# Matematica, Cultura e Società

RIVISTA DELL'UNIONE MATEMATICA ITALIANA

## GIOVANNI NALDI

Possiamo sentire la forma di un grafo? Un grafo può farci sentire la forma dei dati?

Matematica, Cultura e Società. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Serie 1, Vol. 5 (2020), n.2, p. 111–134.

Unione Matematica Italiana

<http://www.bdim.eu/item?id=RUMI\_2020\_1\_5\_2\_111\_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.



# Possiamo sentire la forma di un grafo? Un grafo può farci sentire la forma dei dati?

# I parte

GIOVANNI NALDI Università di Milano E-mail: giovanni.naldi@unimi.it

Sommario: Sistemi composti da elementi discreti che presentano interazioni binarie appaiono in vari ambiti scientifici e tecnologici. La struttura matematica naturale per studiare e rappresentare tali sistemi è quella di grafo in cui gli elementi sono detti vertici (nodi) mentre le interazioni lati (o archi). Di interesse sono anche i modelli che rappresentano processi dinamici su un grafo e in cui si associa ad ogni lato e/o vertice equazioni o operatori differenziali. In tal caso, per capire il comportamento dell'intero sistema è importante comprendere sia la dinamica dei singoli elementi sia la struttura sottostante. In questo articolo (diviso in due parti) considereremo due problemi particolari: il primo consiste nella ricostruzione della topologia di un grafo (sia nel caso statico sia nel caso dinamico); il secondo riguarda la possibilità di estrarre informazioni su un insieme di dati partendo dalle proprietà di un grafo che li rappresenti.

Abstract: Systems composed of discrete elements that present binary interactions appear in various scientific and technological areas. The natural mathematical structure for studying, and representing, these systems is that of a graph in which the elements are called vertices (nodes) while the interactions/edges/arcs. We are also interested in models that represent dynamic processes on a graph and in which differential equations or operators are associated with each edge and/or vertex. To understand the behavior of the whole system, it is important to understand both the dynamics of the individual elements and the underlying structure. In this article (divided into two parts) we will consider two particular problems: the first one consists in the reconstruction of the topology of a graph (both in the static and in the dynamic case); the second concerns the possibility of extracting information on a data set starting from the properties of a graph that represents them.

# 1. – Solutio problematis ad geometriam situs pertinentis

Quante volte abbiamo guardato la mappa stilizzata di una rete metropolitana o quella ferroviaria o autostradale? Possiamo riconoscervi alcuni punti principali (stazioni, caselli, città) e collegamenti

Accettato: il 22 luglio 2020.

suggeriti da tratti rettilinei o meno. Allo stesso modo potremmo aver osservato, magari in un museo o in una vetrina di una libreria scientifica (a scopo di allestimento) un modello di molecola con sfere e piccole aste. Gli atomi sono rappresentati da sfere di colore diverso in funzione del tipo di elemento chimico, mentre delle brevi aste collegano coppie di sfere e rappresentano i legami chimici. Ancora, si potrebbe aver incontrato una rete che rappresenta le interazioni tra geni, piuttosto che tra

specie chimiche oppure una rappresentazione di una parte del mondo web. Altre volte potremmo aver avuto il desiderio di ricostruire il nostro albero genealogico (un tempo in qualche fiera c'era chi si offriva di farlo e irrimediabilmente si finiva per essere discendenti di nobili, conti o duchi): si identificano dei punti che etichettiamo con nomi e schematizziamo relazioni parentali con archi o segmenti (ma come si chiamava la bisnonna?). In realtà potremmo anche ricostruire la rete delle nostre

amicizie o conoscenze partendo dalla cerchia degli amici più stretti (e facendo loro qualche domanda inopportuna sulla qualità dell'amicizia con terze persone). In tutti gli esempi fatti una rappresentazione grafica semplice ed intuitiva è composta da un insieme di punti (nodi/vertici) e da tratti di curva, di solito segmenti, per rappresentare collegamenti/relazioni/connessioni/similarità: tale rappresentazione grafica corrisponde ad una struttura algebrica detta grafo, si veda Figura 1.

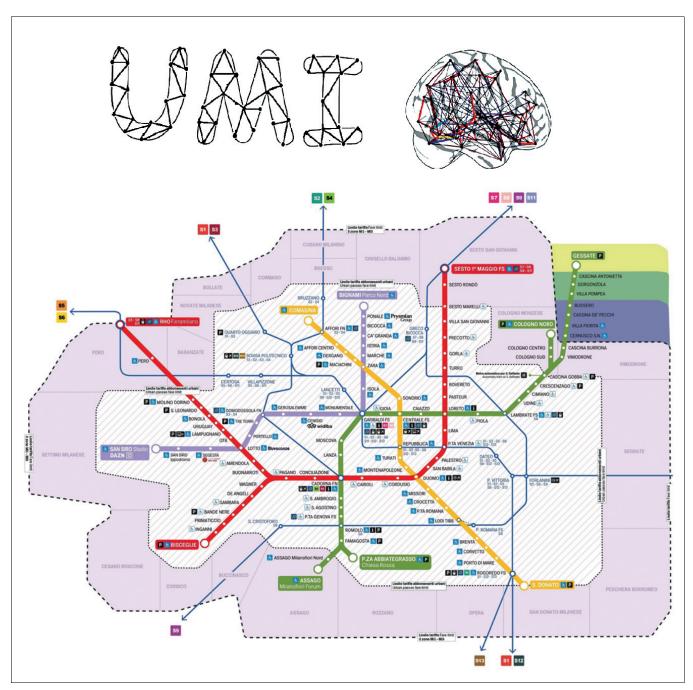


FIGURA 1 – Alcuni esempi di grafi: triangolazione di figure, rete macroscopica del cervello, mappa metropolitana di Milano.

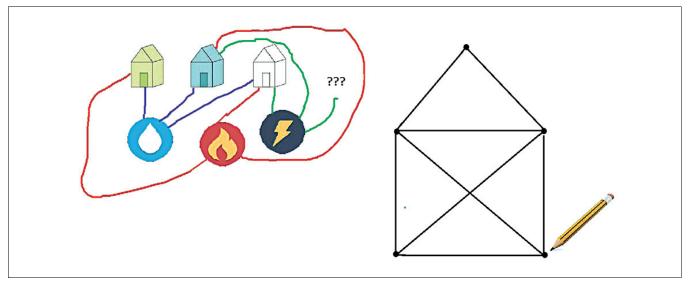


FIGURA 2 – Due semplici giochi con i grafi. Il problema dei tre servizi: è possibile collegare tre servizi (acqua, luce e gas) a tre case senza che i collegamenti si incrocino? Il secondo problema consiste nel disegnare una forma passando per ogni lato una volta sola e tornando al punto di partenza.

Osserviamo inoltre che ci ripetono continuamente che siamo sempre connessi, magari anche ora qualche lettore starà leggendo questo articolo con qualche strumento collegato in rete, e anche i nostri oggetti si mettono in rete per nostra comodità: è l'internet delle cose bellezza (speriamo seguano le leggi di Asimov della robotica!). Recenti ed attive aree di ricerca coinvolgono poi reti complesse in vari ambiti: dalle reti sociali al mondo del web, dalla biologia alle neuroscienze, dalla medicina alla logistica. Lo studio e le applicazioni di tali reti sono in rapida crescita con interessanti problemi anche dal punto di vista matematico. Solo a titolo di esempio potremmo citare gli interessanti legami con l'algebra lineare (1) [2, 13]. Nella seconda parte dell'articolo torneremo su alcuni di questi aspetti volendo introdurre alcuni metodi per analizzare e modellizzare dati.

Probabilmente un primo incontro con i grafi si è avuto in forma di semplici enigmi. Per quelli della mia generazione, come si suole dire, un tipico esempio è il problema delle tre utilità (o tre servizi).

Abbiamo tre punti in cui si produce e distribuisce rispettivamente acqua, corrente elettrica, gas e tre case a cui far arrivare questi servizi. Il problema consiste nell'evitare che due collegamenti si sovrappongano intersecandosi, si veda Figura 2. Solitamente dopo numerosi e infruttuosi tentativi, vista la sfida, era tipico convincersi che qualche soluzione doveva pur esserci, la persona che aveva proposto il gioco ci guardava beffarda, prendeva la penna e abilmente bucava il foglio dicendo qualcosa che non ricordo bene. La reazione comunque era di rimettersi al lavoro, probabilmente il nostro amico non ci aveva pensato bene... il problema rientra nella verifica se un grafo è planare: dato un grafo, decidere se esso può essere disegnato nel piano in modo tale che gli archi non si incrocino. Un secondo gioco consisteva nel disegnare una figura in modo tale da percorrere ogni lato una volta sola e tornando al punto di partenza. Dopo un corso in teoria dei grafi il problema si traduce nella ricerca di un circuito euleriano. Anche qui, dopo vari e inutili tentativi ci si poteva anche autoconvincere che una soluzione in fondo "accettabile" poteva contemplare la rinuncia a tornare al punto di partenza.

Come abbiamo visto dai pochi esempi sopra, ci muoviamo su grafi e grafi possono rappresentare molte cose. Sarebbe millantatorio pensare di descrivere, come dire, lo stato dell'arte riguardante

<sup>(</sup>¹) Si veda ad esempio il sito https://snap.stanford.edu/ curato da Jure Leskovec e relativo allo Stanford Network Analysis Project.

tali oggetti matematici. In questo articolo, e nella sua prosecuzione, cercheremo di concentrarci solo su un aspetto particolare andando avanti e indietro tra teoria e applicazioni (con qualche citazione di algoritmi): lo studio dello spettro di un grafo (2). In alcune parti saremo più formali ma in altre molto meno, soprattutto quando considereremo alcuni aspetti analitici. In questo senso il lettore è avvertito ma può sempre spulciare nella bibliografia proposta (speriamo di non scontentare tutti, sia chi è nuovo al soggetto e sia chi no). In questa prima parte il problema sarà: se ascolto il suono di un grafo posso ricostruirlo (in particolare posso ricostruire quella trama di rapporti rappresentata dai suoi vertici ed archi)? Abbiamo un pò di strada da fare prima di porre in modo più sensato tale problema.

Un grafo è una terna ordinata  $G = (V, E, \psi)$ , dove  $V \text{ ed } E \text{ sono insiemi con } V \neq \emptyset, \psi : E \rightarrow V \times V \text{ una}$ funzione che associa ad ogni elemento  $e \in E$  una coppia  $(u,v) \in V \times V$ . Chiamiamo V l'insieme dei vertici (nodi) ed E l'insieme degli archi (lati) di G. Per ogni arco  $e \in E$  gli elementi di  $\psi(e)$  sono detti estremi di e. Due vertici  $u, v \in V$  sono detti adiacenti (o connessi da un arco) se  $(u, v) = \psi(e)$  per qualche arco  $e \in E$ . Scriveremo  $u \sim v$  se i vertici u e v sono adiacenti al medesimo arco. I vertici u, v sono invece detti incidenti con un arco e se appartengono alla coppia  $\psi(e)$ . Se ogni arco  $e \in E$  di un grafo ha un "senso di percorrenza", ovvero la coppia di vertici che lo compone è una coppia ordinata, il grafo si dice orientato o diretto o digrafo. Per un arco e incidente nei vertici u e v scriveremo e = (u, v), se il grafo è orientato l'arco "esce" dal vertice u ed "entra" nel vertice v (a volte per i grafi orientati si usa la notazione e = [u, v]). Il grafo  $G = (V, E, \psi)$  si dice finito se entrambi gli insiemi V e E lo sono. Il grado (o valenza) di  $v \in V$  è la cardinalità dell'insieme degli archi in E di cui v è un estremo, e si denota con d(v). Un vertice che non sia estremo di alcun arco (cioè tale che d(v) = 0) si dice vertice isolato di G. Se l'applicazione  $\psi$  è iniettiva chiameremo il grafo G Volendo andare a spasso su grafi possiamo iniziare a definire una passeggiata in un grafo  $G=(V,E,\psi)$ : ovvero una sequenza di vertici e lati alternativamente

$$v_0$$
  $e_1$   $v_1$   $e_2$  ...  $v_{n-1}$   $e_n$   $v_n$ 

sottoposta alla sola condizione che ogni lato  $e_i$  abbia come estremi i vertici  $v_{i-1}$  e  $v_i$  (si possono quindi percorrere liberamente più di una volta gli stessi lati e tornare agli stessi vertici come spesso accade in una passeggiata reale). Dati  $v, w \in V$  due vertici del grafo G (non necessariamente distinti), volendo evitare di ripassare per gli stessi archi, definiamo invece un cammino in G da v a w una sequenza  $v = v_0 \ e_1 \ v_1 \ e_2 \dots v_{n-1} \ e_n \ v_n = w, \cos v_i \in V, \ i = 0, ..., n$ vertici (non necessariamente distinti), ed archi  $e_i \in E$ , i = 1, ..., n tutti distinti e tali che  $\psi(e_i) = (v_{i-1}, v_i), \text{ per ogni } i = 1, 2, ..., n.$ L'intero  $n \ge 0$  si dice la lunghezza del cammino (nel caso in cui n=0 abbiamo il cammino di lunghezza 0 formato da un solo vertice e nessun arco). Se  $v_0 = v_n$ , il cammino è detto circuito. Un cammino si dice semplice se tutti i vertici che lo compongono, tranne eventualmente il primo e l'ultimo, sono diversi, ovvero se per ogni  $n > i, j > 1, v_i = v_i \implies i = j$  ed il cammino non ripassa per uno stesso vertice. Un circuito semplice con almeno due archi è detto anche ciclo. Nel caso in cui G sia un grafo semplice nella descrizione di cammino non è necessario includere esplicitamente gli archi ed è sufficien-

grafo semplice (3). In tal caso è conveniente identificare E con la sua immagine in  $V \times V$  tramite  $\psi$ , e quindi vedere l'insieme degli archi di G come un sottoinsieme di  $V \times V$ : un grafo semplice è una coppia ordinata (V,E), dove  $V \neq \emptyset$  ed E è un sottoinsieme di  $V \times V$ . Chiaramente, la differenza tra grafo e grafo semplice è che, in un grafo semplice, per ogni coppia di vertici c'è al più un arco che ha tali vertici come estremi, mentre in un generico grafo è consentito che ve ne siano più di uno (ma non sono ammessi archi che abbiano un solo estremo).

