(d)$, sendo $k = \binom{d-1}{2} - 1$, temos que $\sigma(H_{n,k}) > \sigma(G_{n,k})$, enquanto $\varepsilon(H_{n,k}) < \varepsilon(G_{n,k})$. Isto nos leva a afirmar que nenhuma dessas medidas é melhor que a outra, ou seja, não são comparáveis para estes pares de grafos.

3.3 Medida não-balanceada

Em [18], Hansen *et al.* exibiram um limite superior para a medida não-balanceada $irr(G) = \sum_{(i,j) \in E} |d_i - d_j|$, definida por Alberston [4]. Além disso, estes autores caracterizaram os grafos extremais para esta medida, com o auxílio do programa *AutoGraphiX (AGX)* [19].

Definição 3.3.1 [5] *Sejam k e n inteiros tal que $0 \leq k \leq n$. Um grafo split completo, denotado por $SC(n, k)$, é um grafo split com n vértices e uma clique de tamanho k tal que cada um dos seus $n - k$ vértices do conjunto independente é adjacente a todos os k vértices da clique.*

Na Figura 3.13, exibimos grafos split completo com 6, 7 e 10 vértices, de modo que o primeiro tem a clique de tamanho 2, o segundo de tamanho 3 e o terceiro de tamanho 4.

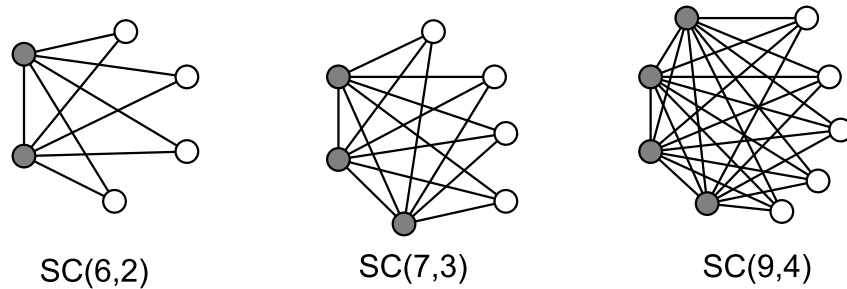


Figura 3.13: Grafos $SC(6, 2)$, $SC(7, 3)$ e $SC(9, 4)$.

Definição 3.3.2 [5] *Sejam n, k, t inteiros tais que $0 \leq k \leq n$ e $0 \leq t \leq n - k - 1$. Um grafo abano split completo $SCF(n, k, t)$ (do Inglês, *split complete fanned*) é aquele obtido de um grafo split completo $SC(n, k)$ unindo-se um vértice do conjunto independente a t outros do mesmo conjunto independente.*

A Figura 3.14, exhibe grafos *abano split completo* com 6, 7 e 10 vértices. Observe que o grafo $SCF(6, 2, 1)$ possui uma clique de tamanho 2 e um vértice do conjunto independente ligado a um outro vértice também do conjunto independente; o grafo $SCF(7, 3, 2)$ tem uma clique de tamanho 3 e um vértice do conjunto independente adjacente a dois outros vértices do conjunto independente. Já o grafo $SCF(10, 4, 3)$ contém uma clique de tamanho 4 e um vértice do conjunto independente adjacente a três outros vértices do conjunto independente.

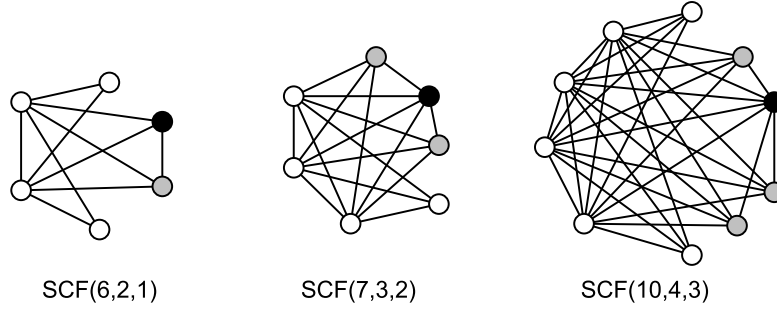


Figura 3.14: Grafos $SCF(6, 2, 1)$, $SCF(7, 3, 2)$ e $SCF(10, 4, 3)$.

Teorema 3.3.3 [18] *Seja G um grafo qualquer com n vértices e m arestas. Então,*

$$irr(G) \leq d(n-d)(n-d-1) + t(t-2d-1),$$

onde $d = \lfloor n - \frac{1}{2} - \sqrt{(n - \frac{1}{2})^2 - 2m} \rfloor$ e $t = m - (n-d)d - \frac{d(d-1)}{2}$. A igualdade vale se e somente se G é um grafo abano split completo, $SCF(n, d, t)$.

Também, em [18], Hansen *et al.* estabeleceram a seguinte conjectura:

Conjectura 3.3.4 *Se G é um grafo conexo com n vértices, raio r , com irregularidade máxima $irr(G)$, número clique $\omega(G)$, número independente $\alpha(G)$, número cromático $\chi(G)$ e grau máximo Δ , então $\omega(G) = \chi(G)$, $n = \Delta + 1$, $r = 1$ e $\omega(G) + \alpha(G) = \Delta + 2$.*

Em [21], Henning e Rautenbach determinaram que se G é um grafo bipartido com conjuntos independentes de mesma cardinalidade, a medida $irr(G)$ tem limite superior dado por $irr(G) \leq n^3/27$ e se G é bipartido com conjuntos independentes n_1 e n_2 tal que $n_1 \geq 2n_2$, $irr(G) \leq irr(K_{n_1, n_2})$, onde K_{n_1, n_2} é um grafo bipartido completo.

Para os grafos abacaxi, $H_{n,k}$ e os grafos antiregulares que serão definidos a seguir mostramos que a Conjectura 3.3.4 é válida, sendo uma das nossas contribuições da tese.

Proposição 3.3.5 *Seja $PA(n, k)$ um grafo abacaxi com irregularidade máxima*

$irr(PA(n, k))$. Então $\omega(G) = \chi(G)$, $n = \Delta + 1$, $r = 1$ e $\omega(G) + \alpha(G) = \Delta + 2$.

Prova: O grafo abacaxi possui 1 vértice de grau $n - 1$, $n - k$ vértices de grau 1 e $k - 1$ vértices de grau $k - 1$. Assim,

$$\begin{aligned} irr(PA(n, k)) &= (n - k)(n - 2) + (k - 1)(n - k) \\ &= -k^2 + 3k - 3n + n^2. \end{aligned}$$

Para obtermos o valor máximo de $irr(PA(n, k))$ precisamos maximizar a função $f(k) = -k^2 + 3k - 3n + n^2$. Assim, obtemos que $k = \frac{3}{2}$ é o valor que atinge o valor máximo da função $f(k)$. Como k deve ser inteiro, temos que calcular e comparar $f(\lfloor k \rfloor)$ e $f(\lceil k \rceil)$ para $k = \frac{3}{2}$. Como $f(\lfloor \frac{3}{2} \rfloor) = f(\lceil \frac{3}{2} \rceil) = n^2 - 3n + 2$, o grafo $PA(n, 1)$ é isomorfo ao grafo $PA(n, 2)$, que é o grafo estrela S_n , é o grafo mais irregular para a medida $irr(PA(n, k))$ para todo $1 \leq k \leq n$. Neste caso $\omega(G) = \chi(G) = 2$, $\Delta(G) = n - 1$ e $r = 1$ e $\omega(G) + \alpha(G) = n + 1$ e o resultado segue ■

Um fato interessante é que para a família dos grafos abacaxi $PA(n, k)$, com $1 \leq k \leq n$, sempre temos que $\omega(G) = \chi(G) = k$, $\alpha(G) = n - k + 1$, $\omega(G) + \alpha(G) = \Delta + 2$ e $r = 1$.

A proposição a seguir mostra a validade da conjectura na classe dos grafos $H_{n,k}$.

Proposição 3.3.6 *Considere $n, k \in \mathbb{Z}$, $0 \leq k \leq n - 3$. Seja $G = H_{n,k}$ um grafo com irregularidade máxima $irr(H_{n,k})$. Então $\omega(G) = \chi(G)$, $n = \Delta + 1$, $r = 1$ e $\omega(G) + \alpha(G) = \Delta + 2$.*

Prova: o grafo $H_{n,k}$ possui 1 vértice de grau $n - 1$, 1 vértice de grau $k + 2$, $k + 1$ vértices de grau 2 e $n - k - 3$ vértices de grau 1. Logo,

$$\begin{aligned} irr(H_{n,k}) &= (n - k - 3)(n - 2) + (k + 1)(n - 3) + (k + 1)k + 1(n - k - 3) \\ &= n^2 - 3n - k + k^2. \end{aligned}$$

Para obtermos o valor máximo de $irr(H_{n,k})$, precisamos maximizar a função $f(k) = n^2 - 3n - k + k^2$. Assim, obtemos que $k = \frac{1}{2}$ é o valor que atinge o valor máximo da função $f(k)$. Como k deve ser inteiro, temos que calcular e comparar $f(\lfloor k \rfloor)$ e $f(\lceil k \rceil)$ para $k = \frac{1}{2}$. Obtemos que para $k = \frac{1}{2}$, $f(\lfloor k \rfloor) = f(\lceil k \rceil) = n^2 - 3n$, e portanto, os grafos $H_{n,0}$ e $H_{n,1}$ são os grafos mais irregulares para a medida $irr(G)$

dentre todos os grafos $H_{n,k}$, $0 \leq k \leq n - 3$. Não é difícil verificar que $\omega(G) = \chi(G) = 3$, $\alpha(G) = n - 2$, $r = 1$ e $\omega(G) + \alpha(G) = \Delta + 2$. ■

Em 2003, Merris [26] definiu grafo *antiregular* como segue.

Definição 3.3.7 [26] *Um grafo é chamado antiregular se possui $n - 1$ graus diferentes.*

Merris considerou os grafos completos K_1 e K_2 como sendo grafos antiregulares. Além disso, mostrou que a menos de isomorfismo, para $n \geq 2$ existe um único grafo antiregular conexo, denotado por A_n , cujo seus vértices com graus repetidos é igual $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor$. Neste mesmo artigo é mostrado que para $n \geq 3$, temos que $A_{n+1} = (A_{n-1} + K_1) \vee K_1$. Devido a Mahdev e Peled [24], o autor mostra que grafos antiregulares são grafos threshold e por Hammer e Simeone [17] A_n e o seu complementar são grafos cordais e, portanto são grafos perfeitos. Portanto, $\chi(A_n) = \omega(A_n)$. A Figura 3.15 exhibe para $2 \leq n \leq 12$ todos os grafos conexos antiregulares, para tais grafos a Conjectura 3.3.4 também é verdadeira, dado que $r = 1$, $n = \Delta + 1$ e $\omega(A_n) + \alpha(A_n) = \Delta + 2$.

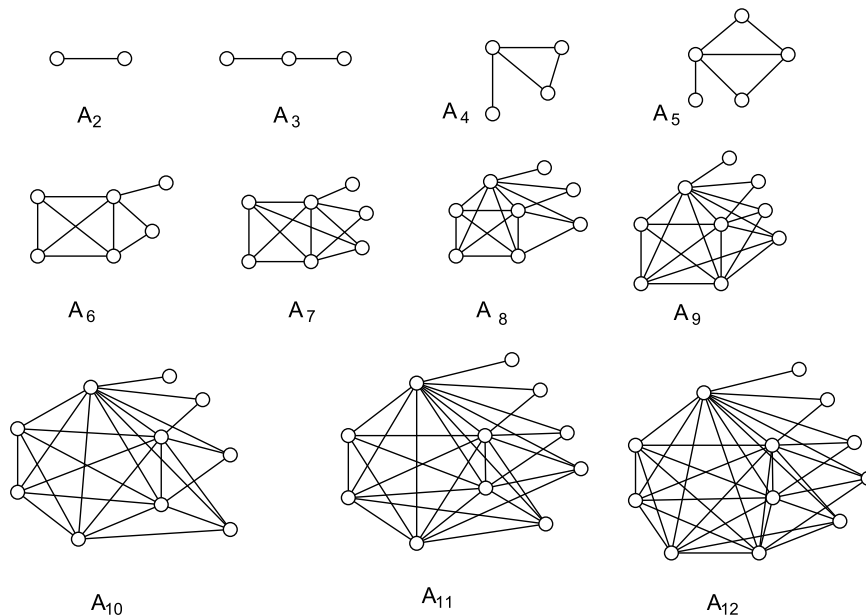


Figura 3.15: Grafos conexos antiregulares com $2 \leq n \leq 12$ vértices.

3.4 Medida do Desvio dos Graus

O desvio dos graus G , em relação ao grau médio $s(G) = \sum_{i=1}^n |d_i - \frac{2m}{n}|$, foi definido por V. Nikiforov, em [27], como uma medida de irregularidade de grafos. Denominamos este invariante como *medida do desvio dos graus*. De fato, $s(G) = 0$ se e somente se G é regular. Bell, em [8], comparou as medidas de irregularidade $\varepsilon(G)$ e $\sigma(G)$ mas não exibiu nenhuma desigualdade entre elas. Em [27], Nikiforov mostrou duas desigualdades envolvendo $s(G)$, $\varepsilon(G)$ e $\sigma(G)$, que são introduzidas nos próximos dois teoremas. Apresentamos uma alternativa de prova para o Teorema 3.4.1.

Teorema 3.4.1 [27] *Para todo grafo G com n vértices $\frac{s^2(G)}{n^2} \leq \sigma(G) \leq s(G)$.*

Prova: Utilizando a desigualdade das médias aritmética e média quadrática, temos:

$$\frac{|d_1 - \bar{d}| + \dots + |d_n - \bar{d}|}{n} = \frac{s(G)}{n} \leq \sqrt{\frac{(d_1 - \bar{d})^2 + \dots + (d_n - \bar{d})^2}{n}} = \sqrt{\sigma(G)}.$$

Portanto, $\frac{s^2(G)}{n^2} \leq \sigma(G)$. Para o limite superior considere $a_i = |d_i - \frac{2m}{n}|$, queremos mostrar que $\sum_{i=1}^n \frac{a_i^2}{n} \leq \sum_{i=1}^n a_i$. Para provar essa desigualdade devemos provar que, $\forall i, 1 \leq i \leq n$, temos $\frac{a_i^2}{n} \leq a_i$. Isto equivale a ter $a_i(n - a_i) \geq 0$. Logo, basta mostrar que $n - a_i > 0$. Como $a_i = |d_i - \frac{2m}{n}| \leq \max\{\Delta - \frac{2m}{n}, \frac{2m}{n} - \delta\} = p$, temos então o que desejamos encontrar, ou seja, $n - a_i \geq n - p = \begin{cases} n - \Delta + \frac{2m}{n} > 0; \\ n - \frac{2m}{n} + \delta > 0. \end{cases}$ ■

Teorema 3.4.2 [27] *Para todo grafo G , $\frac{\sigma(G)}{2\sqrt{2m}} \leq \varepsilon(G) \leq \sqrt{s(G)}$.*

Em [27], Nikiforov mostrou que $s_2(G) = \sum_{i \in A} |d_i - \frac{m}{a}| + \sum_{i \in B} |d_i - \frac{m}{b}|$ pode servir como uma medida de irregularidade para grafos bipartidos, quando $V = A \cup B$, $|A| = a$ e $|B| = b$. Claramente, pode-se observar que $s_2(G) = 0$ se e somente se G é bipartido e semiregular.

O Teorema 3.4.3 apresentado a seguir, mostra um limite inferior e um limite superior para a medida $\varepsilon(G)$, considerando G um grafo bipartido.

Teorema 3.4.3 [27] *Se G é um grafo bipartido tal que $V = A \cup B$, com A e B disjuntos, então*

$$\frac{s_2^2(G)}{2n^2\sqrt{|A||B|}} \leq \lambda_1 - \frac{m}{\sqrt{|A||B|}} \leq \sqrt{\frac{s_2(G)}{2}}.$$

A Tabela 3.1 apresenta um resumo sobre os resultados encontrados na literatura sobre grafos extremais para as medidas $\varepsilon(G)$, $\sigma(G)$ e $irr(G)$. A 2ª coluna da tabela contém os grafos extremais para três das quatro medidas estudadas que estão listadas na 1ª coluna. A 4ª coluna lista as classes às quais os grafos extremais pertencem, a 3ª coluna exibe as restrições impostas para garantir a extremalidade dos grafos e a última coluna dá as referências de onde estão os resultados. É interessante registrar que não são conhecidos (ainda) grafos extremais para medida do desvio dos graus dada por Nikiforov em [27].

