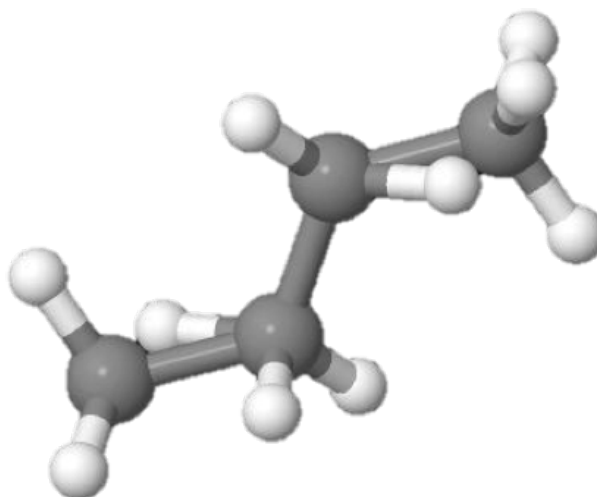




Helena Margarida dos
Santos Vasconcelos
Gomes

Invariantes espectrais da matriz de Randić de um grafo

Spectral invariants of Randić matrix of a graph





Helena Margarida dos
Santos Vasconcelos
Gomes

Invariantes espectrais da matriz de Randić de um grafo

Tese apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Doutor em Matemática, realizada sob a orientação científica de Enide Cascais Silva Andrade, Professora Auxiliar do Departamento de Matemática da Universidade de Aveiro e de María Rosario Robbiano Bustamante, Professora Associada da Universidad Católica Del Norte, Antofagasta, Chile.

Apoio financeiro de fundos nacionais através do CIDMA-Centro de Investigação e Desenvolvimento em Matemática e Aplicações (Universidade de Aveiro) e da FCT-Fundação para a Ciência e a Tecnologia, no âmbito do projeto PEst-OE/MAT/UI4106/2014.

Aos meus Pais e aos meus Avós.

À Nini, ao Hugo, ao Gabriel e ao Miguel.

o júri

presidente

Prof. Doutor João Filipe Colardelle da Luz Mano

Professor Catedrático da Universidade de Aveiro

Prof. Doutora Natália Isabel Quadros Bebiano Pinheiro da Providência
e Costa

Professora Catedrática da Universidade de Coimbra

Prof. Doutor Henrique José Freitas Cruz

Professor Auxiliar da Universidade da Beira Interior

Prof. Doutora Maria da Graça Pereira Soares

Professora Auxiliar da Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro

Prof. Doutor Domingos Moreira Cardoso

Professor Catedrático da Universidade de Aveiro

Prof. Doutora Enide Cascais Silva Andrade (Orientadora)

Professora Auxiliar da Universidade de Aveiro

Agradecimentos

Às minhas Orientadoras, Professora Enide Andrade e Professora Maria Robbiano.

Ao Centro de Investigação e Desenvolvimento em Matemática e Aplicações da Universidade de Aveiro.

Aos meus colegas da Escola Superior de Educação de Viseu, em particular aos colegas do Departamento de Ciências Exatas e Naturais.

Aos meus Amigos.

À minha Família.

palavras-chave

Teoria espectral dos grafos, Matriz de Randić, *Spread* de Randić, Energia de Randić.

resumo

Este trabalho apresenta um estudo sobre invariantes espectrais da matriz de Randić de um grafo. O índice de Randić é um invariante espectral apresentado em 1975 por Milan Randić e com importantes aplicações ao nível da Química. Em 2010 define-se a matriz de Randić, uma matriz não negativa construída a partir desse índice. O estudo do espectro de matrizes associadas a grafos é um dos grandes objetivos da investigação em teoria dos grafos e são já diversas as aplicações em diferentes áreas científicas. Neste trabalho é estudado o espectro da matriz de Randić associada a um grafo e definido o *spread* de Randić. Para além disso, são apresentados majorantes e minorantes para esse invariante espectral. Em Química, a energia de grafos *caterpillar*, que estão associados a sistemas aromáticos, está relacionada com as relações de ressonância desses sistemas. Tendo esse facto como motivação, é estudado o espectro e o espectro de Randić de grafos *caterpillar* e são apresentados majorantes para a energia e para a energia de Randić dessa classe de grafos.

keywords

Spectral graph theory, Randić matrix, Randić spread, Randić energy.

abstract

This work presents a study related to spectral invariants for the Randić matrix of a graph. The Randić index is a spectral invariant presented in 1975 by Milan Randić and with important applications in chemistry. In 2010 the Randić matrix was defined as a nonnegative matrix built from this index. The study of the spectrum of matrices associated with graphs is one of the major goals of research in graph theory and there are already several applications in different scientific areas. In this work the spectrum of the Randić matrix associated to a graph is studied and the Randić spread is defined. In addition, upper and lower bounds are presented for this spectral invariant. In chemistry, the energy of caterpillar graphs, that are associated with aromatic systems, is related with the resonance of these systems. Having this as motivation, the spectrum and the Randić spectrum of caterpillar graphs are studied and upper bounds are presented for the energy and for the Randić energy of this class of graphs.

Índice

Índice	i
Lista de Figuras	iii
Lista de Tabelas	v
Lista de Símbolos	vii
1 Introdução	1
1.1 Enquadramento, Motivações e Problemas	1
1.2 Organização do Documento	7
2 Notações, Conceitos e Resultados Preliminares	9
3 Matriz de Randić e <i>Spread</i> de Randić	27
3.1 Índice de Randić e Matriz de Randić	27
3.2 Espectro e <i>Spread</i> de Randić	31
3.3 Majorantes e Minorantes para o <i>Spread</i> de Randić	35
3.4 Estudos Computacionais para Aproximações ao <i>Spread</i> de Randić	56
3.4.1 Aproximações ao <i>Spread</i> de Randić para Grafos Bipartidos Completos	56
3.4.2 Aproximações ao <i>Spread</i> de Randić para Ciclos	68
3.4.3 Aproximações ao <i>Spread</i> de Randić para Grafos da Coleção <i>Second</i> <i>DIMACS Implementation</i>	79
4 Energia e Energia de Randić de Grafos <i>Caterpillar</i>	85
4.1 Grafos <i>Caterpillar</i> na Química Matemática	85

4.2	Espetro de Randić e <i>Spread</i> de Randić do <i>H-join</i> de Grafos	89
4.3	Espetro e Espetro de Randić de Alguns Grafos <i>Caterpillar</i>	98
4.4	Majorantes para a Energia e para a Energia de Randić de Grafos <i>Caterpillar</i>	105
4.5	Estudos Computacionais para Aproximações à Energia e à Energia de Randić de Grafos <i>Caterpillar</i>	113
5	Conclusões	117
	Referências Bibliográficas	120
	Índice Remissivo	129

Lista de Figuras

2.1	$G = T(2, 1, 3)$	13
2.2	$G = H[C_4, P_2, C_3]$	14
3.1	Correlação entre o ponto de ebulição (bp) de um conjunto de alcanos e o Índice de Randić dos grafos moleculares associados (figura retirada de [65]).	29
4.1	Fórmulas de Clar, [45].	88
4.2	Exemplo de um sistema aromático	88
4.3	Grafo Clar associado ao sistema aromático	89
4.4	<i>Caterpillar</i> associado ao sistema aromático	89
4.5	Etiquetagem dos vértices em $G = T(2, 1, 3)$	98
4.6	$T(q_1, \dots, q_r)$ como $H_0 [K_1, \dots, K_1, \bar{K}_{q_1}, \dots, \bar{K}_{q_r}]$	100
4.7	$G = T(q_1, \dots, q_r)$. Caso A	102
4.8	$G = T(q_1, \dots, q_r)$. Caso B	102
4.9	$G = T(q_1, \dots, q_r)$. Caso C	102
4.10	$G = T(q_1, \dots, q_r)$. Caso D	103

Lista de Tabelas

3.1	Minorantes para o <i>spread</i> de Randić de grafos bipartidos completos	58
3.2	Minorantes para o <i>spread</i> de Randić de grafos bipartidos completos (continuação)	59
3.3	Erros de aproximação dos minorantes para o <i>spread</i> de Randić de grafos bipartidos completos	60
3.4	Erros de aproximação dos minorantes para o <i>spread</i> de Randić de grafos bipartidos completos (continuação)	61
3.5	Majorantes para o <i>spread</i> de Randić de grafos bipartidos completos	63
3.6	Majorantes para o <i>spread</i> de Randić de grafos bipartidos completos (continuação)	64
3.7	Erros de aproximação dos majorantes para o <i>spread</i> de Randić de grafos bipartidos completos	65
3.8	Erros de aproximação dos majorantes para o <i>spread</i> de Randić de grafos bipartidos completos (continuação)	66
3.9	Minorantes para o <i>spread</i> de Randić de ciclos	69
3.10	Minorantes para o <i>spread</i> de Randić de ciclos (continuação)	70
3.11	Erros de aproximação dos minorantes para o <i>spread</i> de Randić de ciclos	71
3.12	Erros de aproximação dos minorantes para o <i>spread</i> de Randić de ciclos (continuação)	72
3.13	Majorantes para o <i>spread</i> de Randić de ciclos	74
3.14	Majorantes para o <i>spread</i> de Randić de ciclos (continuação)	75
3.15	Erros de aproximação dos majorantes para o <i>spread</i> de Randić de ciclos	76

3.16	Erros de aproximação dos majorantes para o <i>spread</i> de Randić de ciclos (continuação)	77
3.17	Minorantes para o <i>spread</i> de Randić de grafos pertencentes à coleção <i>Second DIMACS Implementation</i> e respetivos erros de aproximação	80
3.18	Majorantes para o <i>spread</i> de Randić de grafos pertencentes à coleção <i>Second DIMACS Implementation</i>	82
3.19	Erros de aproximação dos majorantes para o <i>spread</i> de Randić de grafos pertencentes à coleção <i>Second DIMACS Implementation</i>	83
4.1	Majorantes para a energia de grafos <i>caterpillar</i>	114
4.2	Majorantes para a energia de Randić de grafos <i>caterpillar</i>	116

Lista de Símbolos

(n, m) -grafo grafo com n vértices e m arestas

$\#X$ cardinal de um conjunto X

□ final de cada demonstração

$\chi(G)$ índice de Randić de um grafo G

$\Delta(G)$ maior grau dos vértices de um grafo G

$\delta(G)$ menor grau dos vértices de um grafo G

$\det(\mathbf{M})$ determinante de uma matriz quadrada \mathbf{M}

$\lambda_i(\mathbf{M})$ i -ésimo maior valor próprio de uma matriz Hermítica \mathbf{M}

$\|x\|$ norma euclidiana de um vetor x

$\mathbf{A}(G)$ matriz de adjacência de um grafo G

$\mathbf{L}(G)$ matriz Laplaciana de um grafo G

\mathbf{M}^* matriz transconjugada de uma matriz \mathbf{M}

$\mathbf{R}(G)$ matriz de Randić de um grafo G

\mathbf{e}_k vetor com todas as k entradas iguais a 1

\mathbf{M}^T matriz transposta de uma matriz \mathbf{M}

$\mathbf{O}_{m \times n}$ matriz nula com m linhas e n colunas

$\mathcal{L}(G)$ matriz Laplaciana normalizada de um grafo G

$\mathcal{E}(\mathbf{M})$ energia de uma matriz \mathbf{M}

$\mathcal{E}(G)$ energia de um grafo G

$\mathcal{E}_R(G)$ energia de Randić de um grafo G

$\max S$ máximo de um conjunto S

$\min S$ mínimo de um conjunto S

\overline{G} grafo complementar de um grafo G

$\rho(\mathbf{M})$ raio espectral de uma matriz \mathbf{M}

$\sigma(\mathbf{M})$ espectro de uma matriz \mathbf{M}

σ_G espectro de um grafo G

\mathbf{I}_n matriz identidade de ordem n

$|\mathbf{M}|$ norma de Frobenius de uma matriz \mathbf{M}

$\|\mathbf{M}\|_p$ normas l_p de uma matriz \mathbf{M}

C_n ciclo com n vértices

d_i grau de um vértice i

$\text{diag}(a_1, \dots, a_n)$ matriz diagonal onde a_1, \dots, a_n se encontram na diagonal principal

$E(G)$ conjunto de arestas de um grafo G

$G[B]$ subgrafo de um grafo G induzido por $B \subseteq V(G)$

$G_1 \cong G_2$ G_1 é isomorfo a G_2

$G_1 \vee G_2$ *join* de G_1 e G_2

$G_1 \cap G_2$ interseção de G_1 e G_2

$G_1 \cup G_2$ união de G_1 e G_2

$H[G_1, \dots, G_k]$ *H-join* de G_1, \dots, G_k

$i \not\sim j$ vértice i não adjacente ao vértice j

$i \sim j$ vértice i adjacente ao vértice j

K_n grafo completo com n vértices

$K_{r,s}$ grafo bipartido completo com $r + s$ vértices

$N_G(i)$ conjunto de vizinhos de um vértice i de um grafo G

$R_\alpha(G)$ índice de Randić generalizado de um grafo G

$s(\mathbf{M})$ *spread* de uma matriz \mathbf{M}

S_{r+1} estrela com $r + 1$ vértices

$spr_L(G)$ *spread* laplaciano de um grafo G

$spr_R(G)$ *spread* de Randić de um grafo G

$spr_{\mathcal{L}}(G)$ *spread* laplaciano normalizado de um grafo G

$tr(\mathbf{M})$ traço de uma matriz \mathbf{M}

$V(G)$ conjunto de vértices de um grafo G

Capítulo 1

Introdução

1.1 Enquadramento, Motivações e Problemas

Este trabalho enquadra-se na teoria espectral dos grafos entendida, genericamente, como a teoria que estuda os grafos e as suas propriedades, a partir do estudo do espectro de matrizes que lhes estão associadas. Uma vez que um grafo fica completamente determinado pela sua estrutura de adjacência ou pela sua estrutura de incidência, associam-se diversas matrizes a grafos que traduzem, de alguma forma, essas estruturas. Na sequência desta ligação tão próxima com a Álgebra Linear, Dragoš Cvetković, Michael Doob e Horst Sachs desenvolveram, em [23], a teoria que designaram por teoria espectral dos grafos como uma teoria na qual se estabelecem relações recíprocas entre o espectro das matrizes que representam um grafo e a respetiva estrutura combinatória e que tem, por isso, as suas próprias características e formas específicas de raciocínio. Embora esta obra, pela sua dimensão e profundidade, seja considerada uma das marcas mais importantes na cronologia do desenvolvimento da teoria espectral dos grafos, a sua origem é consensualmente atribuída ao artigo publicado em 1957 por Lothar Collatz e Ulrich Sinogowitz, [20]. Nesse trabalho, os autores mostraram, por exemplo, que o valor médio dos graus dos vértices de um grafo arbitrário é um minorante para o maior valor próprio da matriz de adjacência desse grafo.

Apesar de, na maior parte da literatura da área, o início da teoria espectral dos grafos estar referenciado por esse trabalho, já antes, em 1931, Erich Hückel tinha publicado o artigo [59], na área da Química quântica, onde se desenvolvem algumas ideias do que viria a ser a teoria espectral dos grafos. Nesse artigo, Hückel usa valores próprios de grafos (ou seja, valores próprios das respectivas matrizes de adjacência) para representar os níveis de energia de determinados elétrons. Desde o trabalho de Lothar Collatz e Ulrich Sinogowitz, [20], que a teoria espectral dos grafos tem tido um grande desenvolvimento através da publicação de inúmeros livros e artigos científicos. No entanto, a publicação, em 1980, de Dragoš Cvetković, Michael Doob e Horst Sachs, [23], é considerada por muitos como uma das maiores referências bibliográficas nesta área, sendo também o primeiro livro acessível, já que reúne os principais conceitos e resultados obtidos na área até então e introduz um grande número de novos resultados nessa época.

São diversas as aplicações do estudo do espectro de grafos. Em [22, 23, 25] é possível encontrar referências a aplicações do estudo dos valores próprios de um grafo nomeadamente na Física, na Química, nas Ciências da computação ou na própria Matemática. Também ao nível da Biologia e das Ciências Sociais é possível encontrar aplicações do estudo de grafos, em particular, do seu espectro [4, 86]. Muitas dessas aplicações, mais diretas, mais indiretas, simples ou mais complexas, constituem fortes motivações para o desenvolvimento da teoria espectral dos grafos, teoria na qual se enquadra esta tese.

Um dos objetivos mais procurados no desenvolvimento da teoria dos grafos é o estudo de invariantes de diferentes naturezas (invariantes de natureza espectral como, por exemplo, a energia dos grafos; de natureza combinatória como o número de independência ou o número de clique dos grafos; ou, por exemplo, de natureza topológica como a propriedade de ser planar) procurando relações entre propriedades espectrais e estruturais dos grafos. Particularmente, é interessante analisar o comportamento de valores próprios de um grafo quando ele sofre diversas transformações estruturais, especialmente nos casos em que o espectro dos grafos resultantes pode estar relacionado com o espectro de grafos mais simples,

[23]. Esta tese apresenta um estudo sobre invariantes espectrais da matriz de Randić de determinados grafos. Em particular, o objetivo deste trabalho é o estudo do *spread*¹ de Randić e da energia de Randić dos grafos, como se explica mais à frente.

A primeira referência à matriz de Randić surgiu em 1975 no artigo [76] de Milan Randić. No mesmo trabalho, o autor definiu um descritor de estrutura molecular (índice topológico) que designou por Índice de ramificação e que atualmente é conhecido como Índice de Randić, [39, 50, 64], definido como um dos mais importantes índices topológicos associados a um grafo. O Índice de Randić tem inúmeras aplicações na Química e, também por isso, é um tópico que tem merecido a investigação de vários autores, particularmente ao nível da Química matemática, [50, 64, 77]. Milan Randić reconheceu, por exemplo, a existência de uma correlação forte entre o Índice de Randić e os pontos de ebulição dos alcanos, [65]. Outra aplicação importante deste descritor molecular relaciona-se com a previsão do cancro. Em 2010, Cristian Munteanu, Juan Rabuñal e Javier Pereira apresentaram, em [73], o trabalho *Predicción del Cáncer Colorrectal y de Mama con Grafos*. Nesse trabalho, os grafos e algumas propriedades espectrais, como o Índice de Randić, são apresentados como uma técnica para a previsão do cancro colo-retal e da mama. Em particular, os autores apresentam os grafos e propriedades espectrais associadas para estudar a relação entre sequências de proteínas ou sinais do espectro de massas e a existência de cancro.

A matriz de Randić de um grafo é uma matriz não negativa cuja definição é motivada pela definição do Índice de Randić, [9]. Esta matriz é construída de tal forma que a soma das suas entradas é igual ao dobro do Índice de Randić. Como se explica mais à frente nesta tese, é possível concluir que o maior valor próprio da matriz de Randić associada a um determinado grafo com pelo menos uma aresta é sempre igual a 1.

O *spread* de uma matriz complexa está definido em [72] como o maior valor absoluto

¹Neste trabalho, opta-se pela designação inglesa *spread* em alternativa às respetivas traduções para português (por exemplo, *separação*), dado que não existem trabalhos na área que apresentem qualquer tradução para essa língua. Por isso, entende-se que a expressão em inglês é reconhecida em Portugal.

da diferença entre dois quaisquer valores próprios dessa matriz. Desde 1956 que existem diversos estudos relacionados com o *spread* de uma matriz, [60, 70, 72]. Este conceito tem inúmeras aplicações como, por exemplo, em problemas de optimização combinatoria e tem merecido o estudo por vários autores. Tendo esse conceito como motivação, David Gregory, Daniel Hershkowitz e Stephen Kirkland definiram o *spread* de um grafo, em 2001, [42], como o maior valor absoluto da diferença entre dois quaisquer valores próprios distintos da matriz de adjacência desse grafo. Nesse artigo, os autores determinaram majorantes e minorantes para o *spread* de um grafo. Em particular, mostraram que o grafo com menor *spread* entre todos os grafos conexos de uma determinada ordem é o caminho. Apresentaram, também, conjecturas para a caracterização de classes de grafos com o *spread* máximo. Também em [70] foram obtidos majorantes e minorantes para o *spread* de um grafo. Como já foi referido, 1 é o maior valor próprio da matriz de Randić associada a qualquer grafo com pelo menos uma aresta. Esta é, aliás, uma das características espectrais da matriz de Randić associada a um determinado grafo nas condições descritas que condiciona a definição de *spread* de Randić do grafo e que se introduz nesta tese. Para além disso apresentam-se, nesta tese, majorantes e minorantes para o *spread* de Randić e, para alguns deles, testa-se o respetivo grau de aproximação em determinadas classes de grafos, recorrendo a testes computacionais.

A energia de um grafo G , $\mathcal{E}(G)$, é definida como a soma dos valores absolutos dos valores próprios do grafo. Este conceito foi introduzido em 1978 por Ivan Gutman, em [47]. Em Química teórica, o interesse no estudo da energia de um grafo reside no facto da energia total dos electrões- π para a maioria das moléculas de hidrocarbonetos conjugados², calculada pela teoria de Hückel, coincidir com o valor da energia do grafo que modela essas moléculas ou seja do grafo molecular³ respetivo, [7]. Mais especificamente,

²Sistemas conjugados de electrões- π que têm um sistema conexo de orbitais- p com electrões- π deslocados.

³*Grafos moleculares* são grafos que representam a estrutura das moléculas orgânicas (habitualmente os compostos químicos constituídos por átomos de carbono e de hidrogénio, designados por hidrocarbonetos). Nos grafos moleculares os vértices representam os átomos e as arestas as ligações entre átomos. Por razões químicas, os grafos moleculares de hidrocarbonetos não podem ter vértices com graus superiores a 4, [46].

como se explica na Secção 4.1, existe uma correlação entre as relações de ressonância⁴ de um sistema aromático⁵ e a energia de um grafo (um *caterpillar*) que está associado ao sistema aromático. Esta é, aliás, uma das mais fortes motivações para o estudo da energia e da energia de Randić de grafos *caterpillar* que se apresenta neste trabalho.

Antes de ser introduzido o conceito de energia de um grafo, a energia total dos eletrões- π , \mathcal{E}_π , era calculada da seguinte forma:

$$\mathcal{E}_\pi = \begin{cases} 2 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} \lambda_i, & \text{se } n \text{ é par} \\ 2 \sum_{i=1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \lambda_i, & \text{se } n \text{ é ímpar} \end{cases} \quad (1.1)$$

onde n é o número de vértices do grafo molecular respetivo e os valores próprios desse grafo estão representados por λ_i , com $i \in \{1, \dots, \frac{n}{2}\}$, para n par ou $i \in \{1, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor\}$, para n ímpar, [47]. Ivan Gutman reconheceu, porém, que todos os resultados principais existentes para \mathcal{E}_π até essa altura (por exemplo, os resultados apresentados nas referências [21, 43, 68]), eram válidos apenas na condição de \mathcal{E}_π coincidir com a energia do grafo correspondente, $\mathcal{E}(G)$, [52] (observe-se que quando o grafo molecular é bipartido, \mathcal{E}_π é igual a $\mathcal{E}(G)$). Para além disso, a comunidade científica reconheceu que a definição de energia de um grafo é mais adequada do que a definição apresentada em (1.1) e, por outro lado, que são inúmeras as propriedades que podem ser apresentadas para $\mathcal{E}(G)$.

A energia de um grafo tem sido estudada por diversos autores sobretudo matemáticos e químicos, [44, 66]. Em [47], Ivan Gutman conjecturou que o grafo completo com n vértices era o grafo com energia máxima, entre todos os grafos com n vértices. No entanto, em 1986, esta conjectura foi invalidada pelo próprio Ivan Gutman que, juntamente com Dragoš Cvetković,

⁴A *ressonância* ou *deslocalização de eletrões* é um método para descrever eletrões deslocalizados em determinadas moléculas. As moléculas têm uma estrutura preferencial, mais estável, mas podem alterar para outras estruturas devido a fatores externos. São diversos os compostos orgânicos que apresentam ressonância (os compostos aromáticos são um exemplo).

⁵Um *sistema aromático* é um objeto combinatório (ou geométrico) obtido pela organização de hexágonos regulares e congruentes no plano (cada um representa o benzeno) de tal forma que dois hexágonos têm, ou não, uma aresta em comum, [26]. A um sistema aromático é possível associar um grafo, designado por grafo benzenóide, tomando os vértices dos hexágonos como os vértices do grafo e os lados dos hexágonos como as arestas do grafo.

em [24], introduziu os conceitos de grafo hiperenergético (grafo cuja energia é superior à energia do grafo completo) e de grafo não hiperenergético (grafo com energia inferior ou igual à energia do grafo completo). Um dos problemas ainda em aberto está relacionado com a caracterização do grafo de n vértices com energia máxima de entre todos os grafos com n vértices. Na classe das árvores, Ivan Gutman mostra em [43] que a árvore de n vértices com energia mínima é a estrela e a de energia máxima é o caminho. São vários os autores que se dedicam ao estudo da energia de certas classes de grafos, procurando definir majorantes e minorantes mais apertados do que os já existentes. Depois da introdução do conceito de energia de um grafo, surgiram diversos estudos relativos à energia de outras matrizes associadas a grafos. O conceito de energia de Randić foi introduzido em 2010, no artigo [9], por Burcu Bozkurt, Dilek Güngör, Ivan Gutman e Sinan Çevik. Para além desse trabalho que introduz o conceito de energia de Randić, existem diversos artigos na literatura, por exemplo [8, 27, 28, 51], que apresentam majorantes e minorantes para essa energia. Também em [38], os autores compararam a energia com a energia de Randić de um grafo. Em 2014, foi apresentada uma conjectura sobre a caracterização dos grafos com energia de Randić máxima na classe das árvores, para um determinado número de vértices, [51]. Mais recentemente, em [29], Kinkar Das, Sezer Sorgun e Kexiang Xu reúnem diversos majorantes e minorantes para a energia de Randić de um grafo, existentes na literatura, e caracterizam as classes de grafos em que determinados majorantes e minorantes são atingidos.

1.2 Organização do Documento

Esta tese está dividida em cinco capítulos.

No primeiro capítulo, são apresentadas algumas aplicações e problemas ainda em aberto que motivaram o desenvolvimento deste trabalho.

O segundo capítulo introduz a notação usada ao longo do documento e apresenta as principais definições e resultados da literatura que são a base para algumas das ideias deste trabalho ou que, de alguma forma, são úteis ao seu desenvolvimento.

No terceiro capítulo é apresentado o índice e a matriz de Randić, bem como algumas propriedades do espectro dessa matriz e a sua relação com outras matrizes como a de adjacência e a Laplaciana normalizada. É uma das secções nucleares deste trabalho, dado que caracteriza a matriz sobre a qual incide o estudo que se apresenta nesta tese. Ainda neste terceiro capítulo define-se o *spread* de Randić e apresentam-se minorantes e majorantes para esse invariante espectral. Na última secção desse terceiro capítulo, apresentam-se estudos computacionais para avaliar o grau de aproximação ao *spread* de Randić de alguns dos minorantes e majorantes estudados para esse invariante, nas classes dos grafos bipartidos completos, dos ciclos e de grafos da coleção *Second DIMACS Implementation*.

No penúltimo capítulo é estudado o espectro e espectro de Randić de grafos *caterpillar* e são apresentados majorantes para a energia e para a energia de Randić dessa classe de grafos. Na Secção 4.5 apresentam-se estudos computacionais para averiguar o grau de aproximação de alguns desses majorantes. Neste capítulo, os grafos *caterpillar* são apresentados como grafos com elevada importância na Química matemática. A esse propósito, representou-se um *caterpillar* (associado a um sistema aromático)⁶ na capa desta tese, como referência às aplicações da teoria dos grafos na Química matemática. Grande parte

⁶A imagem do *caterpillar* foi criada no software Jmol, versão 13.0 (software para representar estruturas químicas em 3D).

das ideias deste capítulo surge como aplicação de propriedades do espectro e do *spread* de Randić do *H-join* de grafos.

Por fim, no capítulo cinco, são apresentadas algumas conclusões que resultam do trabalho desenvolvido.

Capítulo 2

Notações, Conceitos e Resultados

Preliminares

Nesta secção introduzem-se as notações e definições utilizadas ao longo da tese. Para além disso, apresentam-se os principais resultados necessários para o seu desenvolvimento, já existentes na literatura. As principais referências consultadas foram [12, 18, 22, 23, 25, 57, 58, 69, 71], com particular interesse sobre [23] e [25]. Sempre que se trate de um conceito de natureza mais específica, as referências consultadas são escritas no texto junto à informação correspondente.

Este segundo capítulo inicia com a apresentação de definições, notações e resultados gerais da teoria dos grafos e, seguidamente, da teoria das matrizes. No final do capítulo estão resultados que envolvem matrizes associadas a grafos.

Ao longo deste trabalho, a menos que se estabeleçam condições distintas, considera-se que os grafos são *grafos simples* (ou seja sem arestas paralelas e sem lacetes), não orientados, com n vértices e m arestas.

O conjunto, finito, de vértices é denotado por $V(G)$, com $V(G) \neq \emptyset$. Denotam-se

os vértices de G por v_1, v_2, \dots, v_n ou, simplifcadamente, por $1, 2, \dots, n$. O conjunto das *arestas* representa-se por $E(G)$ onde cada aresta é um par, não ordenado, de vértices distintos de $V(G)$. Simplifcadamente escreve-se $G = (V(G), E(G))$.

Se o grafo G tiver n vértices diz-se que é um grafo de *ordem* n e se tiver m arestas diz-se que é um grafo de *dimensão* m . Nesse caso, G é um (n, m) -grafo.

Se $a \in E(G)$ é uma aresta que liga os vértices i e j , então diz-se que os *vértices* i e j são *adjacentes* e escreve-se $a = ij$ ou $i \sim j$. Nesse caso, a *aresta* ij diz-se *incidente* nos vértices i e j que são, então, os *extremos da aresta*. Se os vértices i e j não são adjacentes escreve-se $i \not\sim j$.

O conjunto $N_G(i) = N_i = \{j \in V(G) : ij \in E(G)\}$ define-se como sendo o *conjunto de vizinhos do vértice* $i \in V(G)$ e a sua cardinalidade designa-se por *grau do vértice* i , denotando-se por d_i . Um *vértice isolado* é um vértice de grau zero. O maior grau dos vértices do grafo G denota-se por $\Delta(G)$ enquanto o menor grau denota-se por $\delta(G)$ (Δ e δ , respetivamente, se não surgirem dúvidas quanto ao grafo em causa).

Um *grafo é regular* se todos os seus vértices têm o mesmo grau. Mais especificamente, diz-se um *grafo p -regular* se todos os seus vértices têm grau igual a p , $p \geq 0$.

Um grafo onde qualquer par de vértices distintos é adjacente é chamado *grafo completo* e denotado por K_n , onde n é o número de vértices. Observe-se que K_n é um grafo $(n - 1)$ -regular.

O *complementar* de um grafo G , que se representa por \overline{G} , é um grafo com o mesmo conjunto de vértices de G no qual dois vértices são adjacentes se e só se não são adjacentes em G .

Um *grafo* G diz-se *bipartido* se existe uma partição do seu conjunto de vértices em dois conjuntos X e Y tal que não existem arestas entre qualquer par de vértices de X nem entre qualquer par de vértices de Y (ou seja, cada aresta de G tem um extremo em

X e outro em Y). Um grafo bipartido tal que $\forall x \in X, \forall y \in Y, xy \in E(G)$ designa-se por *grafo bipartido completo* e denota-se por $K_{r,s}$ se o cardinal de X for igual a r , $\#X = r$, e o de Y for igual a s , $\#Y = s$.

Dado um grafo G , designa-se por *passeio* em G toda a sequência (não vazia):

$$P = v_0 e_1 v_1 e_2 \dots e_k v_k,$$

tal que $v_0, v_1, \dots, v_k \in V(G)$, $e_1, e_2, \dots, e_k \in E(G)$ e os vértices v_{i-1} e v_i são vértices extremos da aresta e_i , para $i \in \{1, \dots, k\}$. O vértice v_0 designa-se por vértice inicial, o vértice v_k designa-se por vértice final e os vértices v_1, \dots, v_{k-1} designam-se por vértices intermédios do passeio P . Neste caso, também se diz que P é um passeio entre os vértices v_0 e v_k . Se em P todas as arestas são distintas então o passeio P designa-se por *trajeto* e se, adicionalmente, todos os vértices são distintos, o passeio P designa-se por *caminho*.

Designa-se por *ciclo* um caminho fechado. Representa-se por C_n um ciclo com n vértices .

Um *grafo* diz-se *conexo* se entre cada par de vértices existe um caminho que os une. Caso contrário, diz-se *não conexo* ou *desconexo*.

Uma *árvore* é um grafo conexo sem ciclos e uma família de árvores é designada por *floresta*. Uma floresta é sempre um grafo bipartido.

Para $r \geq 0$, uma *estrela* com $r + 1$ vértices, S_{r+1} , é uma árvore com um vértice central de grau r e os restantes r vértices são pendentos (ou seja, vértices de grau igual a 1).

Dois grafos G_1 e G_2 com conjuntos de vértices, respetivamente, $V_1(G)$ e $V_2(G)$ dizem-se *isomorfos* e escreve-se $G_1 \cong G_2$, se existir uma bijeção entre $V_1(G)$ e $V_2(G)$ que preserva as relações de adjacência dos vértices ou seja, se quaisquer dois vértices são adjacentes em G_1 , então as respetivas imagens pela bijeção também são adjacentes em

G_2 .

Dados dois grafos G_1 e G_2 , $G_1 \cup G_2$ representa a *união* de G_1 com G_2 com $G_1 \cup G_2 = (V(G_1) \cup V(G_2), E(G_1) \cup E(G_2))$. A *interseção* de G_1 com G_2 é denotada por $G_1 \cap G_2$ com $G_1 \cap G_2 = (V(G_1) \cap V(G_2), E(G_1) \cap E(G_2))$. Um grafo G é uma *união disjunta* de grafos se é obtido pela união disjunta dos conjuntos de vértices e pela união disjunta dos conjuntos das arestas desses grafos.

Dados dois grafos G e H , H é um *subgrafo* de G ou G é *supergrafo* de H se $V(H) \subseteq V(G)$ e $E(H) \subseteq E(G)$. Um *subgrafo* (de G) *induzido* por um subconjunto do conjunto de vértices $B \subseteq V(G)$, denota-se por $G[B]$ e é o subgrafo obtido de G tal que $V(G[B]) = B$ e $E(G[B]) = \{ij : i, j \in B \wedge ij \in E(G)\}$. Dado um grafo G , dois vértices $i, j \in V(G)$ dizem-se *conexos* se existe um caminho em G que os une. A relação de conexidade entre vértices é uma relação de equivalência sobre o conjunto dos vértices $V(G)$. Supondo que $V(G)$ se parte nas classes de equivalência V_1, V_2, \dots, V_k , designa-se por *componente conexa* (ou, simplesmente, *componente*) de G cada um dos subgrafos induzidos $G[V_1], G[V_2], \dots, G[V_k]$. Observe-se que desta forma, dois vértices são conexos se e só se pertencem a uma mesma componente.

Um *caterpillar* é uma árvore de ordem $n \geq 5$ (observe-se que uma árvore em que $n < 5$ é um caminho ou uma estrela) tal que se todos os vértices pendentes forem removidos, obtém-se um caminho com pelo menos dois vértices. Em particular, o *caterpillar* $T(q_1, \dots, q_r)$ é obtido a partir do caminho P_r , com $r \geq 2$, fazendo coincidir o vértice central da estrela S_{q_i+1} , $i \in \{1, \dots, r\}$ com o i -ésimo vértice do caminho P_r . Nestas condições, a ordem do *caterpillar* $T(q_1, \dots, q_r)$ é $n = r + q_1 + \dots + q_r$. O exemplo seguinte apresenta um *caterpillar* $T(q_1, q_2, q_3)$, com $q_1 = 2$, $q_2 = 1$ e $q_3 = 3$, obtido a partir do caminho P_3 , fazendo coincidir o vértice central da estrela S_{q_i+1} , $i \in \{1, 2, 3\}$ com o i -ésimo vértice do caminho P_3 :

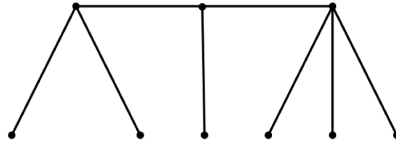


Figura 2.1: $G = T(2, 1, 3)$

Dados dois grafos G_1 e G_2 com conjuntos de vértices disjuntos, o *join* desses grafos, denotado por $G_1 \vee G_2$, é o grafo G tal que $V(G) = V(G_1) \cup V(G_2)$ e $E(G) = E(G_1) \cup E(G_2) \cup \{ij : i \in V(G_1), j \in V(G_2)\}$, [55]. Desta forma, o *join* de grafos é um caso particular do *H-join* de grafos (ou composição generalizada de grafos), operação entre grafos definida de seguida, [13, 81]. A operação de *H-join* de grafos já tinha sido definida em 1974 por Allen Schwenk, embora com uma designação distinta, [81]. De facto, esse autor generalizou a operação de *join* de grafos, apresentando a chamada *composição generalizada* de grafos, denotada por $H[G_1, \dots, G_k]$, onde H é um grafo arbitrário de ordem k .

Considere-se uma família de k grafos, $\mathcal{F} = \{G_1, \dots, G_k\}$, onde cada grafo G_i tem ordem n_i , para $i \in \{1, \dots, k\}$ e um grafo H tal que $V(H) = \{v_1, \dots, v_k\}$. Cada vértice $v_i \in V(H)$ é associado ao grafo $G_i \in \mathcal{F}$. O *H-join* de G_1, \dots, G_k é o grafo $G = H[G_1, \dots, G_k]$ tal que

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

e

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

Considere-se o seguinte exemplo onde $\mathcal{F} = \{G_1, G_2, G_3\}$ com $G_1 = C_4$, $G_2 = P_2$, $G_3 = C_3$ e $G = H[C_4, P_2, C_3]$ onde $H = P_3$. Nestas condições, $G = H[C_4, P_2, C_3]$ é o grafo seguinte:

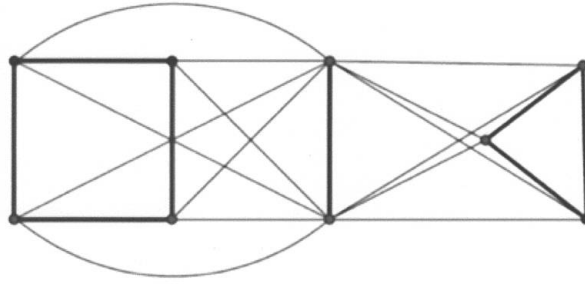


Figura 2.2: $G = H[C_4, P_2, C_3]$

De facto, quando $H = P_2$, $H[G_1, G_2]$ corresponde ao *join* de G_1 e G_2 já definido.