<sup>(2)</sup> Per gli impazienti possono fare un giro sulla pagina di Fan Chung Graham e Rob Ellis

http://www.math.ucsd.edu/~fan/hear/index.html per sentire qualche "accordo di grafo".

<sup>(3)</sup> Si sottolinea che parte della terminologia in teoria dei grafi è soggetta a cambiamenti da testo a testo, per esempio in alcuni testi sono detti multigrafi quelli che noi qui abbiamo definito come grafi, mentre i grafi semplici sono detti semplicemente grafi.

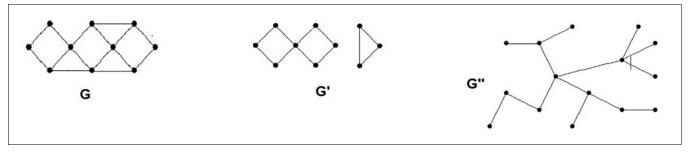


FIGURA 3 – Esempi relativi alla connessione: G è un grafo connesso, G' non è connesso ed ha due componenti connesse, G'' è un albero.

te definire un cammino in un grafo semplice G come una sequenza di vertici di G  $v_0$ ,  $v_1$ , ...,  $v_n$  tale che, per ogni i,  $k \in \{1, 2, ..., n\}$ ,  $(v_{i-1}, v_i) \in E$ , e  $(v_{i-1}, v_i) = (v_{k-1}, v_k)$  se i = k.

Una nozione naturale legata al concetto di cammino è quella di connessione: un grafo G si dice connesso se per ogni coppia di suoi vertici v, w esiste in G un cammino tra v e w. Se poi consideriamo in relazione due vertici se esiste un cammino che li congiunge si ottiene una relazione di equivalenza sull'insieme V del grafo G. Definendo sottografo  $G' = (V', E', \psi')$  del grafo  $G = (V, e, \psi)$  se  $\emptyset \neq V' \subseteq V, E' \subseteq E, \psi' = \psi \mid_{V'}$ , le componenti connesse di G sono i sottografi indotti dalle singole classi di equivalenza di vertici. Si osserva facilmente che le componenti connesse di un grafo sono i suoi sottografi connessi massimali. Un grafo connesso privo di circuiti non banali (ovvero connesso e privo di cicli) si dice albero, si veda Figura 3.

Esempio 1.1 – (L. Eulero, 1736). Parlando di questioni riguardanti i grafi, in un ambito elementare e introduttivo come questo, non si può evitare un riferimento a quello che ne è considerato l'atto costitutivo: la soluzione data dal grande matematico svizzero Leonhard Eulero al problema detto dei ponti di Königsberg (4) [14]. Citando Eulero [4] (si veda Figura 4): "... Il problema, che mi è stato riferito essere molto noto, è il seguente: a Königsberg, in Prussia, c'è un'isola A, chiamata Kneiphof, il fiume che la circonda è diviso in due rami, come mostrato nella Figura, e questi rami sono attraversati da sette ponti a, b, c, d, e, f e g.

Riguardo a questi ponti, è stato chiesto se qualcuno è in grado di trovare un percorso in modo tale da attraversare ogni ponte una e una sola volta. Mi è stato detto che qualcuno afferma che ciò sia impossibile, mentre altri rimangono nel dubbio; ma nessuno affermerebbe che ciò possa essere fatto. Partendo da ciò ho formulato il seguente problema generale: qualunque sia la disposizione e la divisione del fiume in vari rami, e qualunque numero di ponti ci possa essere, è possibile determinare se sia possibile o meno attraversare ogni ponte esattamente una sola volta?".

Lo stesso Eulero fa presente che non fu lui ad occuparsi per la prima volta di questo nuovo tipo di problemi geometrici, ancora Eulero scrive: "Oltre quella parte di geometria che si occupa di grandezze e fu considerata in ogni tempo con la massima attenzione, c'è un'altra parte, quasi sconosciuta, che Leibniz considerò per primo, e chiamò geometria di posizione". Eulero scarta da subito l'approccio forza bruta in cui si potrebbero elencare tutte le passeggiate possibili che percorrono sette ponti e toccano le varie zone della città: così facendo si potrebbe sicuramente trovare l'eventuale cammino che soddisfa il problema oppure constatare che la passeggiata cercata non esiste. Egli però esclude subito tale metodo per due motivi. Primo, perchè i percorsi possibili sono in numero elevato, e la loro elencazione creerebbe qualche difficoltà (che non ha nulla a che vedere con la natura del problema). In secondo luogo, perchè si risolverebbe il problema specifico, mentre resterebbe aperto il caso generale per altre disposizioni di isole, ponti e luoghi. Come riportato sopra, Eulero inventa un modo idoneo per rappresentare i percorsi: costruisce un grafo. Inizia con l'indicare con A, B, C e D le quattro regioni da collegare e che rappresentano i vertici, i sette ponti a, b, c, d, e, f, g sono gli archi. A questo punto il

<sup>(4)</sup> Le riproduzioni delle opere e del carteggio di Eulero sono (liberamente) disponibili in rete, per esempio:

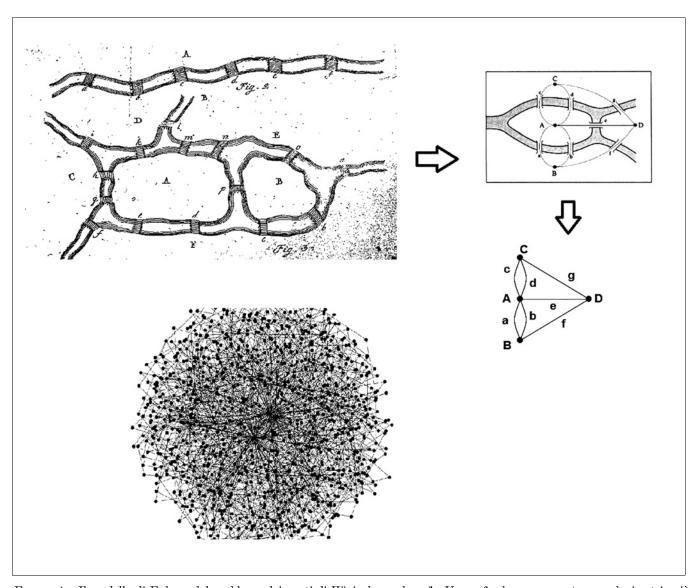
http://eulerarchive.maa.org/

problema di partenza diventa: esiste un circuito (cammino chiuso) nel grafo? Se la risposta è affermativa diremo che il grafo è euleriano. Eulero definisce quindi il grado (valenza) di un vertice per arrivare al seguente Teorema (il primo Teorema in teoria dei grafi) espresso in termini "moderni". Ricordiamo che il grado (o valenza) d(u) di un vertice u è il numero di archi incidenti con esso (Se d(u)=0 il vertice u si dice isolato).

Teorema 1.2. – Un grafo connesso è euleriano se e solo se ogni suo vertice ha grado pari.

Si osservi che abbiamo aggiunto l'ipotesi di connessione perchè se un grafo euleriano non è connesso,

una sola delle sue componenti connesse avrà degli archi, mentre le altre componenti connesse saranno vertici isolati. Conviene quindi limitarci ai grafi connessi. Una semplice dimostrazione, per induzione, si può reperire nel breve testo di Ore [28]. Quello dei sette ponti è un esempio semplice ed efficace di cosa vuol dire introdurre, analizzare ed utilizzare un modello matematico. Nel caso in cui si richieda un cammino non chiuso (cioè se non siamo costretti a tornare al punto di partenza) possiamo avere due vertici con grado dispari: devono però essere il vertice di partenza ed il vertice di arrivo del cammino stesso. A questo punto potremmo lanciare la sfida: Eulero provaci con il grafo intricato di Figura 4 (che più che



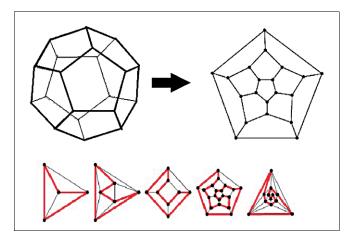
 $\label{eq:figura} Figura\ 4-Il\ modello\ di\ Eulero:\ dal\ problema\ dei\ ponti\ di\ K\"{o}nigsberg\ al\ grafo.\ Un\ grafo\ che\ rappresenta\ una\ planimetria\ più\ complessa\ rispetto\ alla\ citt\`{a}\ di\ K\"{o}nisberg.$ 

una ordinata città prussiana sembra una caotica megalopoli)! Ci piace immaginare che Eulero non batterebbe ciglio, grazie al suo Teorema la risposta sarebbe semplice, basta contare (magari con un pò di pazienza e oggi con qualche opportuna struttura dati e un calcolatore) la valenza dei vari nodi: ottimo esempio di matematica applicata e di interesse di un Teorema.

Dal punto di vista applicativo, nel caso esista un circuito euleriano, sarebbe interessante trovare tale cammino, cioè costruire un algoritmo che fornisca la descrizione del circuito (o dei circuiti nel caso non sia unico). Questo è un aspetto importante che non tratteremo qui ma che va di pari passo con gli sviluppi teorici [8].

Una possibile generalizzazione del problema dei ponti di Königsberg è il problema del "postino cinese" (così chiamato dal matematico cinese Meigu Guan che lo ha introdotto per primo (5). In questo problema conta anche la lunghezza dei lati e si cerca una passeggiata che passi su tutti i lati di un grafo almeno una volta e che sia di lunghezza minima. Non è un problema solo astratto, si pensi, ad esempio alla pulizia delle strade, oppure alla consegna della posta: tutte le strade devono essere visitate, il servizio deve ritornare al punto di partenza e, soprattutto, si devono minimizzare i costi del servizio stesso. Nella versione semplificata, tutti i lati hanno lunghezza unitaria ed il problema si riduce a trovare il numero minimo di lati da duplicare per rendere tutti i nodi di grado pari (per esempio partendo dal grafo originale di Königsberg bastano due archi aggiuntivi).

ESEMPIO 1.3 – (W. R. Hamilton, 1859). Nel 1859, Sir. Hamilton propose un gioco che, per diversi aspetti, era legato alla sua teoria dei quaternioni (pare che lo cedette per 25 sterline a un commerciante). Il gioco era il seguente: Hamilton aveva assegnato ai vertici di un dodecaedro il nome di una città e richiedeva di trovare un percorso che facesse il giro del mondo visitando tutte le città una sola volta, per poi



 ${\tt Figura}$ 5 – Il problema del circuito Hamiltoniano per i solidi platonici.

tornare al vertice di partenza. Lo scheletro (o meglio l'1-scheletro) del dodecaedro si può pensare in modo naturale come un grafo semplice G=(V,L) dove V è l'insieme dei vertici del dodecaedro, mentre i lati di L corrispondono ai suoi spigoli: quindi due vertici sono adiacenti se e solo se si trovano agli estremi dello stesso spigolo. Hamilton osservò che tale grafo si può ridurre ad una versione bidimensionale, sostituendo lo scheletro del dodecaedro con un grafo semplice piano ottenuto proiettando gli spigoli del poliedro da un punto opportuno dello spazio, si veda Figura 5.

Se non etichettiamo i vertici, per un dodecaedro sono possibili solo due circuiti di Hamilton, immagini speculari l'uno dell'altro. Se però i vertici vengono etichettati e consideriamo ogni percorso differente se passa per i 20 vertici in ordine diverso, allora i circuiti diversi diventano 30 (non contando le sequenze uguali percorse in senso inverso).

