Proceeding Series of the Brazilian Society of Applied and Computational Mathematics, v. 6, n. 1, 2018.

Trabalho apresentado no XXXVII CNMAC, S.J. dos Campos - SP, 2017.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Famílias infinitas de grafos **Q**-equienergéticos

João B. Carvalho[1]
Instituto de Matemática, UFRGS, Porto Alegre, RS
Vilmar Trevisan[2]
Instituto de Matemática, UFRGS, Porto Alegre, RS
Cybele T. M. Vinagre[3]
Instituto de Matemática e Estatística, UFF, Niterói, RJ

Resumo. A **Q**- energia de um grafo G com n vértices e m arestas é definida por $LE^+(G) = \sum_{i=1}^{n} \left|q_i - \frac{2m}{n}\right|$, onde $q_1 \geq \ldots \geq q_n$ são os autovalores da matriz laplaciana sem sinal $\mathbf{Q}$ de G. Nesta nota, construímos duas famílias infinitas de pares de grafos *threshold* com o mesmo número de vértices, a mesma **Q**-energia e diferentes espectros com respeito à matriz **Q**.

Palavras-chave. Matriz laplaciana sem sinal, Energia, Grafo *threshold*.

1 Introdução

Dado um grafo simples G com vértices $v_1, \cdots, v_n$ e m arestas, considere sua *matriz de adjacência* $\mathbf{A} = [a_{ij}]$, ou seja, a matriz de ordem $n \times n$ onde $a_{ij} = 1$ ou 0, caso haja ou não aresta entre os vértices v_i e v_j. A relação $\mathbf{Q} = \mathbf{A} + \mathbf{D}$, onde $\mathbf{D}$ é a matrix diagonal cujos elementos não nulos são os graus dos vértices de G, define $\mathbf{Q}$, que é chamada *matriz laplaciana sem sinal* de G. A matriz $\mathbf{Q}$ é semidefinida positiva e portanto, seus autovalores são não negativos. O *espectro laplaciano sem sinal* do grafo G é o multiconjunto formado pelos autovalores da matriz $\mathbf{Q}$, que são aqui denotados em ordem não decrescente por $q_1 \geq q_2 \geq \cdots q_n$.

Em Teoria Espectral de Grafos, estuda-se o espectro de matrizes associadas a um grafo para investigar algumas de suas propriedades estruturais, tais como conectividade, número de triângulos, etc - sugerimos [2] para os fundamentos da área e [3] para um estudo específico de propriedades da matriz **Q**. Um parâmetro espectral relacionado com a matriz **Q** é a *energia laplaciana sem sinal* (ou ***Q**-energia*) do grafo G, definida por

$$LE^+(G) = \sum_{i=1}^{n} \left|q_i - \frac{2m}{n}\right|.$$

Uma vertente da investigação sobre este parâmetro e que trataremos nesta nota, é a determinação de grafos que têm a mesma **Q**-energia. Notamos que, se dois grafos são

[1] carvalho@mat.ufrgs.br
[2] trevisan@mat.ufrgs.br
[3] cybl@vm.uff.br

coespectrais em relação à matriz **Q**, ou seja, têm o mesmo **Q**-espectro, a **Q**-energia é a mesma. Portanto, o problema relevante é determinar grafos que, mesmo com **Q**-espectros diferentes, tenham a mesma **Q**-energia. Dizemos que dois grafos G_1 e G_2 com n vértices e não coespectrais são **Q**-*equienergéticos* quando $LE^+(G_1) = LE^+(G_2)$.

Neste artigo, exibimos famílias de pares de grafos **Q**-equienegéticos. Especificamente, investigamos grafos *threshold* (ver definição abaixo) e construímos duas famílias infinitas de pares de grafos *threshold* **Q**-equienegéticos.

