São José dos Campos - SP
LV SBPO
LV Simpósio Brasileiro de Pesquisa Operacional
São José dos Campos, SP - 6 a 9 de novembro de 2023

GRAFOS OUTERPLANARES MAXIMAIS E GRAFOS 2-CAMINHO COM CONECTIVIDADE ALGÉBRICA MÁXIMA

Claudia Marcela Justel
Engenharia de Computação e PGSC - Instituto Militar de Engenharia
Praça General Tibúrcio 80, Praia Vermelha, Rio de Janeiro, Brasil
cjustel@ime.eb.br

Rafael Leal de Paula
Engenharia de Computação e PGSC - Instituto Militar de Engenharia
Praça General Tibúrcio 80, Praia Vermelha, Rio de Janeiro, Brasil
paula.rafael@ime.eb.br

Daniel Botinelly Bezerril Ribeiro
Engenharia de Computação - Instituto Militar de Engenharia
Praça General Tibúrcio 80, Praia Vermelha, Rio de Janeiro, Brasil
daniel.ribeiro@ime.eb.br

RESUMO

Existem na literatura diversos artigos que analisam autovalores de diferentes matrizes associadas a grafos planares e outerplanares. A conectividade algébrica de um grafo é o segundo menor autovalor de sua matriz Laplaciana. Neste trabalho apresentamos a construção de dois *datasets* contendo listas de grafos outerplanares maximais e grafos 2-caminho em formato $g6$. A partir deles será realizada uma busca exaustiva pelo grafo de cada uma dessas 2 classes com número de vértices fixo e com maior valor da conectividade algébrica. Finalmente, os resultados das buscas são apresentados.

PALAVRAS CHAVE. Grafos, Teoria espectral de grafos, Conectividade algébrica.

Tópicos: Teoria e Algoritmos em Grafos

ABSTRACT

There are several results in the literature analizing eigenvalues of different matrices associated with planar and outerplanar graphs. The algebraic connectivity of a graph is the second smallest eigenvalue of its Laplacian matrix. In this work we present the construction of two datasets containing lists of maximal outerplanar graphs and 2-path graphs in $g6$ format. An exhaustive search will be carried out from those datasets looking for the graph of each of these 2 classes with fixed number of vertices and with the highest algebraic connectivity value. Finaly, the results of the search are presented.

KEYWORDS. Graphs. Spectral graph theory. Algebraic connectivity.

Paper topics: Theory and Algorithms in Graphs

DOI: 10.59254/sbpo-2023-174837
http://live-proceedings.pantheonsite.io/p/174837

1. Introdução

Os grafos outerplanares maximais (*mops*) são uma subfamília dos grafos planares. Além de admitir um desenho no plano sem cruzamento de arestas, admitem um desenho com todos os vértices formando a fronteira da face exterior e possuem o maior número possível de arestas (graphclasses.org/classes/gc_723.html). Também são uma subfamília dos grafos cordais, pois todo ciclo de tamanho maior ou igual a 4 em um grafo outerplanar maximal possui uma corda. Vários problemas que são NP-completos para grafos em geral admitem algoritmos polinomiais, quando restritos para a classe de grafos cordais (e em alguns casos linear), para resolvê-los. Portanto, os *mops*, sendo cordais, também são uma classe importante de grafos.

A área de Teoria Espectral de Grafos (TEG) procura relacionar autovalores e autovetores de matrizes associadas a grafos com invariantes dos mesmos. Existem na literatura diversos artigos que analisam autovalores de diferentes matrizes associadas a grafos planares e outerplanares. [Cvetković et al.,1990] e [Boots et al., 1991] conjecturaram tanto para grafos planares quanto outerplanares com número de vértices fixo, os grafos que atingem o maior autovalor da matriz de Adjacência ($A(G)$) são $P_{n-2} \vee K_2$ e $P_{n-1} \vee K_1$, respectivamente. [Tait, Tobin, 2017] provaram essas conjecturas para n suficientemente grande, e [Lin, Ning, 2021] provaram que a conjectura para grafos outerplanares é verdadeira para todo $n \geq 2$ exceto para $n = 6$. [Yu et al., 2015] apresentaram limite superior para o maior autovalor da matriz Laplaciana sem sinal ($Q(G) = A(G) + D(G)$) de grafos planares, outerplanares e Halim em termos do número de vértices do grafo e do grau máximo. Além disso, no mesmo artigo apresentaram o grafo com maior autovalor da matriz Laplaciana sem sinal para grafos 2-caminho, uma subfamília dos *mops*. [Yu, 2019] analizou o maior autovalor da matriz A_α ($A_\alpha = \alpha D(G) + (1-\alpha)A(G)$, $0 \leq \alpha \leq 1$), e provou que o grafo outerplanar com maior autovalor da matriz A_α é $P_{n-1} \vee K_1$. Em [Barrière et al., 2013] é analisado o comportamento assintótico do segundo menor autovalor da matriz Laplaciana ($L(G) = A(G) - D(G)$), denominado conectividade algébrica, de grafos planares bipartidos e grafos outerplanares com número fixo de vértices.

