



UM ESTUDO SOBRE ORDENAÇÃO DE ÁRVORES

Diego de Souza Maceira Belay

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 Aguiéiras Alvarez de
Freitas
Celso Marques da Silva Junior

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2022

UM ESTUDO SOBRE ORDENAÇÃO DE ÁRVORES

Diego de Souza Maceira Belay

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA 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.

Orientadores: Maria Aguiéiras Alvarez de Freitas
Celso Marques da Silva Junior

Aprovada por: Prof. Maria Aguiéiras Alvarez de Freitas
Prof. Celso Marques da Silva Junior
Prof. Nair Maria Maia de Abreu
Prof. Lino Guimarães Marujo
Prof. Renata Raposo Del-Vecchio
Prof. Cybele Tavares Maia Vinagre
Prof. Carla Silva Oliveira

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
FEVEREIRO DE 2022

Belay, Diego de Souza Maceira

Um estudo sobre ordenação de árvores/Diego de Souza Maceira Belay. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2022.

XIV, 70 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Maria Agueiras Alvarez de Freitas

Celso Marques da Silva Junior

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia de Produção, 2022.

Referências Bibliográficas: p. 65 – 68.

1. Grafos. 2. Teoria Espectral de Grafos. 3. Conectividade. I. Freitas, Maria Agueiras Alvarez de *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia de Produção. III. Título.

*Às minhas sobrinhas,
Beatriz, Elena, Amora,
Laura e Aurora.*

Agradecimentos

À professora Marisa Leal, por sempre ser como uma mãe para mim e por estar presente em todos os momentos importantes que passei na UFRJ.

Ao meu orientador Celso Marques da Silva Jr., por todo o apoio, incentivo, esforço e dedicação que foram extremamente importantes durante este trabalho.

À minha orientadora Maria Aguiéiras A. de Freitas, por todas as oportunidades e ensinamentos que foram essenciais na minha formação.

À professora Laura Patuzzi (*in memorian*), pela ajuda e apoio no início desta jornada.

Às professoras Cybele Tavares Maia Vinagre, Nair M. Maia de Abreu e Renata Raposo Del-Vecchio, pelas correções e sugestões que ajudaram a melhorar este trabalho.

A todos os componentes do grupo TEG-Rio, pela colaboração e pelo companheirismo.

A todos os funcionários do PEP, pela atenção e pelo profissionalismo.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro na realização deste trabalho.

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

UM ESTUDO SOBRE ORDENAÇÃO DE ÁRVORES

Diego de Souza Maceira Belay

Fevereiro/2022

Orientadores: Maria Aguietas Alvarez de Freitas

Celso Marques da Silva Junior

Programa: Engenharia de Produção

O objetivo deste trabalho é estudar a ordenação de árvores a partir da conectividade algébrica e dos índices das matrizes A_α , a família de matrizes que são a combinação linear convexa das matrizes de adjacência e diagonal dos graus, buscando comparar e expandir diferentes resultados presentes na literatura. No estudo envolvendo a conectividade algébrica, introduzimos quatro novas classes de árvores que, junto a uma busca computacional, possibilitaram a caracterização de todas as árvores que possuem conectividade algébrica maior ou igual a $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. Além disso, generalizamos resultados clássicos de ordenação de árvores envolvendo as matrizes de adjacência e laplaciana através do estudo das matrizes A_α . Consideramos este problema quando, além do número de vértices, o grau máximo ou o diâmetro são parâmetros fixados e, por fim, determinamos as árvores que ocupam da terceira até a sexta posições na ordenação de árvores com n vértices pelos índices dessas matrizes.

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

A STUDY ABOUT ORDERING TREES

Diego de Souza Maceira Belay

February/2022

Advisors: Maria Aguiéiras Alvarez de Freitas

Celso Marques da Silva Junior

Department: Production Engineering

The goal of this work is to study the ordering of trees by algebraic connectivity and the indices of the A_α matrices, the family of matrices that are the linear convex combination of the adjacency and the diagonal matrix of the degrees, trying to compare and expand different results present in the literature. In the study involving algebraic connectivity, we introduce four new classes of trees that, together with a computational search, enabled the characterization of all trees that have algebraic connectivity greater than or equal to $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. Furthermore, we generalize classical tree ordering results involving the adjacency and Laplacian matrices by studying the A_α matrices. We consider this problem when, in addition to the number of vertices, the maximum degree or the diameter are fixed parameters and, finally, we determine the trees that takes the third to sixth positions in the order of trees with n vertices by the indices of these matrices.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xii
Lista de Símbolos	xiii
1 Introdução	1
2 Conceitos Básicos	3
2.1 Teoria de Grafos	3
2.2 Teoria de Matrizes	6
2.3 Teoria Espectral de Grafos	8
3 Ordenação de Árvores	10
3.1 Índice da Matriz de Adjacência	10
3.2 Índice da Matriz Laplaciana	17
3.3 Relação entre as ordenações	19
4 Conectividade Algébrica	21
4.1 Matriz <i>bottleneck</i>	21
4.2 Ordenação de árvores	24
4.3 As árvores $T(k, p, q)$ e $T(j, k, p, q)$	27
5 Árvores com conectividade algébrica maior ou igual a $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$	31
5.1 Novas Classes	31
5.2 Resultados Auxiliares	32
5.3 Resultados Principais	43
5.4 Árvores com conectividade algébrica maior ou igual a $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$	44
6 Ordenação de árvores pelo α-índice	47
6.1 Matriz A_α	47
6.2 Alguns resultados importantes	48
6.3 Árvores de diâmetro 3	52

6.4	Árvores de diâmetro 4	56
6.5	Ordenação em \mathcal{T}_n	60
7	Considerações finais	63
	Referências Bibliográficas	65
	Índice Remissivo	69

Lista de Figuras

2.1	$T(n, b; h_1, \dots, h_b)$.	5
2.2	$T(n, r, s; a_1, \dots, a_r; b_1, \dots, b_s)$.	5
2.3	Árvore $T_{n,d}$.	6
3.1	Árvore $V(n - 3, 1, 3)$.	11
3.2	Árvore $V(n - 4, 2, 3)$.	11
3.3	Árvore $T_{n,4}$.	11
3.4	Árvore $V(n - 4, 1, 4)$.	12
3.5	Árvore $V(n - 5, 3, 3)$.	12
3.6	Árvore $T(n, n - 4; 2, 1, 0, \dots, 0)$.	12
3.7	Árvore $T(n, n - 4; 1, 1, 1, 0, \dots, 0)$.	13
3.8	Árvores T e T_0 .	14
3.9	<i>Grafting</i> de uma aresta.	14
3.10	$G_{u,v}^1(k, l)$ e $G_{u,v}^1(k + 1, l - 1)$.	15
3.11	Árvore $T(n, 3; n - 5, 1, 0)$.	16
3.12	Árvore $T_{n,5}$.	16
3.13	Árvore $V(n - 5, 2, 4)$.	16
3.14	Árvore $V(n - 5, 1, 5)$.	16
3.15	Árvore $V(n - 6, 4, 3)$.	16
4.1	Árvore $V(k, l, 3)$.	24
4.2	Árvore $V(s, t, d)$, $n = s + t + d - 1$.	25
4.3	Árvore $P(k, l, d)$.	25
4.4	Árvore $D(p_1, 1, \dots, 1, p_{d-1})$.	26
4.5	Árvore $D(1, \dots, 1, p_{\frac{d-1}{2}}, p_{\frac{d+1}{2}}, 1, \dots, 1)$.	26
4.6	Árvore $D(1, \dots, 1, p_k, 1, \dots, 1, p_{d-k}, 1, \dots, 1)$.	26
4.7	Árvore $T(k, p, q)$.	27
4.8	Árvores $T(0, 0, 12)$, $T(0, 1, 10)$ e $T(0, 2, 8)$.	28
4.9	Árvores $T(1, 0, 9)$, $T(1, 1, 7)$ e $T(2, 1, 4)$.	28
4.10	Árvore $T(j, k, p, q)$.	29
5.1	Árvore enraizada $T(i, j, k, p, q)$.	32

5.2	$V(26, 4, 3)$.	33
5.3	$T(30, 24; 4, 1, 0, \dots, 0)$ e $T(30, 3; 25, 1, 0)$.	33
5.4	$T(21, 4; 15, 1, 0, 0)$.	34
5.5	$T(21, 14; 5, 1, 0, \dots, 0)$.	34
5.6	$T(30, 2; 25, 2)$.	34
5.7	$T(30, 23; 4, 2, 0, \dots, 0)$ e $T(30, 3; 24, 2, 0)$.	35
5.8	$T(21, 4; 14, 2, 0, 0)$.	35
5.9	$T(21, 13; 5, 2, 0, \dots, 0)$.	35
5.10	$T(21, 12; 4, 2, 2, 0, \dots, 0)$ e $T(21, 3; 13, 2, 2)$.	36
5.11	$T(15, 4; 4, 2, 2, 2)$.	36
5.12	$T(10, 2; 4, 3)$.	36
5.13	$T(24, 18, 2; 1, 0, \dots, 0; 1, 0)$.	37
5.14	$T(17, 10, 3; 1, 0, \dots, 0; 1, 0, 0)$.	37
5.15	$T(8, 1, 1; 2; 2)$.	37
5.16	$T(12, 2, 3; 2, 2; 1, 0, 0)$.	38
5.17	$T(13, 4, 2; 2, 2, 0, 0; 1, 0)$.	38
5.18	$T(24, 17, 2; 2, 0, \dots, 0; 1, 0)$.	38
5.19	$T(24, 16, 3; 2, 0, \dots, 0; 1, 0, 0)$.	38
5.20	$T(11, 2, 4; 2, 0; 1, 0, 0, 0)$.	39
5.21	$T(10, 1, 4; 2; 1, 0, 0, 0)$.	39
5.22	$T(9, 1, 2; 3; 1, 0)$.	39
5.23	$T(9, 1, 1; 3; 2)$.	40
5.24	$T(9, 1, 1; 4; 1)$.	40
5.25	T'_1, T'_2, T'_3, T'_4 and T'_5 .	40
5.26	P_7	41
5.27	$T(1, j - 1, k, p, q + 4)$ e $T(1, j, k, p, q)$	42
5.28	Árvores enraizadas T_A, T_B, T_C, T_D e T_E .	45
6.1	Árvore $V(k, l, 3)$.	52

Lista de Tabelas

3.1	Ordenação de árvores a partir dos índices das matrizes de adjacência e laplaciana.	20
5.1	Árvores com conectividade algébrica maior que $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$ que não estão em $\bigcup_{i=1}^{10} C_i$	46

Lista de Símbolos

C_n	ciclo com n vértices, p. 4
$D(p_1, \dots, p_{d-1})$	<i>caterpillar</i> com diâmetro d , p. 4
$G - e$	retira-se do grafo G a aresta e , p. 3
$G - v$	retira-se do grafo G o vértice v , p. 3
$G_{u,v}^1(k, l)$	grafo $G_{u,v}^1(k, l)$, p. 15
$G_{u,v}^2(k, l)$	grafo $G_{u,v}^2(k, l)$, p. 15
$G_1 \simeq G_2$	G_1 isomorfo a G_2 , p. 4
$G_u(k, l)$	grafo $G_u(k, l)$, p. 14
K_n	grafo completo com n vértices, p. 3
K_{p_1, p_2}	grafo bipartido completo, p. 4
$N(v)$	vizinhança do vértice v , p. 3
$P(k, l, d)$	árvore $P(k, l, d)$, p. 25
P_n	caminho com n vértices, p. 4
S_n e $K_{1, n-1}$	estrela com n vértices, p. 4
$T(n, b; h_1, \dots, h_b)$	árvore de diâmetro 4, p. 4
$T(n, r, s; a_1, \dots, a_r; b_1, \dots, b_s)$	árvore de diâmetro 5, p. 5
$T^{(\Delta)}$	árvore com grau máximo Δ , p. 16
$T_{n,d}$	árvore $T_{n,d}$, p. 5
$T_{n,d}(i)$	árvore $T_{n,d}(i)$, p. 5
$T_{n,d}(i, j)$	árvore $T_{n,d}(i, j)$, p. 5

$V(s, t, d)$	dupla vassoura com diâmetro d , p. 4
$\Delta(G)$	grau máximo do grafo G , p. 3
$\delta(G)$	grau mínimo do grafo G , p. 3
\mathcal{T}_n	conjunto das árvores de ordem n , p. 5
$\mathcal{T}_n^{(\Delta)}$	conjunto das árvores com n vértices e grau máximo Δ , p. 5
$\mathcal{T}_{n,d}$	conjunto das árvores com n vértices e diâmetro d , p. 5
\overline{G}	grafo complementar de G , p. 3
$d(v)$	grau do vértice v , p. 3
$d(v_i, v_j)$	distância do vértice v_i ao vértice v_j , p. 4
$diam(G)$	diâmetro do grafo G , p. 4
uv	aresta que incide nos vértices u e v , p. 3

Capítulo 1

Introdução

A Teoria de Grafos é um ramo da matemática que tem recebido destaque nos últimos anos por possuir aplicações em diferentes áreas, como Estrutura de Dados [1], Química [2] e até mesmo no Ensino de Matemática [3]. Neste trabalho, nos aprofundamos na Teoria Espectral de Grafos, que estuda propriedades de um grafo a partir de matrizes a ele associadas. Dentre essas matrizes, destacamos a matriz de adjacência, a matriz laplaciana, a matriz laplaciana sem sinal e as matrizes A_α , obtida através da combinação linear convexa das matrizes de adjacência e matriz diagonal dos graus, proposta por NIKIFOROV [4].

O estudo da ordenação de grafos sempre foi um objeto de interesse dentro da Teoria Espectral de Grafos. Para as árvores, particularmente, vários trabalhos envolvendo a ordenação a partir de diferentes invariantes foram publicados, como o índice da matriz de adjacência [5], índice da matriz laplaciana [6], segundo maior autovalor laplaciano [7], conectividade algébrica [8], energia [9], índice de Wiener [10] e outros. Dentre estes invariantes utilizados, a conectividade algébrica tem recebido muita atenção ([8, 11–13]). O nosso objetivo neste trabalho é estudar a ordenação de árvores a partir da conectividade algébrica e do índice das matrizes A_α .

Este trabalho está estruturado da seguinte forma: no Capítulo 2 encontram-se os conceitos e resultados básicos da Teoria de Grafos, Teoria de Matrizes e Teoria Espectral de Grafos; no Capítulo 3 é feito um levantamento de resultados envolvendo ordenação de árvores a partir dos índices das matrizes de adjacência e laplaciana, focando nas árvores que maximizam esses autovalores, em especial, quando apenas o número de vértices é um parâmetro fixado ou quando, adicionalmente, o grau máximo ou diâmetro também estão fixados; no Capítulo 4, destacamos alguns resultados envolvendo a conectividade algébrica e a ordenação a partir deste parâmetro. Neste capítulo, também apresentamos o conceito de pontos limites para a conectividade algébrica, proposto por KIRKLAND [14], e os trabalhos de YUAN *et al.* [15] e WANG e TAN [16], que encontraram classes que maximizam a conectividade algébrica descrevendo, respectivamente, todas as árvores a partir de uma determinada

ordem cujas conectividades algébricas são maiores que $2 - \sqrt{3}$, ou estão no intervalo $[\frac{5-\sqrt{21}}{2}, 2 - \sqrt{3})$.

No Capítulo 5, temos as nossas primeiras contribuições que foram publicadas em BELAY *et al.* [17], onde expandimos os trabalhos de YUAN *et al.* [15] e WANG e TAN [16], definindo quatro classes de árvores em que todas possuem conectividade algébrica no intervalo $[2(1 - \cos(\frac{\pi}{7})), 2 - \sqrt{3})$ e determinando todas as árvores com pelo menos 32 vértices que possuem conectividade algébrica maior ou igual a $2(1 - \cos(\frac{\pi}{7}))$. Além disso, utilizando os *softwares Nauty and Traces* [18] e *Sage-Math* [19] fazemos uma busca computacional e listamos todas as árvores com menos de 32 vértices que possuem conectividade algébrica maior ou igual a $2(1 - \cos(\frac{\pi}{7}))$. Desta forma, como principal resultado, caracterizamos todas as árvores que possuem a conectividade algébrica maior ou igual a esse valor. No Capítulo 6, estudamos as matrizes A_α , dando continuidade aos trabalhos de NIKIFOROV *et al.* [20] e GUO e ZHOU [21], que determinaram as duas primeiras árvores que maximizam os índices dessas matrizes. Nesse capítulo determinamos as próximas quatro árvores que maximizam esses autovalores. Também estudamos a ordenação de árvores quando o diâmetro ou grau máximo são fixados, generalizando resultados já conhecidos para as matrizes de adjacência e laplaciana. Finalmente, no Capítulo 7, expomos nossas considerações finais e nossas propostas para a continuidade desta pesquisa.

Capítulo 2

Conceitos Básicos

Buscamos neste capítulo apresentar resultados e definições da Teoria de Grafos, Teoria de Matrizes e Teoria Espectral de Grafos que serão necessários ao longo deste trabalho.

2.1 Teoria de Grafos

Um grafo G é uma estrutura que consiste num par de conjuntos finitos $V(G)$, de $n \geq 1$ *vértices*, e $E(G)$, de $m \geq 0$ *arestas*, onde $E(G)$ é um conjunto formado por pares não ordenados de vértices distintos e a cardinalidade de $V(G)$ é dita *ordem* de G . Dizemos que dois vértices u e v de G são *adjacentes* se existe uma aresta ligando-os, ou seja, se $\{u, v\} \in E(G)$. Representamos a aresta que une dois vértices adjacentes u e v de G por $\{u, v\}$ ou uv . Dizemos que duas arestas diferentes são *adjacentes* quando possuem um vértice em comum. Denotamos por $G - e$ o grafo obtido a partir de G pela remoção da aresta e e por $G - v$ o grafo obtido de G pela remoção do vértice v .

O *complementar* \overline{G} de um grafo G é o grafo tal que $V(\overline{G}) = V(G)$ e dois vértices são adjacentes em \overline{G} se, e somente se, eles não são adjacentes em G .

A *vizinhança* de um vértice v de um grafo G é o conjunto de todos os vértices de G que são adjacentes a ele e será denotada por $N(v)$. O número de vértices adjacentes a um vértice v é chamado de *grau* do vértice v e será denotado por $d(v)$. O *grau máximo* de G é definido como $\Delta(G) = \max\{d(v); v \in V(G)\}$ e o *grau mínimo* de G por $\delta(G) = \min\{d(v); v \in V(G)\}$.

Um grafo G de ordem n é dito *completo*, denotado por K_n , se quaisquer dois vértices de G são adjacentes.

Um grafo G é dito *k-regular*, ou simplesmente *regular*, se $d(v) = k$, $\forall v \in V(G)$. Se $d(v) = 0$ então v é dito um vértice *isolado*. Se $d(v) = n - 1$ então v é dito um vértice *universal*. O grafo *trivial* é aquele que possui apenas um vértice.

Um grafo G é *bipartido* quando o seu conjunto de vértices V pode ser particionado em dois subconjuntos V_1 e V_2 , tais que toda aresta de G conecta vértices de subconjuntos distintos. Um grafo bipartido é dito completo se quaisquer dois vértices de subconjuntos distintos da partição são adjacentes. Sendo $|V_1| = p_1$ e $|V_2| = p_2$, um grafo bipartido completo é denotado por K_{p_1, p_2} .

Um conjunto de vértices é dito ser *independente* se não existem arestas que ligam quaisquer dois vértices desse conjunto.

Dois grafos $G_1 = G_1(V_1, E_1)$ e $G_2 = G_2(V_2, E_2)$ são ditos *isomorfos* se existe uma bijeção $f : V_1 \rightarrow V_2$ tal que $\{v_1, v_2\} \in E_1$ se, e somente se, $\{f(v_1), f(v_2)\} \in E_2$, $\forall v_1, v_2 \in V_1$. Neste caso, escrevemos $G_1 \cong G_2$. Além disso, dizemos que dois vértices u e v são *equivalentes* em G se existe um automorfismo $p : G \rightarrow G$ tal que $p(u) = v$.

Uma *cadeia* é uma sequência de vértices v_1, \dots, v_k de um grafo $G(V, E)$ tal que $\{v_i, v_{i+1}\} \in E$, $1 \leq i \leq k - 1$. Se $v_1 = v_k$, dizemos que a cadeia é *fechada*. Caso contrário, dizemos que a cadeia é *aberta*. Uma cadeia cujos vértices são todos distintos é denominada *caminho*. O caminho com n vértices é representado por P_n . Uma cadeia fechada cujos vértices, exceto v_1 e v_k , são todos distintos, recebe o nome de *ciclo*. O ciclo de n vértices é denotado por C_n . O comprimento de um caminho ou ciclo é obtido pelo número de arestas que o compõem.

Um grafo é *conexo* quando existe um caminho ligando qualquer par de seus vértices. Dizemos que a *distância* do vértice v_i ao vértice v_j num grafo conexo, denotada por $d(v_i, v_j)$, é o menor dos comprimentos dos caminhos que ligam v_i a v_j . O *diâmetro* de um grafo é o máximo das distâncias entre quaisquer dois de seus vértices e é representado por $diam(G)$.

Uma *árvore* é um grafo conexo e acíclico. Em uma árvore, todo vértice de grau 1 é chamado *folha*. A *estrela* com n vértices, S_n , é uma árvore com $n - 1$ folhas. Quando conveniente, por ser um grafo bipartido completo, esta estrela também será denotada por $K_{1, n-1}$.

Caterpillars são árvores cuja remoção de todas as folhas resulta em um caminho. Denotaremos por $D(p_1, \dots, p_{d-1})$ o *caterpillar* de diâmetro d obtido a partir do caminho $P_{d-1} = v_1 v_2 \dots v_{d-1}$, ligando em cada vértice v_i , p_i folhas.

Denotamos por $V(s, t, d)$, as árvores obtidas a partir de um caminho P_{d-1} ligando s vértices a uma extremidade e t vértices à outra extremidade deste caminho. Quando $s = 1$ ou $t = 1$, chamamos de *vassoura*, caso contrário chamamos de *dupla vassoura*. Quando $d = 3$, chamamos de *dupla estrela*.

Uma árvore de ordem n e *diâmetro quatro* pode ser denotada por $T(n, b; h_1, \dots, h_b)$, a árvore obtida a partir das estrelas $K_{1, b}, K_{1, h_1}, \dots, K_{1, h_b}$, identificando as folhas de $K_{1, b}$ e os centros de $K_{1, h_1}, \dots, K_{1, h_b}$, respectivamente, onde $h_1 \geq h_2 \geq \dots \geq h_b \geq 0$, $h_1 \geq h_2 > 0$ e $1 + b + h_1 + \dots + h_b = n$ (veja Figura 2.1).

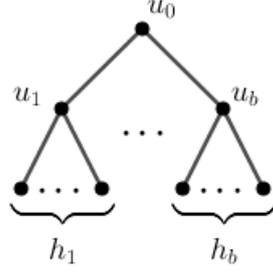


Figura 2.1: $T(n, b; h_1, \dots, h_b)$.

Uma árvore de ordem n e *diâmetro cinco* pode ser denotada por $T(n, r, s; a_1, \dots, a_r; b_1, \dots, b_s)$, a árvore obtida a partir de duas árvores de diâmetro quatro, $T(n_1, r; a_1, \dots, a_r)$ e $T(n_2, s; b_1, \dots, b_s)$, ligando a raiz de cada uma, onde $a_1 \geq a_2 \geq \dots \geq a_r \geq 0$, $b_1 \geq b_2 \geq \dots \geq b_s \geq 0$, $a_1 \geq 1$, $b_1 \geq 1$, $1+r+a_1+\dots+a_r = n_1$, $1+s+b_1+\dots+b_s = n_2$ e $n_1+n_2 = n$ (veja Figura 2.2).

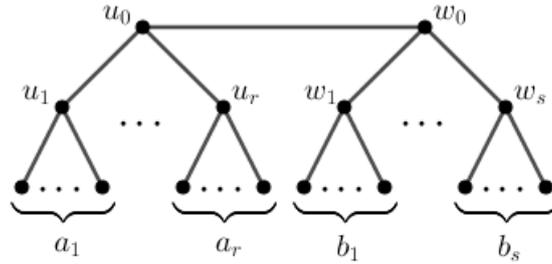


Figura 2.2: $T(n, r, s; a_1, \dots, a_r; b_1, \dots, b_s)$.

Denotamos por \mathcal{T}_n o conjunto formado por todas as árvores com n vértices, $\mathcal{T}_{n,d}$ o conjunto formado por todas as árvores com n vértices e diâmetro d e $\mathcal{T}_n^{(\Delta)}$ o conjunto formado por todas as árvores com n vértices e grau máximo Δ . Para $3 \leq d \leq n-1$, denotaremos por $T_{n,d}(i)$ a árvore com n vértices obtida do caminho $P_{d+1} = v_1v_2 \dots v_dv_{d+1}$ adicionando $n-d-1$ arestas pendentes ao vértice v_i , $1 < i < d+1$, e por $T_{n,d}(i, j)$ a árvore com n vértices obtida do caminho $P_{d+1} = v_1v_2 \dots v_dv_{d+1}$ ligando $n-d-2$ arestas pendentes ao vértice v_i , $1 < i < d+1$, e uma aresta pendente ao vértice v_j , $j \neq i$ e $1 < j < d+1$. Para simplificar a notação, denotaremos a árvore $T_{n,d} \left(\left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor + 1 \right)$ por $T_{n,d}$ (Figura 2.3).

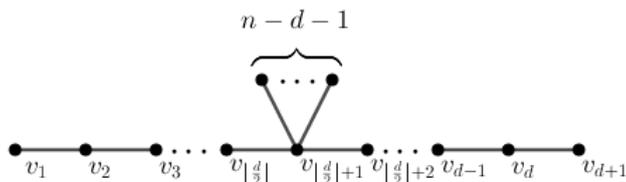


Figura 2.3: Árvore $T_{n,d}$.

