

Università di Pisa

Dipartimento di Matematica
Corso di Laurea Triennale in Matematica

TESI DI LAUREA TRIENNALE

Misure di centralità in grafi:
Dimostrazione della congettura di Estrada e
interlacciamento di misure

Relatore
Prof. Michele Benzi

Candidato
Nikita Deniskin

Anno Accademico 2019/2020

Indice

Introduzione	2
1 Richiami su grafi e funzioni di matrice	4
1.1 Grafi e matrici	4
1.2 Teorema di Perron-Frobenius	8
1.3 Rappresentazione spettrale	12
1.4 Funzioni di matrice	14
2 Misure di centralità	19
2.1 Esempi e confronto tra diverse misure	19
2.2 Comportamento limite di misure con parametro	28
3 Uguaglianza e interlacciamento di misure	37
3.1 Simmetrie dei grafi	37
3.2 Vertici cospettrali e interlacciamenti	44
3.3 Dimostrazione della congettura di Estrada	53
Considerazioni conclusive	60
Bibliografia	61

Introduzione

Una misura di centralità è una funzione che associa un peso a ogni vertice di un grafo per determinare la sua “importanza”. Molte reti e strutture che ci circondano possono essere rappresentate da grafi, per esempio: pagine web e Internet, collegamenti stradali, collaborazioni tra persone in ricerca, collegamenti di neuroni nel cervello, infrastruttura energetica o di distribuzioni di beni, modelli epidemiologici, relazioni preda-predatore in una nicchia ecologica. In tali ambiti sorge spesso la necessità di individuare i nodi più importanti, che ha spinto alla nascita di diverse misure di centralità. Diventa dunque interessante studiare queste misure dal punto di vista matematico, capire quali utilizzare in base al problema analizzato, in modo da poterle applicare nelle altre scienze.

Lo scopo di questa trattazione è presentare alcune misure di centralità basate sull'algebra lineare e sulla matrice di adiacenza del grafo, in particolare la *Resolvent Subgraph Centrality* e l'*Exponential Subgraph Centrality*, per le quali mostreremo alcuni risultati teorici originali. L'obiettivo che ci poniamo è di capire in quali casi una misura di centralità può assegnare lo stesso peso a due vertici “diversi”. Come verrà spiegato più avanti, per calcolare la Resolvent e l'Exponential Subgraph Centrality viene scelto un parametro β , poi per ogni vertice v si conta il numero di cammini chiusi lunghi k con origine e fine in v . Il valore associato a v è una somma pesata del numero di tali cammini; il peso dipende da k e da β . Valori diversi di β , in generale, porteranno a risultati diversi nella valutazione dell'importanza relativa di almeno una parte dei nodi del grafo.

Nel capitolo 1 faremo dei richiami su grafi e proprietà matriciali collegate, teorema di Perron-Frobenius, funzioni di matrice e rappresentazione tramite proiettori spettrali. Nel capitolo 2.1 illustreremo alcune delle misure di centralità più usate e le metteremo a confronto.

Nel capitolo 2.2 mostreremo un risultato di Benzi e Klymko del 2015 [6] che permette di stabilire il ranking ottenuto da queste due misure per valori limite di β : per $\beta \rightarrow 0$ le misure si comportano come la *Degree Centrality*, mentre per β grande si comportano come l'*Eigenvector Centrality*.

Nel capitolo 3.1 mostreremo alcune classi di grafi con notevoli proprietà di simmetria, tra cui i grafi transitivi per vertici e i grafi regolari. Vedremo che alcune misure di centralità sono più adatte di altre per poter distinguere vertici in grafi di questo tipo. Sono importanti le seguenti due definizioni:

Definizione. Un grafo \mathcal{G} è *walk-regular* se, chiamata A la sua matrice di adiacenza, A^k ha diagonale costante per ogni $k \geq 0$.

Definizione. Due vertici u, v di un grafo \mathcal{G} si dicono *cospettrali* se $[A^k]_{uu} = [A^k]_{vv}$ per $k \geq 0$, dove A è la matrice di adiacenza del grafo.

Nel capitolo 3.2 vedremo che misure basate su funzioni di matrice (come la Resolvent e Exponential Subgraph Centrality), per tutti i valori dei parametri assegnano lo stesso valore a due vertici cospettrali. Ci sono esempi in cui due vertici non cospettrali hanno la stessa centralità per alcuni valori particolari di β : chiameremo tale fenomeno *interlacciamento*. Dimostriamo che il numero di interlacciamenti è limitato dall'alto dal numero di autovalori distinti di A .

Infine nel capitolo 3.3 dimostreremo una congettura proposta da Estrada nel 2005 [20] proposta successivamente in una forma più generale da Kloster, Král, Sullivan nel 2018 [36]. Quest'ultima afferma che:

Congettura. Sia \mathcal{G} un grafo e β un numero razionale. Se l'Exponential Subgraph Centrality con parametro β è uguale per tutti i vertici, allora il grafo è walk-regular.

Utilizzando il Teorema di Lindemann-Weierstrass (risultato molto importante nella Teoria dei Numeri Trascendenti), dimostreremo questa congettura in una versione più forte:

Teorema. Sia \mathcal{G} un grafo, u, v due vertici e β un numero algebrico. Se l'Exponential Subgraph Centrality con parametro β assegna lo stesso peso a u e v , allora i due vertici sono cospettrali.

Questo implica la congettura in quanto un grafo è walk-regular se e solo se tutti i vertici sono cospettrali tra di loro.

Capitolo 1

Richiami su grafi e funzioni di matrice

1.1 Grafi e matrici

Definizione 1.1 (Grafo orientato). Un *grafo orientato* $\mathcal{G} = (V, E)$ è dato da un insieme di vertici (detti anche nodi) V , e da un insieme di archi $E \subseteq V \times V$.

Ogni arco di \mathcal{G} è dunque una coppia ordinata di nodi (i, j) , e rappresenta un collegamento dal vertice i al vertice j . Tuttavia se $(i, j) \in E$, questo non implica che $(j, i) \in E$: se posso percorrere un arco, non è detto che si possa tornare indietro.

I grafi in cui è sempre possibile percorrere un arco in entrambe le direzioni si chiamano *grafi non orientati*. Quando verranno trattati grafi non orientati, diremo “arco non orientato” per indicare entrambi gli archi (orientati) (i, j) e (j, i) .

Nella definizione data è possibile che un arco colleghi un vertice a se stesso, rappresentato da (i, i) ; un tale arco viene detto *cappio*.

Definizione 1.2 (Grafo semplice). Un grafo $\mathcal{G} = (V, E)$ è *semplice* se è non orientato e non ci sono cappi.

La teoria dei grafi si è sviluppata originariamente per grafi semplici; per essi inoltre è possibile ottenere risultati più forti che per grafi orientati.

Introduciamo ora una generalizzazione di grafo orientato, in cui ad ogni arco viene associato un peso:

Definizione 1.3 (Grafo pesato). Un grafo *pesato* $\mathcal{G} = (V, E, \omega)$ con V, E definiti come sopra e $\omega : E \rightarrow \mathbb{C}$ è una funzione peso, che associa a ogni arco del grafo un numero complesso.

Il codominio di ω può essere scelto in modo diverso (spesso è \mathbb{R} o \mathbb{R}^+), un tale grafo verrà comunque detto pesato. Inoltre da ogni grafo pesato possiamo ottenere un grafo orientato dimenticandoci dei pesi associati agli archi.

In questa trattazione V è sempre un insieme finito, quindi senza perdita di generalità possiamo prendere $V = \{1, 2, 3, \dots, n\}$, in modo che i vertici siano rappresentati da numeri interi tra 1 e n .

I grafi semplici sono un sottoinsieme dei grafi orientati, che a loro volta sono un sottoinsieme dei grafi pesati. Useremo il termine “grafo” generalmente per indicare un grafo orientato, specificando altri aggettivi (che semplicemente aggiungono restrizioni) se necessario.

Un modo comodo di rappresentare un grafo è il seguente:

Definizione 1.4 (Matrice di adiacenza). Ad ogni grafo $\mathcal{G} = (V, E)$, con $|V| = n$, associamo una matrice A di dimensione $n \times n$, tale che:

$$\begin{cases} A_{ij} = 1 & \text{se l'arco } (i, j) \in E; \\ A_{ij} = 0 & \text{se l'arco } (i, j) \notin E. \end{cases}$$

Per un grafo pesato $\mathcal{G} = (V, E, \omega)$, in ogni entrata i, j della matrice inseriamo il peso dell'arco (i, j) : $A_{ij} = \omega((i, j))$; se invece $(i, j) \notin E$, allora $A_{ij} = 0$ come prima.

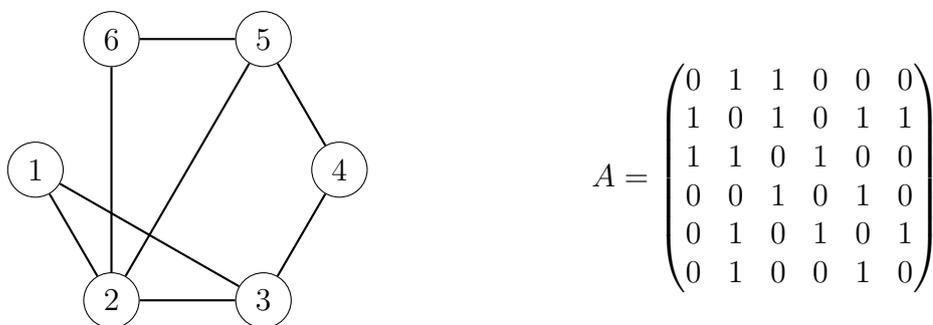


Figura 1: Grafo semplice e matrice di adiacenza.

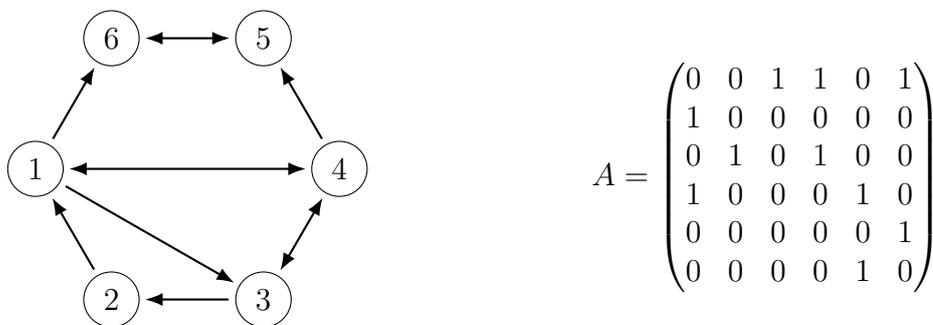


Figura 2: Grafo orientato e matrice di adiacenza.

Notiamo che un grafo \mathcal{G} è non orientato se e solo se A è simmetrica. Per un grafo orientato con A non simmetrica, si ha che A^T è la matrice di adiacenza di un grafo ottenuto da \mathcal{G} invertendo l'orientazione di tutti gli archi.

Per brevità di notazione, diremo “Sia (\mathcal{G}, A) un grafo semplice/orientato/pesato” per indicare \mathcal{G} un grafo semplice/orientato/pesato e A la sua matrice di adiacenza.

Definizione 1.5 (Cammino). Dato un grafo \mathcal{G} , un *cammino* è una sequenza di vertici i_0, i_1, \dots, i_k tale che $(i_0, i_1), (i_1, i_2), \dots, (i_{k-1}, i_k)$ siano tutti archi in E . Non richiediamo che i vertici i_j siano distinti tra di loro. L'intero k viene detta la *lunghezza* del cammino.

Un cammino è *chiuso* se $i_0 = i_k$, cioè vertice iniziale e finale coincidono. In inglese si chiamano *walk* e *closed walk*, rispettivamente.

Un grafo semplice è detto *connesso* se per ogni coppia di vertici i, j , esiste un cammino che li congiunge. Un grafo orientato è detto *fortemente connesso* se per ogni coppia di vertici i, j , esiste sia un cammino da i a j che uno da j ad i . Una *componente connessa* è un insieme di vertici massimale tale che da ogni vertice si possa raggiungere qualsiasi altro dell'insieme. Un grafo orientato si dice *sconnesso* se ha almeno due componenti connesse. In un grafo semplice non è possibile passare da una componente connessa all'altra, mentre in un grafo orientato ci potrebbero essere degli archi in una sola direzione tra due componenti: per esempio si può andare dalla prima alla seconda, ma non si può tornare indietro.

La matrice di adiacenza non è utile solo come modo visivo di rappresentare il grafo, ma si possono ottenere informazioni sul grafo guardando alcune proprietà della suddetta matrice.

Proposizione 1.1. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo orientato. Allora il numero di cammini dal vertice i al vertice j lunghi k è dato dall'entrata (i, j) di A^k , che denoteremo come $[A^k]_{ij}$.

Dimostrazione. Per $k = 1$ è la definizione di matrice di adiacenza, per $k > 1$ si procede per induzione su k . \square

Questo risultato si estende ai grafi pesati, definendo il peso di un cammino il prodotto dei pesi degli archi che lo compongono. Allora $[A^k]_{ij}$ è la somma dei pesi di tutti i cammini lunghi k tra i e j .

Definizione 1.6 (Grado di un vertice). Sia \mathcal{G} un grafo semplice e v un vertice. Il *grado* di v è il numero di archi che entra (o esce) in v e viene indicato con $d(v)$ o $\deg(v)$. Per un grafo orientato, il grado di uscita (*out-degree*) $d_{out}(v)$ è il numero di archi uscenti da v , mentre il grado di entrata (*in-degree*) $d_{in}(v)$ è il numero di archi entranti in v .

Per un grafo semplice i tre gradi coincidono: $d_{out}(v) = d_{in}(v) = \deg(v)$; inoltre si può utilizzare la matrice di adiacenza per calcolare il grado di un vertice:

Proposizione 1.2. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo orientato, e sia $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)^\top$, il vettore formato da n uno. Per un qualsiasi vertice i , $[A\mathbf{1}]_i = d_{out}(i)$, $[\mathbf{1}^\top A]_i = d_{in}(i)$. Se \mathcal{G} è un grafo semplice, allora $\deg(i) = [A^2]_{ii}$.

Dimostrazione. Il grado di uscita o di entrata è la somma dell' i -esima riga o colonna, rispettivamente; si ottengono dunque calcolando $A\mathbf{1}$ oppure $\mathbf{1}^\top A$.

Se il grafo è semplice, allora il numero di cammini chiusi di lunghezza 2 che partono da i è uguale al grado di i : l'unica possibilità è di percorrere un arco e tornare subito indietro. Per la proposizione 1.1, il numero di tali cammini è proprio $[A^2]_{ii}$. \square

Osserviamo che per un grafo orientato, $[A^2]_{ii}$ non può essere ricondotto né al grado di entrata né a quello di uscita. Infatti $[A^2]_{ii}$ conta i percorsi di lunghezza 2, ovvero il numero di vertici j per cui c'è sia un arco $i \rightarrow j$ che uno $j \rightarrow i$. Questa quantità è

sicuramente minore di $d_{out}(i), d_{in}(i)$, però può essere piccola pure se $d_{out}(i), d_{in}(i)$ sono grandi: per esempio, se l'insieme dei vertici che puntano a i e quello dei vertici puntati da i sono disgiunti, allora $[A^2]_{ii} = 0$.

Oltre alla relazione tra A^k e il numero di cammini chiusi, ci sono altre caratteristiche “matriciali” di A che permettono di dare informazioni sulla struttura del grafo. Un esempio lampante è lo spettro di A , e il polinomio caratteristico che vi è legato. Per approfondimenti si veda [10, 26].

Definizione 1.7 (Polinomio caratteristico). Dato un grafo orientato (\mathcal{G}, A) , il suo polinomio caratteristico è il polinomio caratteristico di A :

$$P_A(x) = \det(xI - A)$$

Osserviamo che se A è triangolare a blocchi, allora il polinomio caratteristico $P_A(x)$ si fattorizza seguendo gli stessi blocchi. A ciascun blocco sulla diagonale corrisponde una componente connessa del grafo, dunque otteniamo la seguente proposizione:

Proposizione 1.3. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo orientato con componenti connesse $\mathcal{G}_1, \dots, \mathcal{G}_c$. Allora A è triangolare a blocchi, i blocchi sulla diagonale sono A_1, \dots, A_c , e il polinomio caratteristico di \mathcal{G} è il prodotto dei polinomi caratteristici delle componenti connesse.

Dati due vertici i, j , la *distanza* tra i e j è la lunghezza del cammino minimo da i a j . Il *diametro* δ di un grafo è la massima distanza tra tutte le coppie di vertici; per convenzione, un grafo non fortemente connesso ha diametro infinito. In particolare, se il grafo è fortemente connesso, ogni vertice è raggiungibile da qualsiasi altro con un cammino lungo δ , ma non con uno lungo $\delta - 1$. Mostriamo un altro legame tra grafo e matrice di adiacenza:

Proposizione 1.4. Sia (\mathcal{G}, A) grafo orientato fortemente connesso di diametro δ . Allora il polinomio minimo di A ha grado $\geq \delta + 1$. Se \mathcal{G} è semplice, ciò implica che A ha almeno $\delta + 1$ autovalori distinti.