Existe uma abundância de artigos na literatura que tratam da busca de grafos equienergéticos, com relação às matrizes de adjacência, laplaciana, e outras, veja-se, por exemplo, [8], [5] e as referências ali contidas. Mais recentemente, alguns artigos surgiram abordando a **Q**-energia, geralmente fornecendo cotas para este parâmetro. Em [7], pares de grafos **Q**-equienergéticos com mesmo número de arestas são construídos por meio de certas operações em grafos e este parece ser o único artigo nesta linha. Como explicamos mais adiante, nossas construções não estão contempladas neste artigo.

Em se tratando de grafos *threshold* **Q**-equienergéticos, a investigação é ainda mais relevante, pelos motivos que relatamos a seguir. Por um lado, os grafos *threshold* parecem ter grande energia laplaciana sem sinal. De fato, em [6] conjectura-se que o grafo de n vértices com maior **Q**-energia seja um grafo *threshold*, mais especificamente o grafo com uma clique de $\lceil \frac{n-1}{3} \rceil$ vértices e $\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil$ vértices que são adjacentes a cada um dos vértices da clique. A figura abaixo mostra o candidato a grafo com **Q**-energia máxima para $n = 9$.

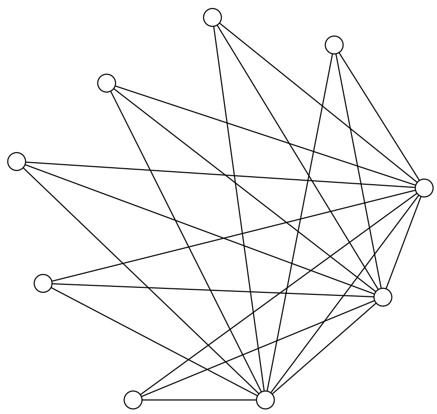

Figura 1: O grafo *threshold* com 9 vértices e **Q**-energia máxima.

Por outro lado existe uma abundância de grafos *threshold* que são coespectrais. De fato, em um artigo recente, [1], o seguinte surpreendente resultado foi obtido: do total de 2^{n-1} grafos *threshold* com n vértices, existem 2^{n-4} pares **Q**-coespectrais. Assim, parece ser o caso que famílias infinitas de grafos *threshold* com n vértices **Q**-equienergéticos são raras. Entendemos, portanto, que esse estudo seja relevante.

2 Preliminares sobre grafos *threshold*

Há várias maneiras equivalentes de se definir um grafo *threshold*. Nestas notas utilizaremos aquela dada por uma sequência binária.

Definição 2.1. *Dada uma sequência finita com n elementos (a_i) onde $a_i = 0$ ou 1, o grafo* threshold *associado a (a_i) é o grafo com n vértices construído recursivamente, iniciando-se com um grafo vazio (sem vértices e sem arestas) e adicionando-se um vértice isolado rotulado por i, se $a_i = 0$, ou um vértice rotulado i adjacente a todos os vértices com rótulo menor do que i, se $a_i = 1$.*

Notamos que, pela definição, a sequência de graus de um grafo *threshold* pode ser obtida da sua sequência binária (a_i): de fato, o vértice i tal que $a_i = 1$ é adjacente a todos os vértices j tais que $j < i$ e a todos os vértices k tais que $k > i$ e $a_k = 1$; por outro lado, se $a_i = 0$, então o vértice i é adjacente somente aos vértices k tais que $k > i$ e $a_k = 1$. Portanto, se o grafo tem n vértices, o grau d_i do vértice i é dado por $d_i = (i-1)a_i + \sum_{j=i+1}^{n} a_i$ e podemos assim encontrar o grau médio $d = \frac{2m}{n}$ do grafo a partir de sua sequência binária.

Por exemplo, o grafo da Figura 1 tem sequência binária 000000111, e portanto, $d_1 = d_2 = \cdots = d_6 = 3$ e $d_7 = d_8 = d_9 = 8$. Escreveremos 000000111 na forma $0^6 1^3$. De modo geral, se (q_j) é a sequência de quantidades de elementos de cada bloco de 0's e 1's, a sequência (a_i) será descrita na forma compacta $({b_i}^{q_i})$, onde $b_i = 0$ ou 1.