2.2 Teoria de Matrizes

Nesta seção, vamos rever algumas definições e apresentar alguns resultados de Teoria de Matrizes, com ênfase em matrizes simétricas, uma vez que as matrizes que utilizamos para representar um grafo neste trabalho são todas simétricas. Como referência podemos citar [22].

Seja $M = [m_{ij}]$ uma matriz quadrada de ordem n com entradas reais. A *transposta* de M é a matriz $M^T = [k_{ij}]$ satisfazendo $k_{ij} = m_{ji}$, $1 \leq i, j \leq n$. Se $M^T = M$, dizemos que a matriz M é *simétrica*.

A matriz M é *invertível* se existe uma matriz N tal que $MN = NM = \mathbb{I}$, onde \mathbb{I} representa a matriz identidade. Neste caso, N é dita *inversa* de M e representada por M^{-1} .

Um subconjunto $S = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$ de \mathbb{R}^n é denominado *ortogonal* se quaisquer dois vetores distintos em S são *ortogonais*, isto é, se $\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle = 0$ sempre que $i \neq j$. Se, além disso, todos os vetores de S são unitários, isto é, $\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i \rangle = 1$, $i = 1, 2, \dots, k$, dizemos que o conjunto S é *ortonormal*.

Dizemos que a matriz M é *ortogonal* quando $M^{-1} = M^T$. Uma matriz de ordem n é ortogonal se, e somente se, suas linhas (ou colunas) formam um conjunto ortonormal de vetores em \mathbb{R}^n .

O *traço* da matriz M , $\text{traço}(M)$, é a soma dos elementos da diagonal principal de M , ou seja, $\text{traço}(M) = m_{11} + m_{22} + \dots + m_{nn}$.

O *polinômio característico* da matriz M é definido por $P_M(x) = \det(x\mathbb{I} - M)$, e suas raízes, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, são chamados *autovalores* de M . Se λ é um autovalor de M e $\mathbf{v} \neq 0$ em \mathbb{R}^n é tal que $M\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$, dizemos que \mathbf{v} é um *autovetor* de M *associado* ao autovalor λ . Autovetores associados a autovalores diferentes de M são linearmente independentes.

Para toda matriz M temos que $\det(M) = \lambda_1\lambda_2 \dots \lambda_n$ e $\text{traço}(M) = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n$.

Teorema 2.2.1 ([23]). *Sejam M uma matriz quadrada de ordem n e $n_1, n_2, \dots, n_k \in \mathbb{N}$ tais que $\sum_{i=1}^k n_i = n$. Suponhamos que M possa ser escrita na forma de blocos como*

$$M = \begin{bmatrix} M_{1,1} & M_{1,2} & \dots & M_{1,k} \\ M_{2,1} & M_{2,2} & \dots & M_{2,k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ M_{k,1} & M_{k,2} & \dots & M_{k,k} \end{bmatrix},$$

onde cada $M_{i,j}$, $1 \leq i, j \leq k$, é uma matriz de $n_i \times n_j$ cujas linhas têm somas constantes iguais a $c_{i,j}$. Seja $\overline{M} = [c_{i,j}]_{k \times k}$. Então, o polinômio característico de \overline{M} divide o polinômio característico de M .

Se a matriz M é simétrica, pelo Teorema Espectral [22], todos os seus autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ são reais e ela é diagonalizável. Neste caso, existe uma matriz ortogonal P tal que $P^T M P = \text{Diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, onde $\text{Diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ é a matriz diagonal cujas entradas são os autovalores de M . Portanto, as colunas de P formam uma base ortonormal de \mathbb{R}^n constituída de autovetores de M .

Uma matriz simétrica M de ordem n é denominada *semidefinida positiva* se $\mathbf{x}^T M \mathbf{x} \geq 0$, para todo $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Equivalentemente, uma matriz simétrica M de ordem n é semidefinida positiva se, e somente se, todos os seus autovalores são maiores ou iguais a 0.

Uma matriz $M = [m_{i,j}]$ é dita ser *diagonalmente dominante* se

$$|m_{i,i}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |m_{i,j}| \quad , \forall \quad i = 1, \dots, n.$$

No caso de M ser uma matriz simétrica, diagonalmente dominante e ter as entradas da diagonal principal não negativas, então todos os autovalores de M também serão não negativos (M é semidefinida positiva).

Uma matriz M é denominada *não negativa (positiva)* se suas entradas são números reais não negativos (positivos). Denotamos uma matriz M não negativa (positiva) por $M \geq 0$ ($M > 0$).

Teorema 2.2.2 ([22]). *Toda matriz $M \geq 0$ possui um autovalor $\rho \geq 0$ com um autovetor associado u não negativo, isto é, $u \geq 0$. Além disso, para todo λ autovalor de M , $|\lambda| \leq \rho$.*

Se φ é uma permutação de $\{1, 2, \dots, n\}$, representamos por M_φ a matriz $[m'_{i,j}]$ tal que $m'_{i,j} = m_{\varphi(i)\varphi(j)}$, $1 \leq i, j \leq n$.

Dizemos que uma matriz M de ordem n é *reduzível* se uma das seguintes condições é satisfeita:

- i) $n = 1$ e $M = 0$;

- ii) $n \geq 2$ e existe permutação φ tal que

$$M_\varphi = \begin{bmatrix} B & C \\ \mathbf{0} & D \end{bmatrix},$$

com B e D matrizes quadradas.

Caso contrário, dizemos que a matriz M é *irredutível*.

Teorema 2.2.3 ([22]). (*Teorema de Perron-Frobenius*) *Seja $M \geq 0$ uma matriz simétrica, irredutível e com autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$. Então:*

1. $\lambda_1 > 0$ e associado a esse autovalor existe um autovetor positivo;
2. $\lambda_1 > \lambda_2$;
3. $|\lambda_i| \leq \lambda_1$ para todo $i \in \{1, 2, \dots, n\}$.

O autovalor máximo no Teorema 2.2.3 é denominado *raio espectral* ou *índice* da matriz M . Um autovetor associado ao raio espectral é chamado de *vetor de Perron*.

Denotamos por $\mathbb{J}_{\alpha, \beta}$, ou simplesmente por \mathbb{J}_α quando $\alpha = \beta$, a matriz de ordem $\alpha \times \beta$ que possui todas as entradas iguais a 1. Por $\mathbf{1}_\alpha$ representamos um vetor que tem todas as suas α coordenadas iguais a 1 e, sempre que for evidente o número de entradas que o vetor possui, usamos apenas $\mathbf{1}$.

2.3 Teoria Espectral de Grafos

Passamos agora a apresentar alguns conceitos de Teoria Espectral de Grafos que podem ser encontrados em [24].

A *matriz de adjacência* de um grafo G com n vértices, $A(G) = [a_{i,j}]$, é a matriz quadrada de ordem n , tal que $a_{i,j} = 1$, se os vértices v_i e v_j são adjacentes e, em caso contrário, $a_{i,j} = 0$. O polinômio característico desta matriz, denotado por $P_A^G(x)$, é chamado *polinômio característico do grafo G* . Os autovalores de $A(G)$ são chamados *autovalores* de G . O *espectro* de G é o espectro de $A(G)$, ou seja, é a lista de autovalores de $A(G)$ dispostos em ordem não crescente, denotado por $Sp(A(G)) = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$.

A *matriz laplaciana* de um grafo G é a matriz $L(G) = Deg(G) - A(G)$, onde $Deg(G) = Diag(d_1, \dots, d_n)$ é a matriz diagonal dos graus dos vértices de G . O polinômio característico desta matriz, denotado por $P_L^G(x)$, é chamado *polinômio característico laplaciano do grafo G* . Os autovalores de $L(G)$ são chamados *autovalores laplacianos* de G . O *espectro laplaciano* de G é o espectro de $L(G)$, dado pela lista de autovalores dispostos em ordem não crescente e é denotado por

$Sp(L(G)) = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)$. É fato conhecido que $L(G)$ é uma matriz semidefinida positiva e, portanto, seus autovalores são todos não negativos. Além disso, dado que $L(G)$ é uma matriz singular, tem-se $\mu_n = 0$. O segundo menor autovalor de $L(G)$ recebe o nome de *conectividade algébrica do grafo* G e é representado por $a(G)$.

A *matriz laplaciana sem sinal* de um grafo G dada por $Q(G) = Deg(G) + A(G)$. Os autovalores de $Q(G)$ são chamados *autovalores laplacianos sem sinal* de G . O *espectro laplaciano sem sinal* de G é o espectro de $Q(G)$, dado pela lista de autovalores dispostos em ordem não crescente. Assim como ocorre com a matriz laplaciana, é possível provar que a matriz $Q(G)$ é semidefinida positiva e, portanto, que seus autovalores são todos não negativos. Além disso, é sabido que para grafos bipartidos o espectro da matriz laplaciana sem sinal é igual ao espectro da matriz laplaciana.

Capítulo 3

Ordenação de Árvores

A ordenação de grafos sempre foi um objeto de interesse dentro da Teoria Espectral de Grafos. CVETKOVIĆ *et al.* [25] destacaram, por exemplo, que apesar de ser difícil diferenciar graficamente grafos 4-regulares de 10 vértices, esses grafos são facilmente ordenados a partir do seu espectro. Desde então, vários trabalhos envolvendo a ordenação de grafos a partir de diferentes invariantes foram publicados.

Apresentaremos nesse capítulo alguns resultados sobre ordenação de árvores pelos índices das matrizes de adjacência e laplaciana, observando a ordenação quando apenas o número de vértices é fixado ou quando, adicionalmente, o grau máximo ou diâmetro também estão fixados.

3.1 Índice da Matriz de Adjacência

O estudo da ordenação de árvores a partir do índice da matriz de adjacência começou com a busca de árvores que maximizavam esse autovalor. Em 1997, HOFMEISTER [5] encontrou as primeiras árvores que maximizavam o índice, fixado o número de vértices. Nos próximos resultados são apresentadas as cinco árvores que possuem os maiores índices da matriz de adjacência.

Teorema 3.1.1 ([5]). *Seja T uma árvore em \mathcal{T}_n . Então*

$$\lambda_1(T) \leq \sqrt{n-1}$$

e a igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong S_n$.

Teorema 3.1.2 ([5]). *Seja T uma árvore em $\mathcal{T}_n \setminus \{S_n\}$ e $n \geq 4$. Então*

$$\lambda_1(T) \leq \sqrt{\frac{1}{2}(n-1 + \sqrt{n^2 - 6n + 13})}$$

e a igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong V(n-3, 1, 3)$ (Figura 3.1).

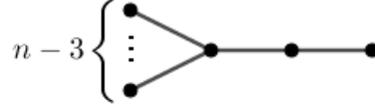


Figura 3.1: Árvore $V(n-3, 1, 3)$.

Teorema 3.1.3 ([5]). *Seja T uma árvore em $\mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3)\}$ e $n \geq 4$. Então*

$$\lambda_1(T) \leq \sqrt{\frac{1}{2}(n-1 + \sqrt{n^2 - 10n + 33})}$$

e a igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong V(n-4, 2, 3)$ (Figura 3.2).

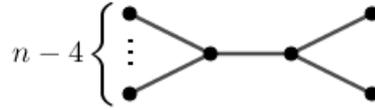


Figura 3.2: Árvore $V(n-4, 2, 3)$.

É importante observar que as três árvores apresentadas anteriormente possuem diâmetro menor ou igual a três, enquanto as próximas duas possuem diâmetro quatro.

Teorema 3.1.4 ([5]). *Seja T uma árvore em $\mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3), V(n-4, 2, 3)\}$ e $n \geq 5$. Então*

$$\lambda_1(T) \leq \sqrt{\frac{1}{2}(n-1 + \sqrt{n^2 - 8n + 24})}$$

e a igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong T_{n,4}$ (Figura 3.3).

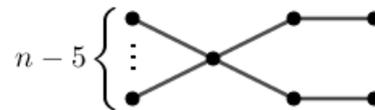


Figura 3.3: Árvore $T_{n,4}$.

Teorema 3.1.5 ([5]). *Seja T uma árvore em $\mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3), V(n-4, 2, 3), T_{n,4}\}$ e $n \geq 6$. Então*

$$\lambda_1(T) \leq \sqrt{\frac{1}{2}(n-1 + \sqrt{n^2 - 10n + 29})}$$

e a igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong V(n-4, 1, 4)$ (Figura 3.4) ou $T \cong V(3, 3, 3)$.

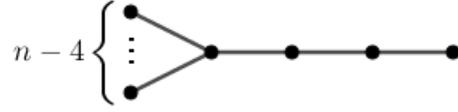


Figura 3.4: Árvore $V(n-4, 1, 4)$.

A partir do artigo de HOFMEISTER [5], CHANG e HUANG [26] deram sequência ao trabalho de encontrar as árvores que maximizam o índice da matriz de adjacência, obtendo as árvores que ocupam a sexta, sétima e oitava posições.

Teorema 3.1.6 ([26]). *Seja T uma árvore em $\mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3), V(n-4, 2, 3), T_{n,4}, V(n-4, 1, 4)\}$ e $n \geq 11$. Então*

$$\lambda_1(T) \leq \sqrt{\frac{1}{2}(n-1 + \sqrt{n^2 - 14n + 61})}$$

e a igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong V(n-5, 3, 3)$ (Figura 3.5).

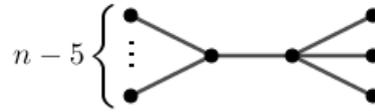


Figura 3.5: Árvore $V(n-5, 3, 3)$.

Teorema 3.1.7 ([26]). *Seja T uma árvore em $\mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3), V(n-4, 2, 3), T_{n,4}, V(n-4, 1, 4), V(n-5, 3, 3)\}$ e $n \geq 11$. Então*

$$\lambda_1(T) \leq \gamma_1,$$

onde γ_1 é a maior raiz da equação $\lambda^6 - (n-1)\lambda^4 + (3n-12)\lambda^2 - 2(n-6) = 0$, e a igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong T(n, n-4; 2, 1, 0, \dots, 0)$ (Figura 3.6).

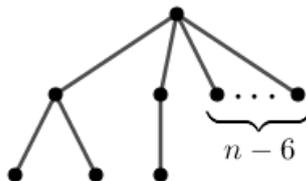


Figura 3.6: Árvore $T(n, n-4; 2, 1, 0, \dots, 0)$.

Teorema 3.1.8 ([26]). *Seja T uma árvore em $\mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3), V(n-4, 2, 3), T_{n,4}, V(n-4, 1, 4), V(n-5, 3, 3), T(n, n-4; 2, 1, 0, \dots, 0)\}$ e $n \geq 11$. Então*

$$\lambda_1(T) \leq \sqrt{\frac{1}{2}(n-1 + \sqrt{n^2 - 10n + 37})}$$

e a igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong T(n, n-4; 1, 1, 1, 0, \dots, 0)$ (Figura 3.7).

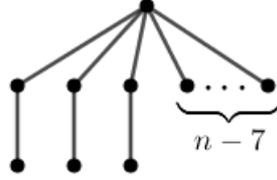


Figura 3.7: Árvore $T(n, n-4; 1, 1, 1, 0, \dots, 0)$.

No Teorema 3.1.9, uma ordenação para todas as árvores de diâmetro 3 é apresentada.

Teorema 3.1.9 ([26]). *A ordenação das árvores diâmetro 3, duplas estrelas, pelo maior autovalor da adjacência é:*

$$\lambda_1(V(n-3, 1, 3)) > \lambda_1(V(n-4, 2, 3)) > \dots > \lambda_1\left(V\left(\left\lfloor \frac{n-2}{2} \right\rfloor, \left\lceil \frac{n-2}{2} \right\rceil, 3\right)\right).$$

LIN e GUO [27] apresentaram o próximo resultado, utilizado para encontrar cotas para o índice da matriz de adjacência observando os subgrafos. No mesmo trabalho, estudaram o comportamento do índice da matriz de adjacência em algumas operações.

Teorema 3.1.10 ([27]). *Sejam G um grafo conexo e G' um subgrafo próprio de G . Então $\lambda_1(G') < \lambda_1(G)$, e quando $y \geq \lambda_1(G)$, temos que $P_A^G(y) < P_A^{G'}(y)$.*

Definição 3.1.11 ([27]). *Seja T uma árvore em \mathcal{T}_n e $n \geq 4$. Seja $e = uv$ uma aresta não pendente de T e sejam T_1 e T_2 as duas componentes de $T - e$, $u \in T_1$ e $v \in T_2$. Além disso, seja T_0 é o grafo obtido de T da seguinte maneira (Figura 3.8):*

1. *contraia a aresta $e = uv$;*
2. *adicione uma aresta pendente ao vértice $u(=v)$.*

Teorema 3.1.12 ([27]). *Seja T em \mathcal{T}_n , $n \geq 4$, uma árvore com pelo menos 3 arestas não pendentes. Se T_0 é obtida a partir de T pela operação definida em 3.1.11, então $\lambda_1(T_0) > \lambda_1(T)$.*

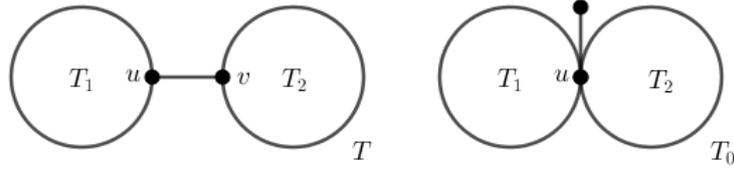


Figura 3.8: Árvores T e T_0

No estudo de ordenação de árvores, outra transformação que é muito utilizada é o *grafting* de aresta. Observe que esta operação é definida para um grafo qualquer.

Definição 3.1.13. *Seja G um grafo de ordem $n \geq 2$ e u um vértice de G . Defina-se como $G_u(k, l)$, $k \geq l \geq 1$, o grafo obtido a partir de G ligando dois novos caminhos, um de ordem k e outro de ordem l , ao vértice u . O *grafting* de uma aresta é a operação de remover a aresta pendente do menor caminho e ligar o vértice que ficou isolado ao maior caminho, obtendo-se $G_u(k + 1, l - 1)$, conforme mostra a Figura 3.9*

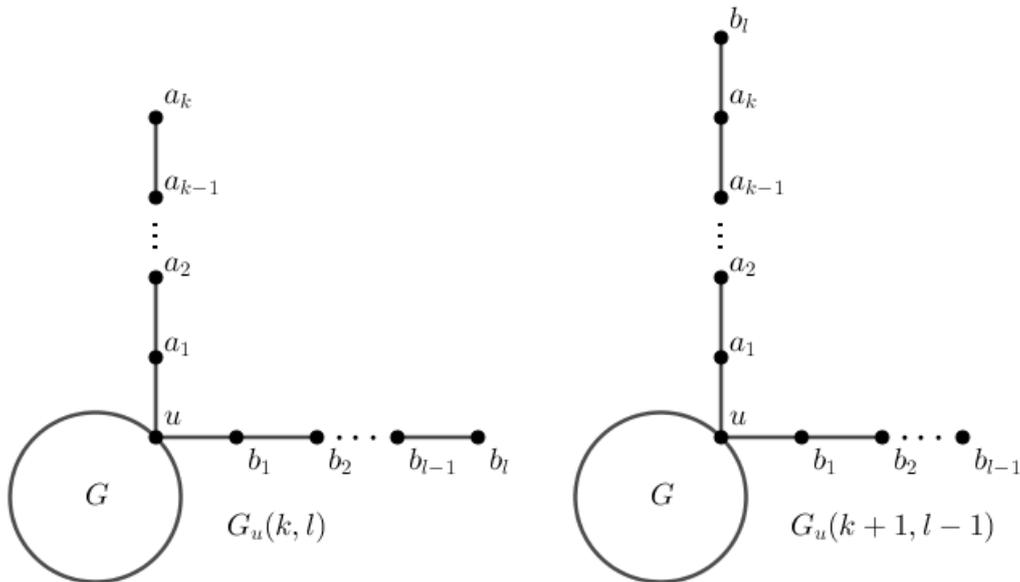


Figura 3.9: *Grafting* de uma aresta

Teorema 3.1.14 ([27]). *Seja u um vértice do grafo conexo não trivial G e seja $G_u(k, l)$ o grafo obtido a partir de G adicionando dois caminhos pendentes de tamanho k e l em u . Se $k \geq l \geq 1$, então $\lambda_1(G_u(k, l)) > \lambda_1(G_u(k + 1, l - 1))$.*

No mesmo trabalho também foram estudadas outras operações, similares ao *grafting*. No lugar de dois caminhos pendentes ligados ao mesmo vértice, no Teorema 3.1.15 a operação é realizada considerando vértices adjacentes, enquanto no Teorema

3.1.16 a operação é realizada considerando vértices que, ao serem removidos do grafo, geram grafos isomorfos.

Teorema 3.1.15 ([27]). *Sejam u e v vértices adjacentes de grau maior que um em G . Seja $G_{u,v}^1(k, l)$ o grafo obtido a partir de G adicionando um caminho pendente de tamanho k em u e um caminho pendente de tamanho l em v . Se $k \geq l \geq 1$, então $\lambda_1(G_{u,v}^1(k, l)) > \lambda_1(G_{u,v}^1(k+1, l-1))$.*

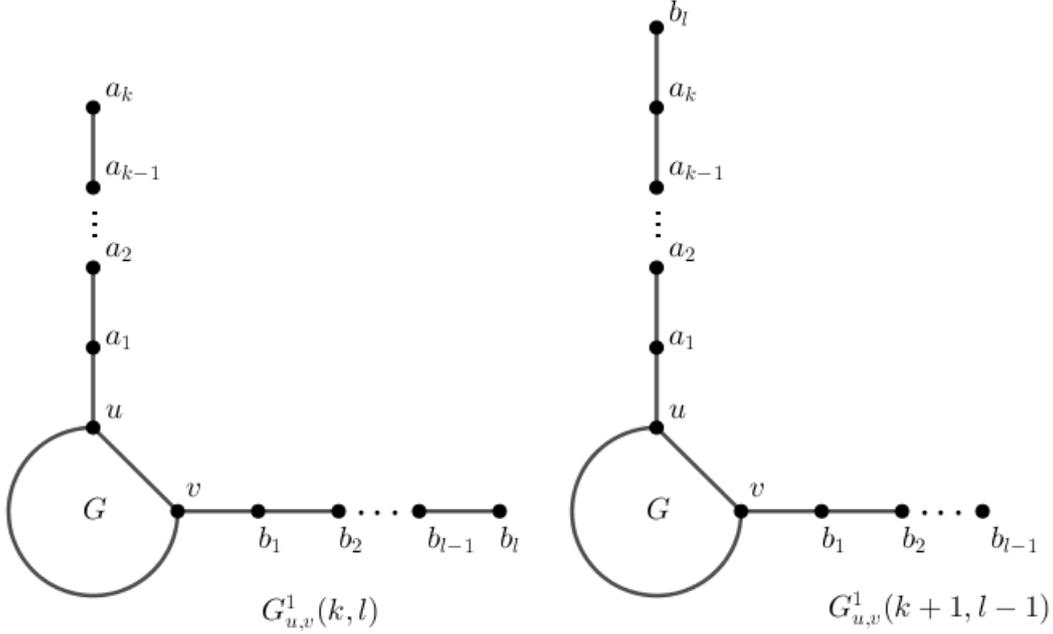


Figura 3.10: $G_{u,v}^1(k, l)$ e $G_{u,v}^1(k+1, l-1)$

Teorema 3.1.16 ([27]). *Sejam u e v vértices no grafo conexo G tais que $G-u \cong G-v$. Seja $G_{u,v}^2(k, l)$ o grafo obtido a partir de G adicionando k arestas pendentes em u e l arestas pendentes em v . Se $k \geq l \geq 1$, então $\lambda_1(G_{u,v}^2(k+1, l-1)) > \lambda_1(G_{u,v}^2(k, l))$.*

Utilizando as transformações acima, LIN e GUO [27] estudaram a ordenação na família de árvores que possuem grau máximo fixado Δ , $\mathcal{T}_n^{(\Delta)}$. O próximo resultado mostra que, fixado o grau máximo, as vassouras minimizam o índice da matriz de adjacência. Além disso, se $\lceil \frac{n}{2} \rceil \leq \Delta \leq n-1$, a dupla estrela de grau máximo Δ maximiza o índice da matriz de adjacência.

Teorema 3.1.17 ([27]). *Seja T uma árvore em $\mathcal{T}_n^{(\Delta)}$, com $n \geq 4$. Então $\lambda_1(T) \geq \lambda_1(V(\Delta-1, 1, n-\Delta+1))$, com igualdade se, e somente se, $T \cong V(\Delta-1, 1, n-\Delta+1)$. Se $\lceil \frac{n}{2} \rceil \leq \Delta \leq n-1$, então $\lambda_1(T) \leq \lambda_1(V(\Delta-1, n-\Delta-1, 3))$, com igualdade se, e somente se, $T \cong V(\Delta-1, n-\Delta-1, 3)$.*

Ainda na família $\mathcal{T}_n^{(\Delta)}$, o próximo resultado mostra que, comparando o grau máximo, é possível determinar qual árvore possui o maior índice.

Teorema 3.1.18 ([27]). *Seja $T^{(\Delta)}$ uma árvore em $\mathcal{T}_n^{(\Delta)}$, $\Delta = 2, 3, \dots, n - 1$ e $n \geq 4$. Então $\lambda_1(T^{(n-1)}) > \lambda_1(T^{(n-2)}) > \dots > \lambda_1(T^{(\lceil \frac{2n}{3} \rceil)}) > \lambda_1(V(\lfloor \frac{n}{3} \rfloor, \lfloor \frac{2n}{3} \rfloor - 2, 3)) \geq \lambda_1(T^{(k)})$, onde $2 \leq k \leq \lfloor \frac{2n}{3} \rfloor - 1$, com igualdade se, e somente se, $T^{(k)} \cong V(\lfloor \frac{n}{3} \rfloor, \lfloor \frac{2n}{3} \rfloor - 2, 3)$.*

Complementando a listagem das árvores que maximizam o índice da matriz de adjacência, LIN e GUO [27] encontraram as cinco próximas árvores da ordenação.

