
La Matematica nella Società e nella Cultura

RIVISTA DELL'UNIONE MATEMATICA ITALIANA

FRANCESCO BELARDO

Un aspetto rilevante di teoria spettrale dei grafi: perturbazione in un grafo e variazione dell'indice

La Matematica nella Società e nella Cultura. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Serie 1, Vol. 1 (2008), n.2 (Fascicolo Tesi di Dottorato), p. 235–238.

Unione Matematica Italiana

[<http://www.bdim.eu/item?id=RIUMI_2008_1_1_2_235_0>](http://www.bdim.eu/item?id=RIUMI_2008_1_1_2_235_0)

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)
SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>

Un aspetto rilevante di teoria spettrale dei grafi: perturbazione in un grafo e variazione dell'indice

FRANCESCO BELARDO

1. – Introduzione.

La Teoria Spettrale dei Grafi si occupa di dedurre la struttura combinatorica di un grafo dal suo spettro (cioè dall'insieme di autovalori di una matrice ad esso associata). La teoria delle matrici e l'algebra lineare sono, quindi, gli strumenti per analizzare la matrice di adiacenza (laplaciana, oppure altre) di un grafo. Lo studio dello spettro di un grafo, quando si esamina la sua matrice di adiacenza, è affrontato in numerosi lavori scientifici. La Tesi si inserisce in questo filone. Recentemente, sotto la spinta delle applicazioni, una grande diffusione sta avendo anche lo studio dello spettro di altre matrici associate ad un grafo. Possiamo far risalire la nascita della Teoria Spettrale dei Grafi al 1931, quando E. Hückel introduce (in chimica quantistica) un modello in cui le molecole di idrocarburi non saturi sono rappresentate da grafi i cui autovalori esprimono il livello di energia di alcuni elettroni (detti π -elettroni), mentre gli autovettori descrivono la densità di distribuzione degli elettroni negli atomi di carbonio della molecola. La tesi rappresenta una indagine sul massimo autovalore, noto anche come *indice*, di grafi (semplici e connessi) appartenenti a fissate classi.

La conoscenza di grafi che hanno massimo o minimo indice in alcune classi di grafi è di molto interesse in chimica; per esempio molti idrocarburi possono essere rappresentati come grafi planari di massimo grado 3, e la loro stabilità è legata allo spettro ed in particolare all'indice. Una membrana (con contorni fissati) può essere rappresentata da un grafo reticolare (lattice graph) i cui autovalori determinano le oscillazioni armoniche della membrana stessa e l'indice corrisponde alle oscillazioni di minore energia. Nella teoria degli orbitali molecolari di Hückel, gli autovalori del grafo G determinano i livelli di energia (quantistica) per le molecole ed anche in questo caso l'indice di G corrisponde allo stato di minima energia. Diverse proprietà fisiche e chimiche degli idrocarburi saturi (ad esempio la viscosità, la tensione superficiale, il punto di ebollizione, la densità, etc.) dipendono dalla "vastità della ramificazione" (extent of branching) di G , che a sua volta è legata all'indice.

Nella Tesi vengono affrontati i seguenti due problemi:

- 1) Determinare i grafi con indice massimo o minimo di una data classe;
- 2) Ordinare i grafi di una data classe rispetto all'indice.

I due problemi vengono affrontati con tecniche simili. Tali tecniche sono proprie della Teoria delle Perturbazioni (parte molto sviluppata della Teoria Spettrale dei Grafi), che studia come l'indice di un grafo varia in conseguenza di una perturbazione apportata alla sua struttura.

La Tesi si conclude con un capitolo dedicato ad alcuni problemi aperti che nascono dai risultati originali ottenuti durante il Corso di Dottorato ed esposti nei precedenti capitoli.

2. – Risultati principali.

Le notazioni utilizzate sono quelle di [5].

Uno dei problemi classici di Teoria Spettrale dei Grafi, aperto da oltre 40 anni, riguarda la determinazione dei grafi massimali nella classe $\mathcal{H}(n, m)$ i cui elementi sono i grafi connessi di ordine n (numero di vertici) e dimensione m (numero di spigoli). Un primo risultato è stato quello di identificare i grafi candidati ad essere massimali, cioè grafi con indice massimo in $\mathcal{H}(n, m)$.