Il problema di Hamilton appare quasi come il duale di quello di Eulero ma, in realtà, risulta molto più difficile. Mentre è facile implementare un programma ragionevolmente "efficiente" che, utilizzando il Teorema di Eulero, stabilisce se un grafo è euleriano (connesso con circuito euleriano), in generale decidere se un dato grafo ammetta un ciclo (o anche un cammino) hamiltoniano è un problema molto più difficile. Di fatto, non si conosce (né si sa se esista) alcuna caratterizzazione dei grafi hamiltoniani analoga a quella vista per i grafi euleriani. Va comunque osservato che sono stati ottenuti vari risultati i quali assicurano che, sotto condizioni di

<sup>(&</sup>lt;sup>5</sup>) Si veda, per esempio, M. Grötschel, Y. Yuan *Euler*, *Mei-Ko Kwan, Königsberg, and a Chinese postman, Optimization stories*, 21° International Symposium on Mathematical Programming, Berlin, August 19–24, 2012, Documenta Mathematica, Extra 43-50.

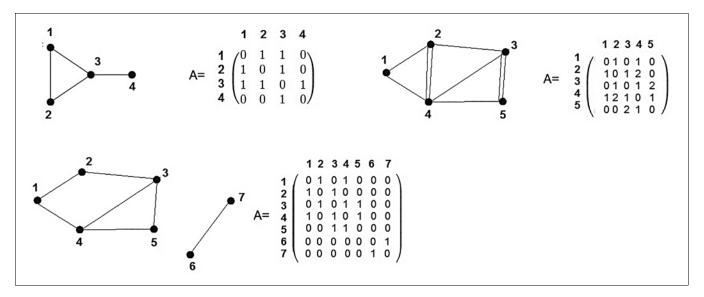


Figura 6 – Alcuni esempi di grafi con le corrispondenti matrici di adiacenza.

solito abbastanza specifiche, certi grafi sono (o non sono) hamiltoniani [12].

Tutte le nozioni di passeggiata, cammino, circuito sono naturalmente definite anche per grafi orientati con l'unica condizione che occorre rispettare il verso di percorrenza degli archi (niente sensi unici al contrario).

Consideriamo ora alcuni aspetti di teoria dei grafi che si rifanno ad argomenti di natura più "algebrica". Questo approccio risulta utile anche per la rappresentazione di grafi al fine di implementare algoritmi che li riguardano.

Una prima basilare interpretazione dei grafi in termini di algebra lineare è quella legata alla nozione di matrice di adiacenza. Sia G un grafo finito e, per ogni coppia di vertici u, v denotiamo con  $A_{uv}$  il numero di archi i cui estremi sono u e v: quindi  $A_{uv}$  è uguale alla cardinalità dell'insieme  $\psi^{-1}(u,v)$ . Fissando inoltre un ordinamento dell'insieme dei vertici V, la matrice di adiacenza  $A_G$  è la matrice i cui elementi  $a_{ij}$  sono, al variare dei vertici  $u,v\in V$ , i numeri interi  $A_{uv}$  quando i e j sono la posizione nell'ordinamento dei vertici  $u \in v$ . Se il grafo G ha N vertici, indipendentemente dalla scelta dell'ordine su V, la matrice  $A_G$  è una matrice quadrata  $N \times N$ , simmetrica. Nel caso poi non vi siano lacci, ossia archi i cui estremi coincidono, gli elementi  $a_{ii}$  sono tutti nulli e la matrice ha traccia zero. Inoltre per ogni  $u \in V$ 

$$\sum_{v \in V} A_{uv} = d(u).$$

In Figura 6 si mostrano alcuni esempi di grafi e delle loro matrici di adiacenza.

Se G è un grafo semplice abbiamo

$$A_{uv} = \left\{ egin{array}{ll} 1 & ext{se } ( ext{u}, ext{v}) \in ext{E}, \ 0 & ext{altrimenti.} \end{array} 
ight.$$

Un'altra matrice che si può associare al grafo finito G è la matrice di incidenza  $B_G = (b_{ij})$  con i = 1, 2, ..., N, j = 1, 2, ..., M dove N è il numero di vertici (supposti ordinati) ed M è il numero di archi (supposti ordinati). La matrice di incidenza si definisce come:

$$b_{ij} = egin{cases} 1 & ext{se } v_i ext{ ed il lato } e_j ext{ sono incidenti,} \ 0 & ext{altrimenti.} \end{cases}$$

Nel caso di grafo diretto, indicando con  $e_j^+$  il vertice da cui esce  $e_j$  e con  $e_j^-$  il vertice in cui arriva il lato  $e_j$ , si ha

$$b_{ij} = egin{cases} 1 & ext{se } v_i = e_j^+, \ -1 & ext{se } v_i = e_j^-, \ 0 & ext{altrimenti.} \end{cases}$$

Dalle definizioni date risulta ovvio che la conoscenza della matrice di adiacenza o della matrice di incidenza di un grafo è equivalente alla conoscenza del grafo stesso.

## 2. - Can one hear the shape of a drum?

La spettroscopia è lo studio della struttura interna di atomi, molecole e solidi tramite l'analisi degli spettri, cioè la distribuzione d'intensità della radiazione (luce visibile, o ad altre regioni di lunghezza d'onda) al variare della frequenza (o energia). Spesso questa si è dimostrata un'ottima tecnica analitica, perchè gli spettri sono caratteristici della natura chimica dei composti presenti nel campione in esame. Di fatto, un elettrone legato a un nucleo si comporta come un oscillatore, con (almeno) una frequenza caratteristica di risonanza. Segue che lo spettro a righe caratterizza diversi gas atomici e molecole semplici: gli elettroni oscillano a frequenze specifiche e non esistono elementi con spettro identico. Sir Arthur Schuster, che ha coniato lo stesso termine "spettroscopia", pensava che lo studio dello spettro potesse fornire non solo le specie chimiche ma anche informazioni strutturali su atomi e molecole. Nel 1882 Schuster scriveva: "Sappiamo molto di più sulle forze che producono le vibrazioni del suono rispetto a ciò che produce le vibrazioni della luce. Scoprire le diverse melodie emesse da un sistema vibrante è un problema che potrebbe non essere risolvibile in alcuni casi speciali, ma frustrerebbe il matematico più abile risolvere il problema inverso e scoprire la forma di una campana per mezzo dei suoni che è in grado di emettere. E questo è il problema che in definitiva la spettroscopia spera di risolvere nel caso della luce."

Capire la forma, o alcune caratteristiche, di un oggetto partendo da come lo stesso oggetto "vibra" è diventato un problema classico che ha sempre suscitato interesse. Il problema inverso di cui parla Schuster è stato inizialmente considerato dal punto di vista matematico da H. Weyl [34], A. Pleijel [29] e da S. Bochner [20]. Nel 1966, M. Kac ha pubblicato un lavoro [23] diventato famoso (virale diremmo oggi) ed intitolato "Can one hear the shape of a drum?". Vediamo come si pone il problema in termini matematici.

Dato un dominio  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ , sia  $(u, \lambda)$  una soluzione non nulla del problema,

$$\begin{cases} -\Delta u = \lambda u & \text{in } \Omega \\ U = 0 & \text{su } \partial \Omega \end{cases}$$

dove  $\Delta u = \sum_j (\partial^2 u)/(\partial x_j^2)$ ,  $\partial/\partial x_j$  denota la derivata parziale rispetto alla variabile  $x_j$ ,  $\lambda$  è un parametro reale e con  $\partial\Omega$  abbiamo indicato il bordo di  $\Omega$  (la condizione al bordo è quindi la condizione di Dirichlet omogenea). Nel caso vi sia soluzione la funzione u è detta autofunzione mentre il valore  $\lambda$  autovalore (dell'operatore laplaciano). Nel caso in cui  $\Omega$  sia compatto esiste una sequenza di valori

$$0 \le \lambda_1 < \lambda_2 \le \lambda_3 \le \cdots \le \lambda_k \le \cdots, \quad \lim_{k \to \infty} \ \lambda_k = \infty,$$

ed una sequenza di corrispondenti autofunzioni  $u_1, u_2, \ldots, u_k, \ldots$  tali che  $\Delta u_k + \lambda_k u_k = 0$  in  $\Omega$ per ogni k = 1, 2, ... e che sono ortogonali rispetto al prodotto scalare in  $L^2(\Omega)$ . Due domini  $\Omega_1$  e  $\Omega_2$  che hanno lo stesso insieme di autovalori, contando la loro molteplicità, si dicono isospettrali (si chiama spettro l'insieme di tutti gli autovalori). Il problema di Kac è quindi il seguente: due domini isospettrali sono necessariamente isometrici? Dal punto di vista fisico, per un tamburo usuale, questo corrisponde a chiedersi se dalla conoscenza delle frequenze tipiche di un tamburo, cosa che possiamo fare ascoltando il suono che produce a diverse sollecitazioni, possiamo ricostruire la sua forma geometrica. Va sottolineato che si sta immaginando che la superficie del tamburo sia formata da una membrana elastica, vincolata al bordo (altro sarebbe considerare superfici composte da piastre metalliche o altro ancora).

Prima del lavoro di Kac, J. Milnor aveva considerato un problema analogo per una varietà compatta M in  $\mathbb{R}^n$ ,  $n \geq 2$  e il corrispondente operatore di Laplace-Beltrami. Milnor aveva poi analizzato coppie  $\lambda_k$ ,  $u_k$  soluzioni dell'equazione  $\Delta u_k + \lambda_k u_k = 0$  in M ma senza condizioni al bordo. In questo contesto lo stesso Milnor ha mostrato un controesempio [27] in  $\mathbb{R}^{16}$  di due varietà isospettrali ma non isometriche. Quindi, per quanto riguarda le varietà compatte, la questione di Kac ha risposta negativa. Certo che mettersi all'ascolto di un tale oggetto in sedici dimensioni, pur essendo affascinante, deve essere arduo per tutti (6). Più tardi M. Kneser ha fornito un controe-

<sup>(6)</sup> Allegato alla rivista The Mathematical Intelligencer, Vol. 11, n. 3 del 1989, c'era un disco, vecchio stile in vinile, in cui Dennis DeTurck aveva registrato la musica di alcune varietà

sempio in dimensione 12, mentre nel 1980 Marie-France Vignéras [33] ha risolto, in senso negativo, il problema per le varietà compatte per ogni dimensione  $n \geq 2$  fornendo, per ogni n, due varietà isospettrali ma non isometriche.

Torniamo alla domanda originale posta da Kac per domini in  $\mathbb{R}^2$  con metrica euclidea. Affrontiamo la questione nel caso unidimensionale: la corda vibrante. Una corda può essere idealmente rappresentata con un intervallo di lunghezza L, la cui configurazione u(x,t) è una funzione di  $x \in [0,L]$ (spazio) e di un parametro reale non negativo t(tempo). Il valore u(x,t) è quindi interpretato come lo spostamento verticale di un punto x al tempo t. Se gli estremi della corda sono fissati, abbiamo le seguenti condizioni al bordo u(0,t) = u(L,t) = 0per tutti i valori  $t \geq 0$ . L'evoluzione della configurazione di una corda vibrante, pensata la corda di sezione costante e normalizzando alcuni parametri fisici in gioco, è ben descritta dall'equazione delle onde (questa equazione si può dedurre facilmente sotto ipotesi ragionevoli, euristicamente il termine a sinistra rappresenta l'accelerazione nel punto x, mentre il termine di destra è legato alla curvatura del grafico di u e quindi alla forza avvertita in un piccolo pezzo di corda centrato in x),

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

con una opportuna configurazione iniziale  $u_0(x) = u(x,0)$  e una velocità iniziale. Un metodo per risolvere questa equazione consiste nella ricerca di soluzioni stazionarie, o modi normali, nella forma

$$u(x,t) = g(x)h(t)$$

in cui abbiamo una forma d'onda fissata g(x) la cui ampiezza viene variata nel tempo da h(t). La condizione agli estremi dell'intervallo può essere espressa come g(0)=g(L)=0. Sostituendo nell'equazione delle onde si ottiene

$$g(x)h''(t) = g''(x)h(t)$$

o equivalentemente, supponendo g(x) e h(t) diversi da zero,

$$\frac{h''(t)}{h(t)} = \frac{g''(x)}{g(x)}.$$

In quest'ultima equazione, il termine a sinistra

dipende solo dalla variabile t mentre il termine di destra solo da x, ne segue che entrambi i rapporti devono essere costanti, chiamiamo  $\mu$  tale comune valore costante. Se  $\mu = 0$  seguirebbe che, essendo  $g(x) \neq 0$ , g''(x) = 0, da cui si deduce che (ricordiamo che x varia in un intervallo) g è lineare g(x) = ax + b. Imponendo le condizioni al bordo si deduce che g è identicamente nulla e quindi la soluzione trovata sarebbe la soluzione nulla per ogni configurazione iniziale. Se  $\mu > 0$  seguirebbe che  $g(x) = \alpha e^{\sqrt{\mu}x} + \beta e^{-\sqrt{\mu}x}$  e le condizioni al bordo danno  $g(0) = \alpha + \beta = 0$ ,  $g(L) = 2\alpha \sinh(\sqrt{\mu}L) = 0$  da cui  $\alpha = \beta = 0$  e ancora la sola soluzione nulla. Rimane  $\mu < 0$  che indicheremo come  $\mu = -\lambda$  con  $\lambda > 0$ . Dobbiamo quindi risolvere due equazioni  $g''(x) = -\lambda g(x)$ ,  $h''(t) = -\lambda h(t)$ . Per la prima si ottiene la soluzione generale

$$g(x) = A\sin(\sqrt{\lambda}x) + B\cos(\sqrt{\lambda}x),$$

con A e B costanti reali. Imponendo la condizione al bordo g(0)=0 segue che B=0. Per x=L abbiamo quindi  $g(L)=A\sin(\sqrt{\lambda}L)=0$  da cui, per evitare la soluzione nulla,  $\sqrt{\lambda}L=k\pi$  con k intero, da cui abbiamo i possibili valori di  $\lambda$ ,

$$\lambda_k = \frac{k^2 \pi^2}{L^2}.$$

La soluzione generale per la seconda equazione è

$$h(t) = C\sin(\sqrt{\lambda_k}t) + D\cos(\sqrt{\lambda_k}t).$$

Abbiamo quindi una funzione periodica con frequenza  $\sqrt{\lambda_k}/2\pi$ , cioè k/2L. Le frequenze per cui la corda può vibrare sono quindi 1/2L, 2/2L, 3/2L, ..., si veda Figura 7.

