

Grafos hiperenergéticos e não hiperenergéticos

Andréa S. Bonifácio,

Nair M. M. de Abreu,

Programa de Engenharia de Produção, COPPE, UFRJ,

Caixa Postal 68507, CEP 21945-970, Rio de Janeiro, RJ

E-mail: andrea@pep.ufrj.br, nair@pep.ufrj.br,

Cybele T.M. Vinagre

Instituto de Matemática, UFF

Campus do Valonguinho, 24020-140, Niterói, RJ

E-mail: cybl@vm.uff.br,

Ivan Gutman

Faculty of Science, University of Kragujevac

P.O.60, 34000, Kragujevac, Sérvia

E-mail: gutman@kg.ac.yu

Resumo: A energia de um grafo é a soma dos valores absolutos dos autovalores da matriz de adjacência do grafo. Trata-se de um invariante que tem despertado muito interesse entre matemáticos e químicos. Grafos com energia superior à energia do grafo completo (grafo simples onde todos os vértices são adjacentes) são chamados hiperenergéticos e, em caso contrário, não hiperenergéticos. Reunimos neste artigo os principais resultados da literatura sobre estes dois tópicos e apresentamos duas novas famílias de grafos não hiperenergéticos.

1 Introdução

No que se segue, vamos considerar $G = G(V, E)$ um grafo simples, finito e não-orientado, em que $V = \{v_1, \dots, v_n\}$ é o conjunto de vértices e $E = \{\{v_i, v_j\} \mid 1 \leq i, j \leq n\}$ é o conjunto de m arestas. A matriz de adjacência de G , $A(G) = [a_{ij}]$, ou simplesmente A , é a matriz tal que $a_{ij} = 1$, se o vértice v_i é adjacente ao vértice v_j , e $a_{ij} = 0$ em caso contrário. O polinômio $P(G, \lambda) = \det(\lambda I - A)$ é chamado *polinômio característico do grafo G* e suas raízes são os *autovalores de G* ; o *espectro de G* é o espectro de $A(G)$, descrito pela lista de autovalores distintos de $A(G)$ com as respectivas multiplicidades, como em $Sp(G) = [\lambda_1^{(\alpha_1)}, \lambda_2^{(\alpha_2)}, \dots, \lambda_r^{(\alpha_r)}]$.

A *energia* de um grafo G é definida como

a soma dos valores absolutos dos autovalores $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ de G , ou seja,

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

Este conceito foi introduzido por um dos co-autores em 1978 e seu estudo tem despertado grande interesse, sobretudo entre matemáticos e químicos. Particularmente, em química teórica, o interesse surge do fato de que, para a maioria das moléculas de hidrocarbonetos conjugados, a energia total dos elétrons π , calculada pela Teoria de Hückel, coincide com o valor da energia do grafo que modela essas moléculas, veja [2].

Um grafo com n vértices onde qualquer par de vértices distintos é adjacente é chamado *grafo completo* e denotado por K_n . É fácil mostrar que para todo inteiro $n \geq 1$, $E(K_n) = 2(n-1)$. Em [6], I. Gutman (1978) conjecturou que, dentre todos os grafos com n vértices, o grafo completo K_n era aquele com energia máxima. Após esta conjectura ter sido invalidada pelo próprio Gutman num artigo em conjunto com D. Cvetković [4], os seguintes conceitos foram introduzidos: um grafo G é dito *grafo hiperenergético* quando $E(G) > 2(n-1)$, e *grafo não hiperenergético* quando $E(G) \leq 2(n-1)$. Neste trabalho reunimos os principais resultados sobre grafos hiperenergéticos e não hiperenergéticos disponíveis em [1], [2], [8],

[9], [10], [15], [16] e exibimos algumas classes de grafos não hiperenergéticos, uma constituída por grafos com muitas arestas (grafos densos), outra com grafos em que as arestas são dadas como função linear do número de vértices e de parâmetros a e b , para certos valores de a e b .