TEOREMA 1. – *Sia G un grafo di $\mathcal{H}(n, m)$ con indice massimo. Allora G non contiene, come sottografo indotto, alcuno dei seguenti grafi: $2K_2$, P_4 e C_4 .*

Come conseguenza del Teorema 1 i grafi massimali hanno una struttura molto particolare che prende il nome di *Nested Split Graph* (NSG). Nella Tesi viene data una rappresentazione compatta ad albero e vengono determinate le condizioni affinché rilocalizzazioni di spigoli conducano da un NSG ad un altro.

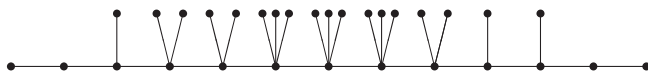
Consideriamo adesso la classe degli alberi di fissati ordine n e diametro d , denotata con $\mathcal{T}_{n,d}$. Dicesi *caterpillar* (*millepiedi*) un albero in cui la rimozione di tutti i vertici di grado uno determina un path. Sia $T(m_0, m_1, \dots, m_d)$ un caterpillar ottenuto da un path di lunghezza d attaccando al suo i -esimo vertice m_i spigoli pendenti. Si noti che $T = T(m_0, m_1, \dots, m_{d-1}, m_d)$ è di diametro d se e solo se $m_0 = m_d = 0$.

TEOREMA 2. – *Sia $\hat{T} \in \mathcal{T}_{n,d}$ un albero con indice massimo e $m_{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor} = n - d - 1$, allora*

$$\hat{T} = T(0, \dots, 0, m_{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor}, 0, \dots, 0).$$

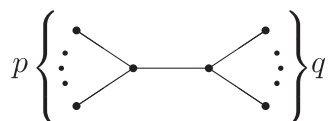
Un problema più complesso nasce se consideriamo i caterpillar con fissata sequenza dei gradi (dei vertici). Si denoti con $\mathcal{T}(m_1, \dots, m_{d-1})$ l'insieme dei caterpillar che differiscono da $T(0, m_1, \dots, m_{d-1}, 0)$ per una permutazione dei parametri m_i .

TEOREMA 3. – *Se $T_M \in \mathcal{T}(m_1, m_2, \dots, m_{d-1})$ è un albero con massimo indice, allora T_M è il caterpillar i cui parametri m_i decrescono alternandosi dal vertice centrale $\lfloor \frac{d}{2} \rfloor$ del path, come in Fig. 1.*

Fig. 1. – Il caterpillar con indice massimo in $\mathcal{T}(3, 3, 3, 2, 2, 2, 1, 1, 1, 0, 0)$.

Analoghi risultati valgono per grafi unciclici di fissati ordine n e circonferenza g .

Successivamente si è affrontato il problema di determinare i grafi di $\mathcal{T}_{n,d}$ aventi minimo indice. Il problema si è rivelato molto arduo ed il caso generale non è stato risolto. Tuttavia si sono risolti i casi $d = 3$ e $d = 4$. Indichiamo con $DS(p, q)$ il grafo costituito da uno spigolo uv avente p (q) vertici pendenti attaccati in u (risp. v).

Fig. 2. – La doppia stella $DS(p, q)$.

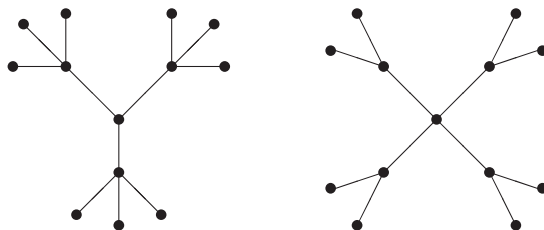
TEOREMA 4. – Se T_m è un albero avente minimo indice in $\mathcal{T}_{n,3}$ allora

$$T_m = DS\left(\left\lfloor \frac{n-2}{2} \right\rfloor, \left\lceil \frac{n-2}{2} \right\rceil\right).$$

Per il caso $d = 4$ è necessario fare una piccola premessa. Per ogni $k > 0$, sia $a_k = k^2 + k + 1$ e si considerino in $\mathbb{N}$ gli intervalli $I_k = [a_k, a_{k+1}]_k$. Allora ogni intero positivo n appartiene ad almeno uno di tali intervalli: $[1, 3]_0$, $[3, 7]_1$, $[7, 13]_2$, $[13, 21]_3$, $[21, 31]_4$, $\dots$, $[a_k, a_{k+1}]_k, \dots$

TEOREMA 5. – Sia $n \in I_k$, $T_m \in \mathcal{T}_{n,4}$ un albero minimale, c il suo vertice centrale e W l'insieme dei vertici adiacenti a c . Allora $\deg(c) = k + 1$ e $|\deg(w_j) - \deg(w_i)| \leq 1$, per ogni $w_i, w_j \in W$.

