

Soma dos maiores autovalores da matriz Laplaciana sem sinal de um grafo

Bruno Dias Amaro

Carlile Lavor

Jorge Alencar

Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, DMA, IMECC, UNICAMP,
13083-859, Campinas, SP.

E-mail: brunoama@gmail.br clavor@ime.unicamp.br jorge.fa.lima@gmail.com

Leonardo Lima

Departamento de Engenharia de Produção, CEFET-RJ
20271-110, Maracanã, RJ.

E-mail: llima@cefet-rj.br

Carla Oliveira

Escola Nacional de Ciências Estatísticas, ENCE, IBGE
20231-050, Rio de Janeiro, RJ.

E-mail: carla.oliveira@ibge.gov.br

Resumo: *Seja G um grafo simples com n vértices e $e(G)$ arestas. Denotamos por $A = A(G)$ a matriz de Adjacência de G e $D = D(G)$ a matriz diagonal da soma das linhas de A , isto é, os graus de cada vértice de G . A matriz $Q = Q(G) = D + A$, que vem sendo estudada com grande intensidade nos últimos anos, é chamada de matriz Laplaciana sem sinal do grafo G . Sendo Q uma matriz simétrica e semi-definida positiva, seus autovalores são reais e não negativos e podem ser ordenados de forma não crescente como $q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n \geq 0$. Poucos trabalhos têm estudado a soma dos maiores autovalores da matriz Q e, recentemente, Ashraf et al. [1] conjecturaram que*

$$T_k(G) = \sum_{i=1}^k q_i \leq e(G) + \binom{k+1}{2}. \quad (1)$$

É fácil provar que a Conjectura (1) é válida para $k = 1, n - 1, n$ e Ashraf et al. [1] provaram, recentemente, que a Conjectura (1) é válida para os grafos regulares e para $k = 2$ quando G é não regular. Neste trabalho, examinamos alguns resultados disponíveis na literatura e apresentamos alguns avanços na Conjectura (1) para o caso $k = 3$.

Palavras-chave: *grafos extremais, matriz Laplaciana sem sinal, autovalores.*

1 Introdução

A teoria dos grafos é um ramo da matemática que estuda as relações entre os objetos de um determinado conjunto. Um grafo é denotado por $G(V, E)$, onde V é um conjunto não vazio de objetos denominados vértices e E é um conjunto de pares não ordenados de V , chamado arestas. Estruturas que podem ser representadas por grafos estão em toda parte e muitos problemas de interesse prático podem ser formulados como questões sobre certos grafos [4], [5].

A representação geométrica é extremamente útil na visualização de um grafo. Entretanto, extrair propriedades topológicas e/ou estruturais de um grafo apenas por visualização torna-se um trabalho não aplicável. Porém, um grafo pode ser convertido em uma forma algébrica via matriz. Quando um grafo é representado na forma matricial, algumas operações e propriedades

podem ser realizadas. Assim, a partir da Teoria de Grafos, uma área que vem cada vez mais se consolidando é a Teoria Espectral de Grafos.

A Teoria Espectral de Grafos se preocupa com a relação entre as propriedades algébricas do espectro de certas matrizes associadas a grafos, como a matriz de Adjacência, Laplaciana ou Laplaciana sem sinal e a topologia dos mesmos. Os autovalores e autovetores das matrizes associadas a um grafo são os invariantes que formam o autoespaço de grafos. Muitas das demonstrações matemáticas, que relaciona a estrutura de um grafo com seu espectro, podem ser encontradas, por exemplo, nos livros de Norman Biggs [2], Dragoš Cvetković [9] e Chris Godsil [11].

Há, na literatura do tema, uma conjectura proposta por Brouwer e Haemers [3] que associa a soma dos k maiores autovalores da matriz Laplaciana de um grafo G com seu número de arestas mais um fator combinatório que depende do valor k adotado.

Recentemente, Ashraf *et al.* [1] estenderam a Conjectura proposta por Brouwer e Haemers [3] para a matriz Laplaciana sem sinal de um grafo G , isto é,

$$T_k(G) = \sum_{i=1}^k q_i \leq e(G) + \binom{k+1}{2}. \tag{2}$$

Sem muitas dificuldades podemos provar que a Conjectura (2) é válida para $k = 1, n - 1, n$. Ainda, Ashraf *et al.* [1] provaram que a mesma é válida para $k = 2$ e, se G for regular, ela é válida para $1 \leq k \leq n$. Neste trabalho examinamos alguns resultados disponíveis na literatura e apresentamos alguns avanços na Conjectura (2) para o caso $k = 3$.