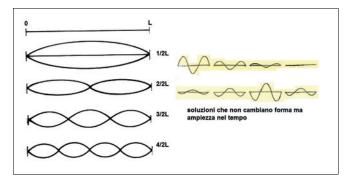


FIGURA 7 – A sinistra, onde stazionarie a diversa frequenza partendo dalla frequenza fondamentale 1/2L; a destra, variazione nel tempo dell'ampiezza dell'onda stazionaria (che non si propaga).

Osserviamo che il problema è lineare per cui la somma di soluzioni è ancora una soluzione, moltiplicando una soluzione per una costante si ottiene ancora una soluzione. Possiamo quindi sommare multipli delle onde stazionarie ed ottenere altre soluzioni. Le condizioni al bordo sulla parte spaziale g determinano lo spettro, ovvero la lista dei valori permessi per  $\lambda$  tali che l'equazione non ha soluzione nulla. Una volta scelta una delle frequenze possibili  $\sqrt{\lambda_k}/2\pi$ , la componente temporale h è una oscillazione periodica a quella determinata frequenza. La situazione è nota ai musicisti: la freguenza 1/2L è la frequenza fondamentale della corda stessa. In corrispondenza di tale frequenza l'ampiezza della vibrazione è nulla agli estremi della corda. Le altre frequenze sono le armoniche della frequenza fondamentale. Nel caso unidimensionale, previa normalizzazione e riscalamento delle caratteristiche del materiale della corda, il problema di Kac è risolto: la forma della corda è individuata completamente dalla sua lunghezza L che può essere trovata dal reciproco della frequenza più bassa. Nel caso non normalizzato il risultato rimane il medesimo, la frequenza fondamentale risulta però uguale a  $(T/D)^{1/2}(1/2L)$  dove T e D sono rispettivamente la tensione e la densità della corda.

Per il famoso tamburo la situazione è simile, il suono prodotto è ottenuto dalla sovrapposizione di varie frequenze diverse dette modi normali di vibrazione. Per particolari domini si può ripetere lo stesso procedimento visto sopra e adattarlo al caso bidimensionale del tamburo arrivando alle equazioni  $-\Delta g = \lambda g$ ,  $-h''(t) = \lambda h(t)$  con le opportune condizioni al bordo. Ma come è andata a finire la questione? L'insieme degli autovalori del laplaciano rappresenta le impronte digitali per identificare un dominio? La risposta è negativa per un dominio piano generale e arriva da C. Gordon, L. Webb e S. Wolpert in un lavoro del 1992 [16]. Il controesempio è ottenuto costruendo due opportune figure planari poligonali, si veda Figura 8, ed è basato su una precedente costruzione di Sunada relativa a varietà isospettrali. Da allora sono state trovate dimostrazioni elementari oltre che diverse regioni di questo tipo.

Tutti i controesempi di cui abbiamo fatto cenno sopra riguardano domini che sono non convessi (o non connessi) e con bordo "non regolare". Gordon e

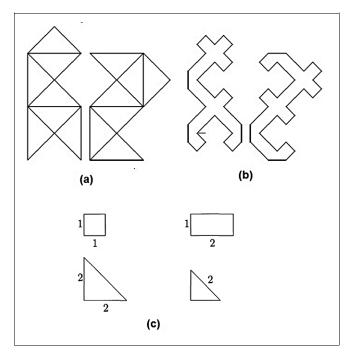


FIGURA 8 – Due esempi di domini non isometrici ma isospettrali, le forme (a) e (b) sono state costruite da Gordon, Webb e Wolpert; le (c) non sono connesse e sono state trovate da Chapman.

Webb proposero la questione per l'esistenza di domini connessi, convessi, isospettrali ma non isometrici: li trovarono per spazi euclidei di dimensione  $n \geq 4$ . Pur non essendoci ancora una risposta definitiva ci sono degli importanti risultati parziali. Per esempio Zelditch [36] ha mostrato che per domini che possiedono una simmetria simile ad una ellisse (per dare un'idea) e con un bordo regolare l'insieme degli autovalori ne determina univocamente la forma. Watanabe invece mostra che un dominio con bordo sufficientemente regolare è univocamente determinato se si considera sia l'insieme degli autovalori che corrispondono a condizioni omogenee di Dirichlet che l'insieme degli autovalori per il problema con condizioni di Neumann  $\partial u/\partial n=0$  su  $\partial \Omega$ dove  $\partial/\partial n$  è la derivata direzionale normale al bordo del dominio  $\Omega$ .

A questo punto cosa possiamo dire nel caso dei grafi? Possiamo sentire la topologia di un grafo? In un certo senso un grafo potrebbe essere a metà strada tra la corda vibrante (meglio una rete di corde vibranti) e una varietà di dimensione superiore. Iniziamo con un approccio completamente algebrico.

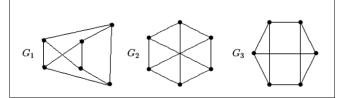


FIGURA 9 – I grafi  $G_1$ ,  $G_2$ ,  $G_3$  hanno lo stesso numero di vertici e di lati, e ogni vertice ha valenza tre. I grafi  $G_1$  e  $G_2$  sono isomorfi mentre  $G_3$  non è isomorfo agli altri due.

Il primo passo riguarda la definizione di grafi isomorfi: quando due grafi sono lo "stesso grafo"? Nel seguito ci occuperemo di grafi semplici, continueremo quindi a parlare di grafi ma sempre pensando, salvo indicazione differente, ai grafi semplici. Un isomorfismo tra due grafi  $G = (V, E, \psi)$  e  $G' = (V', E', \psi')$  è una biezione  $\alpha: V \to V'$ , tra gli insiemi dei vertici tale che, per ogni coppia di vertici  $u, v \in V, (u, v) \in E \Rightarrow (\alpha(u), \alpha(v)) \in E'$  (si ricorda che gli insiemi E e  $V \times V$  sono identificati tramite la  $\psi$ ). Se una tale applicazione esiste, si dice che G e G' sono isomorfi (7) e si usa scrivere l'isomorfismo come  $\alpha: G \to G'$ . Se si rappresenta un grafo con un diagramma, che contiene in effetti tutte le informazioni utili, occorre osservare che diagrammi graficamente diversi possono in realtà rappresentare il medesimo grafo. In generale, non è facile stabilire se due grafi siano isomorfi, e non esiste un algoritmo efficiente per farlo (8). In Figura 9 si mostra un esempio di grafi isomorfi e non isomorfi. Solo per alcune classi di grafi il problema è facilmente risolubile.

Un grafo G = (V, E) si dice completo se per ogni coppia di vertici  $u, v \in V$ , con  $u \neq v$  si ha che  $(u, v) \in E$ . Il grafo completo su n vertici si denota con  $K_n$ . In un grafo completo su n vertici, il numero degli archi è uguale a n(n-1)/2. Due grafi completi

sono isomorfi se e solo se i loro insiemi di vertici hanno la stessa cardinalità. Altri grafi facili da scovare sono i cosiddetti cicli: il ciclo di lunghezza n, indicato con  $C_n$ , è graficamente identificato ponendo i vertici nei vertici di un n-agono regolare, gli archi sono i lati del medesimo poligono regolare.

Rispetto al caso del tamburo ora abbiamo a che fare con un mondo discreto e non più continuo. Abbiamo già introdotto la matrice di adiacenza, nel caso di grafo non diretto tale matrice è reale e simmetrica per cui, per il Teorema Spettrale, tutti i suoi autovalori sono reali. Li denoteremo, contandone la molteplicità, come (qui n è il numero dei vertici)

$$\mu_1 \leq \mu_2 \leq \ldots \leq \mu_n$$
.

ESEMPIO 2.1 – Calcoliamo lo spettro della matrice di adiacenza  $A_{K_n}$  del grafo completo su n vertici. Si ha  $A_{K_n} = J_n - I_n$ , dove  $J_n$  è la matrice  $n \times n$  in cui ogni elemento è uguale ad 1, e  $I_n$  la matrice identità di ordine n. Ne segue che gli autovalori di  $A_{K_n}$  sono tutti e soli del tipo  $(\mu - 1)$ , dove  $\mu$  è autovalore di  $J_n$ . Ora,  $J_n$  ha rango 1, quindi il suo nucleo ha dimensione n-1, e pertanto 0 è autovalore di  $J_n$  con molteplicità n-1. L'altro autovalore di  $J_n$  è n con molteplicità 1. Pertanto, gli autovalori di  $A_{K_n}$  sono: (n-1) con molteplicità 1, e-1 con molteplicità n-1.

Possiamo interpretare la matrice quadrata  $A_G$  come la matrice di un endomorfismo di uno spazio n-dimensionale. Sia G=(V,E) un grafo (semplice) con n vertici ed  $A_G$  la sua matrice di adiacenza i cui termini denotiamo con  $A_{uv},\ u,v\in V$ . Lo spazio vettoriale che risulta conveniente considerare è lo spazio  $C(G)=\{f\mid f:V\to\mathbb{R}\}$ , di dimensione n, di tutte le applicazioni sull'insieme V a valori in  $\mathbb{R}$  (una possibile base è costituita dalle applicazioni che assumono valore 1 in uno dei vertici e valore 0 sugli altri). L'azione della matrice A su C(G) si descrive facilmente, se  $f\in C(G)$ , allora per ogni  $u\in V$  si pone (ricordiamo che  $u\sim v$  significa che u e v sono adiacenti al medesimo arco)

$$(A_G f)(u) = \sum_{v \in V} A_{uv} f(v) = \sum_{u \sim v} A_{uv} f(v) = \sum_{u \sim v} f(v).$$

Facciamo un esempio. Ricordiamo che un grafo G si dice regolare se i suoi vertici hanno tutti lo stesso

<sup>(7)</sup> La definizione di isomorfismo per i grafi non semplici dovrà tener conto del fatto che l'insieme degli archi non è individuato da coppie di vertici, saranno necessarie due biezioni, una per i vertici e l'altra per gli archi, che si compongono in modo adeguato.

 $<sup>(^8)</sup>$  Si sospetta che il problema dell'isomorfismo di grafi non sia nella classe di complessità P né sia NP-completo, sebbene sia evidentemente in NP. Questo è un esempio di problema che si ritiene computazionalmente difficile, ma che si ritiene non sia NP-completo.

grado; se tale grado comune è uguale a k si dice che è un grafo k-regolare. Se G è k-regolare con  $k \geq 2$ , allora per ogni  $u \in V$ 

$$\sum_{v \in V} A_{uv} = k.$$

Ciò comporta che la funzione che vale costantemente 1 su V è un autovettore per  $A_G$  relativo all'autovalore k, e quindi che k è un autovalore. Vediamo un risultato che lega autovalori della matrice di adiacenza e proprietà del grafo (almeno per i grafi k-regolari).

