



4-CICLOS E O QUINTO COEFICIENTE CARACTERÍSTICO DE ALGUMAS
SUBFAMÍLIAS DE GRAFOS CORDAIS

Beatriz Malajovich

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
Lilian Markenzon

Rio de Janeiro
Março de 2015

4-CICLOS E O QUINTO COEFICIENTE CARACTERÍSTICO DE ALGUMAS
SUBFAMÍLIAS DE GRAFOS CORDAIS

Beatriz Malajovich

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:

Prof.^a Nair Maria Maia de Abreu, D. Sc.

Prof.^a Lilian Markenzon, D. Sc.

Prof. Carlile Campos Lavor, D. Sc.

Prof.^a Christina Fraga Esteves Maciel Waga, D. Sc.

Prof.^a Claudia Marcela Justel, D. Sc.

Prof.^a Maria Aguiéiras Alvarez de Freitas, D. Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MARÇO DE 2015

Malajovich, Beatriz

4-Ciclos e o quinto coeficiente característico de algumas subfamílias de grafos cordais/Beatriz Malajovich. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2015.

XIII, 119 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Nair Maria Maia de Abreu

Lilian Markenzon

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia de Produção, 2015.

Referências Bibliográficas: p. 101 – 104.

1. Número de 4-ciclos. 2. Coeficientes característicos.
3. k -Árvores. I. Abreu, Nair Maria Maia de *et al.*
II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia de Produção. III. Título.

*Para Pam Ahern e para
o inesquecível Frostie.*

Agradecimentos

Meu imenso obrigada às estimadas Professoras Nair Abreu e Lilian Markenzon pela orientação fundamental durante todo o processo de pesquisa e elaboração desta tese.

Aos Professores examinadores Carlile Lavor, Christina Waga, Claudia Justel e Maria Agueiras, deixo meu agradecimento pelas horas dedicadas à leitura deste texto e pelas sugestões e correções feitas para aprimorá-lo.

Agradeço ao Professor Samuel Jurkiewicz por despertar minha curiosidade sobre o universo dos grafos ainda no início da minha graduação, em um mini-curso no XXV CNMAC (Friburgo, 2002).

“O Doutorado representa o amadurecimento em buscarmos com muito esforço uma oportunidade de deixarmos na ciência uma contribuição sólida e duradoura”. Essas são palavras do Dr. Marcelo Corrêa Manso, a quem registro minha enorme admiração pela precisão e brilho com que pratica a sua profissão. Muito obrigada por proporcionar a tranquilidade e bem-estar necessários para que eu concluísse esta etapa e por, sem perceber, exercer uma influência tão positiva e marcante na minha vida.

À Pam Ahern, fundadora do Santuário *Edgar's Mission*, agradeço profundamente pela generosidade e dedicação aos seres vivos mais frágeis e por espalhar sua mensagem de gentileza pelo mundo. A Frostie (*in memoriam*) que, em seu breve período entre nós, foi um inesquecível exemplo de resiliência, motivação e *joie de vivre*; em tantos momentos, foi a minha inspiração para seguir em frente.

Obrigada ao Professor Silas Fantin pelo apoio na UNIRIO na fase final da minha pesquisa e à minha querida amiga Aline Bernardes por compartilhar comigo os êxitos e os óbices ao longo desses anos de vida acadêmica.

A Gregorio Malajovich, muito obrigada pela ajuda e paciência.

À Mí, meu anjinho dourado, agradeço pelo mais cristalino amor de nossas vidas.

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

4-CICLOS E O QUINTO COEFICIENTE CARACTERÍSTICO DE ALGUMAS SUBFAMÍLIAS DE GRAFOS CORDAIS

Beatriz Malajovich

Março/2015

Orientadores: Nair Maria Maia de Abreu

Lilian Markenzon

Programa: Engenharia de Produção

Em Teoria Espectral de Grafos, é frequente a abordagem de um problema primeiramente em famílias especiais de grafos. Por esse caminho, a análise pode ser favorecida devido às particularidades dos grafos considerados. Neste texto, escolhemos trabalhar sobre grafos k -árvore, que formam uma subfamília de grafos cordais. Mais especificamente, lidamos com grafos k -serpentina e k -leque, que são casos particulares de grafos k -caminho, e grafos k -estrela. Todos eles são grafos bem estruturados nos quais os graus dos vértices se distribuem de modo previsível. Nosso objetivo é determinar explicitamente o quinto coeficiente característico de cada um desses grafos em função das variáveis pertinentes. Pela relação existente entre os coeficientes característicos e os subgrafos elementares de um grafo, faz-se necessário conhecer, para o quinto coeficiente, o número de ciclos de comprimento quatro nele contidos. Para isso, estabelecemos uma estratégia de contagem de 4-ciclos baseada em listas de tamanho quatro formadas por rótulos de vértices. Utilizando objetos combinatórios, somos capazes de entender como as posições dessas listas podem ser preenchidas e, com isso, chegar a fórmulas fechadas para o número de 4-ciclos contidos nos grafos examinados. Acreditamos que a metodologia desenvolvida para a contagem de 4-ciclos possa ser aplicada a outras famílias de grafos bem comportados ou adaptada para contar ciclos de comprimento distinto.

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

4-CYCLES AND THE FIFTH CHARACTERISTIC COEFFICIENT OF SOME
SUBFAMILIES OF CHORDAL GRAPHS

Beatriz Malajovich

March/2015

Advisors: Nair Maria Maia de Abreu

Lilian Markenzon

Department: Production Engineering

In the theory of graph spectra, it is common to approach a problem primarily in special families of graphs. By doing this, the analysis of the problem may be favored due to the peculiarities of the considered graphs. In this research, we choose to deal with k -tree graphs, which constitute a subfamily of chordal graphs. More specifically, we work with k -ribbons and k -fans, that are particular k -path graphs, and k -stars. All three subfamilies are composed of well-structured graphs with recognizable degree distribution. Our goal is to explicitly determine the fifth characteristic coefficient of each of them in terms of the pertinent variables. The characteristic coefficients of a graph are related to its elementary subgraphs. In order to obtain the fifth coefficient, the number of cycles of length four must be known. Therefore, we establish a technique for counting 4-cycles based on lists of size four formed by labels of vertices. Using combinatorial objects, we are able to understand how the positions in these lists must be filled in. Thereby, we arrive at closed-form expressions for the number of 4-cycles contained in the examined graphs. We believe that the method developed might be applied to other families of well-structured graphs in order to count 4-cycles or modified to count cycles of different length.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xii
1 Introdução	1
2 Teoria dos Grafos	4
2.1 Conceitos básicos	4
2.2 Matrizes em Teoria dos Grafos	8
3 Subfamílias de grafos cordais	12
3.1 Grafos k -árvore e k -caminho	12
3.2 Grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela	16
4 Índice de grafos k-serpentina, k-leque e k-árvore estrela	26
4.1 Índice de um grafo	26
4.2 Limites para o índice de grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela	28
4.3 Adição de um vértice e entrelaçamento de autovalores	33
5 Contagem de 4-ciclos	36
5.1 Número de 4-ciclos em grafos k -serpentina	36
5.2 Número de 4-ciclos em grafos k -leque	58
5.3 Número de 4-ciclos em grafos k -árvore estrela	71
6 Aplicação	80
6.1 Coeficientes característicos por contagem em subgrafos elementares	81
6.2 2-emparelhamentos em grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela	84
6.3 O coeficiente característico da potência λ^{n-4}	88

7	Considerações finais	100
	Referências Bibliográficas	101
A	Contagem de 4-ciclos em casos particulares de k -serpentinias	105

Lista de Figuras

2.1	Um grafo isomorfo a seu grafo complementar.	5
2.2	Um caminho de comprimento 6 e um 5-ciclo contidos em G	6
2.3	Dois grafos não isomorfos e coespectrais com 6 vértices.	10
3.1	Construção de T_3^{10} , uma possível 3-árvore com 10 vértices.	13
3.2	Duas 2-árvores distintas com 8 vértices.	14
3.3	Todos os grafos 2-caminhos com 8 vértices e não isomorfos.	15
3.4	Construção de S_3^9 , a 3-serpentina com 9 vértices.	17
3.5	Construção de S_2^9 e S_3^9 por potências 2 e 3 de P_1^9	18
3.6	S_2^n com n par e ímpar e ciclos hamiltonianos em evidência.	19
3.7	$F_2^7 = K_1 + S_1^6$, o único 2-leque com 7 vértices.	20
3.8	Os três possíveis 4-leques com 10 vértices não isomorfos.	22
3.9	Exemplos de grafos k -árvore estrela para $k = 2$ e $k = 4$	25
4.1	S_3^7 , a 3-serpentina com 7 vértices.	29
4.2	K_l , S_{k-l}^{n-l} e $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ para $l = 3$, $k = 5$ e $n = 10$	31
5.1	S_4^n , a 4-serpentina com n vértices.	38
5.2	S_3^9 , a 3-serpentina com 9 vértices.	61
5.3	Os três possíveis 4-ciclos contendo os vértices g , h , i e j de um grafo completo K_l , para $l \geq 4$	65
5.4	$K_3 + S_2^8$, um 5-leque com 11 vértices.	66
5.5	Exemplos de 4-ciclos dos tipos (a.1) a (a.5) contidos em $K_3 + S_2^8$; não há 4-ciclo do tipo (a.6).	67
5.6	Contagem de 4-ciclos durante a construção de uma 2-árvore estrela.	74
5.7	E_3^6 , a 3-árvore estrela com 6 vértices.	77

5.8	E_6^9 , a 6-árvore estrela com 9 vértices.	78
6.1	O grafo G , um 4-ciclo e arestas disjuntas duas a duas em G	83
6.2	S_5^{11} , a 5-serpentina com 11 vértices.	89
6.3	$K_5 + S_4^9$, um 9-leque com 14 vértices.	91
6.4	E_2^{14} , a 2-árvore estrela com 14 vértices.	95
6.5	E_3^{18} , a 3-árvore estrela com 18 vértices.	98
A.1	S_3^n , a 3-serpentina com n vértices.	105

Lista de Tabelas

4.1	Graus dos vértices de S_k^n	28
4.2	Graus dos vértices de S_3^7	28
4.3	Graus dos vértices de S_{k-l}^{n-l}	30
4.4	Graus dos vértices de $K_l + S_{k-l}^{n-l}$	30
4.5	Graus dos vértices de S_{k-l}^{n-l} para $l = 3, k = 5$ e $n = 10$	31
4.6	Graus dos vértices de $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ para $l = 3, k = 5$ e $n = 10$	32
4.7	Graus dos vértices de E_k^n	33
4.8	Grau médio, índice e grau máximo quando $n \in \mathbb{N} \rightarrow +\infty$	33
5.1	Contagem de 4-ciclos em S_4^n associados a listas da categoria <i>Lista 1</i> ($a _ _ d$)	39
5.2	Contagem de 4-ciclos em S_4^n associados a listas da categoria <i>Lista 2</i> ($a _ d _$)	42
5.3	Contagem de 4-ciclos em S_k^n associados a listas da categoria <i>Lista 1</i> ($a _ _ d$), para $a = 1, 2, \dots, n - k - 1, n - k$	47
5.4	Contagem de 4-ciclos em S_k^n associados a listas da categoria <i>Lista 1</i> ($a _ _ d$), para $a = n - k + 1, n - k + 2, \dots, n - 4, n - 3$	50
5.5	Contagem de 4-ciclos em S_k^n associados a listas da categoria <i>Lista 2</i> ($a _ d _$), para $a = 1, 2, \dots, n - 2k, n - 2k + 1$	52
5.6	Contagem de 4-ciclos em S_k^n associados a listas da categoria <i>Lista 2</i> ($a _ d _$), para $a = n - 2k + 2, n - 2k + 3, \dots, n - 4, n - 3$	55
5.7	Comparações entre as três subfamílias estudadas de k -árvores em n vértices para $n = 18$ e $k = 5$	79
A.1	Contagem de 4-ciclos em S_3^n associados a listas da categoria <i>Lista 1</i> ($a _ _ d$)	106

A.2	Contagem de 4-ciclos em S_3^n associados a listas da categoria <i>Lista 2</i>	
	$(a-d-)$	108
A.3	Contagem de 4-ciclos em S_5^n associados a listas da categoria <i>Lista 1</i>	
	$(a--d)$	112
A.4	Contagem de 4-ciclos em S_5^n associados a listas da categoria <i>Lista 2</i>	
	$(a-d-)$	115

Capítulo 1

Introdução

Em Teoria Espectral de Grafos, é comum a abordagem de um problema primeiramente em famílias especiais de grafos. Por esse caminho, a investigação do problema pode se beneficiar das particularidades dos grafos considerados. Neste texto, optamos por trabalhar com três subfamílias de grafos k -árvore que, por sua vez, constituem uma subfamília de grafos cordais [1, 2]. Mais especificamente, lidamos com grafos k -serpentina e k -leque, que são casos particulares de grafos k -caminho, e grafos k -estrela. Todos eles são grafos bem estruturados nos quais os graus dos vértices se distribuem de modo previsível. Além disso, dentro da subfamília das k -árvores, os grafos k -caminho e k -estrela são extremais com respeito à quantidade de vértices simpliciais.

Menos frequentes na literatura de Teoria Espectral de Grafos são os artigos com enfoque nos coeficientes característicos de um grafo, em contraste àqueles dedicados ao espectro em si. DE MORAES *et al.* [3] se propuseram a estudar o quinto e sexto coeficientes característicos de grafos. Sobre o primeiro coeficiente citado, a análise partiu da relação existente entre os coeficientes característicos e os subgrafos elementares de um grafo. Os autores estabeleceram o número ϵ_2 de 2-emparelhamentos em um grafo qualquer. Com isso, chegaram a uma expressão para o quinto coeficiente que depende, além de ϵ_2 , do número de 4-ciclos no grafo considerado. O objetivo desta pesquisa é determinar explicitamente, por meio de uma função polinomial, o quinto coeficiente característico de grafos pertencentes a cada uma das três subfamílias de k -árvores mencionadas. Uma vez calculado o número de 2-emparelhamentos nesses grafos, o obstáculo a esse propósito é estabelecer o número de 4-ciclos neles contidos.

A contagem de ciclos em grafos não é um interesse recente. BONDY e SIMONOVITS [4] resolveram uma conjectura de Erdős mostrando que um grafo de ordem n contém um ciclo de comprimento $2l$ para cada inteiro l em $[k, kn^{1/k}]$ se possui ao menos $100kn^{1+(1/k)}$ arestas. MONIEN [5] desenvolveu um algoritmo para identificar o menor ciclo de comprimento par em um grafo não orientado em $O(n^2)$ operações. Dada a arboricidade $a(G)$ de um grafo G (o número mínimo de florestas disjuntas nas quais G pode ser decomposto), CHIBA e NISHIZEKI [6] estabeleceram quatro algoritmos para: (i) listar todos os triângulos em um grafo G em $O(a(G)m)$ operações, (ii) encontrar todos os 4-ciclos em $O(a(G)m)$ operações, (iii) identificar todos os subgrafos completos K_l de ordem l em $O(la(G)^{l-2}m)$ operações, e (iv) listar todas as cliques em $O(a(G)m)$ operações por clique. Utilizando separadores, RICHARDS [7] apresentou algoritmos que detectam tanto 5- quanto 6-ciclos em grafos planares em $O(n \log n)$ operações. Em [8], ALON *et al.* forneceram vários métodos para reconhecer e contar ciclos de um dado comprimento em grafos orientados e não orientados. A maior parte dos limites obtidos depende unicamente do número de arestas no grafo considerado, e não do número de vértices. SCHANK e WAGNER [9] realizaram um experimento focado na eficiência de algoritmos para contagem e identificação de triângulos em grafos. Como consequência, foram capazes de melhorar um algoritmo conhecido, tornando esses procedimentos viáveis em grandes redes. Em [10], BUCHIN *et al.* estabeleceram cotas superiores para o número máximo de ciclos e de ciclos Hamiltonianos em grafos planares.

Os resultados referidos no parágrafo anterior dependem direta ou indiretamente do número de vértices e/ou arestas do grafo. Logo, os algoritmos para computar o número de ciclos de um dado comprimento em um grafo podem ser custosos se m e/ou n forem grandes. Nossa intenção é tirar vantagem da estrutura bem comportada e da distribuição de graus dos grafos nas subfamílias de k -árvores escolhidas para expressar o número exato de seus 4-ciclos por funções polinomiais. Ainda que o objetivo seja a determinação do quinto coeficiente de seus respectivos polinômios característicos, acreditamos que a principal contribuição deste trabalho seja a estratégia desenvolvida para calcular 4-ciclos. A abordagem por listas de rótulos talvez possa ser aplicada a outras famílias de grafos bem estruturados ou adaptada para contar ciclos de comprimento distinto.

Quanto a estudos concernentes ao polinômio característico de um grafo, apontamos alguns artigos. PRABHU e DEO [11] deduziram o polinômio característico de uma perturbação de um grafo G a partir do polinômio característico de G e usaram essa perturbação para testar isomorfismos entre grafos. Essa é uma abordagem inversa ao problema original de reconstrução polinomial apresentada por GUTMAN e CVETKOVIĆ [12] e considerada posteriormente por HAGOS [13] e SIMIĆ e STANIĆ [14]. SCHWENK [15] estabeleceu três métodos para computar o polinômio característico de um grafo. Um deles faz uso de produto entre grafos, fornecendo o polinômio característico do produto como uma função dos polinômios característicos dos fatores. ZHANG e ZHANG [16] focaram nos coeficientes Laplacianos de grafos unicíclicos. Para um tratamento mais abrangente sobre espectro de grafos, recomendamos [17], [18] e [19].

Este texto está organizado como segue. Iniciamos o Capítulo 2 com uma revisão dos fundamentos básicos de Teoria dos Grafos, incluindo os conceitos de matrizes que serão necessários ao desenvolvimento deste trabalho. O Capítulo 3 apresenta as três subfamílias de grafos cordais de interesse, formadas por grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela, assim como o contexto histórico no qual estão inseridas e algumas propriedades de destaque. O índice de grafos pertencentes a cada uma dessas três subfamílias é considerado no Capítulo 4. O Capítulo 5 reúne os principais resultados desta pesquisa, no qual são estabelecidas expressões que contabilizam os 4-ciclos contidos em grafos das três subfamílias estudadas. Já o Capítulo 6 trata da aplicação dos resultados obtidos na determinação de um dos coeficientes característicos desses grafos. Para isso, considera os subgrafos elementares de um grafo e como eles estão relacionados aos coeficientes característicos do mesmo. Faz uso ainda da contagem de 2-emparelhamentos em um grafo, desenvolvida em [3]. Por fim, o Capítulo 7 traz as considerações finais sobre o que foi desenvolvido neste trabalho, apontando algumas direções para a sua continuidade. No Apêndice A foram alocadas as provas para duas proposições enunciadas no Capítulo 5.

Capítulo 2

Teoria dos Grafos

Começamos este capítulo recordando conceitos básicos em Teoria dos Grafos. Em seguida, tratamos de matrizes no contexto de grafos. Algumas matrizes, quando estruturadas e sob determinadas condições, caracterizam classes de grafos e permitem a utilização de técnicas que favorecem a análise espectral e o entendimento do grafo associado.

2.1 Conceitos básicos

Um *grafo* não orientado G é uma dupla ordenada $G = (V(G), E(G))$ na qual $V(G)$ é um conjunto de vértices e $E(G)$ é um conjunto de arestas. Cada aresta de $E(G)$ é um subconjunto de $V(G)$ com um ou dois vértices. Em geral, escrevemos simplesmente V e E em lugar de $V(G)$ e $E(G)$. Dada uma aresta $e = \{u, v\}$ em E , dizemos que u e v são as extremidades da aresta e e que e conecta u a v . Nesse caso, u e v são chamados de vértices *adjacentes*. É comum notar a aresta $e = \{u, v\}$ por $e = uv$ (ou $e = vu$), omitindo-se a notação usual de conjunto. Se uma aresta $e = uv$ em E é tal que $v = u$, ou seja, e é uma aresta que conecta um vértice a si mesmo, então G possui um *laço* em v (ou em u).

Um grafo G é *simples* quando não apresenta laços e quando não ocorre mais de uma aresta entre um mesmo par de vértices. Em todo este texto, consideramos apenas grafos dessa natureza.

A maneira usual de representar graficamente um grafo $G = (V, E)$ é desenhando um ponto para cada vértice de V e ligando dois desses pontos por uma linha sempre

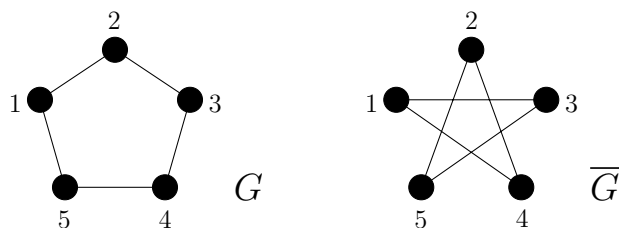


Figura 2.1: Um grafo isomorfo a seu grafo complementar.

que eles constituírem uma aresta de E . É irrelevante como esses pontos e linhas são desenhados desde que seja levada em consideração a informação sobre quais pares de vértices formam, ou não, uma aresta.

A *ordem* de um grafo $G = (V, E)$ é o número n de vértices em V , enquanto o *tamanho* de um grafo corresponde ao número m de arestas em E . O *grau* de um vértice v em V , notado por $d(v)$, corresponde ao número de arestas incidentes em v . A *vizinhança* $N(v)$ de um vértice v em V é o subconjunto $N(v) = \{w \in V \mid \{w, v\} \in E\}$ contido em V . Se, para todo v em V , $N(v)$ possui o mesmo número r de elementos, dizemos que G é um grafo r -regular. Dado qualquer subconjunto S de V , chamamos de $G[S]$ o subgrafo de G induzido pelos vértices em S . Quando $G[S]$ é um subgrafo completo de G , dizemos que S é uma *clique*. Um vértice v de V é *simplicial* em G se $N(v)$ é uma clique e é *universal* em G quando $N(v)$ possui $n - 1$ elementos.

Dizemos que um grafo G com n vértices é um *grafo completo*, e escrevemos $G = K_n$, quando todos os seus vértices são adjacentes dois a dois, ou seja, quando todo vértice do grafo é universal.

Dado um grafo $G = (V, E)$, o seu *grafo complementar* \overline{G} é o grafo com o mesmo conjunto de vértices de G e tal que existe uma aresta entre dois vértices u e v de V em \overline{G} sempre que esses vértices não são adjacentes em G .

Sejam $G = (V, E)$ e $G' = (V', E')$ dois grafos. Dizemos que G e G' são *isomorfos*, e escrevemos $G \simeq G'$, se há uma bijeção $\varphi : V \rightarrow V'$ satisfazendo $uv \in E \Leftrightarrow \varphi(u)\varphi(v) \in E'$ para todo u, v em V . A função φ é chamada de um *isomorfismo* entre G e G' ; se $G = G'$, então φ é um *automorfismo*. Na Figura 2.1, vemos um exemplo de grafo $G = (V, E)$ isomorfo a seu grafo complementar $\overline{G} = (V, E')$. De fato, definindo a função $\varphi : V \rightarrow V$ por $\varphi(1) = 1$, $\varphi(2) = 4$, $\varphi(3) = 2$, $\varphi(4) = 5$ e $\varphi(5) = 3$, verificamos que $\varphi(1)\varphi(2) = 14$, $\varphi(2)\varphi(3) = 42$, $\varphi(3)\varphi(4) = 25$, $\varphi(4)\varphi(5) = 53$ e $\varphi(1)\varphi(5) = 13$

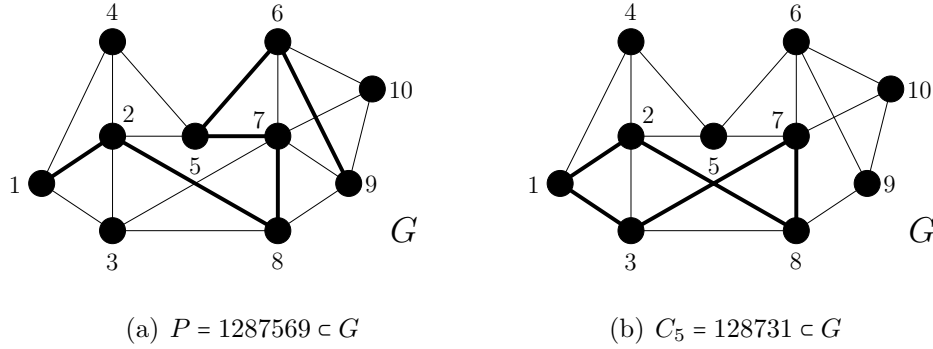


Figura 2.2: Um caminho de comprimento 6 e um 5-ciclo contidos em G .

são arestas de E' .

Um *caminho* é um grafo não vazio $P = (V(P), E(P))$ da forma $V(P) = \{v_1, v_2, \dots, v_s\}$ e $E(P) = \{v_1v_2, v_2v_3, \dots, v_{s-1}v_s\}$, sendo os elementos de $V(P)$ todos distintos. O caminho P liga os vértices v_1 a v_s e por isso v_1 e v_s são chamados de *extremos* de P , em contraste aos seus vértices *internos* v_2, v_3, \dots, v_{s-1} . O comprimento do caminho P corresponde ao número de suas arestas, $|E(P)|$. É comum representar o caminho P pela sequência de seus vértices: $P = v_1v_2v_3 \dots v_s$. A Figura 2.2(a) mostra um caminho de comprimento seis, $P = 1287569$, contido no grafo G . Um *grafo caminho* ou *grafo 1-caminho* em n vértices, que notaremos por $P_1^n = (V, E)$, com $|E| = n - 1$, é o grafo consistindo em um caminho ligando os n vértices do grafo. Apresentaremos uma generalização para os grafos 1-caminho no Capítulo 3.

Se $P = v_1v_2 \dots v_n$ é um caminho com $n \geq 3$, então o grafo definido por $C = P + v_nv_1$ é chamado de *ciclo*. A representação usual de um ciclo, como feita para o caminho, é por meio da sequência (cíclica) de seus vértices, $C = v_1 \dots v_nv_1$. O comprimento de C corresponde ao número de suas arestas (ou de seus vértices). O ciclo de comprimento k é conhecido por *k-ciclo* e notado por C_k . A Figura 2.2(b) mostra um 5-ciclo, $C_5 = 128731$, contido no grafo G . Quando estiver expressamente claro pelo contexto que C representa um ciclo, omitiremos a repetição do vértice v_1 ao final da sequência $v_1v_2 \dots v_nv_1$, escrevendo simplesmente $C = v_1v_2 \dots v_n$.

Dado um grafo $G = (V, E)$, a *distância* em G entre quaisquer dois vértices v_i, v_j em V é definida como o número de arestas no menor caminho ligando v_i e v_j . Caso não exista caminho entre v_i e v_j , dizemos que a distância entre os vértices é infinita.

Dizemos que um grafo $G = (V, E)$ é *conexo* se, para todo par de vértices distintos v_i, v_j em V , existe um caminho entre v_i e v_j . Caso contrário, dizemos que G é

desconexo. Nesse caso, a representação gráfica de G fica dividida em pelo menos duas partes, chamadas de *componentes conexas* de G . Se $G = (V, E)$ é tal que $|E| = 0$, ou seja, os vértices de G são todos isolados, então G é um grafo *totalmente desconexo*. Nesse caso, o seu complementar \overline{G} é um grafo completo.

Uma *floresta* é um grafo *acíclico*, isto é, que não contém ciclos. Uma floresta conexa, por sua vez, é uma *árvore*. Assim, uma floresta é um grafo cujas componentes são árvores. Em uma árvore, os vértices de grau 1 são chamados de *folhas*. Um grafo caminho P_1^n é um exemplo de árvore com o menor número possível de folhas, que correspondem aos dois extremos de P_1^n .

Um *ciclo hamiltoniano* em um grafo $G = (V, E)$ é um ciclo que passa por cada um dos vértices de V . Se G possui tal ciclo, então G é chamado de *grafo hamiltoniano*. A sequência (cíclica) de vértices que corresponde ao ciclo hamiltoniano de G induz uma sequência de graus dos vértices que formam esse ciclo. Se $v_1v_2 \dots v_nv_1$ é um ciclo hamiltoniano de G e d_i é o grau do vértice v_i , com $i = 1, 2, \dots, n$, então $d_1d_2 \dots d_n$ é a sequência de graus dos correspondentes vértices do ciclo hamiltoniano (omite-se a repetição de d_1 ao final dessa sequência). Com a notação $D = [d_1, d_2, \dots, d_n]$, D é chamada de *sequência hamiltoniana de graus* ou *hds* (do inglês *hamiltonian degree sequence*) de G . É comum fragmentar essa notação quando elementos consecutivos da sequência se repetem, escrevendo-o somente uma vez e adicionando como potência o número de vezes que a repetição ocorre. Como ilustração, tomemos a sequência $D = [2, 4, 5, 5, 5, 4, 4, 4, 4, 2]$; podemos expressá-la de forma equivalente por $D = [2, 4] \circ [5]^3 \circ [4]^4 \circ [2]$.

Um grafo $G = (V, E)$ é dito *cordal* se todo ciclo de comprimento maior que ou igual a quatro possui uma corda, ou seja, uma aresta ligando dois vértices não consecutivos do ciclo. Um grafo é *periplanar* se ele pode ser imerso no plano de tal modo que todos os seus vértices estejam na face exterior. Um grafo periplanar é *periplanar maximal* se a adição de uma aresta entre quaisquer dois vértices não adjacentes resulta em um grafo não-periplanar. Tais grafos são conhecidos como *mops*, do inglês *maximal outerplanar graphs*, e constituem uma subclasse dos grafos cordais planares. Como todos os vértices de um *mop* estão na face exterior, seu contorno forma um ciclo hamiltoniano. As arestas do ciclo hamiltoniano são ditas externas, enquanto as demais são as arestas internas.

RODRIGUES [20] generalizou o conceito de regularidade estabelecendo o conceito de *maxregularidade*. Nesse caso, procura-se não mais por grafos com todos os vértices de mesmo grau r , mas sim por aqueles que, em uma dada família de grafos, possuam o maior número possível de vértices de grau r . Sejam P um conjunto de restrições ou propriedades que define uma classe de grafos e G um grafo de ordem n que satisfaz P . G é (n, r) -*maxregular* quando G tem o maior número possível de vértices de grau r , dentre todos os grafos de ordem n que satisfazem P . Assim, se G satisfaz P e $\omega_G(r)$ é o número de vértices em G de grau r , G é (n, r) -maxregular se e somente se $\omega_G(r) = \max\{\omega_{G'}(r) \mid G' \text{ é um grafo de ordem } n \text{ que satisfaz } P\}$. Como exemplo, considere a classe das árvores. Dentre elas, todos os caminhos P_1^n são $(n, 2)$ -maxregulares, pois são as árvores com n vértices com o maior número possível de vértices de grau 2.

Seja l um inteiro maior que ou igual a 2. Um grafo $G = (V, E)$ é l -partido se V admite uma partição em l classes (disjuntas) de modo que cada aresta tenha suas extremidades em classes distintas, ou seja, vértices em uma mesma partição não podem ser adjacentes. É comum o termo *bipartido* no lugar de 2-partido.

Tratamos na próxima seção das matrizes mais frequentes na Teoria dos Grafos.

2.2 Matrizes em Teoria dos Grafos

Matrizes são amplamente utilizadas no estudo de grafos. Representamos um grafo $G = (V, E)$, em geral, por meio da *matriz de adjacência* $A(G)$. Se $|V(G)| = n$, então $A(G) = [a_{ij}]$ é a matriz quadrada de ordem n na qual ou $a_{ij} = 1$, quando existe uma aresta entre os vértices v_i e v_j , ou $a_{ij} = 0$, caso contrário. Com relação a grafos simples, observamos que $A(G)$ é sempre uma matriz *simétrica*, isto é, $a_{ij} = a_{ji}$, $i, j = 1, \dots, n$, e com coeficientes nulos na diagonal principal. Como o *traço* de uma matriz é definido como a soma dos elementos da sua diagonal, segue que o traço de $A(G)$ é sempre nulo. Outra matriz simétrica associada a G é a *matriz Laplaciana* $L(G) = D(G) - A(G)$, onde $D(G)$ é a matriz diagonal dos graus dos vértices de G . Com uma pequena mudança definimos a *matriz Laplaciana sem sinal* como $Q(G) = D(G) + A(G)$.

Seja A uma matriz quadrada de ordem n . Chamamos de *autovalor* de A o número

(real ou complexo) λ para o qual existe um vetor x não nulo em \mathbb{R}^n satisfazendo $Ax = \lambda x$. O vetor x é chamado de *autovetor* de A associado a λ . O número λ é um autovalor de A se e somente se $\det(\lambda I_n - A) = 0$, onde I_n é a matriz identidade de ordem n . O polinômio de grau n em λ definido por $p(A; \lambda) = \det(\lambda I_n - A)$ é chamado de *polinômio característico* de A . Os autovalores de A são as n raízes (sobre o corpo \mathbb{C}) de $p(A; \lambda)$, considerando-se multiplicidades. Definimos o *espectro* de A como a n -upla $\text{Spec}(A) = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$. Quando os n autovalores de A são reais, é comum ordená-los de forma decrescente, tal que $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$. Para representar os autovalores juntamente a suas respectivas multiplicidades, usaremos a notação

$$\text{Spec}^*(A) = \begin{pmatrix} \lambda_1, & \lambda_2, & \dots, & \lambda_n \\ d_1^*, & d_2^*, & \dots, & d_n^* \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

onde d_i^* representa a multiplicidade algébrica do autovalor λ_i como raiz do polinômio característico, para $i = 1, 2, \dots, n$.

Uma matriz real simétrica M , de ordem n , é *positiva definida* se e somente se $z^\top M z > 0$ para todo vetor não nulo z em \mathbb{R}^n , onde z^\top representa o vetor z transposto. Se vale a desigualdade $z^\top M z \geq 0$ para todo vetor não nulo z em \mathbb{R}^n , então M é uma matriz *positiva semidefinida*.

Os vetores q_1, q_2, \dots, q_n são *ortonormais* se $q_i^\top q_k = \delta_{ik}$, onde

$$\delta_{ik} = \begin{cases} 0, & \text{se } i \neq k, \\ 1, & \text{se } i = k, \end{cases} \quad (2.2)$$

representa a *função delta de Kronecker*. Uma matriz com colunas ortonormais é comumente notada por Q e satisfaz $Q^\top Q = I$. Quando Q é quadrada, $Q^\top Q = I$ implica em $Q^\top = Q^{-1}$ e Q é dita uma *matriz ortogonal*.

Uma *similaridade* é uma transformação que associa a uma matriz A uma matriz da forma $B = PAP^{-1}$, na qual P é uma matriz invertível. Nesse caso, as matrizes A e B são ditas *semelhantes* ou *similares* e P é a *matriz de similaridade*. Observamos que: (i) a toda matriz invertível P está associada uma transformação de similaridade; (ii) se P é invertível e ortogonal, a transformação recebe o nome de *similaridade ortogonal*; (iii) se A e B são matrizes semelhantes, elas possuem polinômios característicos iguais, o que pode ser justificado pelas propriedades do

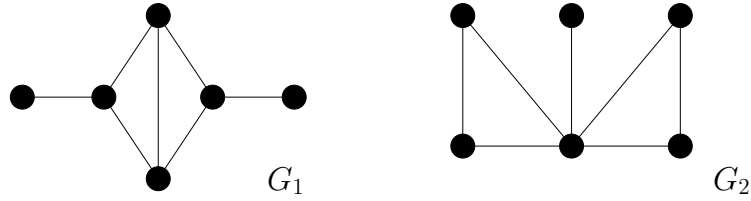


Figura 2.3: Dois grafos não isomorfos e coespectrais com 6 vértices.

determinante:

$$\begin{aligned}
 \det(B) &= \det(PAP^{-1}) \\
 &= \det(P) \det(A) \det(P^{-1}) \\
 &= \det(P) \det(A) \frac{1}{\det(P)} \\
 &= \det(A).
 \end{aligned}$$

Conseqüentemente, as matrizes semelhantes A e B compartilham o mesmo espectro.

Uma *matriz elementar* é qualquer matriz quadrada que se escreva como a soma da matriz identidade com uma matriz de posto 1. Matrizes elementares são úteis pois podem ser armazenadas de forma compacta e têm suas inversas calculadas facilmente [21]. Quando, numa transformação de similaridade, a matriz P é invertível e elementar, a transformação é chamada de *similaridade elementar*; se P é invertível, ortogonal e elementar, a transformação é dita *similaridade ortogonal elementar*.

A teoria espectral de matrizes induz conceitos equivalentes nas matrizes associadas a grafos. Dizemos que os *autovalores* de G são os autovalores reais da matriz de adjacência (simétrica) $A(G)$. O maior autovalor do grafo G , λ_1 , é chamado de *índice* de G . A partir da matriz Laplaciana definimos os *autovalores laplacianos* de G , consistindo de todos os autovalores reais da matriz laplaciana (simétrica) $L(G)$. A matriz $L(G)$ é positiva semidefinida, logo tem todos os autovalores não negativos, e singular, isto é, tem ao menos um autovalor nulo.

Por simplicidade, notaremos o polinômio característico de um grafo G por $p(G; \lambda)$, no lugar de escrever $p(A(G); \lambda)$. Os coeficientes característicos de G são os coeficientes que multiplicam as potências da variável λ na expansão de $p(G; \lambda) = \det(\lambda I_n - A(G))$.

Dois grafos não isomorfos são ditos *coespectrais* se possuem os mesmos autovalores com as mesmas multiplicidades. Na Figura 2.3, os dois grafos con-

xos com seis vértices, G_1 e G_2 , têm polinômio característico igual a $p(G_i; \lambda) = \lambda^6 - 7\lambda^4 - 4\lambda^3 + 7\lambda^2 + 4\lambda - 1$, com $i = 1, 2$, e, portanto, são coespectrais [22].

No decorrer deste texto, trataremos essencialmente de grafos pertencentes a três subfamílias de grafos cordais. O próximo capítulo se dedica à apresentação dessas subfamílias, ilustrando-as com exemplos e destacando características de cada uma delas.

Capítulo 3

Subfamílias de grafos cordais

O interesse deste capítulo é apresentar algumas subfamílias de grafos cordais. A mais abrangente das subfamílias consideradas, no sentido de conter as demais, é a formada pelos grafos k -árvore. Esses grafos estão relacionados a sistemas lineares esparsos e foram caracterizados por ROSE [1] e posteriormente por FRÖBERG [2]. Da subfamília de grafos k -árvore, destacamos as subfamílias de grafos k -caminho e k -árvore estrela [23]. Contidas na subfamília de grafos k -caminho, ressaltamos ainda duas subfamílias de grafos: a primeira formada pelos grafos k -serpentina e a segunda pelos grafos k -leque. Ambas foram introduzidas por MARKENZON e WAGA [24], sendo os grafos k -serpentina uma extensão dos grafos serpentina tratados em [25]. Começamos o capítulo apresentando os grafos k -árvore e os grafos k -caminho, assim como dois resultados relativos ao número de vértices simpliciais contidos nesses grafos. Em seguida, voltamos nossa atenção para as duas subfamílias citadas de grafos k -caminho e para a subfamília de grafos k -árvore estrela.

