

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

---

## Famílias infinitas de grafos $\mathbf{Q}$ -equienergéticos

João B. Carvalho<sup>1</sup>

Instituto de Matemática, UFRGS, Porto Alegre, RS

Vilmar Trevisan<sup>2</sup>

Instituto de Matemática, UFRGS, Porto Alegre, RS

Cybele T. M. Vinagre<sup>3</sup>

Instituto de Matemática e Estatística, UFF, Niterói, RJ

**Resumo.** A  $\mathbf{Q}$ -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  $q_1 \geq \dots \geq q_n$  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  $\mathbf{Q}$ -energia e diferentes espectros com respeito à matriz  $\mathbf{Q}$ .

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

### 1 Introdução

Dado um grafo simples  $G$  com vértices  $v_1, \dots, v_n$  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 matriz 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  $q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$ .

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  $\mathbf{Q}$ . Um parâmetro espectral relacionado com a matriz  $\mathbf{Q}$  é a *energia laplaciana sem sinal* (ou  *$\mathbf{Q}$ -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  $\mathbf{Q}$ -energia. Notamos que, se dois grafos são

---

<sup>1</sup>carvalho@mat.ufrgs.br

<sup>2</sup>trevisan@mat.ufrgs.br

<sup>3</sup>cybl@vm.uff.br

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

Neste artigo, exibimos famílias de pares de grafos  $\mathbf{Q}$ -equienergéticos. Especificamente, investigamos grafos *threshold* (ver definição abaixo) e construímos duas famílias infinitas de pares de grafos *threshold*  $\mathbf{Q}$ -equienergéticos.

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  $\mathbf{Q}$ -energia, geralmente fornecendo cotas para este parâmetro. Em [7], pares de grafos  $\mathbf{Q}$ -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*  $\mathbf{Q}$ -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  $\mathbf{Q}$ -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  $\mathbf{Q}$ -energia máxima para  $n = 9$ .

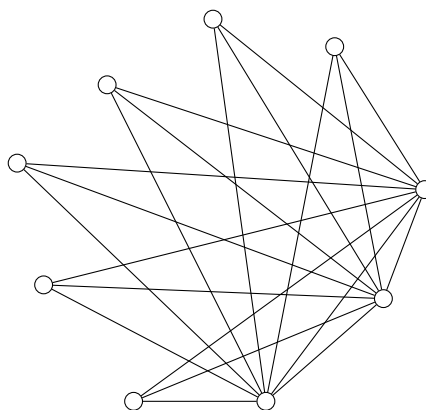


Figura 1: O grafo *threshold* com 9 vértices e  $\mathbf{Q}$ -energia máxima.

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  $\mathbf{Q}$ -coespectrais. Assim, parece ser o caso que famílias infinitas de grafos *threshold* com  $n$  vértices  $\mathbf{Q}$ -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  $d_i = (i - 1)a_i + \sum_{j=i+1}^n a_j$  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 0000001111, e portanto,  $d_1 = d_2 = \dots = d_6 = 3$  e  $d_7 = d_8 = d_9 = 8$ . Escreveremos 0000001111 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  $\mathbf{Q}$ -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  $\mathbf{Q}$ -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 $\mathbf{Q}$ -equienergéticos

Claramente, a determinação da  $\mathbf{Q}$ -energia de um grafo depende da comparação entre os autovalores da sua matriz  $\mathbf{Q}$  em relação ao grau médio. Antes de exibir a construção da primeira família infinita de pares de grafos *threshold*  $\mathbf{Q}$ -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  $0^a 1^b 0^c$ , 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

$$\begin{aligned} d(a, b, c) &\leq \sqrt{(b + (a - 2))^2} = \sqrt{b^2 + 2b(a - 2) + (a - 2)^2} \\ &\leq \sqrt{(b^2 + 2b(a - 2) + (a - 2)^2) + 4ab} = \sqrt{(b^2 + (6a - 4)b + (a - 2)^2)}. \end{aligned}$$

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  $\mathbf{Q}$ -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  $0^a 1^b 0^c$  e  $0^b 1^a 0^c$ . 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*  $\mathbf{Q}$ -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  $\mathbf{Q}$ -equienergéticos os grafos *threshold*  $G_1 = G_1(p, i)$  e  $G_2 = G_2(p, i)$  com sequências binárias dadas, respectivamente, por

$$0^a 1^b 0^c \quad \text{e} \quad 0^b 1^a 0^c.$$

**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

$$\begin{aligned}
 b + a - 2 - d(a, b, c) &= \frac{(i - 1)^2 p^4 + (i - 1)(3i - 1)p^3 + i(3i - 2)p^2 + (i^2 - i + 1)p - 2}{(i - 1)p^2 + (3i - 2)p + i + 2} \\
 &\geq \frac{p^4 + 2p^3 + p^2 + p - 2}{(i - 1)p^2 + (3i - 2)p + i + 2} > 0, \quad \text{e para } G_2, \\
 b + a - 2 - d(b, a, c) &= \frac{(i - 1)^2 p^3 + (i - 1)(3i - 2)p^2 + (i - 1)(3i - 2)p + i(i - 1) - 2}{(i - 1)p^2 + (3i - 2)p + i + 2} \\
 &\geq \frac{p^3 + p^2 + p}{(i - 1)p^2 + (3i - 2)p + i + 2} > 0.
 \end{aligned}$$

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

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

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

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

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*  $\mathbf{Q}$ -equienergéticos. A prova também aplica o algoritmo desenvolvido em [4].

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

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

**Prova:** Para um inteiro  $c \geq 2$  fixado, os grafos  $G_1$  e  $G_2$  têm  $\mathbf{Q}$ -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  $\mathbf{Q}$ -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  $\mathbf{Q}$ -energia e com diferentes  $\mathbf{Q}$ -espectros.

## Referências

- [1] J. Carvalho, B. S. Souza, V. Trevisan and F. C. Tura. Exponentially many graphs have a  $\mathbf{Q}$ -cospectral mate, 2016, to appear.
- [2] D. Cvetković, M. Doob, and H. Sachs. *Spectra of Graphs*. Johann Ambrosius Barth, Leipzig, 3<sup>a</sup> 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 signless Laplacian energy, 2016, to appear.
- [7] S. Pirzada and H. A. Ganie. On the construction of  $\mathbf{L}$ -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.