O *grafo linha* de um grafo G é o grafo cujos vértices são as arestas de G e onde dois vértices são adjacentes se e só se as arestas correspondentes em G têm um vértice em comum.

Dado um subconjunto finito S de elementos em \mathbb{R} , representa-se por $\max S$ e $\min S$ o máximo e o mínimo de S , respetivamente.

No desenvolvimento que se segue, I_n representa a matriz *identidade* de ordem n , $\mathbf{e}_k \in \mathbb{R}^{k \times 1}$ o vetor de ordem k com todas as entradas iguais a 1 e $\mathbf{O}_{m \times n}$ a matriz *nula* com m linhas e n colunas. Quando não há dúvidas quanto às respetivas dimensões, a matriz identidade pode ser representada simplesmente por \mathbf{I} , o vetor com todas as entradas iguais a 1 por \mathbf{e} e a matriz nula por \mathbf{O} .

Como habitualmente, $\mathbf{S}^T \in \mathbb{C}^{n \times m}$ representa a matriz *transposta* da matriz $\mathbf{S} \in \mathbb{C}^{m \times n}$ e $\mathbf{S}^* \in \mathbb{C}^{n \times m}$ a matriz *transconjugada* de \mathbf{S} (matriz transposta da conjugada de \mathbf{S}).

Se $\mathbf{S} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ é uma matriz diagonal, escreve-se $\mathbf{S} = \text{diag}(s_1, \dots, s_n)$, onde s_1, \dots, s_n são as entradas da diagonal principal de \mathbf{S} .

Uma matriz $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ é *normal* se $\mathbf{M}^* \mathbf{M} = \mathbf{M} \mathbf{M}^*$, [57]. Observe-se que qualquer matriz simétrica com entradas reais é uma matriz Hermítica (matriz igual à sua transconjugada) e, portanto, uma matriz normal. Por outro lado, uma matriz é normal se e só se é

unitariamente diagonalizável¹, [57]. Assim, qualquer matriz simétrica com entradas reais é uma matriz diagonalizável.

O *espectro* de $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ é o conjunto dos valores próprios de \mathbf{M} e denota-se por $\sigma(\mathbf{M})$ enquanto a multiplicidade (algébrica), s , de um valor próprio λ , no espectro, denota-se por $\lambda^{(s)}$. Quando a multiplicidade de um valor próprio é igual a 1, diz-se que o *valor próprio é simples*. Se $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ é uma matriz Hermítica, $\lambda_i(\mathbf{M})$ denota o i -ésimo maior valor próprio de \mathbf{M} .

O *raio espectral* de $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ é o máximo do valor absoluto dos seus valores próprios e representa-se por $\rho(\mathbf{M})$ enquanto o *determinante* de \mathbf{M} se denota por $\det(\mathbf{M})$. Se \mathbf{M} é uma matriz quadrada, $tr(\mathbf{M})$ representa o *traço* de \mathbf{M} , ou seja a soma das entradas da diagonal principal da matriz. Adicionalmente, se \mathbf{M} é simétrica, o seu traço é igual à soma dos seus valores próprios.

Um vetor $x \in \mathbb{R}^{n \times 1}$, com $x \neq 0$, que satisfaz a relação $\mathbf{M}x = \lambda x$ é designado por *vetor próprio de \mathbf{M}* associado ao valor próprio λ e, nesse caso, o par (λ, x) diz-se um *par próprio* de \mathbf{M} .

Se $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ é uma matriz Hermítica então, por [57], sabe-se que

$$\lambda_1(\mathbf{M}) = \max_{x \neq 0} \frac{x^* \mathbf{M} x}{x^* x} \quad \text{e} \quad \lambda_n(\mathbf{M}) = \min_{x \neq 0} \frac{x^* \mathbf{M} x}{x^* x}$$

ou, de forma equivalente,

$$\lambda_1(\mathbf{M}) = \max_{\|x\|=1} x^* \mathbf{M} x \quad \text{e} \quad \lambda_n(\mathbf{M}) = \min_{\|x\|=1} x^* \mathbf{M} x$$

onde x é um vetor unitário qualquer de dimensões adequadas e $\|x\| = \sqrt{x^* x}$ representa

¹Uma matriz $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ é *unitariamente diagonalizável* se existe uma matriz unitária $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{n \times n}$, ou seja uma matriz \mathbf{U} que verifica $\mathbf{U}^* \mathbf{U} = \mathbf{U} \mathbf{U}^* = \mathbf{I}_n$, tal que $\mathbf{U}^* \mathbf{M} \mathbf{U} = \mathbf{B}$ onde $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ é uma matriz diagonal, [57].

a norma euclidiana de x . Consequentemente,

$$\lambda_n(\mathbf{M}) \leq \frac{x^* \mathbf{M} x}{x^* x} \leq \lambda_1(\mathbf{M}), \quad \forall x \neq 0. \quad (2.1)$$

O quociente $\frac{x^* \mathbf{M} x}{x^* x}$ é designado por *Quociente de Rayleigh* e foi estudado pelo matemático e físico John Strutt (1842–1919) conhecido mais tarde, em 1873, como Baron Rayleigh. Prova-se que se x for uma boa aproximação para um vetor próprio de \mathbf{M} então $\frac{x^* \mathbf{M} x}{x^* x}$ é, também, uma boa aproximação para o valor próprio correspondente, [69]. Em particular, $\frac{x^* \mathbf{M} x}{x^* x}$ coincide com $\lambda_1(\mathbf{M})$ (respetivamente com $\lambda_n(\mathbf{M})$) se e só se $(\lambda_1(\mathbf{M}), x)$ é um par próprio de \mathbf{M} (respetivamente $(\lambda_n(\mathbf{M}), x)$ é um par próprio de \mathbf{M}).

Em 1931 o matemático soviético Semyon Geršgorin introduziu o que atualmente se designa por *círculos de Geršgorin* que contêm os valores próprios de uma matriz quadrada com entradas em \mathbb{C} (de modo equivalente, qualquer valor próprio da matriz pertence a pelo menos um dos seus discos de Geršgorin). Dada uma matriz $\mathbf{M} = [m_{ij}] \in \mathbb{C}^{n \times n}$, os valores próprios de \mathbf{M} estão contidos na união dos n círculos definidos da seguinte forma, [85]:

$$|z - m_{ii}| \leq r_i, \quad \text{onde } r_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |m_{ij}|, \quad \text{para } i \in \{1, \dots, n\}.$$

O Teorema de Entrelaçamento de Cauchy, apresentado de seguida, é um dos resultados clássicos da teoria das matrizes que permite relacionar os valores próprios de uma matriz Hermítica com os valores próprios de qualquer uma das suas submatrizes principais.

Teorema 2.0.1. [23] *Seja $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ uma matriz Hermítica com valores próprios $\lambda_n(\mathbf{M}) \leq \dots \leq \lambda_2(\mathbf{M}) \leq \lambda_1(\mathbf{M})$ e $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{m \times m}$ uma das suas submatrizes principais com valores próprios $\lambda_m(\mathbf{B}) \leq \dots \leq \lambda_2(\mathbf{B}) \leq \lambda_1(\mathbf{B})$. Então acontecem as seguintes desigualdades:*

$$\lambda_{n-m+i}(\mathbf{M}) \leq \lambda_i(\mathbf{B}) \leq \lambda_i(\mathbf{M}), \quad \forall i \in \{1, \dots, m\}.$$

Uma função $\|\cdot\| : \mathbb{C}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma *norma matricial* se, para quaisquer matrizes

$\mathbf{M}, \mathbf{C} \in \mathbb{C}^{n \times n}$, são satisfeitos os seguintes axiomas:

- Axioma da não negatividade

$$\|\mathbf{M}\| \geq 0;$$

- Axioma da positividade

$$\|\mathbf{M}\| = 0 \text{ se e só se } \mathbf{M} = \mathbf{O};$$

- Axioma da homogeneidade

$$\|c\mathbf{M}\| = |c| \cdot \|\mathbf{M}\|, \quad \forall c \in \mathbb{C};$$

- Axioma da desigualdade triangular

$$\|\mathbf{M} + \mathbf{C}\| \leq \|\mathbf{M}\| + \|\mathbf{C}\|;$$

- Axioma da submultiplicidade

$$\|\mathbf{MC}\| \leq \|\mathbf{M}\| \cdot \|\mathbf{C}\|.$$

Dada uma matriz $\mathbf{M} = [m_{ij}] \in \mathbb{C}^{n \times n}$, definem-se as *normas* l_p de \mathbf{M} , para $p = 1, 2$ da seguinte forma:

$$\|\mathbf{M}\|_p = \left(\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n |m_{ij}|^p \right)^{\frac{1}{p}}.$$

A norma l_2 designa-se por *norma de Frobenius de \mathbf{M}* e denota-se, também, por $\|\mathbf{M}\|$. Observe-se que

$$\|\mathbf{M}\|_2 = \|\mathbf{M}\| = \sqrt{\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n |m_{ij}|^2} = \sqrt{\text{tr}(\mathbf{M}^* \mathbf{M})}.$$

Proposição 2.0.2. Dada uma matriz $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $\rho(\mathbf{M}) \leq \|\mathbf{M}\|$, onde $\|\mathbf{M}\|$ representa uma qualquer norma de \mathbf{M} . Em particular, $\rho(\mathbf{M}) \leq |\mathbf{M}|$.

O *spread* de uma matriz $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ representa-se por $s(\mathbf{M})$ e está definido da seguinte forma:

$$s(\mathbf{M}) = \max\{|\lambda_i(\mathbf{M}) - \lambda_j(\mathbf{M})|, i, j \in \{1, \dots, n\}\}, \quad (2.2)$$

onde o máximo é tomado sobre todos os pares de valores próprios distintos de \mathbf{M} , [72].

Uma *matriz de permutação* $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz que se obtém da matriz identidade por permutação de linhas ou de colunas. Uma matriz de permutação \mathbf{P} é ortogonal, ou seja, $\mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P}^T$. Duas matrizes $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{C}^{n \times m}$ dizem-se *semelhantes por permutação* ou *permutacionalmente semelhantes* se existir uma matriz de permutação $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tal que $\mathbf{B} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}$.

Uma matriz $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ é *reduzível* se ou $n = 1$ e \mathbf{M} é a matriz nula ou se $n \geq 2$ e existe uma matriz de permutação $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e um número inteiro r com $r \in \{1, \dots, n-1\}$ tal que

$$\mathbf{P}^T \mathbf{M} \mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{B} & \mathbf{C} \\ \mathbf{O} & \mathbf{D} \end{pmatrix}$$

onde $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{r \times r}$, $\mathbf{C} \in \mathbb{C}^{r \times (n-r)}$, $\mathbf{D} \in \mathbb{C}^{(n-r) \times (n-r)}$ e \mathbf{O} é uma matriz nula de dimensão adequada. Uma matriz \mathbf{M} é *irreduzível* se não for reduzível.

Dada uma matriz $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ irreduzível com raio espectral r e com exatamente h valores próprios de módulo igual a r então o número h é designado de *índice de imprimitividade* de \mathbf{M} ou *índice* de \mathbf{M} . Se $h = 1$, a matriz \mathbf{M} diz-se *primitiva*. Caso contrário, \mathbf{M} diz-se *imprimitiva* ou *cíclica*. Atualmente, existem diversos resultados que permitem verificar se determinadas matrizes são, ou não, imprimitivas, sem realizar o estudo dos seus espetros. Um deles, o designado *Teste de Frobenius*, mostra que o estudo das potências

de uma dada matriz não negativa (matriz com entradas não negativas) permite determinar se a matriz é, ou não, imprimitiva. O resultado garante que uma matriz não negativa $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é primitiva se e só se $\mathbf{M}^p > 0$, para algum $p > 0$, [69].

Em 1912, o matemático Georg Frobenius publicou um trabalho, [37], onde apresenta uma conexão importante entre as propriedades espectrais de uma matriz irredutível e a distribuição de entradas nulas nessa matriz. Em [71], Henryk Minc apresenta o resultado em causa dedicando uma secção do livro ao estudo de características espectrais de matrizes primitivas e imprimitivas. Apresenta-se, de seguida, a Forma de Frobenius de uma matriz irredutível.

Teorema 2.0.3. [71] (*Forma de Frobenius de uma matriz irredutível*) *Seja $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz não negativa e irredutível, com índice h , onde $h \geq 2$. Então, \mathbf{M} é uma matriz permutacionalmente semelhante a uma matriz \mathbf{F} da forma*

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{M}_{12} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{M}_{23} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \mathbf{M}_{(h-1)h} \\ \mathbf{M}_{h1} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

onde os blocos de zeros na diagonal principal são de dimensões quadradas.

A forma matricial apresentada em (2.3) associada a uma matriz irredutível e imprimitiva \mathbf{M} é designada por *Forma de Frobenius de \mathbf{M}* . Observe-se, então, que dada uma matriz $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ não negativa e irredutível, com índice $h \geq 2$, ou seja uma matriz imprimitiva, é possível garantir que existe uma matriz de permutação $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tal que

$$\mathbf{M} = \mathbf{P}^T \mathbf{F} \mathbf{P},$$

onde \mathbf{F} é uma matriz com a forma de (2.3). Em [71] refere-se que uma matriz simétrica

e imprimitiva tem índice igual a 2. Assim, tendo em conta a Forma de Frobenius para uma matriz não negativa e irredutível, apresentada no Teorema 2.0.3, se $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz simétrica e imprimitiva, é possível concluir que existe uma matriz de permutação $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tal que

$$\mathbf{M} = \mathbf{P}^T \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{M}_{12} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \mathbf{P}, \quad (2.4)$$

onde $\mathbf{M}_{21}^T = \mathbf{M}_{12}$.

Do trabalho de Georg Frobenius destaca-se, ainda, a teoria de Perron-Frobenius para uma matriz não negativa. Em 1907, Oskar Perron publica o seu estudo sobre o espectro de matrizes positivas (matrizes com entradas positivas) e, cinco anos mais tarde, Georg Frobenius estende esse estudo à classe das matrizes não negativas. Pela teoria de Perron-Frobenius para uma matriz não negativa $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é possível garantir que \mathbf{M} tem um valor próprio igual ao seu raio espectral que se designa por *raíz de Perron de \mathbf{M}* . Se, para além de não negativa, a matriz \mathbf{M} for irredutível, então a raíz de Perron de \mathbf{M} é um valor próprio simples com um vetor próprio correspondente positivo (vetor com todas as entradas positivas) e designado por *vetor de Perron de \mathbf{M}* .

Teorema 2.0.4. [25] *Seja $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz simétrica, irredutível e não negativa. Então $\lambda_1(\mathbf{M})$ é um valor próprio simples com um vetor próprio associado positivo. Para além disso,*

$$|\lambda| \leq \lambda_1(\mathbf{M}), \forall \lambda \in \sigma(\mathbf{M}).$$

Em 1974, Miroslav Fiedler apresentou, no seu artigo *Eigenvalues of Nonnegative Symmetric Matrices*, [34], diversos resultados sobre o espectro de matrizes simétricas não negativas. Um deles caracteriza o espectro de uma matriz simétrica construída em função de outras duas matrizes simétricas, relacionando-o com o espectro dessas duas matrizes.

Lema 2.0.5. *Seja $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ uma matriz simétrica com pares próprios (α_i, \mathbf{u}_i) , para $i \in$*

$\{1, \dots, m\}$, $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz também simétrica com pares próprios (β_i, \mathbf{v}_i) , para $i \in \{1, \dots, n\}$ e $\|\mathbf{u}_1\| = 1 = \|\mathbf{v}_1\|$ então, para qualquer μ , a matriz

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mu \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^T \\ \mu \mathbf{v}_1 \mathbf{u}_1^T & \mathbf{B} \end{pmatrix}$$

tem valores próprios $\alpha_2, \dots, \alpha_m, \beta_2, \dots, \beta_n, \gamma_1, \gamma_2$, onde γ_1 e γ_2 são valores próprios da matriz

$$\hat{\mathbf{C}} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \mu \\ \mu & \beta_1 \end{pmatrix}.$$

Como se verá mais à frente, os autores de [14] estenderam o lema anterior a mais do que dois blocos quadrados diagonais.

Uma matriz simétrica $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ associada a um grafo G denota-se por $\mathbf{M}(G)$ ou, simplesmente, por \mathbf{M} se não existirem dúvidas quanto ao grafo a que está associada essa matriz. Em teoria espectral dos grafos, uma das matrizes associada a um dado grafo mais estudada é a matriz de adjacência, assim designada porque traduz as relações de adjacência entre vértices no grafo respetivo. A *matriz de adjacência* de um grafo G , denotada por $\mathbf{A}(G) = [a_{ij}]$ ou, simplesmente, por \mathbf{A} , é uma matriz de ordem n , simétrica, cuja entrada (i, j) é igual a 1 se $ij \in E(G)$, e 0 caso contrário. Define-se *espectro de um grafo* G como o conjunto dos valores próprios da respetiva matriz de adjacência e representa-se por σ_G ou, simplifadamente, por σ . Assim, $\sigma_G = \sigma(\mathbf{A}(G)) = \sigma(\mathbf{A})$. Cada valor próprio de G com n vértices representa-se por $\lambda_i(G) = \lambda_i(\mathbf{A})$, $i \in \{1, \dots, n\}$. O espectro de algumas classes de grafos é conhecido. Por exemplo, se $G \cong K_n$ então o seu espectro é $\{n-1, (-1)^{(n-1)}\}$ e sempre que G for um grafo p -regular com n vértices, então p é um valor próprio de G e (p, \mathbf{e}_n) é um par próprio de $\mathbf{A}(G)$. Uma vez que as matrizes de adjacência de grafos simples não orientados são simétricas de ordem n então têm n valores próprios reais (contabilizadas, já, eventuais repetições) que se ordenam, usualmente, por $\lambda_n(G) \leq \dots \leq \lambda_2(G) \leq \lambda_1(G)$, [23]. O maior valor próprio de um grafo G ,

$\lambda_1(G)$, é habitualmente designado por *índice do grafo* G . Por outro lado, $\text{tr}(\mathbf{A}) = 0$ sempre que o grafo G não tem lacetes. Assim, $\lambda_1(G) + \lambda_2(G) + \dots + \lambda_n(G) = 0$. Sabe-se, também, que dado um grafo G , $-\Delta(G) \leq \lambda(G) \leq \Delta(G)$, qualquer que seja $\lambda(G) \in \sigma_G$.

O *spread* do grafo G , $s(G)$, é o *spread* da sua matriz de adjacência, [42]:

$$s(G) = s(\mathbf{A}) = \lambda_1(G) - \lambda_n(G).$$

Existem diversas propriedades de grafos que são refletidas em propriedades das matrizes de adjacência associadas (nomeadamente dos seus espetros) e vice-versa. Por exemplo, dado um grafo G , sabe-se que o valor da entrada na posição (i, j) de \mathbf{A}^k , a k -ésima potência de $\mathbf{A}(G)$ com $k \geq 1$, corresponde ao número de caminhos (distintos) de comprimento k existentes em G entre os vértices i e j . Existe, ainda, outro resultado conhecido que garante que um grafo com pelo menos uma aresta é bipartido se e só se os seus valores próprios são simetricamente distribuídos relativamente a zero. Como consequência, a matriz de adjacência de qualquer grafo bipartido G com pelo menos uma aresta, é sempre imprimitiva de índice 2, [71], dado que o maior valor próprio do grafo G é o simétrico do menor valor próprio de G . De forma mais geral, nessa classe de grafos, $\lambda_i(G)$ é o simétrico de $\lambda_{n+1-i}(G)$, $i \in \{1, \dots, n\}$. Sabe-se, também, que o estudo da irreduzibilidade da matriz de adjacência de um grafo G permite tirar conclusões sobre a conexidade de G . De facto, G é um grafo conexo se e só se $\mathbf{A}(G)$ é uma matriz irreduzível, [23, 79].

A *matriz Laplaciana* de um grafo G representa-se por $\mathbf{L}(G)$, simplificadamente \mathbf{L} , com $\mathbf{L}(G) = \mathbf{D}(G) - \mathbf{A}(G)$, onde $\mathbf{D}(G)$ é a matriz diagonal cujas entradas não nulas são iguais aos graus dos vértices respetivos. Sabe-se que a matriz Laplaciana é uma matriz semidefinida positiva, [23]. Com efeito, pelo resultado de Geršgorin, todos os seus valores próprios são não negativos. Para além disso, o menor valor próprio de $\mathbf{L}(G)$ é sempre igual a 0, com multiplicidade igual ou superior a 1 e o vetor próprio associado é o vetor

e, dado que $\mathbf{L}(G)\mathbf{e} = \mathbf{0}$. A multiplicidade do valor próprio 0 de $\mathbf{L}(G)$ é igual ao número de componentes do grafo G , [23].

Considere-se um grafo G com n vértices e que $\mathbf{D}(G)^{-1/2}$, simplificadaamente $\mathbf{D}^{-1/2}$, é a matriz diagonal cuja entrada (i, i) é não nula e igual a $d_i^{-1/2}$, $i \in \{1, \dots, n\}$. Observe-se que se G for um grafo sem vértices isolados, a matriz diagonal $\mathbf{D}(G)^{-1/2}$ está bem definida. A *matriz Laplaciana normalizada* de um grafo G sem vértices isolados é a matriz $\mathcal{L} = \mathcal{L}(G) = \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{L}(G) \mathbf{D}^{-1/2}$. Sabe-se, também, que a matriz Laplaciana normalizada é semidefinida positiva, [18], e que tem a mesma inércia² da matriz Laplaciana. Por isso, o menor valor próprio da matriz Laplaciana normalizada associada a um grafo sem vértices isolados é igual a 0. À semelhança de outras matrizes associadas a grafos, o espectro desta matriz tem sido estudado por diversos autores. Em [18], pode ser encontrado um estudo muito completo sobre as propriedades espectrais da matriz Laplaciana normalizada que são relacionadas com as propriedades do grafo respetivo.

A *matriz de Randić* de G , $\mathbf{R}(G)$ ou simplificadaamente \mathbf{R} , é uma matriz cuja definição foi motivada pela definição do Índice de Randić, como se verá mais à frente. Tendo em conta a definição, é possível concluir que $\mathbf{R}(G) = \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{A}(G) \mathbf{D}^{-1/2}$. Observe-se que esta matriz possui a mesma inércia que a matriz $\mathbf{A}(G)$, [18], e que, para além disso, $(1, \mathbf{D}^{1/2}\mathbf{e})$ é um par próprio de $\mathbf{R}(G)$, já que $\mathbf{R}(G)\mathbf{D}^{1/2}\mathbf{e} = \mathbf{D}^{1/2}\mathbf{e}$. Por outro lado, $\mathcal{L}(G) = \mathbf{I} - \mathbf{R}(G)$, o que permite concluir que $\lambda_1(\mathbf{R}(G)) = 1$, tendo em conta que, como já visto, 0 é o menor valor próprio de $\mathcal{L}(G)$.

Nos últimos anos têm surgido alguns estudos que envolvem a definição de *H-join* de grafos como forma de descrever o espectro de algumas matrizes. Por exemplo, em [13] é estudado o espectro da matriz de adjacência e da matriz Laplaciana associadas a grafos obtidos pelo *H-join* de famílias de grafos (regulares no caso do espectro da matriz de adjacência e arbitrários no caso do espectro da matriz Laplaciana) usando resultados que

²A *inércia* de uma matriz real e simétrica é o terno (ρ, ν, ζ) no qual ρ , ν , ζ são, respetivamente, o número de valores próprios positivos, negativos e nulos (contadas as respetivas multiplicidades) da matriz.

generalizam o Lema de Fiedler, Lema 2.0.5. A extensão desse lema permite o estudo do espectro de matrizes com mais do que dois blocos quadrados diagonais.

Teorema 2.0.6. [13] Para $j \in \{1, \dots, k\}$, seja \mathbf{M}_j uma matriz simétrica de ordem m_j , com pares próprios $(\alpha_{rj}, \mathbf{u}_{rj})$, $\forall r \in I_j = \{1, \dots, m_j\}$. Suponha-se que para cada j o conjunto de vetores próprios $\{\mathbf{u}_{rj}, r \in I_j\}$ é ortonormado. Considere-se

$$\hat{\rho} = (\rho_{12}, \rho_{13}, \dots, \rho_{1k}, \rho_{23}, \dots, \rho_{2k}, \dots, \rho_{(k-1)k})$$

um vetor de dimensão $\frac{k(k-1)}{2}$ e $\hat{\alpha} = (\alpha_{i_11}, \dots, \alpha_{i_kk})$ um vetor de dimensão k onde cada α_{i_jj} é escolhido a partir dos valores próprios $\{\alpha_{1j}, \dots, \alpha_{m_jj}\}$, com $j \in \{1, \dots, k\}$. Então, a matriz

$$\mathbf{C}_{\hat{\alpha}}(\hat{\rho}) = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_1 & \rho_{12}\mathbf{u}_{i_11}\mathbf{u}_{i_22}^T & \cdots & \rho_{1k}\mathbf{u}_{i_11}\mathbf{u}_{i_kk}^T \\ \rho_{12}\mathbf{u}_{i_22}\mathbf{u}_{i_11}^T & \mathbf{M}_2 & \cdots & \rho_{2k}\mathbf{u}_{i_22}\mathbf{u}_{i_kk}^T \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{1k}\mathbf{u}_{i_kk}\mathbf{u}_{i_11}^T & \rho_{2k}\mathbf{u}_{i_kk}\mathbf{u}_{i_22}^T & \cdots & \mathbf{M}_k \end{pmatrix}$$

tem o seguinte espectro

$$\left(\bigcup_{j=1}^k \{\alpha_{1j}, \dots, \alpha_{m_jj}\} \setminus \{\alpha_{i_jj}\} \right) \cup \{\gamma_1, \dots, \gamma_k\},$$

onde os valores $\gamma_1, \dots, \gamma_k$ são valores próprios da matriz

$$\tilde{\mathbf{C}}_{\hat{\alpha}}(\hat{\rho}) = \begin{pmatrix} \alpha_{i_11} & \rho_{12} & \cdots & \rho_{1(k-1)} & \rho_{1k} \\ \rho_{12} & \alpha_{i_22} & \cdots & \rho_{2(k-1)} & \rho_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \rho_{1k} & \rho_{2k} & \cdots & \cdots & \alpha_{i_kk} \end{pmatrix}.$$

O resultado seguinte surge como aplicação desta extensão do Lema de Fiedler e permite, então, descrever o espectro da matriz de adjacência de grafos obtidos pelo H -join de famílias de grafos regulares. Note-se que em [81] o espectro do grafo $H[G_1, \dots, G_k]$,

quando G_i , $i \in \{1, \dots, k\}$, são grafos regulares já tinha sido apresentado. No entanto, o mesmo resultado é provado em [13] usando uma abordagem diferente.

Considere-se $G = H[G_1, \dots, G_k]$ onde H é um grafo com k vértices não isolados e G_1, \dots, G_k é uma seqüência de k grafos p_j -regular, disjuntos, de ordens, respetivamente, n_j , $j \in \{1, \dots, k\}$. Para $j \in \{1, \dots, k\}$, A_j representa a matriz de adjacência de G_j . Seja $A(H) = [\delta_{ij}]$ a matriz de adjacência de H , de ordem k , e defina-se a seguinte matriz

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} p_1 & \delta_{12}\sqrt{n_1n_2} & \dots & \delta_{1k}\sqrt{n_1n_k} \\ \delta_{12}\sqrt{n_1n_2} & p_2 & \dots & \delta_{2k}\sqrt{n_2n_k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \delta_{1k}\sqrt{n_1n_k} & \delta_{2k}\sqrt{n_2n_k} & \dots & p_k \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Teorema 2.0.7. [13] Para $j \in \{1, \dots, k\}$, seja G_j um grafo p_j -regular de ordem n_j e com espectro σ_{G_j} . Se $G = H[G_1, \dots, G_k]$ e \hat{C} está definida como em (2.5), então

$$\sigma_G = \sigma(\hat{C}) \cup \left(\bigcup_{j=1}^k (\sigma_{G_j} \setminus \{p_j\}) \right).$$

Vladimir Nikiforov apresenta, em [74], o conceito de energia de uma matriz complexa da forma que se apresenta de seguida, alargando o conceito de energia da matriz de adjacência de um grafo G que corresponde à energia de G , $\mathcal{E}(G)$.

Definição 2.0.8. Seja $M \in \mathbb{C}^{n \times m}$ uma matriz com valores singulares (raízes quadradas dos valores próprios de MM^*) $s_q(M) \leq \dots \leq s_1(M)$. Então a **energia de M** , $\mathcal{E}(M)$, define-se da seguinte forma:

$$\mathcal{E}(M) = s_1(M) + \dots + s_q(M),$$

com $q \leq \min\{n, m\}$.

Observe-se que se M for uma matriz real e simétrica então os valores singulares

de \mathbf{M} são iguais aos valores absolutos dos valores próprios de \mathbf{M} . Em particular, quando \mathbf{M} é a matriz de Randić associada a um grafo G então a energia de \mathbf{M} que se designa por *energia de Randić* é a soma dos valores absolutos dos valores próprios de $\mathbf{R}(G)$ e representa-se por $\mathcal{E}_{\mathbf{R}}(G)$, [51].

Capítulo 3

Matriz de Randić e *Spread* de Randić

Este capítulo apresenta o Índice de Randić e a matriz de Randić, matriz que é construída tendo em conta a definição do índice referido. Para além disso, é apresentado o conceito de *spread* de Randić, novo na literatura, bem como alguns majorantes e minorantes para esse invariante espectral. A eficácia na aproximação ao *spread* de Randić de alguns desses majorantes e minorantes é estudada na última secção deste capítulo, a partir de testes computacionais.

Os novos conceitos e resultados apresentados neste capítulo estão publicados em [40, 41].

3.1 Índice de Randić e Matriz de Randić

O Índice de Randić é um invariante espectral de grafos com diversas aplicações na Química. O seu nome deve-se ao químico sérvio Milan Randić nascido em 1930 e um dos que mais se destacou no desenvolvimento das aplicações da Matemática à Química, ou seja na *Química matemática*.

Em Química, algumas propriedades das moléculas dependem da sua forma molecu-

lar e variam com regularidade dentro de uma série de componentes homólogas. O grau de ramificação de uma estrutura molecular é um fator crítico. Os pontos de ebulição de hidrocarbonetos e os volumes ou tempos de retenção obtidos de experiências cromatográficas são situações típicas desse tipo de relação. A magnitude da interação está diretamente relacionada com o grau de ramificações assim como o tamanho das moléculas. Desta forma, conhecer a topologia molecular permite caracterizar algumas destas propriedades experimentais. Em 1975, Milan Randić criou um *descriptor molecular*¹, mais concretamente um *índice topológico*, que cumpria as condições apropriadas para medir a extensão da ramificação da estrutura do átomo de carbono nas moléculas de hidrocarbonetos saturados², [76]. Milan Randić designou esse índice, inicialmente, por *Índice de ramificação* tendo ficado conhecido, mais tarde, como *Índice de conexidade* ou *Índice de Randić*, [76]. Dado um grafo molecular G , Milan Randić definiu o Índice de Randić³ da seguinte forma:

$$\chi = \chi(G) = \sum_{ij \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}}. \quad (3.1)$$

Mais tarde, em 1998, Béla Bollobás e Paul Erdős generalizaram esse índice e apresentaram o *Índice de Randić Generalizado*, [6], da forma:

$$R_\alpha(G) = \sum_{ij \in E(G)} (d_i d_j)^\alpha, \text{ para } \alpha \in \mathbb{R}. \quad (3.2)$$

Observe-se que $R_{-\frac{1}{2}}(G) = \chi$.

Milan Randić reconheceu, então, a existência de uma correlação forte entre o Índice

¹De uma forma geral, um *descriptor molecular* é definido, em [84], por Roberto Todeschini e Viviana Consonni da seguinte forma

Um descriptor molecular é o resultado final de uma lógica e de um procedimento matemático que transforma a informação química codificada dentro de uma representação simbólica de uma molécula num número útil ou o resultado de alguma experiência padronizada.

²Hidrocarbonetos cujos átomos de carbono estão ligados apenas com ligações simples.

³Na literatura contemporânea de Matemática e Química matemática, o Índice de Randić é usualmente denotado por R , [39, 46, 50, 53, 64, 65, 67]. Uma vez que neste trabalho essa notação está reservada para a matriz de Randić, retoma-se a notação original, χ , [76].

de Randić e determinadas propriedades físico-químicas dos alcanos⁴ como, por exemplo, pontos de ebulição, tempos de retenção cromatográfica, entalpias de formação ou solubilidade em água o que ajudou a justificar estudos mais aprofundados sobre esse invariante. Por exemplo, pela representação gráfica seguinte, é possível analisar a correlação positiva forte que existe entre o ponto de ebulição (bp) de um conjunto de alcanos e o Índice de Randić dos grafos moleculares associados, [65]:

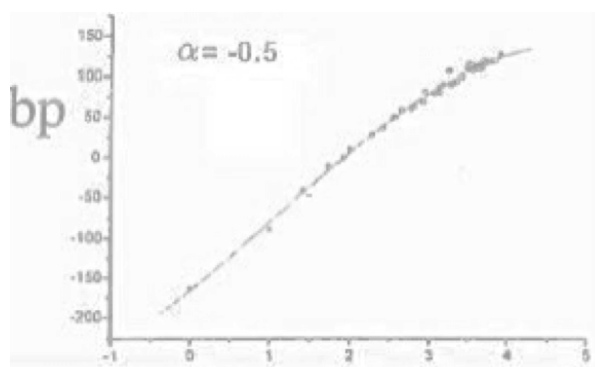


Figura 3.1: Correlação entre o ponto de ebulição (bp) de um conjunto de alcanos e o Índice de Randić dos grafos moleculares associados (figura retirada de [65]).

Em [54], pode ler-se que o Índice de Randić, juntamente com as suas generalizações, é considerado o descritor molecular mais usado em aplicações ao nível da Química orgânica, da Farmacologia ou da Medicina. Em particular, e como já referido antes, o Índice de Randić tem aplicações ao nível da previsão de cancro colo-retal e da mama. Em [50, 62, 63, 64, 65, 67, 77] podem ser consultadas algumas das aplicações químicas e farmacológicas do Índice de Randić.

Desde a segunda metade dos anos 90 que o estudo matemático do Índice de Randić e do Índice de Randić Generalizado ganharam relevância. De facto, desde essa altura que foram publicados diversos estudos sobre esses conceitos, a maior parte dos quais relacionados com a apresentação de majorantes e minorantes.

Definido o Índice de Randić como em (3.1), seria adequado construir a chamada

⁴Representantes da classe dos hidrocarbonetos saturados que apresentam uma cadeia aberta, acíclica, formada por ligações simples entre os átomos de carbono da cadeia.

matriz de Randić da forma que se apresenta de seguida. A definição foi proposta em 2010 por Burcu Bozkurt, Dilek Güngör, Ivan Gutman e Sinan Çevik, em [9].

Definição 3.1.1. [9] *Seja G um grafo simples. A matriz de Randić associada a G define-se como $\mathbf{R} = \mathbf{R}(G) = [r_{ij}]$, onde $r_{ij} = \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}}$ se $ij \in E(G)$ e $r_{ij} = 0$ caso contrário.*

Observe-se que dado um grafo G simples,

$$\|\mathbf{R}(G)\|_1 = 2\chi(G)$$

ou seja, a soma das entradas da matriz de Randić é igual ao dobro do Índice de Randić.

Tendo em conta a definição da matriz de Randić, é possível concluir que quando G é um grafo simples com n vértices e sem vértices isolados,

$$\mathbf{R}(G) = \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{A}(G) \mathbf{D}^{-1/2} \quad (3.3)$$

onde $\mathbf{D}^{-1/2}$ é a matriz diagonal cuja entrada (i, i) é não nula e igual a $d_i^{-1/2}$, $i \in \{1, \dots, n\}$ e $\mathbf{A}(G)$ é a matriz de adjacência de G . Apesar da matriz de Randić estar definida para qualquer grafo simples, a relação definida em (3.3) só é válida para grafos sem vértices isolados. Na literatura de teoria dos grafos, existem alguns autores que consideram a matriz $\mathbf{D}^{-1/2}$ bem definida para grafos com vértices isolados, uma vez que definem, nessa matriz diagonal, as entradas da diagonal principal correspondentes aos vértices isolados iguais a zero, [18, 23]. Nessa perspetiva, é óbvio que a relação apresentada em (3.3) ocorre sem quaisquer restrições. Por simplicidade, são considerados grafos sem vértices isolados neste trabalho, até que se diga algo em contrário.

Curiosamente, a história atual da matriz de Randić é praticamente independente da definição do Índice de Randić. Em 1980 a matriz de Randić associada a um grafo G surge no livro de Dragoš Cvetković, Michael Doob e Horst Sachs, em [23], como $\mathbf{R}(G) = \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{A}(G) \mathbf{D}^{-1/2}$ e, portanto, sem qualquer nome e sem qualquer referência ao Índice de

Randić⁵. Passados 25 anos, a matriz foi usada e apresentada em [78] como na Definição 3.1.1, mas designada por *matriz de adjacência pesada*. Só em 2010 é que Burcu Bozkurt, Dilek Güngör, Ivan Gutman e Sinan Çevik propõem que a matriz se designe por matriz de Randić, [9].

3.2 Espetro e *Spread* de Randić

Os valores próprios da matriz de Randić associada a um dado grafo G são designados por *valores próprios de Randić de G* e o espectro da matriz de Randić associada a um grafo G é designado por *espectro de Randić de G* .

É possível estabelecer algumas relações entre a matriz de Randić e outras matrizes, como a de adjacência ou a Laplaciana normalizada, que justificam alguns resultados sobre os espectros dessas matrizes.

A matriz Laplaciana associada a um grafo G é uma matriz semidefinida positiva e, por isso, todos os seus valores próprios são não negativos, [57]. Por outro lado, $(0, \mathbf{e})$ é um par próprio da matriz, dado que $\mathbf{L}(G)\mathbf{e} = \mathbf{0}$ e, por isso, 0 é o menor valor próprio da matriz. Uma vez que a matriz Laplaciana normalizada tem a mesma inércia da matriz Laplaciana, [56], então a matriz Laplaciana normalizada é também semidefinida positiva e 0 é também o menor valor próprio da matriz associado ao vetor positivo $\mathbf{D}^{1/2}\mathbf{e}$.