Até onde sabemos, ainda não foram identificados os grafos outerplanares maximais com número de vértices fixo que possuem maior valor de conectividade algébrica, segundo menor autovalor associado à matriz Laplaciana de G, $L(G)$. O objetivo deste trabalho é fazer experimentos executando uma busca exaustiva pelo grafo outerplanar maximal com número fixo de vértices com maior valor de conectividade algébrica. Para tal fim será criado inicialmente um *dataset* com grafos outerplanares maximais com número de vértices fixo, variando entre 6 e 11, a partir do qual executaremos a busca. Com os resultados obtidos com essa busca, procuramos identificar a estrutura do *mop* que atinge a maior conectividade algébrica e propor conjecturas. Além disso, uma família de grafos outerplanares maximais, os grafos 2-caminho, será analisada. Será criado um segundo *dataset* com grafos 2-caminho com número fixo de vértices variando entre 6 e 24 e também será procurado o grafo 2-caminho com maior conectividade algébrica.

O restante deste artigo está organizado da seguinte maneira. Na Seção 2 apresentamos algumas definições e resultados da teoria de grafos e álgebra linear. A Seção 3 introduz a metodologia para a construção dos *datasets* criados para fazer os experimentos. A seguir, na Seção 4 são apresentados os resultados experimentais. As Seções 3 e 4 apresentam as contribuições deste trabalho. Na Seção 5 são discutidas as considerações finais e por último as referências.

2. Conceitos Básicos

Seja $G = (V, E)$ um grafo não direcionado com $|V| = n$ vértices e $|E| = m$ arestas. A vizinhança de $v \in V$ é denotada $Adj(v) = \{w \in V | \{v, w\} \in E\}$, e o grau do vértice v, denotado

DOI: 10.59254/sbpo-2023-174837
http://live-proceedings.pantheonsite.io/p/174837

d_v, é $|Adj(v)|$. Para $S \subset V$, o subgrafo de G induzido por S é denotado $G[S]$. Se $G[S]$ é um subgrafo completo então S é denominado **clique**. Denotamos por K_p, P_p e C_p, respectivamente, os grafos completo, caminho e ciclo com p vértices. Um vértice $v \in V$ é **simplicial** em G quando $Adj(v)$ é uma clique em G; v é **universal** quando $|Adj(v)| = n - 1$.

Uma k**-coloração** de um grafo G consiste em atribuir uma cor, de um conjunto de k cores, a cada $v \in V$ de maneira tal que vértices adjacentes recebam cores diferentes.

Se $G_1 = (V_1, E_1)$ e $G_2 = (V_2, E_2)$ são grafos disjuntos nos vértices, seu grafo soma é $G_1 + G_2 = (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2)$. A operação **join** entre dois grafos, $G_1 \vee G_2$ é o grafo obtido a partir de $G_1 + G_2$ adicionando novas arestas entre cada vértice de G_1 e todos os vértices de G_2. No caso particular em que $G_2 = K_1$, denotamos a operação join $G \vee v$. Dado um grafo G e um inteiro positivo d, a d**-potencia** de $G = (V, E)$ é o grafo $G^d = (V, E')$ tal que dois vértices são adjacentes se e somente se a distância entre eles em G é no máximo d.

Um grafo é **outerplanar** se é planar e pode ser representado no plano com todos os vértices na mesma face. Existe uma caracterização de grafos outerplanares por configurações proibidas, um grafo é outerplanar se e somente se não contém subgrafo homeomorfo a K_4 e a $K_{2,3}$ [Chartrand, Harary, 1967]. Um **grafo outerplanar maximal**, mop, verifica que não existe a possibilidade de inclusão de novas arestas sem a perda da outerplanaridade. Todo *mop* com n vértices possui $2n - 3$ arestas e sua conectividade de vértices é igual a 2. [Harary, 1969].

Um grafo $G = (V, E)$ é **cordal** se todo ciclo de tamanho maior ou igual a 4 admite uma corda. O **grafo interseção de cliques** de um grafo cordal G é um grafo conexo com pesos nas arestas cujos vértices são as cliques maximais de G. O peso de cada aresta é o número de vértices na interseção de duas cliques maximais. Uma árvore geradora de peso máximo do grafo interseção de cliques de G é denominado **árvore de cliques** de G.