Dimostrazione. Per la definizione di diametro, esistono vertici i, j tali che $[A^k]_{ij} = 0$ per $0 \leq k \leq \delta - 1$ e $[A^\delta]_{ij} \geq 1$. Dunque A^δ non è esprimibile come combinazione lineare di potenze più piccole, perciò il polinomio minimo ha grado almeno $\delta + 1$. \square

Corollario 1.1. Se A ha d autovalori distinti, si può stimare il diametro come: $\delta < d$.

Nel corso della trattazione vedremo molti risultati per grafi derivanti dalla loro matrice di adiacenza. In tali casi spesso non è rilevante se le entrate di A siano in $\{0, 1\}$ o meno, bensì se A sia simmetrica o non, complessa o reale o non negativa, diagonalizzabile o non. Per evitare di appesantire il testo, indicheremo principalmente risultati per grafi semplici o orientati; nel caso in cui una proposizione si può facilmente generalizzare al caso di un grafo pesato, indicheremo ciò tra parentesi quadre.

Alcuni dei risultati che mostreremo sono validi per un grafo orientato (\mathcal{G}, A) con A diagonalizzabile. Osserviamo che i grafi semplici rientrano sempre in tale categoria,

poiché se A è simmetrica per il teorema spettrale è diagonalizzabile con una matrice ortogonale: $A = QDQ^\top$.

Si tenga a mente che la maggior parte delle proposizioni sono interessanti per grafi semplici, e conviene pensarle in questo modo. Molte dimostrazioni sono valide per categorie più ampie di grafi, per cui formuleremo proposizioni più generali, dove possibile.

1.2 Teorema di Perron-Frobenius

Introduciamo ora il teorema di Perron-Frobenius, che determina alcune proprietà dello spettro di una matrice con tutte le entrate maggiori o uguali a 0.

Nel 1907 Perron [40] ha dimostrato il teorema per matrici strettamente positive. Successivamente nel 1912 Frobenius [23] l'ha generalizzato per matrici non-negative, per le quali il risultato è più debole rispetto al teorema di Perron. Tuttavia se si assume che la matrice sia irriducibile o primitiva (termini che definiremo tra poco), allora si riottengono alcuni risultati del teorema di Perron. Per le dimostrazioni dei teoremi presenti in questa sezione, rimandiamo a [30], [38].

Definizione 1.8 (Grafo associato ad una matrice). Data A una matrice di dimensioni $n \times n$, sia \mathcal{G} il grafo definito sui vertici $V = \{1, 2, \dots, n\}$ tale che c'è un arco da i a j se e solo se $A_{ij} \neq 0$.

Questa è una definizione speculare a 1.4, e se A è la matrice di adiacenza di un grafo \mathcal{G} , allora il grafo associato ad A è proprio \mathcal{G} .

Si osservi che se \mathcal{G} è un grafo pesato, allora passando alla matrice di adiacenza A e poi tornando indietro, si ottiene un grafo non pesato con gli stessi archi di \mathcal{G} . Tuttavia si può modificare la procedura associando all'arco (i, j) il peso dato da A_{ij} , a seconda se si vuole avere un grafo pesato o meno.

Osserviamo infine che se A è simmetrica allora \mathcal{G} è non orientato.

La dimostrazione originale di Frobenius utilizzava proprietà del polinomio caratteristico della matrice in questione, tuttavia successivamente sono state trovate dimostrazioni che utilizzano il grafo associato alla matrice. In questo modo il collegamento tra grafi e matrici diventa bidirezionale, potendo utilizzare teoria dell'uno per dimostrare risultati dell'altro.

Definizione 1.9 (Matrice irriducibile). Una matrice A è *riducibile* se esiste una matrice di permutazione P tale che:

$$PAP^\top = \begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ 0 & A_{2,2} \end{pmatrix}$$

dove $A_{1,1}$ e $A_{2,2}$ sono matrici quadrate. Se A non è riducibile, allora si dice che è *irriducibile*.

Notiamo che trovare una matrice di permutazione che renda A nella forma descritta sopra, equivale a trovare una partizione dei vertici di \mathcal{G} in modo che non si possa andare

dal secondo gruppo al primo (mentre se si può andare dal primo al secondo o meno dipende da $A_{1,2}$). Questo ci porta al seguente risultato:

Proposizione 1.5. Una matrice è irriducibile se e solo se il suo grafo associato è fortemente connesso.

È possibile caratterizzare le matrici irriducibili senza passare dal grafo associato:

Proposizione 1.6. Sia A matrice $n \times n$. A è irriducibile se e solo se $(I + A)^{n-1}$ è una matrice strettamente positiva.

Per un grafo orientato fortemente connesso, sia k il massimo comun divisore delle lunghezze di tutti i cammini chiusi. Se $k = 1$, il grafo e la relativa matrice si dicono *primitivi*, mentre se $k > 1$ si dicono *imprimitivi di indice k* .

Nel secondo caso, si può dimostrare che esiste una partizione di V in k insiemi V_1, \dots, V_k , in modo che ogni arco uscente da un vertice di V_i vada a finire in V_{i+1} .

Osserviamo che $k \leq n$, in quanto il cammino chiuso di lunghezza minima passa al massimo una volta per un vertice. È possibile ottenere $k = n$ con \mathcal{G} ciclo orientato, ovvero tutti gli archi sono $E = \{(1, 2), (2, 3), \dots, (n-1, n), (n, 1)\}$.

Se il grafo è semplice (e connesso), allora potendo percorrere ogni arco avanti e indietro ci sono tanti cammini chiusi di lunghezza 2. Questo implica che $k|2$, ovvero necessariamente $k = 1, 2$. Nel caso $k = 2$, per quanto detto sopra, è possibile dividere i vertici in due insiemi, in modo che gli archi colleghino solo vertici di insiemi diversi e mai due dello stesso insieme. Un tale grafo viene detto *bipartito*. Riassumiamo quanto detto nella seguente proposizione:

Proposizione 1.7. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo semplice connesso. Allora o A è primitiva ($k = 1$), o \mathcal{G} è bipartito ($k = 2$), e queste possibilità sono mutualmente esclusive.

In maniera simile a quanto visto per matrici irriducibili, è possibile caratterizzare le matrici primitive nel seguente modo:

Proposizione 1.8. Una matrice A è primitiva se e solo se esiste un intero $m > 0$ tale che A^m è strettamente positiva.

È possibile trovare un limite dall'alto per m ; questo offre un algoritmo decidibile per stabilire se una matrice è primitiva. Inoltre questo limite è ottimale, cioè è sempre raggiungibile. Per la storia di questa proposizione e alcune precedenti rimandiamo a [33, 45, 47].

Proposizione 1.9 (Indice di Wielandt). Se A di dimensione $n \times n$ è primitiva, allora il minimo m per cui $A^m > 0$ soddisfa la disuguaglianza $m \leq (n-1)^2 + 1$.

Siamo pronti ora ad enunciare il Teorema di Perron-Frobenius.

Teorema 1.1 (Perron-Frobenius). Sia A una matrice $n \times n$ con tutte le entrate reali non-negative. Sia ρ il raggio spettrale di A , ovvero il massimo dei valori assoluti degli autovalori di A . Si ha allora:

1. Se A ha tutte le entrate strettamente positive, oppure se alcune sono nulle ed A è una matrice primitiva:
 - ρ è un autovalore di A .
 - ρ è un autovalore semplice.
 - Per ogni altro autovalore $\lambda \neq \rho$, si ha che $|\lambda| < \rho$.
 - L'autospazio relativo a ρ (che ha dimensione 1) è generato da un vettore x con tutte le componenti strettamente positive. x viene detto *autovettore di Perron*.
 - Sia u un qualsiasi altro autovettore con tutte le componenti positive. Allora necessariamente u è un multiplo di x .
 - Sia $B = \frac{1}{\rho}A$, allora esiste il limite $\lim_{m \rightarrow \infty} B^m = xy^\top$, dove x, y^\top sono gli autovettori destro e sinistro relativi a ρ per A .
2. Se A è irriducibile, con indice di imprimitività $k > 1$; si chiami $\omega = e^{\frac{2\pi i}{k}}$ la radice k -esima dell'unità, allora:
 - ρ è un autovalore di A .
 - ρ è un autovalore semplice.
 - Se λ è un autovalore di A , anche $\omega\lambda, \omega^2\lambda, \dots, \omega^{k-1}\lambda$ sono autovalori di A con la stessa molteplicità.
 - Se λ è un autovalore di modulo massimo ($|\lambda| = \rho$), allora necessariamente $\lambda = \omega^j\rho$.
 - L'autospazio relativo a ρ (di dimensione 1) è generato da un vettore x con tutte le componenti strettamente positive. Anche in questo caso x viene detto *autovettore di Perron*.
 - Sia u un qualsiasi altro autovettore con tutte le componenti positive. Allora necessariamente u è un multiplo di x .
3. Se A è riducibile:
 - ρ è autovalore di A .
 - Esiste un autovettore x per ρ , con tutte le componenti non-negative.

Enunciamo ora alcuni risultati utili, legati alla teoria di Perron-Frobenius:

Teorema 1.2. Sia A una matrice con entrate non-negative. Sia $R_i = [A\mathbf{1}]_i$ la somma dell' i -esima riga di A , e $C_j = [\mathbf{1}^\top A]_j$ la somma della j -esima colonna. Allora si ha:

$$\min_i R_i \leq \rho \leq \max_i R_i$$

$$\min_j C_j \leq \rho \leq \max_j C_j$$

Corollario 1.2. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo semplice. Allora il raggio spettrale di A soddisfa:

$$\min_i \deg(i) \leq \rho \leq \max_i \deg(i)$$

Se \mathcal{G} è orientato, allora si ha:

$$\min_i d_{out}(i) \leq \rho \leq \max_i d_{out}(i) \quad \text{e} \quad \min_i d_{in}(i) \leq \rho \leq \max_i d_{in}(i)$$

In particolare se \mathcal{G} è connesso, allora $\rho \geq 1$.

Proposizione 1.10. Siano A, B matrici quadrate della stessa dimensione, entrambe con tutte le entrate non-negative e $A \leq B$. Allora si ha che $\rho(A) \leq \rho(B)$. Inoltre se B è irriducibile e $A \neq B$, allora necessariamente $\rho(A) < \rho(B)$.

Osserviamo che se B è irriducibile, A può anche non esserlo e la seconda proposizione rimane vera. Se A è irriducibile e $A \leq B$, allora anche B è irriducibile e quindi la proposizione rimane valida.

Abbiamo visto che matrici irriducibili corrispondono a grafi fortemente connessi e viceversa, dunque la proposizione 1.10 può essere applicata ai grafi nel seguente modo:

Corollario 1.3. Sia \mathcal{G} un grafo orientato fortemente connesso, e sia \mathcal{G}' un grafo ottenuto da \mathcal{G} togliendo alcuni archi. Chiamate A, A' le relative matrici di adiacenza, si ha:

$$\rho(A') < \rho(A)$$

In particolare se per i vertice, si rimuovono tutti gli archi con un estremo in i , \mathcal{G}' si può vedere come \mathcal{G} a cui è stato tolto il vertice i , e il corollario rimane vero.

Dato (\mathcal{G}, A) grafo fortemente connesso, il suo autovettore di Perron x ha tutte le componenti positive. Questo svolge un ruolo cruciale nella definizione di misure di centralità come la *Eigenvector Centrality*, che assegna al vertice i l'entrata x_i , e similmente anche per il *PageRank*.

Il fatto che x sia l'autovettore relativo al raggio spettrale (che è l'unico autovalore di modulo massimo, se la matrice è primitiva) implica che preso un vettore u , la sequenza di vettori $(u, Au, A^2u, A^3u, \dots)$ opportunamente rinormalizzata converge a x (ciò è vero se u , quando scritto nella base di autovettori di A ha componente relativa a x non nulla; questa condizione si verifica quasi sempre).

La convergenza di questo metodo iterativo è rapida quando A non ha altri autovalori di modulo vicino a $\rho(A)$, cosa spesso vera per reti del mondo reale; inoltre ci sono altri metodi iterativi più sofisticati per calcolare x . Dunque uno dei vantaggi di queste misure è che il loro calcolo è computazionalmente poco costoso e abbastanza veloce.

1.3 Rappresentazione spettrale

Lavoreremo principalmente con matrici diagonalizzabili, per le quali introduciamo la notazione che useremo di solito.

Sia A una matrice diagonalizzabile di taglia n , $A = QDQ^{-1}$ dove D è diagonale e $\text{diag}(D) = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ sono gli autovalori, eventualmente ripetuti. Siano μ_1, \dots, μ_d gli autovalori di A senza ripetizioni, con $d \leq n$. Sia $m_h = m(\mu_h)$ la molteplicità algebrica di μ_h , che coincide con quella geometrica perché A è diagonalizzabile.

Sia inoltre $\mathcal{I}_h = \{k \mid \lambda_k = \mu_h\}$ l'insieme degli indici delle copie dell'autovalore μ_h .

Possiamo assumere che $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ siano già permutati in modo che le varie copie dello stesso autovalore siano consecutive. Inoltre, se tutti gli autovalori sono reali, assumiamo che $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$.

Si veda [38] per i risultati presenti in questa sezione.

Ricordiamo che un *proiettore* P è una matrice in $\mathbb{C}^{n \times n}$ tale che $P^2 = P$. Si vede facilmente che $\text{Ker}(P) \cap \text{Im}(P) = \{0\}$, inoltre la somma delle dimensioni di questi due sottospazi è n , da cui si ottiene che sono in somma diretta $\mathbb{C}^n = \text{Ker}(P) \oplus \text{Im}(P)$.

In tal caso si dice che P è un *proiettore su* $\text{Im}(P)$ *lungo* $\text{Ker}(P)$. Dati U, V sottospazi vettoriali in somma diretta, esiste ed è unico il proiettore su U lungo V .

Se inoltre $\text{Ker}(P) = \text{Im}(P)^\perp$, allora P si dice *proiettore ortogonale*. Osserviamo che P è ortogonale se e solo se è Hermitiano. Dato un sottospazio vettoriale, esiste ed è unico il proiettore ortogonale su di esso.

Definizione 1.10 (Proiettore spettrale). Sia $V_h = V_{\mu_h} = \text{Ker}(A - \mu_h I)$ l'autospazio relativo a μ_h . Il relativo *proiettore spettrale* è il proiettore su V_h lungo $\text{Im}(A - \mu_h I)$ e lo denoteremo con $E_{\mu_h} = E_h$.

Se A è normale, allora V_h è un proiettore ortogonale. Nella base data dagli autovettori di A , E_h è l'identità sugli autovettori di V_h ed è nullo su tutti gli altri. Passando alla base canonica, si ottiene:

$$E_h = Q \begin{pmatrix} \boxed{0} & & & \\ & \boxed{I_{m_h}} & & \\ & & \boxed{0} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} Q^{-1} \tag{1.1}$$

dove I_{m_h} corrisponde alle m_h copie di μ_h in D . Segue che $A = \sum_{h=1}^d \mu_h E_h$ e $I = \sum_{h=1}^d E_h$.

Si verifica facilmente che $E_h^2 = E_h$, coerentemente con la definizione di proiettore. Inoltre dati due proiettori distinti E_h, E_l con $l \neq h$, si ha che $E_h E_l = E_l E_h = 0$. Questo permette di dire che:

$$A^k = \sum_{h=1}^d \mu_h^k E_h \tag{1.2}$$

Vedendo ogni polinomio $p(x)$ come somma di monomi, si può utilizzare il risultato di cui sopra per calcolare $p(A)$:

$$p(A) = \sum_{h=1}^d p(\mu_h) E_h$$

Vedremo in seguito che questa scrittura si applica più in generale ad ogni funzione di matrice definita su A .

Vale anche il viceversa: ogni E_h si può scrivere come polinomio in A . Si definisca il polinomio $p_h(x)$ come:

$$p_h(x) = \prod_{j \neq h} \frac{x - \mu_j}{\mu_h - \mu_j}$$

$p_h(x)$ è un polinomio di grado $d-1$ che si annulla in μ_j per $j \neq h$, e $p_h(\mu_h) = 1$. Questo significa che $p_h(D)$ è la matrice diagonale di 0 e 1 presente in 1.1, e quindi cambiando base con Q si ha $p_h(A) = E_h$.

Da questo si deduce che A ed E_h commutano: $A E_h = E_h A$.

Sia $S_A = \text{span}(I, A)$ la sottoalgebra delle matrici $n \times n$ generata da I e A (ovvero con somme e moltiplicazioni). Sia $q(x)$ il polinomio minimo di A di grado d (poiché A è diagonalizzabile con d autovalori distinti), dunque $q(A) = 0$. Questo vuol dire che $S_A = \langle I, A, A^2, \dots, A^{d-1} \rangle$ (con parentesi angolate intendiamo il sottospazio vettoriale generato da somme e prodotti per scalare), cioè S_A è un sottospazio di dimensione d dello spazio vettoriale delle matrici $n \times n$.

