

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Mudanças na energia laplaciana sem sinal pela adição de uma aresta

Lucélia Kowalski Pinheiro¹

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

Vilmar Trevisan²

Instituto de Matemática e Estatística, UFRGS, Porto Alegre, RS

Resumo. Neste trabalho estudaremos qual é o efeito que a adição de uma aresta à um grafo qualquer $G \neq K_n$ produz na energia laplaciana sem sinal deste grafo. Mais especificamente, obtemos uma cota para a diferença entre as energias do grafo original e do grafo obtido pela adição de uma aresta. Além disso, mostramos que essa cota é justa.

Palavras-chave. Grafos, Energia laplaciana sem sinal, Adição de arestas.

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* $Q(G)$ 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 $q_{ii} = d_i$. Podemos escrever a matriz laplaciana sem sinal como $Q(G) = A(G) + D(G)$, onde $A(G)$ é a matriz de adjacências de G e $D(G)$ é a matriz diagonal com entradas d_i . Os autovalores de $Q(G)$ são chamados de autovalores laplacianos sem sinal de G e são denotados por q_1, q_2, \dots, q_n .

Definimos a *energia laplaciana sem sinal* de G por

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

onde $\bar{d} := \frac{2m}{n}$ é o grau médio de G .

O conceito de energia de grafos surgiu em 1978 inicialmente associado à matriz de adjacência A de G , onde a energia é definida como a soma dos valores absolutos dos autovalores de A . Somente anos mais tarde surgiram outros conceitos de energia: energia laplaciana, energia laplaciana normalizada, energia laplaciana sem sinal, dentre outras. No que diz respeito à adição ou remoção de arestas já existem resultados nos quais a variação da energia de um grafo G e do grafo $G + e$, com $e \notin E$, ou $G - e$, com $e \in E$, é analisada.

¹lucelia.kowalski@ufrgs.br

²trevisan@mat.ufrgs.br

Por exemplo, nas referências [1, 5] os autores analisaram qual o efeito que a remoção de uma aresta produz na energia usual de um grafo e em [2, 4] foram estudados os efeitos que a remoção de uma aresta produz na energia laplaciana normalizada.

Neste trabalho vamos estudar o efeito que a adição de uma aresta pode causar na energia laplaciana sem sinal de um grafo qualquer $G \neq K_n$, obtendo uma cota para a diferença $|LE^+(G + e) - LE^+(G)|$. Além disso, apresentamos dois exemplos de grafos para os quais a cota é atingida.

2 Resultados preliminares

Os *valores singulares* de uma matriz B , $n \times n$, são definidos como as raízes quadradas dos autovalores da matriz $B^t B$, os quais denotaremos por $\sigma_1(B), \sigma_2(B), \dots, \sigma_n(B)$. Note que para matrizes simétricas, os valores singulares são exatamente iguais aos valores absolutos dos seus autovalores. Então, podemos escrever a energia laplaciana sem sinal de um grafo G como

$$LE^+(G) = \sum_{i=1}^n \sigma_i \left(Q(G) - \frac{2m}{n} I_n \right), \tag{2}$$

onde I_n denota a matriz identidade de ordem n .

Além disso, temos que a soma dos valores singulares da soma de matrizes satisfaz o seguinte resultado

Lema 2.1. [7] *Sejam A, B matrizes de ordem $n \times n$. Então:*

$$\sum_{i=1}^n \sigma_i(A + B) \leq \sum_{i=1}^n \sigma_i(A) + \sum_{i=1}^n \sigma_i(B). \tag{3}$$

A partir deste lema podemos obter a seguinte relação

$$\left| \sum_{i=1}^n \sigma_i(A) - \sum_{i=1}^n \sigma_i(B) \right| \leq \sum_{i=1}^n \sigma_i(A - B). \tag{4}$$

Veremos agora uma técnica que pode ser útil para calcular alguns autovalores de uma matriz através dos autovalores de uma matriz de ordem menor. Seja B uma matriz real e simétrica de ordem n e suponha que as linhas e colunas de B são indexadas por $X = \{1, \dots, n\}$. Seja $\{X_1, X_2, \dots, X_m\}$ uma partição de X , onde cada $|X_i| = n_i > 0$. Podemos particionar B de acordo com $\{X_1, X_2, \dots, X_m\}$, isto é,

$$B = \begin{bmatrix} B_{1,1} & \cdots & B_{1,m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{m,1} & \cdots & B_{m,m} \end{bmatrix},$$

onde $B_{i,j}$ denota a submatriz (bloco) de B formada pelas linhas em X_i e pelas colunas em X_j .