Tendo em conta a relação apresentada em (3.3) e a definição da matriz Laplaciana normalizada, $\mathcal{L}(G) = \mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{L}(G)\mathbf{D}^{-1/2}$, onde $\mathbf{L}(G)$ é a matriz Laplaciana, obtém-se a seguinte relação entre a matriz Laplaciana normalizada e a matriz de Randić associadas a um determinado grafo G sem vértices isolados:

$$\mathcal{L}(G) = \mathbf{I} - \mathbf{R}(G). \quad (3.4)$$

⁵Em [23] a matriz de Randić surge com a notação \mathbf{A}^* .

Esta relação entre as duas matrizes sugere que λ é um valor próprio da matriz de Randić associada a G se e só se $1 - \lambda$ é um valor próprio da matriz Laplaciana normalizada de G . Por outro lado, como o menor valor próprio de $\mathcal{L}(G)$ é 0, então 1 é o maior valor próprio da matriz de Randić associada a um grafo simples G com pelo menos uma aresta.

No exemplo seguinte, apresenta-se o espectro de Randić de K_n e de $K_{r,s}$, $r, s \in \mathbb{N}$.

Exemplo 3.2.1. Se $G \cong K_n$ então

$$\sigma(\mathbf{R}(G)) = \left\{ 1, \left(-\frac{1}{n-1} \right)^{(n-1)} \right\} \quad e \quad \sigma(\mathcal{L}(G)) = \left\{ \left(\frac{n}{n-1} \right)^{(n-1)}, 0 \right\}.$$

Seja agora $G \cong K_{r,s}$, $r, s \in \mathbb{N}$.

O espectro da matriz Laplaciana normalizada associada ao grafo bipartido completo, $G = K_{r,s}$, é conhecido, [18]:

$$\sigma(\mathcal{L}(G)) = \{ 2, 1^{(r+s-2)}, 0 \}.$$

Por (3.4), o espectro da matriz de Randić associada a $G = K_{r,s}$, $r, s \in \mathbb{N}$ é, então,

$$\sigma(\mathbf{R}(G)) = \{ 1, 0^{(r+s-2)}, -1 \}.$$

A matriz de Randić associada a um grafo simples G é uma matriz não negativa. Para além disso, se G for um grafo conexo, $\mathbf{A}(G)$ é uma matriz irredutível, [23, 79], e portanto pela relação definida entre as duas matrizes em (3.3), $\mathbf{R}(G)$ é, também, uma matriz irredutível. Pela teoria de Perron–Frobenius, [57], a raiz de Perron de $\mathbf{R}(G)$, 1, é um valor próprio simples de $\mathbf{R}(G)$ e o correspondente vetor de Perron, $\mathbf{D}^{1/2} \mathbf{e}$, é um vetor próprio positivo. Destas observações, conclui-se que se G for um grafo arbitrário, a multiplicidade de $1 \in \sigma(\mathbf{R}(G))$ corresponde ao número de componentes conexas de G que não são constituídas por vértices isolados.

O *spread* de uma matriz quadrada com entradas em \mathbb{C} foi definido em 1957 por Leon

Mirsky, em [72], e apresentado nesta tese em (2.2).

Uma vez que o menor valor próprio das matrizes Laplaciana e Laplaciana normalizada associadas a um determinado grafo é 0, o conceito de *spread* para essas matrizes é trivial e desinteressante já que:

(i) $s(\mathbf{L})$ e $s(\mathcal{L})$ são iguais ao raio espectral das respectivas matrizes, como referido em [42];

(ii) Na literatura existem inúmeros resultados sobre o raio espectral dessas matrizes, especialmente sobre a determinação de majorantes, [79, 83].

Tendo em conta estas limitações, Yi-Zheng Fan, Jing Xu, Yi Wang e Dong Liang apresentaram, em 2008, uma definição para o *spread laplaciano* de um grafo G com n vértices, em [32], distinta da definição de *spread* da matriz Laplaciana, onde consideram a diferença entre o maior e o segundo menor valores próprios da matriz Laplaciana associada a G :

$$spr_{\mathbf{L}}(G) = \max \{ |\lambda_i(\mathbf{L}) - \lambda_j(\mathbf{L})| : \lambda_i(\mathbf{L}), \lambda_j(\mathbf{L}) \in \sigma(\mathbf{L}) \setminus \{0\} \} = \lambda_1(\mathbf{L}) - \lambda_{n-1}(\mathbf{L}). \quad (3.5)$$

O segundo menor valor próprio de $\mathbf{L}(G)$, $\lambda_{n-1}(\mathbf{L})$, designado por *conexidade algébrica* de G , é uma medida algébrica de conexidade de um grafo G com bastante importância e inúmeros estudos na literatura, [2, 17, 33], o que ajuda a reforçar a importância da definição do *spread* laplaciano recorrer a esse valor.

Analogamente, o *spread laplaciano normalizado* de um grafo G com n vértices define-se da seguinte forma, [11, 15, 75]:

$$spr_{\mathcal{L}}(G) = \max \{ |\lambda_i(\mathcal{L}) - \lambda_j(\mathcal{L})| : \lambda_i(\mathcal{L}), \lambda_j(\mathcal{L}) \in \sigma(\mathcal{L}) \setminus \{0\} \} = \lambda_1(\mathcal{L}) - \lambda_{n-1}(\mathcal{L}). \quad (3.6)$$

De forma paralela com i) e ii) observe-se, também, que dado um grafo simples, $s(\mathbf{R})$ é igual à diferença entre 1 e o menor valor próprio de Randić do grafo e, adicionalmente, igual a $s(\mathcal{L})$. Mais, para qualquer grafo bipartido, $s(\mathbf{R}) = 2$. Assim, de forma análoga com (3.5) e (3.6), introduz-se o conceito de *spread de Randić* de um grafo simples na literatura, não usando a definição de *spread* da matriz de Randić associada a esse grafo. O *spread de Randić* de um grafo simples G é, então, definido como a diferença entre o segundo maior e o menor valores próprios da matriz $\mathbf{R}(G)$, como se apresenta de seguida.

Definição 3.2.2. *Dado um grafo G simples com n vértices, o **spread de Randić** de G é dado por:*

$$spr_{\mathbf{R}}(G) = \max \{ |\lambda_i(\mathbf{R}) - \lambda_j(\mathbf{R})| : \lambda_i(\mathbf{R}), \lambda_j(\mathbf{R}) \in \sigma(\mathbf{R}) \setminus \{1\} \} = \lambda_2(\mathbf{R}) - \lambda_n(\mathbf{R}).$$

Observe-se que como se considera G um grafo sem vértices isolados, $spr_{\mathbf{R}}(G)$ e $spr_{\mathcal{L}}(G)$ são iguais, atendendo a (3.6) e à Definição 3.2.2.

O exemplo seguinte apresenta o *spread de Randić* de duas classes de grafos.

Exemplo 3.2.3. *Atendendo ao Exemplo 3.2.1, $spr_{\mathbf{R}}(K_n) = spr_{\mathcal{L}}(K_n) = 0$ e $spr_{\mathbf{R}}(K_{r,s}) = spr_{\mathcal{L}}(K_{r,s}) = 1$, $r, s \in \mathbb{N}$.*

O próximo resultado garante que só o grafo completo tem o segundo maior valor próprio de Randić negativo. Como consequência, é possível garantir que só nessa classe de grafos o *spread de Randić* é nulo.

Lema 3.2.4. *Seja G um grafo conexo de ordem $n \geq 2$. Então, $\lambda_2(\mathbf{R}(G)) < 0$ se e só se $G \cong K_n$.*

Demonstração. Seja G um grafo conexo de ordem $n \geq 2$ e considere-se que $\lambda_2(\mathbf{R}(G)) < 0$. Se $G \not\cong K_n$, então existem vértices $v, w \in V(G)$ tais que $vw \notin E(G)$. Assim, recorrendo a uma matriz de permutação \mathbf{P} de dimensões adequadas, garante-se que a matriz $\mathbf{P}\mathbf{R}(G)\mathbf{P}^T$ tem uma submatriz nula de ordem 2. Desta forma, pelo Teorema de Entrelaçamento de

Cauchy, Teorema 2.0.1, $\lambda_n(\mathbf{R}(G)) \leq 0 \leq \lambda_2(\mathbf{R}(G))$, obtendo-se uma contradição.

Considere-se, agora, que $G \cong K_n$ com $n \geq 2$. Pelo Exemplo 3.2.1,

$$\sigma(\mathbf{R}(K_n)) = \left\{ 1, \left(-\frac{1}{n-1} \right)^{(n-1)} \right\}$$

e, portanto, $\lambda_2(\mathbf{R}(K_n)) = \frac{-1}{n-1} < 0$, ficando provado o pretendido. \square

Corolário 3.2.5. *Seja G um grafo conexo com n vértices. Então $\text{spr}_{\mathbf{R}}(G) = 0$ se e só se $G \cong K_n$.*

Demonstração. Considere-se G um grafo conexo com n vértices.

Se $\text{spr}_{\mathbf{R}}(G) = 0$ então $\lambda_2(\mathbf{R}(G)) = \lambda_n(\mathbf{R}(G)) < 0$ pois $\text{tr}(\mathbf{R}(G)) = 0$. Desta forma, pelo Lema 3.2.4, $G \cong K_n$. Se $G \cong K_n$ então, como já visto no Exemplo 3.2.3, $\text{spr}_{\mathbf{R}}(G) = 0$. \square

3.3 Majorantes e Minorantes para o *Spread* de Randić

Nesta secção definem-se majorantes e minorantes para o *spread* de Randić de grafos. Mais à frente, comparam-se as eficácias desses majorantes e minorantes nas aproximações ao *spread* de Randić, em determinadas classes de grafos.

O próximo resultado, obtido em 2013 por Oscar Rojo e Ricardo Soto, apresenta um majorante para o maior valor absoluto de um valor próprio de Randić sobre o conjunto de todos os valores próprios de Randić negativos.

Lema 3.3.1. [79] *Sejam G um grafo simples, não orientado e conexo, com n vértices, $i, j \in V(G)$, \mathbf{R} a matriz de Randić associada e $\#(N_i \cap N_j)$ o número de vértices de G que são vizinhos, simultaneamente, a i e a j . Se $\lambda(\mathbf{R})$ é um valor próprio com o maior valor absoluto no conjunto dos valores próprios negativos da matriz de Randić de G , então*

$$|\lambda(\mathbf{R})| \leq 1 - \min_{i \sim j} \left\{ \frac{\#(N_i \cap N_j)}{\max\{d_i, d_j\}} \right\} \quad (3.7)$$

onde o mínimo é considerado sobre todos os pares (i, j) , $i, j \in \{1, \dots, n\}$ com $i < j$, tais que $i \sim j$.

Recorrendo a este lema, é possível definir um majorante para o *spread* de Randić de um grafo nas condições seguintes.

Teorema 3.3.2. *Seja G um grafo simples, não orientado e conexo, com n vértices e \mathbf{R} a matriz de Randić associada a G . Nestas condições,*

$$\text{spr}_{\mathbf{R}}(G) = \lambda_2(\mathbf{R}) - \lambda_n(\mathbf{R}) \leq 2 - \min_{i \sim j} \left\{ \frac{\#(N_i \cap N_j)}{\max\{d_i, d_j\}} \right\}$$

onde o mínimo é considerado sobre todos os pares (i, j) , $i, j \in \{1, \dots, n\}$ com $i < j$, tais que $i \sim j$.

Demonstração. A prova resulta de (3.7) e do facto de 1 ser o maior valor próprio de Randić de qualquer grafo simples, não orientado e conexo. □

O próximo resultado foi obtido por Alfred Brauer, em 1952, [10], e relaciona os valores próprios de uma matriz arbitrária com os da matriz que dela resulta depois de se efetuar uma perturbação aditiva de característica 1. Concretamente, o teorema mostra como se pode modificar um valor próprio de uma matriz quadrada qualquer, através de uma perturbação aditiva de característica 1, sem alterar qualquer um dos restantes valores próprios dessa matriz.

Teorema 3.3.3. [10] *Sejam $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ uma matriz arbitrária com valores próprios*

$$\lambda_1(\mathbf{M}), \lambda_2(\mathbf{M}), \dots, \lambda_n(\mathbf{M})$$

e $\mathbf{q} \in \mathbb{C}^{n \times 1}$. Se $(\lambda_k(\mathbf{M}), \mathbf{x}_k)$ é um par próprio de \mathbf{M} , então a matriz $\mathbf{M} + \mathbf{x}_k \mathbf{q}^T$ tem valores próprios

$$\lambda_1(\mathbf{M}), \dots, \lambda_{k-1}(\mathbf{M}), \lambda_k(\mathbf{M}) + \mathbf{x}_k^T \mathbf{q}, \lambda_{k+1}(\mathbf{M}), \dots, \lambda_n(\mathbf{M}).$$

No desenvolvimento seguinte, recorre-se a este resultado para obter matrizes cujo *spread* é igual ao *spread* de Randić de um determinado grafo, com o objetivo de definir minorantes para esse invariante espectral. As matrizes são obtidas por uma perturbação aditiva de característica 1 sobre a matriz de Randić associada a um grafo.

Seja G um (n, m) -grafo arbitrário e $pq \in E(G)$. A matriz de ordem 2 definida por

$$\mathbf{R}_{pq} = \begin{pmatrix} 0 & (d_p d_q)^{-1/2} \\ (d_p d_q)^{-1/2} & 0 \end{pmatrix}$$

é uma submatriz principal da matriz $\mathbf{P}\mathbf{R}(G)\mathbf{P}^T$, onde \mathbf{P} é uma matriz de permutação adequada de ordem n .

Observe-se que

$$\sigma(\mathbf{R}_{pq}) = \left\{ \frac{-1}{\sqrt{d_p d_q}}, \frac{1}{\sqrt{d_p d_q}} \right\}$$

e, por isso, o menor valor próprio de \mathbf{R}_{pq} é igual a $\lambda_{pq}(\mathbf{R}_{pq}) = \frac{-1}{\sqrt{d_p d_q}}, \forall pq \in E(G)$.

Pelo Teorema 2.0.1,

$$\lambda_n(\mathbf{R}(G)) \leq \lambda_{pq}(\mathbf{R}_{pq}) \leq \lambda_2(\mathbf{R}(G)). \quad (3.8)$$

Por outro lado, como já visto, $(1, w)$ é um par próprio de $\mathbf{R}(G)$ onde $w = \mathbf{D}^{1/2} \mathbf{e}$.

Seja

$$\mathbf{B}_{pq} = \mathbf{R}(G) + \beta_{pq} w w^T$$

com

$$\beta_{pq} = -\frac{1}{2m} \left(\frac{1}{\sqrt{d_p d_q}} + 1 \right). \quad (3.9)$$

Pelo Teorema 3.3.3,

$$\begin{aligned}\sigma(\mathbf{B}_{pq}) &= \sigma(\mathbf{R}(G)) \setminus \{1\} \cup \{1 + \beta_{pq} w^T w\} \\ &= \sigma(\mathbf{R}(G)) \setminus \{1\} \cup \{1 - ((d_p d_q)^{-1/2} + 1)\} = \sigma(\mathbf{R}(G)) \setminus \{1\} \cup \{\lambda_{pq}(\mathbf{R}_{pq})\}.\end{aligned}$$

Desta forma,

$$spr_{\mathbf{R}}(G) = s(\mathbf{B}_{pq}).$$

Pelo raciocínio anterior, dados um grafo G e a matriz de Randić associada, é então possível construir uma matriz \mathbf{B}_{pq} com um *spread* igual ao *spread* de Randić, recorrendo a uma perturbação aditiva de característica 1 em $\mathbf{R}(G)$. Através desse procedimento, o maior valor próprio da matriz de Randić é substituído por $\lambda_{pq}(\mathbf{R}_{pq})$, um valor que não altera o *spread* de Randić, atendendo a (3.8).

Note-se, também, que a média aritmética dos m valores próprios $\lambda_{pq}(\mathbf{R}_{pq})$

$$\frac{1}{m} \sum_{p \sim q} \lambda_{pq}(\mathbf{R}_{pq}) = \frac{1}{m} \sum_{p \sim q} \left(-\frac{1}{\sqrt{d_p d_q}} \right) = -\frac{\chi(G)}{m} \quad (3.10)$$

também tem a propriedade

$$\lambda_n(\mathbf{R}(G)) \leq -\frac{\chi(G)}{m} \leq \lambda_2(\mathbf{R}(G)). \quad (3.11)$$

Nesse caso, se $spr_{\mathbf{R}}(G) = 0$, $\chi(G) = -m\lambda_2(\mathbf{R}(G)) = -m\lambda_n(\mathbf{R}(G))$.

Considere-se, agora,

$$\mathbf{B} = \mathbf{R}(G) + \beta w w^T \quad (3.12)$$

com

$$\beta = -\frac{1}{2m} \left(\frac{\chi(G)}{m} + 1 \right) \quad (3.13)$$

e w como antes. Pelo Teorema 3.3.3,

$$\begin{aligned}\sigma(\mathbf{B}) &= \sigma(\mathbf{R}(G)) \setminus \{1\} \cup \{1 + \beta w^T w\} \\ &= \sigma(\mathbf{R}(G)) \setminus \{1\} \cup \left\{1 - \left(\frac{\chi(G)}{m} + 1\right)\right\} = \sigma(\mathbf{R}(G)) \setminus \{1\} \cup \left\{-\frac{\chi(G)}{m}\right\}\end{aligned}$$

e por isso, também a matriz \mathbf{B} tem um *spread* igual ao *spread* de Randić de G .

Assim,

$$\text{spr}_{\mathbf{R}}(G) = s(\mathbf{B}) = s(\mathbf{B}_{pq}).$$

De uma forma mais geral, para qualquer valor ξ tal que

$$\lambda_n(\mathbf{R}(G)) \leq \xi \leq \lambda_2(\mathbf{R}(G)), \quad (3.14)$$

a relação

$$\text{spr}_{\mathbf{R}}(G) = s(\mathbf{B}_{\xi}) \quad (3.15)$$

é verificada, onde

$$\mathbf{B}_{\xi} = \mathbf{R}(G) + \kappa w w^T, \quad (3.16)$$

com

$$\kappa = \frac{1}{2m} (\xi - 1). \quad (3.17)$$

Defina-se

$$\Gamma(j) = \sum_{s \sim j} \frac{1}{d_s} \quad (3.18)$$

para $j \in \{1, \dots, n\}$. Observe-se que se G é um grafo regular, então $\Gamma(j) = 1, \forall j \in \{1, \dots, n\}$.

Sejam $\mathbf{B}_{\xi} = \mathbf{R}(G) + \kappa w w^T$ como em (3.16) e κ como em (3.17). Se $\mathbf{B}_{\xi} = [b_{ij}]$, com

$i, j \in \{1, \dots, n\}$, então

$$b_{ij} = \begin{cases} \kappa d_i, & \text{se } i = j \\ \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}} + \kappa \sqrt{d_i d_j}, & \text{se } ij \in E(G) \\ \kappa \sqrt{d_i d_j}, & \text{se } ij \notin E(G). \end{cases} \quad (3.19)$$

De seguida, são apresentados majorantes e minorantes para o *spread* de Randić de grafos, alguns resultantes da aplicação dos raciocínios anteriores e, portanto, também do Teorema de Brauer, Teorema 3.3.3.

O próximo teorema apresenta um minorante para o *spread* de Randić. O resultado surge como uma aplicação das desigualdades em (3.11).

Teorema 3.3.4. *Considere-se G um (n, m) -grafo simples não orientado e sem vértices isolados cuja matriz de Randić é $\mathbf{R}(G)$. Nestas condições,*

$$spr_{\mathbf{R}}(G) \geq \max \left\{ \left| \frac{\chi(G)}{m} + \lambda_n(\mathbf{R}(G)) \right|, \frac{\chi(G)}{m} + \lambda_2(\mathbf{R}(G)) \right\}. \quad (3.20)$$

Demonstração. Por (3.11), conclui-se que

$$\lambda_n(\mathbf{R}(G)) + \frac{\chi(G)}{m} \leq 0 \quad (3.21)$$

e

$$\frac{\chi(G)}{m} \geq -\lambda_2(\mathbf{R}(G)).$$

Assim, e porque $spr_{\mathbf{R}}(G) \geq 0$,

$$\frac{\chi(G)}{m} + \lambda_n(\mathbf{R}(G)) \leq spr_{\mathbf{R}}(G)$$

e

$$\lambda_n(\mathbf{R}(G)) + \frac{\chi(G)}{m} \geq \lambda_n(\mathbf{R}(G)) - \lambda_2(\mathbf{R}(G)) = -spr_{\mathbf{R}}(G).$$

Portanto,

$$spr_{\mathbf{R}}(G) \geq \left| \frac{\chi(G)}{m} + \lambda_n(\mathbf{R}(G)) \right|. \quad (3.22)$$

De (3.21) e (3.22), conclui-se o pretendido. \square

Nota 3.3.5. *O minorante do teorema anterior pode ser melhorado para o caso de grafos em que o produto $d_p d_q$ não é um valor constante, para $pq \in E(G)$. Considere-se $\lambda_{pq}^{min}(\mathbf{R}_{pq})$ o menor valor de $\lambda_{pq}(\mathbf{R}_{pq})$ e $\lambda_{pq}^{max}(\mathbf{R}_{pq})$ o maior, para $pq \in E(G)$. Então, de (3.8),*

$$spr_{\mathbf{R}}(G) \geq \max \left\{ \lambda_{pq}^{max}(\mathbf{R}_{pq}) - \lambda_n(\mathbf{R}(G)), \lambda_2(\mathbf{R}(G)) - \lambda_{pq}^{min}(\mathbf{R}_{pq}) \right\}. \quad (3.23)$$

Por outro lado, de (3.10),

$$\lambda_{pq}^{min}(\mathbf{R}_{pq}) \leq -\frac{\chi(G)}{m} \leq \lambda_{pq}^{max}(\mathbf{R}_{pq}).$$

Assim, de (3.11),

$$\begin{aligned} & \max \left\{ \left| \frac{\chi(G)}{m} + \lambda_n(\mathbf{R}(G)) \right|, \frac{\chi(G)}{m} + \lambda_2(\mathbf{R}(G)) \right\} \\ & \leq \max \left\{ \lambda_{pq}^{max}(\mathbf{R}_{pq}) - \lambda_n(\mathbf{R}(G)), \lambda_2(\mathbf{R}(G)) - \lambda_{pq}^{min}(\mathbf{R}_{pq}) \right\}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Quando o produto $d_p d_q$ não é constante, o minorante de (3.23) comporta-se melhor do que o minorante de (3.20), tendo em conta a desigualdade (3.24). Se $d_p d_q$ é constante, para $pq \in E(G)$, por exemplo quando G é um grafo regular ou um grafo bipartido completo, os minorantes de (3.20) e de (3.23) coincidem porque

$$-\frac{\chi(G)}{m} = \frac{1}{m} \sum_{p \sim q} \lambda_{pq}(\mathbf{R}_{pq}) = \frac{1}{m} \sum_{p \sim q} \left(-\frac{1}{\sqrt{d_p d_q}} \right) = \lambda_{pq}^{min}(\mathbf{R}_{pq}) = \lambda_{pq}^{max}(\mathbf{R}_{pq}).$$

O seguinte majorante para o *spread* de uma matriz quadrada foi apresentado em [72] por Leon Mirsky, em 1956. Mirsky provou que para qualquer matriz $\mathbf{C} \in \mathbb{C}^{n \times n}$,

$$s(\mathbf{C}) \leq \sqrt{2|\mathbf{C}|^2 - \frac{2}{n}|\text{tr}(\mathbf{C})|^2}. \quad (3.25)$$

Recorrendo à desigualdade em (3.25), obtém-se o resultado seguinte.

Teorema 3.3.6. *Seja G um (n, m) -grafo conexo, \mathbf{B}_ξ a matriz definida em (3.16) e $R_{-1}(G)$ definido em (3.2). Então,*

$$s(\mathbf{B}_\xi) \leq \sqrt{4R_{-1}(G) + \frac{2(\xi - 1)}{n}(1 + n + \xi(n - 1))}, \quad (3.26)$$

para $\lambda_n(\mathbf{R}(G)) \leq \xi \leq \lambda_2(\mathbf{R}(G))$. Assim, para κ definido como em (3.17),

$$spr_R(G) \leq \sqrt{4R_{-1}(G) + 8\kappa m \left(1 + \kappa m - \frac{\kappa m}{n}\right)}.$$

Para $\xi = \lambda_2(\mathbf{R}(G))$, de (3.26)

$$spr_R(G) \leq \sqrt{4R_{-1}(G) + \frac{2(\lambda_2(\mathbf{R}(G)) - 1)}{n}(1 + n + \lambda_2(\mathbf{R}(G))(n - 1))}.$$

Para $\xi = \lambda_n(\mathbf{R}(G))$, de (3.26)

$$spr_R(G) \leq \sqrt{4R_{-1}(G) + \frac{2(\lambda_n(\mathbf{R}(G)) - 1)}{n}(1 + n + \lambda_n(\mathbf{R}(G))(n - 1))}.$$

Demonstração. Considere-se \mathbf{B}_ξ a matriz definida em (3.16). Como foi visto em (3.15),

$$spr_R(G) = s(\mathbf{B}_\xi),$$

para $\lambda_n(\mathbf{R}(G)) \leq \xi \leq \lambda_2(\mathbf{R}(G))$. Assim, por (3.25),

$$s(\mathbf{B}_\xi) = spr_R(G) \leq \sqrt{2|\mathbf{B}_\xi|^2 - \frac{2}{n}|tr(\mathbf{B}_\xi)|^2}. \quad (3.27)$$

Tendo em conta a forma das entradas da matriz \mathbf{B}_ξ apresentada em (3.19) e $\Gamma(j)$ definida em (3.18), para $j \in \{1, \dots, n\}$, tem-se que:

$$\begin{aligned}
|\mathbf{B}_\xi|^2 &= \text{tr}(\mathbf{B}_\xi^* \mathbf{B}_\xi) \\
&= \sum_{i \in V(G)} \kappa^2 d_i^2 + \sum_{i \in V(G)} \sum_{j \sim i} \frac{(1 + \kappa d_i d_j)^2}{d_i d_j} + \sum_{i \in V(G)} \sum_{j \not\sim i} \left(\kappa \sqrt{d_i d_j} \right)^2 \\
&= \kappa^2 \sum_{i \in V(G)} d_i^2 + \sum_{i \in V(G)} \sum_{j \sim i} \frac{1}{d_i d_j} + \sum_{i \in V(G)} \sum_{j \sim i} 2\kappa + \kappa^2 \sum_{i \in V(G)} \sum_{j \sim i} d_i d_j + \kappa^2 \sum_{i \in V(G)} \sum_{j \not\sim i} d_i d_j \\
&= \kappa^2 \sum_{i \in V(G)} d_i^2 + \sum_{i \in V(G)} \frac{\Gamma(i)}{d_i} + 4\kappa m + \kappa^2 \left(\sum_{i \in V(G)} \sum_{j \sim i} d_i d_j + \sum_{i \in V(G)} \sum_{j \not\sim i} d_i d_j \right) \\
&= \kappa^2 \sum_{i \in V(G)} d_i^2 + \sum_{i \in V(G)} \frac{\Gamma(i)}{d_i} + 4\kappa m + \kappa^2 d_1(2m - d_1) + \kappa^2 d_2(2m - d_2) + \cdots + \kappa^2 d_n(2m - d_n) \\
&= \kappa^2 \sum_{i \in V(G)} d_i^2 + \sum_{i \in V(G)} \frac{\Gamma(i)}{d_i} + 4\kappa m + 2\kappa^2 m (d_1 + d_2 + \cdots + d_n) - \kappa^2 (d_1^2 + d_2^2 + \cdots + d_n^2) \\
&= \kappa^2 \sum_{i \in V(G)} d_i^2 + \sum_{i \in V(G)} \frac{\Gamma(i)}{d_i} + 4\kappa m + 4\kappa^2 m^2 - \kappa^2 \sum_{i \in V(G)} d_i^2 \\
&= \sum_{i \in V(G)} \frac{\Gamma(i)}{d_i} + 4\kappa m + 4\kappa^2 m^2.
\end{aligned}$$

Por outro lado,

$$\text{tr}(\mathbf{B}_\xi) = \sum_{i \in V(G)} \kappa d_i = 2\kappa m.$$

Logo, de (3.27) conclui-se que

$$\begin{aligned}
s(\mathbf{B}_\xi) = \text{spr}_R(G) &\leq \sqrt{2 \left(\sum_{i \in V(G)} \frac{\Gamma(i)}{d_i} + 4\kappa m + 4\kappa^2 m^2 \right) - \frac{2}{n} 4\kappa^2 m^2} \\
&= \sqrt{4R_{-1}(G) + 8\kappa m \left(1 + \kappa m - \frac{\kappa m}{n} \right)}.
\end{aligned}$$

Tendo em conta que κ está definido como em (3.17), é possível reescrever o majorante anterior da seguinte forma:

$$\text{spr}_R(G) \leq \sqrt{4R_{-1}(G) + \frac{2(\xi - 1)}{n} (1 + n + \xi(n - 1))}. \quad (3.28)$$

Dado que $\lambda_n(\mathbf{R}(G)) \leq \xi \leq \lambda_2(\mathbf{R}(G))$, se $\xi = \lambda_2(\mathbf{R}(G))$, o majorante definido em (3.28) toma

a forma

$$spr_{\mathbf{R}}(G) \leq \sqrt{4R_{-1}(G) + \frac{2(\lambda_2(\mathbf{R}(G)) - 1)}{n}(1 + n + \lambda_2(\mathbf{R}(G))(n - 1))}$$

enquanto se $\xi = \lambda_n(\mathbf{R}(G))$,

$$spr_{\mathbf{R}}(G) \leq \sqrt{4R_{-1}(G) + \frac{2(\lambda_n(\mathbf{R}(G)) - 1)}{n}(1 + n + \lambda_n(\mathbf{R}(G))(n - 1))}.$$

□

O próximo resultado é consequência do teorema anterior e apresenta mais um majorante para o *spread* de Randić de um grafo conexo não isomorfo a K_n .

Corolário 3.3.7. *Seja G um grafo conexo com n vértices e $G \not\cong K_n$. Então,*

$$spr_{\mathbf{R}}(G) \leq \sqrt{4R_{-1}(G) - \frac{2(1+n)}{n}}.$$

Demonstração. Pelo Lema 3.2.4, se $G \not\cong K_n$ então $\lambda_2(\mathbf{R}(G)) \geq 0$. Para além disso, de (3.11) sabe-se que $\lambda_n(\mathbf{R}(G)) \leq -\frac{\chi(G)}{m} \leq \lambda_2(\mathbf{R}(G))$ e, portanto, $\lambda_n(\mathbf{R}(G)) < 0$. Assim,

$$\lambda_n(\mathbf{R}(G)) < 0 \leq \lambda_2(\mathbf{R}(G)) \tag{3.29}$$

o que implica que $\xi = 0$ satisfaz a condição apresentada em (3.14) e que pelo Teorema 3.3.6 se obtém

$$spr_{\mathbf{R}}(G) \leq \sqrt{4R_{-1}(G) - \frac{2(1+n)}{n}}.$$

□

O próximo corolário define mais um majorante para o *spread* de Randić de um grafo, recorrendo ao Índice de Randić e ao Índice de Randić Generalizado. O resultado é, também, consequência do Teorema 3.3.6.

Corolário 3.3.8. *Seja G um (n, m) -grafo conexo. Então,*

$$\text{spr}_{\mathbb{R}}(G) \leq \sqrt{4R_{-1}(G) - \frac{2(\chi(G) + m)((1 + n)m - \chi(G)(n - 1))}{nm^2}}. \quad (3.30)$$

Demonstração. Por (3.11), se $\xi = -\frac{\chi(G)}{m}$, $\text{spr}_{\mathbb{R}}(G) = s(\mathbf{B}_{\xi})$. Nestas condições, a partir de (3.28), obtém-se o majorante definido em (3.30). \square

O próximo resultado apresenta um minorante para o *spread* de uma matriz normal, definido a partir da soma de algumas entradas da matriz.

Lema 3.3.9. [70] *Seja $\mathbf{M} = [m_{ij}] \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $i, j \in \{1, \dots, n\}$ uma matriz normal de ordem $n \geq 2$. Então*

$$s(\mathbf{M}) \geq \frac{1}{n-1} \left| \sum_{j=1}^n \sum_{k \neq j} m_{jk} \right|.$$

Recorrendo ao lema anterior, é possível apresentar um minorante para o *spread* de Randić de grafos regulares.

Corolário 3.3.10. *Seja G um (n, m) -grafo p -regular, com $p \geq 1$. Então*

$$\text{spr}_{\mathbb{R}}(G) \geq \frac{1}{p} - \frac{1}{n-1}.$$

A igualdade acontece se $G \cong K_n$.

Demonstração. Seja G um grafo p -regular de ordem n . Nesse caso, $m = \frac{np}{2}$.

Pelo Lema 3.3.9, é possível estabelecer um minorante para o *spread* da matriz \mathbf{B} , definida em (3.12). Por esse lema, ao considerar a matriz \mathbf{M} como a matriz \mathbf{B} , definida em (3.12),

obtém-se

$$\begin{aligned}
s(\mathbf{B}) &\geq \frac{1}{n-1} \left| \sum_{j=1}^n \sum_{k \neq j} m_{jk} \right| \\
&= \frac{1}{n-1} \left| np \left[\frac{1}{p} + \left(-\frac{1}{2m} \left(\frac{1}{p} + 1 \right) \right) p \right] + (n^2 - n - np) \left[-\frac{1}{2m} \left(\frac{1}{p} + 1 \right) p \right] \right| \\
&= \frac{1}{n-1} \left| n - \frac{n^2}{2m} - n + \frac{n}{2m} + 1 \right| \\
&= \frac{1}{n-1} \left| -\frac{n^2}{np} + \frac{n}{np} + 1 \right|.
\end{aligned}$$

Como $\frac{1-n+p}{p} \leq 0$, porque $p \leq n-1$, então

$$\begin{aligned}
s(\mathbf{B}) &\geq \frac{1}{n-1} \left(\frac{n-p-1}{p} \right) \\
&= \frac{1}{p} - \frac{1}{n-1}.
\end{aligned}$$

Se $G \cong K_n$ então $p = n-1$ e, tendo em conta o seu espectro de Randić já apresentado no Exemplo 3.2.1, $spr_{\mathbf{R}}(G) = \frac{1}{n-1} - \frac{1}{n-1} = 0$. \square

O próximo resultado apresenta mais um minorante para o *spread* de Randić de um grafo G , dependente do Índice de Randić associado a G .

Corolário 3.3.11. *Considere-se um grafo G de ordem n , $n \geq 2$. Então*

$$spr_{\mathbf{R}}(G) \geq \frac{2\chi(G)}{n-1} - 1 + \lambda_2(\mathbf{R}(G)).$$

Demonstração. Considere-se um grafo G com n vértices.

Tendo em conta a definição de *spread* de uma matriz e que 1 é o maior valor próprio de Randić, como já foi visto, conclui-se que

$$s(\mathbf{R}(G)) = \lambda_1(\mathbf{R}(G)) - \lambda_n(\mathbf{R}(G)) = 1 - \lambda_n(\mathbf{R}(G)).$$

Assim, ao aplicar o Lema 3.3.9 à matriz $\mathbf{R}(G)$, obtém-se

$$1 - \lambda_n(\mathbf{R}(G)) \geq \frac{2\chi(G)}{n-1}.$$

Adicionando $\lambda_2(\mathbf{R}(G)) - 1$ a ambos os membros da desigualdade anterior, conclui-se o pretendido. \square

O próximo resultado estabelece uma conexão entre o *spread* de Randić e o *spread* laplaciano, na classe dos grafos regulares.

Teorema 3.3.12. *Seja G um grafo p -regular de ordem n , com $p \geq 1$. Então $spr_{\mathbf{L}}(G) = p \cdot spr_{\mathbf{R}}(G)$.*

Demonstração. Seja G um grafo p -regular, $p \geq 1$, de ordem n . Tendo em conta que $\mathcal{L}(G) = \mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{L}(G)\mathbf{D}^{-1/2}$ e $\mathbf{L}(G) = \mathbf{D}(G) - \mathbf{A}(G)$, obtém-se $\mathbf{L}(G) = p\mathcal{L}(G)$. Neste caso, se ξ é um valor próprio da matriz Laplaciana normalizada associada a G , $p\xi$ é um valor próprio da matriz Laplaciana associada a G . Por outro lado, como já visto, para um grafo G sem vértices isolados $spr_{\mathbf{R}}(G)$ e $spr_{\mathcal{L}}(G)$ coincidem. Então, $spr_{\mathbf{L}}(G) = p \cdot spr_{\mathcal{L}}(G) = p \cdot spr_{\mathbf{R}}(G)$. \square

Para qualquer grafo G nas condições anteriores, surge o seguinte corolário como consequência do teorema anterior e do Corolário 3.3.10. Mais uma vez, e como acontece com o *spread* de Randić, fica conhecido um minorante para o *spread* laplaciano, na classe dos grafos regulares.

Corolário 3.3.13. *Seja G um grafo p -regular de ordem n , com $p \geq 1$. Então*

$$spr_{\mathbf{L}}(G) \geq 1 - \frac{p}{n-1}. \quad (3.31)$$

A igualdade acontece se $G \cong K_n$.

Por (3.31), é fácil concluir que para um grafo p -regular com n vértices, quanto maior é o valor de p , menor é o valor do *spread* laplaciano.

O minorante que se apresenta de seguida para o *spread* de uma matriz Hermítica é considerado, de forma comum, como um dos melhores minorantes na classe das matrizes simétricas e foi apresentado em 2003 por Jorma Merikoski e Ravinder Kumar, [70]. Os autores provaram que dada uma matriz Hermítica $\mathbf{M} = [m_{ij}] \in \mathbb{C}^{n \times n}$,

$$s(\mathbf{M}) \geq \max_{i,j} \left((m_{jj} - m_{ii})^2 + 2 \sum_{s \neq j} |m_{js}|^2 + 2 \sum_{s \neq i} |m_{is}|^2 \right)^{1/2}. \quad (3.32)$$

A partir desse minorante, é possível obter um minorante para o *spread* de Randić de um grafo arbitrário, como se mostra de seguida.