Teorema 2.2. – Sia G = (V, E) un grafo k-regolare con matrice di adiacenza  $A_G$  con autovalori  $\mu_1 \leq \mu_2 \leq \ldots \leq \mu_v$  allora

- (1)  $k = \mu_n$ ;
- (2)  $|\mu_i| \le k \ per \ ogni \ i = 1, \dots, n;$
- (3)  $G \ e \ connesso \ se \ e \ solo \ se \ \mu_n > \mu_{n-1} \ (ovvero \ k \ e \ un \ autovalore \ di \ molteplicità \ 1).$

Vediamone sinteticamente una dimostrazione. Sia  $\mu$  un autovalore di  $A_G$  e  $f \in C(G), f \neq 0$ , il corrispondente autovettore. Scegliamo  $z \in V$  tale che |f(z)| sia massimo, possiamo assumere  $0 < f(z) \in \mathbb{R}$ . Segue che

$$\begin{aligned} |\mu|f(z) &= |\mu f(z)| = |(Af)(z)| = \left| \sum_{v \in V} A_{zv} f(v) \right| \\ &\leq \sum_{v \in V} A_{zv} |f(v)| \leq f(z) \sum_{v \in V} A_{zv} = k f(z). \end{aligned}$$

Quindi  $|\mu| \le k$ , il che prova i punti (1) e (2) del Teorema. Sia ora f un autovettore relativo a k e  $z \in V$  scelto come sopra. Allora,

$$kf(z) = (Af)(z) = \sum_{v \in V} A_{zv} f(v) =$$

$$=\sum_{v\sim z}A_{zv}f(v)\Rightarrow f(z)=\sum_{v\sim z}rac{A_{zv}}{k}f(v).$$

Dato che  $0 < A_{zv}/k \le 1$  e  $\sum A_{zv}/k = 1$  con  $v \sim z$ , il valore f(z) appartiene all'inviluppo convesso dei punti f(v) con  $v \sim z$ . Ognuno di questi ultimi punti è interno al cerchio di centro l'origine e raggio f(z), ne segue che f(v) = f(z) per ogni  $v \sim z$ . Si conclude che f è costante sulle componenti connesse di G. Pertanto se G è connesso l'autospazio relativo al-

l'autovalore k è composto da tutte le  $f \in C(G)$  costanti su V e quindi ha dimensione 1. Si conclude che l'autovalore k è semplice. Se G non è connesso, sia U l'insieme dei vertici in una sua componente connessa e S = V/U, definiamo  $f \in C(G)$  uguale ad 1 per  $v \in U$  e 0 per  $v \in S$ , mentre  $g \in C(G)$  uguale a 0 per  $v \in U$  e 1 per  $v \in S$ . Sia f che g sono autovettori di  $A_G$  corrispondenti al medesimo autovalore k che ha almeno molteplicità 2, cioè  $\mu_n = \mu_{n-1}$ .

Vediamo un'altra classe di grafi utili nelle applicazioni. Un grafo G=(V;E) è detto r-partito,  $r\geq 2$  intero, se l'insieme dei vertici V ammette una partizione in r classi in modo tale che ogni lato di G abbia i due vertici incidenti in classi diverse. Un grafo 2-partito è detto bipartito. Un grafo r-partito è detto completo se due vertici qualunque, purchè appartenenti a classi diverse, sono collegati da un lato. Un grafo r-partito completo in cui ogni classe contiene esattamente s vertici si indica solitamente come  $K_{r,s}$ .

Sia G un grafo k-regolare e connesso, allora condizioni equivalenti affinché G sia bipartito sono: (i) lo spettro della matrice di adiacenza  $A_G$  è simmetrico rispetto a 0; (ii)  $\mu_1 = -k$ . Qualche proprietà di un grafo si può quindi dedurre dagli autovalori (che possiamo legare idealmente a frequenze di vibrazione del grafo stesso): possiamo "sentire" la forma del grafo (in casi particolari).

Una premessa prima di citare un primo risultato (al solito ci limiteremo a grafi semplici senza cappi).

TEOREMA 2.3. – Sia G = (V, E) un grafo con vertici  $V = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ , sia  $A_G$  la sua matrice d'adiacenza, allora indicato con  $a_{ij}^{(p)}$  l'elemento della matrice  $A_G^p$ , potenza p-esima di  $A_G$  con  $p \ge 1$  intero, si ha che  $a_{ij}^{(p)}$  è uguale al numero di cammini possibili di lunghezza p tra i vertici  $v_i$  e  $v_i$ .

Per la dimostrazione possiamo procedere per induzione. Per p=1 l'enunciato è banale, perché si deduce dalla definizione di matrice di adiacenza. Assumiamo vero l'enunciato per p-1, allora ogni cammino di lunghezza p fra  $v_i$  e  $v_j$  si ottiene aggiungendo un arco ad un cammino di lunghezza p-1 fra  $v_i$  e  $v_k$ , dove  $v_k \sim v_j$ . I cammini fra  $v_i$  e  $v_j$  di lunghezza p sono quindi

$$\sum_{v_k \sim v_j} a_{ik}^{(p-1)} = \sum_{k=1}^n a_{ik}^{(p-1)} \cdot a_{kj} = a_{ij}^{(p)}.$$

Se volessimo trovare il numero di triangoli (ovvero di 3–cicli) nel diagramma che rappresenta G si osservi che, grazie al Teorema ora dimostrato, il numero di triangoli per un vertice  $v_i$  vale  $a_{ii}^{(3)}/2$  (siamo su un grafo non orientato per cui percorro il medesimo ciclo due volte secondo due versi differenti). Quindi il numero totale di triangoli  $N_T$  contenuti in G vale

$$N_T = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^{n} \frac{a_{ii}^{(3)}}{2} = \frac{1}{6} Tr(A^3) = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^{n} \mu_i^3$$

dove  $\mu_i$  è l'i—esimo autovalore della matrice di adiacenza  $A_G$  e con Tr(M) abbiamo indicato la traccia di una matrice M. Qualcosa si inizia a "sentire" della forma di un grafo ma l'entusiasmo si placa subito se si pretendesse di ricostruire tutto il grafo dallo spettro della matrice di adiacenza. In Figura 10 si mostra un esempio di grafi isospettrali, in riferimento agli autovalori della matrice di adiacenza, ma non isomorfi: uno dei due grafi è connesso l'altro no.

A questo punto occorre introdurre un altro "personaggio" sulla scena per avvicinarci alla definizione di un operatore discreto analogo all'operatore laplaciano considerato da Kac nel continuo. Abbiamo vari modi per farlo, un approccio fisico consiste nel considerare l'operatore più naturale associato a un grafo: l'operatore di diffusione. Questo operatore descrive la diffusione di una qualche quantità tra i vertici di un grafo. Si può immaginare un processo in

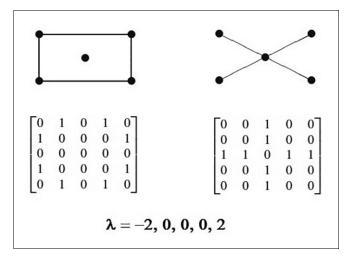


FIGURA 10 – Un esempio di grafi isospettrali, rispetto agli autovalori della matrice di adiacenza, ma non isomorfi: un grafo è connesso l'altro no.

cui ogni vertice può contenere una certa quantità di una qualche sostanza (per esempio un liquido). Se si considera un tempo discreto, ad ogni istante, la quantità presente in un vertice si distribuirà uniformemente nei vertici vicini (adiacenti). Questo processo si può anche collegare a passeggiate casuali sul medesimo grafo ed in cui ad ogni tempo discreto con una certa probabilità si può transitare da un vertice all'altro. Nel caso continuo questi approcci forniscono, dopo un opportuno procedimento di limite, il medesimo modello: il laplaciano. Un ulteriore approccio consiste nel determinare, per un grafo, l'equivalente dell'operatore gradiente e dell'operatore di divergenza in modo da ottenere il laplaciano come operatore del secondo ordine composizione dei due precedenti. Questa via potrebbe anche essere percorsa in un ambito più astratto riguardante la teoria di Hodge discreta [15].

Scegliamo qui una via differente che non coinvolga "troppo" particolari operatori differenziali e che appare, almeno per chi scrive, come un approccio nuovo. Una funzione armonica f in un aperto di  $\mathbb{R}^n$  è soluzione dell'equazione  $\Delta f=0$ . Abbiamo una bella, ed elegante, proprietà (poco credibile, probabilmente, a prima vista): il valore in ogni punto fissato di una funzione armonica è uguale alla media dei suoi valori sulle "bolle" (e sulle sfere) centrate in quel medesimo punto. Per f sufficientemente regolare, continua con le sue derivate seconde, armonica in un dominio aperto e connesso  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ , per ogni bolla di raggio R>0 e centro in  $x, B_R(x) \subset \Omega$  si ha

$$f(x) = \frac{1}{m_n(B_R(x))} \int_{B_n(x)} f(y) dy,$$

$$f(x) = \frac{1}{m_{n-1}(\partial B_R(x))} \int_{\partial B_n(x)} f(y) d\sigma(y),$$

dove  $m_n$  indica la misura di Lebesgue n-dimensionale,  $d\sigma$  l'elemento di misura n-1 dimensionale sulla sfera  $S_R = \partial B_R$  (bordo (9) di  $B_R$ ). Indichiamo con F(x,R) la media relativa alla sfera  $\partial B_R$ , per f continua  $\lim_{r\to 0^+} F(x,r) = f(x)$ . Sotto ipotesi di de-

<sup>(9)</sup> Non ci addentreremo nelle interessanti e notevoli definizioni e proprietà relative alla misura di Lebesgue, frontiere e bordi: mondo meraviglioso ma qui non esplorabile.

rivabilità per F, si può dimostrare, utilizzando il teorema della divergenza, la seguente formula

$$\frac{\partial F(x,R)}{\partial R} = \left(\frac{R}{n}\right) \frac{1}{\omega_n r^n} \int_{B_R(x)} \ \Delta f(y) dy,$$

dove  $\omega_n$  è il volume della sfera unitaria in dimensione n ( $\Gamma$  è la funzione Gamma),

$$\omega_n = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(1+n/2)}.$$

In conclusione, il laplaciano indica la "variazione" della funzione f rispetto a una sua media su una sfera. Per un grafo G=(V,E), e una funzione  $f\in C(V)$ , per un vertice  $u\in V$  possiamo considerare la media di f rispetto ai vertici adiacenti,

$$\frac{1}{d(u)} \sum_{u \in v} f(v)$$

dove d(u) indica il grado di u. La differenza  $\operatorname{tra} f(u)$  ed il valore medio ora definito deve essere "integrata", quindi moltiplicata per d(u), per ottenere il valore nel nodo del laplaciano discreto che indicheremo  $\operatorname{con} L$ ,

$$(Lf)(u) = d(u)f(u) - \sum_{u \sim v} f(v) =$$

$$= d(u)f(u) - \sum_{v \in V} A_{uv}f(v),$$

dove  $A=A_G$  al solito rappresenta la matrice di adiacenza. Se definiamo  $D_G$  la matrice diagonale  $n\times n$ , con n numero di vertici, con elementi diagonali d(u) possiamo definire l'operatore laplaciano come

$$L = D_G - A_G$$
.

Orientiamo arbitrariamente gli archi di un grafo non orientato G e indichiamo con B la matrice d'incidenza del grafo orientato risultante. Possiamo scrivere  $B=B_++B_-$  dove  $B_+$  è ottenuta da B mantenendo i valori uguali ad 1 e azzerando tutti gli altri, mentre  $B_-$  è ottenuta da B mantenendo i valori uguali a -1 e ponendo uguali a zero i rimanenti elementi. Si ha

$$BB^{T} = (B_{+} + B_{-})(B_{+} + B_{-})^{T} = (B_{+}B_{+}^{T}) + (B_{+}B_{-}^{T}) + (B_{-}B_{+}^{T}) + (B_{-}B_{-}^{T}).$$

La matrice  $B_+B_+^T$  risulta essere una matrice diagonale i cui elementi contano gli archi uscenti dal corrispondente nodo, la matrice  $B_-B_-^T$  è ancora diagonale e gli elementi diagonali sono uguali agli archi entranti in un nodo, la matrice  $B_+B_-^T + B_-B_+^T$  ha invece diagonale nulla ed elementi uguali a -1 dove vi è un arco. Abbiamo quindi

$$L = BB^T$$
,

e la rappresentazione è indipendente dalla scelta degli orientamenti scelti per ogni arco. Inoltre per  $f \in C(V)$ , quindi  $f \in \mathbb{R}^n$ , scelto un qualsiasi orientamento,

$$f^{T}Lf = f^{T}BB^{T}f = (B^{T}f)^{T}(B^{T}f) =$$
  
=  $\sum_{(u,v)\in E} (f(u) - f(v))^{2}.$ 

Abbiamo quindi che la matrice L è semidefinita positiva, essendo anche simmetrica abbiamo quindi n autovalori reali, considerando anche le molteplicità,

$$0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$$
.

Il laplaciano per un grafo ha varie interpretazioni fisiche. Per esempio, gli archi del grafo potrebbero essere pensati come resistenze elettriche in una rete elettrica (per noi le resistenze avranno tutte valore 1 ma si potrebbero aggiungere dei pesi non negativi senza alterare la struttura del grafo). Avendo un potenziale elettrico f(u) nel vertice u e, rispettivamente, un potenziale f(v) nel vertice v, una corrente elettrica (f(u) - f(v)) (ricordiamo che le conduttanze hanno tutte valore uguale ad 1) attraverserà l'arco (u,v). Quindi se applichiamo diversi potenziali f nei vertici, il valore  $f^T L f$  rappresenta l'energia dissipata sulla rete.