Medidas de Irregularidade	Grafos extremais	Restrições: $n, m, k, q, t, d \in \mathbb{Z}$	Classes de grafos	Referências
$\varepsilon(G) = \lambda_1 - \frac{2m}{n}$	$QC(n, m)$	$m = \left(\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor\right)$, se n é ímpar	$\mathcal{G}(n)$	Proposição 3.1.2
		$m = \left(\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor\right)$ ou $\left(\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor + 1\right)$ se n é par		
	$PA(n, q)$	$q = \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil + 1$	$\mathcal{H}(n)$	Conjectura 3.1.7
	$QC(n, m)$		$\mathcal{G}(n, m)$	Proposição 3.1.1
	$H_{n,k}$	$k \geq 3$, n suficientemente grande	$\mathcal{H}(n, n+k)$	Proposição 3.1.4
$\sigma(G) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (d_i - \bar{d}(G))^2$	$QC(n, m)$	$m = \left(\lfloor \frac{1}{4}(3n+2) \rfloor\right)$	$\mathcal{G}(n)$	Proposição 3.2.5
	$QS(n, m)$	$m = \binom{n}{2} - \left(\lfloor \frac{1}{4}(3n+2) \rfloor\right)$	$\mathcal{H}(n)$	Corolário 3.2.7
	$QS(n, m)$	$m < \frac{1}{2} \binom{n}{2} - \frac{n}{2}$	$\mathcal{G}(n, m)$	proposição 3.2.4
	$QC(n, m)$	$m > \frac{1}{2} \binom{n}{2} + \frac{n}{2}$		
	$QS(n, m)$	$m < \frac{1}{2} \binom{n}{2}$	$\mathcal{H}(n, n+k)$	Proposição 3.2.6
	$G_{n,k}$	$m > \frac{1}{2} \binom{n}{2} + n - 1$, $0 \leq k \leq \binom{n}{2} - n$		
$irr(G) = \sum_{(i,j) \in E(G)} d_i - d_j $	$SCF(n, d, t)$	$t = m - (n-d)d - \frac{d(d-1)}{2}$ $d = \left\lfloor n - \frac{1}{2} - \sqrt{\left(n - \frac{1}{2}\right)^2 - 2m} \right\rfloor$	$\mathcal{G}(n, m)$	Teorema 3.3.3

Tabela 3.1: Grafos Extremais para medidas de irregularidade $\varepsilon(G)$, $\sigma(G)$ e $irr(G)$.

Capítulo 4

Irregularidade de Grafos em Classes Especiais

No capítulo anterior vimos que foram caracterizados grafos extremais para as medidas de irregularidade $\varepsilon(G)$, $\sigma(G)$ e $irr(G)$ nas classes $\mathcal{G}(n)$, $\mathcal{G}(n, m)$, $\mathcal{H}(n)$ e $\mathcal{H}(n, m)$. Dentre as medidas investigadas, ainda não são conhecidos os grafos extremais com respeito à medida do desvio dos graus em nenhuma classe de grafos. Além disso, vimos que as medidas de irregularidade estudadas não são comparáveis, dado que os grafos extremais a elas correspondentes são distintos. Desta forma, resolvemos verificar se tais medidas podem ser comparáveis pelo menos em algumas classes de grafos. As classes escolhidas foram a dos grafos caminho-completo e a dos grafos split completo, dado que os grafos a elas pertinentes possuem distribuições de graus bem definidas e propriedades extremais com relação a outros invariantes. Por exemplo, Belhaiza *et al.* [6] determinaram que os grafos caminho-completo são aqueles que possuem conectividade algébrica mínima em $\mathcal{H}(n, m)$. Oliveira *et al.*[30] conjecturaram que tais grafos possuem o maior valor do Q -spread dentre todos os grafos em $\mathcal{H}(n)$, $n \geq 5$. Para os grafos split completo, existe uma conjectura estabelecida em [5], envolvendo os parâmetros espectrais λ_1 e λ_n .

Neste capítulo, como contribuição original, teremos os resultados sobre os grafos extremais, em relação às medidas $s(G)$, $\sigma(G)$ e $irr(G)$, para a subfamília dos grafos

caminho-completo e a família dos grafos split completo. Já para a medida espectral $\varepsilon(G)$, conjecturas foram estabelecidas.

4.1 Grafos Caminho-Completos

Os grafos caminho-completo foram definidos em 1962 por Harary [20], que provou serem os que possuem diâmetro máximo dentre os grafos conexos com n vértices e m arestas, não sendo os únicos a terem esta propriedade.

Definição 4.1.1 [20] *Sejam $n, m, t, p \in \mathbb{N}$, onde $1 \leq t \leq n - 2$ e $1 \leq p \leq n - t - 1$. Um grafo com n vértices e m arestas tal que*

$$\frac{(n-t)(n-t-1)}{2} + t \leq m \leq \frac{(n-t)(n-t-1)}{2} + n - 2$$

é denominado um grafo (n, p, t) -caminho-completo, denotado por $PC_{n,p,t}$, quando

1. *a clique maximal de $PC_{n,p,t}$ é K_{n-t} ;*
2. *$PC_{n,p,t}$ tem um t -caminho $P_{t+1} = v_0, \dots, v_t$ tal que $v_0 \in K_{n-t} \cap P_{t+1}$ e v_1 é ligado a K_{n-t} por p arestas.*
3. *não existem outras arestas além das definidas em 1 e 2.*

A Figura 4.1 exibe um grafo $PC_{n,p,t}$ -caminho-completo.

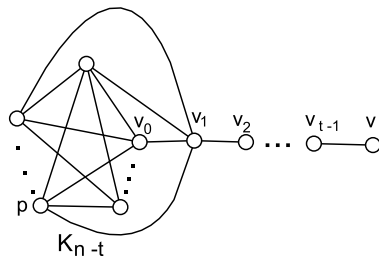


Figura 4.1: $PC_{n,p,t}$ -caminho-completo.

Com o auxílio do programa AGX, [19], coletamos dados sobre os grafos $PC_{n,p,1}$ que nos permitiram analisar o comportamento das 4 medidas de irregularidade estudadas, quando aplicada aos grafos desta classe. Os testes foram executados

com grafos até 12 vértices e observamos que o grafo $PC_{n,1,1}$ é o mais irregular dentre todos os grafos desta família para qualquer uma das 3 medidas $\sigma(G)$, $s(G)$ e $\varepsilon(G)$. Contudo, em relação à medida não-balanceada $irr(G)$, para $4 \leq n \leq 12$, $PC_{n,1,1}$ não se mostrou ser o mais irregular nesta classe. A Tabela 4.1 mostra, para $4 \leq n \leq 12$, os extremais para a medida não-balanceada.

n	Grafos extremais para $Irr(PC_{n,p,1})$, $1 \leq p \leq n - 2$
4	$PC_{4,2,1}$
5	$PC_{5,2,1}$
6	$PC_{6,2,1}$ ou $PC_{6,3,1}$
7	$PC_{7,3,1}$
8	$PC_{8,3,1}$ ou $PC_{8,4,1}$
9	$PC_{9,4,1}$
10	$PC_{10,4,1}$ ou $PC_{10,5,1}$
11	$PC_{11,5,1}$
12	$PC_{12,5,1}$ ou $PC_{12,6,1}$

Tabela 4.1: Grafos extremais para $irr(PC_{n,p,1})$, $4 \leq n \leq 12$.

Diante dos resultados experimentais obtidos, buscamos as respectivas provas formais. A medida do desvio dos graus aplicada aos grafos caminho-completo $PC_{n,p,1}$ toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 s(PC_{n,p,1}) &= \sum_{i=1}^n \left| d_i - \frac{2m}{n} \right| \\
 &= \left| p - \frac{(n-1)(n-2)+2p}{n} \right| + p \left| n - 1 - \frac{(n-1)(n-2)+2p}{n} \right| + (n-p-1) \left| n - 2 - \frac{(n-1)(n-2)+2p}{n} \right|.
 \end{aligned}$$

Com simples manipulação algébrica, chegamos a

$$s(PC_{n,p,1}) = \frac{(n-p-1)(n+2p-2+|n-2p-2|)}{n}. \quad (4.1)$$

Para esta medida, o Teorema 4.1.2 confirma os testes computacionais, mostrando que, de fato, $PC_{n,1,1}$ é o mais irregular dentre todos aqueles na subclasse de grafos caminho-completo quando se tem $t = 1$, ou seja, quando o grafo é do tipo $PC_{n,p,1}$

para todo n e $1 \leq p \leq n - 2$. Além disso, o teorema mostra que o grafo $PC_{n,n-2,1}$ é o menos irregular nesta subclasse.

Teorema 4.1.2 *Para um dado $n \geq 4$, seja $PC_{n,p,1}$, $1 \leq p \leq n - 2$. Então $\frac{4(n-2)}{n} \leq s(PC_{n,p,1}) \leq \frac{2(n-2)^2}{n}$, com o limite inferior atingido somente para $PC_{n,n-2,1}$ e com o limite superior atingido unicamente por $PC_{n,1,1}$.*

Prova: É suficiente calcular a diferença entre às medidas do desvio dos graus aplicadas aos grafos $PC_{n,p,1}$ e $PC_{n,p+1,1}$.

$$\begin{aligned} s(PC_{n,p,1}) - s(PC_{n,p+1,1}) &= \\ &= \frac{(n-p-1)(2p+n-2+|n-2p-2|)}{n} - \frac{(n-p-1-1)(2p+2+n-2+|n-2p-2-2|)}{n} \\ &\geq = \frac{(n-p-1)(n+2p+n-2p-2-2)+(n-p-2)(-n-2p-n+2p+4)}{n} = \frac{2n-4}{n}. \end{aligned}$$

Dos cálculos acima, para todo $n > 2$, $s(PC_{n,p,1}) - s(PC_{n,p+1,1}) > 0$. Logo, $\forall 1 \leq p \leq n - 3$, tem-se $s(PC_{n,p,1}) > s(PC_{n,p+1,1})$.

Portanto, o limite inferior é atingido quando $p = n - 2$ e o superior, quando $p = 1$. Em cada um desses casos, temos $s(PC_{n,1,1}) = \frac{2(n-2)^2}{n}$ e $s(PC_{n,n-2,1}) = \frac{4(n-2)}{n}$. ■

A expressão algébrica para a medida da variância aplicada aos grafos $PC_{n,p,1}$ é dada por:

$$\sigma(PC_{n,p,1}) = \frac{(n-p-1)[(n-4)(n-p)+4]}{n^2}.$$

Assim, como no caso anterior, o próximo teorema confirma nossos testes e mostra que dentre todos os grafos $PC_{n,p,1}$, e $\forall 1 \leq p \leq n - 2$, $PC_{n,1,1}$ é o grafo mais irregular e $PC_{n,n-2,1}$ é o menos irregular, segundo a medida da variância $\sigma(G)$.

Teorema 4.1.3 *Seja $n \geq 4$ e para todo p , $1 \leq p \leq n - 2$, seja $PC_{n,p,1}$ um grafo caminho-completo. Então $\frac{2(n-2)}{n^2} \leq \sigma(PC_{n,p,1}) \leq \frac{(n-2)(n^2-5n+8)}{n^2}$. O limite inferior é atingido para $PC_{n,n-2,1}$ e o limite superior, para $PC_{n,1,1}$.*

Prova: A prova segue do cálculo da diferença entre as medidas da variância aplicadas aos grafos $PC_{n,p,1}$ e a $PC_{n,p+1,1}$,

$$\sigma(PC_{n,p,1}) - \sigma(PC_{n,p+1,1}) = \frac{2(n-p-1)(n-4) + 4}{n^2} > 0.$$

Portanto, $\sigma(PC_{n,p,1}) > \sigma(PC_{n,p+1,1})$, $\forall 1 \leq p \leq n-3$.

Assim, $\sigma(PC_{n,1,1}) = \frac{(n-2)(n^2-5n+8)}{n^2}$ e $\sigma(PC_{n,n-2,1}) = \frac{2(n-2)}{n^2}$. ■

Para o cálculo da expressão algébrica da medida $\varepsilon(G)$ é preciso determinar o índice do grafo $PC_{n,p,1}$. O Lema 4.1.4 determina o espectro de $A(PC_{n,p,1})$.

Lema 4.1.4 Para $n \geq 4$ e $\forall p$, $1 \leq p \leq n-2$, o espectro de $PC_{n,p,1}$ é

$$\text{Spec}(A(PC_{n,p,1})) = \left(\begin{array}{cccc} \alpha & \beta & \gamma & -1 \\ 1 & 1 & 1 & n-3 \end{array} \right),$$

onde α, β e γ são as raízes de $p(x) = x^3 + (3-n)x^2 - (n+p-2)x - 2p + np - p^2$.

Prova: A matriz adjacência do grafo $PC_{n,p,1}$, $\forall p$, $1 \leq p \leq n-2$, é dada por

$$A(PC_{n,p,1}) = \begin{bmatrix} (J-I)_{p \times p} & J_{p \times (n-p-1)} & J_{p \times 1} \\ J_{(n-p-1) \times p} & (J-I)_{(n-p-1) \times (n-p-1)} & O_{(n-p-1) \times 1} \\ J_{1 \times p} & O_{1 \times (n-p-1)} & O_{1 \times 1} \end{bmatrix},$$

onde J é a matriz cujas entradas são todas iguais a 1 e I é a matriz identidade. Considere e_i o i -ésimo vetor da base canônica do \mathbb{R}^n . Seja $v = e_i - e_{n-1}$. Como $Av = -1v$, para todo i , $2 \leq i \leq n-2$, o vetor $v = e_i - e_{n-1}$ é um autovetor associado ao autovalor -1 . Logo, -1 tem multiplicidade algébrica no mínimo $n-3$. Dado que a matriz $A(PC_{n,p,1})$ possui uma base ortogonal constituída por autovetores, segue que existem autovetores da forma $y^t = (\underbrace{a, \dots, a}_p, \underbrace{b, \dots, b}_{n-p-1}, c)$ a ela associados. Assim,

os autovalores de $A(PC_{n,p,1})$ são exatamente iguais aos autovalores da matriz

$$B = \begin{bmatrix} p-1 & n-1-p & 1 \\ p & n-p-2 & 0 \\ p & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

cujos polinômio característico é $p_B(x) = x^3 + (3-n)x^2 - (n+p-2)x - 2p + np - p^2$.

■

Do Lema 4.1.4, a maior raiz de $p(x)$ é $\lambda_1(PC_{n,p,1})$, ou seja, o índice do grafo $PC_{n,p,1}$, cuja expressão algébrica no caso particular de $p = n-2$ é dada pelo seguinte corolário.

Corolário 4.1.5 *Para $n \geq 4$, o espectro de $PC_{n,n-2,1}$ é*

$$\text{Spec}(A(PC_{n,n-2,1})) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}n + \frac{\sqrt{2n+n^2-7}}{2} - \frac{3}{2} & 0 & -1 & \frac{1}{2}n - \frac{\sqrt{2n+n^2-7}}{2} - \frac{3}{2} \\ 1 & 1 & n-3 & 1 \end{pmatrix}.$$

Prova: Do Lema 4.1.4, a matriz de adjacência do grafo $PC_{n,p,1}$ tem -1 como seu autovalor com multiplicidade $n-3$. Substituindo em $p(x)$ o valor de p por $n-2$, obtemos, $p(x) = x(x^2 + (3-n)x + (4-2n))$, cujas raízes são 0 e $\frac{1}{2}n \pm \frac{\sqrt{2n+n^2-7}}{2} - \frac{3}{2}$.

■

Para todo $1 \leq p \leq n-3$, $PC_{n,p,1}$ é subgrafo próprio do grafo $PC_{n,p+1,1}$. Do Lema 2.2.4, conclui-se que, para todo $1 \leq p \leq n-3$, $\lambda_1(PC_{n,p,1}) < \lambda_1(PC_{n,p+1,1})$.

Sabe-se que $|E(PC_{n,j+1,1})| = |E(PC_{n,j,1})| + 1$. Como, $\bar{d}(PC_{n,j,1}) = \frac{2m}{n}$, tem-se que, para todo j , $1 \leq j \leq n-3$,

$$\bar{d}(PC_{n,j+1,1}) = \bar{d}(PC_{n,j,1}) + \frac{2}{n}. \quad (4.2)$$

Da igualdade dada em (4.2), tem-se que, para $1 \leq p \leq n-3$, $\varepsilon(PC_{n,p,1}) - \varepsilon(PC_{n,p+1,1}) = \lambda_1(PC_{n,p,1}) - \lambda_1(PC_{n,p+1,1}) + \frac{2}{n}$. Com testes realizados com o auxílio do software AGX, [19], pudemos estabelecer a seguinte conjectura.

