

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Grafos *split* completos com energia laplaciana sem sinal máxima

Lucélia Kowalski Pinheiro¹

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, RS

Vilmar Trevisan²

Instituto de Matemática, UFRGS, Porto Alegre, RS

Resumo. Neste trabalho descreveremos o grafo *split* completo com n vértices que tem a maior energia laplaciana sem sinal.

Palavras-chave. Energia laplaciana sem sinal, grafos *threshold*, grafos *split* completos.

1 Introdução

Seja $G = (V, E)$ um grafo simples, onde $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ é o conjunto de vértices de G e $E = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ é o conjunto de arestas de G . Usaremos d_i para denotar o grau do vértice v_i . A matriz laplaciana sem sinal Q de G é uma matriz simétrica de ordem $n \times n$ definida elemento a elemento como $q_{ij} = 1$, se os vértices v_i e v_j são adjacentes e 0 caso contrário, se $i \neq j$, e $q_{ii} = d_i$. Os autovalores de Q são chamados de autovalores laplacianos sem sinal de G e são denotados por q_1, q_2, \dots, q_n .

Um grafo G com $n = k + j$ vértices é chamado de *split* completo se G é formado por uma clique com j vértices e um conjunto independente de k vértices, onde todos esses k vértices são adjacentes aos j vértices da clique.

Definimos a energia laplaciana sem sinal de G por

$$LE^+ = \sum_{i=1}^n |q_i - \bar{d}|, \quad (1)$$

onde $\bar{d} := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i$ é o grau médio de G .

O conceito de energia de grafos surgiu inicialmente relacionado à matriz de adjacência A de G , onde a energia é definida como a soma dos valores absolutos dos autovalores de A . Com o aprofundamento do estudo de outras matrizes associadas à grafos (laplaciana, laplaciana normalizada, laplaciana sem sinal, ...) surgiram outros conceitos de energia em grafos, incluindo a que trataremos neste trabalho: energia laplaciana sem sinal. Uma questão relevante que surge quando trabalhamos com energia é encontrar grafos extremos, por exemplo, qual dentre os grafos com n vértices, possui energia máxima. Seguindo

¹luukowalski@hotmail.com

²trevisan@mat.ufrgs.br

essa ideia, ao procurarmos por grafos com n vértices que tem a maior energia laplaciana sem sinal estabelecemos a seguinte conjectura: o grafo *split* completo com $k = \lceil \frac{2n-1}{3} \rceil$ e $j = \lfloor \frac{n+1}{3} \rfloor$ é o grafo com $n \geq 6$ vértices com a maior energia laplaciana sem sinal e neste trabalho vamos dar o primeiro passo para demonstrar tal conjectura provando o seguinte resultado:

Teorema 1.1. *Se $n < 6$, o grafo *split* completo com maior energia laplaciana sem sinal é o grafo completo. Se $n \geq 6$, o grafo *split* completo com maior energia laplaciana sem sinal é aquele com $k = \lceil \frac{2n-1}{3} \rceil$ e $j = \lfloor \frac{n+1}{3} \rfloor$.*

2 Grafos *threshold*

Vamos inicialmente apresentar propriedades sobre os grafos *threshold* que formam uma classe maior de grafos que contém os *split* completos.

Um grafo G é dito um grafo *threshold* se ele pode ser definido através de uma sequência binária da seguinte maneira: Dada uma sequência $(a_i) = a_1 a_2 \dots a_n$ de 0's e 1's, o grafo *threshold* associado à (a_i) é um grafo de n vértices construído recursivamente, começando com um grafo vazio, e para cada $i = 1, \dots, n$, uma das seguintes operações é realizada

- adição de um vértice isolado, caso $a_i = 0$;
- adição de um vértice adjacente à todos os vértices já existentes, caso $a_i = 1$.