3.1 Grafos k -árvore e k -caminho

Definição 3.1.1. Um *grafo k -árvore*, ou simplesmente uma k -árvore em n vértices, com $k > 0$ e $n \geq k + 1$, é definido indutivamente da seguinte forma:

- Todo grafo completo com $k + 1$ vértices é uma k -árvore.
- Se $G = (V, E)$ é uma k -árvore, $v \notin V$ e $Q \subset V$ é uma k -clique de G , então $G' = (V \cup \{v\}, E \cup \{vw \mid w \in Q\})$ é também uma k -árvore.

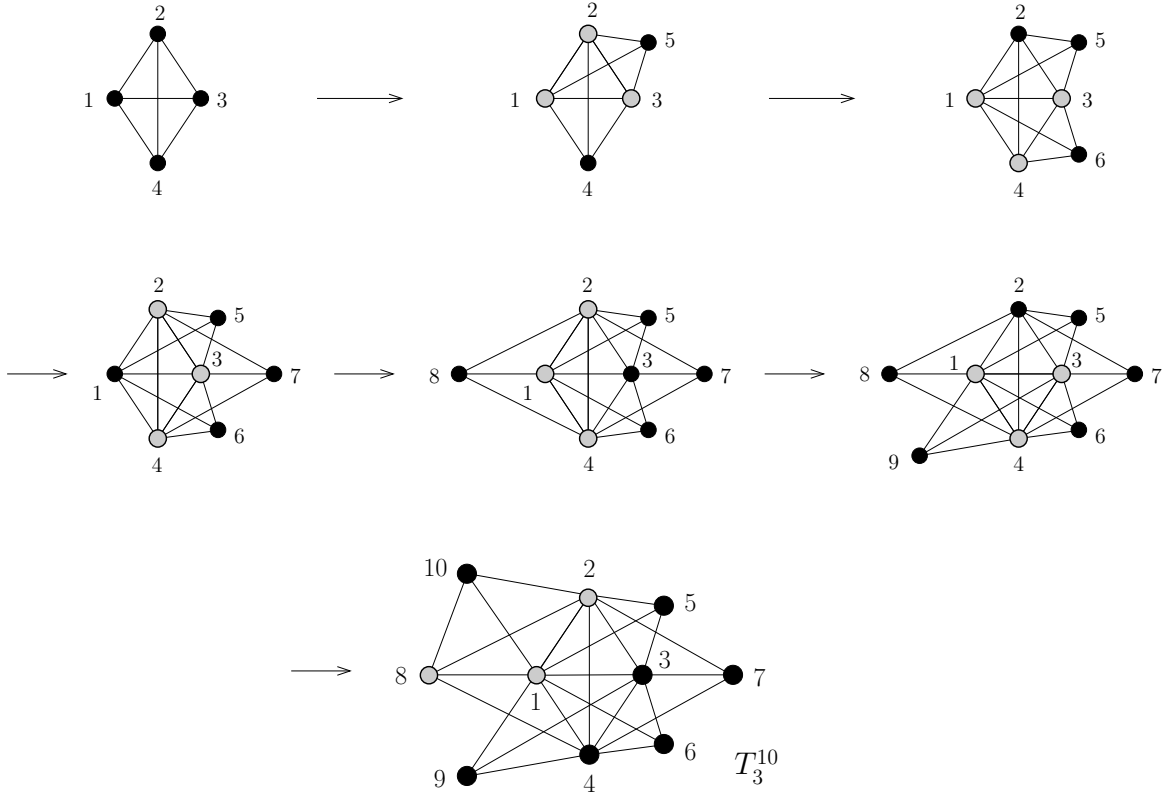


Figura 3.1: Construção de T_3^{10} , uma possível 3-árvore com 10 vértices.

- Nenhum outro grafo é uma k -árvore.

Quando conveniente, notaremos um grafo k -árvore em n vértices por T_k^n .

O número de arestas m em qualquer k -árvore decorre diretamente de sua definição construtiva. De fato, partimos de um grafo completo com $k+1$ vértices, que possui $\frac{k}{2}(k+1)$ arestas, e inserimos k novas arestas no grafo ao adicionarmos cada um dos vértices de rótulo $(k+2)$ a n . O modo como escolhemos a clique de ligação de um novo vértice adicionado à k -árvore não afeta o número total de arestas no grafo. Portanto, o número de arestas m depende apenas da variável k e do número de vértices n da k -árvore considerada. Podemos expressar m por:

$$m = m(n, k) = k\left(n - \frac{1}{2}\right) - \frac{k^2}{2}. \quad (3.1)$$

Seguindo PROSKUROWSKI [26], dizemos que uma k -árvore com n vértices, $n \geq k+1$, rotulados por $1, 2, \dots, n$, está *recursivamente rotulada* se os vértices $1, 2, \dots, k+1$ formam uma clique de tamanho $k+1$ em T_k^n e todo vértice de rótulo j , com $j > k+1$, é adjacente a exatamente k vértices rotulados com valores menores que j que formam

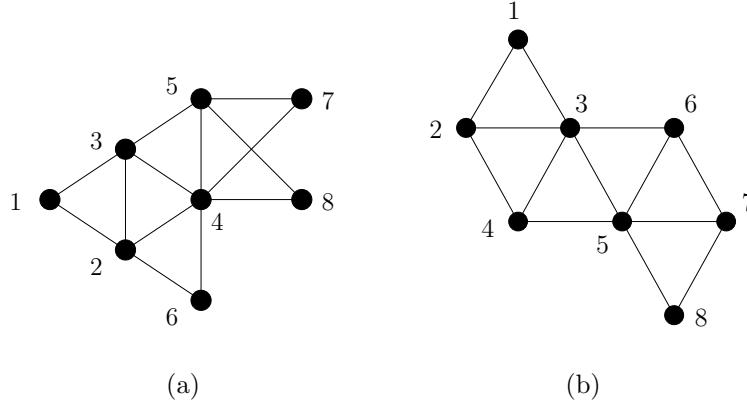


Figura 3.2: Duas 2-árvores distintas com 8 vértices.

uma clique. A rotulação recursiva não é única. Por exemplo, ao adicionarmos o vértice $j = k + 2$, há diversas possibilidades para seus k vértices adjacentes. Podemos escolher os de rótulos $1, 2, 3, \dots, k$, ou os de rótulos $1, 3, 4, \dots, k + 1$, ou $2, 3, \dots, k, k + 1$, etc.

Os primeiros $k + 1$ vértices de uma k -árvore formam a sua *clique base*, enquanto a k -clique escolhida no momento da adição de um vértice v é chamada de *clique de ligação* de v . A rotulação recursiva de uma k -árvore reflete o modo como ela foi construída segundo sua definição.

Em uma k -árvore, um vértice v é simplicial quando sua vizinhança $N(v)$ é uma clique de tamanho k , ou seja, satisfaz $|N(v)| = k$.

A Figura 3.1 mostra o processo de construção de uma possível 3-árvore em dez vértices. No momento da adição de um novo vértice, sua clique de ligação aparece realçada em tom de cinza. Os vértices de rótulos 5, 6, 7, 9, e 10 são simpliciais, pois estão ligados a cliques de tamanho 3 em T_3^{10} . Na Figura 3.2, vemos duas 2-árvores distintas em oito vértices. A 2-árvore em 3.2(a) possui quatro vértices simpliciais (rótulos 1, 6, 7 e 8), enquanto a 2-árvore em 3.2(b) possui somente dois vértices ligados a cliques de tamanho 2 (rótulos 1 e 8).

Os grafos k -caminho formam um subconjunto da subfamília de grafos k -árvore. Eles são definidos de modo semelhante a estes, porém com uma restrição sobre a escolha para clique de ligação no momento da adição de um novo vértice.

Definição 3.1.2. Um *grafo k -caminho*, ou simplesmente um k -caminho em n vértices, com $k > 0$ e $n \geq k + 1$, é definido indutivamente por:

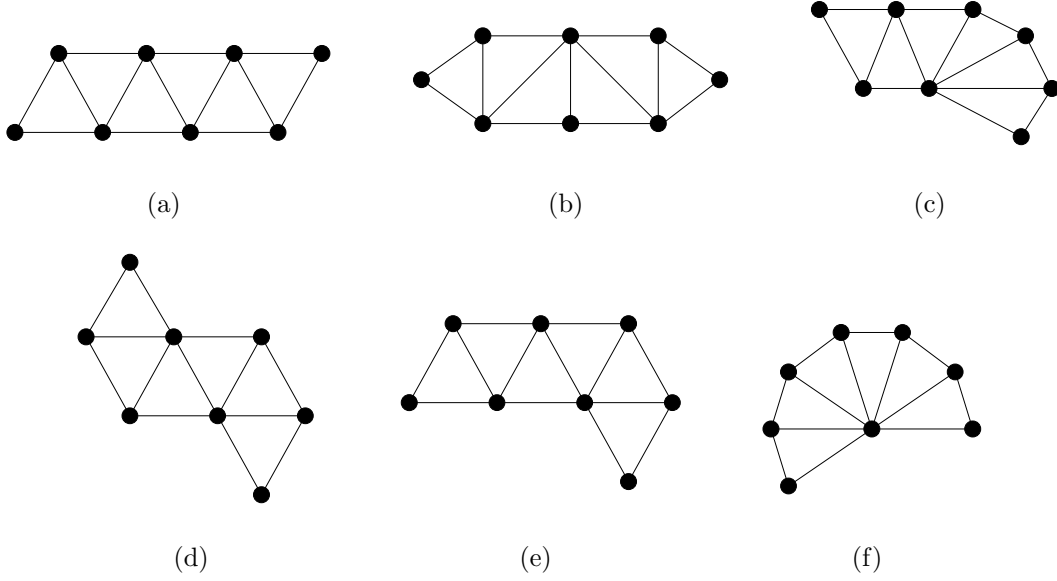


Figura 3.3: Todos os grafos 2-caminhos com 8 vértices e não isomorfos.

- Todo grafo completo com $k + 1$ vértices é um grafo k -caminho (e, portanto, uma k -árvore).
- Se $G = (V, E)$ é um grafo k -caminho, $v \notin V$ e $Q \subseteq V$ é uma k -clique de G contendo ao menos um vértice simplicial, então $G' = (V \cup \{v\}, E \cup \{vw \mid w \in Q\})$ é também um grafo k -caminho.
- Nenhum outro grafo é grafo k -caminho.

Quando conveniente, notaremos um grafo k -caminho em n vértices por P_k^n . Quando $k = 1$, o grafo 1-caminho em n vértices, P_1^n , coincide com o caminho usual P .

Todos os grafos 2-caminho em oito vértices e não isomorfos estão ilustrados na Figura 3.3. Apontamos o fato que cada um dos grafos apresentados possui exatamente dois vértices simpliciais. Essa é a característica destacada por MARKENZON *et al.* [23] no próximo resultado, que estabelece uma condição necessária e suficiente para que um grafo k -árvore seja um grafo k -caminho.

Teorema 3.1.1 (Teorema de Caracterização). *Seja $G = (V, E)$ uma k -árvore em n vértices, com $n > k + 1$. G é um grafo k -caminho se e somente se possui exatamente dois vértices simpliciais.*

Segundo o Teorema 3.1.1, para verificarmos se uma k -árvore $G = (V, E)$ é um grafo k -caminho, basta analisarmos a cardinalidade da vizinhança de v em G , para

todo v em V . Por exemplo, nos grafos 2-árvore da Figura 3.2 ocorrem, respectivamente, quatro e dois vértices de grau 2 (simpliciais). Pelo Teorema de Caracterização, apenas a 2-árvore da Figura 3.2(b) é um grafo 2-caminho.

Ainda com relação a vértices simpliciais, PEREIRA [27] demonstrou qual é o maior e o menor número possível de tais vértices em um grafo k -árvore.

Lema 3.1.1. Um grafo k -árvore em n vértices, com $n > k + 1$, possui no mínimo dois e no máximo $n - k$ vértices simpliciais.

Há duas subfamílias de grafos k -árvore que satisfazem as quantidades extremas de vértices simpliciais mencionadas no lema acima. O valor mínimo é atingido por grafos k -caminho, em acordo com o Teorema 3.1.1. Já o valor máximo de vértices simpliciais é atingido por grafos k -árvore estrela. Consideramos essas subfamílias com mais detalhes na próxima seção.

3.2 Grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela

No decorrer deste texto, lidaremos com três subfamílias de grafos k -árvore. Como comentado no início deste capítulo, duas delas, formadas pelos grafos k -serpentina e pelos grafos k -leque, são casos particulares da subfamília de grafos k -caminho. A terceira subfamília é um caso particular de grafos k -árvore. Apresentamos cada uma a seguir, observando características com relação às matrizes de adjacência de seus grafos.

A ideia por trás dos grafos k -serpentina é simples. Começamos, como nos grafos k -caminho, com uma clique de tamanho $k + 1$. A partir daí, escolhemos sempre os k últimos vértices incluídos para formar a clique de ligação ao adicionarmos um novo vértice ao grafo. Tal clique sempre possui um vértice simplicial, a saber, o vértice de maior rótulo dentre os vértices da clique de ligação, o que garante que uma k -serpentina é um exemplo de grafo k -caminho.

Definição 3.2.1 ([24]). Um *grafo k -serpentina*, ou simplesmente uma k -serpentina em n vértices, com $k > 0$ e $n \geq k + 1$, notado por S_k^n , é definido indutivamente por:

- Todo grafo completo com $k + 1$ vértices é uma k -serpentina (e, portanto, um k -caminho).

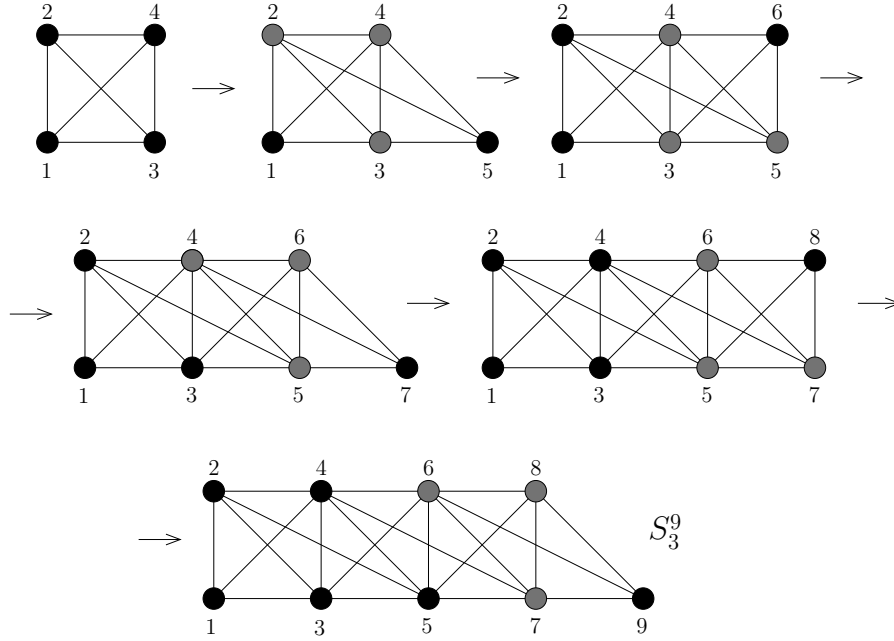


Figura 3.4: Construção de S_3^9 , a 3-serpentina com 9 vértices.

- Se $G = (V, E)$ é uma k -serpentina, $v \notin V$ e $Q \subseteq V$ é uma k -clique de G contendo os vértices mais recentemente incluídos, então $G' = (V \cup \{v\}, E \cup \{vw \mid w \in Q\})$ é também uma k -serpentina.
- Nenhum outro grafo é k -serpentina.

Para k e n dados, o grafo k -serpentina de ordem n é único. É possível definir uma k -serpentina de outras duas maneiras: por meio do conceito de maxregularidade ou por meio de potências de P_1^n . RODRIGUES *et al.* [25] observaram que um grafo k -caminho é uma k -serpentina, com $k \geq 1$, quando é $(n, 2k)$ -maxregular. Pela definição de maxregularidade, a k -serpentina é o k -caminho de ordem n com o maior número de vértices de grau $2k$.

Para o terceiro modo de se definir uma k -serpentina, é necessário recordarmos o conceito de potência de um grafo. Dados um grafo $G = (V, E)$ e um número inteiro positivo d , a d -ésima potência de G é o grafo $G^{(d)} = (V, E')$ no qual dois vértices são adjacentes se e somente se a distância entre eles em G é no máximo d . Segue que $G = G^{(1)} \subseteq G^{(2)} \subseteq \dots$ [28].

Da definição de d -ésima potência de um grafo, MARKENZON e WAGA [24] estabeleceram a seguinte relação entre $(P_1^n)^{(d)}$ e os grafos k -serpentina:

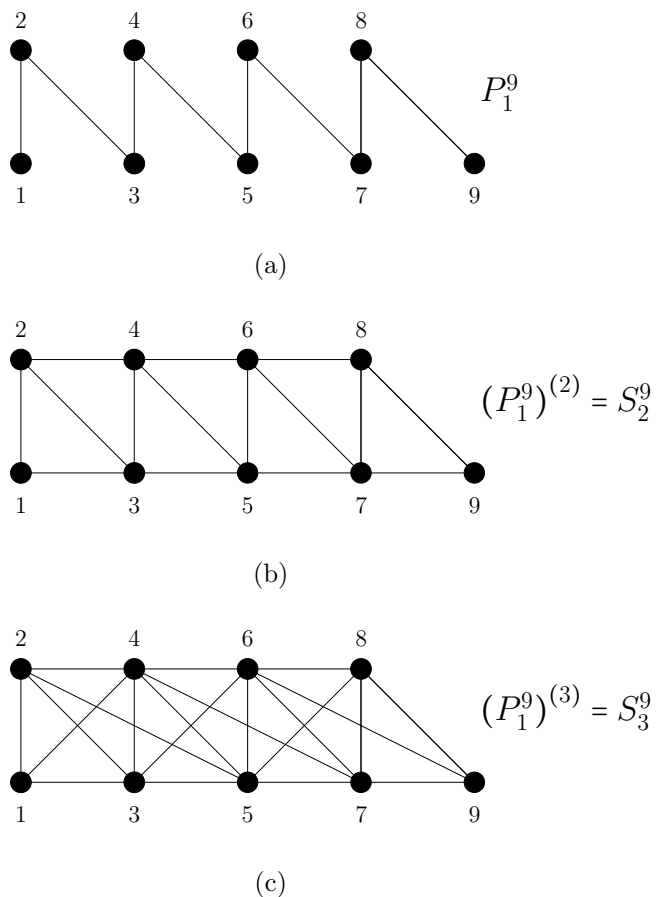


Figura 3.5: Construção de S_2^9 e S_3^9 por potências 2 e 3 de P_1^9 .

Lema 3.2.1. Para um número inteiro positivo d fixo, com $d < n$, $(P_1^n)^{(d)}$ é um grafo d -serpentina.

Um exemplo é mostrado na Figura 3.5 na qual, partindo de um caminho com nove vértices, P_1^9 , obtemos: (i) S_2^9 , em 3.5(b), tomando a potência 2 do primeiro grafo; (ii) S_3^9 , em 3.5(c), tomando a potência 3 do primeiro grafo. A Figura 3.4 ilustra a construção da mesma 3-serpentina com nove vértices seguindo sua definição indutiva.

As matrizes de adjacência de S_2^9 e S_3^9 (Figuras 3.5(b) e 3.5(c)) são, respectivamente:

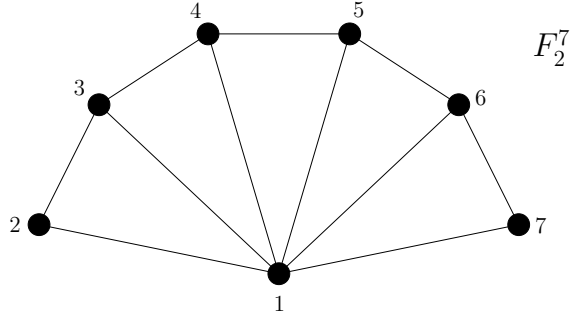


Figura 3.7: $F_2^7 = K_1 + S_1^6$, o único 2-leque com 7 vértices.

de banda de suas respectivas matrizes de adjacência. Assim, rotulando os vértices de uma k -serpentina como feito para os casos particulares anteriores (rótulos 1 a k para os vértices da k -clique inicial e os demais variando de $(k + 1)$ a n , em ordem crescente conforme adição ao grafo durante sua construção), podemos afirmar que a matriz de adjacência associada a uma k -serpentina em n vértices, S_k^n , é uma matriz simétrica do tipo (k, k) -banda, similar às mostradas em (3.3). Procurar por grafos satisfazendo essa condição foi a primeira motivação para este trabalho.

RODRIGUES *et al.* [25] apresentaram uma quarta possibilidade nos casos em que $k = 2$ e $n > 3$, definindo uma 2-serpentina em n vértices a partir de sua sequência hamiltoniana de graus (*hds*). Isso é possível pelo fato da 2-serpentina ser um exemplo de *mop* e, conseqüentemente, possuir um ciclo hamiltoniano. Quando n é par, como na Figura 3.6(a), a *hds* de S_2^n é

$$[2, 3] \circ [4]^{\frac{n-4}{2}} \circ [2, 3] \circ [4]^{\frac{n-4}{2}},$$

e quando n é ímpar, como na Figura 3.6(b), sua *hds* é

$$[2, 3] \circ [4]^{\lfloor \frac{n-4}{2} \rfloor} \circ [3, 2] \circ [4]^{\lfloor \frac{n-4}{2} \rfloor + 1}.$$

A segunda subfamília dos grafos k -caminho é composta pelos grafos k -leque. Sua definição faz uso da operação de *junção* de grafos [29]. Dados $G_1 = (V_1, E_1)$ e $G_2 = (V_2, E_2)$, a *junção* de G_1 e G_2 é o grafo $G_1 + G_2$ definido por

$$G_1 + G_2 = (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2 \cup \{uv \mid u \in V_1 \text{ e } v \in V_2\}). \quad (3.4)$$

Definição 3.2.2 ([24]). Um grafo k -caminho, com $k \geq 2$, é um k -leque em n vértices quando é a junção do grafo completo K_l , com $1 \leq l \leq k-1$, e de uma $(k-l)$ -serpentina com $n-l$ vértices, S_{k-l}^{n-l} , ou seja, $K_l + S_{k-l}^{n-l}$.

Como, dado um valor de k , a variável l pode variar de 1 a $k-1$, é o par $(l, k-l)$ que especifica o tipo de junção de um k -leque. Para um dado $n > 2k+1$, existem $k-1$ k -leques não isomorfos determinados pelos pares $(1, k-1), (2, k-2), \dots, (k-1, 1)$ [24].

Quando $k = 2$, l é obrigatoriamente igual a 1 e o par $(1, 1)$ especifica a junção do único 2-leque em n vértices, formado por K_1 (um vértice apenas) e S_1^{n-1} (que coincide com um caminho de $n-1$ vértices). Assim como uma 2-serpentina, um 2-leque também fica caracterizado por sua hds , dada por $[2, n-1, 2] \circ [3]^{n-3}$. A Figura 3.7 traz como exemplo o 2-leque com 7 vértices e hds igual a $[2, 6, 2] \circ [3]^4$.

Como um segundo exemplo, fixemos $n = 10$ e $k = 4$. Nesse caso, há três 4-leques não isomorfos determinados pelos pares $(1, 3), (2, 2)$ e $(3, 1)$. Os respectivos grafos são, portanto, $K_1 + S_3^9, K_2 + S_2^8$ e $K_3 + S_1^7$, e estão representados na Figura 3.8.

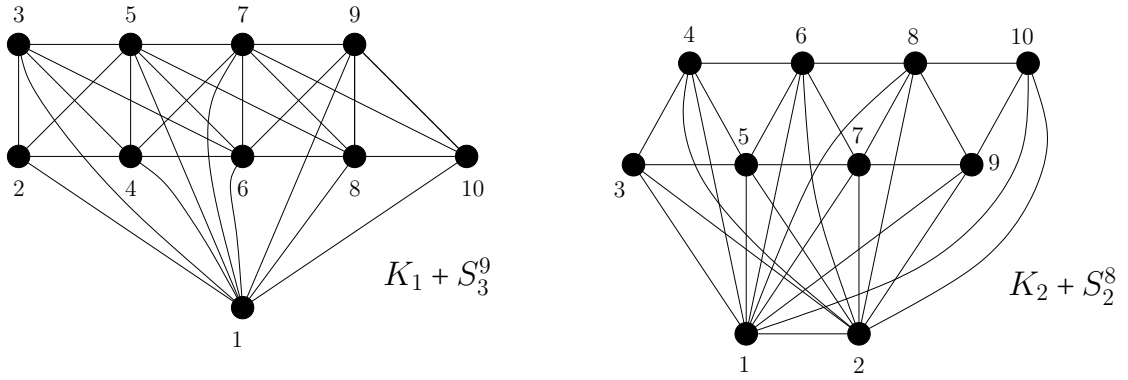
A matriz de adjacência do 4-leque determinado pela junção de K_2 com S_2^8 (Figura 3.8(b)), fica

$$A(K_2 + S_2^8) = \left[\begin{array}{cc|cccccccc} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{array} \right] \quad (3.5)$$

Os traços separando as duas primeiras colunas e duas primeiras linhas da matriz em (3.5) evidenciam sua estrutura em blocos:

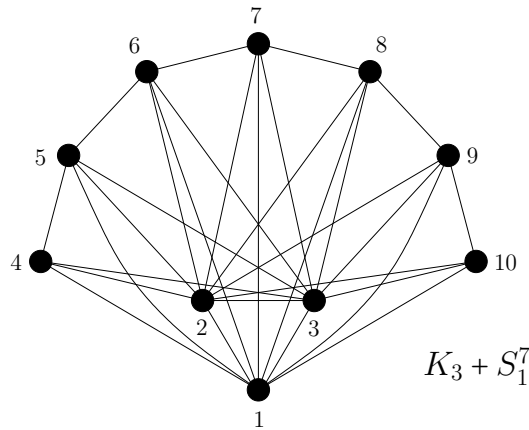
$$A(K_2 + S_2^8) = \left[\begin{array}{c|c} A(K_2) & \mathbb{J}_{2 \times 8} \\ \hline \mathbb{J}_{8 \times 2} & A(S_2^8) \end{array} \right], \quad (3.6)$$

onde o símbolo \mathbb{J} representa a matriz de ordem indicada com todos os seus coeficientes iguais a 1.



(a) 4-leque dado pelo par $(1, 3)$

(b) 4-leque dado pelo par $(2, 2)$



(c) 4-leque dado pelo par $(3, 1)$

Figura 3.8: Os três possíveis 4-leques com 10 vértices não isomorfos.

Observamos que, fixados n e k , temos diferentes k -leques não isomorfos que, consequentemente, estão associados a matrizes de adjacência distintas. Apesar disso, uma vez escolhido o par $(l, k - l)$ que especifica o k -leque, sempre podemos obter a respectiva matriz de adjacência com a estrutura em (3.6), bastando rotular os vértices do k -leque começando pelos l vértices do grafo completo seguidos dos vértices da $(k - l)$ -serpentina.

MARKENZON e WAGA [24] mostram como determinar, a partir dos grafos utilizados na junção, os graus dos vértices de um grafo k -leque, com $k \geq 2$, em n vértices. Os l vértices do grafo completo K_l têm grau $n - 1$ e os graus de cada um dos vértices da $(k - l)$ -serpentina, já conhecidos, devem ser acrescidos de l . Explicitaremos essa sequência no próximo capítulo.

A terceira subfamília dos grafos cordais de nosso interesse é formada pelos grafos k -árvore estrela, cuja definição apresentamos a seguir.

Definição 3.2.3 ([27]). Uma k -*árvore estrela* ou, simplesmente, uma k -estrela em n vértices, com $n > k + 1$, notada por E_k^n , é uma k -árvore com exatamente $n - k$ vértices simpliciais.

A Definição 3.2.3 é equivalente a colocarmos uma restrição sobre a escolha da clique de ligação no momento de adição de um novo vértice à k -árvore. Como usual, iniciamos com um grafo completo com $k + 1$ vértices e podemos selecionar quaisquer k vértices dentre eles para formar a clique de ligação ao adicionarmos o vértice de rótulo $(k + 2)$. A partir daí, qualquer novo vértice adicionado ao grafo terá como clique de ligação a clique de ligação do vértice $(k + 2)$. Escolhidos valores para k e n , assim como k vértices dentre os que formam a clique base, a k -árvore estrela obtida é única. Podemos, sem perda de generalidade, escolher como clique de ligação aquela formada pelos vértices de rótulos 1 a k da clique base; qualquer vértice de rótulo j , com $j \geq (k + 2)$, adicionado à k -árvore será ligado aos vértices dessa clique de ligação (por definição, o vértice de rótulo $(k + 1)$ também está ligado a esses k vértices).

Uma definição alternativa para as k -árvores estrela é por meio da operação de junção entre um grafo completo com k vértices, K_k , e o complementar do grafo completo com $n - k$ vértices, \overline{K}_{n-k} , que consiste em $n - k$ pontos isolados. Assim, podemos representar E_k^n como $K_k + \overline{K}_{n-k}$. Trabalhar com essa definição não é interessante ao propósito deste trabalho.

Na Figura 3.9 apresentamos dois exemplos: uma 2-estrela com oito vértices, E_2^8 , e uma 4-estrela com sete vértices, E_4^7 . As respectivas cliques de ligação estão destacadas em cinza; para E_2^8 , a clique de ligação é formada pelos vértices de rótulos 1 e 2, enquanto para E_4^7 , pelos vértices de rótulos 1, 2, 3 e 4. Observe que E_2^8 possui $8 - 2 = 6$ vértices simpliciais (rótulos 3 a 8), de grau 2, enquanto E_4^7 possui $7 - 4 = 3$ vértices simpliciais (rótulos 5 a 7), de grau 4. As matrizes de adjacência desses

grafos são, respectivamente,

$$A(E_2^8) = \left[\begin{array}{cc|cccccc} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad \text{e} \quad A(E_4^7) = \left[\begin{array}{cccc|ccc} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right]. \quad (3.7)$$

Os traços horizontais e verticais nas matrizes em (3.7) dividem cada uma delas nos seguintes blocos

$$A(E_2^8) = \left[\begin{array}{c|c} A(K_2) & \mathbb{J}_{2 \times 6} \\ \hline \mathbb{J}_{6 \times 2} & 0_6 \end{array} \right] \quad \text{e} \quad A(E_4^7) = \left[\begin{array}{c|c} A(K_4) & \mathbb{J}_{4 \times 3} \\ \hline \mathbb{J}_{3 \times 4} & 0_3 \end{array} \right], \quad (3.8)$$

onde 0_i representa a matriz nula $i \times i$. Em geral, dado um grafo k -árvore estrela em n vértices, E_k^n , é sempre possível colocar sua matriz de adjacência na forma em bloco como as matrizes em (3.8), desde que a escolha para a clique de ligação dos vértices de rótulos $(k+1)$ a n seja formada pelos vértices de rótulos 1 a k ; obtemos

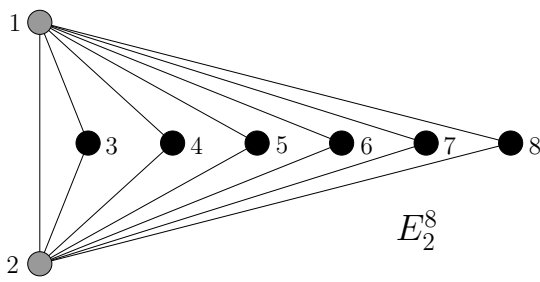
$$A(E_k^n) = \left[\begin{array}{c|c} A(K_k) & \mathbb{J}_{k \times (n-k)} \\ \hline \mathbb{J}_{(n-k) \times k} & 0_{n-k} \end{array} \right],$$

ou ainda

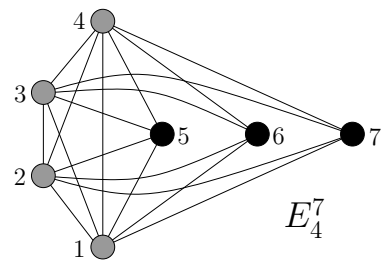
$$A(E_k^n) = \left[\begin{array}{c|c} \mathbb{J}_k - I_k & \mathbb{J}_{k \times (n-k)} \\ \hline \mathbb{J}_{(n-k) \times k} & 0_{n-k} \end{array} \right].$$

Trabalhar com matrizes em blocos pode ser útil em algumas aplicações, especialmente quando o número n é bem maior do que o valor de k , pois nesse caso a submatriz nula de ordem $n-k$, no bloco inferior direito, representa uma parte significativa da matriz de adjacência de E_k^n .

No próximo capítulo, olhamos com mais detalhes a distribuição dos graus dos vértices em cada uma das três subfamílias apresentadas. Além disso, tratamos do maior autovalor dos grafos k -serpentina e k -leque.



(a) 2-estrela com $n = 8$



(b) 4-estrela com $n = 7$

Figura 3.9: Exemplos de grafos k -árvore estrela para $k = 2$ e $k = 4$.

Capítulo 4

Índice de grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela

Começamos este capítulo recordando um resultado que estabelece cotas, superior e inferior, para o maior autovalor de um grafo. Ele será utilizado com o propósito de caracterizar o índice de grafos pertencentes as três subfamílias de grafos cordais, formadas pelas k -serpentinhas, pelos k -leques e pelas k -árvores estrela, à medida que o número de vértices desses grafos cresce arbitrariamente. Além disso, o Teorema do Entrelaçamento permite observar algumas relações entre os autovalores dos grafos considerados quando um novo vértice é adicionado a cada um deles.

4.1 Índice de um grafo

Um resultado importante e conhecido sobre matrizes não-negativas é o Teorema de Perron-Frobenius. Ele afirma que, se $A \in \mathcal{M}_{n \times n}$ é matriz não-negativa, então A possui um autovalor real não-negativo λ com maior valor absoluto dentre todos os autovalores de A (ou seja, $\lambda = \rho(A)$, o raio espectral de A) e cujo autovetor associado é real e não-negativo. Além disso, se A é também irredutível, então $\lambda = \rho(A)$ é um autovalor algebricamente simples e seu autovetor associado é positivo.

Usaremos a notação $\lambda_1(A(G))$, ou simplesmente λ_1 , para o índice de um grafo G , que corresponde ao maior autovalor da matriz $A(G)$. Como a matriz de adjacência $A(G)$ de um grafo conexo G é irredutível, segue que o seu raio espectral $\rho(A(G))$ e seu índice λ_1 coincidem [30]. Além disso, λ_1 tem autovetor associado positivo.

O notório resultado a seguir está enunciado sem demonstração em [31]. Resolvemos registrar aqui a nossa versão de prova para o mesmo resultado. Esta proposição será utilizada para caracterizar o índice das subfamílias k -caminho, k -leque e k -árvores estrela para valores grandes de n , o número de vértices do grafo considerado.

Proposição 4.1.1. Para todo grafo G , vale

$$\max \left\{ \bar{d}, \sqrt{d_{\max}} \right\} \leq \lambda_1 \leq d_{\max}, \quad (4.1)$$

onde \bar{d} é o grau médio e d_{\max} é o grau máximo dos vértices de G e λ_1 é o índice de G .

Demonstração. Seja $A = A(G)$ a matriz de adjacência de G e d_i o grau do vértice i em G . Para mostrar que $\lambda_1 \leq d_{\max}$, consideremos o autovetor positivo x associado a λ_1 , o índice ou raio espectral de G . Como:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} Ax = \begin{bmatrix} d_1 & d_2 & \dots & d_n \end{bmatrix} x \quad (4.2)$$

e

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} Ax = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} (\lambda_1 x) \quad (4.3)$$

$$= \begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_1 & \dots & \lambda_1 \end{bmatrix} x, \quad (4.4)$$

segue, de (4.2) e (4.4), que

$$(d_1 - \lambda_1)x_1 + (d_2 - \lambda_1)x_2 + \dots + (d_n - \lambda_1)x_n = 0. \quad (4.5)$$

Suponha por absurdo que $\lambda_1 > d_i$ para todo $i = 1, 2, \dots, n$. Então $d_i - \lambda_1 < 0$ para todo i , o que contradiria a equação (4.5). Logo, ao menos para d_{\max} , o maior dos números d_1, d_2, \dots, d_n , vale $\lambda_1 \leq d_{\max}$.

Vamos mostrar a outra desigualdade da Proposição em duas partes. A primeira delas é verificar que $\bar{d} \leq \lambda_1$. Seja $u = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}^\top \in \mathbb{R}^n$. Pela desigualdade de Schwarz, temos que*

$$\sum_{i=1}^n d_i = u^\top Au = \langle Au, u \rangle \leq \|Au\|_2 \|u\|_2 \leq \|A\| \|u\|_2 \|u\|_2 \leq \rho(A) (\|u\|_2)^2 = \lambda_1 \cdot n. \quad (4.6)$$

* No caso em que A é simétrica, $\|A\| =$ raio espectral de A .

Logo, dividindo os extremos da equação (4.6) por n , chegamos a $\bar{d} \leq \lambda_1$. A segunda parte é verificar que $\sqrt{d_{\max}} \leq \lambda_1$, o que pode ser feito observando que

$$\sqrt{d_{\max}} = \max_{j=1, \dots, n} \|Ae_j\|_2 \leq \lambda_1. \quad (4.7)$$

Assim, podemos concluir que $\max\{\bar{d}, \sqrt{d_{\max}}\} \leq \lambda_1$. \square

Na próxima seção, aplicaremos a Proposição 4.1.1 aos grafos das três subfamílias de nosso interesse.

4.2 Limites para o índice de grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela

As subfamílias dos grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela são formadas por grafos de estrutura bastante regular. Pelo processo de construção desses grafos, é possível determinar a distribuição dos graus dos vértices em cada um deles.

Tabela 4.1: Graus dos vértices de S_k^n .

graus	k	$k+1$	$k+2$	\dots	$2k-1$	$2k$
n ^o vértices	2	2	2	\dots	2	$n-2k$

Começemos pela primeira subfamília citada. MARKENZON e WAGA [24] mostraram que, em um grafo k -serpentina em n vértices, S_k^n , com $n > 2k+1$, os vértices têm grau determinados como mostra a Tabela 4.1. A título de ilustração, consideremos a 3-serpentina com sete vértices, S_3^7 , que está representada graficamente na Figura 4.1. Seus vértices têm graus como mostra a Tabela 4.2, em acordo com a anterior. A terceira linha da Tabela 4.2 indica os rótulos dos vértices em S_3^7 que possuem grau correspondente à coluna na qual estão.

Tabela 4.2: Graus dos vértices de S_3^7 .

graus	3	4	5	6
n ^o vértices	2	2	2	1
rótulos	1 e 7	2 e 6	3 e 5	4

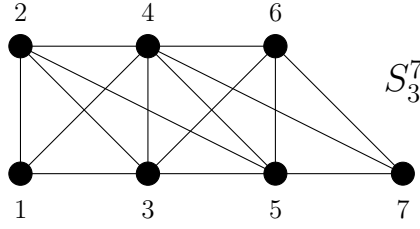


Figura 4.1: S_3^7 , a 3-serpentina com 7 vértices.