2 Grafos hiperenergéticos e não hiperenergéticos

Em 1986, buscas computacionais mostraram que só existem grafos hiperenergéticos de ordem $n \geq 8$, veja [4]. Em geral, tais grafos possuem um número muito grande de arestas. O primeiro método de construção de grafos hiperenergéticos foi obtido por H. Walikar *et al.* [16] que demonstraram que, para $p \geq 5$, o grafo-linha $l(K_p)$ do grafo completo K_p é hiperenergético. O grafo-linha $l(G)$ de um grafo G é o grafo cujos vértices correspondem às arestas de G e onde dois vértices são adjacentes se, e somente se, eles correspondem a arestas incidentes em um mesmo vértice em G . Y. Hou e I. Gutman [10] mostraram que se um grafo G com p vértices tem mais do que $2p - 1$ arestas, seu grafo-linha correspondente $l(G)$ é necessariamente hiperenergético.

Em [1], R. Balakrishnan considerou grafos $K_n - H$, obtidos de K_n retirando-se as arestas de um ciclo Hamiltoniano H de K_n e propôs a seguinte conjectura: *Para $n \geq 4$, $K_n - H$ é não hiperenergético.* Na Tabela 1, apresentamos as energias de $K_n - H$ e de K_n , para $4 \leq n \leq 9$. Nestes casos, vê-se que $E(K_n - H) < E(K_n)$, ou seja, $K_n - H$ é não hiperenergético¹.

Em [15], D. Stevanović e I. Stanković resolveram a conjectura proposta por Balakrishnan em [1] mostrando que, para $n \geq 10$, $K_n - H$ é hiperenergético.

I. Gutman e L. Pavlović [9] estudaram a energia de grafos densos, ou seja, aqueles que têm muitas arestas. Eles definiram os seguintes tipos de grafos: os grafos $Ka_n(k)$, que são aqueles obtidos de K_n eliminando-se k arestas incidentes em um mesmo vértice; os grafos $Kb_n(k)$, que são aqueles obtidos de K_n por eliminação de k arestas independentes; os do tipo $Kc_n(k)$, que são os grafos resultantes da retirada de to-

n	$E(K_n - H)$	$E(K_n)$
4	4	6
5	6.47214	8
6	8	10
7	11.20775	12
8	13.65685	14
9	15.51754	16

Tabela 1: $E(K_n - H)$ versus $E(K_n)$, para $4 \leq n \leq 9$.

das as arestas de uma k -clique de K_n , onde $k < n$, e os grafos $Kd_n(k)$, que são obtidos pela eliminação das arestas de um k -ciclo em K_n . Na Figura 1, da esquerda para a direita, o primeiro grafo é $Ka_8(4)$, o segundo é $Kb_8(4)$, o terceiro é $Kc_8(4)$ e o quarto grafo é $Kd_8(4)$.

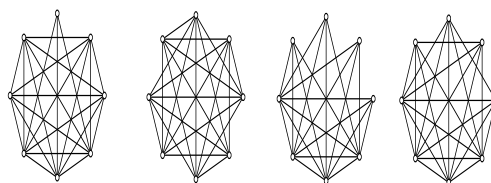


Figura 1: $Ka_8(4)$, $Kb_8(4)$, $Kc_8(4)$ e $Kd_8(4)$.

I. Gutman e L. Pavlović [9] mostraram que, na maioria dos casos, os grafos $Ka_n(k)$ são hiperenergéticos e os grafos $Kb_n(k)$ e $Kc_n(k)$ são não hiperenergéticos. E que um grafo do tipo $Kd_n(k)$ tanto pode ser hiperenergético quanto não hiperenergético.

Baseando-se na construção dos grafos densos descritos em [7], I. Gutman *et al.* introduziram mais dois tipos, os grafos $Ke_n(k)$, que são aqueles obtidos de K_n por eliminação das arestas de k cópias de P_3 e os grafos $Kf_n(k)$, que são obtidos de K_n por eliminação das arestas de k cópias de C_3 . Uma contribuição que apresentamos aqui é o estudo da energia dos grafos $Kf_n(k)$.

Teorema 1.1 Dados $n \geq 3$ e $1 \leq k \leq \lfloor \frac{n}{3} \rfloor$, o polinômio característico de $Kf_n(k)$ é $P(Kf_n(k), \lambda) = \lambda^{2k}(\lambda + 1)^{n-3k-1}(\lambda + 3)^{k-1}[\lambda^2 - (n-4)\lambda - 3(n-2k-1)]$.

