



PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ESPECTRAIS DE k -ÁRVORES

Allana Sthel Santos de Oliveira

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

Orientadores: Maria Agueiras Alvarez de
Freitas
Cybele T.M. Vinagre

Rio de Janeiro
Janeiro de 2021

PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ESPECTRAIS DE k -ÁRVORES

Allana Sthel Santos de Oliveira

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

Examinada por:

Prof^ª. Cybele T.M. Vinagre, D.Sc.

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

Prof^ª. Lilian Markenzon, D.Sc.

Prof^ª. Renata Raposo Del-Vecchio, D.Sc.

Prof. Celso Marques da Silva Júnior, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

JANEIRO DE 2021

Sthel Santos de Oliveira, Allana

PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ESPECTRAIS
DE k -ÁRVORES/Allana Sthel Santos de Oliveira. – Rio
de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2021.

X, 66 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Maria Agueiras Alvarez de Freitas

Cybele T.M. Vinagre

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de
Engenharia de Produção, 2021.

Referências Bibliográficas: p. 63 – 66.

1. k -árvores. 2. Nulidade. 3. Grafo $(k + 1)$ -
linha. I. Agueiras Alvarez de Freitas, Maria *et al.*
II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE,
Programa de Engenharia de Produção. III. Título.

Ao meu parceiro Átila

Agradecimentos

Agradeço imensamente à professora Cybele, que me acompanha desde a graduação sempre com os melhores conselhos e com muito carinho. Estou muito feliz por finalizar mais essa etapa com seu apoio e orientação. Muito obrigada! Agradeço também à professora Maria por todas as contribuições e incentivo para essa conquista tão importante.

Não foi fácil concluir essa etapa mas Átila, você me deu forças quando precisei, seu ombro quando chorei e ajuda quando o cansaço bateu. Muito obrigada por ser meu maior fã e incentivador!

Allícia, você sempre foi exemplo de força e determinação para mim. Sua amizade e irmandade me animaram e sustentaram quando precisei. Agradeço todos os dias pela melhor irmã que poderia ter. Obrigada por ser “my person”.

Agradeço aos meus pais por todo incentivo, dedicação e amor! Sem vocês eu não chegaria até aqui. Amo vocês!

Finalmente, agradeço aos meus amigos por toda torcida e pelos momentos de descontração. Mais um épico para conta!

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

PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ESPECTRAIS DE k -ÁRVORES

Allana Sthel Santos de Oliveira

Janeiro/2021

Orientadores: Maria Agueiras Alvarez de Freitas
Cybele T.M. Vinagre

Programa: Engenharia de Produção

Uma k -árvore é um grafo completo com k vértices ou um grafo que contém um vértice cuja vizinhança induz um grafo completo de ordem k e cuja remoção resulta em uma k -árvore. Neste texto mostramos propriedades e resultados obtidos para esta família de grafos, que generaliza a já amplamente estudada classe das árvores (grafos conexos sem ciclos) para o caso $k = 1$. Nossas principais contribuições são as relacionadas ao estudo da nulidade de grafos $(k + 1)$ -linha de k -árvores. Em nosso trabalho, obtemos uma cota superior para a nulidade dos grafos $(k + 1)$ -linha de uma família específica de k -árvores, generalizando um resultado conhecido sobre a nulidade de grafos linha de árvores. Também apresentamos uma caracterização geral para os grafos $(k + 1)$ -linha de k -árvores. Este estudo originou o artigo [“On $(k+1)$ -line graphs of k -trees and their nullities”, *Linear Algebra and its Applications*, 2020] em coautoria com de Freitas, Vinagre e Markenzon. Outra contribuição desta tese é o cálculo do diâmetro dos grafos P_n^k , que culminou com a obtenção de uma cota superior para o diâmetro de k -árvores em geral.

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

STRUCTURAL AND SPECTRAL PROPERTIES OF k -TREES

Allana Sthel Santos de Oliveira

January/2021

Advisors: Maria Agueiras Alvarez de Freitas

Cybele T.M. Vinagre

Department: Production Engineering

A k -tree is a complete graph with k vertices or a graph that contains a vertex whose neighborhood induces a complete graph of size k and whose removal results in a k -tree. In this text we show properties and results obtained for this family, which generalizes the already widely studied class of trees (connected graphs without cycles) for the case $k = 1$. In our work we obtain an upper bound for the nullity of the $(k + 1)$ -line graphs of a particular family of k -trees, generalizing a known result about the nullity of line graphs of trees. We also present a general characterization for the $(k + 1)$ -line graphs of k -trees. This study originated the article [“On $(k + 1)$ -line graphs of k -trees and their nullities”, *Linear Algebra and its Applications*, 2020] co-authored with de Freitas, Vinagre e Markenzon. Another contribution of this thesis is the calculation of the diameter of P_n^k , which culminated in obtaining an upper bound for the diameter of k -trees in general.

Sumário

Lista de Figuras	ix
1 Introdução	1
2 Preliminares	3
2.1 Teoria Geral de Grafos	3
2.2 Teoria Espectral de Grafos	7
2.3 A classe das k -árvores	11
3 Polinômio Característico de P_n^2	23
4 Sobre a matriz distância de k-árvores	38
5 Sobre grafos $(k + 1)$-linha de k-árvores e suas nulidades	46
6 Conclusões e propostas futuras	60
Referências Bibliográficas	63

Lista de Figuras

2.1	Exemplo de grafo 3-partido.	4
2.2	Grafo G	5
2.3	Um grafo G e seu complementar \overline{G}	5
2.4	Exemplo de árvore.	6
2.5	Caminho P_6	6
2.6	Estrela S_9	6
2.7	Exemplo de grafo cordal.	6
2.8	Exemplo de 3-árvore com 8 vértices.	11
2.9	Remoção sequencial de vértices simpliciais	12
2.10	Uma 4-estrela	13
2.11	Exemplo de 3-caminho com 7 vértices.	14
2.12	2-caminhos com 7 vértices não isomorfos	14
2.13	G , G^2 e G^3	15
2.14	P_8^2 é um 2-caminho.	16
2.15	Grafo G auxiliar para Afirmação 1.	17
2.16	Grafo G auxiliar para Afirmação 2.	18
2.17	Grafo G'	19
2.18	Grafo G^*	20
2.19	Uma 3-árvore com 11 vértices e a 3-estrela $S_{3,8}$	20
2.20	Exemplo de 4-leque com 9 vértices: $K_3 \vee P_6$	21
2.21	$T_{9,5}$	21
3.1	P_7^2	24
3.2	$G_{n,1}$ e $G_{n,2}$	30
3.3	$G'_{n,1}$ e $G'_{n,2}$	30
3.4	Esquema para n par	31
3.5	Esquema para n ímpar	32
3.6	P_{10}^2	33
3.7	Decomposição de P_{10}^2	34
3.8	P_{13}^2	35
3.9	Decomposição de P_{13}^2	36

4.1	Esquema do Caso 1	40
4.2	Esquema do Caso 2	40
4.3	2-árvores com 12 vértices e diâmetros diferentes	42
4.4	2-caminhos com 13 vértices e mesmo diâmetro	43
4.5	3-árvores com 11 vértices cujos determinantes de suas matrizes distância são diferentes	43
4.6	3-caminhos com 11 vértices cujos determinantes de suas matrizes distância são diferentes.	44
4.7	$S_{3,8}$	45
5.1	Grafo G e seu grafo linha $\ell(G)$	46
5.2	Grafo G e seu grafo 3-linha $\ell(G)$	47
5.3	Exemplo de grafo bloco.	47
5.4	Uma árvore T e seu grafo linha $\ell(T)$	48
5.5	Casos 1 e 2 da demonstração do Teorema 5.1.	51
5.6	Árvores $T(\eta', 5)$, para $\eta' \in X = \{2, 4, 6, 8\}$	52
5.7	Árvore $T \in \mathfrak{T}(14, 7)$ tal que $\eta(T) = 8$	52
5.8	Grafos T_1, T_2, T_3, T_4 e T_5 referentes à Proposição 5.12.	53
5.9	Uma 2-árvore e seu grafo 3-linha	53
5.10	$H = \ell(G_1) = \ell_3(G_2) = \ell_4(G_3)$	55
5.11	$H = \ell_3(G_1) = \ell_3(G_2) = \ell_3(G_3)$	56
5.12	2-árvore G e $\eta(\ell_3(G)) = 4$	56
5.13	T_q	56
5.14	3-árvores cujo grafo 4-linha tem nulidade igual a 5.	57

Capítulo 1

Introdução

O estudo da teoria de grafos é de bastante interesse para diversos ramos do conhecimento como física, química, tecnologia computacional, engenharia elétrica e civil, arquitetura, genética, psicologia, sociologia, economia e antropologia, pois grafos modelam e ajudam a construir soluções para vários problemas dessas áreas. A teoria está também fortemente relacionada a vários ramos da matemática, tais como teoria de matrizes, teoria de grupos, análise numérica, probabilidade, topologia e combinatória.

A teoria espectral de grafos é uma linha de investigação que começou no final dos anos 1970, onde se procura determinar propriedades da estrutura de um grafo a partir de matrizes associadas a ele. Ela tem despertado grande interesse não só de matemáticos, mas também de outros profissionais que trabalham com grafos e a pesquisa neste campo tem crescido muito nos últimos anos.

Um grafo bastante conhecido na literatura é a árvore: trata-se de um grafo com estrutura bem simples e que modela diversos problemas. Neste trabalho estudamos k -árvores, que incluem as árvores e generalizam uma das formas de construí-las. A família das k -árvores foi introduzida em [1].

A multiplicidade do zero como autovalor da matriz de adjacência do grafo é chamada de **nulidade** do grafo G , denotada por $\eta(G)$. Este é um parâmetro amplamente estudado devido à sua relevância tanto para a matemática quanto para a química, como podemos consultar no survey [2]. A nulidade das árvores foi estudada em muitos artigos, como, por exemplo, [3], [4] e [5]. Em particular, Fiorini *et al.* provaram em [6] que dentre todas as árvores com n vértices nas quais nenhum vértice tem grau maior que um valor fixo Δ , a nulidade máxima é igual a $n - 2\lceil \frac{n-1}{\Delta} \rceil$. Em nosso trabalho, refinamos esse resultado demonstrando que, para números inteiros $n \geq 4$, $\Delta \geq 2$ e η' , onde $0 \leq \eta' \leq n - 2\lceil \frac{n-1}{\Delta} \rceil$ e η' tem a mesma paridade de n , existe uma árvore com n vértices e grau máximo Δ cuja nulidade é igual a η' .

Investigamos ainda fatos sobre os grafos $(k + 1)$ -linha de k -árvores, inspiradas em resultados conhecidos sobre grafos linha de árvores. De fato, foi provado em [7]

que um grafo é o grafo linha de uma árvore se, e somente se, for um grafo bloco conexo livre de $K_{1,3}$. Nossa contribuição aqui foi caracterizar os grafos que são grafos $(k+1)$ -linha de k -árvores como sendo aqueles que são grafos bloco conexos livres de $K_{1,k+2}$.

Por outro resultado conhecido, de Gutman *et al.* [8], sabe-se que a nulidade do grafo linha de qualquer árvore é no máximo 1. Em mais uma contribuição ao estudo de k -árvores, construímos para cada par de números inteiros $p \geq 2$ e $k \geq 2$, uma k -árvore cujo grafo $(k+1)$ -linha tem nulidade igual a p . Essas k -árvores pertencem à subfamília de k -árvores ditas *simple-clique* ou brevemente, SC k -árvores, aquelas cujos grafos $(k+1)$ -linha são árvores. Por outro lado, como consequência do principal resultado de [6], estabelecemos uma cota superior para a nulidade dos grafos $(k+1)$ -linha de SC k -árvores com n vértices em termos de k e n , generalizando assim o resultado acima mencionado de [8] sobre nulidade de grafos linha de árvores. Além disso, garantimos a existência de SC k -árvores para as quais as nulidades dos respectivos grafos $(k+1)$ -linha atingem todos os valores até a cota estabelecida.

Neste texto, também estudamos a matriz distância de uma k -árvore G , $\mathbf{D}(G)$, e como contribuição, apresentamos uma cota superior para o diâmetro de um grafo genérico desta família.

Na terceira contribuição deste trabalho, aplicamos ainda um resultado da literatura para estudar a ocorrência dos autovalores 0 e 1 no espectro da matriz de adjacência dos grafos P_n^2 , que formam uma subfamília das k -árvores.

Este texto está organizado do seguinte modo. No Capítulo 2 apresentamos conceitos básicos e resultados da teoria de grafos e da teoria espectral de grafos que serão usados no decorrer do texto. Definimos também as k -árvores e algumas de suas subfamílias e apresentamos resultados da literatura relacionados a estes grafos. No Capítulo 3, aplicamos um resultado da literatura para obter informações sobre a ocorrência dos autovalores 0 e 1 no espectro da matriz de adjacência de P_k^2 . No Capítulo 4, estudamos a matriz distância de k -árvores e demonstramos resultados relacionados ao diâmetro destes grafos. No Capítulo 5, apresentamos nosso estudo sobre grafos $(k+1)$ -linha de k -árvores e suas nulidades. Primeiramente apresentamos os conceitos básicos e lembramos alguns resultados conhecidos sobre a nulidade de árvores. Após, provamos que todas as nulidades possíveis abaixo da cota superior de Fiorini *et al.*, em [6], são atingidas. Caracterizamos então os grafos que são grafos $(k+1)$ -linha de k -árvores e, por fim, aplicamos nossos resultados para obter uma cota superior para as nulidades de grafos $(k+1)$ -linha de SC k -árvores. Também mostramos como construir uma SC k -árvore cuja nulidade é um número qualquer p .

Capítulo 2

Preliminares

2.1 Teoria Geral de Grafos

Seja $G(V, E)$ um grafo em que $V = V(G)$ é um conjunto de vértices e $E = E(G)$ é um conjunto de arestas. Denotaremos a adjacência entre dois vértices $u, v \in V$ por $(u, v) \in E$. O **grau de um vértice** v é o número de vértices adjacentes a v , cujo valor é denotado por $d_G(v)$, ou simplesmente $d(v)$ caso não haja ambiguidade. Um vértice v é **universal** (ou **dominante**) se é adjacente a todos os outros vértices do grafo, ou seja, $d(v) = n - 1$, onde n é a **ordem** do grafo, isto é, seu número de vértices. O conjunto dos vértices de G adjacentes a $v \in V$ será denotado por $N(v)$, isto é, $N(v) = \{u \in V; (u, v) \in E\}$.

Neste trabalho, tratamos de grafos sem *laços* (arestas que ligam um vértice a ele mesmo), sem *arestas múltiplas* (isto é, mais de uma aresta ligando dois vértices) e sem orientação (ou seja, $(u, v) \in E$ se e somente se $(v, u) \in E$). São os chamados *grafos simples*, aqui denominados *grafos* por simplicidade. Um grafo com um único vértice e sem arestas é conhecido como **grafo trivial**.

Diremos que $H(V', E')$ é um **subgrafo** de $G(V, E)$, $H \subset G$, quando $V' \subseteq V$ e $E' \subseteq E$. No caso em que $(x, y) \in E'$ se, e somente se, $(x, y) \in E$, diremos que H é **subgrafo induzido** de G , ou ainda G induz H . Neste caso escrevemos $H = G[V']$ ou $H = G[E']$. No caso em que $H = G[V \setminus \{u\}]$ escreveremos simplesmente $G - u$, para $u \in V(G)$. Um grafo é **livre de** $K_{1,n}$ se ele não contém $K_{1,n}$ como subgrafo induzido.

Há grafos que podem ser obtidos a partir de uma nova rotulação dada aos vértices de outro grafo. Formalmente, dizemos que os grafos $G_1 = G_1(V_1, E_1)$ e $G_2 = G_2(V_2, E_2)$ são **isomorfos**, denotado por $G_1 \simeq G_2$, quando existe uma função $f : V_1 \rightarrow V_2$ biunívoca de modo que as adjacências sejam preservadas por f , ou seja, dois vértices u, v são adjacentes em G_1 se e somente se $f(u)$ e $f(v)$ são adjacentes em G_2 .

Um **grafo completo** é aquele no qual quaisquer dois vértices distintos são adjacentes. Para cada $n \geq 1$, o grafo completo com n vértices é denotado por K_n . Uma **clique** em um grafo $G(V, E)$ é um subconjunto $X \subset V$ tal que cada dois vértices de X são conectados por uma aresta. Em contrapartida, um conjunto X de vértices é dito **independente** ou **estável** se não há aresta entre qualquer par de vértices de X . Uma k -clique é uma clique com k vértices.

Uma **cadeia** em um grafo $G(V, E)$ é uma sequência finita v_1, v_2, \dots, v_k de vértices tal que $(v_i, v_{i+1}) \in E$ para $1 \leq i \leq k - 1$. Dizemos que v_1, v_2, \dots, v_k é uma **cadeia fechada** (respectivamente, **cadeia aberta**) quando $v_1 = v_k$ (respectivamente $v_1 \neq v_k$). Um **caminho** em um grafo é uma cadeia em que todos os vértices são distintos. Um **ciclo** com n vértices em um grafo é um caminho v_1, v_2, \dots, v_n ao qual se acrescenta uma aresta entre v_1 e v_n . O **comprimento de um caminho ou de um ciclo** em um grafo é o número de arestas que ocorrem em cada um. O grafo que é um ciclo com n vértices será denotado C_n .

Diz-se que G é um **grafo conexo** quando existe um caminho ligando cada par de seus vértices. Caso contrário, G é denominado **grafo desconexo**. Uma **componente conexa** de G é um subgrafo maximal conexo. Um grafo G com n vértices é dito **k -conexo** se $n \geq k$ e G permanece conexo sempre que são removidos $k - 1$ vértices. Um **vértice de corte** (ou **vértice de articulação**) é um vértice cuja remoção aumenta o número de componentes conexas do grafo.

$G(V, E)$ é dito ser um grafo **k -partido** quando existe uma partição do seu conjunto de vértices em k subconjuntos não vazios de modo que não haja vértices adjacentes em um mesmo subconjunto da partição. Quando $k = 2$, temos um **grafo bipartido**. Quando $E = V_1 \cup V_2$ com $|V_1| = r$, $|V_2| = s$ e todo vértice de V_1 é adjacente a todo vértice de V_2 , dizemos que $G = (V, E)$ é um **grafo bipartido completo** e escrevemos $G = K_{r,s}$.

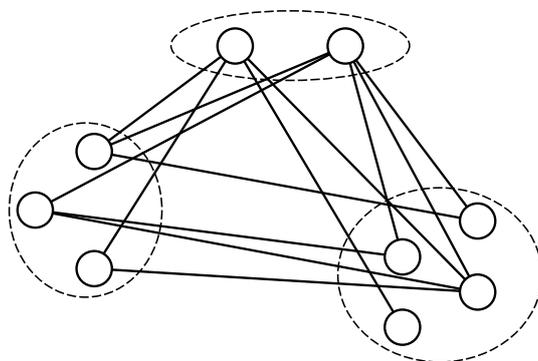


Figura 2.1: Exemplo de grafo 3-partido.

Um grafo $G(V, E)$ é dito **k -colorível** quando existe uma função $f : V \rightarrow \{1, 2, \dots, k\}$ tal que $f(u) \neq f(v)$ se $(u, v) \in E$. O menor número k tal que G é

k -colorível é dito o **número cromático** de G e denotado por $\chi(G)$.

O **join** dos grafos $G_1 = (V_1, E_1)$ e $G_2 = (V_2, E_2)$ é o grafo $G_1 \vee G_2 = (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2 \cup \{(u, v) \mid u \in V_1 \text{ e } v \in V_2\})$.

Seja G um grafo conexo. Se u e v são vértices de G , chamamos **distância** de u a v e denotamos por $d(u, v)$, ao comprimento de um menor caminho que liga u a v . O máximo das distâncias entre dois vértices quaisquer de G é chamado **diâmetro** de G e denotado por $\text{diam}(G)$.

Exemplo 2.1. Na Figura 2.2 temos um grafo G com as seguintes distâncias, por exemplo, $d(1, 3) = 2$, $d(2, 4) = 3$ e $d(3, 4) = 4$. O diâmetro deste grafo é $\text{diam}(G) = 4$.

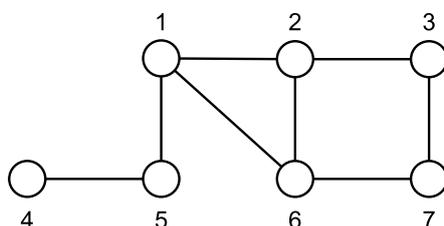


Figura 2.2: Grafo G .

O **grafo complementar** de $G = (V, E)$ é o grafo $\bar{G} = (\bar{V}, \bar{E})$ obtido de $G = (V, E)$ de tal forma que $\bar{V} = V$ e $(v_i, v_j) \in \bar{E}$ se e somente se $(v_i, v_j) \notin E$. Veja a Figura 2.3.

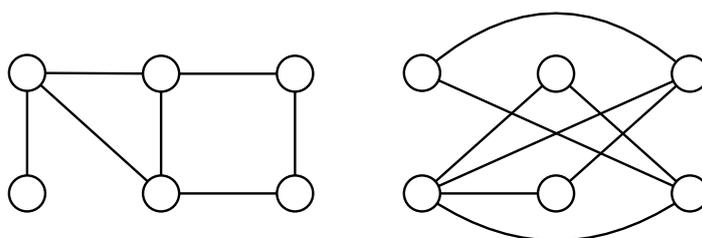


Figura 2.3: Um grafo G e seu complementar \bar{G} .

Árvores são grafos conexos e sem ciclos. Apesar da simplicidade de sua definição, as árvores possuem uma estrutura rica e fornecem uma variedade de aplicações úteis, tão simples quanto uma árvore genealógica, tão complexas quanto as árvores que modelam as estruturas de dados da ciência da computação.

Os vértices de grau um são denominados **folhas** da árvore. A árvore da figura acima tem 8 folhas. Uma árvore com exatamente 2 folhas é um **grafo caminho**, denotado por P_n , onde n é o número de vértices.

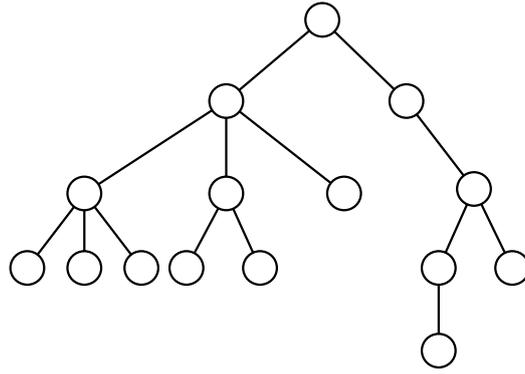


Figura 2.4: Exemplo de árvore.



Figura 2.5: Caminho P_6

A **estrela** com n vértices S_n é o grafo bipartido completo $K_{1,n-1}$, ou seja, uma árvore onde um vértice é universal e os demais são folhas. Utilizaremos ambas as notações no texto.

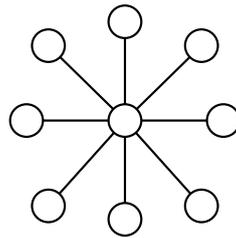


Figura 2.6: Estrela S_9

Uma **árvore geradora** de um grafo G é um subgrafo de G que é uma árvore com mesmo número de vértices do grafo.

Outra classe bastante estudada é a dos **grafos cordais**, que são aqueles em que cada ciclo de quatro ou mais vértices tem uma **corda**, ou seja, uma aresta entre dois vértices que não são adjacentes no ciclo.

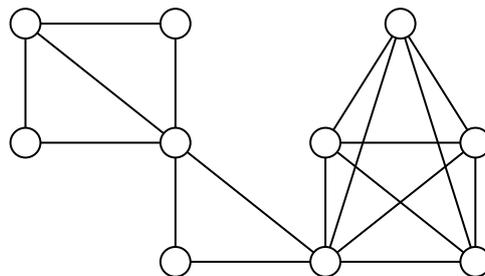


Figura 2.7: Exemplo de grafo cordal.