Com as informações fornecidas pela Tabela 4.1 e a Proposição 4.1.1, podemos estabelecer o valor do índice de S_k^n quando o número de vértices cresce arbitrariamente.

Lema 4.2.1. Para um grafo k -serpentina em n vértices, S_k^n , o índice $\lambda_1 \rightarrow 2k$ quando $n \in \mathbb{N} \rightarrow +\infty$.

Demonstração. Da Proposição 4.1.1 e da Tabela 4.1, temos que $\bar{d} \leq \lambda_1 \leq 2k$. O grau médio de um grafo k -serpentina em função do seu número n de vértices e de k é

$$\begin{aligned}
 \bar{d} &= \frac{1}{n} [2(k) + 2(k+1) + 2(k+2) + \dots + 2(2k-1) + (n-2k)(2k)] \\
 &= \frac{2}{n} [k + (k+1) + (k+2) + \dots + (k+(k-1)) + (n-2k)(k)] \\
 &= \frac{2}{n} \left[k^2 + \sum_{i=1}^{k-1} i + kn - 2k^2 \right] \\
 &= \frac{2}{n} \left[\frac{k(k-1)}{2} - k^2 + kn \right] \\
 &= 2k - \left(\frac{k^2+k}{n} \right).
 \end{aligned}$$

Assim,

$$2k - \left(\frac{k^2+k}{n} \right) \leq \lambda_1 \leq 2k \quad (4.8)$$

e, passando o limite quando $n \in \mathbb{N} \rightarrow +\infty$ em (4.8), concluímos que λ_1 se aproxima cada vez mais de $2k$ à medida que o número de vértices de uma k -serpentina cresce arbitrariamente. \square

Passemos à subfamília dos k -leques. Seja $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ um k -leque em n vértices formado pela junção do grafo completo K_l , com $1 \leq l \leq k-1$, e de uma $(k-l)$ -serpentina, S_{k-l}^{n-l} . Por definição de junção, cada um dos l vértices de K_l é ligado a todos os $n-l$ vértices de S_{k-l}^{n-l} e, conhecendo os graus do último, determinamos os graus de cada um dos vértices de $K_l + S_{k-l}^{n-l}$; os vértices de K_l são universais em $K_l + S_{k-l}^{n-l}$, enquanto os graus de cada um dos vértices de S_{k-l}^{n-l} , em $K_l + S_{k-l}^{n-l}$,

são acrescidos de l . Com base na Tabela 4.1, listamos os graus dos vértices de S_{k-l}^{n-l} na Tabela 4.3, adaptando as duas linhas da Tabela 4.1 para o caso de uma $(k-l)$ -serpentina com $n-l$ vértices. Pela definição de junção e com o auxílio da Tabela 4.3, listamos os graus dos vértices de $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ na Tabela 4.4, fazendo as devidas simplificações. Em ambas supomos $n-l > 2(k-l) + 1$ ou, equivalentemente, $n-1 > 2k-l$. Na Tabela 4.4, a segunda coluna diz respeito aos vértices de K_l na junção $K_l + S_{k-l}^{n-l}$, enquanto a terceira coluna em diante se referem aos vértices de S_{k-l}^{n-l} em $K_l + S_{k-l}^{n-l}$.

Tabela 4.3: Graus dos vértices de S_{k-l}^{n-l} .

graus	$k-l$	$(k-l)+1$	$(k-l)+2$...	$(k-l)+((k-l)-1)$	$2(k-l)$
nº vértices	2	2	2	...	2	$(n-l) - 2(k-l) = n - 2k + l$

Tabela 4.4: Graus dos vértices de $K_l + S_{k-l}^{n-l}$.

graus	$(l-1) + (n-l)$ $= n-1$	$(k-l)+l$ $= k$	$(k-l)+1+l$ $= k+1$...	$(k-l)+((k-l)-1)+l$ $= 2k-l-1$	$2(k-l)+l$ $= 2k-l$
nº vértices	l	2	2	...	2	$n-2k+l$

Para ilustrar o parágrafo anterior e as Tabelas 4.3 e 4.4, consideremos o caso em que $n = 10$, $k = 5$ e $l = 3$. Com essas escolhas, temos $k-l = 5-3 = 2$, $n-l = 10-3 = 7$ e a desigualdade $n-1 = 9 > 7 = 2k-l$ é satisfeita. A junção de $K_l = K_3$, o grafo completo com três vértices, com $S_{k-l}^{n-l} = S_2^7$, a 2-serpentina com sete vértices, forma o grafo 5-leque com dez vértices, $K_3 + S_2^7$. Os grafos K_3 e S_2^7 estão representados na Figura 4.2(a), enquanto a junção entre eles aparece na Figura 4.2(b). Os graus de cada um dos vértices em S_2^7 e em $K_3 + S_2^7$ estão listados, respectivamente, nas Tabelas 4.5 e 4.6. Os dados em ambas são uma adaptação das informações contidas nas Tabelas 4.3 e 4.4 para $n = 10$, $k = 5$ e $l = 3$.

Com relação à subfamília de grafos k -árvore estrela, a distribuição dos graus dos vértices é bem simples. Por construção, os k vértices da clique de ligação de todos os vértices de rótulos $(k+1)$ a n são universais, ou seja, têm grau $n-1$; já os demais $n-k$ vértices são simpliciais no grafo e, portanto, têm grau k . Arrumamos esses dados na Tabela 4.7.

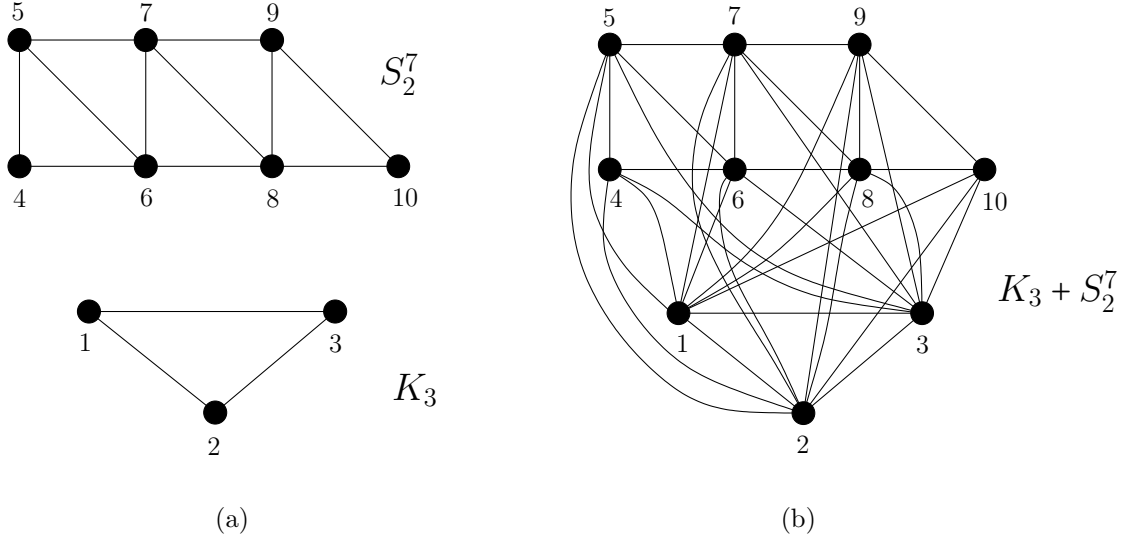


Figura 4.2: K_l , S_{k-l}^{n-l} e $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ para $l = 3$, $k = 5$ e $n = 10$.

Com as informações indicadas nas Tabelas 4.4 e 4.7 e a Proposição 4.1.1, podemos analisar, de modo análogo ao Lema 4.2.1, o comportamento do índice de $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ e de E_k^n quando o número de vértices cresce arbitrariamente.

Lema 4.2.2. Para um grafo k -leque em n vértices determinado pela junção $K_l + S_{k-l}^{n-l}$, o índice $\lambda_1 \rightarrow +\infty$ quando $n \in \mathbb{N} \rightarrow +\infty$.

Demonstração. Da Tabela 4.4, temos que o grau máximo em $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ é $n - 1$. Pela Proposição 4.1.1, segue que $\sqrt{n-1} \leq \lambda_1 \leq n - 1$. Passando o limite quando $n \in \mathbb{N} \rightarrow +\infty$ nessa desigualdade, concluímos que $\lambda_1 \rightarrow +\infty$ quando o número de vértices de um k -leque cresce arbitrariamente. \square

Lema 4.2.3. Para um grafo k -árvore estrela em n vértices, E_k^n , o índice $\lambda_1 \rightarrow +\infty$ quando $n \in \mathbb{N} \rightarrow +\infty$.

Demonstração. Análoga à prova do lema anterior, com os valores da Tabela 4.7. \square

Embora, na demonstração do Lema 4.2.3, não tenhamos necessitado da expressão para o grau médio de um grafo k -leque na demonstração do Lema 4.2.2, nem da

Tabela 4.5: Graus dos vértices de S_{k-l}^{n-l} para $l = 3$, $k = 5$ e $n = 10$.

graus	2	3	4
n ^o vértices	2	2	3
rótulos	4 e 10	5 e 9	6, 7 e 8

expressão para o grau médio de um grafo k -árvore estrela, podemos calculá-las a fim de realizar uma comparação entre os grafos das três subfamílias. Pela Tabela 4.4, o grau médio \bar{d} de um grafo k -leque determinado pela junção $K_l + S_{k-l}^{n-l}$, em função do seu número n de vértices e de k , é

$$\begin{aligned}
\bar{d} &= \frac{1}{n} [l(n-1) + 2(k) + 2(k+1) + \dots + 2(k + ((k-l) - 1)) + (n+l-2k)(2k-l)] \\
&= \frac{1}{n} [ln - l + 2[k + (k+1) + \dots + (k + ((k-l) - 1))] + 2kn - ln + 2kl - l^2 - 4k^2 + 2kl] \\
&= \frac{1}{n} \left[-l + 2[k(k-l)] + 2 \sum_{i=1}^{k-l-1} i + 2kn + 4kl - l^2 - 4k^2 \right] \\
&= \frac{1}{n} \left[-l + 2k^2 - 2kl + 2 \frac{(k-l)(k-l-1)}{2} + 2kn + 4kl - l^2 - 4k^2 \right] \\
&= 2k - \left(\frac{k^2+k}{n} \right).
\end{aligned}$$

Quando $n \in \mathbb{N} \rightarrow +\infty$, verificamos que $\bar{d} \rightarrow 2k$.

Por sua vez, pela Tabela 4.7, o grau médio de um grafo k -árvore estrela, E_k^n , em função do seu número n de vértices e de k , é

$$\bar{d} = \frac{1}{n} [(k)(n-1) + (n-k)(k)] = \frac{1}{n} [kn - k + kn - k^2] = 2k - \left(\frac{k^2+k}{n} \right),$$

que também tende a $2k$ quando $n \in \mathbb{N} \rightarrow +\infty$.

O índice de um grafo está comumente relacionado ao seu grau médio [31]. É interessante observar que, em grafos k -leque e k -árvore estrela em n vértices, o comportamento entre o índice e o grau médio difere de forma significativa à medida que o número de vértices cresce arbitrariamente. Veja a Tabela 4.8, na qual organizamos as informações obtidas nessa seção. Seria menos intrigante se esse comportamento não usual tivesse ocorrido apenas para as k -árvores estrela, pois os grafos k -caminho, dos quais as k -serpentinhas e os k -leques são exemplos, e os grafos k -árvore estrela são extremos, dentro da subfamília das k -árvores, com relação ao número de vértices simpliciais. No entanto, já acontece esse rompimento dentro da própria subfamília de grafos k -caminho, uma vez que o grau médio tanto de uma k -serpentina quanto de

Tabela 4.6: Graus dos vértices de $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ para $l = 3$, $k = 5$ e $n = 10$.

graus	9	5	6	7
nº vértices	3	2	2	3
rótulos	1, 2 e 3	4 e 10	5 e 9	6, 7 e 8

Tabela 4.7: Graus dos vértices de E_k^n .

graus	$n - 1$	k
n ^o vértices	k	$n - k$

um k -leque permanece finito quando o número de vértices cresce arbitrariamente, porém o índice da primeira permanece finito, enquanto o do segundo não. Além dessas observações, podemos concluir que o grau médio de qualquer k -árvore em n vértices é $\bar{d} = 2k - \left(\frac{k^2+k}{n}\right)$. Esse fato está associado ao número de arestas nesses grafos, que é o mesmo para qualquer k -árvore (ver (3.1)).

Tabela 4.8: Grau médio, índice e grau máximo quando $n \in \mathbb{N} \rightarrow +\infty$.

Subfamílias	grau médio (\bar{d})	índice (λ_1)	grau máximo (d_{\max})
k -serpentinhas	$2k - \left(\frac{k^2+k}{n}\right) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 2k$	$\lambda_1 \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 2k$	$2k$
k -leques	$2k - \left(\frac{k^2+k}{n}\right) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 2k$	$\lambda_1 \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} +\infty$	$n - 1 \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} +\infty$
k -estrelas	$2k - \left(\frac{k^2+k}{n}\right) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 2k$	$\lambda_1 \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} +\infty$	$n - 1 \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} +\infty$

4.3 Adição de um vértice e entrelaçamento de autovalores

Nesta seção, fazemos algumas observações sobre os autovalores de grafos k -serpentina e k -leque a partir do Teorema do Entrelaçamento de autovalores. Esse resultado estabelece inequações relacionando os autovalores de uma matriz real simétrica A de ordem n com os autovalores de uma submatriz principal B de A com ordem s [30]. Para $i = 1, 2, \dots, s$, vale

$$\lambda_{n-s+i}(A) \leq \lambda_i(B) \leq \lambda_i(A).$$

Ao apresentarmos os grafos k -serpentina na Seção 3.2, observamos que a estrutura de banda da matriz de adjacência de uma k -serpentina, para um valor fixo de k , não é alterada ao incluirmos um novo vértice ao grafo. Desse modo, a matriz de

adjacência da k -serpentina em n vértices, $A(S_k^n)$, é uma submatriz principal de ordem n da matriz de adjacência da k -serpentina em $n+1$ vértices, $A(S_k^{n+1})$. Usando o Teorema do Entrelaçamento de autovalores, para k fixo e $i = 1, 2, \dots, n$, temos que

$$\lambda_{i+1}(A(S_k^{n+1})) \leq \lambda_i(A(S_k^n)) \leq \lambda_i(A(S_k^{n+1})).$$

Em particular, $\lambda_2(A(S_k^{n+1})) \leq \lambda_1(A(S_k^n)) \leq \lambda_1(A(S_k^{n+1}))$, ou seja, para k fixo, o índice de S_k^n é limitado pelo índice e pelo segundo maior autovalor de S_k^{n+1} .

Na Seção 3.2 também vimos que, fixados n e k , com $n > 2k+1$, existem $k-1$ k -leques não isomorfos. Conseqüentemente, cada um desses k -leques está associado a uma matriz de adjacência particular. Além disso, uma vez escolhido o par $(l, k-l)$ que especifica o k -leque, no qual $1 \leq l \leq k-1$, podemos obter a respectiva matriz de adjacência com a estrutura em blocos

$$A(K_l + S_{k-l}^{n-l}) = \left[\begin{array}{c|c} A(K_l) & \mathbb{J}_{l \times (n-l)} \\ \hline \mathbb{J}_{(n-l) \times l} & A(S_{k-l}^{n-l}) \end{array} \right], \quad (4.9)$$

bastando rotular os vértices do k -leque começando pelos l vértices do grafo completo seguidos pelos $n-l$ vértices da $(k-l)$ -serpentina, como usual. A adição de um vértice ao k -leque, mantendo-se k e l fixos, deve ocorrer, obrigatoriamente, como vértice da $(k-l)$ -serpentina. Segue que $A(K_l + S_{k-l}^{n-l})$ é uma submatriz principal de $A(K_l + S_{k-l}^{(n+1)-l})$. Pelo Teorema do Entrelaçamento de autovalores, para k e l fixos e $i = 1, 2, \dots, n$, vale

$$\lambda_{i+1}(A(K_l + S_{k-l}^{(n+1)-l})) \leq \lambda_i(A(K_l + S_{k-l}^{n-l})) \leq \lambda_i(A(K_l + S_{k-l}^{(n+1)-l})).$$

Em particular,

$$\lambda_2(A(K_l + S_{k-l}^{(n+1)-l})) \leq \lambda_1(A(K_l + S_{k-l}^{n-l})) \leq \lambda_1(A(K_l + S_{k-l}^{(n+1)-l})),$$

ou seja, para k e l fixos, o índice de $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ é limitado pelo índice e pelo segundo maior autovalor de $K_l + S_{k-l}^{(n+1)-l}$. Como ilustração, consideremos $k = 5$ e $l = 3$. Quando $n = 15$, o 5-leque é determinado pela junção de K_3 com uma 2-serpentina com doze vértices, S_2^{12} . Já quando $n = 16$, o 5-leque é determinado pela junção de K_3 com uma 2-serpentina com treze vértices, S_2^{13} . Os três maiores autovalores de $K_3 + S_2^{13}$ são 9.099644, 3.119464 e 2.297030, enquanto os dois maiores autovalores de $K_3 + S_2^{12}$ são 8.83797 e 2.99390, calculados pelo *software* OCTAVE [32]. Fica evidente

que o índice de $K_3 + S_2^{12}$, 8.83797, é limitado superiormente pelo índice e inferiormente pelo segundo maior autovalor de $K_3 + S_2^{13}$, 9.099644 e 3.119464, respectivamente.

Por sua vez, para k e l fixos, é claro que $A(K_l)$ é uma submatriz principal de ordem l de $A(K_l + S_{k-l}^{n-l})$, como em (4.9). Portanto, para $i = 1, 2, \dots, l$, vale

$$\lambda_{(n-l)+i}(A(K_l + S_{k-l}^{n-l})) \leq \lambda_i(A(K_l)) \leq \lambda_i(A(K_l + S_{k-l}^{n-l})). \quad (4.10)$$

Como todos os autovalores do grafo completo K_l são conhecidos, a equação (4.10) pode ser útil para analisar os autovalores de $K_l + S_{k-l}^{n-l}$.

Os grafos k -árvore estrela não foram considerados nesta seção, uma vez que uma parte significativa de sua matriz de adjacência é um bloco nulo, como as matrizes em (3.8). Nesse caso, o Teorema do Entrelaçamento aplicado à matriz de adjacência de E_k^n e sua submatriz principal $\mathbb{J}_{k \times k} - I_k$ de ordem k resulta em desigualdades pouco informativas, em especial quando os valores de n e k se distanciam.

Capítulo 5

Contagem de 4-ciclos

O objetivo deste capítulo é estabelecer o número de 4-ciclos contidos em grafos pertencentes a três subfamílias de grafos cordais. Iniciamos pela contagem de 4-ciclos em grafos da subfamília das k -serpentinhas e, com o resultado obtido, passamos à contagem de 4-ciclos em grafos da subfamília dos k -leques. Em seguida, tratamos da contagem de 4-ciclos contidos em grafos da subfamília das k -árvores estrela. Em cada um dos três casos mencionados, a contagem se dá identificando as possíveis arrumações entre os rótulos dos vértices que compõem os 4-ciclos a fim de buscar objetos combinatórios que permitam contabilizá-los.

5.1 Número de 4-ciclos em grafos k -serpentina

As Proposições 5.1.1, 5.1.2 e 5.1.3 estabelecem o número de 4-ciclos contidos em grafos 3-, 4- e 5-serpentina em função do número n de vértices do grafo considerado. Enquanto a contagem desses ciclos em grafos 2-serpentina e mesmo em grafos 3-serpentina é viável a partir da representação gráfica atinente, tal abordagem deixa de sê-lo em grafos k -serpentina, com $k \geq 4$. Essa dificuldade surge pois o número de arestas dos respectivos grafos k -serpentina aumenta significativamente, tornando a tarefa de representá-los graficamente bastante complexa. Por esse motivo, procuramos estabelecer um método de contagem que fosse independente da representação gráfica de qualquer grafo k -serpentina e que não dependesse da listagem explícita de todos os 4-ciclos nele contidos.

Em seguida as três proposições mencionadas, apresentamos o Teorema 5.1.1, o

principal resultado desta seção, que estabelece o número de 4-ciclos contidos em grafos k -serpentina com n vértices em função das variáveis n e k , para qualquer $k \geq 2$. As proposições que antecedem o teorema são, portanto, casos particulares do mesmo. Mantivemos a demonstração da Proposição 5.1.2, relativa aos grafos 4-serpentina, alocando para o Apêndice A as provas das Proposições 5.1.1 e 5.1.3, referentes aos grafos 3- e 5-serpentina, respectivamente. As demonstrações dos casos particulares são muito ilustrativas para a compreensão do caso geral. Fica a critério do leitor seguir o fluxo do texto ou consultar o Apêndice A antes da leitura do Teorema 5.1.1.

Há um ponto crucial para a contagem de 4-ciclos pelo método desenvolvido nesta seção. Qualquer 4-ciclo está associado à sequência cíclica dos rótulos dos quatro vértices que o compõe (omitindo-se, ao final da sequência, a repetição do seu primeiro vértice). Sendo inteiros distintos, esses rótulos sempre podem ser ordenados. Considere $a < b < c < d$, com a, b, c e d inteiros positivos, os rótulos dos vértices associados a um 4-ciclo. Como a respectiva sequência dos seus vértices é cíclica, podemos escolher o menor rótulo, a , para iniciá-la, isto é, escrevê-la como $a _ _ _$. Nessas condições, pelo mesmo motivo, qualquer 4-ciclo pode ser identificado a uma sequência iniciada por a e com d , o maior dentre os rótulos dos seus vértices, ocupando a penúltima ou última posição na sequência. Ou seja, qualquer 4-ciclo formado pelos quatro vértices de rótulos a, b, c e d , com a, b, c e d inteiros positivos satisfazendo $a < b < c < d$, pode ser representado ou por uma sequência da forma $a _ _ d$ ou por uma sequência da forma $a _ d _$. Essas duas maneiras de expressar as sequências associadas a um 4-ciclo determinam duas categorias (disjuntas) que definimos por:

$$\textit{Lista 1: } a _ _ d \quad \text{ou} \quad \textit{Lista 2: } a _ d _, \quad (5.1)$$

nas quais a, b, c e d são inteiros positivos satisfazendo $a < b < c < d$.

Pelo exposto na parágrafo anterior, dado um 4-ciclo contido em um grafo k -serpentina em n vértices, S_n^k , podemos sempre associá-lo a uma sequência cíclica de seus vértices pertencente a exatamente uma das categorias em (5.1). Nossa tarefa é entender como as duas lacunas vazias nas *Listas 1* ou *2* são preenchidas com os possíveis inteiros estritamente maiores que a e menores que d . O primeiro caso tratado por meio da contagem utilizando listas foi o número de 4-ciclos contidos em

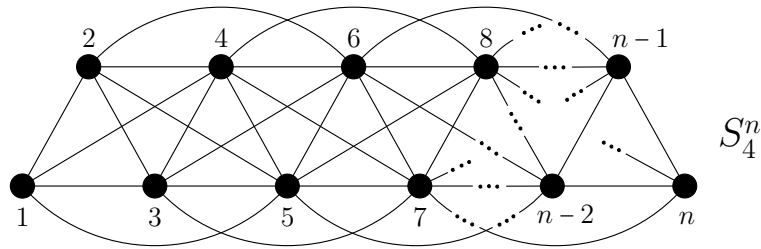


Figura 5.1: S_4^n , a 4-serpentina com n vértices.

grafos 3-serpentina.

Proposição 5.1.1 (Número de 4-ciclos em S_3^n). Para um grafo 3-serpentina com n vértices, S_3^n , com $n > 6$, o número de 4-ciclos, em função de n , é dado por

$$n_4(S_3^n) = 7n - 26. \quad (5.2)$$

Demonstração. Consultar Apêndice A. □

Para grafos pertencentes à subfamília das 4-serpentinhas (ver Figura 5.1), a contagem de 4-ciclos contidos no grafo em função do seu número de vértices n se dá de maneira semelhante ao caso anterior.

Proposição 5.1.2 (Número de 4-ciclos em S_4^n). Para um grafo 4-serpentina com n vértices, S_4^n , com $n > 8$, o número de 4-ciclos, em função de n , é dado por

$$n_4(S_4^n) = 22n - 100. \quad (5.3)$$

Demonstração. Para obtermos uma expressão que contabilize o número de 4-ciclos contidos em um grafo 4-serpentina em função do número n de seus vértices, vamos tratar separadamente dos dois tipos de 4-ciclos possíveis: aqueles cujas listas de vértices podem ser identificadas como uma *Lista 1* e aqueles cujas listas de vértices podem ser identificadas como uma *Lista 2*, estando ambas as *Listas 1* e *2* definidas em (5.1).

Consideremos inicialmente os 4-ciclos cujas respectivas listas podem ser reconhecidas como uma *Lista 1*. Nesse caso, por hipótese, os quatro números inteiros positivos e distintos entre si (a, b, c e d) que compõem a lista associada ao 4-ciclo satisfazem $a < b < c < d$, a ocupa a primeira posição e d ocupa a última posição na lista. O menor valor possível de a na lista $a _ _ d$ é 1, enquanto o maior valor

possível é $n - 3$, pois nela aparecem três inteiros estritamente maiores que a e, além disso, d , o último elemento da lista, não pode assumir um valor superior ao número n de vértices.

Na Tabela 5.1, organizamos a contagem de todos os 4-ciclos cujas listas pertencem à categoria *Lista 1*. Nessa tabela, há $n - 2$ linhas e $n - 2$ colunas; a primeira coluna descreve os possíveis valores de a , o primeiro elemento da lista, enquanto a primeira coluna descreve os possíveis valores de d , o último elemento da lista. Uma célula rs , com $r = 2, 3, \dots, n - 2$ e $s = 2, 3, \dots, n - 2$, é preenchida com o número de 4-ciclos tendo o valor de a dado na célula $r1$ e o valor de d dado na célula $1s$. Por exemplo, a célula em que $r = 5$ e $s = 5$ está associada ao valor $a = 4$ e $d = 7$. Ela é preenchida com o número de 4-ciclos associados à lista $4 _ _ 7$. São dois os 4-ciclos: 4567 e 4657. Caso não haja nenhum 4-ciclo possível para algum valor de a e de d , a respectiva célula é deixada vazia.

Tabela 5.1: Contagem de 4-ciclos em S_4^n associados a listas da categoria *Lista 1* ($a _ _ d$).

$a \backslash d$	4	5	6	7	8	...	$n - 3$	$n - 2$	$n - 1$	n
1	2	6								
2		2	6							
3			2	6						
4				2	6					
⋮					⋮	⋮				
⋮						⋮	⋮			
$n - 6$							2	6		
$n - 5$								2	6	
$n - 4$									2	6
$n - 3$										2

Vejamos a segunda linha da Tabela 5.1. Se $a = 1$, d pode assumir os valores 4 ou 5. De fato, d não pode ser menor que 4, uma vez que há dois inteiros estritamente entre 1 e 4 para ocupar a segunda e a terceira posição na *Lista 1*. Por outro lado, por construção do grafo S_4^n , d não pode ser maior que 5, uma vez que começamos com uma 5-clique e, ao adicionarmos o sexto vértice, o conectamos aos últimos quatro vértices adicionados, ou seja, apenas aos vértices de rótulos 2 a 5.

Quando $a = 1$ e $d = 4$, há duas formas de se preencher as duas lacunas da lista $1 _ _ 4$ com os números 2 e 3 e essas listas estão associadas a dois 4-ciclos não isomorfos: 1234 e 1324. Quando $a = 1$ e $d = 5$, há seis formas de se preencher as duas lacunas da lista $1 _ _ 5$ com os números 2, 3 e 4 e as listas obtidas estão associadas a seis 4-ciclos não isomorfos: 1235, 1245, 1325, 1345, 1425 e 1435. Se há *exatamente* i números inteiros *estritamente entre* a e d , a quantidade de maneiras distintas de se preencher as duas lacunas centrais de uma lista na categoria *Lista 1* escolhendo dois dentre esses i inteiros é igual ao valor do arranjo de i inteiros tomados dois a dois, A_2^i . Para $i = 2$, $A_2^2 = 2$, e para $i = 3$, $A_2^3 = 6$. Logo, o número total de listas na categoria *Lista 1* tendo $a = 1$ é $\sum_{i=2}^3 A_2^i = A_2^2 + A_2^3 = 2 + 6 = 8$.

A contagem do número de formas de se preencher a segunda e terceira posições na lista $a _ _ d$ ocorre de modo análogo ao descrito no parágrafo anterior para $a = 2$ até $a = (n-4)$. Para cada um desses valores de a , obtemos $\sum_{i=2}^3 A_2^i = A_2^2 + A_2^3 = 2 + 6 = 8$ listas distintas na categoria *Lista 1*. Logo, de $a = 1$ até $a = (n-4)$, a soma do número de listas possíveis é igual a

$$(n-4) \sum_{i=2}^3 A_2^i = (n-4)(8) = 8n - 32. \quad (5.4)$$

O caso em que $a = (n-3)$, situação descrita na última linha da Tabela 5.1, deve ser tratado separadamente. Para esse valor de a , temos obrigatoriamente $d = n$; há somente duas formas de se preencher as duas lacunas da lista $(n-3) _ _ (n)$ com os inteiros $(n-2)$ e $(n-1)$ e as listas obtidas estão associadas a dois 4-ciclos não isomorfos: $(n-3)(n-2)(n-1)(n)$ e $(n-3)(n-1)(n-2)(n)$. Assim, para $a = (n-3)$, o número de listas distintas na categoria *Lista 1* é igual a $A_2^2 = 2$. Somando essa quantidade àquela calculada em (5.4), chegamos ao número total de listas na categoria *Lista 1* correspondentes a 4-ciclos não isomorfos em S_4^n :

$$\left((n-4) \sum_{i=2}^3 A_2^i \right) + A_2^2 = (8n - 32) + 2 = 8n - 30. \quad (5.5)$$

Passemos a contagem dos 4-ciclos cujas respectivas listas podem ser enquadradas na categoria *Lista 2* em (5.1). Nesse caso, por hipótese, os quatro números inteiros positivos e distintos entre si $(a, b, c$ e $d)$ que compõem a lista associada ao 4-ciclo satisfazem $a < b < c < d$, a ocupa a primeira posição e d ocupa a penúltima posição na lista. O menor valor possível de a na lista $a _ d _ _$ é 1, enquanto o maior valor possível é $n-3$, pois nela aparecem três inteiros estritamente maiores que a e, além

disso, d , o maior inteiro na lista, não pode ultrapassar n . É importante observarmos que uma lista associada a um 4-ciclo é cíclica. Assim, ambas as listas $abcd$ e $acdb$ estão na categoria *Lista 2* e correspondem a 4-ciclos *iguais*, de modo que devemos considerar apenas uma delas na contagem de 4-ciclos associados a listas na categoria *Lista 2*. Faremos a convenção de escolher sempre a primeira, $abcd$, na qual o número na segunda posição é menor que o na última posição da lista, uma vez que b é menor que c (ou seja, preenchamos a segunda posição da lista com o menor rótulo de vértice possível na ocasião).

Na Tabela 5.2, organizamos a contagem de todos os 4-ciclos cujas listas pertencem à categoria *Lista 2*. Nessa tabela, há $n - 2$ linhas e $n - 2$ colunas. A primeira coluna descreve os valores de a , o primeiro elemento da lista, que pode variar de 1 a $(n - 3)$. Já a primeira linha descreve os valores de d , o último elemento da lista, que pode variar de 4 a n . Uma célula rs , com $r = 2, 3, \dots, n - 2$ e $s = 2, 3, \dots, n - 2$, é preenchida com o número de 4-ciclos tendo o valor de a dado na célula $r1$ e o valor de d dado na célula $1s$. Por exemplo, a célula em que $r = 3$ e $s = 6$ está associada ao valor $a = 2$ e $d = 8$. Ela é preenchida com o número de 4-ciclos associados à lista $2_8_$. São três os 4-ciclos para esses valores de a e d : 2485, 2486 e 2586. Caso não haja nenhum 4-ciclo possível para algum valor de a e de d , a respectiva célula é deixada vazia.

Vejam os a segunda linha da Tabela 5.2. Se $a = 1$, d pode assumir os valores 4, 5, 6, 7, ou 8. De fato, d não pode ser menor que 4, uma vez que há dois inteiros estritamente entre 1 e 4 para ocupar a segunda e a última posição de uma lista na categoria *Lista 2*. Por outro lado, por construção do grafo S_4^n , d não pode ser maior que 8, pois não conseguiríamos preencher a segunda ou última posição em $a_d_$ com inteiros estritamente entre a e d e simultaneamente obter uma lista representativa de um 4-ciclo em S_4^n . Nesse grafo, cada vértice de rótulo i , $i \geq 5$, está ligado aos vértices de rótulos $(i - 4)$, $(i - 3)$, $(i - 2)$ e $(i - 1)$. Logo, se $a = 1$ e $d = 9$, por exemplo, poderíamos colocar 5 na segunda posição da lista $1_9_$, pois o vértice de rótulo 5 está conectado aos de rótulos 1 e 9, mas não teríamos como escolher um número estritamente entre 1 e 9 e diferente de 5 para ocupar a última posição sem contradizer a condição anterior.

Quando $a = 1$ e $d = 4$, há apenas uma forma de se preencher as duas lacunas

Tabela 5.2: Contagem de 4-ciclos em S_4^n associados a listas da categoria *Lista 2* ($a_d_$).

$a \backslash d$	4	5	6	7	8	9	10	11	...	$n-4$	$n-3$	$n-2$	$n-1$	n
1	1	3	6	3	1									
2		1	3	6	3	1								
3			1	3	6	3	1							
4				1	3	6	3	1						
⋮					⋮	⋮	⋮	⋮	⋮					
⋮						⋮	⋮	⋮	⋮	⋮				
⋮							⋮	⋮	⋮	⋮	⋮			
⋮								⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		
⋮									⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	
$n-7$										1	3	6	3	1
$n-6$											1	3	6	3
$n-5$												1	3	6
$n-4$													1	3
$n-3$														1

da lista $1_4_$ com os números 2 e 3 escolhendo o menor entre eles para ocupar a segunda posição; a lista que corresponde ao 4-ciclo em S_4^n é 1243. Quando $a = 1$ e $d = 5$, há três formas de preenchermos as duas lacunas da lista $1_5_$ com os números 2, 3 e 4 escolhendo o menor entre os dois selecionados para ocupar a segunda posição; as listas 1253, 1254 e 1354 estão associadas a três 4-ciclos não isomorfos em S_4^n . Se $a = 1$ e $d = 6$, há seis formas de as duas lacunas da lista $1_6_$ serem preenchidas com os números 2, 3, 4 e 5 escolhendo o menor entre os dois considerados para ocupar a segunda posição; as listas 1263, 1264, 1265, 1364, 1365 e 1465 determinam seis 4-ciclos não isomorfos em S_4^n . Quando $a = 1$ e $d = 7$, há três maneiras de preenchermos as duas lacunas da lista $1_7_$ com os números 3, 4 e 5 escolhendo o menor entre os dois considerados para ocupar a segunda posição; as listas 1374, 1375 e 1475 correspondem a três 4-ciclos não isomorfos em S_4^n . É interessante observarmos que, quando $a = 1$ e $d = 7$, não podemos usar o número 2 nem o número 6 para preencher nenhuma das lacunas da lista $1_7_$ visto que, por construção de S_4^n , 3 é o menor dentre os rótulos dos vértices ligados ao vértice de rótulo 7 e 5 é o maior dentre os rótulos dos vértices ligados ao vértice de rótulo

1. Logo, não podemos colocar o 2 na lista, nem na segunda nem na última posição, pois qualquer um dos casos implicaria na existência da aresta 27, que não ocorre em S_4^n ; analogamente, não podemos colocar o 6 na lista, nem na segunda nem na última posição, pois qualquer um dos casos implicaria na existência da aresta 16, que também não ocorre em S_4^n . Finalmente, se $a = 1$ e $d = 8$, há somente uma forma de as duas lacunas da lista $1 _ 8 _$ serem preenchidas com os números 4 e 5 escolhendo o menor entre eles para ocupar a segunda posição; a lista 1485 determina um 4-ciclo em S_4^n . Nesse caso, dado o modo de construção de S_4^n , não podemos usar os números 2, 3, 6 ou 7 para preencher nenhuma das lacunas da lista $1 _ 8 _$, como já explicado.

Se há i números inteiros *estritamente entre* a e d e cuja respectiva diferença com a e com d seja *menor que ou igual a* 4, então a quantidade de maneiras distintas de se preencher as duas lacunas de uma lista na categoria *Lista 2* escolhendo dois dentre esses i inteiros e colocando o menor entre eles na segunda posição da lista é igual ao valor da combinação de i inteiros tomados dois a dois, C_2^i . Para $i = 2$, $C_2^2 = 1$; para $i = 3$, $C_2^3 = 3$ e para $i = 4$, $C_2^4 = 6$. Logo, o número total de listas na categoria *Lista 2* tendo $a = 1$ é

$$\sum_{i=2}^4 C_2^i + \sum_{i=2}^3 C_2^i = \left(2 \sum_{i=2}^3 C_2^i\right) + C_2^4 = 2(1 + 3) + 6 = 14. \quad (5.6)$$

O preenchimento da segunda e última posições na lista $a _ d _$ ocorre de forma análoga à descrita nos últimos três parágrafos para $a = 2$ até $a = (n - 7)$. Para cada um desses valores de a , obtemos $2 \left(\sum_{i=2}^3 C_2^i\right) + C_2^4 = 14$ listas distintas na categoria *Lista 2*. Logo, de $a = 1$ até $a = (n - 7)$, a soma do número de listas possíveis é igual a

$$(n - 7) \left[\left(2 \sum_{i=2}^3 C_2^i\right) + C_2^4 \right] = (n - 7)(14) = 14n - 98. \quad (5.7)$$

Os casos em que $a = (n - j)$, com $j = 3, 4, 5, 6$, devem ser tratados com atenção, pois à medida que d se aproxima de n , diminuem a quantidade de inteiros estritamente entre a e d que satisfazem a respectiva diferença com a e com d ser menor que ou igual a 4. Isso ocorre porque temos uma limitação para o valor máximo de d , dada pelo número n de vértices do grafo S_4^n . Vamos considerar a linha em que $a = (n - 5)$ na Tabela 5.2 como exemplo. Nesse caso, d pode assumir os valores $(n - 2)$, $(n - 1)$ e n . Quando $a = (n - 5)$ e $d = (n - 2)$, há apenas uma forma de

preencher as duas lacunas da lista $(n-5) _ (n-2) _$ com os números $(n-4)$ e $(n-3)$ escolhendo $(n-4)$, o menor entre eles, para ocupar a segunda posição; a lista $(n-5)(n-4)(n-3)(n-2)$ determina um 4-ciclo em S_4^n . Quando $a = (n-5)$ e $d = (n-1)$, ocorrem três maneiras de preencher as duas lacunas da lista $(n-5) _ (n-1) _$ com os números $(n-4)$, $(n-3)$ e $(n-2)$ escolhendo o menor entre os dois selecionados para ocupar a segunda posição; as listas $(n-5)(n-4)(n-1)(n-3)$, $(n-5)(n-4)(n-1)(n-2)$ e $(n-5)(n-3)(n-1)(n-2)$ determinam três 4-ciclos não isomorfos em S_4^n . Já se $a = (n-5)$ e $d = n$, temos seis formas de preencher as duas lacunas da lista $(n-5) _ (n) _$ com os números $(n-4)$, $(n-3)$, $(n-2)$ e $(n-1)$ escolhendo o menor entre os dois selecionados para ocupar a segunda posição; as listas $(n-5)(n-4)(n)(n-3)$, $(n-5)(n-4)(n)(n-2)$, $(n-5)(n-4)(n)(n-1)$, $(n-5)(n-3)(n)(n-2)$, $(n-5)(n-3)(n)(n-1)$ e $(n-5)(n-2)(n)(n-1)$ estão associadas a seis 4-ciclos não isomorfos em S_4^n . Portanto, se $a = (n-5)$, o número de 4-ciclos representados por listas na categoria *Lista 2* é igual a $\sum_{i=2}^4 C_2^i = 10$.