Conjectura 4.1.6 *Seja $n \geq 4$ e para todo p , $1 \leq p \leq n - 3$, seja $PC_{n,p,1}$ um grafo caminho-completo. Então $0 < \lambda_1(PC_{n,p+1,1}) - \lambda_1(PC_{n,p,1}) < \frac{2}{n}$.*

Numericamente confirmamos que a conjectura é válida para $n \leq 25$. Sob tal condição, o grafo $PC_{n,1,1}$ é o grafo mais irregular dentre todos os grafos da subclasse dos caminho-completos $PC_{n,p,1}$, para todo p , $1 \leq p \leq n - 2$, com respeito às medidas $\sigma(G)$, $\varepsilon(G)$ e $s(G)$. A partir deste fato, estabelecemos a seguinte conjectura.

Conjectura 4.1.7 *Dado $n \geq 4$ e, para todo p , $1 \leq p \leq n - 2$, considere a subclasse dos grafos caminho-completos $PC_{n,p,1}$. O grafo $PC_{n,1,1}$ é o grafo mais irregular para $\varepsilon(G)$ nesta subclasse.*

Se a Conjectura 4.1.7 for verdadeira poderemos ter, para a subclasse dos grafos caminho-completos $PC_{n,p,1}$, uma compatibilidade entre as medidas $\sigma(G)$, $\varepsilon(G)$ e $s(G)$, sendo $PC_{n,1,1}$ o mais irregular dentre os grafos nesta subclasse.

A expressão algébrica dada para a medida não-balanceada $irr(G)$ aplicada aos grafos $PC_{n,p,1}$ é facilmente expressada por, $irr(PC_{n,p,1}) = 2pn - 2p - 2p^2$.

O Teorema 4.1.8 mostra quais grafos atingem o valor máximo para $irr(PC_{n,p,1})$.

Teorema 4.1.8 *Seja $n \geq 4$. Para todo p , $1 \leq p \leq n - 2$ o valor máximo de $irr(PC_{n,p,1})$ é atingido se p é ímpar, quando $p = \frac{n-1}{2}$, e, se p é par, quando $p = \frac{n}{2}$ ou $p = \frac{n-2}{2}$.*

Prova: Para obtermos o valor máximo de $irr(PC_{n,p,1})$, precisamos maximizar a função $f(p) = 2pn - 2p - 2p^2$. Assim, $p = \frac{n-1}{2}$ dá o valor máximo para $f(p)$, o que só acontece se n é ímpar, dado que p é inteiro.

Se n é par, é preciso avaliar e comparar os valores em f para $\lceil p \rceil = \frac{n}{2}$ ou $\lfloor p \rfloor = \frac{n-2}{2}$. Isto nos leva a $f(\lceil p \rceil)$ e $f(\lfloor p \rfloor)$, o que nos conduz a $f(\frac{n}{2}) = f(\frac{n-2}{2}) = \frac{n^2-2n}{2}$. Portanto, no caso n par, o valor máximo é atingido tanto por $\lceil p \rceil$ quanto por $\lfloor p \rfloor$.

■

O Teorema 4.1.8 nos diz que, mesmo na subfamília dos $PC_{n,p,1}$, a medida $irr(PC_{n,p,1})$ não é compatível às demais medidas estudadas, visto que para um dado

n , $PC_{n,1,1}$ é o mais irregular com relação a $s(PC_{n,p,1})$ e $\sigma(PC_{n,p,1})$. Com relação à medida espectral, o grafo $PC_{n,p,1}$ parece também ser o mais irregular na subclasse dos caminho-completos $PC_{n,p,1}$.

4.2 Grafos Split Completos

Sejam os grafos split completo $SC(n, k)$, definidos no Capítulo 3, mais especificamente dado pela Definição 3.3.1. Vamos agora caracterizar o grafo mais irregular desta classe, com relação a $s(G)$, $irr(G)$ e $\sigma(G)$.

Teorema 4.2.1 *Dado $n \in \mathbb{N}$, seja a família dos grafos split completos $SC(n, k)$, para todo $k \in \mathbb{N}$, $0 \leq k \leq n$. Se G é um grafo desta família, então $s(G) = \frac{2}{n}k(n - k)(n - 1 - k)$ e o grafo mais irregular dentre todos os $SC(n, k)$ é aquele em que k toma um dos seguintes valores dados em função de n :*

$$k = \begin{cases} \frac{n}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 0; \\ \frac{n-1}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 1; \\ \frac{n-2}{3} \text{ e } \frac{n+1}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 2. \end{cases}$$

Prova: Primeiro, vamos determinar a expressão algébrica de $s(G)$ quando $G = SC(n, k)$. Assim, $s(G) = k \left| n - 1 - \frac{k(2n-k-1)}{n} \right| + (n - k) \left| k - \frac{k(2n-k-1)}{n} \right|$, o que nos leva a $s(G) = \frac{2}{n}k(n - k)(n - 1 - k)$.

Defina a função $f(k) = \frac{2}{n}k(n - k)(n - 1 - k)$. Para n fixo, é preciso, determinar $k \in [0, n]$ que maximize $f(k)$. Da primeira derivada temos,

$$f'(k) = \frac{1}{n} [2k - n - 4kn + 3k^2 + n^2],$$

sendo $\frac{2}{3}n \pm \frac{1}{3}\sqrt{n^2 - n + 1} - \frac{1}{3}$ as suas duas raízes. É fácil ver que $f(0) = f(n) = 0$ e que estas raízes são os únicos candidatos ao máximo da função. Como $f''(k) = \frac{1}{n}(6k - 4n + 2)$, chegamos a

$$f''\left(\frac{2n + \sqrt{n^2 - n + 1} - 1}{3}\right) = \frac{2}{n}\sqrt{n^2 - n + 1} > 0$$

e

$$f''\left(\frac{2n - \sqrt{n^2 - n + 1} - 1}{3}\right) = -\frac{2}{n}\sqrt{n^2 - n + 1} < 0.$$

E vimos que, o valor máximo de $f(k)$ é dado para $k = \frac{2}{3}n - \frac{1}{3}\sqrt{n^2 - n + 1} - \frac{1}{3}$. O problema é que k precisa ser um número natural. Assim, devemos determinar em quais casos vamos ter $\lceil k \rceil$ ou $\lfloor k \rfloor$. Para isso, considere $n = 3p + r$, $0 \leq r \leq 2$, $p \in \mathbb{Z}_+$. Segue-se que

$$n^2 - n + 1 = 9p^2 + 6pr + r^2 - 3p - r + 1.$$

i) Para $r = 0$, podemos escrever $n^2 - n + 1 = 9p^2 - 3p + 1$. Como $(3p + 1)^2 - 9p = 9p^2 - 3p + 1 = (3p - 1)^2 + 3p$, concluímos que $3p - 1 \leq \sqrt{n^2 - n + 1} \leq 3p + 1$.

Logo,

$$k = \frac{2}{3}n - \frac{1}{3}\sqrt{n^2 - n + 1} - \frac{1}{3} \leq \frac{n}{3}$$

e

$$k = \frac{2}{3}n - \frac{1}{3}\sqrt{n^2 - n + 1} - \frac{1}{3} \geq \frac{n - 2}{3} > \frac{n}{3} - 1.$$

Portanto,

$$\frac{n}{3} - 1 < k \leq \frac{n}{3} \text{ se } n \bmod (3) = 0.$$

ii) Para $r = 1$, escrevemos $n^2 - n + 1 = 9p^2 + 3p + 1$. Como $(3p + 1)^2 - 3p = (3p - 1)^2 + 9p$, concluímos que, $3p - 1 \leq \sqrt{n^2 - n + 1} \leq 3p + 1$.

Consequentemente,

$$k = \frac{2}{3}n - \frac{1}{3}\sqrt{n^2 - n + 1} - \frac{1}{3} < \frac{n + 2}{3}$$

e

$$k = \frac{2}{3}n - \frac{1}{3}\sqrt{n^2 - n + 1} - \frac{1}{3} \geq \frac{n-1}{3},$$

o que nos leva as seguintes desigualdades em mod(3):

$$\frac{n-1}{3} \leq k < \frac{n+2}{3} \text{ se } n \bmod (3) = 1.$$

iii) Para $r = 2$, $n^2 - n + 1 = 9p^2 + 9p + 3$. Dado que $(3p+2)^2 - (3p+1) = (3p+1)^2 + (3p+2)$, chegamos a $3p+1 \leq \sqrt{n^2 - n + 1} \leq 3p+2$.

Assim,

$$k = \frac{2}{3}n - \frac{1}{3}\sqrt{n^2 - n + 1} - \frac{1}{3} \leq \frac{n}{3} < \frac{n+1}{3}$$

e

$$k = \frac{2}{3}n - \frac{1}{3}\sqrt{n^2 - n + 1} - \frac{1}{3} \geq \frac{n-1}{3} > \frac{n-2}{3}.$$

Portanto,

$$\frac{n-2}{3} < k < \frac{n+1}{3} \text{ se } n \bmod (3) = 2.$$

Desta forma, obtemos as seguintes condições para os valores de $\lfloor k \rfloor$ e $\lceil k \rceil$:

$$\lfloor k \rfloor = \begin{cases} \frac{n}{3} - 1, & \text{se } n \bmod (3) = 0; \\ \frac{n-1}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 1; \\ \frac{n-2}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 2. \end{cases} \quad \lceil k \rceil = \begin{cases} \frac{n}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 0; \\ \frac{n+2}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 1; \\ \frac{n+1}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 2. \end{cases}$$

Finalmente, para determinar o valor máximo da função f , devemos calcular e comparar $f(\lfloor k \rfloor)$ e $f(\lceil k \rceil)$ em cada um dos três casos.

i) Se $n \bmod (3) = 0$, chegamos a

$f\left(\frac{n}{3}\right) = \frac{8}{27}n^2 - \frac{4}{9}n > f\left(\frac{n}{3} - 1\right) = \frac{8}{27}n^2 - \frac{4}{9}n - \frac{4}{3}$. Logo, o valor máximo é atingido pelo $\lceil k \rceil = \frac{n}{3}$.

ii) Se $n \bmod (3) = 1$, temos

$$f\left(\frac{n-1}{3}\right) = \frac{1}{27n}(8n^3 - 12n^2 + 4) > f\left(\frac{n+2}{3}\right) = \frac{1}{27n}(8n^3 - 12n^2 - 36n + 40).$$

Assim, o valor máximo é atingido pelo $\lfloor k \rfloor = \frac{n-1}{3}$.

iii) Se $n \bmod 3 = 2$,

$f\left(\frac{n-2}{3}\right) = f\left(\frac{n+1}{3}\right) = \frac{1}{27n}(8n^3 - 12n^2 - 12n + 8)$ e o valor máximo é atingido tanto pelo $\lfloor k \rfloor = \frac{n-2}{3}$ quanto pelo $\lceil k \rceil = \frac{n+1}{3}$. ■

O Teorema 4.2.2 mostra que os grafos extremais para $s(SC(n, k))$ são iguais aos obtidos para a medida não-balanceada $irr(SC(n, k))$.

Teorema 4.2.2 *Dado $n \in \mathbb{N}$, seja a família dos grafos split completos $SC(n, k)$, para todo $k \in \mathbb{N}$, $0 \leq k \leq n$. Se G é um grafo desta família, então $irr(G) = k(n-k)(n-1-k)$ e o grafo mais irregular dentre todos os $SC(n, k)$ é aquele em que k toma um dos seguintes valores, dados em função do n fixado:*

$$k = \begin{cases} \frac{n}{3}, & \text{se } n \bmod 3 = 0; \\ \frac{n-1}{3}, & \text{se } n \bmod 3 = 1; \\ \frac{n-2}{3} \text{ e } \frac{n+1}{3}, & \text{se } n \bmod 3 = 2. \end{cases}$$

Prova: Desde que $SC(n, k)$ é um grafo com k vértices de grau $n-1$ e $n-k$ vértices de grau k , chega-se a $irr(SC(n, k)) = k(n-k)(n-1-k)$. Logo, $irr(SC(n, k)) = \frac{n}{2}s(SC(n, k))$. O restante da prova é análoga ao Teorema 4.2.1. ■

O próximo resultado caracteriza o grafo split completo mais irregular para a medida da variância $\sigma(G)$, para G na família dos $SC(n, k)$.

Teorema 4.2.3 *Dado $n \in \mathbb{N}$, seja a família dos grafos split completos $SC(n, k)$, para todo $k \in \mathbb{N}$, $0 \leq k \leq n$. Se G é um grafo desta família, então $\sigma(G) = \frac{1}{n^2}(k-n+1)^2(n-k)k$ e o grafo mais irregular dentre todos os $SC(n, k)$ é aquele em*

que k toma um dos seguintes valores, dados em função do n fixado:

$$k = \begin{cases} \frac{n}{4}, & \text{se } n \bmod (8) = 0 \text{ ou } 4; \\ \frac{n-1}{4}, & \text{se } n \bmod (8) = 1 \text{ ou } 5; \\ \frac{n-2}{4}, & \text{se } n \bmod (8) = 2 \text{ ou } 6 \text{ e} \\ \frac{n+1}{4}, & \text{se } n \bmod (8) = 3 \text{ ou } 7. \end{cases}$$

Prova: A expressão algébrica para $\sigma(G)$, quando G é do tipo $SC(n, k)$ é dada como segue

$$\sigma(SC(n, k)) = \frac{1}{n} \left(k \left(n - 1 - \frac{k(2n-1-k)}{n} \right)^2 + (n-k) \left(k - \frac{k(2n-1-k)}{n} \right)^2 \right). \text{ Daí,} \\ \text{temos que } \sigma(SC(n, k)) = \frac{1}{n^2} (k-n+1)^2 (n-k) k.$$

Defina a função $f(k) = \frac{1}{n^2} (k-n+1)^2 (n-k) k$. Para n fixo, é preciso determinar o valor de $k \in [0, n]$ que maximize $\sigma(G)$. A prova segue analogamente àquela do Teorema 4.2.1. Assim, temos $f'(k) = \frac{1}{n^2} (2k-n-5kn+4k^2+n^2) (-k+n-1)$. cujas raízes são $n-1$, e $\frac{5}{8}n \pm \frac{1}{8}\sqrt{9n^2-4n+4} - \frac{1}{4}$. Logo, a função é anulada pra $k = 0, n-1$ ou n ; cujos possíveis máximos são um do valores $\frac{5}{8}n \pm \frac{1}{8}\sqrt{9n^2-4n+4} - \frac{1}{4}$. Temos que $f''(k) = -\frac{2}{n^2} (6k-4n-9kn+6k^2+3n^2+1)$. Assim, como no caso do Teorema 4.2.1, chegamos a $f(\frac{5n-\sqrt{9n^2-4n+4}-2}{8}) - f(\frac{5n+\sqrt{9n^2-4n+4}-2}{8}) = \frac{(n-2)(9n^2-4n+4)}{256n^2} > 0$, para todo $n \geq 2$.

Portanto, o máximo de $f(k)$ é dado para $k = \frac{5}{8}n - \frac{1}{8}\sqrt{9n^2-4n+4} - \frac{1}{4}$. Outra vez, é preciso que $k \in \mathbb{N}$. Para descobrir os possíveis valores de $k \in \mathbb{N}$ tome $n = 8p + r$, $0 \leq r \leq 7$, $p \in \mathbb{Z}$. Assim,

$$9n^2 - 4n + 4 = 576p^2 + 144pr + 9r^2 - 32p - 4r + 4.$$

Para $r = 0$, escrevemos $9n^2 - 4n + 4 = 576p^2 - 32p + 4$. Dado que $(24p-2)^2 + 64p = 576p^2 - 32p + 4 = (24p+2)^2 - 128p$, chegamos a $24p-2 \leq \sqrt{9n^2-4n+4} \leq 24p+2$.

Daí, temos,

$$\frac{n}{4} - 1 < k = \frac{5}{8}n - \frac{1}{8}\sqrt{9n^2-4n+4} - \frac{2}{8} \leq \frac{n}{4}.$$

Portanto,

$$\frac{n}{4} - 1 < k \leq \frac{n}{4} \text{ se } n \bmod (8) = 0.$$

Para determinar o valor de $\lceil k \rceil$ que maximiza $f(k)$, temos que comparar $f(\frac{n}{4} - 1)$ e $f(\frac{n}{4})$, como segue:

$f(\frac{n}{4}) = \frac{27}{256}n^2 - \frac{9}{32}n + \frac{3}{16} > f(\frac{n}{4} - 1) = \frac{27}{256}n^2 - \frac{9}{32}n - \frac{9}{16}$. Logo, o máximo de $f(k)$ é atingido para $\lceil k \rceil = \frac{n}{4}$.

Para $r = 1$, procedemos analogamente ao caso anterior para chegarmos que o máximo de $f(k)$ é atingido para $\lfloor k \rfloor = \frac{n-1}{4}$.