2.2 Teoria Espectral de Grafos

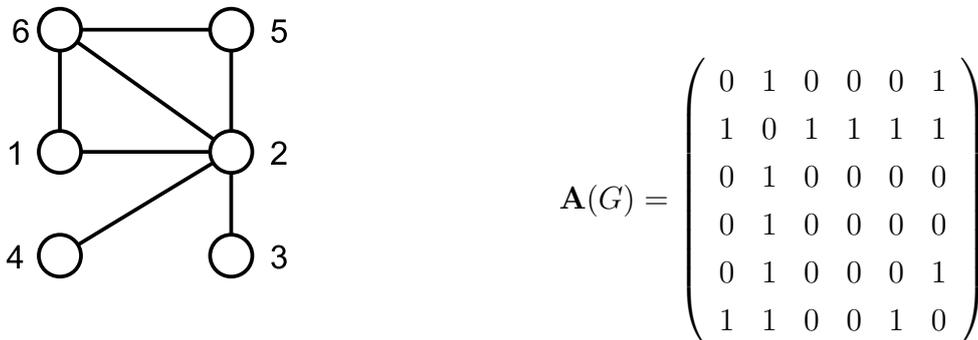
A área da Matemática que estuda como o espectro de uma matriz associada a um grafo se relaciona com a estrutura do grafo é chamada *Teoria Espectral de Grafos*. Há várias matrizes que podem ser definidas a partir de um grafo. Inicialmente apresentaremos duas delas, mais essenciais para o presente estudo, a matriz de adjacência e a matriz distância.

A matriz de adjacência é construída naturalmente a partir das relações de adjacência entre os vértices do grafo. A seguir apresentamos a definição e conceitos ligados a essa matriz, que serão de grande importância principalmente nos Capítulos 3 e 5 desta tese.

Definição 2.1. Dado um grafo $G = (V, E)$ com $V = \{v_1, \dots, v_n\}$, a matriz de adjacência $\mathbf{A}(G)$ é aquela cujas entradas são dadas por:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } v_i \text{ é adjacente a } v_j; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Exemplo 2.2. A seguir temos um grafo G e a sua matriz de adjacência.



A partir da definição de matriz de adjacência de um grafo podemos observar que:

- Como em um grafo o vértice u é adjacente ao vértice v se, e somente se, v é adjacente a u , a matriz de adjacência de um grafo é simétrica e, portanto, todos os seus autovalores são reais.
- Como um vértice nunca é adjacente a ele mesmo então a diagonal da matriz de adjacência é composta por zeros.
- Cada vértice do grafo é representado por uma linha (e coluna) da matriz, cujas entradas não nulas indicam os vértices adjacentes a ele.
- A soma dos elementos de cada linha (respectivamente, coluna) da matriz de adjacência resulta no número de arestas incidentes no vértice correspondente. Este número, naturalmente, é o grau do vértice.

Fixaremos a notação para o determinante de uma matriz quadrada \mathbf{M} por $|\mathbf{M}|$.

Definição 2.2. Chama-se **polinômio característico** de um grafo $G = (V, E)$ e denota-se $p_G(\lambda)$, ao polinômio característico da matriz de adjacência $\mathbf{A}(G)$, isto é, $p_G(\lambda) = |\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}(G)|$.

Se G é um grafo com n vértices e existem $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}_{\mathbb{R}^n}$, e $\lambda \in \mathbb{R}$ tais que $\mathbf{A}(G)\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$, diz-se que λ é um **autovalor** do grafo G e \mathbf{v} um **autovetor** de G associado a λ .

O **espectro** do grafo informa seus autovalores com suas respectivas multiplicidades e neste texto usaremos a seguinte notação:

$$\sigma_{\mathbf{A}}(G) = \left[\lambda_1^{(a_1)}; \lambda_2^{(a_2)}; \dots; \lambda_r^{(a_r)} \right],$$

onde o expoente a_i indica a multiplicidade do autovalor λ_i , $1 \leq i \leq r$.

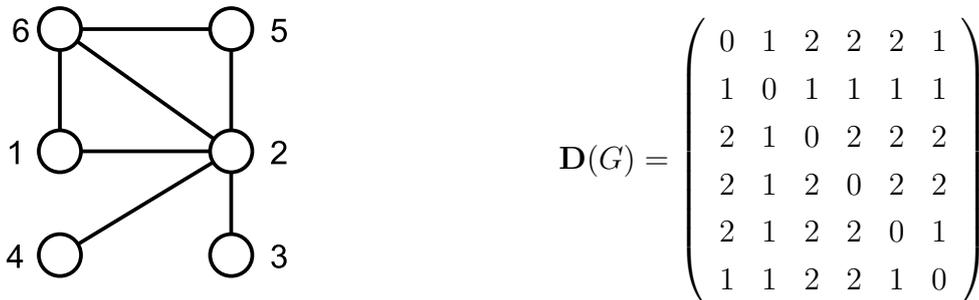
Um resultado espectral sobre grafos bipartidos é dado a seguir. Como árvores são grafos bipartidos, esta proposição é válida para esta classe de grafos.

Proposição 2.1. Seja G um grafo bipartido. Então λ é autovalor de G se e somente se $-\lambda$ também é. Além disso, λ e $-\lambda$ têm a mesma multiplicidade.

Definiremos agora a matriz distância de um grafo. Estudaremos aspectos relacionados a essa matriz e k -árvores no Capítulo 4.

Definição 2.3. A **matriz distância** de um grafo conexo G , denotada por $\mathbf{D}(G) = [d_{i,j}]$, é a matriz quadrada de ordem n , tal que $d_{i,j} = d(v_i, v_j)$.

A seguir temos um grafo G e a sua matriz distância, $\mathbf{D}(G)$.



$$\mathbf{D}(G) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 2 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 0 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Definição 2.4. Chama-se **polinômio característico distância** de um grafo $G = (V, E)$ e denota-se $p_G^{\mathbf{D}}(\mu)$, ao polinômio característico da matriz distância $\mathbf{D}(G)$.

Os autovalores de $\mathbf{D}(G)$ dão ditos **autovalores distância** ou **D-autovalores** de G .

Podemos observar que:

- Como trabalhamos com grafos não orientados, então para todo par u, v de vértices vale que $d(u, v) = d(v, u)$ e, portanto, a matriz $\mathbf{D}(G)$ é simétrica com todos os autovalores reais.
- Como $d(v, v) = 0$, a diagonal da matriz $\mathbf{D}(G)$ é composta por zeros.
- A maior entrada da matriz distância de um grafo é o seu diâmetro.

Atualmente, ainda sabe-se pouco sobre o polinômio característico da matriz distância de árvores, porém entre os primeiros resultados associados a esta matriz está o admirável teorema a seguir, que fornece a expressão do determinante da matriz distância de uma árvore em função apenas do número de vértices n . Trata-se do seguinte resultado cuja prova está em [9].

Teorema 2.1. [9] Se T é uma árvore com $n \geq 2$ vértices então o determinante de sua matriz distância é

$$|\mathbf{D}(T)| = (-1)^{n-1}(n-1)2^{n-2}.$$

Definiremos a seguir as matrizes laplaciana e laplaciana sem sinal de um grafo, completando a apresentação das principais matrizes estudadas em Teoria Espectral de Grafos.

Definição 2.5. Seja $\mathbf{Deg}(G)$ a matriz diagonal dos graus dos vértices de um grafo G (ou seja, a matriz $\mathbf{Deg}(G)$ tal que $\mathbf{Deg}(G)_{ii} = d(v_i)$).

A matriz $\mathbf{L}(G) = \mathbf{Deg}(G) - \mathbf{A}(G)$ é chamada **matriz laplaciana** de G . Já a **matriz laplaciana sem sinal** de G é definida como $\mathbf{Q}(G) = \mathbf{Deg}(G) + \mathbf{A}(G)$.

Seja $\mathbf{M}(G)$ uma matriz quadrada associada a um grafo G . Dizemos que o **raio M-espectral** de G é o número real não negativo $\max_i |\lambda_i|$, onde $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ são os autovalores de $\mathbf{M}(G)$. Dizemos que uma matriz \mathbf{M} é **irreduzível** quando não é possível transformá-la em uma matriz triangular superior por meio de permutações simultâneas de linhas/colunas. Uma matriz é **não negativa** quando todos os seus elementos são maiores ou iguais a zero. A seguir temos um resultado bastante conhecido da literatura, cuja demonstração pode ser encontrada em [10] e [11].

Teorema 2.2. [10](Teorema de Perron-Frobenius) Seja \mathbf{M} matriz não negativa irreduzível e com autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$. Então,

1. $\lambda_1 > 0$ e existe um autovetor associado a este autovalor cujas coordenadas são todas positivas;
2. $\lambda_1 > \lambda_2$;

3. $|\lambda_i| \leq \lambda_1$, para todo $i \in \{1, 2, \dots, n\}$.

Dado um grafo G conexo, temos que a matriz $\mathbf{Q}(G)$ é irredutível e pelo Teorema de Perron-Frobenius 2.2, o raio \mathbf{Q} -espectral de G , $q(G)$, tem multiplicidade 1 e seu autovetor, que chamaremos *vetor de Perron* de \mathbf{Q} , possui todas as entradas positivas. O seguinte resultado, demonstrado em [12], faz associação entre o raio \mathbf{Q} -espectral e operações em arestas no grafo e será usado mais adiante.

Teorema 2.3. [12] Seja G um grafo conexo. Sejam u, v dois vértices de G com graus $d_u(G)$ e $d_v(G)$. Suponha que v_1, v_2, \dots, v_s ($1 \leq s \leq d_G(v)$) são alguns vértices de $N_G(v) \setminus N_G(u)$ e $(x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ é o vetor de Perron de \mathbf{Q} , onde x_i corresponde ao vértice v_i , $1 \leq i \leq n$. Seja G^* o grafo obtido de G ao deletar as arestas (v, v_i) e adicionar as arestas (u, v_i) , $1 \leq i \leq s$. Se $x_u \geq x_v$, então $q(G) < q(G^*)$, onde $q(H)$ indica o raio \mathbf{Q} -espectral do grafo H .

Para grafos bipartidos existe uma estreita relação entre $\mathbf{Q}(G)$ e $\mathbf{L}(G)$, como descrito no teorema a seguir.

Teorema 2.4. [13] Para grafos bipartidos, o espectro da matriz laplaciana sem sinal é igual ao espectro da laplaciana.

Nos artigos [14] e [15], são provados dois importantes resultados espectrais para árvores. É mostrado que dentre todas as árvores com n vértices, a que possui maior autovalor da matriz laplaciana é a estrela S_n , e a que possui o menor, é o caminho P_n . Pelo Teorema 2.4, os teoremas a seguir também valem para a matriz laplaciana sem sinal \mathbf{Q} .

Teorema 2.5. [14] Dentre todas as árvores com n vértices, o caminho P_n tem o menor raio L -espectral.

Teorema 2.6. [15] Dentre todas as árvores com n vértices, a estrela S_n tem o maior raio L -espectral.

No decorrer do texto usaremos notações específicas para os autovalores das principais matrizes associadas a grafos, já definidas anteriormente.

Autovalor	Matriz associada a G	Espectro
λ_i	$\mathbf{A}(G)$	$\sigma_{\mathbf{A}}(G)$
μ_i	$\mathbf{L}(G)$	$\sigma_{\mathbf{L}}(G)$
q_i	$\mathbf{Q}(G)$	$\sigma_{\mathbf{Q}}(G)$
∂_i	$\mathbf{D}(G)$	$\sigma_{\mathbf{D}}(G)$

Na próxima seção estudaremos as k -árvores, uma classe que contém a família das árvores.

2.3 A classe das k -árvores

A família das k -árvores é uma importante subfamília dos grafos cordais. As k -árvores foram definidas em 1968 por Beineke e Pippert em [1] e são encontrados na literatura diversos trabalhos envolvendo esta classe de grafos. Na área de complexidade computacional, podemos citar [16], [17] e [18]. Em particular, este último aborda a complexidade do reconhecimento de se um grafo é subgrafo de uma k -árvore. Na área de teoria de grafos, encontramos [19], [20] e [21] que abordam problemas de hamiltonicidade na classe, enquanto Markenzon et al. estudam algumas subfamílias de k -árvores em [22]. Em [23], os autores mostram que o determinante da matriz distância dos grafos 2-caminho (uma subclasse das 2-árvores) independe das suas estruturas, isto é, todos os 2-caminhos com n vértices tem o mesmo valor de determinante de matriz distância. Por fim, na área de teoria espectral de grafos, artigos como [24], [25], [26], [27], [28] e [29], abordam a classe das k -árvores ou algumas das suas subclasses sob o ponto de vista espectral.

Definição 2.6. *Uma k -árvore, sendo $k > 0$, é definida da seguinte maneira:*

- *Um grafo completo com k vértices é uma k -árvore;*
- *Se $G = (V, E)$ é uma k -árvore, $C \subseteq V$ é uma k -clique de G e $v \notin V$, o grafo $G' = (V \cup \{v\}, E \cup \{(v, w) | w \in C\})$ é uma k -árvore;*
- *Nenhum outro grafo é k -árvore.*

Exemplo 2.3.

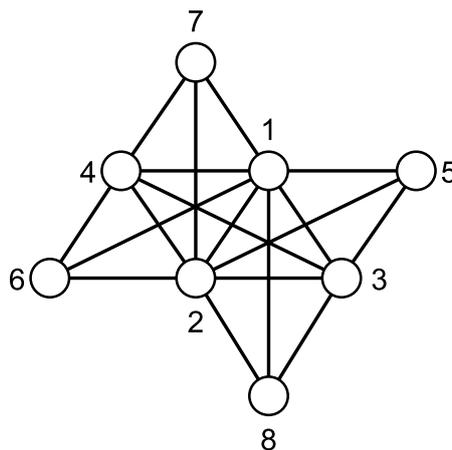


Figura 2.8: Exemplo de 3-árvore com 8 vértices.

Definição 2.7. *Os primeiros k -vértices de uma k -árvores são chamados **clique-base**. A k -clique C escolhida ao adicionar o vértice v é chamada **joint-clique** de v e*

denotada por $JC(v)$. Dizemos que $v \in V(G)$ é um **vértice simplicial** quando seus vizinhos formam uma clique em G . Denotaremos o conjunto de vértices simpliciais de G como $S_1(G)$.

Exemplo 2.4. Considere G a 3-árvore da Figura 2.8. Temos que $JC(6) = \{1, 2, 4\}$ e $JC(4) = \{1, 2, 3\}$, por exemplo. $S_1(G) = \{5, 6, 7, 8\}$.

O conceito de rotulação recursiva, introduzido por Proskurowski em [30], pode ser aplicado a k -árvores como podemos ver na seguinte definição.

Definição 2.8. [22] Uma k -árvore G com n vértices, $n \geq k$ e rotulação $1, 2, \dots, n$ está **rotulada recursivamente** se os vértices $1, 2, \dots, k$ formam uma k -clique em G e todo vértice com rotulação j , $j > k$, é adjacente a exatamente k vértices rotulados com valores menores do que j .

Exemplo 2.5. A k -árvore da Figura 2.8 está rotulada recursivamente.

Pela definição, toda k -árvore G com n vértices pode ser reduzida ao grafo K_k , pelo processo de remoções sucessivas de vértices simpliciais de G , como exemplificado na figura 2.9.

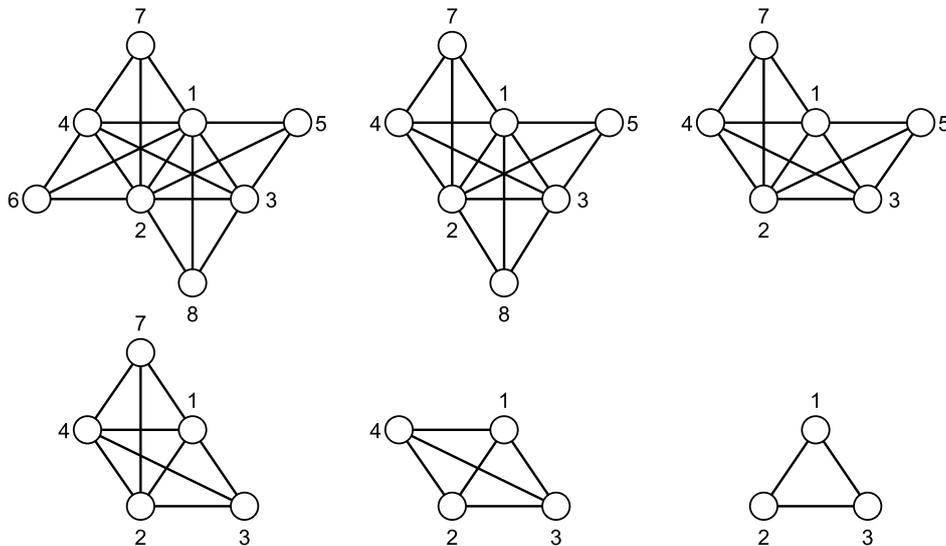


Figura 2.9: Remoção sequencial de vértices simpliciais

Podemos citar alguns resultados e artigos da literatura sobre a classe das k -árvores. Em [31], o seguinte resultado de caracterização de k -árvores usando grafos proibidos é apresentado.

Teorema 2.7. [31] Seja G um grafo de ordem pelo menos $k + 1$. Então G é uma k -árvore se e somente se G é k -conexo e não possui subgrafos induzidos isomorfos a C_n , para $n \geq 4$, ou a K_{k+2} .

Seja $\omega(G)$ o número de componentes conexas de G . Um grafo é *t-resistente* (*t-tough*) se $|S| \geq t\omega(G - S)$ para todo subconjunto S de $V(G)$ com $\omega(G - S) > 1$. A *resistência* (toughness) de G , denotada por $\tau(G)$ é o valor máximo de t para o qual G é *t-resistente* (tomando $\tau(K_n) = \infty$ para todo $n \geq 1$).

Em [20], Broersma et al. caracterizam, para $k \geq 2$, as k -árvores *hamiltonianas*, isto é, aquelas que contém um ciclo passando por todos os seus vértices, a partir do conceito de resistência.

Teorema 2.8. [20] Seja $G \neq K_2$ uma k -árvore. Então G é hamiltoniano se e somente se G possui uma 2-árvore geradora 1-resistente.

Teorema 2.9. [20] Se $G \neq K_2$ é uma k -árvore $(\frac{k+1}{3})$ -resistente ($k \geq 2$), então G é hamiltoniano.

Veremos agora duas importantes subfamílias de k -árvores que serão estudadas nos próximos capítulos.

Definição 2.9. Quando todos os vértices de uma k -árvore possuem a mesma joint-clique, ela é dita uma *k-estrela*. Denotaremos a k -estrela com n vértices por $S_{k,n-k}$.

Note que k -estrelas possuem exatamente $n - k$ vértices simpliciais.

Exemplo 2.6. O grafo abaixo é uma 4-estrela com 6 vértices simpliciais.

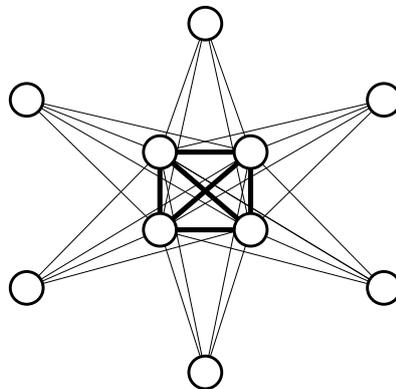


Figura 2.10: Uma 4-estrela

Definição 2.10. [22] Um **k-caminho**, sendo $k > 0$, é definido como a seguir:

- Um grafo completo com k vértices é um k -caminho;
- Se $G = (V, E)$ é um k -caminho, $C \subseteq V$ é uma k -clique de G contendo pelo menos um vértice simplicial e $v \notin V$, o grafo $G' = (V \cup \{v\}, E \cup \{(v, w) | w \in C\})$ é um k -caminho;
- Nenhum outro grafo é k -caminho.

Como cada vértice acrescentado deve ser adjacente a uma clique que contenha algum vértice simplicial, o seguinte resultado é natural.

Teorema 2.10. [22] Uma k -árvore G é um k -caminho se e somente se possui exatamente 2 vértices simpliciais.

Exemplo 2.7. A seguir temos um exemplo de um 3-caminho com 7 vértices, cujos dois únicos vértices simpliciais são 6 e 7.

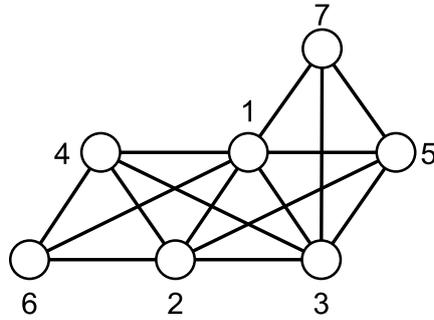


Figura 2.11: Exemplo de 3-caminho com 7 vértices.

As definições das classes acima sugerem uma forte relação entre as folhas de uma árvore e os vértices simpliciais de uma k -árvore. A estrela é a árvore com maior número de folhas, que é $n - 1$, enquanto k -estrelas possuem o maior número de vértices simpliciais, $n - k$, dentre as k -árvores. Sabemos ainda que um grafo caminho é uma árvore com o menor número de folhas, isto é, exatamente duas, enquanto o resultado acima diz que um k -caminho é uma k -árvore com exatamente dois vértices simpliciais, também o menor número de vértices simpliciais possível em k -árvores. Porém vale observar que para cada n existe um único caminho com n vértices, o que não acontece com k -caminhos.

Exemplo 2.8. Na Figura 2.12 exibimos todos os 2-caminhos não isomorfos com 7 vértices. Temos que seus conjuntos de autovalores são diferentes. De fato,

$$\sigma_{\mathbf{A}}(G_1) = [-1, 857; -1, 773; -1; -0, 558; 0, 201; 1, 593; 3, 394],$$

$$\sigma_{\mathbf{A}}(G_2) = [-2; -1, 807; -1, 414; -0, 713; 0; 0, 845; 1, 414; 3, 676] \text{ e}$$

$\sigma_{\mathbf{A}}(G_3) = [-1, 877; -1, 732; -1; -0, 476; 0; 1, 732; 3, 354]$, onde os valores decimais são todos aproximados.

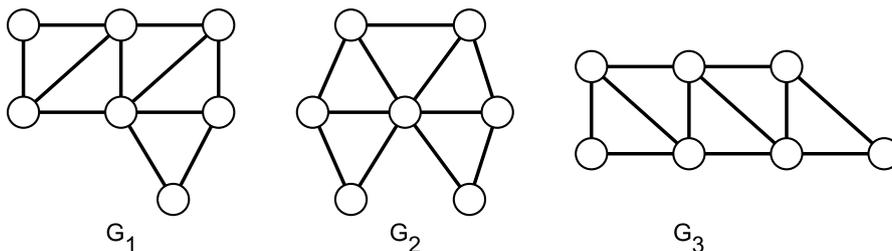


Figura 2.12: 2-caminhos com 7 vértices não isomorfos

Definição 2.11. [32] Dado um grafo G e um inteiro positivo d , a d -ésima potência do grafo $G = (V, E)$ é o grafo $G^d = (V, E')$ tal que dois vértices são adjacentes em G^d se e somente se eles têm distância no máximo d em G .

Exemplo 2.9. Na Figura 2.13, temos um grafo G e suas segunda e terceira potências.

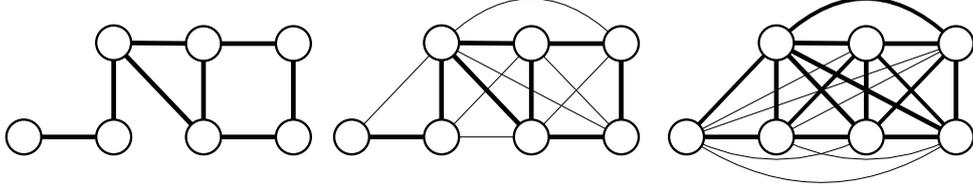


Figura 2.13: G , G^2 e G^3 .

Proposição 2.2. [22] Para qualquer inteiro positivo d , $d < n$, P_n^d é um grafo d -caminho.

Demonstração. Fixemos um inteiro $n \geq 3$. Se $d = n - 1$ então P_n^d é grafo completo, donde por definição, é um grafo $(n - 1)$ -caminho.