Para determinar a **Q**-energia de um grafo *threshold* precisamos determinar o seu espectro laplaciano sem sinal. Para este fim, em nossas construções, utilizamos o algoritmo de decomposição de grafos desenvolvido em [4], que, no caso dos grafos *threshold*, permite obter o espectro laplaciano sem sinal a partir da sequência binária na forma $({b_i}^{q_i})$.

Exemplo 2.1 Se $a, b, c \geq 0$ são inteiros, para o grafo *threshold* com sequência binária da forma

$$0^a 1^b 0^c$$

que tem $n = a + b + c$ vértices, a aplicação do algoritmo de [4] fornece seu espectro laplaciano sem sinal, que é dado pela união do conjunto

$$\sigma(G) = \{b^{(a-1)}, (b+a-2)^{(b-1)}, 0^{(c)}\},$$

onde os expoentes indicam as multiplicidades, com o espectro $\{\lambda_1, \lambda_2\}$ da matriz

$$\begin{bmatrix} b & \sqrt{ab} \\ \sqrt{ab} & 2b+a-2 \end{bmatrix},$$

sendo $\lambda_1 = \frac{\sqrt{b^2+(6a-4)b+(a-2)^2}+(3b+a-2)}{2}$ e $\lambda_2 = \frac{-\sqrt{b^2+(6a-4)b+(a-2)^2}+(3b+a-2)}{2}$. Para este grafo, o grau médio é dado por

$$d = d(a,b,c) = \frac{ab + b(a+b-1)}{a+b+c}.$$

Portanto, pela definição, a **Q**-energia deste grafo é dada por

$$LE^+(G) = |d - \lambda_1(a,b,c)| + |d - \lambda_2(a,b,c)| + (b-1)\,|d-(b+a-2)| + (a-1)\,|d-b| + cd\,.$$

3 Famílias infinitas de pares de grafos Q-equienergéticos

Claramente, a determinação da **Q**-energia de um grafo depende da comparação entre os autovalores da sua matriz **Q** em relação ao grau médio. Antes de exibir a construção da primeira família infinita de pares de grafos *threshold* **Q**-equienergéticos, fazemos uma observação de caráter mais geral sobre os grafos apresentados no Exemplo 2.1.

Observação 3.1. *Chamemos $G = G(a,b,c)$ ao grafo* threshold *com sequência binária $0^a1^b0^c$, onde $a \geq 3, b, c \geq 0$ são inteiros. Com as notações do Exemplo 2.1, suponhamos que valham as relações $b + a - 2 \geq d(a,b,c)$ e $d(a,b,c) \geq b$ entre o grau médio e os autovalores $b + a - 2$ e b de G. Então*

$$d(a,b,c) \leq \sqrt{(b + (a-2))^2} = \sqrt{b^2 + 2b(a-2) + (a-2)^2}$$

$$\leq \sqrt{(b^2 + 2b(a-2) + (a-2)^2) + 4ab} = \sqrt{(b^2 + (6a-4)b + (a-2)^2)}.$$

E como $d(a,b,c) \leq 3b + a - 2$, segue que

$$2d(a,b,c) \leq \sqrt{(b^2 + (6a-4)b + (a-2)^2)} + (3b + a - 2),$$

garantindo que $d(a,b,c) \leq \lambda_1(a,b,c)$. Além disso, também vale $\lambda_2(a,b,c) \leq d(a,b,c)$. De fato: temos que $2b < 2d(a,b,c)$ e além disso,

$$(b + a - 2) \leq \sqrt{(b^2 + 2b(a-2) + (a-2)^2) + 4ab} = \sqrt{(b^2 + (6a-4)b + (a-2)^2)}.$$

Daí $3b + a - 2 = 2b + (b + a - 2) \leq 2d(a,b,c) + \sqrt{(b^2 + (6a-4)b + (a-2)^2)}$, garantindo

$$-\sqrt{(b^2 + (6a-4)b + (a-2)^2)} + (3b + a - 2) \leq 2d(a,b,c),$$

como queríamos.