Teorema 3.3.14. *Seja G um (n, m) -grafo arbitrário. Então*

$$\text{spr}_{\mathbb{R}}(G)^2 \geq \max_{i \leq j} \left\{ 4\kappa (d_j + d_i)(1 + \kappa m) - \kappa^2 (d_j + d_i)^2 + \frac{2}{d_j} \Gamma(j) + \frac{2}{d_i} \Gamma(i) \right\} \quad (3.33)$$

onde κ está definido como em (3.17).

Demonstração. Tendo em conta a definição das entradas da matriz \mathbf{B}_{ξ} em (3.19) e a igualdade apresentada em (3.15), é suficiente mostrar que $s(\mathbf{B}_{\xi})$ satisfaz a desigualdade (3.33). Aplicando o minorante definido em (3.32) para o *spread* de uma matriz Hermítica a $s(\mathbf{B}_{\xi})$, obtém-se:

$$\begin{aligned} s(\mathbf{B}_{\xi})^2 &\geq \max_{i,j} \left(\kappa^2 (d_j - d_i)^2 + 2 \sum_{s \sim j} \frac{(1 + \kappa d_s d_j)^2}{d_s d_j} \right. \\ &\quad \left. + 2\kappa^2 d_j \sum_{s \not\sim j} d_s + 2 \sum_{s \sim i} \frac{(1 + \kappa d_s d_i)^2}{d_s d_i} + 2\kappa^2 d_i \sum_{s \not\sim i} d_s \right) \\ &= \max_{i,j} \left(\kappa^2 (d_j - d_i)^2 + 2\kappa^2 d_j \sum_{s \sim j} d_s + \frac{2}{d_j} \sum_{s \sim j} \frac{1}{d_s} + 4d_j \kappa + 2\kappa^2 d_j \sum_{s \not\sim j} d_s \right. \\ &\quad \left. + 2\kappa^2 d_i \sum_{s \sim i} d_s + \frac{2}{d_i} \sum_{s \sim i} \frac{1}{d_s} + 4d_i \kappa + 2\kappa^2 d_i \sum_{s \not\sim i} d_s \right) \\ &= \max_{i,j} \left(\kappa^2 (d_j - d_i)^2 + 2\kappa^2 d_j \sum_{s \sim j} d_s + 2\kappa^2 d_j \sum_{s \not\sim j} d_s + 2\kappa^2 d_i \sum_{s \sim i} d_s \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2\kappa^2 d_i \sum_{s \sim i} d_s + \frac{2}{d_j} \sum_{s \sim j} \frac{1}{d_s} + \frac{2}{d_i} \sum_{s \sim i} \frac{1}{d_s} + 4d_i \kappa + 4d_j \kappa \Big) \\
& = \max_{i,j} \left(\kappa^2 (d_j - d_i)^2 + 2\kappa^2 d_j (2m - d_j) + 2\kappa^2 d_i (2m - d_i) + 4\kappa (d_j + d_i) + \frac{2}{d_j} \Gamma(j) + \frac{2}{d_i} \Gamma(i) \right) \\
& = \max_{i,j} \left(4\kappa (d_j + d_i)(1 + \kappa m) - \kappa^2 (d_j + d_i)^2 + \frac{2}{d_j} \Gamma(j) + \frac{2}{d_i} \Gamma(i) \right).
\end{aligned}$$

Atendendo à simetria da expressão anterior, é possível fixar $i \leq j$, ficando provado o pretendido. \square

No Teorema 3.3.14 apresentou-se um minorante para o *spread* de Randić de um grafo arbitrário G que depende de κ . Como κ pode variar desde que se mantenha a relação definida em (3.17), é possível melhorar a aproximação ao *spread* de Randić de G sempre que a expressão em (3.33) assuma os maiores valores possíveis. Tendo em conta este raciocínio, apresenta-se, na nota seguinte, um método para tornar o minorante do Teorema 3.3.14 mais apertado.

Nota 3.3.15. *Seja G um (n, m) -grafo arbitrário. Para $\kappa < 0$ define-se a função auxiliar*

$$\begin{aligned}
f(\kappa) & = 4\kappa (d_j + d_i)(1 + \kappa m) - \kappa^2 (d_j + d_i)^2 + \frac{2}{d_j} \Gamma(j) + \frac{2}{d_i} \Gamma(i) \\
& = \frac{d_i + d_j}{4m - (d_i + d_j)} \left[(4m - (d_i + d_j)) \kappa + 2 \right]^2 \\
& + \frac{2}{d_j} \Gamma(j) + \frac{2}{d_i} \Gamma(i) - \frac{4(d_i + d_j)}{4m - (d_i + d_j)}.
\end{aligned}$$

Observe-se que

$$\begin{aligned}
f'(\kappa) = 0 & \iff 8md_i\kappa + 8md_j\kappa - 2\kappa d_i^2 - 4\kappa d_i d_j - 2\kappa d_j^2 + 4d_i + 4d_j = 0 \\
& \iff \kappa = \frac{-2d_i - 2d_j}{4m(d_i + d_j) - (d_i + d_j)^2} \\
& \iff \kappa = \frac{-2}{4m - (d_i + d_j)}.
\end{aligned}$$

Assim, é possível concluir que o mínimo global dessa função f é atingido para

$$\kappa_{\min} = -\frac{2}{4m - (d_i + d_j)}.$$

Como foi referido antes, dado que se trata de um minorante, é possível melhorar a aproximação ao spread de Randić sempre que esse minorante seja o maior possível. Uma vez que é conhecido o valor de κ que permite que a função f atinja o mínimo global, é possível concluir que quanto maior for a diferença de um determinado valor κ (definido em (3.17)) para o valor de κ_{\min} , maior será $f(\kappa)$. Logo, um método simples para obter um minorante para o spread de Randić mais apertado, é considerar o menor κ ou o maior κ conhecidos o que corresponde, respetivamente e por (3.17), a considerar o menor ξ ou o maior ξ . Note-se, por fim, que se $G \cong K_n$, então $d_i = n - 1, \forall i \in \{1, \dots, n\}$, $m = \frac{n(n-1)}{2}$ e

$$\begin{aligned} \kappa_{\min} &= \frac{-2}{4m - 2n + 2} = \frac{-2}{2n^2 - 4n + 2} = \frac{-1}{n^2 - 2n + 1} \\ &= \frac{-n}{n(n^2 - 2n + 1)} = \frac{-1 - n + 1}{n(n^2 - 2n + 1)} = \frac{-1 - (n-1)}{n(n-1)^2} \\ &= \frac{-1}{n(n-1)} \left(\frac{1}{n-1} + 1 \right) = \frac{-1}{2m} \left(\frac{1}{n-1} + 1 \right) = \frac{-1}{2m} \left(\frac{1}{\sqrt{(n-1)^2}} + 1 \right) \\ &= \beta_{pq} = \beta, \end{aligned}$$

onde β_{pq} e β são definidos em (3.9) e (3.13), respetivamente.

O minorante para o spread de Randić de um grafo arbitrário, em (3.33), pode ser reescrito a partir da definição de κ em (3.17).

Nota 3.3.16. Para κ definido como em (3.17) tem-se, a partir de (3.33),

$$\begin{aligned} \text{spr}_{\mathbb{R}}(G)^2 &\geq \max_{i \leq j} \left\{ \left(\frac{2\xi - 2}{m} \right) (d_j + d_i) \left(1 + \frac{\xi m - m}{2m} \right) - \frac{1}{4m^2} (\xi - 1)^2 (d_i + d_j)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{d_j} \Gamma(j) + \frac{2}{d_i} \Gamma(i) \right\} \\ &= \max_{i \leq j} \left\{ \left(\frac{2\xi - 2}{m} + \frac{\xi^2 - \xi}{m} - \frac{\xi - 1}{m} \right) (d_j + d_i) - \frac{1}{4m^2} (\xi - 1)^2 (d_i + d_j)^2 \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2}{d_j} \Gamma(j) + \frac{2}{d_i} \Gamma(i) \Big\} \\
& = \max_{i \leq j} \left\{ \left(\frac{\xi^2 - 1}{m} \right) (d_j + d_i) - \frac{1}{4m^2} (\xi - 1)^2 (d_i + d_j)^2 + \frac{2}{d_j} \Gamma(j) + \frac{2}{d_i} \Gamma(i) \right\}.
\end{aligned}$$

Na nota seguinte, é simplificado o minorante para o *spread* de Randić de G dado pelo Teorema 3.3.14, quando $G \not\cong K_n$ e quando $G = K_{r,s}$, $r, s \geq 1$.

Nota 3.3.17. Quando $G \not\cong K_n$, então ξ pode ser igual a 0 por (3.29). Se $\xi = 0$, o minorante para o *spread* de Randić do Teorema 3.3.14 pode ser simplificado, a partir da expressão anterior

$$\text{spr}_{\mathbb{R}}(G)^2 \geq \max_{i \leq j} \left\{ -\frac{d_j + d_i}{m} \left(1 + \frac{1}{4m} (d_i + d_j) \right) + \frac{2}{d_j} \Gamma(j) + \frac{2}{d_i} \Gamma(i) \right\}. \quad (3.34)$$

Considere-se, agora, $G = K_{r,s}$, $r, s \geq 1$ o grafo bipartido completo com partição X (de cardinalidade r) e Y (de cardinalidade s). Para esta classe de grafos tem-se que $m = rs$, $d_i = s$, $\forall i \in X$, $d_j = r$, $\forall j \in Y$ e $\forall j \in \{1, \dots, n\}$,

$$\Gamma(j) = \begin{cases} \frac{s}{r}, & \text{se } j \in X \\ \frac{r}{s}, & \text{se } j \in Y. \end{cases}$$

Tendo em conta o espetro de Randić de $K_{r,s}$ apresentado no Exemplo 3.2.1, o minorante para o *spread* de Randić de $K_{r,s}$ dado no Teorema 3.3.14, em (3.33), é mais eficaz para $\xi = -1$ ou para $\xi = 0$. Assim, para $\xi = -1$, κ fica definido como

$$\kappa(\xi) = \kappa(-1) = \kappa = \frac{1}{2rs} (-1 - 1) = -\frac{1}{rs}.$$

Suponha-se que $i \in X$ e $j \in Y$. Aplicando o minorante do Teorema 3.3.14, em (3.33), obtém-se:

$$\begin{aligned}
\text{spr}_{\mathbb{R}}(K_{r,s}) & \geq \sqrt{-\left(-\frac{1}{rs}\right)^2 (r+s)^2 + \frac{2}{d_j} \Gamma(j) + \frac{2}{d_i} \Gamma(i)} \\
& = \sqrt{-\left(\frac{r+s}{rs}\right)^2 + \frac{2}{s} + \frac{2}{r}} = \sqrt{\left(\frac{1}{r} + \frac{1}{s}\right) \left(2 - \frac{1}{r} - \frac{1}{s}\right)}.
\end{aligned}$$

A partir desta relação, apresentam-se minorantes, de forma mais simplificada, para o *spread* de Randić de grafos bipartidos completos para o caso $r = s$ e de estrelas (onde $r = 1$ e $s = n - 1$).

Para $r = s$, obtém-se:

$$\text{spr}_{\mathbb{R}}(K_{r,r}) \geq \sqrt{\frac{2}{r} \left(2 - \frac{2}{r}\right)} = \sqrt{\frac{4}{r} - \frac{4}{r^2}} = 2\sqrt{\frac{1}{r} - \frac{1}{r^2}}. \quad (3.35)$$

Para estrelas, onde $r = 1$ e $s = n - 1$, obtém-se a seguinte expressão como minorante para o *spread* de Randić de $K_{r,s}$:

$$\text{spr}_{\mathbb{R}}(K_{1,n-1}) \geq \sqrt{\left(\frac{1}{n-1} + 1\right) \left(1 - \frac{1}{n-1}\right)} = \sqrt{1 - \frac{1}{(n-1)^2}}.$$

Para $\xi = 0$,

$$\kappa = \frac{1}{2rs}(-1) = -\frac{1}{2rs},$$

e, por (3.34), obtém-se

$$\begin{aligned} \text{spr}_{\mathbb{R}}(K_{r,s}) &\geq \sqrt{\frac{2}{s} + \frac{2}{r} - \frac{(r+s)}{rs} - \frac{(r+s)^2}{4r^2s^2}} \\ &= \sqrt{\left(\frac{1}{s} + \frac{1}{r}\right) \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{1}{s} + \frac{1}{r}\right)\right]}. \end{aligned}$$

Para $r = s$,

$$\text{spr}_{\mathbb{R}}(K_{r,r}) \geq \sqrt{\frac{2}{r} \left(1 - \frac{1}{2r}\right)} = \sqrt{\frac{2}{r} - \frac{1}{r^2}}. \quad (3.36)$$

Assim, para $r \geq 2$ e $r = s$, o minorante definido em (3.35) obtido para $\xi = -1$, permite obter valores mais próximos do *spread* de Randić, comparativamente ao de (3.36) para $\xi = 0$.

No próximo corolário caracteriza-se um minorante para o *spread* de Randić e para o *spread* laplaciano, na classe dos grafos regulares, resultante da aplicação do Teorema 3.3.14.

Corolário 3.3.18. *Seja G um grafo p -regular de ordem n . Então, pelo Teorema 3.3.14,*

$$spr_{\mathbb{R}}(G) \geq \frac{2}{np} \sqrt{(n-1-p)(pn+p+1)} \quad (3.37)$$

e

$$spr_{\mathbb{L}}(G) \geq \frac{2}{n} \sqrt{(n-1-p)(pn+p+1)}. \quad (3.38)$$

A igualdade em (3.37) e (3.38) ocorre para $G \cong K_n$.

Demonstração. De facto, se G é um grafo p -regular de ordem n , com $p \geq 1$ então $d_i = d_j = p, \forall i, j \in \{1, \dots, n\}$, $m = \frac{np}{2}$ e $\Gamma(i) = 1, \forall i \in \{1, \dots, n\}$. Para além disso, de (3.9),

$$\kappa = -\frac{1}{np^2} - \frac{1}{np}.$$

Nestas condições, de (3.33),

$$\begin{aligned} spr_{\mathbb{R}}(G)^2 &\geq \max_{i \leq j} \left\{ 4\kappa(d_j + d_i)(1 + \kappa m) - \kappa^2(d_j + d_i)^2 + \frac{2}{d_j} \Gamma(j) + \frac{2}{d_i} \Gamma(i) \right\} \\ &= 4\kappa(d_j + d_i)(1 + \kappa m) - \kappa^2(d_j + d_i)^2 + \frac{2}{d_j} \Gamma(j) + \frac{2}{d_i} \Gamma(i) \\ &= 2p \left(-\frac{4}{np^2} - \frac{4}{np} \right) \left(1 - \frac{m}{np^2} - \frac{m}{np} \right) - \left(-\frac{1}{np^2} - \frac{1}{np} \right)^2 4p^2 + \frac{4}{p} \\ &= -\frac{8}{np} + \frac{8m}{n^2p^3} + \frac{16m}{n^2p^2} - \frac{8}{n} + \frac{8m}{n^2p} - \frac{4 + 8p + 4p^2}{n^2p^2} + \frac{4}{p} \\ &= -\frac{8np}{n^2p^2} + \frac{4n}{n^2p^2} + \frac{8np}{n^2p^2} - \frac{8np^2}{n^2p^2} + \frac{4np^2}{n^2p^2} - \frac{4 + 8p + 4p^2}{n^2p^2} + \frac{4pn^2}{n^2p^2} \\ &= \frac{4n - 4np^2 - 4p^2 - 8p - 4 + 4pn^2}{n^2p^2}. \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned} spr_{\mathbb{R}}(G) &\geq \sqrt{\frac{4n - 4np^2 - 4p^2 - 8p - 4 + 4pn^2}{n^2p^2}} \\ &= \frac{2}{np} \sqrt{n - np^2 - p^2 - 2p - 1 + pn^2} \end{aligned}$$

$$= \frac{2}{np} \sqrt{(n-1-p)(pn+p+1)}.$$

Assim, pelo Teorema 3.3.12, pode ser apresentado o seguinte minorante para o *spread* laplaciano, a partir do minorante anterior para o *spread* de Randić:

$$\text{spr}_L(G) \geq \frac{2}{n} \sqrt{(n-1-p)(pn+p+1)}.$$

Uma vez que o minorante para o *spread* de Randić definido em (3.37) se anula para $p = n - 1$, a igualdade nas desigualdades (3.37) e (3.38) é verificada para $G \cong K_n$ como, aliás, já se tinha mostrado no Corolário 3.2.5. \square

David Scott apresentou um majorante para o *spread* de uma matriz quadrada com entradas em \mathbb{R} , recorrendo aos círculos de Geršgorin, [5, 82]. O autor provou que, dada uma matriz $\mathbf{M} = [m_{ij}] \in \mathbb{R}^{n \times n}$,

$$s(\mathbf{M}) \leq \max_{i \neq j} \left\{ |m_{ii} - m_{jj}| + \sum_{k \neq i} |m_{ik}| + \sum_{k \neq j} |m_{jk}| \right\}. \quad (3.39)$$

O teorema seguinte apresenta um majorante para o *spread* da matriz \mathbf{B}_ξ definida em (3.16). Consequentemente, fica definido mais um majorante para o *spread* de Randić de G .

Teorema 3.3.19. *Sejam G um (n, m) -grafo conexo, \mathbf{B}_ξ a matriz definida em (3.16) e $i, j \in V(G)$. Assim,*

$$\begin{aligned} s(\mathbf{B}_\xi) &\leq \max_{i < j} \left\{ \left(\frac{1-\xi}{2m} \right) |d_i - d_j| + \sum_{l \sim i} \left| \frac{1}{\sqrt{d_i d_l}} - \left(\frac{1-\xi}{2m} \right) \sqrt{d_i d_l} \right| \right. \\ &+ \frac{(1-\xi)}{2m} \sum_{l \not\sim i} \sqrt{d_i d_l} + \sum_{l \sim j} \left| \frac{1}{\sqrt{d_j d_l}} - \left(\frac{1-\xi}{2m} \right) \sqrt{d_j d_l} \right| \\ &\left. + \frac{(1-\xi)}{2m} \sum_{l \not\sim j} \sqrt{d_j d_l} \right\}. \end{aligned}$$

Os dois corolários seguintes apresentam majorantes para $spr_R(G)$ e surgem como consequências do Teorema 3.3.19.

Corolário 3.3.20. *Sejam $G \not\cong K_n$ um (n, m) -grafo conexo e $i, j \in V(G)$. Então,*

$$\begin{aligned} spr_R(G) \leq & \max_{i < j} \left\{ \frac{|d_i - d_j|}{2m} + \sum_{l \sim i} \left| \frac{1}{\sqrt{d_i d_l}} - \frac{\sqrt{d_i d_l}}{2m} \right| \right. \\ & + \sum_{l \sim j} \left| \frac{1}{\sqrt{d_j d_l}} - \frac{\sqrt{d_j d_l}}{2m} \right| + \sum_{l \not\sim j} \frac{\sqrt{d_j d_l}}{2m} + \left. \sum_{l \not\sim i} \frac{\sqrt{d_i d_l}}{2m} \right\}. \end{aligned}$$

Demonstração. Pelo Lema 3.2.4, se $G \not\cong K_n$ então $\lambda_2(\mathbf{R}(G)) \geq 0$. Em (3.29) ficou garantido que

$$\lambda_n(\mathbf{R}(G)) < 0 \leq \lambda_2(\mathbf{R}(G))$$

ou seja que $\xi = 0$ satisfaz a condição definida em (3.14) e, nessas condições, $spr_R(G) = s(\mathbf{B}_\xi)$, onde \mathbf{B}_ξ é a matriz definida em (3.16). Pelo Teorema 3.3.19, obtém-se o pretendido. \square

Considerando $\xi = -\frac{\chi(G)}{m}$ no Teorema 3.3.19, obtém-se o próximo corolário que permite definir mais um majorante para o *spread* de Randić de um grafo conexo.

Corolário 3.3.21. *Sejam G um (n, m) -grafo conexo e $i, j \in V(G)$. Assim,*

$$\begin{aligned} spr_R(G) \leq & \max_{i < j} \left\{ \frac{|d_i - d_j|(m + \chi(G))}{2m^2} + \sum_{l \sim i} \left| \frac{1}{\sqrt{d_i d_l}} - \frac{m + \chi(G)}{2m^2} \sqrt{d_i d_l} \right| \right. \\ & + \sum_{l \sim j} \left| \frac{1}{\sqrt{d_j d_l}} - \frac{m + \chi(G)}{2m^2} \sqrt{d_j d_l} \right| \\ & + \left. \left(\frac{m + \chi(G)}{2m^2} \right) \left(\sum_{l \not\sim i} \sqrt{d_i d_l} + \sum_{l \not\sim j} \sqrt{d_j d_l} \right) \right\}. \end{aligned}$$

Demonstração. Por (3.11), $\xi = -\frac{\chi(G)}{m}$ permite ter $spr_R(G) = s(\mathbf{B}_\xi)$. Logo, pelo Teorema 3.3.19, obtém-se o pretendido. \square

3.4 Estudos Computacionais para Aproximações ao *Spread* de Randić

Nesta secção, são apresentados valores obtidos através de alguns minorantes e majorantes ($vmin$ e $vmaj$, respetivamente) apresentados na Secção 3.3, para o *spread* de Randić de grafos completos bipartidos, ciclos e grafos da coleção *Second DIMACS Implementation*, [61], bem como os respetivos erros cometidos, avaliando-se a eficácia das respetivas aproximações ao *spread* de Randić. Os erros são calculados da forma usual:

$$er = \frac{|spr_{\mathbf{R}}(G) - vmin|}{spr_{\mathbf{R}}(G)}$$

ou

$$er = \frac{|spr_{\mathbf{R}}(G) - vmaj|}{spr_{\mathbf{R}}(G)},$$

conforme o caso. Os valores apresentados com 6 casas decimais foram obtidos através do *software Matlab* (versão R2015a) e do *software Numbers* (versão 3.6.2). Em cada caso, o valor que corresponde à aproximação ao *spread* de Randić mais eficaz está escrito a negrito.

3.4.1 Aproximações ao *Spread* de Randić para Grafos Bipartidos Completos

Nas tabelas das páginas seguintes estão aproximações ao *spread* de Randić obtidas por alguns dos minorantes e majorantes apresentados anteriormente, na classe dos grafos bipartidos completos, $G = K_{r,s}$, $r, s \geq 1$. Para esta classe de grafos, o *spread* de Randić é igual a 1, conforme foi visto no Exemplo 3.2.3.

Nas tabelas 3.1 e 3.2 estão os resultados da aplicação dos minorantes obtidos pelo Corolário 3.3.10 (C. 3.3.10), Corolário 3.3.11 (C. 3.3.11), Teorema 3.3.14 (T. 3.3.14), Corolário

3.3.18 (C. 3.3.18) e Teorema 3.3.4 (T. 3.3.4) e nas tabelas 3.5 e 3.6 são apresentados os resultados da aplicação dos majorantes obtidos pelo Teorema 3.3.2 (T. 3.3.2), Teorema 3.3.6 (T. 3.3.6), Corolário 3.3.7 (C. 3.3.7), Corolário 3.3.8 (C. 3.3.8) e Teorema 3.3.19 (T. 3.3.19). Na classe dos grafos bipartidos completos, o majorante obtido pelo Teorema 3.3.2 é constante e igual a 2.

Minorantes para o *spread* de Randić de grafos bipartidos completos

G	C. 3.3.10	C. 3.3.11	T. 3.3.14	C. 3.3.18	T. 3.3.4
$K_{1,2}$	--	0.414214	0.878320	--	0.707107
$K_{1,3}$	--	0.154701	0.819747	--	0.577350
$K_{1,4}$	--	0.000000	0.826797	--	0.500000
$K_{1,5}$	--	-0.105573	0.828255	--	0.552786
$K_{1,6}$	--	-0.183503	0.828423	--	0.591752
$K_{1,7}$	--	-0.244071	0.828318	--	0.622036
$K_{1,8}$	--	-0.292893	0.828212	--	0.646447
$K_{1,9}$	--	-0.333333	0.828173	--	0.666667
$K_{1,10}$	--	-0.367544	0.828210	--	0.683772
$K_{2,2}$	0.166667	0.333333	0.829156	0.829156	0.500000
$K_{2,3}$	--	0.224745	0.819070	--	0.591752
$K_{2,4}$	--	0.131371	0.816684	--	0.646447
$K_{2,5}$	--	0.054093	0.816631	--	0.683772
$K_{2,6}$	--	0.182588	0.817412	--	0.711325
$K_{2,7}$	--	-0.064586	0.818499	--	0.732739
$K_{2,8}$	--	-0.111111	0.819680	--	0.750000
$K_{2,9}$	--	-0.151472	0.820863	--	0.764298
$K_{2,10}$	--	-0.186884	0.822008	--	0.776393
$K_{3,3}$	0.133333	0.200000	0.737028	0.737028	0.666667
$K_{3,4}$	--	0.154701	0.733282	--	0.711325
$K_{3,5}$	--	0.106567	0.731584	--	0.741801
$K_{3,6}$	--	0.060660	0.730781	--	0.764298
$K_{3,7}$	--	0.018350	0.730423	--	0.781782
$K_{3,8}$	--	-0.020204	0.730303	--	0.795876
$K_{3,9}$	--	-0.055245	0.730318	--	0.807550
$K_{3,10}$	--	-0.087129	0.730412	--	0.817426
$K_{4,4}$	0.107143	0.142857	0.658478	0.658478	0.750000
$K_{4,5}$	--	0.118034	0.656829	--	0.776393
$K_{4,6}$	--	0.088662	0.655907	--	0.795876
$K_{4,7}$	--	0.058301	0.655364	--	0.811018
$K_{4,8}$	--	0.028519	0.655038	--	0.823223
$K_{4,9}$	--	0.000000	0.654843	--	0.833333
$K_{4,10}$	--	-0.026991	0.654731	--	0.841886
$K_{5,5}$	0.088889	0.111111	0.598665	0.598665	0.800000
$K_{5,6}$	--	0.095445	0.597824	--	0.817426
$K_{5,7}$	--	0.075651	0.597297	--	0.830969
$K_{5,8}$	--	0.054093	0.596951	--	0.841886
$K_{5,9}$	--	0.032031	0.596720	--	0.850929
$K_{5,10}$	--	0.010153	0.596562	--	0.858579

Tabela 3.1: Minorantes para o *spread* de Randić de grafos bipartidos completos

G	C. 3.3.10	C. 3.3.11	T. 3.3.14	C. 3.3.18	T. 3.3.4
$K_{6,6}$	0.075758	0.090909	0.552072	0.552072	0.833333
$K_{6,7}$	---	0.080123	0.551596	---	0.845697
$K_{6,8}$	---	0.065877	0.551274	---	0.855662
$K_{6,9}$	---	0.049781	0.551048	---	0.863917
$K_{6,10}$	---	0.032796	0.550887	---	0.870901
$K_{7,7}$	0.065934	0.076923	0.514674	0.514674	0.857143
$K_{7,8}$	---	0.069045	0.514383	---	0.866369
$K_{7,9}$	---	0.058301	0.514174	---	0.874012
$K_{7,10}$	---	0.045825	0.514021	---	0.880477
$K_{8,8}$	0.058333	0.066667	0.483871	0.483871	0.875000
$K_{8,9}$	---	0.060660	0.483681	---	0.882149
$K_{8,10}$	---	0.052267	0.483540	---	0.888197
$K_{9,9}$	0.052288	0.058824	0.457956	0.457956	0.888889
$K_{9,10}$	---	0.054093	0.457827	---	0.894591
$K_{10,10}$	0.047368	0.052632	0.435775	0.435775	0.900000
$K_{140,140}$	0.003559	0.003584	0.119309	0.119309	0.992857
$K_{141,300}$	---	-0.065138	0.118886	---	0.995138
$K_{142,300}$	---	-0.063956	0.118468	---	0.995155
$K_{143,300}$	---	-0.062791	0.118055	---	0.995172
$K_{144,300}$	---	-0.061643	0.117646	---	0.995189
$K_{145,300}$	---	-0.060511	0.117241	---	0.995205
$K_{146,300}$	---	-0.059396	0.116840	---	0.995222
$K_{147,300}$	---	-0.058296	0.116443	---	0.995238
$K_{148,300}$	---	-0.057212	0.116051	---	0.995254
$K_{149,300}$	---	-0.056144	0.115662	---	0.995270
$K_{150,300}$	---	-0.055091	0.115277	---	0.995286
$K_{151,300}$	---	-0.054053	0.114896	---	0.995302
$K_{152,300}$	---	-0.053031	0.114519	---	0.995317
$K_{153,300}$	---	-0.052023	0.114145	---	0.995332
$K_{154,300}$	---	-0.051029	0.113775	---	0.995348
$K_{155,300}$	---	-0.050050	0.113409	---	0.995363
$K_{300,300}$	0.001664	0.001669	0.081582	0.081582	0.996667
$K_{300,1000}$	---	-0.156701	0.081581	---	0.998174
$K_{1000,1000}$	0.000500	0.000500	0.044710	0.044710	0.999000
$K_{5000,10000}$	---	-0.057128	0.019999	---	0.999859
$K_{10000,10000}$	0.000050	0.000050	0.014142	0.014142	0.999900
$K_{20000,20000}$	0.000025	0.000025	0.010000	0.010000	0.999950
$K_{100000,100000}$	0.000005	0.000005	0.004472	0.004472	0.999990

Tabela 3.2: Minorantes para o *spread* de Randić de grafos bipartidos completos (continuação)

Erros de aproximação dos minorantes para o *spread* de Randić de $K_{r,s}$

G	<i>er</i> C. 3.3.10	<i>er</i> C. 3.3.11	<i>er</i> T. 3.3.14	<i>er</i> C. 3.3.18	<i>er</i> T. 3.3.4
$K_{1,2}$	---	0.585786	0.121680	---	0.292893
$K_{1,3}$	---	0.845299	0.180253	---	0.422650
$K_{1,4}$	---	1.000000	0.173203	---	0.500000
$K_{1,5}$	---	1.105573	0.171745	---	0.447214
$K_{1,6}$	---	1.183503	0.171577	---	0.408248
$K_{1,7}$	---	1.244071	0.171682	---	0.377964
$K_{1,8}$	---	1.292893	0.171788	---	0.353553
$K_{1,9}$	---	1.333333	0.171827	---	0.333333
$K_{1,10}$	---	1.367544	0.171790	---	0.316228
$K_{2,2}$	0.833333	0.666667	0.170844	0.170844	0.500000
$K_{2,3}$	---	0.775255	0.180930	---	0.408248
$K_{2,4}$	---	0.868629	0.183316	---	0.353553
$K_{2,5}$	---	0.945907	0.183369	---	0.316228
$K_{2,6}$	---	1.010257	0.182588	---	0.288675
$K_{2,7}$	---	1.064586	0.181501	---	0.267261
$K_{2,8}$	---	1.111111	0.180320	---	0.250000
$K_{2,9}$	---	1.151472	0.179137	---	0.235702
$K_{2,10}$	---	1.186884	0.177992	---	0.223607
$K_{3,3}$	0.866667	0.800000	0.262972	0.262972	0.333333
$K_{3,4}$	---	0.845299	0.266718	---	0.288675
$K_{3,5}$	---	0.893433	0.268416	---	0.258199
$K_{3,6}$	---	0.939340	0.269219	---	0.235702
$K_{3,7}$	---	0.981650	0.269577	---	0.218218
$K_{3,8}$	---	1.020204	0.269697	---	0.204124
$K_{3,9}$	---	1.055245	0.269682	---	0.192450
$K_{3,10}$	---	1.087129	0.269588	---	0.182574
$K_{4,4}$	0.892857	0.857143	0.341522	0.341522	0.250000
$K_{4,5}$	---	0.881966	0.343171	---	0.223607
$K_{4,6}$	---	0.911338	0.344093	---	0.204124
$K_{4,7}$	---	0.941699	0.344636	---	0.188982
$K_{4,8}$	---	0.971481	0.344962	---	0.176777
$K_{4,9}$	---	1.000000	0.345157	---	0.166667
$K_{4,10}$	---	1.026991	0.345269	---	0.158114
$K_{5,5}$	0.911111	0.888889	0.401335	0.401335	0.200000
$K_{5,6}$	---	0.904555	0.402176	---	0.182574
$K_{5,7}$	---	0.924349	0.402703	---	0.169031
$K_{5,8}$	---	0.945907	0.403049	---	0.158114
$K_{5,9}$	---	0.967969	0.403280	---	0.149071
$K_{5,10}$	---	0.989847	0.403438	---	0.141421

Tabela 3.3: Erros de aproximação dos minorantes para o *spread* de Randić de grafos bipartidos completos

G	<i>er C. 3.3.10</i>	<i>er C. 3.3.11</i>	<i>er T. 3.3.14</i>	<i>er C. 3.3.18</i>	<i>er T. 3.3.4</i>
$K_{6,6}$	0.924242	0.909091	0.447928	0.447928	0.166667
$K_{6,7}$	---	0.919877	0.448404	---	0.154303
$K_{6,8}$	---	0.934123	0.448726	---	0.144338
$K_{6,9}$	---	0.950219	0.448952	---	0.136083
$K_{6,10}$	---	0.967204	0.449113	---	0.129099
$K_{7,7}$	0.934066	0.923077	0.485326	0.485326	0.142857
$K_{7,8}$	---	0.930955	0.485617	---	0.133631
$K_{7,9}$	---	0.941699	0.485826	---	0.125988
$K_{7,10}$	---	0.954175	0.485979	---	0.119523
$K_{8,8}$	0.941667	0.933333	0.516129	0.516129	0.125000
$K_{8,9}$	---	0.939340	0.516319	---	0.117851
$K_{8,10}$	---	0.947733	0.516460	---	0.111803
$K_{9,9}$	0.947712	0.941176	0.542044	0.542044	0.111111
$K_{9,10}$	---	0.945907	0.542173	---	0.105409
$K_{10,10}$	0.952632	0.947368	0.564225	0.564225	0.100000
$K_{140,140}$	0.996441	0.996416	0.880691	0.880691	0.007143
$K_{141,300}$	---	1.065138	0.881114	---	0.004862
$K_{142,300}$	---	1.063956	0.881532	---	0.004845
$K_{143,300}$	---	1.062791	0.881945	---	0.004828
$K_{144,300}$	---	1.061643	0.882354	---	0.004811
$K_{145,300}$	---	1.060511	0.882759	---	0.004795
$K_{146,300}$	---	1.059396	0.883160	---	0.004778
$K_{147,300}$	---	1.058296	0.883557	---	0.004762
$K_{148,300}$	---	1.057212	0.883949	---	0.004746
$K_{149,300}$	---	1.056144	0.884338	---	0.004730
$K_{150,300}$	---	1.055091	0.884723	---	0.004714
$K_{151,300}$	---	1.054053	0.885104	---	0.004698
$K_{152,300}$	---	1.053031	0.885481	---	0.004683
$K_{153,300}$	---	1.052023	0.885855	---	0.004668
$K_{154,300}$	---	1.051029	0.886225	---	0.004652
$K_{155,300}$	---	1.050050	0.886591	---	0.004637
$K_{300,300}$	0.998336	0.998331	0.918418	0.918418	0.003333
$K_{300,1000}$	---	1.156701	0.918419	---	0.001826
$K_{1000,1000}$	0.999500	0.999500	0.955290	0.955290	0.001000
$K_{5000,10000}$	---	1.057128	0.980001	---	0.000141
$K_{10000,10000}$	0.999950	0.999950	0.985858	0.985858	0.000100
$K_{20000,20000}$	0.999975	0.999975	0.990000	0.990000	0.000050
$K_{100000,100000}$	0.999995	0.999995	0.995528	0.995528	0.000010

Tabela 3.4: Erros de aproximação dos minorantes para o *spread* de Randić de grafos bipartidos completos (continuação)

Pela análise dos testes computacionais realizados a minorantes para o *spread* de Randić, na classe dos grafos bipartidos completos, observa-se o seguinte:

- Na classe das estrelas (isto é, para $r = 1, s = n - 1$), o minorante dado pelo Teorema 3.3.14 é o que evidencia melhor aproximação ao *spread* de Randić.
- Na classe dos grafos regulares (ou seja, quando $r = s$), a aproximação ao *spread* de Randić dada pelo Teorema 3.3.4 é mais eficaz em cerca de 87% dos casos estudados. Para essa classe de grafos, os valores resultantes da aplicação do Teorema 3.3.4 são cada vez mais próximos do *spread* de Randić, à medida que $r + s = n$ aumenta.
- Relativamente à classe dos grafos bipartidos completos (em geral) e observando os resultados,
 - os valores obtidos pelo Teorema 3.3.14 apresentam uma eficácia melhor para os casos em que $n \leq 7$ (e os resultados obtidos pelo Teorema 3.3.4 permitem obter as segundas melhores aproximações ao *spread* de Randić, em cada caso) enquanto para $n \geq 8$ é o minorante do Teorema 3.3.4 que permite obter os valores mais próximos do *spread* de Randić (e os resultados obtidos pelo Teorema 3.3.14 permitem obter as segundas melhores aproximações ao *spread* de Randić, em cada caso);
 - as aproximações dadas pelo Teorema 3.3.4 são melhores, à medida que $r + s = n$ aumenta e os respetivos erros de aproximação são inferiores a 1% para os casos testados em que $r \geq 140$ e $s \geq 140$;
 - fixado $n \geq 3$, as melhores aproximações para o *spread* de Randić correspondem aos grafos $K_{r,s}$ para os quais $r = 1$ e $s = n - 1$.