Para $d < n - 1$ vamos mostrar o resultado por indução sobre d .

Se $d = 1$, temos que $P_n^d = P_n$ que é um grafo 1-caminho. Considere $d > 1$ e suponha que P_n^{d-1} é um grafo $(d - 1)$ -caminho.

Sem perda de generalidade, considere uma rotulação recursiva de $G = P_n$ tal que l_1 é um vértice simplicial de G (ou seja, l_1 é um dos extremos de G). Pela definição 2.11, $P_n^{d-1} \subset P_n^d$. A construção de P_n^d adiciona a P_n^{d-1} todas as arestas (l_i, l_j) tais que $j - i = d$, para $i = 1, \dots, n - d$. Então $N(l_{d+1})$ em P_n^d conterà todos os vértices l_i tais que $i \leq d$. Note que tais vértices, que denotaremos por $N^*(l_{d+1})$ formam uma clique pois eles têm distância no máximo $d - 1$, ou seja, no grafo P_n^{d-1} já existiam as adjacências entre todos. Assim, $N^*(l_{d+1}) \cup \{l_{d+1}\}$ é uma $(d + 1)$ -clique. Percorrendo a rotulação recursiva de G , cada aresta adicionada estabelece uma nova $(d + 1)$ -clique criando uma d -árvore. Temos que $N^*(l_{d+1}) = \{l_1, l_2, \dots, l_{d+1}\}$ é a clique-base desta d -árvore.

A clique-base de uma k -árvore tem no máximo um vértice simplicial. Temos que l_1 é vértice simplicial de P_n^d , pois $N(l_1) = \{l_2, \dots, l_{d+1}\}$ que é uma d -clique.

Todos os vértices l_i , $i > d + 1$, de P_n^d tiveram $|N(l_i)|$ acrescidos de pelo menos um vértice, o que significa que os vértices l_i , $i > d + 1$, não podem ser simpliciais (pois $N(l_{i-1})$ não era uma clique em P_n^{d-1}).

Logo, os vértices simpliciais de P_n^{d-1} permanecem sendo os dois únicos vértices simpliciais de P_n^d e pelo Teorema 2.10, P_n^d é um grafo d -caminho. □

No decorrer do texto usaremos a rotulação natural do caminho P_n também para a sua potência k , P_n^k . Deste modo, os extremos de P_n serão rotulados 1 e n e estes serão os vértices simpliciais de P_n^k . Assim, tomando dois vértices i, j adjacentes de P_n^k , valerá que $|i - j| < k$.

Exemplo 2.10. *Abaixo temos o 2-caminho P_8^2 com a rotulação descrita anteriormente.*

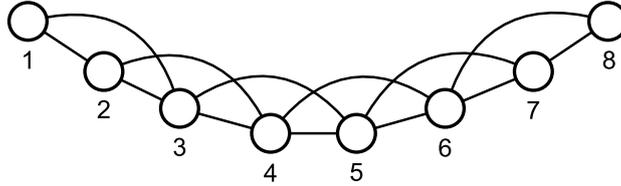


Figura 2.14: P_8^2 é um 2-caminho.

O **número de independência** de G , denotado por $\alpha(G)$, é a cardinalidade de um conjunto independente máximo. Em [33], os autores calculam o número de independência dos k -caminhos P_n^k e da k -estrela $S_{k,n-k}$, além de exibir uma fórmula para o número de arestas de uma k -árvore.

Teorema 2.11. [33]

- O número de arestas de uma k -árvore G com n vértices é dado por $m = kn - \frac{1}{2}k(k+1) = \frac{2nk - k^2 - k}{2}$.
- Para uma potência de caminho P_n^k com n vértices, temos que $\alpha(P_n^k) = \lfloor \frac{n+k}{k+1} \rfloor$.
- Para uma k -estrela $S_{k,n-k}$ com n vértices, temos que $\alpha(S_{k,n-k}) = n - k$.

Vamos destacar agora alguns resultados espectrais de k -árvores encontrados na literatura. Os primeiros estão relacionados à matriz laplaciana sem sinal, \mathbf{Q} . As notações a seguir, introduzidas em [24], serão necessárias para a demonstração do próximo resultado.

Seja G uma k -árvore com n vértices. Dada uma k -clique $\{v_1, v_2, \dots, v_k\}$ de G , se existe $w \in V(G)$ tal que $\{v_1, v_2, \dots, v_k, w\}$ é uma $(k+1)$ -clique e $d_G(w) = k$, então dizemos que $\{v_1, v_2, \dots, v_k, w\}$ tem a propriedade $P_G(v_1, v_2, \dots, v_k)$. Seja $l_G(v_1, v_2, \dots, v_k)$ o número de $(k+1)$ -cliques que têm a propriedade $P_G(v_1, v_2, \dots, v_k)$ e defina

$$l(G) := \max_{\{v_1, \dots, v_k\} \subseteq V(G)} \{l_G(v_1, v_2, \dots, v_k); \{v_1, v_2, \dots, v_k\} \text{ é uma } k\text{-clique de } G.\}$$

Claramente, $l(G) = n - k$ se e somente se G é isomorfo a $S_{k,n-k}$.

O Lema 2.1 será essencial para a demonstração do Teorema 2.12 a seguir. Na demonstração do lema, o Teorema 2.3 se faz extremamente importante.

Lema 2.1. [24] Seja G uma k -árvore com $n \geq k + 1$ vértices e não isomorfa à k -estrela $S_{k,n-k}$. Então existe uma k -árvore G^* com n vértices tal que $q_1(G) < q_1(G^*)$ com $|S_1(G^*)| = |S_1(G)| + 1$.

Demonstração. Como G é não isomorfo a $S_{k,n-k}$ temos que $|S_1(G)| < n - k$, donde $S_1(G - S_1(G)) \neq \emptyset$. E ainda, $G - S_1(G)$ é uma k -árvore tal que $|V(G - S_1(G))| \geq k + 1$, pois caso contrário teríamos

$$\begin{aligned} |V(G - S_1(G))| < k + 1 &\Rightarrow |V(G)| - |S_1(G)| < k + 1 \Rightarrow n - |S_1(G)| < k + 1 \Rightarrow \\ &\Rightarrow |S_1(G)| > n - k - 1 \Rightarrow |S_1(G)| > n - k, \end{aligned}$$

o que é absurdo.

Seja $u \in S_1(G - S_1(G))$ com vizinhança, digamos, $N_{G - S_1(G)}(u) = \{v_1, v_2, \dots, v_k\}$ e suponha que $N_G(u) \cap S_1(G) = \{w_1, w_2, \dots, w_s\}$. Então pela definição de k -árvore temos que $d_G(w_j) = k$ e que $N_G(w_j) \subseteq \{v_1, v_2, \dots, v_k, u\}$, para $1 \leq j \leq s$.

Consideraremos ainda $(x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ o vetor de Perron de $\mathbf{Q}(G)$.

O objetivo dessa demonstração é obter a partir da k -árvore G uma nova k -árvore com mesmo número de vértices e um vértice simplicial a mais que G . Para isso, precisaremos das duas afirmações a seguir, que serão demonstradas mais adiante.

Afirmção 1: Se G contém dois vértices w_i e w_j em $\{w_1, w_2, \dots, w_s\}$ satisfazendo $N_G(w_i) \neq N_G(w_j)$, então existe uma k -árvore G' com n vértices tal que $q_1(G) < q_1(G')$ e $N_{G'}(w_i) = N_{G'}(w_j)$ com $|S_1(G')| = |S_1(G)|$ ou $|S_1(G)| + 1$.

O grafo da Figura 2.15 é uma 3-árvore que satisfaz as condições da Afirmção 1 e auxiliará na visualização da demonstração.

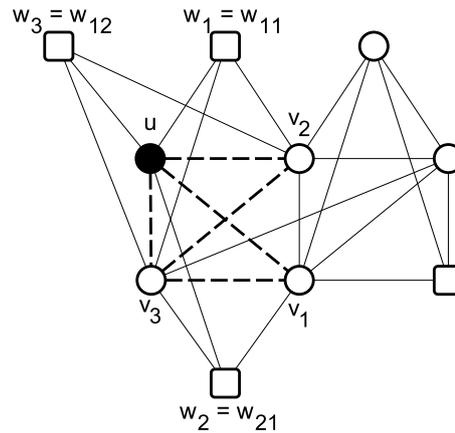


Figura 2.15: Grafo G auxiliar para Afirmção 1.

Afirmção 2: Se $N_G(w_1) = N_G(w_2) = \dots = N_G(w_s)$, então existe uma k -árvore G^* com n vértices tal que $q_1(G) < q_1(G^*)$ e $|S_1(G^*)| = |S_1(G)| + 1$.

Na Figura 2.16 temos uma 3-árvore que satisfaz as condições da Afirmção 2.

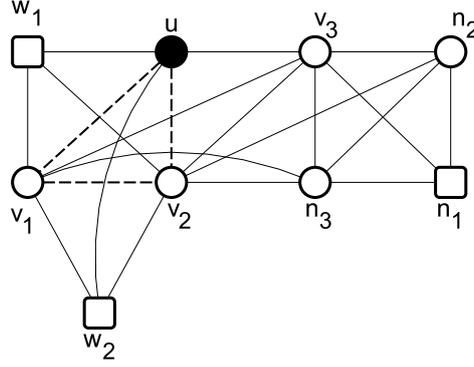


Figura 2.16: Grafo G auxiliar para Afirmação 2.

Temos que se $N_G(w_1) = N_G(w_2) = \dots = N_G(w_s)$, o resultado vale pela Afirmação 2. Caso contrário, usando repetidamente a Afirmação 1 (no máximo $(s - 1)$ vezes), obtemos uma k -árvore G'' com n vértices tal que $q_1(G) < q_1(G'')$ satisfazendo um dos seguintes itens:

1. $|S_1(G'')| = |S_1(G)| + 1$
2. $|S_1(G'')| = |S_1(G)|$ e $N_{G''}(w_1) = N_{G''}(w_2) = \dots = N_{G''}(w_s)$.

Se vale 1., então claramente o lema está provado. Se vale 2., combinando com a Afirmação 2, podemos obter uma k -árvore G^* com n vértices tal que $q_1(G'') < q_1(G^*)$ e $|S_1(G^*)| = |S_1(G'')| + 1 = |S_1(G)| + 1$, como desejado. Assim, o lema ficará provado. Vamos então demonstrar as afirmações acima.

Demonstração da Afirmação 1: Sem perda de generalidade, considere que $N_G(w_i) = \{v_1, \dots, v_k, u\} \setminus \{v_i\}$, $N_G(w_j) = \{v_1, \dots, v_k, u\} \setminus \{v_j\}$ e

$$l_G(v_1, \dots, v_{i-1}, v_{i+1}, \dots, v_k, u) = a, \quad l_G(v_1, \dots, v_{j-1}, v_{j+1}, \dots, v_k, u) = b,$$

onde $v_i \neq v_j$. Claramente, $1 \leq a \leq s$, $1 \leq b \leq s$.

Sejam $\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_a$ (respectivamente $\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_b$) as $(k + 1)$ -cliques com propriedade $P_G(v_1, \dots, v_{i-1}, v_{i+1}, \dots, v_k, u)$ (respectivamente $P_G(v_1, \dots, v_{j-1}, v_{j+1}, \dots, v_k, u)$) e $w_{i_1}(= w_i), w_{i_2}, \dots, w_{i_a}$ (respectivamente $w_{j_1}(= w_j), w_{j_2}, \dots, w_{j_b}$) os vértices nessas $(k + 1)$ -cliques que são diferentes de $v_1, \dots, v_{i-1}, v_{i+1}, \dots, v_k, u$ (respectivamente $v_1, \dots, v_{j-1}, v_{j+1}, \dots, v_k, u$).

Podemos supor sem perda de generalidade que $x_{v_i} \geq x_{v_j}$, no vetor de Perron de \mathbf{Q} pois, caso contrário, bastaria inverter as rotulações destes vértices. Seja

$$G' = G - \{(v_j, w_{i_1}), (v_j, w_{i_2}), \dots, (v_j, w_{i_a})\} + \{(v_i, w_{i_1}), (v_i, w_{i_2}), \dots, (v_i, w_{i_a})\}$$

Desta forma G' também é uma k -árvore, pois a mudança acima apenas modificou as joint-cliques dos vértices $w_{i_r} \in S_1(G), 1 \leq r \leq a$, que eram

$\{v_1, \dots, v_{i-1}, v_{i+1}, \dots, v_k, u\}$ e passaram a ser $\{v_1, \dots, v_{j-1}, v_{j+1}, \dots, v_k, u\}$ e, naturalmente, $N_{G'}(w_i) = N_{G'}(w_j)$. Sendo assim, $q_1(G) < q_1(G')$, pelo Teorema 2.3. Note que

$$\{v_1, \dots, v_{j-1}, v_{j+1}, \dots, v_k, u, w_{i_1}, w_{i_2}, \dots, w_{i_a}\} \subseteq N_G(v_j).$$

Por isso temos que $S_1(G') = S_1(G)$ se $d_G(v_j) > k + a$, enquanto que $S_1(G') = S_1(G \cup \{v_j\})$ se $d_G(v_j) = k + a$. Logo $|S_1(G')| = |S_1(G)|$ ou $|S_1(G)| + 1$, e a Afirmação 1 está provada.

Na Figura 2.17 temos o grafo G' obtido após a operação no grafo G da Figura 2.15.

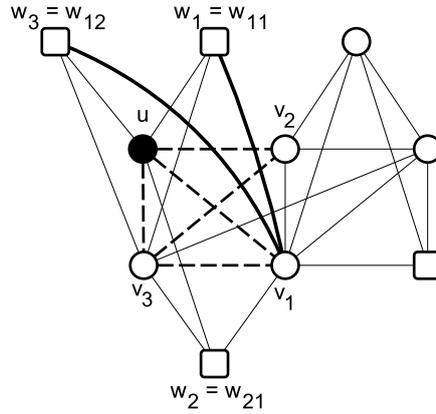


Figura 2.17: Grafo G' .

Demonstração da Afirmação 2: Sem perda de generalidade, considere que $N_G(w_j) = \{v_1, \dots, v_{k-1}, u\}$, para $1 \leq j \leq s$. Seja $V_0 = N_G(v_k) \setminus \{v_1, \dots, v_{k-1}, u\}$, donde $V_0 \neq \emptyset$, já que $v_k \notin S_1(G)$.

Se $x_{v_k} \geq x_u$, então seja

$$G^* = G - \{(u, w_1), (u, w_2), \dots, (u, w_s)\} + \{(v_k, w_1), (v_k, w_2), \dots, (v_k, w_s)\}.$$

Assim como na Afirmação 1, é fácil ver que G^* é uma k -árvore com n vértices, pois apenas trocamos a vizinhança dos vértices simpliciais $\{w_1, w_2, \dots, w_s\}$ que passou a ser a clique $\{v_1, \dots, v_k\}$. E ainda, como $|V_G(u) \setminus \{w_1, \dots, w_s\}| = k$, temos que $|S_1(G^*)| = |S_1(G) \cup \{u\}| = |S_1(G)| + 1$. Pelo Teorema 2.3, $q_1(G) < q_1(G^*)$.

Já no caso em que $x_{v_k} < x_u$, considere

$$G^* = G - \sum_{v \in V_0} (v_k, v) + \sum_{v \in V_0} (u, v).$$

Novamente podemos verificar que G^* é uma k -árvore com n vértices e $|S_1(G^*)| = |S_1(G) \cup \{v_k\}| = |S_1(G)| + 1$. Pelo Teorema 2.3, $q_1(G) < q_1(G^*)$.

O grafo G da Figura 2.16 é tal que $x_{v_3} > x_u$, então o grafo G^* é obtido da

primeira operação descrita na demonstração da Afirmação 2.

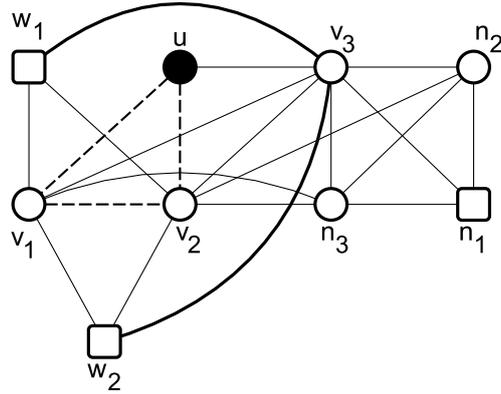


Figura 2.18: Grafo G^* .

□

O próximo resultado garante que, dentre as k -árvores, aquela com o maior raio \mathbf{Q} -espectral é a k -estrela. Sua prova foi apresentada em 2015 por Zhang e Li em [24] e decorre diretamente do lema anterior. Vale ainda ressaltar que podemos interpretá-lo como uma generalização do Teorema 2.6.

Teorema 2.12. [24] Seja G uma k -árvore com n vértices tal que $n \geq k + 1$. Então $q_1(G) \leq q_1(S_{k,n-k})$, e a igualdade vale se e somente se $G \simeq S_{k,n-k}$.

Exemplo 2.11. A 3-árvore à esquerda na Figura 2.19 tem raio espectral igual a $q(G) = 12,425$ e a 3-estrela à direita é tal que $q(S_{3,8}) = 14,152$.

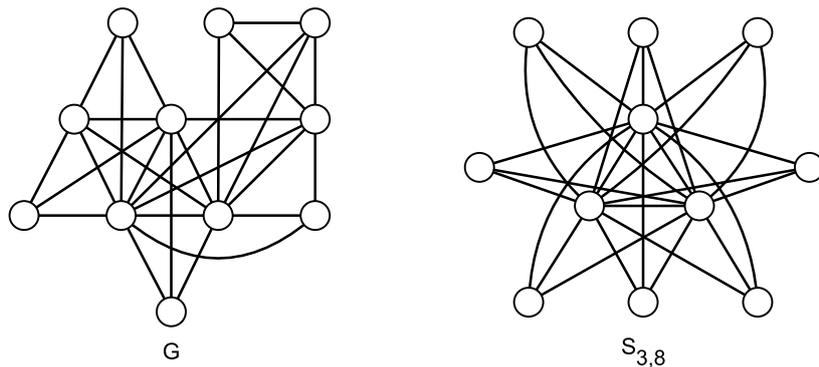


Figura 2.19: Uma 3-árvore com 11 vértices e a 3-estrela $S_{3,8}$.

Os grafos $K_{k-1} \vee P_{n-k+1}$, são ditos k -leques e são uma generalização do grafo leque $K_1 \vee P_{n-1}$. Estes grafos formam uma subfamília dos k -caminhos. De fato, a construção indutiva consiste em: clique-base inicial e cada novo vértice v_{i+1} acrescentado é ligado a esta clique e a v_{i-1} .

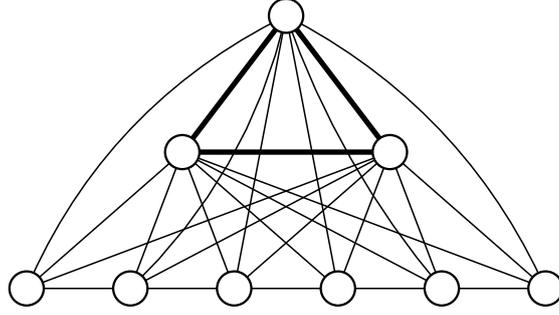


Figura 2.20: Exemplo de 4-leque com 9 vértices: $K_3 \vee P_6$

Teorema 2.13. [25] Dentre todos os 2-caminhos, aquele que possui maior raio \mathbf{Q} -espectral é o 2-leque $K_1 \vee P_{n-1}$ e o que possui menor raio \mathbf{Q} -espectral é P_n^2 .

Decorrente de nossos estudos e testes, propomos uma conjectura que generaliza o Teorema 2.13 acima.

Conjectura 2.1. Dentre todos os k -caminhos, aquele que possui maior raio \mathbf{Q} -espectral é o k -leque $K_{k-1} \vee P_{n-k+1}$ e o que possui menor raio \mathbf{Q} -espectral é P_n^k .

Vamos exibir agora alguns resultados sobre a matriz laplaciana e os k -caminhos P_n^k . Mas antes, apresentamos a seguinte árvore que aparece no enunciado de um dos teoremas.

Seja $T_{n,i}$ a árvore obtida de um caminho P_{n-1} , $v_1v_2\dots v_{n-1}$, ao juntar uma aresta pendente (v_i, v_n) em um vértice v_i , $i = 1, 2, 3, \dots, n-1$. Em particular, $T_{n,1} = T_{n,n-1} = P_n$. Na Figura 2.21 temos $T_{9,5}$.

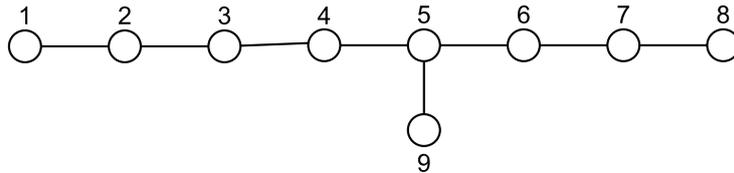


Figura 2.21: $T_{9,5}$.

Kinkar Ch. Das e Ji-Ming Guo provaram em [26] os seguintes resultados.

Teorema 2.14. [26] Para, $2 \leq i \leq n-1$, $\mu_1(P_n^2) \leq \mu_1(T_{n,i}^2)$.

Corolário 2.1. [26] Seja P_n um caminho de ordem n . Então $\mu_1(P_n^2) \leq 6,606$.

Destacamos também os seguintes resultados provados pelos mesmos autores em [27].

Teorema 2.15. [27] Para qualquer árvore T de ordem n ,

$$\mu_1(P_n^2) \leq \mu_1(T^2) \leq \mu_1(S_n^2).$$

A igualdade à esquerda vale se e somente se $T \cong P_n$ e a igualdade à direita vale se e somente se $T \cong S_n$.

Corolário 2.2. [27] Se G é um grafo com $n \geq 4$ vértices, então

$$\mu_1(P_n^2) \leq \mu_1(G^2) \leq \mu_1(S_n^2).$$

A igualdade à esquerda vale se e somente se $G \cong P_n$ e a igualdade à direita vale se e somente se $\text{diam}(G) < 2$.

Teorema 2.16. [27] Seja G um grafo conexo com n vértices e complementar conexo \overline{G} . Então

$$\mu_1(P_n^2) + \mu_1(\overline{P_n^2}) \leq \mu_1(G^2) + \mu_1(\overline{G^2}).$$

A igualdade vale se e somente se $G \cong P_n$ ou $\overline{G} \cong P_n$.

Teorema 2.17. [27] Seja G um grafo conexo com n vértices e complementar conexo \overline{G} . Se $k \geq 2$, então

$$\mu_1(P_n^k) + \mu_1(\overline{P_n^k}) \leq \mu_1(G^k) + \mu_1(\overline{G^k}) \leq 2n - 2.$$

A seguir temos uma tabela com as principais relações entre árvores e k -árvores vistas no texto.

Propriedades	Árvore	k -árvore
	$k = 1$	$k \geq 1$
χ	2	$k + 1$
Ordem da maior clique	2	$k + 1$
Maior raio Q -espectral	estrela S_n	k -estrela $S_{k,n-k}$
Construção	$ JC(v) = 1$	$ JC(v) = k$
"pontas"	folhas	vértices simpliciais
Superclasse	cordal	cordal

Capítulo 3

Polinômio Característico de P_n^2

Neste capítulo apresentamos a definição de matriz pentadiagonal de Toeplitz e veremos que a matriz de adjacência dos 2-caminhos P_n^2 são deste tipo. Aplicamos então um resultado da literatura, [34], sobre matrizes pentadiagonais de Toeplitz simétricas para escrever uma fórmula para o polinômio característico de grafos na família P_n^2 e com isso, estudamos a ocorrência dos autovalores 0 e 1 no espectro da matriz de adjacência destes grafos. Após isso, usamos um algoritmo apresentado em [35] para fazer a decomposição de grafos P_n^2 em dois grafos cuja união dos espectros coincide com o espectro de P_n^2 , o que pode dar informações sobre o espectro de P_n^2 .