Visto che ogni E_h è un polinomio in A , e che ogni A^k con $k \geq 0$ si può ottenere come combinazione lineare degli E_h , si ottiene:

$$S_A = \langle I, A, A^2, \dots, A^{d-1} \rangle = \langle E_1, E_2, \dots, E_d \rangle$$

Le proprietà elencate valgono per E_h come applicazione lineare (le equazioni in 1.2 non dipendono dalla base); per la base data da Q , utilizzando la formula 1.1 si ottiene:

$$E_h = \sum_{k \in \mathcal{I}_h} q_k \widehat{q}_k^\top \quad (1.3)$$

dove q_k, \widehat{q}_k sono la k -esima colonna di Q e la k -esima riga di Q^{-1} rispettivamente. La componente (i, j) di E_h è dunque:

$$[E_h]_{ij} = \sum_{k \in \mathcal{I}_h} Q_{ik} [Q^{-1}]_{kj} \quad (1.4)$$

Trattiamo ora il caso in cui A non è diagonalizzabile, $A = QJQ^{-1}$ dove J è la sua forma canonica di Jordan. Siano μ_1, \dots, μ_d gli autovalori distinti di A , e sia b_h l'indice di μ_h , ovvero la dimensione del blocco di Jordan più grande relativo a μ_h . Sia $V_h = \text{Ker}(A - \mu_h I)^{b_h}$ l'autospazio generalizzato relativo a μ_h ; similmente a quanto prima, sia E_h il proiettore su V_h lungo $\text{Im}(A - \mu_h I)^{b_h}$.

Sia $N_h = (A - \mu_h I) E_h$. Anche in questo caso A e E_h commutano, come si vede scrivendo A, E_h nella base data da Q come nell'equazione 1.1. Dunque $N_h = E_h(A - \mu_h I)$ e segue che $N_h^k = E_h^k (A - \mu_h I)^k = E_h (A - \mu_h I)^k$ in quanto E_h è idempotente. In particolare con $k = b_h$, si ha $N_h^{b_h} = E_h (A - \mu_h I)^{b_h} = 0$, cioè N_h è nilpotente.

Con il cambio di base dato da Q , si vede facilmente che E_h è diagonale e si ottiene sostituendo in J gli elementi uguali a μ_h con 1 e tutti gli altri con 0; N_h è invece la somma delle parti nilpotenti di ciascun blocco di Jordan relativo a μ_h . Si ha quindi:

$$A = \sum_{h=1}^d (\mu_h E_h + N_h)$$

Come prima, per $l \neq h$ si ha $E_h E_l = 0$, $N_h N_l = 0$ e $E_h N_l = 0$, tuttavia in generale $E_h N_h \neq 0$ e diventa più complicato calcolare A^k o un polinomio valutato in A .

Anche in questo caso si può dimostrare che E_h è un polinomio in A . Il polinomio minimo di A è $p(x) = \prod_{h=1}^d (x - \mu_h)^{b_h}$ che ha grado $\sum_{h=1}^d b_h = m$. Come prima sia S_A la sottoalgebra delle matrici generate da I, A ; come sottospazio vettoriale di $\mathbb{C}^{n \times n}$, ha dimensione m . Sia $S' = \text{span}(E_1, \dots, E_d, N_1, \dots, N_d)$, visto che $A = \sum_{h=1}^d (\mu_h E_h + N_h)$, segue che $A \in S'$. Dunque $S_A \subseteq S'$ e la dimensione di S' come sottospazio vettoriale è $\geq m$. Calcoliamo la dimensione di S' . E_h è idempotente, $E_h N_h = N_h$ e N_h ha indice di nilpotenza b_h , dunque $\text{span}(E_h, N_h) = \langle E_h, N_h, N_h^2, \dots, N_h^{b_h-1} \rangle$ è uno sottospazio vettoriale di $\mathbb{C}^{n \times n}$ di dimensione b_h . Per $l \neq h$, E_h, N_h agiscono solo su V_h mentre E_l, N_l solo su V_l ; dato che $V_h \cap V_l = \{0\}$, segue che $\text{span}(E_h, N_h)$ e $\text{span}(E_l, N_l)$ sono linearmente indipendenti. In generale, al variare di h tutti i E_h, N_h sono linearmente indipendenti tra di loro; segue che la dimensione di S' è $\sum_{h=1}^d b_h = m$.

Si ha quindi che $S_A \subseteq S'$, S_A e S' sono sottospazi vettoriali della stessa dimensione m , da cui $S_A = S'$, ovvero $E_h, N_h \in S_A$, dunque ogni E_h o N_h è esprimibile come polinomio in A .

1.4 Funzioni di matrice

Se $p(x) = c_k x^k + \dots + c_1 x + c_0$ è un polinomio e A è una matrice quadrata, si può definire $p(A)$ sostituendo A al posto di x nell'espressione sopra. Così si sommano le matrici $A^0 = I, A, A^2, \dots, A^k$ con opportuni coefficienti, ottenendo un'altra matrice.

Ci si può chiedere se si può generalizzare questa idea a una funzione $f(x)$, in modo che $f(A)$ sia ancora una matrice, e nel caso analitico se si espande f in serie di Taylor $f(x) = \sum c_k x^k$, allora $f(A) = \sum c_k A^k$. La risposta è sì, e tale generalizzazione viene chiamata *funzione di matrice* [29, 31, 38].

Definizione 1.11 (Funzione di matrice). Sia A una matrice con forma di Jordan J , $A = QJQ^{-1}$. Siano μ_1, \dots, μ_d gli autovalori distinti di A , e sia b_h l'indice di μ_h .

Diremo che una funzione f è definita su A se per ogni μ_h e per ogni $0 \leq i \leq b_h - 1$, è ben definito $f^{(i)}(\mu_h)$.

Allora per ogni blocco di Jordan J_k , si definisce $f(J_k)$ nel seguente modo:

$$J_k \implies f(J_k)$$

$$\begin{pmatrix} \mu_h & 1 & & & \\ & \mu_h & 1 & & \\ & & \mu_h & \ddots & \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & & \mu_h \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} f(\mu_h) & f^{(1)}(\mu_h) & \frac{f^{(2)}(\mu_h)}{2!} & \dots & \frac{f^{(b_h-1)}(\mu_h)}{(b_h-1)!} \\ & f(\mu_h) & f^{(1)}(\mu_h) & & \\ & & f(\mu_h) & \ddots & \vdots \\ & & & \ddots & f^{(1)}(\mu_h) \\ & & & & f(\mu_h) \end{pmatrix}$$

Allora $f(J)$ è la matrice con la stessa suddivisione diagonale a blocchi di J , in cui ogni J_k è sostituito da $f(J_k)$; infine $f(A)$ è definita come:

$$f(A) = Q f(J) Q^{-1}$$

Questa definizione sembra molto pesante, ma lo è a causa della generalità necessaria per trattare i blocchi di Jordan. Infatti, nel caso diagonalizzabile si ha molto più semplicemente:

$$A = Q \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix} Q^{-1} \implies f(A) = Q \begin{pmatrix} f(\lambda_1) & & & \\ & f(\lambda_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & f(\lambda_n) \end{pmatrix} Q^{-1}$$

Osserviamo che nel caso diagonalizzabile, richiediamo solo che f sia definita sullo spettro di A , che è discreto. Non si richiede quindi alcuna condizione di regolarità (neanche la continuità).

Se A ha un blocco di Jordan relativo a μ_h di dimensione b_h , si richiede che f sia definita su un intorno di μ_h e che sia derivabile $b_h - 1$ volte in μ_h . Se gli autovalori sono reali questo significa che f stia in un qualche \mathcal{C}^{b_h} , mentre se alcuni autovalori sono complessi serve che f sia olomorfa in un intorno di quegli autovalori.

Di fatto, visto che si vuole utilizzare una funzione per più di una matrice alla volta, di solito si lavora con funzioni definite su un dominio sufficientemente ampio e abbastanza regolari, in modo che si possa sempre calcolare $f(A)$. Inoltre le funzioni utilizzate molto spesso sono analitiche, per le quali è possibile calcolare $f(A)$ tramite lo sviluppo in serie di Taylor come accennato prima.

Proposizione 1.11. Sia $f(x)$ una funzione analitica in 0, con espansione in serie di potenze $f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k$ con raggio di convergenza R .

Sia A una matrice con raggio spettrale $\rho(A) < R$, allora si ha:

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$$

Dimostrazione. Se A è diagonalizzabile con $A = QDQ^{-1}$, allora $A^k = QD^kQ^{-1}$. Si denoti con S_m la somma parziale del membro di destra fino all'indice m . Si ha quindi:

$$S_m = \sum_{k=0}^m c_k A^k = Q \left(\sum_{k=0}^m c_k D^k \right) Q^{-1} = Q D_m Q^{-1}$$

dove D_m è una matrice diagonale che ha come entrata i -esima $[D_m]_{ii} = \sum_{k=0}^m c_k \lambda_i^k$. Poiché $|\lambda_i| \leq \rho(A) < R$ che è il raggio di convergenza di f , si ha che $[D_m]_{ii}$ converge a $f(\lambda_i)$. Visto che i λ_i sono in numero finito, si ha convergenza uniforme:

$$\lim_m D_m = \text{diag}(f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)) = f(D)$$

Da cui segue che $\lim_m S_m = Qf(D)Q^{-1} = f(A)$.

Se A non è diagonalizzabile, sia $A = QJQ^{-1}$ la sua forma di Jordan. Sia $f_m(x) = \sum_{k=0}^m c_k x^k$ e sia S_m definita come prima; dunque $S_m = f_m(A) = Q \left(\sum_{k=0}^m c_k J^k \right) Q^{-1}$. Preso un blocco di Jordan J_h relativo all'autovalore μ_h di dimensione t , si decomponga come $J_h = \mu_h I + N$, dove N è la parte nilpotente, $N^t = 0$. Si ha quindi:

$$\begin{aligned} J_h^k &= (\mu_h I + N)^k = \sum_{l=0}^k \binom{k}{l} \mu_h^{k-l} N^l = \sum_{l=0}^{t-1} \binom{k}{l} \mu_h^{k-l} N^l \\ f_m(J_h) &= \sum_{k=0}^m c_k J_h^k = \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^{t-1} c_k \binom{k}{l} \mu_h^{k-l} N^l = \\ &= \sum_{l=0}^{t-1} N^l \left(\sum_{k=0}^m c_k \binom{k}{l} \mu_h^{k-l} \right) = \sum_{l=0}^{t-1} N^l \left(\frac{1}{l!} f_m^{(l)}(\mu_h) \right) \end{aligned} \tag{1.5}$$

Dove $f_m^{(l)}(x)$ è la l -esima derivata di $f_m(x)$. Preso r tale che $\rho(A) < r < R$, visto che f è analitica, le somme parziali delle derivate $f_m^{(l)}$ convergono totalmente a $f^{(l)}$ sul disco di centro 0 e raggio r . Tutti gli autovalori μ_h sono contenuti in questo insieme, dunque:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} f_m(J_h) = \sum_{l=0}^{t-1} N^l \left(\frac{1}{l!} f^{(l)}(\mu_h) \right) = f(J_h)$$

Questo vale per tutti i blocchi di Jordan che compongono J , quindi segue che:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} S_m = Q \left(\lim_{m \rightarrow \infty} f_m(J) \right) Q^{-1} = Qf(J)Q^{-1} = f(A)$$

□

Nella dimostrazione abbiamo utilizzato la convergenza puntuale di $f_m(D)$ a $f(D)$ e di $f_m(J)$ a $f(J)$, ma si può dimostrare passando dalla convergenza in norma. Questo permette di estendere il risultato a operatori su spazi di Banach di dimensione infinita.

Osserviamo che questo risultato si può applicare a qualsiasi funzione analitica $g(x)$ con espansione in un altro punto $x_0 \neq 0$: si definisca $f(x) = g(x - x_0)$ e poi $g(A) = f(A + x_0 I)$; serve naturalmente che $A + x_0 I$ abbia raggio spettrale minore del raggio di convergenza della serie di Taylor di $g(x)$ in x_0 .

Una spiegazione euristica del perché per A non diagonalizzabile, $f(A)$ è definita tramite derivate successive su ogni blocco di Jordan si può trovare in [31]. L'idea di fondo è questa: se si ha una successione di matrici diagonalizzabili B_m che tende ad A , con la definizione data $f(B_m)$ tende a $f(A)$.

Ci sono due modi equivalenti in cui si possono definire le funzioni di matrice [29, 31, 38].

Proposizione 1.12 (Funzione di matrice tramite interpolazione polinomiale). Data $A = QJQ^{-1}$ e f definita su A , esiste un polinomio $p(x)$ tale che $p^{(i)}(\mu_h) = f^{(i)}(\mu_h)$ per ogni autovalore μ_h con $0 \leq i \leq b_h - 1$. Dunque $p(J) = f(J)$ e di conseguenza $p(A) = f(A)$.

Questo ci dice anche che $f(A)$ è sempre esprimibile come una somma finita di potenze di A , ovvero $f(A) \in S_A$. Si noti tuttavia che il polinomio interpolatore non dipende solo dalla funzione, ma anche da A ; per matrici diverse servono in generale polinomi diversi. Il secondo modo è il seguente:

Proposizione 1.13 (Funzione di matrice tramite integrale di Cauchy). Sia A una matrice in $\mathbb{C}^{n \times n}$, Ω un aperto di \mathbb{C} che contiene tutti gli autovalori di A , e sia γ la curva che parametrizza il bordo di Ω . Sia f una funzione olomorfa definita su $\Omega \cup \text{Im}(\gamma)$. Allora si ha:

$$f(A) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} f(z) (zI - A)^{-1} dz \quad (1.6)$$

Vediamo ora come esprimere una funzione di matrice tramite i proiettori spettrali. Nel caso non diagonalizzabile, siano E_h i proiettori spettrali e N_h le matrici nilpotenti relative alla forma di Jordan di A . Allora si ha [38]:

$$f(A) = \sum_{h=1}^d \sum_{k=0}^{b_h-1} \frac{f^{(k)}(\mu_h)}{k!} (A - \mu_h I)^k E_h = \sum_{h=1}^d \left(f(\mu_h) E_h + \sum_{k=1}^{b_h-1} \frac{f^{(k)}(\mu_h)}{k!} N_h^k \right) \quad (1.7)$$

Se A è diagonalizzabile l'espressione diventa più semplice:

$$f(A) = \sum_{h=1}^d f(\mu_h) E_h \quad (1.8)$$

Utilizzando la relazione 1.4, otteniamo la seguente formula per calcolare l'entrata (i, j) di $f(A)$ nel caso di A diagonalizzabile.

$$f(A)_{ij} = \sum_{h=1}^d f(\mu_h) [E_h]_{ij} = \sum_{l=1}^n f(\lambda_l) Q_{il} [Q^{-1}]_{lj} \quad (1.9)$$

Una funzione di matrice che utilizzeremo molto è l'esponenziale di matrice $A \rightarrow e^A$. Tramite essa si può esprimere la soluzione di equazioni differenziali del primo ordine, e studiarne la stabilità a seconda degli autovalori di A . L'esponenziale è una funzione analitica con raggio di convergenza infinito, per cui e^A è sempre ben definita; per questo possiamo utilizzare tutte le definizioni/proposizioni date senza problemi.

Ci sono altre funzioni di matrice che non sono analitiche o definite ovunque: per esempio quelle che corrispondono a $\frac{1}{x}$, \sqrt{x} , $\log(x)$, $|x|$. Per il logaritmo e le radici bisogna anche scegliere quale ramo prendere; tuttavia proprio per questo tramite il logaritmo si possono risolvere tante equazioni matriciali, come $A = e^X$ oppure $A = X^k$. Vedremo molte misure di centralità basate su funzioni di matrice, in particolar modo sull'esponenziale e^A e sull'inversa $(I - A)^{-1}$.

Capitolo 2

Misure di centralità

2.1 Esempi e confronto tra diverse misure

La scienza delle reti si occupa dello studio di molti fenomeni e strutture presenti in altre branche scientifiche che sono rappresentabili mediante grafi. Per esempio, un grafo in cui i vertici sono computer/server e gli archi sono collegamenti rappresenta la rete Internet. In essa è interessante ottimizzare la comunicazione tra i nodi, decidere come distribuire i pacchetti uscenti, possibilmente tutto in maniera dinamica e automatica. La rete delle città e delle strade è un altro esempio di grafo in cui interessa ottimizzare la comunicazione. Altri esempi sono presenti in biochimica, nello studio di proteine e interazioni tra di esse, nelle scienze sociali, cresciute negli ultimi anni con la possibilità di analizzare i social network, nelle neuroscienze con i processi di scarica dei neuroni, nei motori di ricerca per il ranking di pagine web, in modelli epidemiologici per studiare la diffusione di malattie.

In questi ambiti sorge la necessità di trovare i nodi “più importanti di un grafo”. Sono state proposte per questo diverse *misure di centralità*, ovvero funzioni che assegnano un certo peso a ciascun vertice, in modo che vertici più importanti abbiano peso maggiore. È difficile stabilire con esattezza cosa vuol dire “più importante”, e non ne daremo una definizione precisa. Le misure di centralità che verranno presentate sono calcolate concentrandosi su alcuni aspetti particolari del grafo, e quindi danno più importanza a certe sue strutture che ad altre. La scelta della misura da utilizzare dipende dal problema studiato e dalla cosa a cui si vuole dare più importanza. Per esempio, le *sub-graph centralities* danno maggiore peso a vertici in cricche locali grandi e ben connesse; altre classificano i vertici in base ai percorsi più corti per raggiungere altri vertici; altre ancora si basano sull'autovettore dominante della matrice di adiacenza e inquadrano il vertice nella struttura globale del grafo.

Non c'è dunque una misura di centralità migliore delle altre, ma al contrario è utile confrontare diverse misure per capire meglio il ruolo di ciascun vertice all'interno del grafo.