Mais informações sobre os grafos *threshold* podem ser encontradas em [1], [3] e [4]. Caso o grafo seja conexo, temos $a_n = 1$. Além disso, não existe diferença em se considerar a_1 igual à 0 ou 1, mas para simplificar a notação futura consideraremos $a_1 = a_2$. A estrutura de um grafo *threshold* está representada na Figura 1.

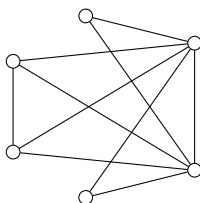


Figura 1: Grafo *threshold* com sequência 110011.

Note que um grafo *threshold* pode ser representado através de uma estrutura de blocos da seguinte maneira: $(b_i^{q_i}) := b_1^{q_1} \dots b_r^{q_r}$ onde cada $b_k \in \{0, 1\}$ e $q_k \in \mathbb{N}$ representa o número de repetições do dígito b_k , para $k = 1, \dots, r$. Além disso, a sequência b_k é alternante, isto é, $b_k + b_{k+1} = 1$, para $k = 1, \dots, r - 1$, e todos os vértices do bloco k possuem o mesmo grau, que denotaremos por p_k . Por exemplo, a sequência binária 00111011 pode ser escrita como $0^2 1^3 0^1 1^2$ com grau dos blocos $p_1 = 5$, $p_2 = 6$, $p_3 = 2$ e $p_4 = 7$.

Conforme demonstrado em [2] é possível descobrir $n - r$ autovalores laplacianos sem sinal de um grafo *threshold* cuja sequência binária é $b_1^{q_1} \dots b_r^{q_r}$.

Lema 2.1. *Seja G um grafo threshold com n vértices, sequência binária $b_1^{q_1} \dots b_r^{q_r}$ e graus dos blocos iguais à p_k , com $k = 1, \dots, r$. Para $k \in \{1, \dots, r\}$, $p_k - b_k$ é autovalor laplaciano sem sinal de G com multiplicidade pelo menos $q_k - 1$.*

Além disso, também foi provado em [2] que os outros r autovalores laplacianos sem sinal são os autovalores da matriz

$$B = \begin{bmatrix} p_1 + b_1(q_1 - 1) & b_2\sqrt{q_1q_2} & b_3\sqrt{q_1q_3} & \dots & b_r\sqrt{q_1q_r} \\ b_2\sqrt{q_1q_2} & p_2 + b_2(q_2 - 1) & b_3\sqrt{q_2q_3} & \dots & b_r\sqrt{q_2q_r} \\ b_3\sqrt{q_1q_3} & b_3\sqrt{q_2q_3} & p_3 + b_3(q_3 - 1) & \dots & b_r\sqrt{q_3q_r} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_r\sqrt{q_1q_r} & b_r\sqrt{q_2q_r} & b_r\sqrt{q_3q_r} & \dots & p_r + b_r(q_r - 1) \end{bmatrix}. \quad (2)$$

3 O grafo $G(k, j)$

O grafo *split* completo com $n = k + j$ vértices é um grafo *threshold* com sequência binária dada por $0^k 1^j$ e é denotado por $G(k, j)$, $k, j \in \mathbb{N} - \{0\}$. A Figura 2 representa um grafo $G(k, j)$.

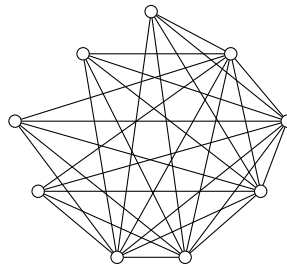


Figura 2: Grafo $G(4, 5)$.

Lema 3.1. *Os autovalores laplacianos sem sinal de um grafo $G(k, j)$, para quaisquer $k, j \in \mathbb{N} - \{0\}$, são dados por*

$$\begin{aligned} & n - 2 \text{ com multiplicidade } j - 1, \\ & j \text{ com multiplicidade } k - 1, \\ & \frac{k + 3j - 2 - \sqrt{j(j + 6k - 4) + k^2 - 4k + 4}}{2}, \\ & \frac{k + 3j - 2 + \sqrt{j(j + 6k - 4) + k^2 - 4k + 4}}{2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Demonstração: Os vértices correspondentes à 0^k tem grau j e os vértices correspondentes à 1^j tem grau $n - 1$, pelo Lema 2.1, j e $n - 2$ são autovalores laplacianos sem sinal com multiplicidade $k - 1$ e $j - 1$, respectivamente.