*Notamos que pelas hipóteses e cálculos acima, a expressão para a **Q**-energia de G em função de a, b, c torna-se*

$$LE^+(G) = (\lambda_1(a,b,c) - d) + (d - \lambda_2(a,b,c)) + (b-1)((b+a-2) - d) + (a-1)(d-b) + cd\,.$$

Experimentos computacionais nos levaram a investigar pares de grafos *threshold* com sequências binárias das formas $0^a1^b0^c$ e $0^b1^a0^c$. Considerando os fatos registrados na Observação 3.1, exibimos em nosso primeiro resultado uma família infinita de ternos (a,b,c) e (b,c,a) de inteiros definidos a dois parâmetros, que determinam grafos *threshold* **Q**-equienergéticos.

Teorema 3.1. *Sejam p, i inteiros tais que: $p, i \geq 2$ e $p > i$. Ponhamos $a = a(p,i) = (1+p) + p(p+1)(i-1)$, $b = b(p,i) = 1 + (p+1)(i-1)$ e $c = c(p,i) = 1 + p(i-1)$. Então são **Q**-equienergéticos os grafos* threshold *$G_1 = G_1(p,i)$ e $G_2 = G_2(p,i)$ com sequências binárias dadas, respectivamente, por*

$$0^a1^b0^c \quad e \quad 0^b1^a0^c\,.$$

Prova: Fixemos os inteiros p, i com $i \geq 2$, $p > i$ e sejam a, b, c como no enunciado. Pelo visto no Exemplo 2.1, como $a(p,i) \neq b(p,i)$, o par $G_1(p,i)$ e $G_2(p,i)$ é formado por grafos não coespectrais. Além disso, em ambos os grafos, $b+a-2$ é um autovalor. Temos então que vale: para G_1, $a \geq 3$ e

$$b+a-2-d(a,b,c) = \frac{(i-1)^2p^4 + (i-1)(3i-1)p^3 + i(3i-2)p^2 + (i^2-i+1)p - 2}{(i-1)p^2 + (3i-2)p + i + 2}$$

$$\geq \frac{p^4 + 2p^3 + p^2 + p - 2}{(i-1)p^2 + (3i-2)p + i + 2} > 0\,, \quad \text{ e para } G_2,$$

$$b+a-2-d(b,a,c) = \frac{(i-1)^2p^3 + (i-1)(3i-2)p^2 + (i-1)(3i-2)p + i(i-1) - 2}{(i-1)p^2 + (3i-2)p + i + 2}$$

$$\geq \frac{p^3 + p^2 + p}{(i-1)p^2 + (3i-2)p + i + 2} > 0.$$

Para o grafo G_1, temos ainda que b é um autovalor e vale

$$d(a,b,c) - b = \frac{(i-1)^2p^3 + (i^2-1)p^2 + p - i}{(i-1)p^2 + (3i-2)p + i + 2} > 0 \quad \text{ pois } p > i.$$

Por outro lado, notemos que $G_2 = G(b,a,c)$ na Observação 3.1; para este grafo, temos que $b \geq 3$, a é um autovalor e vale

$$d(b,a,c) - a = \frac{(i-2)(i-1)p^2 + i(i-2)p + i - 2}{(i-1)p^2 + (3i-2)p + i + 2} \geq 0\,, \qquad \text{pois } \ i \geq 2.$$