Introduciamo alcune misure di centralità per grafi semplici, e successivamente vedremo come si possono generalizzare a grafi orientati. Supponiamo che tutti i grafi siano

connessi (o fortemente connessi), altrimenti basta lavorare separatamente su ciascuna componente connessa.

Una misura molto semplice è la *Degree Centrality*, che assegna a ogni vertice il suo grado

$$DC(i) = \deg(i) \quad (2.1)$$

Intuitivamente, un vertice che ha tanti collegamenti è più importante di uno che ne ha pochi. Questo è importante nella visione locale del grafo, però non considera il ruolo che un vertice può assumere a livello globale.

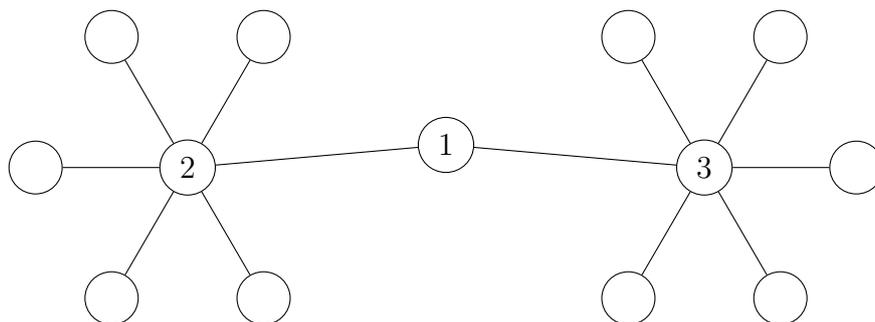


Figura 3

In questo grafo si ha $DC(2) = DC(3) = 6$ e $DC(1) = 2$. Pur avendo un grado basso, il vertice 1 è comunque molto importante per la struttura del grafo, poiché è l'unico ponte tra le due "stelle".

La *Closeness* e la *Betweenness Centrality* sono definite per grafi semplici, usando i cammini di minima lunghezza (detti anche *geodetiche*). Dati due vertici i, j , sia $\text{dist}(i, j)$ la distanza tra i e j . La Closeness Centrality è definita come:

$$CC(i) = \frac{1}{\sum_{j \neq i} \text{dist}(j, i)} \quad (2.2)$$

È stata introdotta da Bavelas nel 1950 [3]. Nodi da cui si possono raggiungere tutti gli altri vertici più velocemente hanno importanza maggiore.

La *Betweenness Centrality* è stata proposta da Freeman nel 1977 [22]. Essa individua i vertici "crocevia" più visitati quando si naviga il grafo seguendo cammini geodetici. Dati a, b, i tre vertici, sia $\sigma(a, b)$ il numero di cammini di lunghezza minima tra a e b , e $\tau(i, a, b) \leq \sigma(a, b)$ il numero di tali cammini che passa per i . La Betweenness Centrality si calcola come:

$$BC(i) = \sum_{(a,b)} \frac{\tau(i, a, b)}{\sigma(a, b)} \quad (2.3)$$

Queste due misure contano solo i cammini di lunghezza minima per calcolare la centralità. Tuttavia in molte reti non si trasmettono informazioni solo tramite i percorsi più brevi: basti pensare al traffico Internet o stradale, in cui si vuole evitare di sovraccaricare gli archi, oppure in modelli epidemiologici dove la trasmissione dell'infezione viaggia

contemporaneamente su più di un canale, e non necessariamente su quelli più corti. Per esempio, nel grafo in figura si ha $BC(4) = 63$, $BC(2) = 7$, $BC(3) = 9$ e $BC(6) = 12.76$; il percorso più breve tra i due cluster passa per il vertice 4 e non per 2, 3, però il fatto che abbiano una centralità minore del vertice 6 indica che la Betweenness Centrality non è molto adatta per i problemi menzionati sopra.

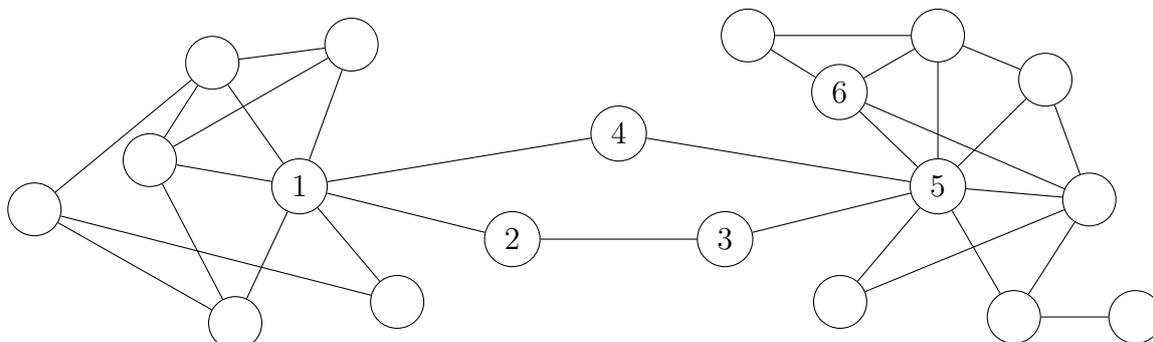


Figura 4

Molte reti sociali o Internet esibiscono il fenomeno *small world*: il grafo è sparso, ma il suo diametro è molto piccolo in confronto al numero di nodi; per esempio in tali grafi per $n \approx 10^9$ nodi, il diametro è circa uguale a 10 – 20. Inoltre la media delle lunghezze dei cammini minimi tra due vertici è spesso nettamente minore del diametro, ovverosia, la maggior parte dei vertici è a piccola distanza dagli altri. Questo porta ad avere delle Closeness Centrality molto vicine.

Infine il calcolo della distanza minima tra i vertici richiede un grande numero di operazioni, ed è computazionalmente costoso per grafi con centinaia di migliaia di vertici.

Dunque la Closeness e Betweenness Centrality sono buoni candidati per reti non troppo grandi, che non abbiano diametro piccolo e in cui è davvero importante utilizzare ogni percorso di lunghezza minima.

Per questi motivi, soprattutto nell'ambito di reti grandi, sono state introdotte misure basate più sulla matrice di adiacenza A e su funzioni di matrice $f(A)$, in confronto a quelle appena descritte di aspetto più combinatorico. Alcune definiscono ricorsivamente che “un vertice importante è quello collegato a tanti vertici importanti”, che si può vedere come un metodo iterativo $x_{(k+1)} = Ax_{(k)}$, il cui punto fisso è legato agli autovalori $Ax = \lambda x$ di A . Altre invece si basano sulla proprietà che $[A^k]_{ij}$ rappresenta il numero di cammini dal vertice i al vertice j di lunghezza k , che non sono necessariamente i più corti. Se $i = j$, allora $[A^k]_{ii}$ è il numero di cammini chiusi di lunghezza k che partono e finiscono in i ; un vertice “ben connesso” e con tanti collegamenti avrà più cammini. Per $i \neq j$, allora $[A^k]_{ij}$ indica quanti cammini di lunghezza k ci sono da i a j , che può essere interpretata come misura di *communicabilità*: quanto si trasmettono bene le informazioni da i a j .

Per grafi orientati c'è una considerazione in più di cui tenere conto, rispetto a quelli semplici: ci possono essere vertici con tanti collegamenti uscenti (e pochi entranti), o viceversa. Entrambe le categorie di vertici influenzano la comunicazione nel grafo, ma svolgono ruoli diversi. Quelli che riescono a diffondere bene le informazioni che vi

arrivano sono le *sorgenti* (chiamati anche *broadcaster* o *hub*) e di solito hanno tanti archi uscenti, mentre quelli per riescono a prendere informazioni da tante parti sono *pozzi* (*receiver*, *authority*) e hanno tanti archi entranti. Un vertice receiver importante è puntato da tanti broadcaster importanti, e viceversa un broadcaster importante punta a tanti receiver importanti. Questa è una definizione apparentemente circolare, ma come discusso prima ha un'interpretazione come processo iterativo; vedremo per esempio quella data nell'algoritmo HITS. In grafi orientati dunque si può assegnare una misura di authority o di hub a ciascun vertice, che possono dare ranking anche molto diversi: non è detto che un broadcaster importante sia anche un receiver importante. Per esempio, dalla Degree Centrality si ottiene una misura per authority e una per hub. $DC_h(i) = d_{out}(i) = [A\mathbf{1}]_i$ è il numero di archi uscenti da i e indica la sua importanza nel ruolo di "sorgente", mentre $DC_a(i) = d_{in}(i) = [\mathbf{1}^\top A]_i$ è il numero di archi entranti e indica l'importanza come "pozzo". Naturalmente questa semplice misura soffre le stesse limitazioni già discusse nel caso della Degree Centrality in grafi non orientati.

Sia A la matrice di adiacenza del grafo e ρ il raggio spettrale di A . Sia α un parametro tale che $0 < \alpha < \frac{1}{\rho}$ (in particolare $\rho \geq 1$ per il corollario 1.2, dunque $\alpha < 1$). Allora αA è una matrice con raggio spettrale $\rho(\alpha A) = \alpha\rho < 1$, dunque $I - \alpha A$ è una matrice non singolare, la cui inversa è esprimibile come serie di potenze per la proposizione 1.11.

$$(I - \alpha A)^{-1} = I + \alpha A + \alpha^2 A^2 + \alpha^3 A^3 + \dots$$

Infatti, siccome $\alpha < \frac{1}{\rho}$ la serie converge. La matrice $(I - \alpha A)^{-1}$ viene spesso detta *Resolvent Matrix*, da cui il nome della *Resolvent Subgraph Centrality*. Essa si definisce nel seguente modo

$$RC(i, \alpha) = [(I - \alpha A)^{-1}]_{ii} = 1 + \alpha A_{ii} + \alpha^2 [A^2]_{ii} + \alpha^3 [A^3]_{ii} + \dots \quad (2.4)$$

Ogni addendo della serie a destra indica il numero di cammini chiusi (di lunghezza $k = 0, 1, 2, \dots$) passanti per i . Il numero di cammini cresce molto rapidamente con k ; il peso α^k serve per controbilanciare questo aumento (ricordiamo che $\alpha < 1$), e al tempo stesso assicura la convergenza della serie. In questo modo, un nodo con tanti cammini chiusi corti è considerato importante, in quanto partecipa tanto alla diffusione di informazioni nella sua *local community*.

Il ruolo del parametro α è di dare più o meno peso ai cammini più lunghi: vedremo in avanti che per α vicino a 0 si ha un ranking dei nodi simile alla Degree Centrality, mentre per α vicino a $\frac{1}{\rho}$ è simile alla Eigenvector Centrality.

La *Katz Centrality* utilizza invece le somme di riga (per l'hub) e le somme di colonna (per l'authority) di $(I - \alpha A)^{-1}$:

$$\begin{aligned} KC_h(i, \alpha) &= [(I - \alpha A)^{-1} \mathbf{1}]_i && \text{hub} \\ KC_a(i, \alpha) &= [\mathbf{1}^\top (I - \alpha A)^{-1}]_i && \text{authority} \end{aligned} \quad (2.5)$$

La Katz Centrality è stata introdotta da Katz nel 1953 in ambito sociologico [34]. Notiamo che per un grafo semplice, $A = A^\top$ e quindi $\mathbf{1}^\top f(A) = (f(A)^\top \mathbf{1})^\top = (f(A^\top) \mathbf{1})^\top = (f(A) \mathbf{1})^\top$. Le due misure di hub e authority coincidono per grafi semplici.

Due misure costruite in maniera simile alla Katz e Resolvent Subgraph sono l'*Exponential Subgraph Centrality* e la *Total Communicability*. Dato $\beta > 0$ parametro reale, esse si basano sull'esponenziale di matrice $e^{\beta A}$.

L'*Exponential Subgraph Centrality* è stata introdotta da Estrada e Rodríguez-Velázquez nel 2005 [20]. La indicheremo come *SC*, lasciando la sigla *EC* alla *Eigenvector Centrality*. Essa è definita nel seguente modo:

$$SC(i, \beta) = [e^{\beta A}]_{ii} = 1 + \beta A_{ii} + \frac{\beta^2}{2!} [A^2]_{ii} + \frac{\beta^3}{3!} [A^3]_{ii} + \dots \quad (2.6)$$

Come la Resolvent Subgraph Centrality, essa conta i cammini di varia lunghezza a cui assegna un peso pari a $\frac{\beta^k}{k!}$ (la serie di potenze converge per la proposizione 1.11). In questo modo si assicura la convergenza della serie di potenze per qualsiasi $\beta > 0$, mentre nella Resolvent Subgraph serve scegliere α con molta cura in modo che non ecceda l'upper bound di $\frac{1}{\rho(A)}$. Inoltre il ruolo di β è simile alla “*temperatura inversa*” presente nell'energia libera e nella funzione di partizione della Meccanica Statistica [17, 19].

La Total Communicability si basa sulle somme di riga/colonna di $e^{\beta A}$:

$$\begin{aligned} TC_h(i, \beta) &= [e^{\beta A} \mathbf{1}]_i && \text{hub} \\ TC_a(i, \beta) &= [\mathbf{1}^\top e^{\beta A}]_i && \text{authority} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Questa misura è stata introdotta da Benzi e Klymko nel 2013 [7]. $[e^{\beta A}]_{ij}$ è una somma pesata dei cammini da i a j , e perciò è una misura di *communicabilità* tra il vertice i e j : vertici con comunicabilità maggiore hanno più percorsi possibili per scambiare informazioni. In questo modo la somma dell' i -esima riga, $[e^{\beta A} \mathbf{1}]_i$, rappresenta la comunicabilità del vertice i con tutti i vertici del grafo (incluso i stesso), da cui il nome “Total Communicability”.

Riassumiamo dunque la relazione tra Katz, Resolvent Subgraph, Exponential Subgraph Centrality e Total Communicability nella seguente tabella:

	$f(A)_{ii}$	$[f(A)\mathbf{1}]_i$
$f(x) = \frac{1}{1-\alpha x}$	Resolvent Subgraph	Katz
$f(x) = e^{\beta x}$	Exponential Subgraph	Total Communicability

Si potrebbe utilizzare un'altra funzione di matrice, con la stessa interpretazione di $[f(A)]_{ii}$ come numero di cammini chiusi o $[f(A)\mathbf{1}]_i$ come comunicabilità del vertice i ; vedremo nella prossima sezione che questa definizione è sensata, a patto che i coefficienti della serie di Taylor di f siano positivi. Il motivo per cui si usano l'esponenziale e la resolvent non è dettato solo dall'interpretazione in termini di cammini e pesi, ma anche della loro complessità computazionale. Entrambe sono funzioni molto studiate in Analisi Numerica e per le quali esistono tanti algoritmi veloci di calcolo, efficaci anche per matrici e grafi sparsi con un grande numero di nodi (dell'ordine di migliaia o addirittura di milioni). Queste misure sono quindi molto più facili da calcolare, il che

rende possibile provare molte modifiche di una rete e ottimizzarla (per esempio, per migliorarne la connettività).

Un problema delle misure di centralità basate sul contare i cammini con $[A^k]_{ij}$ è che vengono contati i cammini che vanno “avanti e indietro”, per esempio $i \rightarrow j \rightarrow i$, che aumentano lo *score* di un vertice senza che sia davvero collegato “meglio”. Per questo è stata proposta da Hashimoto la *non backtracking matrix*, che per un grafo \mathcal{G} con m vertici è una matrice $m \times m$ costruita in maniera simile alla matrice di incidenza. Tuttavia spesso questa matrice è molto più grande della matrice di adiacenza, rendendo più costoso il calcolo di centralità. Per ulteriori riferimenti, si veda [41].

Le misure descritte finora utilizzano certe metriche create “artificialmente” per decidere l’importanza di un vertice, cioè che abbia tanti archi o cammini per raggiungere altri vertici. Un modo alternativo è sfruttare un’idea più intrinseca di importanza: un vertice è importante se è collegato a tanti vertici importanti. Messa così è una definizione autoreferenziale; cerchiamo di definirla meglio matematicamente.

Assegniamo a ogni vertice una certa misura iniziale (positiva), racchiudendole tutte nel vettore v_0 ; per semplicità si può scegliere $v_0 = \mathbf{1}$. Successivamente a ogni passo k , ogni vertice i prende come importanza la somma delle importanze al passo $k - 1$ dei vertici che puntano a i . In termini matriciali, $v_k = Av_{k-1}$; per evitare che i valori divergano, si può rinormalizzare ad ogni passo in modo che $\|v_k\| = 1$.

Si ottiene quindi un processo iterativo, con il quale v_k converge all’autovettore di Perron per A . Infatti, per il teorema di Perron-Frobenius, il raggio spettrale ρ è un autovalore semplice di A ; se inoltre A è primitiva, per quasi ogni vettore iniziale v_0 , il limite $\lim_m (\frac{1}{\rho}A)^m v_0 = w$ è un multiplo dell’autovettore di Perron di A .