Os outros 2 autovalores laplacianos sem sinal são os autovalores da matriz (2) que, neste caso, é dada por

$$\begin{bmatrix} j & \sqrt{kj} \\ \sqrt{kj} & n + j - 2 \end{bmatrix}, \tag{4}$$

os quais podem ser facilmente calculados e são iguais à

$$q_1 := \frac{k + 3j - 2 - \sqrt{j(j + 6k - 4) + k^2 - 4k + 4}}{2}$$

e

$$q_n := \frac{k + 3j - 2 + \sqrt{j(j + 6k - 4) + k^2 - 4k + 4}}{2}.$$

□

Vamos agora calcular o grau médio de $G(k, j)$. Como os k vértices correspondentes à 0^k têm grau j e os j vértices correspondentes à 1^j tem grau $n - 1$, o grau médio é dado por (lembrando que $n = k + j$)

$$\begin{aligned} \bar{d} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i \\ &= \frac{1}{k + j} \cdot (kj + j(n - 1)) \\ &= \frac{j^2 + (2k - 1)j}{k + j}. \end{aligned} \tag{5}$$

Vamos localizar os autovalores com relação ao grau médio, utilizando somente manipulações nas expressões matemáticas. Para quaisquer valores de k e j , temos

$$q_1 < j \leq \bar{d} \text{ e } \bar{d} \leq q_n. \tag{6}$$

Já para o autovalor $n - 2$ temos duas condições diferentes

- (i) Se $k^2 < j + 2k$, temos que $\bar{d} > n - 2$;
- (ii) Se $k^2 \geq j + 2k$, temos que $\bar{d} \leq n - 2$.

Além disso, para $k \geq 2$, vale

$$j \leq n - 2$$

e para $k = 1$,

$$n - 2 < j.$$

O caso $k = 1$ pode ser facilmente calculado separadamente. Consideremos portanto $k \geq 2$. Assim, se $k^2 < j + 2k$, temos que $q_1, j \leq \bar{d}$, $n - 2 < \bar{d}$ e $q_n \geq \bar{d}$; e se $k^2 \geq j + 2k$ temos que $q_1, j \leq \bar{d}$ e $n - 2, q_n \geq \bar{d}$.

Utilizando essas informações obtemos o seguinte resultado

Teorema 3.1. *A energia laplaciana sem sinal do grafo $G(k, j)$ é dada por:*

(i)

$$LE^+(G(k, j)) = \sqrt{(k+j)^2 + 4(jk - k - j + 1)} + \frac{j^2 + k^2 - 2k}{k+j}, \quad (7)$$

se $k^2 < j + 2k$.

(ii)

$$LE^+(G(k, j)) = \sqrt{(k+j)^2 + 4(jk - k - j + 1)} + \frac{2j(k^2 + 1) - 2k(j - 1) - (k + j)^2}{k+j}, \quad (8)$$

se $k^2 \geq j + 2k$.

Demonstração: Para calcular a energia laplaciana sem sinal precisamos saber quais autovalores estão acima e abaixo do grau médio. Precisamos portanto calcular a energia laplaciana sem sinal para cada um dos casos separadamente: (i) $n - 2 < \bar{d}$ e (ii) $n - 2 \geq \bar{d}$. Vejamos a demonstração do caso (ii).