2 A matriz laplaciana sem sinal: soma dos seus autovalores

Definição 2.1. Seja G um grafo simples com n vértices e $e(G)$ arestas. Denotamos por $A = A(G)$ a matriz de Adjacência de G e $D = D(G)$ a matriz diagonal da soma das linhas de A , isto é, os graus de cada vértice de G . Definimos as matrizes $L = L(G) = D - A$ e $Q = Q(G) = D + A$ como as matrizes Laplaciana e Laplaciana sem sinal do grafo G , respectivamente.

Da Definição acima, temos os seguintes resultados:

Teorema 2.2. [8] Sejam G um grafo com n vértices, Q a matriz Laplaciana sem sinal de G e q um autovetor da matriz Q associado ao autovalor q_i , $i = 1, 2, \dots, n$. Então:

- (i) Q é simétrica e semi-definida positiva, isto é, $q^t Q q \geq 0$.
- (ii) Os autovalores q_i são reais e não negativos.

Sendo q_i reais e não negativos, eles podem ser ordenados de forma não crescente como $q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n \geq 0$.

Teorema 2.3. [8] Se G é um grafo bipartido, então o menor autovalor de Q é zero.

Definição 2.4. Sejam $G_1(V_1, E_1)$ e $G_2(V_2, E_2)$ grafos disjuntos com V_1, V_2 e E_1, E_2 seus respectivos conjuntos de vértices e arestas. A união $G_1 \cup G_2$ é o grafo $(V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2)$. A junção (“join”) $G = G_1 \vee G_2$ é obtida de $G_1 \cup G_2$ e cada vértice de G_1 é ligado por uma nova aresta a cada vértice de G_2 .

Baseado na Conjectura proposta por Brouwer e Haemers [3] para a matriz Laplaciana L , Ashraf *et al.* [1] conjecturaram que

$$T_k(G) = \sum_{i=1}^k q_i \leq e(G) + \binom{k+1}{2}. \tag{3}$$

Neste trabalho, estudamos o caso $k = 3$, ou seja,

$$q_1 + q_2 + q_3 \leq e(G) + 6. \tag{4}$$

Os casos $k = 1$, $k = n - 1$ e $k = n$ são imediatos e Ashraf *et al.* demonstraram em [1] a Conjectura válida para o caso $k = 2$.

A partir do uso do AutoGraphiX (AGX), ferramenta baseada na metaheurística *Variable Neighborhood Search* para geração e descrição de classes de grafos e ainda determinação de grafos extremais (conforme referência [7]), a função $f(G) = m + 6 - (q_1 + q_2 + q_3)$ foi otimizada e a classe de grafos $\mathcal{G} = \overline{(K_{n-4} \vee \overline{K_2})} \cup 2K_1 = K_2 \vee ((n-4)K_1 \cup K_2)$, $n \geq 4$ foi obtida. A Figura 1 ilustra os grafos da classe $\overline{(K_{n-4} \vee \overline{K_2})} \cup 2K_1$.

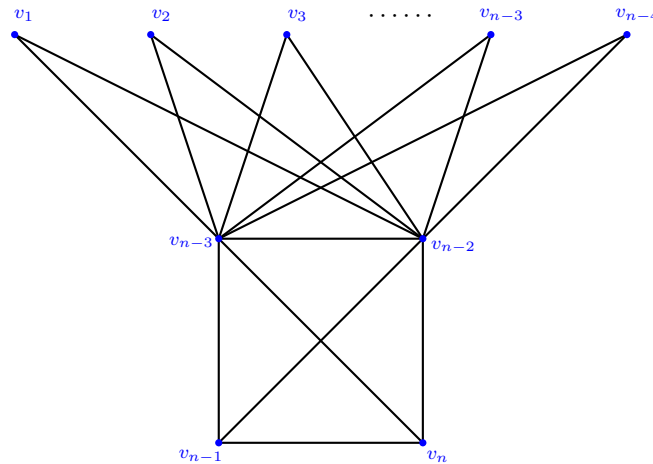


Figura 1: Grafo $\mathcal{G} = \overline{(K_{n-4} \vee \overline{K_2})} \cup 2K_1 = K_2 \vee ((n-4)K_1 \cup K_2)$, $n \geq 4$

Como o AGX é um procedimento heurístico, não se pode afirmar que a classe de grafos obtida seja ótima, isto é, a função $f(G)$ dada acima fornece o melhor resultado possível. Entretanto, este fato motivou o desenvolvimento dos resultados teóricos a seguir.