Dentre os grafos cordais, neste trabalho consideramos os grafos k-caminho. A família de **grafos** k**-caminho** [Proskurowski, Telles, 1999] pode ser definida da seguinte forma: todo grafo completo com k vértices é um grafo k-caminho. Se $G = (V, E)$ é um grafo k-caminho , $Q \subset V$ é uma clique de tamanho k de G contendo no mínimo um vértice simplicial e $v \notin V$, então o grafo aumentado $G' = (V \cup \{v\}, E \cup \{\{v, w\} | w \in \text{Q}\})$ também é um grafo k-caminho. Observar que o número de arestas num grafo k-caminho com n vértices é $2n - \frac{k(k+1)}{2}$. Dois exemplos de grafos 2-caminho com n vértices são $P_{n-1} \vee K_1$ e P_n^2, chamados leque e serpentina, respectivamente.

Os grafos k-caminho são um exemplo de grafos cordais com todas suas cliques maximais de tamanho fixo ($k + 1$, se $n > k$). Para o caso particular $k = 2$, os grafos 2-caminho não contém subgrafo homeomorfo a K_4 e $K_{2,3}$, e portanto são outerplanares. Além disso, pela definição, podemos concluir que os grafos 2-caminho possuem número de arestas igual a $2n - 3$, logo são grafos outerplanares maximais.

A **matriz Laplaciana** de um grafo G é definida como: $L(G) = D(G) - A(G)$, onde $D(G) = diag(d_{v_1}, \ldots, d_{v_n})$ é a matriz diagonal dos graus dos vértices de G e $A(G)$ a matriz de adjacência de G. $L(G)$ é simétrica , logo, possui n autovalores reais, e também é semidefinida positiva, assim, todos seus autovalores são não negativos. Além disso, a matriz $L(G)$ é singular, portanto, o menor autovalor é igual a zero. Denotamos os autovalores de $L(G)$ por $\mu_1(G) \geq \cdots \geq \mu_{n-1}(G) \geq \mu_n(G) = 0$. [Fiedler, 1973] provou que um grafo é conexo se e somente se $\mu_{n-1}(G) > 0$; este autovalor é chamado **conectividade algébrica** e é denotado por $a(G)$. Fiedler também provou que a conectividade algébrica de um grafo não completo está limitada superiormente pela sua conectividade de vértices.

Outras definições e resultados sobre grafos, grafos cordais e conectividade algébrica podem ser achados em [Diestel, 2001], [Golumbic, 1980] e [Abreu, 2007], respectivamente.

DOI: 10.59254/sbpo-2023-174837
http://live-proceedings.pantheonsite.io/p/174837

3. Metodologia

Nesta seção é apresentada a metodologia utilizada para a criação de dois *datasets* formados por listas de grafos em formato $graph6$ ($g6$) com número de vértices fixo. O primeiro, denominado *Dataset* 1 contém grafos outerplanares maximais com até 11 vértices. O segundo, denominado *Dataset* 2, contém grafos 2-caminho com até 24 vértices. A Figura 1 apresenta as etapas da construção de cada *dataset*.

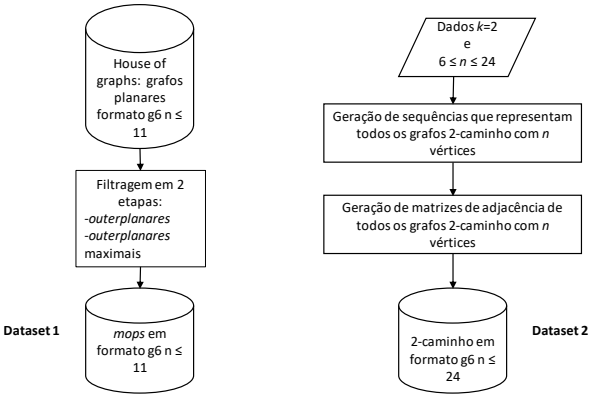


Figura 1: Criação *Datasets* 1 e 2

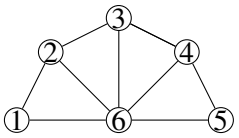
3.1. Formato *graph6*

O formato $graph6$, ou $g6$, foi introduzido por Brendan McKay, para armazenar grafos não direcionados utilizando caracteres ASCII (https://users.cecs.anu.edu.au/˜ bdm/data/formats.txt). Dado um grafo não direcionado $G = (V, E)$, $|V| = n$, para calcular o código $g6$ correspondente a G, devem ser realizadas as seguintes operações:

1. Considerar a matriz de adjacência $A(G)$. Como esta matriz é simétrica, considera-se unicamente a parte triangular superior da mesma (sem a diagonal, que é igual a zero).
2. Construir um vetor x de dimensão $n(n-1)/2$ com entradas 0 e 1 a partir da parte triangular superior de $A(G)$, cujos elementos são obtidos a partir das colunas desta parte da matriz. Se $n(n-1)/2$ não for múltiplo de 6, completar o vetor x com zeros até atingir maior inteiro menor ou igual a múltiplo de 6 (supor que $x\prime$ tem dimensão igual a um múltiplo de 6). Dividir esse novo vetor $x\prime$ em subvetores de dimensão 6. Cada subvetor forma uma string que pode ser convertida a um número em base 10, acrescentar 63 a esse valor.
3. Acrescentar 63 unidades ao valor n (número de vértices de G).
4. O formato g6 de G é dado pela conversão de $n + 63$ a ASCII, seguido pela conversão de cada subvetor de tamanho 6 convertido a um número em base 10 e acrescentando 63 unidades, para finalmente converter em ASCII.