Si noti che per ogni $n \neq a_k$ si ottiene un solo grafo con indice minimo, mentre per $n = a_k$ si costruiscono due grafi minimali non isomorfi, poiché $\deg(c)$ può assumere i due valori k e $k + 1$.

Fig. 3. – I grafi minimali in $\mathcal{T}_{13,4}$.

I grafi con indice nell'intervallo $(2, \sqrt{2 + \sqrt{5}})$ sono stati completamente determinati da diversi anni. Questo risultato costituisce un interessante obiettivo raggiunto in Teoria Spettrale dei Grafi, anche perché esso ha rilevanti applicazioni in Chimica. I risultati riportati nella Tesi riguardano l'ordinamento secondo l'indice di tali grafi. La quasi totalità di questi grafi può essere rappresentata da path di lunghezza d aventi due vertici pendenti ai vertici i e j . Questi grafi vengono denotati con $M_{i,j}$.



Fig. 4. – Il grafo $M_{i,j}$.

TEOREMA 6. – Sia $h = \begin{cases} r-2, & \text{se } d = 4r \text{ o } d = 4r+1; \\ r-1, & \text{se } d = 4r+2 \text{ o } d = 4r+3. \end{cases}$

Allora i grafi della classe con indice (prossimo a 2) nell'intervallo $(2, \sqrt{2 + \sqrt{5}})$ sono ordinati come segue:

$$\begin{aligned} & \rho(M_{0,d-2}) < \rho(M_{1,d-2}) < \rho(M_{2,d-2}) \\ & < \rho(M_{0,d-3}) < \dots < \rho(M_{h,d-h}) < \rho(M_{0,d-h-1} (= M_{0, \lceil \frac{3d+2}{4} \rceil})). \end{aligned}$$

Nella Tesi è stato studiato anche l'ordinamento di grafi della stessa classe con indice prossimo a $\sqrt{2 + \sqrt{5}}$, e l'ordinamento degli alberi della classe $\mathcal{T}_{n,n-3}$ con indice nell'intervallo $(\sqrt{2 + \sqrt{5}}, \sqrt{2}\sqrt{1 + \sqrt{2}})$.

BIBLIOGRAFIA

- [1] F. BELARDO, E.M. LI MARZI and S.K. SIMIĆ, *Ordering graphs with index in the interval $(2, \sqrt{2 + \sqrt{5}})$* , Discrete Applied Math. (2008), in corso di stampa, doi:10.1016/j.dam.2007.08.027.
- [2] F. BELARDO, E.M. LI MARZI and S.K. SIMIĆ, *Path-like graphs ordered by the index*, Internat. J. Algebra, **1** (2007), 113-128.
- [3] F. BELARDO, E.M. LI MARZI and S.K. SIMIĆ, *Some results on the index of unicyclic graphs*, Linear Algebra Appl., **416**, (2006), 1048-1059.
- [4] F. BELARDO, E.M. LI MARZI and S.K. SIMIĆ, *Some notes on graphs whose index is close to 2*, Linear Algebra Appl., **423** (2007), 81-89.
- [5] D. CVETKOVIĆ, M. DOOB and H. SACHS, *Spectra of Graphs - Theory and Applications*, Cambridge University Press (1995).
- [6] S.K. SIMIĆ, E.M. LI MARZI and F. BELARDO, *Connected graphs of fixed order and size: Structural considerations*, Le Matematiche, **LIX** (2004), 349-365.
- [7] S.K. SIMIĆ, E.M. LI MARZI and F. BELARDO, *On the index of caterpillars*, Discrete Math., **308** (2008), 324-330.

Dipartimento di Matematica, Università degli Studi di Messina,
e-mail: fbelardo@gmail.com

Dottorato di ricerca in Matematica (sede amministrativa: Università di Messina) - Ciclo XVIII
Direttore di ricerca: Prof. Enzo M. Li Marzi, Università degli Studi di Messina