Teorema 3.1.19 ([27]). *Na ordenação das árvores em \mathcal{T}_n , $n \geq 12$, pelo índice da matriz de adjacência, as árvores $T(n, 3; n - 5, 1, 0)$, $T_{n,5}$, $V(n - 5, 2, 4)$, $V(n - 5, 1, 5)$ e $V(n - 6, 4, 3)$ ocupam da nona até a décima terceira posições (Figuras 3.11, 3.12, 3.14, 3.15 e 3.13).*

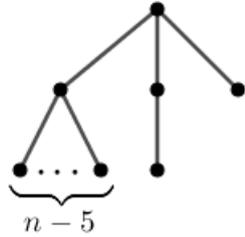


Figura 3.11: Árvore $T(n, 3; n - 5, 1, 0)$.

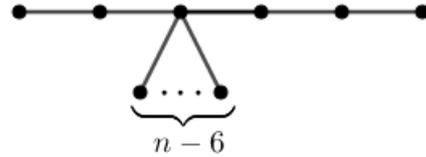


Figura 3.12: Árvore $T_{n,5}$.

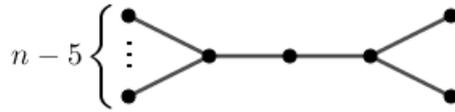


Figura 3.13: Árvore $V(n - 5, 2, 4)$.

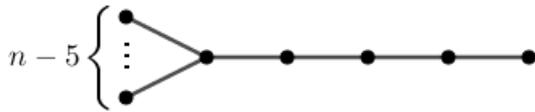


Figura 3.14: Árvore $V(n - 5, 1, 5)$.

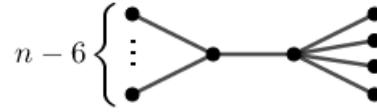


Figura 3.15: Árvore $V(n - 6, 4, 3)$.

Para finalizar, GUO e SHAO [28] estudaram a ordenação de árvores na família $\mathcal{T}_{n,d}$, isto é, das árvores com n vértices e diâmetro fixado d .

Teorema 3.1.20 ([28]). *Seja $d \geq 4$ e $n = d + 3$. As $\lfloor \frac{d}{2} \rfloor + 1$ primeiras árvores com o maior índice no conjunto $\mathcal{T}_{n,d}$ são, respectivamente:*

$$T_{n,d} = T_{n,d} \left(\left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor + 1 \right), T_{n,d} \left(\left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor \right), \dots, T_{n,d}(3).$$

Teorema 3.1.21 ([28]). *Seja $d \geq 3$ e $n \geq d + 4$. As $\lfloor \frac{d}{2} \rfloor + 1$ primeiras árvores com o maior índice no conjunto $\mathcal{T}_{n,d}$ são, respectivamente:*

$$T_{n,d} = T_{n,d} \left(\left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor + 1 \right), T_{n,d} \left(\left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor \right), \dots, T_{n,d}(3), T_{n,d}(2), T_{n,d} \left(\left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor + 1, \left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor + 2 \right).$$

3.2 Índice da Matriz Laplaciana

Assim como aconteceu com a matriz de adjacência, o estudo da ordenação de árvores a partir do índice da matriz laplaciana começou com a busca de árvores que maximizavam esse autovalor. Em 2003, GUO [6] encontrou as quatro primeiras árvores, com n vértices, que possuíam essa propriedade.

Teorema 3.2.1 ([6]). *Seja T uma árvore em \mathcal{T}_n , então $\mu_1(T) \leq n$. A igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong S_n$.*

Teorema 3.2.2 ([6]). *Seja T uma árvore em $\mathcal{T}_n \setminus \{S_n\}$, então $\mu_1(T) \leq r_1$, onde r_1 é a maior raiz da equação*

$$x^3 - (n+2)x^2 + (3n-2)x - n = 0.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong V(n-3, 1, 3)$.

Teorema 3.2.3 ([6]). *Seja T uma árvore em $\mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3)\}$ e $n \geq 6$. Então $\mu_1(T) \leq r_2$, onde r_2 é a maior raiz da equação*

$$x^3 - (n+2)x^2 + (4n-7)x - n = 0.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong V(n-4, 2, 3)$.

Teorema 3.2.4 ([6]). *Seja T uma árvore em $\mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3), V(n-4, 2, 3)\}$, $n \geq 6$. Então $\mu_1(T) \leq r_3$, onde r_3 é a maior raiz da equação*

$$x^3 - (n+1)x^2 + (3n-5)x - n = 0.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong T_{n,4}$.

Uma importante ferramenta para determinar cotas para o índice laplaciano é apresentada no teorema abaixo.

Teorema 3.2.5 ([6]). *Sejam G um grafo conexo bipartido e G' um subgrafo de G . Então $\mu_1(G') \leq \mu_1(G)$ e a igualdade ocorre se, e somente se, $G' \cong G$.*

Dando continuidade ao trabalho de GUO [6], YU *et al.* [29] determinaram as próximas quatro árvores que maximizam o índice laplaciano.

Teorema 3.2.6 ([29]). *Seja $T \in \mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3), V(n-4, 2, 3), T_{n,4}\}$ e $n \geq 8$. Então $\mu_1(T) \leq \lambda_1(V(n-4, 1, 4))$, onde $\lambda_1(V(n-4, 1, 4))$ é a maior raiz da equação*

$$x^4 - (n+3)x^3 + (5n-4)x^2 - (6n-10)x + n = 0.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong V(n-4, 1, 4)$.

Teorema 3.2.7 ([29]). *Seja $T \in \mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3), V(n-4, 2, 3), T_{n,4}, V(n-4, 1, 4)\}$ e $n \geq 9$. Então $\mu_1(T) \leq \lambda_1(V(n-5, 3, 3))$, onde $\lambda_1(V(n-5, 3, 3))$ é a maior raiz da equação*

$$x^3 - (n+2)x^2 + (5n-14)x - n = 0.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong V(n-5, 3, 3)$.

Teorema 3.2.8 ([29]). *Seja $T \in \mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3), V(n-4, 2, 3), T_{n,4}, V(n-4, 1, 4), V(n-5, 3, 3)\}$ e $n \geq 15$. Então $\mu_1(T) \leq \lambda_1(T(n, n-4; 2, 1, 0, \dots, 0))$, onde $\lambda_1(T(n, n-4; 2, 1, 0, \dots, 0))$ é a maior raiz da equação*

$$x^5 - (n+4)x^4 + (7n-7)x^3 - (32-14n)x^2 + (7n-10)x - n = 0.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong T(n, n-4; 2, 1, 0, \dots, 0)$.

Teorema 3.2.9 ([29]). *Seja $T \in \mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3), V(n-4, 2, 3), T_3^n, V(n-4, 1, 4), V(n-5, 3, 3), T(n, n-4; 2, 1, 0, \dots, 0)\}$ e $n \geq 15$. Então $\mu_1(T) \leq \lambda_1(T_n^4)$, onde $\lambda_1(T_n^4)$ é a maior raiz da equação*

$$x^3 - nx^2 + (3n-8)x - n = 0.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong T(n, n-4; 1, 1, 1, 0, \dots, 0)$.

Assim como aconteceu com a matriz de adjacência, algumas transformações foram muito utilizadas para ordenar árvores pelo índice da matriz laplaciana. Destacamos aqui, novamente, o *grafting* (Definição 3.1.13) e a transformação de Kelmans aplicada em grafos bipartidos, apresentada no Teorema 3.2.11.

Teorema 3.2.10 ([30]). *Se G é um grafo conexo e bipartido com $n \geq 2$ vértices, então*

$$\mu_1(G_u(k, l)) > \mu_1(G_u(k+1, l-1)),$$

para todo $k \geq l \geq 1$.

Teorema 3.2.11 ([30]). *Sejam u e v dois vértices do grafo bipartido conexo $G = (V_1 \cup V_2, E)$. Suponha que v_1, v_2, \dots, v_s ($1 \leq s \leq d(v)$) são alguns vértices*

de $N_G(v) \setminus N_G(u)$ e v_1, v_2, \dots, v_s são diferentes de u . Seja \mathbf{x} o autovetor unitário de G correspondente a $\mu(G)$, e seja $G^\#$ o grafo obtido de G deletando todas as arestas vv_i e adicionando as arestas uv_i ($1 \leq s \leq d(v)$). Se $|\mathbf{x}_u| \geq |\mathbf{x}_v|$ e $G^\#$ também é um grafo bipartido, então $\mu(G^\#) > \mu(G)$.

Os resultados abaixo ordenam as árvores com n vértices e grau máximo fixado Δ a partir do índice da matriz laplaciana.

Teorema 3.2.12 ([31]). *Seja T uma árvore em $\mathcal{T}_n^{(\Delta)}$. Se $\Delta \geq \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$, então $\mu_1(T) \leq \mu_1(V(\Delta - 1, n - \Delta - 1, 3))$ e a igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong V(\Delta - 1, n - \Delta - 1, 3)$.*

Teorema 3.2.13 ([31]). *Seja T uma árvore em $\mathcal{T}_n^{(\Delta)}$. Então $\mu_1(T) \geq \mu_1(V(\Delta - 1, 1, n - \Delta + 1))$ e a igualdade ocorre se, e somente se, $T \cong V(\Delta - 1, 1, n - \Delta + 1)$.*

Teorema 3.2.14 ([31]). *Sejam $T_1, T_2 \in \mathcal{T}_n$ ($n \geq 6$). Se $\Delta(T_1) > \Delta(T_2)$ e $\Delta(T_1) \geq \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil + 1$, então $\mu_1(T_1) > \mu_1(T_2)$.*

Para finalizar, GUO [32] estudou a ordenação de árvores que possuem diâmetro fixado.

Teorema 3.2.15 ([32]). *As $\left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor + 1$ primeiras árvores com o maior raio espectral laplaciano no conjunto $\mathcal{T}_{n,d}$, com $n \geq d + 3$ e $d \geq 3$ são:*

$$T_{n,d} = T_{n,d} \left(\left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor + 1 \right), T_{n,d} \left(\left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor \right), \dots, T_{n,d}(3), T_{n,d}(2), T_{n,d} \left(\left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor + 1, \left\lfloor \frac{d}{2} \right\rfloor + 2 \right).$$

Similar com o que foi feito em LIN e GUO [27], LI *et al.* [33] encontraram as próximas árvores que maximizam o índice da matriz laplaciana:

Teorema 3.2.16 ([33]). *Na ordenação das árvores em \mathcal{T}_n , $n \geq 15$, pelo índice da matriz laplaciana, as árvores $T(n, 3; n - 5, 1, 0)$, $T_{n,5}$, $V(n - 5, 2, 4)$, $V(n - 5, 1, 5)$ e $V(n - 6, 4, 3)$ ocupam da nona até a décima terceira posições (Figuras 3.11, 3.12, 3.14, 3.15 e 3.13).*

3.3 Relação entre as ordenações

Utilizando os resultados apresentados, a tabela abaixo mostra as árvores que maximizam o índice, fixado o número de vértices. É importante destacar que as ordenações para as matrizes de adjacência e laplaciana coincidem nas 13 primeiras posições, o que nos motivou a estudar o problema de ordenação a partir dos índices das matrizes A_α e verificar se as mesmas árvores maximizarão este invariante.

Adjacência	Laplaciana
S_n	S_n
$V(n-3, 1, 3)$	$V(n-3, 1, 3)$
$V(n-4, 2, 3)$	$V(n-4, 2, 3)$
$T_{n,4}$	$T_{n,4}$
$V(n-4, 1, 4)$	$V(n-4, 1, 4)$
$V(n-5, 3, 3)$	$V(n-5, 3, 3)$
$T(n, n-4; 2, 1, 0, \dots, 0)$	$T(n, n-4; 2, 1, 0, \dots, 0)$
$T(n, n-4; 2, 1, 1, 1, 0, \dots, 0)$	$T(n, n-4; 2, 1, 1, 1, 0, \dots, 0)$
$T(n, 3; n-5, 1, 0)$	$T(n, 3; n-5, 1, 0)$
$T_{n,5}$	$T_{n,5}$
$V(n-5, 2, 4)$	$V(n-5, 2, 4)$
$V(n-5, 1, 5)$	$V(n-5, 1, 5)$
$V(n-6, 4, 3)$	$V(n-6, 4, 3)$

Tabela 3.1: Ordenação de árvores a partir dos índices das matrizes de adjacência e laplaciana.

Capítulo 4

Conectividade Algébrica

A conectividade algébrica, definida por Fiedler em [34], recebeu uma grande atenção na Teoria Espectral de Grafos nos últimos anos. Este autovalor fornece informações sobre a estrutura do grafo, como por exemplo a conexidade, e está associado a vários outros invariantes.

ABREU *et al.* [11] afirmam que encontrar um parâmetro que possa distinguir grafos continua sendo uma tarefa desafiadora, assim como saber se a conectividade algébrica é um bom parâmetro para ordenação. Buscamos aqui apresentar alguns resultados importantes para o estudo da conectividade algébrica de árvores, além de exibir as classes de árvores definidas por YUAN *et al.* [15] e WANG e TAN [16], que buscaram estudar o problema de ordenação de árvores a partir da conectividade algébrica, encontrando classes que maximizam esse invariante.

4.1 Matriz *bottleneck*

KIRKLAND *et al.* [35] provaram resultados importantes que permitem calcular ou estimar a conectividade algébrica de árvores. Destacamos as seguintes definições e resultados:

Definição 4.1.1 ([35]). *Seja v um vértice de uma árvore T . Suponha que $T - v = T_1 \dot{\cup} T_2 \dot{\cup} \dots \dot{\cup} T_k$, onde T_1, T_2, \dots, T_k são componentes conexas de $T - v$. Seja v_i o vértice de T_i adjacente a v em T , então a árvore T_i com raiz v_i é chamada de ramo de T em v , denotada por B_i .*

Definição 4.1.2 ([35]). *Seja $L_v(T)$ a sub-matriz principal de $L(T)$ obtida deletando a linha e a coluna correspondente ao vértice v e seja $L(T_i)$ a matriz laplaciana da árvore T_i onde a primeira linha e coluna correspondem ao vértice v_i . Definimos $L_i = L(T_i) + E_{11}$, onde E_{11} é a matriz de ordem n com entrada $a_{1,1} = 1$ e todas as*

outras iguais a zero, logo

$$L_v(T) = L_1 \oplus L_2 \oplus \cdots \oplus L_k.$$

Definição 4.1.3 ([35]). A matriz inversa L_i^{-1} é chamada de matriz bottleneck do ramo B_i da árvore T em v , denotada por M_i .

Definição 4.1.4 ([35]). O raio espectral $\rho(M_i)$ da matriz bottleneck M_i é chamado de valor de Perron do ramo B_i .

Definição 4.1.5 ([35]). Seja v um vértice de uma árvore T e sejam B_1, B_2, \dots, B_k ramos de T em v . Então o ramo B_i é dito ramo de Perron de T em v se a matriz bottleneck M_i satisfaz

$$\rho(M_i) = \max\{\rho(M_j) | j = 1, 2, \dots, k\}.$$

Chamamos de vetores de Fiedler os autovetores associados à conectividade algébrica. Uma classificação importante para árvores é definida abaixo.

Definição 4.1.6 ([35]). Uma árvore T é dita do Tipo 1 se existe um vetor de Fiedler \mathbf{x} tal que $\mathbf{x}_v = 0$, para algum vértice v de T . Caso contrário, dizemos que T é do Tipo 2.

Sobre as árvores Tipo 1 e Tipo 2, FIEDLER [36] provou que quando uma árvore T é do Tipo 1, existe um único vértice v em T tal que $\mathbf{x}_v = 0$, para qualquer vetor de Fiedler \mathbf{x} . Este vértice é chamado de *vértice característico* da árvore T . Por outro lado, se T for do Tipo 2, existe uma única aresta uv tal que $\mathbf{x}_u \mathbf{x}_v < 0$, para qualquer vetor de Fiedler \mathbf{x} . Neste caso, os vértices u e v são chamados de *vértices característicos*.

KIRKLAND *et al.* [35] encontraram a relação entre os vértices característicos e os ramos de Perron:

Teorema 4.1.7 ([35]).

1. T é uma árvore do Tipo 1 com vértice característico v se, e somente se, existem dois ou mais ramos de Perron em v . Nesse caso, $a(T) = \frac{1}{\rho(M)}$, onde M é a matriz bottleneck de algum ramo de Perron em v .
2. T é uma árvore do Tipo 2 com vértices característicos u e v se, e somente se, u e v são adjacentes e o ramo de u contendo v é o único ramo de Perron em u , enquanto o ramo de v contendo u é o único ramo de Perron em v . Neste caso, sejam M_1 e M_2 as matrizes bottleneck dos ramos de Perron em u e v , respectivamente, então existe um único $\gamma \in (0, 1)$ tal que

$$a(T) = \frac{1}{\rho(M_1 - \gamma J)} = \frac{1}{\rho(M_2 - (1 - \gamma)J)}.$$

Teorema 4.1.8 ([15]). *Seja M a matriz bottleneck de um ramo de Perron B do vértice v de uma árvore T . Então*

$$a(T) \geq \frac{1}{\rho(M)}$$

e a igualdade ocorre se e somente se existem pelo menos 2 ramos de Perron de T em v .

Teorema 4.1.9 ([15]). *Se T' é uma subárvore de T , então $a(T') \geq a(T)$.*

Considerando os valores possíveis de serem assumidos pela conectividade algébrica de um grafo, KIRKLAND [14] propôs o conceito de pontos limites para a conectividade algébrica de grafos. Um número real r é um ponto limite da conectividade algébrica se r é o limite de uma sequência de números distintos, onde cada um é a conectividade algébrica de algum grafo. Seja τ o conjunto de todos os pontos limites para a conectividade algébrica de árvores, o resultado abaixo relaciona os pontos limites com a matriz bottleneck.

Teorema 4.1.10 ([14]). *Suponha que r seja um número positivo. Então $r \in \tau$ se, e somente se, $r = \frac{1}{\rho(M)}$, onde M é a matriz bottleneck de um ramo com pelo menos dois vértices.*

Nesse artigo também é provado que o conjunto formado pelas conectividades algébricas de todos os grafos, independente da ordem, é denso em $[0, \infty)$. Porém não é possível afirmar que o conjunto de conectividades algébricas de árvores é denso em $[0, 1]$. O corolário abaixo prova que esse conjunto, unido com zero, é fechado.

Corolário 4.1.11 ([14]). *Seja $A_T = \{a(T) | T \text{ é uma árvore}\}$. Então $A_T \cup \{0\}$ é um conjunto fechado.*

Por fim, KIRKLAND [14] também determinou os quatro maiores elementos de τ , isto é, os quatro maiores pontos limites para a conectividade algébrica de árvores: $\frac{3-\sqrt{5}}{2}$, $2 - \sqrt{3}$, $\frac{5-\sqrt{21}}{2}$ e $2 \left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$.

Observação 4.1.12. [14] *Para determinar os quatro maiores pontos limites, devemos encontrar os quatro menores valores de Perron para matrizes bottleneck com pelo menos 2 vértices. Sabemos, pela construção da matriz bottleneck, que se um ramo possui outro como subgrafo, o valor de Perron do primeiro é maior que o valor de Perron do segundo. Ora, como os únicos ramos que não contêm um caminho de 3 vértices são as estrelas, basta determinar quais são as estrelas que possuem o valor de Perron menor que o de P_3 . É conhecido que o valor de Perron da estrela com k vértices é $\frac{k+1+\sqrt{k^2+2k-3}}{2}$, enquanto o valor de Perron do caminho com 3 vértices é $\frac{1}{2(1-\cos(\frac{\pi}{7}))}$, então basta resolver $\frac{k+1+\sqrt{k^2+2k-3}}{2} < \frac{1}{2(1-\cos(\frac{\pi}{7}))}$, obtendo $k = 2$, $k = 3$*

e $k = 4$. Portanto, os quatro maiores elementos de τ são $\frac{3-\sqrt{5}}{2}$, $2 - \sqrt{3}$, $\frac{5-\sqrt{21}}{2}$ e $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$.

4.2 Ordenação de árvores

Em 1990, GRONE e MERRIS [8] introduziram a ordenação de árvores a partir da conectividade algébrica, buscando explicar o porquê de algumas árvores serem mais conexas que outras. A partir deste trabalho, a ordenação de árvores recebeu uma grande atenção dentro da Teoria Espectral de Grafos.

Nesta seção, a partir do *survey* de ABREU *et al.* [11], apresentamos resultados clássicos de ordenação pela conectividade algébrica para árvores com diâmetro três e para *caterpillars*. Para mais resultados sobre conectividade algébrica, destacamos o *survey* de ABREU [37].

Teorema 4.2.1 ([38]). *Se $T \not\cong S_n$ é uma árvore com $n \geq 6$ vértices, então $a(T) < 0.49$.*

Teorema 4.2.2 ([38]). *Seja T é uma árvore com diâmetro $\text{diam}(T)$. Então*

$$a(T) \leq 1 \left(2 - \cos \left(\frac{\pi}{\text{diam}(T) + 1} \right) \right).$$

Além disso, PATRA e LAL [39] estudaram o comportamento da conectividade algébrica para o *grafting* de uma aresta.

Teorema 4.2.3 ([39]). *Seja G uma árvore com $n \geq 2$ vértices e seja u um vértice de G . Seja $G_u(k, l)$ o grafo definido anteriormente (ver Figura 3.9). Se $k \geq l \geq 1$, então*

$$a(G_u(k+1, l-1)) \leq a(G_u(k, l)).$$

Observando o Teorema 4.2.2, é intuitivo pensar (mas não verdadeiro) que quanto maior o diâmetro de uma árvore, menor será sua conectividade algébrica. Em [8], Grone e Merris estudaram as árvores de diâmetro 3, que podem ser vistas como duplas vassouras de diâmetro 3 (ou duplas estrelas) e denotadas por $V(k, l, 3)$, como mostra a Figura 4.1.

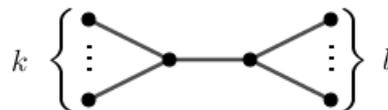


Figura 4.1: Árvore $V(k, l, 3)$.

Os resultados abaixo, provados em [8], ordenam todas as árvores de diâmetro três com n vértices:

Proposição 4.2.4 ([8]). *Fixados $n \geq 4$, $1 \leq l \leq \frac{n-2}{2}$ e $k = n - l - 2$, seja $V = V(k, l, 3)$. Então, o polinômio característico laplaciano de V é*

$$P_L^V(x) = x(x-1)^{n-4}[x^3 - (n+2)x^2 + (2n+kl+1)x - n].$$

Corolário 4.2.5 ([8]). *Fixados $n \geq 4$, $1 \leq l \leq \frac{n-2}{2}$ e $k = n - l - 2$. Então $L(V(k, l, 3))$ possui exatamente um autovalor positivo menor que 1, denotado por a_l , e igual a $a(V(k, l, 3))$. Além disso, a_l é uma função estritamente decrescente de l , $1 \leq l \leq \frac{(n-2)}{2}$.*

Assim, a partir destes resultados, temos:

$$a(V(k, l, 3)) < a(V(k+1, l-1, 3)), \text{ para } 2 \leq l \leq \frac{n-2}{2} \text{ e } k = n - l - 2.$$

Uma pergunta natural, a partir da ordenação dada em GRONE e MERRIS [8], é se, dado um diâmetro d , é possível obter uma ordenação para as duplas vassouras com esse diâmetro, $V(s, t, d)$.

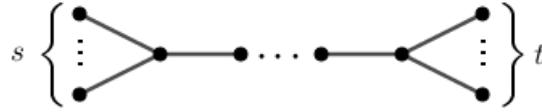


Figura 4.2: Árvore $V(s, t, d)$, $n = s + t + d - 1$.

FALLAT e KIRKLAND [40] obtiveram uma ordenação completa para essa família:

$$a(V(s, t, d)) < a(V(s-1, t+1, d)), \text{ para } 2 \leq s \leq \frac{n-2}{2} \text{ e } t = n - d - s - 1.$$

Neste mesmo trabalho, os autores definiram e ordenaram as árvores $P(k, l, d)$, com diâmetro d ímpar. Estas árvores são construídas a partir do caminho P_{d+1} , ligando k vértices pendentes ao vértice $\frac{d+1}{2}$ e l vértices pendentes ao vértice $\frac{d+3}{2}$, como mostra a Figura 4.3.

A ordenação obtida em [40] para essa classe, fixados n e d é:

$$a(P(k, l, d)) < a(P(k-1, l+1, d)), \text{ onde } 1 \leq k \leq \frac{n-2}{2} \text{ e } l = n - k - d - 1.$$

É interessante notar que todas as árvores $V(s, t, d)$ e $P(k, l, d)$ são *caterpillars*. Denotaremos por $\mathcal{D}^{n,d}$ o conjunto de todos os *caterpillars* com n vértices e diâmetro

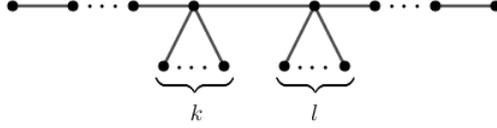


Figura 4.3: Árvore $P(k, l, d)$.

d .

$$\mathcal{D}^{n,d} = \{D(p_1, \dots, p_{d-1}) : p_1 + p_2 + \dots + p_{d-1} = n - d + 1, p_1 \geq 1\}.$$

ROJO *et al.* [41] também consideraram os seguintes subconjuntos de $\mathcal{D}^{n,d}$: $\mathcal{D}_1^{n,d}$, $\mathcal{D}_{\frac{d-1}{2}}^{n,d}$, com d ímpar, e $\mathcal{D}_k^{n,d}$, com $1 < k < \lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor$, descritos abaixo.

$$\mathcal{D}_1^{n,d} = \{D(p_1, 1, \dots, 1, p_{d-1}) \in \mathcal{D}^{n,d} : p_1 \leq p_{d-1}\};$$

$$\mathcal{D}_{\frac{d-1}{2}}^{n,d} = \{D(1, \dots, 1, p_{\frac{d-1}{2}}, p_{\frac{d+1}{2}}, 1, \dots, 1) \in \mathcal{D}^{n,d} : p_{\frac{d-1}{2}} \leq p_{\frac{d+1}{2}}\};$$

$$\mathcal{D}_k^{n,d} = \{D(1, \dots, 1, p_k, 1, \dots, 1, p_{d-k}, 1, \dots, 1) \in \mathcal{D}^{n,d} : p_k \leq p_{d-k}\}.$$

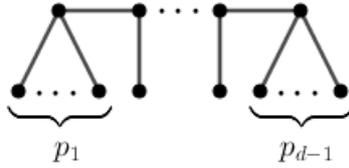


Figura 4.4: Árvore $D(p_1, 1, \dots, 1, p_{d-1})$.