Prova: Fixemos inteiros $n \geq 3$ e k , com $1 \leq k \leq \lfloor \frac{n}{3} \rfloor$, e escrevamos $G = Kf_n(k)$. Sem perda de generalidade podemos assumir que, para cada $i = 1, 2, \dots, k$, as arestas da i -ésima cópia do triângulo C_3 a ser retirada

¹É necessário dizer que as energias de todos os grafos dados como exemplo no presente artigo foram calculadas pelo software *NewGraph*, versão 1.1.2, [14]

conectam os vértices v_{3i-2}, v_{3i-1} e v_{3i} . Então o polinômio característico do grafo $Kf_n(k)$ que, por definição, é o de sua matriz de adjacência, é igual ao seguinte determinante:

$$\begin{vmatrix} \lambda & 0 & 0 & \dots & -1 & -1 & -1 & \dots & -1 & -1 \\ 0 & \lambda & 0 & \dots & -1 & -1 & -1 & \dots & -1 & -1 \\ 0 & 0 & \lambda & \dots & -1 & -1 & -1 & \dots & -1 & -1 \\ \vdots & & & \ddots & & & & & & \\ -1 & -1 & -1 & \dots & \lambda & 0 & 0 & \dots & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & \dots & 0 & \lambda & 0 & \dots & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & \dots & 0 & 0 & \lambda & \dots & -1 & -1 \\ \vdots & & & \ddots & & & & & & \\ -1 & -1 & -1 & \dots & -1 & -1 & -1 & \dots & \lambda & -1 \\ -1 & -1 & -1 & \dots & -1 & -1 & -1 & \dots & -1 & \lambda \end{vmatrix}. \quad (1)$$

Devemos notar que a partir da $(3k)$ -ésima linha e $(3k)$ -ésima coluna da matriz cujo determinante aparece em (1) não há mais entradas nulas.

Sejam $X = \lambda + 1$, $Y = -\frac{1}{\lambda+1}$, $Z = -\lambda - 2$ e $T = -\lambda - 3$.

De agora em diante, tudo o que precisamos fazer para determinar uma fórmula para o determinante em (1) é aplicar adequadas operações elementares sobre as linhas e colunas da matriz subjacente. Neste sentido, por ordem:

- Subtraímos a primeira coluna da matriz subjacente em (1) de todas as demais e obtemos o determinante em (2);
- Multiplicamos por $1/X$ todas as colunas, a partir da $(3k + 1)$ -ésima até a n -ésima coluna, da matriz subentendida em (2) e obtemos o determinante em (3);

$$\begin{vmatrix} \lambda & -\lambda & -\lambda & \dots & -X & -X & -X & \dots & -X & -X \\ 0 & \lambda & 0 & \dots & -1 & -1 & -1 & \dots & -1 & -1 \\ 0 & 0 & \lambda & \dots & -1 & -1 & -1 & \dots & -1 & -1 \\ \vdots & & & \ddots & & & & & & \\ -1 & 0 & 0 & \dots & X & 1 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & X & 1 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & X & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & & & & \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & X & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & X \end{vmatrix}. \quad (2)$$

$$X^{n-3k} \begin{vmatrix} \lambda & -\lambda & -\lambda & \dots & -X & -X & -X & \dots & -1 & -1 \\ 0 & \lambda & 0 & \dots & -1 & -1 & -1 & \dots & Y & Y \\ 0 & 0 & \lambda & \dots & -1 & -1 & -1 & \dots & Y & Y \\ \vdots & & & \ddots & & & & & & \\ -1 & 0 & 0 & \dots & X & 1 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & X & 1 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & X & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & & & & \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (3)$$

- Adicionamos as colunas $3k + 1, 3k + 2, \dots, n$ à primeira coluna da matriz subentendida em (3) e obtemos o determinante em (4);
- A expressão (4) é igual a (5), que é o determinante de uma matriz de ordem $3k$;
- Continuando, então, multiplicamos por X a

segunda e a terceira linhas da matriz subjacente em (5) para obter (6).