Iniziamo a dedurre alcune caratteristiche di un grafo dallo spettro del laplaciano (come mettersi in ascolto dello spettro del grafo). Il numero di vertici è ovviamente deducibile, come per la matrice di adiacenza, contando gli autovalori. Dato che i gradi d(u) nei vertici compaiono nella diagonale principale di L, segue che

$$Tr(L) = \sum_{u \in V} d(u) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 2m$$

dove m è il numero di archi. Dalle potenze della matrice L, come per le potenze della matrice di

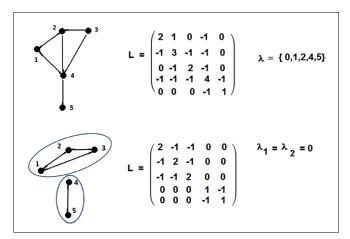
adiacenza, altre informazioni possono essere dedotte come segue:

$$Tr(L^2) = \sum_{u \in V} d^2(u),$$

$$Tr(L^3)=4\sum_{u\in V}d^3(u)-6T(G),$$

dove T(G) indica il numero di triangoli e il valore  $\sum_u d^2(u)$  è indicato come  $Z_G$  ed è stato introdotto nell'ambito della chimica fisica ( $^{10}$ ). Si osservi che senza informazioni sulla distribuzione dei gradi dei vertici il numero dei triangoli non è "udibile", cioè deducibile dalla conoscenza dello spettro. Vediamo ulteriori risultati per gli autovalori del laplaciano L.

LEMMA 2.4. – Sia G = (V, E) un grafo con n vertici, e siano  $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$  gli autovalori del corrispondente laplaciano L, allora: l'autovalore più piccolo è  $\lambda_1 = 0$  e un suo corrispondente autovettore è il vettore  $1 = (1, 1, \ldots, 1)^T$ . La molteplicità di  $\lambda_1$  è uguale al numero di componenti connesse di G, inoltre G è connesso se e solo se  $\lambda_2 > 0$ .



 ${\it Figura~11-Esempi}$  di grafi e del loro laplaciano con alcuni autovalori.

Per la dimostrazione basta osservare che la somma degli elementi della riga della matrice di adiacenza  $A_G$  corrispondente al vertice u è uguale a d(u), quindi

$$A_G \mathbf{1} = D_G \Rightarrow (D_G - A_G) \mathbf{1} = 0 = \lambda_1 \mathbf{1}.$$

Essendo L semidefinita positiva segue che  $\lambda_1=0$  è un autovalore e l'autovettore corrispondente è il vettore 1. Se il grafo è connesso e  $\lambda_2=0$  esiste un autovettore  $w\neq c1$ , con c costante reale non nulla, associato all'autovalore nullo. Quindi Lw=0 da cui  $w^TLw=0$ , cioè  $\sum_{u\sim v}(w(u)-w(v))^2=0$ . la somma è zero quando w(u)=w(v) per ogni coppia di nodi u e v connessi da un cammino. Essendo il grafo connesso segue che il vettore w ha tutti gli elementi uguali ottenendo un assurdo.

Si consideri ora  $\lambda_2 > 0$ , un grafo non connesso e si applichi quanto detto sopra a una componente connessa del grafo. Si consideri inoltre un riordinamento dei nodi che riporti i nodi della componente connessa associati alle prime righe del laplaciano. Sia w il vettore associato all'autovalore nullo per tale componente connessa e lo si completi con elementi nulli fino ad ottenere un vettore in  $\mathbb{R}^n$ . In questo modo si è costruito un vettore che non ha tutte le componenti uguali ma che annulla il laplaciano. Si ottiene così un assurdo nell'aver supposto che il grafo non fosse connesso. Con un ragionamento analogo si mostra che la molteplicità algebrica dell'autovalore 0 è pari al numero di componenti connesse di G.

Osserviamo che l'autovalore  $\lambda_2$  è una sorta di misura di connettività del grafo, tale autovalore è noto col nome di valore di Fiedler.

Sembra quindi che il laplaciano possa far sentire qualche proprietà interessante di un grafo ma, in mancanza di maggiori informazioni sul grado dei nodi, non pare si possa identificare la struttura di un grafo attraverso i suoi autovalori. Una speranza poteva accendersi per i grafi regolari. In effetti si è verificato che tutti i grafi regolari con meno di 10 vertici sono identificati dallo spettro del laplaciano [9, 10]. Un primo controesempio con 10 vertici è stato però proposto in [10], si veda Figura 12. Alcune classi di grafi sono però completamente riconoscibili, una rassegna dello stato dell'arte si può trovare in [11].

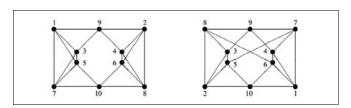


FIGURA 12 – Un esempio di grafi 4-regolari isospettrali, rispetto agli autovalori della matrice laplaciana, ma non isomorfi: hanno un differente numero di triangoli o 3-cicli.

 $<sup>(^{10})</sup>$  Il valore  $Z_G$  è anche noto come primo indice di Zagreb ed è stato introdotto da un gruppo di chimici croati nel 1972 nello studio di proprietà topologiche di molecole.

#### 3. - Siamo davvero sordi?

La matrice di adiacenza e il laplaciano sono matrici simmetriche i cui autovalori e autovettori riflettono, almeno in parte, la struttura del grafo. Abbiamo considerato solo gli autovalori ricavando alcune proprietà del grafo sottostante, anche se lo spettro di queste matrici non riesce, in generale, ad identificare completamente un grafo (a meno di isomorfismi). Si potrebbero utilizzare gli autovettori, oppure selezionare un sottoinsieme di questi, o qualche loro proprietà. Per esempio, nel caso continuo per sottoinsiemi di  $\mathbb{R}^n$  o in situazioni più generali, risulta di interesse lo studio delle proprietà geometriche degli insiemi nodali (insiemi dove si annulla una autofunzione).

Oltre alle due matrici considerate sopra, matrice di adiacenza e matrice laplaciano, ve ne sono anche altre costruite a partire da un grafo, di seguito le più note

- laplaciano senza segno  $L_u = D + A$ ;
- matrice passeggiata casuale:  $P = D^{-1}A$ ;
- matrice adiacenza normalizzata (quando  $d(u) \neq 0$ ):  $\bar{A} = D^{-1/2}AD^{-1/2}$ ;
- laplaciano normalizzato:  $\bar{L} = I \bar{A}$ ;
- matrice modularità:  $B = A \frac{DD^T}{2n}$ ;
- matrice dei motivi.

Per ognuna di queste matrici abbiamo esempi di grafi isospettrali ma non isomorfi. Ciascuna di queste matrici, attraverso il proprio spettro, riesce però a determinare qualche proprietà di un grafo. Per esempio, la matrice di modularità è legata alla differenza tra la frazione di archi in un certo gruppo e la frazione attesa nel caso di distribuzione casuale di archi. La matrice dei motivi, di cui non abbiamo riportato l'espressione, è invece legata al conteggio di quante volte un dato arco è presente in un insieme di motivi (ovvero di sottografi con particolari proprietà). Infine un (enorme) discorso a parte meriterebbero le matrici legate, in qualche modo, a passeggiate casuali in un grafo [5]: riprenderemo il discorso nella seconda parte del presente articolo. Anche le proprietà legate alla stima degli autovalori (come il significato della disuguaglianza di Cheeger per i grafi) saranno successivamente riprese con interessanti applicazioni [7].

Vi sono anche dei risultati che riguardano non i singoli autovalori ma la loro distribuzione o lo spet-

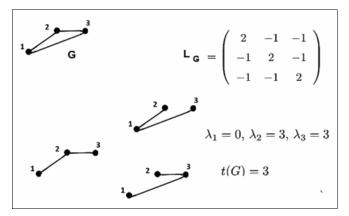


FIGURA 13 - Esempio di applicazione del Teorema di Kirchoff.

tro intero. Un Teorema famoso è certamene dovuto a Gustav R. Kirchoff ( $^{11}$ ) ed è legato ad alcuni Teoremi fondamentali per i circuiti elettrici. Premettiamo una definizione. Sia G=(V,E) un grafo non orientato e connesso, si definisce albero ricoprente di G un sottografo T tale che: T è un albero; T contiene tutti i vertici di G. Abbiamo il seguente risultato.

TEOREMA 3.1. – (Gustav R. Kirchoff) Dato un grafo connesso G con n vertici, il numero t(G) di alberi ricoprenti di G è dato da:

$$t(G) = \frac{1}{n} \lambda_2 \lambda_3 \cdots \lambda_n,$$

dove  $\lambda_2, \lambda_3, \dots \lambda_n$  sono gli autovalori non nulli del laplaciano L di G.

In altri termini, il numero di alberi ricoprenti è uguale a qualsiasi cofattore della matrice laplaciana di *G*. In Figura 13 si mostra una applicazione di questo Teorema.

#### 3.1 – Tornando indietro

Riprendiamo i due giochi che abbiamo descritto all'inizio dell'articolo e che, forse, abbiamo affrontato nella giovinezza e proviamo a risolverli. Per quanto riguarda il disegno della casetta senza staccare la matita, Figura 2, abbiamo il Teorema di Eulero: ci sono 3 vertici di grado pari e 2 vertici di grado dispari per cui non può esserci un circuito euleriano ma un

<sup>(11)</sup> Che ci si creda o meno Kirchoff è nato a Könisberg.

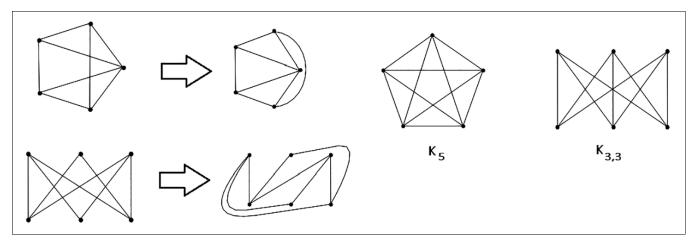


FIGURA 14 – Esempi di grafi planari e di grafi non planari, questi ultimi particolari esempi detti  $K_5$  e  $K_{3,3}$ .

cammino sì (partendo da uno dei due vertici con grado dispari ed arrivando nell'altro vertice di grado dispari). Per quanto riguarda il problema dei servizi iniziamo con una definizione, un grafo  $G=(V,E,\psi)$  è piano se V è un sottoinsieme di punti del piano euclideo  $\mathbb{R}^2$  ed E è un insieme di archi semplici che si intersecano solo negli estremi. Possiamo quindi intendere  $e \in E$  come l'immagine di una applicazione continua e iniettiva  $e:[0,1] \to \mathbb{R}^2$  tale che e(0), e(1) sono vertici del grafo. Un grafo G si dice planare se è isomorfo (come grafo) ad un grafo piano. In Figura 14 si mostrano esempi di grafi planari e grafi non planari, il grafo  $K_5$  (grafo completo con 5 vertici) ed il grafo  $K_{3,3}$  (il cui nome ufficiale è grafo completo bipartito di tipo (3,3)).

Sia e = (u, v) un lato del grafo G, si può costruire un grafo G' aggiungendo a G un nuovo vertice z, togliendo il lato e, e rimpiazzandolo con i due lati (u, z), (z, v).

Un grafo  $G^s$  è detto una suddivisione del grafo G se è ottenuto da G mediante un numero finito di applicazioni successive della procedura appena descritta. Vale il seguente Teorema che caratterizza i grafi planari.

Teorema 3.2. – (K. Kuratowski) Un grafo è planare se e soltanto se non ha sottografi isomorfi ad una suddivisione di  $K_5$  o di  $K_{3.3}$ .

Quindi anche il gioco dei tre servizi e delle tre case non ha soluzione [12].

Restando però sulla rappresentazione di un grafo con cerchi e linee ci si può porre il problema se una rappresentazione sia più efficace di altre [30], in effetti un disegno potrebbe rivelare meglio la struttura di un grafo, un esempio in Figura 15.

Il caso più semplice di rappresentazione grafica consiste nel cercare di disegnare un grafo su una linea. Dato un grafo G = (V, E), semplice e connesso, con n vertici, noi cerchiamo di assegnare ad ogni vertice un valore  $x_v$ . Questo tipo di ordinamento potrebbe essere utile, per esempio, nell'ambito dell'algebra lineare numerica. Un primo approccio potrebbe consistere nell'assegnare un valore ai vertici in modo tale che gli archi (intervalli) abbiano lunghezza la più piccola possibile. Purtroppo non si conosce un algoritmo efficiente per questo (anzi un problema simile pare sia nella classe dei cosiddetti problemi NP). Un approccio, utilizzando opportuni autovettori, è stato proposto da Hall [19] nel 1970. Hall osserva che il problema potrebbe essere modellizzato come problema di minimo per la forma quadratica

$$x^{T}Lx = \sum_{(u,v)\in E} (x(u) - x(v))^{2},$$

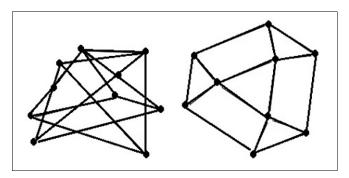


FIGURA 15 – Esempi di rappresentazione di un grafo planare con due diagrammi diversi, uno più efficace dal punto di vista grafico.