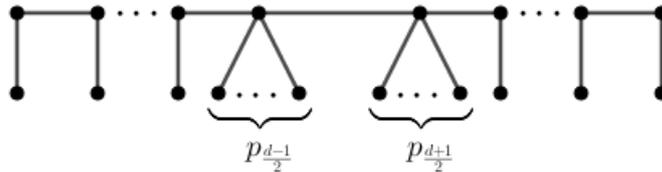


Figura 4.5: Árvore $D(1, \dots, 1, p_{\frac{d-1}{2}}, p_{\frac{d+1}{2}}, 1, \dots, 1)$.

Os autores ordenaram esses três subconjuntos.

Teorema 4.2.6 ([41]). *A conectividade algébrica de $D(a, 1, \dots, 1, b) \in \mathcal{D}_1^{n,d}$ é uma função estritamente decrescente de $1 \leq a \leq \frac{1}{2}(n - 2d + 4)$.*

Teorema 4.2.7 ([41]). *Para d ímpar, a conectividade algébrica de $D(1, \dots, 1, a, b, 1, \dots, 1) \in \mathcal{D}_{\frac{d-1}{2}}^{n,d}$ é uma função estritamente decrescente de $1 \leq a \leq \frac{1}{2}(n - 2d + 4)$.*

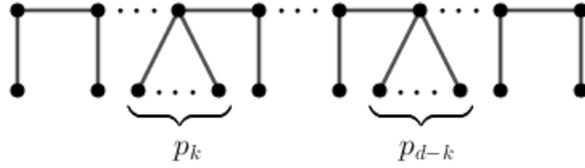


Figura 4.6: Árvore $D(1, \dots, 1, p_k, 1, \dots, 1, p_{d-k}, 1, \dots, 1)$.

Teorema 4.2.8 ([41]). Para $1 < k < \lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor$, a conectividade algébrica de $D(1, \dots, 1, a, 1, \dots, 1, b, 1, \dots, 1) \in \mathcal{D}_k^{n,d}$ é uma função estritamente decrescente de $1 \leq a \leq \frac{1}{2}(n - 2d + 4)$.

4.3 As árvores $T(k, p, q)$ e $T(j, k, p, q)$

A partir de resultados envolvendo a matriz *bottleneck*, YUAN *et al.* [15] introduziram seis classes de árvores que maximizam a conectividade algébrica, provando que uma árvore com $n \geq 15$ vértices possui conectividade algébrica maior ou igual a $2 - \sqrt{3}$ se, e somente se, pertence a uma dessas seis classes.

Para a definição das classes citadas, vamos denotar por $T(k, p, q)$ a árvore de ordem n que contém um vértice v_0 tal que:

$$T(k, p, q) - v_0 = kK_{1,2} \dot{\cup} pK_{1,1} \dot{\cup} qK_1.$$

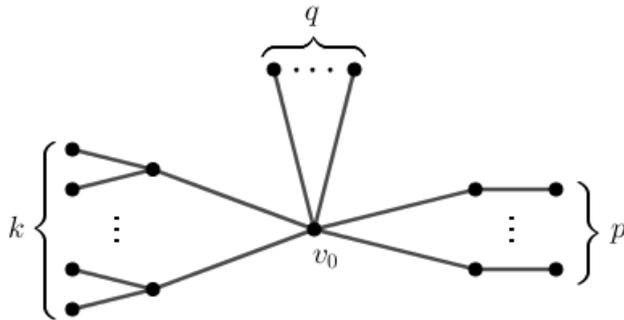


Figura 4.7: Árvore $T(k, p, q)$.

Fixado n , foram definidas as seguintes classes de árvores:

1. $C_1 = \{T(0, 0, n - 1)\} = \{S_n\}$;
2. $C_2 = \{T(0, 1, n - 3)\} = \{V(n - 3, 1, 3)\}$;
3. $C_3 = \{T(0, p, q) : p \geq 2, 2p + q = n - 1\}$;

4. $C_4 = \{T(1, 0, n - 4)\} = \{V(n - 4, 2, 3)\}$;
5. $C_5 = \{T(1, p, q) : p \geq 1, 2p + q = n - 4\}$;
6. $C_6 = \{T(k, p, q) : k \geq 2, 3k + 2p + q = n - 1\}$.

Observemos que as classes C_1 , C_2 e C_4 são constituídas por apenas uma árvore cada. Além disso, toda árvore $T(k, p, q)$ possui diâmetro no máximo 4. Nas Figuras 4.8 e 4.9, apresentamos exemplos de árvores com 13 vértices para cada classe.

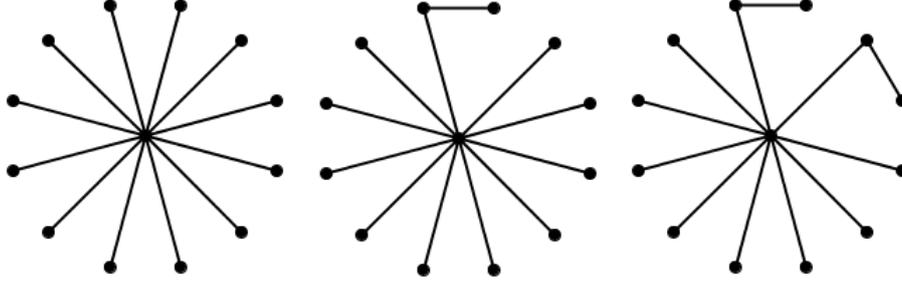


Figura 4.8: Árvores $T(0, 0, 12)$, $T(0, 1, 10)$ e $T(0, 2, 8)$.

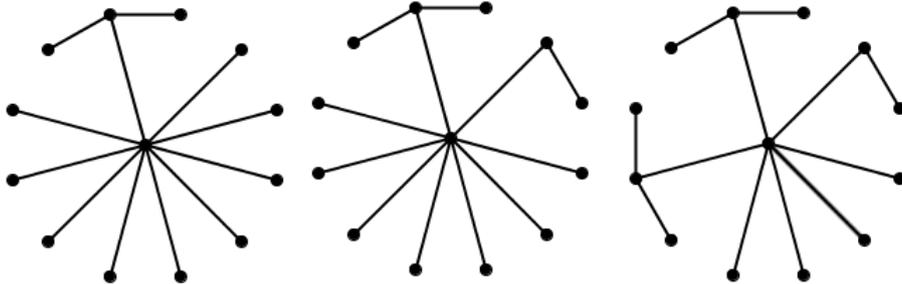


Figura 4.9: Árvores $T(1, 0, 9)$, $T(1, 1, 7)$ e $T(2, 1, 4)$.

Destacamos o seguinte resultado de [15], que trata da ordenação das seis classes e apresenta a conectividade algébrica das árvores contidas em cada uma das classes.

Teorema 4.3.1 ([15]). *Para cada $1 \leq i \leq 6$, seja $T_i \in C_i$ uma árvore de ordem $n \geq 8$. Então:*

1. $a(T_1) > a(T_2) > a(T_3) > a(T_4) > a(T_5) > a(T_6)$;
2. • $a(T_1) = 1$,
- $a(T_2)$ é a menor raiz da equação cúbica

$$x^3 - (n + 2)x^2 + (3n - 2)x - n = 0,$$

- $a(T_3) = \frac{3-\sqrt{5}}{2}$,

- $a(T_4)$ é a menor raiz da equação cúbica

$$x^3 - (n+2)x^2 + (4n-7)x - n = 0,$$

- $a(T_5)$ é a menor raiz da equação

$$x^5 - (n-p+5)x^4 + (7n-7p)x^3 - (14n-13p-19)x^2 + (7n-3p-7)x - n = 0,$$

- $a(T_6) = 2 - \sqrt{3}$;

3. Se T é uma árvore de ordem $n \geq 15$ e $T \notin \bigcup_{i=1}^6 C_i$, então $a(T) < a(T_6) = 2 - \sqrt{3}$.

Continuando o trabalho de YUAN *et al.* [15], WANG e TAN [16] buscaram caracterizar as árvores com pelo menos 45 vértices que possuem a conectividade algébrica no intervalo $[\frac{5-\sqrt{21}}{2}, 2 - \sqrt{3})$, propondo 4 novas classes de árvores. Para definir estas classes, denotemos por $T(j, k, p, q)$ a árvore de ordem n que contém um vértice v_0 tal que:

$$T(j, k, p, q) - v_0 = jK_{1,3} \dot{\cup} kK_{1,2} \dot{\cup} pK_{1,1} \dot{\cup} qK_1.$$

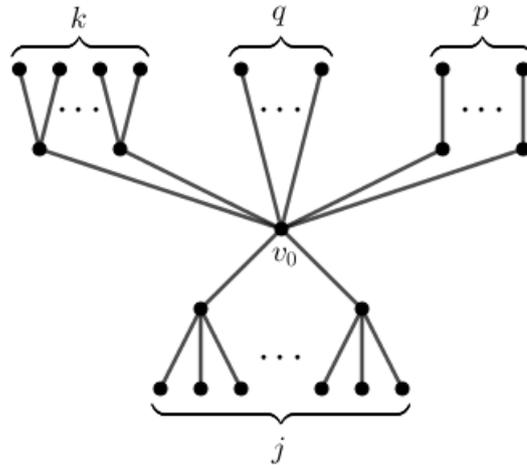


Figura 4.10: Árvore $T(j, k, p, q)$.

Fixado n , foram definidas as seguintes classes de árvores:

1. $C'_1 = \{T(1, 0, 0, q) : q = n - 5\} = \{V(n - 5, 3, 3)\}$;
2. $C'_2 = \{T(1, 0, p, q) : 2p + q = n - 5\}$;

$$3. C'_3 = \{T(1, k, p, q) : k \geq 1, 3k + 2p + q = n - 5\};$$

$$4. C'_4 = \{T(j, k, p, q) : j \geq 2, 4j + 3k + 2p + q = n - 1\}.$$

É importante observar que a classe C'_1 possui apenas uma árvore de diâmetro três e que todas as árvores das classes C'_i , $2 \leq i \leq 4$, possuem diâmetro quatro. Ainda em [16], são apresentados vários resultados envolvendo a comparação da conectividade algébrica dessas árvores. Destacamos os resultados abaixo, que mostram que todas as árvores da classe C'_4 possuem a mesma conectividade algébrica e que, para $n \geq 45$, somente árvores em $\cup_{i=1}^4 C'_i$ possuem conectividade algébrica no intervalo $[\frac{5-\sqrt{21}}{2}, 2-\sqrt{3})$.

Lema 4.3.2 ([16]). *Para árvores arbitrárias $T \in C'_2$, $H \in C'_3$ e $F \in C'_4$, temos que $\min\{a(T), a(H)\} > a(F) = \frac{5-\sqrt{21}}{2}$.*

Teorema 4.3.3 ([16]). *Se T é uma árvore de ordem $n \geq 45$, então $\frac{5-\sqrt{21}}{2} \leq a(T) < 2 - \sqrt{3}$ se, e somente se, $T \in \cup_{i=1}^4 C'_i$.*

Observação 4.3.4. *As classes C'_i , $1 \leq i \leq 4$, não podem ser ordenadas pela conectividade algébrica, diferente das classes C_i , $1 \leq i \leq 6$ (Teorema 4.3.1). Por exemplo, $a(T(48, 43; 3, 1, 0, \dots, 0)) > a(T(48, 42; 3, 2, 0, \dots, 0)) > a(T(48, 23; 3, 1, \dots, 1, 0))$, com $T(48, 23; 3, 1, \dots, 1, 0)$, $T(48, 43; 3, 1, 0, \dots, 0) \in C'_2$ e $T(48, 42; 3, 2, 0, \dots, 0) \in C'_3$.*

Observe que já é conhecido quais árvores, dentre todas a partir de uma ordem apropriada, possuem as conectividades algébricas maiores que os três maiores pontos limites para a conectividade algébrica de árvores: $\frac{3-\sqrt{5}}{2}$, $2 - \sqrt{3}$ e $\frac{5-\sqrt{21}}{2}$. Os dois primeiros valores são estudados no Teorema 4.3.1, enquanto o último valor é investigado no Lema 4.3.2 e Teorema 4.3.3. Em particular, todas as árvores nas classes C_3 , C_6 e C'_4 possuem conectividade algébrica respectivamente iguais ao primeiro, segundo e terceiro pontos limites.

Capítulo 5

Árvores com conectividade algébrica maior ou igual a $2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$

Apresentaremos nesse capítulo as nossas principais contribuições: determinaremos quais árvores possuem a conectividade algébrica maior ou igual ao quarto ponto limite: $2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. Para isso, iremos estender os trabalhos de YUAN *et al.* [15] e WANG e TAN [16], considerando quatro novas classes de árvores: C_i , $7 \leq i \leq 10$. Mostraremos que se T é uma árvore com $n \geq 32$ vértices, então $a(T) \geq 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$ se, e somente se, $T \in \cup_{i=1}^{10} C_i$. Além disso, para $n \geq 45$, provaremos que as dez classes podem ser ordenadas pela conectividade algébrica e apresentaremos a árvore com a maior conectividade algébrica em C_9 . Nós finalizamos esse capítulo utilizando os *softwares Nauty and Traces* [18] e *SageMath* [19] para fazer uma busca computacional de todas as árvores T com menos de 32 vértices e $a(T) \geq 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. Os resultados aqui apresentados foram publicados em BELAY *et al.* [17].

5.1 Novas Classes

Como pontuado em CVETKOVIĆ *et al.* [24], a conectividade algébrica de uma árvore T pode ser limitada superiormente em função do seu diâmetro, $diam(T)$. Como consequência do Teorema 4.2.2, se $diam(T) \geq 7$, então $a(T) < 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. Por essa razão, a partir de agora, nós precisamos apenas considerar árvores com diâmetro menor ou igual a seis. Definimos abaixo quatro novas classes de árvores.

Definição 5.1.1. *Seja $T(i, j, k, p, q)$ uma árvore de ordem n , que contém um vértice v_0 tal que $T(i, j, k, p, q) - v_0 = iP_3 \dot{\cup} jK_{1,3} \dot{\cup} kK_{1,2} \dot{\cup} pK_{1,1} \dot{\cup} qK_1$ (Figura 5.1).*

Definimos as seguintes classes de árvores:

1. $C_7 = \{T(0, 1, k, p, q) : 3k + 2p + q = n - 5\}$;
2. $C_8 = \{T(0, j, k, p, q) : j \geq 2, 4j + 3k + 2p + q = n - 1\}$;
3. $C_9 = \{T(1, j, k, p, q) : 4j + 3k + 2p + q = n - 4\}$;
4. $C_{10} = \{T(i, j, k, p, q) : i \geq 2, 3i + 4j + 3k + 2p + q = n - 1\}$;

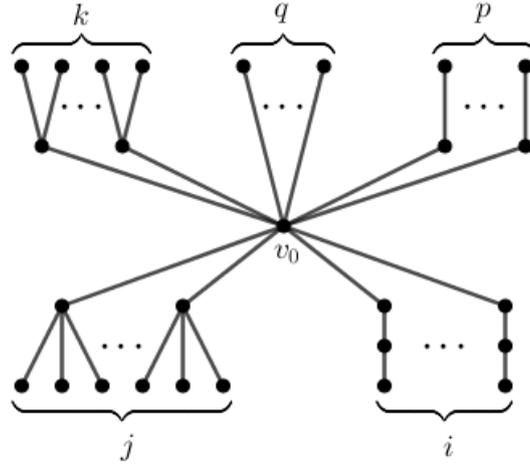


Figura 5.1: Árvore enraizada $T(i, j, k, p, q)$.

Observe que as classes C_i , $1 \leq i \leq 6$ e C'_i , $1 \leq i \leq 4$, podem ser escritas como árvores $T(i, j, k, p, q)$. Na verdade, no primeiro caso, $T(0, 0, k, p, q) = T(k, p, q)$. Além disso, como $C'_1 = \{T(0, 1, 0, 0, n - 5)\}$, $C'_2 = \{T(0, 1, 0, p, q) : p \geq 1\}$, $C'_3 = \{T(0, 1, k, p, q) : k \geq 1\}$ e $C'_4 = \{T(0, j, k, p, q) : j \geq 2\}$, é fácil identificar que $C_7 = C'_1 \cup C'_2 \cup C'_3$ e $C_8 = C'_4$. É necessário reescrever as classes C'_i , $1 \leq i \leq 4$, dessa forma para poderem ser ordenadas pela conectividade algébrica (veja Observação 4.3.4).

5.2 Resultados Auxiliares

Nós começamos essa seção mostrando que qualquer árvore de uma ordem apropriada, não pertencente à classe C_i , $1 \leq i \leq 10$, possui uma subárvore com conectividade algébrica menor que $2 \left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right) \approx 0.19806$. Nós dividimos a demonstração pelo diâmetro.

Lema 5.2.1. *Se T é uma árvore de ordem $n \geq 32$, $\text{diam}(T) = 3$ e $T \notin \bigcup_{i=1}^{10} C_i$, então $a(T) < 2 \left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$.*

Demonstração. Seja $T = V(k, n - 2 - k, 3)$ uma árvore de ordem $n \geq 32$. Como $T \notin \bigcup_{i=1}^{10} C_i$, $k \geq 4$. Além disso, a partir do Teorema 4.2.5, $a(V(k, l, 3)) < a(V(k + 1, l - 1, 3))$ se $k > l$, então $a(V(k, n - 2 - k, 3)) \leq a(V(n - 6, 4, 3))$.

Então, como $n \geq 32$, pelo Teorema 4.1.9, concluímos que $a(V(k, n - 2 - k, 3)) \leq a(V(n - 6, 4, 3)) \leq a(V(26, 4, 3)) \approx 0,19712$. \square

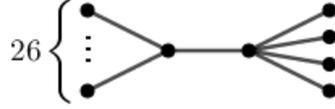


Figura 5.2: $V(26, 4, 3)$.

Lema 5.2.2. Se T é uma árvore de ordem $n \geq 30$, $\text{diam}(T) = 4$ e $T \notin \bigcup_{i=1}^{10} C_i$, então $a(T) < 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$.

Demonstração. Seja $T = T(n, b; h_1, \dots, h_b)$ uma árvore de diâmetro quatro (veja Figura 2.1), $T \notin \bigcup_{i=1}^{10} C_i$. Então, $h_1 \geq 4$.

Como o ramo $K_{1,1}$ pode ser obtido de duas arestas pendentes em u_0 pelo grafting de uma aresta, e esse movimento não aumenta a conectividade algébrica (Teorema 4.2.3), os casos onde $h_k, k \geq 3$, são iguais a 1 não serão considerados.

A seguir, consideramos as estruturas possíveis para T . Para aplicar o Teorema 4.1.9, em cada caso exibiremos subárvores T' tais que $a(T') < 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$.

1) $h_2 = 1$. Como $T \notin \bigcup_{i=1}^{10} C_i$, podemos assumir que $h_3 = 0$. Como $n \geq 30$, T possui pelo menos mais 21 vértices. Existem três opções:

- todos os vértices são adjacentes a u_0 ou u_1 e $a(T) \leq a(T(30, 24; 4, 1, 0, \dots, 0)) \approx 0,19784$ ou $a(T) \leq a(T(30, 3; 25, 1, 0)) \approx 0,19301$;

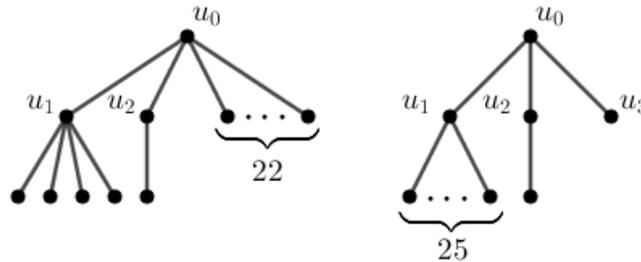


Figura 5.3: $T(30, 24; 4, 1, 0, \dots, 0)$ e $T(30, 3; 25, 1, 0)$.

- pelo menos 11 vértices são adjacentes a u_1 , um vértice é adjacente a u_0 e $a(T) \leq a(T(21, 4; 15, 1, 0, 0)) \approx 0,18814$;

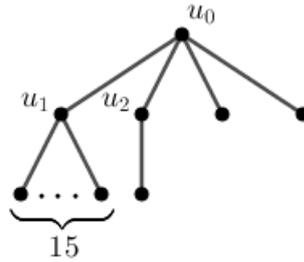


Figura 5.4: $T(21, 4; 15, 1, 0, 0)$.

- pelo menos 11 vértices são adjacentes a u_0 , um vértice é adjacente a u_1 e $a(T) \leq a(T(21, 14; 5, 1, 0, \dots, 0)) \approx 0, 19015$.

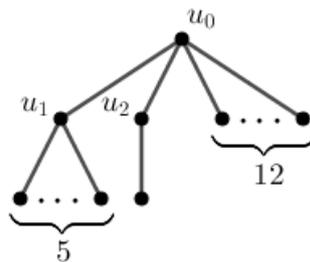


Figura 5.5: $T(21, 14; 5, 1, 0, \dots, 0)$.

2) $h_2 = 2$. As únicas opções são:

2.1) h_3 não existe. Então, $a(T) \leq a(T(30, 2; 25, 2)) \approx 0, 15603$.

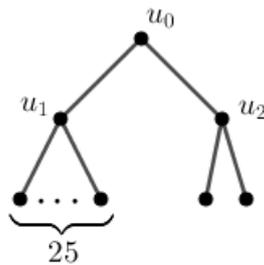


Figura 5.6: $T(30, 2; 25, 2)$.

2.2) $h_3 = 0$. Análogo ao que foi feito no item 1, T tem pelo menos mais 20 vértices e existem três opções:

- todos os vértices são adjacentes a u_0 ou u_1 e $a(T) \leq a(T(30, 23; 4, 2, 0, \dots, 0)) \approx 0, 19414$ ou $a(T) \leq a(T(30, 3; 24, 2, 0)) \approx 0, 14790$;

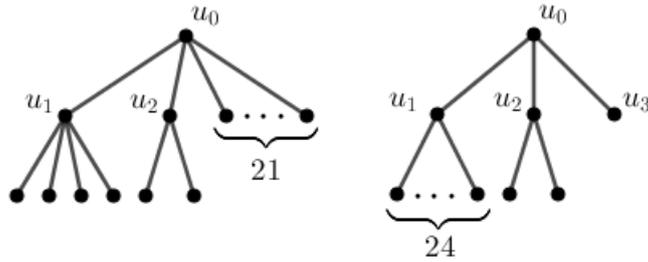


Figura 5.7: $T(30, 23; 4, 2, 0, \dots, 0)$ e $T(30, 3; 24, 2, 0)$.

- pelo menos 10 vértices são adjacentes a u_1 , um vértice é adjacente a u_0 e $a(T) \leq a(T(21, 4; 14, 2, 0, 0)) \approx 0,15379$;

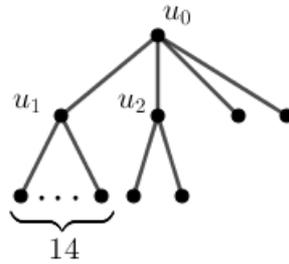


Figura 5.8: $T(21, 4; 14, 2, 0, 0)$.

- pelo menos 10 vértices são adjacentes a u_0 , um vértice é adjacente a u_1 e $a(T) \leq a(T(21, 13; 5, 2, 0, \dots, 0)) \approx 0,18260$.

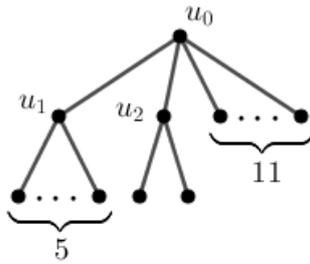


Figura 5.9: $T(21, 13; 5, 2, 0, \dots, 0)$.

- 2.3)** $h_3 = 2$ e $h_4 = 0$ ou h_4 não existe. Então, T tem pelo menos mais 17 vértices e pelo menos 9 são adjacentes a u_0 ou u_1 . Então, $a(T) \leq a(T(21, 12; 4, 2, 2, 0, \dots, 0)) \approx 0,19639$ ou $a(T) \leq a(T(21, 3; 13, 2, 2)) \approx 0,13776$.

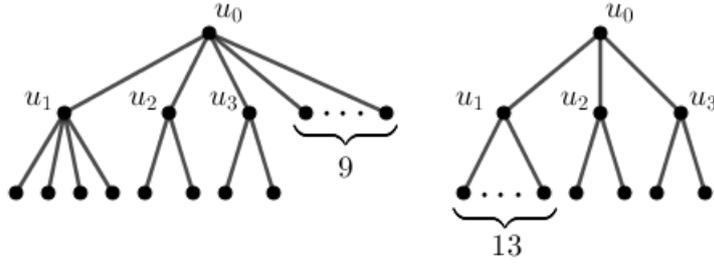


Figura 5.10: $T(21, 12; 4, 2, 2, 0, \dots, 0)$ e $T(21, 3; 13, 2, 2)$.