Nas últimas $(n-3) - (n-7) = 4$ linhas da Tabela 5.2, podemos organizar a contagem dos 4-ciclos da seguinte forma: considerando $a = (n-6)$ e $a = (n-3)$, contamos

$$\left[\left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + C_2^3 \right] + C_2^2 = \left(2 \sum_{i=2}^3 C_2^i \right) + C_2^4 = 2(1+3) + 6 = 14$$

listas associadas a 4-ciclos não isomorfos em S_4^n . Falta somente considerarmos a penúltima e antepenúltima linhas das Tabela 5.2, associadas a $a = (n-5)$ e $a = (n-4)$. Para esses valores de a , contamos

$$\left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + \left(\sum_{i=2}^3 C_2^i \right) = \left(2 \sum_{i=2}^3 C_2^i \right) + C_2^4 = 2(1+3) + 6 = 14$$

listas associadas a 4-ciclos não isomorfos em S_4^n . Logo, os 4-ciclos representados por listas na categoria *Lista 2* em que $a = (n-j)$, com $j = 3, 4, 5, 6$, são em número igual a

$$\frac{(n-3)-(n-7)}{2} \left[\left(2 \sum_{i=2}^3 C_2^i \right) + C_2^4 \right] = 2[2(1+3) + 6] = 28. \quad (5.8)$$

Somando esse valor a quantidade de 4-ciclos representados por listas na categoria *Lista 2* em que $a = 1, 2, \dots, n-7$, dada pela equação (5.7), chegamos ao número

total de listas na categoria *Lista 2*:

$$(n-7) \left[\left(2 \sum_{i=2}^3 C_2^i \right) + C_2^4 \right] + 2 \left[\left(2 \sum_{i=2}^3 C_2^i \right) + C_2^4 \right] = (n-5) \left[\left(2 \sum_{i=2}^3 C_2^i \right) + C_2^4 \right] \quad (5.9)$$

$$= (n-5)(14) = 14n - 70.$$

Assim, da soma do número de 4-ciclos associados a listas da categoria *Lista 1* em (5.5) com o número de 4-ciclos associados a listas da categoria *Lista 2* em (5.9), chegamos ao número total de 4-ciclos em S_4^n em função do número de vértices n :

$$n_4(S_4^n) = \underbrace{\left[\left((n-4) \sum_{i=2}^3 A_2^i \right) + A_2^2 \right]}_{8n-30} + \underbrace{(n-5) \left[\left(2 \sum_{i=2}^3 C_2^i \right) + C_2^4 \right]}_{14n-70} = 22n - 100,$$

concluindo a demonstração. \square

A seguir, aplicamos o processo de contagem de 4-ciclos desenvolvido a fim de calcular uma expressão para n_4 em função de n sem sequer representar graficamente qualquer elemento da subfamília das 5-serpentinhas.

Proposição 5.1.3 (Número de 4-ciclos em S_5^n). Para um grafo 5-serpentina com n vértices, S_5^n , com $n > 10$, o número de 4-ciclos, em função de n , é dado por

$$n_4(S_5^n) = 50n - 270. \quad (5.10)$$

Demonstração. Consultar Apêndice A. \square

Inspirados pelas Proposições 5.1.1, 5.1.2 e 5.1.3, apresentamos um resultado mais geral, que trata da contagem de 4-ciclos contidos em um grafo k -serpentina com n vértices em função das variáveis n e k . Para facilitar sua leitura, procuramos manter a mesma estrutura de demonstração desenvolvida em cada um dos casos particulares.

Teorema 5.1.1 (Número de 4-ciclos em S_k^n). Para um grafo k -serpentina com n vértices, S_k^n , com $k \geq 2$ e $n > 2k$, o número de 4-ciclos, em função de n e k , é dado por

$$n_4(S_k^n) = \frac{kn}{6} (4k^2 - 9k + 5) - \frac{k}{12} (7k^3 - 8k^2 - 7k + 8). \quad (5.11)$$

Demonstração. Para obtermos uma expressão que contabilize o número de 4-ciclos contidos em um grafo k -serpentina em função do número n de seus vértices e da variável k , com $k \geq 2$, vamos tratar separadamente dos dois tipos de 4-ciclos

possíveis: aqueles cujas listas de vértices podem ser identificadas como uma *Lista 1* e aqueles cujas listas de vértices podem ser identificadas como uma *Lista 2*, estando ambas as *Listas 1* e *2* definidas em (5.1).

Consideremos inicialmente os 4-ciclos cujas respectivas listas podem ser reconhecidas como uma *Lista 1*. Nesse caso, por hipótese, os quatro números inteiros positivos e distintos entre si $(a, b, c$ e $d)$ que compõem a lista associada ao 4-ciclo satisfazem $a < b < c < d$, a ocupa a primeira posição e d ocupa a última posição na lista. O menor valor possível de a na lista $a _ _ d$ é 1, enquanto o maior valor possível é $(n - 3)$, pois nela aparecem três inteiros estritamente maiores que a e, além disso, d , o último elemento da lista, não pode assumir um valor superior ao número n de vértices.

Na Tabela 5.3, organizamos a contagem de todos os 4-ciclos cujas listas pertencem à categoria *Lista 1*. Nessa tabela, há $n - k + 1$ linhas e $n - 2$ colunas. A primeira coluna descreve os valores de a , o primeiro elemento da lista, que pode variar de 1 a $(n - k)$. Já a primeira linha descreve os valores de d , o último elemento da lista, que pode variar de 4 a n . Uma célula rs , com $r = 2, 3, \dots, n - k + 1$ e $s = 2, 3, \dots, n - 2$, é preenchida com o número de 4-ciclos tendo o valor de a dado na célula $r1$ e o valor de d dado na célula $1s$. Por exemplo, a célula em que $r = 3$ e $s = 4$ está associada ao valor $a = 2$ e $d = 6$. Ela é preenchida com o número de 4-ciclos associados à lista $2 _ _ 6$. São $A_2^3 = 6$ 4-ciclos: 2346, 2356, 2436, 2456, 2536 e 2546. Caso não haja nenhum 4-ciclo possível para algum valor de a e d , a respectiva célula é deixada vazia.

Vejamos a segunda linha da Tabela 5.3. Se $a = 1$, d pode assumir os valores de 4 até $(k + 1)$. De fato, d não pode ser menor que 4, uma vez que há dois inteiros estritamente entre 1 e 4 para ocupar a segunda e a terceira posição na *Lista 1*. Por outro lado, por construção do grafo S_k^n , d não pode ser maior que $(k + 1)$, uma vez que começamos com uma $(k + 1)$ -clique e, ao adicionarmos o $(k + 2)$ -ésimo vértice, o conectamos aos k vértices de maiores rótulos já presentes no grafo, ou seja, apenas aos vértices de rótulos 2 a $(k + 1)$.

Tabela 5.3: Contagem de 4-ciclos em S_k^n associados a listas da categoria *Lista 1* ($a _ _ d$), para $a = 1, 2, \dots, n - k - 1, n - k$.

$a \backslash d$	4	5	6	...	$k - 1$	k	$k + 1$	$k + 2$...	$n - k + 2$	$n - k + 3$	$n - k + 4$...	$n - 3$	$n - 2$	$n - 1$	n
1	A_2^2	A_2^3	A_2^{k-3}	A_2^{k-2}	A_2^{k-1}										
2		A_2^2	A_2^3	A_2^{k-3}	A_2^{k-2}	A_2^{k-1}									
⋮			⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮								
⋮				⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮							
⋮					⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮						
⋮						⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮					
⋮							⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮				
⋮								⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮			
$n - k - 1$										A_2^2	A_2^3	A_2^{k-3}	A_2^{k-2}	A_2^{k-1}	
$n - k$											A_2^2	A_2^3	A_2^{k-3}	A_2^{k-2}	A_2^{k-1}

Se há *exatamente* i números inteiros *estritamente* entre a e d , a quantidade de maneiras distintas de se preencher as duas lacunas centrais de uma lista na categoria *Lista 1* escolhendo dois dentre esses i inteiros é igual ao valor do arranjo de i inteiros tomados dois a dois, A_2^i . Assim, quando $a = 1$ e $d = 4$, há $A_2^2 = 2$ formas de preenchermos as duas lacunas da lista $1 _ _ 4$ com os números 2 e 3 e essas listas estão associadas a dois 4-ciclos não isomorfos em S_k^n . Se $a = 1$ e $d = 5$, há $A_2^3 = 6$ formas de preenchermos as duas lacunas da lista $1 _ _ 5$ com os números 2, 3 e 4 e as listas obtidas estão associadas a seis 4-ciclos não isomorfos em S_k^n . Continuamos de modo análogo até $a = 1$ e $d = (k + 1)$, quando ocorrem $A_2^{k-1} = (k - 2)(k - 1)$ formas de se preencher as duas lacunas da lista $1 _ _ (k + 1)$ com os números $2, 3, \dots, k - 1, k$ obtendo listas associadas a $(k - 2)(k - 1)$ 4-ciclos não isomorfos em S_k^n . Pelo exposto, segue que o número total de listas na categoria *Lista 1* tendo $a = 1$ é

$$A_2^2 + A_2^3 + \dots + A_2^{k-1} = \sum_{i=2}^{k-1} A_2^i.$$

A contagem do número de formas de se preencher a segunda e terceira lacunas na lista $a _ _ d$ ocorre de modo análogo ao descrito no parágrafo anterior para $a = 2$ até $a = (n - k)$ e está retratada da terceira à última linha da Tabela 5.3. Para cada um desses valores de a , obtemos $A_2^2 + A_2^3 + \dots + A_2^{k-1} = \sum_{i=2}^{k-1} A_2^i$ listas distintas na categoria *Lista 1*. Logo, de $a = 1$ até $a = (n - k)$, a soma do número de listas possíveis é igual a

$$(n - k) \sum_{i=2}^{k-1} A_2^i. \quad (5.12)$$

Os casos em que $a = (n - k + 1)$ até $a = (n - 3)$ devem ser tratados separadamente e estão considerados na Tabela 5.4. Como o valor de d está limitado pelo número n de vértices do grafo, passamos a contar cada vez menos inteiros *estritamente* entre a e d à medida que a aumenta de $(n - k + 1)$ até $(n - 3)$. Por exemplo, na segunda linha da Tabela 5.4, na qual $a = (n - k + 1)$, os valores possíveis para d vão de $d = (n - k + 4)$ a $d = n$, de modo que a quantidade de inteiros *estritamente* entre $a = (n - k + 1)$ e d varia de $(n - k + 4) - (n - k + 1) - 1 = 2$ a $(n) - (n - k + 1) - 1 = k - 2$. Assim, o número total de listas na categoria *Lista 1* tendo $a = (n - k + 1)$ é $A_2^2 + A_2^3 + \dots + A_2^{k-2} = \sum_{i=2}^{k-2} A_2^i$. Passando para a terceira linha da Tabela 5.4, na qual $a = (n - k + 2)$, os valores possíveis para d vão de $d = (n - k + 5)$ a $d = n$, de modo que a quantidade de inteiros *estritamente* entre $a = (n - k + 2)$ e d varia de $(n - k + 5) - (n - k + 2) - 1 = 2$ a

$(n) - (n - k + 2) - 1 = k - 3$. O número total de listas na categoria *Lista 1* tendo $a = (n - k + 2)$ é, portanto, $A_2^2 + A_2^3 + \dots + A_2^{k-3} = \sum_{i=2}^{k-3} A_2^i$. Continuamos a contagem dessa maneira até o caso em que $a = (n - 3)$, tratado na última linha da Tabela 5.4, quando a única possibilidade de valor para d é $d = n$. Como $(n - 3)$ e $(n - 2)$ são os únicos inteiros estritamente entre $a = (n - 3)$ e $d = n$, o número total de listas na categoria *Lista 1* é $A_2^2 = 2$, sendo $(n - 3)(n - 2)(n - 1)(n)$ e $(n - 3)(n - 1)(n - 2)(n)$ as duas possíveis listas. Logo, de $a = (n - k + 1)$ até $a = (n - 3)$, a soma do número de listas na categoria *Lista 1* é igual a

$$\sum_{i=2}^{k-2} A_2^i + \sum_{i=2}^{k-3} A_2^i + \dots + \sum_{i=2}^3 A_2^i + A_2^2 = \sum_{j=2}^{k-2} \sum_{i=2}^j A_2^i. \quad (5.13)$$

Somando os valores em (5.12) e (5.13), chegamos ao número total de listas na categoria *Lista 1* correspondentes a 4-ciclos não isomorfos em S_k^n :

$$\underbrace{(n - k) \sum_{i=2}^{k-1} A_2^i}_{\text{(I)}} + \underbrace{\sum_{j=2}^{k-2} \sum_{i=2}^j A_2^i}_{\text{(II)}}. \quad (5.14)$$

Passemos a contagem dos 4-ciclos cujas respectivas listas podem ser enquadradas na categoria *Lista 2* em (5.1). Nesse caso, por hipótese, os quatro números inteiros positivos e distintos entre si $(a, b, c$ e $d)$ que compõem a lista associada ao 4-ciclo satisfazem $a < b < c < d$, a ocupa a primeira posição e d ocupa a penúltima posição na lista. O menor valor possível de a na lista $a _ d _ _$ é 1, enquanto o maior valor possível é $(n - 3)$, pois nela aparecem três inteiros estritamente maiores que a e, além disso, d , o último elemento da lista, não pode assumir um valor superior ao número n de vértices. É importante observarmos que uma lista associada a um 4-ciclo é cíclica. Assim, ambas as listas $abdc$ e $acdb$ estão na categoria *Lista 2* e correspondem a 4-ciclos *iguais*, de modo que devemos considerar apenas uma delas na contagem de 4-ciclos associados a listas na categoria *Lista 2*. Faremos a convenção de escolher sempre a primeira, $abdc$, na qual o número que ocupa a segunda posição é menor que o que ocupa a última posição da lista, uma vez que b é menor que c (ou seja, preenchemos a segunda posição da lista com o menor rótulo de vértice possível na ocasião).

Tabela 5.4: Contagem de 4-ciclos em S_k^n associados a listas da categoria *Lista 1* ($a _ _ d$), para $a = n - k + 1, n - k + 2, \dots, n - 4, n - 3$.

$a \backslash d$	4	...	k	...	$n - k + 3$	$n - k + 4$	$n - k + 5$	$n - k + 6$...	$n - 3$	$n - 2$	$n - 1$	n
$n - k + 1$						A_2^2	A_2^3	A_2^{k-5}	A_2^{k-4}	A_2^{k-3}	A_2^{k-2}
$n - k + 2$							A_2^2	A_2^3	A_2^{k-5}	A_2^{k-4}	A_2^{k-3}
\vdots								\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots
\vdots									\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots
\vdots										\ddots	\ddots	\ddots	\ddots
\vdots											\ddots	\ddots	\ddots
$n - 4$												A_2^2	A_2^3
$n - 3$													A_2^2

Na Tabela 5.5, organizamos a contagem de todos os 4-ciclos cujas listas pertencem à categoria *Lista 2*. Nessa tabela, há $n-2k+2$ linhas e $n-2$ colunas. A primeira coluna descreve os valores de a , o primeiro elemento da lista, que nessa tabela varia de 1 a $(n-2k+1)$. Já a primeira linha descreve os valores de d , o último elemento da lista, que pode variar de 4 a n . Por questões de espaço, os valores de d estão escritos verticalmente dentro das suas células. Uma célula rs , com $r = 2, 3, \dots, n-2k+2$ e $s = 2, 3, \dots, n-2$, é preenchida com o número de 4-ciclos tendo o valor de a dado na célula $r1$ e o valor de d dado na célula $1s$. Por exemplo, a célula em que $r = 2$ e $s = 3$ está associada ao valor $a = 1$ e $d = 5$. Ela é preenchida com o número de 4-ciclos associados à lista $1_5_$. São $C_2^3 = 3$ os 4-ciclos para esses valores de a e d : 1253, 1254 e 1354. Caso não haja nenhum 4-ciclo possível para algum valor de a e de d , a respectiva célula é deixada vazia.

Vejam a segunda linha da Tabela 5.5, na qual $a = 1$. Nesse caso, d pode variar de 4 até $2k$. De fato, d não pode ser menor que 4, uma vez que há dois inteiros estritamente entre 1 e 4 para ocupar a segunda e a última posição de uma lista na categoria *Lista 2*. Por outro lado, por construção do grafo S_k^n , d não pode ser maior que $2k$, pois não conseguiríamos preencher a segunda ou última posição em $a_d_$ com inteiros estritamente entre a e d e simultaneamente obter uma lista representativa de um 4-ciclo em S_k^n . Nesse grafo, cada vértice de rótulo i , com $i \geq (k+1)$, está ligado aos k vértices de rótulos $(i-k), (i-(k+1)), \dots, (i-2), (i-1)$. Logo, se $a = 1$ e $d = (2k+1)$, por exemplo, poderíamos colocar $(k+1)$ na segunda posição da lista $1_ (2k+1)_$, pois o vértice de rótulo $(k+1)$ está conectado aos de rótulos 1 e $(2k+1)$, mas não teríamos como escolher um número estritamente entre 1 e $(2k+1)$ e diferente de $(k+1)$ para ocupar a última posição sem contradizer a condição anterior (nenhum vértice de rótulo $j < (k+1)$ está conectado ao vértice de rótulo $(2k+1)$ em S_k^n , assim como nenhum vértice de rótulo $j > (k+1)$ está conectado ao vértice de rótulo 1).

Se há exatamente i números inteiros *estritamente entre* a e d cujas respectivas diferenças com a e com d sejam *menor que ou igual a* k , então a quantidade de maneiras distintas de se preencher as duas lacunas de uma lista na categoria *Lista 2* escolhendo dois dentre esses i inteiros e colocando o menor deles na segunda posição da lista é igual ao valor da combinação de i inteiros tomados dois a dois, C_2^i . Para

Tabela 5.5: Contagem de 4-ciclos em S_k^n associados a listas da categoria *Lista 2* ($a_d_$), para $a = 1, 2, \dots, n - 2k, n - 2k + 1$.

$a \backslash d$	4	5	\dots	$k+1$	$k+2$	$k+3$	\dots	$2k-1$	$2k$	$2k+1$	\dots	$n-2k+3$	$n-2k+4$	\dots	$n-k$	$n-k+1$	$n-k+2$	\dots	$n-2$	$n-1$	n
1	C_2^2	C_2^3	\dots	C_2^{k-1}	C_2^k	C_2^{k-1}	\dots	C_2^3	C_2^2												
2		C_2^2	C_2^3	\dots	C_2^{k-1}	C_2^k	C_2^{k-1}	\dots	C_2^3	C_2^2											
\vdots			\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots										
\vdots				\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots									
\vdots					\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots								
\vdots						\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots							
\vdots							\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots						
\vdots								\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots					
\vdots									\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	
$n-2k$												C_2^2	C_2^3	\dots	C_2^{k-1}	C_2^k	C_2^{k-1}	\dots	C_2^3	C_2^2	
$n-2k+1$													C_2^2	C_2^3	\dots	C_2^{k-1}	C_2^k	C_2^{k-1}	\dots	C_2^3	C_2^2

$a = 1$ e $d = 4$, há dois inteiros, 3 e 4, de modo que o número de maneiras distintas de se preencher as duas lacunas de uma lista na categoria *Lista 2* escolhendo o 3 para ocupar a segunda posição da lista é igual a C_2^2 . Para $a = 1$ e $d = 5$, há três inteiros, 3, 4 e 5, e com isso o número de maneiras distintas de preenchermos as duas lacunas de uma lista na categoria *Lista 2* escolhendo dois dentre esses números e colocando o menor dos dois selecionados para ocupar a segunda posição da lista é igual a C_2^3 . Utilizando esse mesmo raciocínio, preenchamos as células dessa linha até aquela em que $d = (k + 2)$, observando um aumento gradativo do número de listas possíveis conforme incrementamos em uma unidade o valor de d . A partir de $d = (k + 3)$, passa a ocorrer o oposto: observamos uma diminuição gradativa do número de listas possíveis enquanto aumentamos em uma unidade o valor de d de $(k + 3)$ até $(2k)$. Como exemplo, tomemos a célula em que $a = 1$ e $d = (2k - 1)$. Nesse caso, há somente três inteiros satisfazendo as condições estipuladas; são eles: $(k - 1)$, k e $(k + 1)$. Nenhum número menor que $(k - 1)$ poderia ser vizinho de $(2k - 1)$ na lista, pois a diferença entre eles seria superior a k ; pelo mesmo motivo, nenhum número maior que $(k + 1)$ poderia ser vizinho de 1 na lista. Segue que o número de maneiras distintas de preenchermos as duas lacunas de uma lista na categoria *Lista 2* escolhendo dois dentre os números $(k - 1)$, k e $(k + 1)$ e colocando o menor dos dois selecionados para ocupar a segunda posição da lista é igual a C_2^3 . As células nas quais $a = 1$ e $d = k + 3, k + 4, \dots, 2k - 1, 2k$ podem ser preenchidas com raciocínio análogo. De acordo com a segunda linha da Tabela 5.5, juntamente às considerações feitas, concluímos que o número total de listas na categoria *Lista 2* tendo $a = 1$ é

$$\sum_{i=2}^k C_2^i + \sum_{i=2}^{k-1} C_2^i = \left(2 \sum_{i=2}^{k-1} C_2^i \right) + C_2^k.$$

A contagem do número de formas de se preencher a segunda e última posições na lista $a _ d _$ ocorre de modo análogo ao descrito no parágrafo anterior para $a = 2$ até $a = (n - (2k - 1)) = (n - 2k + 1)$ e está retratada da terceira à última linha da Tabela 5.5. Para cada um desses valores de a , obtemos $2 \left(\sum_{i=2}^{k-1} C_2^i \right) + C_2^k$ listas distintas na categoria *Lista 2*. Logo, de $a = 1$ até $a = (n - 2k + 1)$, a soma do número de listas possíveis é igual a

$$(n - 2k + 1) \left[\left(2 \sum_{i=2}^{k-1} C_2^i \right) + C_2^k \right]. \quad (5.15)$$

Devemos tratar com atenção os casos em que $a = (n - (2k - j)) = (n - 2k + j)$, com $j = 2, 3, \dots, 2k - 3$, pois à medida que d se aproxima de n , diminuem a quantidade

de inteiros estritamente entre a e d que satisfazem a respectiva diferença com a e com d ser menor que ou igual a k . Isso ocorre porque temos uma limitação para o valor máximo de d , dada pelo número n de vértices do grafo S_k^n . Vamos considerar a linha em que $a = (n-k)$ na Tabela 5.6 como exemplo. Nesse caso, d pode assumir os valores $(n-k+3)$ até n . Portanto, o número de inteiros estritamente entre $a = (n-k)$ e d , com $d = n-k+3, n-k+4, \dots, n-1, n$, e cuja diferença com a e com d permanece menor que ou igual a k aumenta de 2, quando $d = (n-k+3)$, até k , quando $d = (n-1)$, e volta a ser igual a $(k-1)$ quando $d = n$. Para ilustrar, consideremos a célula da Tabela 5.6 que corresponde a $a = (n-k)$ e $d = (n-k+5)$. Os inteiros estritamente maiores que $a = (n-k)$ e menores que $d = (n-k+5)$, e que mantém uma diferença com cada um deles menor que ou igual a k , são $(n-k+1)$, $(n-k+2)$, $(n-k+3)$ e $(n-k+4)$. Nesse caso, há $C_2^4 = 6$ maneiras de preenchermos as duas lacunas da lista $(n-k) _ (n-k+5) _$ com dois dentre esses quatro números escolhendo o menor deles para ocupar a segunda posição; as listas $(n-k)(n-k+1)(n-k+5)(n-k+2)$, $(n-k)(n-k+1)(n-k+5)(n-k+3)$, $(n-k)(n-k+1)(n-k+5)(n-k+4)$, $(n-k)(n-k+2)(n-k+5)(n-k+3)$, $(n-k)(n-k+2)(n-k+5)(n-k+4)$ e $(n-k)(n-k+3)(n-k+5)(n-k+4)$ estão associadas a seis 4-ciclos não isomorfos em S_k^n . As demais células dessa linha são preenchidas seguindo um raciocínio análogo. Das considerações feitas, concluímos que, se $a = (n-k)$, o número de 4-ciclos associados a listas na categoria *Lista 2* é igual a $(\sum_{i=2}^k C_2^i) + C_2^{k-1}$.

Para facilitar a contabilização de todos os 4-ciclos dispostos nas $2k-4$ linhas da Tabela 5.6, vamos agrupá-las duas a duas. Considerando as linhas em que $a = (n-2k+2)$ e $a = (n-3)$, contamos um total de

$$\left(\sum_{i=2}^k C_2^i + \sum_{i=3}^{k-1} C_2^i \right) + (C_2^2) = \left(2 \sum_{i=2}^{k-1} C_2^i \right) + C_2^k$$

listas associadas a 4-ciclos não isomorfos em S_k^n . Das linhas em que $a = (n-2k+3)$ e $a = (n-4)$, contamos um total de

$$\left(\sum_{i=2}^k C_2^i + \sum_{i=4}^{k-1} C_2^i \right) + \left(\sum_{i=2}^3 C_2^i \right) = \left(2 \sum_{i=2}^{k-1} C_2^i \right) + C_2^k$$

listas associadas a 4-ciclos não isomorfos em S_k^n . Procedemos dessa forma, considerando a soma dos 4-ciclos dispostos nas linhas $a = (n-2k+j)$ e $a = (n-j-1)$, com $j = 2, 3, \dots, 2k-1, 2k-3$, até as duas linhas mais centrais da Tabela 5.6, nas quais

Tabela 5.6: Contagem de 4-ciclos em S_k^n associados a listas da categoria *Lista 2* ($a _ d _$), para $a = n - 2k + 2, n - 2k + 3, \dots, n - 4, n - 3$.

$a \backslash d$	4	...	$2k$...	$n - 2k + 4$	$n - 2k + 5$	$n - 2k + 6$	$n - 2k + 7$...	$n - k + 3$	$n - k + 4$	$n - k + 5$...	$n - 2$	$n - 1$	n
$n - 2k + 2$						C_2^2	C_2^3	C_2^4	...	C_2^{k-1}	C_2^k	C_2^{k-1}	...	C_2^5	C_2^4	C_2^3
$n - 2k + 3$							C_2^2	C_2^3	C_2^4	...	C_2^{k-1}	C_2^k	C_2^{k-1}	...	C_2^5	C_2^4
$n - 2k + 4$								C_2^2	C_2^3	C_2^4	...	C_2^{k-1}	C_2^k	C_2^{k-1}	...	C_2^5
\vdots									\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots	\ddots
$n - k$										C_2^2	C_2^3	C_2^4	...	C_2^{k-1}	C_2^k	C_2^{k-1}
$n - k + 1$											C_2^2	C_2^3	C_2^4	...	C_2^{k-1}	C_2^k
$n - k + 2$												C_2^2	C_2^3	C_2^4	...	C_2^{k-1}
\vdots													\ddots	\ddots	\ddots	\ddots
$n - 5$														C_2^2	C_2^3	C_2^4
$n - 4$															C_2^2	C_2^3
$n - 3$																C_2^2

$a = (n - k - 1)$ e $a = (n - k)$. Para esse par, também contabilizamos um total de

$$\left(\sum_{i=2}^k C_2^i \right) + \left(\sum_{i=2}^{k-1} C_2^i \right) = \left(2 \sum_{i=2}^{k-1} C_2^i \right) + C_2^k$$

listas associadas a 4-ciclos não isomorfos em S_k^n . Logo, os 4-ciclos representados por listas na categoria *Lista 2* em que $a = (n - 2k + j)$, com $j = 2, 3, \dots, 2k - 3$, são em número igual a

$$\frac{(n-3)-(n-2k+1)}{2} \left[\left(2 \sum_{i=2}^{k-1} C_2^i \right) + C_2^k \right] = (k-2) \left[\left(2 \sum_{i=2}^{k-1} C_2^i \right) + C_2^k \right]. \quad (5.16)$$

Somando a quantidade de 4-ciclos representados por listas na categoria *Lista 2* em que $a = 1, 2, \dots, n - 2k + 1$, calculada pela equação (5.15), à quantidade de 4-ciclos representados por listas na categoria *Lista 2* em que $a = n - 2k + 2, n - 2k + 3, \dots, n - 4, n - 3$, dada na equação (5.16), chegamos ao número total de listas na categoria *Lista 2* associadas a 4-ciclos não isomorfos em S_k^n :

$$\begin{aligned} (n - 2k + 1) \left[\left(2 \sum_{i=2}^{k-1} C_2^i \right) + C_2^k \right] + (k - 2) \left[\left(2 \sum_{i=2}^{k-1} C_2^i \right) + C_2^k \right] = \\ = \underbrace{(n - k - 1) \left[\left(2 \sum_{i=2}^{k-1} C_2^i \right) + C_2^k \right]}_{\text{(III)}}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Juntando as expressões encontradas em (5.14) e (5.17), obtemos o número total de listas correspondentes a todos os 4-ciclos não isomorfos em S_k^n :

$$n_4(S_k^n) = \underbrace{(n - k) \sum_{i=2}^{k-1} A_2^i}_{\text{(I)}} + \underbrace{\sum_{j=2}^{k-2} \sum_{i=2}^j A_2^i}_{\text{(II)}} + \underbrace{(n - k - 1) \left[\left(2 \sum_{i=2}^{k-1} C_2^i \right) + C_2^k \right]}_{\text{(III)}}. \quad (5.18)$$

Para chegarmos à expressão para $n_4(S_k^n)$ apresentada em (5.11), devemos manipular algebricamente as parcelas (I), (II) e (III) em (5.18). Uma vez que

$$2 \sum_{i=2}^{k-1} C_2^i = \sum_{i=2}^{k-1} 2 C_2^i = \sum_{i=2}^{k-1} 2 \frac{i!}{2!(i-2)!} = \sum_{i=2}^{k-1} \frac{i!}{(i-2)!} = \sum_{i=2}^{k-1} A_2^i, \quad (5.19)$$

podemos substituir uma parte da parcela (III) em (5.18), obtendo a equação equivalente

$$n_4(S_k^n) = (n - k) \sum_{i=2}^{k-1} A_2^i + \sum_{j=2}^{k-2} \sum_{i=2}^j A_2^i + (n - k - 1) \left[\left(\sum_{i=2}^{k-1} A_2^i \right) + C_2^k \right], \quad (5.20)$$

ou ainda, rearrumando e agrupando termos,

$$n_4(S_k^n) = \underbrace{(2(n-k)-1) \sum_{i=2}^{k-1} A_2^i}_{\text{(IV)}} + \underbrace{\sum_{j=2}^{k-2} \sum_{i=2}^j A_2^i}_{\text{(V)}} + \underbrace{(n-k-1) C_2^k}_{\text{(VI)}}. \quad (5.21)$$

Como

$$\begin{aligned} \sum_{i=2}^{k-1} A_2^i &= \sum_{i=2}^{k-1} (i-1)(i) \\ &= \sum_{i=2}^{k-1} i^2 - \sum_{i=2}^{k-1} i^2 \\ &= \frac{1}{6} (k-1)(k)(2k-1) - \frac{1}{2} (k-1)(k) \\ &= \frac{1}{3} (k^3 - 3k^2 + 2k), \end{aligned}$$

a primeira parcela ao lado direito da igualdade em (5.21) equivale a

$$\underbrace{(2(n-k)-1) \sum_{i=2}^{k-1} A_2^i}_{\text{(IV)}} = \frac{1}{3} [(2k^3 - 6k^2 + 4k)n - 2k^4 + 5k^3 - k^2 - 2k]. \quad (5.22)$$

Já a segunda parcela em (5.21) pode ser expressa pelo seguinte polinômio em k :

$$\underbrace{\sum_{j=2}^{k-2} \sum_{i=2}^j A_2^i}_{\text{(V)}} = \frac{1}{12} (k^4 - 6k^3 + 11k^2 - 6k). \quad (5.23)$$

De fato,

$$\begin{aligned} \sum_{j=2}^{k-2} \sum_{i=2}^j A_2^i &= A_2^2 + (A_2^2 + A_2^3) + (A_2^2 + A_2^3 + A_2^4) + \dots + (A_2^2 + A_2^3 + A_2^4 + \dots + A_2^{k-3} + A_2^{k-2}) \\ &= (k-3)A_2^2 + (k-4)A_2^3 + (k-5)A_2^4 + \dots + (k-(k-3+1))A_2^{k-3} + (k-(k-2+1))A_2^{k-2} \\ &= \sum_{i=2}^{k-2} (k-(i+1))A_2^i \\ &= \sum_{i=2}^{k-2} (k-(i+1))(i-1)(i) \\ &= \sum_{i=1}^{k-3} (k-(i+2))(i)(i+1) \\ &= -\sum_{i=2}^{k-3} i^3 + (k-3) \sum_{i=2}^{k-3} i^2 - (k-2) \sum_{i=2}^{k-3} i \\ &= -\frac{1}{4} (k-2)^2 (k-3)^2 + (k-3) \left[\frac{1}{6} (k-2)(k-3)(2k-5) \right] + (k-2) \left[\frac{1}{2} (k-2)(k-3) \right] \\ &= \frac{1}{12} (k^4 - 6k^3 + 11k^2 - 6k). \end{aligned}$$

Por fim, a terceira parcela em (5.21) equivale a

$$\underbrace{(n-k-1)C_2^k}_{(VI)} = \frac{1}{2}(n-k-1)(k-1)(k) = \frac{1}{2}[(k^2-k)n - k^3 + k]. \quad (5.24)$$

Substituindo as parcelas (IV), (V) e (VI) de (5.21) por suas expressões equivalentes encontradas, respectivamente, em (5.22), (5.23) e (5.24), e desenvolvendo as contas, expressamos $n_4(S_k^n)$ por meio do polinômio nas variáveis n e k apresentado em (5.11). \square

Como ilustração ao Teorema 5.1.1, vamos resgatar as expressões que fornecem o número de 4-ciclos contidos em grafos 3-, 4- e 5-serpentina em função do número n de vértices do grafo considerado. O número de 4-ciclos contidos em um grafo 3-serpentina em função do número n de vértices foi estabelecido na equação (5.2) da Proposição 5.1.1. Ela coincide com a expressão obtida fazendo $k = 3$ na equação (5.11):

$$n_4(S_3^n) = \frac{n}{2}(36 - 27 + 5) - \frac{1}{4}(189 - 72 - 21 + 8) = \frac{n}{2}(14) - \frac{1}{4}(104) = 7n - 26.$$

Já o número de 4-ciclos contidos em um grafo 4-serpentina em função do número de vértices n foi estabelecido na equação (5.3) da Proposição 5.1.2. Ela é igual à expressão obtida substituindo $k = 4$ na equação (5.11):

$$n_4(S_4^n) = \frac{2n}{3}(64 - 36 + 5) - \frac{1}{3}(448 - 128 - 28 + 8) = \frac{2n}{3}(33) - \frac{1}{3}(300) = 22n - 100.$$

Por fim, substituindo $k = 5$ na equação (5.11), resgatamos a expressão

$$n_4(S_5^n) = \frac{5n}{6}(100 - 45 + 5) - \frac{5}{12}(875 - 200 - 35 + 8) = \frac{5n}{6}(60) - \frac{5}{12}(648) = 50n - 270,$$

apresentada na equação (5.10) da Proposição 5.1.3.

Passemos agora à contagem de 4-ciclos contidos em grafos pertencentes à segunda subfamília de interesse neste trabalho.

5.2 Número de 4-ciclos em grafos k -leque

O objetivo dessa seção é estabelecer o número de 4-ciclos contidos em um grafo k -leque. Para isso, vamos recordar sua definição: um grafo k -leque com n vértices

é formado pela junção de um grafo completo com l vértices, K_l , com $1 \leq l \leq k - 1$, com uma $(k - l)$ -serpentina com $(n - l)$ vértices, S_{k-l}^{n-l} . Para um dado $n > 2k + 1$, existem exatamente $(k - 1)$ k -leques não isomorfos determinados pelos pares $(1, k - 1)$, $(2, k - 2)$, \dots , $(k - 1, 1)$ [24]. Assim, à exceção de $k = 2$, há dois ou mais k -leques não isomorfos para um mesmo valor de k . Com relação à rotulação dos vértices, os l primeiros rótulos se destinam aos vértices do grafo completo, enquanto os demais são atribuídos aos vértices da $(k - l)$ -serpentina conforme a Definição 3.2.1.

Apresentamos a seguir três resultados preliminares que serão oportunos na contagem de 4-ciclos em grafos k -leque. O primeiro deles determina o número de caminhos de comprimento dois em um grafo k -serpentina em n vértices.

Lema 5.2.1. O número de caminhos de comprimento dois em um grafo k -serpentina com n vértices, S_k^n , com $n > 2k$, em função de n e k , pode ser calculado pela expressão $\frac{1}{3} [(6k^2 - 3k)n - 5k^3 - 3k^2 + 2k]$.