Se a soma das linhas de cada bloco $B_{i,j}$ é constante, dizemos que a partição $\{X_1, X_2, \dots, X_m\}$ é uma *partição equilibrada (ou regular)* de B .

Lema 2.2. [3] *Seja $\{X_1, X_2, \dots, X_m\}$ uma partição equilibrada de B , onde cada bloco $B_{i,j}$ da matriz B tem soma das linhas constante e igual à c_{ij} . Se $C = (c_{ij})_{m \times m}$ então o espectro da matriz C está contido no espectro da matriz B , levando em conta as multiplicidades.*

Um vértice de grau 1 é chamado de *vértice pendente* e um vértice adjacente à um vértice pendente é chamado de *vértice quase-pendente*. O próximo resultado fala sobre a multiplicidade dos autovalores laplacianos sem sinal associados ao número de vértices pendentes de um grafo.

Lema 2.3. [6] *Seja G um grafo com p vértices pendentes adjacentes à q vértices quase-pendentes. Então, 1 é autovalor laplaciano sem sinal de G com multiplicidade pelo menos $p - q$.*

Note que, combinando os dois últimos lemas temos boas ferramentas para o cálculo dos autovalores laplacianos sem sinal de grafos que possuem uma grande quantidade de vértices pendentes.

3 Adicionando uma aresta a um grafo

Provaremos a seguir uma cota para a diferença entre as energias laplacianas sem sinal do grafo $G \neq K_n$ e do grafo $G + e$, que é obtido pela adição de uma aresta e ao grafo G .

Teorema 3.1. *Sejam $G = (V, E)$ um grafo com n vértices e m arestas, $G \neq K_n$, e e uma aresta que não pertence a E . Então:*

$$|LE^+(G + e) - LE^+(G)| \leq 4 - \frac{4}{n}. \tag{5}$$

Demonstração. Usando as equações (2) e (4) obtemos

$$\begin{aligned} |LE^+(G + e) - LE^+(G)| &= \left| \sum_{i=1}^n \sigma_i \left(Q(G + e) - \frac{2(m+1)}{n} I_n \right) - \sum_{i=1}^n \sigma_i \left(Q(G) - \frac{2m}{n} I_n \right) \right| \\ &\leq \sum_{i=1}^n \sigma_i \left(Q(G + e) - \frac{2(m+1)}{n} I_n - Q(G) + \frac{2m}{n} I_n \right) \\ &= \sum_{i=1}^n \sigma_i \left(Q(G + e) - Q(G) - \frac{2}{n} I_n \right). \end{aligned}$$

Para estimar esse valor teremos que encontrar os autovalores da matriz $Q(G + e) - Q(G) - \frac{2}{n} I_n$, uma vez que esta é simétrica. Para isso suponhamos, sem perda de generalidade, que a aresta e liga os dois primeiros vértices de G (que anteriormente não eram adjacentes), ou seja, as matrizes $Q(G + e)$ e $Q(G)$ são iguais, respectivamente a

$$\begin{bmatrix} d_1 + 1 & 1 & q_{13} & \cdots & q_{1n} \\ 1 & d_2 + 1 & q_{23} & \cdots & q_{2n} \\ q_{13} & q_{23} & d_3 & \cdots & q_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{1n} & q_{2n} & q_{3n} & \cdots & d_n \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \begin{bmatrix} d_1 & 0 & q_{13} & \cdots & q_{1n} \\ 0 & d_2 & q_{23} & \cdots & q_{2n} \\ q_{13} & q_{23} & d_3 & \cdots & q_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{1n} & q_{2n} & q_{3n} & \cdots & d_n \end{bmatrix}.$$

Assim,

$$Q(G + e) - Q(G) - \frac{2}{n}I_n = \begin{bmatrix} 1 - \frac{2}{n} & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 - \frac{2}{n} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{n} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{n} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -\frac{2}{n} \end{bmatrix}.$$

Portanto, o espectro de $Q(G + e) - Q(G) - \frac{2}{n}I_n$ é $\left\{ \left(-\frac{2}{n}\right)^{(n-1)}, 2 - \frac{2}{n} \right\}$. Por fim, basta tomar o valor absoluto desses números e somá-los para obter o que desejamos

$$\sum_{i=1}^n \sigma_i \left(Q(G + e) - Q(G) - \frac{2}{n}I_n \right) = \frac{2}{n}(n - 1) + 2 - \frac{2}{n} = 4 - \frac{4}{n}, \tag{6}$$

ou seja, $|LE^+(G + e) - LE^+(G)| \leq 4 - \frac{4}{n}$. □

Apresentamos a seguir dois exemplos de grafos para os quais a igualdade acima é atingida, em um deles o valor obtido é exato (apesar de o grafo considerado ser bem peculiar) e no outro obtemos o valor no limite, ou seja, quando o número de vértices de G tende ao infinito.