(ii) Se $n - 2 \geq \bar{d}$ (donde devemos ter, $k^2 \geq j + 2k$), temos

$$\begin{aligned} LE^+(G(k, j)) &= \sum_{i=1}^n |q_i - \bar{d}| \\ &= |q_1 - \bar{d}| + (k-1) \cdot |j - \bar{d}| + (j-1) \cdot |n-2 - \bar{d}| + |q_n - \bar{d}| \\ &= \bar{d} - q_1 + (k-1) \cdot (\bar{d} - j) + (j-1) \cdot (n-2 - \bar{d}) + q_n - \bar{d}. \end{aligned} \quad (9)$$

Fazendo as simplificações necessárias, substituindo $n = k + j$ e lembrando que q_1 e q_n são raízes do polinômio $x^2 + (2 - 3j - k)x + 2j^2 - 2j$ (polinômio característico da matriz (4)), donde $q_1 + q_n = k + 3j - 2$, obtemos

$$\begin{aligned} LE^+(G(k, j)) &= -q_1 + (k-1) \cdot (\bar{d} - j) + (j-1) \cdot (n-2 - \bar{d}) + q_n \\ &= -q_1 + (k-j) \cdot \bar{d} + j^2 - 2j - k + 2 + k + 3j - 2 - q_1 \\ &= -2q_1 + (k-j)\bar{d} + j^2 + j. \end{aligned} \quad (10)$$

Substituindo $q_1 = \frac{k+3j-2-\sqrt{j(j+6k-4)+k^2-4k+4}}{2}$ e $\bar{d} = \frac{j^2+(2k-1)j}{k+j}$ e fazendo as simplificações, chegamos à fórmula desejada (8).

O item (i) é provado de modo análogo. □

4 O $G(k, j)$ com maior energia laplaciana sem sinal

Para melhor manejar as equações, vamos reescrever o Teorema 3.1 em termos somente de n e k , o que é possível uma vez que $j = n - k$.

Teorema 4.1. *A energia laplaciana sem sinal do grafo $G(k, j)$ é dada por:*

(i)

$$LE^+(G(k, j)) = \sqrt{n^2 + 4n(k-1) - 4k^2 + 4} + \frac{2k^2 - 2kn - 2k + n^2}{n}, \quad (11)$$

se $k < \frac{1+\sqrt{4n+1}}{2}$.

(ii)

$$LE^+(G(k, j)) = \sqrt{n^2 + 4n(k-1) - 4k^2 + 4} + \frac{2nk^2 - 2kn - 2k^3 + 2k^2 + 2n - n^2}{n}, \quad (12)$$

se $k \geq \frac{1+\sqrt{4n+1}}{2}$.

Agora temos as ferramentas necessárias para demonstrar o Teorema 1.1, o qual enunciaremos novamente aqui.

Teorema 4.2. *Se $n < 6$, o grafo completo é o $G(k, j)$ com maior energia laplaciana sem sinal. Se $n \geq 6$, o grafo $G(k, j)$ com maior energia laplaciana sem sinal é aquele com $k = \lceil \frac{2n-1}{3} \rceil$ e, portanto $j = \lfloor \frac{n+1}{3} \rfloor$.*

Ideia da demonstração: Para demonstrar o resultado para $n < 6$, listamos os possíveis grafos $G(k, j)$ com n vértices e verificamos que o grafo completo $G(1, n-1)$ é o grafo com maior energia laplaciana sem sinal.

Para o caso $n \geq 6$, vamos dividir em 3 etapas:

1. Se $k < \frac{1+\sqrt{4n+1}}{2}$, temos que (11) atinge seu máximo para $k = 1$, ou seja, para o grafo completo.
2. A equação (12) atinge seu máximo para $k = \lceil \frac{2n-1}{3} \rceil$.
3. Comparar os máximos obtidos nas etapas 1 e 2.

Vejamos a demonstração de cada etapa separadamente.

1. Basta provar que, se $k \geq 2$, então

$$\sqrt{n^2 + 4n(k-1) - 4k^2 + 4} + \frac{2k^2 - 2kn - 2k + n^2}{n} \leq 2n - 2. \quad (13)$$

2. Provaremos inicialmente que a equação (12) é crescente para k entre 2 e $\frac{2n-1}{3}$. Lembrando que, as contas são efetuadas para quaisquer valores reais de k , mas o que nos interessa são somente os valores naturais de k .