A Tabela 1 mostra um exemplo do cálculo do formato $g6$ para o grafo da Figura 2, com $n = 6$, vetor $x = [1|01|001|0001|11111]$ de dimensão 15 e $x\prime = [101001|000111|111000]$ de dimensão 18. O formato $g6$ calculado a partir da matriz de adjacência da Figura 2 para o grafo $P_5 \vee K_1$ é EhFw.

DOI: 10.59254/sbpo-2023-174837
http://live-proceedings.pantheonsite.io/p/174837



$$A(G) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Figura 2: Grafo $P_5 \vee K_1$ e sua matriz de adjacência

y_2		101001_2	000111_2	111000_2
y_{10}	6	41	7	5
$y_{10} + 63$	69	104	70	119
ASCII	E	h	F	w

Tabela 1: subvetores de tamanho 6 base 2, valores equivalentes em base 10, somando 63 e convertidos a ASCII

3.2. Construção do *Dataset 1*

House of Graphs (https://houseofgraphs.org/) é um repositório completo de listas de grafos de varias classes armazenados em formato $g6$. Uma característica importante deste repositório é que permite procurar por grafos interessantes, por exemplo por grafos extremais ou por contraexemplos para conjecturas. Além disso, esse repositório pode ser aumentado pelos seus usuários.

Sua primeira versão data de 2012 [Brinkmanna et al., 2013], e foi reconstruído completamente em 2021-2022. Na sua versão mais recente [Brinkmanna et al., 2023] permite fazer consultas calculando invariantes, desenhar grafos e editar os desenhos para modifica-los manualmente, assim como exportar desenhos em formatos diferentes.

Para construir o dataset correspondente aos *mops*, foi utilizada a lista de grafos planares do House of Graphs (https://houseofgraphs.org/meta-directory/planar), e foram filtrados dessas listas os *mops*. A Tabela 2 mostra a quantidade de grafos planares com número de vértices fixo na página do House of Graphs. A filtragem foi realizada em 2 etapas. Na primeira etapa, a partir da lista de grafos planares, foram identificados aqueles que verificam $m = 2n - 3$. Na seguna etapa, usando o Lema 1, foram identificados os grafos outerplanares dentro da lista de grafos planares com $m = 2n - 3$.

Lema 1: [Gao et al., 2020] Seja $G = (V, E)$ um grafo e v um vértice que não pertence a V. O grafo $G \vee v$ é planar se e somente se G é outerplanar.

Dessa forma foram construídas listas com *mops* com número de vértices fixo n, variando de 6 até 11. A limitação do número de vértices é devido a limitação das listas de grafos planares disponíveis no House of Graphs. Observe que existem 313.372.298 grafos planares não isomorfos com $n = 12$ vértices e por esse motivo não estão disponíveis. Os algoritmos de filtragem e o teste de planaridade foram implementados em *Python*, usando as bibliotecas do *NetworkX* [Hagberg et al., 2008]. A Tabela 3 mostra a quantidade de *mops* com número de vértices fixo no *Dataset* 1 construído neste trabalho.

3.3. Construção do *Dataset* 2

Para construir um *dataset* contendo grafos 2-caminho com número de vértices fixo foi utilizada uma rotulação proposta por [Pereira et al., 2014]. Nesse artigo é apresentado um algoritmo

DOI: 10.59254/sbpo-2023-174837
http://live-proceedings.pantheonsite.io/p/174837

n	grafos planares com n vértices
1	1
2	1
3	2
4	6
5	20
6	99
7	646
8	5.974
9	71.885
10	1.052.805
11	17.449.299
12	313.372.298

Tabela 2: Quantidade de *grafos planares* não isomorfos com número de vértices n, $1 \leq n \leq 12$ - extraído de House of Graphs www.hog.grinvin.org/Planar

n	*mops* com n vértices
6	3
7	4
8	12
9	27
10	82
11	228

Tabela 3: Quantidade de *mops* não isomorfos com número de vértices n, $6 \leq n \leq 11$

tal que, dados o valor $k \geq 2$ e o número de vértices n permite obter sequências de números inteiros de tamanho $n-k-1$ representando a $k+1$ coloração do todos os grafos k-caminho não isomorfos. Os Lemas e Definições do artigo [Pereira et al., 2014] mencionados a seguir mostram a corretude dessa representação. Apresentamos aqui os resultados desse artigo para o caso $k = 2$.