Exemplo 3.1. A Figura 1 ilustra um grafo G com n vértices isolados, e o grafo $G + e$, obtido a partir de G pela adição de uma aresta e .

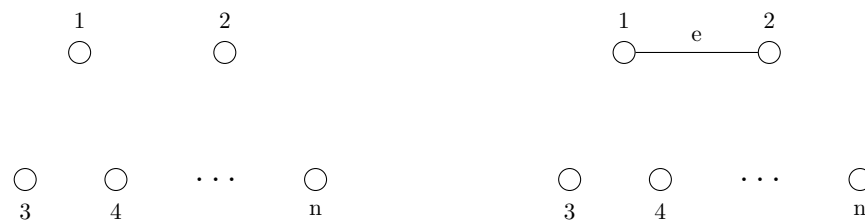


Figura 1: Grafos G e $G + e$

Claramente, todos os autovalores laplacianos sem sinal de G são nulos, donde $LE^+(G) = 0$. Além disso, o espectro laplaciano sem sinal de $G + e$ pode ser encontrado olhando para a matriz

$$Q(G + e) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix},$$

ou seja, $\{0^{(n-1)}, 2\}$ é o espectro laplaciano sem sinal de $G + e$. Assim, a energia laplaciana sem sinal de $G + e$ é $LE^+(G + e) = 4 - \frac{4}{n}$, donde

$$|LE^+(G + e) - LE^+(G)| = \left|4 - \frac{4}{n} - 0\right| = 4 - \frac{4}{n}. \tag{7}$$

Exemplo 3.2. Uma *caterpillar* é uma árvore na qual a remoção dos vértices de grau 1 resulta em um caminho, ou seja, uma *caterpillar* é formada por um caminho juntamente com qualquer número de folhas pendentes adicionadas a cada um dos vértices do caminho. Seja P_d este caminho central formado por d vértices. Os $n - d$ vértices restantes são os vértices pendentes que são adjacentes a um, e somente um, dos d vértices do caminho. Uma *caterpillar* regular é uma caterpillar na qual todos os vértices do caminho P_d possuem o mesmo número r de vértices pendentes (veja a Figura 2). Denotaremos tais *caterpillars* por $C(d, r)$ e, neste caso, o número de vértices é $n = d(r + 1)$.

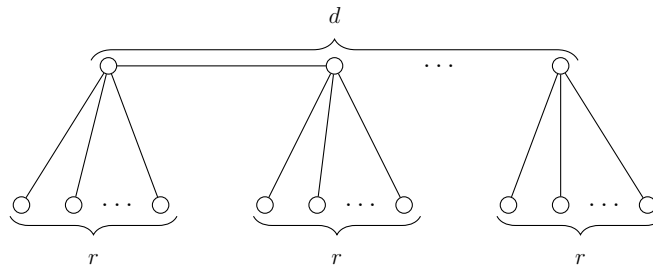


Figura 2: *Caterpillar* $C(d, r)$

Vamos considerar a caterpillar regular $C(3, r)$ com um caminho de tamanho 3. É possível calcular os autovalores de $C(3, r)$ utilizando os Lemas 2.2 e 2.3. De fato, pelo Lema 2.3, 1 é autovalor laplaciano sem sinal de $C(3, r)$ com multiplicidade $3r - 3$, e pelo Lema 2.2 os outros autovalores laplacianos sem sinal de $C(3, r)$ são os autovalores da seguinte matriz reduzida

$$B(C(3, r)) = \begin{bmatrix} r + 1 & 1 & 0 & r & 0 & 0 \\ 1 & r + 2 & 1 & 0 & r & 0 \\ 0 & 1 & r + 1 & 0 & 0 & r \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

cujo espectro é $\left\{0, r + 1, \frac{r+2 \pm \sqrt{r^2+4r}}{2}, \frac{r+4 \pm \sqrt{r^2+8r+4}}{2}\right\}$. Como 1 não faz parte deste espectro, obtemos desta forma o espectro laplaciano sem sinal completo de $C(3, r)$ que é igual à

$$\left\{0, 1^{(3r-3)}, r + 1, \frac{r + 2 \pm \sqrt{r^2 + 4r}}{2}, \frac{r + 4 \pm \sqrt{r^2 + 8r + 4}}{2}\right\}.$$

Podemos, portanto, calcular a energia laplaciana sem sinal de $C(3, r)$. Lembrando que $m = n - 1 = 3r + 2$, donde $\bar{d} = \frac{6r+4}{3r+3}$, obtemos que

$$LE^+(C(3, r)) = \frac{4r^2 - 3}{r + 1} + \sqrt{r^2 + 4r} + \sqrt{r^2 + 8r + 4}.$$

Vamos agora adicionar uma aresta e ligando os vértices terminais do caminho obtendo o grafo da Figura 3.