Majorantes para o *spread* de Randić de grafos bipartidos completos

G	T. 3.3.2	T. 3.3.6	C. 3.3.7	C. 3.3.8	T. 3.3.19
$K_{1,2}$	2	1.000000	1.154701	1.028198	1.414120
$K_{1,3}$	2	1.154701	1.224745	1.192749	1.732051
$K_{1,4}$	2	1.224745	1.264911	1.264911	2.000000
$K_{1,5}$	2	1.264911	1.290994	1.304553	2.236068
$K_{1,6}$	2	1.290994	1.309307	1.329178	2.449490
$K_{1,7}$	2	1.309307	1.322876	1.345741	2.645751
$K_{1,8}$	2	1.322876	1.333333	1.357522	2.828427
$K_{1,9}$	2	1.333333	1.341641	1.366260	3.000000
$K_{1,10}$	2	1.341641	1.348400	1.372956	3.162278
$K_{2,2}$	2	1.154701	1.224745	1.172604	1.500000
$K_{2,3}$	2	1.224745	1.264911	1.240995	1.724745
$K_{2,4}$	2	1.264911	1.290994	1.280351	1.914214
$K_{2,5}$	2	1.290994	1.309307	1.305761	2.081139
$K_{2,6}$	2	1.309307	1.322876	1.323441	2.232051
$K_{2,7}$	2	1.322876	1.333333	1.336405	2.370829
$K_{2,8}$	2	1.333333	1.341641	1.346291	2.500000
$K_{2,9}$	2	1.341641	1.348400	1.354061	2.621320
$K_{2,10}$	2	1.348400	1.354006	1.360318	2.736068
$K_{3,3}$	2	1.264911	1.290994	1.276569	1.666667
$K_{3,4}$	2	1.290995	1.309307	1.300840	1.821367
$K_{3,5}$	2	1.309307	1.322876	1.318168	1.957661
$K_{3,6}$	2	1.322876	1.333333	1.331085	2.080880
$K_{3,7}$	2	1.333333	1.341641	1.341054	2.194192
$K_{3,8}$	2	1.341641	1.348400	1.348967	2.299660
$K_{3,9}$	2	1.348400	1.354006	1.355391	2.398717
$K_{3,10}$	2	1.354006	1.358732	1.360704	2.492409
$K_{4,4}$	2	1.309307	1.322876	1.316957	1.750000
$K_{4,5}$	2	1.322876	1.333333	1.329393	1.868034
$K_{4,6}$	2	1.333333	1.341641	1.339160	1.974745
$K_{4,7}$	2	1.341641	1.348400	1.346995	2.072876
$K_{4,8}$	2	1.348400	1.354006	1.353403	2.164214
$K_{4,9}$	2	1.354007	1.358732	1.358732	2.250000
$K_{4,10}$	2	1.358732	1.362770	1.363230	2.331139
$K_{5,5}$	2	1.333333	1.341641	1.338656	1.800000
$K_{5,6}$	2	1.341641	1.348400	1.346253	1.895445
$K_{5,7}$	2	1.348400	1.354006	1.352542	1.983216
$K_{5,8}$	2	1.354007	1.358732	1.357813	2.064911
$K_{5,9}$	2	1.358732	1.362770	1.362285	2.141641
$K_{5,10}$	2	1.362770	1.366260	1.366121	2.214214

Tabela 3.5: Majorantes para o *spread* de Randić de grafos bipartidos completos

G	T. 3.3.2	T. 3.3.6	C. 3.3.7	C. 3.3.8	T. 3.3.19
$K_{6,6}$	2	1.348400	1.354006	1.352296	1.833333
$K_{6,7}$	2	1.354007	1.358732	1.357436	1.913457
$K_{6,8}$	2	1.358732	1.362770	1.361835	1.988034
$K_{6,9}$	2	1.362770	1.366260	1.365630	2.058078
$K_{6,10}$	2	1.366260	1.369306	1.368932	2.124328
$K_{7,7}$	2	1.358732	1.362770	1.361700	1.857143
$K_{7,8}$	2	1.362770	1.366260	1.365418	1.926188
$K_{7,9}$	2	1.366260	1.369306	1.368673	1.991036
$K_{7,10}$	2	1.369307	1.371989	1.371540	2.052371
$K_{8,8}$	2	1.366260	1.369306	1.368593	1.875000
$K_{8,9}$	2	1.369307	1.371989	1.371411	1.935660
$K_{8,10}$	2	1.371989	1.374369	1.373920	1.993034
$K_{9,9}$	2	1.371989	1.374369	1.373869	1.888889
$K_{9,10}$	2	1.374369	1.376494	1.376081	1.942981
$K_{10,10}$	2	1.376495	1.378405	1.378042	1.900000
$K_{140,140}$	2	1.656874	1.411686	1.411686	1.992857
$K_{141,300}$	2	1.658933	1.412609	1.412610	2.451558
$K_{142,300}$	2	1.658941	1.412613	1.412614	2.446462
$K_{143,300}$	2	1.658949	1.412616	1.412618	2.441421
$K_{144,300}$	2	1.658957	1.412620	1.412621	2.436431
$K_{145,300}$	2	1.658965	1.412624	1.412625	2.431493
$K_{146,300}$	2	1.658973	1.412627	1.412628	2.426606
$K_{147,300}$	2	1.658981	1.412631	1.412632	2.421769
$K_{148,300}$	2	1.658989	1.412634	1.412635	2.416980
$K_{149,300}$	2	1.658997	1.412638	1.412639	2.412240
$K_{150,300}$	2	1.659005	1.412641	1.412642	2.407547
$K_{151,300}$	2	1.659012	1.412645	1.412646	2.402900
$K_{152,300}$	2	1.659020	1.412648	1.412649	2.398300
$K_{153,300}$	2	1.659028	1.412652	1.412653	2.393744
$K_{154,300}$	2	1.659036	1.412655	1.412656	2.389233
$K_{155,300}$	2	1.995600	1.412659	1.412659	2.384765
$K_{300,300}$	2	1.659881	1.413035	1.413035	1.996667
$K_{300,1000}$	2	1.661296	1.413670	1.413670	2.822409
$K_{1000,1000}$	2	1.661720	1.413860	1.413860	1.999000
$K_{5000,10000}$	2	1.662403	1.414166	1.414166	2.414014
$K_{10000,10000}$	2	1.662429	1.414178	1.414178	1.999900
$K_{20000,20000}$	2	1.662468	1.414196	1.414196	1.999950
$K_{100000,100000}$	2	1.662492	1.414210	1.414210	1.999990

Tabela 3.6: Majorantes para o *spread* de Randić de grafos bipartidos completos (continuação)

Erros de aproximação dos majorantes para o *spread* de Randić de $K_{r,s}$

G	<i>er</i> T. 3.3.2	<i>er</i> T. 3.3.6	<i>er</i> C. 3.3.7	<i>er</i> C. 3.3.8	<i>er</i> T. 3.3.19
$K_{1,2}$	1.000000	0.000000	0.154701	0.028198	0.414120
$K_{1,3}$	1.000000	0.154701	0.224745	0.192749	0.732051
$K_{1,4}$	1.000000	0.224745	0.264911	0.264911	1.000000
$K_{1,5}$	1.000000	0.264911	0.290994	0.304553	1.236068
$K_{1,6}$	1.000000	0.290994	0.309307	0.329178	1.449490
$K_{1,7}$	1.000000	0.309307	0.322876	0.345741	1.645751
$K_{1,8}$	1.000000	0.322876	0.333333	0.357522	1.828427
$K_{1,9}$	1.000000	0.333333	0.341641	0.366260	2.000000
$K_{1,10}$	1.000000	0.341641	0.348400	0.372956	2.162278
$K_{2,2}$	1.000000	0.154701	0.224745	0.172604	0.500000
$K_{2,3}$	1.000000	0.224745	0.264911	0.240995	0.724745
$K_{2,4}$	1.000000	0.264911	0.290994	0.280351	0.914214
$K_{2,5}$	1.000000	0.290994	0.309307	0.305761	1.081139
$K_{2,6}$	1.000000	0.309307	0.322876	0.323441	1.232051
$K_{2,7}$	1.000000	0.322876	0.333333	0.336405	1.370829
$K_{2,8}$	1.000000	0.333333	0.341641	0.346291	1.500000
$K_{2,9}$	1.000000	0.341641	0.348400	0.354061	1.621320
$K_{2,10}$	1.000000	0.348400	0.354006	0.360318	1.736068
$K_{3,3}$	1.000000	0.264911	0.290994	0.276569	0.666667
$K_{3,4}$	1.000000	0.290995	0.309307	0.300840	0.821367
$K_{3,5}$	1.000000	0.309307	0.322876	0.318168	0.957661
$K_{3,6}$	1.000000	0.322876	0.333333	0.331085	1.080880
$K_{3,7}$	1.000000	0.333333	0.341641	0.341054	1.194192
$K_{3,8}$	1.000000	0.341641	0.348400	0.348967	1.299660
$K_{3,9}$	1.000000	0.348400	0.354006	0.355391	1.398717
$K_{3,10}$	1.000000	0.354006	0.358732	0.360704	1.492409
$K_{4,4}$	1.000000	0.309307	0.322876	0.316957	0.750000
$K_{4,5}$	1.000000	0.322876	0.333333	0.329393	0.868034
$K_{4,6}$	1.000000	0.333333	0.341641	0.339160	0.974745
$K_{4,7}$	1.000000	0.341641	0.348400	0.346995	1.072876
$K_{4,8}$	1.000000	0.348400	0.354006	0.353403	1.164214
$K_{4,9}$	1.000000	0.354007	0.358732	0.358732	1.250000
$K_{4,10}$	1.000000	0.358732	0.362770	0.363230	1.331139
$K_{5,5}$	1.000000	0.333333	0.341641	0.338656	0.800000
$K_{5,6}$	1.000000	0.341641	0.348400	0.346253	0.895445
$K_{5,7}$	1.000000	0.348400	0.354006	0.352542	0.983216
$K_{5,8}$	1.000000	0.354007	0.358732	0.357813	1.064911
$K_{5,9}$	1.000000	0.358732	0.362770	0.362285	1.141641
$K_{5,10}$	1.000000	0.362770	0.366260	0.366121	1.214214

Tabela 3.7: Erros de aproximação dos majorantes para o *spread* de Randić de grafos bipartidos completos

G	$er T. 3.3.2$	$er T. 3.3.6$	$er C. 3.3.7$	$er C. 3.3.8$	$er T. 3.3.19$
$K_{6,6}$	1.000000	0.348400	0.354006	0.352296	0.833333
$K_{6,7}$	1.000000	0.354007	0.358732	0.357436	0.913457
$K_{6,8}$	1.000000	0.358732	0.362770	0.361835	0.988034
$K_{6,9}$	1.000000	0.362770	0.366260	0.365630	1.058078
$K_{6,10}$	1.000000	0.366260	0.369306	0.368932	1.124328
$K_{7,7}$	1.000000	0.358732	0.362770	0.361700	0.857143
$K_{7,8}$	1.000000	0.362770	0.366260	0.365418	0.926188
$K_{7,9}$	1.000000	0.366260	0.369306	0.368673	0.991036
$K_{7,10}$	1.000000	0.369307	0.371989	0.371540	1.052371
$K_{8,8}$	1.000000	0.366260	0.369306	0.368593	0.875000
$K_{8,9}$	1.000000	0.369307	0.371989	0.371411	0.935660
$K_{8,10}$	1.000000	0.371989	0.374369	0.373920	0.993034
$K_{9,9}$	1.000000	0.371989	0.374369	0.373869	0.888889
$K_{9,10}$	1.000000	0.374369	0.376494	0.376081	0.942981
$K_{10,10}$	1.000000	0.376495	0.378405	0.378042	0.900000
$K_{140,140}$	1.000000	0.656874	0.411686	0.411686	0.992857
$K_{141,300}$	1.000000	0.658933	0.412609	0.412610	1.451558
$K_{142,300}$	1.000000	0.658941	0.412613	0.412614	1.446462
$K_{143,300}$	1.000000	0.658949	0.412616	0.412618	1.441421
$K_{144,300}$	1.000000	0.658957	0.412620	0.412621	1.436431
$K_{145,300}$	1.000000	0.658965	0.412624	0.412625	1.431493
$K_{146,300}$	1.000000	0.658973	0.412627	0.412628	1.426606
$K_{147,300}$	1.000000	0.658981	0.412631	0.412632	1.421769
$K_{148,300}$	1.000000	0.658989	0.412634	0.412635	1.416980
$K_{149,300}$	1.000000	0.658997	0.412638	0.412639	1.412240
$K_{150,300}$	1.000000	0.659005	0.412641	0.412642	1.407547
$K_{151,300}$	1.000000	0.659012	0.412645	0.412646	1.402900
$K_{152,300}$	1.000000	0.659020	0.412648	0.412649	1.398300
$K_{153,300}$	1.000000	0.659028	0.412652	0.412653	1.393744
$K_{154,300}$	1.000000	0.659036	0.412655	0.412656	1.384765
$K_{155,300}$	1.000000	0.995600	0.412659	0.412659	1.384765
$K_{300,300}$	1.000000	0.659881	0.413035	0.413035	0.996667
$K_{300,1000}$	1.000000	0.661296	0.413670	0.413670	1.822409
$K_{1000,1000}$	1.000000	0.661720	0.413860	0.413860	0.999000
$K_{5000,10000}$	1.000000	0.662403	0.414166	0.414166	1.414014
$K_{10000,10000}$	1.000000	0.662429	0.414178	0.414178	0.999900
$K_{20000,20000}$	1.000000	0.662468	0.414196	0.414196	0.999950
$K_{100000,100000}$	1.000000	0.662492	0.414210	0.414210	0.999990

Tabela 3.8: Erros de aproximação dos majorantes para o *spread* de Randić de grafos bipartidos completos (continuação)

Analisando os testes computacionais realizados a majorantes para o *spread* de Randić, na classe dos grafos bipartidos completos, observa-se o seguinte:

- Para $r < 140$ e $s < 140$, observa-se que os resultados obtidos pelo Teorema 3.3.6 são os melhores na aproximação ao *spread* de Randić dos grafos bipartidos completos $K_{r,s}$.
- Para os casos restantes, o Corolário 3.3.7 é o que permite obter aproximações melhores ao *spread* de Randić (cerca de 39% dessas aproximações são coincidentes com as resultantes da aplicação do majorante do Corolário 3.3.8). Apesar dos valores obtidos para o majorante por esse corolário aumentarem à medida que $n = r + s$ é maior, os erros de aproximação cometidos mantêm-se na ordem dos 41%.

3.4.2 Aproximações ao *Spread* de Randić para Ciclos

Da mesma forma que se apresentaram alguns testes computacionais relativos ao *spread* de Randić de grafos bipartidos completos apresentam-se, agora, tabelas onde estão os resultados de alguns minorantes e majorantes para o *spread* de Randić de ciclos, C_n .

Nas tabelas 3.9 e 3.10 estão os resultados obtidos pelos minorantes dados pelo Corolário 3.3.10 (C. 3.3.10), Corolário 3.3.11 (C. 3.3.11), Teorema 3.3.14 (T. 3.3.14), Corolário 3.3.18 (C. 3.3.18) e Teorema 3.3.4 (T. 3.3.4) e nas tabelas 3.13 e 3.14 são apresentados os resultados da aplicação dos majorantes para o *spread* de Randić obtidos pelo Teorema 3.3.2 (T. 3.3.2), Teorema 3.3.6 (T. 3.3.6), Corolário 3.3.7 (C. 3.3.7), Corolário 3.3.8 (C. 3.3.8) e Teorema 3.3.19 (T. 3.3.19). Os erros associados às aproximações dadas por esses minorantes estão nas tabelas 3.11 e 3.12 enquanto os erros associados às aproximações dadas pelos majorantes estão nas tabelas 3.15 e 3.16.

Minorantes para o *spread* de Randić de ciclos

G	$spr_R(G)$	C. 3.3.10	C. 3.3.11	T. 3.3.14	C. 3.3.18	T. 3.3.4
C_4	1.000000	0.166667	0.333333	1.000000	0.829156	0.500000
C_5	1.118034	0.250000	0.559017	1.095445	1.019804	0.809017
C_6	1.500000	0.300000	0.700000	1.247219	1.118034	1.000000
C_7	1.524459	0.333333	0.790156	1.280287	1.178030	1.123490
C_8	1.707107	0.357143	0.849964	1.322876	1.218349	1.207107
C_9	1.705737	0.375000	0.891044	1.346723	1.247219	1.266044
C_{10}	1.809017	0.388889	0.920128	1.363944	1.268858	1.309017
C_{11}	1.800747	0.400000	0.941254	1.375819	1.285649	1.341254
C_{12}	1.866025	0.409091	0.956934	1.384257	1.299038	1.366025
C_{13}	1.856398	0.416667	0.968789	1.390409	1.309953	1.385456
C_{14}	1.900969	0.423077	0.977892	1.394996	1.319013	1.400969
C_{15}	1.891693	0.428571	0.984974	1.398482	1.326650	1.413545
C_{16}	1.923880	0.433333	0.990546	1.401177	1.333171	1.423880
C_{17}	1.915445	0.437500	0.994972	1.403293	1.338801	1.432472
C_{18}	1.939693	0.441176	0.998516	1.404977	1.343710	1.439693
C_{19}	1.932179	0.444444	1.001373	1.406333	1.348026	1.445817
C_{20}	1.951057	0.447368	1.003688	1.407437	1.351851	1.451057
C_{21}	1.944404	0.450000	1.005573	1.408344	1.355262	1.455573
C_{22}	1.959493	0.452381	1.007112	1.409097	1.358323	1.459493
C_{23}	1.953603	0.454545	1.008372	1.409727	1.361085	1.462917
C_{24}	1.965926	0.456522	1.009404	1.410258	1.363589	1.465926
C_{25}	1.960698	0.458333	1.010250	1.410708	1.365870	1.468583
C_{26}	1.970942	0.460000	1.010942	1.411093	1.367955	1.470942
C_{27}	1.966283	0.461538	1.011506	1.411424	1.369870	1.473045
C_{28}	1.974928	0.462963	1.011965	1.411709	1.371633	1.474928
C_{29}	1.970759	0.464286	1.012335	1.411957	1.373263	1.476621
C_{30}	1.978148	0.465517	1.012630	1.412174	1.374773	1.478148
C_{31}	1.974399	0.466667	1.012863	1.412363	1.376176	1.479530
C_{32}	1.980785	0.467742	1.013043	1.412530	1.377484	1.480785
C_{33}	1.977401	0.468750	1.013179	1.412677	1.378705	1.481929
C_{34}	1.982973	0.469697	1.013276	1.412808	1.379848	1.482973
C_{35}	1.979904	0.470588	1.013341	1.412924	1.380920	1.483930
C_{36}	1.984808	0.471429	1.013379	1.413028	1.381927	1.484808
C_{37}	1.982013	0.472222	1.013394	1.413121	1.382876	1.485616
C_{38}	1.986361	0.472973	1.013388	1.413205	1.383770	1.486361
C_{39}	1.983808	0.473684	1.013366	1.413280	1.384615	1.487050
C_{40}	1.987688	0.474359	1.013329	1.413348	1.385415	1.487688
C_{41}	1.985346	0.475000	1.013280	1.413409	1.386173	1.488280

Tabela 3.9: Minorantes para o *spread* de Randić de ciclos

G	$spr_R(G)$	C. 3.3.10	C. 3.3.11	T. 3.3.14	C. 3.3.18	T. 3.3.4
C_{100}	1.998027	0.489899	1.008128	1.414158	1.403246	1.498027
C_{110}	1.998369	0.490826	1.007543	1.414172	1.404273	1.498369
C_{120}	1.998630	0.491597	1.007033	1.414181	1.405125	1.498630
C_{130}	1.998832	0.492248	1.006584	1.414188	1.405842	1.498832
C_{140}	1.998993	0.492806	1.006187	1.414193	1.406454	1.498993
C_{150}	1.999123	0.493289	1.005834	1.414197	1.406983	1.499123
C_{200}	1.999507	0.494975	1.004532	1.414207	1.408820	1.499507
C_{260}	1.999708	0.496139	1.003569	1.414210	1.410081	1.499708
C_{270}	1.999729	0.496283	1.003447	1.414211	1.410236	1.499729
C_{280}	1.999748	0.496416	1.003332	1.414211	1.410380	1.499748
C_{300}	1.999781	0.496656	1.003125	1.414211	1.410638	1.499781
C_{301}	1.999728	0.496667	1.003115	1.414212	1.410650	1.499782
C_{302}	1.999784	0.496678	1.003106	1.414212	1.410662	1.499784
C_{303}	1.999731	0.496689	1.003096	1.414212	1.410674	1.499785
C_{304}	1.999786	0.496700	1.003087	1.414212	1.410686	1.499786
C_{305}	1.999735	0.496711	1.003077	1.414212	1.410697	1.499788
C_{306}	1.999789	0.496721	1.003068	1.414212	1.410709	1.499789
C_{307}	1.999738	0.496732	1.003059	1.414212	1.410721	1.499791
C_{308}	1.999792	0.496743	1.003049	1.414212	1.410732	1.499792
C_{309}	1.999742	0.496753	1.003040	1.414212	1.410743	1.499793
C_{310}	1.999795	0.496764	1.003031	1.414212	1.410755	1.499795
C_{500}	1.999921	0.497996	1.001925	1.414213	1.412078	1.499921
C_{1000}	1.999980	0.498999	1.000981	1.414214	1.413149	1.499980
C_{1500}	1.999991	0.499333	1.000658	1.414214	1.413505	1.499991
C_{2500}	1.999997	0.499600	1.000397	1.414214	1.413789	1.499997
C_{3000}	1.999998	0.499667	1.000331	1.414214	1.413860	1.499998
C_{3500}	1.999998	0.499714	1.000284	1.414214	1.413910	1.499998
C_{4000}	1.999999	0.499750	1.000249	1.414214	1.413948	1.499999
C_{4500}	1.999999	0.499778	1.000221	1.414214	1.413978	1.499999
C_{5000}	1.999999	0.499800	1.000199	1.414214	1.414001	1.499999
C_{5500}	1.999999	0.499818	1.000181	1.414214	1.414021	1.499999
C_{6000}	1.999999	0.499833	1.000166	1.414214	1.414037	1.499999
C_{6500}	2.000000	0.499846	1.000153	1.414214	1.414050	1.500000
C_{7000}	2.000000	0.499857	1.000142	1.414214	1.414062	1.500000
C_{8000}	2.000000	0.499875	1.000125	1.414214	1.414081	1.500000
C_{9000}	2.000000	0.499889	1.000111	1.414214	1.414096	1.500000
C_{100000}	2.000000	0.499990	1.000010	1.414214	1.414203	1.500000
C_{200000}	2.000000	0.499995	1.000005	1.414214	1.414208	1.500000
C_{300000}	2.000000	0.499997	1.000003	1.414214	1.414210	1.500000

Tabela 3.10: Minorantes para o $sprad$ de Randić de ciclos (continuação)

Erros de aproximação dos minorantes para o *spread* de Randić de C_n

G	<i>er</i> C. 3.3.10	<i>er</i> C. 3.3.11	<i>er</i> T. 3.3.14	<i>er</i> C. 3.3.18	<i>er</i> T. 3.3.4
C_4	0.833333	0.666667	0.000000	0.170844	0.500000
C_5	0.776393	0.500000	0.020204	0.087860	0.276393
C_6	0.800000	0.533333	0.168521	0.254644	0.333333
C_7	0.781343	0.481681	0.160169	0.227247	0.263024
C_8	0.790791	0.502103	0.225077	0.286308	0.292893
C_9	0.780154	0.477619	0.210474	0.268809	0.257773
C_{10}	0.785028	0.491366	0.246030	0.298593	0.276393
C_{11}	0.777870	0.477298	0.235973	0.286047	0.255168
C_{12}	0.780769	0.487180	0.258179	0.303848	0.267949
C_{13}	0.775551	0.478135	0.251018	0.294358	0.253686
C_{14}	0.777441	0.485582	0.266166	0.306136	0.263024
C_{15}	0.773446	0.479316	0.260725	0.298697	0.252762
C_{16}	0.774761	0.485131	0.271692	0.307041	0.259892
C_{17}	0.771594	0.480553	0.267380	0.301050	0.252147
C_{18}	0.772553	0.485219	0.275670	0.307256	0.257773
C_{19}	0.769978	0.481739	0.272152	0.302328	0.251717
C_{20}	0.770705	0.485567	0.278628	0.307119	0.256271
C_{21}	0.768567	0.482837	0.275693	0.302994	0.251404
C_{22}	0.769134	0.486034	0.280887	0.306799	0.255168
C_{23}	0.767330	0.483840	0.278396	0.303295	0.251170
C_{24}	0.767783	0.486550	0.282649	0.306388	0.254333
C_{25}	0.766240	0.484750	0.280507	0.303376	0.250990
C_{26}	0.766609	0.487077	0.284051	0.305938	0.253686
C_{27}	0.765274	0.485574	0.282187	0.303320	0.250848
C_{28}	0.765580	0.487594	0.285184	0.305477	0.253174
C_{29}	0.764413	0.486322	0.283546	0.303181	0.250735
C_{30}	0.764670	0.488092	0.286113	0.305020	0.252762
C_{31}	0.763641	0.487002	0.284662	0.302990	0.250643
C_{32}	0.763860	0.488565	0.286884	0.304577	0.252425
C_{33}	0.762946	0.487621	0.285589	0.302769	0.250567
C_{34}	0.763135	0.489012	0.287530	0.304152	0.252147
C_{35}	0.762318	0.488187	0.286367	0.302532	0.250504
C_{36}	0.762481	0.489432	0.288078	0.303748	0.251914
C_{37}	0.761746	0.488705	0.287027	0.302287	0.250451
C_{38}	0.761890	0.489827	0.288546	0.303364	0.251717
C_{39}	0.761225	0.489181	0.287592	0.302041	0.250406
C_{40}	0.761351	0.490197	0.288949	0.303002	0.251548
C_{41}	0.760747	0.489620	0.288079	0.301798	0.250367

Tabela 3.11: Erros de aproximação dos minorantes para o *spread* de Randić de ciclos

G	$er C. 3.3.10$	$er C. 3.3.11$	$er T. 3.3.14$	$er C. 3.3.18$	$er T. 3.3.4$
C_{100}	0.754809	0.495438	0.292223	0.297684	0.250247
C_{110}	0.754387	0.495817	0.292337	0.297290	0.250204
C_{120}	0.754033	0.496138	0.292425	0.296956	0.250171
C_{130}	0.753732	0.496414	0.292493	0.296669	0.250146
C_{140}	0.753473	0.496653	0.292547	0.296419	0.250126
C_{150}	0.753247	0.496862	0.292591	0.296200	0.250110
C_{200}	0.752451	0.497610	0.292722	0.295416	0.250062
C_{260}	0.751894	0.498142	0.292792	0.294857	0.250037
C_{270}	0.751825	0.498209	0.292799	0.294787	0.250034
C_{280}	0.751761	0.498271	0.292805	0.294721	0.250031
C_{300}	0.751645	0.498382	0.292817	0.294604	0.250027
C_{301}	0.751633	0.498374	0.292798	0.294579	0.250007
C_{302}	0.751634	0.498393	0.292818	0.294593	0.250027
C_{303}	0.751622	0.498384	0.292799	0.294568	0.250007
C_{304}	0.751624	0.498403	0.292819	0.294582	0.250027
C_{305}	0.751612	0.498395	0.292800	0.294558	0.250007
C_{306}	0.751613	0.498413	0.292820	0.294571	0.250026
C_{307}	0.751601	0.498405	0.292802	0.294547	0.250007
C_{308}	0.751603	0.498423	0.292821	0.294561	0.250026
C_{309}	0.751591	0.498415	0.292803	0.294537	0.250006
C_{310}	0.751593	0.498433	0.292822	0.294550	0.250026
C_{500}	0.750992	0.499018	0.292866	0.293933	0.250010
C_{1000}	0.750498	0.499504	0.292886	0.293418	0.250002
C_{1500}	0.750332	0.499669	0.292890	0.293244	0.250001
C_{2500}	0.750200	0.499801	0.292892	0.293105	0.250000
C_{3000}	0.750166	0.499834	0.292892	0.293069	0.250000
C_{3500}	0.750143	0.499858	0.292893	0.293044	0.250000
C_{4000}	0.750125	0.499875	0.292893	0.293025	0.250000
C_{4500}	0.750111	0.499889	0.292893	0.293011	0.250000
C_{5000}	0.750100	0.499900	0.292893	0.292999	0.250000
C_{5500}	0.750091	0.499909	0.292893	0.292989	0.250000
C_{6000}	0.750083	0.499917	0.292893	0.292981	0.250000
C_{6500}	0.750077	0.499923	0.292893	0.292975	0.250000
C_{7000}	0.750071	0.499929	0.292893	0.292969	0.250000
C_{8000}	0.750062	0.499938	0.292893	0.292959	0.250000
C_{9000}	0.750056	0.499944	0.292893	0.292952	0.250000
C_{100000}	0.750005	0.499995	0.292893	0.292899	0.250000
C_{200000}	0.750002	0.499998	0.292893	0.292896	0.250000
C_{300000}	0.750002	0.499998	0.292893	0.292895	0.250000

Tabela 3.12: Erros de aproximação dos minorantes para o *spread* de Randić de ciclos (continuação)

Pela análise dos testes computacionais realizados a minorantes para o *spread* de Randić, na classe dos ciclos, observa-se o seguinte:

- Os resultados obtidos pelo minorante dado pelo Teorema 3.3.14 apresentam uma eficácia melhor na aproximação ao *spread* de Randić dos ciclos C_n para os casos em que $n \leq 13$.
- Para $n \geq 14$, é o minorante do Teorema 3.3.4 que permite obter os valores mais próximos do *spread* de Randić de C_n . Para além disso, o erro cometido nas aproximações efetuadas ao *spread* de Randić a partir desse resultado mantém-se na ordem dos 25%. Para esses casos, o Teorema 3.3.14 permite obter as segundas melhores aproximações ao *spread* de Randić, em cada caso.

Majorantes para o *spread* de Randić de ciclos

G	$spr_R(G)$	T. 3.3.2	T. 3.3.6	C. 3.3.7	C. 3.3.8	T. 3.3.19
C_4	1.000000	2.000000	1.154701	1.224745	1.172604	1.150000
C_5	1.118034	2.000000	1.581139	1.612452	1.612452	1.638197
C_6	1.500000	2.000000	1.897367	1.914854	1.936492	2.041667
C_7	1.524459	2.000000	2.160247	2.171241	2.203893	2.107574
C_8	1.707107	2.000000	2.390457	2.397916	2.436699	2.128141
C_9	1.705737	2.000000	2.598076	2.603417	2.645751	2.129975
C_{10}	1.809017	2.000000	2.788867	2.792848	2.837252	2.124139
C_{11}	1.800747	2.000000	2.966479	2.969542	3.015113	2.115452
C_{12}	1.866025	2.000000	3.133398	3.135815	3.181981	2.106063
C_{13}	1.856398	2.000000	3.291403	3.293350	3.339737	2.096922
C_{14}	1.900969	2.000000	3.441824	3.443420	3.489781	2.088421
C_{15}	1.891693	2.000000	3.585686	3.587014	3.633180	2.080691
C_{16}	1.923880	2.000000	3.723797	3.724916	3.770776	2.073742
C_{17}	1.915445	2.000000	3.856812	3.857765	3.903241	2.067528
C_{18}	1.939693	2.000000	3.985267	3.986087	4.031129	2.061983
C_{19}	1.932179	2.000000	4.109609	4.110321	4.154896	2.057034
C_{20}	1.951057	2.000000	4.230217	4.230839	4.274927	2.052614
C_{21}	1.944404	2.000000	4.347413	4.347961	4.391550	2.048658
C_{22}	1.959493	2.000000	4.461475	4.461960	4.505048	2.045110
C_{23}	1.953603	2.000000	4.572646	4.573078	4.615663	2.041920
C_{24}	1.965926	2.000000	4.681137	4.681524	4.723611	2.039043
C_{25}	1.960698	2.000000	4.787136	4.787484	4.829079	2.036444
C_{26}	1.970942	2.000000	4.890808	4.891122	4.932233	2.034087
C_{27}	1.966283	2.000000	4.992302	4.992587	5.033223	2.031947
C_{28}	1.974928	2.000000	5.091751	5.092011	5.132181	2.029997
C_{29}	1.970759	2.000000	5.189275	5.189512	5.229228	2.028217
C_{30}	1.978148	2.000000	5.284982	5.285199	5.324472	2.026587
C_{31}	1.974399	2.000000	5.378971	5.379171	5.418011	2.025092
C_{32}	1.980785	2.000000	5.471333	5.471517	5.509934	2.023718
C_{33}	1.977401	2.000000	5.562149	5.562319	5.600325	2.022452
C_{34}	1.982973	2.000000	5.651495	5.651653	5.689257	2.021284
C_{35}	1.979904	2.000000	5.739440	5.739587	5.776801	2.020203
C_{36}	1.984808	2.000000	5.826050	5.826186	5.863020	2.019201
C_{37}	1.982013	2.000000	5.911383	5.911510	5.947973	2.018272
C_{38}	1.986361	2.000000	5.995494	5.995612	6.031714	2.017407
C_{39}	1.983808	2.000000	6.078435	6.078546	6.114296	2.016602
C_{40}	1.987688	2.000000	6.160253	6.160357	6.195765	2.015851
C_{41}	1.985346	2.000000	6.240994	6.241091	6.276165	2.015150

Tabela 3.13: Majorantes para o *spread* de Randić de ciclos

G	$spr_R(G)$	T. 3.3.2	T. 3.3.6	C. 3.3.7	C. 3.3.8	T. 3.3.19
C_{100}	1.998027	2.000000	9.898475	9.898485	9.922449	2.002792
C_{110}	1.998369	2.000000	10.391422	10.391430	10.414369	2.002320
C_{120}	1.998630	2.000000	10.862007	10.862013	10.884048	2.001959
C_{130}	1.998832	2.000000	11.313023	11.313029	11.334257	2.001675
C_{140}	1.998993	2.000000	11.746728	11.746732	11.767237	2.001449
C_{150}	1.999123	2.000000	12.164973	12.164977	12.184827	2.001266
C_{200}	1.999507	2.000000	14.070890	14.070892	14.088204	2.000719
C_{260}	1.999708	2.000000	16.062138	16.062139	16.077397	2.000428
C_{270}	1.999729	2.000000	16.370478	16.370479	16.385461	2.000398
C_{280}	1.999748	2.000000	16.673117	16.673118	16.687838	2.000370
C_{300}	1.999781	2.000000	17.262483	17.262483	17.276718	2.000323
C_{301}	1.999728	2.000000	17.291424	17.291424	17.305636	2.000321
C_{302}	1.999784	2.000000	17.320316	17.320317	17.334506	2.000319
C_{303}	1.999731	2.000000	17.349161	17.349161	17.363328	2.000316
C_{304}	1.999786	2.000000	17.377957	17.377958	17.392102	2.000314
C_{305}	1.999735	2.000000	17.406706	17.406707	17.420828	2.000312
C_{306}	1.999789	2.000000	17.435408	17.435408	17.449507	2.000310
C_{307}	1.999738	2.000000	17.464062	17.464063	17.478139	2.000308
C_{308}	1.999792	2.000000	17.492669	17.492670	17.506724	2.000306
C_{309}	1.999742	2.000000	17.521230	17.521231	17.535263	2.000304
C_{310}	1.999795	2.000000	17.549744	17.549745	17.563755	2.000302
C_{500}	1.999921	2.000000	22.315824	22.315824	22.326912	2.000117
C_{1000}	1.999980	2.000000	31.591106	31.591106	31.598979	2.000029
C_{1500}	1.999991	2.000000	38.703988	38.703988	38.710425	2.000013
C_{2500}	1.999997	2.000000	49.979988	49.979988	49.984980	2.000005
C_{3000}	1.999998	2.000000	54.753989	54.753989	54.758547	2.000003
C_{3500}	1.999998	2.000000	59.143887	59.143887	59.148108	2.000002
C_{4000}	1.999999	2.000000	63.229736	63.229736	63.233685	2.000002
C_{4500}	1.999999	2.000000	67.067127	67.067127	67.070851	2.000001
C_{5000}	1.999999	2.000000	70.696532	70.696532	70.700064	2.000001
C_{5500}	1.999999	2.000000	74.148497	74.148497	74.151866	2.000001
C_{6000}	1.999999	2.000000	77.446754	77.446754	77.449979	2.000001
C_{6500}	2.000000	2.000000	80.610171	80.610171	80.613270	2.000001
C_{7000}	2.000000	2.000000	83.654048	83.654048	83.657034	2.000001
C_{8000}	2.000000	2.000000	89.431537	89.431537	89.434330	2.000000
C_{9000}	2.000000	2.000000	94.857787	94.857787	94.860421	2.000000
C_{100000}	2.000000	2.000000	316.224604	316.224604	316.225394	2.000000
C_{200000}	2.000000	2.000000	447.211359	447.211359	447.211918	2.000000
C_{300000}	2.000000	2.000000	547.720732	547.720732	547.721188	2.000000

Tabela 3.14: Majorantes para o *spread* de Randić de ciclos (continuação)

Erros de aproximação dos majorantes para o *spread* de Randić de C_n

G	<i>er</i> T. 3.3.2	<i>er</i> T. 3.3.6	<i>er</i> C. 3.3.7	<i>er</i> C. 3.3.8	<i>er</i> T. 3.3.19
C_4	1.000000	0.154701	0.224745	0.172604	0.250000
C_5	0.788854	0.414214	0.442221	0.442221	0.465248
C_6	0.333333	0.264911	0.276569	0.290994	0.361111
C_7	0.311941	0.417058	0.424270	0.445689	0.382507
C_8	0.171573	0.400297	0.404667	0.427385	0.246636
C_9	0.172514	0.523140	0.526271	0.551090	0.248713
C_{10}	0.105573	0.541648	0.543848	0.568394	0.174195
C_{11}	0.110650	0.647361	0.649062	0.674369	0.174764
C_{12}	0.071797	0.679183	0.680478	0.705218	0.128636
C_{13}	0.077355	0.773005	0.774054	0.799042	0.129565
C_{14}	0.052095	0.810563	0.811403	0.835791	0.098609
C_{15}	0.057254	0.895490	0.896192	0.920597	0.099909
C_{16}	0.039566	0.935567	0.936148	0.959985	0.077896
C_{17}	0.044144	1.013533	1.014030	1.037772	0.079398
C_{18}	0.031091	1.054587	1.055010	1.078231	0.063046
C_{19}	0.035101	1.126930	1.127299	1.150368	0.064619
C_{20}	0.025086	1.168167	1.168486	1.191083	0.052053
C_{21}	0.028593	1.235859	1.236141	1.258559	0.053618
C_{22}	0.020672	1.276852	1.277099	1.299088	0.043694
C_{23}	0.023749	1.340622	1.340843	1.362641	0.045207
C_{24}	0.017332	1.381136	1.381333	1.402741	0.037192
C_{25}	0.020045	1.441547	1.441724	1.462939	0.038632
C_{26}	0.014743	1.481457	1.481617	1.502475	0.032038
C_{27}	0.017147	1.538954	1.539099	1.559765	0.033395
C_{28}	0.012695	1.578196	1.578327	1.598668	0.027884
C_{29}	0.014838	1.633136	1.633256	1.653409	0.029155
C_{30}	0.011047	1.671682	1.671792	1.691645	0.024487
C_{31}	0.012966	1.724358	1.724460	1.744131	0.025675
C_{32}	0.009701	1.762204	1.762297	1.781692	0.021675
C_{33}	0.011429	1.812859	1.812945	1.832165	0.022783
C_{34}	0.008587	1.850011	1.850090	1.869054	0.019320
C_{35}	0.010150	1.898848	1.898922	1.917718	0.020354
C_{36}	0.007654	1.935322	1.935391	1.953948	0.017328
C_{37}	0.009075	1.982514	1.982578	2.000975	0.018294
C_{38}	0.006866	2.018330	2.018390	2.036565	0.015630
C_{39}	0.008162	2.064024	2.064080	2.082101	0.016531
C_{40}	0.006194	2.099205	2.099257	2.117070	0.014169
C_{41}	0.007381	2.143529	2.143578	2.161244	0.015012

Tabela 3.15: Erros de aproximação dos majorantes para o *spread* de Randić de ciclos

G	$er T. 3.3.2$	$er T. 3.3.6$	$er C. 3.3.7$	$er C. 3.3.8$	$er T. 3.3.19$
C_{100}	0.000988	3.954125	3.954130	3.966124	0.002385
C_{110}	0.000816	4.199951	4.199955	4.211434	0.001977
C_{120}	0.000686	4.434727	4.434731	4.445756	0.001666
C_{130}	0.000584	4.659816	4.659819	4.670439	0.001422
C_{140}	0.000504	4.876322	4.876325	4.886582	0.001229
C_{150}	0.000439	5.085156	5.085157	5.095087	0.001072
C_{200}	0.000247	6.037181	6.037182	6.045840	0.000606
C_{260}	0.000146	7.032242	7.032242	7.039872	0.000360
C_{270}	0.000135	7.186347	7.186348	7.193840	0.000334
C_{280}	0.000126	7.337608	7.337608	7.344969	0.000311
C_{300}	0.000110	7.632188	7.632188	7.639307	0.000271
C_{301}	0.000136	7.646889	7.646890	7.653997	0.000297
C_{302}	0.000108	7.661095	7.661096	7.668191	0.000268
C_{303}	0.000134	7.675746	7.675746	7.682831	0.000293
C_{304}	0.000107	7.689907	7.689907	7.696980	0.000264
C_{305}	0.000133	7.704507	7.704508	7.711569	0.000289
C_{306}	0.000105	7.718623	7.718623	7.725673	0.000261
C_{307}	0.000131	7.733174	7.733174	7.740214	0.000285
C_{308}	0.000104	7.747245	7.747245	7.754273	0.000257
C_{309}	0.000129	7.761747	7.761747	7.768764	0.000281
C_{310}	0.000103	7.775773	7.775774	7.782779	0.000254
C_{500}	0.000039	10.158352	10.158352	10.163897	0.000098
C_{1000}	0.000010	14.795709	14.795709	14.799646	0.000025
C_{1500}	0.000004	18.352079	18.352079	18.355297	0.000011
C_{2500}	0.000002	23.990033	23.990033	23.992529	0.000004
C_{3000}	0.000001	26.377025	26.377025	26.379304	0.000003
C_{3500}	0.000001	28.571968	28.571968	28.574078	0.000002
C_{4000}	0.000001	30.614887	30.614887	30.616862	0.000002
C_{4500}	0.000000	32.533580	32.533580	32.535442	0.000001
C_{5000}	0.000000	34.348280	34.348280	34.350046	0.000001
C_{5500}	0.000000	36.074261	36.074261	36.075945	0.000001
C_{6000}	0.000000	37.723387	37.723387	37.725000	0.000001
C_{6500}	0.000000	39.305095	39.305095	39.306644	0.000001
C_{7000}	0.000000	40.827032	40.827032	40.828525	0.000001
C_{8000}	0.000000	43.715775	43.715775	43.717172	0.000000
C_{9000}	0.000000	46.428899	46.428899	46.430216	0.000000
C_{100000}	0.000000	157.112302	157.112302	157.112697	0.000000
C_{200000}	0.000000	222.605680	222.605680	222.605959	0.000000
C_{300000}	0.000000	272.860366	272.860366	272.860594	0.000000

Tabela 3.16: Erros de aproximação dos majorantes para o *spread* de Randić de ciclos (continuação)

Analisando os testes computacionais realizados a majorantes para o *spread* de Randić na classe dos ciclos, observa-se o seguinte:

- O majorante dado pelo Teorema 3.3.2 é o que permite obter aproximações mais eficazes ao *spread* de Randić de ciclos, em cerca de 97% dos casos estudados.
- Apesar de não ser o majorante mais eficaz na aproximação ao *spread* de Randić para a maior parte dos casos estudados na classe dos ciclos, o majorante do Teorema 3.3.19 é o que permite obter as segundas melhores aproximações, para cada caso, em cerca de 96% dos exemplos. Alguns dos resultados obtidos a partir desse Teorema 3.3.19 coincidem com os obtidos a partir do Teorema 3.3.2 (para C_n e $n \geq 21$, quando arredondados a 1 casa decimal, para C_n e $n \geq 100$, quando arredondados a 2 casas decimais, ou para C_n e $n \geq 8000$, quando arredondados a 6 casas decimais).