$$X^{n-3k} \begin{vmatrix} \lambda - (n-3k) & -\lambda & -\lambda & \dots & -X & -X & -X & \dots & -1 & -1 \\ (n-3k)Y & \lambda & 0 & \dots & -1 & -1 & -1 & \dots & Y & Y \\ (n-3k)Y & 0 & \lambda & \dots & -1 & -1 & -1 & \dots & Y & Y \\ \vdots & & & \ddots & & & & & & \\ -1 & 0 & 0 & \dots & X & 1 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & X & 1 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & X & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (4)$$

$$X^{n-3k} \begin{vmatrix} \lambda - (n-3k) & -\lambda & -\lambda & \dots & -X & -X & -X \\ (n-3k)Y & \lambda & 0 & \dots & -1 & -1 & -1 \\ (n-3k)Y & 0 & \lambda & \dots & -1 & -1 & -1 \\ \vdots & & & \ddots & & & \\ -1 & 0 & 0 & \dots & X & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & X & 1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & X \end{vmatrix}. \quad (5)$$

$$X^{n-3k-2} \begin{vmatrix} \lambda - (n-3k) & -\lambda & -\lambda & \dots & -X & -X & -X \\ -(n-3k) & \lambda X & 0 & \dots & -X & -X & -X \\ -(n-3k) & 0 & \lambda X & \dots & -X & -X & -X \\ \vdots & & & \ddots & & & \\ -1 & 0 & 0 & \dots & X & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & X & 1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & X \end{vmatrix}. \quad (6)$$

- Multiplicamos por $1/\lambda$ a segunda e a terceira colunas da matriz subjacente em (6) para chegar a (7);
- Subtraímos a terceira linha da primeira na matriz subentendida em (7), para obter (8);

$$\lambda^2 X^{n-3k-2} \begin{vmatrix} \lambda - (n-3k) & -1 & -1 & \dots & -X & -X & -X \\ -(n-3k) & X & 0 & \dots & -X & -X & -X \\ -(n-3k) & 0 & X & \dots & -X & -X & -X \\ \vdots & & & \ddots & & & \\ -1 & 0 & 0 & \dots & X & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & X & 1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & X \end{vmatrix}. \quad (7)$$

$$\lambda^2 X^{n-3k-2} \begin{vmatrix} \lambda & -1 & Z & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -(n-3k) & X & 0 & \dots & -X & -X & -X \\ -(n-3k) & 0 & X & \dots & -X & -X & -X \\ \vdots & & & \ddots & & & \\ -1 & 0 & 0 & \dots & X & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & X & 1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & X \end{vmatrix}, \quad (8)$$

- Adicionamos a segunda e a terceira colunas da matriz subjacente em (8) às colunas $4, 5, \dots, 3k$, para obter o determinante (9);
- Adicionamos as linhas $4, 5, \dots, 3k$ à primeira linha da matriz subjacente ao determinante em (9), para obter (10);
- Finalmente, adicionamos as colunas $4, 5, \dots, 3k$, da matriz subentendida em (10), já multiplicadas por $\frac{1}{X+2}$, à primeira coluna para obter (11).

$$\lambda^2 X^{n-3k-2} \begin{vmatrix} \lambda & -1 & Z & \dots & T & T & T \\ -(n-3k) & X & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -(n-3k) & 0 & X & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \\ -1 & 0 & 0 & \dots & X & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & X & 1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & X \end{vmatrix}. \quad (9)$$

$$\lambda^2 X^{n-3k-2} \begin{vmatrix} \lambda-(3k-3) & -1 & Z & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -(n-3k) & X & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -(n-3k) & 0 & X & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \\ -1 & 0 & 0 & \dots & X & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & X & 1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & X \end{vmatrix}. \quad (10)$$

$$\lambda^2 X^{n-3k-2} \begin{vmatrix} \lambda-(3k-3) & -1 & Z & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -(n-3k) & X & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -(n-3k) & 0 & X & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & X & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & X & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & X \end{vmatrix}. \quad (11)$$