A sunto di queste considerazioni, l’*Eigenvector Centrality* è definita nel seguente modo: data A la matrice di adiacenza di un grafo fortemente connesso, e chiamati x, y i suoi autovettori di Perron destro e sinistro $Ax = \rho x, y^\top A = \rho y^\top$, si ha:

$$\begin{aligned} EC_h(i) = x_i & \quad \text{hub,} & \quad \text{Right Eigenvector Centrality} \\ EC_a(i) = y_i & \quad \text{authority,} & \quad \text{Left Eigenvector Centrality} \end{aligned} \tag{2.8}$$

Una misura di centralità che ha avuto grande successo negli ultimi 20 anni è l’algoritmo *PageRank*, che nasce nel 1998 [8] con l’esigenza di classificare le pagine internet per un motore di ricerca. Si basa sul simulare la navigazione internet come una passeggiata aleatoria su un grafo, e dando peso maggiore a pagine visitate più spesso (ed è quindi una misura di authority). Dato un grafo orientato (\mathcal{G}, A) di n vertici, sia V_0 l’insieme dei vertici che hanno grado di uscita nullo. Sia a un vettore con $a_i = 1$ se $i \in V_0$, e $a_i = 0$ altrimenti. Sia D la matrice diagonale con gli out-degree dei vertici: $D_{ii} = d_{out}(i)$ se $i \notin V_0$, e $D_{ii} = 1$ se $i \in V_0$. Sia H la seguente rinormalizzazione di A :

$$H = A^\top D^{-1}$$

In questo modo le colonne relative a $i \in V_0$ sono nulle e le altre hanno somma 1; dunque il raggio spettrale è $\rho(H) \leq 1$. Si modifichi H cambiando ogni colonna nulla in $\frac{1}{n}\mathbf{1}$:

$$S = H + \frac{1}{n}\mathbf{1}a^\top$$

Questa matrice potrebbe essere riducibile, dunque preso v vettore di personalizzazione strettamente positivo (per esempio $v = \mathbf{1}$) e $0 < \gamma < 1$ parametro (di solito $\gamma = 0.85$), costruiamo la seguente matrice, detta *Google Matrix*:

$$P = \gamma S + (1 - \gamma)v\mathbf{1}^\top \quad (2.9)$$

P è primitiva (infatti, è positiva) e dunque per il teorema di Perron-Frobenius ha un unico autovettore di Perron p ; inoltre per costruzione P è stocastica per colonne, dunque nel calcolo di p tramite metodi iterativi non c'è bisogno di rinormalizzare. Il vettore p è detto *PageRank vector*, e p_i indica la centralità dell' i -esimo vertice come authority. Si può fare uno *score* simile per avere un punteggio per gli hub, cambiando A^\top in A nella definizione di H .

Anche l'algoritmo HITS [35] è stato sviluppato per classificare pagine web, con l'idea di dare a ogni vertice simultaneamente un peso per il suo ruolo da hub e uno per il ruolo da authority. Si parte con due vettori qualsiasi, x_0 per hub e y_0 per authority, per esempio $x_0 = y_0 = \mathbf{1}$. A ogni passo del metodo iterativo, si calcola $x_k = Ay_{k-1}$ e $y_k = A^\top x_{k-1}$: in questo modo $y_k(i)$ è la somma dei pesi hub dei vertici che puntano a i , mentre $x_k(i)$ è la somma dei pesi authority dei vertici puntati da i . Si può dimostrare che x_k e y_k , opportunamente rinormalizzati, convergono all'autovettore destro di AA^\top e $A^\top A$ rispettivamente. Chiamati v, u i due autovettori, $v(i)$ indica la centralità come hub del vertice i e $u(i)$ la centralità come authority.

Notiamo che la Katz Centrality e Total Communicability possono essere calcolate sia come hub che come authority (scegliendo A oppure A^\top); tuttavia le Subgraph Centrality non riescono a distinguere il ruolo di sorgente o pozzo di ogni vertice. In [5] è descritto un modo per generalizzarle a grafi orientati, potendo così dare un peso di hub o authority. Quindi per grafi orientati di solito si preferisce utilizzare misure che distinguono pozzi e sorgenti, e usare le Subgraph Centrality per grafi semplici. Per tali grafi vedremo dei vantaggi delle Subgraph Centrality, ovvero che possono distinguere più facilmente vertici "diversi" rispetto alle altre misure.

Comunque per grafi orientati che hanno quasi tutti gli archi percorribili in entrambe le direzioni, le Subgraph Centrality riescono lo stesso a dare dei buoni risultati.

Ci sono due quantità legate alla Exponential Subgraph Centrality e alla Total Communicability, che indicano quanto un grafo è ben collegato nella sua interezza. In questo modo non si confrontano due vertici in un grafo, o come cambia la centralità di un vertice modificando il grafo, ma si assegna un'unico punteggio al grafo nella sua interezza, in modo da poter confrontare grafi diversi e determinare quanto sono "ben connessi". Esse sono l'*Estrada Index*, definito come

$$EE(\mathcal{G}) = \frac{1}{n} \text{Tr}(e^A) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n SC(i, 1) \quad (2.10)$$

e la *Total Network Communicability* [7]:

$$TNC(\mathcal{G}) = \frac{1}{n} \mathbf{1}^\top A \mathbf{1} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [e^A]_{ij} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n TC(i, 1) \quad (2.11)$$

Mostriamo, a titolo d'esempio, un grafo orientato preso da un modello reale [21] e calcoliamo le varie misure di centralità per ogni vertice. Ogni vertice rappresenta una zona della corteccia cerebrale di un macaco, mentre un arco tra vertici indica che la prima zona manda segnali alla seconda. Il grafo ha 30 nodi e 311 archi orientati; la maggior parte di essi sono bidirezionali (121×2), e i restanti 69 sono unidirezionali.

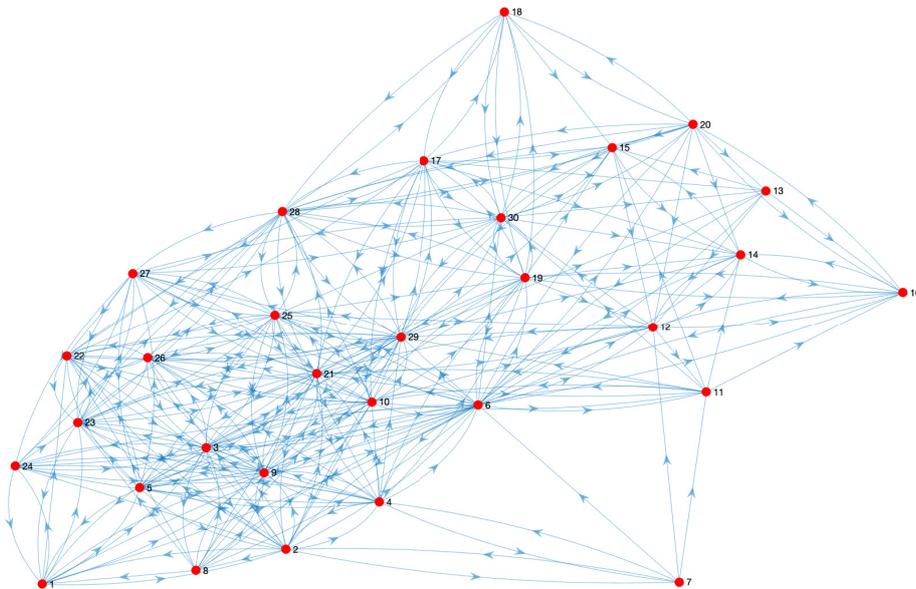


Figura 5: Rappresentazione delle aree della corteccia cerebrale di un macaco tramite grafo orientato.

	DC_h	DC_a	EC_h	EC_a	SC	TC_h	TC_a	RC	KC_h	KC_a	PR_h	PR_a	HI_h	HI_a
1°	6	29	6	29	9	6	29	6	6	29	6	29	25	29
2°	9	6	9	21	21	9	21	9	9	6	2	6	9	10
3°	25	21	25	10	6	25	10	21	25	21	21	21	6	21
4°	21	10	21	9	10	21	9	10	21	10	9	28	2	9
5°	10	9	2	23	29	2	23	3	10	9	4	12	21	6
6°	2	23	3	6	25	3	6	29	2	23	3	30	10	23

Riportiamo la classifica dei 6 vertici più importanti per ciascuna misura di centralità. Notiamo che i vertici 6, 9, 21, 25 sono spesso tra i primi tre secondo misure di tipo hub, mentre 29, 21, 10 lo sono per misure di tipo authority. Si osservi che vertici importanti come hub hanno comunque un punteggio molto elevato nel ranking come authority, e viceversa. Possiamo quindi ragionevolmente affermare che questi 6 vertici, assieme a 2, 23 (che appaiono nella top 6, ma con punteggio spesso più basso), sono tra quelli più importanti nel grafo.

In tabella sono riportati i valori per le varie misure di centralità. Si è scelto $\beta = 1$ per calcolare la Exponential Subgraph Centrality e la Total Communicability, $\alpha = \frac{1}{2\rho(A)} \approx 4.32 \cdot 10^{-2}$ per la Resolvent Subgraph Centrality e la Katz Centrality. PR_h e PR_a sono i valori del PageRank per hub e authority, con parametro $\gamma = 0.85$. HI_h e HI_a rappresentano i valori di $HITS_h$ e $HITS_a$. I valori presenti sono rinormalizzati per ciascuna misura in modo che abbiano lo stesso ordine di grandezza. Riportiamo il fattore di rinormalizzazione: per EC e $HITS$ è 10, per PR è 100, per SC è 10^{-3} e per TC è 10^{-5} . Sono evidenziati in azzurro tutti i vertici che sono tra i 6 più importanti per almeno due misure.

V	DC _h	DC _a	EC _h	EC _a	SC	TC _h	TC _a	RC	KC _h	KC _a	PR _h	PR _a	HI _h	HI _a
1	8	8	1.56	1.42	2.39	0.89	0.75	1.019	1.74	1.70	2.92	2.34	1.46	1.45
2	15	9	2.67	1.57	4.50	1.53	0.83	1.027	2.32	1.78	5.45	2.59	2.61	1.55
3	14	13	2.65	2.25	6.41	1.52	1.19	1.037	2.28	2.11	4.75	3.32	2.46	2.39
4	13	9	2.44	1.48	3.90	1.40	0.79	1.024	2.19	1.76	4.98	2.33	2.31	1.64
5	12	11	2.36	2.09	5.32	1.35	1.11	1.031	2.12	1.99	4.04	3.06	2.27	2.13
6	20	19	2.92	2.53	7.96	1.68	1.34	1.052	2.65	2.45	6.50	5.91	2.72	2.63
7	5	2	0.87	0.26	0.25	0.50	0.14	1.004	1.45	1.15	2.30	0.80	0.66	0.41
8	8	6	1.53	1.28	2.11	0.87	0.68	1.012	1.74	1.58	2.47	1.82	1.65	1.29
9	16	15	2.90	2.79	8.72	1.66	1.48	1.048	2.43	2.33	5.28	4.24	2.79	2.65
10	15	16	2.58	2.85	7.89	1.48	1.51	1.042	2.33	2.38	4.70	4.29	2.48	2.86
11	8	5	1.10	0.87	1.03	0.63	0.46	1.008	1.66	1.44	2.14	1.92	1.33	0.79
12	7	11	0.93	1.52	1.53	0.53	0.81	1.012	1.57	1.87	2.13	4.45	1.08	1.38
13	4	5	0.43	0.90	0.42	0.25	0.48	1.003	1.30	1.45	1.30	1.95	0.47	0.73
14	4	10	0.43	1.43	0.67	0.25	0.76	1.010	1.30	1.81	1.30	4.09	0.47	1.20
15	5	9	0.51	1.23	0.69	0.29	0.65	1.010	1.38	1.71	1.36	3.75	0.79	0.91
16	5	7	0.60	0.84	0.56	0.34	0.45	1.011	1.40	1.53	1.77	3.21	0.62	0.75
17	11	9	1.34	1.65	2.40	0.77	0.88	1.023	1.87	1.80	3.19	3.16	1.62	1.26
18	6	5	0.61	0.74	0.50	0.35	0.39	1.012	1.46	1.41	2.05	1.88	0.69	0.62
19	13	10	1.75	1.64	3.10	1.01	0.87	1.024	2.06	1.85	3.79	3.28	1.84	1.55
20	10	6	0.89	0.88	0.86	0.51	0.47	1.014	1.72	1.49	2.70	2.51	1.11	0.71
21	16	16	2.76	2.87	8.54	1.58	1.52	1.047	2.41	2.39	5.32	4.70	2.57	2.73
22	8	13	1.48	2.44	3.89	0.85	1.29	1.024	1.73	2.14	2.75	3.83	1.50	2.24
23	9	15	1.61	2.70	4.67	0.92	1.43	1.028	1.80	2.29	2.89	4.17	1.62	2.62
24	8	7	1.51	1.20	1.95	0.86	0.64	1.016	1.73	1.60	2.86	1.99	1.40	1.34
25	16	10	2.80	2.22	6.68	1.61	1.17	1.034	2.43	1.97	4.67	3.30	2.92	1.84
26	9	10	1.76	2.12	4.00	1.01	1.12	1.024	1.84	1.94	2.77	3.06	1.86	1.94
27	10	9	1.78	1.84	3.53	1.02	0.98	1.023	1.90	1.85	3.14	3.06	1.85	1.54
28	12	14	1.60	2.36	4.07	0.92	1.25	1.031	1.98	2.18	3.67	4.64	1.74	1.99
29	14	19	1.98	3.35	7.14	1.14	1.78	1.037	2.14	2.65	3.78	5.97	2.19	3.10
30	10	13	0.98	2.04	2.17	0.56	1.08	1.022	1.74	2.08	3.00	4.42	1.13	1.88

2.2 Comportamento limite di misure con parametro

In questa tesi, ci concentreremo principalmente sulla Resolvent, Exponential Subgraph Centrality, Katz Centrality e Total Communicability. Esse dipendono da un parametro, ed è interessante studiare in che modo esso influisce sull'importanza calcolata per i vertici.

È difficile confrontare direttamente le centralità ottenute per diversi valori del parametro: per esempio se β tende a infinito, allora i valori di $SC(i, \beta) = [e^{\beta A}]_{ii}$ divergono. Si può invece confrontare il *ranking* ottenuto dalle misure, cioè la classifica dei vertici ordinata per la centralità calcolata.

Sperimentalmente si è osservato che molte misure danno ranking simili per i nodi più importanti [24], e anche nell'esempio della sezione precedente è così. Per le misure menzionate sopra, si possono ottenere dei risultati più specifici. Per $\alpha \rightarrow 0$, i ranking ottenuti da $KC(i, \alpha)$ e $RC(i, \alpha)$ tendono al ranking dato dal grado $DC(i)$, e per $\alpha \rightarrow \frac{1}{\rho}$, i ranking di $KC(i, \alpha)$ e $RC(i, \alpha)$ tendono al ranking dell'Eigenvector Centrality $EC(i)$. Similmente, per $\beta \rightarrow 0$ i ranking di $EC(i, \beta)$ e $SC(i, \beta)$ tendono alla Degree Centrality, e per $\beta \rightarrow \infty$ tendono all'Eigenvector Centrality.

Precisiamo cosa vuol dire che i ranking tendono a un altro, prendiamo come esempio la Degree Centrality e la Katz Centrality. Se per due vertici i, j si ha che $DC(i) > DC(j)$, allora esiste ε tale che per ogni $\alpha \in (0, \varepsilon)$, $KC(i, \alpha) > KC(j, \alpha)$.

Il caso di uguaglianza è più complicato: se $DC(i) = DC(j)$, allora non è detto che $KC(i, \alpha) = KC(j, \alpha)$ per α abbastanza piccolo. Osservando che per ogni vertice u si ha $KC(u, 0) = 1$, l'interpretazione è la seguente: dato un altro vertice u con $DC(u) \neq DC(i)$, viste come funzioni in α , $KC(i, \alpha)$ e $KC(j, \alpha)$ hanno lo stesso ordine di convergenza in $\alpha = 0$ in confronto a $KC(u, \alpha)$. Analoghe interpretazioni si hanno per le altre misure o per il caso in cui il parametro tende a infinito.

I risultati in questa sezione sono presi da [6]. Le dimostrazioni per le misure basate sulla Resolvent Matrix o sull'esponenziale di matrice sono casi particolari di una proposizione più generale valida per funzioni di matrice $f(A)$, dove f ha le seguenti proprietà.

Definizione 2.1. Sia \mathcal{P} l'insieme di tutte le funzioni analitiche definite in un intorno di 0, e la cui espansione in serie di Taylor in 0 abbia tutti i coefficienti positivi. Sia \mathcal{P}_1 l'insieme di queste funzioni che hanno raggio di convergenza infinito, e sia \mathcal{P}_2 l'insieme delle funzioni f in \mathcal{P} che soddisfano la seguente proprietà: scrivendo f in serie di Taylor in 0, $f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k$ con raggio di convergenza R , allora $f(R) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k R^k = \infty$.

Richiediamo che i coefficienti di f siano tutti positivi, perché così nell'espansione $f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$, tutti i percorsi di lunghezza k tra due vertici abbiano peso positivo.

Si osservi che presa una tale f e una generica matrice A , non è detto che $f(A)$ sia ben definito: serve che il raggio spettrale di A sia minore del raggio di convergenza R di f . Possiamo tuttavia inserire un parametro t e calcolare $f(tA)$, che è ben definita per $t \in (0, t^*)$ dove $t^* = \frac{R}{\rho(A)}$; così la matrice tA ha raggio spettrale minore di R e l'espansione in serie con le matrici converge.

Nel caso in cui f abbia raggio di convergenza $R = \infty$, allora $f(tA)$ è ben definita per ogni t e poniamo $t^* = \infty$; questo corrisponde alla classe \mathcal{P}_1 .