A equação (10) pode ser reescrita em termos de n e k como

$$\begin{aligned} LE_1^+(k) &:= -2q_1 + (2k - n) \cdot \bar{d} + (n - k)^2 + n - k \\ &= -2q_1 + (2k - n) \cdot \frac{(n - k)^2 + 2k(n - k) - n + k}{n} + (n - k)^2 + n - k \\ &= \frac{-2nq_1 - 2k^3 - 4nk + 2k^2 + 2nk^2 + 2n^2}{n}. \end{aligned} \quad (14)$$

O que resta agora é analisar sob que condições $LE_1^+(k) - LE_1^+(k-1) > 0$ para obter que o valor de k deve estar entre 2 e $\frac{2n-1}{3}$.

Utilizando a mesma ideia anterior, basta provar que a equação (12) é decrescente para k entre $\frac{2n-1}{3} + 2$ e n , verificando, neste caso, que $LE_1^+(k) - LE_1^+(k-1) < 0$, quando k está entre $\frac{2n-1}{3} + 2$ e n .

Juntando as duas informações anteriores obtemos que o valor máximo de (12) ocorre para algum k no intervalo $[\frac{2n-1}{3} - 1, \frac{2n-1}{3} + 3]$ (levando em conta que $\frac{2n-1}{3}$ possa não ser um valor inteiro temos que considerar essa variação). Agora, temos que um dos valores $\frac{2n-1}{3}$, $\frac{2n}{3}$ ou $\frac{2n+1}{3}$ é inteiro. Para concluir o resultado, precisamos analisar cada uma das possibilidades ($\frac{2n-1}{3}$, $\frac{2n}{3}$ ou $\frac{2n+1}{3}$ é inteiro) e ver quais os possíveis valores inteiros de k no intervalo $[\frac{2n-1}{3} - 1, \frac{2n-1}{3} + 3]$.

Por exemplo, se $\frac{2n-1}{3}$ é inteiro, os valores inteiros de k no intervalo $[\frac{2n-1}{3} - 1, \frac{2n-1}{3} + 3]$ são $\frac{2n-1}{3} - 1$, $\frac{2n-1}{3}$, $\frac{2n-1}{3} + 1$, $\frac{2n-1}{3} + 2$ e $\frac{2n-1}{3} + 3$. Agora, calculamos a energia laplaciana sem sinal para cada um desses valores de k e verificamos por comparação que o caso $k = \frac{2n-1}{3}$ é o que possui a maior energia laplaciana sem sinal.

3. Basta verificar que a energia laplaciana sem sinal máxima para a equação (12) é maior que $2n - 2$ que é o máximo de (11). \square

5 Conclusões e Trabalho futuros

Neste trabalho vimos qual é o grafo *split* completo que tem a maior energia laplaciana sem sinal. Estamos agora trabalhando para encontrar o grafo *threshold* com maior energia laplaciana sem sinal.

Referências

- [1] N. Abreu, R. R. Del-Vecchio, V. Trevisan e C. T. M. Vinagre. Teoria Espectral de Grafos - Uma Introdução. In *Notas do IIIº Colóquio de Matemática da Região Sul*, Florianópolis, Santa Catarina, Brasil, 2014.
- [2] E. Fritscher and V. Trevisan, Exploring symmetries to decompose matrices and graphs preserving the spectrum, *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 2015. to appear.
- [3] N. V. R. Mahadev and U. N. Peled. *Threshold graphs and related topics*. Elsevier, 1995.
- [4] C. T. M. Vinagre, R. R. Del-Vecchio, D. A. R. Justo and V. Trevisan. Maximum Laplacian energy among threshold graphs, *Linear Algebra and its Applications*, 439:1479–1495, 2013.