2.4) $h_3 = 2$ e $h_4 = 2$. Então, $a(T) \leq a(T(15, 4; 4, 2, 2, 2)) \approx 0,19646$.

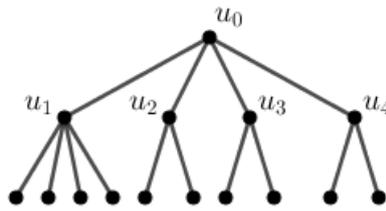


Figura 5.11: $T(15, 4; 4, 2, 2, 2)$.

3) $h_2 \geq 3$. Então, $a(T) \leq a(T(10, 2; 4, 3)) \approx 0,19021$.

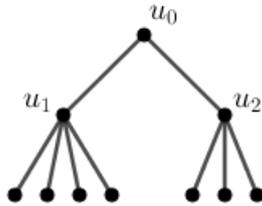


Figura 5.12: $T(10, 2; 4, 3)$.

Portanto, $a(T) < 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. □

Usando as mesmas técnicas do Lema 5.2.2, podemos enunciar:

Lema 5.2.3. *Se T é uma árvore de ordem $n \geq 24$, $\text{diam}(T) = 5$ e $T \notin \bigcup_{i=1}^{10} C_i$, então $a(T) < 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$.*

Demonstração. Seja $T = T(n, r, s; a_1, \dots, a_r; b_1, \dots, b_s)$ uma árvore de diâmetro cinco (veja Figura 2.2). Análogo à demonstração do Lema 5.2.2, casos onde a_k e b_k , $k \geq 2$, são iguais a 1 não serão considerados (Teorema 4.2.3). Além disso, podemos assumir sem perda de generalidade, que $a_1 \geq b_1$.

Novamente, consideraremos as possíveis estruturas para T e iremos exibir subárvores T' tais que $a(T') < 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$.

1) $a_1 = b_1 = 1$. Como $T \notin \bigcup_{i=1}^{10} C_i$, podemos assumir que $a_2 = b_2 = 0$. Além disso, como $n \geq 24$, T possui pelo menos mais 16 vértices. Por simetria, existem apenas duas opções para esses vértices:

- todos os vértices são adjacentes a u_0 e $a(T) \leq a(T(24, 18, 2; 1, 0, \dots, 0; 1, 0)) \approx 0, 19738$;

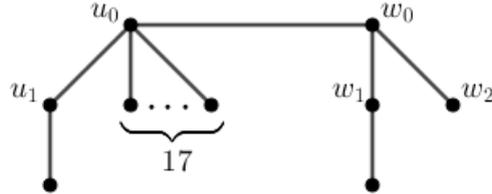


Figura 5.13: $T(24, 18, 2; 1, 0, \dots, 0; 1, 0)$.

- pelo menos 8 vértices são adjacentes a u_0 , um vértice é adjacente a w_0 e $a(T) \leq a(T(17, 10, 3; 1, 0, \dots, 0; 1, 0, 0)) \approx 0, 19548$.

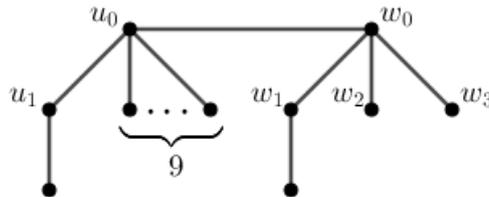


Figura 5.14: $T(17, 10, 3; 1, 0, \dots, 0; 1, 0, 0)$.

2) $a_1 = b_1 = 2$. Então, $a(T) \leq a(T(8, 1, 1; 2; 2)) \approx 0, 18639$.



Figura 5.15: $T(8, 1, 1; 2; 2)$.

3) $a_1 = 2$ e $b_1 = 1$. Como $T \notin \bigcup_{i=1}^{10} C_i$, podemos assumir que $b_2 = 0$.

3.1) Se $a_2 = 2$, as únicas opções são:

- $b_3 = 0$. Então, $a(T) \leq a(T(12, 2, 3; 2, 2; 1, 0, 0)) \approx 0, 18639$.

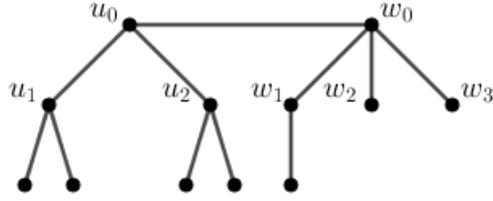


Figura 5.16: $T(12, 2, 3; 2, 2; 1, 0, 0)$.

- b_3 não existe. Então, $a(T) \leq a(T(13, 4, 2; 2, 2, 0, 0; 1, 0)) \approx 0,19756$.

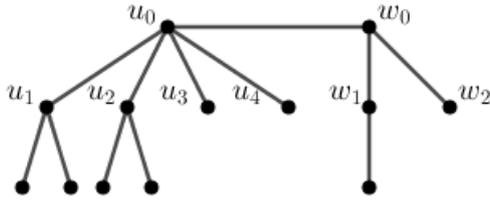


Figura 5.17: $T(13, 4, 2; 2, 2, 0, 0; 1, 0)$.

3.2) Se $a_2 = 0$, como T possui pelo menos mais 15 vértices, existem três opções:

- todos os vértices são adjacentes a u_0 e $a(T) \leq a(T(24, 17, 2; 2, 0, \dots, 0; 1, 0)) \approx 0,19334$;

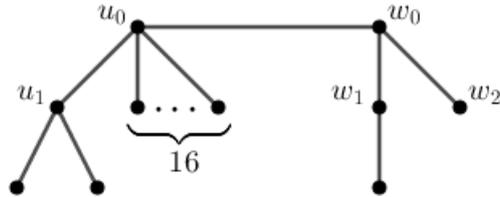


Figura 5.18: $T(24, 17, 2; 2, 0, \dots, 0; 1, 0)$.

- apenas um vértice é adjacente a w_0 , os vértices restantes são adjacentes a u_0 e $a(T) \leq a(T(24, 16, 3; 2, 0, \dots, 0; 1, 0, 0)) \approx 0,17709$;

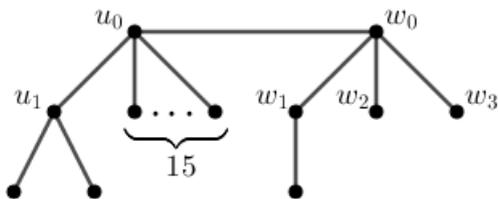


Figura 5.19: $T(24, 16, 3; 2, 0, \dots, 0; 1, 0, 0)$.

- pelo menos dois vértices são adjacentes a w_0 e $a(T) \leq a(T(11, 2, 4; 2, 0; 1, 0, 0, 0)) \approx 0,19321$.

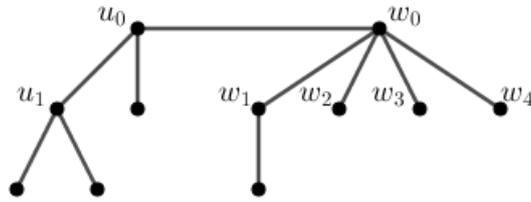


Figura 5.20: $T(11, 2, 4; 2, 0; 1, 0, 0, 0)$.

- 3.3)** Se a_2 não existe, todos os vértices restantes são adjacentes a w_0 e $a(T) \leq a(T(10, 1, 4; 2; 1, 0, 0, 0)) \approx 0,19669$.

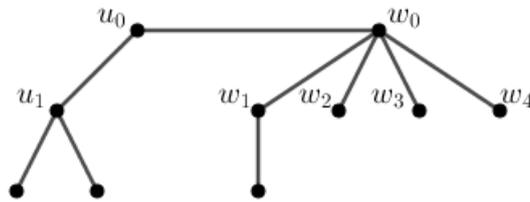


Figura 5.21: $T(10, 1, 4; 2; 1, 0, 0, 0)$.

4) $a_1 = 3$. As opções são:

- $b_1 = 1$ e, já que $T \notin \cup_{i=1}^{10} C_i$, $b_2 \in \{0, 1\}$. Então, $a(T) \leq a(T(9, 1, 2; 3; 1, 0)) \approx 0,18836$.

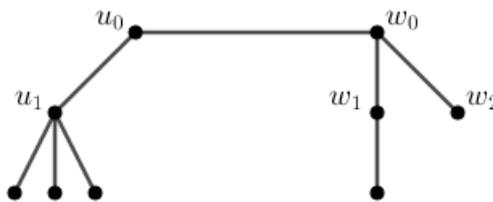


Figura 5.22: $T(9, 1, 2; 3; 1, 0)$.

- $b_1 \in \{2, 3\}$. Então, $a(T) \leq a(T(9, 1, 1; 3; 2)) \approx 0,16492$.



Figura 5.23: $T(9, 1, 1; 3; 2)$.

5) $a_1 \geq 4$. Então, $a(T) \leq a(T(9, 1, 1; 4; 1)) \approx 0,18760$.



Figura 5.24: $T(9, 1, 1; 4; 1)$.

Portanto, $a(T) < 2 \left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. □

Para a demonstração do Lema 5.2.4, considere as árvores T'_1 , T'_2 , T'_3 , T'_4 e T'_5 (Figura 5.25).

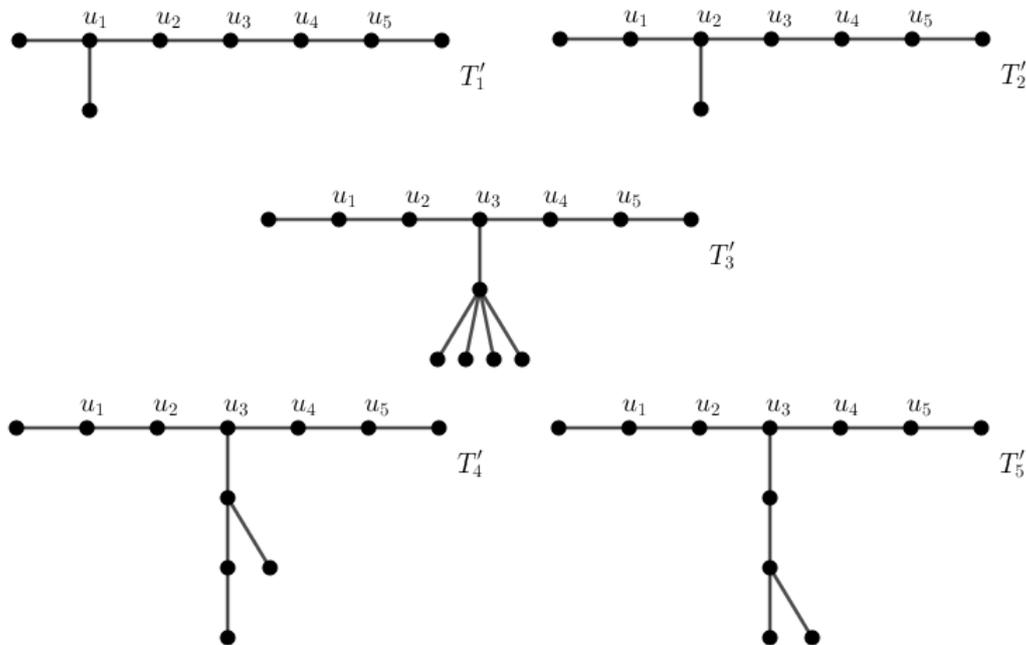


Figura 5.25: T'_1 , T'_2 , T'_3 , T'_4 and T'_5 .

Lema 5.2.4. Se T é uma árvore de ordem $n \geq 12$, $\text{diam}(T) = 6$ e $T \notin \cup_{i=1}^{10} C_i$, então $a(T) < 2 \left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$.

Demonstração. Como $\text{diam}(T) = 6$, T possui P_7 como subárvore, com os vértices não pendentos rotulados como na Figura 5.26.



Figura 5.26: P_7

Como $T \notin \cup_{i=1}^{10} C_i$, apenas os seguintes casos podem ocorrer:

- 1) $d(u_1) > 2$ ou $d(u_2) > 2$ (por simetria, u_4 ou u_5). Então T vai ter T'_1 ou T'_2 como subárvore. Como $a(T'_1) \approx 0,16672$ e $a(T'_2) \approx 0,18639$, o resultado segue do Teorema 4.1.9.
- 2) $d(u_1) = d(u_2) = d(u_4) = d(u_5) = 2$ e $d(u_3) > 2$. Novamente, como $T \notin \cup_{i=1}^{10} C_i$, T vai ter T'_3 ou T'_4 ou T'_5 como subárvore. Como $a(T'_3) \approx 0,18309$, $a(T'_4) \approx 0,18216$ e $a(T'_5) \approx 0,15740$, o resultado segue do Teorema 4.1.9.

Logo, obtemos o resultado desejado. □

Visando obter a árvore com a maior conectividade algébrica em C_9 , precisamos comparar a conectividade algébrica de árvores nessa classe. Lembramos que uma árvore T é chamada de árvore do Tipo 2 se nenhuma entrada do vetor Fiedler de T é zero. KIRKLAND *et al.* [35] provaram que T é uma árvore do Tipo 2 se, e somente se, existe um único ramo de Perron em cada vértice.

Lema 5.2.5. Para $j \geq 1$, sejam $T(1, j, k, p, q)$ e $T(1, j - 1, k, p, q + 4)$ árvores de ordem n em C_9 . Então, $a(T(1, j - 1, k, p, q + 4)) > a(T(1, j, k, p, q))$.

Demonstração. Sejam $T(1, j, k, p, q)$ e $T(1, j - 1, k, p, q + 4)$ rotuladas como na Figura 5.27. Seja \mathbf{x} um vetor de Fiedler normalizado de $T(1, j - 1, k, p, q + 4)$. Como existe um único ramo de Perron em cada vértice de $T(1, j - 1, k, p, q + 4)$, a mesma é uma árvore do Tipo 2. Então $\mathbf{x}_{v_i} \neq 0$, $1 \leq i \leq n$.

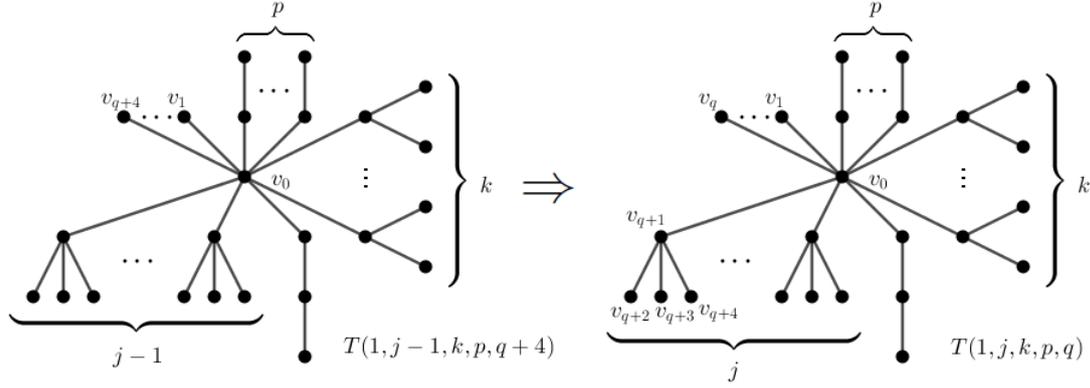


Figura 5.27: $T(1, j-1, k, p, q+4)$ e $T(1, j, k, p, q)$

A partir das equações de autovetor e autovalor, sabemos que $\mathbf{x}_{v_i}(a(T(1, j-1, k, p, q+4)) - 1) = -\mathbf{x}_{v_0}$, $1 \leq i \leq q+4$ e, como $a(T(1, j-1, k, p, q+4)) < 1$, segue que $\mathbf{x}_{v_1} = \mathbf{x}_{v_2} = \dots = \mathbf{x}_{v_{q+4}}$. Então,

$$\begin{aligned} a(T(1, j, k, p, q)) &= \min_{\substack{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\} \\ \mathbf{y} \perp \mathbf{1}}} \frac{\mathbf{y}^T L(T(1, j, k, p, q)) \mathbf{y}}{\mathbf{y}^T \mathbf{y}} \leq \frac{\mathbf{x}^T L(T(1, j, k, p, q)) \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} \\ &= \mathbf{x}^T L(T(1, j, k, p, q)) \mathbf{x}, \end{aligned}$$

implicando em

$$\begin{aligned} a(T(1, j, k, p, q)) - a(T(1, j-1, k, p, q+4)) &\leq \\ &\leq \mathbf{x}^T L(T(1, j, k, p, q)) \mathbf{x} - \mathbf{x}^T L(T(1, j-1, k, p, q+4)) \mathbf{x} \\ &= \mathbf{x}^T (L(T(1, j, k, p, q)) - L(T(1, j-1, k, p, q+4))) \mathbf{x} \\ &= (\mathbf{x}_{v_{q+2}} - \mathbf{x}_{v_{q+1}})^2 + (\mathbf{x}_{v_{q+3}} - \mathbf{x}_{v_{q+1}})^2 + (\mathbf{x}_{v_{q+4}} - \mathbf{x}_{v_{q+1}})^2 \\ &\quad - (\mathbf{x}_{v_{q+2}} - \mathbf{x}_{v_0})^2 - (\mathbf{x}_{v_{q+3}} - \mathbf{x}_{v_0})^2 - (\mathbf{x}_{v_{q+4}} - \mathbf{x}_{v_0})^2 \\ &= 0 - 3(\mathbf{x}_{v_{q+4}} - \mathbf{x}_{v_0})^2 = -3a(T(1, j-1, k, p, q+4))^2 \mathbf{x}_{v_{q+4}}^2 < 0. \end{aligned}$$

Portanto, $a(T(1, j-1, k, p, q+4)) > a(T(1, j, k, p, q))$. \square

Lema 5.2.6. Para $k \geq 1$, sejam $T(1, j, k, p, q)$ e $T(1, j, k-1, p, q+3)$ árvores de ordem n em C_9 . Então, $a(T(1, j, k-1, p, q+3)) > a(T(1, j, k, p, q))$.

Demonstração. Seja \mathbf{x} um vetor de Fiedler normalizado de $T(1, j, k-1, p, q+3)$. Como existe um único ramo de Perron em cada vértice de $T(1, j, k-1, p, q+3)$, a mesma é uma árvore do Tipo 2. Então $\mathbf{x}_{v_i} \neq 0$, $1 \leq i \leq n$.

Análogo à demonstração do Lema 5.2.5,

$$\begin{aligned} a(T(1, j, k, p, q)) - a(T(1, j, k - 1, p, q + 3)) &\leq \\ &\leq \mathbf{x}^T L(T(1, j, k, p, q)) \mathbf{x} - \mathbf{x}^T L(T(1, j, k - 1, p, q + 3)) \mathbf{x} \\ &= -2a(T(1, j, k - 1, p, q + 3))^2 \mathbf{x}_{v_{q+3}}^2 < 0. \end{aligned}$$

Portanto, $a(T(1, j, k - 1, p, q + 3)) > a(T(1, j, k, p, q))$. \square

5.3 Resultados Principais

Usando os resultados da Seção 5.2, podemos provar as nossas principais contribuições.

Teorema 5.3.1. *Seja T uma árvore de ordem $n \geq 32$ e $T \notin \cup_{i=1}^{10} C_i$, então $a(T) < 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$.*

Demonstração. Seja T uma árvore de ordem $n \geq 32$ e $T \notin \cup_{i=1}^{10} C_i$. Se $\text{diam}(T) \geq 7$, pelo Teorema 4.2.2, $a(T) < 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. Além disso, se $3 \leq \text{diam}(T) \leq 6$, pelos Lemas 5.2.1, 5.2.2, 5.2.3 e 5.2.4, $a(T) < 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. \square

Teorema 5.3.2. *Seja T é uma árvore de ordem $n \geq 45$, então $2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right) \leq a(T) < \frac{5-\sqrt{21}}{2}$ se, e somente se, $T \in C_9 \cup C_{10}$. Além disso, se $T \in C_{10}$, então $a(T) = 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$.*

Demonstração. Seja T uma árvore de ordem $n \geq 45$ e $2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right) \leq a(T) < \frac{5-\sqrt{21}}{2}$. Pelo Teorema 5.3.1, $T \in \cup_{i=1}^{10} C_i$ e segue dos Teoremas 4.3.1 e 4.3.3 que $T \notin \cup_{i=1}^8 C_i$. Como consequência, $T \in C_9 \cup C_{10}$.

Por outro lado, seja T uma árvore de ordem $n \geq 45$ e $T \in C_9 \cup C_{10}$. Pelos Teoremas 4.3.1 e 4.3.3, como T possui pelo menos 45 vértices e $T \notin \cup_{i=1}^8 C_i$, $a(T) < \frac{5-\sqrt{21}}{2}$. Além disso, pelo Teorema 4.1.8, temos que $a(T) \geq 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$ e, se $T \in C_{10}$, $a(T) = \frac{1}{\rho(M_i)} = 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. \square

Uma cota inferior para a conectividade algébrica das árvores em $\cup_{i=1}^{10} C_i$ pode ser obtida, independente da sua ordem.

Corolário 5.3.3. *Seja $T \in \cup_{i=1}^{10} C_i$ uma árvore de ordem n . Então, $a(T) \geq 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$.*

Demonstração. Seja $T(i, j, k, p, q) \in \cup_{i=1}^{10} C_i$. Se $n \geq 32$, pelo Teorema 5.3.1, $a(T) \geq 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. Além disso, se $n < 32$, $T(i, j, k, p, q + 32 - n)$ é uma árvore de ordem 32 e, pelo Teorema 5.3.1, $a(T(i, j, k, p, q + 32 - n)) \geq 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. Então, pelo Teorema 4.1.9, $a(T(i, j, k, p, q)) \geq a(T(i, j, k, p, q + 32 - n)) \geq 2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. \square

Então, a partir dos Teoremas 4.1.8, 4.3.1, 4.3.3 e 5.3.2, nós podemos concluir que é possível ordenar o conjunto das árvores com pelo menos 45 vértices e conectividade algébrica maior que $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$ em dez classes:

Corolário 5.3.4. *Seja T_i uma árvore de ordem $n \geq 45$ na classe C_i , $1 \leq i \leq 10$. Então:*

$$a(T_1) > a(T_2) > a(T_3) > a(T_4) > a(T_5) > a(T_6) > a(T_7) > a(T_8) > a(T_9) > a(T_{10}).$$

É importante enfatizar que, embora o problema para ordenação de classes fosse tratado em [15] (Teorema 4.3.1), esta ordenação não era possível a partir das quatro classes C'_i , $1 \leq i \leq 4$ (Observação 4.3.4). Dessa forma, o resultado acima estende o número de classes de ordenação de seis para dez. Além disso, árvores com diâmetro cinco e seis passam a ser incluídas nessa ordenação, dado que anteriormente apenas árvores com diâmetro menor ou igual a quatro eram consideradas.

Como consequência do Teorema 4.3.1, Lema 4.3.2 e Teorema 5.3.2, segue que entre essas dez classes de árvores, as únicas classes onde mais de um valor é atingido pela conectividade algébrica são C_5 , C_7 e C_9 . Nas duas primeiras classes, para $n \geq 45$, as árvores com maior conectividade algébrica são, respectivamente, $T(0, 0, 1, 0, n - 4)$ e $T(0, 1, 0, 0, n - 5)$ (veja Lema 4.8 de [15] e Teorema 3.2 de [16]). Nós provamos que $T(1, 0, 0, 0, n - 4)$ tem a maior conectividade algébrica em C_9 .

Corolário 5.3.5. *Seja T uma árvore de ordem $n \geq 45$. Se $T \notin \bigcup_{i=1}^8 C_i$, então $a(T) \leq a(T(1, 0, 0, 0, n - 4))$ e a igualdade ocorre se, e somente se $T \cong T(1, 0, 0, 0, n - 4)$.*

Demonstração. Seja T uma árvore de ordem $n \geq 45$, $T \notin \bigcup_{i=1}^8 C_i$. Como $T(1, 0, 0, 0, n - 4) \in C_9$, se $T \in C_9$, pelo Teorema 4.2.3, Lema 5.2.5 e Lema 5.2.6, $a(T) \leq a(T(1, 0, 0, 0, n - 4))$. Se $T \notin \bigcup_{i=1}^9 C_i$, pelo Teorema 5.3.1, Teorema 5.3.2 e Corolário 5.3.4, $a(T) \leq 2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right) < a(T(1, 0, 0, 0, n - 4))$. \square

5.4 Árvores com conectividade algébrica maior ou igual a $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$

O Teorema 5.3.1 implica que toda árvore com pelo menos 32 vértices, que não está em $\bigcup_{i=1}^{10} C_i$, possui conectividade algébrica menor que $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. Para árvores com menos de 32 vértices, que não estão em $\bigcup_{i=1}^{10} C_i$, é possível fazer uma busca computacional com o objetivo de investigar quais árvores possuem conectividade algébrica maior que $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. Nós fizemos isso utilizando os softwares Nauty and Traces [18], para gerar todas as árvores não isomorfas com menos de 32 vértices

e diâmetro até seis (Teorema 4.2.2), e SageMath [19] para determinar quais delas possuem a conectividade algébrica maior que $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$. Das árvores restantes, encontramos 346 árvores que não estão em $\bigcup_{i=1}^{10} C_i$.

Na Tabela 5.1, $T(i, j, k, p, q) \diamond T'$ denota a árvore obtida de $T(i, j, k, p, q)$ adicionando o ramo T' ao vértice v_0 , i.e., $(T(i, j, k, p, q) \diamond T') - v_0 = iP_3 \dot{\cup} jK_{1,3} \dot{\cup} kK_{1,2} \dot{\cup} pK_{1,1} \dot{\cup} qK_1 \dot{\cup} T'$. Os ramos T_A, T_B, T_C, T_D e T_E são exibidos na Figura 5.28. Além disso, a_{max} e a_{min} denotam a maior e menor conectividade algébrica na classe, respectivamente. Esses valores são alcançados nos limites de cada intervalo.