Definição 3.1. *Uma **matriz pentadiagonal de Toeplitz** \mathbf{M}_n é definida como tendo zeros em todas as entradas, exceto em suas cinco diagonais principais, com cada diagonal principal tendo o mesmo elemento em todas as posições. Neste texto, escreveremos esta matriz \mathbf{M}_n de ordem n em forma de linha única, ou seja, $\mathbf{M}_n = [e, d, a, b, c]$.*

Temos, por exemplo, que a matriz pentadiagonal de Toeplitz $\mathbf{M}_6 = [3, 2, 1, 2, 3]$ de ordem 6 é:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 2 & 3 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 1 & 2 & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 2 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 3 & 2 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

Em [34], os autores apresentam um algoritmo que calcula os determinantes de matrizes pentadiagonais de Toeplitz genéricas, sem impor condições restritivas. Em particular, os autores exibem uma fórmula recursiva para o determinante de matrizes pentadiagonais de Toeplitz que são simétricas. Trata-se do teorema a seguir.

Teorema 3.1. [34] Seja $\mathbf{M}_n = [c, b, a, b, c]$ uma matriz pentadiagonal de Toeplitz simétrica $n \times n$. Então,

$$|\mathbf{M}_n| = (a-c)|\mathbf{M}_{n-1}| + (ac-b^2)|\mathbf{M}_{n-2}| + (b^2c-ac^2)|\mathbf{M}_{n-3}| + (c^4-ac^3)|\mathbf{M}_{n-4}| + c^5|\mathbf{M}_{n-5}|.$$

A fim de não sobrecarregar o texto, neste capítulo denotaremos o polinômio característico de P_n^2 por $p_n(\lambda) := p_{P_n^2}(\lambda) = |\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}(P_n^2)|$ e rotularemos P_n^2 a partir da rotulação usual do caminho P_n , como explicado anteriormente.

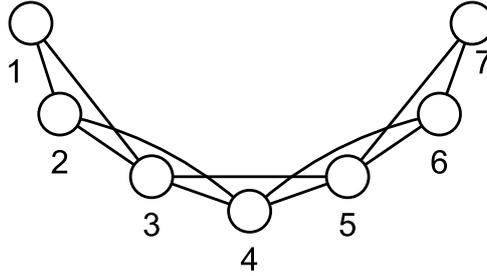


Figura 3.1: P_7^2 .

Temos como exemplo inicial o 2-caminho P_7^2 com rotulação como na Figura 3. O seu polinômio característico é dado pelo seguinte determinante:

$$p_7(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & \lambda & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & \lambda & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & \lambda & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & \lambda & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & \lambda & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & \lambda \end{vmatrix}$$

Observe que esse é determinante da matriz pentadiagonal de Toeplitz simétrica $[-1, -1, \lambda, -1, -1]$ de ordem 7. De forma geral, temos que

$$p_n(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & \lambda & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & -1 & \lambda & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & -1 & \lambda & -1 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & \lambda & -1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & & & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & \dots & & 0 & \lambda \end{vmatrix} = |[-1, -1, \lambda, -1, -1]|.$$

Assim, aplicando diretamente o Teorema 3.1, obtemos a seguinte expressão para o polinômio característico das potências de caminho P_n^k .

Teorema 3.2. *Para cada inteiro $j \geq 2$, indique-se por $p_j(\lambda)$ o polinômio característico de P_j^2 . Então, para cada inteiro $n \geq 7$, o polinômio característico do grafo P_n^2 é dado pela fórmula:*

$$p_n(\lambda) = (\lambda + 1)[p_{n-1}(\lambda) - p_{n-2}(\lambda) - p_{n-3}(\lambda) + p_{n-4}(\lambda)] - p_{n-5}(\lambda).$$

A fórmula do teorema acima sugere o estudo do autovalor $\lambda = -1$. Usando o software *New Graph*, podemos obter o polinômio característico de P_i^2 pra $i \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ e verificar para quais destes grafos $p_n(-1) = 0$, ou seja, $\lambda = -1$ é autovalor.

$$p_2(\lambda) = \lambda^2 - 1, \quad p_2(-1) = 0$$

$$p_3(\lambda) = \lambda^3 - 3\lambda - 2, \quad p_3(-1) = 0$$

$$p_4(\lambda) = \lambda^4 - 5\lambda^2 - 4\lambda, \quad p_4(-1) = 0$$

$$p_5(\lambda) = \lambda^5 - 7\lambda^3 - 6\lambda^2 + 3\lambda + 2, \quad p_5(-1) \neq 0$$

$$p_6(\lambda) = \lambda^6 - 9\lambda^4 - 8\lambda^3 + 10\lambda^2 + 12\lambda + 3, \quad p_6(-1) \neq 0$$

Corolário 3.1. $\lambda = -1$ é autovalor de P_n^2 se e somente se $n \equiv i \pmod{5}$, $i \in \{2, 3, 4\}$.

Demonstração. Se $\lambda = -1$ é autovalor de P_n^2 , então pelo Teorema 3.2

$$0 = p_n(-1) = (-1+1)[p_{n-1}(-1) - p_{n-2}(-1) - p_{n-3}(-1) + p_{n-4}(-1)] - p_{n-5}(-1) = -p_{n-5}(-1),$$

ou seja, $p_{n-5}(-1) = 0$.

Como $\lambda = -1$ é autovalor de P_i^2 , $i \in \{2, 3, 4\}$, segue que P_{i+5} também terá -1 como autovalor, diretamente da fórmula obtida no Teorema 3.2. De fato, se $i \in \{2, 3, 4\}$ vimos acima que $p_i(-1) = 0$, então pela fórmula temos:

$$p_{i+5}(\lambda) = (-1+1)[p_{i+4}(-1) - p_{i+3}(-1) - p_{i+2}(-1) + p_{i+1}(-1)] - p_i(-1) = -p_i(-1) = 0.$$

Reciprocamente, seja $n \geq 2$ tal que $n \equiv 2 \pmod{5}$. Então, $n = 5q + 2$, $q \in \mathbb{N}$.

Vamos mostrar por indução sobre q que $p_{5q+2}(-1) = 0$, para $q \geq 0$.

De fato, para $q = 0$ temos $p_{5q+2}(-1) = p_2(-1) = 0$, pois $p_2(\lambda) = \lambda^2 - 1$.

Suponha agora que $p_{5q+2}(-1) = 0$ para algum $q \geq 0$. Pelo Teorema 3.2 que

$$\begin{aligned} p_{5(q+1)+2}(-1) &= p_{5q+7}(-1) \\ &= (-1+1)[p_{5q+6}(-1) - p_{5q+5}(-1) - p_{5q+4}(-1) + p_{5q+3}(-1)] - p_{5q+2}(-1) \\ &= -p_{5q+2}(-1) \\ &= 0, \end{aligned}$$

onde na última igualdade usamos a hipótese de indução. Então o resultado vale para $q + 1$, donde por indução vale para todo $q \geq 0$.

Os casos em que $n \equiv 3 \pmod{5}$ e $n \equiv 4 \pmod{5}$ são completamente análogos. □

Corolário 3.2. *Se $n \equiv 1 \pmod{3}$ então $\lambda = 0$ é autovalor de P_n^2 .*

Demonstração. Pelo Teorema 3.2 temos que se $p_n(0) = 0$ então

$$\begin{aligned} p_{n+3}(0) &= (0+1)[p_{n+2}(0) - p_{n+1}(0) - p_n(0) + p_{n-1}(0)] - p_{n-2}(0) \\ &= p_{n+2}(0) - p_{n+1}(0) + p_{n-1}(0) - p_{n-2}(0) \\ &= (p_{n+1}(0) - p_n(0) - p_{n-1}(0) + p_{n-2}(0) - p_{n-3}(0)) - p_{n+1}(0) + p_{n-1}(0) - p_{n-2}(0) \\ &= -p_{n-3}(0), \end{aligned}$$

onde na terceira igualdade escrevemos a fórmula do teorema anterior para o polinômio $p_{n+2}(\lambda)$.

Assim, se $p_n(0) = 0$ então $p_{n+3}(0) = -p_{n-3}(0)$. (*)

Vamos agora usar indução forte para mostrar o corolário, isto é mostraremos que $p_{3q+1}(0) = 0$, para todo $q \geq 1$.

Se $q = 1$, temos que $p_{3q+1}(0) = p_4(0) = 0$, já que $p_4(0) = \lambda^4 - 5\lambda^2 - 4\lambda$.

Suponhamos agora que $p_{3l+1}(0) = 0$ para todo $1 \leq l \leq q$ e algum $q \geq 1$. Queremos mostrar que $p_{3(q+1)+1}(0) = p_{3q+4}(0) = 0$. Como $p_{3q+1}(0) = 0$, então por (*), $p_{3q-2}(0) = -p_{3q+4}(0)$, isto é, $p_{3(q-1)+1}(0) = -p_{3(q+1)+1}(0)$. Já que $q - 1 \leq q$, pela hipótese de indução temos que $p_{3(q-1)+1}(0) = 0$, donde $p_{3(q+1)+1}(0) = 0$.

Portanto, provamos por indução forte que $p_{3q+1}(0) = 0$, para todo $q \geq 1$. □

Depois de inúmeros testes, acreditamos que a recíproca do corolário anterior é verdadeira, porém não conseguimos formalizar uma demonstração. Temos então a seguinte conjectura.

Conjectura 3.1. *Se $\lambda = 0$ é autovalor de P_n^2 então $n \equiv 1 \pmod{3}$.*

Fritscher, E. apresenta em sua tese de doutorado [35] um algoritmo cuja resposta é uma decomposição do espectro de um grafo com propriedade que listaremos a seguir. Usaremos essa teoria para os grafos P_n^2 , já que estes satisfazem tal propriedade. Começamos com a definição de grafos com pesos generalizados (GWG), introduzida em [35].

Definição 3.2. *Um **grafo com peso generalizado** (GWG) é uma tripla (G, ρ, ε) onde $G(V, E)$ é um grafo simples, ρ é a função dos vértices $\rho : V \rightarrow \mathbb{R}$ e ε é a função peso das arestas $\varepsilon : E \rightarrow \mathbb{R}$. Os valores associados a um vértice e a uma aresta são chamados de peso do vértice e peso da aresta.*

Como ressaltado em [35], a função ε está definida apenas para o conjunto E de arestas. Desta forma, define-se $\varepsilon_{i,j} = 0$ quando $(i, j) \notin E$.

Observe que se todas as arestas de um GWG tiverem peso 1 e o peso de cada vértice for 0, então a matriz do GWG é a matriz de adjacência do grafo.

Definição 3.3. *Dois conjuntos ordenados de vértices $S_1 = \{h_1^{(1)}, h_2^{(1)}, \dots, h_r^{(1)}\}$ e $S_2 = \{h_1^{(2)}, h_2^{(2)}, \dots, h_r^{(2)}\}$ são ditos simétricos se as quatro relações forem satisfeitas.*

1. $\rho_{h_i^{(1)}} = \rho_{h_i^{(2)}}$ para todo $1 \leq i \leq r$;
2. $\varepsilon_{h_i^{(1)}, u} = \varepsilon_{h_i^{(2)}, u}$ para todo $1 \leq i \leq r$ e $u \notin S_1 \cup S_2$;
3. $\varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(1)}} = \varepsilon_{h_i^{(2)}, h_j^{(2)}}$ para todo $1 \leq i < j \leq r$
4. $\varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(2)}} = \varepsilon_{h_j^{(1)}, h_i^{(2)}}$ para todo $1 \leq i < j \leq r$

Na proposição a seguir mostramos que P_n^2 possui dois conjuntos simétricos.

Proposição 3.1. *Para todo n , o 2-caminho P_n^2 , onde $V = \{1, 2, \dots, n\}$, possui dois conjuntos simétricos a saber,*

- Se n é par: $S_1 = \{1, 2, \dots, \frac{n}{2}\}$ e $S_2 = \{n, n-1, \dots, \frac{n}{2}+2, \frac{n}{2}+1\}$ e assim, $V \setminus (S_1 \cup S_2) = \emptyset$.
- Se n é ímpar: $S_1 = \{1, 2, \dots, \frac{n-1}{2}\}$ e $S_2 = \{n, n-1, \dots, \frac{n+1}{2}+2, \frac{n+1}{2}+1\}$ e assim, $V \setminus (S_1 \cup S_2) = \{\frac{n+1}{2}\}$.

Demonstração. Considere o grafo P_n^2 cujas arestas têm peso 1 e os vértices têm peso 0. Observe que desta forma, dados vértices a, b, c, d do grafo, verificar se $\varepsilon_{a,b} = \varepsilon_{c,d}$ é equivalente a verificar se $(a, b) \in E$ e $(c, d) \in E$.

Considere a rotulação utilizada anteriormente neste capítulo, ou seja, $(x, y) \in E$ se e somente se $|x - y| \leq 2$.

Vamos verificar que os conjuntos do enunciado satisfazem a cada uma das quatro relações da definição 3.3.

Caso 1: Seja n par.

Considere

$$S_1 = \left\{ h_1^{(1)}, h_2^{(1)}, \dots, h_{\frac{n}{2}}^{(1)} \right\} \text{ e } S_2 = \left\{ h_1^{(2)}, h_2^{(2)}, \dots, h_{\frac{n}{2}}^{(2)} \right\},$$

onde $h_i^{(1)} = i$ e $h_i^{(2)} = n - i + 1$, para $1 \leq i \leq \frac{n}{2}$.

1. Claramente essa relação é satisfeita, pois todos os vértices têm peso 0.
2. Como $V \setminus (S_1 \cup S_2) = \emptyset$, esta relação também é claramente satisfeita.
3. Para todo $1 \leq i, j \leq \frac{n}{2}$, vale $\varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(1)}}, \varepsilon_{h_i^{(2)}, h_j^{(2)}} \in \{0, 1\}$, então

$$\begin{aligned} \varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(1)}} = 1 &\Leftrightarrow (h_i^{(1)}, h_j^{(1)}) \in E \Leftrightarrow (i, j) \in E \Leftrightarrow |i - j| \leq 2 \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow |(n - i + 1) - (n - j + 1)| \leq 2 \Leftrightarrow (n - i + 1, n - j + 1) \in E \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow (h_i^{(2)}, h_j^{(2)}) \in E \Leftrightarrow \varepsilon_{h_i^{(2)}, h_j^{(2)}} = 1 \end{aligned}$$

O caso $\varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(1)}} = \varepsilon_{h_i^{(2)}, h_j^{(2)}} = 0$ decorre da equivalência acima.

4. De forma análoga ao item anterior, para todo $1 \leq i, j \leq \frac{n}{2}$ vale

$$\begin{aligned} \varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(2)}} = 1 &\Leftrightarrow (i, n - j + 1) \in E \Leftrightarrow |i - (n - j + 1)| \leq 2 \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow |(n - i + 1) - j| \leq 2 \Leftrightarrow (n - i + 1, j) \in E \Leftrightarrow \varepsilon_{h_j^{(1)}, h_i^{(2)}} = 1 \end{aligned}$$

Caso 2: Seja n ímpar.

Considere

$$S_1 = \left\{ h_1^{(1)}, h_2^{(1)}, \dots, h_{\frac{n-1}{2}}^{(1)} \right\}, S_2 = \left\{ h_1^{(2)}, h_2^{(2)}, \dots, h_{\frac{n-1}{2}}^{(2)} \right\} \text{ e } V \setminus (S_1 \cup S_2) = \left\{ \frac{n+1}{2} \right\}$$

onde $h_i^{(1)} = i$ e $h_i^{(2)} = n - i + 1$, para $1 \leq i \leq \frac{n-1}{2}$.

Com exceção do item 2, todos os demais seguem de forma análoga ao caso n par. Vamos, então, verificá-lo:

2. Para $1 \leq i \leq \frac{n}{2}$, e $u = \frac{n+1}{2} \notin S_1 \cup S_2$ temos

$$\begin{aligned} \varepsilon_{h_i^{(1)},u} = 1 &\Leftrightarrow (h_i^{(1)}, u) \in E \Leftrightarrow \left(i, \frac{n+1}{2}\right) \in E \Leftrightarrow \left|i - \frac{n+1}{2}\right| \leq 2 \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \left|(n-i+1) - \frac{n+1}{2}\right| \leq 2 \Leftrightarrow \left(n-i+1, \frac{n+1}{2}\right) \in E \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow (h_i^{(2)}, u) \in E \Leftrightarrow \varepsilon_{h_i^{(2)},u} = 1 \end{aligned}$$

O que conclui a demonstração. □

Teorema 3.3. [35] O Algoritmo 3.1 transforma um GWG com $c \geq 1$ conjuntos simétricos S_i selecionados em um outro GWG com o mesmo espectro.

Algorithm 3.1 Decomposição de simetria

Input: GWG(G, ρ, ε) com c conjuntos simétricos $\{S_k\}$ de tamanho r .

Output: GWG com o mesmo espectro

```

1: procedure Decomposicao( $GWG, S_1, \dots, S_k$ )
2:   for all aresta entre  $h_i^{(1)} \in S_1$  e  $u \notin \bigcup S_k$  do
3:      $\varepsilon_{h_i^{(1)},u} \leftarrow \sqrt{c}\varepsilon_{h_i^{(1)},u}$ ;
4:   end for
5:   for all aresta entre  $h_i^{(1)} \in S_1$  e  $h_i^{(2)} \in S_2$  do
6:      $w \leftarrow \varepsilon_{h_i^{(1)},h_i^{(2)}}$ ;
7:      $\rho_{h_i^{(1)}} \leftarrow \rho_{h_i^{(1)}} + (c-1)w$ ;
8:      $\rho_{h_i^{(k)}} \leftarrow \rho_{h_i^{(k)}} - w$ , para todo  $2 \leq k \leq c$ ;
9:   end for
10:  for all par de arestas entre  $(h_i^{(1)}, h_j^{(2)}) \cup (h_j^{(1)}, h_i^{(2)})$  do
11:     $w \leftarrow \varepsilon_{h_i^{(1)},h_j^{(2)}}$ ;
12:     $\varepsilon_{h_i^{(1)},h_j^{(1)}} \leftarrow \varepsilon_{h_i^{(1)},h_j^{(1)}} + (c-1)w$ ;
13:     $\varepsilon_{h_i^{(k)},h_j^{(k)}} \leftarrow \varepsilon_{h_i^{(k)},h_j^{(k)}} - w$ , para todo  $2 \leq k \leq c$ ;
14:  end for
15:  for all aresta entre  $h_i^{(1)} \in S_k$  e  $u \notin S_k$  do
16:     $\varepsilon_{h_i^{(k)},u} \leftarrow 0$ , para todo  $2 \leq k \leq c$ ;
17:  end for
18: end function

```

Usaremos o algoritmo anterior para decompor o grafo P_n^2 em outro grafo com mesmo espectro.

Proposição 3.2. *Considere o grafo P_n^2 , $n \geq 5$.*

Se n é par então o espectro de P_n^2 é dado pela união dos espectros dos grafos com pesos generalizados $G_{n,1}$ e $G_{n,2}$ da Figura 3.2.

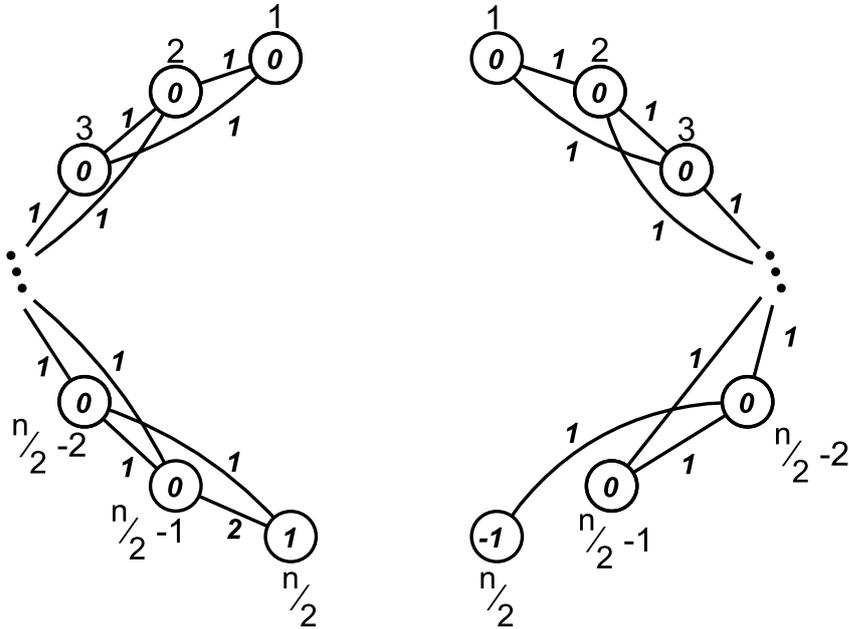


Figura 3.2: $G_{n,1}$ e $G_{n,2}$

Se n é ímpar então o espectro de P_n^2 é dado pela união dos espectros dos grafos com pesos generalizados $G'_{n,1}$ e $G'_{n,2}$ da Figura 3.3.

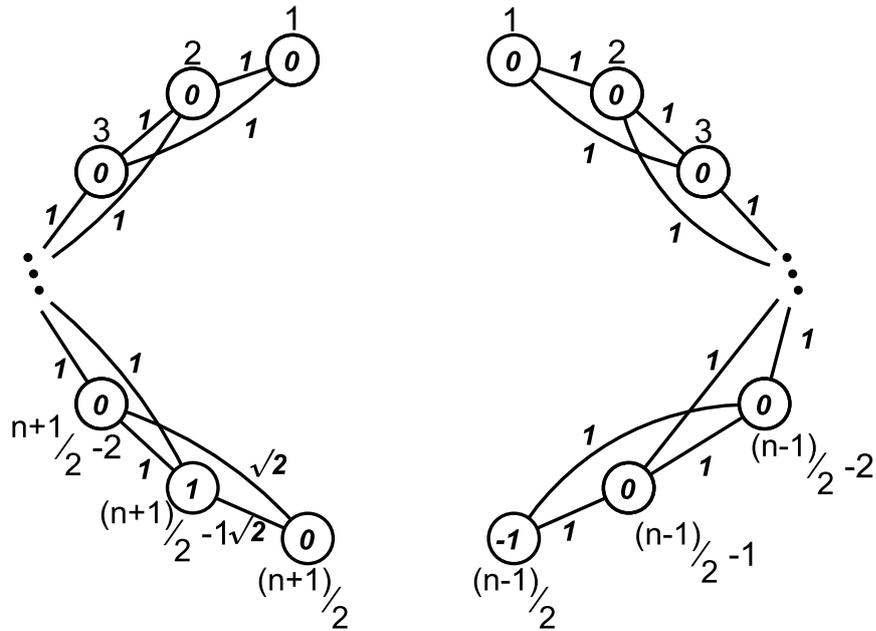


Figura 3.3: $G'_{n,1}$ e $G'_{n,2}$

Demonstração. Considere P_n^2 com n par e os conjuntos simétricos S_1 e S_2 detalhados na Proposição 3.1 como entrada no Algoritmo 3.1 (veja Figura 3.4).

1. O bloco 1 não produz alterações no grafo.
2. Note que a única aresta $(h_i^{(1)}, h_i^{(2)})$, com $h_i^{(1)} \in S_1$ e $h_i^{(2)} \in S_2$ ocorre quando $i = \frac{n}{2}$, ou seja, $h_i^{(1)} = \frac{n}{2}$ e $h_i^{(2)} = \frac{n}{2} + 1$. Então o bloco 2 só causará a seguinte alteração:

$$w \leftarrow 1;$$

$$\rho_{\frac{n}{2}} \leftarrow 0 + (2 - 1)1 = 1;$$

$$\rho_{\frac{n}{2}+1} \leftarrow 0 - 1 = -1.$$

3. O único par de arestas da forma $\{(h_i^{(1)}, h_j^{(2)}); (h_j^{(1)}, h_i^{(2)})\}$ em que $(h_i^{(1)}, h_j^{(2)}) \in E$ ocorre para $i = \frac{n}{2} - 1$ e $j = \frac{n}{2}$. Neste caso:

$$w \leftarrow 1;$$

$$\varepsilon_{h_i^{(1)}, h_j^{(1)}} \leftarrow 1 + (2 - 1)1 = 2;$$

$$\varepsilon_{h_i^{(2)}, h_j^{(2)}} \leftarrow 1 - 1 = 0.$$

4. O bloco 4 deleta as arestas que tenham um extremo em S_1 e o outro em S_k , para $k = 2$.

A Figura 3.4 mostra um esquema de como o algoritmo atua no grafo P_n^2 , n par. Os vértices quadrados pertencem ao conjunto S_1 e os triangulares ao S_2 . As linhas pontilhadas representam as arestas que serão deletadas após a execução do algoritmo.