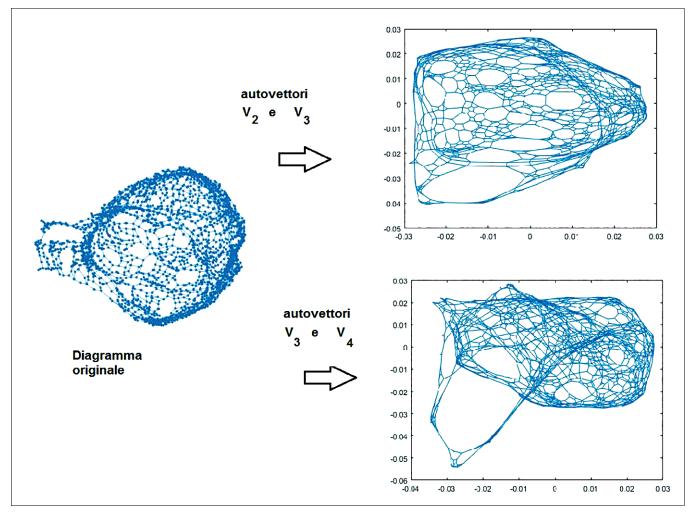


FIGURA 16 – Esempio di rappresentazione con proiezione rispetto ad alcuni autovettori del laplaciano del grafo (il grafo rappresenta una parte della mappa stradale di Roma ed i dati sono disponibili pubblicamente dal sito del Prof. D. Spielman http://www.cs.yale.edu/homes/spielman/).

dove x è una funzione  $x: V \to \mathbb{R}$ . Occorre però evitare la soluzione banale:  $x = \mathbf{1} = (1, 1, \dots, 1)^T$ . Quindi si impone il vincolo che x sia ortogonale al vettore 1. Se il grafo G è connesso il secondo autovalore  $\lambda_2$  del laplaciano è strettamente positivo e la soluzione risulta essere  $x = V_2$ , dove  $V_2$  è un autovettore corrispondente a  $\lambda_2$ . Infatti, grazie al Teorema di Courant-Fischer, si ha che

$$\lambda_2 = \min_{x 
eq 0, \ x^T 1 = 0} \ rac{x^T L_G x}{x^T x}$$

e  $V_2$  è un vettore per cui il minimo è assunto. La condizione di ortogonalità  $x^T\mathbf{1}=0$  può essere riscritta come  $\sum x(v)=0$ , mentre per assicurare unicità si può aggiungere una condizione di normalizzazione  $\sum x^2(v)=1$ .

Per immergere ( $^{12}$ ) G nel piano si cerca invece una opportuna funzione  $X: E \to \mathbb{R}^2$ . Indicando con  $\|\cdot\|$  la norma euclidea in  $\mathbb{R}^2$  e posto  $X = (x,y)^T$ , il problema risulta essere la minimizzazione di

$$\sum_{(u,v)\in E} \left\| \begin{pmatrix} x(u) \\ y(u) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x(v) \\ y(v) \end{pmatrix} \right\|^2 = x^T L_G x + y^T L_G y$$

a cui si aggiungono le condizioni di ortogonalità  $\sum x(u) = 0$ ,  $\sum y(u) = 0$ , per evitare la soluzione banale X(u) = (1,1), le condizioni di normalizzazio-

 $<sup>(^{12})</sup>$  In realtà non è corretto parlare di immersione nel senso della geometria differenziale perchè non stiamo imponendo che la funzione X sia iniettiva.

ne  $\sum x^2(u)=1$ ,  $\sum y^2(u)=1$  e la condizione  $\sum x(u)y(u)=0$ , per evitare la soluzione  $x=y=V_2$ .

Sotto queste condizioni Hall ha mostrato che una soluzione è data da  $x = V_2$ ,  $y = V_3$  con  $V_3$  un autovettore corrispondente all'autovalore  $\lambda_3$  (altre soluzioni si ottengono con rotazioni di questa).

Si potrebbe procedere con ulteriori coppie di autovettori. Nella pratica la rappresentazione grafica sembrerebbe migliorare ma non è così per tutti i grafi, un esempio è mostrato in Figura 16 dove un grafo, relativo ad una parte della mappa stradale di Roma, viene rappresentato utilizzando diverse coppie di autovettori. Una dimostrazione del motivo e di quando il miglioramento accade non è stata ancora trovata, W.T. Tutte [32] ha proposto una giustificazione basata sul fatto che se  $\lambda$  e x sono autovalore e autovettore di  $L_G$  si ha

$$x(u) = \frac{1}{d(u) - \lambda} \sum_{v \in \mathcal{U}} x(v)$$

per ogni vertice  $u \in V$ . Quindi ad un  $\lambda$  piccolo corrispondono valori di x(u) vicini al suo valore medio rispetto ad un intorno di nodi adiacenti. Quindi se il grafo è planare, si fissano i lati più esterni e gli altri vertici si posizionano come media dei vertici nell'intorno, dando così vita a una immersione del grafo nel piano.

Altri utilizzi di autovalori e autovettori saranno fatti nella seconda parte di questo articolo, non per fini grafici ma per individuare particolari zone o partizioni di un grafo che modellizzi un insieme di dati.

### 4. – Non solo linee e punti

Abbiamo visto che dato un grafo G=(V,E) e limitandoci a grafi semplici e connessi, possiamo definire funzioni che assumono valori sui vertici di G e quindi assimilabili a vettori di  $\mathbb{R}^n$ , con n numero di vertici. Gli operatori che agiscono su tali vettori sono operatori discreti. Ad esempio, il laplaciano può essere considerato come un particolare operatore alle differenze. Possiamo spostare l'attenzione a funzioni definite sugli archi, questo avviene in diversi sistemi fisici, chimici e biologici. Per esempio, nell'ambito delle neuroscienze abbiamo un comportamento attivo delle connessioni tra neuroni (vertici) che comportano una modellizzazione di un processo dinamico sugli archi [26, 6] insieme ad un modello per i vertici [1].

Dobbiamo adottare una topologia, meglio una metrica per ogni arco: passiamo dal considerare un arco come rappresentazione

di una relazione binaria al considerare un arco come un mezzo fisico, un filo, che connette vertici [3].

DEFINIZIONE (grafo metrico). Un grafo connesso G = (V, E) è detto grafo metrico se

- (i) ad ogni arco  $e \in E$  è assegnata una lunghezza positiva  $L_e \in (0, +\infty)$ ;
- (ii) per ogni arco  $e \in E$  è specificata una coordinata  $x_e \in [0, L_e]$ .

Per includere casi differenti, si potrebbero accettare anche archi di lunghezza infinita (cioè archi che vanno da un vertice ad un punto all'infinito). Inoltre si potrebbero considerare grafi con un numero infinito di archi, nel seguito considereremo, per semplicità, solo lunghezze finite e grafi finiti.

L'introduzione di una struttura metrica porta ad interpretare un grafo come un complesso simpliciale. Si noti inoltre che, a priori, non si pensa il grafo immerso in qualche varietà o spazio euclideo anche se in alcune applicazioni questa immersione esiste ed è naturale: nanotubi, cristalli fotonici, circuiti vari (in tal caso la coordinata  $x_e$  corrisponde ad una lunghezza d'arco). Se una sequenza di archi  $\{e_j\}$  forma un cammino la sua lunghezza è definita come la somma delle lunghezze degli archi  $\sum L_j$ . Dati due vertici u e v la loro distanza  $\rho(u,v)$  è definita come la lunghezza minima di un cammino che li connetta. In un grafo metrico si suppone che il grado di ogni nodo sia positivo (e finito).

In un grafo metrico i punti non sono solo i vertici ma anche i punti intermedi sugli archi: abbiamo perso la struttura di punti collegati da lati. Quando si parlerà di una funzione f(x), considereremo quindi la f definita lungo tutti gli archi del grafo. Per esempio potremmo considerare lo spazio standard delle funzioni continue  $C^0(G)$ . Possiamo anche definire in modo naturale una misura di Lebesgue dx sul grafo. In questo modo è possibile definire i classici spazi funzionali. Lo spazio  $L^2(G)$  consiste nelle funzioni che sono misurabili e con quadrato integrabile su ogni lato  $e \in E$  e tali che

$$||f||_{L^2(G)}^2 = \sum_{e \in E} ||f||_{L^2(e)}^2 < \infty, \quad ||f||_{L^2(e)}^2 = \int_e f^2(x) dx.$$

Lo spazio di Sobolev  $H^1(G)$  è invece lo spazio delle funzioni continue  $f \in C^0(G)$  tali che

$$\|f\|_{H^1(G)}^2 = \sum_{e \in E} \|f\|_{H^1(e)}^2 < \infty,$$

$$||f||_{H^1(e)}^2 = \int_e (f'(x))^2 dx + \int_e f^2(x) dx.$$

Funzioni in una variabile reale  $g \in H^1(e)$ , per le proprietà di immersione degli spazi di Sobolev, risultano continue su e. L'ipotesi di continuità globale costringe le funzioni ad assumere il medesimo valore in ogni vertice comune a più archi.

Ad un grafo metrico si può assegnare un operatore differenziale (o più generale). L'operatore più frequentemente utilizzato è il corrispondente del laplaciano per ogni arco

$$f \mapsto -\frac{\partial^2 f}{\partial x^2},$$

dove  $x=x_e$  per ogni  $e\in E$ . Un altro operatore molto comune è l'operatore di Schrödinger (ancora per x lungo ogni lato)

$$f \mapsto -\frac{d^2f}{dx^2} + V(x)f(x),$$

dove V(x) è una funzione potenziale.

Ad ogni modo, andranno introdotte opportune condizioni di "accoppiamento", o compatibilità, nei vertici. Per un grafo con M archi, indicando con  $E_v$  l'insieme degli archi e incidenti il vertice v, una condizione nei vertici standard per una funzione definita su G è la seguente

f continua,

$$\sum_{e \in E_v} \frac{df}{dx_e}(v) = 0, \ v \in V,$$

dove la derivata denota la derivata normale della funzione f nell'estremo v. Queste condizioni sono chiamate condizioni di Neumann o, più raramente condizioni di Neumann-Kirchoff o standard. Un grafo metrico diventa un grafo quantistico (nel seguito utilizzeremo la dicitura inglese di quantum graph) quando si assegnano un operatore  $\mathcal{H}$  e le condizioni nei vertici. Qui siamo interessati al caso corrispondente al laplaciano per cui  $\mathcal{H} = -\partial^2/\partial x^2$ . Se etichettassimo gli M archi e gli n vertici del grafo il problema agli autovalori diventerebbe

$$-\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} = \lambda f, \ x_i \in (0, L_i),$$

a cui aggiungere le condizioni di Neumann. Osserviamo che, con  $f_i$  intendiamo la restrizione di f sul lato  $e_i$ ,

$$-\sum_{j=1}^{M} \int_{0}^{L_{j}} f_{j} \frac{\partial^{2} f_{j}}{\partial x_{j}^{2}} dx_{j} =$$

$$= \sum_{i=1}^{M} \int_{0}^{L_{j}} \left(\frac{\partial f_{j}}{\partial x_{i}}\right)^{2} dx_{j} - \sum_{i=1}^{M} \left[f_{j} \frac{\partial f_{j}}{\partial x_{i}}\right]_{0}^{L_{j}},$$

quindi

$$\begin{split} \sum_{j=1}^{M} \int_{0}^{L_{j}} \left( \frac{\partial f_{j}}{\partial x_{j}} \right)^{2} dx_{j} - \sum_{i=1}^{n} f(v_{i}) \sum_{j=1}^{M} \frac{\partial f_{j}}{\partial n_{j}}(v_{i}) = \\ = \lambda \sum_{i=1}^{M} \int_{0}^{L_{j}} (f_{j})^{2} dx_{j}, \end{split}$$

dove la doppia sommatoria è nulla per via delle condizioni nei vertici. Ne segue che gli autovalori  $\lambda$  sono non negativi.

ESEMPIO  $4.1 - (Quantum\ graph\ a\ stella)$  Consideriamo il caso di un grafo a stella con un vertice centrale e M archi con tale vertice incidente (l'altro vertice di ogni lato ha valenza 1). Per ogni lato risolviamo il problema, orientiamo tutti i lati in modo tale che  $x_i = L_i$  corrisponde al vertice centrale,

$$-\frac{\partial^2 f_j}{\partial x_j^2} = \lambda f(x_j), \quad x_j \in (0, L_j).$$

La soluzione per ogni arco può essere scritta come (sappiamo che  $\lambda > 0$ ),

$$f_j = A_j \cos(\sqrt{\lambda}x_j) + B_j \sin(\sqrt{\lambda}x_j).$$

Imponendo la condizione di Neumann nel vertice a valenza 1,  $x_i = 0$ , si ottiene  $B_i = 0$  per ogni j = 1, ..., M.