Em [Pereira et al., 2008] foi provado que todo grafo k-caminho admite uma única árvore de cliques que é um caminho. A partir desse resultado, verificou-se que os vértices da árvore de cliques formam uma sequência de $n-k$ cliques diferentes, cada uma das quais tem tamanho $k+1$, que é chamada de **sequência core** de G . No caso particular de $k = 2$, a sequência core, denotada por $\mathcal{D}(G) = \langle D_1, D_2, \ldots, D_{n-2} \rangle$, verifica $|D_i| = 3, \forall 1 \leq i \leq n-2$. Notar que um k-caminho, e em particular um 2-caminho, admite duas sequências core, pois a sequência reversa de $\mathcal{D}(G)$, $\mathcal{D}'(G) = \langle D_{n-2}, \ldots, D_1 \rangle$, também é uma sequência core de G. A sequência formada pelas interseções de duas cliques consecutivas em $\mathcal{D}(G)$ também é formada por cliques diferentes de tamanho 2, denotadas $B_i = D_{i+1} \cap D_i$, para $i = 1, \ldots, n-3$.

Usando as observações anteriores, [Pereira et al., 2014] provam que um grafo 2-caminho é univocamente 3-colorível. E definem, a partir de uma 3-coloração $c(G)$ a **sequência de cores** $C = \langle c_1, c_2, \ldots, c_{n-3} \rangle$ onde c_i, é a cor de v_i na sequência $\langle v_1, v_2, \ldots, v_{n-3} \rangle$ onde $\{v_i\} = D_{i+1} \setminus D_i$

DOI: 10.59254/sbpo-2023-174837
http://live-proceedings.pantheonsite.io/p/174837

da sequência core do grafo 2-caminho G. Se $n = 3$ a sequência de cores é vazia.

Para poder caracterizar os grafos 2-caminho com n fixo como sequências de tamanho $n-3$, [Pereira et al., 2014] introduzem dois novos conceitos: sequência normalizada e sequência restrita. Dada uma sequência de números inteiros $C = \langle a_1, a_2, \ldots, a_j \rangle$, C é **normalizada** se $a_1 = 1$ e $a_i \leq 1 + max(a_1, \ldots, a_{i-1})$ para $2 \leq i \leq j$. E a sequência C é **restrita** se $a_i \neq a_{i+1}$ para $1 \leq i \leq j-1$. A partir dessas definições, as autores provam os dois resultados a seguir.

Lema 2 (Lema 4 [Pereira et al., 2014]): Seja $\mathcal{D}(G) = \langle D_1, D_2, \ldots, D_{n-2} \rangle$ uma sequência core de um grafo 2-caminho com n vértices. Existe uma única sequência de cores restrita normalizada $C = \langle c_1, c_2, \ldots, c_{n-3} \rangle$ de $\mathcal{D}(G)$ com no máximo 3 cores.

Lema 3 (Lema 5 [Pereira et al., 2014]) Seja $C = \langle a_1, a_2, \ldots, a_{n-3} \rangle$ uma sequência restrita normalizada com no máximo 3 cores. C é uma sequência de cores de um único grafo 2-caminho com n vértices.

Para o grafo 2-caminho $G = P_5 \vee K_1$ com $n = 6$ vértices da Figura 2 temos $\mathcal{D}(G) = \langle D_1, D_2, D_3, D_4 \rangle$, onde $D_1 = \{1, 2, 6\}$, $D_2 = \{2, 3, 6\}$, $D_3 = \{3, 4, 6\}$ e $D_4 = \{4, 5, 6\}$, a sequência de vértices na diferencia de duas 3-cliques consecutivas em $\mathcal{D}(G)$, $\{v_i\} = D_{i+1} \setminus D_i$, $1 \leq i \leq n-3$, é $\langle 3, 4, 5 \rangle$. Uma sequência restrita e normalizada de tamanho $n-k-1 = 3$ formada por, no máximo, $k+1 = 3$ cores para $G = P_5 \vee K_1$ é $C = \langle 1, 2, 1 \rangle$.

A seguir apresentamos o algoritmo proposto em [Pereira et al., 2014] para o caso particular $k = 2$. Dados n e $k = 2$, o Algoritmo 1 gera todas as sequências inteiras de tamanho $n-3$ com valores no máximo 3 representando todos os grafos 2-caminho não isomorfos com n vértices.
As sequências são geradas na ordem lexicográfica, respeitando as seguintes regras:
(i) deve ser uma sequência restrita;
(ii) deve ser uma sequência normalizada;
(iii) no máximo 3 cores são usadas.