Teorema 2.5. Seja o grafo $\mathcal{G} = K_2 \vee ((n-4)K_1 \cup K_2)$, $n \geq 4$ e $Q(\mathcal{G})$ a matriz Laplaciana sem sinal de \mathcal{G} . Então:

- (i) 2 é autovalor de multiplicidade $n - 4$ em $Q(\mathcal{G})$.
- (ii) $n - 2$ é autovalor de multiplicidade 1 em $Q(\mathcal{G})$.

Demonstração. Seja o conjunto de vértices $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. Mantendo essa ordenação em V , temos que a matriz Laplaciana sem sinal $Q(\mathcal{G})$ é dada por

$$\begin{matrix}
 & v_1 & v_2 & \cdots & v_{n-4} & v_{n-3} & v_{n-2} & v_{n-1} & v_n \\
 \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{n-4} \\ v_{n-3} \\ v_{n-2} \\ v_{n-1} \\ v_n \end{matrix} & \left(\begin{array}{cccc|cc|cc}
 2 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
 0 & 2 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 0 & 0 & \cdots & 2 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
 \hline
 1 & 1 & \cdots & 1 & n-1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & n-1 & 1 & 1 \\
 \hline
 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 3 & 1 \\
 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 1 & 3
 \end{array} \right),
 \end{matrix}$$

Assim:

- (i) O conjunto de vetores $\{e_1, e_2, \dots, e_{n-5}, e_{n-4}\}$, onde e_i , $i = 1, 2, \dots, n - 4$, é o vetor cuja i -ésima entrada é igual a 1 e as demais são todas iguais a zero, forma um conjunto de $n - 4$ autovetores associados ao autovalor 2.

(ii) O vetor $v = e_{n-3} - e_{n-2} = (\underbrace{0, \dots, 0}_{n-4 \text{ vezes}}, 1, -1, 0, 0)$ é um autovetor de $Q(\mathcal{G})$ associado ao autovalor $n - 2$. □

Teorema 2.6. [3, 10] Seja A uma matriz quadrada de ordem n . Suponhamos que A seja da forma:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1k} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{k1} & A_{k2} & \cdots & A_{kk} \end{pmatrix},$$

onde A_{ij} , $1 \leq i, j \leq k$, é uma matriz de ordem $n_i \times m_j$ tal que suas linhas têm soma constantes iguais a c_{ij} . Seja então

$$RA = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1k} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{k1} & c_{k2} & \cdots & c_{kk} \end{pmatrix}.$$

Então, o polinômio característico de RA divide o polinômio característico de A .

Assim, dos Teoremas 2.5 e 2.6, temos o seguinte Corolário:

Corolário 2.7. O polinômio característico associado a matriz reduzida $RQ(\mathcal{G})$ divide o polinômio característico da matriz $Q(\mathcal{G})$, onde

$$RQ(\mathcal{G}) = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ n - 4 & n & 2 \\ 0 & 2 & 4 \end{pmatrix}.$$

Do Teorema 2.6 e do Corolário 2.7, temos que os autovalores de $RQ(\mathcal{G})$ são também autovalores de $Q(\mathcal{G})$. Já do Teorema 2.5, temos $n - 4 + 1 = n - 3$ autovalores conhecidos. O próximo resultado nos garante que os demais 3 autovalores são determinados pela matriz $RQ(\mathcal{G})$ do Corolário 2.7, ou seja, 2 e $n - 1$ não são autovalores de $RQ(\mathcal{G})$.

Teorema 2.8. Os 3 autovalores restantes de $Q(\mathcal{G})$ são determinados pela matriz $RQ(\mathcal{G})$.

Demonstração. O polinômio característico de $RQ(\mathcal{G})$ é dado por

$$p(x) = -x^3 + (n + 6)x^2 - (4n + 12)x + 24.$$

Como

$$p(2) = -8 + (n - 6)4 - (4n + 12)2 + 24 \Leftrightarrow p(2) = -4n + 16 \neq 0, \quad \forall n > 4 \text{ e}$$

$$p(n - 2) = (n - 2)^3 + (n + 6)(n - 2) - (4n + 12)(n - 2) + 24 \Leftrightarrow$$

$$p(n - 2) = n^3 - 9n^2 + 12n + 28 \neq 0, \quad \forall n \in \mathbb{N},$$

segue que nem 2 nem $n - 2$ são autovalores de $RQ(\mathcal{G})$, gerando o resultado. □

Teorema 2.9. Para $n \geq 8$, os autovalores q_1, q_3 e q_n de $Q(\mathcal{G})$ são as raízes do polinômio característico associado a $RQ(\mathcal{G})$.