Demonstração. Para encontrarmos o número total de caminhos de comprimento dois em S_k^n , com $n > 2k$, vamos primeiro calcular o número de caminhos de comprimento dois tendo o vértice de rótulo i de S_k^n como sua extremidade inicial. Para tornar a escrita mais enxuta, identificaremos um vértice de rótulo j simplesmente por vértice j . A sequência de vértices associada a um caminho de comprimento dois tendo início no vértice i é da forma ijk , onde j e k são vértices de S_k^n e o vértice j é vizinho do vértice i (e também do vértice k). Seja $N(i) = \{j \in V(S_k^n) \mid ij \in E(S_k^n)\}$ a vizinhança do vértice i em S_k^n , $d(i)$ o grau do vértice i e $d(j)$ o grau do vértice j , para cada j em $N(i)$. O número de caminhos de comprimento dois em S_k^n tendo início no vértice i pode ser obtido a partir da soma dos graus de cada um dos vizinhos do vértice i , subtraindo um em cada uma das parcelas da soma (a fim de considerar apenas os vizinhos de j diferentes de i). Assim,

$$\begin{aligned} \#(\text{caminhos de comprimento 2 do tipo } ijk) &= \sum_{j=1}^{d(i)} [d(j) - 1] \\ &= -d(i) + \sum_{j=1}^{d(i)} d(j). \end{aligned} \quad (5.25)$$

Fazendo i variar de 1 a n na equação (5.25), contabilizamos o número total de caminhos de comprimento dois tendo início no vértice i , para cada vértice i de S_k^n . Para eliminarmos caminhos isomorfos, considerando, por exemplo, os caminhos ijk

e kji apenas uma vez, efetuamos a divisão por 2. Segue que

$$\begin{aligned}
\#(\text{caminhos de comprimento 2 em } S_k^n) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left(-d(i) + \sum_{j=1}^{d(i)} d(j) \right) \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n d(i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{d(i)} d(j) \\
&= -m + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{d(i)} d(j), \quad (5.26)
\end{aligned}$$

onde m , como de costume, denota o número de arestas do grafo, cuja expressão, em função de n e k , já foi obtida na equação (3.1). Precisamos fazer o mesmo para a segunda parcela de (5.26). Considere o vértice de rótulo i e grau $d(i)$, para algum i satisfazendo $1 \leq i \leq n$. Calcular o somatório interno em (5.26) associado ao vértice i consiste em somar os graus de todos os $d(i)$ vizinhos do vértice i . Por outro lado, ao passarmos o somatório externo em (5.26), fazendo i variar de 1 a n e percorrendo todos os vértices do grafo, o grau $d(i)$ do vértice i aparecerá como grau de vértice vizinho nos somatórios internos associados a cada um dos seus $d(i)$ vizinhos, ou seja, teremos exatamente $d(i)$ parcelas iguais a $d(i)$, para cada $i = 1, 2, \dots, n$. Desse modo, a segunda parcela de (5.26) satisfaz

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{d(i)} d(j) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n [d(i)]^2. \quad (5.27)$$

Os graus dos vértices de S_k^n são conhecidos. Podemos reescrever o lado direito da equação (5.27) explicitamente em função de n e k , bastando trocar $d(i)$, para cada $i = 1, 2, \dots, n$, pelos graus dos vértices de S_k^n , utilizando a Tabela 4.1:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{d(i)} d(j) &= \frac{1}{2} \left[2(k)^2 + 2(k+1)^2 + \dots + 2(2k-1)^2 + (n-2k)(2k)^2 \right] \\
&= \underbrace{\left[(k)^2 + (k+1)^2 + \dots + (2k-1)^2 \right]}_{\text{(I)}} + \underbrace{(n-2k)(2k^2)}_{\text{(II)}}. \quad (5.28)
\end{aligned}$$

A primeira parcela de (5.28) é equivalente a:

$$\begin{aligned}
\text{(I)} &= k^2 + (k^2 + 2 \cdot k \cdot 1 + 1^2) + (k^2 + 2 \cdot k \cdot 2 + 2^2) + \dots + (k^2 + 2 \cdot k \cdot (k-1) + (k-1)^2) \\
&= k \cdot k^2 + 2k(1 + 2 + \dots + (k-1)) + (1^2 + 2^2 + \dots + (k-1)^2) \\
&= k^3 + 2k \frac{k(k-1)}{2} + \frac{k(k-1)(2k-1)}{6} \\
&= \frac{1}{6} (14k^3 - 9k^2 + k). \quad (5.29)
\end{aligned}$$

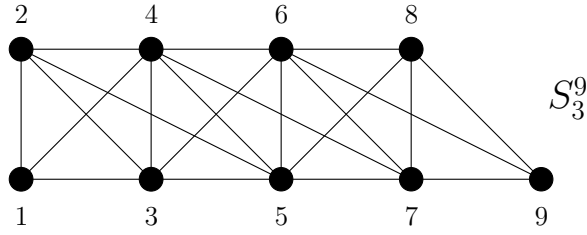


Figura 5.2: S_3^9 , a 3-serpentina com 9 vértices.

Somando a expressão equivalente a (I) encontrada em (5.29) à parcela (II) em (5.28), chegamos ao seguinte polinômio nas variáveis n e k :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{d(i)} d(j) &= \frac{1}{6} (14k^3 - 9k^2 + k) + (2nk^2 - 4k^3) \\ &= \frac{1}{6} (12nk^2 - 10k^3 - 9k^2 + k). \end{aligned} \quad (5.30)$$

Substituindo a primeira parcela de (5.26) pela expressão de m em função de n e k dada em (3.1), a segunda parcela pela expressão em (5.30) e agrupando os termos, obtemos o número de caminhos de comprimento dois em S_k^n como um polinômio nas variáveis n e k , concluindo a demonstração. \square

Para ilustrar o Lema 5.2.1, considere o grafo 3-serpentina com nove vértices, S_3^9 , representado na Figura 5.2. Nesse exemplo, vamos calcular o número de caminhos de comprimento dois primeiramente a partir da representação gráfica do grafo e, depois, pelo raciocínio desenvolvido na prova do lema. São doze os caminhos de comprimento dois de S_3^9 com início no vértice 1:

$$\begin{array}{cccc} 123 & 124 & 125 & \\ \hline 132 & 134 & 135 & 136 \\ \hline 142 & 143 & 145 & 146 & 147. \end{array}$$

Os caminhos de comprimento dois de S_3^9 com início no vértice 2 somam dezesseis. São eles:

$$\begin{array}{cccc} 213 & 214 & & \\ \hline 231 & 234 & 235 & 236 \\ \hline 241 & 243 & 245 & 246 & 247 \\ \hline 253 & 254 & 256 & 257 & 258. \end{array}$$

Há vinte caminhos de comprimento dois em S_3^9 com início no vértice 3:

312	314			
321	324	325		
341	342	345	346	347
352	354	356	357	358
364	365	367	368	369.

Já os caminhos de comprimento dois de S_3^9 com início no vértice 4 somam 23. São eles:

412	413			
421	423	425		
431	432	435	436	
452	453	456	457	458
463	465	467	468	469
475	476	478	479.	

Com início no vértice 5, temos 24 caminhos de comprimento dois em S_3^9 :

521	523	524		
531	532	534	536	
541	542	543	546	547
563	564	567	568	569
574	576	578	579	
586	587	589.		

Os caminhos de comprimento dois de S_3^9 com início no vértice 6 somam 23:

631	632	634	635	
641	642	643	645	647
652	653	654	657	658
674	675	678	679	
685	687	689		
697	698.			

Existem vinte caminhos de comprimento dois em S_3^9 com início no vértice 7. São eles:

741	742	743	745	746
752	753	754	756	758
763	764	765	768	769
785	786	789		
796	798.			

Os caminhos de comprimento dois em S_3^9 com início no vértice 8 somam dezesseis e são:

852	853	854	856	857
863	864	865	867	869
874	875	876	879	
896	897.			

Por fim, os caminhos de comprimento dois em S_3^9 com início no vértice 9 são em doze:

963	964	965	967	968
974	975	976	978	
985	986	987.		

O total de caminhos de comprimento dois listados é 166. Dividindo esse número por 2, chegamos a um total de 83 caminhos de comprimento dois não isomorfos contidos em S_3^9 .

O Lema 5.2.1 chega a esse mesmo valor sem a necessidade da listagem explícita de todos os caminhos de comprimento dois de S_3^9 . A equação (5.25) parte da soma, sobre cada vértice i do grafo, da soma dos graus dos vizinhos de i (excluindo o próprio i). Fazendo i variar sobre todos os vértices do grafo e organizando as contas, concluímos, na equação (5.26), que o número de 2-caminhos pode ser computado por meio do número de arestas e da soma, sobre cada um dos vértices do grafo, dos graus dos seus vizinhos.

Por (3.1), o número de arestas de S_3^9 é $m = 3\left(9 - \frac{1}{2}\right) - \frac{3^2}{2} = 21$. Por outro lado, para S_3^9 , a segunda parcela de (5.26), omitindo a constante $\frac{1}{2}$, fica:

$$\sum_{i=1}^9 \sum_{j=1}^{d(i)} d(j) = \underbrace{(4+5+6)}_{\sum_{j=1}^{d(1)} d(j)} + \underbrace{(3+5+6+6)}_{\sum_{j=1}^{d(2)} d(j)} + \underbrace{(3+4+6+6+6)}_{\sum_{j=1}^{d(3)} d(j)} + \underbrace{(3+4+5+6+6+5)}_{\sum_{j=1}^{d(4)} d(j)} +$$

$$\begin{aligned}
& + \underbrace{(4+5+6+6+5+4)}_{\sum_{j=1}^{d(5)} d(j)} + \underbrace{(5+6+6+5+4+3)}_{\sum_{j=1}^{d(6)} d(j)} + \underbrace{(6+6+6+4+3)}_{\sum_{j=1}^{d(7)} d(j)} + \underbrace{(6+6+5+3)}_{\sum_{j=1}^{d(8)} d(j)} + \\
& + \underbrace{(6+5+4)}_{\sum_{j=1}^{d(9)} d(j)} = 6(3) + 8(4) + 10(5) + 18(6) = 2(3^2 + 4^2 + 5^2) + 3(6^2) = 208.
\end{aligned}$$

Multiplicando 208 pela constante $\frac{1}{2}$, obtemos 104, cujo valor pode ser encontrado utilizando a expressão em função de n e k em (5.30), com $n = 9$ e $k = 3$. Substituindo esse valor e o de m em (5.26), chegamos ao número de caminhos de comprimento dois em S_3^9 :

$$\#(\text{caminhos de comprimento 2 em } S_3^9) = -21 + \frac{1}{2}(208) = 83,$$

que é o resultado fornecido pelo Lema 5.2.1 para $n = 9$ e $k = 3$.

Os próximos dois lemas estabelecem, respectivamente, o número de caminhos de comprimento dois e o número de 4-ciclos contidos em um grafo completo com l vértices, K_l . Esse último resultado também será de auxílio na próxima seção.

Lema 5.2.2. O número de caminhos de comprimento dois em um grafo completo com l vértices, K_l , em função de l , é igual a $\frac{l}{2}(l-1)(l-2)$.

Demonstração. Por definição de grafo completo, cada vértice de K_l está ligado aos demais $l-1$ vértices do grafo. Procurar pelo número de caminhos de comprimento dois em K_l corresponde, portanto, a calcular o arranjo de l vértices tomados três a três, A_3^l , pois são necessários três vértices de K_l para formar um caminho de comprimento dois contido no grafo. Para que não haja repetição de caminhos isomorfos, ou seja, para que abc e cba , por exemplo, sejam contabilizados apenas uma vez, devemos dividir A_3^l por dois. Assim,

$$\#(\text{caminhos de comprimento 2 em } K_l) = \frac{1}{2} A_3^l = \frac{l}{2}(l-1)(l-2). \quad (5.31)$$

□

Lema 5.2.3. O número de 4-ciclos contidos em um grafo completo com l vértices, K_l , em função de l , é igual a $3C_4^l = \frac{l}{8}(l-1)(l-2)(l-3)$.

Demonstração. Para contabilizar o número de 4-ciclos contidos em K_l , observemos que, uma vez selecionados quatro vértices do grafo, eles determinam três 4-ciclos não isomorfos. De fato, sejam g, h, i e j quaisquer quatro vértices distintos de K_l . Os

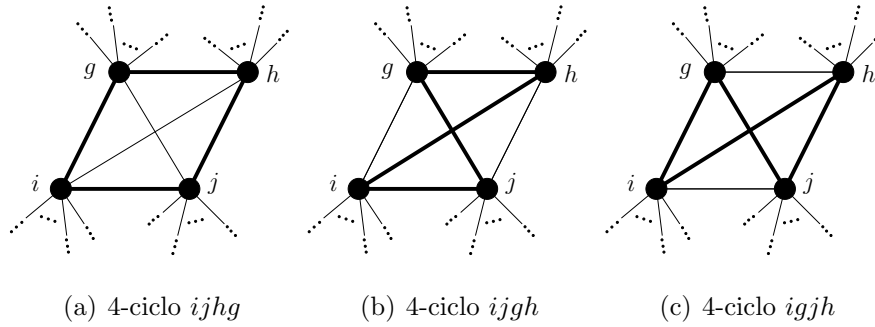


Figura 5.3: Os três possíveis 4-ciclos contendo os vértices g, h, i e j de um grafo completo K_l , para $l \geq 4$.

três 4-ciclos não isomorfos contendo os quatro vértices são: $ijhg$, $ijgh$ e $igjh$ (Figura 5.3). Logo, o número total de 4-ciclos, em função de l , é obtido multiplicando três pela combinação do número l de vértices de K_l tomados quatro a quatro, C_4^l , o que resulta em $3C_4^l = \frac{l}{8}(l-1)(l-2)(l-3)$ 4-ciclos. \square

Naturalmente, o número de 4-ciclos em K_l fornecido pelo Lema 5.2.3 é zero quando $l = 1, 2$ ou 3 , pois nesses casos não há um número suficiente de vértices no grafo para que ele contenha um 4-ciclo.

Para ilustrar os Lemas 5.2.2 e 5.2.3, considere o grafo completo com quatro vértices, K_4 , cujos vértices estão rotulados por $1, 2, 3$ e 4 , como usual. Os caminhos de comprimento dois, não isomorfos, de K_4 são: $123, 124, 132, 134, 142, 143, 213, 214, 234, 243, 314$ e 324 . São em um total de doze, que é o valor fornecido pela equação (5.31) fazendo $l = 4$. Com relação à quantidade de 4-ciclos não isomorfos contidos em K_4 , o Lema 5.2.3 informa que existem $3C_4^4 = \frac{4}{8}(3)(2)(1) = 3$ 4-ciclos. De fato, são eles: $1243, 1234$ e 1324 .

A procura pelo número total de 4-ciclos em um grafo k -leque com n vértices será feita identificando todas as possibilidades para as origens dos vértices que compõem o ciclo. Nesse contexto, utilizamos a expressão ‘origem de um vértice no ciclo’ com a intenção de distinguir vértices que pertençam a um 4-ciclo de $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ mas que, antes da junção, eram vértices de K_l , de vértices que pertençam a um 4-ciclo de $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ mas que, antes da junção, eram vértices de S_{k-l}^{n-l} .

Ao todo, há seis formas distintas de combinarmos vértices de origem em K_l com vértices de origem em S_{k-l}^{n-l} formando um 4-ciclo contido em $K_l + S_{k-l}^{n-l}$. Cada uma dessas seis combinações determina um 4-ciclo do tipo (a.i), com $i = 1, 2, \dots, 6$,

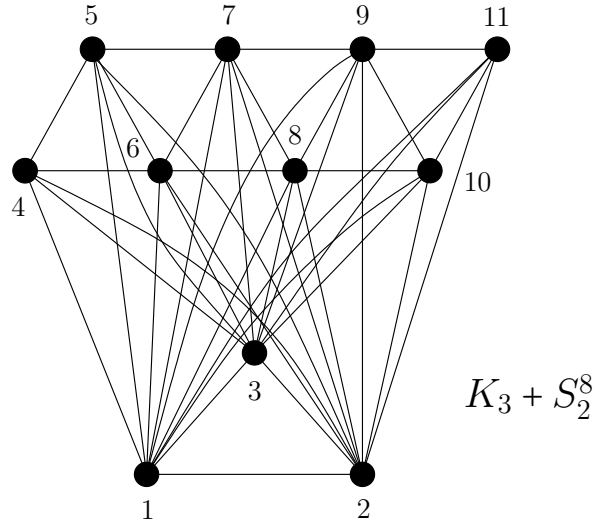
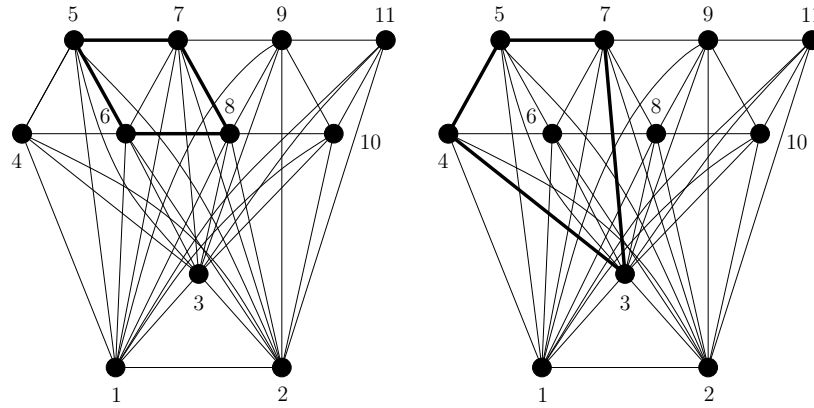


Figura 5.4: $K_3 + S_2^8$, um 5-leque com 11 vértices.

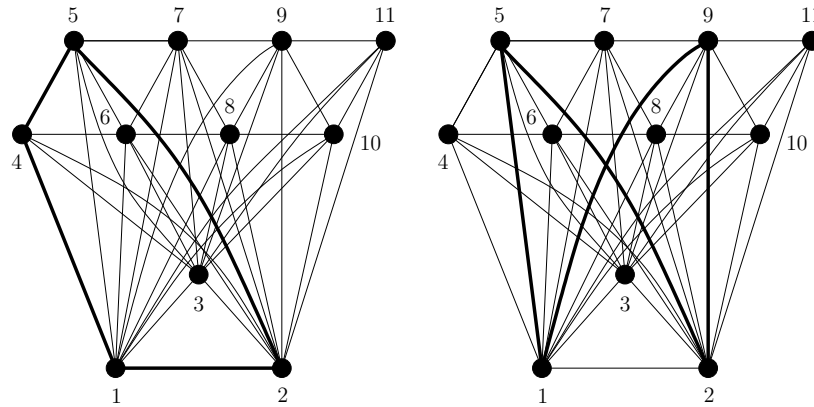
definidos na demonstração do próximo teorema. Com a intenção de auxiliar sua compreensão, tomamos como exemplo o 5-leque com onze vértices determinado pela junção $K_3 + S_2^8$, representado na Figura 5.4, e destacamos um 4-ciclo de cada um dos cinco primeiros tipos, (a.1) a (a.5), na Figura 5.5. Não há 4-ciclos do tipo (a.6) contidos no grafo escolhido. Para uma junção $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ na qual $l \geq 4$, os 4-ciclos do tipo (a.6) são apresentados na Figura 5.3.

No próximo resultado, contamos quantos 4-ciclos existem em $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ associados a cada uma dessas seis formas de combinação entre os vértices. A soma de todas essas quantidades resulta no número total de 4-ciclos contidos em um grafo k -leque, determinado pela junção $K_l + S_{k-l}^{n-l}$, em função das variáveis n , k e l . Notaremos esse número por $n_4(K_l + S_{k-l}^{n-l}; n, k, l)$, com as variáveis n , k e l escritas explicitamente no argumento. O motivo dessa escolha é que, ao tomar um k -leque formado por uma junção específica, os parâmetros da serpentina na junção não ficam tão evidentes. Por exemplo, o 5-leque com onze vértices da Figura 5.4 é formado pela junção $K_3 + S_2^8 = K_3 + S_{5-3}^{11-3}$ (as variáveis são $n = 11$, $k = 5$ e $l = 3$).

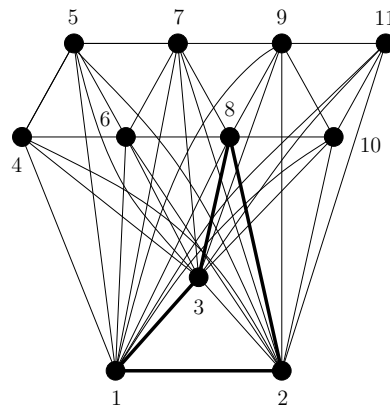
Teorema 5.2.1 (Número de 4-ciclos em $K_l + S_{k-l}^{n-l}$). *Para um grafo k -leque com n vértices determinado pela junção $K_l + S_{k-l}^{n-l}$, com $1 \leq l \leq k - 1$ e $n > 2k + 1$, o número*



(a) 5687, um 4-ciclo do tipo (a.1) (b) 3457, um 4-ciclo do tipo (a.2)



(c) 1254, um 4-ciclo do tipo (a.3) (d) 1529, um 4-ciclo do tipo (a.4)



(e) 1382, um 4-ciclo do tipo (a.5)

Figura 5.5: Exemplos de 4-ciclos dos tipos (a.1) a (a.5) contidos em $K_3 + S_2^8$; não há 4-ciclo do tipo (a.6).

de 4-ciclos, em função de n , k e l , é dado pela expressão

$$\begin{aligned} n_4(K_l + S_{k-l}^{n-l}; n, k, l) = & \frac{1}{24} \left[-14k^4 + 16k^3 + 14k^2 - 16k + (6l^2 - 6l)n^2 + \right. \\ & + (8l^3 - (24k + 18)l^2 + (24k + 10)l + 16k^3 - 36k^2 + 20k)n + \\ & \left. + 3l^4 - (16k + 10)l^3 + (24k^2 + 36k + 9)l^2 - (24k^2 + 20k + 2)l \right]. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Demonstração. Considere um grafo k -leque com n vértices determinado pela junção $K_l + S_{k-l}^{n-l}$, com $1 \leq l \leq k-1$ e $n > 2k+1$. Os 4-ciclos em $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ podem ser divididos como segue: (a.1) 4-ciclos formados por quatro vértices com origem em S_{k-l}^{n-l} ; (a.2) 4-ciclos formados por três vértices com origem em S_{k-l}^{n-l} e por um vértice com origem em K_l ; (a.3) 4-ciclos formados por dois vértices com origem e adjacentes em S_{k-l}^{n-l} , ou seja, com uma aresta de S_{k-l}^{n-l} , e por dois vértices com origem em K_l ; (a.4) 4-ciclos formados por dois vértices com origem em S_{k-l}^{n-l} e por dois vértices com origem em K_l , mas sem conter aresta de nenhum desses grafos; (a.5) 4-ciclos formados por um vértice com origem em S_{k-l}^{n-l} e por três vértices com origem em K_l ; e (a.6) 4-ciclos formados por quatro vértices com origem em K_l . Naturalmente, para ocorrer 4-ciclos do tipo (a.3) e (a.4), é necessário que $l \geq 2$. Para 4-ciclos do tipo (a.5), $l \geq 3$, e para 4-ciclos do tipo (a.6), $l \geq 4$. Faremos separadamente a contagem do número de 4-ciclos em $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ para cada um dos seis tipos, começando por aqueles classificados como (a.1).

O número de 4-ciclos, em função de n , k e l , formados por quatro vértices com origem em S_{k-l}^{n-l} , que notaremos por $n_4((a.1); n, k, l)$, pode ser obtido adaptando o resultado do Teorema 5.1.1, que fornece o número de 4-ciclos em S_k^n em função de n e k . Para isso, basta substituímos n por $n-l$ e k por $k-l$ na equação (5.11), chegando a

$$\begin{aligned} n_4((a.1); n, k, l) = & \frac{1}{12} \left[(8(k-l)^3 - 18(k-l)^2 + 10(k-l))(n-l) + \right. \\ & \left. + (-7)(k-l)^4 + 8(k-l)^3 + 7(k-l)^2 - 8(k-l) \right]. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Passemos aos 4-ciclos formados por três vértices com origem em S_{k-l}^{n-l} e por um vértice com origem em K_l . Esses 4-ciclos ocorrem quando há um caminho de comprimento dois contido em S_{k-l}^{n-l} cujas extremidades estão conectadas a um vértice de K_l . Por definição de junção entre grafos, todo vértice de S_{k-l}^{n-l} está conectado a todo vértice de K_l . Logo, procurar pelo número de 4-ciclos do tipo (a.2) em função de n , k e l , que notaremos por $n_4((a.2); n, k, l)$, corresponde a multiplicar o número de

caminhos de comprimento dois em S_{k-l}^{n-l} pelo número l de vértices em K_l . O número de caminhos de comprimento dois em S_{k-l}^{n-l} , em função de n , k e l , pode ser computado por meio do Lema 5.2.1, que fornece o número de caminhos de comprimento dois em um grafo k -serpentina com n vértices, S_k^n . Para isso, basta substituímos n por $n-l$ e k por $k-l$ na expressão fornecida pelo Lema. Assim, adaptando a expressão e multiplicando-a por l , obtemos

$$n_4((a.2); n, k, l) = \frac{l}{3} \left[(6(k-l)^2 - 3(k-l))(n-l) - 5(k-l)^3 - 3(k-l)^2 + 2(k-l) \right]. \quad (5.34)$$

Notaremos por $n_4((a.3); n, k, l)$ o número de 4-ciclos do tipo (a.3). Eles são caracterizados por possuir uma aresta de S_{k-l}^{n-l} e uma aresta de K_l . Para formar um 4-ciclo com essas duas arestas, é necessário utilizarmos duas arestas da junção entre os grafos K_l e S_{k-l}^{n-l} , aquelas justamente que conectam as extremidades da aresta de K_l e da aresta de S_{k-l}^{n-l} . Sejam i e j vértices com origem em K_l e u e v vértices com origem e adjacentes em S_{k-l}^{n-l} . Escolhidas a aresta $e = ij$ de K_l e $f = uv$ de S_{k-l}^{n-l} , tomamos as duas arestas da junção que conectam as extremidades de e e f , formando dois 4-ciclos não isomorfos: $iuvj$ e $ivuj$. Para calcularmos o número de caminhos de comprimento dois do tipo (a.3) em $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ em função de n , k e l , devemos tomar o dobro do produto entre o número de arestas em K_l e o número de arestas em S_{k-l}^{n-l} , expressos em função das variáveis envolvidas. O número de arestas em um grafo completo K_l em função de l é $\frac{l}{2}(l-1)$. Com relação a S_{k-l}^{n-l} , o número de arestas em função de n , k e l é determinado pela equação (3.1), bastando trocar n por $n-l$ e k por $k-l$. Logo,

$$n_4((a.3); n, k, l) = 2 \left[\frac{l}{2}(l-1) \right] \left[(k-l) \left((n-l) - \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2}(k-l)^2 \right]. \quad (5.35)$$

Os 4-ciclos do tipo (a.4), formados por dois vértices com origem em S_{k-l}^{n-l} e dois vértices com origem em K_l , mas sem conter aresta de nenhum desses grafos, são obtidos da seguinte forma: se i e j são vértices com origem em K_l e u e v são vértices com origem em S_{k-l}^{n-l} , o 4-ciclo $ivju$ é o único 4-ciclo contendo os vértices i , j , u e v e sem conter a aresta $e = ij$ de K_l e, possivelmente, a aresta $f = uv$ de S_{k-l}^{n-l} , quando os vértices u e v são adjacentes em S_{k-l}^{n-l} . Assim, para calcular o número de 4-ciclos do tipo (a.4) em função de n e l , que notaremos por $n_4((a.4); n, l)$, multiplicamos a combinação do número l de vértices de K_l tomados dois a dois pela

combinação do número $n - l$ de vértices de S_{k-l}^{n-l} tomados dois a dois. O número de 4-ciclos do tipo (a.4) em função de n e l é, portanto,

$$n_4((a.4); n, l) = C_2^l \cdot C_2^{n-l} = \frac{l}{4} (l-1)(n-l)(n-l-1). \quad (5.36)$$

Os 4-ciclos que possuem três vértices com origem em K_l e um vértice com origem em S_{k-l}^{n-l} formam os 4-ciclos do tipo (a.5). Esses ciclos ocorrem quando há um caminho de comprimento dois contido em K_l cujas extremidades estão conectadas a um vértice de S_{k-l}^{n-l} . Por definição de junção entre grafos, todo vértice de S_{k-l}^{n-l} está conectado a todo vértice de K_l . Logo, procurar pelo número de 4-ciclos do tipo (a.5) em função de n e l , que notaremos por $n_4((a.5); n, l)$, corresponde a multiplicar o número de caminhos de comprimento dois em K_l pelo número $n - l$ de vértices em S_{k-l}^{n-l} . O número de caminhos de comprimento dois em K_l , em função de l , pode ser computado por meio do Lema 5.2.2. Multiplicando a expressão fornecida pelo lema por $n - l$, obtemos

$$n_4((a.5); n, l) = (n - l) \left[\frac{l}{2} (l-1)(l-2) \right]. \quad (5.37)$$

Finalmente, consideremos os 4-ciclos do tipo (a.6), formados por quatro vértices com origem em K_l . Segue diretamente do Lema 5.2.3 que o número desses 4-ciclos em função de l , que notaremos por $n_4((a.6); l)$, é

$$n_4((a.6); l) = 3C_4^l = \frac{l}{8} (l-1)(l-2)(l-3). \quad (5.38)$$

Somando as expressões obtidas em (5.33), (5.34), (5.35), (5.36), (5.37) e (5.38), chegamos à equação (5.32), que fornece, em função das variáveis n , k e l , o número de 4-ciclos em um grafo k -leque com n vértices determinado pela junção $K_l + S_{k-l}^{n-l}$. \square

Para ilustrar o uso do Teorema 5.2.1, retomemos o 5-leque com onze vértices determinado pela junção $K_3 + S_2^8$, já apresentado na Figura 5.4. Faremos a contagem de 4-ciclos contidos em $K_3 + S_2^8$ exclusivamente pelo Teorema 5.2.1. O resultado será confirmado quando o utilizarmos no cálculo de um dos coeficientes característicos de $K_3 + S_2^8$ na Seção 6.3. As variáveis associadas a esse grafo são $n = 11$, $k = 5$ e $l = 3$. Pela equação (5.33), o número de 4-ciclos do tipo (a.1) é $n_4((a.1); 11, 5, 3) = 5$. O número de 4-ciclos do tipo (a.2) é dado pela equação (5.34) e vale $n_4((a.2); 11, 5, 3) = 96$. Já o número de 4-ciclos do tipo (a.3), calculado por meio da equação (5.35),

é igual a $n_4((a.3); 11, 5, 3) = 78$. A equação (5.36) fornece o número de 4-ciclos do tipo (a.4), resultando em $n_4((a.4); 11, 3) = 84$. O número de 4-ciclos do tipo (a.5) é dado pela equação (5.37) e vale $n_4((a.5); 11, 3) = 24$. Por fim, a equação (5.38) calcula o número de 4-ciclos do tipo (a.6), obtendo $n_4((a.6); 3) = 0$ (K_3 não possui número suficiente de vértices para conter um 4-ciclo). A soma de todos esses valores resulta no número de 4-ciclos contidos em $K_3 + S_2^8$:

$$n_4(K_3 + S_2^8; 11, 5, 3) = 5 + 96 + 78 + 84 + 24 + 0 = 287, \quad (5.39)$$

que é o mesmo valor obtido substituindo diretamente $n = 11$, $k = 5$ e $l = 3$ na equação (5.32).

Na próxima seção, tratamos da contagem de 4-ciclos contidos em grafos k -estrela, que formam a terceira e última subfamília de grafos considerada.

5.3 Número de 4-ciclos em grafos k -árvore estrela

Da Definição 3.2.3, segue que as k -árvores estrela são obtidas escolhendo sempre a mesma clique de ligação, formada por k vértices da $(k+1)$ -clique inicial, para todos os vértices de rótulo $k+2$ a n adicionados ao grafo. Observamos que, sem perda de generalidade, podemos selecionar os vértices de rótulo 1 a k para formar essa k -clique de ligação.

Dentre as três subfamílias de grafos k -árvore consideradas, é na de grafos k -árvore estrela que a contagem de 4-ciclos se dá de forma mais direta. Ainda assim, achamos vantajoso considerar as 2-estrelas em separado às demais k -estrelas, com $k \geq 3$, a fim de ganharmos intuição antes de demonstrar o caso geral.

Proposição 5.3.1 (Número de 4-ciclos em E_2^n). Para um grafo 2-árvore estrela em n vértices, E_2^n , com $n > 3$, o número de 4-ciclos, em função de n , é dado pela expressão

$$n_4(E_2^n) = \frac{1}{2}(n-3)(n-2). \quad (5.40)$$

Demonstração. A construção de uma 2-árvore estrela se inicia com um grafo completo com três vértices e tem como 2-clique de ligação de todo vértice de rótulo i , com $i = 4, 5, \dots, n$, a clique formada pelos vértices de rótulos 1 e 2. Quando temos apenas o grafo completo com três vértices inicial, não há nenhum 4-ciclo, mas à

medida que adicionamos os vértices de rótulo 4 a n , passamos a identificar 4-ciclos no grafo. Ao inserir o vértice de rótulo 4, ou vértice 4, por simplicidade, o 4-ciclo adicionado à 2-árvore estrela obrigatoriamente conterá esse vértice, assim como os dois vértices adjacentes a ele. Em outras palavras, as duas arestas que conectam o vértice 4 à 2-clique de ligação, formada pelos vértices 1 e 2, serão arestas do 4-ciclo, sendo necessárias, no entanto, mais duas arestas adequadas dentre as determinadas pela 3-clique inicial. Na Figura 5.6(a), vemos que as arestas 14 e 24 são as arestas que ligam o vértice 4 à 2-clique de ligação e que a única escolha possível para as duas outras arestas desse 4-ciclo são 13 e 23. É interessante observar que, escolhendo o vértice 4 para iniciar o 4-ciclo, ele será da forma 41_2 ; não podemos preencher a lacuna com nenhum dos vértices 1 ou 2 e nem com o vértice 4, pois nenhuma dessas escolhas resultaria em um 4-ciclo no grafo. Só há uma possibilidade para o preenchimento da lacuna em 41_2 de modo a obter um 4-ciclo e essa quantidade é equivalente ao grau do vértice 1 na 2-estrela com *quatro* vértices, 3, subtraído de 2 (pois, como já foi dito, do vértice 1 não podemos ir para o vértice 2 e nem voltar para o vértice 4).

Seguindo na construção de E_2^n , vamos inserir o vértice 5; os novos 4-ciclos adicionados à 2-árvore estrela obrigatoriamente conterão esse vértice, assim como os dois vértices adjacentes a ele. Em outras palavras, as duas arestas que conectam o vértice 5 à 2-clique de ligação serão arestas do 4-ciclo, sendo necessárias, no entanto, mais duas arestas adequadas dentre aquelas existentes em E_2^4 . As arestas 15 e 25 são as que ligam o vértice 5 à 2-clique de ligação e há duas escolhas possíveis para as duas outras arestas indispensáveis a um 4-ciclo: 13 e 23 (Figura 5.6(b)) e 14 e 24 (Figura 5.6(c)). Observamos que, escolhendo o vértice 5 para iniciar o 4-ciclo, ele será da forma 51_2 ; não podemos preencher a lacuna com nenhum dos vértices 1 ou 2 e nem com o vértice 5, pois nenhuma dessas escolhas resultaria em um 4-ciclo no grafo. O número de possibilidades para o preenchimento da lacuna em 51_2 de modo a obter um 4-ciclo é equivalente ao grau do vértice 1 na 2-estrela com *cinco* vértices, 4, subtraído de 2 (pois, como já foi dito, do vértice 1 não podemos ir para o vértice 2 e nem voltar para o vértice 5).

Em geral, ao inserirmos o vértice i , os novos 4-ciclos adicionados à 2-árvore estrela obrigatoriamente conterão esse vértice, assim como os dois vértices adjacentes a ele.

Em outras palavras, as duas arestas que conectam o vértice i à 2-clique de ligação serão arestas do 4-ciclo, sendo necessárias mais duas arestas adequadas dentre as existentes em E_2^{i-1} . As arestas $1i$ e $2i$ são as que ligam o vértice i à 2-clique de ligação e há $i - 3$ escolhas possíveis para as duas outras arestas indispensáveis a um 4-ciclo: 13 e 23 , 14 e 24 , 15 e 25 , \dots , $1(i-1)$ e $2(i-1)$ (Figuras 5.6(d) a 5.6(g)). De modo análogo ao já observado com os vértices 4 e 5, ao escolhermos o vértice i para iniciar o 4-ciclo, ele será da forma $i1_2$; não podemos preencher a lacuna com nenhum dos vértices 1 ou 2 e nem com o vértice i , pois nenhuma dessas escolhas resultaria em um 4-ciclo no grafo. O número $i - 3$ de possibilidades para o preenchimento da lacuna em 51_2 de modo a obter um 4-ciclo é equivalente ao grau do vértice 1 na 2-estrela com i vértices, $i - 1$, subtraído de 2 (uma vez que, partindo do vértice 1, não podemos ir para o vértice 2 e nem voltar para o vértice i). Assim, somando os 4-ciclos obtidos ao adicionarmos desde o vértice 4 até o vértice n , chegamos ao número total de 4-ciclos em uma 2-árvore estrela em função de n :

$$\begin{aligned}
n_4(E_2^n) &= \sum_{i=4}^n (i-3) \\
&= \left(\sum_{i=4}^n i \right) - 3(n-3) \\
&= \frac{1}{2}(n-3)(n+4) - 3(n-3) \\
&= \frac{1}{2}(n-3)(n-2).
\end{aligned}$$

□

Com as devidas adaptações, a demonstração para o número de 4-ciclos em uma k -árvore estrela em n vértices, com $k \geq 3$, em função das variáveis n e k se dá de modo bastante semelhante à demonstração da Proposição 5.3.1.