Os casos $r = 2, 3, 4, 5, 6$ e 7 , também tem provas análogas. No caso $r = 2$, $\lfloor k \rfloor = \frac{n-2}{4}$ maximiza $f(k)$; para $r = 3$ $\lfloor k \rfloor = \frac{n+1}{4}$ maximiza $f(k)$; para $r = 4$, $\lfloor k \rfloor = \frac{n}{4}$ é que maximiza $f(k)$; para $r = 5$, $\lfloor k \rfloor = \frac{n-1}{4}$ maximiza $f(k)$, já para $r = 6$ $\lfloor k \rfloor = \frac{n-2}{4}$ é que forma $f(k)$ máximo. Finalmente, para $r = 7$ $\lfloor k \rfloor = \frac{n+1}{4}$ maximiza $f(k)$. ■

Resta-nos agora determinar quais são os possíveis grafos extremais para a medida espectral $\varepsilon(G)$, quando G é um grafo split completo. Para isso, é preciso conhecer o índice de G . A proposição seguinte nos dá uma expressão algébrica do índice de $SC(n, k)$, em função de n e k .

Proposição 4.2.4 *Sejam k e n dados, tal que $0 \leq k \leq n$. O espectro de $SC(n, k)$ é*

$$\text{spect}(A(SC(n, k))) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(k-1) \pm \frac{1}{2}\sqrt{4kn - 2k - 3k^2 + 1} & 0 & -1 \\ & 1 & n-k-1 & k-1 \end{pmatrix}.$$

Prova:

A matriz de adjacência do grafo $SC(n, k)$ é dada por

$$A(SC(n, k)) = \begin{bmatrix} (J - I)_{k \times k} & J_{k \times (n-k)} \\ J_{(n-k) \times k} & O_{(n-k) \times (n-k)} \end{bmatrix},$$

onde J é a matriz cujas entradas são todas iguais a 1 e I é a matriz identidade. Pode-se observar que -1 é autovalor de $A(SC(n, k))$. De fato, considere o vetor e_i ,

o i -ésimo vetor da base canônica para todo i , $2 \leq i \leq k$. Assim, $v = e_i - e_1$ é um autovetor associado ao autovalor -1 . Portanto, -1 é autovalor de $A(SC(n, k))$ com multiplicidade algébrica no mínimo $k - 1$. Além disso, 0 é também um autovalor de $A(SC(n, k))$, pois $x = e_j - e_n$, $k + 2 \leq j \leq n$, é um autovetor associado a 0 . Portanto, 0 é autovalor de $SC(n, k)$ com multiplicidade algébrica no mínimo $n - k - 1$. Como $A(SC(n, k))$ possui uma base ortogonal constituída por autovetores, existem autovetores de $A(SC(n, k))$ da forma $y^t = (\underbrace{a, \dots, a}_k, \underbrace{b, \dots, b}_{n-k})$. Isto nos leva a concluir

que os autovalores da matriz $B = \begin{bmatrix} k-1 & n-k \\ k & 0 \end{bmatrix}$ são também autovalores de $A(SC(n, k))$.

Logo, $\frac{1}{2}(k-1) \pm \frac{1}{2}\sqrt{4kn - 2k - 3k^2 + 1}$ são autovalores de $A(SC(n, k))$. Portanto, obtemos o espectro de $A(SC(n, k))$ e podemos escrever o polinômio característico da matriz de adjacência do grafo $SC(n, k)$ por $p_x(A(SC(n, k))) = x^{n-k-1}(x+1)^{k-1}(x^2 + (-k+1)x - k(-k+n))$. ■

Da Proposição 4.2.4, a medida de irregularidade $\varepsilon(SC(n, k))$ fica facilmente determinada, como segue:

$$\varepsilon(SC(n, k)) = \frac{1}{2n} \left(2k - n - 3kn + 2k^2 + n\sqrt{4kn - 2k - 3k^2 + 1} \right). \quad (4.3)$$

Infelizmente, não conseguimos determinar o máximo da função dada pela equação 4.3 que descreve $\varepsilon(SC(n, k))$. Para todo n , $4 \leq n \leq 15$, com o auxílio do software AGX, determinamos o grafo mais irregular para a medida espectral na família dos split completos. Para todo n , $4 \leq n \leq 11$, a estrela $S_n = SC(n, 1)$ é o mais irregular, e para todo n , $12 \leq n \leq 15$, o mais irregular é $SC(n, 2)$. Tais experimentos junto com os resultados decorrentes dos Teoremas 4.2.1, 4.2.2 e 4.2.3 nos permite concluir que as 4 medidas estudadas não fornecem os mesmos grafos extremos, mesmo numa classe limitada como a dos grafos split completos.

Para $5 \leq n \leq 15$ investigamos para a medida do desvio dos graus, na classe $\mathcal{H}(n)$, qual seria o grafo extremal, e obtemos que o grafo split completo é o mais

irregular dentre todos os grafos nesta classe. Baseado nos resultados anteriores e nos testes realizados, com o auxílio do software AGX [19] estabelecemos a seguinte conjectura:

Conjectura 4.2.5 *Seja $\mathcal{H}(n)$ o conjunto de todos os grafos conexos com n vértices. Então, o grafo conexo mais irregular segundo a medida do desvio dos graus $s(G)$ em $\mathcal{H}(n)$ é um grafo split completo, onde k satisfaz as seguintes condições:*

$$k = \begin{cases} \frac{n}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 0; \\ \frac{n-1}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 1; \\ \frac{n-2}{3} \text{ e } \frac{n+1}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 2. \end{cases}$$

Uma fato interessante que podemos observar é que $\forall p, 1 \leq p \leq n-2$ os grafos $PC_{n,p,1}$ são grafos quase-completo. Como vimos no Capítulo 3 tais grafos são extremais tanto para a medida $\varepsilon(G)$ quanto para $\sigma(G)$. O grafo split completo $SC(n, n-2)$ é isomorfo ao grafo $H_{n,n-2}$ que também é uma das famílias que são extremais para a medida espectral.

A proposição a seguir determina o espectro da matriz laplaciano sem sinal para um grafo split completo que será utilizado no Capítulo 6.

Proposição 4.2.6 *Sejam k e n , dados tais que $0 \leq k \leq n$. O espectro do grafo split completo, $SC(n, k)$, em relação a matriz laplaciana sem sinal é dado por*

$$\text{spect}(Q(SC(n, k))) = \begin{pmatrix} \frac{2k+n}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{4kn - 4n - 4k^2 + n^2 + 4} - 1 & k & n-2 \\ & 1 & n-k-1 & k-1 \end{pmatrix}.$$

Prova: É fácil ver que a matriz laplaciana sem sinal do grafo $SC(n, k)$ é

$$Q(SC(n, k)) = \begin{bmatrix} (J + (n-2)I)_{k \times k} & J_{k \times (n-k)} \\ J_{(n-k) \times k} & kJ_{(n-k) \times (n-k)} \end{bmatrix},$$

onde J é a matriz cujas entradas são todas iguais a 1 e I é a matriz identidade. Pode-se observar que k é autovalor de $Q(SC(n, k))$. De fato, considere o vetor e_i como o

i -ésimo vetor da base canônica. O vetor $v = e_i - e_{k+1}$, $\forall k+2 \leq i \leq n$, é um autovetor associado ao autovalor k . Portanto, k é autovalor com multiplicidade algébrica no mínimo $n - k - 1$. Além disso, temos que $(n-2)$ é autovalor de $Q(SC(n, k))$ pois, o vetor $x = e_j - e_1$, $\forall 2 \leq j \leq k$, é um autovetor associado ao autovalor $(n-2)$. Portanto, $(n-2)$ é autovalor com multiplicidade algébrica no mínimo $k - 1$. Como $Q(SC(n, k))$ possui uma base ortogonal constituída por autovetores, segue que existem autovetores de $Q(SC(n, k))$ da forma $y^t = (\underbrace{a, \dots, a}_k, \underbrace{b, \dots, b}_{n-k})$ associado ao autovalor λ . Po-

demos então concluir que os autovalores de $B = \begin{bmatrix} n+k-2 & n-k \\ k & k \end{bmatrix}$ são também autovalores de $Q(SC(n, k))$. Logo, os autovalores de $Q(SC(n, k))$ são da forma $k + \frac{1}{2}n \pm \frac{1}{2}\sqrt{4kn - 4n - 4k^2 + n^2 + 4} - 1$. Portanto, o polinômio característico de $Q(SC(n, k))$ é dado por

$$p_x(Q(SC(n, k))) = (x - (n - 2))^{k-1} (x - k)^{n-k-1} (x^2 + (-2k - n + 2)x + (k(k + n - 2) - k(-k + n))). \blacksquare$$

Nas Tabelas 4.2 e 4.3 apresentamos um resumo de nossas contribuições neste capítulo.

Medida de irregularidade	Grafos Extremais na classe $PC_{n,p,1}$	Referência
$s(PC_{n,p,1}) = \frac{1}{n} ((n - p - 1)(n + 2p - 2 + n - 2p - 2)$	$PC_{n,1,1}$	Teorema 4.1.2
$irr(PC_{n,p,1}) = k(n - k)(n - 1 - k)$	$PC_{n, \frac{n-1}{2}, 1}$ se n é ímpar $PC_{n, \frac{n}{2}, 1}$ ou $PC_{n, \frac{n-2}{2}, 1}$ se n é par	Teorema 4.1.8
$\sigma(PC_{n,p,1}) = \frac{1}{n^2} ((n - p - 1) [(n - 4)(n - p) + 4])$	$PC_{n,1,1}$	Teorema 4.1.3
$\varepsilon(PC_{n,p,1})$	$PC_{n,1,1}$	Conjectura 4.1.7

Tabela 4.2: Grafos caminho-completos extremais para $s(G)$, $irr(G)$, $\sigma(G)$ e $\varepsilon(G)$.

Medidas de Irregularidade	Grafos Extremais $SC(n, k)$	Referência
$s(SC(n, k)) = \frac{2}{n}k(n - k)(n - 1 - k)$	$k = \begin{cases} \frac{n}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 0; \\ \frac{n-1}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 1; \\ \frac{n-2}{3} \text{ e } \frac{n+1}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 2. \end{cases}$	Teorema 4.2.1
$irr(SC(n, k)) = k(n - k)(n - 1 - k)$	$k = \begin{cases} \frac{n}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 0; \\ \frac{n-1}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 1; \\ \frac{n-2}{3} \text{ e } \frac{n+1}{3}, & \text{se } n \bmod (3) = 2. \end{cases}$	Teorema 4.2.2
$\sigma(SC(n, k)) = \frac{1}{n^2}(k - n + 1)^2(n - k)k$	$k = \begin{cases} \frac{n}{4}, & \text{se } n \bmod (4) = 0 \text{ ou } 4; \\ \frac{n-1}{4}, & \text{se } n \bmod (8) = 1 \text{ ou } 5; \\ \frac{n-2}{4}, & \text{se } n \bmod (8) = 2 \text{ ou } 6; \\ \frac{n+1}{4}, & \text{se } n \bmod (8) = 3 \text{ ou } 7. \end{cases}$	Teorema 4.2.3
$\varepsilon(SC(n, k)) = \frac{1}{2n} (2k - n - 3kn + 2k^2 + n\sqrt{4kn - 2k - 3k^2 + 1})$	$S_n = SC(n, 1)$ se $4 \leq n \leq 11$; $S_n = SC(n, 2)$ se $12 \leq n \leq 15$;	Testes com AGX, página 47

Tabela 4.3: Grafos split completo extremais para $s(G)$, $irr(G)$, $\sigma(G)$ e $\varepsilon(G)$.

Capítulo 5

Uma nova Medida de Irregularidade

Neste capítulo, definimos uma nova medida de irregularidade que envolve dois parâmetros espectrais, a energia de um grafo e a energia laplaciana sem sinal. Determinamos uma expressão para energia laplaciana sem sinal em função dos autovalores menores ou maiores que a média dos graus. Além disso, estabelecemos uma conjectura para a nova medida.

5.1 A medida $I(G)$

Em 1978, Gutman definiu *energia* de um grafo G como sendo a soma do valor absoluto dos autovalores da matriz de adjacência:

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

Como a soma dos autovalores da matriz de adjacência é igual a zero, podemos escrever $E(G) = 2 \sum_{\lambda_i > 0} \lambda_i$.

O invariante $QE(G) = \sum_{i=1}^n |q_i - \frac{2m}{n}|$, igual a soma dos valores absolutos das diferenças entre os autovalores da matriz laplaciana sem sinal e a média dos graus de G , foi definido por Abreu *et al.* [2] como sendo a energia laplaciana sem sinal. A proposição seguinte nos dá uma expressão de $QE(G)$ em função dos autovalores menores ou maiores que a média dos graus.

Proposição 5.1.1 *Seja G um grafo com n vértices. Então $QE(G) = 2a\bar{d}(G) - 2 \sum_{q_i < \bar{d}} q_i = 2 \sum_{q_i > \bar{d}} q_i - 2b\bar{d}$, onde a e b é o número de autovalores menores e maiores que \bar{d} , respectivamente.*

Prova: Para provar a primeira igualdade, é suficiente calcular:

$$\begin{aligned}
 QE(G) &= \sum_{i=1}^n |q_i - \bar{d}| \\
 &= \sum_{q_i < \bar{d}} (\bar{d} - q_i) + \sum_{q_i > \bar{d}} (q_i - \bar{d}) \\
 &= 2 \sum_{q_i < \bar{d}} (\bar{d} - q_i) + \sum_{i=1}^n (q_i - \bar{d}) \\
 &= 2a\bar{d} - 2 \sum_{q_i < \bar{d}} q_i.
 \end{aligned}$$

A prova da segunda igualdade é feita de modo similar a anterior. ■

O Teorema 5.1.2, apresentado em [2] e reescrito a seguir, nos dá um limite superior para a energia laplaciana sem sinal em função da energia do grafo, do número de arestas e sequência dos graus dos vértices.

Teorema 5.1.2 [2] *Para todo grafo G , $QE(G) \leq E(G) + \sqrt{n \sum_{i=1}^n d_i^2 - 4m^2}$. A igualdade ocorre se e somente se G é regular.*

Baseado no resultado acima, propomos investigar o parâmetro $I(G) = |E(G) - QE(G)|$ como uma nova medida de irregularidade de grafos. A razão disso se dá pelo fato de que, quando G é regular, $QE(G) = E(G)$ e, conseqüentemente, $I(G) = 0$. A medida $I(G)$ possui uma característica em comum com a medida não-balanceada $irr(G)$, devido ao fato que $I(G) = 0$ se e somente se G é regular ou um grafo desconexo com componentes regulares. A Figura 5.1 exhibe um grafo desconexo irregular para o qual $I(G) = 0$.

Embora este fato seja suficiente para garantir $I(G)$ como medida de irregularidade, é interessante que se faça uma investigação rigorosa sobre o comportamento deste parâmetro em grafos de diversas famílias comparando o seu desempenho com o desempenho das demais medidas já conhecidas da literatura e

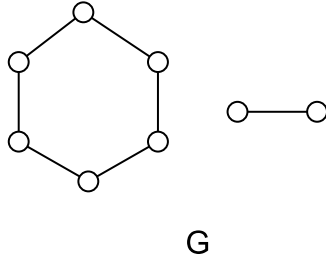


Figura 5.1: Grafos irregulares em que $I(G) = 0$.

que foram estudadas no Capítulo 3. Os testes iniciais já feitos para calcular o valor de $I(G)$ são apresentados a seguir. Foram testados com o auxílio do software AGX [19], grafos com n vértices, $5 \leq n \leq 12$, e m arestas, $n - 1 < m < \binom{n}{2}$. Para cada valor possível de m , obtivemos o valor de $I(G)$ máximo. Por exemplo, para $n = 5$ e $m = 6$, o valor máximo encontrado é $I(G) = 1,501021$, cujo grafo associado é exibido na Figura 5.2. A Figura 5.3 apresenta a curva dada pelos valores de $I(G)$, para os grafos de 5 vértices em que o número de arestas m varia entre 4 e 10, estão representados pela ordenada y .

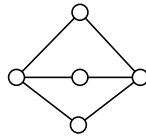


Figura 5.2: O grafo mais irregular com relação à $I(G)$ na classe $\mathcal{G}(5, 6)$.

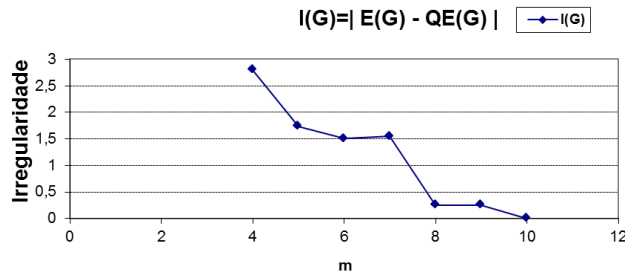


Figura 5.3: Valores maximais de $I(G)$ em $\mathcal{H}(5, m)$, para $4 \leq m \leq 10$.

A Figura 5.4 exhibe os grafos mais irregulares para $I(G)$ com 5 vértices e m arestas, $4 \leq m < 10$.