Definiamo anche la f -Resolvent Subgraph Centrality e la f -Total Communicability nel seguente modo:

$$f\text{-}SC(i, t) = [f(tA)]_{ii} \quad f\text{-}TC_h(i, t) = [f(tA)\mathbf{1}]_i \quad f\text{-}TC_a(i, t) = [\mathbf{1}^\top f(tA)]_i$$

Euristicamente vediamo che queste rappresentano delle misure di centralità: sommano i cammini che passano per i di lunghezza k , pesati con un coefficiente c_k positivo. La scelta della funzione equivale a scegliere i coefficienti c_k , ovvero il peso da dare a ogni lunghezza.

La nuova definizione è coerente con quanto già detto: nel caso in cui $f(x) = \frac{1}{1-x}$, la f - SC e f - TC diventano la Resolvent Subgraph Centrality e la Katz Centrality rispettivamente. Se $f(x) = e^x$, allora diventano l'Exponential Subgraph Centrality e la Total Communicability.

Ci serviranno i seguenti due lemmi:

Proposizione 2.1. Siano $g(t) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k t^k$ e $h(t) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k t^k$ due serie di potenze con raggio di convergenza infinito, e che abbiano tutti i coefficienti positivi. Se $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{a_k}{b_k} = 0$, allora

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sum_{k=0}^{\infty} a_k t^k}{\sum_{k=0}^{\infty} b_k t^k} = 0$$

Dimostrazione. Dato un $\varepsilon > 0$, sia N tale che $\forall k > N, \frac{a_k}{b_k} < \varepsilon$.

Sia $g_N(t) = \sum_{k=0}^N a_k t^k$ la somma parziale fino a N e $g_c(t) = g(t) - g_N(t)$ la relativa coda.

Analogamente sono definite $h_N(t)$ e $h_c(t)$. Si ha:

$$\frac{g(t)}{h(t)} = \frac{g_N(t) + g_c(t)}{h_N(t) + h_c(t)} = \frac{g_N(t)}{h_N(t) + h_c(t)} + \frac{g_c(t)}{h_c(t)} \frac{1}{1 + \frac{h_N(t)}{h_c(t)}}$$

Visto che $h_c(t)$ ha tutti addendi di grado almeno $N+1$, mentre $g_N(t)$ e $h_N(t)$ al massimo N , per $t \rightarrow \infty$ $\frac{g_N(t)}{h_N(t) + h_c(t)}$ e $\frac{h_N(t)}{h_c(t)}$ tendono a 0.

Inoltre $g_c(t) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k t^k = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{a_k}{b_k}\right) b_k t^k < \varepsilon h_c(t)$, dunque definitivamente in t si ha che $\frac{g(t)}{h(t)} < \varepsilon$, e per l'arbitrarietà di ε , si conclude. \square

Proposizione 2.2. Siano $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbb{C}$, con $\lambda_1 > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|$. Sia f una funzione in $\mathcal{P}_1 \cup \mathcal{P}_2$. Allora

$$\lim_{t \rightarrow t^*} \frac{t^j f^{(j)}(t\lambda_i)}{f(t\lambda_1)} = 0 \quad \forall j \quad \forall 2 \leq i \leq n$$

dove $t^* = \infty$ se $f \in \mathcal{P}_1$ e ha sviluppo in serie di potenze con raggio di convergenza infinito; altrimenti per $f \in \mathcal{P}_2$, chiamato R il raggio di convergenza dello sviluppo in serie di f in 0, si ha $t^* = \frac{R}{\lambda_1}$.

Dimostrazione. Se $f \in \mathcal{P}_2$, allora $\lim_{t \rightarrow t^*} f(t\lambda_1) = \infty$ in quanto $t^*\lambda_1 = R$ è il raggio di convergenza. D'altro canto le derivate successive $f^{(j)}(x)$ sono funzioni analitiche in $(-R, R)$, e $f^{(j)}(t^*\lambda_1)$ è ben definito siccome $|\lambda_i| < \lambda_1$. Dunque il limite in questione è infinito.

Se $f \in \mathcal{P}_1$, consideriamo $t^* = \infty$. Le derivate successive di f si possono scrivere derivando la serie di potenze, essendo f analitica:

$$f^{(j)}(x) = \sum_{k=j}^{\infty} \binom{k}{j} c_k x^{k-j}$$

Preso λ_i con $i \geq 2$, otteniamo

$$|f^{(j)}(t\lambda_i)| \leq \sum_{k=j}^{\infty} \left| \binom{k}{j} c_k t^{k-j} \lambda_i^{k-j} \right| \leq \sum_{k=j}^{\infty} \binom{k}{j} c_k t^{k-j} |\lambda_i|^{k-j}$$

Tralasciando il caso $\lambda_i = 0$ per cui la tesi segue facilmente, vogliamo applicare la proposizione precedente. Consideriamo le due serie di potenze in t , la prima $g(t)$ che ha come coefficiente di t^k pari a $a_k = \binom{k}{j} c_k |\lambda_i|^{k-j}$ e la seconda $f(t\lambda_1)$ che ha $b_k = c_k \lambda_1^k$. I coefficienti sono tutti positivi, e il rapporto è

$$\frac{a_k}{b_k} = \binom{k}{j} \frac{1}{|\lambda_i|^j} \left(\frac{|\lambda_i|}{\lambda_1} \right)^k$$

Questo tende a 0 per $k \rightarrow \infty$ in quanto $\frac{|\lambda_i|}{\lambda_1} < 1$ e il termine esponenziale batte quello polinomiale di grado j dato da $\binom{k}{j}$.

Possiamo applicare la proposizione 2.1 ottenendo che $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{g(t)}{f(t\lambda_1)} = 0$. Utilizzando che $|t^j f^{(j)}(t\lambda_i)| \leq g(t)$ si ottiene la tesi. □

Ora siamo pronti per dimostrare le proprietà al limite (inferiore e superiore) della f -SC e f -TC; trattiamo prima il caso di grafi semplici, per i quali basta il caso $j = 0$ della proposizione 2.2.

Teorema 2.1. Sia \mathcal{G} un grafo semplice connesso con matrice di adiacenza A primitiva (ovvero il grafo non è bipartito). Sia $f \in \mathcal{P}_1 \cup \mathcal{P}_2$, e siano f -SC(i, t), f -TC(i, t) la f -Resolvent Subgraph e la f -Total Communicability del vertice i .

1. Per $t \rightarrow 0$, i ranking ottenuti da f -SC e f -TC convergono al ranking dato dalla Degree Centrality.
2. Per $t \rightarrow t^*$, i ranking ottenuti da f -SC e f -TC convergono al ranking dato dall'Eigenvector Centrality.
3. Preso v un vettore con tutte le entrate positive, se si sostituisce v al vettore $\mathbf{1}$ nella definizione di f -TC, allora vale la stessa conclusione del punto 2.

Dimostrazione. 1) Sia $f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k t^k$ l'espansione in serie di Taylor di f . Usando la proposizione 1.11 si possono calcolare f - SC e f - TC :

$$f\text{-}SC(i, t) = [f(tA)]_{ii} = \sum_{k=0}^{\infty} c_k t^k [A^k]_{ii} = c_0 + c_1 t A_{ii} + c_2 t^2 [A^2]_{ii} + \mathcal{O}(t^3)$$

Poiché il grafo è semplice, non ci sono cappi e $A_{ii} = 0$. Inoltre $[A^2]_{ii} = DC(i)$ è il grado del vertice i . Dunque:

$$f\text{-}SC(i, t) = c_0 + c_2 t^2 DC(i) + \mathcal{O}(t^3)$$

Per ipotesi $c_2 > 0$, quindi per t abbastanza piccolo e se $DC(i) < DC(j)$, allora $f\text{-}SC(i, t) < f\text{-}SC(j, t)$. Se invece $DC(i) = DC(j)$, allora $\frac{1}{t^2}(f\text{-}SC(i, t) - f\text{-}SC(j, t))$ è $\mathcal{O}(t)$, cioè hanno ordine di convergenza simile rispetto a un vertice con grado diverso.

$$f\text{-}TC(i, t) = [f(tA)\mathbf{1}]_i = \sum_{k=0}^{\infty} c_k t^k [A^k \mathbf{1}]_i = c_0 + c_1 t [A\mathbf{1}]_i + \mathcal{O}(t^2)$$

Il grafo è non orientato, dunque $[A\mathbf{1}]_i = DC(i)$ è il grado di i . Per t abbastanza piccolo, il termine dominante è $c_1 t DC(i)$, da cui si ottiene che il ranking converge a quello dato dalla Degree Centrality.

2) Per questa parte ci serve l'espressione di $f(tA)$ in termine dei proiettori spettrali, ovvero $f(tA) = \sum_{h=1}^d f(t\mu_h) E_h$ dove i μ_h sono gli autovalori di A senza ripetizione.

Siccome A è simmetrica, è ortogonalmente diagonalizzabile $A = QDQ^\top$. Utilizzando che $Q^{-1} = Q^\top$ e la formula 1.9 si ottiene:

$$f\text{-}SC(i, t) = [f(tA)]_{ii} = \sum_{l=1}^n f(t\lambda_l) Q_{il} [Q^{-1}]_{li} = \sum_{l=1}^n f(t\lambda_l) Q_{il}^2$$

Senza perdita di generalità possiamo assumere che $\lambda_1 = \rho(A)$ sia l'autovalore di Perron di A . Il suo autovettore è la prima colonna di Q , dunque $EC(i) = Q_{i1}$.

Sia $\psi(i, t)$ la seguente funzione:

$$\psi(i, t) = \frac{1}{f(t\lambda_1)} f\text{-}SC(i, t) = Q_{i1}^2 + \sum_{l=2}^n \frac{f(t\lambda_l)}{f(t\lambda_1)} Q_{il}^2$$

Il ranking prodotto da ψ è lo stesso di quello prodotto da $f\text{-}SC$. Siccome $f \in \mathcal{P}_1 \cup \mathcal{P}_2$, per la proposizione 2.2 ognuno degli addendi della sommatoria tende a 0 per $t \rightarrow t^*$. Dunque il ranking ottenuto da ψ tende a quello dato da Q_{i1}^2 , che è uguale a quello dell'Eigenvector Centrality (dal momento che l'autovettore di Perron ha tutte le componenti positive):

$$f(tA)\mathbf{1} = \sum_{l=1}^n f(t\lambda_l) q_l q_l^\top \mathbf{1} = \sum_{l=1}^n f(t\lambda_l) (q_l^\top \mathbf{1}) q_l$$

$$f\text{-}TC(i, t) = [f(tA)\mathbf{1}]_i = \sum_{l=1}^n f(t\lambda_l) (q_l^\top \mathbf{1}) Q_{il} = f(t\lambda_1) (q_1^\top \mathbf{1}) Q_{i1} + \sum_{l=2}^n f(t\lambda_l) (q_l^\top \mathbf{1}) Q_{il}$$

Come fatto nel caso precedente, dividiamo $f\text{-}TC(i, t)$ per $f(t\lambda_1) (q_1^\top \mathbf{1})$ in modo da isolare il termine relativo a λ_1 , ottenendo:

$$\varphi(i, t) = Q_{i1} + \sum_{l=2}^n \frac{f(t\lambda_l)}{f(t\lambda_1)} \frac{q_l^\top \mathbf{1}}{q_1^\top \mathbf{1}} Q_{il}$$

Si noti che $q_1^\top \mathbf{1} > 0$ perché q_1^\top è l'autovettore di Perron di A , che ha tutte le componenti positive. Per la proposizione 2.2, la sommatoria tende a 0 per $t \rightarrow t^*$, dunque il ranking di φ (che coincide con quello di $f\text{-}TC$) tende a quello dato dall'Eigenvector Centrality.

3) La dimostrazione è analoga sostituendo il vettore v a $\mathbf{1}$, notando che $q^\top v$ è sempre un numero positivo. □

Osserviamo che $f(x) = e^x$ è una funzione in \mathcal{P}_1 , e $g(x) = \frac{1}{1-x}$ è in \mathcal{P}_2 . Applicando il teorema 2.1 a queste due funzioni otteniamo il seguente corollario.

Corollario 2.1. Sia \mathcal{G} un grafo semplice connesso con matrice di adiacenza A primitiva (ovvero il grafo non è bipartito). Siano $RC(i, \alpha), KC(i, \alpha)$ la Resolvent Subgraph e Katz Centrality con $\alpha \in (0, \frac{1}{\rho(A)})$ e $SC(i, \beta), TC(i, \beta)$ l'Exponential Subgraph Centrality e la Total Communicability con $\beta > 0$.

1. Per $\alpha \rightarrow 0$, i ranking ottenuti da RC e KC convergono al ranking dato dalla Degree Centrality.
2. Per $\beta \rightarrow 0$, i ranking ottenuti da SC e TC convergono al ranking dato dalla Degree Centrality.
3. Per $\alpha \rightarrow \frac{1}{\rho(A)}$, i ranking ottenuti da RC e KC convergono al ranking dato dall'Eigenvector Centrality.
4. Per $\beta \rightarrow \infty$, i ranking ottenuti da SC e TC convergono al ranking dato dall'Eigenvector Centrality.

Limite	ranking RC	ranking KC	Limite	ranking SC	ranking TC
$\alpha \rightarrow 0$	DC	DC	$\beta \rightarrow 0$	DC	DC
$\alpha \rightarrow \frac{1}{\rho(A)}$	EC	EC	$\beta \rightarrow \infty$	EC	EC

Analizziamo ora la situazione in cui il grafo è orientato. In tal caso la $f\text{-}SC$ può dare risultati molto differenti da altre misure, se il vertice in questione ha grande importanza come authority e poca come hub (o viceversa). Per questo è difficile dare risultati teorici per la $f\text{-}SC$, e ci concentreremo solo sulla $f\text{-}TC$. Osserviamo che la dimostrazione usata nel teorema 2.1 fallisce nel caso orientabile per la $f\text{-}SC$ perché $[A^2]_{ii}$ non è più uguale al grado di i .

Teorema 2.2. Sia \mathcal{G} un grafo orientato [eventualmente pesato, con pesi non negativi] fortemente connesso con matrice di adiacenza A primitiva. Sia $f \in \mathcal{P}_1 \cup \mathcal{P}_2$, e siano $f\text{-}TC_h(i, t)$, $f\text{-}TC_a(i, t)$ la f -Total Communicability per hub e authority del vertice i .

1. Per $t \rightarrow 0$, il ranking ottenuto da $f\text{-}TC_h$ converge a quello ottenuto dalla out-Degree Centrality DC_h .
2. Per $t \rightarrow 0$, il ranking ottenuto da $f\text{-}TC_a$ converge a quello ottenuto dalla in-Degree Centrality DC_a .
3. Per $t \rightarrow t^*$, il ranking ottenuto da $f\text{-}TC_h$ converge a quello ottenuto dalla Right Eigenvector Centrality EC_h .
4. Per $t \rightarrow t^*$, il ranking ottenuto da $f\text{-}TC_a$ converge a quello ottenuto dalla Left Eigenvector Centrality EC_a .
5. Preso v un vettore con tutte le entrate positive, se si sostituisce v al vettore $\mathbf{1}$ nella definizione di $f\text{-}TC$, allora valgono le stesse conclusioni dei punti 3 e 4.

Dimostrazione. I punti 1) e 2) si dimostrano in maniera simile al punto 1) del Teorema 2.1, ricordando che $[A\mathbf{1}]_i$ è il grado di uscita di i e $[\mathbf{1}^\top A]_i$ è invece il grado di entrata. Per il punto 3), ricordiamo l'equazione 1.7 per calcolare $f(tA)$

$$f(tA) = \sum_{h=1}^d \sum_{k=0}^{b_h-1} \frac{f^{(k)}(t\mu_h)}{k!} (tA - t\mu_h I)^k E_h$$

Per ipotesi A è primitiva, quindi vale il teorema di Perron-Frobenius nella forma più forte e $\lambda_1 = \rho(A)$ è autovalore semplice. Dunque

$$f(tA)\mathbf{1} = f(t\lambda_1)E_1\mathbf{1} + \sum_{h=2}^d \sum_{k=0}^{b_h-1} \frac{t^k f^{(k)}(t\mu_h)}{k!} (A - \mu_h I)^k E_h \mathbf{1}$$

Ricordiamo che $E_1 = xy^\top$, dove x, y^\top sono gli autovettori destro e sinistro relativi a λ_1 .

$$f\text{-}TC_h(i, t) = [f(tA)\mathbf{1}]_i = f(t\lambda_1) x_i (y^\top \mathbf{1}) + \sum_{h=2}^d \sum_{k=0}^{b_h-1} \frac{t^k f^{(k)}(t\mu_h)}{k!} [(A - \mu_h I)^k E_h \mathbf{1}]_i$$

Il ranking dato da $f\text{-}TC_h$ è lo stesso se si divide per $f(t\lambda_1)(y^\top \mathbf{1})$ che è un numero positivo. Si ottiene:

$$\frac{1}{f(t\lambda_1)(y^\top \mathbf{1})} f\text{-}TC_h(i, t) = x_i + \sum_{h=2}^d \sum_{k=0}^{b_h-1} \frac{t^k f^{(k)}(t\mu_h)}{f(t\lambda_1) k! (y^\top \mathbf{1})} [(A - \mu_h I)^k E_h \mathbf{1}]_i$$

Per la proposizione 2.2, ogni termine della sommatoria tende a 0, dunque il ranking tende a quello dato dagli x_i , ovvero dalla Right Eigenvector Centrality EC_h .