Teorema 5.3.1 (Número de 4-ciclos em E_k^n , $k \geq 3$). *Para um grafo k -árvore estrela em n vértices, E_k^n , com $k \geq 3$ e $n > k + 1$, o número de 4-ciclos, em função de n e k , é dado pela expressão*

$$n_4(E_k^n) = \frac{kn}{4}(k-1)(n-5) - \frac{k}{8}(k^3 - 6k^2 - k + 6). \quad (5.41)$$

Demonstração. A construção de uma k -árvore estrela se inicia com um grafo completo com $k + 1$ vértices e tem como k -clique de ligação de todo vértice de rótulo i , com $i = k + 2, k + 3, \dots, n$, a clique formada pelos vértices de rótulo 1 a k . Durante

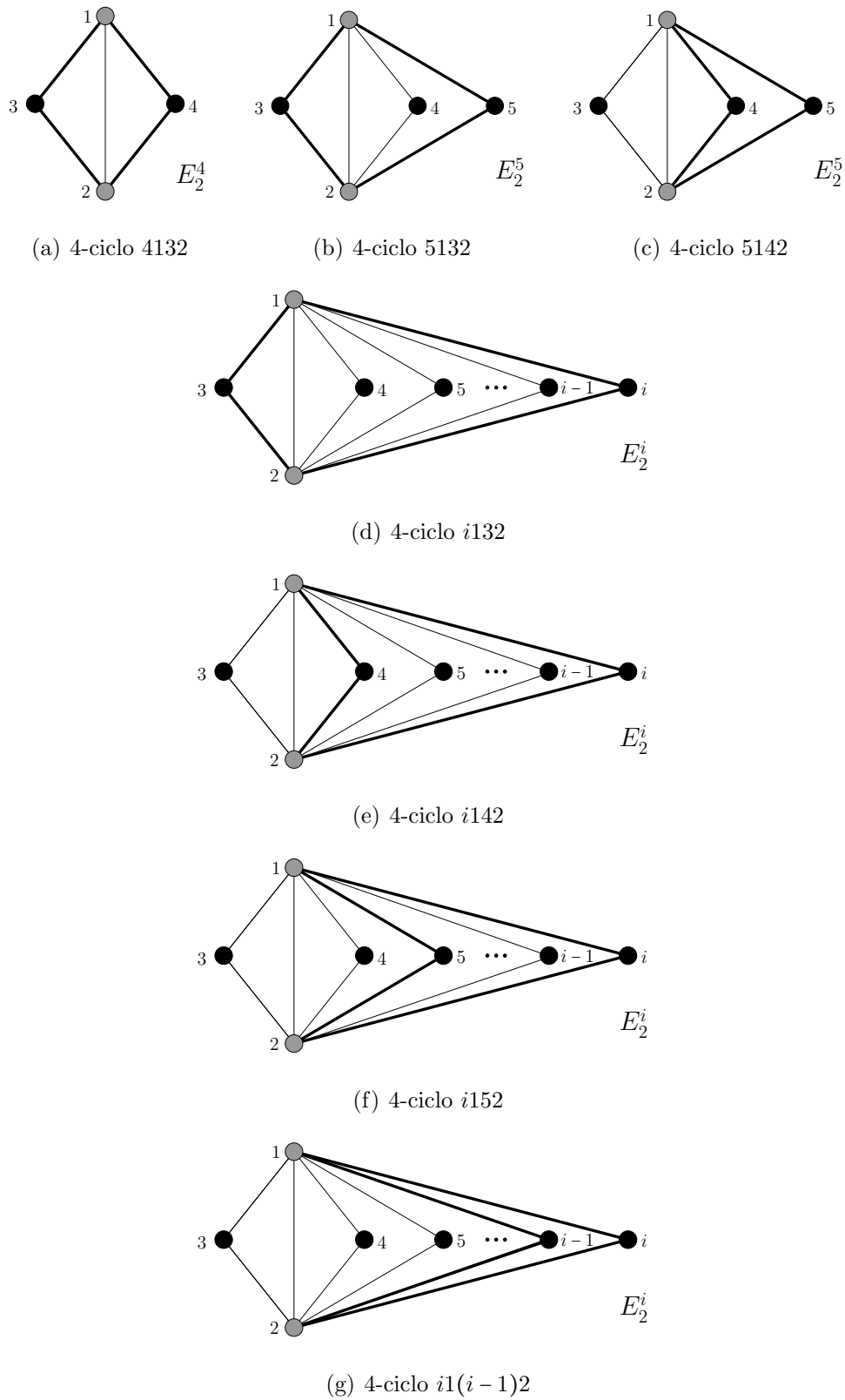


Figura 5.6: Contagem de 4-ciclos durante a construção de uma 2-árvore estrela.

o processo de construção de E_k^n , quando temos somente o grafo completo com $k + 1$ vértices inicial, o Lema 5.2.3 assegura que há exatamente $3C_4^{k+1}$ 4-ciclos em E_k^{k+1} . À medida que adicionamos os vértices de rótulos $(k + 2)$ a n , passamos a identificar novos 4-ciclos no grafo. Ao inserir o vértice de rótulo $(k + 2)$, ou vértice $(k + 2)$, por simplicidade, os 4-ciclos adicionados à k -árvore estrela obrigatoriamente conterão esse vértice, assim como dois dos k vértices adjacentes a ele. Em outras palavras, duas dentre as k arestas que conectam o vértice $(k + 2)$ à k -clique de ligação serão arestas do 4-ciclo, sendo necessárias, no entanto, mais duas arestas adequadas das determinadas pela $(k + 1)$ -clique inicial. O número de escolhas para o par de arestas que ligam o vértice $(k + 2)$ a dois vértices p e q da k -clique de ligação, com $p < q$, é igual à combinação de k arestas tomadas duas a duas, ou seja, C_2^k . Fixados esses dois vértices p e q da k -clique de ligação, há exatamente $k - 1$ escolhas possíveis para as duas outras arestas do 4-ciclo contendo as arestas $p(k + 2)$ e $q(k + 2)$. De fato, escolhendo o vértice $(k + 2)$ para iniciar tal 4-ciclo, ele será da forma $(k + 2)p - q$. Não podemos preencher a lacuna com nenhum dos vértices p ou q e nem com o vértice $(k + 2)$, pois nenhuma dessas escolhas resultaria em um 4-ciclo no grafo; no entanto, podemos colocar na lacuna qualquer um dos vértices da k -clique de ligação, desde que diferentes de p e q , ou ainda o vértice $(k + 1)$. Assim, concluímos que o número de maneiras de preenchermos a lacuna em $(k + 2)p - q$ de modo a obter um 4-ciclo em E_k^{k+2} , contendo as arestas $p(k + 2)$ e $q(k + 2)$, é igual ao grau do vértice p em E_k^{k+2} , $k + 1$, subtraído de 2 (pois, como já foi dito, do vértice p não podemos ir para o vértice q e nem voltar para o vértice $(k + 2)$). Logo, contabilizamos $C_2^k \cdot (k - 1)$ 4-ciclos em E_k^{k+2} após a adição do vértice $(k + 2)$.

Seguindo na construção de E_2^n , vamos inserir o vértice $(k + 3)$; os novos 4-ciclos adicionados à k -árvore estrela obrigatoriamente conterão esse vértice, assim como dois dos k vértices adjacentes a ele. Em outras palavras, duas dentre as k arestas que conectam o vértice $(k + 3)$ à k -clique de ligação serão arestas do 4-ciclo, sendo necessárias, no entanto, mais duas arestas adequadas daquelas existentes em E_k^{k+2} . O número de escolhas para o par de arestas que ligam o vértice $(k + 3)$ a dois vértices p e q da k -clique de ligação, com $p < q$, é igual à combinação de k arestas tomadas duas a duas, C_2^k . Fixados esses dois vértices p e q da k -clique de ligação, há exatamente k escolhas possíveis para as duas outras arestas do 4-ciclo contendo as

arestas $p(k+3)$ e $q(k+3)$. De fato, escolhendo o vértice $(k+3)$ para iniciar tal 4-ciclo, ele será da forma $(k+3)p-q$. Não podemos preencher a lacuna com nenhum dos vértices p ou q e nem com o vértice $k+3$, pois nenhuma dessas escolhas resultaria em um 4-ciclo no grafo; no entanto, podemos colocar na lacuna qualquer um dos vértices da k -clique de ligação, desde que diferentes de p e q , ou ainda os vértices $k+1$ ou $k+2$. Assim, concluímos que o número de maneiras de preenchermos a lacuna em $(k+3)p-q$ de modo a obter um 4-ciclo em E_k^{k+3} , contendo as arestas $p(k+3)$ e $q(k+3)$, é igual ao grau do vértice p em E_k^{k+3} , $k+2$, subtraído de 2 (pois, como já foi dito, do vértice p não podemos ir para o vértice q e nem voltar para o vértice $(k+3)$). Logo, identificamos $C_2^k \cdot (k)$ novos 4-ciclos em E_k^{k+3} após a adição do vértice $(k+3)$.

Em geral, ao inserirmos o vértice i , os novos 4-ciclos adicionados à k -árvore estrela obrigatoriamente conterão esse vértice, assim como dois dos k vértices adjacentes a ele. Ou seja, duas dentre as k arestas que conectam o vértice i à k -clique de ligação serão arestas do 4-ciclo, sendo necessárias, no entanto, mais duas arestas adequadas daquelas existentes em E_k^{i-1} . O número de escolhas para o par de arestas que ligam o vértice i a dois vértices p e q da k -clique de ligação, com $p < q$, é igual à combinação de k arestas tomadas duas a duas, C_2^k . Fixados esses dois vértices p e q distintos da k -clique de ligação, há exatamente $i-3$ escolhas possíveis para as duas outras arestas do 4-ciclo contendo as arestas pi e qi . De fato, escolhendo o vértice i para iniciar tal 4-ciclo, ele será da forma $ip-q$. Não podemos preencher a lacuna com nenhum dos vértices p ou q e nem com o vértice i , pois nenhuma dessas escolhas resultaria em um 4-ciclo no grafo; no entanto, podemos colocar qualquer um dos vértices da k -clique de ligação, desde que diferentes de p e q , ou ainda os vértices $(k+1)$, $(k+2)$, \dots , $(i-2)$, $(i-1)$. Portanto, concluímos que o número de maneiras de preenchermos a lacuna em $ip-q$ de modo a obter um 4-ciclo em E_k^i , contendo as arestas pi e qi , é igual a $(k-2) + [(i-1) - k] = i-3$, que coincide com o grau do vértice p em E_k^i , $i-1$, subtraído de 2 (já que, do vértice p , não podemos ir para o vértice q e nem voltar para o vértice i). Logo, contabilizamos $C_2^k \cdot (i-3)$ 4-ciclos em E_k^i após a adição do vértice i .

Somando aos 4-ciclos contidos na $(k+1)$ -clique inicial os 4-ciclos obtidos ao adicionarmos desde o vértice $(k+2)$ até o vértice n , chegamos ao número total de

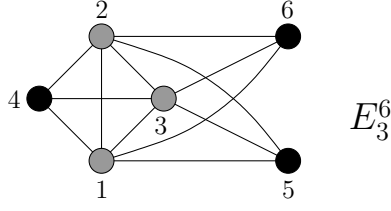


Figura 5.7: E_3^6 , a 3-árvore estrela com 6 vértices.

4-ciclos em uma k -árvore estrela em n vértices, com $k \geq 3$ e $n > k + 1$, em função das variáveis n e k :

$$\begin{aligned}
 n_4(E_k^n) &= 3C_4^{k+1} + C_2^k \sum_{i=k+2}^n (i-3) \\
 &= 3C_4^{k+1} + C_2^k \left[\left(\sum_{i=k+2}^n i \right) - 3(n - (k+1)) \right] \\
 &= 3C_4^{k+1} + C_2^k \left[\frac{1}{2}(n+k+2)(n - (k+1)) - 3(n - (k+1)) \right] \\
 &= \frac{k}{8}(k+1)(k-1)(k-2) + \frac{k}{2}(k-1) \left[\frac{1}{2}(n-k-1)(n+k-4) \right] \\
 &= \frac{kn}{4}(k-1)(n-5) - \frac{k}{8}(k^3 - 6k^2 - k + 6).
 \end{aligned}$$

□

Chamamos a atenção para o fato de que o resultado estabelecido pela Proposição 5.3.1 está embutido no Teorema 5.3.1, ou seja, esse último fornece o número de 4-ciclos contidos em um grafo k -árvore estrela em n vértices para qualquer $k \geq 2$ satisfazendo $k > n + 1$. Embora a 3-clique inicial de uma 2-árvore estrela não possua um número suficiente de vértices para conter um 4-ciclo, de modo que não faz sentido calcular C_4^{k+1} para $k = 2$, não há nenhum problema em substituímos tal valor na expressão simplificada para essa combinação, $\frac{k}{24}(k+1)(k-1)(k-2)$, o que resulta em zero. É simples verificar que, ao fazermos $k = 2$ na equação (5.41), obtemos $n_4(E_2^n) = \frac{1}{2}(n-3)(n-2)$, que é justamente a expressão em (5.40) para o número de 4-ciclos contidos em uma 2-árvore estrela em função do seu número de vértices n . Assim, com o cuidado de convencionarmos que $C_4^{k+1} = 0$ para $k = 2$, a demonstração do Teorema 5.3.1 é válida para $k \geq 2$.

Vamos considerar duas k -árvores estrela para ilustrar o Teorema 5.3.1. Os 4-ciclos contidos na 3-árvore estrela com seis vértices, E_3^6 , apresentada na Figura 5.7, serão contabilizados tanto explicitamente quanto pela equação (5.41). Com relação a 6-árvore estrela com nove vértices, E_6^9 , representada na Figura 5.8, a contagem de

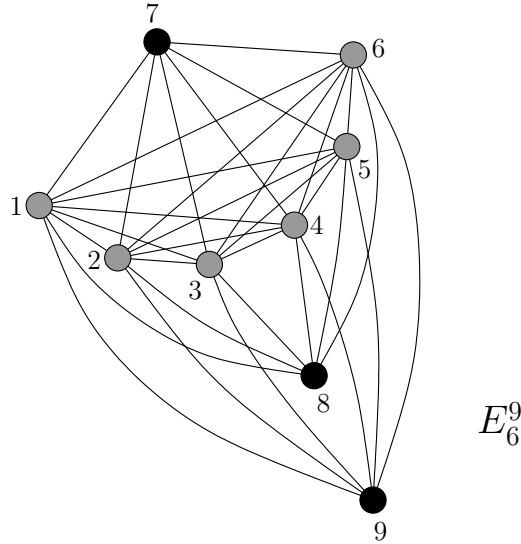


Figura 5.8: E_6^9 , a 6-árvore estrela com 9 vértices.

4-ciclos será feita exclusivamente por meio do Teorema 5.3.1; no entanto, o resultado obtido será confirmado na Seção 6.3, quando o utilizarmos como parte do cálculo de um dos coeficientes característicos de E_6^9 .

Os 4-ciclos contidos em E_3^6 são: 1234, 1243 e 1324, contendo apenas os vértices da 4-clique inicial; 5132, 5142, 5123, 5143, 5213 e 5243, obtidos com a adição do vértice 5; e 6132, 6142, 6152, 6123, 6143, 6153, 6213, 6243 e 6253, obtidos com a adição do vértice 6. São em um total de dezoito 4-ciclos. Esse é o número fornecido pela expressão em (5.41) fazendo $n = 6$ e $k = 3$:

$$n_4(E_3^6) = \frac{18}{4} (2)(1) - \frac{3}{8} (27 - 6(9) - 3 + 6) = 9 - \frac{3}{8} (-24) = 18.$$

Já para E_6^9 , a expressão em (5.41), com $n = 9$ e $k = 6$, contabiliza um total de 270 4-ciclos contidos no grafo:

$$n_4(E_6^9) = \frac{54}{4} (5)(4) - \frac{6}{8} (216 - 6(36) - 6 + 6) = 270 - \frac{6}{8} (0) = 270. \quad (5.42)$$

Os experimentos nos levam a constatar um fato interessante. Nas três subfamílias de k -árvores em n vértices analisadas, o número de 4-ciclos aumenta quando passamos das k -serpentinhas para os k -leques (e cresce dentro dessa subfamília quando l varia de 1 a $k - 1$) e, em seguida, para as k -estrelas. Notamos também que o número de 4-ciclos é o mesmo entre a k -serpentina em n vértices e o k -leque determinado pela junção $K_1 + S_{k-1}^{n-1}$ ($l = 1$). A quantidade de 4-ciclos é afetada pelo número de vértices universais dos grafos considerados, ainda que todos eles tenham

o mesmo número de arestas. Na Tabela 5.7, fazemos comparações entre os números de vértices simpliciais, universais e de 4-ciclos para as 5-árvores em dezoito vértices de cada uma das três subfamílias. Lembramos que, para $k = 5$, há quatro 5-leques não isomorfos.

Tabela 5.7: Comparações entre as três subfamílias estudadas de k -árvores em n vértices para $n = 18$ e $k = 5$.

5-árvores em 18 vértices	# vértices simpliciais	# vértices universais	# 4-ciclos (n_4)
S_5^{18}	2	0	630
$K_1 + S_4^{17}$	2	1	630
$K_2 + S_3^{16}$	2	2	666
$K_3 + S_2^{15}$	2	3	756
$K_4 + S_1^{14}$	2	4	921
E_5^{18}	13	5	1.185

No próximo capítulo, utilizamos os resultados estabelecidos com o propósito de estabelecer expressões para o coeficiente c_4 da potência λ^{n-4} do polinômio característico de grafos das três subfamílias de k -árvores estudadas em função das variáveis n , k e possivelmente l .

Capítulo 6

Aplicação

O principal objetivo deste capítulo é obter expressões para o coeficiente característico da potência λ^{n-4} do polinômio característico de grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela com n vértices em função das variáveis n , k e, com relação aos grafos k -leque, também em função de l . Para chegarmos às expressões procuradas, utilizaremos a abordagem do cálculo dos coeficientes característicos a partir dos subgrafos elementares de um grafo. O coeficiente associado à potência λ^{n-4} está relacionado à quantidade de pares de arestas disjuntas e de ciclos de tamanho quatro contidos no grafo. Assim, nossa primeira tarefa é contabilizar pares de arestas disjuntas e, para isso, utilizamos um resultado estabelecido por DE MORAES *et al.* [3] aliado à observação de características dos grafos considerados. Associando aos resultados obtidos no capítulo anterior, chegamos a uma representação para o coeficiente da potência λ^{n-4} do polinômio característico desses grafos em função das três variáveis citadas.

A seguir, relembramos conceitos que serão importantes no decorrer desta seção, como o de subgrafo elementar, e apresentamos uma proposição a partir da qual se desenvolve este capítulo. Esse resultado estabelece de que forma os coeficientes característicos de um grafo estão relacionados a seus subgrafos elementares.

6.1 Coeficientes característicos por contagem em subgrafos elementares

Embora o polinômio característico de um grafo seja calculado algebricamente, seus coeficientes guardam informações próprias à estrutura do grafo, o que permite que sejam encontrados de modo alternativo, por meio de contagem em subgrafos elementares. Para seguirmos essa abordagem, é adequado recordarmos algumas definições.

Dado um grafo G com n vértices, m arestas e c componentes conexas, o *posto* e o *co-posto* de G são definidos, respectivamente, por

$$r(G) = n - c \quad \text{e} \quad s(G) = m - n + c. \quad (6.1)$$

Observamos que o conceito de co-posto permite definir grafos cíclico (ou ciclo, simplesmente), bicíclico e tricíclico quando $s = 1$, $s = 2$ e $s = 3$. De modo geral, um grafo G é k -cíclico quando $s(G) = k$, ou seja, G é formado por k ciclos disjuntos. Em particular, se $k = 0$, G é uma floresta.

Um *grafo elementar* é um grafo simples no qual cada componente é regular de grau 1 ou 2. Em outras palavras, cada componente de um grafo elementar é uma aresta ou um ciclo com r vértices, que também chamamos de r -ciclo. O co-posto de um grafo elementar coincide com o número de suas componentes que são ciclos. De fato, se o grafo elementar G se escreve como a componentes do tipo K_2 e b componentes do tipo C_r , obtemos

$$s(G) = a(m_{K_2} - n_{K_2} + c_{K_2}) + b(m_{C_r} - n_{C_r} + c_{C_r}) = a(1 - 2 + 1) + b(r - r + 1) = b.$$

O cálculo é análogo para o caso geral em que G se escreve como a componentes do tipo K_2 , b_1 componentes do tipo C_{r_1} , b_2 componentes do tipo C_{r_2} , ..., b_l componentes do tipo C_{r_l} , quando

$$s(G) = a(1 - 2 + 1) + b_1(r_1 - r_1 + 1) + \dots + b_l(r_l - r_l + 1) = b_1 + \dots + b_l.$$

A partir dos valores do posto e do co-posto de cada subgrafo elementar de um grafo, podemos determinar cada um dos seus coeficientes característicos utilizando o resultado a seguir:

Proposição 6.1.1 ([22], p. 45). Seja

$$p(G; \lambda) = \lambda^n + c_1 \lambda^{n-1} + c_2 \lambda^{n-2} + c_3 \lambda^{n-3} + c_4 \lambda^{n-4} + \dots + c_{n-1} \lambda + c_n \quad (6.2)$$

o polinômio característico de um grafo G . Os coeficientes de $p(G; \lambda)$ são dados por

$$(-1)^i c_i = \sum (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)}, \quad (6.3)$$

onde as parcelas do somatório percorrem todos os subgrafos elementares Λ de G com i vértices e $r(\Lambda)$ e $s(\Lambda)$ são o posto e o co-posto de Λ .

O cálculo de cada coeficiente característico de um grafo G por meio da equação (6.3) pode, em geral, ser um problema combinatório penoso, pois requer a identificação de todos os subgrafos elementares do grafo. Para os primeiros coeficientes característicos, no entanto, não há maiores dificuldades. O coeficiente $-c_1$ corresponde à soma dos autovalores de G , que coincide com o traço de $A(G)$, e que sabemos ser igual a zero. Logo, $c_1 = 0$. Os únicos grafos elementares com menos de quatro vértices são a aresta K_2 e o 3-ciclo ou triângulo C_3 . Assim, $-c_2$ corresponde a m , o número de arestas de G , enquanto $-c_3$ é igual ao dobro do número n_3 de 3-ciclos em G . Os grafos elementares com exatamente quatro vértices são os 4-ciclos e o grafo contendo duas arestas disjuntas, de sorte que o coeficiente c_4 é expresso pela diferença

$$c_4 = n_2 - 2n_4, \quad (6.4)$$

onde n_2 é o número de pares de arestas disjuntas e n_4 é o número de 4-ciclos em G .

Para ilustrar o resultado estabelecido pela Proposição 6.1.1, considere G o grafo representado no canto superior esquerdo da Figura 6.1. Para esse grafo, temos: $c_1 = 0$, $-c_2 = m = 7$, $-c_3 = 2n_3 = 2(2) = 4$ e $c_4 = n_2 - 2n_4 = 9 - 2(1) = 7$, onde o número n_2 de subgrafos elementares contendo duas arestas disjuntas, o número n_3 de 3-ciclos (triângulos) e o número n_4 de 4-ciclos foram encontrados analisando a Figura 6.1.

A Proposição 6.1.1 pode ser utilizada para determinar expressões para os demais coeficientes de $p(G; \lambda)$ em função das características estruturais do grafo G considerado. DE MORAES *et al.* [3] exploraram o conceito de k -emparelhamentos a fim de obter representações para c_4 e c_5 , respectivamente os coeficientes das potências λ^{n-4} e λ^{n-5} do polinômio característico de um grafo. Quando $k = 2$, o número de

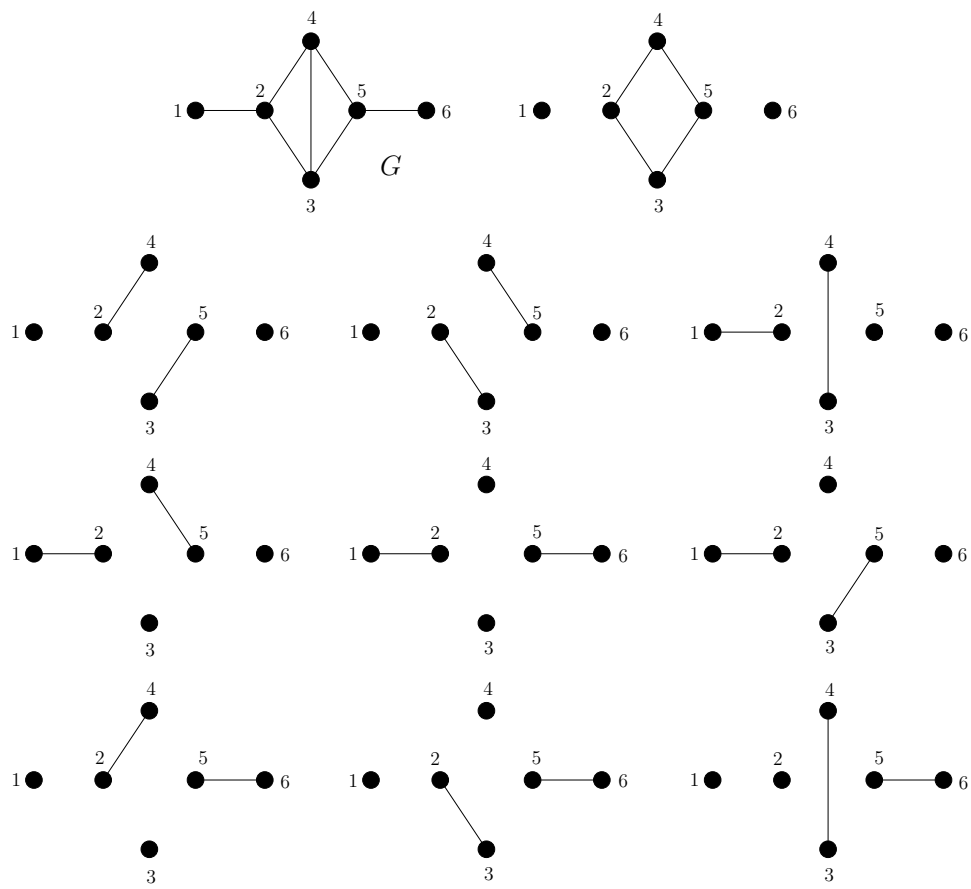


Figura 6.1: O grafo G , um 4-ciclo e arestas disjuntas duas a duas em G .

k -emparelhamentos coincide com a quantidade de pares de arestas disjuntas contidas no grafo, que sabemos ser de relevância ao cômputo do coeficiente c_4 . Na próxima seção, com esse propósito, estabelecemos fórmulas para o número de 2-emparelhamentos em grafos de cada uma das três subfamílias — k -serpentina, k -leque e k -árvores estrela — em função das variáveis envolvidas.

6.2 2-emparelhamentos em grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela

Em [3], DE MORAES *et al.* abordaram os k -emparelhamentos, $k \geq 2$, que são grafos constituídos por k componentes isomorfas a K_2 . Em particular, um 2-emparelhamento é um grafo com quatro vértices e duas arestas não adjacentes. O primeiro resultado apresentado pelos autores mostra como encontrar o número de 2-emparelhamentos em um grafo G , notado por $\epsilon_2(G)$, a partir da sequência de graus do grafo, sem a necessidade de listar todos os seus k -emparelhamentos.

Teorema 6.2.1 ([3]). *Seja G um grafo com n vértices e m arestas, cuja sequência de graus é igual a $D = [d_1, d_2, \dots, d_n]$. O número de 2-emparelhamentos de G , $\epsilon_2(G)$, pode ser encontrado por meio da expressão*

$$\epsilon_2(G) = \frac{1}{2} \left(m^2 + m - \sum_{i=1}^n d_i^2 \right). \quad (6.5)$$

O Teorema 6.2.1 estabelece um resultado forte e aplicável a qualquer grafo. Quando lidamos com as subfamílias de grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela com n vértices, expressões para o número ϵ_2 de 2-emparelhamentos em função das variáveis n , k e l (essa última no caso dos grafos k -leque) podem ser obtidas a partir da equação (6.5) e de características estruturais dos grafos considerados. Essas expressões serão fundamentais para determinarmos, em função de variáveis mencionadas, o coeficiente c_4 da potência λ^{n-4} do polinômio característico dos grafos em cada uma das subfamílias estudadas.

Corolário 6.2.1 (Número de 2-emparelhamentos em S_k^n). Para um grafo k -serpentina com n vértices, S_k^n , com $n > 2k$, o número de 2-emparelhamentos, ϵ_2 , em função de n e k , é dado por

$$\epsilon_2(S_k^n) = \frac{1}{2} \left[\frac{k^4}{4} + k^3 \left(\frac{23}{6} - n \right) + k^2 \left(n^2 - 5n + \frac{11}{4} \right) + k \left(n - \frac{5}{6} \right) \right]. \quad (6.6)$$

Demonstração. Seja S_k^n uma k -serpentina com n vértices, com $n > 2k$. Para calcularmos o número de 2-emparelhamentos no grafo, em função de n e k , usando a equação (6.5), precisamos determinar apenas a soma dos quadrados dos graus dos vértices do grafo em função das mesmas variáveis, uma vez que o número de arestas em S_k^n é conhecido. Conforme a Tabela 4.1, a sequência de graus de S_k^n é

$$\begin{aligned} D_{S_k^n} &= [k, k+1, \dots, 2k-2, 2k-1, \underbrace{2k, 2k, \dots, 2k}_{n-2k}, 2k-1, 2k-2, \dots, k+1, k] \\ &= [k, k+1, \dots, 2k-2, 2k-1] \circ [2k]^{n-2k} \circ [2k-1, 2k-2, \dots, k+1, k]. \end{aligned}$$

Assim, a soma dos quadrados dos graus dos vértices de S_k^n é igual a

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n d_i^2 &= 2[k^2 + (k+1)^2 + \dots + (2k-1)^2] + (n-2k)(2k)^2 \\ &= 2\left[\frac{1}{6}(2k-1)(2k)(4k-1) - \frac{1}{6}(k-1)(k)(2k-1)\right] + (n-2k)(2k)^2 \\ &= 2\left[\frac{1}{6}(14k^3 - 9k^2 + k)\right] + 4nk^2 - 8k^3 \\ &= \frac{1}{3}[-10k^3 + (12n-9)k^2 + k]. \end{aligned} \tag{6.7}$$

Substituindo na equação (6.5) as expressões para m em termos de n e k , calculada em (3.1), e para a soma dos quadrados dos vértices obtida em (6.7), expandindo o quadrado e desenvolvendo as contas, chegamos à expressão para o número de 2-emparelhamentos em S_k^n em função de n e k apresentada em (6.6):

$$\begin{aligned} \epsilon_2(S_k^n) &= \frac{1}{2} \left\{ \left[k \left(n - \frac{1}{2} \right) - \frac{k^2}{2} \right]^2 + \left[k \left(n - \frac{1}{2} \right) - \frac{k^2}{2} \right] - \frac{1}{3} [-10k^3 + (12n-9)k^2 + k] \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \left[\frac{k^4}{4} + k^3 \left(\frac{1}{2} - n \right) + k^2 \left(n^2 - n + \frac{1}{4} \right) \right] + \left[-\frac{k^2}{2} + k \left(n - \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{10k^3}{3} + (3-4n)k^2 - \frac{k}{3} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{k^4}{4} + k^3 \left[\left(\frac{1}{2} - n \right) + \frac{10}{3} \right] + k^2 \left[\left(n^2 - n - \frac{1}{4} \right) + (3-4n) \right] + k \left[\left(n - \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{3} \right] \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{k^4}{4} + k^3 \left(\frac{23}{6} - n \right) + k^2 \left(n^2 - 5n + \frac{11}{4} \right) + k \left(n - \frac{5}{6} \right) \right]. \end{aligned}$$

□

Como exemplo ao Corolário 6.2.1, tomemos o grafo 2-serpentina em n vértices, S_2^n . O número de 2-emparelhamentos em S_2^n , em função de n , pode ser calculado pela equação (6.6), com $k = 2$:

$$\begin{aligned} \epsilon_2(S_2^n) &= \frac{1}{2} \left[\frac{2^4}{4} + 2^3 \left(\frac{23}{6} - n \right) + 2^2 \left(n^2 - 5n + \frac{11}{4} \right) + 2 \left(n - \frac{5}{6} \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[4n^2 - 26n + \frac{174}{6} + 15 \right] \\ &= 2n^2 - 13n + 22. \end{aligned}$$

Para o número de 2-emparelhamentos em grafos k -leque, usaremos a notação $\epsilon_2(K_l + S_{k-l}^{n-l}; n, k, l)$, com as variáveis n , k e l escritas explicitamente no argumento, assim como feito para o número de 4-ciclos nesses grafos. Lembramos que o motivo dessa notação é evidenciar os parâmetros da serpentina na junção que forma um dado k -leque.

Corolário 6.2.2 (Número de 2-emparelhamentos em $K_l + S_{k-l}^{n-l}$). Para um grafo k -leque com n vértices determinado pela junção $K_l + S_{k-l}^{n-l}$, com $1 \leq l \leq k-1$ e $n > 2k+1$, o número de 2-emparelhamentos, ϵ_2 , em função de n , k e l , é dado por

$$\begin{aligned} \epsilon_2(K_l + S_{k-l}^{n-l}; n, k, l) &= \frac{1}{2} \left\{ \left[k \left(n - \frac{1}{2} \right) - \frac{k^2}{2} \right]^2 + \left[k \left(n - \frac{1}{2} \right) - \frac{k^2}{2} \right] - [l(n-1)]^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{k-l}{3} [6k(2k-l-1) + (k-l-1)(2(k-l)-1)] + (n+l-2k)(2k-l)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Demonstração. Considere um grafo k -leque com n vértices determinado pela junção $K_l + S_{k-l}^{n-l}$, com $n > 2k+1$. Para calcularmos o número de 2-emparelhamentos no grafo, em função de n , k e l , usando a equação (6.5), precisamos determinar somente a soma dos quadrados dos graus dos vértices do grafo em função dessas variáveis, já que conhecemos o número de arestas em qualquer k -árvore. Conforme a Tabela 4.4, a sequência de graus de $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ é

$$D_{K_l + S_{k-l}^{n-l}} = [n-1]^l \circ [k, k+1, \dots, 2k-l-1] \circ [2k-l]^{n+l-2k} \circ [2k-l-1, \dots, k+1, k].$$

A partir dessa sequência, uma expressão para a soma dos quadrados dos graus dos vértices de $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ em função de n , k e l pode ser calculada como

$$\sum_{i=1}^n d_i^2 = l(n-1)^2 + 2 \underbrace{[k^2 + (k+1)^2 + \dots + (k + (k-l-1))^2]}_{(I)} + (n+l-2k)(2k-l)^2, \quad (6.9)$$

onde

$$\begin{aligned} (I) &= k^2 + (k^2 + 2 \cdot 1 \cdot k + 1^2) + (k^2 + 2 \cdot 2 \cdot k + 2^2) + \dots + (k^2 + 2 \cdot (k-l-1) \cdot k + (k-l-1)^2) \\ &= k^2(k-l) + 2k(1+2+3+\dots+(k-l-1)) + (1^2+2^2+3^2+\dots+(k-l-1)^2) \\ &= k^2(k-l) + 2k \cdot \frac{1}{2}(k-l)(k-l-1) + \frac{1}{6}((k-l-1)+1)(k-l-1)(2(k-l-1)+1) \\ &= k(k-l)(2k-l-1) + \frac{1}{6}(k-l)(k-l-1)(2(k-l)-1) \\ &= \frac{(k-l)}{6} [6k(2k-l-1) + (k-l-1)(2(k-l)-1)]. \end{aligned}$$

Trocando a soma (I) em (6.9) pelo lado direito da última igualdade, obtemos

$$\sum_{i=1}^n d_i^2 = l(n-1)^2 + \frac{(k-l)}{3} [6k(2k-l-1) + (k-l-1)(2(k-l)-1)] + (n+l-2k)(2k-l)^2. \quad (6.10)$$

Finalmente, substituindo na equação (6.5) as expressões obtidas para m em termos de n e k , em (3.1), e para a soma dos quadrados dos graus dos vértices, em (6.10), chegamos à expressão correspondente ao número ϵ_2 de 2-emparelhamentos em $K_l + S_{k-l}^{n-l}$ em função de n , k e l apresentada em (6.8). Não obtemos uma fórmula mais simples para ϵ_2 ao expandir o quadrado e efetuar as operações algébricas indicadas; em virtude disso, optamos por manter, em (6.8), sua estrutura no formato

$$\epsilon_2(K_l + S_{k-l}^{n-l}; n, k, l) = \frac{1}{2} (m^2 + m - \sum_{i=1}^n d_i^2).$$

□

Corolário 6.2.3 (Número de 2-emparelhamentos em E_k^n). Para um grafo k -árvore estrela em n vértices, E_k^n , com $n > k + 1$, o número de 2-emparelhamentos, ϵ_2 , em função de n e k , é dado por

$$\epsilon_2(E_k^n) = \frac{k}{2} [(k-1)n^2 - (k^2 + 2k - 3)n + \frac{1}{4}(k^3 + 6k^2 - k - 6)]. \quad (6.11)$$

Demonstração. Seja E_k^n uma k -árvore estrela em n vértices, com $n > k + 1$. Para calcularmos o número de 2-emparelhamentos em E_k^n , em função de n e k , usando a equação (6.5), precisamos determinar apenas a soma dos quadrados dos graus dos seus vértices em função das mesmas variáveis, pois o número de arestas em qualquer k -árvore já foi computado. Por definição, o grafo E_k^n possui exatamente $(n-k)$ vértices simpliciais, *i. e.*, de grau k . Os demais k vértices são universais, pois formam a k -clique de ligação de todos os $(n-k)$ vértices do grafo. Logo, a soma dos quadrados dos graus dos vértices de E_k^n , em função de n e k , é dada pela expressão

$$\sum_{i=1}^n d_i^2 = (n-k)k^2 + k(n-1)^2. \quad (6.12)$$

Substituindo as expressões para m em termos de n e k calculada em (3.1) e para a soma dos quadrados dos vértices em (6.12) na equação (6.5), expandindo o quadrado e desenvolvendo as contas, chegamos à expressão para o número de 2-emparelhamentos em E_k^n em função de n e k apresentada em (6.6):

$$\begin{aligned} \epsilon_2(E_k^n) &= \frac{1}{2} \left\{ \left[k \left(n - \frac{1}{2} \right) - \frac{k^2}{2} \right]^2 + \left[k \left(n - \frac{1}{2} \right) - \frac{k^2}{2} \right] - [(n-k)k^2 + k(n-1)^2] \right\} \\ &= \frac{k}{2} [(k-1)n^2 - (k^2 + 2k - 3)n + \frac{1}{4}(k^3 + 6k^2 - k - 6)]. \end{aligned}$$

□

De posse dos Corolários 6.2.1, 6.2.2 e 6.2.3, e conhecendo o número de 4-ciclos contidos em grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela, determinamos, na próxima seção, um dos coeficientes dos respectivos polinômios característicos por meio da Proposição 6.1.1 e, mais especificamente, da equação (6.4).

6.3 O coeficiente característico da potência λ^{n-4}

Da Proposição 6.1.1, sabemos que o valor do coeficiente c_4 da potência λ^{n-4} do polinômio característico de um grafo pode ser calculado por meio da equação (6.4): $c_4 = n_2 - 2n_4$. O número n_2 de pares de arestas disjuntas em um grafo é equivalente, pelo Teorema 6.2.1, ao número ϵ_2 de 2-emparelhamentos no grafo, o que nos permite exprimir c_4 pela relação

$$c_4 = \epsilon_2 - 2n_4. \quad (6.13)$$

Os três Corolários a seguir utilizam a equação (6.13) e resultados estabelecidos ao longo do texto para expressar o coeficiente c_4 do polinômio característico de grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela em n vértices em função das variáveis pertinentes a cada uma dessas três subfamílias.

Todos os polinômios característicos apresentados durante os exemplos desta seção foram calculados pelo MAXIMA [33]. Observamos que esse *software* calcula o polinômio característico de uma matriz A como $p(A; \lambda) = \det(A - \lambda I_n)$ e não como $p(A; \lambda) = \det(\lambda I_n - A)$. Naturalmente as duas formas fornecem polinômios com os mesmos autovalores e respectivas multiplicidades, porém o primeiro não é mônico quando a matriz quadrada A tem ordem ímpar. Assim, quando o grafo considerado possui um número ímpar de vértices, o polinômio característico fornecido pelo *Maxima* foi multiplicado por -1 de modo a torná-lo mônico, tal como em (6.2), satisfazendo a hipótese da Proposição 6.1.1.