Para verificar as três regras, o algoritmo utiliza as variáveis a_i e b_i. A menor sequência em ordem lexicografico que verifica todas as regras é a sequência $\langle 1, 2, 1, 2, 1, \ldots \rangle$. O Algoritmo 1 descarta algumas sequências, pois tanto uma sequência restrita normalizada de tamanho $n-3$ quanto a sua sequência reversa representam o mesmo grafo 2-caminho. Portanto, o algoritmo só considera válida a que for menor lexicograficamente. O Algoritmo 1 inicializa o conjunto T com a sequência $\langle 1, 2, 1, 2, \ldots \rangle$ de tamanho $n-3$, e no final da execução o conjunto T contém todas as sequências correspondentes a grafos 2-caminhos com n vértices não isomorfos.

Algoritmo 1
Entrada: n número de vértices
Saída: T todas as sequências de grafos 2-caminhos com n vértices não isomorfos
Passo 1 : $\langle p_1, p_2, \ldots, p_{n-3} \rangle \leftarrow \langle 1, 2, 1, 2, \ldots \rangle$;
$T \leftarrow \{\langle p_1, p_2, \ldots, p_{n-3} \rangle\}$;
Passo 2: **Enquanto** existir i máximo tal que $a_i = min(\{p_{i+1}, p_{i+2}\} - \{p_{i-1}\})$,
$b_i = max(p_1, p_2, \ldots, p_{i-1}) + 1$ e $a_i \leq b_i \leq 3$ **faça**
Passo 2(a) : $\langle p_1, p_2, \ldots, p_{n-3} \rangle \leftarrow \langle p_1, \ldots, p_{i-1}, a_i, 1, 2, 1, 2, \ldots \rangle$;
Passo 2(b) : Calcular $\langle q_1, \ldots, q_{n-3} \rangle$ sequência reversa normalizada de $\langle p_1, p_2, \ldots, p_{n-3} \rangle$;
Passo 2(c) : **Se** $\langle p_1, p_2, \ldots, p_{n-3} \rangle \preceq \langle q_1, \ldots, q_{n-3} \rangle$ **então** $T \leftarrow T \cup \{\langle p_1, p_2, \ldots, p_{n-3} \rangle\}$.

DOI: 10.59254/sbpo-2023-174837
http://live-proceedings.pantheonsite.io/p/174837

O Algoritmo 1 foi implementado em *Python*. Dados $k = 2$ e um valor de n, foram geradas todas as sequências restritas normalizadas utilizando no máximo 3 cores diferentes. Uma vez obtidas para n fixo todas as sequências, foram determinadas as matrizes de adjacência (Algoritmo 2) e os códigos $g6$ correspondentes a cada grafo 2-caminho (usando bibliotecas do *NetworkX*). Dessa forma foi criado um *dataset* contendo todos os grafos 2-caminho com número de vértices fixo, variando entre 6 e 24 em formato $g6$. A Tabela 4 mostra a quantidade de grafos 2-caminho não isomorfos para cada valor de n.

Algoritmo 2
Entrada: $C = \langle c_1, \ldots c_{|C|} \rangle$ sequência restrita normalizada com valores $1, 2, 3$ e $|C| = n - 3$
Saída: $A(G)$ do único grafo 2-caminho com n vértices representado pela sequência C
$A_{n \times n} = 0$
$B = \langle 1, 2, 3, c_1, \ldots, c_{|C|} \rangle$
Para $i = n, \ldots, 1$ **faça**
    $conjuntoTriangulo = \{1, 2, 3\}$
    $conjuntoAuxiliar = \{B[i]\}$
    Para $j = i - 1, \ldots, 1$ **faça**
        Se $conjuntoTriangulo \neq conjuntoAuxiliar$ **então**
            Se $B[j] \notin conjuntoAuxiliar$ **então**
                $conjuntoAuxiliar = conjuntoAuxiliar + B[j]$
                $A_{i \times j}$ = 1
                $A_{j \times i}$ = 1

n	grafos 2-caminhos com n vértices	n	grafos 2-caminhos com n vértices
6	2	16	1.056
7	3	17	2.080
8	6	18	4.160
9	10	19	8.256
10	20	20	16.512
11	36	21	32.896
12	72	22	65.792
13	136	23	131.328
14	272	24	262.656
15	528		

Tabela 4: Quantidade de grafos 2-caminho não isomorfos com número de vértices $6 \leq n \leq 24$

.

4. Experimentos e Resultados

Nesta seção são descritos os experimentos realizados e os resultados obtidos utilizando os *datasets* apresentados na seção anterior. O objetivo dos experimentos é executar uma busca exaustiva pelo grafo de cada família, *mop* e 2-caminho, com número de vértices fixo com maior valor da conectividade algébrica.

Para calcular a conectividade algébrica a partir do grafo em formato $g6$ foram utilizadas a linguagem de programação *Python* e bibliotecas do *NetworkX*. Posteriormente foi identificado o

DOI: 10.59254/sbpo-2023-174837
http://live-proceedings.pantheonsite.io/p/174837

grafo que atinge o máximo valor de conectividade algébrica dentre todos os grafos de cada família com número de vértices fixo.