La dimostrazione del punto 4) è analoga: $f\text{-}TC_a(i, t) = [\mathbf{1}^\top f(A)]_i$ ha termine dominante $f(t\lambda_1)(\mathbf{1}^\top x) y_i$, perciò il ranking tende a quello della Left Eigenvector Centrality EC_a .

Infine per il punto 5) basta sostituire il vettore v a $\mathbf{1}$ nella dimostrazione sopra. \square

Corollario 2.2. Sia \mathcal{G} un grafo orientato [pesato ≥ 0] fortemente connesso con matrice di adiacenza A primitiva. Siano $KC_a(i, \alpha), KC_h(i, \alpha)$ la Katz Centrality con $\alpha \in (0, \frac{1}{\rho(A)})$ e $TC_a(i, \beta), TC_h(i, \beta)$ la Total Communicability con $\beta > 0$.

1. Per $\alpha \rightarrow 0$, il ranking ottenuto da KC_a converge al ranking dato dalla in-Degree Centrality, e il ranking ottenuto da KC_h a quello della out-Degree Centrality.
2. Per $\beta \rightarrow 0$, il ranking ottenuto da TC_a converge al ranking dato dalla in-Degree Centrality, e il ranking ottenuto da TC_h a quello della out-Degree Centrality.
3. Per $\alpha \rightarrow \frac{1}{\rho(A)}$, il ranking ottenuto da KC_a converge al ranking dato dalla Left-Eigenvector Centrality, e il ranking ottenuto da KC_h a quello della Right-Eigenvector Centrality.
4. Per $\beta \rightarrow \infty$, il ranking ottenuto da TC_a converge al ranking dato dalla Left-Eigenvector Centrality, e il ranking ottenuto da TC_h a quello della Right-Eigenvector Centrality.

Limite	ranking KC_a	ranking KC_h	Limite	ranking TC_a	ranking TC_h
$\alpha \rightarrow 0$	DC_a	DC_h	$\beta \rightarrow 0$	DC_a	DC_h
$\alpha \rightarrow \frac{1}{\rho(A)}$	EC_a	EC_h	$\beta \rightarrow \infty$	EC_a	EC_h

Ci chiediamo ora quando può accadere che la centralità di due vertici sia la stessa (per una certa misura). Se prendiamo un grafo molto simmetrico, per esempio un ciclo di dimensione n , allora tutti i vertici avranno la stessa misura di centralità. Sarebbe problematico se non fosse così, visto che i vertici sono tutti “uguali” tra di loro. Può accadere che una misura di centralità dia lo stesso peso a due vertici “diversi”? La risposta è sì, e accade spesso con la Degree Centrality. Nel seguente grafo, i gruppi di vertici indicati con A,B,C hanno tutti grado 3, però sicuramente il ruolo che ricoprono nel grafo è diverso.

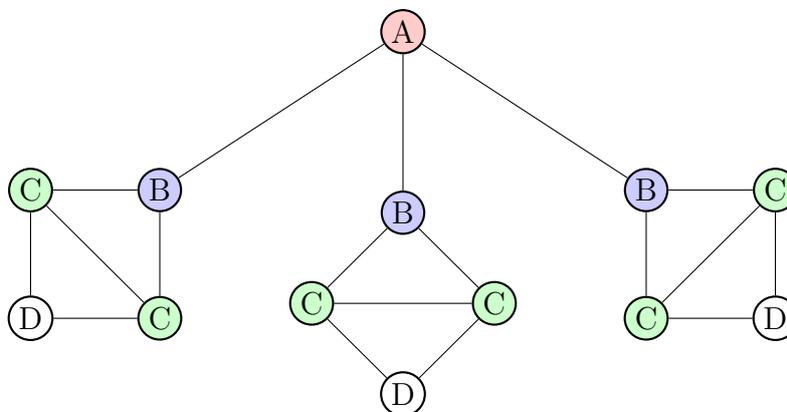


Figura 6

Questo è un altro aspetto per cui la Degree Centrality è una misura troppo semplice: può assumere solo valori discreti, generalmente abbastanza bassi, per cui esistono tanti vertici con lo stesso grado e che non vengono distinti. Vediamo che una situazione simile può capitare anche nelle altre misure.

Presupponiamo che ci siano due vertici i, j tali che $DC(i) < DC(j)$ e $EC(i) > EC(j)$. Questo accade quando i ha più archi di j ed è collegato meglio alla sua *local community*, però su scala globale j ha più importanza. Per i limiti visti, per α piccoli $RC(i, \alpha) < RC(j, \alpha)$ in quanto tendenti alla Degree Centrality, e invece per α grandi $RC(i, \alpha) > RC(j, \alpha)$ poiché tendono alla Eigenvector Centrality. Per continuità esiste un valore α_0 tale che $RC(i, \alpha_0) = RC(j, \alpha_0)$; per questo valore la Resolvent Subgraph Centrality non riesce a distinguere i e j .

Definizione 2.2 (Interlacciamento). Chiameremo *interlacciamento* tra i vertici i, j al “tempo” t_0 quando per una misura di centralità $C(i, t)$ con parametro t , i grafici di $f(t) = C(i, t)$, $g(t) = C(j, t)$ si intersecano in t_0 , ma in generale f e g non coincidono in ogni punto.

Nel grafo in figura 7, il vertice 2 ha grado 4 e il vertice 8 ha grado 3. Tuttavia $EC(2) = 0.2915$ e $EC(8) = 0.3413$, che implica che le misure SC , RC , KC e TC abbiano un interlacciamento. Prendendo per esempio l'Exponential Subgraph Centrality, per $\beta < 2.48$ si ha che $SC(2, \beta) > SC(8, \beta)$, mentre per $\beta > 2.48$ si ha la disuguaglianza opposta.

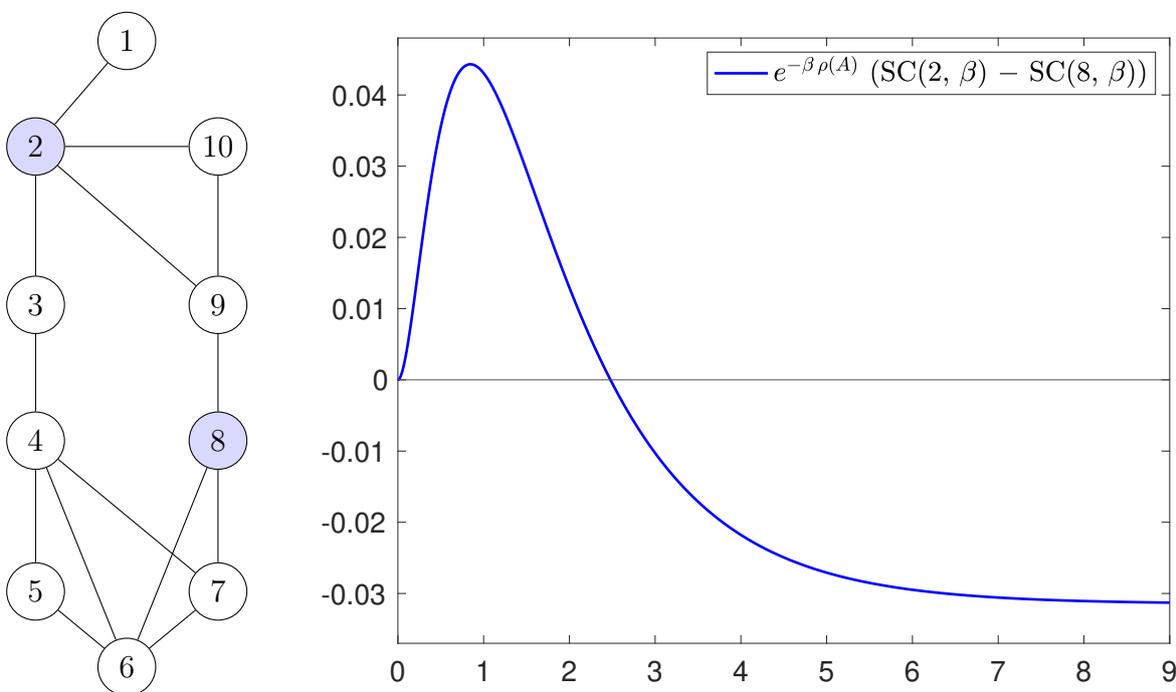


Figura 7: A sinistra, grafo con i vertici 2,8 in evidenza. A destra, grafico della funzione $e^{-\beta \rho(A)} (SC(2, \beta) - SC(8, \beta))$. Si ha interlacciamento per $\beta \approx 2.48$.

Non è rara la situazione in cui Degree Centrality e Eigenvector Centrality hanno ordinamento diverso su alcuni nodi, portando quindi a fenomeni di interlacciamento. Questo indica che le reti possono essere abbastanza complesse e l'importanza non è riconducibile a quella data da una sola misura; d'altro canto ciò pone la questione della scelta dei parametri α, β per RC, KC, SC, TC . Per i corollari 2.1, 2.2 sappiamo cosa succede quando α, β sono molto piccoli o molto grandi, ma nel caso intermedio non si sa stabilirlo con precisione.

Per esempio, se per due vertici i, j si ha $DC(i) > DC(j)$ e $EC(i) > EC(j)$ allora nella maggior parte dei casi $C(i, t) > C(j, t)$ per tutti i valori di t dove C è una misura di centralità tra Katz, Resolvent, Exponential e Total Communicability. Tuttavia possiamo solo dire che il numero di interlacciamenti dev'essere pari, e vedremo alla fine della sezione 3.2 che ci può essere interlacciamento doppio per la Resolvent e l'Exponential Subgraph Centrality. Se invece $DC(i) > DC(j)$ e $EC(i) < EC(j)$, allora c'è un numero dispari di interlacciamenti (e quindi almeno uno); ci sono però esempi di grafi con 300 vertici che hanno interlacciamento triplo.

Il fatto che due vertici abbiano la stessa centralità tramite una qualche misura non è di per se un male, però significa che è più difficile inferire proprietà del grafo basandosi solo sulle centralità calcolate, in quanto vertici "diversi" possono avere lo stesso *score*. Nel resto della tesi studieremo le condizioni in cui due vertici "diversi" possano avere lo stesso peso per la Resolvent e Exponential Subgraph Centrality, e il fenomeno collegato dell'interlacciamento. Per farlo dobbiamo prima definire cosa vuol dire che due vertici di un grafo siano "diversi".

Capitolo 3

Uguaglianza e interlacciamento di misure

3.1 Simmetrie dei grafi

In questa sezione ci occuperemo principalmente di grafi semplici, per i quali sono state introdotte storicamente la maggior parte delle definizioni. Dove possibile, le estenderemo a grafi orientati.

Definizione 3.1 (Automorfismo di un grafo). Sia \mathcal{G} un grafo orientato, un *automorfismo* di \mathcal{G} è una funzione biettiva $\varphi : V \rightarrow V$, tale che $(i, j) \in E$ se e solo se $(\varphi(i), \varphi(j)) \in E$.

Applicare un automorfismo vuol dire cambiare i nomi ai vertici, in modo che il grafo rimanga lo stesso. Per esempio, il seguente grafo ha come gruppo di automorfismi $G = \{\text{id}, \varphi, \varphi^2\}$, dove φ manda $i \rightarrow i + 2$ modulo 6:

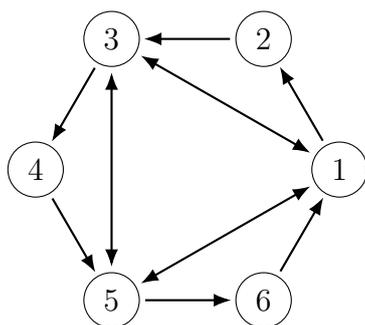


Figura 8

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\varphi = (135)(246)$$

Ogni funzione $\varphi : V \rightarrow V$ biettiva si può indicare con una matrice di permutazione P . In tal caso φ è automorfismo di (\mathcal{G}, A) se e solo se $PAP^T = A$.

Definizione 3.2 (Vertici isomorfi). Sia \mathcal{G} un grafo orientato, diciamo che due vertici u, v sono *isomorfi* se esiste un automorfismo φ di G tale che $\varphi(u) = v$.

Nell'esempio di sopra, i vertici 1, 3, 5 sono isomorfi tra di loro, e anche 2, 4, 6. Non c'è nessun automorfismo che manda un vertice dispari in uno pari, per cui 1 e 2 non sono isomorfi.

Osserviamo che se $\varphi(u) = v$, non è necessariamente vero che $\varphi(v) = u$; tuttavia esiste sicuramente un automorfismo ψ tale che $\psi(v) = u$ (per esempio, $\psi = \varphi^{-1}$).

Siamo interessati a studiare la sua struttura intrinseca di un grafo; i nomi che assegniamo ai vertici possono essere scelti arbitrariamente. Per questo due vertici isomorfi sono indistinguibili in un grafo, e dunque richiediamo che una misura di centralità dia lo stesso peso a vertici isomorfi. Tuttavia, come abbiamo visto, può succedere che vertici non isomorfi abbiano centralità uguale.

Si possono creare funzioni che danno peso uguale a due vertici se e solo se sono isomorfi. Trovare tali funzioni è strettamente legato al *Graph Isomorphism problem*: determinare tutti gli automorfismi di un grafo, o equivalentemente, dati due grafi, stabilire se sono isomorfi. Ci sono molti algoritmi per stabilirlo, che però hanno complessità non polinomiale; è un problema aperto stabilire la complessità computazionale del Graph Isomorphism. Molti degli algoritmi, pur essendo esponenziali nel caso peggiore, in media sono abbastanza veloci, (cf. per esempio Nauty [37]).

In generale, gli automorfismi di un grafo sono pochi: infatti, quasi tutti i grafi hanno gruppo di automorfismo banale. In particolare, due vertici di un grafo generalmente non saranno isomorfi; introduciamo adesso una classe di grafi per cui invece ciò si verifica.

Definizione 3.3. Un grafo semplice \mathcal{G} si dice *transitivo per vertici* (in inglese *vertex-transitive*) se per ogni coppia di vertici u, v esiste $\varphi \in \text{Aut}(G)$ tale che $\varphi(u) = v$.

Spesso un tale grafo viene detto semplicemente *transitivo*.

Osserviamo che in un grafo transitivo per vertici, tutti i vertici devono avere necessariamente lo stesso grado. Il viceversa non è vero: un esempio è il grafo di Frucht, che ha gruppo di automorfismo banale:

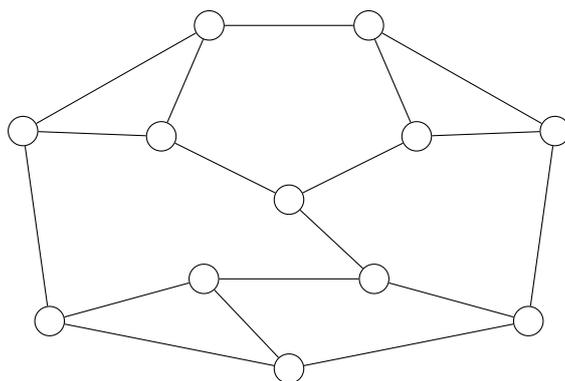


Figura 9: Grafo di Frucht.

Definizione 3.4. Un grafo semplice \mathcal{G} si dice *regolare* (in inglese *regular*) se tutti i vertici hanno lo stesso grado.

I grafi transitivi per vertici (come in generale i grafi con un gruppo di automorfismi particolare) sono molti di meno dei grafi regolari. È possibile costruirne un gran numero: si parte da un grafo regolare, si cancellano due archi (i, j) e (u, v) e si sostituiscono con $(i, v), (u, j)$ (se non sono già presenti). Ripetendo questa operazione si ottengono tanti grafi regolari, di cui la maggior parte avrà pochi automorfismi.

Introduciamo una classe di grafi che invece ha più automorfismi di un grafo transitivo per vertici.

Definizione 3.5. Un grafo semplice \mathcal{G} si dice *simmetrico* (in inglese *symmetric* o *arc-transitive*) se date due qualunque coppie di vertici u, v e x, y con $(u, v), (x, y) \in E$, esiste $\varphi \in \text{Aut}(\mathcal{G})$ tale che $\varphi(u) = x$ e $\varphi(v) = y$.

Non solo è possibile mandare ogni vertice in qualsiasi altro, ma è possibile “ruotare” attorno a un vertice in modo da mandare un arco uscente in qualsiasi altro.

Definizione 3.6. Un grafo semplice \mathcal{G} si dice *transitivo per archi* (in inglese *edge-transitive*) se per ogni coppia di archi non orientati $(u, v), (x, y) \in E$ esiste $\varphi \in \text{Aut}(\mathcal{G})$ che manda un arco nell’altro, senza scelta dell’orientazione.

Ovvero, non possiamo dire che esistono entrambi φ, ψ tali che $\varphi(u) = x, \varphi(v) = y$ e $\psi(u) = y, \psi(v) = x$ come nel caso di un grafo simmetrico, ma esiste sicuramente almeno uno dei due. Un grafo che è sia vertex transitive che edge transitive non è necessariamente simmetrico.

Definizione 3.7. Un grafo semplice \mathcal{G} si dice *half-transitive* se è vertex-transitive e edge transitive ma non è simmetrico.

Il più piccolo grafo half-transitive è il grafo di Holt, con 27 vertici e grado 4. In particolare, è un esempio di grafo edge-transitive che non sia simmetrico. Esistono anche grafi edge-transitive che non sono vertex-transitive; verranno caratterizzati nella prossima proposizione.