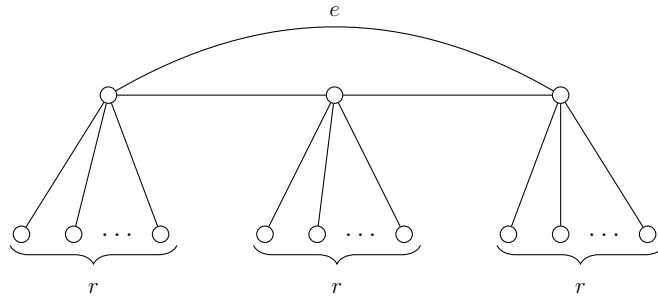


Figura 3: Grafo $C(3, r) + e$

Analogamente ao realizado acima temos que, pelo Lema 2.3, 1 é autovalor laplaciano sem sinal de $C(3, r) + e$ com multiplicidade $3r - 3$, e pelo Lema 2.2 os outros autovalores laplacianos sem sinal de $C(3, r)$ podem ser obtidos da seguinte matriz reduzida

$$B(C(3, r) + e) = \begin{bmatrix} r + 2 & 1 & 1 & r & 0 & 0 \\ 1 & r + 2 & 1 & 0 & r & 0 \\ 1 & 1 & r + 2 & 0 & 0 & r \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

cujo espectro é $\left\{ \left(\frac{r+2 \pm \sqrt{r^2+4r}}{2} \right)^{(2)}, \frac{r+5 \pm \sqrt{r^2+10r+9}}{2} \right\}$. Como 1 não faz parte deste espectro, obtemos desta forma o espectro laplaciano sem sinal completo de $C(3, r) + e$ que é igual à

$$\left\{ 1^{(3r-3)}, \left(\frac{r + 2 \pm \sqrt{r^2 + 4r}}{2} \right)^{(2)}, \frac{r + 5 \pm \sqrt{r^2 + 10r + 9}}{2} \right\}.$$

Podemos, portanto, calcular a energia laplaciana sem sinal de $C(3, r) + e$. Lembrando que, neste caso, $m = n$, donde $\bar{d} = 2$, obtemos que

$$LE^+(C(3, r) + e) = 3r - 3 + 2\sqrt{r^2 + 4r} + \sqrt{r^2 + 10r + 9}.$$

Portanto

$$LE^+(C(3, r) + e) - LE^+(C(3, r)) = -\frac{r^2}{r + 1} + \sqrt{r^2 + 4r} + \sqrt{r^2 + 10r + 9} - \sqrt{r^2 + 8r + 4}.$$

Agora, fazendo $n \rightarrow \infty$, temos que $r \rightarrow \infty$, e neste caso

$$\lim_{r \rightarrow \infty} (LE^+(C(3, r) + e) - LE^+(C(3, r))) = 4.$$

Portanto, o grafo $C(3, r)$ satisfaz a igualdade em (5) quando o número de vértices n tende ao infinito.

Referências

- [1] S. Akbari, E. Ghorbani, and M. R. Oboudi. Edge addition, singular values, and energy of graphs and matrices. *Linear Algebra and its Applications*, 430: 2192–2199, 2009.
- [2] L. E. Allem, D. P. Jacobs, and V. Trevisan. Normalized Laplacian energy change and edge deletion. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 75: 343–353, 2016.
- [3] A. E. Brouwer, and W. H. Haemers. *Spectra of graphs*. Springer Science & Business Media, 2011.
- [4] M. Cavers, S. Fallat, and S. Kirkland. On the normalized Laplacian energy and general Randić index R_{-1} of graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 433: 172–190, 2010.
- [5] J. Day, and W. So. Graph energy change due to edge deletion. *Linear Algebra and its Applications*, 428: 2070–2078, 2008.
- [6] E. Fritscher, and V. Trevisan. Exploring symmetries to decompose matrices and graphs preserving the spectrum. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 37.1: 260–289, 2016.
- [7] R. A. Horn, and C. R. Johnson. *Topics in matrix analysis*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1991.