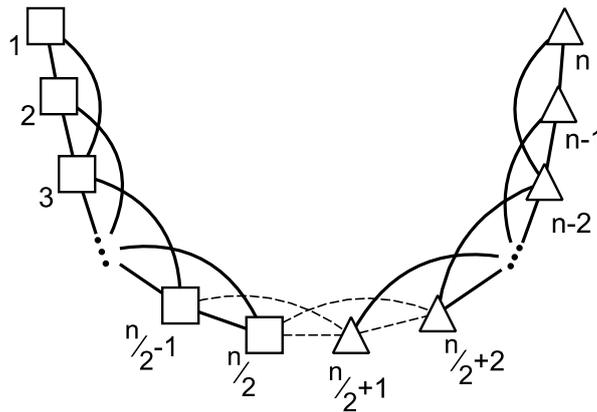


Figura 3.4: Esquema para n par

Faremos agora o caso em que a entrada é P_n^2 com n ímpar e o respectivo par de conjuntos simétricos S_1 e S_2 (veja Figura 3.5).

1. Como $u = \frac{n+1}{2} \notin S_1 \cup S_2$, temos que o bloco 1 fará as seguintes alterações no grafo:

$$\varepsilon_{h_i^{(1)}, u} \leftarrow \sqrt{2}, i \in \left\{ \frac{n-1}{2}, \frac{n-1}{2} - 1 \right\}.$$

2. Note que a única aresta $(h_i^{(1)}, h_i^{(2)})$, com $h_i^{(1)} \in S_1$ e $h_i^{(2)} \in S_2$ ocorre quando $i = \frac{n+1}{2} - 1$, ou seja, $h_i^{(1)} = \frac{n+1}{2} - 1$ e $h_i^{(2)} = \frac{n+1}{2} + 1$. Então o bloco 2 só causará a seguinte alteração:

$$w \leftarrow 1;$$

$$\rho_{\frac{n+1}{2}-1} \leftarrow 0 + (2-1)1 = 1;$$

$$\rho_{\frac{n+1}{2}+1} \leftarrow 0 - 1 = -1.$$

3. O bloco 3 não produz alterações no grafo.
4. O bloco 4 deleta as arestas que tenham um extremo em S_1 ou em $u = \frac{n+1}{2}$ e o outro em S_k , para $k = 2$.

A Figura 3.5 mostra o esquema para o caso ímpar.

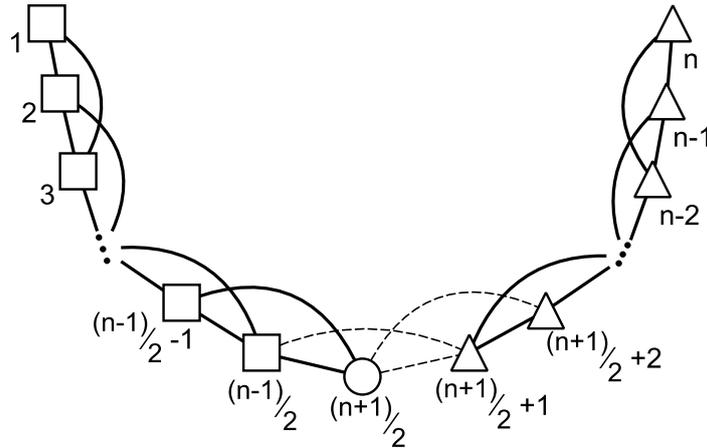


Figura 3.5: Esquema para n ímpar

□

A decomposição acima nos dá a possibilidade de estudar o espectro e também o polinômio característico de P_n^2 a partir das matrizes dos grafos obtidos após aplicação do Algoritmo 3.1. A proposição abaixo nos dá a forma dessas matrizes, que são facilmente obtidas ao estudar os grafos das Figuras 3.2 e 3.3.

Corolário 3.3. *Considere o grafo P_n^2 , $n \geq 5$.*

Se n é par então o espectro de P_n^2 é dado pela união dos espectros das matrizes a seguir.

$$\begin{pmatrix} & & & & 0 & 0 \\ & & & & \vdots & \vdots \\ & & & & 0 & 0 \\ & & & & 1 & 0 \\ & & & & 1 & 1 \\ \mathbf{A}\left(P_{\frac{n}{2}-2}^2\right) & & & & & \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} e \begin{pmatrix} & & & & & 0 \\ & & & & & \vdots \\ & & & & & 0 \\ & & & & & 1 \\ & & & & & 0 \\ \mathbf{A}\left(P_{\frac{n}{2}-1}^2\right) & & & & & \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Se n é ímpar então o espectro de P_n^2 é dado pela união dos espectros das matrizes a seguir.

$$\begin{pmatrix} & & & & 0 & 0 \\ & & & & \vdots & \vdots \\ & & & & 0 & 0 \\ & & & & 1 & 0 \\ & & & & 1 & \sqrt{2} \\ \mathbf{A}\left(P_{\frac{n+1}{2}-2}^2\right) & & & & & \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 1 & 1 & \sqrt{2} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \sqrt{2} & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} e \begin{pmatrix} & & & & & 0 \\ & & & & & \vdots \\ & & & & & 0 \\ & & & & & 1 \\ & & & & & 1 \\ \mathbf{A}\left(P_{\frac{n-1}{2}-1}^2\right) & & & & & \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Vamos ilustrar a aplicação do Algoritmo 3.1 nos dois exemplos a seguir, a fim de deixar mais clara a demonstração da Proposição 3.2.

Exemplo 3.1. Vamos obter a decomposição do grafo P_{10}^2 (Figura 3.6), através do Algoritmo 3.1.

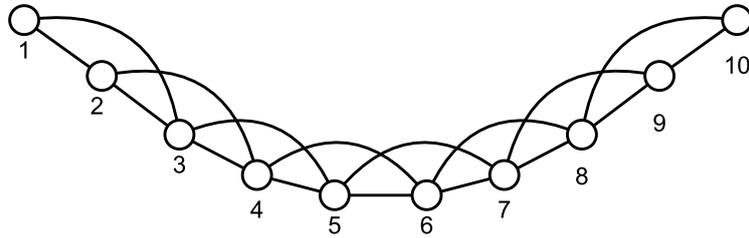


Figura 3.6: P_{10}^2 .

Pela Proposição 3.1, os conjuntos simétricos deste grafo são $S_1 = \{1, 2, 3, 4, 5\}$ e $S_2 = \{10, 9, 8, 7, 6\}$. Seguindo os passos do algoritmo temos:

1. O bloco 1 não produz alterações no grafo.

2. A única aresta em que obtemos alteração é $(5, 6)$. Então,

$$w \leftarrow 1;$$

$$\rho_5 \leftarrow 1;$$

$$\rho_6 \leftarrow -1.$$

3. O único par de arestas que produzirá alteração é $(4, 6) \cup (5, 7)$. Neste caso:

$$w \leftarrow 1;$$

$$\varepsilon_{4,5} \leftarrow 2;$$

$$\varepsilon_{6,7} \leftarrow 0.$$

4. O bloco 4 deleta as arestas $(4, 6)$, $(5, 6)$ e $(5, 7)$.

Assim, os autovalores de P_{10}^2 coincidem com a união dos autovalores dos grafos abaixo.

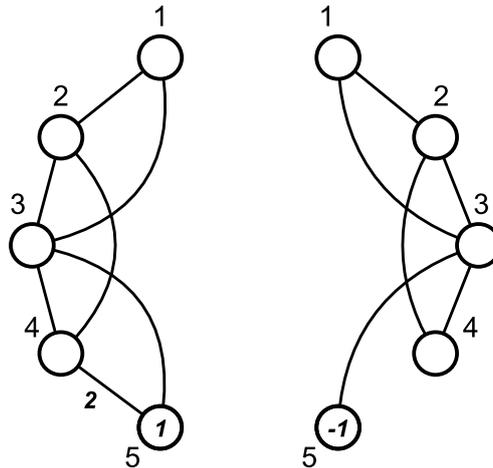


Figura 3.7: Decomposição de P_{10}^2 .

Sejam G_1 o grafo à esquerda e G_2 o grafo à direita na figura acima. Temos que

$$\sigma_{\mathbf{A}}(G_1) = [-2; -1, 277; -0, 662; 1, 3; 3, 639] \text{ e}$$

$$\sigma_{\mathbf{A}}(G_2) = [-2; -1, 377; -0, 274; 0; 2, 651].$$

Note que $10 \equiv 1 \pmod{3}$ e 0 aparece no espectro de P_{10}^2 , como inferimos na Conjectura 3.1.

Neste exemplo, as matrizes de que trata o Corolário 3.3 são:

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} \quad e \quad \mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

cujos polinômios característicos são, respectivamente:

$$p_{\mathbf{A}_1}(\lambda) = -(\lambda + 2)(\lambda^4 - 3\lambda^3 - 4\lambda^2 + 5\lambda + 4) \quad e$$

$$p_{\mathbf{A}_2}(\lambda) = \lambda(\lambda + 2)(\lambda^3 - \lambda^2 - 4\lambda - 1),$$

ou seja,

$$p_{P_{10}^2}(\lambda) = -\lambda(\lambda + 2)^2(\lambda^4 - 3\lambda^3 - 4\lambda^2 + 5\lambda + 4)(\lambda^3 - \lambda^2 - 4\lambda - 1),$$

que é uma fatoração para a fórmula do polinômio encontrada no Teorema 3.2

Exemplo 3.2. Faremos agora o mesmo processo para o grafo P_{13}^2 , representado na Figura 3.8.

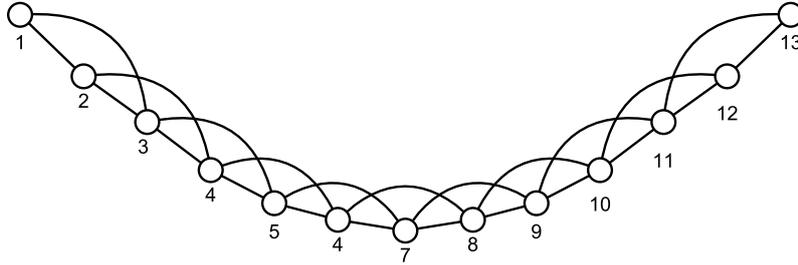


Figura 3.8: P_{13}^2 .

Pela Proposição 3.1, os conjuntos simétricos deste grafo são $S_1 = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ e $S_2 = \{13, 12, 11, 10, 9, 8\}$ e $V \setminus (S_1 \cup S_2) = \{7\}$. Seguindo os passos do Algoritmo 3.1 temos:

1. Como $u = 7$, temos que o bloco 1 fará as seguintes alterações no grafo:

$$\varepsilon_{5,7} \leftarrow \sqrt{2};$$

$$\varepsilon_{6,7} \leftarrow \sqrt{2};$$

2. Note que a única aresta em que obtemos alteração é $(6, 8)$. Então,

$$w \leftarrow 1;$$

$$\rho_6 \leftarrow 1;$$

$$\rho_8 \leftarrow -1.$$

3. O bloco 3 não produz alterações no grafo.

4. O bloco 4 deleta as arestas (7, 8), (7, 9) e (6, 8).

Assim, os autovalores de P_{13}^2 coincidem com a união dos autovalores dos grafos abaixo.

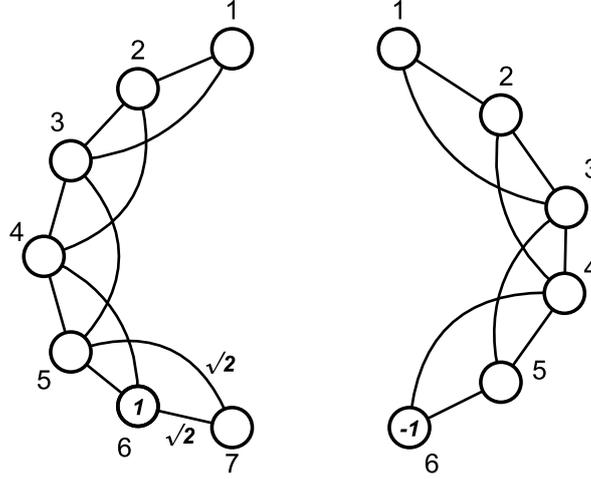


Figura 3.9: Decomposição de P_{13}^2 .

Sejam G_1 o grafo à esquerda e G_2 o grafo à direita na figura acima. Temos que

$$\sigma_{\mathbf{A}}(G_1) = [-2, 071; -1, 678; -1; -0, 177; 0; 2, 156, 3, 770] \text{ e}$$

$$\sigma_{\mathbf{A}}(G_2) = [-2, 104; -1, 597; -1; -0, 459; 1, 040; 3, 119].$$

Temos que $13 \equiv 1 \pmod{3}$ e 0 aparece no espectro de P_{13}^2 , como inferimos na Conjectura 3.1. E também $13 \equiv 3 \pmod{5}$, então -1 é autovalor de P_{13}^2 como vimos no Corolário 3.1. Neste exemplo a multiplicidade do -1 é dois.

Neste exemplo, as matrizes de que trata o Corolário 3.3 são:

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix},$$

cujos polinômios característicos são, respectivamente:

$$p_{\mathbf{A}_1}(\lambda) = -\lambda(\lambda + 1)(\lambda^5 - 2\lambda^4 - 11\lambda^3 + 8\lambda^2 + 30\lambda + 5) \text{ e}$$

$$p_{\mathbf{A}_2}(\lambda) = (\lambda + 1)(\lambda^5 - 9\lambda^3 - 6\lambda^2 + 10\lambda + 5),$$

ou seja,

$$p_{P_{13}^2}(\lambda) = -\lambda(\lambda + 1)^2(\lambda^5 - 2\lambda^4 - 11\lambda^3 + 8\lambda^2 + 30\lambda + 5)(\lambda^5 - 9\lambda^3 - 6\lambda^2 + 10\lambda + 5).$$

Observe que -1 é autovalor das duas matrizes \mathbf{A}_1 e \mathbf{A}_2 acima. Então se conseguirmos determinar uma fórmula para os polinômios característicos destas matrizes talvez seja possível determinar a multiplicidade de -1 no espectro dos grafos P_n^2 , completando o estudo deste autovalor.

Capítulo 4

Sobre a matriz distância de k -árvores

Neste capítulo estudamos a forma da matriz distância de uma k -árvore. Exibimos ainda, uma fórmula que dá o diâmetro de P_n^k e vemos que este número é uma cota superior para o diâmetro de k -árvores em geral. Por fim, usamos um resultado conhecido da literatura para exibir uma expressão do determinante de da matriz distância de k -estrelas.

Proposição 4.1. *Considere uma k -árvore G , onde $V(G) = \{v_1, v_2, v_3, \dots, v_n\}$ e sua matriz distância $\mathbf{D}[G]$. Ao acrescentar um vértice u e ligá-lo aos vértices de uma k -clique de G , obtemos uma k -árvore G' , com $n + 1$ vértices. Sua matriz distância será*

$$[\mathbf{D}(G')]_{i,j} = \begin{cases} [\mathbf{D}(G)]_{i,j}, & \text{se } 1 \leq i, j \leq n \\ 1, & \text{se } j = n + 1 \text{ e } v_i \in JC(u) \\ 1, & \text{se } i = n + 1 \text{ e } v_j \in JC(u) \\ d(v_i, JC(u)) + 1, & \text{se } j = n + 1 \text{ e } v_i \notin JC(u) \\ d(v_i, JC(u)) + 1, & \text{se } i = n + 1 \text{ e } v_j \notin JC(u) \end{cases},$$

onde $d(v_i, JC(u)) = \min\{d(v_i, x) | x \in JC(u)\}$.

Demonstração. .

Caso 1: $i \leq n, j \leq n$.

Inserir o vértice u não altera as distâncias entre os vértices já existentes em G . De fato, considere que u pertence a um caminho de comprimento mínimo entre $v_i, v_j \in V(G)$, digamos $P = \{v_i, \dots, u, \dots, v_j\}$. Os vizinhos de u em P são adjacentes em G' , já que u é simplicial em G' . Logo, $P \setminus \{u\}$ é um caminho entre v_i e v_j , donde P não é mínimo, o que gera uma contradição.

Caso 2: $j = n + 1$ e $v_i \in JC(u)$ ou $i = n + 1$ e $v_j \in JC(u)$.

É fácil ver que $d(u, v) = 1$ nestes casos.

Caso 3: $j = n + 1$ e $v_i \notin JC(u)$.

Neste caso, v_i não é adjacente a u . Então para calcular $d(u, v_i)$ basta tomar a menor distância entre v_i e os vértices adjacentes a u e somar uma unidade.

Caso 4: $i = n + 1$ e $v_j \notin JC(u)$.

Análogo ao Caso 3.

□

Podemos citar alguns resultados da literatura sobre matriz distância de k -árvores. O primeiro calcula o determinante da matriz distância de grafos 2-caminho. O interessante desse resultado é que o determinante depende apenas do número de vértices do grafo, o que acontecia para árvores, como vimos no Teorema 2.1.

Teorema 4.1. [23] Seja G um grafo 2-caminho com n vértices. Então,

$$|\mathbf{D}(G)| = (-1)^{n-1} \left(1 + \left\lfloor \frac{n-2}{n} \right\rfloor \right) \left(1 + \left\lceil \frac{n-2}{n} \right\rceil \right).$$

O *índice de Wiener* é um parâmetro topológico baseado em distância bem conhecido, introduzido como um descritor estrutural para moléculas orgânicas acíclicas. É definido como a soma das distâncias entre todos os pares não ordenados de vértices de um grafo G :

$$\sum_{(u,v) \subseteq V(G)} d_G(u,v).$$

Para o k -caminho P_n^k , temos o seguinte resultado, provado por An e Wu em [28], envolvendo o índice de Wiener.

Teorema 4.2. [28] Para qualquer árvore T com n vértices, $W(S_n^k) \leq W(T^k) \leq W(P_n^k)$.

O seguinte resultado trata do menor autovalor da matriz distância de uma k -árvore.

Teorema 4.3. [29] Sejam G uma k -árvore ($k \geq 2$) com n vértices e ∂_n o menor autovalor de $\mathbf{D}(G)$. Então temos

1. se $n = k, k + 1$, então $\partial_n = -1$;
2. se $n \geq k + 2$, então $\partial_n = -2$ se e somente se $G \cong S_{k,n-k}$;
3. se $n \geq k + 3$ e $G \neq S_{k,n-k}$, então $\partial_n < -2,383$.

Os próximos resultados deste capítulo são nossas contribuições para o estudo da matriz \mathbf{D} e de distâncias, em particular o diâmetro, em k -árvores.

É conhecido que o diâmetro de uma árvore é dado pela maior das distâncias entre as suas folhas. Na proposição a seguir conseguimos estabelecer um resultado análogo para k -árvores, onde os vértices simpliciais desempenham os papéis das folhas.

Proposição 4.2. *O diâmetro de uma k -árvore é dado pela maior das distâncias entre os seus vértices simpliciais.*

Demonstração. Considere x e y vértices de G . Suponha que pelo menos um destes vértices é não simplicial. Então existe $z \in V(G)$ tal que $y \in JC(z)$. Temos duas possibilidades.

Caso 1: $d(x, JC(z)) = d(x, y)$.

Neste caso, temos que

$$d(x, z) = d(x, JC(z)) + 1 = d(x, y) + 1 > d(x, y)$$

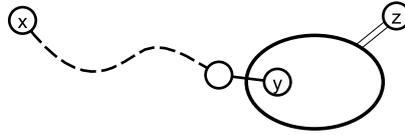


Figura 4.1: Esquema do Caso 1

Caso 2: $d(x, JC(z)) = d(x, y) - 1$.

Neste caso, temos que

$$d(x, z) = d(x, JC(z)) + 1 = d(x, y) - 1 + 1 = d(x, y)$$

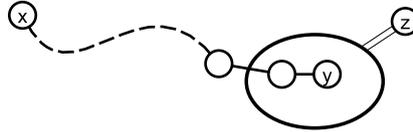


Figura 4.2: Esquema do Caso 2

Ou seja, dados x, y vértices de G , tal que y não é simplicial, então existe z onde $d(x, z) \geq d(x, y)$. Logo, o diâmetro do grafo é dado por um caminho cujos extremos são vértices simpliciais, pois caso contrário o caminho poderia ser aumentado. \square

Corolário 4.1. *Se G é um k -caminho, seu diâmetro é dado pela distância entre seus dois vértices simpliciais.*

É fácil ver que o diâmetro de uma k -estrela é 2.

Usaremos o corolário anterior para exibir uma fórmula para o diâmetro dos k -caminhos P_n^k .

Proposição 4.3. *Para todos $n \geq 3$ e $k \geq 2$,*

$$\text{diam}(P_n^k) = \left\lfloor \frac{n + (k - 2)}{k} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{n - 2}{k} \right\rfloor + 1.$$

Demonstração. Pelo Corolário 4.1, basta determinar $d(v_1, v_n)$, onde v_1 e v_n são os vértices simpliciais de P_n^k .

Caso 1: $k|(n-1)$.

Então existe $q \in \mathbb{N}$ tal que $n-1 = qk$. O caminho de comprimento mínimo entre v_1 e v_n é:

$$P = \{v_1, v_{1+k}, v_{1+2k}, \dots, v_{1+qk} = v_n\},$$

pois $(i, j) \in E(P_n^k)$ se e somente se $i - j \leq k$.

Assim,

$$\text{diam}(P_n^k) = |P| = q = \frac{n-1}{k} = \left\lfloor \frac{n-2}{k} \right\rfloor + 1$$

Caso 2: $k \nmid (n-1)$.

Então existem $q, r \in \mathbb{N}$ tais que $n-1 = qk + r$, com $0 < r < k$, pela divisão Euclidiana de inteiros. O caminho de comprimento mínimo entre v_1 e v_n é:

$$P = \{v_1, v_{1+k}, v_{1+2k}, \dots, v_{1+qk}, v_n\},$$

donde $\text{diam}(P_n^k) = q+1 = \frac{n-1-r}{k} + 1$. Como $\frac{n-1-r}{k} \in \mathbb{N}$ e $r-1 < k$ (pois $0 < r < k$), vale que

$$\begin{aligned} \text{diam}(P_n^k) &= \frac{n-1-r}{k} + 1 \\ &= \left\lfloor \frac{n-1-r}{k} \right\rfloor + 1 \\ &= \left\lfloor \frac{n-1-r}{k} + \frac{r-1}{k} \right\rfloor + 1 \\ &= \left\lfloor \frac{n-2}{k} \right\rfloor + 1 \end{aligned}$$

Portanto, pelos casos acima, $\text{diam}(P_n^k) = \left\lfloor \frac{n+(k-2)}{k} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{n-2}{k} \right\rfloor + 1$, $\forall n \geq 3$ e $\forall k \geq 2$.

□

Para cada n fixado, a árvore de ordem n que tem o maior diâmetro é o caminho. Nossa próxima contribuição é a generalização da afirmação acima para k -árvores e é estabelecida na proposição abaixo.

Proposição 4.4. *O número $\text{diam}(P_n^k)$ é um limitante superior para o diâmetro de k -árvores, ou seja, se G é uma k -árvore com n vértices, então $\text{diam}(G) \leq \left\lfloor \frac{n-2}{k} \right\rfloor + 1$.*

Demonstração. Inicialmente vamos provar que o resultado é válido se G é um k -caminho. Neste caso, seu diâmetro é dado pela distância entre o único par de vértices simpliciais, pela Proposição 4.2. Portanto, uma forma de obter um k -caminho com

diâmetro máximo é construí-lo de forma que a joint-clique de cada vértice v_i , $i > k$, inserido seja a clique mais distante do outro simplicial, digamos v_1 , isto é maximizar a expressão $d(v_1, JC(v_i))$. Tal construção resulta no grafo P_n^k pois cada v_i adicionado é tal que $JC(v_i) = \{v_{i-1}, v_{i-2}, \dots, v_{i-k}\}$.