Demonstração. Pelo Teorema 2.5, $n-2$ é autovalor com multiplicidade algébrica 1 e 2 é autovalor com multiplicidade $n-4$. Os três autovalores restantes, de acordo com o Teorema 2.8, são determinados pela matriz reduzida $RQ(\mathcal{G})$, de polinômio característico $p(x) = -x^3 + (n+6)x^2 - (4n+12)x + 24$. Assim, temos:

$$p(0) = 24 \text{ e } p(1) = -3n + 17 < 0, \quad \forall n \geq 6$$

$$p(4) = 8 \text{ e } p\left(4 - \frac{3.5}{n}\right) = -20 + \frac{525,22 - 73,5n}{n^3} < 0, \quad \forall n \geq 8$$

$$p(n+2) = -12n + 16 < 0 \text{ e } p\left(n+2 - \frac{4}{n}\right) = 16 - \frac{32}{n} + \frac{64}{n^3} > 0$$

Logo, os outros três autovalores de $Q(\mathcal{G})$ (que equivalem aos autovalores de $RQ(\mathcal{G})$) pertencem aos intervalos: $[0, 1]$, $\left[4 - \frac{3.5}{n}, 4\right]$ e $\left[n+2 - \frac{4}{n}, n+2\right]$.

Agora, temos que $q_1 \geq d_1 + 1$ (Cvetković [9]) e que $q_2 \geq d_2 - 1$ (K.C.Das [6]). Considerando que, no grafo \mathcal{G} , $d_1 = d_2 = n - 1$, temos:

$$q_1 \geq n \tag{5}$$

$$q_2 \geq n - 2 \tag{6}$$

Da relação (5), segue que $q_1 \in \left[n+2 - \frac{4}{n}, n+2\right]$. Por outro lado, $q_2 \leq n - 2$, donde temos, junto com a expressão (6), que $q_2 = n - 2$, (que é em $Q(\mathcal{G})$ o autovalor de multiplicidade 1 conforme Teorema 2.5 (ii)), donde $q_2 \notin [0, 1]$ e $q_2 \notin \left[4 - \frac{3.5}{n}, 4\right]$ (o que já era esperado, pois $n - 2$ não é autovalor de $RQ(\mathcal{G})$ e, portanto, não pode pertencer a nenhum dos intervalos). Assim, $q_j \in \left[4 - \frac{3.5}{n}, 4\right]$ para algum $j = 3, 4, 5, \dots, n$.

Observando que:

- 2 é autovalor de multiplicidade $n - 4$ (Teorema 2.5 (i)),
- $2 \notin \left[4 - \frac{3.5}{n}, 4\right]$ e $2 \notin [0, 1]$,
- $q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$,

podemos concluir que $q_3 \in \left[4 - \frac{3.5}{n}, 4\right]$ e $q_n \in [0, 1]$, seguindo o resultado. □

O Teorema 2.9 acima, em resumo, nos diz que:

- (i) $q_1 \in \left[n+2 - \frac{4}{n}, n+2\right]$
- (ii) $q_2 = n - 2$
- (iii) $q_3 \in \left[4 - \frac{3.5}{n}, 4\right]$
- (iv) $q_4 = q_5 = \dots = q_{n-1} = 2$
- (v) $q_n \in [0, 1]$

e, com essas informações, obtemos o seguinte resultado:

Teorema 2.10. Seja G um grafo isomorfo ao grafo $\mathcal{G} = ((n-4)K_1 \cup K_2) \vee K_2$, com $n \geq 8$. Então,

$$e(G) + 6 - \frac{7.5}{n} < T_3(G) < e(G) + 6.$$

Demonstração. Em primeiro lugar, note que $e(G) = 2(n-4) + 6 = 2n - 2$. Como

$$\begin{aligned} n + 2 - \frac{4}{n} &< q_1 < n + 2 \\ q_2 &= n - 2 \\ 4 - \frac{3.5}{n} &< q_3 < 4 \end{aligned}$$

segue que:

$$n + 2 - \frac{4}{n} + n - 2 + 4 - \frac{3.5}{n} < q_1 + q_2 + q_3 < n + 2 + n - 2 + 4$$

e

$$2n + 4 - \frac{7.5}{n} < T_3(G) < 2n + 4.$$

Porém, $e(G) = 2(n - 4) + 6 = 2n - 2 \Leftrightarrow e(G) + 6 = 2n + 4$, donde

$$e(G) + 6 - \frac{7.5}{n} < T_3(G) < e(G) + 6.$$

□

Do Teorema 2.10, podemos ver claramente que $T_3(G)$ converge para $e(G) + 6$, à medida que n tende ao infinito.