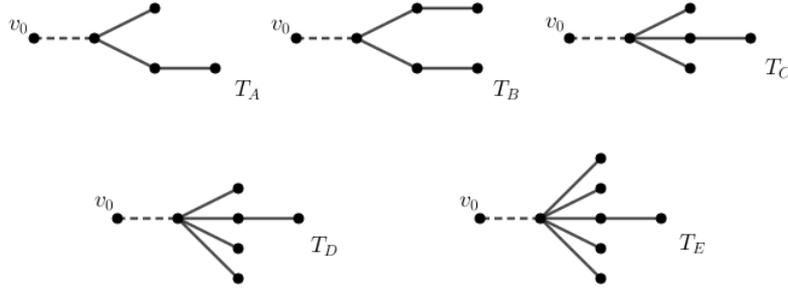


Figura 5.28: Árvores enraizadas T_A, T_B, T_C, T_D e T_E .

Classe	Intervalo	a_{max}	a_{min}
$B(p, 4, 3)$	$4 \leq p \leq 25$	0.29843	0.19807
$B(p, 5, 3)$	$5 \leq p \leq 12$	0.25834	0.20035
$B(p, 6, 3)$	$6 \leq p \leq 9$	0.22799	0.19941
$T(0, 0, 0, 1, n - 8) \diamond K_{1,4}$	$9 \leq n \leq 29$	0.26795	0.19883
$T(0, 0, 0, 2, n - 10) \diamond K_{1,4}$	$10 \leq n \leq 28$	0.24415	0.19857
$T(0, 0, 0, 3, n - 12) \diamond K_{1,4}$	$12 \leq n \leq 27$	0.22704	0.19832
$T(0, 0, 0, 4, n - 14) \diamond K_{1,4}$	$14 \leq n \leq 26$	0.21653	0.19809
$T(0, 0, 0, 5, n - 16) \diamond K_{1,4}$	$16 \leq n \leq 24$	0.20939	0.19881
$T(0, 0, 0, 6, n - 18) \diamond K_{1,4}$	$18 \leq n \leq 23$	0.20422	0.19856
$T(0, 0, 0, 7, n - 20) \diamond K_{1,4}$	$20 \leq n \leq 22$	0.20030	0.19832
$T(0, 0, 1, 0, n - 9) \diamond K_{1,4}$	$9 \leq n \leq 24$	0.22013	0.19890
$T(0, 0, 1, 1, n - 11) \diamond K_{1,4}$	$11 \leq n \leq 23$	0.21398	0.19866
$T(0, 0, 1, 2, n - 13) \diamond K_{1,4}$	$13 \leq n \leq 22$	0.20871	0.19843
$T(0, 0, 1, 3, n - 15) \diamond K_{1,4}$	$15 \leq n \leq 21$	0.20434	0.19821
$T(0, 0, 1, 4, n - 17) \diamond K_{1,4}$	$17 \leq n \leq 19$	0.20075	0.19887
$T(0, 0, 2, 0, n - 12) \diamond K_{1,4}$	$12 \leq n \leq 18$	0.20442	0.19873
$T(0, 0, 2, 1, n - 14) \diamond K_{1,4}$	$14 \leq n \leq 17$	0.20113	0.19852
$T(0, 0, 2, 2, n - 16) \diamond K_{1,4}$	$n = 16$	0.19832	

Classe	Intervalo	a_{max}	a_{min}
$T(0, 0, 0, 1, n - 9) \diamond K_{1,5}$	$10 \leq n \leq 18$	0.25351	0.19931
$T(0, 0, 0, 2, n - 11) \diamond K_{1,5}$	$11 \leq n \leq 17$	0.22789	0.19841
$T(0, 0, 0, 3, n - 13) \diamond K_{1,5}$	$13 \leq n \leq 15$	0.20871	0.20093
$T(0, 0, 1, 0, n - 10) \diamond K_{1,5}$	$10 \leq n \leq 13$	0.20759	0.19935
$T(0, 0, 1, 1, n - 12) \diamond K_{1,5}$	$n = 12$	0.19869	
$T(0, 0, 0, 1, n - 10) \diamond K_{1,6}$	$11 \leq n \leq 15$	0.24291	0.20427
$T(0, 0, 0, 2, n - 12) \diamond K_{1,6}$	$12 \leq n \leq 14$	0.21604	0.20220
$T(0, 0, 1, 0, n - 11) \diamond K_{1,6}$	$n = 11$	0.19844	
$T(0, 0, 0, 1, n - 11) \diamond K_{1,7}$	$12 \leq n \leq 15$	0.23479	0.20119
$T(0, 0, 0, 2, n - 13) \diamond K_{1,7}$	$13 \leq n \leq 14$	0.20701	0.19897
$T(0, 0, 0, 1, n - 12) \diamond K_{1,8}$	$13 \leq n \leq 15$	0.22387	0.20278
$T(0, 0, 0, 2, n - 14) \diamond K_{1,8}$	$n = 14$	0.19989	
$T(0, 0, 0, 1, 1) \diamond K_{1,n-5}$	$14 \leq n \leq 24$	0.22315	0.19884
$T(0, 0, 0, 1, 2) \diamond K_{1,n-6}$	$15 \leq n \leq 17$	0.20871	0.19969
$T(0, 0, 0, 1, n - 7) \diamond T_A$	$8 \leq n \leq 23$	0.25088	0.19852
$T(0, 0, 0, 2, n - 9) \diamond T_A$	$9 \leq n \leq 22$	0.23106	0.19823
$T(0, 0, 0, 3, n - 11) \diamond T_A$	$11 \leq n \leq 20$	0.21673	0.19911
$T(0, 0, 0, 4, n - 13) \diamond T_A$	$13 \leq n \leq 19$	0.20812	0.19881
$T(0, 0, 0, 5, n - 15) \diamond T_A$	$15 \leq n \leq 18$	0.20236	0.19851
$T(0, 0, 0, 6, n - 17) \diamond T_A$	$n = 17$	0.19823	
$T(0, 0, 1, 0, n - 8) \diamond T_A$	$8 \leq n \leq 18$	0.21368	0.19863
$T(0, 0, 1, 1, n - 10) \diamond T_A$	$10 \leq n \leq 17$	0.20759	0.19836
$T(0, 0, 1, 2, n - 12) \diamond T_A$	$12 \leq n \leq 16$	0.20272	0.19811
$T(0, 0, 1, 3, n - 14) \diamond T_A$	$n = 14$	0.19888	
$T(0, 0, 2, 0, n - 11) \diamond T_A$	$11 \leq n \leq 12$	0.19944	0.19847
$T(0, 0, 0, 1, n - 8) \diamond T_C$	$10 \leq n \leq 16$	0.23303	0.19873
$T(0, 0, 0, 2, n - 10) \diamond T_C$	$10 \leq n \leq 14$	0.22055	0.20133
$T(0, 0, 0, 3, n - 12) \diamond T_C$	$12 \leq n \leq 13$	0.20390	0.20033
$T(0, 0, 1, 0, n - 9) \diamond T_C$	$9 \leq n \leq 11$	0.20426	0.19893
$T(0, 0, 0, 1, n - 8) \diamond T_B$	$11 \leq n \leq 13$	0.21176	0.19833
$T(0, 0, 0, 2, n - 10) \diamond T_B$	$10 \leq n \leq 11$	0.20871	0.20246
$T(0, 0, 0, 1, n - 9) \diamond T_D$	$12 \leq n \leq 14$	0.21542	0.20081
$T(0, 0, 0, 2, n - 11) \diamond T_D$	$12 \leq n \leq 13$	0.20509	0.19923
$T(0, 0, 0, 1, n - 10) \diamond T_E$	$n = 14$	0.19883	

Tabela 5.1: Árvore com conectividade algébrica maior que $2 \left(1 - \cos \left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$ que não estão em $\bigcup_{i=1}^{10} C_i$

Capítulo 6

Ordenação de árvores pelo α –índice

Neste capítulo, o nosso objetivo é estudar a ordenação de árvores a partir dos índices das matrizes A_α , propostas por NIKIFOROV [4] em 2017. Chamaremos esse autovalor de α –índice e buscaremos generalizar alguns resultados envolvendo ordenação de árvores pelos índices das matrizes de adjacência e laplaciana presentes no Capítulo 3. Em particular, complementando os trabalhos de NIKIFOROV [4] e GUO e ZHOU [21] que encontraram as duas árvores com os maiores α –índices, determinaremos as próximas quatro árvores que maximizam esse autovalor.

6.1 Matriz A_α

Buscando generalizar as matrizes de adjacência e laplaciana sem sinal de um grafo, NIKIFOROV [4] propôs a combinação linear convexa das matrizes $A(G)$ e $Deg(G)$, como definido a seguir.

Definição 6.1.1. *A matriz A_α de um grafo G é definida por*

$$A_\alpha(G) = \alpha Deg(G) - (1 - \alpha)A(G), \quad 0 \leq \alpha \leq 1.$$

É claro que $A_0(G) = A(G)$, $A_1(G) = Deg(G)$ e $2A_{\frac{1}{2}}(G) = Q(G)$. Além disso, como para árvores $Q(G)$ e $L(G)$ são matrizes semelhantes, os resultados envolvendo $A_\alpha(G)$ também generalizam os que temos para $L(G)$, no caso de G ser uma árvore. Denotaremos os índices dessas matrizes por $\rho_\alpha(G)$.

Apesar de recente, essa matriz recebeu muita atenção nos últimos anos e destacamos os trabalhos [20, 21, 42–47], que serão especialmente úteis nesse capítulo.

6.2 Alguns resultados importantes

A seguir, apresentamos resultados envolvendo ordenação de árvores para a família de matrizes A_α e que serão utilizados nas próximas seções.

Proposição 6.2.1 ([4]). *Seja G um grafo conexo de ordem n e sejam u e v vértices equivalentes em G . Se $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ é um autovetor de $\rho_\alpha(G)$, então $\mathbf{x}_u = \mathbf{x}_v$.*

Na sequência, apresentaremos uma cota simples que relaciona o grau máximo de um grafo com os índices das matrizes de adjacência e A_α . Em particular, como $\rho(A(G)) > \delta(G)$, podemos concluir que $\rho_\alpha(G) \geq 1$ sempre que G for um grafo conexo com pelo menos uma aresta, o que será utilizado em resultados futuros.

Proposição 6.2.2 ([20]). *Se G é um grafo com grau máximo Δ e $\alpha \in [0, 1]$, então*

$$\rho(A(G)) \leq \rho_\alpha(G) \leq \Delta.$$

Se $\rho_\alpha(G) = \Delta$, então ou $\alpha = 1$ ou G é regular.

Os próximos teoremas generalizam resultados clássicos da literatura para $A(G)$ e $Q(G)$, presentes no Capítulo 3.

Teorema 6.2.3 ([43]). *Seja $\alpha \in [0, 1]$ e seja G um grafo de ordem n . Sejam $u, v \in V(G)$ e $S \subset V(G)$, tais que $u, v \notin S$ e para todo $w \in S$, $uw \in E(G)$ e $vw \notin E(G)$. Seja H o grafo obtido deletando as arestas uw e adicionando as arestas vw , para todo $w \in S$. Se S é não vazio e existe um autovetor positivo $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ de $\rho_\alpha(G)$ tal que $\mathbf{x}_v \geq \mathbf{x}_u$, então*

$$\rho_\alpha(H) > \rho_\alpha(G).$$

Teorema 6.2.4 ([21]). *Seja G um grafo conexo e $e = uv$ uma aresta de corte de G . Suponha que $G - e$ consista em duas componentes não triviais G_1 e G_2 com $u \in G_1$ e $v \in G_2$. Seja G' o grafo obtido de G identificando u de G_1 com v de G_2 e adicionando uma aresta pendente a esse vértice comum. Então $\rho_\alpha(G) < \rho_\alpha(G')$, para $0 \leq \alpha < 1$.*

Teorema 6.2.5 ([21]). *Seja G um grafo conexo não trivial e $u \in V(G)$. Para inteiros $k \geq l \geq 1$ e $0 \leq \alpha < 1$,*

$$\rho_\alpha(G_u(k, l)) > \rho_\alpha(G_u(k + 1, l - 1)).$$

NIKIFOROV *et al.* [20] provaram que a estrela S_n maximiza o α -índice entre todas as árvores de ordem n .

Teorema 6.2.6 ([20]). *Se T é uma árvore de ordem n e $\alpha \in [0, 1]$, então*

$$\rho(A_\alpha(T)) \leq \frac{\alpha n + \sqrt{\alpha^2 n^2 + 4(n-1)(1-2\alpha)}}{2}.$$

A igualdade ocorre se, e somente se, T é a estrela S_n .

GUO e ZHOU [21] provaram que entre todas as árvores de ordem n e diâmetro d , $T_{n,d}$ (ver Figura 2.3) maximiza o α -índice. Apesar de ser um resultado presente na literatura, a demonstração foi incluída por apresentar uma técnica que será utilizada para a demonstração de outros fatos.

Teorema 6.2.7 ([21]). *Seja $T \in \mathcal{T}_{n,d}$. Para $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(T) \leq \rho_\alpha(T_{n,d})$, com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong T_{n,d}$.*

Demonstração. Sejam T a árvore com α -índice máximo entre todas as árvores com n vértices e diâmetro d , $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ o vetor de Perron de $A_\alpha(T)$ e $P = v_1 \dots v_{d+1}$ um caminho diametral de T . Para todo $u \in V(T)$, seja $d_T(u, P) = \min\{d_T(u, v_i) : i = 1, \dots, d+1\}$. Suponha que exista $uv \in E(T) \setminus E(P)$ não pendente. Assuma que $d_T(u, P) < d_T(v, P)$.

Seja w o vértice de P com $d_T(u, P) = d_T(u, w)$. Seja $T' = T - \{vz : vz \in E(T), z \neq u\} + \{wz : vz \in E(T), z \neq u\}$, se $\mathbf{x}_w \geq \mathbf{x}_v$ e $T' = T - \{wz : wz \in E(T) \setminus \{e\}\} + \{vz : wz \in E(T) \setminus \{e\}\}$, caso contrário, onde e é a aresta incidente em w no caminho conectando w e v . T' tem n vértices e diâmetro d . Pelo Teorema 6.2.3, $\rho_\alpha(T') > \rho_\alpha(T)$, o que é uma contradição. Logo, toda aresta fora de P é uma aresta pendente a algum vértice de P , exceto v_1 e v_{d+1} .

Suponha agora que existam u e v em P com grau maior que dois. Podemos assumir que $\mathbf{x}_u \geq \mathbf{x}_v$. Seja $T'' = T - \{vz : vz \in E(T) \setminus E(P)\} + \{uz : vz \in E(T) \setminus E(P)\}$. Novamente, pelo Teorema 6.2.3, temos que $\rho_\alpha(T'') > \rho_\alpha(T)$, uma contradição. Segue que existe no máximo um vértice em P com grau maior que 2.

Portanto, T é obtida a partir de P ligando $n - d - 1$ arestas pendentes a um vértice diferente de v_1 e v_{d+1} . Pelo Teorema 6.2.5, temos que $T \cong T_{n,d}$. \square

Como consequência dos Teoremas 6.2.4 e 6.2.7, podemos provar que a árvore $T_{n,d}$, $n \geq 4$ e $d \geq 3$, maximiza o α -índice entre todas as árvores com n vértices e diâmetro maior ou igual a d .

Lema 6.2.8. *Para n fixado, $d \geq 4$ e $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(T_{n,d-1}) > \rho_\alpha(T_{n,d})$.*

Demonstração. Seja T' a árvore obtida de $T_{n,d}$ identificando os vértices $v_{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor}$ e $v_{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor + 1}$ e adicionando um vértice pendente ao vértice $v_{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor}$. É claro que $T' \cong T_{n,d-1}$. Pelo Teorema 6.2.4, temos

$$\rho_\alpha(T') = \rho_\alpha(T_{n,d-1}) > \rho_\alpha(T_{n,d}).$$

□

Corolário 6.2.9. *Para n fixado, $d \geq 3$ e $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(T_{n,d}) \geq \rho_\alpha(T)$, para todo $T \in \mathcal{T}_{n,d^*}$ e $d^* \geq d$.*

Demonstração. Utilizando o Lema 6.2.8 recursivamente, temos que $\rho_\alpha(T_{n,d}) \geq \rho_\alpha(T_{n,d^*})$. Além disso, o Teorema 6.2.7 nos diz que $\rho_\alpha(T_{n,d^*}) \geq \rho_\alpha(T)$, para todo $T \in \mathcal{T}_{n,d^*}$. Logo, $\rho_\alpha(T_{n,d}) \geq \rho_\alpha(T)$, para todo $T \in \mathcal{T}_{n,d^*}$. □

Analogamente ao problema de determinar a árvore com n vértices e diâmetro fixado que maximiza o α -índice, podemos considerar a questão de encontrar a árvore que maximiza esse autovalor em $\mathcal{T}_n^{(\Delta)}$, o conjunto das árvores de n vértices e grau máximo fixado Δ .

Estudos similares foram conduzidos para as matrizes de adjacência e laplaciana. Nesse sentido, os resultados que apresentamos abaixo podem ser vistos em parte como generalizações para os Teoremas 3.1.17, 3.2.12 e 3.2.13.

Teorema 6.2.10. *Para $n \geq 4$, $0 \leq \alpha < 1$ e $n - 1 > \Delta \geq \lceil \frac{n}{2} \rceil$, seja $T \in \mathcal{T}_n^{(\Delta)}$. Então, $\rho_\alpha(T) \leq \rho_\alpha(V(\Delta - 1, n - \Delta - 1, 3))$ com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong V(\Delta - 1, n - \Delta - 1, 3)$.*

Demonstração. Seja T uma árvore com α -índice máximo entre todas as árvores com n vértices e grau máximo Δ e $w \in V(T)$ tal que $d(w) = \Delta$.

Vamos supor que $d(T) \geq 5$ e seja $P = v_0 \dots v_d$ um caminho diametral de T . Como $\text{diam}(P) \geq 5$, existe $v_i v_{i+1}$ aresta não pendente em P tal que $v_i \neq w$ e $v_{i+1} \neq w$. Seja T' a árvore obtida de T identificando v_i e v_{i+1} e adicionando uma aresta pendente ao vértice v_i . Pelo Teorema 6.2.4, $\rho_\alpha(T') > \rho_\alpha(T)$. Como T' é uma árvore e $d(w) = \Delta \geq \lceil \frac{n}{2} \rceil$, é claro que o grau máximo de T' ainda é Δ , o que é uma contradição. Logo, $\text{diam}(T) \leq 4$.

Vamos supor agora que $\text{diam}(T) = 4$ e seja $P = v_0 v_1 v_2 v_3 v_4$. Dois casos podem ocorrer:

1. $w \notin P$. Seja T' a árvore obtida de T identificando v_1 e v_2 e adicionando uma aresta pendente ao vértice v_1 . Pelo Teorema 6.2.4, $\rho_\alpha(T') > \rho_\alpha(T)$. Novamente, é claro que o grau máximo de T' é Δ , o que é uma contradição.
2. $w \in P$ e $w = v_1$ ou $w = v_3$. Suponhamos, sem perda de generalidade, que $w = v_3$. Seja T' a árvore obtida de T identificando v_1 e v_2 e adicionando uma aresta pendente ao vértice v_1 . Pelo Teorema 6.2.4, $\rho_\alpha(T') > \rho_\alpha(T)$. Novamente, é claro que o grau máximo de T' é Δ , o que é uma contradição.
3. $w \in P$ e $w = v_2$. Seja \mathbf{x} o vetor de Perron de $A_\alpha(T)$ e, sem perda de generalidade, suponhamos que $\mathbf{x}_{v_1} \geq \mathbf{x}_{v_3}$. Então, $T' = T - v_3 v_4 + v_1 v_4$ ainda tem grau máximo Δ e, pelo Teorema 6.2.3, $\rho_\alpha(T') > \rho_\alpha(T)$, o que é uma contradição.

Logo, $\text{diam}(T) = 3$. Como $V(\Delta - 1, n - \Delta - 1, 3)$ é a única árvore com diâmetro 3 em $\mathcal{T}_n^{(\Delta)}$, temos que $V(\Delta - 1, n - \Delta - 1, 3)$ possui o α -índice máximo entre todas as árvores com n vértices e grau máximo Δ . \square

Ainda considerando árvores com n vértices e grau máximo fixado, o próximo resultado determina aquela que minimiza o α -índice.

Teorema 6.2.11. *Para $n \geq 4$ e $0 \leq \alpha < 1$, seja $T \in \mathcal{T}_n^{(\Delta)}$. Então, $\rho_\alpha(T) \geq \rho_\alpha(V(\Delta - 1, 1, n - \Delta + 1))$ com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong V(\Delta - 1, 1, n - \Delta + 1)$.*

Demonstração. Seja T uma árvore com α -índice mínimo entre todas as árvores com n vértices e grau máximo Δ . Sejam $w \in V(T)$ tal que $d(w) = \Delta$ e $P = v_0 \dots v_k$ um caminho de comprimento máximo em T tal que $w \in P$.

Suponha que exista $v_i \in P$, $v_i \neq w$, tal que $d(v_i) > 2$. Vamos provar que, para todo vértice $v \in V(T) \setminus P$ adjacente a v_i , $d(v) \geq 2$. Se $d(v) = 1$, seja $T' = T - v_i v_{i+1} + v v_{i+1}$. Pelo Teorema 6.2.4, $\rho_\alpha(T') < \rho_\alpha(T)$, o que é uma contradição. Logo, todo vértice em P diferente de w tem grau menor ou igual a dois ou é adjacente a um vértice $v \in V(T) \setminus P$ com $d(v) \geq 2$.

Para todo $u \in V(T)$, seja $d_T(u, P) = \min\{d_T(u, v_i) : i = 0, \dots, k\}$. Suponha, agora, que exista uma aresta $u_1 u_2 \in E(T) \setminus E(P)$ que não incide em P . Assuma que $d_T(u_1, P) < d_T(u_2, P)$. Seja v_j o vértice de P com $d_T(u_1, P) = d_T(u_1, v_j)$. Podemos supor, sem perda de generalidade, que para $0 < i < j$, $d(v_i) = 2$. Seja P' um caminho contendo u_1 e u_2 e que possui v_j e uma folha f como extremos. Denotamos por q o comprimento de P' e, como P é o maior caminho de T que contém w , é claro que $j \geq q$. Dois casos podem ocorrer:

1. para todo vértice $u \in P' \setminus \{v_j, f\}$, $d(u) = 2$. Nesse caso, como $j \geq q$, T pode ser escrita como $T'_{v_j}(j, q)$ (ver Figura 3.9) e, pelo Teorema 6.2.5, $\rho_\alpha(T) = \rho_\alpha(T'_{v_j}(j, q)) > \rho_\alpha(T'_{v_j}(j + 1, q - 1))$;
2. existe um vértice $u \in P'$, $d(u) \geq 3$. Se existem dois ramos distintos de u que são caminhos de tamanho $a - 1$ e $b - 1$, com $a \geq b \geq 1$, então T pode ser escrita como $T'_u(a, b)$ e, pelo Teorema 6.2.5, $\rho_\alpha(T) = \rho_\alpha(T'_u(a, b)) > \rho_\alpha(T'_u(a + 1, b - 1))$. Caso contrário, existe um vértice u' em um ramo de u que não contém v_j , que possui dois ramos distintos que são caminhos e o argumento segue de forma análoga.

Logo, como T possui α -índice mínimo, toda aresta em T incide em P , que é, portanto, um caminho diametral de T . Por fim, se $w \neq v_1$ e $w \neq v_{k-1}$, pelo Teorema 6.2.5 $T' = T - v_0 v_1 + v_k v_0$ ou $T'' = T - v_k v_{k-1} + v_0 v_k$ possui α -índice menor que T , o que é uma contradição.

Portanto, $T \cong V(\Delta - 1, 1, n - \Delta + 1)$. \square

Além disso, podemos provar que a árvore $V(\Delta - 1, 1, n - \Delta + 1)$, $n \geq 4$, possui o α -índice maior que toda árvore $V(\Delta^* - 1, 1, n - \Delta^* + 1)$, $\Delta^* < \Delta$.

Lema 6.2.12. *Para n fixado e $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(V(\Delta - 1, 1, n - \Delta + 1)) > \rho_\alpha(V(\Delta - 2, 1, n - \Delta + 2))$.*

Demonstração. Seja $P = v_0 \dots v_{n-\Delta+2}$ um caminho diametral de $V(\Delta - 2, 1, n - \Delta + 2)$, com $d(v_1) = \Delta$. Seja T' a árvore obtida de $V(\Delta - 2, 1, n - \Delta + 2)$ identificando os vértices v_1 e v_2 e adicionando uma aresta pendente ao vértice v_1 . É claro que $T' \cong V(\Delta - 1, 1, n - \Delta + 1)$. Pelo Teorema 6.2.4, temos

$$\rho_\alpha(T') = \rho_\alpha(V(\Delta - 1, 1, n - \Delta + 1)) > \rho_\alpha(V(\Delta - 2, 1, n - \Delta + 2)).$$

□

Para um grafo G qualquer, com α -índice $\rho_\alpha(G)$, sabemos que $\rho_\alpha(G)$ é a maior raiz da equação $p_\alpha(G; x) = 0$, então $p_\alpha(G; x) > 0$ para todo $x > \rho_\alpha(G)$. Logo, temos imediatamente o seguinte resultado:

Lema 6.2.13. *Sejam G_1 e G_2 dois grafos. Se $p_\alpha(G_1; x) < p_\alpha(G_2; x)$ para todo $x \geq \rho_\alpha(G_1)$, então $\rho_\alpha(G_1) > \rho_\alpha(G_2)$.*

O Teorema 6.2.7 e o Lema 6.2.8, apesar de tratarem do problema de maximizar o α -índice para árvores com n vértices e diâmetro d fixado, ou ordená-las a partir deste parâmetro, acabam por também indicar uma alternativa para tratar o problema geral, isto é, de ordenar árvores quando apenas o número de vértices é um parâmetro fixado. Na próxima seção, estudaremos estes problemas em $\mathcal{T}_{n,3}$ e $\mathcal{T}_{n,4}$, os conjuntos de árvores com n vértices e diâmetro, respectivamente, três e quatro. No primeiro caso, uma ordenação completa é obtida, enquanto no segundo determinamos as duas árvores com os maiores índices para a matriz A_α .