O caso em que G é uma k -árvore que não é um k -caminho a prova será feita por indução em n . É fácil ver que o resultado é válido para o caso base $n = k$, pois trata-se de uma k -clique. Seja $n \geq k$ e suponha que toda k -árvore G com n vértices satisfaz que $diam(G) \leq diam(P_n^k)$.

Seja G' uma k -árvore não k -caminho com $n + 1$ vértices e tome a potência de caminho P_{n+1}^k . Então G' possui pelo menos três vértices simpliciais, digamos $a, b, c \in V(G')$, portanto $G' - c$ é uma k -árvore com n vértices. Pela Proposição 4.2 podemos supor que $diam(G') = d_{G'}(a, b)$. Note que a remoção de c não interfere na distância entre a e b , pois caso contrário c estaria no caminho entre a e b o que contradiz o fato de c ser simplicial, então $diam(G' - c) = diam(G')$. Pela hipótese de indução obtemos $diam(G' - c) \leq diam(P_n^k)$ e, portanto:

$$diam(G') = diam(G' - c) \leq diam(P_n^k) \leq diam(P_{n+1}^k).$$

Logo o resultado vale para todo $n \geq k$, o que conclui a prova. □

Uma pergunta natural seria se para cada n e para cada k existem k -árvores que não alcançam a cota estabelecida na proposição acima. Na Figura 4.3 temos exemplos que mostram que isso acontece. Os grafos desta figura são 2-árvores com 12 vértices e diâmetros diferentes e abaixo da cota máxima que é $diam(P_{12}^2) = 6$.

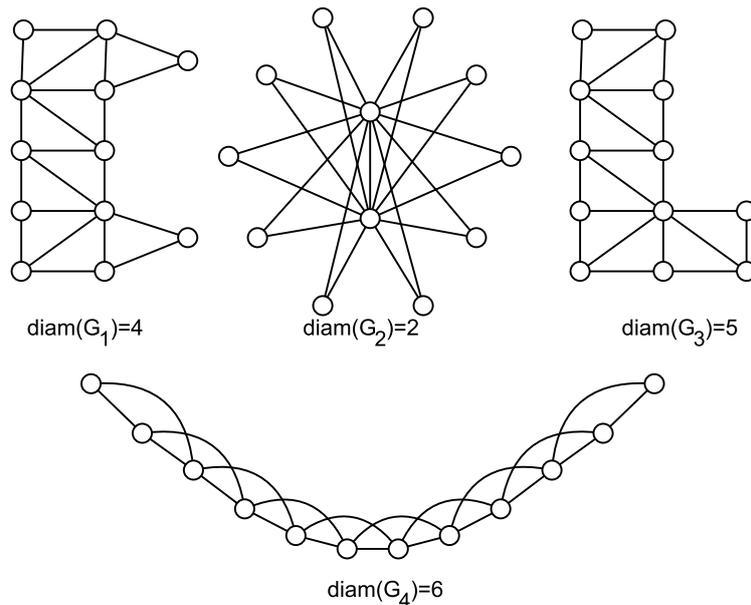


Figura 4.3: 2-árvores com 12 vértices e diâmetros diferentes

Há casos ainda em que uma k -árvore pode atingir o diâmetro máximo, dado pela Proposição 4.4, mesmo esta não sendo potência k de um caminho, conforme visto na Figura 4.4, onde temos 2-caminhos com 13 vértices e mesmo diâmetro, sendo G_2 o grafo P_{13}^2 .

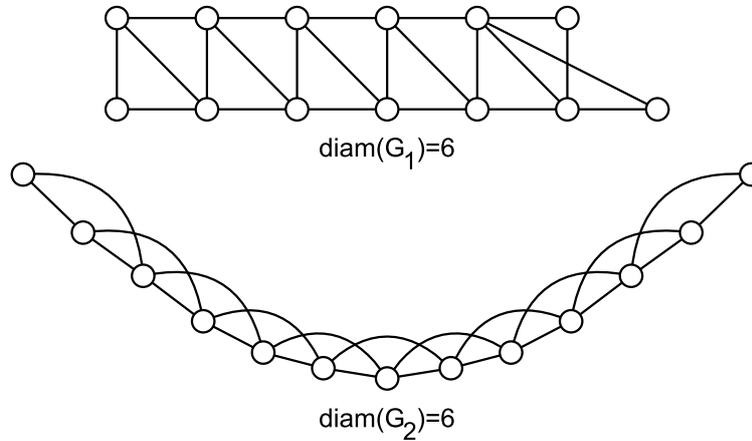


Figura 4.4: 2-caminhos com 13 vértices e mesmo diâmetro

Vimos no Teorema 2.1 que o determinante da matriz distância de uma árvore pode ser escrito em função do seu número de vértices. É natural então questionar se $|\mathbf{D}(G)|$, onde G é uma k -árvore, também depende apenas de n ou então apenas de n e k . Infelizmente a resposta é não. Na Figura 4.5, exibimos exemplos de 3-árvores com 11 vértices em que o determinante de suas respectivas matrizes distância são diferentes.

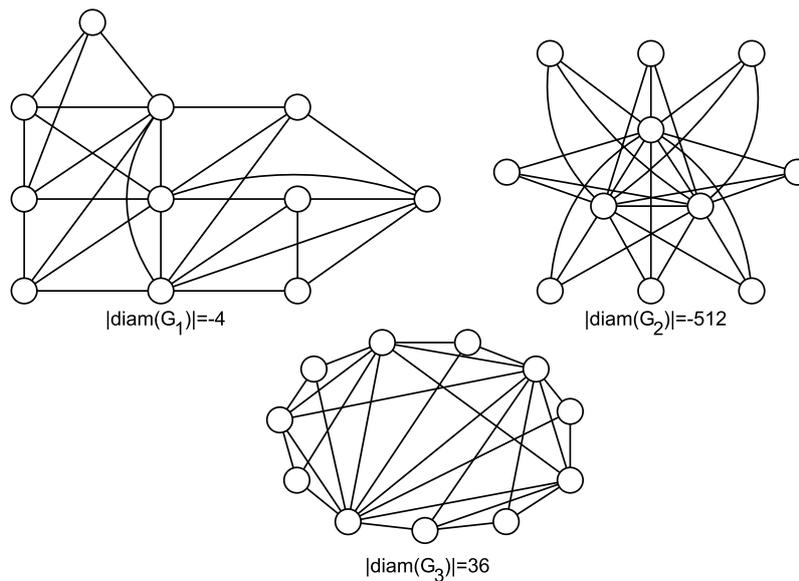


Figura 4.5: 3-árvores com 11 vértices cujos determinantes de suas matrizes distância são diferentes

O Teorema 4.1 mostra que o determinante da matriz distância de grafos 2-caminho depende apenas do número de vértices do grafo. O próximo passo então seria verificar se este resultado vale para k -caminhos em geral. A resposta novamente é não, ou seja, em geral fixados n e k não é verdade que $|\mathbf{D}(G_1)| = |\mathbf{D}(G_2)|$, G_1 e G_2 k -caminhos não isomorfos com n vértices. Os grafos da Figura 4.6 são 3-caminhos com 11 vértices tais que o determinante de suas respectivas matrizes distância são diferentes.

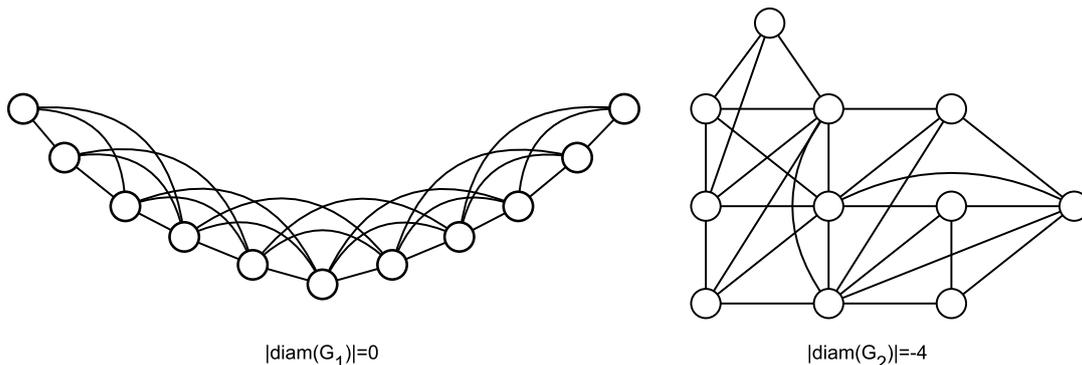


Figura 4.6: 3-caminhos com 11 vértices cujos determinantes de suas matrizes distância são diferentes.

Para a classe das k -estrelas, como era de se esperar, é possível exibir uma fórmula para o determinante da matriz distância, como veremos a seguir. Vale lembrar que para cada n e k fixados existe uma única k -estrela com n vértices. Ressaltamos ainda que as k -estrelas são grafos split completos, ou seja, grafos $K_k \vee \overline{K_{n-k}}$. Sendo assim, sua matriz distância tem uma estrutura determinada, assim como seu \mathbf{D} -espectro, vide [36].

Teorema 4.4. [36] O \mathbf{D} -espectro do grafo split completo $K_b \vee \overline{K_a}$, $a, b \in \mathbb{N}$ é dado por:

$$\sigma_{\mathbf{D}}(K_b \vee \overline{K_a}) = \left[\frac{2a + b - 3}{2} \pm \frac{\sqrt{4a(a-1) + (b+1)^2}}{2}; -2^{(a-1)}; -1^{(b-1)} \right]$$

onde os expoentes indicam a multiplicidade do autovalor.

Como a matriz distância \mathbf{D} de um grafo não orientado é simétrica, então pelo Teorema Espectral de Álgebra Linear, \mathbf{D} é diagonalizável com autovalores reais. Portanto, o determinante de \mathbf{D} é dado pelo produto de seus autovalores. Para mais detalhes, uma boa referência é [11]. Logo, o determinante de uma k -estrela é dado pelo produtório dos autovalores explicitados no Teorema 4.4.

Proposição 4.5. *Se $S_{k,n-k}$ é a k -estrela com n vértices, então*

$$|\mathbf{D}(S_{k,n-k})| = (-1)^{k-1}(-2)^{n-k-1}(-k^2 + nk - 2n + 2)$$

Exemplo 4.1. *Pela fórmula obtida na proposição acima temos que*

$$|\mathbf{D}(S_{3,8})| = (-1)^2(-2)^{11-3-1}(-3^2 + 3 \cdot 11 - 2 \cdot 11 + 2) = -512$$

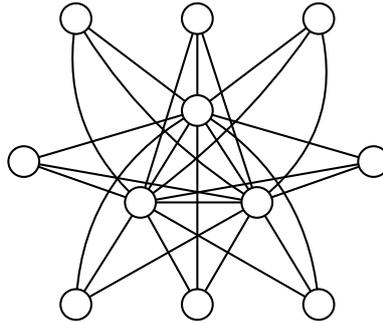


Figura 4.7: $S_{3,8}$

Capítulo 5

Sobre grafos $(k + 1)$ -linha de k -árvores e suas nulidades

Em [6], Fiorini *et. al* apresentaram uma cota superior para a nulidade de árvores em função da sua ordem e do seu grau máximo. Neste capítulo, mostramos que cada valor abaixo desta cota é nulidade de alguma árvore com as mesmas condições. Este resultado nos permitiu obter uma cota superior para a nulidade do grafo $(k + 1)$ -linha de uma família particular de SC k -árvores, generalizando um resultado conhecido sobre nulidade de grafos linha de árvores. Outra contribuição é a caracterização dos grafos $(k + 1)$ -linha de k -árvores. Os estudos neste capítulo originaram o artigo [37].

O **grafo linha** de $G(V, E)$ é o grafo $\ell(G)$ obtido do grafo G da seguinte forma: as arestas de G se tornam vértices de $\ell(G)$ e dois vértices são adjacentes em $\ell(G)$ se as arestas correspondentes em G têm um vértice comum. Observe o exemplo abaixo.

Exemplo 5.1.

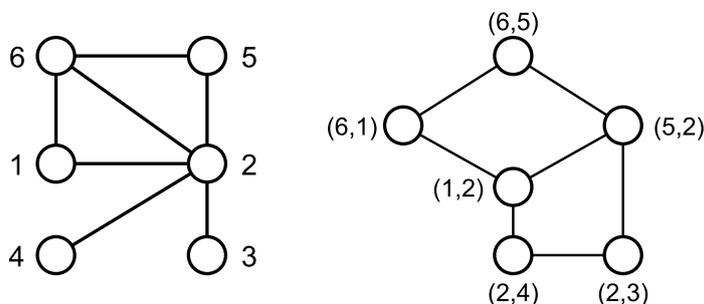


Figura 5.1: Grafo G e seu grafo linha $\ell(G)$.

Uma generalização do conceito de grafo linha foi introduzida em [38] por Lê e está descrita na definição abaixo.

Definição 5.1. O *grafo k -linha* de um grafo G , denotado por $\ell_k(G)$ é definido como o grafo cujos vértices são as cliques de ordem k de G sendo que dois vértices são adjacentes no grafo k -linha se e somente se eles têm, em G , $k - 1$ vértices em comum.

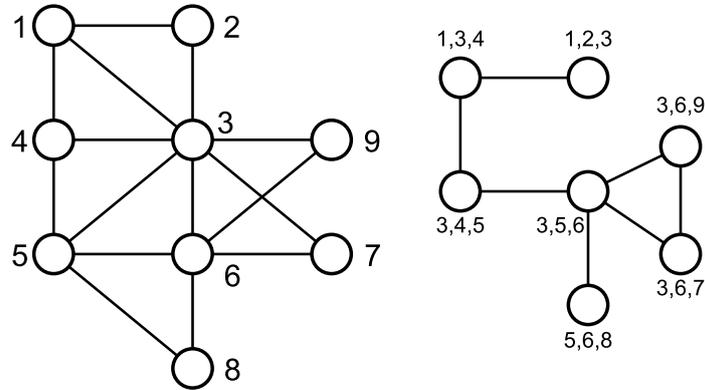


Figura 5.2: Grafo G e seu grafo 3-linha $\ell(G)$.

Em particular temos $\ell(G) = \ell_2(G)$.

Um **bloco** em um grafo G é um subgrafo conexo maximal de G que não possui vértice de corte. Um **grafo bloco** é um grafo em que todo bloco é um grafo completo.

Exemplo 5.2.

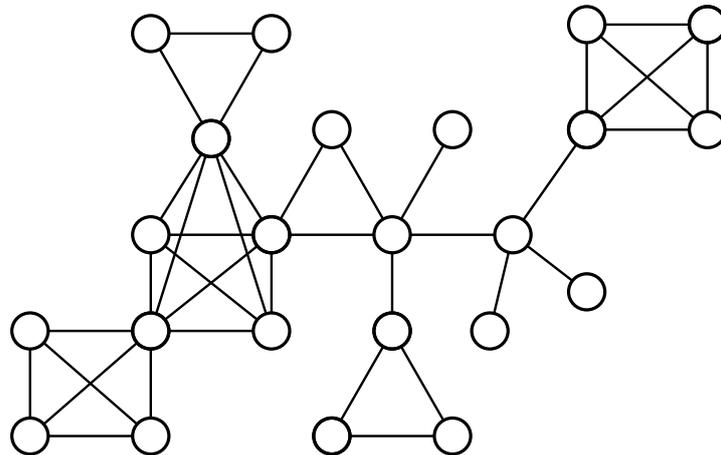


Figura 5.3: Exemplo de grafo bloco.

Harary, F. [7, Th. 8.5] credits the following result to Gary T. Chartrand.

Proposição 5.1. [7] Um grafo é grafo linha de uma árvore se e somente se é um grafo bloco conexo livre de $K_{1,3}$.

Podemos reescrever esta proposição da seguinte forma:

Proposição 5.2. *Seja H um grafo. As seguintes afirmações são equivalentes:*

1. H é o grafo linha de uma árvore.
2. H é um grafo bloco conexo livre de $K_{1,3}$.
3. H é um grafo bloco conexo em que cada vértice de corte está em exatamente 2 blocos.

Exemplo 5.3.

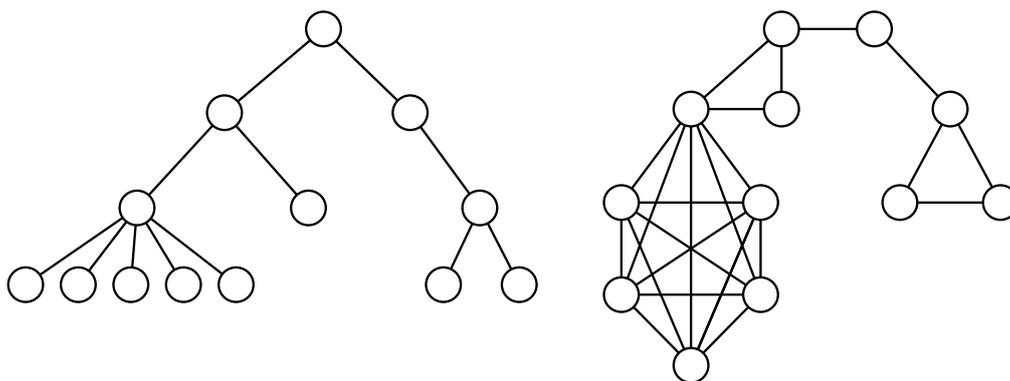


Figura 5.4: Uma árvore T e seu grafo linha $\ell(T)$.

Note que uma k -clique contém k cliques de ordem $k - 1$. Deste argumento, segue o resultado abaixo, registrado em [39, p.67].

Proposição 5.3. [39] Para todo grafo G e para todo k , o grafo k -linha de G é livre de $K_{1,k+1}$.

A **nulidade** de um grafo G , denotada por $\eta(G)$ é a multiplicidade do zero como autovalor da matriz de adjacência, sendo que fixamos $\eta(G) = 0$ para o caso em que 0 não é autovalor de G . O estudo da nulidade de um grafo possui aplicações em Química pois está relacionado, por exemplo, com o comportamento de elétrons em moléculas [40] e também relaciona conceitos em Matemática. Em 1998, Sciriha [41] apresentou um resultado espectral sobre a nulidade do grafo linha de uma árvore (Proposição 5.4 a seguir). Em 2001, Gutman e Sciriha [8] deram uma nova prova para esse resultado. Em 2006, em [42], foi adotada uma abordagem básica fundamental no estudo de grafos linha de árvores, que usa apenas a definição de grafo linha para obter o mesmo resultado principal acima dentre outros.

Proposição 5.4. [8] Se T é uma árvore, então $\eta(\ell(T)) \leq 1$.

Um **emparelhamento** M de G é um conjunto de arestas independentes. Um vértice é dito **saturado** por M se ele é a extremidade de alguma das arestas do emparelhamento. Caso contrário, o vértice é **insaturado**. Um problema fundamental de otimização é encontrar um **emparelhamento máximo**, isto é, um emparelhamento que contém o número máximo de arestas possíveis. Neste texto, o número de arestas de um emparelhamento máximo será denotada por $m(G)$. Um **caminho M -alternante** é um caminho que começa em um vértice insaturado e alterna entre arestas em M e arestas fora de M . Um caminho M -alternante cujos extremos são vértices insaturados por M é dito um caminho **M -aumentante**.

Proposição 5.5. [43] Um emparelhamento M é máximo em um grafo G se e somente se G não possui caminho M -aumentante.

O próximo resultado torna evidente que a nulidade de árvores está relacionada à cardinalidade de um emparelhamento máximo, que é um parâmetro estrutural.

Proposição 5.6. [44] Sejam T uma árvore com $n \geq 1$ vértices. Então $\eta(T) = n - 2m(T)$.

Para inteiros positivos n e Δ , denotaremos por $\mathfrak{T}(n, \Delta)$ o conjunto de todas as árvores com n vértices e cujos graus dos seus vértices são menores ou iguais a Δ . Fiorini *et al.* exibem em [6] a seguinte cota para a nulidade de árvores em $\mathfrak{T}(n, \Delta)$.

Proposição 5.7. [6] Sejam $n \geq 4$ e $\Delta \geq 3$. Se $T \in \mathfrak{T}(n, \Delta)$, então $\eta(T) \leq n - 2\lceil \frac{n-1}{\Delta} \rceil$. Para todo $n \geq 1$ e $\Delta \geq 3$, existem árvores $T \in \mathfrak{T}(n, \Delta)$ tais que $\eta(T) = n - 2\lceil \frac{n-1}{\Delta} \rceil$.

No artigo [6] são apresentados métodos para construir árvores com a nulidade máxima exibida na Proposição 5.7. Já em [3], todas as árvores em $\mathfrak{T}(n, \Delta)$ com nulidade máxima são descritas, como reproduziremos a seguir. Um vértice é dito ser um **PC-vértice** de um grafo G quando ele é saturado por todos os emparelhamentos maximais de G . Considere $\mathfrak{T}(n, \Delta, max)$ o conjunto de árvores em $\mathfrak{T}(n, \Delta)$ com nulidade máxima (igual a $n - 2\lceil \frac{n-1}{\Delta} \rceil$). Vamos descrever agora conjuntos $\mathfrak{T}_1(n, \Delta, max)$ e $\mathfrak{T}_2(n, \Delta, max)$. Para $n = 1, 2, \dots, \Delta$ o único elemento de $\mathfrak{T}_1(n, \Delta, max)$ é a estrela com n vértices. Para $n = k\Delta + i$, $k \geq 1$, $i = 1, 2, \dots, \Delta$, qualquer árvore em $\mathfrak{T}_1(n, \Delta, max)$ é obtida de uma árvore $T' \in \mathfrak{T}_1(n - \Delta, \Delta, max) \cup \mathfrak{T}_2(n - \Delta, \Delta, max)$ e uma cópia da estrela com Δ vértices da seguinte forma: um vértice de T' cujo grau seja menor que Δ é ligado ao centro de S_Δ , onde $\mathfrak{T}_2(n - \Delta, \Delta, max)$ é obtido ao tornar (um por um) alguns vértices pendentes de $T' \in \mathfrak{T}_1(n - \Delta, \Delta, max)$ vizinhos de outros PC-vértices, obedecendo as seguintes regras:

- o grau dos vértices não exceda Δ .

- em cada passo, o vértice ao qual o vértice pendente é ligado é um PC-vértice.

Seguindo essa construção, Li e Chang [3] provam que:

Proposição 5.8. [3] $\mathfrak{T}(n, \Delta, max) = \mathfrak{T}_1(n, \Delta, max) \cup \mathfrak{T}_2(n, \Delta, max)$.

No contexto de grafos bipartidos, Fan e Qian [45] indicam o conjunto de possíveis nulidades de grafos bipartidos com n vértices. Os autores também caracterizam os grafos bipartidos com nulidade $n - 4$ e os grafos bipartidos regulares com nulidade $n - 6$, usando a seguinte definição.

Definição 5.2. [45] Sejam $P_n = v_1v_2 \dots v_n$ $n \geq 2$ o caminho com n vértices e O_{m_i} o grafo trivial com m_i vértices, $i = 1, 2, \dots, n$. Ao substituir cada vértice v_i pelo grafo O_{m_i} e adicionar arestas entre cada vértice de O_i e de O_{i+1} , para $i = 1, 2, \dots, n - 1$, obtemos o grafo G de ordem $m_1 + m_2 + \dots + m_n$, que é chamado **caminho expandido** de tamanho n . O grafo O_{m_i} é chamado **vértice expandido** de tamanho m_i para $i = 1, 2, \dots, n$. Analogamente, podemos definir um ciclo expandido de tamanho n ($n \geq 3$).

Proposição 5.9. [45] O conjunto de nulidades de grafos bipartidos com n vértices é $N = \{n - 2i; i = 0, 1, 2, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor\}$.

Proposição 5.10. [45] Seja G um grafo bipartido de ordem $n \geq 4$. Então $\eta(G) = n - 4$ se e somente se G é obtido de um grafo H possivelmente adicionando vértices isolados, onde H é um dos seguintes grafos: a união disjunta de caminhos expandidos, ambos de tamanho 2; um caminho expandido de tamanho 4 ou 5.