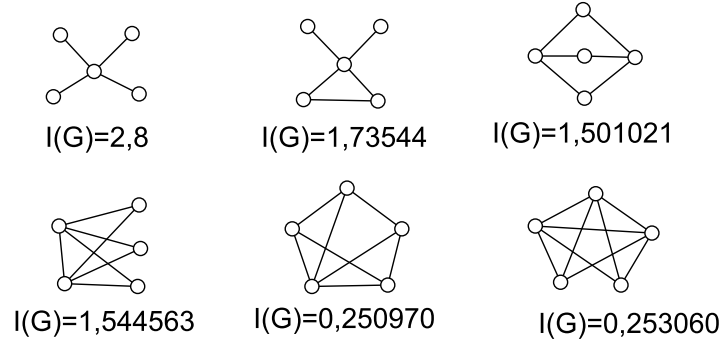


Figura 5.4: Grafos mais irregulares com relação a $I(G)$.

Observando a Figura 5.4, vemos que o grafo mais irregular é a estrela, que como se sabe é um grafo split completo. Para $1 \leq n \leq 14$, realizamos o cálculo da medida $I(G)$ para grafos G na família $\mathcal{H}(n)$. Em cada caso testado, o grafo mais irregular encontrado foi um grafo split completo $SC(n, k)$, $0 < k < n - 1$. A Tabela 5.1 fornece os grafos split completo extremais para $I(G)$ com n vértices apresentando o valor máximo em cada um dos casos.

n	$I(G)$	$G = SC(n, k)$
5	2,8	$SC(5, 1)$
6	4,19453	$SC(6, 1)$
7	7,08770	$SC(7, 2)$
8	10,16515	$SC(8, 2)$
9	13,36378	$SC(9, 2)$
10	17,98469	$SC(10, 3)$
11	22,849489	$SC(11, 3)$
12	27,8392	$SC(12, 4)$
13	34,217	$SC(13, 4)$
14	39,428	$SC(14, 5)$

Tabela 5.1: Grafos extremais em $\mathcal{H}(n)$ para $I(G)$, $5 \leq n \leq 14$.

A partir daí estabelecemos a seguinte conjectura:

Conjectura 5.1.3 *O grafo conexo mais irregular para $I(G)$ é um grafo split completo.*

Para provar que um grafo split completo é o mais irregular em $\mathcal{H}(n)$ para $I(G)$, primeiramente é necessário caracterizar o split completo mais irregular dentre todos os grafos da família $SC(n, k)$. Desta forma, precisamos conhecer o espectro e a energia em relação às matrizes de adjacência e laplaciana sem sinal. Na Proposição 4.2.4, determinamos o espectro de $SC(n, k)$ e na Proposição 4.2.6 determinamos o espectro da matriz laplaciana sem sinal. Então as equações correspondentes para energia e energia laplaciana sem sinal para os grafos split completo são:

$$E(SC(n, k)) = k - 1 + \sqrt{4kn - 2k - 3k^2 + 1};$$

$$QE(SC(n, k)) = n^{-1} (2k - 8kn + 6k^2 + 2kn^2 + n\sqrt{4kn - 4n - 4k^2 + n^2 + 4});$$

Logo, $I(SC(n, k)) = |E(SC(n, k)) - QE(SC(n, k))|$. Infelizmente não conseguimos encontrar o máximo para esta função.

Determinar a energia ou a energia laplaciana de um grafo demanda um trabalho computacional bastante considerável, pois é necessário calcular todos os autovalores da matriz correspondente. Portanto, desde o ponto de vista do cálculo, a nova medida, $I(G)$, comparada com as outras medidas de irregularidade não parece trazer muitas vantagens. Porém se as Conjecturas 4.2.5 e 5.1.3 forem provadas, podemos concluir que existe uma compatibilidade desta nova medida com a medida desvio dos graus, $s(G)$, desta nova medida com a medida desvio dos graus, $s(G)$, sendo o grafo conexo com n vértices mais irregular para as duas medidas um grafo split completo para valores de k próximos de $\frac{1}{3}n$.

Capítulo 6

Conjunto Equilibrador em Grafos de Classes Especiais

Iniciamos este capítulo com conceitos relacionados à média e à distribuição dos graus dos vértices de um grafo. Tais conceitos foram, primeiramente, estudados por Rodrigues em [34] e, posteriormente, por Damas *et al.* [14]. Investigamos os invariantes *top*, *gap* e *conjunto equilibrador*, todos relativos à distribuição dos graus dos vértices de um grafo pertinente a alguma família de grafos extremais, para as medidas de irregularidade estudadas nos Capítulos 3 e 4. Determinamos também o conjunto equilibrador de um grafo em uma dessas classes para atingir o nosso objetivo principal deste capítulo que é relacionar os grafos extremais para a irregularidade com o conceito de grafos não-balanceados. Isto é feito pois, em certo sentido, os grafos balanceados parecem estar mais próximos dos grafos regulares e, portanto, as medidas de irregularidade para estes grafos devem estar mais próximas a zero que os valores das medidas aplicadas a grafos não-balanceados.

6.1 Média dos Graus e Conceitos Relacionados

Os conceitos de *top* e *gap* são a seguir reproduzidos e alguns resultados a eles relacionados, obtidos por Damas *et al.* [14] são a apresentados a seguir.

Definição 6.1.1 [14] O top de um grafo G , denotado por $\mu(G)$, é o menor inteiro maior ou igual que a média dos graus de G , isto é, $\mu(G) = \lceil \bar{d}(G) \rceil$.

Definição 6.1.2 [14] Seja G um grafo com n vértices. O gap de G é um múltiplo escalar de n dado em função da diferença entre o top e a média dos graus de G , ou seja, $h(G) = n(\mu(G) - \bar{d}(G))$.

O grafo da Figura 6.1 tem $\bar{d}(G) = \frac{20}{7} \cong 2,85$. Portanto, seu top é $\mu(G) = 3$ e seu gap é $h(G) = 1$.

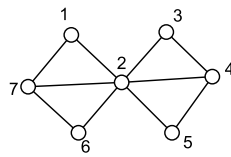


Figura 6.1: Grafo G com $\mu(G) = 3$ e $h(G) = 1$.

Quando $\mu(G) = \bar{d}(G)$, o grafo G possui gap nulo, isto é, $h(G) = 0$. É fácil verificar que todo grafo regular possui gap nulo. Na Figura 6.2, para $1 \leq n \leq 5$, exibimos todos os grafos que possuem gap nulo e, como se vê, há vários deles que são grafos não-regulares.

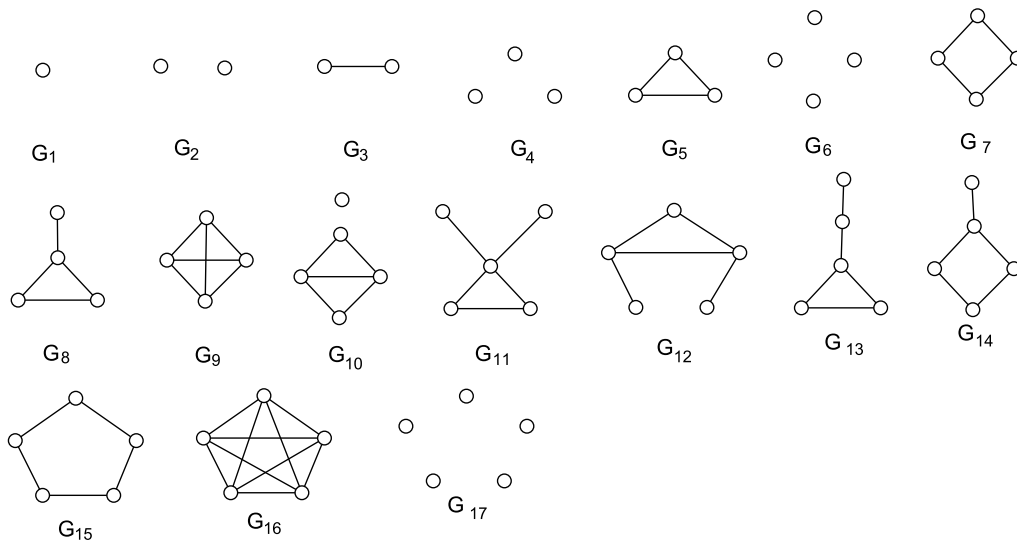


Figura 6.2: Grafos com gap nulo.

Definição 6.1.3 [14] Seja G um grafo e $V(G)$ o conjunto de seus vértices. Então:

1. $B(G) = \{i \in V(G) | d_i = \mu(G)\}$ é o conjunto de vértices balanceados de G ;
2. $U(G) = \{i \in V(G) | d_i > \mu(G)\}$ é o conjunto de vértices superiores de G ;
3. $L(G) = \{i \in V(G) | d_i < \mu(G)\}$ é o conjunto de vértices inferiores de G .

O grafo da Figura 6.3 tem $\bar{d}(G) = \mu(G) = 2$ e seus conjuntos de vértices balanceados, superiores e inferiores são respectivamente, $B(G) = \{1, 2\}$, $U(G) = \{3\}$ e $L(G) = \{4, 5\}$.

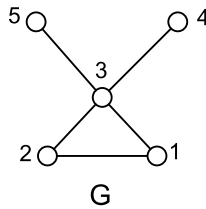


Figura 6.3: Grafo com $B(G)$, $L(G)$ e $U(G)$ não vazios.

Definição 6.1.4 [14] Um grafo G é dito não-balanceado se o conjunto de vértices superiores $U(G)$ é não vazio. Caso contrário, G é balanceado.

Como exemplo trivial de grafos balanceados temos os grafos regulares. Entretanto, existem grafos balanceados que são irregulares. O grafo G da Figura 6.4, é irregular e balanceado com $\bar{d}(G) = 2.5$; $\mu(G) = 3$ e $U(G) = \emptyset$.

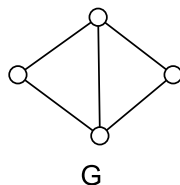


Figura 6.4: Grafo G irregular e balanceado.

Os grafos $G_{10}, G_{11}, G_{12}, G_{13}$ e G_{14} da Figura 6.2 possuem, pelo menos, um vértice de grau maior ou igual a 3, ou seja, maior ou igual a $\mu(G) = 2$. Logo para tais grafos, $U(G_i) \neq \emptyset$, $11 \leq i \leq 14$. Portanto, estes são todos não-balanceados.

Em Damas *et al.* [14] encontramos os resultados que seguem, relativos a grafos balanceados, aqueles com gap nulo e a grafos não-balanceados.

Lema 6.1.5 [14] *Todo grafo G com n vértices tal que $\mu(G) = n - 1$ é balanceado.*

O grafo G da Figura 6.5 tem 5 vértices e possui $\mu(G) = 5 - 1 = 4$. Portanto, é um grafo balanceado.

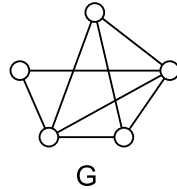


Figura 6.5: Grafo G balanceado.

Lema 6.1.6 [14] *Seja G um grafo conexo com n vértices tal que $\mu(G) \leq n - 2$. Se $\Delta(G) = n - 1$ então G é um grafo não-balanceado.*

Os grafos exibidos na Figura 6.6 possuem $\Delta(G) = n - 1$ e $\mu(G) \leq n - 2$. Do lema anterior, concluímos que estes são não-balanceados.

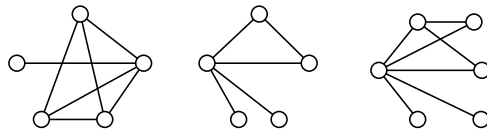


Figura 6.6: Grafos não-balanceados com $\Delta(G) = n - 1$ e $\mu(G) \leq n - 2$.

Proposição 6.1.7 [14] *Seja G um grafo conexo, com n vértices, não-balanceado e com gap nulo. Então $2 \leq \mu(G) \leq n - 2$. O limite superior é atingido se e somente se n é par.*

Proposição 6.1.8 [14] *Seja G um grafo com n vértices e n par. G é um grafo conexo, não-balanceado, com gap nulo e top $\mu(G) = n - 2$ se e somente se G possui $m = \frac{n(n-2)}{2}$ arestas e grau máximo $\Delta(G) = n - 1$.*

O grafo da Figura 6.7 atende as condições da Proposição 6.1.8 e veja que tem $m = \frac{6 \times 4}{2} = 12$ arestas e $\Delta(G) = 5$.

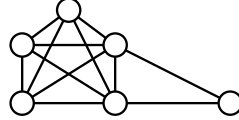


Figura 6.7: Grafo conexo, não-balanceado, com gap nulo e top $n - 2$.

Teorema 6.1.9 [14] *Seja $n > 2$ par. Para qualquer $q \in \mathbb{N}, 2 \leq q \leq n - 2$, existe um grafo com n vértices, não-balanceado, com gap nulo e top $\mu(G) = q$.*

Corolário 6.1.10 [14] *Sejam G_1 e G_2 grafos de ordem n , o primeiro com m_1 arestas e o segundo, com m_2 arestas, ambos não-balanceados e com gap nulo. Se n é par e $\mu(G_2) = \mu(G_1) + 1$ então $m_2 = m_1 + \frac{n}{2}$.*

O conceito de conjunto equilibrador de um grafo foi introduzido por Rodrigues [34], em 1997, para estabelecer regras na distribuição dos graus dos grafos periplanares maximais (casos particulares de grafos cordais planares maximais). Damas *et al.* [14] generalizaram este conceito para grafos não-balanceados.

Definição 6.1.11 [14] *Seja $U = U(G) \subseteq V(G)$, $U \neq \emptyset$, o conjunto de vértices superiores de G e $L = L(G)$ o conjunto de vértices inferiores de G . Se existir Ψ , $\Psi \neq \emptyset$ tal que $\Psi \subseteq L$, para o qual a seguinte equação seja verificada*

$$\mu(G) = \frac{\sum_{t \in \Psi} d_t + \sum_{u \in U} d_u}{|\Psi| + |U|}, \quad (6.1)$$

diz-se que G possui um conjunto equilibrador $\Psi(G) = \Psi$. Caso contrário, G não possui conjunto equilibrador.

Seja Ψ é um conjunto equilibrador de um grafo G , Ψ é denominado *conjunto equilibrador pleno* se $\Psi = L(G) = L$. Se $\Psi \subset L$, dizemos que Ψ é um *conjunto equilibrador próprio*.

A Figura 6.8 exibe um grafo G em que $\bar{d}(G) = 2, 8$, $\mu(G) = 3$ e $h(G) = 1$. Os subconjuntos de vértices balanceados, superiores e inferiores são dados, respectivamente, por $B(G) = \{3, 4\}$, $U(G) = \{1\}$ e $L(G) = \{2, 5\}$.

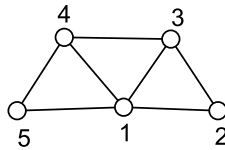


Figura 6.8: Grafo G com conjunto equilibrador próprio $\Psi = \{2\}$.

Pode-se verificar que $\Psi = \{2\}$ é um conjunto equilibrador de G , pois $\sum_{t \in \Psi} d_t = 2$ e $\sum_{u \in U(G)} d_u = 4$. Como $|U(G)| = |\Psi| = 1$, a equação (6.1) é verificada para $\mu(G) = 3$.

Podemos ver que $L(G) = \{2, 5\}$ não é um conjunto equilibrador de G , pois $\sum_{t \in \Psi} d_t = 4$, $\sum_{u \in U(G)} d_u = 4$, $|U| = 1$ e $|\Psi| = 2$, fazendo com que a equação (6.1) não se verifique. Veja que o valor dela resultante é 2.5 que difere de $|\Psi| = 2$.

Conseqüentemente, o grafo da Figura 6.8 não possui um conjunto equilibrador pleno. O grafo H da Figura 6.9 não possui conjunto equilibrador. Veja que $L(H) = \{6\}$ e não é um conjunto equilibrador de H .

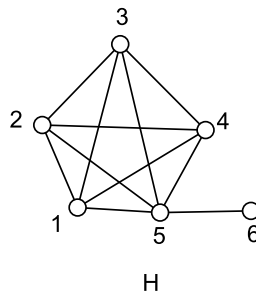


Figura 6.9: Grafo que não possui conjunto equilibrador.

Enquanto o exemplo dado anteriormente nos mostra que nem todo grafo possui conjunto equilibrador, o grafo da Figura 6.10 possui mais de um conjunto equilibrador. Para tal grafo, o conjunto de vértices superiores é $U(G) = \{1\}$ e o de vértices inferiores é $L(G) = \{2, 3, 4, 5, 6, 7\}$. Para $|\Psi(G)| = 1$, somente $\{2\}$ e $\{7\}$ são conjuntos equilibradores de G . Para $|\Psi(G)| = 2$, qualquer subconjunto de L formado por dois vértices de grau 3 é um equilibrador de G .