Corolário 6.3.1 (Coeficiente c_4 em $p(S_k^n; \lambda)$). Para um grafo k -serpentina em n vértices, S_k^n , com $n > 2k$, o coeficiente c_4 da potência λ^{n-4} em $p(S_k^n; \lambda)$, em função de n e k , é dado pela expressão

$$c_4(S_k^n) = \frac{(kn)^2}{2} - \frac{kn}{6}(11k^2 - 3k + 7) + \frac{k}{24}(31k^3 + 14k^2 + 5k + 22). \quad (6.14)$$

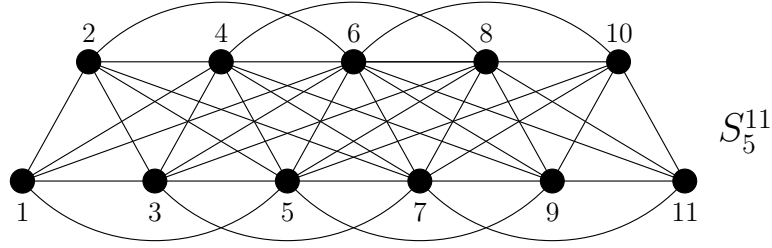


Figura 6.2: S_5^{11} , a 5-serpentina com 11 vértices.

Demonstração. Para um grafo k -serpentina em n vértices, S_k^n , com $n > 2k$, o número ϵ_2 de 2-emparelhamentos, em função de n e k , é calculado pela equação (6.6) do Corolário 6.2.1. Já o número n_4 de 4-ciclos contidos em S_k^n , em função de n e k , é encontrado por meio da equação (5.11) do Teorema 5.1.1. Substituindo essas expressões para ϵ_2 e n_4 na equação (6.13),

$$c_4(S_k^n) = \epsilon_2(S_k^n) - 2n_4(S_k^n),$$

e desenvolvendo as contas, chegamos à representação para o coeficiente c_4 em $p(S_k^n; \lambda)$ em função de n e k apresentada em (6.14). \square

Para ilustrar o Corolário 6.3.1, consideremos uma 2-serpentina em n vértices, S_2^n . O coeficiente c_4 da potência λ^{n-4} do polinômio característico de S_2^n , em função de n , pode ser calculado fazendo $k = 2$ na equação (6.14):

$$\begin{aligned} c_4(S_2^n) &= 2n^2 + \frac{n}{3}(-44 + 6 - 7) + \frac{1}{12}[31(8) + 14(4) + 5(2) + 22] \\ &= 2n^2 - 15n + 28. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Como outro exemplo, consideremos a 5-serpentina com onze vértices, S_5^{11} , ilustrada na Figura 6.2. O polinômio característico desse grafo é

$$\begin{aligned} p(S_5^{11}; \lambda) &= \lambda^{11} - 40\lambda^9 - 140\lambda^8 - 45\lambda^7 + 630\lambda^6 + 1.491\lambda^5 + \\ &\quad + 1.564\lambda^4 + 867\lambda^3 + 256\lambda^2 + 37\lambda + 2. \end{aligned}$$

O coeficiente da potência $\lambda^{(11)-4} = \lambda^7$ é $c_4 = -45$, que é o valor exato fornecido pela equação (6.14) com $n = 11$ e $k = 5$:

$$\begin{aligned} c_4(S_5^{11}) &= \frac{(55)^2}{2} - \frac{55}{6}[11(25) - 15 + 7] + \frac{5}{24}[31(125) + 14(25) + 5(5) + 22] \\ &= \frac{3.025}{2} - \frac{55}{6}(267) + \frac{5}{24}(4.272) \\ &= -\frac{1.080}{24} \\ &= -45. \end{aligned}$$

Corolário 6.3.2 (Coeficiente c_4 em $p(K_l + S_{k-l}^{n-l}; \lambda)$). Para um grafo k -leque em n vértices determinado pela junção $K_l + S_{k-l}^{n-l}$, com $1 \leq l \leq k-1$ e $n > 2k+1$, o coeficiente c_4 da potência λ^{n-4} em $p(K_l + S_{k-l}^{n-l}; \lambda)$, em função de n , k e l , é dado pela expressão

$$\begin{aligned} c_4(K_l + S_{k-l}^{n-l}; n, k, l) &= \frac{k}{24} (31k^3 + 14k^2 + 5k + 22) + \frac{n^2}{2} (k^2 - l^2) - \\ &\quad - \frac{n}{6} (4l^3 - 6l^2(2k+1) - l + 11k^3 - 3k^2 + 7k) - \\ &\quad - \frac{l^4}{4} + \frac{2l^3}{3} (2k+1) - \frac{l^2}{4} (8k^2 + 8k + 1) - \frac{l}{6} (2k+1). \end{aligned} \quad (6.16)$$

Demonstração. Considere um grafo k -leque em n vértices determinado pela junção $K_l + S_{k-l}^{n-l}$, com $1 \leq l \leq k-1$ e $n > 2k+1$. O número ϵ_2 de 2-emparelhamentos em $K_l + S_{k-l}^{n-l}$, em função das variáveis n , k e l , é calculado pela equação (6.8) do Corolário 6.2.2, enquanto o número n_4 de 4-ciclos contidos no grafo, em função dessas três variáveis, é dado pela equação (5.32) do Teorema 5.2.1. Substituindo as expressões para ϵ_2 e n_4 mencionadas na equação (6.13),

$$c_4(K_l + S_{k-l}^{n-l}; n, k, l) = \epsilon_2(K_l + S_{k-l}^{n-l}; n, k, l) - 2n_4(K_l + S_{k-l}^{n-l}; n, k, l), \quad (6.17)$$

e desenvolvendo as contas, chegamos à representação apresentada em (6.16) para o coeficiente c_4 em $p(K_l + S_{k-l}^{n-l}; \lambda)$ em função de n , k e l . \square

Para ilustrar o Corolário 6.3.2, consideremos dois exemplos de grafos k -leque. O primeiro é o 5-leque em onze vértices determinado pela junção $K_3 + S_2^8$ (Figura 5.4), cujas variáveis associadas são $n = 11$, $k = 5$ e $l = 3$. Já calculamos o número n_4 de 4-ciclos por meio do Teorema 5.2.1 na equação (5.39), chegando a $n_4(K_3 + S_2^8; 11, 5, 3) = 287$ 4-ciclos. Por outro lado, o número ϵ_2 de 2-emparelhamentos em $K_3 + S_2^8$, pela equação (6.8), é igual a

$$\begin{aligned} \epsilon_2(K_3 + S_2^8; 11, 5, 3) &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{25}{4} (16)^2 + \frac{5}{2} (16) - [3(100) + \frac{2}{3} [30(6) + 1(3)] + 4(49)] \right\} \\ &= \frac{1}{2} \{1.640 - 618\} \\ &= 511. \end{aligned}$$

Como a equação (6.16) é equivalente à equação (6.17), segue que

$$\begin{aligned} c_4(K_3 + S_2^8; 11, 5, 3) &= \epsilon_2(K_3 + S_2^8; 11, 5, 3) - 2n_4(K_3 + S_2^8; 11, 5, 3) \\ &= 511 - 2(287) \\ &= -63, \end{aligned}$$

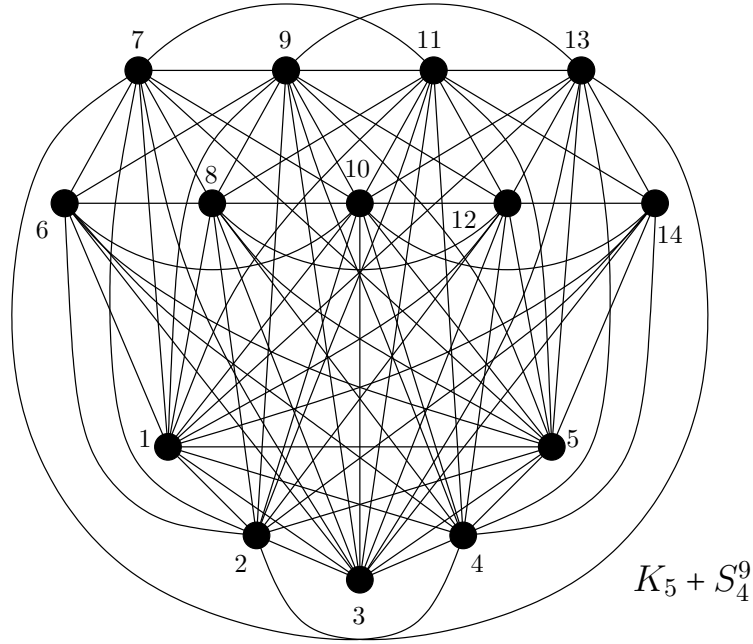


Figura 6.3: $K_5 + S_4^9$, um 9-leque com 14 vértices.

em acordo com o coeficiente c_4 da potência $\lambda^{11-4} = \lambda^7$ do polinômio característico de $K_3 + S_2^8$:

$$p(K_3 + S_2^8; \lambda) = \lambda^{11} - 40\lambda^9 - 140\lambda^8 - 63\lambda^7 + 490\lambda^6 + 1.025\lambda^5 + 696\lambda^4 - 106\lambda^3 - 382\lambda^2 - 177\lambda - 24.$$

Como segundo exemplo, tomemos o 9-leque com quatorze vértices determinado pela junção $K_5 + S_4^9$, representado na Figura 6.3. As variáveis pertinentes a essa junção são $n = 14$, $k = 9$ e $l = 5$. Substituindo-as na equação (6.16), chegamos a

$$c_4(K_5 + S_4^9; 14, 9, 5) = 5.488 - \frac{14}{6}(5.484) - \frac{625}{4} + \frac{4.750}{3} - \frac{18.025}{4} - \frac{95}{6} + \frac{214.200}{24} = -1.478,$$

que é exatamente o valor do coeficiente c_4 da potência $\lambda^{14-4} = \lambda^{10}$ em $p(K_5 + S_4^9; \lambda)$:

$$p(K_5 + S_4^9; \lambda) = \lambda^{14} - 81\lambda^{12} - 528\lambda^{11} - 1.478\lambda^{10} - 1.660\lambda^9 + 1.549\lambda^8 + 8.356\lambda^7 + 13.964\lambda^6 + 13.536\lambda^5 + 8.324\lambda^4 + 3.244\lambda^3 + 757\lambda^2 + 92\lambda + 4.$$

Corolário 6.3.3 (Coeficiente c_4 em $p(E_k^n; \lambda)$). Para um grafo k -árvore estrela em n vértices, E_k^n , com $n > k + 1$, o coeficiente c_4 da potência λ^{n-4} em $p(E_k^n; \lambda)$, em função de n e k , é dado pela expressão

$$c_4(E_k^n) = \frac{k}{2} \left[\frac{3}{4}(k^3 - 2k^2 - k + 2) - (k^2 - 3k + 2)n \right]. \quad (6.18)$$

Demonstração. Para um grafo k -árvore estrela em n vértices, E_k^n , com $n > k + 1$, o número ϵ_2 de 2-emparelhamentos, em função de n e k , é calculado pela equação (6.11) do Corolário 6.2.3. Já o número n_4 de 4-ciclos contidos em E_k^n , em função de n e k , é encontrado por meio da equação (5.41) do Teorema 5.3.1. Substituindo as expressões para ϵ_2 e n_4 mencionadas na equação (6.13),

$$c_4(E_k^n) = \epsilon_2(E_k^n) - 2n_4(E_k^n), \quad (6.19)$$

e desenvolvendo as contas, chegamos à representação para o coeficiente c_4 em $p(E_k^n; \lambda)$ em função de n e k apresentada em (6.18). \square

Como um primeiro exemplo ao Corolário 6.3.3, vamos retomar a 6-árvore estrela com nove vértices, E_6^9 (Figura 5.8). Já calculamos o número n_4 de 4-ciclos por meio do Teorema 5.3.1 na equação (5.42), chegando a $n_4(E_6^9) = 270$ 4-ciclos. Por outro lado, o número ϵ_2 de 2-emparelhamentos em E_6^9 , pela equação (6.11), é igual a

$$\epsilon_2(E_6^9) = \frac{6}{2} [(5)(81) - (36 + 2(6) - 3)9 + \frac{1}{4}(216 + 6(36) - 6 - 6)] = 315. \quad (6.20)$$

Como a equação (6.18) é equivalente à equação (6.19), segue que

$$c_4(E_6^9) = \epsilon_2(E_6^9) - 2n_4(E_6^9) = 315 - 2(270) = -225,$$

em acordo com o coeficiente c_4 da potência $\lambda^{9-4} = \lambda^5$ do polinômio característico de E_6^9 :

$$p(E_6^9; \lambda) = \lambda^9 - 33\lambda^7 - 130\lambda^6 - 225\lambda^5 - 204\lambda^4 - 95\lambda^3 - 18\lambda^2.$$

Com base no Corolário 6.3.3, fica possível estabelecermos o coeficiente c_4 da potência λ^{n-4} do polinômio característico de uma 2-árvore estrela, E_2^n , em função do seu número de vértices n . Substituindo $k = 2$ na equação (6.18), verificamos que

$$c_4(E_2^n) = \frac{2}{2} \left[\frac{3}{4}(8 - 8 - 2 + 2) - (4 - 6 + 2)n \right] = 0, \quad (6.21)$$

ou seja, o coeficiente c_4 em $p(E_2^n; \lambda)$ é nulo seja qual for o número n de vértices em uma 2-árvore estrela. Para essa subfamília de grafos, podemos ir além, caracterizando todos os coeficientes característicos do grafo.

Proposição 6.3.1 (Polinômio característico e espectro de E_2^n). Para um grafo 2-árvore estrela em n vértices, E_2^n , com $n > 3$, o polinômio característico, em função de n , se escreve como

$$p(E_2^n; \lambda, n) = \lambda^n - (2n - 3)\lambda^{n-2} - (2n - 4)\lambda^{n-3}. \quad (6.22)$$

Além disso, o espectro de E_2^n (com as respectivas multiplicidades dos autovalores), em função do número de vértices n , é igual a

$$\text{Spec}^*(E_2^n; \lambda, n) = \left(\begin{array}{cccc} \frac{1+\sqrt{8n-15}}{2}, & 0, & -1, & \frac{1-\sqrt{8n-15}}{2} \\ 1, & n-3, & 1, & 1 \end{array} \right). \quad (6.23)$$

Demonstração. A Proposição 6.1.1 estabelece que os coeficientes do polinômio característico de um grafo G podem ser calculados por meio de contagem em subgrafos elementares, mais especificamente, pela equação (6.3). Devido a esse resultado e à natureza dos subgrafos elementares, os primeiros coeficientes característicos de um grafo G são facilmente computados. Como já mencionado, o coeficiente $-c_1$ da potência λ^{n-1} em $p(G; \lambda)$ coincide com o traço de $A(G)$, o coeficiente c_2 da potência λ^{n-2} corresponde a $-m$, onde m é o número de arestas de G , e o coeficiente $-c_3$ da potência λ^{n-3} é igual ao dobro do número de 3-ciclos (triângulos) em G . Assim, para o grafo 2-árvore estrela em n vértices, temos $c_1 = 0$; $c_2 = -(2n-3)$, pela equação (3.1), com $k = 2$; $c_3 = -2(n-2) = -(2n-4)$, pois o número de triângulos em E_2^n é $1 + 1(n-3) = n-2$, uma vez que partimos de um triângulo, o 3-ciclo K_3 , e inserimos um novo triângulo com a adição de cada um dos vértices de rótulo 4 a n . Obtemos o coeficiente c_4 fazendo $k = 2$ na equação (6.22), o que resulta em $c_4 = 0$. Além dele, todos os demais coeficientes característicos c_i , com $i \geq 5$, também se anulam. Isso se dá em virtude do número de autovalores nulos da matriz de adjacência de E_2^n e da expressão para o coeficiente c_i em termos da soma de produtos de i autovalores. De fato, a matriz de adjacência de E_2^n é da forma

$$A(E_2^n) = \left[\begin{array}{c|ccc} A(K_2) & \mathbb{J}_{2 \times (n-2)} \\ \hline \mathbb{J}_{(n-2) \times 2} & 0_{n-2} \end{array} \right]. \quad (6.24)$$

Aplicando o método de escalonamento à matriz $A(E_2^n)$, chegamos a uma matriz, similar a $A(E_2^n)$, com três linhas linearmente independentes (e as demais $n-3$ linhas nulas):

$$A(E_2^n) \sim \left[\begin{array}{c|cccc} 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{array} \right], \quad (6.25)$$

o que nos permite concluir que o posto da matriz $A(E_2^n)$ é igual a três. Para matrizes simétricas $n \times n$, a dimensão do núcleo coincide com a quantidade de autovalores nulos

da matriz. Em vista disso e do Teorema do Núcleo e da Imagem, segue que a matriz $A(E_2^n)$ possui $n - 3$ autovalores iguais a zero e apenas três autovalores não nulos, seja qual for o valor de n . Por outro lado, é sabido que o coeficiente c_i do polinômio característico de uma matriz $n \times n$ pode ser expresso por uma soma (de C_i^n parcelas) de todos os produtos possíveis de i dentre os n autovalores da matriz. Isso justifica o fato de que, para a matriz $A(E_2^n)$ em questão, $c_i(E_2^n; n, 2) = 0$ para $i = 5, 6, \dots, n$ (e mesmo para $i = 4$), uma vez que, quando $i \geq 4$, qualquer produto de i dentre os n autovalores irá conter, obrigatoriamente, ao menos um fator (autovalor) nulo, já que só três dos n autovalores são diferentes de zero. Logo, os únicos coeficientes característicos não nulos são os três apresentados em (6.22), ficando determinado, portanto, o polinômio característico de E_2^n .

Para calcular os n autovalores de E_2^n , vamos reescrever a equação (6.22) como

$$p(E_2^n; \lambda, n) = \lambda^{n-3} \underbrace{[\lambda^3 - (2n-3)\lambda - (2n-4)]}_{q(\lambda, n)}. \quad (6.26)$$

Pela equação (6.26), fica evidente que zero é um autovalor de E_2^n com multiplicidade algébrica igual a $n - 3$, como já argumentado. Por inspeção, vemos que -1 é raiz de $q(\lambda, n)$ e, por conseguinte, de $p(E_2^n; \lambda, n)$. De fato, a divisão do polinômio $q(\lambda, n)$ por $(\lambda - (-1))$ é exata e resulta no polinômio $\lambda^2 - \lambda - (2n - 4)$ como quociente. O polinômio $p(E_2^n; \lambda, n)$ em (6.26) pode ser fatorado, portanto, como

$$p(E_2^n; \lambda, n) = \lambda^{n-3} \underbrace{(\lambda - (-1))(\lambda^2 - \lambda - (2n - 4))}_{q(\lambda, n)}. \quad (6.27)$$

Aplicando Bhaskara ao polinômio quadrático mais à direita em (6.27), chegamos a forma totalmente fatorada de $p(E_2^n; \lambda)$:

$$p(E_2^n; \lambda, n) = (\lambda - 0)^{n-3} (\lambda - (-1)) \left(\lambda - \left(\frac{1 + \sqrt{8n-15}}{2} \right) \right) \left(\lambda - \left(\frac{1 - \sqrt{8n-15}}{2} \right) \right). \quad (6.28)$$

Assim, concluímos que os autovalores de E_2^n são: $\lambda_1 = \frac{1 + \sqrt{8n-15}}{2}$, com multiplicidade um; $\lambda_2 = 0$, com multiplicidade $n - 3$; $\lambda_3 = -1$, com multiplicidade um; e $\lambda_4 = \frac{1 - \sqrt{8n-15}}{2}$, com multiplicidade um. \square

Como exemplo, consideremos o grafo 2-árvore estrela com quatorze vértices, E_2^{14} , representado na Figura 6.4, cuja matriz de adjacência, de ordem 14×14 , é

$$A(E_2^{14}) = \left[\begin{array}{c|c} A(K_2) & J_{2 \times 12} \\ \hline J_{12 \times 2} & 0_{12} \end{array} \right].$$

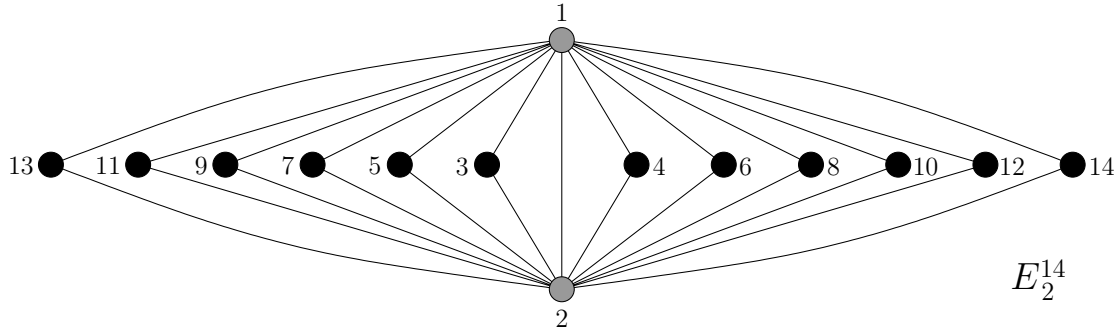


Figura 6.4: E_2^{14} , a 2-árvore estrela com 14 vértices.

O polinômio característico de E_2^{14} é calculado substituindo $n = 14$ na equação (6.22):

$$p(E_2^{14}; \lambda, 14) = \lambda^{14} - 25\lambda^{12} - 24\lambda^{11}.$$

Já o espectro de E_2^{14} (com as respectivas multiplicidades dos autovalores) é encontrado fazendo $n = 14$ na equação (6.23):

$$\text{Spec}^*(E_2^{14}; \lambda, 14) = \begin{pmatrix} \frac{1+\sqrt{97}}{2}, & 0, & -1, & \frac{1-\sqrt{97}}{2} \\ 1, & 11, & 1, & 1 \end{pmatrix},$$

ou seja, os autovalores de E_2^{14} são $\lambda_1 = \frac{1+\sqrt{97}}{2}$, com multiplicidade um; $\lambda_2 = 0$, com multiplicidade onze; $\lambda_3 = -1$, com multiplicidade um; e $\lambda_4 = \frac{1-\sqrt{97}}{2}$, com multiplicidade um.

Com considerações semelhantes, estabelecemos o polinômio característico e o espectro de um grafo 3-árvore estrela em n vértices.

Proposição 6.3.2 (Polinômio característico e espectro de E_3^n). Para um grafo 3-árvore estrela em n vértices, E_3^n , com $n > 4$, o polinômio característico, em função de n , se escreve como

$$p(E_3^n; \lambda, n) = \lambda^n - (3n - 6)\lambda^{n-2} - (6n - 16)\lambda^{n-3} - (3n - 9)\lambda^{n-4}. \quad (6.29)$$

Além disso, o espectro de E_3^n (com as respectivas multiplicidades dos autovalores), em função do número de vértices n , é igual a

$$\text{Spec}^*(E_3^n; \lambda, n) = \begin{pmatrix} 1 + \sqrt{3n - 8}, & 0, & -1, & 1 - \sqrt{3n - 8} \\ 1, & n - 4, & 2, & 1 \end{pmatrix}. \quad (6.30)$$

Demonstração. A Proposição 6.1.1 estabelece que os coeficientes do polinômio característico de um grafo G podem ser calculados por meio de contagem em subgrafos elementares, mais especificamente, pela equação (6.3). Devido a esse resultado e à natureza dos subgrafos elementares, os primeiros coeficientes característicos de um grafo G são facilmente computados: o coeficiente $-c_1$ da potência λ^{n-1} em $p(G; \lambda)$ coincide com o traço de $A(G)$, o coeficiente c_2 da potência λ^{n-2} corresponde a $-m$, onde m é o número de arestas de G , e o coeficiente $-c_3$ da potência λ^{n-3} é igual ao dobro do número de 3-ciclos (triângulos) em G . Assim, para o grafo 3-árvore estrela em n vértices, temos $c_1 = 0$; $c_2 = -(3n - 6)$, pela equação (3.1), com $k = 3$; $c_3 = -2(3n - 8) = -(6n - 16)$, pois o número de triângulos em E_3^n é $4 + 3(n - 4) = 3n - 8$, uma vez que partimos de um grafo completo, K_4 , que contém quatro triângulos, e inserimos três novos triângulos com a adição de cada um dos vértices de rótulo 5 a n . Obtemos o coeficiente c_4 fazendo $k = 3$ na equação (6.22), o que resulta em $c_4 = -(3n - 9)$. Os demais coeficientes característicos c_i , com $i \geq 5$, se anulam. Isso se dá em virtude do número de autovalores nulos da matriz de adjacência de E_3^n e da expressão para o coeficiente c_i em termos da soma de produtos de i autovalores. De fato, a matriz de adjacência de E_3^n é da forma

$$A(E_3^n) = \left[\begin{array}{c|ccc} A(K_3) & \mathbb{J}_{3 \times (n-3)} \\ \hline \mathbb{J}_{(n-3) \times 3} & 0_{n-3} \end{array} \right].$$

Aplicando o método de escalonamento à matriz $A(E_3^n)$, chegamos a uma matriz, similar a $A(E_3^n)$, com quatro linhas linearmente independentes (e as demais $n - 4$ linhas nulas):

$$A(E_3^n) \sim \left[\begin{array}{ccc|cccc} 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{array} \right], \quad (6.31)$$

o que nos permite concluir que o posto da matriz $A(E_3^n)$ é igual a quatro. Para matrizes simétricas $n \times n$, a dimensão do núcleo coincide com a quantidade de autovalores nulos da matriz. Em vista disso e do Teorema do Núcleo e da Imagem, segue que a matriz $A(E_3^n)$ possui $n - 4$ autovalores iguais a zero e apenas quatro autovalores não nulos, seja qual for o valor de n . Por outro lado, é sabido que o

coeficiente c_i do polinômio característico de uma matriz $n \times n$ pode ser expresso por uma soma (de C_i^n parcelas) de todos os produtos possíveis de i dentre os n autovalores da matriz. Isso justifica o fato de que, para a matriz $A(E_3^n)$ em questão, $c_i(E_3^n; n, 3) = 0$ para $i = 5, 6, \dots, n$, uma vez que, quando $i \geq 5$, qualquer produto de i dentre os n autovalores irá conter, obrigatoriamente, ao menos um fator (autovalor) nulo, já que só quatro dos n autovalores são diferentes de zero. Logo, os únicos coeficientes característicos não nulos são os quatro apresentados em (6.22), ficando determinado, dessa forma, o polinômio característico de E_3^n .

Para encontrar os n autovalores de E_3^n , vamos reescrever a equação (6.29) como

$$p(E_3^n; \lambda, n) = \lambda^{n-4} \underbrace{[\lambda^4 - (3n-6)\lambda^2 - (6n-16)\lambda - (3n-9)]}_{q(\lambda, n)}. \quad (6.32)$$

Pela equação (6.32), fica evidente que zero é um autovalor de E_3^n com multiplicidade algébrica igual a $n-4$, como já argumentado. Por inspeção, vemos que -1 é raiz de $q(\lambda, n)$; na verdade, é uma raiz de multiplicidade dois de $q(\lambda, n)$ e, por conseguinte, de $p(E_3^n; \lambda, n)$. De fato, a divisão do polinômio $q(\lambda, n)$ por $(\lambda - (-1))^2 = \lambda^2 + 2\lambda + 1$ é exata e resulta no polinômio $\lambda^2 - 2\lambda - (3n-9)$ como quociente. O polinômio $p(E_3^n; \lambda, n)$ em (6.32) pode ser fatorado, portanto, como

$$p(E_3^n; \lambda, n) = \lambda^{n-4} \underbrace{(\lambda - (-1))^2 (\lambda^2 - 2\lambda - (3n-9))}_{q(\lambda, n)}. \quad (6.33)$$

Aplicando Bhaskara ao polinômio quadrático mais à direita em (6.33), chegamos a forma totalmente fatorada de $p(E_3^n; \lambda)$:

$$p(E_3^n; \lambda, n) = (\lambda - 0)^{n-4} (\lambda - (-1))^2 (\lambda - (1 + \sqrt{3n-8})) (\lambda - (1 - \sqrt{3n-8})). \quad (6.34)$$

Assim, concluímos que os autovalores de E_3^n são: $\lambda_1 = 1 + \sqrt{3n-8}$, com multiplicidade um; $\lambda_2 = 0$, com multiplicidade $n-4$; $\lambda_3 = -1$, com multiplicidade dois; e $\lambda_4 = 1 - \sqrt{3n-8}$, com multiplicidade um. \square

Para ilustrar a Proposição 6.3.2, consideremos a 3-árvore estrela com dezoito vértices representada na Figura 6.5. Sua matriz de adjacência, de ordem 18×18 , é da forma

$$A(E_3^{18}) = \left[\begin{array}{c|c} A(K_3) & \mathbb{J}_{3 \times 15} \\ \hline \mathbb{J}_{15 \times 3} & 0_{15} \end{array} \right].$$

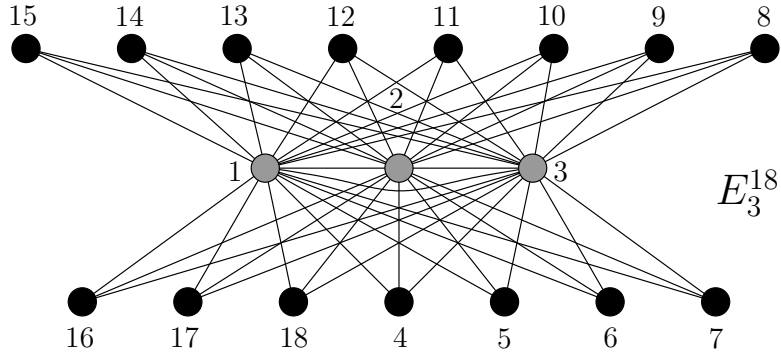


Figura 6.5: E_3^{18} , a 3-árvore estrela com 18 vértices.

Fazendo $n = 6$ na equação (6.29), obtemos o polinômio característico do grafo:

$$\begin{aligned} p(E_3^{18}; \lambda, 18) &= \lambda^{18} - (54 - 6)\lambda^{16} - (108 - 16)\lambda^{15} - (54 - 9)\lambda^{14} \\ &= \lambda^{18} - 48\lambda^{16} - 92\lambda^{15} - 45\lambda^{14}. \end{aligned} \quad (6.35)$$

Os autovalores de E_3^{18} , com as respectivas multiplicidades, são encontrados substituindo $n = 6$ em (6.30). Chegamos a

$$\text{Spec}^*(E_3^{18}; \lambda, 18) = \begin{pmatrix} 1 + \sqrt{46}, & 0, & -1, & 1 - \sqrt{46} \\ 1, & 14, & 2, & 1 \end{pmatrix}, \quad (6.36)$$

ou seja, os autovalores de E_3^{18} são $\lambda_1 = 1 + \sqrt{46}$, com multiplicidade um; $\lambda_2 = 0$, com multiplicidade quatorze; $\lambda_3 = -1$, com multiplicidade dois; e $\lambda_4 = 1 - \sqrt{46}$, com multiplicidade um. Observamos que o *Maxima* demorou mais de cinco minutos para processar cada um dos resultados em (6.35) e (6.36), envolvendo matrizes de ordem 18×18 e cálculo de raízes de um polinômio de grau dezoito. Por outro lado, para o *Maxima* ou outro *software* equivalente, avaliar uma função uma variável, como as em (6.29) e (6.30), é uma operação imediata seja qual for o valor de n .

Vimos nessa seção que saber contar subgrafos elementares do tipo 4-ciclo permite estabelecer uma expressão para o coeficiente c_4 da potência λ^{n-4} do polinômio característico de grafos k -serpentina, k -leque e k -árvore estrela em n vértices em função das variáveis pertinentes a esses grafos. Em vista disso, ficam caracterizados, para essas subfamílias de grafos cordais, os cinco primeiros coeficientes dos respectivos polinômios característicos. Com relação à subfamília das k -árvores estrela em n vértices, fomos além: conseguimos determinar todos os coeficientes característicos, isto é, o polinômio característico, nos casos em que $k = 2$ e $k = 3$, para qualquer

número n de vértices. Ressaltamos que uma k -árvore estrela em n vértices é equivalente à junção entre o grafo completo com k vértices, K_k , e $n - k$ cópias do vértice isolado, K_1 . Sob essa ótica, o polinômio característico de uma k -árvore estrela pode ser encontrado a partir dos polinômios característicos dos grafos que o compõe, como desenvolvido em [15].

Capítulo 7

Considerações finais

Em problemas de Teoria de Grafos, a contagem de ciclos é uma questão recorrente. Os algoritmos existentes para determinar o número de ciclos de um dado comprimento dependem do número de arestas e/ou de vértices do grafo considerado. Para valores grandes de m e/ou n , dificuldades podem surgir durante o processo de execução desses algoritmos. Conseguimos, embora para classes bem particulares de grafos, estabelecer fórmulas fechadas para o número exato de 4-ciclos neles contidos.

No contexto de Teoria Espectral de Grafos, pudemos aplicar os resultados obtidos na determinação do quinto coeficiente do polinômio característico de grafos em cada uma das três classes estudadas.

Como sequência a essa pesquisa, apontamos os seguintes tópicos:

- Adequação/modificação da abordagem de listas de rótulos para contagem de ciclos de comprimentos distintos em k -serpentinhas, k -leques e k -estrelas.
- Aplicação da metodologia desenvolvida para contagem de ciclos a outros tipos de k -árvores ou grafos bem estruturados a fim de encontrar fórmulas fechadas para o número de seus 4-ciclos.
- Estudo dos coeficientes Laplacianos de k -serpentinhas, k -leques e k -estrelas por meio da relação existente entre esses coeficientes e as subflorestas contidas nesses grafos.

Referências Bibliográficas

- [1] ROSE, D. J., “On simple characterizations of k -trees”, *Discrete Math.*, v. 7, pp. 317–322, 1974.
- [2] FRÖBERG, R., “A characterization of k -trees”, *Discrete Math.*, v. 104, pp. 307–309, 1992.
- [3] DE MORAES, P. E., DE ABREU, N. M. M., JURKIEWICZ, S., “The fifth and sixth coefficients of the characteristic polynomial of a graph”. In: *The Ninth Quadrennial International Conference on Graph Theory, Combinatorics, Algorithms and Applications*, v. 11, *Electron. Notes Discrete Math.*, Elsevier, pp. 201–208, 2002.
- [4] BONDY, J. A., SIMONOVITS, M., “Cycles of even length in graphs”, *J. Combinatorial Theory Ser. B*, v. 16, pp. 97–105, 1974.
- [5] MONIEN, B., “The complexity of determining a shortest cycle of even length”, *Computing*, v. 31, n. 4, pp. 355–369, 1983.
- [6] CHIBA, N., NISHIZEKI, T., “Arboricity and subgraph listing algorithms”, *SIAM J. Comput.*, v. 14, n. 1, pp. 210–223, 1985.
- [7] RICHARDS, D., “Finding short cycles in planar graphs using separators”, *J. Algorithms*, v. 7, n. 3, pp. 382–394, 1986.
- [8] ALON, N., YUSTER, R., ZWICK, U., “Finding and counting given length cycles”, *Algorithmica*, v. 17, n. 3, pp. 209–223, 1997.
- [9] SCHANK, T., WAGNER, D., “Finding, Counting and Listing All Triangles in Large Graphs, an Experimental Study”. In: *Experimental and Efficient*

Algorithms, v. 3503, *Lect. Notes Comput. Sci.*, Springer-Verlag, pp. 606–609, 2005.

- [10] BUCHIN, K., KNAUER, C., KRIEGEL, K., ET AL., “On the number of cycles in planar graphs”. In: *Computing and combinatorics*, v. 4598, *Lecture Notes in Comput. Sci.*, Springer-Verlag, pp. 97–107, 2007.
- [11] PRABHU, G. M., DEO, N., “On the power of a perturbation for testing nonisomorphism of graphs”, *BIT*, v. 24, n. 3, pp. 302–307, 1984.
- [12] GUTMAN, I., CVETKOVIĆ, D. M., “The reconstruction problem for characteristic polynomials of graphs”, *Univ. Beograd. Publ. Elektrotehn. Fak. Ser. Mat. Fiz.*, n. 498–541, pp. 45–48, 1975.
- [13] HAGOS, E. M., “The characteristic polynomial of a graph is reconstructible from the characteristic polynomials of its vertex-deleted subgraphs and their complements”, *Electron. J. Combin.*, v. 7, Research Paper 12, 9 pp. (electronic), 2000.
- [14] SIMIĆ, S. K., STANIĆ, Z., “The polynomial reconstruction of unicyclic graphs is unique”, *Linear Multilinear Algebra*, v. 55, n. 1, pp. 35–43, 2007.
- [15] SCHWENK, A. J., “Computing the characteristic polynomial of a graph”. In: *Graphs and combinatorics (Proc. Capital Conf., George Washington Univ., Washington, D.C., 1973)*, v. 406, *Lecture Notes in Math.*, Springer-Verlag, pp. 153–172, 1974.
- [16] ZHANG, J., ZHANG, X.-D., “Laplacian coefficients of unicyclic graphs with the number of leaves and girth”, *Appl. Anal. Discrete Math.*, v. 8, n. 2, pp. 330–345, 2014.
- [17] BROUWER, A. E., HAEMERS, W. H., *Spectra of graphs. Universitext*. New York, Springer-Verlag, 2012.
- [18] CVETKOVIĆ, D. M., DOOB, M., SACHS, H., *Spectra of graphs. Pure and Applied Mathematics*, 87. New York-London, Academic Press, Inc., 1980.

- [19] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., SIMIĆ, S., *An introduction to the theory of graph spectra*. London Mathematical Society Student Texts, 75. Cambridge, Cambridge University Press, 2010.
- [20] RODRIGUES, R. M. N. D., *Grafos Periplanares Maximais: Sequência de Graus Hamiltoniana e Maxregularidade*. Tese de D. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1997.
- [21] PARLETT, B. N., *The symmetric eigenvalue problem*. Classics in Applied Mathematics, 20. Philadelphia, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), 1998.
- [22] BIGGS, N., *Algebraic graph theory*. 2 ed. Cambridge Mathematical Library. Cambridge, Cambridge University Press, 1993.
- [23] MARKENZON, L., JUSTEL, C. M., PACIORNIK, N., “Subclasses of k -trees: characterization and recognition”, *Discrete Appl. Math.*, v. 154, n. 5, pp. 818–825, 2006.
- [24] MARKENZON, L., WAGA, C. F. E. M., “Uma generalização de grafos caminho e leque: o estudo da subcoloração”. In: *Annals VI CLAIO XLIV SBPO*, SOBRAPO, pp. 4126–4132, 2012.
- [25] RODRIGUES, R. M. N. D., DE ABREU, N. M. M., MARKENZON, L., “Max-regularity and maximal outerplanar graphs”. In: *6th Twente Workshop on Graphs and Combinatorial Optimization (Enschede, 1999)*, v. 3, *Electron. Notes Discrete Math.*, Elsevier, pp. 171–175, 1999.
- [26] PROSKUROWSKI, A., “Recursive graphs, recursive labelings and shortest paths”, *SIAM J. Comput.*, v. 10, n. 2, pp. 391–397, 1981.
- [27] PEREIRA, P. R., *Código para Subfamílias de Grafos Cordais*. Tese de D. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2007.
- [28] DIESTEL, R., *Graph theory*. 2 ed. Graduate Texts in Mathematics, 173. New York, Springer-Verlag, 2000.