Proposição 5.11. [45] Seja G um grafo bipartido regular com $n \geq 6$ vértices. Então $\eta(G) = n - 6$ se e somente se G é um dos seguintes grafos: a união de três caminhos expandidos disjuntos de tamanho 2; um ciclo expandido de tamanho 6 ou 8, e em cada grafo todos os vértices expandidos têm a mesma ordem.

Em nossa primeira contribuição neste capítulo, provaremos que todo valor abaixo da cota exibida na Proposição 5.7 é atingido como nulidade de certas árvores, ou seja, para cada η' no conjunto $\{0, 1, 2, 3, \dots, n - 2\lceil \frac{n-1}{\Delta} \rceil\}$ com a mesma paridade de n existe pelo menos uma árvore $T \in \mathfrak{T}(n, \Delta)$ tal que $\eta(T) = \eta'$. Para a demonstração, usaremos o fato de que para todo grafo bipartido G com n vértices, n é par se e somente se $\eta(G)$ é par. Isto é verdade pois o conjunto de autovalores de um grafo bipartido é simétrico em relação a zero (Proposição 2.1).

Teorema 5.1. *Sejam $n \geq 4$ e $\Delta \geq 2$ inteiros. Para cada valor η' no conjunto $\{0, 1, 2, 3, \dots, n - 2\lceil \frac{n-1}{\Delta} \rceil\}$ com mesma paridade de n existe uma árvore $T \in \mathfrak{T}(n, \Delta)$ tal que $\eta(T) = \eta'$.*

Demonstração. É conhecido que $\eta(P_n) = 0$ se n é par e $\eta(P_n) = 1$ se n é ímpar. Assim, a existência de árvores com nulidade 0 e 1 está garantida e podemos supor que $\Delta > 2$.

Para $n \geq 4$ par e $\Delta \geq 3$, seja $X = \{2, 4, 6, \dots, n - 2\lceil \frac{n-1}{\Delta} \rceil\}$ e tome $\eta' \in X$.

Considere a árvore T cujo conjunto de vértices é $A \cup B$, onde $A = \{v_1, v_2, \dots, v_{n-\eta'+1}\}$ induz o caminho $P_{n-\eta'+1}$ e os vértices de B são vizinhos dos vértices em A de acordo com um dos seguintes casos:

Caso 1: $\eta' - 1 \geq \Delta - 2$.

Ao fazer a divisão Euclidiana de $\eta' - 1$ por $\Delta - 2$ obtemos $\eta' - 1 = q(\Delta - 2) + r$, $0 \leq r \leq \Delta - 3$. Definimos $B = \{u_{i,j} | 1 \leq i \leq q, 1 \leq j \leq \Delta - 2\}$, se $r = 0$ e $B = \{u_{i,j} | 1 \leq i \leq q, 1 \leq j \leq \Delta - 2\} \cup \{u_{q+1,l} | 1 \leq l \leq r\}$, caso contrário. Os vértices em B são folhas de T de tal forma que $N(u_{i,j}) = \{v_{2i}\}$, para cada i, j , $1 \leq i \leq q$, $1 \leq j \leq \Delta - 2$ e $N(u_{q+1,l}) = \{v_{2q+2}\}$, $1 \leq l \leq r$ (veja Figura 5.5). Como o grau de cada um dos vértices de $T_{\eta',\Delta}$ é menor ou igual a Δ temos que $T \in \mathfrak{T}(n, \Delta)$.

Caso 2: $\eta' - 1 < \Delta - 2$.

Neste caso consideramos $B = \{u_1, u_2, \dots, u_{\eta'-1}\}$ cujos elementos são folhas de T tais que a $N(u_i) = \{v_2\}$, para cada $1 \leq i \leq \eta' - 1$.

Consideremos agora $M = \{(v_1, v_2), (v_3, v_4), (v_5, v_6), \dots, (v_{n-\eta'-1}, v_{n-\eta'})\}$. Como os vértices insaturados por M são $v_{n-\eta'+1}$ e os vértices de B e, além disso, o único caminho que liga dois destes vértices conterá necessariamente arestas vizinhas que não pertencem a M , temos que T não admite um caminho M -aumentante (veja Figura 5.5). Então, pela Proposição 5.5 M é um emparelhamento máximo e tem tamanho $\frac{n-\eta'}{2}$. Assim, pela Proposição 5.6 vale que $\eta(T) = n - 2\frac{n-\eta'}{2} = \eta'$. Portanto, $T \in \mathfrak{T}(n, \Delta)$ e $\eta(T) = \eta'$. Se n é ímpar a demonstração é análoga, considerando $X = \{3, 5, \dots, n - 2\lceil \frac{n-1}{\Delta} \rceil\}$. Podemos observar pela construção acima que tal árvore existe para cada nulidade no conjunto X , donde segue o resultado. \square

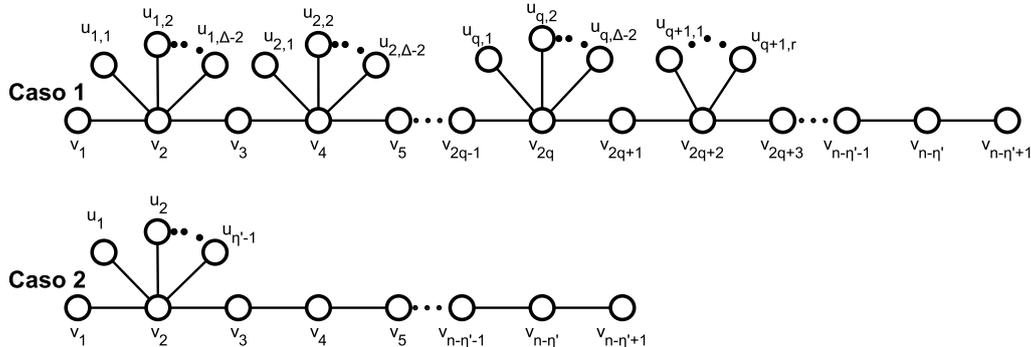


Figura 5.5: Casos 1 e 2 da demonstração do Teorema 5.1.

Na Figura 5.6 apresentamos a família completa das árvores T descritas na prova do Teorema 5.1 para $n = 14$ e $\Delta = 5$. Tais árvores estão denotadas por $T(\eta', \Delta)$,

considerando a nulidade e o grau máximo.

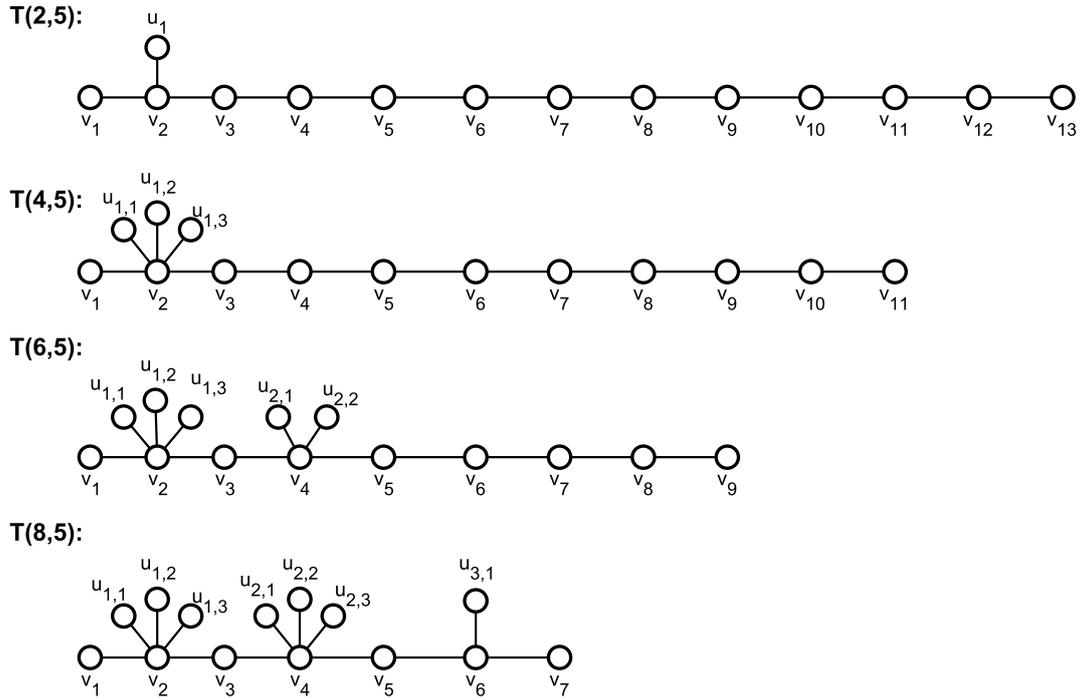


Figura 5.6: Árvores $T(\eta', 5)$, para $\eta' \in X = \{2, 4, 6, 8\}$.

A partir do Teorema 5.1 obtemos a árvore T da Figura 5.7 que pertence a $\mathfrak{T}(14, 7)$ e tem nulidade é igual a 8.

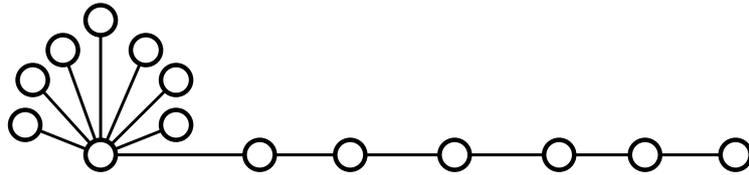


Figura 5.7: Árvore $T \in \mathfrak{T}(14, 7)$ tal que $\eta(T) = 8$.

No artigo [46], o autor sugere uma forma de obter todas as árvores com n vértices para cada valor de nulidade possível.

Proposição 5.12. [46] Seja \mathfrak{T}_n o conjunto de todas as árvores com n vértices.

1. Se $T \in \mathfrak{T}_n$ então $\eta(T) \leq n - 2$ e vale a igualdade se e somente se $T \cong S_n$.
2. Se $T \in \mathfrak{T}_n \setminus S_n$ então $\eta(T) \leq n - 4$ e vale a igualdade se e somente se $T \cong T_1$ ou $T \cong T_2$, onde T_1 e T_2 estão descritas na Figura 5.8.
3. Se $T \in \mathfrak{T}_n \setminus \{S_n, T_1, T_2\}$ então $\eta(T) \leq n - 6$ e vale a igualdade se e somente se $T \cong T_3$ ou $T \cong T_4$ ou $T \cong T_5$, onde T_3, T_4 e T_5 estão descritas na Figura 5.8.

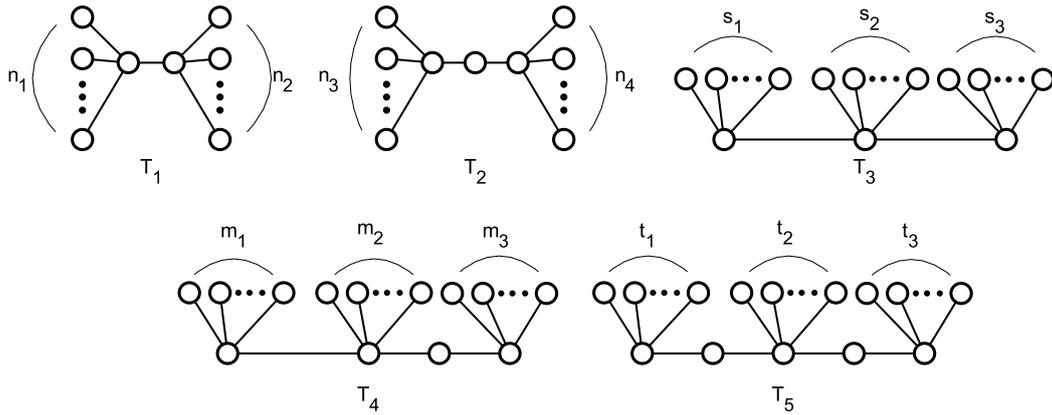


Figura 5.8: Grafos T_1, T_2, T_3, T_4 e T_5 referentes à Proposição 5.12.

Note que a árvore T da Figura 5.7 possui 14 vértices e não é isomorfa aos grafos T_3, T_4 ou T_5 da Figura 5.8. Logo, o item 3. da Proposição 5.12 não descreve todas as árvores com n vértices e nulidade igual a $n - 6$, apesar de enunciar tal fato. Algumas das árvores que descrevemos no Teorema 5.1 não estão contempladas no enunciado da Proposição 5.12.

Observe que o grafo $(k + 1)$ -linha de uma k -árvore não necessariamente é o grafo linha de uma árvore, ou seja, tais classes não coincidem. De fato, na Figura 5.9 exibimos, à esquerda, uma 2-árvore cujo grafo 3-linha (à direita) é $K_{1,3}$, que é um grafo proibido no grafo linha de uma árvore, segundo a Proposição 5.2.

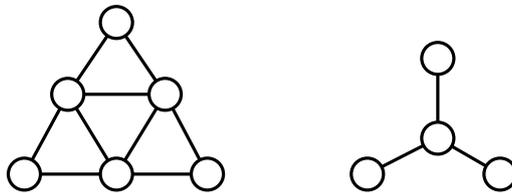


Figura 5.9: Uma 2-árvore e seu grafo 3-linha

Nossa próxima contribuição é o teorema a seguir que generaliza a Proposição 5.2 para o caso destes grafos.

Teorema 5.2. *Seja $k \geq 2$ um inteiro. As seguintes afirmações são equivalentes:*

1. *Existe uma k -árvore G com pelo menos $k + 1$ vértices tal que $H = \ell_{k+1}(G)$.*
2. *H é um grafo bloco conexo livre de $K_{1,k+2}$.*
3. *H é um grafo bloco conexo em que cada vértice de corte está em no máximo $k + 1$ blocos.*

Demonstração. Seja $k \geq 2$ um inteiro. Vamos mostrar as equivalências (1) \Leftrightarrow (2) e (2) \Leftrightarrow (3)

(1) \Rightarrow (2) Vamos mostrar que para cada inteiro $n \geq k + 1$, se G é uma k -árvore com n vértices então $\ell_{k+1}(G)$ é um grafo bloco conexo livre de $K_{1,k+2}$. A prova será feita por indução em n .

De fato, se G tem $k + 1$ vértices, então trata-se do grafo completo K_{k+1} cujo grafo $(k + 1)$ -linha é o grafo trivial com um vértice, donde vale o resultado. Considere $n \geq k + 1$ e suponha que o grafo $(k + 1)$ -linha de qualquer k -árvore com n vértices é um grafo bloco conexo livre de $K_{1,k+2}$. Seja G uma k -árvore de ordem $n + 1$ e H seu grafo $(k + 1)$ -linha. Pela Proposição 5.3, H é livre de $K_{1,k+2}$. Tome $u \in V(G)$ um vértice simplicial de G ; então $JC(u) \cup \{u\}$ é uma $(k + 1)$ -clique de G , que corresponde a um vértice, digamos a , em H . Seja $G' = G - u$. Como o tamanho de cada clique maximal de G é $k + 1$ então claramente $JC(u)$ não é maximal em G' . Como u é um vértice simplicial, o grafo G' é um k -árvore com n vértices, donde pela hipótese de indução temos que seu grafo $(k + 1)$ -linha, digamos H' , é um grafo bloco. Sejam u_1, u_2, \dots, u_p , $p \geq 1$ todos os vértices distintos que formam $(k + 1)$ -cliques $JC(u) \cup \{u_i\}$ em G' , $1 \leq i \leq p$. Cada $(k + 1)$ -clique $JC(u) \cup \{u_i\}$ de G' está associada a um vértice a_i de H' , donde $\{a_1, \dots, a_p\}$ é uma p -clique maximal de H' . Inserir o vértice u em G' para reobter G , resulta na construção de uma nova $(k + 1)$ -clique em G que contém $JC(u)$. Ao mesmo tempo, H é reconstruído ao inserir o vértice a em H' e esse vértice é adjacente aos vértices da clique $\{a_1, \dots, a_p\}$ formando uma $(p + 1)$ -clique maximal. Isso garante que H é um grafo bloco conexo. O resultado segue por indução.

(2) \Rightarrow (1) Agora queremos provar que se H é um grafo bloco conexo com n vértices e livre de $K_{1,k+2}$, então existe uma k -árvore com pelo menos $k + 1$ vértices tal que $\ell_{k+1}(G) = H$. A prova será feita por indução. Se $n = 1$, então claramente H é o grafo $(k + 1)$ -linha da k -árvore K_{k+1} . Seja $n \geq 2$ e suponha que para todo grafo bloco conexo X com n vértices e livre de $K_{1,k+2}$ existe uma k -árvore cujo grafo $(k + 1)$ -linha é X . Seja H^* um grafo bloco conexo livre de $K_{1,k+2}$ com $n + 1$ vértices. Seja v um vértice de H^* que não seja um vértice de corte, ou seja, v pertence a uma única clique maximal de H^* , digamos $C^* = \{v, v_1, v_2, \dots, v_l\}$. Então $H = H^* - v$ é um grafo bloco conexo livre de $K_{1,k+2}$ com n vértices que e pela hipótese de indução existe uma k -árvore G tal que $\ell_{k+1}(G) = H$. Se v não é um vértice pendente de H^* , então os vértices em $C = C^* \setminus \{v\}$ induzem uma clique de H . Portanto, esses vértices são associados a $(k + 1)$ -cliques de G que têm k vértices em comum, digamos u_1, u_2, \dots, u_k . Portanto, ao inserir um vértice u em $V(G)$, de modo que $JC(u) = \{u_1, \dots, u_k\}$, obtém-se uma k -árvore G^* , cujo grafo $(k + 1)$ -linha é H^* . Por outro lado, se v é um vértice pendente de H^* , podemos estudar as possibilidades de seu único vizinho, v_1 . Se v_1 não for um vértice de corte de H , a $(k + 1)$ -clique de G

associada a v_1 terá pelo menos um subconjunto de vértices $\{u_1, \dots, u_k\}$ que não está em nenhuma outra clique maximal de G . Assim, obtemos uma k -árvore G^* ao inserir um vértice u em G de modo que $JC(u) = \{u_1, \dots, u_k\}$, de onde $H^* = \ell_{k+1}(G^*)$. No caso em que v_1 é um vértice de corte de H , o número de componentes conexas de $H - v_1$ é no máximo k , pois H é livre de $K_{1,k+2}$. Logo, a existência de um conjunto $\{u_1, \dots, u_k\} \subset V(G)$ que não é a interseção de cliques maximais de G está garantida. Portanto, de maneira análoga ao caso anterior, obtemos uma k -árvore G^* tal que $G^* = \ell_{k+1}(H^*)$. O resultado segue por indução.

Trivialmente, (2) implica (3), restando provar que (3) implica (2) para completar a prova. Suponha que H seja grafo bloco conexo onde cada vértice de corte está em no máximo $k+1$ blocos. Suponha ainda que $K_{1,k+2}$ seja um subgrafo induzido de H , onde $V(K_{1,k+2}) = \{w, w_1, w_2, \dots, w_{k+2}\}$ e w é o vértice dominante. Então w é um vértice de corte de H pois, caso contrário, o grafo induzido por w_1, w_2, \dots, w_{k+2} em H seria uma clique. Então os vértices w_1, w_2, \dots, w_{k+2} estão em blocos diferentes de H , donde w está em $k+2$ blocos, o que é uma contradição. \square

Pelo teorema anterior podemos concluir que um grafo bloco conexo pode ser o grafo $(k+1)$ -linha de uma k -árvore para valores variados de k . Na Figura 5.10, G_1 é uma árvore, G_2 é uma 2-árvore e G_3 é uma 3-árvore e temos que $H = \ell(G_1)$, $H = \ell_3(G_2)$ e $H = \ell_4(G_3)$.

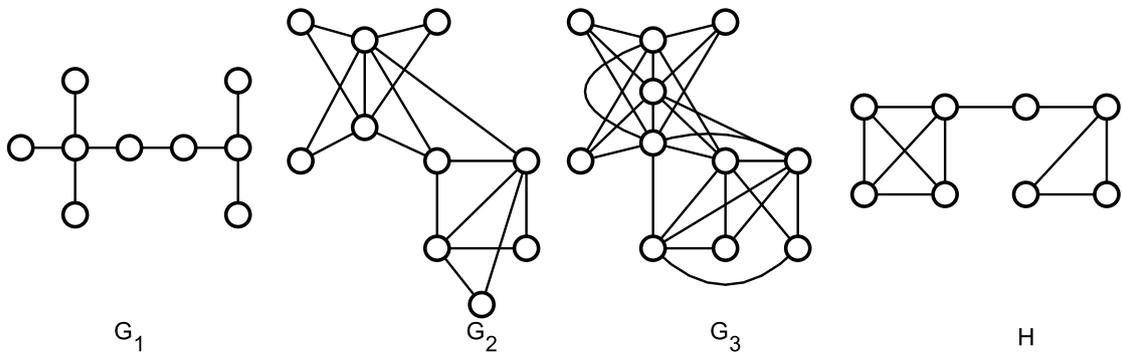


Figura 5.10: $H = \ell(G_1) = \ell_3(G_2) = \ell_4(G_3)$

Por outro lado, para k fixado, podem existir mais do que uma k -árvore com mesmo grafo $(k+1)$ -linha, assim como acontece com árvores. Na Figura 5.11, G_1 , G_2 e G_3 são 2-árvores não isomorfas cujo grafo 3-linha é H .

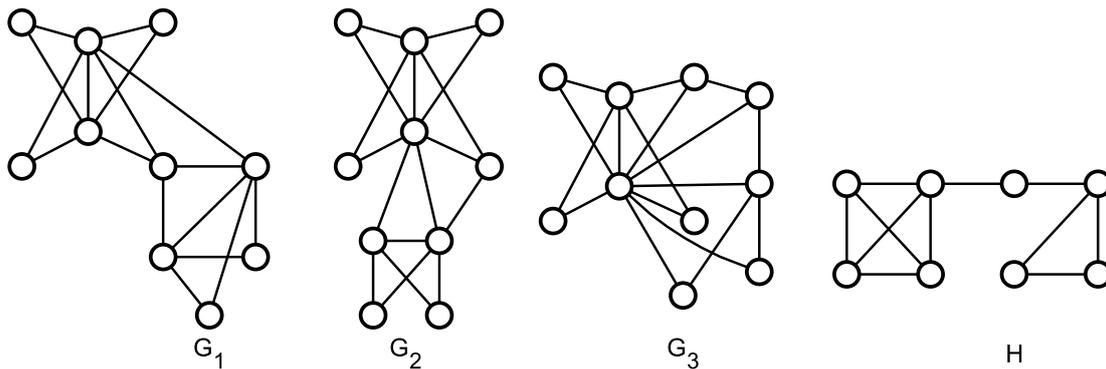


Figura 5.11: $H = \ell_3(G_1) = \ell_3(G_2) = \ell_3(G_3)$

Na Proposição 5.4 vimos que dada uma árvore T , vale que $\eta(\ell(T)) \leq 1$. Levando em consideração que uma árvore é uma 1-árvore, uma abordagem natural seria verificar se $\eta(\ell_{k+1}(G)) \leq k$. No entanto, para $k = 2$, por exemplo, observamos que essa generalização não é válida, como exemplificado na Figura 5.12, em que $\eta(\ell_3(G)) = 4 > k = 2$.

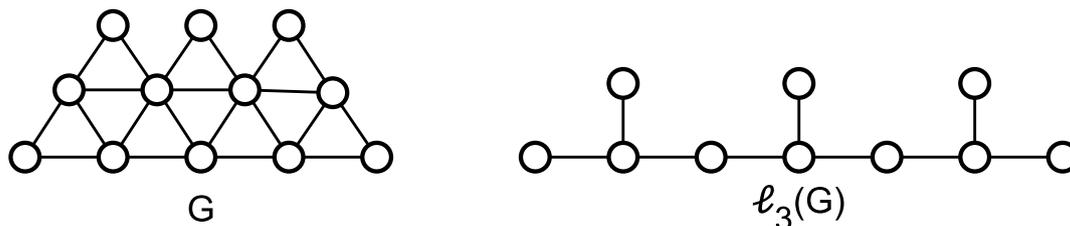


Figura 5.12: 2-árvore G e $\eta(\ell_3(G)) = 4$.