6.3 Árvores de diâmetro 3

Como apresentado no Capítulo 2, toda árvore de diâmetro 3 pode ser denotada por $V(k, l, 3)$, uma dupla vassoura de diâmetro 3 ou, simplesmente, dupla estrela. No Corolário 6.3.2 é exibida uma ordenação para todas as árvores nessa família, a partir do α -índice.

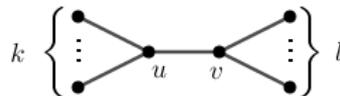


Figura 6.1: Árvore $V(k, l, 3)$.

Lema 6.3.1. *Seja $V(k, l, 3)$ uma dupla estrela com $n \geq 6$ vértices, $k \geq l \geq 2$ e $k + l + 2 = n$. Para $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(V(k, l, 3)) > \rho_\alpha(V(k - 1, l + 1, 3))$.*

Demonstração. Seja $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_{v_1}, \mathbf{x}_{v_2}, \dots, \mathbf{x}_{v_n})$ o vetor de Perron de $A_\alpha(V(k, l, 3))$. Pelas equações de autovetor e autovalor, temos que:

$$\rho_\alpha \mathbf{x}_{v_i} = \alpha d(v_i) \mathbf{x}_{v_i} + (1 - \alpha) \sum_{v_i v_j \in E(V(k, l, 3))} \mathbf{x}_{v_j}, \quad 1 \leq j \leq n.$$

Sejam u e v vértices de $V(k, l, 3)$ tais que $d(u) = k + 1$ e $d(v) = l + 1$. Pela Proposição 6.2.1, sabemos que todas as folhas adjacentes a u possuem a mesma entrada em \mathbf{x} , que denotaremos por \mathbf{x}_k . Analogamente, todas as folhas adjacentes a v possuem a mesma entrada em \mathbf{x} , que denotaremos por \mathbf{x}_l . Logo,

$$\begin{aligned} \rho_\alpha \mathbf{x}_u &= \alpha(k + 1) \mathbf{x}_u + (1 - \alpha)(k \mathbf{x}_k + \mathbf{x}_v), \\ (\rho_\alpha - \alpha(k + 1)) \mathbf{x}_u &= (1 - \alpha)(k \mathbf{x}_k + \mathbf{x}_v). \end{aligned} \quad (6.1)$$

Analogamente, temos:

$$\begin{aligned} \rho_\alpha \mathbf{x}_v &= \alpha(l + 1) \mathbf{x}_v + (1 - \alpha)(l \mathbf{x}_l + \mathbf{x}_u), \\ (\rho_\alpha - \alpha(l + 1)) \mathbf{x}_v &= (1 - \alpha)(l \mathbf{x}_l + \mathbf{x}_u). \end{aligned} \quad (6.2)$$

Além disso, aplicando equações de autovetor e autovalor nas folhas, obtemos:

$$\begin{aligned} \rho_\alpha \mathbf{x}_k &= \alpha \mathbf{x}_k + (1 - \alpha)(\mathbf{x}_u) \\ (\rho_\alpha - \alpha) \mathbf{x}_k &= (1 - \alpha)(\mathbf{x}_u) \\ \mathbf{x}_k &= \frac{(1 - \alpha) \mathbf{x}_u}{(\rho_\alpha - \alpha)}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Da mesma forma, temos:

$$\mathbf{x}_l = \frac{(1 - \alpha) \mathbf{x}_v}{(\rho_\alpha - \alpha)}. \quad (6.4)$$

Substituindo as equações (6.3) e (6.4) em (6.1) e (6.2), respectivamente, temos:

$$(\rho_\alpha - \alpha(k + 1)) \mathbf{x}_u = (1 - \alpha) \left(\frac{k(1 - \alpha) \mathbf{x}_u}{(\rho_\alpha - \alpha)} + \mathbf{x}_v \right);$$

$$(\rho_\alpha - \alpha(k + 1)) \mathbf{x}_u = \frac{k(1 - \alpha)^2 \mathbf{x}_u}{(\rho_\alpha - \alpha)} + (1 - \alpha) \mathbf{x}_v;$$

$$\left(\rho_\alpha - \alpha(k + 1) - \frac{k(1 - \alpha)^2}{(\rho_\alpha - \alpha)} \right) \mathbf{x}_u = (1 - \alpha) \mathbf{x}_v;$$

$$\left(\frac{(\rho_\alpha - \alpha)(\rho_\alpha - \alpha(k+1)) - k(1-\alpha)^2}{(\rho_\alpha - \alpha)} \right) \mathbf{x}_u = (1-\alpha)\mathbf{x}_v. \quad (6.5)$$

Analogamente:

$$\left(\frac{(\rho_\alpha - \alpha)(\rho_\alpha - \alpha(l+1)) - l(1-\alpha)^2}{(\rho_\alpha - \alpha)} \right) \mathbf{x}_v = (1-\alpha)\mathbf{x}_u. \quad (6.6)$$

Como $\mathbf{x}_v > 0$, $\mathbf{x}_u > 0$, $1 - \alpha > 0$ e $\rho_\alpha - \alpha > 0$, é claro que $(\rho_\alpha - \alpha)(\rho_\alpha - \alpha(l+1)) - l(1-\alpha)^2 > 0$. A partir das equações 6.5 por 6.6:

$$\frac{\mathbf{x}_u((\rho_\alpha - \alpha)(\rho_\alpha - \alpha(k+1)) - k(1-\alpha)^2)}{\mathbf{x}_v((\rho_\alpha - \alpha)(\rho_\alpha - \alpha(l+1)) - l(1-\alpha)^2)} = \frac{\mathbf{x}_v}{\mathbf{x}_u}.$$

$$\frac{(\rho_\alpha - \alpha)(\rho_\alpha - \alpha(k+1)) - k(1-\alpha)^2}{(\rho_\alpha - \alpha)(\rho_\alpha - \alpha(l+1)) - l(1-\alpha)^2} = \frac{\mathbf{x}_v^2}{\mathbf{x}_u^2}.$$

Como $k \geq l$, segue que

$$\mathbf{x}_v \leq \mathbf{x}_u.$$

Portanto, pelo Teorema 6.2.3, segue que $\rho_\alpha(V(k, l, 3)) > \rho_\alpha(V(k-1, l+1, 3))$. \square

Como consequência do Lema 6.3.1, podemos enunciar o Corolário 6.3.2, que ordena todas árvores em $\mathcal{T}_{n,3}$, $n \geq 4$, pelo α -índice.

Corolário 6.3.2. *Para $0 \leq \alpha < 1$, as árvores em $\mathcal{T}_{n,3}$, $n \geq 4$, podem ser ordenadas pelo índice da matriz A_α da seguinte forma:*

$$\rho_\alpha(V(n-3, 1, 3)) > \rho_\alpha(V(n-4, 2, 3)) > \dots > \rho_\alpha\left(V\left(\left\lceil \frac{n-2}{2} \right\rceil, \left\lfloor \frac{n-2}{2} \right\rfloor, 3\right)\right).$$

Uma outra consequência do Lema 6.3.1 é que, para n e Δ fixados, $n-1 > \Delta \geq \lceil \frac{n}{2} \rceil$, $V(\Delta-1, n-\Delta-1, 3)$ maximiza o α -índice entre todas as árvores com grau máximo Δ^* , sempre que $\Delta \geq \Delta^* \geq \lceil \frac{n}{2} \rceil$.

Corolário 6.3.3. *Para n fixado, $n-1 > \Delta \geq \lceil \frac{n}{2} \rceil$ e $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(V(\Delta-1, n-\Delta-1, 3)) > \rho_\alpha(V(\Delta-2, n-\Delta, 3))$.*

Demonstração. Como $\Delta-1 > \Delta-2$, pelo Lema 6.3.1, $\rho_\alpha(V(\Delta-1, n-\Delta-1, 3)) > \rho_\alpha(V(\Delta-2, n-\Delta, 3))$. \square

Corolário 6.3.4. *Para n fixado, $n-1 > \Delta \geq \lceil \frac{n}{2} \rceil$ e $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(V(\Delta-1, n-\Delta-1, 3)) \geq \rho_\alpha(T)$, para todo $T \in \mathcal{T}_n^{(\Delta^*)}$ e $\Delta \geq \Delta^* \geq \lceil \frac{n}{2} \rceil$.*

Demonstração. Utilizando o Corolário 6.3.3 recursivamente, temos que $\rho_\alpha(V(\Delta-1, n-\Delta-1, 3)) > \rho_\alpha(V(\Delta^*-1, n-\Delta^*-1, 3))$. Além disso, o Teorema 6.2.10 nos diz que $\rho_\alpha(V(\Delta^*-1, n-\Delta^*-1, 3)) \geq \rho_\alpha(T)$, para todo $T \in \mathcal{T}_n^{(\Delta^*)}$. Logo, $\rho_\alpha(V(\Delta-1, n-\Delta-1, 3)) \geq \rho_\alpha(T)$, para todo $T \in \mathcal{T}_n^{(\Delta^*)}$. \square

Visando utilizar o Teorema 6.2.13, determinaremos o polinômio característico da matriz A_α para as árvores de diâmetro 3.

Teorema 6.3.5. *Seja $V(k, l, 3)$ uma árvore de diâmetro 3 com $n \geq 4$ vértices. Se $k \geq l \geq 1$ e $0 \leq \alpha < 1$, então*

$$p_\alpha(V(k, l, 3), x) = (x - \alpha)^{n-4} h_1(x),$$

onde $h_1(x) = x^4 + (-\alpha n - 2\alpha)x^3 + (-\alpha^2 l^2 + \alpha^2 l n - 2\alpha^2 l + 2\alpha^2 n + \alpha^2 + 2\alpha n - 2\alpha - n + 1)x^2 + (-\alpha^3 n + 4\alpha^2 l^2 - 4\alpha^2 l n + 8\alpha^2 l - 4\alpha^2 n - 2\alpha l^2 + 2\alpha l n + 4\alpha^2 - 4\alpha l + 2\alpha n - 2\alpha)x + 2\alpha^3 n - 4\alpha^2 l^2 + 4\alpha^2 l n - 2\alpha^3 - 8\alpha^2 l - \alpha^2 n + 4\alpha l^2 - 4\alpha l n + \alpha^2 + 8\alpha l - l^2 + l n - 2l$.

Demonstração. Com uma rotulação conveniente, $A_\alpha(V(k, l, 3)) = A_\alpha$ pode ser escrita como:

$$A_\alpha(V(k, l, 3)) = \begin{bmatrix} \alpha(k+1) & (1-\alpha)\mathbf{J}_{1 \times k} & 1-\alpha & \mathbf{0}_{1 \times l} \\ (1-\alpha)\mathbf{J}_{k \times 1} & \alpha\mathbf{I}_k & \mathbf{0}_{k \times 1} & \mathbf{0}_{k \times l} \\ 1-\alpha & \mathbf{0}_{1 \times k} & \alpha(l+1) & (1-\alpha)\mathbf{J}_{1 \times l} \\ \mathbf{0}_{l \times 1} & \mathbf{0}_{l \times k} & (1-\alpha)\mathbf{J}_{l \times 1} & \alpha\mathbf{I}_l \end{bmatrix}.$$

Fazendo $k = n - l - 2$, a matriz quociente R de A_α será:

$$R = \begin{bmatrix} \alpha(n-l-1) & (n-l-2)(1-\alpha) & 1-\alpha & 0 \\ 1-\alpha & \alpha & 0 & 0 \\ 1-\alpha & 0 & \alpha(l+1) & l(1-\alpha) \\ 0 & 0 & 1-\alpha & \alpha \end{bmatrix},$$

cujo polinômio característico é $h_1(x)$ e, pelo Teorema 2.2.1, todas as suas raízes são raízes do polinômio característico de $A_\alpha(V(k, l, 3))$.

Falta provar que α é um autovalor de A_α com multiplicidade exatamente $n - 4$. Como a multiplicidade de α é igual a nulidade da matriz $A_\alpha - \alpha\mathbf{I}$, isto é, a diferença entre n e o posto da matriz $A_\alpha - \alpha\mathbf{I}$, vamos calcular esse posto.

$$A_\alpha - \alpha\mathbf{I} = \begin{bmatrix} k\alpha & (1-\alpha)\mathbf{J}_{1 \times k} & 1-\alpha & \mathbf{0}_{1 \times l} \\ (1-\alpha)\mathbf{J}_{k \times 1} & \mathbf{0}_{k \times k} & \mathbf{0}_{k \times 1} & \mathbf{0}_{k \times l} \\ 1-\alpha & \mathbf{0}_{1 \times k} & l\alpha & (1-\alpha)\mathbf{J}_{1 \times l} \\ \mathbf{0}_{l \times 1} & \mathbf{0}_{l \times k} & (1-\alpha)\mathbf{J}_{l \times 1} & \mathbf{0}_{l \times l} \end{bmatrix}.$$

Podemos observar que $A_\alpha - \alpha I$ possui k linhas iguais, correspondentes às folhas adjacentes ao vértice u e l linhas iguais, correspondentes às folhas adjacentes ao vértice v . Portanto, o posto dessa matriz é no máximo $n - (k - 1) - (l - 1) = 4$ e a

nulidade é no mínimo $n - 4$.

Portanto, basta verificar que α não é raiz do polinômio $h(x)$. Aplicando no polinômio, temos que

$$h_1(\alpha) = -l(\alpha - 1)^4(l + 2 - n) \neq 0,$$

já que $k \geq l \geq 1$, $k + l + 2 = n$ e $0 \leq \alpha < 1$. Assim, a multiplicidade de α como autovalor de $A_\alpha(V(k, l, 3))$ é exatamente $n - 4$. Então,

$$p_\alpha(V(k, l, 3), x) = (x - \alpha)^{n-4}h_1(x).$$

□

Utilizando a ordenação para árvores de diâmetro 3, apresentaremos uma nova demonstração para o resultado abaixo, que encontra a árvore com o segundo maior α -índice entre todas as árvores de ordem n e foi provado por GUO e ZHOU [21].

Teorema 6.3.6 ([21]). *Seja T uma árvore com $n \geq 4$ vértices. Suponha que $T \not\cong S_n$. Então para $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(T) \leq \rho_\alpha(V(n - 3, 1, 3))$, com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong V(n - 3, 1, 3)$.*

Demonstração. Quando $n = 4$, é claro que $T \cong V(n - 3, 1, 3)$. Portanto, vamos assumir que $n \geq 5$ e estudar os casos a partir do diâmetro:

- Se $\text{diam}(T) = 3$, pelo Corolário 6.3.2, temos que $\rho_\alpha(V(n - 3, 1, 3)) \geq \rho_\alpha(T)$.
- Se $\text{diam}(T) \geq 4$, pelo Teorema 6.2.7 e pelo Lema 6.2.8, temos que $\rho_\alpha(V(n - 3, 1, 3)) = \rho_\alpha(T_{n,3}) > \rho_\alpha(T)$.

Então,

$$\rho_\alpha(T) \leq \rho_\alpha(V(n - 3, 1, 3)),$$

com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong V(n - 3, 1, 3)$. □

6.4 Árvores de diâmetro 4

Conforme apresentado no Capítulo 2, árvores de diâmetro 4 podem ser denotadas por $T(n, b; h_1, \dots, h_b)$ (ver Figura 2.1).

A partir do Teorema 6.2.7, sabemos que $T_{n,4}$ maximiza o índice da matriz A_α em $\mathcal{T}_{n,4}$. O nosso objetivo é provar que a árvore $V(n - 4, 1, 4)$ é a próxima árvore com maior α -índice nessa classe. Primeiro, precisamos de algumas informações sobre as entradas do vetor de Perron de árvores de diâmetro quatro.

Lema 6.4.1. *Seja $T(n, b; h_1, \dots, h_b) \in \mathcal{T}_{n,4}$. Se $0 \leq \alpha < 1$ e $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_{u_1}, \mathbf{x}_{u_2}, \dots, \mathbf{x}_{u_n})$ é o vetor de Perron de $A_\alpha(T(n, b; h_1, \dots, h_b))$, então $\mathbf{x}_{u_i} \geq \mathbf{x}_{u_{i+1}}$, $1 \leq i \leq b$.*

Demonstração. Pela Proposição 6.2.1, sabemos que todas as folhas adjacentes ao vértice h_i , $1 \leq i \leq b$, possuem a mesma entrada em \mathbf{x} , que denotaremos por \mathbf{x}_{f_i} .

Para $1 \leq i \leq b$, temos que:

$$\rho_\alpha \mathbf{x}_{f_i} = \alpha \mathbf{x}_{f_i} + (1 - \alpha) \mathbf{x}_{u_i}, \quad (6.7)$$

$$\rho_\alpha \mathbf{x}_{u_i} = \alpha(h_i + 1) \mathbf{x}_{u_i} + (1 - \alpha) h_i \mathbf{x}_{f_i} + (1 - \alpha) \mathbf{x}_{u_0}. \quad (6.8)$$

De (6.7), temos

$$\begin{aligned} (\rho_\alpha - \alpha) \mathbf{x}_{f_i} &= (1 - \alpha) \mathbf{x}_{u_i} \\ \mathbf{x}_{f_i} &= \frac{(1 - \alpha) \mathbf{x}_{u_i}}{(\rho_\alpha - \alpha)}. \end{aligned}$$

De (6.8), temos

$$\begin{aligned} (\rho_\alpha - \alpha(h_i + 1)) \mathbf{x}_{u_i} - h_i \mathbf{x}_{f_i} (1 - \alpha) &= (1 - \alpha) \mathbf{x}_{u_0}, \\ (\rho_\alpha - \alpha(h_i + 1)) \mathbf{x}_{u_i} - \frac{h_i \mathbf{x}_{u_i} (1 - \alpha)^2}{(\rho_\alpha - \alpha)} &= (1 - \alpha) \mathbf{x}_{u_0}, \\ \mathbf{x}_{u_i} \left(\frac{(\rho_\alpha - \alpha(h_i + 1))(\rho_\alpha - \alpha) - h_i (1 - \alpha)^2}{(\rho_\alpha - \alpha)} \right) &= (1 - \alpha) \mathbf{x}_{u_0}. \end{aligned}$$

Como $\mathbf{x}_{u_0} > 0$, $\mathbf{x}_{u_i} > 0$, $1 - \alpha > 0$ e $\rho_\alpha - \alpha > 0$, é claro que $(\rho_\alpha - \alpha(h_i + 1))(\rho_\alpha - \alpha) - h_i (1 - \alpha)^2 > 0$. Então, para $1 \leq i \leq b$, temos

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{u_i} \left(\frac{(\rho_\alpha - \alpha(h_i + 1))(\rho_\alpha - \alpha) - h_i (1 - \alpha)^2}{(\rho_\alpha - \alpha)} \right) &= \\ = \mathbf{x}_{u_{i+1}} \left(\frac{(\rho_\alpha - \alpha(h_{i+1} + 1))(\rho_\alpha - \alpha) - h_{i+1} (1 - \alpha)^2}{(\rho_\alpha - \alpha)} \right), & \\ \frac{\mathbf{x}_{u_i}}{\mathbf{x}_{u_{i+1}}} &= \frac{(\rho_\alpha - \alpha(h_{i+1} + 1))(\rho_\alpha - \alpha) - h_{i+1} (1 - \alpha)^2}{(\rho_\alpha - \alpha(h_i + 1))(\rho_\alpha - \alpha) - h_i (1 - \alpha)^2}. \end{aligned}$$

Como $h_i \geq h_{i+1}$, $1 \leq i \leq b$, segue que

$$\mathbf{x}_{u_i} \geq \mathbf{x}_{u_{i+1}}.$$

□

Conforme observado anteriormente, o Lema 6.2.13 nos permite comparar o α -índice de diferentes árvores a partir do seu polinômio característico. Na sequência, determinaremos o polinômio característico de $A_\alpha(V(n - 4, 1, 4))$. Assim, podemos

utilizar o Lema 6.2.13 para comparar o α -índice desta árvore e de $V(n-5, 3, 3)$. A partir dessa comparação, iremos utilizar o Lema 6.4.1 e o Teorema 6.2.3 para provar que a árvore $V(n-4, 1, 4)$ apresenta o segundo maior α -índice em $\mathcal{T}_{n,4}$.

Lema 6.4.2. *Seja $V(n-4, 1, 4)$ uma árvore de diâmetro 4 com $n \geq 8$ vértices. Se $0 \leq \alpha < 1$, então*

$$p_\alpha(V(n-4, 1, 4), x) = (x - \alpha)^{n-5} h_2(x),$$

onde $h_2(x) = x^5 - (\alpha n + 3\alpha)x^4 - (-5\alpha^2 n + 4\alpha^2 - 2\alpha n + 2\alpha + n - 1)x^3 - (6\alpha^3 n - 10\alpha^3 + 14\alpha^2 n - 34\alpha^2 - 7\alpha n + 17\alpha)x^2 - (-\alpha^4 n - 18\alpha^3 n + 50\alpha^3 + \alpha^2 n + 3\alpha^2 + 8\alpha n - 28\alpha - 2n + 7)x - 2\alpha^4 n + 2\alpha^4 - 11\alpha^3 n + 43\alpha^3 + 12\alpha^2 n - 44\alpha^2 - 3\alpha n + 11\alpha$.

Demonstração. Com uma rotulação conveniente, $A_\alpha(V(n-4, 1, 4)) = A_\alpha$ pode ser escrita como:

$$A_\alpha = \begin{bmatrix} 2\alpha & 1-\alpha & 0 & 1-\alpha & \mathbf{0}_{1 \times (n-4)} \\ 1-\alpha & 2\alpha & 1-\alpha & 0 & \mathbf{0}_{1 \times (n-4)} \\ 0 & 1-\alpha & \alpha & 0 & \mathbf{0}_{1 \times (n-4)} \\ 1-\alpha & 0 & 0 & (n-3)\alpha & (1-\alpha)\mathbf{J}_{1 \times (n-4)} \\ \mathbf{0}_{(n-4) \times 1} & \mathbf{0}_{(n-4) \times 1} & \mathbf{0}_{(n-4) \times 1} & (1-\alpha)\mathbf{J}_{(n-4) \times 1} & \alpha\mathbf{I}_{n-4} \end{bmatrix}.$$

A matriz quociente R de A_α será:

$$R = \begin{bmatrix} 2\alpha & 1-\alpha & 0 & 1-\alpha & 0 \\ 1-\alpha & 2\alpha & 1-\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 1-\alpha & \alpha & 0 & 0 \\ 1-\alpha & 0 & 0 & (n-3)\alpha & (1-\alpha)(n-4) \\ 0 & 0 & 0 & 1-\alpha & \alpha \end{bmatrix}.$$

cujos polinômio característico é $h_2(x)$ e, pelo Teorema 2.2.1, todas as suas raízes são raízes do polinômio característico de A_α .

Falta provar que α é um autovalor de A_α com multiplicidade exatamente $n-5$. Como a multiplicidade de α é igual a nulidade da matriz $A_\alpha - \alpha\mathbf{I}$, isto é, a diferença entre n e o posto da matriz $A_\alpha - \alpha\mathbf{I}$, vamos calcular esse posto.

$$A_\alpha - \alpha\mathbf{I} = \begin{bmatrix} \alpha & 1-\alpha & 0 & 1-\alpha & \mathbf{0}_{1 \times (n-4)} \\ 1-\alpha & \alpha & 1-\alpha & 0 & \mathbf{0}_{1 \times (n-4)} \\ 0 & 1-\alpha & 0 & 0 & \mathbf{0}_{1 \times (n-4)} \\ 1-\alpha & 0 & 0 & (n-4)\alpha & (1-\alpha)\mathbf{J}_{1 \times (n-4)} \\ \mathbf{0}_{(n-4) \times 1} & \mathbf{0}_{(n-4) \times 1} & \mathbf{0}_{(n-4) \times 1} & (1-\alpha)\mathbf{J}_{(n-4) \times 1} & \mathbf{0}_{(n-4) \times (n-4)} \end{bmatrix}.$$

Podemos observar que $A_\alpha - \alpha I$ possui $n - 4$ linhas iguais, correspondentes às folhas adjacentes ao vértice v_1 . Portanto, o posto dessa matriz é no máximo $n - (n - 5) = 5$ e a nulidade é no mínimo $n - 5$.

Logo, basta verificar que α não é raiz do polinômio $h_2(x)$. Aplicando no polinômio, temos que

$$h_2(\alpha) = -\alpha(-1 + \alpha)^4(n - 4) \neq 0.$$

Como $n \geq 8$ e $0 \leq \alpha < 1$, temos que a multiplicidade de α como autovalor de $A_\alpha(V(n - 4, 1, 4))$ é exatamente $n - 5$. Então,

$$p_\alpha(V(n - 4, 1, 4), x) = (x - \alpha)^{n-5}h_2(x).$$

□

Lema 6.4.3. Para $n \geq 8$ fixado e $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(V(n - 4, 1, 4)) > \rho_\alpha(V(n - 5, 3, 3))$.

Demonstração. A partir dos Lemas 6.3.5 e 6.4.2, temos os polinômios característicos de $V(n - 5, 3, 3)$ e $V(n - 4, 1, 4)$.