- [29] GROSS, J. L., YELLEN, J., *Graph theory and its applications*. 2 ed. *Discrete Mathematics and its Applications*. Boca Raton, Chapman & Hall/CRC, 2006.
- [30] GODSIL, C., ROYLE, G., *Algebraic graph theory*. *Graduate Texts in Mathematics*, 207. New York, Springer-Verlag, 2001.
- [31] LOVÁSZ, L., *Eigenvalues of Graphs*. Department of Computer Science, Eötvös Loránd Universitypp, Budapest, 2007. Disponível em: <http://www.cs.elte.hu/lovasz/eigenvals-x.pdf>. Acesso em: 23 Fev. 2015.
- [32] EATON, J. W., BATEMAN, D., HAUBERG, S., *GNU Octave version 3.0.1 manual: a high-level interactive language for numerical computations*. CreateSpace Independent Publishing Platform, 2009. Disponível em: <http://www.gnu.org/software/octave>. Acesso em: 23 Fev. 2015.
- [33] MAXIMA, *Maxima, a Computer Algebra System. Version 5.34.1*. Maxima, 2014. Disponível em: <http://maxima.sourceforge.net>. Acesso em: 24 Fev. 2015.

Apêndice A

Contagem de 4-ciclos em casos particulares de k -serpentinhas

Seguem as demonstrações para o número de 4-ciclos em grafos 3- e 5-serpentina em função do número n de vértices. As proposições foram enunciadas no Capítulo 5.

Proposição A.1 (Número de 4-ciclos em S_3^n). Para um grafo 3-serpentina com n vértices, S_3^n , com $n > 6$, o número de 4-ciclos, em função de n , é dado por

$$n_4(S_3^n) = 7n - 26. \quad (\text{A.1})$$

Demonstração. Para contabilizar os 4-ciclos contidos em um grafo da subfamília das 3-serpentinhas, representado na Figura A.1, em função do seu número n de vértices, vamos tratar separadamente dos dois tipos de 4-ciclos possíveis: aqueles cujas listas de vértices podem ser identificadas como uma *Lista 1* e aqueles cujas listas de vértices podem ser identificadas como uma *Lista 2*, estando ambas as *Listas 1* e *2* definidas em (5.1).

Consideremos inicialmente o caso mais simples em que os 4-ciclos têm listas que podem ser identificadas como uma *Lista 1*. Por hipótese, os quatro números inteiros

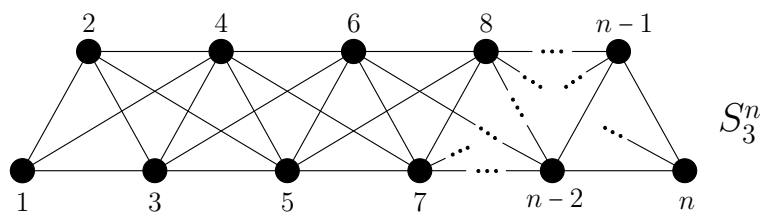


Figura A.1: S_3^n , a 3-serpentina com n vértices.

positivos e distintos entre si (a, b, c e d) que compõem a lista associada ao 4-ciclo satisfazem $a < b < c < d$, a ocupa a primeira posição e d ocupa a última posição na lista. O menor valor possível de a na lista $a _ _ d$ é 1, enquanto o maior valor possível é $n - 3$, pois nela aparecem três inteiros estritamente maiores que a e d , o maior inteiro na lista, não pode ultrapassar o valor do maior rótulo dos vértices, que é n .

Na Tabela A.1, organizamos a contagem de todos os 4-ciclos cujas listas pertencem à categoria *Lista 1*. Sua célula rs , com $r = 2, 3, \dots, n - 2$ e $s = 2, 3, \dots, n - 2$, é preenchida com o número desses 4-ciclos tendo o valor de a dado na célula $r1$ e o valor de d dado na célula $1s$; caso não haja nenhum 4-ciclo possível para algum valor de a na célula r_01 e algum valor de d na célula $1s_0$, com $r_0 \in \{2, 3, \dots, n - 2\}$ e $s_0 \in \{2, 3, \dots, n - 2\}$, a célula r_0s_0 é deixada vazia.

Tabela A.1: Contagem de 4-ciclos em S_3^n associados a listas da categoria *Lista 1* ($a _ _ d$).

$a \backslash d$	4	5	6	...	$n - 1$	n
1	2					
2		2				
3			2			
\vdots				\ddots		
$n - 4$					2	
$n - 3$						2

Vejamos a segunda linha da Tabela A.1. Se $a = 1$, d pode assumir apenas o valor 4. De fato, d não pode ser menor que 4, uma vez que existe dois inteiros estritamente entre 1 e 4 para ocupar a segunda e a terceira posição na *Lista 1*. Por outro lado, por construção do grafo S_3^n , d não pode ser maior que 4, uma vez que começamos com uma 4-clique e, ao adicionarmos o quinto vértice, o conectamos aos três vértices com maiores rótulos, ou seja, aos vértices de rótulos 2 a 4 (não existe aresta entre os vértices de rótulos 1 e 5). Portanto, quando $a = 1$ e $d = 4$, concluímos que há duas formas de se preencher as duas lacunas da lista $1 _ _ 4$ com os números 2 e 3 e essas listas estão associadas a dois 4-ciclos não isomorfos em S_3^n : 1234 e 1324.

A terceira linha da Tabela A.1 está associada ao valor de $a = 2$. Nesse caso, d pode assumir apenas o valor 5. De fato, d não pode ser menor que 5, uma vez

que existe dois inteiros estritamente entre 2 e 5 para ocupar a segunda e a terceira posição na *Lista 1*. Por outro lado, por construção do grafo S_3^n , d não pode ser maior que 5, uma vez que, ao adicionarmos o sexto vértice, o conectamos aos três últimos vértices adicionados, ou seja, aos vértices de rótulos 3 a 5 (não existe aresta entre os vértices de rótulos 2 e 6). Portanto, quando $a = 2$ e $d = 5$, concluímos que há duas formas de se preencher as duas lacunas da lista 2 — 5 com os números 3 e 4 e essas listas estão associadas a dois 4-ciclos não isomorfos em S_3^n : 2345 e 2435.

Em geral, pelo modo em que o grafo S_3^n é construído, para um dado valor de a , com $a = 1, 2, \dots, n - 3$, d deve obrigatoriamente ter valor igual a $a + 3$, o que implica na existência de exatamente dois números inteiros estritamente entre a e $d = a + 3$. Segue que a quantidade de maneiras distintas de se preencher as duas lacunas centrais de uma lista na categoria *Lista 1* com esses dois inteiros é igual ao valor do arranjo de 2 inteiros tomados dois a dois, $A_2^2 = 2$. Logo, quando a varia de 1 a $n - 3$, o número total de listas na categoria *Lista 1* correspondentes a 4-ciclos não isomorfos em S_3^n é igual a

$$(n - 3) A_2^2 = (n - 3) (2) = 2n - 6. \quad (\text{A.2})$$

Passemos a contagem dos 4-ciclos cujas respectivas listas podem ser enquadradas na categoria *Lista 2* em (5.1). Nesse caso, por hipótese, os quatro números inteiros positivos e distintos entre si $(a, b, c$ e $d)$ que compõem a lista associada ao 4-ciclo satisfazem $a < b < c < d$, a ocupa a primeira posição e d ocupa a penúltima posição na lista. O menor valor possível de a na lista $a _ d _ _$ é 1, enquanto o maior valor possível é $n - 3$, pois nela aparecem três inteiros estritamente maiores que a e d , o maior inteiro na lista, não pode ultrapassar o valor do maior rótulo dos vértices, que é n . É importante observarmos que uma lista associada a um 4-ciclo é cíclica. Assim, ambas as listas $abcd$ e $acdb$ estão na categoria *Lista 2* e correspondem a 4-ciclos *iguais*, de modo que devemos considerar apenas uma delas na contagem de 4-ciclos associados a listas na categoria *Lista 2*. Faremos a convenção de escolher sempre a primeira, $abcd$, na qual o número na segunda posição é menor que o na última posição da lista, uma vez que b é menor que c (ou seja, preenchamos a segunda posição da lista com o menor rótulo de vértice possível na ocasião).

Na Tabela A.2, organizamos a contagem de todos os 4-ciclos cujas listas pertencem à categoria *Lista 2*. Sua célula rs , com $r = 2, \dots, n - 2$ e $s = 2, \dots, n - 2$,

é preenchida com o número desses 4-ciclos tendo o valor de a dado na célula $r1$ e o valor de d dado na célula $1s$; caso não haja nenhum 4-ciclo possível para algum valor de a na célula r_01 e algum valor de d na célula $1s_0$, com $r_0 \in \{2, 3, \dots, n-2\}$ e $s_0 \in \{2, 3, \dots, n-2\}$, a célula r_0s_0 é deixada vazia.

Tabela A.2: Contagem de 4-ciclos em S_3^n associados a listas da categoria *Lista 2* ($a_d_$).

$a \backslash d$	4	5	6	7	8	...	$n-3$	$n-2$	$n-1$	n
1	1	3	1							
2		1	3	1						
3			1	3	1					
\vdots				\ddots	\ddots	\ddots				
\vdots					\ddots	\ddots	\ddots			
\vdots						\ddots	\ddots	\ddots		
$n-6$							1	3	1	
$n-5$								1	3	1
$n-4$									1	3
$n-3$										1

Vejamos a segunda linha da Tabela A.2. Se $a = 1$, d pode assumir os valores 4, 5 ou 6. De fato, d não pode ser menor que 4, uma vez que há dois inteiros estritamente entre 1 e 4 para ocupar a segunda e a última posição de uma lista na categoria *Lista 2*. Por outro lado, por construção do grafo S_3^n , d não pode ser maior que 6, pois não conseguiríamos preencher a segunda ou última posição em $a_d_$ com inteiros estritamente entre a e d e simultaneamente obter uma lista representativa de um 4-ciclo em S_3^n . Nesse grafo, cada vértice de rótulo i , com $i \geq 4$, está ligado aos vértices de rótulos $(i-3)$, $(i-2)$ e $(i-1)$. Logo, se $a = 1$ e $d = 7$, por exemplo, poderíamos colocar 4 na segunda posição da lista $1_7_$, pois o vértice de rótulo 4 está conectado aos de rótulos 1 e 7, mas não teríamos como escolher um número estritamente entre 1 e 7 e diferente de 4 para ocupar a última posição sem contradizer a condição anterior.

Quando $a = 1$ e $d = 4$, há apenas uma forma de se preencher as duas lacunas da lista $1_4_$ com os números 2 e 3 escolhendo o menor entre eles para ocupar a segunda posição; a lista que corresponde ao 4-ciclo em S_3^n é 1243. Quando $a = 1$

e $d = 5$, há três formas de preenchermos as duas lacunas da lista $1_5_$ com os números 2, 3 e 4 escolhendo o menor entre os dois selecionados para ocupar a segunda posição; as listas 1253, 1254 e 1354 estão associadas a três 4-ciclos não isomorfos em S_3^n . Por fim, se $a = 1$ e $d = 6$, há apenas uma maneira de as duas lacunas da lista $1_6_$ serem preenchidas com os números 3 e 4 escolhendo o menor entre eles para ocupar a segunda posição; a lista 1364 determina um 4-ciclo em S_3^n . É interessante observarmos que, quando $a = 1$ e $d = 6$, não podemos usar o número 2 nem o número 5 para preencher nenhuma das lacunas da lista $1_6_$ visto que, por construção de S_3^n , 3 é o menor dentre os rótulos dos vértices ligados ao vértice de rótulo 6 e 4 é o maior dentre os rótulos dos vértices ligados ao vértice de rótulo 1. Logo, não podemos colocar o 2 na lista, nem na segunda nem na última posição, pois qualquer um dos casos implicaria na existência da aresta 26, que não ocorre em S_3^n ; analogamente, não podemos colocar o 5 na lista, nem na segunda nem na última posição, pois qualquer um dos casos implicaria na existência da aresta 15, que também não ocorre em S_3^n .

Se há i números inteiros *estritamente entre* a e d e cuja respectiva diferença com a e com d seja *menor que ou igual a* 3, então a quantidade de maneiras distintas de se preencher as duas lacunas de uma lista na categoria *Lista 2* escolhendo dois dentre esses i inteiros e colocando o menor entre eles na segunda posição da lista é igual ao valor da combinação de i inteiros tomados dois a dois, C_2^i . Para $i = 2$, $C_2^2 = 1$, e para $i = 3$, $C_2^3 = 3$. Logo, o número total de listas na categoria *Lista 2* tendo $a = 1$ é

$$\left(\sum_{i=2}^3 C_2^i \right) + C_2^2 = 2(C_2^2) + C_2^3 = 2(1) + 3 = 5. \quad (\text{A.3})$$

O preenchimento da segunda e última posições na lista $a_d_$ ocorre de forma análoga à descrita nos últimos três parágrafos para $a = 2$ até $a = (n - 5)$. Para cada um desses valores de a , obtemos $2(C_2^2) + C_2^3 = 5$ listas distintas na categoria *Lista 2*. Logo, de $a = 1$ até $a = (n - 5)$, a soma do número de listas possíveis é igual a

$$(n - 5) [2(C_2^2) + C_2^3] = (n - 5)(5) = 5n - 25. \quad (\text{A.4})$$

Os casos em que $a = (n - j)$, com $j = 3, 4$, devem ser tratados com atenção, pois à medida que d se aproxima de n , diminuem a quantidade de inteiros estritamente entre a e d que satisfazem a respectiva diferença com a e com d ser menor que

ou igual a 3. Isso ocorre porque temos uma limitação para o valor máximo de d , dada pelo número n de vértices do grafo S_3^n . Vamos considerar a linha em que $a = (n-4)$ na Tabela A.2. Nesse caso, d pode assumir os valores $(n-1)$ e n . Quando $a = (n-4)$ e $d = (n-1)$, há apenas uma forma de preencher as duas lacunas da lista $(n-4) _ (n-1) _$ com os números $(n-3)$ e $(n-2)$ escolhendo $(n-3)$, o menor entre eles, para ocupar a segunda posição; a lista $(n-4)(n-3)(n-1)(n-2)$ está associada a um 4-ciclo em S_3^n . Quando $a = (n-4)$ e $d = n$, ocorrem três maneiras de preencher as duas lacunas da lista $(n-4) _ (n) _$ com os números $(n-3)$, $(n-2)$ e $(n-1)$ escolhendo o menor entre os dois selecionados para ocupar a segunda posição; as listas $(n-4)(n-3)(n)(n-2)$, $(n-4)(n-3)(n)(n-1)$ e $(n-4)(n-2)(n)(n-1)$ determinam três 4-ciclos não isomorfos em S_3^n . Portanto, se $a = (n-4)$, o número de 4-ciclos representados por listas na categoria *Lista 2* é igual a $\sum_{i=2}^3 C_2^i = 4$. Com relação à última linha da Tabela A.2, em que $a = (n-3)$ e $d = n$, temos só uma forma de preencher as duas lacunas da lista $(n-3) _ (n) _$ com os números $(n-2)$ e $(n-1)$ escolhendo o menor, $(n-2)$, para ocupar a segunda posição; a lista $(n-3)(n-2)(n)(n-1)$ está associada a um 4-ciclo S_3^n . Por isso, se $a = (n-3)$, o número de 4-ciclos representados por listas na categoria *Lista 2* é igual a $C_2^2 = 1$. Logo, para $a = (n-4)$ e $a = (n-3)$, o número de 4-ciclos representados por listas na categoria *Lista 2* é igual

$$\left(\sum_{i=2}^3 C_2^i \right) + C_2^2 = 2(C_2^2) + C_2^3 = 2(1) + 3 = 5. \quad (\text{A.5})$$

Somando esse valor a quantidade de 4-ciclos representados por listas na categoria *Lista 2* em que $a = 1, 2, \dots, n-5$, dada pela equação (A.4), chegamos ao número total de listas na categoria *Lista 2*:

$$\begin{aligned} (n-5) [2(C_2^2) + C_2^3] + [2(C_2^2) + C_2^3] &= (n-4) [2(C_2^2) + C_2^3] \\ &= (n-4)(5) = 5n - 20. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Assim, da soma do número de 4-ciclos associados a listas da categoria *Lista 1* em (A.2) com o número de 4-ciclos associados a listas da categoria *Lista 2* em (A.6), chegamos ao número total de 4-ciclos em S_3^n em função do número de vértices n :

$$n_4(S_3^n) = \underbrace{(n-3) A_2^2}_{2n-6} + \underbrace{(n-4) [2(C_2^2) + C_2^3]}_{5n-20} = 7n - 26,$$

concluindo a demonstração. \square

A seguir, replicamos o processo de contagem de 4-ciclos desenvolvido a grafos da subfamília das 5-serpentinhas. O objetivo é calcular o valor de n_4 em função de n sem sequer representar graficamente qualquer elemento da subfamília S_5^n .

Proposição A.2 (Número de 4-ciclos em S_5^n). Para um grafo 5-serpentina com n vértices, S_5^n , com $n > 10$, o número de 4-ciclos, em função de n , é dado por

$$n_4(S_5^n) = 50n - 270. \quad (\text{A.7})$$

Demonstração. Para obtermos uma expressão que contabilize o número de 4-ciclos contidos em um grafo 5-serpentina em função do número n de seus vértices, vamos tratar separadamente dos dois tipos de 4-ciclos possíveis em S_5^n : aqueles cujas listas de vértices podem ser identificadas como uma *Lista 1* e aqueles cujas listas de vértices podem ser identificadas como uma *Lista 2*, estando ambas as *Listas 1* e *2* definidas em (5.1).

Consideremos inicialmente os 4-ciclos cujas respectivas listas podem ser reconhecidas como uma *Lista 1*. Nesse caso, por hipótese, os quatro números inteiros positivos e distintos entre si $(a, b, c$ e $d)$ que compõem a lista associada ao 4-ciclo satisfazem $a < b < c < d$, a ocupa a primeira posição e d ocupa a última posição na lista. O menor valor possível de a na lista $a \dots d$ é 1, enquanto o maior valor possível é $n - 3$, pois nela aparecem três inteiros estritamente maiores que a e d , o maior inteiro na lista, não pode ultrapassar o valor do maior rótulo dos vértices, que é n .

Na Tabela A.3, organizamos a contagem de todos os 4-ciclos cujas listas pertencem à categoria *Lista 1*. Sua célula rs , com $r = 2, 3, \dots, n - 2$ e $s = 2, 3, \dots, n - 2$, é preenchida com o número desses 4-ciclos tendo o valor de a dado na célula $r1$ e o valor de d dado na célula $1s$; caso não haja nenhum 4-ciclo possível para algum valor de a na célula r_01 e algum valor de d na célula $1s_0$, com $r_0 \in \{2, 3, \dots, n - 2\}$ e $s_0 \in \{2, 3, \dots, n - 2\}$, a célula r_0s_0 é deixada vazia.

Vejamos a segunda linha da Tabela A.3. Se $a = 1$, d pode assumir os valores 4, 5 ou 6. De fato, d não pode ser menor que 4, uma vez que há dois inteiros estritamente entre 1 e 4 para ocupar a segunda e a terceira posição na *Lista 1*. Por outro lado, por construção do grafo S_5^n , d não pode ser maior que 6, uma vez que começamos com uma clique de tamanho 6 e, ao adicionarmos o sétimo vértice, o conectamos

Tabela A.3: Contagem de 4-ciclos em S_5^n associados a listas da categoria *Lista 1* ($a _ _ d$).

$a \backslash d$	4	5	6	7	8	9	...	$n-4$	$n-3$	$n-2$	$n-1$	n
1	2	6	12									
2		2	6	12								
3			2	6	12							
4				2	6	12						
⋮					⋮	⋮	⋮					
⋮						⋮	⋮	⋮				
⋮							⋮	⋮	⋮			
$n-7$								2	6	12		
$n-6$									2	6	12	
$n-5$										2	6	12
$n-4$											2	6
$n-3$												2

aos cinco vértices de maiores rótulos já presentes no grafo, ou seja, aos vértices de rótulos 2 a 6.

Quando $a = 1$ e $d = 4$, há duas formas de preencher as duas lacunas da lista $1 _ _ 4$ com os números 2 e 3 e essas listas estão associadas a dois 4-ciclos não isomorfos: 1234 e 1324. Quando $a = 1$ e $d = 5$, há seis formas de preencher as duas lacunas da lista $1 _ _ 5$ com os números 2, 3 e 4 e as listas obtidas estão associadas a seis 4-ciclos não isomorfos: 1235, 1245, 1325, 1345, 1425 e 1435. Por fim, se $a = 1$ e $d = 6$, há doze formas de se preencher as duas lacunas da lista $1 _ _ 6$ com os números 2, 3, 4 e 5 gerando listas correspondentes a doze 4-ciclos não isomorfos: 1236, 1246, 1256, 1326, 1346, 1356, 1426, 1436, 1456, 1526, 1536 e 1546. Se há *exatamente* i números inteiros *estritamente entre* a e d , a quantidade de maneiras distintas de se preencher as duas lacunas centrais de uma lista na categoria *Lista 1* escolhendo dois dentre esses i inteiros é igual ao valor do arranjo de i inteiros tomados dois a dois, A_2^i . Para $i = 2$, $A_2^2 = 2$; para $i = 3$, $A_2^3 = 3$ e para $i = 4$, $A_2^4 = 12$. Logo, o número total de listas na categoria *Lista 1* tendo $a = 1$ é $\sum_{i=2}^4 A_2^i = A_2^2 + A_2^3 + A_2^4 = 2 + 6 + 12 = 20$.

A contagem do número de formas de se preencher a segunda e terceira posições na lista $a _ _ d$ ocorre de modo análogo ao descrito no parágrafo anterior para $a = 2$

até $a = (n - 5)$. Para cada um desses valores de a , obtemos $\sum_{i=2}^4 A_2^i = A_2^2 + A_2^3 + A_2^4 = 2 + 6 + 12 = 20$ listas distintas na categoria *Lista 1*. Logo, de $a = 1$ até $a = (n - 5)$, a soma do número de listas possíveis é igual a

$$(n - 5) \sum_{i=2}^4 A_2^i = (n - 5)(20) = 20n - 100. \quad (\text{A.8})$$

Os casos em que $a = (n - 4)$ e $a = (n - 3)$ devem ser tratados separadamente. Quando $a = (n - 4)$ e $d = (n - 1)$, situação descrita na penúltima linha da Tabela A.3, há duas formas de as lacunas da lista $(n - 4) _ _ (n - 1)$ serem preenchidas com os inteiros $(n - 3)$ e $(n - 2)$ e as listas obtidas estão associadas a dois 4-ciclos não isomorfos em S_5^n : $(n - 4)(n - 3)(n - 2)(n - 1)$ e $(n - 4)(n - 2)(n - 3)(n - 1)$. Quando $a = (n - 4)$ e $d = n$, há seis formas de se preencher as duas lacunas da lista $(n - 4) _ _ (n)$ com os números $(n - 3)$, $(n - 2)$ e $(n - 1)$ gerando listas associadas a seis 4-ciclos não isomorfos: $(n - 4)(n - 3)(n - 2)(n)$, $(n - 4)(n - 3)(n - 1)(n)$, $(n - 4)(n - 2)(n - 3)(n)$, $(n - 4)(n - 2)(n - 1)(n)$, $(n - 4)(n - 1)(n - 3)(n)$ e $(n - 4)(n - 1)(n - 2)(n)$. Com relação à última linha da Tabela A.3, quando $a = (n - 3)$, devemos ter $d = n$ e as duas lacunas da lista $(n - 3) _ _ (n)$ podem ser preenchidas com os números $(n - 2)$ e $(n - 1)$ de duas formas, obtendo listas associadas a dois 4-ciclos não isomorfos: $(n - 3)(n - 2)(n - 1)(n)$ e $(n - 3)(n - 1)(n - 2)(n)$. Assim, nas situações em que $a = (n - 4)$ e $a = (n - 3)$, o número de listas distintas na categoria *Lista 1* é igual a

$$\left(\sum_{i=2}^3 A_2^i \right) + A_2^2 = \sum_{j=2}^3 \sum_{i=2}^j A_2^i = 2 + (2 + 6) = 10. \quad (\text{A.9})$$

Somando os valores em (A.8) e (A.9), chegamos ao número total de listas na categoria *Lista 1* correspondentes a 4-ciclos não isomorfos em S_5^n :

$$(n - 5) \sum_{i=2}^4 A_2^i + \sum_{j=2}^3 \sum_{i=2}^j A_2^i = (20n - 100) + (10) = 20n - 90. \quad (\text{A.10})$$

Passemos à contagem dos 4-ciclos cujas respectivas listas podem ser enquadradas na categoria *Lista 2* em (5.1). Nesse caso, por hipótese, os quatro números inteiros positivos e distintos entre si $(a, b, c$ e $d)$ que compõem a lista associada ao 4-ciclo satisfazem $a < b < c < d$, a ocupa a primeira posição e d ocupa a penúltima posição na lista. O menor valor possível de a na lista $a _ d _ _$ é 1, enquanto o maior valor possível é $n - 3$, pois nela aparecem três inteiros estritamente maiores que a e d , o maior inteiro na lista, não pode ultrapassar o valor do maior rótulo dos vértices,

que é n . É importante observarmos que uma lista associada a um 4-ciclo é cíclica. Assim, ambas as listas $abcd$ e $acdb$ estão na categoria *Lista 2* e correspondem a 4-ciclos *iguais*, de modo que devemos considerar apenas uma delas na contagem de 4-ciclos associados a listas na categoria *Lista 2*. Faremos a convenção de escolher sempre a primeira, $abcd$, na qual o número na segunda posição é menor que o na última posição da lista, uma vez que b é menor que c (ou seja, preenchemos a segunda posição da lista com o menor rótulo de vértice possível na ocasião).

Na Tabela A.4, organizamos a contagem de todos os 4-ciclos cujas listas pertencem à categoria *Lista 2*. Sua célula rs , com $r = 2, \dots, n-2$ e $s = 2, \dots, n-2$, é preenchida com o número desses 4-ciclos tendo o valor de a dado na célula $r1$ e o valor de d dado na célula $1s$; caso não haja nenhum 4-ciclo possível para algum valor de a na célula r_01 e algum valor de d na célula $1s_0$, com $r_0 \in \{2, 3, \dots, n-2\}$ e $s_0 \in \{2, 3, \dots, n-2\}$, a célula r_0s_0 é deixada vazia.

Vejam os a segunda linha da Tabela A.4. Se $a = 1$, d pode assumir os valores 4, 5, 6, 7, 8, 9 ou 10. De fato, d não pode ser menor que 4, uma vez que há dois inteiros estritamente entre 1 e 4 para ocupar a segunda e a última posição de uma lista na categoria *Lista 2*. Por outro lado, por construção do grafo S_5^n , d não pode ser maior que 10, pois não conseguiríamos preencher a segunda ou última posição em $a_d_$ com inteiros estritamente entre a e d e simultaneamente obter uma lista representativa de um 4-ciclo em S_5^n . Nesse grafo, cada vértice de rótulo i , $i \geq 6$, está ligado aos vértices de rótulos $(i-5)$, $(i-4)$, $(i-3)$, $(i-2)$ e $(i-1)$. Logo, se $a = 1$ e $d = 11$, por exemplo, poderíamos colocar 6 na segunda posição da lista $1_11_$, pois o vértice de rótulo 6 está conectado aos de rótulos 1 e 11, mas não teríamos como escolher um número estritamente entre 1 e 11 e diferente de 6 para ocupar a última posição sem contradizer a condição anterior (nenhum vértice de rótulo $j < 6$

Tabela A.4: Contagem de 4-ciclos em S_5^n associados a listas da categoria *Lista 2* ($a_d_$).

$a \backslash d$	4	5	6	7	8	9	10	11	12	...	$n-6$	$n-5$	$n-4$	$n-3$	$n-2$	$n-1$	n
1	1	3	6	10	6	3	1										
2		1	3	6	10	6	3	1									
3			1	3	6	10	6	3	1								
⋮				⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮							
⋮					⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮						
⋮						⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮					
⋮							⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮				
⋮								⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮			
⋮									⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		
$n-9$											1	3	6	10	6	3	1
$n-8$												1	3	6	10	6	3
$n-7$													1	3	6	10	6
$n-6$														1	3	6	10
$n-5$															1	3	6
$n-4$																1	3
$n-3$																	1

está conectado ao vértice de rótulo 11 em S_5^n , assim como nenhum vértice de rótulo $j > 6$ está conectado ao vértice de rótulo 1).

Quando $a = 1$ e $d = 4$, há apenas uma forma de se preencher as duas lacunas da lista 1 _ 4 _ com os números 2 e 3 escolhendo 2, o menor entre eles, para ocupar a segunda posição; a lista que corresponde ao 4-ciclo em S_5^n é 1243. Quando $a = 1$ e $d = 5$, há três formas de preenchermos as duas lacunas da lista 1 _ 5 _ com os números 2, 3 e 4 escolhendo o menor entre os dois considerados para ocupar a segunda posição; as listas 1253, 1254 e 1354 estão associadas a três 4-ciclos não isomorfos em S_5^n . Se $a = 1$ e $d = 6$, há seis formas de as duas lacunas da lista 1 _ 6 _ serem preenchidas com os números 2, 3, 4 e 5 escolhendo o menor entre os dois considerados para ocupar a segunda posição; as listas 1263, 1264, 1265, 1364, 1365 e 1465 determinam seis 4-ciclos não isomorfos em S_5^n . Quando $a = 1$ e $d = 7$, há dez maneiras de preenchermos as duas lacunas da lista 1 _ 7 _ com os números 2, 3, 4, 5 e 6 escolhendo o menor entre os dois considerados para ocupar a segunda posição; as listas 1273, 1274, 1275, 1276, 1374, 1375, 1376, 1475, 1476 e 1576 correspondem a dez 4-ciclos não isomorfos em S_5^n . Se $a = 1$ e $d = 8$, há seis formas de as duas lacunas da lista 1 _ 8 _ serem preenchidas com os números 3, 4, 5 e 6 escolhendo o menor entre os dois considerados para ocupar a segunda posição; as listas 1384, 1385, 1386, 1485, 1486 e 1586 determinam seis 4-ciclos não isomorfos em S_5^n . É interessante observar que, quando $a = 1$ e $d = 8$, não podemos usar nem o número 2 e nem o 7 para preencher nenhuma das lacunas da lista 1 _ 8 _ visto que, por construção de S_5^n , 6 é o maior dentre os rótulos dos vértices ligados ao vértice de rótulo 1 e 3 é o menor dentre os rótulos dos vértices ligados ao vértice de rótulo 8. logo, não podemos colocar o 7 na lista, nem na segunda nem na última posição, pois qualquer um dos casos implicaria na existência da aresta 17, que não ocorre em S_5^n . Quando $a = 1$ e $d = 9$, ocorrem três maneiras de preencher as duas lacunas da lista 1 _ 9 _ com os números 4, 5, e 6 escolhendo o menor entre os dois considerados para ocupar a segunda posição; as listas 1495, 1496 e 1596 correspondem a três 4-ciclos não isomorfos em S_5^n . Nesse caso, pelo modo em que o grafo S_5^n é construído, não podemos utilizar nenhum dos números 2, 3, 7 ou 8 para preencher qualquer das lacunas da lista 1 _ 9 _ . Finalmente, se $a = 1$ e $d = 10$, temos somente uma maneira de preencher a lista 1 _ 10 _ com os números 5 e 6 escolhendo 5, o menor entre os

dois, para ocupar a segunda posição; a lista 15(10)6 determina um 4-ciclo em S_5^n . Nessa última situação, não podemos usar nenhum dos números 2, 3, 4, 7, 8 ou 9 para preenchermos qualquer uma das lacunas da lista.

Se há i números inteiros *estritamente entre* a e d e cuja respectiva diferença com a e com d seja *menor que ou igual a* 5, então a quantidade de maneiras distintas de se preencher as duas lacunas de uma lista na categoria *Lista 2* escolhendo dois dentre esses i inteiros e colocando o menor deles na segunda posição da lista é igual ao valor da combinação de i inteiros tomados dois a dois, C_2^i . Para $i = 2$, $C_2^2 = 1$; para $i = 3$, $C_2^3 = 3$; para $i = 4$, $C_2^4 = 6$ e para $i = 5$, $C_2^5 = 10$. Logo, o número total de listas na categoria *Lista 2* tendo $a = 1$ é

$$\sum_{i=2}^5 C_2^i + \sum_{i=2}^4 C_2^i = 2 \left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + C_2^5 = 2(1 + 3 + 6) + 10 = 30. \quad (\text{A.11})$$

O preenchimento da segunda e última posições na lista $a _ d _$ ocorre de forma análoga à descrita nos últimos três parágrafos para $a = 2$ até $a = (n - 9)$. Para cada um desses valores de a , obtemos $2 \left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + C_2^5 = 30$ listas distintas na categoria *Lista 2*. Logo, de $a = 1$ até $a = (n - 9)$, a soma do número de listas possíveis é igual a

$$(n - 9) \left[2 \left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + C_2^5 \right] = (n - 9)(30) = 30n - 270. \quad (\text{A.12})$$

Os casos em que $a = (n - j)$, com $j = 3, 4, \dots, 8$, devem ser tratados com atenção, pois à medida que d se aproxima de n , diminuem a quantidade de inteiros estritamente entre a e d que satisfazem a respectiva diferença com a e com d ser menor que ou igual a 5. Isso ocorre porque temos uma limitação para o valor máximo de d , dada pelo número n de vértices do grafo S_5^n . Vamos considerar a linha em que $a = (n - 6)$ na Tabela A.4 como exemplo. Nesse caso, d pode assumir os valores $(n - 3)$, $(n - 2)$, $(n - 1)$ e n . Quando $a = (n - 6)$ e $d = (n - 3)$, há apenas uma forma de preencher as duas lacunas da lista $(n - 6) _ (n - 3) _$ com os números $(n - 5)$ e $(n - 4)$ escolhendo $(n - 5)$, o menor entre eles, para ocupar a segunda posição; a lista $(n - 6)(n - 5)(n - 3)(n - 4)$ determina um 4-ciclo em S_5^n . Quando $a = (n - 6)$ e $d = (n - 2)$, ocorrem três maneiras de preenchermos as duas lacunas da lista $(n - 6) _ (n - 2) _$ com os números $(n - 5)$, $(n - 4)$ e $(n - 3)$ escolhendo o menor entre os dois considerados para ocupar a segunda posição; as listas $(n - 6)(n - 5)(n - 2)(n - 4)$, $(n - 6)(n - 5)(n - 2)(n - 3)$ e $(n - 6)(n - 4)(n - 2)(n - 3)$ determinam três 4-ciclos

não isomorfos em S_5^n . Já se $a = (n - 6)$ e $d = (n - 1)$, temos seis formas de preencher as duas lacunas da lista $(n - 6) _ (n - 1) _$ com os números $(n - 5)$, $(n - 4)$, $(n - 3)$ e $(n - 2)$ escolhendo o menor entre os dois considerados para ocupar a segunda posição; as listas $(n - 6)(n - 5)(n - 1)(n - 4)$, $(n - 6)(n - 5)(n - 1)(n - 3)$, $(n - 6)(n - 5)(n - 1)(n - 2)$, $(n - 6)(n - 4)(n - 1)(n - 3)$, $(n - 6)(n - 4)(n - 1)(n - 2)$ e $(n - 6)(n - 3)(n - 1)(n - 2)$ estão associadas a seis 4-ciclos não isomorfos em S_5^n . Por fim, quando $a = (n - 6)$ e $d = n$, há dez formas de preencher as duas lacunas da lista $(n - 6) _ (n) _$ com os números $(n - 5)$, $(n - 4)$, $(n - 3)$, $(n - 2)$ e $(n - 1)$ escolhendo o menor entre os dois considerados para ocupar a segunda posição; as listas $(n - 6)(n - 5)(n)(n - 4)$, $(n - 6)(n - 5)(n)(n - 3)$, $(n - 6)(n - 5)(n)(n - 2)$, $(n - 6)(n - 5)(n)(n - 1)$, $(n - 6)(n - 4)(n)(n - 3)$, $(n - 6)(n - 4)(n - 1)(n - 2)$, $(n - 6)(n - 4)(n)(n - 1)$, $(n - 6)(n - 3)(n)(n - 2)$, $(n - 6)(n - 3)(n)(n - 1)$ e $(n - 6)(n - 2)(n)(n - 1)$ estão associadas a dez 4-ciclos não isomorfos em S_5^n . Portanto, se $a = (n - 6)$, o número de 4-ciclos representados por listas na categoria *Lista 2* é igual a $\sum_{i=2}^5 C_2^i = 20$.

Nas últimas $(n - 3) - (n - 9) = 6$ linhas da Tabela A.4, podemos organizar a contagem dos 4-ciclos agrupando linhas duas a duas. Considerando $a = (n - 8)$ e $a = (n - 3)$, contamos

$$\left[\sum_{i=2}^5 C_2^i + \sum_{i=3}^4 C_2^i \right] + C_2^2 = 2 \left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + C_2^5 = 2(1 + 3 + 6) + 10 = 30$$

listas associadas a 4-ciclos não isomorfos em S_5^n . Considerando $a = (n - 7)$ e $a = (n - 4)$, também contamos

$$\left[\sum_{i=2}^5 C_2^i + C_2^4 \right] + \left[\sum_{i=2}^3 C_2^i \right] = 2 \left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + C_2^5 = 2(1 + 3 + 6) + 10 = 30$$

listas associadas a 4-ciclos não isomorfos em S_5^n . As últimas linhas da Tabela A.4 a serem consideradas são as linhas em que $a = (n - 6)$ e $a = (n - 5)$. Para esses valores de a , contabilizamos

$$\left[\sum_{i=2}^5 C_2^i \right] + \left[\sum_{i=2}^4 C_2^i \right] = 2 \left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + C_2^5 = 2(1 + 3 + 6) + 10 = 30$$

listas associadas a 4-ciclos não isomorfos em S_5^n . Logo, os 4-ciclos representados por listas na categoria *Lista 2* em que $a = (n - j)$, com $j = 3, 4, \dots, 8$, são em número

igual a

$$\begin{aligned} \frac{(n-3)-(n-9)}{2} \left[2 \left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + C_2^5 \right] &= 3 \left[2 \left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + C_2^5 \right] = \\ &= 3 [2(1+3+6) + 10] = 90. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Somando esse valor à quantidade de 4-ciclos representados por listas na categoria *Lista 2* em que $a = 1, 2, \dots, n-9$, dada pela equação (A.12), chegamos ao número total de listas na categoria *Lista 2*:

$$\begin{aligned} (n-9) \left[2 \left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + C_2^5 \right] + 3 \left[2 \left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + C_2^5 \right] &= \\ = (n-6) \left[2 \left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + C_2^5 \right] &= 30n - 180. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Da soma do número de 4-ciclos associados a listas da categoria *Lista 1* em (A.10) com o número de 4-ciclos associados a listas da categoria *Lista 2* em (A.14), chegamos ao número total de 4-ciclos em S_5^n em função de n , a saber

$$n_4(S_5^n) = \underbrace{\left[(n-5) \sum_{i=2}^4 A_2^i + \sum_{j=2}^3 \sum_{i=2}^j A_2^i \right]}_{20n-90} + \underbrace{(n-6) \left[2 \left(\sum_{i=2}^4 C_2^i \right) + C_2^5 \right]}_{30n-180} = 50n - 270,$$

concluindo a demonstração. □