Os resultados obtidos pela busca exaustiva foram os seguintes. No *Dataset* 1, dependendo da paridade do número de vértices considerado, o tipo de *mop* que atingiu o maior valor de conectividade algébrica foi diferente. Para n ímpar, o *mop* que atinge o valor máximo é $P_{n-1} \vee K_1$. Para n par, os grafos que atingem o valor máximo são diferentes. A Tabela 5 mostra os resultados obtidos para n variando entre 6 e 11 . Observar que para o caso de n ímpar, o grafo que atinge o maior valor de conectividade algébrica, $P_{n-1} \vee K_1$ é o mesmo que foi achado para maximizar o índice da matriz $A(G)$ e A_α para grafos outerplanares ([Lin, Ning, 2021] e [Yu, 2019]). Observamos que o *Dataset* 1 não contem grafos isomorfos e em todos os testes realizados o valor máximo da conectividade algébrica foi atingido por um único grafo.

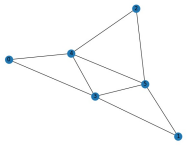
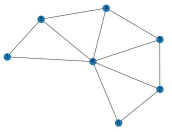
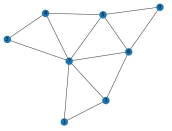
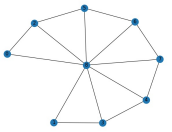
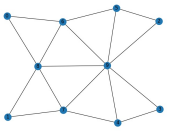
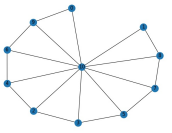
n	$a(G)$ **máxima**	*Mop* G **em formato** $g6$	**Desenho de** G
6	1,6972	EElw	
7	1,2679	FQCnw	
8	1,2890	GAIKj{	
9	1,1522	HQC_GV~	
10	1,1378	I?CcIRBNw	
11	1,0978	J@GOOH@ _f_	

Tabela 5: Mop em formato $g6$ que maximiza a conectividade algébrica para n fixo e desenho correspondente

Por outro lado, para todo valor n fixo considerado no *Dataset* 2, o grafo 2-caminho que atingiu o maior valor da conectividade algébrica foi identificado pela sequência $\langle 1, 2, 1, 2, \dots \rangle$ de

DOI: 10.59254/sbpo-2023-174837
http://live-proceedings.pantheonsite.io/p/174837

tamanho $n-3$ que corresponde ao grafo $P_{n-1} \vee K_1$, $\forall\, 6 \leq n \leq 24$. Observar que o grafo obtido neste experimento para todo valor de n considerado é o mesmo que foi achado com maior autovalor máximo para a matriz Laplaciana sem sinal ($Q(G)$) para os grafos 2-caminho [Yu et al., 2015]. A Tabela 6 mostra os resultados obtidos para n fixo variando entre 6 e 24.

n	$a(G)$ **máxima**	**2-caminho** G **em formato** $g6$	**Sequência restrita normalizada** C
6	1,3820	EzKg	1 2 1
7	1,2679	FzKhG	1 2 1 2
8	1,1981	GzKhHC	1 2 1 2 1
9	1,1522	HzKhHC‘	1 2 1 2 1 2
10	1,1206	IzKhHC‘GG	1 2 1 2 1 2 1
11	1,0979	JzKhHC‘GH?_	1 2 1 2 1 2 1 2
12	1,0810	KzKhHC‘GH?c@	1 2 1 2 1 2 1 2 1
13	1,0681	LzKhHC‘GH?c@G@	1 2 1 2 1 2 1 2 1 2
14	1,0581	MzKhHC‘GH?c@G@G?_	1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1
15	1,0501	NzKhHC‘GH?c@G@G?c?G	1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2
16	1,0437	OzKhHC‘GH?c@G@G?c?H?@	1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1
17	1,0384	PzKhHC‘GH?c@G@G?c?H?@G?C	1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2
18	1,0341	QzKhHC‘GH?c@G@G?c?H?@G?C_?G	1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1
19	1,0304	RzKhHC‘GH?c@G@G?c?H?@G?C_?H??G	1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2
20	1,0273	SzKhHC‘GH?c@G@G?c?H?@G?C_?H??H??C	1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1
21	1,0246	TzKhHC‘GH?c@G@G?c?H?@G?C_?H??H??C_?@	1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2
22	1,0223	UzKhHC‘GH?c@G@G?c?H?@G?C_?H??H??C_?@G??G	1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1
23	1,0204	VzKhHC‘GH?c@G@G?c?H?@G?C_?H??H??C_?@G??H???_	1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2
24	1,0186	WzKhHC‘GH?c@G@G?c?H?@G?C_?H??H??C_?@G??H???c??@	1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1

Tabela 6: Grafo 2-caminho em formato $g6$ que maximiza a conectividade algébrica para n fixo e sequência restritra normalizada correspondente.