3.4.3 Aproximações ao *Spread* de Randić para Grafos da Coleção *Second DIMACS Implementation*

Os próximos resultados são obtidos para avaliar a eficácia de alguns minorantes e majorantes para o *spread* de Randić de alguns grafos pertencentes à coleção *Second DIMACS Implementation*, [61].

Na tabela 3.17 estão os resultados obtidos pelos minorantes (e respetivos erros de aproximação) para o *spread* de Randić do Corolário 3.3.11 (C. 3.3.11) e do Teorema 3.3.4 (T 3.3.4) e na tabela 3.18 são apresentados os resultados da aplicação dos majorantes dados pelo Teorema 3.3.6 (T. 3.3.6), Corolário 3.3.7 (C. 3.3.7) e Corolário 3.3.8 (C. 3.3.8). Os respetivos erros de aproximação estão registados na tabela 3.19.

Neste estudo computacional não foram considerados os minorantes relativos ao Corolário 3.3.10, ao Teorema 3.3.14 e ao Corolário 3.3.18, uma vez que esses resultados recorrem a parâmetros que não são de fácil acesso relativamente aos grafos em questão. Pela mesma razão, não foram estudados os majorantes relativos ao Teorema 3.3.2 e ao Teorema 3.3.19.

Minorantes para o *spread* de Randić de grafos pertencentes à coleção *Second DIMACS Implementation* e respetivos erros de aproximação

G	(n, m)	$spr_R(G)$	C. 3.3.11	er	T. 3.3.4	er
CBROCK21	(200,5066)	0.473057	0.236272	0.500541	0.254409	0.462202
CBROCK22	(200,10024)	0.270069	0.136084	0.496113	0.142109	0.473803
CBROCK23	(200,15704)	0.344236	0.170122	0.505799	0.173118	0.497095
CBROCK24	(200,7852)	0.386003	0.188939	0.510526	0.198902	0.484713
CBROCK41	(400,20077)	0.340528	0.171570	0.496164	0.180774	0.469136
CBROCK42	(400,20014)	0.343920	0.171272	0.502002	0.180395	0.475474
CBROCK43	(400,20119)	0.335867	0.165137	0.508325	0.174246	0.481207
CBROCK44	(400,20035)	0.338929	0.168019	0.504264	0.177212	0.477142
CCFAT21	(200,18366)	0.126901	0.037120	0.707487	0.089345	0.295948
CCFAT22	(200,16665)	0.261778	0.071850	0.725531	0.188948	0.278214
CCFAT25	(200,11427)	0.767675	0.209012	0.727734	0.554906	0.277161
CCFAT51	(500,120291)	0.057140	0.016385	0.713247	0.040679	0.288087
CCFAT52	(500,115611)	0.110515	0.029819	0.730182	0.080535	0.271275
CCFAT55	(500,101559)	0.297575	0.079001	0.734518	0.218114	0.267028
CCFAT510	(500,78123)	0.682908	0.202023	0.704173	0.479685	0.297586
CFAT52	(500,9139)	1.361638	0.993560	0.270320	1.018921	0.251695
CHAM82	(256,1024)	1.750000	0.753922	0.569188	0.875000	0.500000
CPHAT31	(300,33917)	0.137967	0.066878	0.515263	0.070652	0.487905
CPHAT32	(300,22922)	0.241763	0.093188	0.614548	0.122686	0.492537
CPHAT33	(300,11460)	0.383650	0.165173	0.569471	0.198898	0.481565
CPHAT51	(500,93181)	0.108862	0.051949	0.522796	0.055217	0.492777
CSAN271	(200,5970)	1.007058	0.200276	0.801127	0.792859	0.212698
CSAN272	(200,5970)	0.927297	0.228274	0.753828	0.652042	0.296836
CSAN291	(200,1990)	1.304366	0.461990	0.645813	0.764618	0.413801
CSAN292	(200,1990)	1.180124	0.410267	0.652353	0.713267	0.395600
CSAN293	(200,1990)	1.088206	0.437996	0.597506	0.597465	0.450963
CSAN451	(400,39900)	0.865508	0.164547	0.809885	0.696740	0.194993
CSAN471	(400,23940)	0.989099	0.140899	0.857548	0.841383	0.149344
CSAN472	(400,23940)	0.950855	0.158364	0.833451	0.785586	0.173811
CSAN491	(400,7980)	1.193368	0.340758	0.714457	0.825237	0.308481
CSANR27	(200,6032)	0.414361	0.205277	0.504593	0.219442	0.470408
CSANR29	(200,2037)	0.811260	0.395422	0.512582	0.451024	0.444044
CJOH1624	(120,1680)	0.500000	0.436975	0.126050	0.464286	0.071429
KEL4	(171,9435)	0.366994	0.158668	0.567654	0.203973	0.444206
CMANN27	(378,702)	1.530866	0.748127	0.511305	1.075998	0.297131
CMANN27S	(378,702)	1.530866	0.748127	0.511305	1.075998	0.297131

Tabela 3.17: Minorantes para o *spread* de Randić de grafos pertencentes à coleção *Second DIMACS Implementation* e respetivos erros de aproximação

Pela análise dos testes computacionais realizados a minorantes para o *spread* de Randić de grafos pertencentes à coleção *Second DIMACS Implementation*, é possível observar o seguinte:

- O Teorema 3.3.4 é o resultado que permite obter os valores maiores e, por isso, as melhores aproximações ao *spread* de Randić entre os dois minorantes estudados.
- Essas aproximações ao *spread* de Randić parecem ser mais eficazes, em geral, no caso das famílias CCFAT e CSAN.
- Os valores mais próximos do *spread* de Randić, calculados a partir do Corolário 3.3.11 e do Teorema 3.3.4, acontecem para o mesmo caso: o grafo CJOH1624.

Majorantes para o *spread* de Randić de grafos pertencentes à coleção *Second*

DIMACS Implementation

G	(n, m)	$spr_R(G)$	T. 3.3.6	C. 3.3.7	C. 3.3.8
CBROCK21	(200,5066)	0.473057	2.456218	2.425488	2.425565
CBROCK22	(200,10024)	0.270069	1.411040	1.407245	1.407244
CBROCK23	(200,15704)	0.344236	1.762772	1.756111	1.756098
CBROCK24	(200,7852)	0.386003	1.985288	1.965455	1.965472
CBROCK41	(400,20077)	0.340528	2.525102	2.442055	2.442075
CBROCK42	(400,20014)	0.343920	2.609911	2.447285	2.447305
CBROCK43	(400,20119)	0.335867	2.445905	2.438735	2.438755
CBROCK44	(400,20035)	0.338929	2.468965	2.445610	2.445630
CCFAT21	(200,18366)	0.126901	0.807683	0.409788	0.409727
CCFAT22	(200,16665)	0.261778	0.624679	0.624686	0.624648
CCFAT25	(200,11427)	0.767675	1.249702	1.220789	1.220780
CCFAT51	(500,120291)	0.057140	1.662125	0.272567	0.272552
CCFAT52	(500,115611)	0.110515	4.632015	0.398023	0.398013
CCFAT55	(500,101559)	0.297575	4.326664	0.676476	0.676470
CCFAT510	(500,78123)	0.682908	1.417038	1.093646	1.093644
CFAT52	(500,9139)	1.361638	5.039238	5.039080	5.039207
CHAM82	(256,1024)	1.750000	7.873510	7.873512	7.875364
CPHAT31	(300,33917)	0.137967	1.353044	0.803955	0.803943
CPHAT32	(300,22922)	0.241763	1.524976	1.373159	1.373157
CPHAT33	(300,11460)	0.383650	2.471915	2.404497	2.404529
CPHAT51	(500,93181)	0.108862	3.992423	0.823727	0.823722
CSAN271	(200,5970)	1.007058	2.170807	2.163550	2.163601
CSAN272	(200,5970)	0.927297	2.102119	2.084109	2.084156
CSAN291	(200,1990)	1.304366	4.155792	4.155748	4.156196
CSAN292	(200,1990)	1.180124	4.245623	4.245606	4.246066
CSAN293	(200,1990)	1.088206	4.253545	4.253526	4.253990
CSAN451	(400,39900)	0.865508	1.417785	1.412330	1.412330
CSAN471	(400,23940)	0.989099	2.168458	2.162932	2.162945
CSAN472	(400,23940)	0.950855	2.257463	2.162442	2.162455
CSAN491	(400,7980)	1.193368	4.261932	4.247752	4.247868
CSANR27	(200,6032)	0.414361	2.155253	2.149849	2.149898
CSANR29	(200,2037)	0.811260	4.197084	4.197087	4.197529
CJOH1624	(120,1680)	0.500000	2.560200	2.560227	2.560488
KEL4	(171,9435)	0.366994	1.048791	1.042353	1.042329
CMANN27	(378,702)	1.530866	13.783863	13.783857	13.788166
CMANN27S	(378,702)	1.530866	13.783863	13.783857	13.788166

Tabela 3.18: Majorantes para o *spread* de Randić de grafos pertencentes à coleção *Second DIMACS Implementation*

Erros de aproximação dos majorantes para o *spread* de Randić de grafos pertencentes à coleção *Second DIMACS Implementation*

G	(n, m)	$spr_R(G)$	er T. 3.3.6	er C. 3.3.7	er C. 3.3.8
CBROCK21	(200,5066)	0.473057	4.192226	4.127265	4.127430
CBROCK22	(200,10024)	0.270069	4.224748	4.210695	4.210693
CBROCK23	(200,15704)	0.344236	4.120828	4.101479	4.101440
CBROCK24	(200,7852)	0.386003	4.143189	4.091810	4.091854
CBROCK41	(400,20077)	0.340528	6.415262	6.171385	6.171444
CBROCK42	(400,20014)	0.343920	6.588712	6.115851	6.115910
CBROCK43	(400,20119)	0.335867	6.282359	6.261013	6.261072
CBROCK44	(400,20035)	0.338929	6.284606	6.215697	6.215756
CCFAT21	(200,18366)	0.126901	5.364666	2.229193	2.228713
CCFAT22	(200,16665)	0.261778	1.386292	1.386321	1.386173
CCFAT25	(200,11427)	0.767675	0.627905	0.590243	0.590231
CCFAT51	(500,120291)	0.057140	28.088446	3.770132	3.769875
CCFAT52	(500,115611)	0.110515	40.913081	2.601537	2.601446
CCFAT55	(500,101559)	0.297575	13.539747	1.273296	1.273277
CCFAT510	(500,78123)	0.682908	1.075005	0.601454	0.601451
CFAT52	(500,9139)	1.361638	2.700865	2.700749	2.700842
CHAM82	(256,1024)	1.750000	3.499148	3.499150	3.500208
CPHAT31	(300,33917)	0.137967	8.807003	4.827148	4.827058
CPHAT32	(300,22922)	0.241763	5.307722	4.679764	4.679758
CPHAT33	(300,11460)	0.383650	5.443144	5.267418	5.267502
CPHAT51	(500,93181)	0.108862	35.674124	6.566696	6.566657
CSAN271	(200,5970)	1.007058	1.155594	1.148388	1.148438
CSAN272	(200,5970)	0.927297	1.266932	1.247511	1.247562
CSAN291	(200,1990)	1.304366	2.186062	2.186028	2.186371
CSAN292	(200,1990)	1.180124	2.597609	2.597594	2.597984
CSAN293	(200,1990)	1.088206	2.908770	2.908752	2.909179
CSAN451	(400,39900)	0.865508	0.638095	0.631792	0.631792
CSAN471	(400,23940)	0.989099	1.192358	1.186771	1.186784
CSAN472	(400,23940)	0.950855	1.374139	1.274207	1.274221
CSAN491	(400,7980)	1.193368	2.571347	2.559464	2.559561
CSANR27	(200,6032)	0.414361	4.201387	4.188345	4.188465
CSANR29	(200,2037)	0.811260	4.173539	4.173542	4.174087
CJOH1624	(120,1680)	0.500000	4.120399	4.120454	4.120977
KEL4	(171,9435)	0.366994	1.857789	1.840246	1.840183
CMANN27	(378,702)	1.530866	8.003967	8.003963	8.006778
CMANN27S	(378,702)	1.530866	8.003967	8.003963	8.006778

Tabela 3.19: Erros de aproximação dos majorantes para o *spread* de Randić de grafos pertencentes à coleção *Second DIMACS Implementation*

Analisando os testes computacionais realizados a majorantes para o *spread* de Randić de grafos pertencentes à coleção *Second DIMACS Implementation*, observa-se o seguinte:

- O majorante dado pelo Corolário 3.3.8 é o que permite aproximações mais eficazes ao *spread* de Randić, em cerca de 56% dos casos estudados.
- Verifica-se uma tendência geral para se destacar a eficácia de um determinado majorante para o *spread* de Randić numa determinada classe de grafos. Por exemplo, o Corolário 3.3.8 é o que permite obter as aproximações mais eficazes ao *spread* de Randić na classe dos grafos CCFAT enquanto o Corolário 3.3.7 é o majorante para o *spread* de Randić com mais eficácia para grafos da classe CSAN.
- Os valores mais próximos do *spread* de Randić, calculados a partir do majorante dado pelo Teorema 3.3.6 e dos Corolários 3.3.7 e 3.3.8, acontecem para o mesmo caso: o grafo CCFAT25.

Capítulo 4

Energia e Energia de Randić de Grafos *Caterpillar*

Neste capítulo, apresenta-se uma motivação para o estudo do grafo *caterpillar* com ligação à Química. Caracteriza-se, então, o espectro e o espectro de Randić de grafos *caterpillar*, vistos como *H-join* de grafos, e definem-se majorantes e minorantes para a sua energia e energia de Randić. No final do capítulo são apresentados estudos computacionais para avaliar a eficácia de alguns majorantes na aproximação à energia e à energia de Randić de grafos *caterpillar*.

Os conceitos e resultados deste capítulo estão publicados em [1, 40, 41].

4.1 Grafos *Caterpillar* na Química Matemática

Desde o século XIX, mais especificamente desde 1874, que a teoria dos grafos é usada na investigação em Química, dando origem a uma nova área de investigação: Teoria dos Grafos aplicada à Química (*Chemical Graph Theory* – CGT). Nesse ano, o matemático

inglês Arthur Cayley publicou um estudo sobre isômeros¹, *On the mathematical theory of isomers*, [16], o qual tem sido considerado como aquele que, de forma mais marcante, originou o desenvolvimento da Teoria dos Grafos aplicada à Química. Já antes, alguns autores como Couper (1858) ou Laurent (1864) desenvolveram ideias que antecipavam a ligação entre a Teoria dos Grafos e a Química, [35]. Nos anos 30 do século passado, surge uma das mais importantes descobertas na área da Química Orgânica: Erich Hückel definiu um método para encontrar soluções aproximadas da equação de Schrödinger na classe dos hidrocarbonetos conjugados, [30, 47].

Os grafos moleculares podem representar hidrocarbonetos saturados (hidrocarbonetos cujos átomos de carbono se interligam apenas com ligações simples) ou sistemas conjugados de elétrons- π (por exemplo os hidrocarbonetos aromáticos). É a esta segunda classe, de entre as referidas, que dizem respeito as aplicações descritas nesta tese.

Uma condição necessária para que um hidrocarboneto aromático seja quimicamente estável é ter *estruturas de Kekulé* que descrevem a distribuição de elétrons- π , ou seja as ligações duplas, nesse hidrocarboneto aromático, [80]. Nesse caso, o grafo molecular correspondente deve ter emparelhamentos perfeitos². Na literatura são designados por *grafos Kekulé* ou, de uma forma mais genérica, *estruturas de Kekulé*, [26]. As estruturas de *Kekulé* desempenham um papel significativo em diversas teorias químicas onde a teoria da ressonância e a teoria das ligações de valência são dos exemplos mais conhecidos, [26]. Em 1972, Erich Clar, [19], define um *sexteto aromático*. Numa estrutura de Kekulé, um sexteto aromático, abreviadamente *sexteto* e por vezes também designado por π -sexteto aromático, é definido como um conjunto de três ligações duplas conjugadas de forma circular, como em cada uma das duas estruturas Kekulé do benzeno, e é representado por um círculo que simboliza a mobilidade dos 6 elétrons- π no benzeno, [19]. Na terminologia

¹Isômeros são compostos químicos que têm a mesma fórmula molecular mas diferentes fórmulas estruturais.

²Um *emparelhamento* de um grafo é um subconjunto de arestas do grafo sem lacetes que não contém arestas adjacentes ou seja arestas que são incidentes num mesmo vértice enquanto um *emparelhamento perfeito* é um subconjunto de arestas do grafo sem lacetes que não contém duas arestas adjacentes (arestas incidentes num mesmo vértice) e onde cada vértice do grafo tem uma aresta do emparelhamento que lhe é incidente.

de Clar, num sistema aromático existem apenas anéis de benzeno, representados por hexágonos regulares com sextetos e anéis vazios. Substituindo as três ligações duplas que alternam num hexágono de uma estrutura de Kekulé por um círculo, de tal forma que os círculos não podem ser representados em hexágonos com arestas em comum, obtém-se a *Fórmula Generalizada de Clar* de um sistema aromático, [80]. Esta ideia surge como uma consequência das três regras que Ivan Gutman enunciou para a construção de estruturas Clar, [3]:

- Dois círculos não podem ser desenhados em hexágonos com arestas em comum (hexágonos vizinhos);
- Os círculos devem ser desenhados de tal forma que a estrutura de Kekulé possa ser escrita para o resto da molécula;
- A fórmula deverá conter o número máximo de círculos.

As seguintes imagens representam três fórmulas de Clar, c_1 , c_2 e c_3 . Observe-se que as fórmulas c_4 , c_5 e c_6 estão incorretas, dado que não respeitam, respetivamente, a primeira, a segunda e a terceira regras enunciadas anteriormente, [45]:

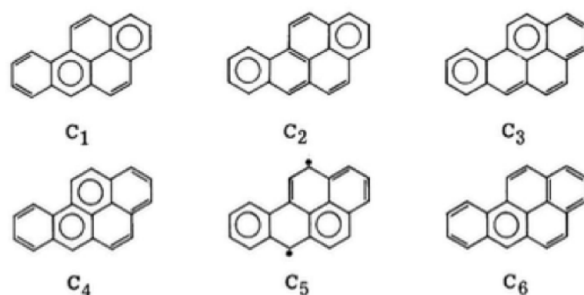


Figura 4.1: Fórmulas de Clar, [45].

A informação sobre as relações de ressonância (sobre os hexágonos individuais) é descrita de uma forma mais eficiente recorrendo a um grafo Clar ou a um *caterpillar* (por vezes também designado por *árvore de Gutman*), [31]. Um grafo Clar de um sistema aromático é um grafo cujos vértices correspondem aos hexágonos do sistema aromático e onde dois vértices são adjacentes se e só se não é possível existirem, simultaneamente, sextetos aromáticos (círculos na fórmula generalizada de Clar) nos hexágonos correspondentes, [48]. Em 1977, Ivan Gutman mostrou que existe uma árvore da qual cada grafo Clar é o grafo linha. De forma a clarificar as relações descritas, estão representados, em [31], um sistema aromático e os grafos Clar e *caterpillar* associados, como nas imagens seguintes:

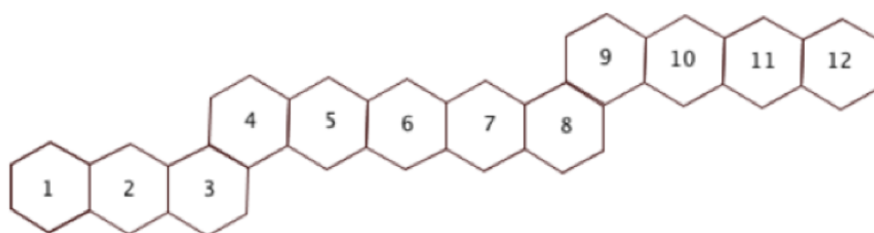


Figura 4.2: Exemplo de um sistema aromático

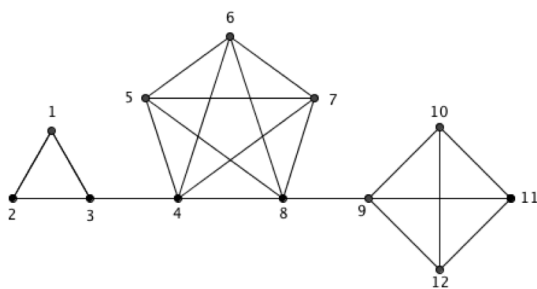


Figura 4.3: Grafo Clar associado ao sistema aromático

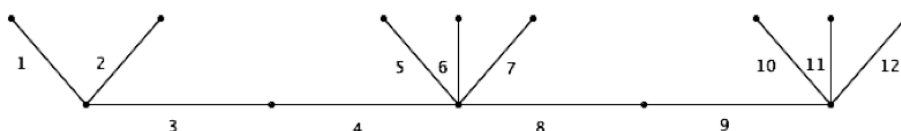


Figura 4.4: *Caterpillar* associado ao sistema aromático

Para este exemplo, o conjunto dos hexágonos do sistema aromático (e o das arestas do *caterpillar* associado) pode ser agrupado em três subconjuntos: $\{1, 2, 3\}$, $\{4, 5, 6, 7, 8\}$ e $\{9, 10, 11, 12\}$. Assim, se dois hexágonos pertencem ao mesmo subconjunto então eles não são ressonantes, [31]. Desta forma, o número de combinações de k hexágonos simultaneamente ressonantes num sistema aromático é igual ao número de emparelhamentos com k arestas do *caterpillar* associado. Para mais informações sobre a importância de grafos *caterpillar* na Química teórica, pode ser consultada, por exemplo, a referência [49].

4.2 Espectro de Randić e *Spread* de Randić do *H-join* de Grafos

De forma a estudar o espectro de Randić de grafos que são o *H-join* de famílias de grafos regulares, introduz-se alguma notação e apresentam-se algumas relações necessárias ao desenvolvimento das próximas ideias.

Considere-se H um grafo com k vértices não isolados e G_1, \dots, G_k uma sequência

de k grafos p_j -regulares, disjuntos, de ordens n_j , $j \in \{1, \dots, k\}$ e $G = H[G_1, \dots, G_k]$. Considere-se, também, que A_j e R_j representam, respetivamente, a matriz de adjacência e a matriz de Randić de G_j , para $j \in \{1, \dots, k\}$. Nas condições apresentadas, é possível concluir que a matriz de Randić para cada grafo regular G_j , com $j \in \{1, \dots, k\}$ tem a forma:

$$R_j = \begin{cases} \frac{1}{p_j} A_j, & \text{se } p_j > 0 \\ \mathbf{O}, & \text{se } p_j = 0. \end{cases}$$

Defina-se, agora, N_j da seguinte forma:

$$N_j = \sum_{v_i \in N_H(v_j)} n_i, \quad j \in \{1, \dots, k\}.$$

Como habitualmente, $A(H) = [\delta_{ij}]$ é a matriz de adjacência de H , de ordem k .

Note-se que o grau dos vértices de cada grafo G_j em G é igual a $N_j + p_j$, $j \in \{1, \dots, k\}$. Uma vez que os blocos da diagonal principal da matriz de Randić de G se referem a relações entre os vértices do mesmo grafo G_j então, de acordo com a definição da matriz de Randić, esses blocos são iguais a

$$\frac{1}{\sqrt{(N_j + p_j)(N_j + p_j)}} A_j = \frac{1}{N_j + p_j} A_j,$$

para cada $j \in \{1, \dots, k\}$. Por outro lado, todas as entradas restantes da matriz de Randić de G referem-se a relações de adjacência entre vértices que pertencem a grafos G_i e G_j distintos, com $i, j \in \{1, \dots, k\}$.

Define-se, agora, o vetor ρ de dimensão $\frac{k(k-1)}{2}$,

$$\rho = (\rho_{12}, \rho_{13}, \dots, \rho_{1k}, \rho_{23}, \dots, \rho_{2k}, \dots, \rho_{(k-1)k})$$

da seguinte forma:

$$\rho_{ij} = \frac{\delta_{ij} \sqrt{n_i n_j}}{\sqrt{(N_i + p_i)(N_j + p_j)}},$$

onde $i \in \{1, \dots, k-1\}$, $j \in \{i+1, \dots, k\}$ e, como já visto, δ_{ij} é a entrada (i, j) da matriz $\mathbf{A}(H)$. Note-se que é necessário definir $\frac{k(k-1)}{2}$ escalares para as entradas da matriz de Randić de G correspondentes a vértices que pertencem a grafos G_j distintos, $j \in \{1, \dots, k\}$. Tendo em conta a definição da matriz de Randić, o bloco na matriz correspondente a vértices de G_i , todos com grau $N_i + p_i$, e vértices de G_j , todos com grau $N_j + p_j$, para alguns $i, j \in \{1, \dots, k\}$ tem dimensão $n_i \times n_j$ e a forma

$$\frac{\delta_{ij} \mathbf{e}_{n_i} \mathbf{e}_{n_j}^T}{\sqrt{(N_i + p_i)(N_j + p_j)}} = \frac{\rho_{ij} \mathbf{e}_{n_i} \mathbf{e}_{n_j}^T}{\sqrt{n_i n_j}}.$$

A matriz de Randić de $G = H[G_1, \dots, G_k]$ é, então, dada por:

$$\mathbf{R}(G) = \begin{pmatrix} \frac{1}{N_1 + p_1} \mathbf{A}_1 & \frac{\rho_{12} \mathbf{e}_{n_1} \mathbf{e}_{n_2}^T}{\sqrt{n_1 n_2}} & \dots & \dots & \frac{\rho_{1k} \mathbf{e}_{n_1} \mathbf{e}_{n_k}^T}{\sqrt{n_1 n_k}} \\ \frac{\rho_{12} \mathbf{e}_{n_2} \mathbf{e}_{n_1}^T}{\sqrt{n_1 n_2}} & \frac{1}{N_2 + p_2} \mathbf{A}_2 & \frac{\rho_{23} \mathbf{e}_{n_2} \mathbf{e}_{n_3}^T}{\sqrt{n_2 n_3}} & \dots & \frac{\rho_{2k} \mathbf{e}_{n_2} \mathbf{e}_{n_k}^T}{\sqrt{n_2 n_k}} \\ \vdots & \frac{\rho_{23} \mathbf{e}_{n_3} \mathbf{e}_{n_2}^T}{\sqrt{n_2 n_3}} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \frac{\rho_{(k-1)k} \mathbf{e}_{n_{k-1}} \mathbf{e}_{n_k}^T}{\sqrt{n_{k-1} n_k}} \\ \frac{\rho_{1k} \mathbf{e}_{n_k} \mathbf{e}_{n_1}^T}{\sqrt{n_1 n_k}} & \frac{\rho_{2k} \mathbf{e}_{n_k} \mathbf{e}_{n_2}^T}{\sqrt{n_2 n_k}} & \dots & \frac{\rho_{(k-1)k} \mathbf{e}_{n_k} \mathbf{e}_{n_{k-1}}^T}{\sqrt{n_{k-1} n_k}} & \frac{1}{N_k + p_k} \mathbf{A}_k \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Observe-se que para $j \in \{1, \dots, k\}$ $\frac{p_j}{N_j + p_j}$ é um valor próprio da matriz $\frac{1}{N_j + p_j} \mathbf{A}_j$, uma vez que os grafos G_j são regulares e p_j é um valor próprio de cada grafo G_j . Por outro lado, dado que

$$\left(\frac{1}{N_j + p_j} \mathbf{A}_j \right) \mathbf{e}_{n_j} = \frac{p_j}{N_j + p_j} \mathbf{e}_{n_j}, \quad j \in \{1, \dots, k\},$$

$\left(\frac{p_j}{N_j + p_j}, \mathbf{e}_{n_j} \right)$ são pares próprios das matrizes $\frac{1}{N_j + p_j} \mathbf{A}_j$, para $j \in \{1, \dots, k\}$.

De forma a usar a generalização do Lema de Fiedler dada pelo Teorema 2.0.6 para a determinação do espectro da matriz de Randić do H -join de grafos regulares, constrói-se

a matriz Γ_k , de ordem k , com os valores $\frac{p_j}{N_j + p_j}$ na diagonal principal e com os $\frac{k(k-1)}{2}$ escalares nas entradas fora da diagonal principal. Seja então Γ_k da seguinte forma:

$$\Gamma_k = \begin{pmatrix} \frac{p_1}{N_1 + p_1} & \rho_{12} & \cdots & \rho_{1(k-1)} & \rho_{1k} \\ \rho_{12} & \frac{p_2}{N_2 + p_2} & \cdots & \rho_{2(k-1)} & \rho_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \rho_{1k} & \rho_{2k} & \cdots & \rho_{(k-1)k} & \frac{p_k}{N_k + p_k} \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

O resultado seguinte recorre à generalização do Lema de Miroslav Fiedler apresentada no Teorema 2.0.6, e permite descrever o espectro de Randić de um grafo G que é o H -join de grafos regulares.

Teorema 4.2.1. *Seja H um grafo com k vértices e sem vértices isolados. Considere-se que $G = H[G_1, \dots, G_k]$, onde cada G_j é um grafo p_j -regular com n_j vértices, $p_j \geq 0$, $n_j \geq 1$, $j \in \{1, \dots, k\}$. Então*

$$\sigma(\mathbf{R}(G)) = \bigcup_{j=1}^k \left\{ \frac{\lambda}{N_j + p_j} : \lambda \in \sigma_{G_j} \setminus \{p_j\} \right\} \cup \sigma(\Gamma_k).$$

Demonstração. O resultado surge como uma consequência do Teorema 2.0.6, considerando as matrizes $\mathbf{R}(G)$ e Γ_k em (4.1) e (4.2), respetivamente. \square

Exemplo 4.2.2. *Considere-se o exemplo da Figura 2.2, onde $G = H[G_1, G_2, G_3]$, $G_1 = C_4$, $G_2 = P_2$, $G_3 = C_3$ e $H = P_3$. Nestas condições, $N_1 = 2$, $n_1 = 4$, $p_1 = 2$, $N_2 = 7$, $n_2 = 2$, $p_2 = 1$, $N_3 = 2$, $n_3 = 3$ e $p_3 = 2$. Para além disso,*

$$\sigma_{G_1} = \{2, 0^{(2)}, -2\}, \sigma_{G_2} = \{1, -1\}, \sigma_{G_3} = \{2, -1^{(2)}\}$$

e

$$\rho_{12} = \frac{\sqrt{8}}{\sqrt{4 \times 8}} = \frac{1}{2}, \quad \rho_{13} = 0, \quad \rho_{23} = \frac{\sqrt{6}}{\sqrt{4 \times 8}} = \sqrt{\frac{3}{16}}.$$

A matriz Γ_3 é, então,

$$\Gamma_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{8} & \sqrt{\frac{3}{16}} \\ 0 & \sqrt{\frac{3}{16}} & \frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

com $\sigma(\Gamma_3) = \left\{ 1, \frac{1}{2}, -\frac{3}{8} \right\}$. Pelo Teorema 4.2.1,

$$\sigma(\mathbf{R}(G)) = \bigcup_{j=1}^3 \left\{ \frac{\lambda}{N_j + p_j} : \lambda \in \sigma_{G_j} \setminus \{p_j\} \right\} \cup \sigma(\Gamma_3) = \left\{ 1, \frac{1}{2}, 0^{(2)}, -\frac{1}{8}, -\frac{1}{4}^{(2)}, -\frac{3}{8}, -\frac{1}{2} \right\}.$$

Nota 4.2.3. Observe-se que se os grafos G_j tiverem apenas vértices isolados, ou seja, se $p_j = 0, \forall j \in \{1, \dots, k\}$, então a matriz Γ_k de (4.2) tem a forma seguinte:

$$\Gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & \rho_{12} & \dots & \rho_{1(k-1)} & \rho_{1k} \\ \rho_{12} & 0 & \dots & \rho_{2(k-1)} & \rho_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \rho_{1k} & \rho_{2k} & \dots & \rho_{(k-1)k} & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{\Sigma} \mathbf{A}(H) \mathbf{\Sigma}$$

onde $\mathbf{\Sigma} = \text{diag} \left(\sqrt{\frac{n_1}{N_1}}, \dots, \sqrt{\frac{n_k}{N_k}} \right)$.

Considere-se, agora, $H = P_2$. O próximo lema mostra que o segundo maior valor próprio de Randić do *join* de dois grafos regulares é igual ao máximo dos segundos maiores valores próprios das duas matrizes que constituem os blocos da diagonal principal da matriz de Randić do *join* desses grafos, definida em (4.1). O resultado permitirá apresentar um minorante para o *spread* de Randić do *join* de dois grafos regulares, no Teorema 4.2.6.

Lema 4.2.4. Sejam G_1 e G_2 dois grafos p_i -regulares, $i \in \{1, 2\}$ e de ordens n_1 e n_2 , respetivamente. Então,

$$\lambda_2(\mathbf{R}(G_1 \vee G_2)) = \max \left\{ \lambda_2 \left(\frac{1}{p_1 + n_2} \mathbf{A}(G_1) \right), \lambda_2 \left(\frac{1}{p_2 + n_1} \mathbf{A}(G_2) \right) \right\}.$$

Demonstração. Seja $G = G_1 \vee G_2$.