Experimentos computacionais mostraram que entre todos os grafos da família $G_t = K_2 \vee ((n - (t + 2))K_1 \cup K_t)$, $2 \leq t \leq n - 4$, o grafo $\mathcal{G} = K_2 \vee ((n - 4)K_1 \cup K_2)$ é o que melhor se aproxima de $e(G) + 6$. Repare que quando $t = 2$ temos $G_2 = K_2 \vee ((n - 4)K_1 \cup K_2) = \mathcal{G}$.

Para mostrar os resultados de forma algébrica, repetindo a linha de raciocínio desenvolvida no grafo \mathcal{G} para o grafo G_t , podemos definir o polinômio característico de G_t em relação matriz $Q(G_t)$ como

$$p_{G_t}(x) = (x - (n - 2))(x - 2)^{n-t-3}(x - t)^{t-1}.g(x),$$

onde

$$g(x) = x^3 - (n + 2t + 2)x^2 + (2nt + 4t + 4)x - 4(t^2 + t)$$

é o polinômio característico da matriz reduzida do grafo G_t . Após certas manipulações algébricas, obtemos:

$$\begin{aligned} q_1 &< n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n} \quad n \geq 13 \\ q_2 &= n - 2 \\ q_3 &< 2t \end{aligned}$$

de tal forma que

$$q_1 + q_2 + q_3 < 2n - \frac{t^2 - t + 6}{2} - \frac{t - 2}{n}.$$

Porém,

$$2n - \frac{t^2 - t + 6}{2} = e(G_t) + 6,$$

implicando em

$$q_1 + q_2 + q_3 < e(G_t) + 6 - \frac{t - 2}{n} \leq e(G_t) + 6.$$

Baseado nas informações acima, temos o seguinte resultado:

Teorema 2.11. Seja G um grafo isomorfo ao grafo $G_t = K_2 \vee ((n - (t + 2))K_1 \cup K_t)$, $2 \leq t \leq n - 4$ e $n \geq 13$. Então:

- (i) $q_1 + q_2 + q_3 < e(G_t) + 6$;
- (ii) $G_2 = K_2 \vee ((n - 4)K_1 \cup K_2)$ é o grafo que melhor se aproxima de $e(G_t) + 6$.

3 Conclusões

Neste trabalho, uma família de grafos infinita que satisfaz a Conjectura (3), para o caso $k = 3$, foi apresentada e provado que dentre todas as famílias de grafos formadas por *join* de um grafo completo K_s e um grafo com $(n-s)$ vértices isolados, a família de grafos $G = K_2 \vee ((n-4)K_1 \cup K_2)$ é a que tem a soma $q_1 + q_2 + q_3$ que melhor se aproxima de $e(G) + 6$.

4 Agradecimentos

Gostaríamos de agradecer ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP pelo apoio financeiro desse projeto.

Referências

- [1] F. Ashraf, G.R. Omid and B. Tayfeh-Rezaie, On the sum of singless Laplacian eingevalues of a graph, *Linear Algebra and its Applications*, 438, (2013), 4539-4546.
- [2] N. Biggs, “Algebraic Graph Theory: Second Edition”, Cambridge Mathematical Library, 1994.
- [3] A.E. Brouwer and W.H. Haemers, *Spectra os graphs*: Obtido em: <http://homepages.cwi.nl/~aeb/math/ipm.pdf>.
- [4] P.O. Boaventura Netto, “Grafos - Teoria, Modelos, Algoritmos, 4a. edição revista e ampliada”, Editora Edgard Bluncher, 2006.
- [5] B. Bollobás, “Graph Theory: An Introductory Course”, Graduate Texts in Mathematics, Springer-Verlag, 1979.
- [6] K.C. Das, On conjectures involving second largest signless Laplacian eigenvalue of graphs, *Linear Algebra and its Applications*, 432, (2010), 3018-3029.
- [7] G. Caporossi, P. Hansen, Variable neighborhood search for extremal graphs: 1 The Auto-GraphiX system, *Discrete Mathematics*, 212, (2000), 29-44.
- [8] D. Cvetković, “Spectral theory of Graphs Based on the Signless Laplacian - A quick Outline”, Research Report, Mathematical Institute SANU, 2010.
- [9] D. Cvetković, M. Doob, H. Sachs, “Spectra of Graphs - Theory and Application” Academic Press Inc., New York, 1980.
- [10] M.A.A. Freitas, “Grafos Integrais, Laplacianos Integrais e Q -integrais”, Tese de Doutorado, Engenharia de Produção, COPPE, UFRJ, 2009.
- [11] C. Godsil, G. Royle, “Algebraic Graph Theory”, Graduate Texts in Mathematics, 207, Springer, 2000.