O cálculo do determinante da matriz diagonal subjacente em (11) é direto e nos fornece (12):

$$\lambda^2 (\lambda+1)^{n-3k-2} \begin{vmatrix} \lambda-(3k-3) & -1 & -\lambda-2 \\ -(n-3k) & \lambda+1 & 0 \\ -(n-3k) & 0 & \lambda+1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} X & 1 & 1 \\ 1 & X & 1 \\ 1 & 1 & X \end{vmatrix}^{k-1}, \quad (12)$$

assim, o polinômio característico do grafo $Kf_n(k)$ é, então, $P(Kf_n(k), \lambda) = \lambda^{2k} \cdot (\lambda+1)^{n-3k-1} \cdot (\lambda+3)^{k-1} [\lambda^2 - (n-4)\lambda - 3(n-2k-1)]$. \diamond

Corolário 1.2 Dados n e $k \in \mathbb{N}$, tal que $1 \leq k \leq \lfloor \frac{n}{3} \rfloor$, tem-se que o espectro do grafo $Kf_n(k)$ é $Sp(Kf_n(k)) = \left[0^{(2k)}, -1^{(n-3k-1)}, -3^{(k-1)}, \frac{(n-4) \pm \sqrt{(n+2)^2 - 24k}}{2} \right]$.

Conhecendo o espectro, é fácil mostrar que os grafos do tipo $Kf_n(k)$ são não hiperenergéticos, como podemos ver no resultado seguinte.

Corolário 1.3 Dados $n \geq 3$ e k tais que $0 \leq k \leq \lfloor \frac{n}{3} \rfloor$, a energia do grafo $Kf_n(k)$ é

$$E(Kf_n(k)) = n - 4 + \sqrt{(n+2)^2 - 24k}.$$

e, como consequência,

$$E(Kf_n(k)) \leq E(K_n).$$

Um dos problemas em aberto mais interessantes no estudo da energia de um grafo é encontrar uma caracterização para os grafos não hiperenergéticos. Em 1999, Gutman *et al.* [8] estabeleceram uma condição apenas de suficiência, apresentada no Teorema 1.4. De acordo com este resultado, se considerarmos a seqüência de grafos com n vértices, à medida que n cresce, a razão entre o número de arestas m e o valor $\frac{n(n-1)}{2}$, o número máximo possível de arestas em um grafo, decresce. Isto significa que a partir de um dado n , os grafos dados pelo Teorema 1.4 podem ser considerados esparsos.

Teorema 1.4[8] Se G é um grafo com n vértices e m arestas tal que $m < 2(n-1)$, então G é não hiperenergético.

Na Figura 2, apresentamos um grafo não hiperenergético com 10 vértices e 41 arestas. Note que o número de arestas deste grafo não satisfaz a condição do Teorema 1.4, mostrando que tal condição é apenas suficiente.

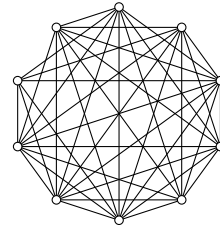


Figura 2: Grafo G com $E(G) = 17.86065 < 18 = E(K_{10})$.

Algumas classes de grafos que satisfazem a condição do Teorema 1.4 são conhecidas na literatura. Dentre elas destacam-se os seguintes exemplos:

Exemplo 1[8]: Os grafos de Hückel satisfazem o Teorema 1.4. Um grafo de Hückel representa um hidrocarboneto conjugado segundo o modelo de orbitais moleculares de Hückel, veja [2]. Cada vértice de um grafo de Hückel tem grau no máximo 3 e, portanto, se ele tiver n vértices terá no máximo $3n/2$ arestas. Temos, $\frac{3n}{2} = 2n - 2 - \frac{n-4}{2}$ e para $n > 4$, $\frac{3n}{2} < 2n - 2$. Conseqüentemente, todo grafo de Hückel com mais de 4 vértices tem no máximo $2(n-1)$ arestas, sendo portanto, não hiperenergético, pelo Teorema 1.4. Para $n \leq 4$, pode ser verificado diretamente que todos os grafos são não hiperenergéticos. \diamond

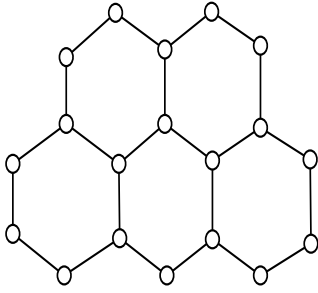


Figura 3: Um grafo de Hückel com 19 arestas energia igual a $26.69642 < 36 = E(K_9)$.