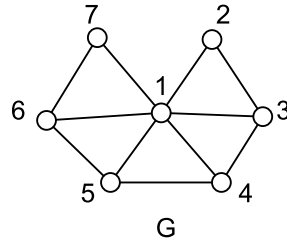


Figura 6.10: Grafo que possui mais de um conjunto equilibrador.

O próximo teorema caracteriza os grafos com gap nulo como aqueles que possuem um único conjunto equilibrador. Neste caso ele é equilibrador pleno, ou seja, $h(G) = 0$ se e somente se $\Psi(G) = L(G)$.

Teorema 6.1.12 [14] *Seja G um grafo qualquer e $L(G)$ seu conjunto de vértices inferiores. G possui um único conjunto equilibrador e este é pleno se e somente se G é um grafo de gap nulo.*

6.2 Grafos $H_{n,k}$ e $G_{n,k}$

Os grafos $H_{n,k}$ e $G_{n,k}$ definidos em 2.2.10 são grafos extremais para a medida espectral $\varepsilon(G)$ quando o número m de arestas é dado. O grafo $G_{n,k}$ é extremal para a medida da variância em $\mathcal{H}(n, n+k)$, para $m = n+k > \frac{1}{2}\binom{n}{2} + n - 1$. A seguir, apresentamos alguns resultados que obtivemos com relação a tais grafos e verificamos se estes são não-balanceados.

Proposição 6.2.1 *Sejam n e k dados, tal que $0 \leq k \leq \frac{n(n-3)}{2} - 1$. Se $G_{n,k} \in \mathcal{H}(n, n+k)$, o top de $G_{n,k}$ é um inteiro entre 2 e $n-1$, ou seja, $2 \leq \mu(G_{n,k}) \leq n-1$. Além disso,*

para n fixo, os tops dos grafos em $\mathcal{H}(n, m)$ é uma função não-decrescente em k , ou seja,

$$\mu(G_{n,0}) \leq \dots \leq \mu(G_{n,k}) \leq \dots \leq \mu(G_{n, \frac{n(n-3)}{2}-1}).$$

Prova: Da Definição 2.2.10, $G_{n,k}$ possui $n + k$ arestas e a média de seu grau é $\bar{d}(G_{n,k}) = 2 + \frac{2k}{n}$. Da hipótese, $0 \leq k \leq \frac{n(n-3)}{2} - 1$. Assim, $2 \leq \bar{d}(G_{n,k}) \leq n - 1 - \frac{2}{n}$. Então, $2 \leq \mu(G_{n,k}) \leq n - 1$. O número de arestas de $G_{n,k+1}$ difere do número de aresta de $G_{n,k}$ por uma unidade apenas. Logo, $\bar{d}(G_{n,k+1}) = \bar{d}(G_{n,k}) + \frac{2}{n}$ e, para todo $0 \leq k \leq \frac{n(n-3)}{2} - 1$, $\mu(G_{n,k}) \leq \mu(G_{n,k+1})$. Portanto, $\mu(G_{n,0}) \leq \dots \leq \mu(G_{n,k}) \leq \dots \leq \mu(G_{n, \frac{n(n-3)}{2}-1})$. ■

A Figura 6.11 exibe todos os grafos $G_{5,k}$ com respectivos tops dados por $2 = \mu(G_{5,0}) < 3 = \mu(G_{5,1}) = \mu(G_{5,2}) < \mu(G_{5,3}) = \mu(G_{5,4}) = 4$.

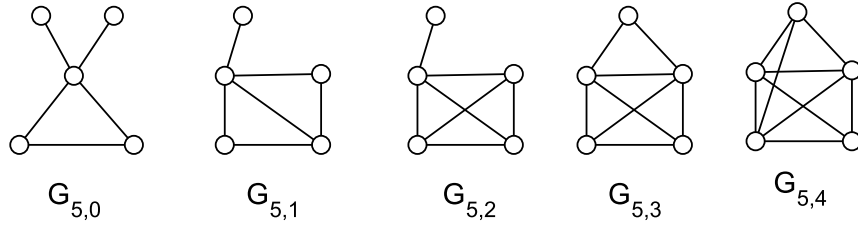


Figura 6.11: Grafos $G_{5,k}$, $0 \leq k \leq 4$.

Da Definição 2.2.10, $\Delta(G_{n,k}) = n - 1$ e da Proposição 6.2.1, segue que $2 \leq \mu(G_{n,k}) \leq n - 1$. Se $\mu(G_{n,k}) = n - 1$, do Lema 6.1.5, $G_{n,k}$ é um grafo balanceado e se $2 \leq \mu(G_{n,k}) \leq n - 2$, do Lema 6.1.6, temos $G_{n,k}$ não-balanceado.

Proposição 6.2.2 *Sejam $n, k \in \mathbb{Z}$, $n \geq 4$ e $0 \leq k \leq \frac{n(n-3)}{2} - 1$ e $G_{n,k} = K_1 \vee QC(n - 1, k + 1)$. Se n é ímpar e $\frac{(n-1)(n-3)}{2} - 1 \leq k \leq \frac{n(n-3)}{2} - 1$ ou se n é par e $\frac{(n-2)^2}{2} - 1 \leq k \leq \frac{n(n-3)}{2} - 1$, tem-se que o grafo $G_{n,k}$ é balanceado.*

Prova: Faremos a prova para o caso n ímpar. A prova no caso n par é semelhante. Da hipótese geral, $n, k \in \mathbb{Z}$, $n \geq 4$ e $0 \leq k \leq \frac{n(n-3)}{2} - 1$. Da Definição 2.2.10, $G_{n,k} = K_1 \nabla QC(n - 1, k + 1)$ e $\Delta(G_{n,k}) = n - 1$. Suponhamos n ímpar e $0 \leq k \leq \frac{(n-1)(n-3)}{2} - 2$. Da Proposição 6.2.1, $\mu(G_{n,k})$ é uma função não-decrescente

de k . Logo, precisamos somente determinar o valor de $\mu(G_{n,k})$ no caso em que $k = \frac{(n-1)(n-3)}{2} - 2$. Como n é ímpar e k é inteiro, $\mu(G_{n, \frac{(n-1)(n-3)}{2} - 2}) = n - 2$. Portanto, para todo $0 \leq k \leq \frac{(n-1)(n-3)}{2} - 2$, $G_{n, \frac{(n-1)(n-3)}{2} - 2}$ é não-balanceado. Tomemos agora $k = \frac{(n-1)(n-3)}{2} - 1$. É fácil provar que, $\mu(G_{n, \frac{(n-1)(n-3)}{2} - 1}) = n - 1$. Isto implica que $U = \emptyset$ e o grafo é balanceado. Sendo $n - 1$ o máximo valor possível para $\mu(G_{n,k})$, da Proposição 6.2.1, para todo k , $\frac{(n-1)(n-3)}{2} - 1 \leq k \leq \frac{n(n-3)}{2} - 1$, temos $\mu(G_{n,k}) = n - 1$. Logo, outra vez, $U = \emptyset$ e os grafos são balanceados. ■

De acordo com a Proposição 6.2.2 temos que para um k relativamente grande os grafos $G_{n,k}$ são balanceados. Para $n \leq 20$, realizamos alguns testes, onde pudemos confirmar o que a nossa intuição sugere, ou seja, que o valor das medidas de irregularidade estudadas decresce a partir do valor de k na qual $G_{n,k}$ torna-se balanceado. A Tabela 6.1 exemplifica este fato para um grafo com 12 vértices.

$G_{12,k}$ $\frac{(n-2)^2}{2} - 1 \leq k \leq \frac{n(n-3)}{2} - 1$	$\sigma(G_{12,k})$	$\varepsilon(G_{12,k})$	$irr(G_{12,k})$	$s(G_{12,k})$
$G_{12,49}$	1.8	0.158	35	10
$G_{12,50}$	1.22	0.104	32	9.33
$G_{12,51}$	0.75	0.06	26	8
$G_{12,52}$	0.38	0.03	20	6
$G_{12,53}$	0.13	0.01	11	3.33

Tabela 6.1: Valores das medidas de irregularidade para $G_{12,k}$ balanceados.

Da Proposição 6.2.1 chega-se também que, para cada n , os tops dos grafos $H_{n,k}$ também são não-decrescentes em função de k .

Corolário 6.2.3 *Para todo $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 3$, e para todo k , $0 \leq k \leq n - 3$, tem-se*

$$\mu(H_{n,0}) \leq \dots \leq \mu(H_{n,k}) \leq \dots \leq \mu(H_{n,n-3}).$$

Prova: Análoga à prova da Proposição 6.2.1. ■

A Figura 6.12 exhibe todos os grafos $H_{7,k}$, $0 \leq k \leq 4$, cujos respectivos tops são $2 = \mu(H_{7,0}) < 3 = \mu(H_{7,1}) = \mu(H_{7,2}) = \mu(H_{7,3}) < 4 = \mu(H_{7,4})$.

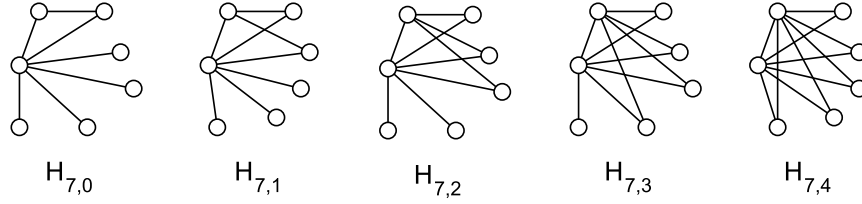


Figura 6.12: Grafos $H_{7,k}$, $0 \leq k \leq 4$.

Proposição 6.2.4 Para $n \geq 7$ e $0 \leq k \leq n - 3$, seja $H_{n,k} \in \mathcal{H}(n, n + k)$. Para n par,

$$\mu(G) = \begin{cases} 2, & \text{se } k = 0; \\ 3, & \text{se } 1 \leq k \leq \frac{n}{2}; \\ 4, & \text{se } \frac{n}{2} + 1 \leq k \leq n - 3; \end{cases}$$

Para n ímpar,

$$\mu(G) = \begin{cases} 2, & \text{se } k = 0; \\ 3, & \text{se } 1 \leq k \leq \frac{n+1}{2} - 1; \\ 4, & \text{se } \frac{n+1}{2} \leq k \leq n - 3. \end{cases}$$

Prova: Para n par, o grafo $H_{n,k}$ possui $n + k$ arestas e tem média dos graus igual a $2 + \frac{2k}{n}$. Se $k = 0$, então $\bar{d}(G) = \mu(G) = 2$. Se $k = 1$ ou $k = \frac{n}{2}$ então $\mu(G) = 3$. Para $1 \leq k \leq \frac{n}{2}$, do Corolário 6.2.3, $\mu(G) = 3$. Para $n > 6$, se $k = \frac{n}{2} + 1$ ou $k = n - 3$ então $\mu(G) = 4$. Portanto, do Corolário 6.2.3, $\mu(G) = 4$, para todo $k = \frac{n}{2} + 1 \leq k \leq n - 3$. Para n ímpar, a prova segue de forma similar a esta. ■

O próximo lema mostra que todos os grafos $H_{n,k}$ são não-balanceados, exceto para $H_{3,0}$ e $H_{4,1}$.

Lema 6.2.5 Exceto para os grafos $H_{3,0}$ e $H_{4,1}$, todos os demais $H_{n,k}$ são grafos não-balanceados.

Prova: Os grafos $H_{3,0}$ e $H_{4,1}$ tem seu respectivos graus máximos e tops dado por $\Delta(H_{3,0}) = \mu(H_{3,0}) = 2$ e $\Delta(H_{4,1}) = \mu(H_{4,1}) = 3$. Portanto, $H_{3,0}$ e $H_{4,1}$ são balanceados. Agora, para $n = 5$, $\Delta(H_{5,k}) = 4$ e se $0 \leq k \leq 2$, da Proposição 6.2.4, $\mu(H_{5,k}) = 2$ ou 3 . Em ambos os casos, $U(H_{5,k}) \neq \emptyset$ e o grafo é não-balanceado.

Para $n = 6$, $\Delta(H_{6,k}) = 5$ e se $0 \leq k \leq 3$, da Proposição 6.2.4, temos que $\mu(H_{6,k}) = 2$ ou $\mu(H_{6,k}) = 3$. Novamente, obtemos $U(H_{6,k}) \neq \emptyset$ e $H_{n,k}$ é não-balanceado. Finalmente, para $n \geq 7$, da Proposição 6.2.4 segue que $\mu(H_{n,k}) \in \{2, 3, 4\}$. Nestes casos, $\Delta(H_{n,k}) \geq 6$, implicando que o conjunto de vértices superiores é não vazio. Logo o grafo é não balanceado, o que completa a prova. ■

Lema 6.2.6 *Sejam $n, k \in \mathbb{N}$ e $h(H_{n,k})$ o gap de $H_{n,k} \in \mathcal{H}(n, n+k)$.*

- i) *Se $n \geq 8$ é par e $0 \leq k \leq n-3$, então $0 \leq h(H_{n,k}) \leq n-2$, para $0 \leq k \leq \frac{n}{2}$ e $6 \leq h(H_{n,k}) \leq n-2$, para $\frac{n}{2} + 1 \leq k \leq n-3$;*
- ii) *Se $n \geq 7$ é ímpar e $0 \leq k \leq n-3$, então $0 \leq h(H_{n,k}) \leq n-2$, para $0 \leq k \leq \frac{n+1}{2} - 1$ e $6 \leq h(H_{n,k}) \leq n-1$, para $\frac{n+1}{2} \leq k \leq n-3$.*

Prova:

- i) No caso em que $k = 0$, temos $\mu(H_{n,k}) = 2$ e $h(H_{n,k}) = 0$. Para $1 \leq k \leq \frac{n}{2}$, temos $\mu(G) = 3$. Se $k = 1$, $h(H_{n,k}) = n-2$ e se $k = \frac{n}{2}$, $h(H_{n,k}) = 0$. Como, para todo $1 \leq k \leq \frac{n}{2}$, $h(H_{n,k+1}) = n(\mu(H_{n,k+1}) - \bar{d}(H_{n,k+1}))$ e $\bar{d}(H_{n,k+1}) = \bar{d}(H_{n,k}) + \frac{2}{n}$ então $h(H_{n,k+1}) = h(H_{n,k}) - 2$. Logo, $\forall 1 \leq k \leq \frac{n}{2}$, $h(H_{n,k+1}) < h(H_{n,k})$, e portanto, $0 \leq h(H_{n,k}) \leq n-2$. Para $\frac{n}{2} + 1 \leq k \leq n-3$, $\mu(G) = 4$. Se $k = \frac{n}{2} + 1$, $h(H_{n,k}) = n-2$ e se $k = n-3$, $h(H_{n,k}) = 6$. De modo similar, chega-se que $\forall \frac{n}{2} + 1 \leq k \leq n-3$, $h(H_{n,k+1}) < h(H_{n,k})$. Portanto, $6 \leq h(H_{n,k}) \leq n-2$.
- ii) A prova segue de maneira análoga ao item anterior. ■

O Lema 6.2.7 nos dá a cardinalidade dos conjuntos de vértices inferiores, balanceados e superiores para o $H_{n,k}$.

Lema 6.2.7 *Para todo $0 \leq k \leq n-3$, seja o grafo $H_{n,k}$ tal que $L(H_{n,k}) = L$, $U(H_{n,k}) = U$ e $B(H_{n,k}) = B$.*

- i) *Para $n \geq 8$ par, se $k = 0$, temos $|L| = n-3$, $|B| = 2$ e $|U| = 1$; se $k = 1$, $|L| = n-2$, $|B| = 1$ e $|U| = 1$ e se $2 \leq k \leq n-3$ $|L| = n-2$, $|B| = 0$ e $|U| = 2$.*

ii) Para $n \geq 7$ ímpar, se $k = 0$, $|L| = n - 3$, $|B| = 2$ e $|U| = 1$; se $k = 1$, tem-se $|L| = n - 2$, $|B| = 1$ e $|U| = 1$ e se $2 \leq k \leq n - 3$, temos $|L| = n - 2$, $|B| = 0$ e $|U| = 2$;

Prova:

i) Para $n \geq 8$ par, os casos em que $k = 0$ e $k = 1$ seguem imediatos da Proposição 6.2.4. Vamos provar o caso mais geral, ou seja, aquele em que $2 \leq k \leq \frac{n}{2}$. Assim, $H_{n,k}$ possui 1 vértice de grau $n - 1$; $k + 1$ vértices de grau 2; 1 vértice de grau $k + 2$ e $n - k - 3$ vértices de grau 1. Da Proposição 6.2.4, $\mu(H_{n,k}) = 3$. Como $2 \leq k \leq \frac{n}{2}$, o vértice de grau $k + 2 \in U$. Portanto, $|L| = n - 2$; $|B| = 0$ e $|U| = 2$. No caso em que $\frac{n}{2} + 1 \leq k \leq n - 3$, $H_{n,k}$ possui 1 vértice de grau $n - 1$; $k + 1$ vértices de grau 2; 1 vértice de grau $k + 2$ e $n - k - 3$ vértices de grau 1. Da Proposição 6.2.4 chegamos a $\mu(H_{n,k}) = 4$. Como $\frac{n}{2} + 1 \leq k \leq n - 3$, o vértice de grau $k + 2 \in U$. Logo, $|L| = n - 2$; $|B| = 0$ e $|U| = 2$.

ii) A prova é análoga a anterior. ■

Para os casos em que $k = 0$ ou $k = 1$, os grafos $H_{n,k}$ e $G_{n,k}$ são isomorfos. A partir dessa observação, obtivemos os Lemas 6.2.8 e 6.2.9.