Em geral, podemos provar que para cada $p \geq 2$ e $k \geq 2$, existe uma k -árvore cuja nulidade do seu grafo $(k+1)$ -linha é igual a p , ou seja, na verdade a nulidade de grafos $(k+1)$ -linha de k -árvores pode ser tão grande quanto se queira. Para demonstrar essa afirmação, procedemos como na prova do Teorema 5.1, considerando árvores de uma subfamília de $\mathfrak{T}(n, \Delta)$. De fato, dado $q \geq 1$, denotamos por T_q a árvore com $3q + 1$ vértices construída a partir do caminho P_{2q+1} , cujos vértices são rotulados como $v_0, v_1, v_{1'}, v_2, v_{2'}, \dots, v_q, v_{q'}$, inserindo um vértice u_i em cada um dos vértices v_i , para $1 \leq i \leq q$ (veja a Figura 5.13).

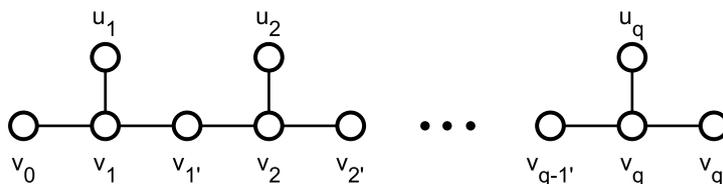


Figura 5.13: T_q .

Observe que, para $q \geq 1$, vale que $\eta(T_q) = q + 1$, já que $M = \{(v_0, v_1), (v_i, v_{i+1}); 1 \leq i \leq q - 1\}$ é um emparelhamento máximo de T_q . Além disso, os vértices de T_q têm graus no máximo 3 para $q \geq 1$. Assim, o Teorema 5.2 afirma que existe uma k -árvore G tal que $\ell_{k+1}(G) = T_q$.

Agora, mostramos como construir uma família infinita de k -árvores, cujos grafos $(k+1)$ -linha são as árvores T_q . De fato, fixemos $k \geq 2$ e $q \geq 1$. Considere os vértices $v_0, v_1, v_{1'}, v_2, v_{2'}, \dots, v_q, v_{q'}$ de T_q . Então, a k -árvore G é tal que cada um dos vértices de T_q corresponde a uma clique maximal de cardinalidade $k+1$ em G , dois desses vértices sendo adjacentes em T_q se e somente se as $(k+1)$ -cliques associadas em G compartilham k vértices. Assim, o caminho induzido em T_q corresponde a um P_{k+1+2q}^k induzido (com a rotulação usual) de G . Como a cardinalidade de uma clique maximal na k -árvore G é $k+1$, existem $k+1$ subcliques de cardinalidade k . Para cada $1 \leq i \leq q$, o vértice v_i em T_q indica a existência de três cliques vizinhas em G , sendo que duas já estão em P_{k+1+2q}^k . Além disso, para cada i , $1 \leq i \leq q$, a clique maximal de G correspondente a v_i compartilha k vértices com a clique maximal correspondente a $v_{i'}$, que é uma das cliques restantes de tamanho k .

Por exemplo, a Figura 5.14 mostra duas 3-árvores diferentes em que a nulidade de seus grafos $(k+1)$ -linha correspondentes são iguais a $p = 5$.

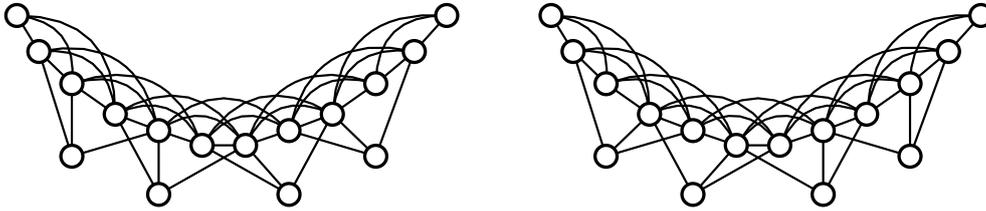


Figura 5.14: 3-árvores cujo grafo 4-linha tem nulidade igual a 5.

Portanto, para cada $q \geq 1$, existe uma k -árvore G tal que $\ell_{k+1}(G) = T_q$, de onde podemos concluir que $\eta(\ell_{k+1}(G)) = \eta(T_q) = q + 1$. Estabelecemos então a seguinte proposição.

Proposição 5.13. *Para cada par de inteiros $p \geq 2$ e $k \geq 2$, existe uma k -árvore G tal que $\eta(\ell_{k+1}(G)) = p$.*

As chamadas **Simple Clique k -árvores**, ou simplesmente SC k -árvores foram introduzidas em [22].

Definição 5.3. [22] O grafo completo com $k+1$ vértices é uma **SC k -árvore**. Uma SC k -árvore com $n+1$ vértices ($n \geq k+1$) é construída de uma SC k -árvore com n vértices ao adicionar-se um vértice adjacente a todos os vértices de uma k -clique Q não escolhida anteriormente na já existente SC k -árvore, e apenas a estes vértices.

As k -árvores da Figura 5.14 são exemplos de SC 3-árvores. Ainda no artigo [22], o seguinte teorema de caracterização é provado.

Teorema 5.3. [22] Para $k \geq 2$ e $n > k$, uma k -árvore G com n vértices é uma SC k -árvore se e somente se $\ell_{k+1}(G)$ é uma árvore.

Usando o Teorema 5.2, podemos reescrever o resultado acima da seguinte maneira.

Proposição 5.14. Uma k -árvore G com $n > k$ vértices é uma SC k -árvore se e somente se $\ell_{k+1}(G)$ é uma árvore com grau máximo igual a $k + 1$.

A Proposição 5.7 nos permite obter uma cota superior para a nulidade de grafos $(k + 1)$ -linha de k -árvores, o que está estabelecido no item (1) do próximo resultado. Além disso, a Proposição 5.14 e nossa caracterização de grafos que são grafos $(k + 1)$ -linha de k -árvores garantem a existência de SC k -árvores cujas nulidades dos seus grafos $(k + 1)$ -linha atingem cada um dos valores possíveis abaixo da cota superior mencionada.

Teorema 5.4. Sejam $k \geq 2$ e $n \geq k + 1$ inteiros.

1. Para cada SC k -árvore G com n vértices, $\eta(\ell_{k+1}(G)) \leq n - k + 2 - 2\lceil \frac{n}{k+1} \rceil$.
2. Para cada $0 \leq \eta' \leq n - k + 2 - 2\lceil \frac{n}{k+1} \rceil$, existe uma SC k -árvore G com n vértices tal que $\eta(\ell_{k+1}(G)) = \eta'$.

Demonstração. (1) Seja G uma SC k -árvore com $n \geq k + 1$ vértices, onde $k \geq 2$ é um número inteiro fixado. Então pela Proposição 5.14, $\ell_{k+1}(G)$ é uma árvore, digamos T , tal que todos os graus de seus vértices são menores ou iguais a $k + 1$. E ainda, como G tem $n - k$ cliques com $k + 1$ vértices, T possui $n - k \geq 1$ vértices. Logo, pela Proposição 5.7, $\eta(\ell_{k+1}(G)) \leq n - k - 2\lceil \frac{n-k-1}{k+1} \rceil = n - k + 2 - 2\lceil \frac{n}{k+1} \rceil$.

(2) Pelo Teorema 5.1, para cada η' em $\{0, 1, 2, \dots, n - k - 2\lceil \frac{n-1}{k+1} \rceil\}$ com a mesma paridade de $n - k$, podemos exibir uma árvore T em $\mathfrak{T}(n - k, k + 1)$ cuja nulidade é η' . Cada árvore em $\mathfrak{T}(n - k, k + 1)$ é um grafo bloco conexo livre de $K_{1,k+2}$. Então, pelo Teorema 5.2, T é o grafo $(k + 1)$ -linha de uma k -árvore, digamos G , com n vértices e pela Proposição 5.14, G é uma SC k -árvore. Portanto, pela observação inicial, segue o resultado. \square

Observamos que a cota superior obtida no teorema anterior generaliza aquela exibida na Proposição 5.7 para o contexto das SC k -árvores.

O Algoritmo Hopcroft-Karp [47] calcula a cardinalidade de um emparelhamento máximo de um grafo bipartido em tempo polinomial. Sendo assim, um procedimento para determinar a nulidade do grafo $(k + 1)$ -linha de uma SC k -árvore consiste em:

1. Para inteiros fixados $k \geq 2$ e $n \geq k + 1$, dada uma SC k -árvore G com n vértices, determine seu grafo $(k + 1)$ -linha. Pela Proposição 5.14, $T = \ell_{k+1}(G)$ é uma árvore com $n - k$ vértices.
2. Utilize o Algoritmo Hopcroft-Karp para determinar o tamanho, $m(T)$, de um emparelhamento máximo de T .
3. Pela Proposição 5.6 a nulidade de T será $\eta(T) = (n - k) - 2m(T)$.

Considerando a proposição acima e nossa caracterização para grafos que são grafos $(k + 1)$ -linha de k -árvores (Teorema 5.2), somos levados a pensar que a nulidade desses grafos deve ser investigada no contexto de nulidade dos grafo de blocos. Esta investigação foi iniciada recentemente em [48], onde é apresentado um algoritmo para identificar se um grafo de bloco é ou não singular.

Capítulo 6

Conclusões e propostas futuras

Nesta tese estudamos propriedades estruturais e espectrais da classe das k -árvores, uma generalização da bastante conhecida família das árvores. Nosso objetivo principal foi fazer paralelos entre essas duas classes. Em geral, vimos que existem tais correspondências, mas as passagens de uma classe a outra precisam ser feitas de forma cuidadosa.

Sob o ponto de vista de noções de distância e diâmetro, garantimos que o diâmetro de k -árvores é dado pela maior das distâncias entre seus vértices simpliciais, similarmente ao que ocorre para árvores, onde o diâmetro é dado pela maior das distâncias entre as folhas. Provamos também que o diâmetro de um particular k -caminho, mais especificamente P_n^2 , é um limitante superior para o diâmetro de k -árvores, enquanto que os caminhos têm o mesmo papel para as árvores.

Nesta tese estudamos também grafos $(k + 1)$ -linha, que são uma generalização dos grafos linha. Usamos este conhecimento para estender um resultado conhecido de caracterização de grafos linha de árvores ao provarmos no Teorema 5.2 que grafos $(k + 1)$ -linha de k -árvores são exatamente os grafos blocos conexos livres de $K_{1,k+2}$. Provamos ainda que a nulidade de grafos $(k + 1)$ -linha de k -árvores pode ser tão grande quanto se queira, resultado formalizado na Proposição 5.13, contrariando a expectativa de que fosse limitada superiormente por k , o que seria uma generalização direta do que ocorre para árvores - é conhecido que grafos linha de árvores possuem nulidade máxima igual a 1. Por outro lado, provamos que para a subclasse das SC k -árvores, fixando n e k , a nulidade de seu grafo $(k + 1)$ -linha é limitada.

Estudamos também algumas algumas propriedades espectrais dos grafos P_n^2 , uma subfamília dos k -caminhos. Determinamos uma expressão para o seu polinômio característico e a partir dele obtivemos informações sobre os autovalores 0 e -1 .

Acreditamos que algumas contribuições desta tese têm potencial para servirem de ponto de partida para pesquisas futuras sobre propriedades estruturais e espectrais de k -árvores. Apresentamos a seguir algumas propostas de desenvolvimento para

alguns tópicos.

Uma proposta imediata de estudo é analisar as matrizes obtidas no Corolário 3.3 e buscar informações sobre autovalores de P_n^2 , multiplicidade de autovalores inteiros e também buscar uma fatoração do polinômio característico destes grafos. O Algoritmo 3.1 também pode ser executado para grafos P_n^k , $k \geq 3$, com conjuntos simétricos similares aos que utilizamos para P_n^2 . Então uma ideia de trabalho futuro seria obter, a partir da decomposição construída pelo algoritmo, informações espectrais sobre a classe dos grafos potência k do caminho. Além disso, provar a Conjectura 3.1: se $\lambda = 0$ é autovalor de P_n^2 então $n \equiv 1 \pmod{3}$ é uma proposta de investigação que pode levar a outros desenvolvimentos.

Com base no conhecimento adquirido sobre grafos $(k + 1)$ -linha de k -árvores e suas nulidades, o seguinte resultado, do artigo [49], pode nos apontar um caminho para complementar esse estudo.

Teorema 6.1. [49] Seja G um grafo com número ímpar de árvores geradoras. Então $\eta(\ell(G)) \leq 1$.

No contexto de k -árvores, sabemos que $\eta(\ell_{k+1}(G))$ pode ser maior do que k , como vimos na Proposição 5.13. Levando em consideração o teorema acima, uma abordagem de estudo é verificar se é possível que impondo alguma restrição ao número de árvores geradoras de uma k -árvore G valerá que $\eta(\ell_{k+1}(G)) \leq k$.

Durante nossos estudos, observamos que os grafos P_n^k são os k -caminhos que possuem comportamento mais semelhante ao dos caminhos, P_n , quando comparamos características de k -árvores e árvores. Uma evidência mais natural dessa comparação está relacionada à própria definição recursiva de k -árvores (que pode naturalmente ser interpretada para árvores, com $k = 1$). A saber, os caminhos são “aumentados” ao escolher o último vértice simplicial criado como vizinho. Já os k -caminhos P_n^k são “aumentados” quando o novo vértice adicionado escolhe a k -clique que contém o último vértice simplicial criado como *join-clique*. Sendo assim, P_n^k são candidatos naturais a generalizações de resultados de árvores envolvendo os caminhos P_n . Naturalmente, podemos fazer a mesma associação entre estrelas e k -estrelas.

Vimos no texto desta tese dois resultados espectrais para árvores (Teoremas 2.6 e 2.5) que reescrevemos em um enunciado único a seguir. Note que podemos trocar a matriz L pela matriz Q pois árvores são grafos bipartidos (veja Teorema 2.4).

Teorema 6.2. [14][15] Dentre todas as árvores com n vértices, o caminho P_n tem o menor raio Q -espectral e a estrela S_n tem o maior raio Q -espectral.

Vimos também a demonstração do seguinte teorema que garante que, dentre as k -árvores, aquela com o maior raio Q -espectral é a k -estrela.

Teorema 6.3. [24] Seja G uma k -árvore com n vértices tal que $n \geq k + 1$. Então $q_1(G) \leq q_1(S_{k,n-k})$, e a igualdade vale se e somente se $G \simeq S_{k,n-k}$.

Levando em conta as relações entre caminhos e potências do caminho e após testes computacionais conjecturamos que a seguinte afirmação seja verdadeira:

Conjectura 6.1. *Dentre todas as k -árvores, aquela que possui menor raio \mathbf{Q} -espectral é P_n^k .*

A principal diferença entre caminhos e sua generalização, os k -caminhos é que na classe dos caminhos existe um grafo para cada n , o que não é verdade para k -caminhos. Faz sentido conjecturar que:

Conjectura 6.2. *Dentre todos os k -caminhos, aquele que possui maior raio \mathbf{Q} -espectral é o k -leque $K_{k-1} \vee P_{n-k+1}$ e o que possui menor raio \mathbf{Q} -espectral é P_n^k .*

Para o caso $k = 2$ essa afirmação é verdadeira como vimos no Teorema 2.13.

Referências Bibliográficas

- [1] BEINEKE, L. W., PIPPERT, R. E. “The number of labeled k -dimensional trees”, *Journal of Combinatorial Theory*, v. 6, n. 2, pp. 200–205, 1969.
- [2] BOROVIČANIN, B., GUTMAN, I. “Nullity of graphs”, *Applications of Graph Spectra, Math. Inst., Belgrade*, pp. 107–122, 2009.
- [3] LI, W., CHANG, A. “On the trees with maximum nullity”, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, v. 56, n. 3, pp. 501–508, 2006.
- [4] MOLINA, G., JAUME, D. A. “Maximum and minimum nullity of a tree degree sequence”, *arXiv preprint arXiv:1806.02399*, 2018.
- [5] GHORBANI, E., MOHAMMADIAN, A., TAYFEH-REZAIE, B. “Integral trees with given nullity”, *Discrete Mathematics*, v. 339, n. 1, pp. 157–164, 2016.
- [6] FIORINI, S., GUTMAN, I., SCIRIHA, I. “Trees with maximum nullity”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 397, pp. 245–251, 2005.
- [7] HARARY, F. *Graph theory and theoretical physics*. Acad. Press, 1967.
- [8] GUTMAN, I., SCIRIHA, I. “On the nullity of line graphs of trees”, *Discrete Mathematics*, v. 232, n. 1-3, pp. 35–45, 2001.
- [9] GRAHAM, R. L., POLLAK, H. O. “On the addressing problem for loop switching”, *Bell System Technical Journal*, v. 50, n. 8, pp. 2495–2519, 1971.
- [10] LIN, K. “An elementary proof of the Perron-Frobenius theorem for non-negative symmetric matrices”, *Chinese Journal of Physics*, v. 15, n. 4, pp. 283–285, 1977.
- [11] HORN, R. A., JOHNSON, C. R. *Matrix Analysis*. Cambridge University Press, 1990.
- [12] HONG, Y., ZHANG, X.-D. “Sharp upper and lower bounds for largest eigenvalue of the Laplacian matrices of trees”, *Discrete Mathematics*, v. 296, n. 2-3, pp. 187–197, 2005.

- [13] GRONE, R., MERRIS, R., SUNDER, V. S. “The Laplacian spectrum of a graph”, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, v. 11, n. 2, pp. 218–238, 1990.
- [14] PETROVIĆ, M., GUTMAN, I. “The path is the tree with smallest greatest Laplacian eigenvalue”, *Kragujevac Journal of Mathematics*, v. 24, n. 24, pp. 67–70, 2002.
- [15] GUTMAN, I. “The star is the tree with greatest greatest Laplacian eigenvalue”, *Kragujevac Journal of Mathematics*, v. 24, n. 24, pp. 61–65, 2002.
- [16] BODLAENDER, H. L. “A tourist guide through treewidth”, *Acta cybernetica*, v. 11, n. 1-2, pp. 1, 1994.
- [17] BODLAENDER, H. L. “A partial k -arboretum of graphs with bounded treewidth”, *Theoretical Computer Science*, v. 209, n. 1-2, pp. 1–45, 1998.
- [18] ARNBORG, S., CORNEIL, D. G., PROSKUROWSKI, A. “Complexity of finding embeddings in a k -tree”, *SIAM Journal on Algebraic Discrete Methods*, v. 8, n. 2, pp. 277–284, 1987.
- [19] SHOOK, J. M., WEI, B. “Some properties of k -trees”, *Discrete Mathematics*, v. 310, n. 17-18, pp. 2415–2425, 2010.
- [20] BROERSMA, H., XIONG, L., YOSHIMOTO, K. “Toughness and hamiltonicity in k -trees”, *Discrete Mathematics*, v. 307, n. 7-8, pp. 832–838, 2007.
- [21] KABELA, A. “Long paths and toughness of k -trees and chordal planar graphs”, *Discrete Mathematics*, v. 342, n. 1, pp. 55–63, 2019.
- [22] MARKENZON, L., JUSTEL, C. M., PACIORNIK, N. “Subclasses of k -trees: characterization and recognition”, *Discrete Applied Mathematics*, v. 154, n. 5, pp. 818–825, 2006.
- [23] CHENG, Y.-J., LIN, J. C.-H. “Graph families with constant distance determinant”, *The Electronic Journal of Combinatorics*, v. 25, n. 4, pp. 4–45, 2018.
- [24] ZHANG, M., LI, S. “Corrigendum to “On the signless Laplacian spectra of k -trees” [Linear Algebra Appl. 467 (2015) 136–148]”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 485, pp. 527–530, 2015.
- [25] YU, G., FENG, L., ILIĆ, A., et al. “The signless Laplacian spectral radius of bounded degree graphs on surfaces”, *Applicable Analysis and Discrete Mathematics*, v. 9, n. 2, pp. 332–346, 2015.

- [26] DAS, K. C., GUO, J.-M. “Laplacian eigenvalues of the second power of a graph”, *Discrete Mathematics*, v. 313, n. 5, pp. 626–634, 2013.
- [27] DAS, K. C., GUO, J.-M. “Eigenvalues of the k -th power of a graph”, *Mathematische Nachrichten*, v. 289, n. 13, pp. 1585–1593, 2016.
- [28] AN, X., WU, B. “The Wiener index of the k th power of a graph”, *Applied Mathematics Letters*, v. 21, n. 5, pp. 436–440, 2008.
- [29] YU, G. “On the least distance eigenvalue of a graph”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 439, n. 8, pp. 2428–2433, 2013.
- [30] PROSKUROWSKI, A. “Recursive graphs, recursive labelings and shortest paths”, *SIAM Journal on Computing*, v. 10, n. 2, pp. 391–397, 1981.
- [31] PATIL, H. “Further characterizations and Helly-property in k -trees”, *Mapana-Journal of Sciences*, v. 15, n. 3, pp. 1–8, 2016.
- [32] DIESTEL, R. *Graph Theory*. Springer, 2000.
- [33] SONG, L., STATON, W., WEI, B. “Independence polynomials of k -tree related graphs”, *Discrete Applied Mathematics*, v. 158, n. 8, pp. 943–950, 2010.
- [34] JIA, J., YANG, B., LI, S. “On a homogeneous recurrence relation for the determinants of general pentadiagonal Toeplitz matrices”, *Computers & Mathematics with Applications*, v. 71, n. 4, pp. 1036–1044, 2016.
- [35] FRITSCHER, E. *Decomposição de espectros de grafos e aplicações*. Tese de Doutorado, UFRGS, 2014.
- [36] POKORNÝ, M., HÍC, P., STEVANOVIĆ, D., et al. “On distance integral graphs”, *Discrete Mathematics*, v. 338, n. 10, pp. 1784 – 1792, 2015. Seventh Czech-Slovak International Symposium on Graph Theory, Combinatorics, Algorithms and Applications, Košice 2013.
- [37] OLIVEIRA, A. S., DE FREITAS, M. A. A., VINAGRE, C. T., et al. “On $(k + 1)$ -line graphs of k -trees and their nullities”, *Linear Algebra and its Applications*, 2020.
- [38] LÊ, V. B. “Perfect k -line graphs and k -total graphs”, *Journal of Graph Theory*, v. 17, n. 1, pp. 65–73, 1993.
- [39] PRISNER, E. *Graph Dynamics*. Chapman and Hall/CRC, 1995.

- [40] GRAOVAC, A., GUTMAN, I., TRINAJSTIĆ, N. *Topological approach to the chemistry of conjugated molecules*, v. 4. Springer Science & Business Media, 2012.
- [41] SCIRIHA, I. “On singular line graphs of trees”, *Congressus Numerantium*, , n. 135, pp. 73–91, 1998.
- [42] MARINO, M. C., SCIRIHA, I., SIMIĆ, S., et al. “More about singular line graphs of trees”, *Publications de l’Institut Mathématique, Nouvelle Série*, v. 79, n. 93, pp. 1–12, 2006.
- [43] BERGE, C. “Two theorems in graph theory”, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, v. 43, n. 9, pp. 842, 1957.
- [44] CVETKOVIĆ, D. M., GUTMAN, I. M. “The algebraic multiplicity of the number zero in the spectrum of a bipartite graph”, *Matematički Vesnik*, v. 9, n. 56, pp. 141–150, 1972.
- [45] FAN, Y.-Z., QIAN, K.-S. “On the nullity of bipartite graphs”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 430, n. 11-12, pp. 2943–2949, 2009.
- [46] LI, S. “On the nullity of graphs with pendent vertices”, *Linear Algebra and its Applications*, v. 429, n. 7, pp. 1619–1628, 2008.
- [47] HOPCROFT, J. E., KARP, R. M. “An $n^{\frac{5}{2}}$ algorithm for maximum matchings in bipartite graphs”, *SIAM Journal on computing*, v. 2, n. 4, pp. 225–231, 1973.
- [48] SINGH, R., SHAKED-MONDERER, N., BERMAN, A. “Linear time algorithm to check the singularity of block graphs”. In: *Conference on Algorithms and Discrete Applied Mathematics*, pp. 77–90. Springer, 2019.
- [49] BAPAT, R. “A note on singular line graphs”, *Bull. Kerala Math. Assoc*, v. 8, n. 2, pp. 207–209, 2011.