Per la condizione di Neumann-Kirchoff nel nodo centrale si ha invece

$$A_1 \cos(\sqrt{\lambda}L_1) = A_2 \cos(\sqrt{\lambda}L_2) = \ldots = C,$$
 
$$\sum_{j=1}^M A_j \sqrt{\lambda} \sin(\sqrt{\lambda}L_j) = 0,$$

con C costante non nulla ( $^{13}$ ). Dividendo la seconda equazione per C, si ha che  $\lambda$  è autovalore se soddisfa la seguente equazione non lineare,

$$F(\lambda) = \sum_{j=1}^{M} \tan(\sqrt{\lambda} L_j) = 0.$$

<sup>(13)</sup> Il caso C = 0 potrebbe essere trattato a parte.

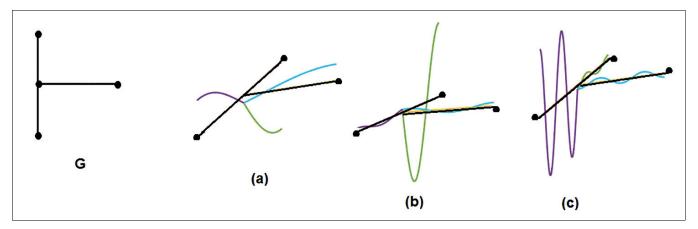


FIGURA 17 - Esempio di autofunzioni per un quantum graph <math>G nel caso di grafo a stella con tre archi, in (a), (b), (c) rappresentiamo tre autofunzioni per valori crescenti del corrispondente autovalore.

In Figura 17 si mostra un esempio numerico con un grafo a stella con tre lati di lunghezza rispettivamente,  $L_1 = \sqrt{3}$ ,  $L_2 = \sqrt{2}$  e  $L_3 = 2$ . Nella medesima figura si sono rappresentate anche tre autofunzioni che hanno la medesima frequenza ma ampiezza differente a causa della lunghezza differente.

Che cosa succede per il nostro tormentone: posso identificare il grafo a meno di isomorfismi a partire dallo spettro? In questo caso occorre ricostruire le connessioni e anche la lunghezza degli archi. In questo caso vi è sostanzialmente un risultato positivo [25]: vogliamo chiudere in bellezza, questa volta il grafo lo si può sentire!

Teorema 4.2. – (P. Kurasov, M. Nowaczyk) Lo spettro dell'operatore di Laplace su un grafo metrico determina univocamente il grafo se:

- (i) nessun vertice ha grado 2, il grafo è finito e connesso;
- (ii) le lunghezze degli archi sono razionalmente indipendenti (cioè  $L/L' \notin Q$  per ogni coppia di lunghezze L e L').

Un risultato analogo vale anche per l'operatore di Schrödinger come dimostrato da Gutkin e Smilansky [18].

Nel caso del problema del "tamburo" avevamo un numero infinito di autovalori per cui è naturale la curiosità riguardo al comportamento asintotico di tali autovalori. Una prima questione era già stata posta dal fisico olandese H. A. Lorentz in una conferenza nel 1910. Lorentz, parlando della distribuzione delle alte frequenze in un problema relativo

ad onde elettromagnetiche, si domandava se anche per un sistema meccanico vibrante il numero di alte frequenze in un certo intervallo è indipendente dalla forma dell'oggetto ma dipende solo dal suo volume. Nel caso di una membrana vibrante (il nostro vecchio tamburo)  $\Omega$  il problema riguarda gli autovalori del laplaciano, con condizioni al bordo nulle, ed in particolare, detto  $N(\lambda) = \sharp \{\lambda_k \ : \ \lambda_k < \lambda\}$  il numero di autovalori minori di un dato valore  $\lambda$ , la domanda di Lorenz diventa,

$$N(\lambda) \sim C \cdot area(\Omega) \cdot \lambda \text{ per } \lambda \to \infty$$

con C costante indipendente da  $\Omega$  e  $\lambda$ . Hilbert, presente alla conferenza di Lorentz, avrebbe dichiarato che "non avrebbe visto una dimostrazione di questo teorema durante la sua vita". Ma uno studente di dottorato dell'epoca, Hermann Weyl, anche lui presente (piuttosto affollata la conferenza) provò la congettura quattro mesi più tardi nel febbraio del 1911 [34, 35]. Dai lavori di Weyl si ha che, nel caso d-dimensionale,

$$N(\lambda) \sim rac{\omega_d \, m_d(\Omega)}{\left(2\pi
ight)^d} \lambda^{d/2} \, \operatorname{per} \lambda 
ightarrow \infty$$

dove  $m_d(\Omega)$  è la misura di Lebesgue di  $\Omega$  (area in due dimensioni e volume nel caso tridimensionale) e  $\omega_d$  è il volume della palla unitaria in dimensione d (già incontrato in precedenza). Weyl ha anche congetturato la forma del secondo termine dello sviluppo asintotico con condizioni, rispettivamente, di Dirichlet e Neumann. Dopo Weyl vari matematici si sono cimentati con la sua congettura, diversi importanti passi sono stati fatti da Richard Courant, Mikhail

Birman, Elliott Lieb, Barry Simon e Torsten Carleman, Boris Levitan, V. G. Avakumovič, Lars Hörmander e Victor Guillemin. Finalmente V. Y. Ivrii ha provato la congettura di Weyl nel caso di un sistema ellittico su una varietà senza bordo [21, 22]. Per un quantum graph non abbiamo volumi o aree ma abbiamo la lunghezza totale del grafo  $L = \sum_i L_i$ . Vale allora la seguente forma della legge di Weyl.

Teorema 4.3. – Sia G un grafo metrico con il laplaciano e condizione nei vertici di tipo Neumann (quantum graph), lunghezza totale L e con autovalori  $\{\lambda_k\}_k$ , sia

$$N(s) = \sharp \{\lambda_k : \lambda_k \le s^2\}$$

allora

$$N(s) \sim \frac{L}{\pi} s \text{ per } s \to \infty.$$

Ancora per un quantum graph abbiamo risultati simili a quelli del ... tamburo.

### RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [1] G. ALETTI, D. LONARDONI, G. NALDI, T. NIEUS, From dynamics to links: a sparse reconstruction of the topology of a neural network, Commun. Appl. Ind. Math., Vol. 10 N. 2 2019, 2-11
- [2] M. Benzi, E. Estrada, C. Klymko, Ranking Hubs and Authorities Using Matrix Functions, Linear Algebra and its Applications, 438 2013, 2447-2474.
- [3] G. Berkolaiko, P. Kuchment Introduction to Quantum Graphs, AMS Mathematical Surveys and Monographs. Providence RI, 2013.
- [4] N.L. BIGGS, E.K. LLOYD, R.J. WILSON Graph Theory 1736-1936. Oxford University Press, New York, 1998.
- [5] P. BLANCHARD, D. VOLCHENKOV Random Walks and Diffusions on Graphs and Databases – An Introduction. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011.
- [6] F. CAVARRETTA, G. NALDI, Mathematical study of a nonlinear neuron model with active dendrites, AIMS Mathematics 4 (3), 831-846.
- [7] FAN R. K. CHUNG Spectral Graph Theory. AMS CBMS Regional Conference Series in Mathematics Vol. 92, 1997.
- [8] T. H. CORMEN, C. E. LEISERSON, R. L. RIVEST, C. STEIN Introduzione agli algoritmi e strutture dati. McGraw-Hill Education, 2010.
- [9] D. M. CVETKOVIĆ, P. ROWLINSON, S. SIMIĆ, An Introduction to the Theory of Graph Spectra, London Mathematical Society, Cambridge University Press, 2010.

- [10] E.R. VAN DAM, W.H. HAEMERS, Which graphs are determined by their spectrum?, Linear Algebra Appl. 373 2003, 241-272.
- [11] E.R. VAN DAM, W.H. HAEMERS, Developments on spectral characterizations of graphs, Discrete Mathematics 309 2009, 576-586.
- [12] R. DIESTEL, *Graph Theory*. Springer-Verlag, Heidelberg Graduate Texts in Mathematics, Volume 173, 2016.
- [13] E. ESTRADA, N. HATANO, M. BENZI, The Physics of Communicability in Complex Networks, Physics Reports, 514 2012, 89-119.
- [14] L. Euler, Solutio problematis ad geometriam situs pertinentis, Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae 8, 1741, 128-140.
- [15] R. Ghrist Elementary Applied Topology, ed. 1.0, Createspace, 2014.
- [16] C. GORDON, D. WEBB, S. WOLPERT, Isospectral plane domains and surfaces via Riemannian orbifolds, Invent. Math., Vol. 110 n. 1, 1992, 1-22
- [17] L. J. GRADY, J. R. POLIMENI Discrete Calculus, Applied Analysis on Graphs for Computational Science, Springer-Verlag London, 2010.
- [18] B. GUTKIN, U. SMILANSKY, Can one hear the shape of a graph?, J. Phys. A: Math. Gen. Vol. 34 2001, 6061.
- [19] K. M. Hall, An r-dimensional quadratic placement algorithm. Management Science, 17 1970, 219-229.
- [20] V. ISAKOV Inverse problems for partial differential equations. Springer- Verlag, New York, 1998.
- [21] V. Y. IVRII, Second term of the spectral asymptotic expansion of the Laplace-Beltrami operator on manifolds with boundary. Funct. Anal. Appl., 14(2) (1980), 98-106.
- [22] V. IVRII, Accurate spectral asymptotics for elliptic operators that act in vector bundles. Funct. Anal. Appl., 16(2) (1982), 101-108.
- [23] M. KAC, Can one hear the shape of a drum?, Amer. Math. Monthly 73 (1966), 1-23.
- [24] M. KNESER, Lineare Relationen Zwischen quadratischer Formen, Math. Ann., 168 (1967), 31-39.
- [25] P. Kurasov, M. Nowaczyk, Inverse Spectral Problem for Quantum Graphs, J. Phys. A: Math. Gen. Vol. 38 2005, 4901-15.
- [26] M. LONDON, M. HUSSER, Dendritic computation. Annu. Rev. Neurosci. Vol. 28 2005, 503-532.
- [27] J. MILNOR, Eigenvalues of the Laplace operator of certain manifold, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A., 51 (1964), 542.
- [28] O. Ore I Grafi e le loro applicazioni. Zanichelli, Bologna,
- [29] A. Pleijel, Propriétés asymptotiques des fonctions fondamentales du problème des vibrations dans un corps élastique, Arkiv f. Mat. Astron. o. Fysik, 26 (1939), 1-9.
- [30] D. A. SPIELMAN, Graphs, vectors, and matrices, Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.), Vol. 54 n. 1, 2017, 45-61.
- [31] T. Sunada, Riemannian coverings and isospectral manifolds, Ann. of Math. (2), Vol. 121 n. 1, 1985, 169-186.
- [32] W. T. TUTTE, How to draw a graph, Proc. London Math. Soc. (3) 13 1963, 743-767.

- [33] Marie-France Vignéras, Varietés riemanniennes isospectrales et non isometriques, Ann. of Math., 91 (1980), 21-32.
- [34] H. WEYL, Über die asymptotische verteilung der Eigenwerte, Gott Nach. (1911), 110-117.
- [35] H. Weyl, Das asymptotische Verteilungsgesetz der Eigenwerte linearer partieller differentialgleichungen, Math. Ann., 71 (1912), 441-479.
- [36] S. ZELDITCH, S., Spectral determination of analytic biaxisymmetric plane domains, Geom. Funct. Anal., Vol. 10 n.3, 2000, 628-677.
- [37] S. ZELDITCH, Eigenfunctions of the Laplacian on a Riemannian manifold. CBMS Regional Conference Series in Mathematics, Vol. 125, AMS, Providence, 2017.



Giovanni Nald

Professore ordinario di Analisi Numerica presso l'Università degli studi di Milano dove è coordinatore del Centro di ricerche ADAMSS (Advanced Applied Mathematical and Statistical Sciences). È stato coordinatore prima del Dottorato di Ricerca in Matematica Computazionale e Ricerca Operativa e poi del Dottorato di Ricerca in Matematica e Statistica per le Scienze Computazionali. Fa parte del Consiglio scientifico del Center for Modelling Computing and Simulation, Università di Ferrara, e del consiglio scientifico di MATEMATITA, Centro Interuniversitario di Ricerca per la Comunicazione e l'Apprendimento Informale della Matematica. I suoi principali argomenti di ricerca riguardano l'analisi numerica di equazioni differenziali alle derivate parziali, il Calcolo Scientifico, i modelli differenziali nelle Scienze applicate, l'analisi delle immagini Biomediche, i problemi ed i modelli multiscala. Ha scritto una dozzina di articoli divulgativi e diversi libri di testo.