5. Conclusões

Neste trabalho foi apresentada a construção de dois *datasets* com o objetivo de fazer experimentos na busca de grafos outerplanares maximais com número de vértices fixo e conectividade algébrica máxima. Foram apresentados dois *datasets*, o primeiro contendo todos os *mops* com número de vértices entre 6 e 11 vértices, e o segundo contendo todos os grafos 2-caminho com número de vértices entre 6 e 24 vértices. Utilizando esses *datasets*, foi possível conjecturar qual o grafo 2-caminho com número de vértices fixo e maior valor da conectividade algébrica, o grafo $P_{n-1} \vee K_1$. No caso dos *mops*, os experimentos mostraram que considerando até 11 vértices, o grafo que atinge a maior conectividade algébrica varia, dependendo se o número de vértices é par ou impar. Propomos como trabalhos futuros continuar utilizando os *datasets* propostos para identificar outros grafos que atinjam autovalores extremos nas duas classes de grafos consideradas. Além disso, provar a conjectura sobre os grafos 2-caminho com conectividade algébrica máxima.

6. Agradecimentos

O segundo e o terceiro autor foram parcialmente financiados pelo projeto FAPERJ E_20/2022-284573 e pela Bolsa PIBITI/CNPq - Projeto Institucional 2021-2022 respectivamente.

7. Referências

Abreu, N. (2007) Old and new results on algebraic connectivity of graphs, *Linear Algebra and its Applications* 423: 53-73.

Barrière, L., Huemer, C., Mitsche, D., Orden, D. (2013) On the Fiedler value of large planar graphs, *Linear Algebra and its Applications* 439(7):2070-2084.

DOI: 10.59254/sbpo-2023-174837
http://live-proceedings.pantheonsite.io/p/174837

Boots, B., Royle, G. (1991) Conjecture on the maximum value of the principal eigenvalue of planar graph, *Geogr. Anal.* 23(3):276-282.

Chartrand, G., Harary, F. (1967) Planar permutation graphs, *Ann. Inst. Henri Poincaré* 3:433-438.

Cvetkovìc, D. Rowlinson, P. (1990) The largest eigenvalue of a graph: survey, *Linear and Multilinear Algebra* 20(1-2):3-33.

Brinkmanna, G., Coolsaet, K., Goedgebeura, J., Mélot H. (2013) House of Graphs: A database of interesting graphs *Discrete Applied Mathematics* 161:311-314.

Brinkmanna, G., Coolsaet, K., Goedgebeura, J., Mélot H. (2023) House of Graphs 2.0 : A database of interesting graphs and more *Discrete Applied Mathematics* 325:97-107.

Brinkmanna, G. (2013) House of Graphs www.hog.grinvin.org . Acessado: 2023-04-19.

Fiedler, M.M. (1973) Algebraic connectivity of graphs, *Czechoslovak Math. Journal* 23:298-305.

Gao, U., Lin, P., Lin, X.. Extremal graphs and classification of planar graphs by MC-numbers. arXiv 2022. https://doi.org/10.48550/arXiv.2010.06809 .

Golumbic, M., Algorithmic Graph Theory and Perfect Graphs Academic Press, New York (1980).

Harary, F., Graph Theory. Addison-Wesley, Reading, MA (1969).

Hagberg, A.A., Schult, D.A., Swart, P.J. (2008) *Exploring network structure, dynamics, and function using NetworkX*, In Proceedings of the 7th Python in Science Conference (SciPy2008), Gäel Varoquaux, Travis Vaught, and Jarrod Millman (Eds), (Pasadena, CA USA), 11-15.

Lin, H., Ning, B.(2021) A complete solution to the Cvetković - Rowlinson conjecture, *Journal of Graph Theory* 97(3):441-450.

Pereira, P.R., Garcia, A., Lilian Markenzon, L. (2014) Generating and counting unlabeled k-path graphs *Discrete Applied Mathematics* 164:297-303.

Pereira, P.R., Markenzon, L., Vernet, O. (2008) A clique-difference encoding scheme for labelled k-path graphs, *Discrete Applied Mathematics* 156:3216-3222.

Proskurowski, A., Telle, J. (1999) Classes of graphs with restricted interval models, *Discrete Math. Theor. Comput. Sci.* 3:167-176.

Tait, M., Tobin, J. (2017) Three conjectures in extremal spectral graph theory, *J. Combin.Theory, Ser. B* 126:137-161.

Yu, G., Feng, L., Ilic, A., Stevanovic, D (2015) The signless laplacian spectral radius of bounded degree graphs on surfaces, *Applicable Analysis and Discrete Mathematics* 9:332-346.

Yu, Z., Kang, L., Liu, L., Shan, E. (2019) The extremal α-index of outerplanar and planar graphs, *Applied Mathematics and Computation* 343(C):90-99.

DOI: 10.59254/sbpo-2023-174837
http://live-proceedings.pantheonsite.io/p/174837