Observe-se que

$$\mathbf{R}(G) = \begin{pmatrix} \frac{1}{p_1 + n_2} \mathbf{A}(G_1) & \frac{\mathbf{e}_{n_1} \mathbf{e}_{n_2}^T}{\sqrt{(p_1 + n_2)(p_2 + n_1)}} \\ \frac{\mathbf{e}_{n_2} \mathbf{e}_{n_1}^T}{\sqrt{(p_1 + n_2)(p_2 + n_1)}} & \frac{1}{p_2 + n_1} \mathbf{A}(G_2) \end{pmatrix}.$$

Para $H = P_2$ e $k = 2$ obtém-se, pelo Teorema 4.2.1:

$$\sigma(\mathbf{R}(G)) = \sigma\left(\frac{1}{p_1 + n_2} \mathbf{A}(G_1)\right) \cup \sigma\left(\frac{1}{p_2 + n_1} \mathbf{A}(G_2)\right) \cup \sigma(\Gamma_2) \setminus \left\{ \frac{p_1}{p_1 + n_2}, \frac{p_2}{p_2 + n_1} \right\} \quad (4.3)$$

onde

$$\Gamma_2 = \begin{pmatrix} \frac{p_1}{p_1 + n_2} & \frac{\sqrt{n_1 n_2}}{\sqrt{(p_1 + n_2)(p_2 + n_1)}} \\ \frac{\sqrt{n_1 n_2}}{\sqrt{(p_1 + n_2)(p_2 + n_1)}} & \frac{p_2}{p_2 + n_1} \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

com

$$\sigma(\Gamma_2) = \{1, \det(\Gamma_2)\}, \quad (4.5)$$

com $\det(\Gamma_2) = \frac{p_1 p_2 - n_1 n_2}{(p_2 + n_1)(p_1 + n_2)}$.

Para além disso, observe-se que o grafo $G = G_1 \vee G_2$ só é um grafo completo, de ordem $n_1 + n_2$, quando os dois grafos G_1 e G_2 também forem grafos completos. Estudam-se, assim, dois casos: quando $G_1 \not\cong K_{n_1}$ ou $G_2 \not\cong K_{n_2}$ e quando $G_1 \cong K_{n_1}$ e $G_2 \cong K_{n_2}$.

Se $G_1 \not\cong K_{n_1}$ ou $G_2 \not\cong K_{n_2}$ então $G_1 \vee G_2 \not\cong K_{n_1 + n_2}$ logo, pelo Lema 3.2.4, $\lambda_2(\mathbf{R}(G_1 \vee G_2)) \geq 0$.

Dado que $n_1 > p_1$ e $n_2 > p_2$ então $\det(\Gamma_2) < 0$, ou seja,

$$\frac{p_1 p_2 - n_1 n_2}{(p_1 + n_2)(p_2 + n_1)} < 0.$$

Nestas condições,

$$\lambda_2(\mathbf{R}(G_1 \vee G_2)) \in \sigma\left(\frac{1}{p_1 + n_2} \mathbf{A}(G_1)\right) \cup \sigma\left(\frac{1}{p_2 + n_1} \mathbf{A}(G_2)\right)$$

e, portanto, obtém-se o pretendido.

Suponha-se, agora, que $G_1 \cong K_{n_1}$ e $G_2 \cong K_{n_2}$. Neste caso, $G_1 \vee G_2 \cong K_{n_1 + n_2}$ o que

permite garantir que $\lambda_2(\mathbf{R}(G_1 \vee G_2)) < 0$, pelo Lema 3.2.4. Por outro lado, pelo Exemplo 3.2.1, conclui-se que:

$$\sigma(\mathbf{R}(K_{n_1+n_2})) = \left\{ 1, \left(-\frac{1}{n_1 + n_2 - 1} \right)^{(n_1+n_2-1)} \right\}.$$

Por fim, uma vez que $p_1 = n_1 - 1$ e $p_2 = n_2 - 1$,

$$\begin{aligned} \lambda_2(\mathbf{R}(G_1 \vee G_2)) = \lambda_2(\mathbf{R}(K_{n_1+n_2})) &= -\frac{1}{n_1 + n_2 - 1} \\ &= \lambda_2 \left(\frac{1}{p_1 + n_2} \mathbf{A}(G_1) \right) \\ &= \lambda_2 \left(\frac{1}{p_2 + n_1} \mathbf{A}(G_2) \right). \end{aligned}$$

□

Defina-se

$$\Upsilon(G_1 \vee G_2) = \min \left\{ -\frac{p_1}{p_1 + n_2}, -\frac{p_2}{p_2 + n_1}, \frac{p_1 p_2 - n_1 n_2}{(p_2 + n_1)(p_1 + n_2)} \right\}.$$

O próximo lema apresenta um minorante para o menor valor próprio de Randić de $G_1 \vee G_2$.

Lema 4.2.5. *Sejam G_1 e G_2 dois grafos p_i -regulares, $i \in \{1, 2\}$, e de ordens n_1 e n_2 , respetivamente. Então*

$$\lambda_n(\mathbf{R}(G_1 \vee G_2)) \geq \Upsilon(G_1 \vee G_2).$$

Demonstração. Uma vez que G_1 e G_2 são grafos p_i -regulares, $i \in \{1, 2\}$,

$$\lambda_{n_1}(\mathbf{A}(G_1)) \geq -\Delta(G_1) \text{ e } \lambda_{n_2}(\mathbf{A}(G_2)) \geq -\Delta(G_2).$$

Assim,

$$\frac{1}{p_1 + n_2} \lambda_{n_1}(\mathbf{A}(G_1)) \geq \frac{-\Delta(G_1)}{p_1 + n_2} = \frac{-p_1}{p_1 + n_2}$$

e

$$\frac{1}{p_2 + n_1} \lambda_{n_2}(\mathbf{A}(G_2)) \geq \frac{-\Delta(G_2)}{p_2 + n_1} = \frac{-p_2}{p_2 + n_1}.$$

Por outro lado, como já foi referido em (4.3), se $G = G_1 \vee G_2$,

$$\sigma(\mathbf{R}(G)) = \sigma\left(\frac{1}{p_1 + n_2} \mathbf{A}(G_1)\right) \cup \sigma\left(\frac{1}{p_2 + n_1} \mathbf{A}(G_2)\right) \cup \sigma(\Gamma_2) \setminus \left\{\frac{p_1}{p_1 + n_2}, \frac{p_2}{p_2 + n_1}\right\}$$

onde Γ_2 está definida como em (4.4) e $\sigma(\Gamma_2)$ como em (4.5). Assim,

$$\begin{aligned} \lambda_n(\mathbf{R}(G_1 \vee G_2)) &= \min \left\{ \frac{1}{p_1 + n_2} \lambda_{n_1}(\mathbf{A}(G_1)), \frac{1}{p_2 + n_1} \lambda_{n_2}(\mathbf{A}(G_2)), \frac{p_1 p_2 - n_1 n_2}{(p_2 + n_1)(p_1 + n_2)} \right\} \\ &\geq \min \left\{ -\frac{p_1}{p_1 + n_2}, -\frac{p_2}{p_2 + n_1}, \frac{p_1 p_2 - n_1 n_2}{(p_2 + n_1)(p_1 + n_2)} \right\} \\ &= \Upsilon(G_1 \vee G_2). \end{aligned}$$

□

De seguida, apresentam-se alguns resultados sobre o *spread* de Randić de grafos que são o *H-join* de outros.

O próximo teorema apresenta um minorante para o *spread* de Randić do *join* de dois grafos regulares e é uma consequência do Lema 4.2.4.

Teorema 4.2.6. *Sejam G_i grafos p_i -regulares e com n_i vértices, para $p_i \geq 0$, $n_i \geq 1$ e $i \in \{1, 2\}$. Se*

$$\begin{aligned} \tilde{\delta}_1 &= \left| \lambda_2 \left(\frac{1}{p_1 + n_2} \mathbf{A}(G_1) \right) - \frac{p_1 p_2 - n_1 n_2}{(p_1 + n_2)(p_2 + n_1)} \right| \\ \tilde{\delta}_2 &= \left| \lambda_2 \left(\frac{1}{p_2 + n_1} \mathbf{A}(G_2) \right) - \frac{p_1 p_2 - n_1 n_2}{(p_1 + n_2)(p_2 + n_1)} \right| \end{aligned}$$

então

$$\text{spr}_{\mathbf{R}}(G_1 \vee G_2) \geq \max \{ \tilde{\delta}_1, \tilde{\delta}_2 \}.$$

Demonstração. Pelo Lema 4.2.4,

$$\lambda_2(\mathbf{R}(G_1 \vee G_2)) = \max \left\{ \lambda_2 \left(\frac{1}{p_1 + n_2} \mathbf{A}(G_1) \right), \lambda_2 \left(\frac{1}{p_2 + n_1} \mathbf{A}(G_2) \right) \right\}.$$

Por outro lado, tendo em conta (4.5), $\frac{p_1 p_2 - n_1 n_2}{(p_1 + n_2)(p_2 + n_1)}$ também é um valor próprio de Randić de $G_1 \vee G_2$, não necessariamente o menor. Assim, $\text{spr}_R(G_1 \vee G_2)$ nunca é menor do que a diferença entre esses dois valores próprios, $\lambda_2 \left(\frac{1}{p_1 + n_2} \mathbf{A}(G_1) \right)$ ou $\lambda_2 \left(\frac{1}{p_2 + n_1} \mathbf{A}(G_2) \right)$ e $\frac{p_1 p_2 - n_1 n_2}{(p_1 + n_2)(p_2 + n_1)}$, obtendo-se o pretendido. \square

Observe-se que se $G \cong K_{r,s}$ então $G \cong \bar{K}_r \vee \bar{K}_s$ e, para esta classe de grafos, o *spread* de Randić é mínimo e igual a $\max \{ \tilde{\delta}_1, \tilde{\delta}_2 \}$. Neste caso, como $n_1 = r$, $p_1 = 0$, $n_2 = s$, $p_2 = 0$ e $\mathbf{A}(G_1) = \mathbf{A}(G_2) = \mathbf{O}$ então

$$\tilde{\delta}_1 = \tilde{\delta}_2 = \left| -\frac{p_1 p_2 - n_1 n_2}{(p_1 + n_2)(p_2 + n_1)} \right| = \left| -\frac{-rs}{rs} \right| = 1.$$

Por outro lado, $\text{spr}_R(K_{r,s}) = 1$ como já visto e, por isso,

$$\tilde{\delta}_1 = \tilde{\delta}_2 = 1 = \text{spr}_R(K_{r,s}),$$

o que permite concluir que o minorante do Teorema 4.2.6 é mais eficaz na aproximação ao *spread* de Randić relativamente a outros já apresentados para a classe dos grafos completos bipartidos.

Por fim, apresenta-se um teorema que define um majorante para o *spread* de Randić do *join* de dois grafos regulares.

Teorema 4.2.7. *Sejam G_i , para $i \in \{1, 2\}$, grafos p_i -regulares com n_i vértices, para $p_i \geq 0$ e $n_i \geq 1$. Se*

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \left| \lambda_2 \left(\frac{1}{p_1 + n_2} \mathbf{A}(G_1) \right) - \Upsilon(G_1 \vee G_2) \right| \\ \varepsilon_2 &= \left| \lambda_2 \left(\frac{1}{p_2 + n_1} \mathbf{A}(G_2) \right) - \Upsilon(G_1 \vee G_2) \right| \end{aligned}$$

então

$$\text{spr}_{\mathbb{R}}(G_1 \vee G_2) \leq \max\{\varepsilon_1, \varepsilon_2\}.$$

Demonstração. A prova deste teorema é consequência dos Lemas 4.2.4 e 4.2.5. \square

4.3 Espectro e Espectro de Randić de Alguns Grafos *Caterpillar*

Nesta secção, recorre-se a alguns dos resultados anteriores para se estudarem os espectros da matriz de adjacência e da matriz de Randić de alguns grafos *caterpillar*. Apresentam-se, de seguida, algumas notações e resultados necessários para o seu desenvolvimento.

Nota 4.3.1. Seja $T(q_1, \dots, q_r)$, para $q_i \geq 1$ e $r \geq 3$, um *caterpillar*. A etiquetagem dos seus vértices é efetuada da seguinte forma:

1. Etiquetar, da esquerda para a direita, os vértices de P_r ;
2. Etiquetar, da esquerda para a direita, os restantes vértices pendentos como $r + i$, para $i \in \{1, \dots, n - r\}$.

Exemplo 4.3.2. Para o *caterpillar* apresentado na Figura 2.1, a etiquetagem dos vértices é feita, então, da seguinte forma:

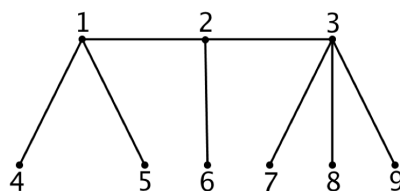


Figura 4.5: Etiquetagem dos vértices em $G = T(2, 1, 3)$

Como se verá de seguida, um *caterpillar* pode ser visto como um *H-join* de grafos.

O objetivo dessa associação é usar alguns dos resultados anteriores para aplicar a esta classe de grafos e estudar o espectro e o espectro de Randić de alguns grafos *caterpillar*.

Neste processo para um determinado *caterpillar* ser apresentado como um *H-join* de grafos, consideram-se algumas condições diferentes das que definiram o *caterpillar*, caso geral, no trabalho. Por exemplo, neste caso, $r \geq 2$, diferente do caso geral apresentado na página anterior, onde $r \geq 3$.

Seja $H_0 = T(1, \dots, 1)$ um *caterpillar* com $2r$ vértices obtidos a partir do caminho com r vértices, P_r , para $r \geq 2$, e fazendo coincidir o vértice central da estrela S_2 com o i -ésimo vértice do caminho P_r , $i \in \{1, \dots, r\}$. Tendo com conta a etiquetagem dos vértices feita anteriormente é possível concluir, facilmente, que a matriz de adjacência do *caterpillar* $H_0 = T(1, \dots, 1)$, de ordem $2r$, tem a forma:

$$\mathbf{A}(H_0) = \begin{pmatrix} \mathbf{A}(P_r) & \mathbf{I}_r \\ \mathbf{I}_r & \mathbf{O} \end{pmatrix},$$

onde $\mathbf{A}(P_r)$ é a matriz de adjacência do caminho P_r . De facto, cada vértice de P_r é adjacente a um ou dois vértices de P_r (conforme se trata de um vértice extremo do caminho ou não, respetivamente) e a um vértice pendente.

Nota 4.3.3. Observe-se, então, que qualquer *caterpillar* $T(q_1, \dots, q_r)$ pode ser visto como um *H-join* de uma família de $2r$ grafos 0-regulares em que $H = H_0 = T(1, \dots, 1)$ onde r são da forma K_1 e r são da forma \overline{K}_{q_i} , $i \in \{1, \dots, r\}$. Nestas condições, $G_j = K_1$, $j \in \{1, \dots, r\}$ e $G_j = \overline{K}_{q_{j-r}}$, $j \in \{r+1, \dots, 2r\}$. A cardinalidade n_j de cada grafo G_j , $j \in \{1, \dots, 2r\}$ é dada por:

$$n_j = \begin{cases} 1, & \text{se } j \in \{1, \dots, r\} \\ q_{j-r}, & \text{se } j \in \{r+1, \dots, 2r\}. \end{cases} \quad (4.6)$$

Assim, podemos escrever:

$$T(q_1, \dots, q_r) = H_0[G_1, \dots, G_{2r}] = H_0[K_1, \dots, K_1, \bar{K}_{q_1}, \dots, \bar{K}_{q_r}].$$

A figura seguinte pretende ilustrar a relação descrita,

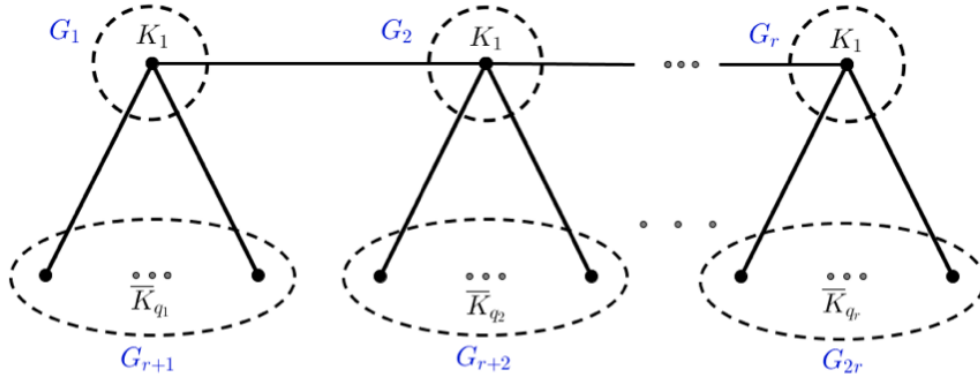


Figura 4.6: $T(q_1, \dots, q_r)$ como $H_0[K_1, \dots, K_1, \bar{K}_{q_1}, \dots, \bar{K}_{q_r}]$

O próximo teorema caracteriza o espectro de um *caterpillar* visto como um *H-join* de grafos em que $H = H_0 = T(1, \dots, 1)$, pela aplicação do Teorema 2.0.7.

Teorema 4.3.4. *Seja $H_0 = T(1, \dots, 1)$ um caterpillar com $2r$ vértices e $G = T(q_1, \dots, q_r)$ um caterpillar com $n = r + \sum_{j=1}^r q_j$ vértices tais que:*

$$G = T(q_1, \dots, q_r) = H_0[K_1, \dots, K_1, \bar{K}_{q_1}, \dots, \bar{K}_{q_r}].$$

Então,

$$\sigma(\mathbf{A}(G)) = \left\{ 0^{(\sum_{j=1}^r (q_j - 1))} \right\} \cup \sigma(\mathbf{C}_{2r}), \quad (4.7)$$

onde \mathbf{C}_{2r} é uma matriz de ordem $2r$ com a seguinte forma

$$\mathbf{C}_{2r} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}(P_r) & \Lambda_r \\ \Lambda_r & \mathbf{O} \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

para $\Lambda_r = \text{diag}(\sqrt{q_1}, \dots, \sqrt{q_r})$.

Demonstração. Aplicando o Teorema 2.0.7, obtém-se o resultado. \square

Note-se que para o caso do *caterpillar* $H_0 = T(1, \dots, 1)$, as matrizes $\mathbf{A}(H_0)$ e \mathbf{C}_{2r} coincidem.

Caracteriza-se, agora, o espectro de Randić de um *caterpillar* $T(q_1, \dots, q_r)$ nas condições apresentadas, recorrendo ao Teorema 4.2.1.

Observe-se que:

$$N_j = \begin{cases} q_j + 1, & \text{se } j \in \{1, r\} \\ q_j + 2, & \text{se } j \in \{2, \dots, r-1\} \\ 1, & \text{se } j \in \{r+1, \dots, 2r\}. \end{cases}$$

Uma vez que, como o explicado antes, os grafos $G_j, j \in \{1, \dots, 2r\}$ só têm vértices isolados, considera-se a informação da Nota 4.2.3. Apresentam-se as matrizes $\mathbf{\Sigma}$ e $\mathbf{\Gamma}_{2r}$ para o caso referido:

$$\begin{aligned} \mathbf{\Sigma} &= \text{diag} \left(\sqrt{\frac{n_1}{N_1}}, \sqrt{\frac{n_2}{N_2}}, \dots, \sqrt{\frac{n_r}{N_r}}, \sqrt{\frac{n_{r+1}}{N_{r+1}}}, \dots, \sqrt{\frac{n_{2r}}{N_{2r}}} \right) \\ &= \text{diag} \left(\sqrt{\frac{1}{q_1 + 1}}, \sqrt{\frac{1}{q_2 + 2}}, \dots, \sqrt{\frac{1}{q_r + 1}}, \sqrt{q_1}, \dots, \sqrt{q_r} \right) \end{aligned}$$

e

$$\mathbf{\Gamma}_{2r} = \mathbf{\Sigma} \mathbf{A}(H_0) \mathbf{\Sigma} = [v_{ij}], \quad i, j \in \{1, \dots, 2r\}. \quad (4.9)$$

Para $r \geq 4$, é possível verificar que as entradas da matriz $\mathbf{\Gamma}_{2r}$ podem ser apresentadas tendo em atenção cinco casos diferentes, de acordo com as adjacências no *caterpillar* $T(q_1, \dots, q_r)$. Os valores de n_j e $N_j, j \in \{1, \dots, 2r\}$, foram apresentados em (4.6) e (4.3), respetivamente. Cada caso é apresentado, de seguida, com o auxílio de representações gráficas.

(A) Entradas na matriz $\mathbf{\Gamma}_{2r}$ resultantes das relações de adjacência em H_0 entre os grafos

G_1 e G_2 , G_{r-1} e G_r .

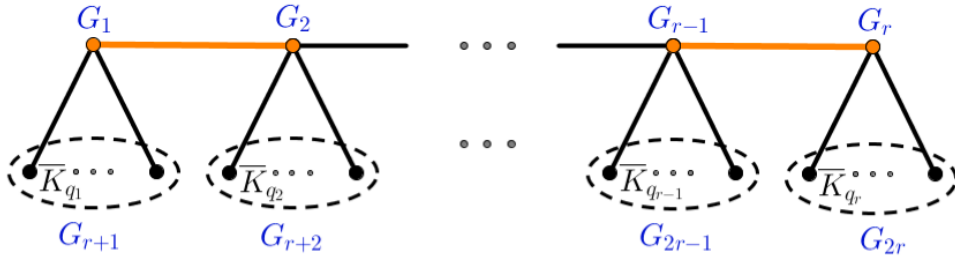


Figura 4.7: $G = T(q_1, \dots, q_r)$. Caso A

Assim, para $(i, j) \in \{(1, 2)\} \cup \{(r, r-1)\}$,

$$v_{ij} = v_{ji} = \rho_{ij} = \frac{\delta_{ij} \sqrt{n_i n_j}}{\sqrt{N_i N_j}} = \frac{1}{\sqrt{(q_i + 1)(q_j + 2)}}.$$

(B) Entradas na matriz Γ_{2r} resultantes das relações de adjacência em H_0 entre os grafos

G_j e G_{j+1} , $\forall j \in \{2, \dots, r-2\}$.

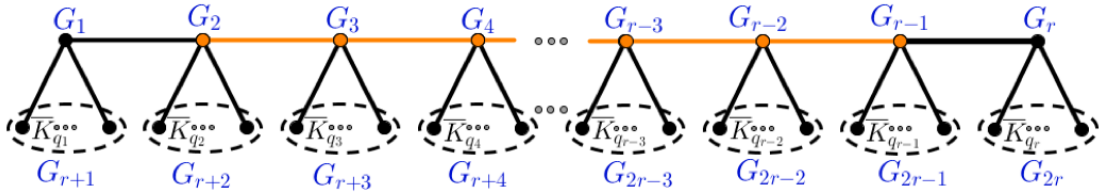


Figura 4.8: $G = T(q_1, \dots, q_r)$. Caso B

Assim, para $(i, j) \in \{(t, t-1), t \in \{3, \dots, r-1\}\}$,

$$v_{ij} = v_{ji} = \rho_{ij} = \frac{\delta_{ij} \sqrt{n_i n_j}}{\sqrt{N_i N_j}} = \frac{1}{\sqrt{(q_i + 2)(q_j + 2)}}.$$

(C) Entradas na matriz Γ_{2r} resultantes das relações de adjacência em H_0 entre os grafos

G_1 e G_{r+1} , G_r e G_{2r} .

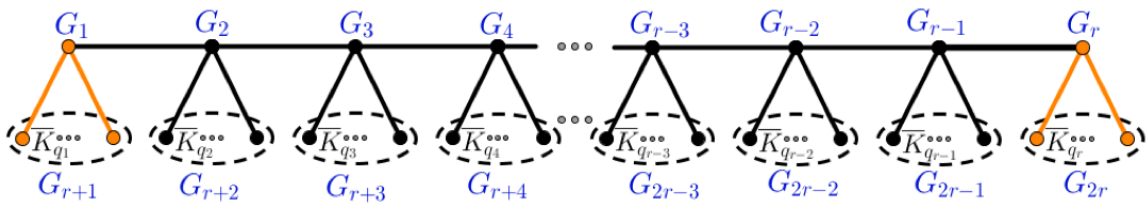


Figura 4.9: $G = T(q_1, \dots, q_r)$. Caso C

Assim, para $(i, j) \in \{(1, r+1)\} \cup \{(r, 2r)\}$,

$$v_{ij} = v_{ji} = \rho_{ij} = \sqrt{\frac{q_i}{q_{j-r} + 1}}.$$

(D) Entradas na matriz Γ_{2r} resultantes das relações de adjacência em H_0 entre os grafos G_j e G_{j+r} , $j \in \{2, \dots, r-1\}$.

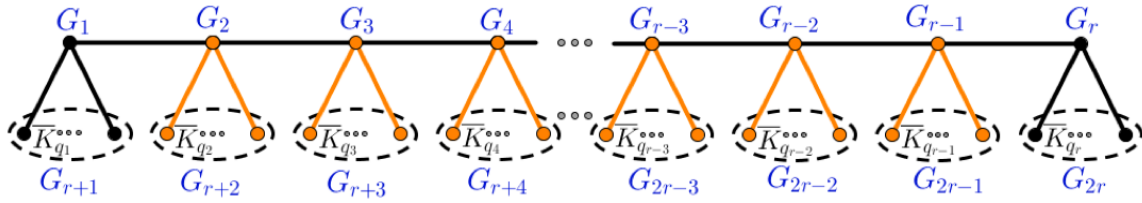


Figura 4.10: $G = T(q_1, \dots, q_r)$. Caso D

Assim, para $(i, j) \in \{(t, t+r), t \in \{2, \dots, r-1\}\}$,

$$v_{ij} = v_{ji} = \rho_{ij} = \sqrt{\frac{q_i}{q_{j-r} + 2}}.$$

(E) Entradas na matriz Γ_{2r} resultantes das relações de adjacência em H_0 entre pares de grafos G_j , $j \in \{1, \dots, 2r\}$ sem vértices adjacentes em $T(q_1, \dots, q_r)$.

Para este caso, as respectivas entradas da matriz Γ_{2r} são nulas.

Tendo em conta os casos apresentados, é possível concluir, então, que se $\Gamma_{2r} = [v_{ij}]$, $i, j \in \{1, \dots, 2r\}$,

$$v_{ij} = v_{ji} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{(q_i + 1)(q_j + 2)}}, & \text{se } (i, j) \in \{(1, 2)\} \cup \{(r, r-1)\} \\ \frac{1}{\sqrt{(q_i + 2)(q_j + 2)}}, & \text{se } (i, j) \in \{(t, t-1), t \in \{3, \dots, r-1\}\} \\ \sqrt{\frac{q_i}{q_{j-r} + 1}}, & \text{se } (i, j) \in \{(1, r+1)\} \cup \{(r, 2r)\} \\ \sqrt{\frac{q_i}{q_{j-r} + 2}}, & \text{se } (i, j) \in \{(t, t+r), t \in \{2, \dots, r-1\}\} \\ 0, & \text{outros casos.} \end{cases} \quad (4.10)$$

Como consequência do Teorema 4.2.1, apresenta-se o espectro de Randić de um *caterpillar* $T(q_1, \dots, q_r)$ no próximo resultado.

Teorema 4.3.5. *Seja $H_0 = T(1, \dots, 1)$ um caterpillar com $2r$ vértices e $G = T(q_1, \dots, q_r)$ um caterpillar com $n = r + \sum_{j=1}^r q_j$ vértices tais que*

$$G = T(q_1, \dots, q_r) = H_0 [K_1, \dots, K_1, \bar{K}_{q_1}, \dots, \bar{K}_{q_r}].$$

Então,

$$\sigma(\mathbf{R}(G)) = \left\{ 0^{(\sum_{j=1}^r (q_j - 1))} \right\} \cup \sigma(\Gamma_{2r}),$$

onde a matriz Γ_{2r} está definida de acordo com (4.9).

Tendo em conta a relação entre as matrizes de Randić e Laplaciana normalizada, definida em (3.4), caracteriza-se, também, o espectro da matriz Laplaciana normalizada de um *caterpillar* $T(q_1, \dots, q_r)$, recorrendo ao Teorema 4.3.5. Assim, é possível concluir que

$$\sigma(\mathcal{L}(G)) = \left\{ 1^{(\sum_{j=1}^r (q_j - 1))} \right\} \cup \sigma(\mathbf{I}_{2r} - \Gamma_{2r}). \quad (4.11)$$

Exemplo 4.3.6. *Considere-se o caterpillar apresentado no Exemplo 4.3.2, $T(2, 1, 3) = H_0 [K_1, K_1, K_1, \bar{K}_2, \bar{K}_1, \bar{K}_3]$. De acordo com as entradas de Γ_{2r} definidas em (4.9), a matriz em (4.9) é*

$$\Gamma_6 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{3} & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & \sqrt{\frac{1}{12}} & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{12}} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{4}} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{4}} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Assim,

$$\sigma(\mathbf{R}(T(2, 1, 3))) = \{0^{(3)}\} \cup \sigma(\Gamma_6) = \{0^{(3)}\} \cup \{\pm 1.0000, \pm 0.8424, \pm 0.4847\}$$

e, de acordo com (4.11) conclui-se, também, que

$$\sigma(\mathcal{L}(T(2, 3, 1))) = \{1^{(3)}\} \cup \{0, 2, 0.1576, 1.8424, 1.4847, 0.5153\}.$$

4.4 Majorantes para a Energia e para a Energia de Randić de Grafos *Caterpillar*

Nesta secção, apresentam-se majorantes para a energia e para a energia de Randić de grafos *caterpillar*. Para tal, segue-se a forma de etiquetagem dos vértices apresentada na Nota 4.3.1.

O próximo teorema apresenta um majorante para a energia de uma matriz simétrica e imprimitiva de índice 2. A partir desse resultado, são obtidos majorantes para a energia e para a energia de Randić de grafos *caterpillar*.

Teorema 4.4.1. [36] *Seja $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz simétrica e imprimitiva cuja Forma de Frobenius é dada por (2.4). Se \mathbf{M}_{12} tem ordem $m_1 \times m_2$, e \mathbf{M}_{21} tem ordem $m_2 \times m_1$ e $\tilde{m} = \min\{m_1, m_2\}$, então*

$$\mathcal{E}(\mathbf{M}) \leq 2\lambda_1(\mathbf{M}) + 2\sqrt{(\tilde{m} - 1) \left(\frac{|\mathbf{M}|^2}{2} - \lambda_1^2(\mathbf{M}) \right)}. \quad (4.12)$$

A igualdade ocorre em (4.12) se e só se $\tilde{m} = 1$ ou se \mathbf{M} tem $2(\tilde{m} - 1)$ valores próprios distintos de $-\lambda_1(\mathbf{M})$ e de $\lambda_1(\mathbf{M})$ com o mesmo valor absoluto, nomeadamente $\sqrt{\frac{|\mathbf{M}|^2}{2} - \lambda_1^2(\mathbf{M})}$ e $|m_2 - m_1|$ valores próprios iguais a 0.

Seja $H_0 = T(1, \dots, 1)$ um *caterpillar* definido como na Nota 4.3.3. Observe-se que

nestas condições, é possível dividir o conjunto dos vértices de H_0 em dois subconjuntos de vértices, X e Y , tais que X contém os vértices do caminho P_r cuja etiqueta é ímpar mais os vértices pendentes que não são adjacentes a esses vértices e Y contém os restantes vértices de H_0 . Assim, $\#X = \#Y = r$. Desta forma, qualquer *caterpillar* nestas condições é um grafo bipartido. Assim, o espectro de $H_0 = T(1, \dots, 1)$ é simetricamente distribuído relativamente ao zero e a matriz de adjacência associada ao *caterpillar*, $A(H_0) = C_{2r}$, é irredutível, uma vez que o *caterpillar* é conexo e é imprimitiva porque $\lambda_1(C_{2r}) = -\lambda_n(C_{2r})$.

Pelo Teorema 4.3.4, sabe-se que o espectro do *caterpillar* $T(q_1, \dots, q_r)$, visto como um H -join de $2r$ grafos em que $H = H_0 = T(1, \dots, 1)$, é constituído pelo valor próprio 0 com multiplicidade igual a $\sum_{j=1}^r (q_j - 1)$ e pelos valores próprios da matriz C_{2r} . Assim, a energia de $T(q_1, \dots, q_r)$ é igual à soma dos valores absolutos dos valores próprios da matriz C_{2r} . Desta forma, considerando a matriz C_{2r} no resultado anterior, obtém-se um majorante para a energia do *caterpillar* $T(q_1, \dots, q_r)$.

Teorema 4.4.2. *Seja $T(q_1, \dots, q_r)$ o caterpillar obtido a partir do caminho com r vértices, P_r , para $r \geq 2$, e fazendo coincidir o vértice central da estrela S_{q_i+1} com o i -ésimo vértice do caminho P_r , $i \in \{1, \dots, r\}$. Nestas condições,*

$$\mathcal{E}(T(q_1, \dots, q_r)) \leq 2\lambda_1(C_{2r}) + 2\sqrt{(r-1) \left(\frac{|C_{2r}|^2}{2} - \lambda_1^2(C_{2r}) \right)}, \quad (4.13)$$

onde a matriz C_{2r} é a matriz definida em (4.8). A igualdade ocorre em (4.13) se e só se C_{2r} tem $2(r-1)$ valores próprios distintos de $-\lambda_1(C_{2r})$ e de $\lambda_1(C_{2r})$ e com o mesmo valor absoluto igual a $\sqrt{\frac{|C_{2r}|^2}{2} - \lambda_1^2(C_{2r})}$.

Demonstração. Tendo em conta a Definição 2.0.8 e (4.7), a energia de $T(q_1, \dots, q_r)$ é a soma dos valores absolutos dos valores próprios da matriz C_{2r} . Por outro lado, a matriz C_{2r} é uma matriz irredutível e imprimitiva, como também referido antes. Para além disso, pelo Teorema 2.0.4, $\rho(C_{2r})$ é um valor próprio simples de C_{2r} . Por essa razão e porque $T(q_1, \dots, q_r)$ é um grafo bipartido, existe um único valor próprio de C_{2r} simétrico de $\lambda_1(C_{2r})$ e, portanto, com o mesmo valor absoluto. Desta forma, $\lambda_1(C_{2r}) = |\lambda_n(C_{2r})|$ e, assim, o índice

de imprimitividade de \mathbf{C}_{2r} é igual a 2. Tendo em conta a relação definida em (2.4), é possível escrever a matriz \mathbf{C}_{2r} na Forma de Frobenius:

$$\mathbf{C}_{2r} = \mathbf{P}^T \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{C}_{12} \\ \mathbf{C}_{21} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \mathbf{P},$$

onde $\mathbf{C}_{21}^T = \mathbf{C}_{12}$ e \mathbf{P} é uma matriz de permutação de dimensões adequadas. Por fim, tendo em conta a forma da matriz \mathbf{C}_{2r} em (4.8), $\tilde{m} = \min \{m_1, m_2\} = m_1 = m_2 = r$. Pelo Teorema 4.4.1, conclui-se o pretendido. \square

Nota 4.4.3. *O desenvolvimento seguinte permite apresentar um novo majorante para $\mathcal{E}(T(q_1, \dots, q_r))$, no Teorema 4.4.4, que não depende de $\lambda_1(\mathbf{C}_{2r})$. Esse majorante é obtido a partir do Teorema 4.4.2.*

De facto, uma vez que \mathbf{C}_{2r} é uma matriz não negativa e irredutível, então pelo Teorema 2.0.4,

$$\rho(\mathbf{C}_{2r}) = \lambda_1(\mathbf{C}_{2r}) > 0.$$

Por outro lado, pela Proposição 2.0.2,

$$\rho(\mathbf{C}_{2r}) = \lambda_1(\mathbf{C}_{2r}) \leq |\mathbf{C}_{2r}|.$$

Define-se, agora, a função f tal que,

$$f(x) = x + \sqrt{(r-1) \left(\frac{|\mathbf{C}_{2r}|^2}{2} - x^2 \right)},$$

para $x \in \left] 0, \frac{|\mathbf{C}_{2r}|}{\sqrt{2}} \right[$.

Note-se que

$$(r-1) \left(\frac{|\mathbf{C}_{2r}|^2}{2} - x^2 \right) \geq 0 \iff -\frac{|\mathbf{C}_{2r}|}{\sqrt{2}} \leq x \leq \frac{|\mathbf{C}_{2r}|}{\sqrt{2}}.$$

Então, neste caso,

$$f'(x) = 1 - \frac{x(r-1)}{\sqrt{(r-1)\left(\frac{|C_{2r}|^2}{2} - x^2\right)}} < 0 \iff x > \frac{|C_{2r}|}{\sqrt{2r}}.$$

Uma vez que $x < \frac{|C_{2r}|}{\sqrt{2}}$, como foi visto antes, é possível concluir que f é uma função decrescente no intervalo $S = \left] \frac{|C_{2r}|}{\sqrt{2r}}, \frac{|C_{2r}|}{\sqrt{2}} \right[$.

Note-se que $\lambda_1(C_{2r}^2) = \lambda_1^2(C_{2r})$, dado que a matriz C_{2r} é uma matriz não negativa. Pela relação com o Quociente de Rayleigh, descrita em (2.1),

$$\lambda_1^2(C_{2r}) = \lambda_1(C_{2r}^2) \geq \frac{\mathbf{e}^* C_{2r}^2 \mathbf{e}}{\mathbf{e}^* \mathbf{e}} \geq \frac{|C_{2r}|^2}{2r}.$$

Logo,

$$\lambda_1(C_{2r}) \geq \frac{|C_{2r}|}{\sqrt{2r}}.$$

Note-se, ainda, que pelo Teorema 4.3.4,

$$\sigma(\mathbf{A}(T(q_1, \dots, q_r))) = \left\{ 0^{(\sum_{j=1}^r (q_j - 1))} \right\} \cup \sigma(C_{2r})$$

e, por isso, $\lambda_1(\mathbf{A}(T(q_1, \dots, q_r))) = \lambda_1(C_{2r})$.

Mais,

$$\begin{aligned} |C_{2r}|^2 &= \text{tr}(C_{2r}^2) \\ &= \lambda_1^2(C_{2r}) + \dots + \lambda_{2r}^2(C_{2r}) \\ &\geq 2\lambda_1^2(C_{2r}), \end{aligned}$$

atendendo ao facto de que o caterpillar é um grafo bipartido pelo que o quadrado do seu menor valor próprio é igual ao quadrado do seu maior valor próprio.