Exemplo 2[1]: O grafo subdivisão de um grafo G também satisfaz o Teorema 1.4. Por *grafo subdivisão* $S(G)$ de um grafo G entende-se aquele obtido pela inserção de um vértice em cada aresta de G . Se G tem n vértices e m arestas, $S(G)$ tem $m + n$ vértices e $2m$ arestas. Logo, para $n > 1$, temos que $m < n + m - 1$. Assim, $2m < 2(n + m) - 2$. Pelo Teorema 1.4, conclui-se que $S(G)$ é não hiperenergético. \diamond

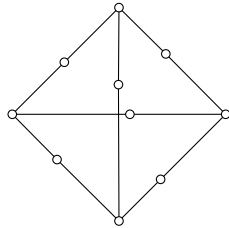


Figura 4: O grafo subdivisão do grafo completo K_4 .

A Figura 4 mostra o grafo subdivisão de K_4 . Este grafo tem $n = 10$ vértices e energia igual a $13.38426 < 18 = E(K_{10})$.

3 Classes (a, b) -lineares de grafos não hiperenergéticos

Considerando $\mathbb{N} = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$, ponhamos $\mathbb{N}/2 = \{\frac{n}{2} \mid n \in \mathbb{N}\}$. Seja G um grafo com n vértices e m arestas e $d(G) = \frac{2m}{n}$ o grau médio de G . Os invariantes *top* de G , $\mu(G) = [d(G)]$ e *gap* de G , $h(G) = n\mu(G) - 2m$, foram introduzidos por Lima *et. al.* [12] e estudados por Damas *et. al.* [5]. Além disso, em [11] e [12] encontramos a definição de classe (a, b) -linear de grafos, aqui reproduzida: Para $a, b \in \mathbb{N}/2$, a classe (a, b) -linear de grafos é por definição,

a coleção

$$L(a, b) = \{G = (V, E) \mid \mu(G) = 2a, h(G) = 2b\}.$$

Quando $G \in L(a, b)$, G é dito ser um grafo (a, b) -linear.

Em [11] e *et. al.* [12] os autores provam que qualquer grafo simples e de ordem finita pertence a uma única classe (a, b) -linear. Eles também provam o seguinte resultado:

Teorema 2.1 Dados $a, b \in \mathbb{N}/2$, seja G um grafo com n vértices e m arestas. O grafo $G \in L(a, b)$ se, e somente, se o número de vértices de G é $n > 2b$ e o número de arestas é dado por $m = an - b$.

A partir de um dado n , e, em função de a e b , o resultado seguinte dá condições necessárias e suficientes para a existência de grafos (a, b) -lineares conexos.

Teorema 2.2[13] Dados $a, b \in \mathbb{N}/2$ e $n > 2b$, seja $S_n(a, b)$ a classe dos grafos (a, b) -lineares com n vértices que são conexos. Se vale também $n \geq 2a$ então $S_n(a, b) = \emptyset$ se e somente se, ou $a = \frac{1}{2}$ ou $a = 1$ e $b \geq 2$.

Assim, se $a, b \in \mathbb{N}/2$, $a < 2$, e se $n > \max\{2a, 2b\}$, então as classes $S_n(a, b)$ não vazias são $S_n(1, b)$ com $b = 0$ ou $b = 1$ e $S_n(3/2, b)$. Mas para os grafos com m arestas nestas classes é fácil ver que, se $b < 2$, então $m = an - b < 2n - b \leq 2n - 2 = 2(n - 1)$ e, se $a = \frac{3}{2}$ e $b \geq 2$ então $m = \frac{3}{2}n - b \leq \frac{3}{2}n < 2n - 2$; ou seja, os grafos nestas classes são todos não hiperenergéticos. Provamos assim a seguinte proposição, que apresenta portanto novas coleções de grafos não hiperenergéticos:

Proposição 2.3 Para quaisquer que sejam $a, b \in \mathbb{N}/2$, se $n > \max\{2a, 2b\}$ então os grafos nas classes $S_n(1, b)$ e $S_n(3/2, b)$ são todos não hiperenergéticos.