Portanto, considerando o acima provado, basta trocar as posições de a e b nas conclusões da Observação 3.1 para obter $\lambda_2(b,a,c) \leq d(b,a,c) \leq \lambda_1(b,a,c)$. Segue que $LE^+(G_2)$ é obtida como na Observação 3.1, apenas trocando-se as posições dos parâmetros a e b. Finalmente, expressando ambas as energias em função de p e i, após simplificações obtemos:

$$LE^+(G_1) = LE^+(G_2) = \frac{2(p+1)(ip-p+1)^2(ip^2-p^2+p-i+1)}{(i-1)p^2 + (3i-2)p + i + 2}$$

■

O teorema a seguir apresenta uma outra família infinita de pares de grafos *threshold* **Q**-equienergéticos. A prova também aplica o algoritmo desenvolvido em [4].

Teorema 3.2. *Para todo inteiro $c \geq 2$, são **Q**-equienergéticos os grafos* threshold *G_1 e G_2 com sequências binárias dadas respectivamente por*

$$1^{(2c+1)}0^{(c+1)} \quad e \quad 1^{(2c+2)}0^c$$

Prova: Para um inteiro $c \geq 2$ fixado, os grafos G_1 e G_2 têm **Q**-espectros respectivamente iguais a $\sigma(G_1) = \{4c, (2c-1)^{2c}, 0^{c+1}\}$ e $\sigma(G_2) = \{4c+2, (2c)^{2c+1}, 0^c\}$, sendo, portanto, não coespectrais. Os respectivos graus médios são $d_1 = \frac{(2c+1)(2c)}{3c+2}$ e $d_2 = \frac{(2c+2)(2c+1)}{3c+2}$. É fácil verificar que $4c \geq d_1$ e que $2c-1 \geq d_1$, para G_1, e que, para G_2, temos $4c+2 \geq d_2$ e $2c \geq d_2$. Calculando as expressões das **Q**-energias pela definição obtemos $LE^+(G_1) = LE^+(G_2) = \frac{8c^3+12c^2+4c}{3c+2}$. ■

Observação 3.2. *Os grafos G_1 e G_2 do Teorema 3.1 possuem o mesmo número de arestas se e somente se $a = b$ ou $a = b - 1$, e estas condições não ocorrem para os parâmetros a e b do enunciado. Também verifica-se que não existe inteiro $c \geq 2$ tais que os pares G_1 e G_2 do Teorema 3.2 tenham o mesmo número de arestas. Portanto, as construções apresentadas em [7] não incluem as famílias descritas nos Teoremas 3.1 e 3.2.*

4 Conclusões

Construímos duas famílias infinitas de pares de grafos *threshold* de mesma ordem, com mesma **Q**-energia e com diferentes **Q**-espectros.

Referências

[1] J. Carvalho, B. S. Souza, V. Trevisan and F. C. Tura. Exponentially many graphs have a **Q**-cospectral mate, 2016, to appear.

[2] D. Cvetković, M. Doob, and H. Sachs. *Spectra of Graphs.* Johann Ambrosius Barth, Leipzig, 3^a edition, 1995.

[3] D. Cvetković and S. K. Simić. Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian, II. *Linear Algebra and its Applications*, 432(9):2257 – 2272, 2010.

[4] E. Fritscher and V. Trevisan. Exploring symmetries to decompose matrices and graphs preserving the spectrum. *SIAM. J. Matrix Anal. & Appl.*, 37(1):260 – 289, 2016.

[5] I. Gutman A. Ilić, M. Bašić. Triply equienergetic graphs. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 64:189–200, 2010.

[6] L. K. Pinheiro and V. Trevisan. Maximality of the singless Laplacian energy, 2016, to appear.

[7] S. Pirzada and H. A. Ganie. On the construction of **L**-equienergetic graphs. *AKCE International Journal of Graphs and Combinatorics*, 12(2-3):141 – 154, 2015.

[8] D. Stevanović. Large sets of noncospectral graphs with equal Laplacian energy. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 61:463 – 470, 2009.