Lema 6.2.8 *Sejam $n \geq 5$ e $k = 0$. Temos que $H_{n,0} \cong G_{n,0}$ são grafos não-balanceados, com gap nulo e com um único conjunto equilibrador, que é um conjunto equilibrador pleno.*

Prova: Do Lema 6.2.5, $H_{n,0}$ é não-balanceado. Como $\mu(H_{n,0}) = \bar{d}(H_{n,0}) = 2$ temos que seu gap é nulo. Do Teorema 6.1.12, $H_{n,0}$ possui um único conjunto equilibrador e este é um conjunto equilibrador pleno. ■

Lema 6.2.9 *Para $n \geq 7$ e $k = 1$, $H_{n,1} \cong G_{n,1}$ são grafos não-balanceados e possuem conjuntos equilibradores não vazios.*

Prova: Seja $n \geq 7$. Do Lema 6.2.5, $H_{n,1}$ é não-balanceado. Sendo, neste caso, $k = 1$, das Proposições 6.2.4 e 6.2.7 chegamos a $\mu(H_{n,1}) = 3$ e $|L(H_{n,1})| = n - 2$ com

$n - 4$ vértices de grau 1 e 2 vértices de grau 2. Desde que $n \geq 7$, tem-se $\mu(H_{n,1}) = 3$ com $H_{n,1}$ que possui um único vértice universal. Disso decorre que $|U(H_{n,1})| = 1$. Vejamos se $H_{n,1}$ possui algum conjunto equilibrador não vazio. Para isso precisamos considerar os dois possíveis casos. Suponha que $\Psi \subset L(H_{n,1})$ com t_1 vértices de grau 1 e um vértice de grau 2. Da expressão 6.1, chegamos a $t_1 = \frac{n-5}{2}$. O segundo caso possível é Ψ ter t_2 vértices de grau 1 e dois vértices de grau 2. Analogamente, da expressão 6.1, chegamos a $t_2 = \frac{n-6}{2}$. Dado que t_1, t_2 são números naturais, a cardinalidade de cada equilibrador só pode ser satisfeita por t_1 , quando n é ímpar, e por t_2 , quando n é par. Por construção, é fácil realizar grafos $H_{n,1}$ com mais de um conjunto equilibrador não vazio. ■

O Lema 6.2.5 mostra que todos os grafos $H_{n,k}$ são não-balanceados com exceção dos grafos $H_{3,0}$ e $H_{4,0}$, constatando assim, a nossa intuição de que grafos extremais são não-balanceados.

6.3 Grafos Abacaxi, Quase-Estrela, Abano Split Completo e Caminho Completo

Os grafos abacaxi foram definidos no Capítulo 3 e, conforme a Conjectura 3.1.7 apresentada na Seção 3.1, tais grafos são esperados ser extremais para medida espectral $\varepsilon(G)$. Nesta seção mostramos que, para n fixo, o top dos grafos abacaxi define uma função monótona não-decrescente. Além disso, vamos provar que, para $1 \leq k \leq n - 1$, os grafos abacaxi são não-balanceados. Estudo semelhante será feito para os grafos quase-estrela e abano split completo, definidos no Capítulo 3 e para os grafos caminho completos, definidos no Capítulo 4.

Proposição 6.3.1 *Seja n dado e para k , $1 \leq k \leq n$, seja $PA(n, k)$ um grafo abacaxi. Então, $2 \leq \mu(PA(n, k)) \leq n - 1$ e, além disso,*

$$\mu(PA(n, 1)) \leq \dots \leq \mu(PA(n, k)) \leq \dots \leq \mu(PA(n, n)).$$

Prova: Pela Definição 3.1.6, o grafo abacaxi possui $\frac{k^2-3k+2n}{2}$ arestas. Logo, $\bar{d}(PA(n, k)) = 2 + \frac{k(k-3)}{n}$. Desde que $1 \leq k \leq n$, tem-se $2 \leq \bar{d}(PA(n, k)) \leq n - 1$. Logo, $2 \leq \mu(PA(n, k)) \leq n - 1$. Como $\bar{d}(PA(n, k + 1)) = \bar{d}(PA(n, k)) + \frac{2(k-1)}{n}$, segue que para todo $1 \leq k \leq n$, $\mu(PA(n, k)) \leq \mu(PA(n, k + 1))$. Portanto, $\mu(PA(n, 1)) \leq \dots \leq \mu(PA(n, k)) \leq \dots \leq \mu(PA(n, n))$. ■

Proposição 6.3.2 *Para $n, k \in \mathbb{N}$, $n \geq 4$ e $1 \leq k \leq n - 1$, todo grafo $PA(n, k)$ é não-balanceado.*

Prova: Da Definição 3.1.6, $\Delta(PA(n, k)) = n - 1$. Para $k = 1$, $\mu(PA(n, 1)) = 2$. Se $k = n - 1$, tem-se $\bar{d}(PA(n, 1)) = n - 3 + \frac{4}{n}$. Logo, para $n \geq 4$, $\mu(PA(n, n - 1)) = n - 2$. Da Proposição 6.3.1, segue-se que $\mu(PA(n, 1)) \leq \dots \leq \mu(PA(n, k)) \leq \dots \leq \mu(PA(n, n - 1))$. Assim, para $n \geq 4$ e $1 \leq k \leq n - 1$, temos $\Delta(PA(n, k)) = n - 1$ e $U(PA(n, k)) \neq \emptyset$. Portanto, o grafo $PA(n, k)$ é não-balanceado. ■

Os grafos quase-estrela foram definidos na Seção 3.1. Caracterizamos aqui, situações para os quais tais grafos são balanceados ou não-balanceados. Não é difícil verificar que para os grafos $QS(n, m)$, o top determina uma função não-crescente de m . A proposição seguinte nos dá as condições para que um grafo quase-estrela seja não-balanceado.

Proposição 6.3.3 *Sejam $n, m, d, t \in \mathbb{N}$, tais que $n \geq 3$, $d = n - 1$, $0 \leq t < d < n$ e $m = \binom{n}{2} - \binom{d}{2} - t$. O grafo quase-estrela $QS(n, m)$ é não-balanceado, se uma das condições abaixo for satisfeita:*

$$i) \ n \text{ par} \begin{cases} \mu(QS(n, m)) = 2 & \text{se } 0 \leq t \leq \frac{n-2}{2} - 1; \\ \mu(QS(n, m)) = 1 & \text{se } \frac{n-2}{2} \leq t < n - 2. \end{cases}$$

$$ii) \ n \text{ ímpar} \begin{cases} \mu(QS(n, m)) = 2 & \text{se } 0 \leq t \leq \frac{n-1}{2} - 1; \\ \mu(QS(n, m)) = 1 & \text{se } \frac{n-1}{2} \leq t < n - 2. \end{cases}$$

Prova:

i) Considere n par e $d = n - 1$. Assim, $\bar{d}(QS(n, m)) = \frac{n(n-1)}{n} - \frac{(n-1)(n-2)}{n} - \frac{2t}{n}$. Se $t = 0$, $\bar{d}(QS(n, m)) = \frac{2(n-1)}{n}$ e $\mu(QS(n, m)) = 2$. Se $t = \frac{n-2}{2} - 1$, $\bar{d}(QS(n, m)) = \frac{n+2}{n}$ e $\mu(QS(n, m)) = 2$. Para n dado, o top de $QS(n, m)$ determina uma função não-crescente de m . Logo, para $0 \leq t \leq \frac{n-2}{2} - 1$, $\mu(QS(n, m)) = 2$ e, se $t = \frac{n-2}{2}$, $\bar{d}(QS(n, m)) = 1$ e $\mu(QS(n, m)) = 1$. Se $t = n - 2$, $\bar{d}(QS(n, m)) = \frac{2}{n}$ e $\mu(QS(n, m)) = 1$. Novamente, para todo t , $\frac{n-2}{2} \leq t \leq n - 2$, temos que $\mu(QS(n, m)) = 1$. Como por hipótese $d = n - 1$, da Definição 3.2.1, $\Delta(QS(n, m)) = n - t - 1$. Logo, o único grafo balanceado $QS(n, m)$ é aquele para o qual $t = n - 2$.

ii) O caso ímpar procede de maneira similar. ■

Pela Proposição 6.3.3 temos que o grafo $QS(n, m)$ é balanceado para $d = n - 1$ e $t = n - 2$.

Os grafos abano split completo foram definidos no Capítulo 3 e estes são, de acordo com o Teorema 3.3.3, extremais para a medida não-balanceada. Não é difícil verificar que o top de tais grafos determina uma função não-crescente em k . É importante destacar que os grafos $SCF(n, 1, t)$ são isomorfos aos $H_{n,q}$, para $1 \leq t \leq n - 2$ e $0 \leq q \leq n - 3$. Portanto, da Proposição 6.2.5, temos que, para todo $1 \leq t \leq n - 2$, $SCF(n, 1, t)$ são não-balanceados, exceto quando se tem os grafos $SCF(3, 1, 1)$ e $SCF(4, 1, 2)$. Infelizmente, não conseguimos identificar uma expressão algébrica de modo que o grafo abano split completo seja balanceado. Numericamente obtivemos para $4 \leq n \leq 54$, os valores de k para os quais este grafos são balanceados. A Tabela 6.2 apresenta em duas colunas os intervalos de n e k para os quais os grafos $SCF(n, k, t)$ são balanceados.

$SCF(n, k, t)$ balanceados	
n	k
$4 \leq n \leq 6$	$n - 2 \leq k \leq n$
$7 \leq n \leq 12$	$n - 3 \leq k \leq n$
$13 \leq n \leq 20$	$n - 4 \leq k \leq n$
$21 \leq n \leq 30$	$n - 5 \leq k \leq n$
$31 \leq n \leq 42$	$n - 6 \leq k \leq n$
$43 \leq n \leq 54$	$n - 7 \leq k \leq n$

Tabela 6.2: Grafos abano split completo balanceados.

Para $n \leq 20$, utilizando os resultados da Tabela 6.2, pudemos constatar que o valor das medidas de irregularidade estudadas decresce a partir do valor de k na qual $SCF(n, k, t)$ torna-se balanceado. A Tabela 6.3 exemplifica este fato para grafos abano split completo com 8 vértices.

$G = SCF(8, k, t), 0 \leq t \leq n - k - 1$	$\sigma(G)$	$\varepsilon(G)$	$irr(G)$	$s(G)$
$SCF(8, 5, 0)$	0.93	0.108	30	7.5
$SCF(8, 5, 1)$	0.5	0.06	20	5
$SCF(8, 5, 2) = SCF(8, 6, 0)$	0.18	0.02	12	3
$SCF(8, 6, 1) = SCF(8, 7, 0) = K_8$	0	0	0	0

Tabela 6.3: Valores das medidas de irregularidade para os grafos $SCF(8, k, t)$ balanceados.

Damas, em sua tese de doutorado[13] obteve resultados para o top, o gap e o conjunto equilibrador dos grafos $PC_{n,1,t}$, para $1 \leq t \leq n - 2$. Neste trabalho, consideramos os grafos $PC_{n,p,t}$, para $n, p \in \mathbb{N}$, tais que $1 \leq p \leq n - 2$ e $t = 1$. O número de arestas de $PC_{n,p,1}$ é $E(PC_{n,p,1}) = \frac{(n-1)(n-2)}{2} + p$, o grau máximo é $\Delta(PC_{n,p,1}) = n - 1$ e o grau mínimo, $\delta(PC_{n,p,1}) = p$. A Figura 6.3 exhibe todos os grafos $PC_{n,p,1}$ para $n = 6$.

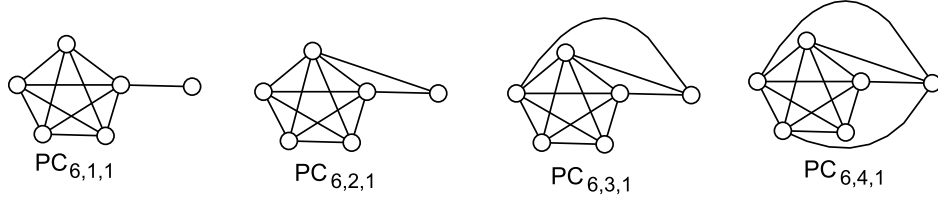


Figura 6.13: $PC_{6,p,1}$ -caminho-completos para $1 \leq p \leq 4$.

Proposição 6.3.4 Para $n, p \in \mathbb{N}$, tal que $1 \leq p \leq n - 2$, o top dos grafos $PC_{n,p,1}$ são assim dados:

$$i) \text{ Se } n \text{ par, } \mu(PC_{n,p,1}) = \begin{cases} n - 2, & \text{se } 1 \leq p \leq \frac{n-2}{2}; \\ n - 1, & \text{se } \frac{n-2}{2} + 1 \leq p \leq n - 2. \end{cases}$$

$$ii) \text{ Se } n \text{ ímpar, } \mu(PC_{n,p,1}) = \begin{cases} n - 2, & \text{se } 1 \leq p \leq \frac{n-3}{2}; \\ n - 1, & \text{se } \frac{n-3}{2} + 1 \leq p \leq n - 2. \end{cases}$$

Prova:

i) Da Proposição 6.1.8, se o número de arestas de $PC_{n,p,1}$ é igual a $\frac{n(n-2)}{2}$, $PC_{n,p,1}$ é um grafo não-balanceado com gap nulo e $\mu(PC_{n,p,1}) = n - 2$. Assim,

$$\frac{(n-1)(n-2)}{2} + p = \frac{n(n-2)}{2} \Rightarrow p = \frac{n-2}{2}.$$

Portanto, o grafo $PC_{n, \frac{n-2}{2}, 1}$ tem gap nulo, é não-balanceado e seu top é $\mu(PC_{n, \frac{n-2}{2}, 1}) = n - 2$. Para $1 \leq j \leq n - 3$, $\bar{d}(PC_{n, j+1, 1}) = \bar{d}(PC_{n, j, 1}) + \frac{2}{n}$. Assim, para $2 < p < \frac{n-2}{2} - 1$, $\mu(PC_{n, 1, 1}) \leq \mu(PC_{n, p, 1}) \leq \mu(PC_{n, \frac{n-2}{2}, 1})$. Dado que $\mu(PC_{n, 1, 1}) = n - 2$, para $1 \leq p \leq \frac{n-2}{2}$, $\mu(PC_{n, p, 1}) = n - 2$.

Se $\frac{n-2}{2} + 1 \leq p \leq n - 2$, tem-se $\mu(PC_{n, \frac{n-2}{2}+1, 1}) \leq \mu(PC_{n, p, 1}) \leq \mu(PC_{n, n-2, 1})$. Como, $\mu(PC_{n, \frac{n-2}{2}+1, 1}) = n - 1$ e $\forall \frac{n-2}{2} + 1 \leq p \leq n - 2$, $\mu(PC_{n, n-2, 1}) = \left\lceil \frac{(n-1)(n-2)+2(n-2)}{n} \right\rceil = n - 1$, chega-se a $\mu(PC_{n, p, 1}) = n - 1$.

ii) Como, $\mu(PC_{n, \frac{n-3}{2}, 1}) = n - 2$ e, $\mu(PC_{n, \frac{n-3}{2}+1, 1}) = n - 1$ segue que, $\forall 1 \leq p \leq \frac{n-3}{2}$, $\mu(PC_{n, p, 1}) = n - 2$, e quando $\forall \frac{n-3}{2} + 1 \leq p \leq n - 2$, temos $\mu(PC_{n, p, 1}) = n - 1$.

■

Dos Lemas 6.1.5 e 6.1.6, concluímos que $PC_{n,p,1}$ são grafos balanceados quando $\mu(PC_{n,p,1}) = n - 1$ e são não-balanceados, quando $\mu(PC_{n,p,1}) = n - 2$. Por outro lado, $PC_{n,p,1}$ é não-balanceado e com gap nulo somente se n é par e $p = \frac{n-2}{2}$. Se $\mu(PC_{n,p,1}) = n - 2$, o gap de $PC_{n,p,1}$ é $h(PC_{n,p,1}) = n - 2 - 2p$ e se $\mu(PC_{n,p,1}) = n - 1$, o gap é $h(PC_{n,p,1}) = 2n - 2 - 2p$. O Lema 6.3.5 dá um limite para o gap de tais grafos em função dos seus respectivos números de vértices.