Na Figura 5 temos grafos com 10 vértices. Da esquerda para à direita, o primeiro pertence a $S_{10}(1, 0)$, o grafo do meio a $S_{10}(1, 1)$ e o último à $S(3/2, 0)$ e, as suas respectivas energias são 12.52771, 11.84282 e 15.07769. Se comparamos com $E(K_{10}) = 18$, confirmamos diretamente que todos os três grafos são não hiperenergéticos.

Para as classes (a, b) -lineares com $a >$

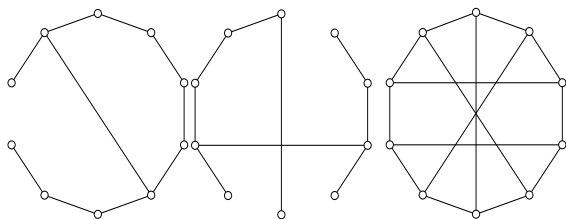


Figura 5: Grafos não hiperenergéticos.

2, ainda não chegamos a fatos conclusivos análogos aos expressos na Proposição 2.3.

Referências

- [1] R. Balakrishnan, The energy of a graph, *Linear Algebra and its Applications*, 387 (2004), 287-295.
- [2] A. S. Bonifácio, “Sobre Energia e Energia Laplaciana de Grafos”, Tese de Doutorado, COPPE-UFRJ, 2008.
- [3] D. M. Cvetković, D. Doob., H. Sachs, “Spectra of Graphs - Theory and Application”, New York, Academic Press, 1980.
- [4] D. M. Cvetković, I. Gutman, The computer system Graph, A useful tool in chemical graph theory, *J. Serb. Chem.* 7 (5) (1986) 640-644.
- [5] M. P. Damas, L. Markenzon, N. M. M. Abreu, New concepts and results about the average degree of a graph, *Applicable Analysis and Discrete Mathematics* 1 (2007), 284-292.
- [6] I. Gutman, The energy of a graph, *Ber. Math. Statist. Sect. Forschungszentrum Graz*. 103 (1978) 1-22.
- [7] I. Gutman, N. M. M. Abreu, C. T. M. Vinagre, A. S. Bonifácio, The Laplacian energy of some Laplacian integral graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, to appear.
- [8] I. Gutman, Y. Hou, H. B. Walikar, H. S. Ramane, P. R. Hampiholi, No Hückel graph is hyperenergetic, *J. Serb. Chem. Soc.*, 65(11) (2000) 799-801.
- [9] I. Gutman, L. Pavilović, The energy of some graphs with large number of edges, *Bull. Acad. Serbe Sci. Arts (cl. Math. Natur.)*, 118 (1999) 35-50.
- [10] Y. Hou, I. Gutman, Hyperenergetic line graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 43 (2001) 29-39.
- [11] L. S. Lima, “Vulnerabilidade de redes em grafos de Harary”, Tese de Doutorado, COPPE-UFRJ, 2006.
- [12] L. S. Lima, N. M. M. Abreu, P. E. Moraes, C. Sertã, Some properties of graphs in (a, b) -linear classes, *Congressus Numerantium*, 166 (2004) 43-51.
- [13] C. S. Oliveira, N. M. M. Abreu, A. F. Pazo, Parameters of connectivity in (a, b) -linear graphs, *Electronic Notes in Discrete Mathematics*, 22 (2005) 189-193.
- [14] D. Stevanović, V. Brankov, *NewGraph*, disponível em <http://www.sgt.pep.ufrj.br> (13/02/2007).
- [15] D. Stevanović, I. Stanković, Remarks on hyperenergetic circulant graphs, *Linear Algebra and its Applications* 400 (2005) 345-348.
- [16] H. B. Walikar, H. S. Ramane, P. R. Hampiholi, On the energy of a graph, in: R. Balakrishnan, H. M. Mulder, A. Vijayakumar (Eds.), *Graph Connections*, Allied Publishers, New Delhi, 1999, pp. 120-123.