Vamos provar que, para $x > \rho_\alpha(V(n - 4, 1, 4))$, $p_\alpha(V(n - 4, 1, 4), x) < p_\alpha(V(n - 5, 3, 3), x)$. Note que

$$p_\alpha(V(n - 4, 1, 4), x) - p_\alpha(V(n - 5, 3, 3), x) = -(x - \alpha)^{n-5}(\alpha x - 2\alpha + 1)^2(x(n - 8) + 4\alpha).$$

Assim, como $x > 1$ e $n \geq 8$, então

$$p_\alpha(V(n - 4, 1, 4), x) - p_\alpha(V(n - 5, 3, 3), x) < 0,$$

$$p_\alpha(V(n - 4, 1, 4), x) < p_\alpha(V(n - 5, 3, 3), x).$$

Logo, pelo Lema 6.2.13, $\rho_\alpha(V(n - 4, 1, 4)) > \rho_\alpha(V(n - 5, 3, 3))$. □

Teorema 6.4.4. Seja $T \in \mathcal{T}_{n,4} \setminus \{T_{n,4}, V(n - 4, 1, 4)\}$, $n \geq 8$. Para $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(T) < \rho_\alpha(V(n - 5, 3, 3))$.

Demonstração. Como $T \in \mathcal{T}_{n,4} \setminus \{T_{n,4}, V(n - 4, 1, 4)\}$, $\Delta(T) \leq n - 4$.

Se $\Delta(T) = n - 4$, pelo Teorema 6.2.10, $\rho_\alpha(T) < \rho_\alpha(V(n - 5, 3, 3))$. Vamos supor que $\Delta(T) \leq n - 5$ e, como $T \in \mathcal{T}_{n,4}$, $T = T(n, b; h_1, \dots, h_b)$. Para $1 \leq i \leq b$ e $1 \leq j \leq h_i$, denotaremos por $u_{i,j}$ as folhas adjacentes ao vértice u_i em $T(n, b; h_1, \dots, h_b)$, quando existirem. Três casos podem ocorrer:

1. $h_1 \geq 3$. Como $T \not\cong V(n - 4, 1, 4)$, ou $h_2 = 1$ e $h_3 \geq 0$ ou $h_2 \geq 2$. Seja T' a árvore obtida de T identificando de forma sequencial cada vértice u_i , $2 \leq i \leq b$, ao vértice u_0 e adicionando uma aresta pendente a u_0 para cada uma dessas

operações. É claro que T' é uma dupla estrela com pelo menos 3 folhas de cada lado e, pelos Corolários 6.3.2 e 6.2.4, $\rho_\alpha(T) < \rho_\alpha(T') \leq \rho_\alpha(V(n-5, 3, 3))$.

2. $h_1 = 2$. Por definição, sabemos que $h_2 \geq 1$. Seja $T' = T(n, b; h_1, \dots, h_b) - u_2u_{2_1} + u_1u_{2_1}$ e, novamente, seja T'' a árvore obtida de T' identificando de forma sequencial cada vértice u_i , $2 \leq i \leq b$, ao vértice u_0 e adicionando uma aresta pendente a u_0 para cada uma dessas operações. É claro que T'' é uma dupla estrela com pelo menos 3 folhas de cada lado e, pelo Lema 6.4.1 e pelos Corolários 6.3.2 e 6.2.4, $\rho_\alpha(T) < \rho_\alpha(T'') \leq \rho_\alpha(T') \leq \rho_\alpha(V(n-5, 3, 3))$.

3. $h_1 = 1$. Por definição, sabemos que $h_2 = 1$ e, como $T \not\cong T_{n,4}$, $h_3 = 1$. Sejam $T' = T(n, b; h_1, \dots, h_b) - u_2u_{2_1} + u_1u_{2_1}$, $T'' = T' - u_3u_{3_1} + u_1u_{3_1}$ e, mais uma vez, seja T''' a árvore obtida de T'' identificando de forma sequencial cada vértice u_i , $4 \leq i \leq b$, ao vértice u_0 e adicionando uma aresta pendente a u_0 para cada uma dessas operações. É claro que T''' é uma dupla estrela com pelo menos 3 folhas de cada lado e, pelo Lema 6.4.1 e pelos Corolários 6.3.2 e 6.2.4, $\rho_\alpha(T) < \rho_\alpha(T''') \leq \rho_\alpha(T'') \leq \rho_\alpha(T') \leq \rho_\alpha(V(n-5, 3, 3))$.

□

Corolário 6.4.5. *Seja $T \in \mathcal{T}_{n,4} \setminus \{T_{n,4}\}$, $n \geq 8$. Para $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(T) \leq \rho_\alpha(V(n-4, 1, 4))$, com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong V(n-4, 1, 4)$.*

Demonstração. Pelo Lema 6.4.3, temos que $\rho_\alpha(V(n-4, 1, 4)) > \rho_\alpha(V(n-5, 3, 3))$. Além disso, pelo Teorema 6.4.4, para $T \in \mathcal{T}_{n,4} \setminus \{T_{n,4}, V(n-4, 1, 4)\}$, segue que $\rho_\alpha(V(n-5, 3, 3)) > \rho_\alpha(T)$. □

6.5 Ordenação em \mathcal{T}_n

Já sabemos, pelos Teoremas 6.2.6 e 6.3.6, que as duas primeiras árvores que maximizam o α -índice são S_n e $V(n-3, 1, 3)$. Na sequência, provaremos que as próximas quatro árvores que maximizam o α -índice são as árvores $V(n-4, 2, 3)$, $T_{n,4}$, $V(n-4, 1, 4)$ e $V(n-5, 3, 3)$.

Lema 6.5.1. *Para $n \geq 8$ fixado e $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(V(n-4, 2, 3)) > \rho_\alpha(T_{n,4})$.*

Demonstração. Pelo Teorema 6.2.10, sabemos que $V(n-4, 2, 3)$ é a árvore que possui α -índice máximo entre todas as árvores com n vértices e grau máximo $n-3$. Como $\Delta(T_{n,4}) = n-3$, temos que $\rho_\alpha(V(n-4, 2, 3)) > \rho_\alpha(T_{n,4})$. □

Teorema 6.5.2. *Seja $T \in \mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3)\}$, $n \geq 8$. Para $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(T) \leq \rho_\alpha(V(n-4, 2, 3))$, com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong V(n-4, 2, 3)$.*

Demonstração. Vamos estudar os casos a partir do diâmetro das árvores:

- Se $\text{diam}(T) = 3$, pelo Corolário 6.3.2, temos que $\rho_\alpha(V(n-4, 2, 3)) \geq \rho_\alpha(T)$.
- Se $\text{diam}(T) \geq 4$, pelo Lema 6.5.1 e pelos Corolário 6.3.4, temos que $\rho_\alpha(V(n-4, 2, 3)) > \rho_\alpha(T_{n,4}) \geq \rho_\alpha(T)$.

Então $\rho_\alpha(T) \leq \rho_\alpha(V(n-4, 2, 3))$, com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong V(n-4, 2, 3)$. \square

Teorema 6.5.3. *Seja $T \in \mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3), V(n-4, 2, 3)\}$, $n \geq 8$. Para $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(T) \leq \rho_\alpha(T_{n,4})$, com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong T_{n,4}$.*

Demonstração. Vamos estudar os casos a partir do diâmetro das árvores:

- Se $\text{diam}(T) = 3$, pelo Lema 6.4.3 e pelos Corolários 6.3.4 e 6.3.2, temos que $\rho_\alpha(T_{n,4}) > \rho_\alpha(V(n-4, 1, 4)) > \rho_\alpha(V(n-5, 3, 3)) \geq \rho_\alpha(T)$.
- Se $\text{diam}(T) \geq 4$ pelo Corolário 6.3.4, temos que $\rho_\alpha(T_{n,4}) \geq \rho_\alpha(T)$.

Então $\rho_\alpha(T) \leq \rho_\alpha(T_{n,4})$ com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong T_{n,4}$. \square

Teorema 6.5.4. *Seja $T \in \mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3), V(n-4, 2, 3), T_{n,4}\}$, $n \geq 8$. Para $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(T) \leq \rho_\alpha(V(n-4, 1, 4))$, com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong V(n-4, 1, 4)$.*

Demonstração. Vamos estudar os casos a partir do diâmetro das árvores:

- Se $\text{diam}(T) = 3$, pelo Lema 6.4.3 e pelo Corolário 6.3.2, temos que $\rho_\alpha(V(n-4, 1, 4)) > \rho_\alpha(V(n-5, 3, 3)) \geq \rho_\alpha(T)$.
- Se $\text{diam}(T) = 4$, pelo Corolário 6.4.5, temos que $\rho_\alpha(V(n-4, 1, 4)) \geq \rho_\alpha(T)$.
- Se $\text{diam}(T) \geq 5$, pelo Teorema 6.2.10, pelo Lema 6.4.3 e pelo Corolário 6.3.4, temos que $\rho_\alpha(V(n-4, 1, 4)) > \rho_\alpha(V(n-5, 3, 3)) > \rho_\alpha(T_{n,5}) \geq \rho_\alpha(T)$.

Então $\rho_\alpha(T) \leq \rho_\alpha(V(n-4, 1, 4))$, com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong V(n-4, 1, 4)$. \square

Teorema 6.5.5. *Seja $T \in \mathcal{T}_n \setminus \{S_n, V(n-3, 1, 3), V(n-4, 2, 3), T_{n,4}, V(n-4, 1, 4)\}$, $n \geq 8$. Para $0 \leq \alpha < 1$, $\rho_\alpha(T) \leq \rho_\alpha(V(n-5, 3, 3))$, com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong V(n-5, 3, 3)$.*

Demonstração. Vamos estudar os casos a partir do diâmetro das árvores:

- Se $\text{diam}(T) = 3$, pelo Corolário 6.3.2, temos que $\rho_\alpha(V(n-3, 1, 3)) > \rho_\alpha(V(n-4, 2, 3)) > \rho_\alpha(V(n-5, 3, 3)) \geq \rho_\alpha(T)$.

- Se $\text{diam}(T) = 4$, pelos Teorema 6.4.4, temos que $\rho_\alpha(V(n-5, 3, 3)) > \rho_\alpha(T)$.
- Se $\text{diam}(T) \geq 5$, pelo Teorema 6.2.10, temos que $\rho_\alpha(V(n-5, 3, 3)) > \rho_\alpha(T_{n,5})$.

Então $\rho_\alpha(T) \leq \rho_\alpha(V(n-5, 3, 3))$, com igualdade ocorrendo se, e somente se, $T \cong V(n-5, 3, 3)$. \square

Como consequência dos Teoremas 6.5.2, 6.5.3, 6.5.4 e 6.5.5, segue o nosso principal resultado.

Teorema 6.5.6. *Quando $n \geq 8$ e $0 \leq \alpha < 1$, na ordenação das árvores em \mathcal{T}_n pelo índice da matriz A_α , as árvores $V(n-4, 2, 3)$, $T_{n,4}$, $V(n-4, 1, 4)$ e $V(n-5, 3, 3)$ ocupam da terceira até a sexta posições.*

Capítulo 7

Considerações finais

Neste trabalho fizemos uma revisão de resultados já presentes na literatura a respeito da ordenação de árvores. Além disso, conseguimos obter resultados inéditos, que foram publicadas em BELAY *et al.* [17], envolvendo a ordenação de árvores a partir da conectividade algébrica, introduzindo quatro novas classes e caracterizando todas as árvores que possuem conectividade algébrica maior ou igual a $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$.

A partir dos trabalhos de YUAN *et al.* [15] e WANG e TAN [16], destacamos a relação das conectividades algébricas das árvores nas classes C_3 , C_6 e C_8 com os três maiores pontos limites para a conectividade algébrica de árvores: $\frac{3-\sqrt{5}}{2}$, $2 - \sqrt{3}$ e $\frac{5-\sqrt{21}}{2}$. Este fato nos motivou a determinar quais árvores possuem a conectividade algébrica maior ou igual ao quarto maior ponto limite, $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$ e, para isso, propusemos quatro novas classes, C_i , $7 \leq i \leq 10$, mostrando que se T é uma árvore com $n \geq 32$ vértices, então $a(T) \geq 2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$ se, e somente se, $T \in \bigcup_{i=1}^{10} C_i$. Mais ainda, para $n \geq 45$, nós provamos que as classes C_i , $7 \leq i \leq 10$, podem ser ordenadas pela conectividade algébrica e, junto com o Teorema 4.3.1, podemos afirmar que $a(T_i) > a(T_j)$ sempre que $T_i \in C_i$, $T_j \in C_j$ e $1 \leq i < j \leq 10$. Por fim, apresentamos a árvore com a maior conectividade algébrica em C_9 . Continuando esse trabalho, temos como proposta:

1. Investigar o quinto maior ponto limite para a conectividade algébrica e determinar quais árvores possuem conectividade algébrica maior ou igual a esse valor.

Também consideramos a matriz A_α , para $0 \leq \alpha < 1$, proposta por NIKIFOROV [4], ampliando o estudo de ordenação a partir do índice dessa matriz, o α -índice. Provamos que as árvores $V(n-4, 2)$, $T_{n,4}$, $V(n-4, 1, 4)$ e $V(n-5, 3)$ ocupam da terceira até a sexta posições na ordenação de árvores com n vértices pelo α -índice, coincidindo com as ordenações já conhecidas para as matrizes de adjacência e laplaciana (Tabela 3.1). Também estudamos o problema de ordenação por este autovalor,

quando o diâmetro e o grau máximo são fixados. Em particular, determinamos, para $n \geq 4$ e $n - 1 > \Delta \geq \lceil \frac{n}{2} \rceil$, que a árvore $V(\Delta - 1, n - \Delta - 1, 3)$ maximiza o α -índice em $\mathcal{T}_n^{(\Delta)}$ e, para $n \geq 4$, que a árvore $V(\Delta - 1, 1, n - \Delta + 1)$ minimiza o α -índice em $\mathcal{T}_n^{(\Delta)}$. Ainda determinamos que a árvore que maximiza o α -índice em $\mathcal{T}_{n,d}$ possui o autovalor maior que qualquer árvore com diâmetro maior ou igual a d , o que nos auxiliou nas demonstrações envolvendo ordenação. Como continuidade desse trabalho, propomos a seguinte conjectura:

Conjectura 7.0.1. *Quando $n \geq 15$ e $0 \leq \alpha < 1$, na ordenação das árvores em \mathcal{T}_n pelo índice da matriz A_α , as árvores $T(n, n - 4; 2, 1, 0, \dots, 0)$, $T(n, n - 4; 1, 1, 1, 0, \dots, 0)$, $T(n, 3; n - 5, 1, 0)$, $T_{n,5}$, $V(n - 5, 2, 4)$, $V(n - 5, 1, 5)$ e $V(4, n - 6, 3)$ ocupam da sétima até a décima terceira posições.*

Observe que, para $\alpha = 0$ e $\alpha = \frac{1}{2}$, a conjectura é verdadeira independente do número de vértices (Tabela 3.1). Além disso, testes computacionais confirmaram a conjectura para árvores com n vértices, $15 \leq n \leq 20$, e $\alpha = 0.3$, $\alpha = 0.6$ e $\alpha = 0.9$. Por fim, buscando generalizar os Teoremas 3.1.17, 3.2.12 e 3.2.13, queremos determinar α e k mínimos que nos permitam comparar o α -índice a partir de seus graus máximos, isto é:

2. Seja $T^{(\Delta)}$ uma árvore em $\mathcal{T}_n^{(\Delta)}$, $\Delta = 2, 3, \dots, n - 1$ e $n \geq 4$. Então $\rho_\alpha(T^{(n-1)}) > \rho_\alpha(T^{(n-2)}) > \dots > \rho_\alpha(T^{(k)})$.

Referências Bibliográficas

- [1] RIAZ, F., ALI, K. M. “Applications of graph theory in computer sciences”, *2011 Third International Conference on Computational Intelligence, Communication Systems and Networks*, pp. 142–145, 2011.
- [2] GUTMAN, I., VIDOVIĆ, D., STEVANOVIĆ, D. P. “Chemical applications of the Laplacian spectrum. VI On the largest Laplacian eigenvalue of alkanes”, *Journal of the Serbian Chemical Society*, v. 67, n. 6, pp. 407–413, 2002.
- [3] FERRARELLO, D., MAMMANA, M. F. “Graph theory in primary, middle, and high school”. In: *Teaching and learning discrete mathematics worldwide: Curriculum and research*, Springer, pp. 183–200, 2018.
- [4] NIKIFOROV, V. “Merging the A - and Q -spectral theories”, *Applicable Analysis and Discrete Mathematics*, v. 11, pp. 81–107, 2017.
- [5] HOFMEISTER, M. “On the two largest eigenvalues of trees”, *Linear Algebra Appl.*, v. 260, pp. 43–59, 1997.
- [6] GUO, J.-M. “On the Laplacian spectral radius of a tree”, *Linear Algebra Appl.*, v. 368, pp. 379–385, 2003.
- [7] GUO, J.-M. “On the second largest Laplacian eigenvalue of trees”, *Linear algebra and its applications*, v. 404, pp. 251–261, 2005.
- [8] GRONE, R., MERRIS, R. “Ordering Trees by Algebraic Connectivity”, *Graphs and Combinatorics*, v. 6, pp. 229–237, 1990.
- [9] GUO, J.-M. “On the minimal energy ordering of trees with perfect matchings”, *Discrete Applied Mathematics*, v. 156, n. 14, pp. 2598–2605, 2008.
- [10] WANG, S., GUO, X. “Trees with extremal Wiener indices”, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, v. 60, n. 2, pp. 609–622, 2008.

- [11] ABREU, N. M. M., JUSTEL, C. M., ROJO, O., et al. “Ordering trees and graphs with few cycles by algebraic connectivity”, *Linear Algebra Appl*, v. 458, pp. 429–453, 2014.
- [12] SHAO, J.-Y., GUO, J.-M., SHAN, H.-Y. “The ordering of trees and connected graphs by algebraic connectivity”, *Linear Algebra Appl*, v. 428, pp. 1421–1438, 2008.
- [13] LI, J. X., GUO, J. M., SHIU, W. C. “The smallest values of algebraic connectivity for trees”, *Acta Mathematica Sinica, English Series*, v. 28, pp. 2021–2032, 2012.
- [14] KIRKLAND, S. “A note on limit points for algebraic connectivity”, *Linear Algebra Appl*, v. 373, pp. 5–11, 2003.
- [15] YUAN, X.-Y., SHAO, J.-Y., ZHANG, L. “The six classes of trees with the largest algebraic connectivity”, *Discrete Applied Mathematics*, v. 156, pp. 757–769, 2008.
- [16] WANG, X.-K., TAN, S.-W. “Ordering trees by algebraic connectivity”, *Linear Algebra Appl*, v. 436, pp. 3684–3691, 2012.
- [17] BELAY, D. S. M., DE FREITAS, M. A. A., DA SILVA, C. M. “On trees with algebraic connectivity greater than or equal to $2\left(1 - \cos\left(\frac{\pi}{7}\right)\right)$ ”, *Computational and Applied Mathematics*, v. 40, n. 6, pp. 1–13, 2021.
- [18] MCKAY, B. D., PIPERNO, A. “Practical graph isomorphism, II”, *Journal of Symbolic Computation*, v. 60, n. 0, pp. 94–112, 2014.
- [19] THE SAGE DEVELOPERS. *SageMath, the Sage Mathematics Software System (Version 9.1)*, 2020. <https://www.sagemath.org>.
- [20] NIKIFOROV, V., PASTÉN, G., ROJO, O., et al. “On the A_α -spectra of trees”, *Linear Algebra App*, v. 520, pp. 286–305, 2017.
- [21] GUO, H., ZHOU, B. “On the α -spectral radius of graphs”, *Applicable Analysis and Discrete Mathematics*, v. 14, n. 2, pp. 431–458, 2020.
- [22] HORN, R. A., JOHNSON, C. R. *Matrix Analysis*. 2 ed. New York, Cambridge University Press, 2012.
- [23] BROUWER, A. E., HAEMERS, W. H. *Spectra of graphs*. Springer Science & Business Media, 2011.

- [24] CVETKOVIĆ, D., DOOB, M., SACHS, H. *Spectra of Graphs - Theory and Applications*. 3 ed. Heidelberg-Leipzig, Johann Ambrosius Barth Verlag, 1995.
- [25] CVETKOVIĆ, D., DOOB, M., GUTMAN, I., et al. “Recent results in the theory of graph spectra”, *Annals of Discrete Mathematics*, v. 36, 1988.
- [26] CHANG, A., HUANG, Q. “Ordering trees by their largest eigenvalues”, *Linear Algebra Appl*, v. 370, pp. 175–184, 2003.
- [27] LIN, W., GUO, X. “Ordering trees by their largest eigenvalues”, *Linear Algebra Appl*, v. 418, pp. 450–456, 2006.
- [28] GUO, J.-M., SHAO, J.-Y. “On the spectral radius of trees with fixed diameter”, *Linear Algebra Appl*, v. 413, pp. 131–147, 2006.
- [29] YU, A., LU, M., TIAN, F. “Ordering trees by their Laplacian spectral radii”, *Linear Algebra Appl*, v. 405, pp. 45–59, 2005.
- [30] GUO, J.-M. “The effect on the Laplacian spectral radius of a graph by adding or grafting edges”, *Linear Algebra Appl*, v. 413, pp. 59–71, 2006.
- [31] YUANA, X.-Y., SHANB, H.-Y., LIU, Y. “On the Laplacian spectral radii of trees”, *Discrete Mathematics*, v. 309, pp. 4241–4246, 2009.
- [32] GUO, J.-M. “On the Laplacian spectral radius of trees with fixed diameter”, *Linear Algebra Appl*, v. 419, pp. 618–629, 2006.
- [33] LI, J., SHIU, W. C., CHAN, W. H. “Ordering trees by their largest Laplacian eigenvalues”, *Graph Theory Notes of New York*, v. 58, pp. 1–9, 2010.
- [34] FIEDLER, M. “Algebraic connectivity of graphs”, *Czechoslovak Math. J.*, v. 23, pp. 298–305, 1973.
- [35] KIRKLAND, S., NEUMANN, M., SHADER, B. “Characteristic vertices of weighted trees via Perron values”, *Linear Multilinear Algebra*, v. 40, pp. 311–325, 1996.
- [36] FIEDLER, M. “A property of eigenvectors of nonnegative symmetric matrices and its application to graph theory”, *Czechoslovak Mathematical Journal*, v. 25, n. 4, pp. 619–633, 1975.
- [37] ABREU, N. M. M. “Old and new results on algebraic connectivity of graphs”, *Linear Algebra Appl*, v. 423, pp. 53–73, 2007.

- [38] GRONE, R., MERRIS, R., SUNDER, V. S. “The Laplacian Spectrum of a Graph”, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, v. 11, n. 2, pp. 218–238, 1990.
- [39] PATRA, K., LAL, A. “The effect on the algebraic connectivity of a tree by grafting or collapsing of edges”, *Linear Algebra Appl.*, v. 428, pp. 855–864, 2008.
- [40] FALLAT, S., KIRKLAND, S. “Extremizing algebraic connectivity subject to graph theoretic constraints”, *Electronic Journal of Linear Algebra*, v. 3, n. 7, 1998.
- [41] ROJO, O., MEDINA, L., ABREU, N. M. M., et al. “On the algebraic connectivity of some caterpillars: A sharp upper bound and a total ordering”, *Linear Algebra Appl.*, v. 432, pp. 586–605, 2010.
- [42] LIU, X., LIU, S. “On the A_α -characteristic polynomial of a graph”, *Linear Algebra App.*, v. 546, pp. 274–288, 2018.
- [43] NIKIFOROV, V., ROJO, O. “On the α -index of graphs with pendent paths”, *Linear Algebra Appl.*, v. 550, pp. 87–104, 2018.
- [44] LIN, H., HUANG, X., XUE, J. “A note on the A_α -spectral radius of graphs”, *Linear Algebra App.*, v. 557, pp. 430–437, 2018.
- [45] BRONDANI, A. E., OLIVEIRA, C. S., FRANÇA, F. A. M., et al. “ A_α -Spectrum of a Firefly Graph”, *Electronic Notes in Theoretical Computer Science*, v. 346, pp. 209–2019, 2019.
- [46] ROJO, O. “The maximal α -index of trees with k pendent vertices and its computation”, *Electronic Journal of Linear Algebra*, v. 36, pp. 38–46, 2020.
- [47] XUE, J., LIN, H., LIU, S., et al. “On the A_α -spectral radius of a graph”, *Linear Algebra Appl.*, v. 550, pp. 105–120, 2018.

Índice Remissivo

- autovalores, 6
- autovetor, 6
- cadeia, 4
 - aberta, 4
 - fechada, 4
- caminho, 4
- caterpillars, 4
- ciclo, 4
- conjunto independente, 4
- distância, 4
- diâmetro, 4
- diâmetro cinco, 5
- diâmetro quatro, 4
- dupla
 - estrela, 4
 - vassoura, 4
- estrela, 4
- folha, 4
- grafo, 3
 - bipartido completo, 4
 - complementar, 3
 - completo, 3
 - conexo, 4
 - regular, 3
 - trivial, 3
- grafting, 14
- grau, 3
 - máximo, 3
 - mínimo, 3
- irredutível, 8
- isomorfo, 4
- matriz, 6
 - bottleneck, 22
 - de adjacência, 8
 - diagonalmente dominante, 7
 - invertível, 6
 - laplaciana, 8
 - laplaciana sem sinal, 9
 - não negativa, 7
 - ortogonal, 6
 - positiva, 7
 - semidefinida positiva, 7
 - simétrica, 6
- permutação, 7
- polinômio característico, 6
- ponto
 - limite, 23
- raio espectral, 8
- traço, 6
- valor de Perron, 22
- vassoura, 4
- vetor
 - de Fiedler, 22
 - de Perron, 8
- vizinhança, 3
- vértice, 3
 - característico, 22
 - equivalente, 4
 - isolado, 3
 - universal, 3

árvore, 4

Tipo 1, 22

Tipo 2, 22

índice, 8