Lema 6.3.5 *Dado $n \geq 4$, para todo $1 \leq p \leq n - 2$, seja o grafo $PC_{n,p,1}$.*

$$i) \text{ Se } n \text{ é par } \begin{cases} 0 \leq h(PC_{n,p,1}) \leq n - 4, & \text{se } 1 \leq p \leq \frac{n-2}{2}; \\ 2 \leq h(PC_{n,p,1}) \leq n - 2, & \text{se } \frac{n-2}{2} + 1 \leq p \leq n - 2. \end{cases}$$

$$ii) \text{ Se } n \text{ é ímpar } \begin{cases} 1 \leq h(PC_{n,p,1}) \leq n - 4, & \text{se } 1 \leq p \leq \frac{n-3}{2}; \\ 2 \leq h(PC_{n,p,1}) \leq n - 1, & \text{se } \frac{n-3}{2} + 1 \leq p \leq n - 2. \end{cases}$$

Prova:

i) Considere n par e $1 \leq p \leq \frac{n-2}{2}$. Da Proposição 6.3.4, tem-se $\mu(PC_{n,p,1}) = n - 2$. Assim, $h(PC_{n,p,1}) = n - 2 - 2p$. Se $p = 1$ então $h(PC_{n,p,1}) = n - 4$. Se $p = \frac{n-2}{2}$, $h(PC_{n,p,1}) = 0$. Para $1 \leq p \leq \frac{n-2}{2}$, $h(PC_{n,p+1,1}) = n(\mu(PC_{n,p+1,1}) - \bar{d}(PC_{n,p+1,1}))$ e $\bar{d}(PC_{n,p+1,1}) = \bar{d}(PC_{n,p,1}) + \frac{2}{n}$. Daí chegamos a $h(PC_{n,p+1,1}) = h(PC_{n,p,1}) - 2$. Logo, $h(PC_{n,p+1,1}) < h(PC_{n,p,1})$ e, portanto, $0 \leq h(PC_{n,p,1}) \leq n - 4$.

Agora, considere $\frac{n-2}{2} + 1 \leq p \leq n - 2$. Novamente da Proposição 6.3.4 tem-se $\mu(PC_{n,p,1}) = n - 1$. Assim, $h(PC_{n,p,1}) = 2n - 2 - 2p$. Se $p = \frac{n-2}{2} + 1$, $h(PC_{n,p,1}) = n - 2$. Se $p = n - 2$ então $h(PC_{n,p,1}) = 2$. De maneira análoga feita anteriormente, $\forall \frac{n-2}{2} + 1 \leq p \leq n - 3$, temos $h(PC_{n,p+1,1}) < h(PC_{n,p,1})$. Portanto, $\forall \frac{n-2}{2} + 1 \leq p \leq n - 2$, $2 \leq h(G) \leq n - 2$.

ii) A prova segue de maneira similar ao caso i). ■

Lema 6.3.6 *Dentre todos os grafos $PC_{n,p,1}$, $1 \leq p \leq n - 2$, os únicos grafos não-balanceados que possuem conjunto equilibrador são os caminho-completo em que n é par e $p = \frac{n-2}{2}$, $PC_{n, \frac{n-2}{2}, 1}$. Além disso, o conjunto equilibrador é pleno.*

Prova:

O grafo $PC_{n,p,1}$ possui 1 vértice de grau p , p vértices de grau $n - 1$ e $(n - p - 1)$ vértices de grau $n - 2$. Sabemos que grafos balanceados possuem conjunto equilibrador vazio, mas os não-balanceados podem ou não possuir conjunto equilibrador vazio. De acordo com os Lemas 6.1.5 e 6.1.6, temos dois casos a considerar:

(i) n par e $1 \leq p \leq \frac{n-2}{2}$;

(ii) n ímpar e $1 \leq p \leq \frac{n-3}{2}$.

Em ambos os casos, $\mu(PC_{n,p,1}) = n - 2$. Assim, $|U(PC_{n,p,1})| = p$, $|B(PC_{n,p,1})| = n - p - 1$ e $|L(PC_{n,p,1})| = 1$. Como $|L(PC_{n,p,1})| = 1$, se $PC_{n,p,1}$ possuir conjunto equilibrador não vazio, este tem que ser pleno. Logo, $\Psi = L(PC_{n,p,1})$. Da expressão 6.1 é fácil chegar que, neste caso, $p = \frac{n-2}{2}$. Portanto, $PC_{n, \frac{n-2}{2}, 1}$ é o único grafo não-balanceado que possui conjunto equilibrador não vazio, sendo este equilibrador pleno. ■

As Tabelas 6.4 e 6.5 apresentam um resumo dos resultados obtidos deste capítulo.

Medida de Irregularidade	Grafo Extremal	Restrições		Referência
$\varepsilon(G)/\sigma(G)$	$G_{n,k}$	$\frac{(n-2)^2}{2}-1 \leq k \leq \frac{n(n-3)}{2}-1$, se n é par $\frac{(n-1)(n-3)}{2}-1 \leq k \leq \frac{n(n-3)}{2}-1$ se n é ímpar	Balanceados	Proposição 6.2.2
$\varepsilon(G)$	$H_{n,k}$	$n = 3; k = 0$ $n = 4; k = 1$	Balanceados	Proposição 6.2.5
$\sigma(G)$	$QS(n, m)$	$d = n - 1; t = n - 2$	Balanceados	Proposição 6.3.3
$irr(G)$	$SCF(n, k, t)$	$4 \leq n \leq 6; n - 2 \leq k \leq n$ $7 \leq n \leq 12; n - 3 \leq k \leq n$ $13 \leq n \leq 20; n - 4 \leq k \leq n$ $21 \leq n \leq 30; n - 5 \leq k \leq n$ $31 \leq n \leq 42; n - 6 \leq k \leq n$ $43 \leq n \leq 54; n - 7 \leq k \leq n$	Balanceados	Numericamente observado $4 \leq n \leq 54$ $0 \leq t \leq n - k - 1$

Tabela 6.4: Grafos extremais para $\varepsilon(G)$, $\sigma(G)$ e $irr(G)$ balanceados

Medida de Irregularidade	Classe de Grafos	Grafos	Restrições		Referências
$\varepsilon(G)$ /Conjectura 3.1.7	$\mathcal{H}(n)$	$PA(n, k)$	$n \geq 4$ e $1 \leq k \leq n - 1$	não-balanceados	Proposição 6.3.2
$\varepsilon(G)$ / Conjectura 4.1.7	$PC_{n,p,1}$	$PC_{n,p,1}$	$1 \leq p \leq \frac{n-2}{2}$ se n é par $1 \leq p \leq \frac{n-3}{2}$ se n é ímpar	não-balanceados	Lemas 6.1.5 e 6.1.6 e Proposição 6.3.4

Tabela 6.5: Grafos não-balanceados

Capítulo 7

Considerações Finais

A primeira contribuição desta tese está no Capítulo 3 onde reunimos os principais resultados referentes aos invariantes utilizados como medida de irregularidade existentes na literatura. Neste mesmo capítulo, apresentamos uma alternativa de prova de resultado conhecido dado na Proposição 3.2.2 e também para o Lema 3.2.3. Finalmente, embora não tenhamos conseguido provar a Conjectura 3.3.4, mostramos que ela é verdadeira para os grafos abacaxi e os grafos conexos antiregulares até 12 vértices.

Os resultados apresentados no Capítulo 4 são todos originais. Nas Proposições 4.1.2 e 4.1.3 provamos que os grafos $PC_{n,p,1}$ são os extremais para as medidas do desvio dos graus e variância. Com respeito a $irr(PC_{n,p,1})$, outros grafos extremais foram obtidos, indicando ser este invariante não comparável aos 2 anteriores com relação a irregularidade dos grafos. Em contraponto a isto, concluímos que os invariantes $irr(G)$ e $s(G)$ são equivalentes quando G é um grafo split completo, dado que provamos que $irr(SC(n, k)) = \frac{n}{2}s(SC(n, k))$. Portanto, os grafos extremais na classe dos $SC(n, k)$ são iguais para ambas as medidas $irr(G)$ e $s(G)$. Já para a medida $\sigma(SC(n, k))$, determinamos a existência de outros grafos extremais distintos daqueles obtidos para $irr(G)$ e $s(G)$, como é possível conferir no Teorema 4.2.3. As Tabelas 4.2 e 4.3 apresentam um resumo dos resultados obtidos naquele capítulo. Tais resultados foram incluídos num artigo submetido à revista Pesquisa Operacional e apresentado no congresso "Conference on Applications of Graph Spectra in Com-

puter Science" em Barcelona-Espanha, no mês de julho de 2012. No Capítulo 5, apresentamos uma nova medida de irregularidade $I(G)$, envolvendo a energia e energia laplaciana sem sinal. Além disso, estalecemos a Conjectura 5.1.3 que determina o grafo mais irregular para $I(G)$ dentre todos os grafos conexos.

No Capítulo 6, uma outra contribuição nossa aparece quando determinamos expressões matemáticas para o top e o gap de grafos extremais para as medidas de irregularidade $\varepsilon(G)$, $\sigma(G)$ e $irr(G)$. Isto nos levou a concluir que para quase todas as classes de grafos extremais estudadas, a maioria dos grafos pertencentes a cada classe são não-balanceados o que pode ser observado na Tabela 6.4. Parte destes resultados foram publicados em Oliveira *et al.* [31].

Finalmente, à época de concluir esta tese, encontramos uma outra medida de irregularidade definida, em 2010, por Estrada [15]. O autor considerou como medida de irregularidade de um grafo o "índice de heterogeneidade" dado por $\rho'(G) = \sum_{(i,j) \in E} (d_i^{-\frac{1}{2}} - d_j^{-\frac{1}{2}})^2$. Se o grafo G é regular, então $\rho'(G) = 0$. E o índice $\rho'(G)$ aumenta de valor quando as diferenças entre os graus dos vértices adjacentes aumentam. Essa medida pode ser expressada como uma forma quadrática da matriz laplaciana do grafo. Portanto, é uma medida espectral. Propomos como trabalho futuro comparar o índice de heterogeneidade com as medidas estudadas nesta tese como, por exemplo, determinar grafos extremais para o índice de heterogeneidade com condições sobre o grafo e analisar as suas características.

Referências Bibliográficas

- [1] ABREGO, B. M., MERCHANT, S. F., 2009, “Sum of Squares of Degrees in a Graph”, *J. I. Pure and Applied Mathematics*, v. 10, pp. 64.
- [2] ABREU, N. M. M., IGUTMAN, ROBBIANO, M., et al., “Bounds for the singular Laplacian Energy”, *Linear Algebra and its Application*, v. 435.
- [3] AHLWEDE, R., KATONA, G. O. H., 1978, “Graphs with Maximal Number of Adjacent Pairs of Edges”, v. 32, pp. 97 – 120.
- [4] ALBERSTON, P., 1997, “The Irregularity of a graph”, *Ars Combinatoria*, v. 46, pp. 219 – 225.
- [5] AOUCHE, M., BELL, F., CVETKOVIC, D., et al., 2008, “Variable neighborhood search for extremal graphs. 16. Some conjectures related to the largest eigenvalue of a graph”, *European Journal of Operational Research*, v. 191, n. 3, pp. 661 – 676.
- [6] BELHAIZA, S., ABREU, N. M. M., HANSEN, P., et al., 2005, “Variable Neighborhood Search for Extremal Graphs. XI. Bounds on Algebraic Connectivity”, pp. 1–16.
- [7] BELL, F. K., 1990, “On the maximal index of connected graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 144, pp. 135 – 151.
- [8] BELL, F. K., 1992, “A note on the irregularity of graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 161, pp. 45 – 54.
- [9] BRUALDI, R. A., SOLHEID, E. S., 1986, “On the spectral radius of connected graphs”, *Publications de L’Institut Mathématique(BEOGRAD)(N.S.)*, v. 39, n. 53, pp. 45 – 54.
- [10] COLLATZ, L., SINOLOWITZ, U., 1957, “Spektren endlicher Grafen”, *Abh. Math. Sem. Univ. Hamburg*, v. 21, pp. 63 – 77.

- [11] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., 1988, “On connected graphs with maximal index”, *Publications de L’Institut Mathématique(BEOGRAD)(N.S.)*, v. 44, n. 58, pp. 29 – 34.
- [12] CVETKOVIĆ, D., DOOB, M., SACHS, H., 1979, *Spectra of Graphs*. New York, Academic Press.
- [13] DAMAS, M. P., 2007, *Novos Conceitos e Resultados sobre a Média dos graus de um grafo*. COPPE/UFRJ, Tese.
- [14] DAMAS, M. P., MARKENZON, L., ABREU, N. M. M., 2007, “New Concepts and Results on The Average Degree of a Graph”, *Applicable Analysis and Discrete Mathematics*, v. 1, pp. 1 – 11.
- [15] ESTRADA, E., 2010, “Quantifying network heterogeneity”, *Physical Review E*, v. 82, pp. 66102.
- [16] GREGORY, D. A., HERSHKOWITZ, D., KIRKLAND, S. J., 2001, “The Spread of the Spectrum of a Graph”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 332-334, pp. 23 – 35.
- [17] HAMMER, P. L., SIMEONE, B., 1981, “The splittance of a graph.” *Combinatorica*, v. 1.
- [18] HANSEN, P., MÉLOT, H., 2005, “Variable Neighborhood Search for Extremal Graphs 9. Bounding the Irregularity of a Graph”, v. 69, pp. 253 – 264.
- [19] HANSEN, P., CAPOROSSI, G., 2000, “AutoGraphiX: An Automated System for Finding Conjectures in Graph Theory”, *Electronic Notes in Discrete Mathematics*, v. 5, pp. 158 – 161. 6th International Conference on Graph Theory.
- [20] HARARY, F., 1962, “The maximum connectivity of a graph”, *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A*, v. 48, pp. 1142–1146.
- [21] HENNING, M. A., RAUTENBACH, D., 2007, “On the irregularity of bipartite graphs”, *Discrete Mathematics*, v. 307, n. 11-12, pp. 1467 – 1472.
- [22] HORNE, R. A., JOHSON, C., 1985, *Matrix Analysis*. Cambridge, Cambridge University Press.
- [23] LIU, B., CHEN, Z., LIU, M., 2008, “On graphs with the largest Laplacian index”, *Czechoslovak Mathematical Journal*, v. 58, pp. 949–960.

- [24] MAHDEV, N. V. R., PELED, U. N., 1995, “Threshold Graphs and Related Topics.” *Anal. of Discrete Math., Elsevier, Amsterdam*, v. 56.
- [25] MERRIS, R., 2001, *Graph Theory*. Canada, Wiley-Interscience Publication.
- [26] MERRIS, R., 2003, “Antiregular graphs are universal for trees.” *Univ. Beograd. Publ. Elektrotehn. Fak.*, v. 14, pp. 1–3.
- [27] NIKIFOROV, V., 2006, “Eigenvalues and degree deviation in graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 414, n. 53, pp. 347 – 360.
- [28] NIKIFOROV, V., 2007, “Bounds on graph eigenvalues II”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 427, n. 2, pp. 183–189.
- [29] NOSAL, E., 1970, *Eigenvalues of graphs*. University of Calgary, Master’s Thesis.
- [30] OLIVEIRA, C. S., LIMA, L. S., ABREU, N. M. M., et al., 2010, “Bounds on the Q-spread of a graph”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 432, n. 9, pp. 2342 – 2351.
- [31] OLIVEIRA, J. A., OLIVEIRA, C., JUSTEL, C., et al., 2011, “Grafos extremais para irregularidade são não-balanceados?” *Anais do XLIII Simpósio Brasileiro de Pesquisa Operacional, Ubatuba-SP*.
- [32] PELED, U., PEDRESCHI, R., STERBINI, Q., 1999, “(n,e)-Graphs with maximum sum of squares of degrees”, *Journal Graph Theory*, v. 31, pp. 283–295.
- [33] PICOULEAU, C., “A note on a conjecture on maximum matching in almost regular graphs.” *Discrete Mathematics*.
- [34] RODRIGUES, R. M. N. D., 1997, *Grafos Periplanares Maximais: Sequência de graus Hamiltoniana e Maxregularidade*. COPPE/UFRJ, Tese.
- [35] ROWLINSON, P., 1988, “On the maximal index of graphs with a prescribed number of edges”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 110, pp. 43 – 53.
- [36] YUAN, H., 1988, “A bound on the spectral radius of graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 108, pp. 135 – 139.