Assim,

$$\frac{|C_{2r}|}{\sqrt{2}} \geq \lambda_1(C_{2r}).$$

Como consequência,

$$\lambda_1(\mathbf{C}_{2r}) \in S.$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} \text{tr}(\mathbf{C}_{2r}^2) &\leq \mathbf{e}^* \mathbf{C}_{2r}^2 \mathbf{e} \\ &= \|\mathbf{C}_{2r} \mathbf{e}\|^2 \\ &= \frac{\mathbf{e}^*}{\|\mathbf{e}\|} \mathbf{C}_{2r}^2 \frac{\mathbf{e}}{\|\mathbf{e}\|} \|\mathbf{e}\|^2 \\ &\leq 2r \left(\max_{\|x\| \neq 0} \frac{x^* \mathbf{C}_{2r}^2 x}{x^* x} \right) \\ &= 2r \lambda_1(\mathbf{C}_{2r}^2) \\ &= 2r \lambda_1^2(\mathbf{C}_{2r}). \end{aligned}$$

Assim,

$$|\mathbf{C}_{2r}|^2 \leq \|\mathbf{C}_{2r} \mathbf{e}\|^2 \leq 2r \lambda_1^2(\mathbf{C}_{2r})$$

e, então,

$$|\mathbf{C}_{2r}| \leq \|\mathbf{C}_{2r} \mathbf{e}\| \leq \sqrt{2r} \lambda_1(\mathbf{C}_{2r}).$$

Das desigualdades anteriores obtém-se

$$\frac{|\mathbf{C}_{2r}|}{\sqrt{2r}} \leq \frac{\|\mathbf{C}_{2r} \mathbf{e}\|}{\sqrt{2r}} \leq \lambda_1(\mathbf{C}_{2r}) \leq \frac{|\mathbf{C}_{2r}|}{\sqrt{2}},$$

o que implica que

$$\frac{\|\mathbf{C}_{2r} \mathbf{e}\|}{\sqrt{2r}} \in S$$

e

$$f \left(\frac{\|\mathbf{C}_{2r} \mathbf{e}\|}{\sqrt{2r}} \right) \geq f(\lambda_1(\mathbf{C}_{2r})). \quad (4.14)$$

Tendo em conta, agora, o majorante para $\mathcal{E}(T(q_1, \dots, q_r))$, definido em (4.13) e a relação

em (4.14) obtém-se:

$$\mathcal{E}(T(q_1, \dots, q_r)) \leq 2f \left(\frac{\|\mathbf{C}_{2r}\mathbf{e}\|}{\sqrt{2r}} \right) = 2 \left(\frac{\|\mathbf{C}_{2r}\mathbf{e}\|}{\sqrt{2r}} + \sqrt{(r-1) \left(\frac{|\mathbf{C}_{2r}|^2}{2} - \frac{\|\mathbf{C}_{2r}\mathbf{e}\|^2}{2r} \right)} \right).$$

Atendendo à definição da matriz \mathbf{C}_{2r} em (4.8),

$$|\mathbf{C}_{2r}|^2 = 2m = 2(n-1).$$

Desta forma, o majorante anterior pode ser reescrito como

$$\mathcal{E}(T(q_1, \dots, q_r)) \leq 2 \left(\frac{\|\mathbf{C}_{2r}\mathbf{e}\|}{\sqrt{2r}} + \sqrt{(r-1) \left(n-1 - \frac{\|\mathbf{C}_{2r}\mathbf{e}\|^2}{2r} \right)} \right).$$

Com este resultado, fica definido um novo majorante para $\mathcal{E}(T(q_1, \dots, q_r))$ não tão eficaz como o definido no Teorema 4.4.2 pelos desenvolvimentos descritos, mas que recorre a parâmetros de acesso mais simples, comparativamente aos do majorante desse resultado. O próximo teorema formaliza esse resultado.

Teorema 4.4.4. *Seja $T(q_1, \dots, q_r)$ o caterpillar obtido a partir do caminho com r vértices, P_r , para $r \geq 2$, e fazendo coincidir o vértice central da estrela $S_{q_{i+1}}$ com o i -ésimo vértice do caminho P_r , $i \in \{1, \dots, r\}$. Então,*

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(T(q_1, \dots, q_r)) &\leq 2\lambda_1(\mathbf{C}_{2r}) + 2\sqrt{(r-1)(n-1 - \lambda_1^2(\mathbf{C}_{2r}))} \\ &\leq \sqrt{\frac{2}{r}} \|\mathbf{C}_{2r}\mathbf{e}\| + \sqrt{\frac{2}{r}} \sqrt{(r-1)(2r(n-1) - \|\mathbf{C}_{2r}\mathbf{e}\|^2)}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

A igualdade ocorre nas desigualdades anteriores se e só se \mathbf{C}_{2r} tem $2(r-1)$ valores próprios distintos de $\lambda_1(\mathbf{C}_{2r})$ e de $-\lambda_1(\mathbf{C}_{2r})$ com o mesmo valor absoluto e $(\lambda_1(\mathbf{C}_{2r}), \mathbf{e})$ é um par próprio de \mathbf{C}_{2r} .

Demonstração. A prova deste resultado é consequência do Teorema 4.4.2 e do desenvolvimento apresentado na Nota 4.4.3. A igualdade ocorre em (4.15) quando $(\lambda_1(\mathbf{C}_{2r}), \mathbf{e})$ é um

par próprio de \mathbf{C}_{2r} dado que nessas condições $\frac{\|\mathbf{C}_{2r}\mathbf{e}\|}{\sqrt{2r}} = \lambda_1(\mathbf{C}_{2r})$. □

No próximo teorema apresenta-se um majorante para $\mathcal{E}_{\mathbf{R}}(T(q_1, \dots, q_r))$.

Teorema 4.4.5. *Seja $T(q_1, \dots, q_r)$ o caterpillar obtido a partir do caminho com r vértices, P_r , para $r \geq 2$, e fazendo coincidir o vértice central da estrela $S_{q_{i+1}}$ com o i -ésimo vértice do caminho P_r , $i \in \{1, \dots, r\}$. Nestas condições,*

$$\mathcal{E}_{\mathbf{R}}(T(q_1, \dots, q_r)) \leq 2 + 2\sqrt{(r-1) \left(\frac{|\Gamma_{2r}|^2}{2} - 1 \right)}, \quad (4.16)$$

onde Γ_{2r} é a matriz cujas entradas estão definidas em (4.9). A igualdade ocorre em (4.16) se e só se Γ_{2r} tem $2(r-1)$ valores próprios distintos de -1 e de 1 e com o mesmo valor absoluto igual a $\sqrt{\frac{|\Gamma_{2r}|^2}{2} - 1}$.

Demonstração. Como já visto na Secção 4.3, as matrizes $\mathbf{A}(H_0)$ e \mathbf{C}_{2r} coincidem quando o caterpillar é $H_0 = T(1, \dots, 1)$. Assim, a matriz $\mathbf{A}(H_0)$ é uma matriz irredutível e imprimitiva. Dado que o produto pela matriz diagonal Σ não afeta o padrão de zeros nas potências da matriz $\mathbf{A}(H_0)$ conclui-se que a matriz

$$\Gamma_{2r} = \Sigma \mathbf{A}(H_0) \Sigma$$

com

$$\Sigma = \text{diag} \left(\sqrt{\frac{n_1}{N_1}}, \dots, \sqrt{\frac{n_{2r}}{N_{2r}}} \right)$$

também é uma matriz irredutível e imprimitiva, atendendo ao Teste de Frobenius para o estudo da primitividade de matrizes. Para além disso, o Índice de imprimitividade da matriz Γ_{2r} continua a ser igual a 2, pelas mesmas razões apontadas anteriormente. Observe-se, também, que o grafo de $\Sigma \mathbf{A}(H_0) \Sigma$ é um grafo bipartido o que permite obter a relação $\lambda_1(\Gamma_{2r}) = |\lambda_n(\Gamma_{2r})|$. Nestas condições, as matrizes $\mathbf{A}(H_0)$ e Γ_{2r} podem ser escritas na Forma de Frobenius:

$$\mathbf{P}^T \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{V}_{12} \\ \mathbf{V}_{21} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \mathbf{P},$$

onde $\mathbf{V}_{21}^T = \mathbf{V}_{12}$ e \mathbf{P} é uma matriz de permutação de dimensões adequadas. Tendo em conta a forma da matriz $\mathbf{A}(H_0)$, $\tilde{m} = \min\{m_1, m_2\} = m_1 = m_2 = r$. Por outro lado, 1 é o maior valor próprio da matriz de Randić de $T(q_1, \dots, q_r)$ e, pelo Teorema 4.3.5, da matriz Γ_{2r} . Por fim, pelo Teorema 4.4.1, conclui-se o pretendido. \square

Exemplo 4.4.6. No Exemplo 4.3.6 foi apresentado o espetro da matriz de Randić de $T(2, 1, 3)$ da seguinte forma:

$$\sigma(\mathbf{R}(T(2, 1, 3))) = \{0^{(3)}\} \cup \sigma(\Gamma_6) = \{0^{(3)}\} \cup \{\pm 1.0000, \pm 0.8424, \pm 0.4847\}.$$

Assim, $\mathcal{E}_{\mathbf{R}}(T(2, 1, 3)) = 2(1 + 0.8424 + 0.4847) = 4.6542$.

Aplicando o majorante dado pelo Teorema 4.4.5, tem-se

$$\mathcal{E}_{\mathbf{R}}(T(2, 1, 3)) \leq 2 + 2\sqrt{(r-1) \left(\frac{|\Gamma_{2r}|^2}{2} - 1 \right)} = 4.7487.$$

Observando a forma das entradas da matriz Γ_{2r} , em (4.9), é possível simplificar a expressão $\frac{|\Gamma_{2r}|^2}{2}$ do majorante do Teorema 4.4.5 e, assim, reescrever o majorante da forma que se segue.

Teorema 4.4.7. Seja $T(q_1, \dots, q_r)$ o caterpillar obtido a partir do caminho com r vértices, P_r , para $r \geq 2$, e fazendo coincidir o vértice central da estrela S_{q_i+1} com o i -ésimo vértice do caminho P_r , $i \in \{1, \dots, r\}$. Então

$$\mathcal{E}_{\mathbf{R}}(T(q_1, \dots, q_r)) \leq Y,$$

para

$$Y = 2 + 2\sqrt{(r-1) \left(\frac{1+q_1q_2+2q_1}{(q_1+1)(q_2+2)} + \frac{1+q_rq_{r-1}+2q_r}{(q_r+1)(q_{r-1}+2)} + \frac{q_2}{q_2+2} + \sum_{i=3}^{r-1} \frac{1+q_iq_{i-1}+2q_i}{(q_i+2)(q_{i-1}+2)} - 1 \right)}.$$

A igualdade surge se e só se Γ_{2r} tem $2(r-1)$ valores próprios distintos de 1 e de

−1 e com o mesmo valor absoluto igual a

$$\sqrt{\frac{\frac{1+q_1q_2+2q_1}{(q_1+1)(q_2+2)} + \frac{1+q_rq_{r-1}+2q_r}{(q_r+1)(q_{r-1}+2)} + \frac{q_2}{q_2+2} + \sum_{i=3}^{r-1} \frac{1+q_iq_{i-1}+2q_i}{(q_i+2)(q_{i-1}+2)} - 1}{r-1}}.$$

Demonstração. Tendo em conta as entradas da matriz Γ_{2r} definidas em (4.9) e que, como já foi referido anteriormente, $\frac{|\Gamma_{2r}|^2}{2}$ é igual a metade da soma do quadrado de todas as entradas de $|\Gamma_{2r}|^2$, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{|\Gamma_{2r}|^2}{2} &= \\ &= \frac{1}{(q_1+1)(q_2+2)} + \frac{1}{(q_r+1)(q_{r-1}+2)} + \sum_{i=3}^{r-1} \frac{1}{(q_i+2)(q_{i-1}+2)} + \frac{q_1}{q_1+1} + \frac{q_r}{q_r+1} + \sum_{i=2}^{r-1} \frac{q_i}{q_i+2} \\ &= \frac{1}{(q_1+1)(q_2+2)} + \frac{1}{(q_r+1)(q_{r-1}+2)} + \frac{q_1}{q_1+1} + \frac{q_r}{q_r+1} + \sum_{i=3}^{r-1} \frac{1}{(q_i+2)(q_{i-1}+2)} + \sum_{i=2}^{r-1} \frac{q_i}{q_i+2} \\ &= \frac{1}{(q_1+1)(q_2+2)} + \frac{1}{(q_r+1)(q_{r-1}+2)} + \frac{q_1}{q_1+1} + \frac{q_r}{q_r+1} + \sum_{i=3}^{r-1} \left(\frac{1}{(q_i+2)(q_{i-1}+2)} + \frac{q_i}{q_i+2} \right) + \frac{q_2}{q_2+2} \\ &= \frac{1+q_1q_2+2q_1}{(q_1+1)(q_2+2)} + \frac{1+q_rq_{r-1}+2q_r}{(q_r+1)(q_{r-1}+2)} + \frac{q_2}{q_2+2} + \sum_{i=3}^{r-1} \frac{1+q_iq_{i-1}+2q_i}{(q_i+2)(q_{i-1}+2)}. \end{aligned}$$

Substituindo esta expressão no majorante para a energia de Randić definido em (4.16), obtém-se o resultado. \square

4.5 Estudos Computacionais para Aproximações à Energia e à Energia de Randić de Grafos *Caterpillar*

Nesta secção são apresentados os valores obtidos através da aplicação dos majorantes para a energia e para a energia de Randić de alguns grafos *caterpillar*, usando a notação *vmaj*. Os majorantes estudados são os que foram apresentados no Teorema 4.4.4 (T. 4.4.4) e no Teorema 4.4.7 (T. 4.4.7). De forma paralela, são apresentados os respetivos erros cometidos nas aproximações e, como antes, os erros são calculados da seguinte

forma:

$$er = \frac{|\mathcal{E}(G) - vmaj|}{\mathcal{E}(G)}$$

ou

$$er = \frac{|\mathcal{E}_R(G) - vmaj|}{\mathcal{E}_R(G)},$$

conforme o caso.

Mais uma vez, os valores apresentados com 6 casas decimais foram obtidos através do *software Matlab* (versão R2015a) e do *software Numbers* (versão 3.6.2).

Na tabela seguinte estão os valores e respetivos erros de aproximação relativos ao Teorema 4.4.4.

G	$\mathcal{E}(G)$	T. 4.4.4	er T. 4.4.4
$T(1, 2, 3, 4)$	13.234547	14.045895	0.061305
$T(2, 2, 3, 4)$	14.011457	14.603270	0.042238
$T(1, 2, 3, 5)$	13.692384	14.613661	0.067284
$T(4, 4, 4, 4)$	16.724652	17.102379	0.022585
$T(5, 5, 5, 5)$	18.540962	18.876850	0.018116
$T(1, 2, 3, 4, 5)$	17.932720	19.305394	0.076546
$T(2, 2, 3, 4, 5)$	18.709636	19.840861	0.060462
$T(1, 2, 3, 4, 6)$	18.349161	19.832619	0.080846
$T(5, 5, 5, 5, 5)$	23.228950	24.025929	0.034310
$T(6, 6, 6, 6, 6)$	25.291284	26.039096	0.029568
$T(1, 2, 3, 4, 5, 6)$	23.037730	24.823465	0.077513
$T(2, 2, 3, 4, 5, 6)$	23.814646	25.356883	0.064760
$T(1, 2, 3, 4, 5, 7)$	23.422246	25.347317	0.082190
$T(6, 6, 6, 6, 6, 6)$	30.388415	31.163859	0.025518
$T(7, 7, 7, 7, 7, 7)$	32.673063	33.324090	0.019925
$T(1, 2, 3, 4, 5, 6, 7)$	28.519757	30.722015	0.077219
$T(2, 2, 3, 4, 5, 6, 7)$	29.296673	31.185730	0.064480
$T(1, 2, 3, 4, 5, 6, 8)$	28.878700	31.182028	0.079759
$T(7, 7, 7, 7, 7, 7, 7)$	38.148766	39.205577	0.027702

Tabela 4.1: Majorantes para a energia de grafos *caterpillar*

Pela análise dos testes computacionais, observa-se o seguinte:

- Fixado $r \in \mathbb{N}$, $r \geq 4$,

- a eficácia da aproximação à energia de $G = T(q_1, \dots, q_r)$ dada pelo majorante do Teorema 4.4.4 é melhor quando $q_1 = \dots = q_r = r + 1$;
- a energia de $G = T(q_1, \dots, q_r)$ é menor nos casos em que $q_{t+1} = q_t + 1$, $t \in \{1, \dots, r - 1\}$ e maior quando $q_1 = \dots = q_r = r + 1$;
- Qualquer uma das aproximações estudadas apresenta um erro inferior a 9%.

Na tabela 4.2 estão os dados obtidos a partir do Teorema 4.4.7 e os erros de aproximação respetivos.

G	$\mathcal{E}_R(G)$	T. 4.4.7	er T. 4.4.7
$T(1, 2, 3, 4)$	6.309753	6.402272	0.014663
$T(2, 2, 3, 4)$	6.496072	6.569464	0.011298
$T(1, 2, 3, 5)$	6.342499	6.438468	0.015131
$T(4, 4, 4, 4)$	6.741010	6.932883	0.028464
$T(5, 5, 5, 5)$	6.945381	7.095016	0.021544
$T(1, 2, 3, 4, 5)$	7.992586	8.086050	0.011694
$T(2, 2, 3, 4, 5)$	7.777440	8.248200	0.060529
$T(1, 2, 3, 4, 6)$	8.016113	8.086050	0.008725
$T(5, 5, 5, 5, 5)$	8.773412	8.809357	0.004097
$T(6, 6, 6, 6, 6)$	9.019597	8.964194	0.006143
$T(1, 2, 3, 4, 5, 6)$	9.718532	8.860168	0.088322
$T(2, 2, 3, 4, 5, 6)$	9.904852	9.040022	0.087314
$T(1, 2, 3, 4, 5, 7)$	9.736237	8.860168	0,089980
$T(6, 6, 6, 6, 6, 6)$	10.678319	9.786206	0.083544
$T(7, 7, 7, 7, 7, 7)$	10.833183	9.919347	0.084355
$T(1, 2, 3, 4, 5, 6, 7)$	11.477328	10.654644	0.071679
$T(2, 2, 3, 4, 5, 6, 7)$	11.663647	10.826260	0.071795
$T(1, 2, 3, 4, 5, 6, 8)$	11.491127	10.654644	0.072794
$T(7, 7, 7, 7, 7, 7, 7)$	12.603996	11.706813	0.071182

Tabela 4.2: Majorantes para a energia de Randić de grafos *caterpillar*

Pela análise dos testes computacionais, observa-se o seguinte:

- Em qualquer um dos casos apresentados, verifica-se uma grande eficácia do majorante do Teorema 4.4.7 na aproximação à energia de Randić de $G = T(q_1, \dots, q_r)$. Os erros das aproximações são, também, inferiores a 9% e em alguns casos o erro é mesmo inferior a 1%;
- Fixado $r \in \mathbb{N}$, $r \geq 4$, a energia de Randić de $G = T(q_1, \dots, q_r)$ é também maior quando $q_1 = \dots = q_r = r + 1$.

Capítulo 5

Conclusões

Esta tese apresentou um estudo de invariantes espectrais da matriz de Randić de um grafo.

A definição para a matriz de Randić foi proposta em 2010 por Burcu Bozkurt, Dilek Güngör, Ivan Gutman e Sinan Çevik, em [9], a partir da definição do Índice de Randić proposta por Milan Randić, em [76], 35 anos antes. Como foi referido, o Índice de Randić tem inúmeras aplicações em áreas como a Química, a Farmacologia ou a Medicina. Particularmente, destacam-se as aplicações desse índice topológico ao nível da previsão de cancro colo-retal e da mama. Por outro lado, o estudo de invariantes de naturezas diversas associados a grafos é um dos grandes objetivos da teoria espectral dos grafos. Foram essas as maiores motivações para o estudo que se apresenta nesta tese sobre a matriz de Randić e algumas das suas propriedades espectrais. A esse propósito, destaca-se a definição de *spread* de Randić de um grafo que considera a diferença entre o segundo maior e o menor valores próprios da matriz de Randić. Um dos resultados mais interessante sobre o *spread* de Randić, mostrou que os grafos completos são os únicos grafos para os quais o segundo maior valor próprio de Randić é negativo. Mais, os grafos completos são os únicos grafos conexos com *spread* de Randić nulo.

Paralelamente à definição de diferentes majorantes e minorantes para o *spread* de diferentes matrizes (algumas associadas a grafos) existentes na literatura foram, também, apresentados majorantes e minorantes para o *spread* de Randić de grafos e realizados diversos testes computacionais para se avaliar o comportamento desses majorantes e minorantes em grafos bipartidos completos, ciclos e grafos pertencentes à coleção *Second DIMACS Implementation*.

O estudo de propriedades espectrais da matriz de Randić e a definição de majorantes e minorantes para o *spread* de Randić foram motivados por vários resultados da literatura. Destacam-se o Lema 3.3.1, de Oscar Rojo e Ricardo Soto de 2013, o Teorema 3.3.3 apresentado por Alfred Brauer em 1952, o resultado de (3.25), provado por Mirsky em 1956, o Lema 3.3.9, o resultado (3.32) de Jorma Merikoski e Ravinder Kumar de 2003 e o majorante para o *spread* de uma matriz, (3.39), apresentado em 1985 por David Scott.

Os testes computacionais realizados nas três classes de grafos referidas, permitiram concluir que, em geral, existe uma tendência relativamente bem definida para determinado majorante ou minorante apresentar um comportamento melhor na aproximação ao *spread* de Randić. Este padrão de comportamento não é visível, apenas, no estudo dos majorantes para o *spread* de Randić em grafos à coleção *Second DIMACS Implementation*. É verdade, porém, que os exemplos escolhidos para os testes computacionais nessa classe de grafos não seguem qualquer tipo de organização (como acontece em relação ao número de vértices que vai aumentando de forma organizada nos testes relativos às classes dos grafos bipartidos completos e ciclos), o que pode ajudar a explicar o facto de não se destacar qualquer majorante sistematicamente mais próximo do *spread* de Randić. Destaca-se, ainda, o facto de existirem majorantes e minorantes que apresentam, em alguns casos, a melhor aproximação ao *spread* de Randić mas não terem uma expressão de fácil concretização, como são os exemplos do Teorema 3.3.6 ou do Teorema 3.3.14. Esse facto permite refletir sobre a importância de se avaliar a rapidez e a facilidade de utilização de um determinado majorante ou minorante na aproximação a um parâmetro em estudo, para além

de se avaliar a sua maior ou menor aproximação a esse parâmetro.

No Capítulo 4 apresentaram-se aplicações do estudo do espectro e do *spread* de Randić ao *H-join* de grafos. Caracterizando os grafos *caterpillar* como *H-join* de grafos, foi possível estudar o espectro e o espectro de Randić dessa classe e apresentar majorantes para a energia e para a energia de Randić de grafos *caterpillar*. Foram apresentados, também, alguns testes que confirmaram a elevada eficácia da aproximação à energia e à energia de Randić de alguns grafos *caterpillar* dada, respetivamente, pelos Teoremas 4.4.4 e 4.4.7. Efetivamente, todos os exemplos apresentados mostraram que as aproximações à energia e à energia de Randić de grafos *caterpillar* são conseguidas com erros de aproximação inferiores a 9%, os melhores de todos os testes computacionais escritos nesta tese.

Referências Bibliográficas

- [1] ANDRADE, E., GOMES, H. and ROBBIANO, M. Spectra and Randić Spectra of Caterpillar Graphs and Applications to the Energy. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 77 (2017), 61–75.
- [2] ABREU, N. M. M. Old and new results on algebraic connectivity of graphs. *Lin. Algebra Appl.*, 423 (2007), 53–73.
- [3] BALABAN, A. T. Clar formulas: How to draw and how not to draw formulas of polycyclic aromatic hydrocarbons. *Polycyclic Arom. Comp.*, 24 (2004), 8389.
- [4] BANERJEE, A. and JOST, J. Graph spectra as a systematic tool in computational biology. *Discr. Appl. Math.*, 157 (2009), 24252431.
- [5] BARNES, E. R. and HOFFMAN, A. J. Bounds for the spectrum of normal matrices. *Lin. Algebra Appl.*, 201 (1994), 79–90.
- [6] BOLLOBÁS, B. and ERDÖS, P. Graphs of extremal weights. *Ars Combin.*, 50 (1998), 225233.
- [7] BONIFÁCIO, A. S. *Sobre Energia e Energia Laplaciana de Grafos*. PhD thesis, COPPE-UFRJ, 2008.
- [8] BOZKURT, Ş. B., GÜNGÖR, A. D. and GUTMAN, I. Randić spectral radius and Randić energy. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 64 (2010), 321–334.

- [9] BOZKURT, Ş. B., GÜNGÖR, A. D., GUTMAN, I. and ÇEVİK, A. S. Randić matrix and Randić energy. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 64 (2010), 239–250.
- [10] BRAUER, A. Limits for the characteristic roots of a matrix. IV. Applications to stochastic matrices. *Duke Math. J.*, 19 (1952), 75–91.
- [11] BUTLER, S. *Eigenvalues and structures of graphs*. PhD Dissertation, University of California, San Diego, 2008.
- [12] CARDOSO, D. M., SZYMAŃSKI, J. and ROSTAMI, M. *Matemática Discreta: Combinatória, Teoria dos Grafos, Algoritmos*. Escolar Editora, Lisboa, 2009.
- [13] CARDOSO, D. M., FREITAS, M. A., MARTINS, E. A. and ROBBIANO, M. Spectra of graphs obtained by a generalization of the join graph operation. *Discr. Math.*, 313 (2013), 733–741.
- [14] CARDOSO, D. M., GUTMAN, I., MARTINS, E. A. and ROBBIANO, M. A generalization of Fiedler’s lemma and some applications. *Linear Multilinear Algebra*, 59, 8 (2011), 929–942.
- [15] CAVERS, M., FALLAT, S. and KIRKLAND, S. On the normalized Laplacian energy and general Randić index R_{-1} of graphs. *Lin. Algebra Appl.*, 433 (2010), 172–190.
- [16] CAYLEY, A. On the mathematical theory of isomers. *Phil. Mag.*, 47 (1874), 444–446.
- [17] CHEN, X. and DAS, K. C. Some results on the Laplacian spread of a graph. *Linear Algebra and its Applications*, 505 (2016), 245–260.
- [18] CHUNG, F. *Spectral Graph Theory*. Am. Math. Soc., Providence, 1997.
- [19] CLAR, E. *The Aromatic Sextet*. John Wiley & Sons, London, 1972.
- [20] COLLATZ, L. and SINOGOWITZ, U. Spektren endlicher graphen. *Abh. Math. Sem. Univ. Hamburg*, 21 (1957), 63–77.

- [21] COULSON, C.A. On the calculation of the energy in unsaturated hydrocarbon molecules. *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, 36 (1940), 201-203.
- [22] CVETKOVIĆ, D., DOOB, M., GUTMAN, I. and TORGASEV, A. *Recent Results in the Theory of Graph Spectra*. North-Holland, Amsterdam, 1988.
- [23] CVETKOVIĆ, D., DOOB, M. and SACHS, H. *Spectra of Graphs - Theory and Application*. Academic Press, New York, 1980.
- [24] CVETKOVIĆ, D. and GUTMAN, I. The computer system Graph, A useful tool in chemical graph theory. *J. Serb. Chem.*, 7, 5 (1986), 640-644.
- [25] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P. and SIMIĆ, S. K. *An Introduction to the Theory of Graph Spectra*. Cambridge University Press, Cambridge, 2009.
- [26] CYVIN, S. J. and GUTMAN, I., *Kekulé Structures in Benzenoid Hydrocarbons*. Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [27] DAS, K. C. and SORGUN, S. On Randić energy of graphs. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 72 (2014), 227-238.
- [28] DAS, K. C., SORGUN, S. and GUTMAN, I. On Randić energy. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 73 (2015), 81-92.
- [29] DAS, K. C., SORGUN, S. and XU, K. On Randić energy of graphs. in Gutman, I. and Li, X. (Eds.) *Energies of graphs - Theory and Applications*, Univ. Kragujevac, Kragujevac, 2016, 111-122.
- [30] DEWAR, M. J. S. *The Molecular Orbital Theory of Organic Chemistry*. McGrawHill, New York, 1969.
- [31] EL-BASIL, S. Novel applications of Randić molecular connectivity in index on data reduction graphs. *Chem. Phys. Lett.*, 137, 6 (1987), 543-547.

- [32] FAN, Y. Z., XU, J., WANG, Y. and LIANG, D. The Laplacian spread of a tree. *Discr. Math. Theor. Comput. Sci.*, 10 (2008), 79–86.
- [33] FIEDLER, M. Algebraic connectivity of graphs. *Czech. Math. J.*, 23 (1973), 298–305.
- [34] FIEDLER, M. Eigenvalues of nonnegative symmetric matrices. *Linear Algebra Appl.*, 9, 2-3 (1974), 119-142.
- [35] FOULDS, L. R. *Graph Theory Applications*. Springer-Verlag, New York, 1992.
- [36] FREITAS, M. A. A., ROBBIANO, M., and BONIFÁCIO, A. S. An improved upper bound of the energy of some graphs and matrices. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 74 (2015), 307–320.
- [37] FROBENIUS, G. Uber Matrizen aus nicht negativen Elementem. *S. - B. Deutsch. Akad. Wiss. Berlin. Math-Nat. Kl.* (1912), 456–477.
- [38] FURTULA, B. and GUTMAN, I. Comparing energy and Randić energy. *Maced. J. Chem. Chem. Engin.*, 32 (2013), 117–123.
- [39] FURTULA, B., GUTMAN, I. and DEHMER, M. On structure–sensitivity of degree–based topological indices. *Appl. Math. Comput.*, 219 (2013), 8973–8978.
- [40] GOMES, H., GUTMAN, I., MARTINS, E., ROBBIANO, M. and SAN MARTÍN, B. On Randić Spread. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 72 (2014), 249–266.
- [41] GOMES, H., MARTINS, E. A., ROBBIANO, M. and SAN MARTÍN, B. Upper bounds for Randić spread. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 72 (2014), 267–278.
- [42] GREGORY, D., HERSHKOWITZ, D. and KIRKLAND, S. The *spread* of the spectrum of a graph. *Lin. Algebra Appl.*, 332–334 (2001), 23–35.
- [43] GUTMAN, I. Acyclic systems with extremal Huckel p–electron energy. *Theoret. Chim. Acta (Berlin)*, 45 (1977), 79–87.

- [44] GUTMAN, I. (Editorial). Census of graph energies. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 74 (2015), 219–221.
- [45] GUTMAN, I. Clar Formulas and Kekulé Structures. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 17 (1985), 75–90.
- [46] GUTMAN, I. Degree–based topological indices. *Croat. Chem. Acta*, 86 (2013), 351–361.
- [47] GUTMAN, I. The energy of a graph. *Ber. Math.–Statist. Sect. Forschungszentrum Graz*, 103 (1978), 1–22.
- [48] GUTMAN, I. Topological properties of benzenoid systems, An identity for the sextet polynomial. *Theor. Chim. Acta* 45, 309 (1977).
- [49] GUTMAN, I. and EL-BASIL, S. Topological Properties of Benzenoid Systems. in *XXX–VII. Characterization of Certain Chemical Graphs*, Z. Naturforsch., 1985, 40a, 923–926.
- [50] GUTMAN, I. and FURTULA, B. (Eds.) *Recent Results in the Theory of Randić Index*. Univ. Kragujevac, Kragujevac, 2008.
- [51] GUTMAN, I., FURTULA, B. and BOZKURT, Ş. B. On Randić energy. *Lin. Algebra Appl.*, 442 (2014), 50–57.
- [52] GUTMAN, I. and LI, X. (Eds.) *Energies of Graphs – Theory and Applications*. Mathematical Chemistry Monographs, 17, Kragujevac, 2016.
- [53] GUTMAN, I. and TOŠOVIĆ, J. Testing the quality of molecular structure descriptors. Vertex–degree–based topological indices. *J. Serb. Chem. Soc.*, 78 (2013), 805–810.
- [54] HANSEN, P. and MÉLOT, H. Variable neighborhood search for extremal graphs. 6. Analyzing bounds for the connectivity index. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 40 (2003), 1–14.
- [55] HARARY, F. *Graph Theory*. Reading, MA: Addison–Wesley, 1994.

- [56] HAYNSWORTH, E. V. Determination of the inertia of a partitioned Hermitian matrix. *Linear Algebra Appl.*, 1 (1968), 73–81.
- [57] HORN, R. and JOHNSON, C. R. *Matrix Analysis*. Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
- [58] HORN, R. and JOHNSON, C. R. *Topics in Matrix Analysis*. Cambridge University Press, Cambridge, 1991.
- [59] HÜCKEL, E. Quantentheoretische Beiträge zum Benzolproblem. *Z. Phys.*, 70 (1931), 204–286.
- [60] JOHNSON, C. R., KUMAR, R. and WOLKOWICZ, H. Lower bounds for the spread of a matrix. *Lin. Algebra Appl.*, 71 (1985), 161–173.
- [61] JOHNSON, D. S. and TRICK, M. A. *Cliques, coloring, and satisfiability: second DIMACS challenge*. DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, American Mathematical Society, Providence, 1996.
- [62] KIER, L. B. and HALL, L. H. *Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research*. Academic Press, New York, 1976.
- [63] KIER, L. B. and HALL, L. H. *Molecular Connectivity in Structure–Activity Analysis*, Wiley, New York, 1986.
- [64] LI, X. and GUTMAN, I. *Mathematical Aspects of Randić-Type Molecular Structure Descriptors*, Univ. Kragujevac, Kragujevac, 2006.
- [65] LI, X. and SHI, Y. A survey on the Randić index. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 59 (2008), 127–156.
- [66] LI, X., SHI, Y. and GUTMAN, I. *Graph Energy*. Springer, New York, 2012.

- [67] LI, X., SHI, Y. and WANG, L. An updated survey on the Randić index. in Gutman, I. and Furtula, B. (Eds.) *Recent Results in the Theory of Randić Index*, Univ. Kragujevac, Kragujevac, 2008, 9-47.
- [68] McCLELLAND, B. J. Properties of the latent roots of a matrix: The estimation of π -electron energies. *J. Chem. Phys.*, 54 (1971), 640643.
- [69] MEYER, C. D. *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*. SIAM, Philadelphia, 2000.
- [70] MERIKOSKI, J. K. and KUMAR, R. Characterizations and lower bounds for the spread of a normal matrix. *Linear Algebra Appl.*, 364 (2003), 13-31.
- [71] MINC, H. *Nonnegative Matrices*, Wiley, New York, 1988.
- [72] MIRSKY, L. The spread of a matrix. *Mathematika*, 3 (1956), 127-130.
- [73] MUNTEANU, C. R., RABUÑAL, J. R. and PEREIRA, J. Predicción del cáncer colorrectal con grafos. in Aguiló, J., Figueras, A., Freire, A., Martín, F., Munteanu C.R. and Pazos A. (Eds.) *Nuevas Fronteras Tecnológicas. Redes NANOROADMAP e IBERO-NBIC*, Ciencia y Tecnología para el Desarrollo, Spain, 2010, 70-89.
- [74] NIKIFOROV, V. The energy of graphs and matrices. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 326 (2007), 1472-1475.
- [75] POPOVIĆ, M., STANKOVIĆ, R., MILOVANOVIĆ, I. and MILOVANOVIĆ, E. Some remarks on normalized Laplacian spreads of graphs. *Rev. Téc. Ing. Univ. Zulia*, 38, 2 (2015), 1317.
- [76] RANDIĆ, M. On characterization of molecular branching. *J. Am. Chem. Soc.*, 97 (1975), 6609-6615.
- [77] RANDIĆ, M. On history of the Randić index and emerging hostility toward chemical graph theory. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 59 (2008), 5-124.

- [78] RODRÍGUEZ, J. A. A spectral approach to the Randić index. *Lin. Algebra Appl.*, 400 (2005), 339–344.
- [79] ROJO, O. and SOTO, R. A new upper bound on the largest normalized Laplacian eigenvalue. *Operators and Matrices*, 7 (2013), 323–332.
- [80] SALEM, K., KLAVŽAR, S., VESEL, A. and ŽIGERT, P. The Clar formulas of a benzenoid system and the resonance graph. *Discr. Appl. Math.*, 157 (2009) 25652569.
- [81] SCHWENK, A. J. Computing the characteristic polynomial of a graph. in Bary, R. and Harary, F. (Eds.) *Graphs and Combinatorics: Lecture notes in Mathematics*, Springer-Verlag, 1974, 153–172.
- [82] SCOTT, D. S. On the accuracy of the Gershgorin circle theorem for bounding the spread of a real symmetric matrix. *Linear Algebra Appl.*, 65 (1985), 147–155.
- [83] SHU, J. L., HONG, Y. and WEN, R. K. A sharp upper bound on the largest eigenvalue of the Laplacian matrix of a graph. *Lin. Algebra Appl.*, 347 (2002), 123–129.
- [84] TODESCHINI, R. and CONSONNI, V. *Handbook of Molecular Descriptors*, Wiley-VCH, Weinheim, 2000.
- [85] VARGA, R. S. *Matrix Iterative Analysis*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1962.
- [86] YING, X. and WU, X. Randomizing social networks: a spectrum pre-serving approach. in *SIAM Internat. Conf. Data Mining, SDM2008*, Atlanta, Georgia, USA, 2008, 739750.

Índice Remissivo

arestas, 10

incidentes, 10

caterpillar, 12

ordem do, 12

ciclo, 11

descritor molecular, 28

estrela, 11

floresta, 11

grafo

p -regular, 10

bipartido, 10

bipartido completo, 11

complementar do, 10

completo, 10

componente conexa, 12

conexo, 11

dimensão do, 10

energia de, 25

espectro de, 21

ordem do, 10

regular, 10

simples, 9

spread do, 22

índice do, 22

grafos

H -join de, 13

interseção de, 12

isomorfos, 11

join de, 13

subgrafo do, 12

supergrafo do, 12

união de, 12

união disjunta de, 12

matriz

de adjacência, 21

de permutação, 18

energia de, 25

Hermítica, 14

Laplaciana, 22

Laplaciana normalizada, 23

normal, 14

normas de, 17

ortogonal, 18

primitiva, 18

reduzível, 18

- unitariamente diagonalizável, 15
- índice de imprimitividade, 18
- matrizes
 - semelhantes por permutação, 18
- passeio, 11
- quociente de Rayleigh, 16
- Randić
 - energia de, 26
 - espectro de, 31
 - matriz de, 23, 30
 - índice de, 27
- spread
 - de Randić, 34
 - de uma matriz, 18
 - laplaciano, 33
 - laplaciano normalizado, 33
- subgrafo
 - induzido, 12
- vértice
 - grau do, 10
 - isolado, 10
- vértices, 9
 - adjacentes, 10
 - pendentes, 11
- árvore, 11