Definizione 3.8. Un grafo semplice \mathcal{G} si dice *semisimmetrico* (*semi-symmetric*) se è edge-transitive, regolare ma non è vertex-transitive.

Proposizione 3.1. Sia \mathcal{G} un grafo semplice, connesso e edge-transitive. Allora si hanno due possibilità:

1. \mathcal{G} è transitivo per vertici (dunque \mathcal{G} è half-transitive o simmetrico).
2. \mathcal{G} è bipartito e chiamati V_1, V_2 i due insiemi di partizione dei vertici, $\text{Aut}(\mathcal{G})$ è transitivo su ogni coppia di vertici nella stessa partizione. In particolare, in ogni partizione tutti i vertici hanno lo stesso grado.

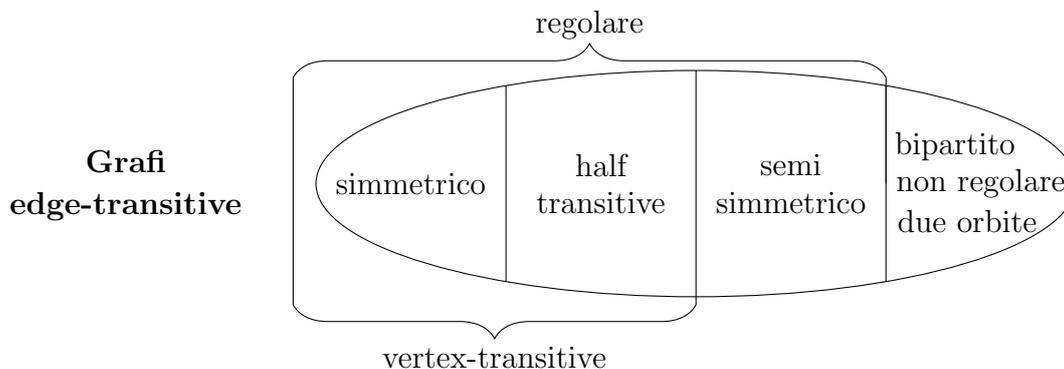
Dimostrazione. Sia $v \in V$ un vertice, e consideriamo $\text{Orb}(v) = \{\varphi(v) \mid \varphi \in \text{Aut}(\mathcal{G})\}$, l’orbita di v tramite gli automorfismi del grafo. Se $\text{Orb}(v) = V$, allora il grafo è vertex-transitive e ricadiamo nel primo caso.

Se $Orb(v) \neq V$, sia u un qualsiasi vertice adiacente a v . Siccome il grafo è edge-transitive, ogni arco (x, y) può essere mandato con un automorfismo φ in (u, v) oppure (v, u) . Questo significa che $\varphi(x), \varphi(y) \in \{u, v\}$, ovvero che $x, y \in Orb(u) \cup Orb(v)$. Poiché il grafo è connesso (da ogni vertice parte almeno un arco), segue che $V = Orb(u) \cup Orb(v)$. Inoltre $Orb(v) \cap Orb(u) = \emptyset$, altrimenti le due orbite dovrebbero coincidere ed essere uguali a V . Dunque $Orb(u)$ e $Orb(v)$ costituiscono una partizione dei vertici in due insiemi, su ognuno dei quali $Aut(\mathcal{G})$ è transitivo.

Inoltre non ci sono archi tra due elementi di uno dei due insiemi. Per assurdo, supponiamo esistano $x, y \in Orb(v)$ collegati da un arco. Per ipotesi esiste un automorfismo ψ che manda (u, v) in (x, y) ; a meno di cambiare nome, presupponiamo che $\psi(u) = y$. Poiché $y \in Orb(v)$, esiste $\eta \in Aut(\mathcal{G})$ tale che $\eta(y) = v$, dunque $\eta(\psi(u)) = v$, cioè $v \in Orb(u)$ che è assurdo in quanto abbiamo supposto le due orbite distinte. \square

Corollario 3.1. Un grafo semplice, connesso, semisimmetrico è bipartito, e il gruppo di automorfismi agisce transitivamente su ciascuna delle due partizioni.

Riassumiamo quanto detto nel seguente schema:



Il più piccolo grafo semisimmetrico è il grafo di Folkmann con 20 vertici. È bipartito, ogni partizione ha 10 vertici (in accordo con il corollario di sopra) e ogni vertice ha grado 4.

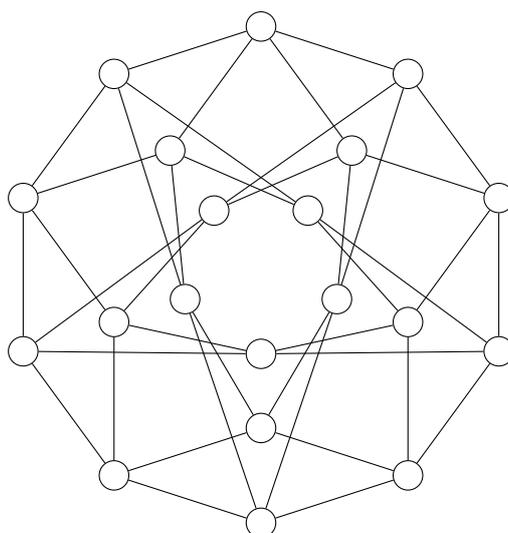


Figura 10: Grafo di Folkmann.

È ragionevole richiedere che per un grafo vertex-transitive, tutte le misure di centralità studiate diano lo stesso valore su ogni vertice. Però per le misure di centralità collegate a funzioni di matrice, c'è una classe di grafi più ampia per cui tutti i vertici hanno necessariamente lo stesso peso.

Definizione 3.9 (Walk-regular). Un grafo orientato (\mathcal{G}, A) si dice *walk-regular* se per ogni $k \geq 0$, la diagonale di A^k ha tutti gli elementi uguali.

Osserviamo che di solito con walk-regular si intendono solo grafi semplici; tuttavia i risultati che mostreremo sono validi anche per eventuali grafi orientati.

Se $q(x)$ è il polinomio minimo di A di grado d , allora $q(A) = 0$, ovvero si può scrivere

$$A^d = c_{d-1}A^{d-1} + \dots + c_1A + c_0I \quad (3.1)$$

Se la diagonale di A^k è costante per $0 \leq k \leq d-1$, allora anche quella di A^d sarà costante. Similmente per le potenze successive A^m con $m \geq d$, moltiplicando l'equazione 3.1 per A^{m-d} si ottiene che anche la diagonale di A^m ha tutti gli elementi uguali. Dunque basta verificare che la diagonale di A^k sia costante per ogni $k \leq d-1$, per stabilire che \mathcal{G} sia walk-regular; inoltre, per il Teorema di Hamilton-Cayley sappiamo che $d \leq n$, dimensione della matrice.

I grafi walk-regular sono stati introdotti in [28]. Essi sono necessariamente regolari (quelli non orientati), e contengono i grafi transitivi per vertici, semisimmetrici e distance regular, che adesso definiamo:

Definizione 3.10 (Distance-regular). Un grafo semplice (\mathcal{G}, A) si dice *distance-regular* se per ogni $k \geq 0$, $[A^k]_{ij}$ dipende solo dalla distanza l tra i e j . Ovverosia, per ogni altra coppia u, v a distanza l , $[A^k]_{ij} = [A^k]_{uv}$.

Si noti che spesso si usa un'altra definizione di distance-regular: al posto dell'ipotesi sul numero di cammini, si chiede che per ogni coppia di vertici i, j a distanza l , il numero di vertici a distanza 1 da j e t da i dipende solo da l (dunque t può essere solo $l-1, l, l+1$). Per altre proprietà di grafi distance-regular rimandiamo a [12, 13, 43].

Proposizione 3.2. Le seguenti classi di grafi: transitivo per vertici, semisimmetrico, distance regular, sono composte tutte da grafi walk-regular.

Dimostrazione. Se \mathcal{G} è vertex-transitive allora tutti i vertici sono isomorfi, dunque hanno tutti le stesse proprietà, tra cui il numero di cammini chiusi $[A^k]_{ii}$ al variare di k .

Se \mathcal{G} è distance-regular allora la tesi segue scegliendo $i = j$, che sono a distanza 0; si ottiene dunque che $[A^k]_{ii}$ è costante al variare di i .

Se \mathcal{G} è semisimmetrico ([25]), per la proposizione 3.1, \mathcal{G} è bipartito e ognuna delle due partizioni è vertex transitive, quindi basta verificare che A^k coincide per due vertici di partizioni diverse. Dato che \mathcal{G} è bipartito e semplice, a meno di permutazioni la matrice di adiacenza si può scrivere nel seguente modo:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^\top & 0 \end{pmatrix}$$

Per k dispari vale $[A^k]_{ii} = 0$, perché non ci sono cammini chiusi di lunghezza dispari. Per k pari si ha:

$$A^{2k} = \begin{pmatrix} (B^\top B)^k & 0 \\ 0 & (BB^\top)^k \end{pmatrix}$$

Per ipotesi \mathcal{G} è regolare, quindi $[A^2]_{hh}$ è costante al variare di h , ovvero $[BB^\top]_{ii} = [B^\top B]_{jj}$ per ogni i, j . Siano m e $n - m$ il numero di vertici in ciascuna partizione di \mathcal{G} , allora B è una matrice $m \times (n - m)$. Vale che

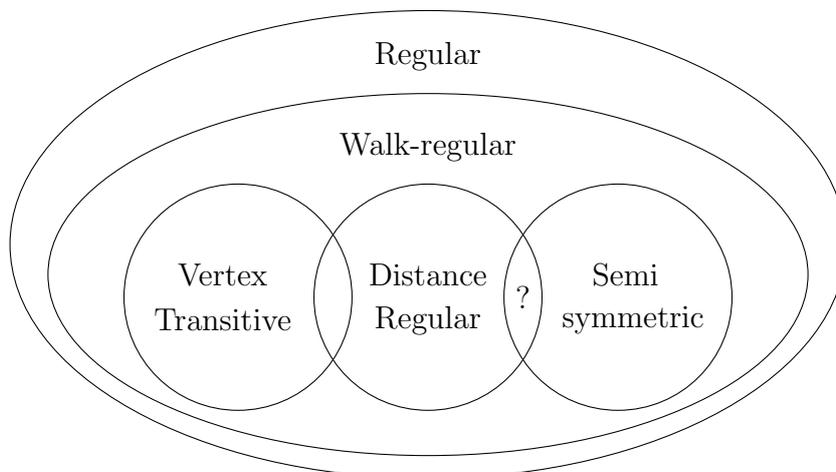
$$m [BB^\top]_{ii} = \text{Tr}(BB^\top) = \text{Tr}(B^\top B) = (n - m) [B^\top B]_{jj}$$

Da cui $m = n - m$, cioè le due partizioni hanno la stessa dimensione.

Inoltre $(B^\top B)^k$ e $(BB^\top)^k$ hanno diagonale costante in quanto i vertici di ogni partizione sono isomorfi tra di loro. Dunque:

$$m [(BB^\top)^k]_{ii} = \text{Tr}((B^\top B)^k) = \text{Tr}((BB^\top)^k) = m [(BB^\top)^k]_{jj}$$

Quindi A è walk regular. Osserviamo che $\text{Tr}((B^\top B)^k) = \text{Tr}((BB^\top)^k)$ rimane vera per qualsiasi grafo edge-transitive, ma è cruciale l'ipotesi che A sia regolare per ottenere che BB^\top e $B^\top B$ hanno la stessa dimensione. \square



Oltre queste tre, non sono note altre classi generali di grafi walk regular. Sono presenti molti esempi sporadici (di solito con pochi autovalori distinti), come quello in figura 16, sezione 3.3; attualmente non si conosce molto sui grafi walk-regular.

Vediamo che risultati otteniamo applicando le misure di centralità a tutte queste classi di grafi con molte simmetrie e regolarità. Nessuna misura può distinguere i vertici di grafi vertex-transitive (dunque neanche di quelli simmetrici), così come non si possono distinguere due vertici isomorfi, ed è giusto che sia così.

La Degree Centrality non distingue i vertici di un grafo regolare (\mathcal{G}, A) , e neanche la Katz Centrality e la Total Communicability. Chiamato d il grado di un vertice, si ha che $A\mathbf{1} = d\mathbf{1}$, $A^2\mathbf{1} = A(d\mathbf{1}) = d^2\mathbf{1}$ e in generale $A^k\mathbf{1} = d^k\mathbf{1}$. Per ogni funzione di

matrice esiste un polinomio p dipendente da A tale che $f(A) = p(A)$, dunque $f(A)\mathbb{1} = p(A)\mathbb{1}$ è una combinazione lineare finita di $A^k\mathbb{1}$, da cui $f(A)\mathbb{1} = p(d)\mathbb{1}$. Per questo $f\text{-}TC(i, t) = [f(tA)\mathbb{1}]_i = p(td)$ non dipende dal vertice i .

Neanche l'Eigenvector Centrality riesce a distinguere i vertici di un grafo regolare: $\mathbb{1}$ è l'autovettore di Perron di A .

Invece misure basate sulla Subgraph Centrality spesso riescono a distinguere vertici in un grafo regolare, come mostra il seguente esempio:

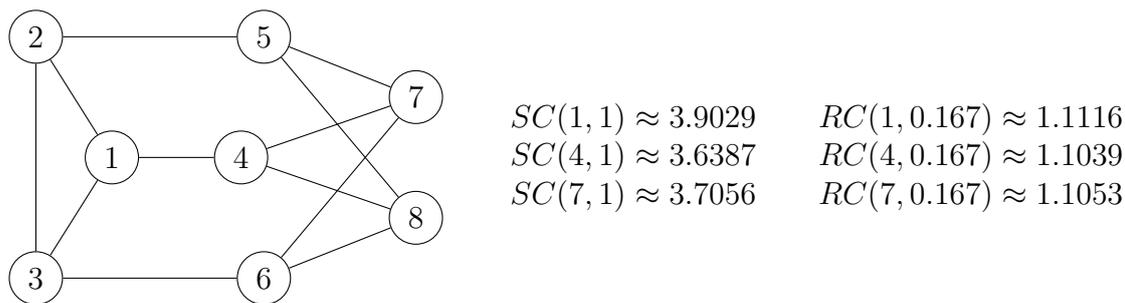


Figura 11

In questo grafo DC, EC, KC, TC, CC danno lo stesso peso a ogni vertice, mentre SC e RC riescono a distinguere vertici non isomorfi (le 3 classi di isomorfismo sono $(1, 2, 3), (4, 5, 6), (7, 8)$). Si è scelto $\beta = 1$ per l'Exponential Subgraph Centrality, e $\alpha = \frac{1}{6} = \frac{1}{2\rho(A)}$ per la Resolvent Subgraph Centrality.

Questo è un primo indizio che le misure basate sulla Subgraph Centrality siano le più sensibili a rilevare differenze tra i vertici, quando molte altre non sono in grado di farlo.

Notiamo però che tutte le misure basate sulla matrice di adiacenza, come $f\text{-}SC, f\text{-}TC, EC, DC$, non riescono a distinguere i vertici di un grafo walk-regular. Infatti visto che $[A^k]_{ii} = [A^k]_{jj}$ per ogni i, j e k , scrivendo ogni funzione di matrice $f(A)$ come polinomio si ottiene che $f(A)_{ii} = f(A)_{jj}$ per ogni i, j . Essendo anche regolari, neppure DC e le $f\text{-}TC$ riescono a distinguere i vertici. Per i limiti visti nei teoremi 2.1, 2.2, anche $EC(i) = EC(j)$.

In generale quindi misure basate sull'algebra lineare non riescono a distinguere i vertici di un grafo walk-regular; ovverosia, per il resto della trattazione i grafi walk-regular sono il nostro limite, oltre il quale non possiamo andare con questi strumenti. Molti dei grafi walk-regular sono transitivi per vertici, quindi in realtà i loro vertici non sono distinguibili in nessun modo; tuttavia come visto nella proposizione 3.2, ci sono esempi di grafi walk-regular che non sono transitivi per vertici. Osserviamo però che la Betweenness Centrality in certi casi riesce a distinguere vertici in grafi walk-regular; vedremo un esempio nella sezione 3.3, per il grafo in figura 16.

Possiamo chiederci invece se fino a tale limite, le misure di centralità viste riescono a distinguere tutti gli altri grafi. Ci sarà utile la seguente definizione:

Definizione 3.11. Un grafo semplice (\mathcal{G}, A) è β -subgraph regular se $SC(i, \beta) = SC(j, \beta)$ per ogni coppia di vertici i, j .

Ovverosia, $SC(\cdot, \beta)$ assegna lo stesso peso a tutti i vertici del grafo. La congettura che vogliamo investigare è la seguente, proposta da Estrada [14]:

Congettura. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo semplice. Allora \mathcal{G} è walk-regular se e solo se è 1-subgraph regular.

Abbiamo visto sopra l'implicazione walk-regular \Rightarrow β -subgraph regular, per ogni β . Nella sezione 3.3 dimostreremo che questa congettura è vera in una versione più forte.

3.2 Vertici cospettrali e interlacciamenti

Trattando grafi walk-regular, abbiamo richiesto che valga $[A^k]_{ii} = [A^k]_{jj}$ per ogni coppia di vertici i, j . Tuttavia possiamo indebolire la condizione, chiedendo che questa relazione valga solo per due specifici vertici. Questo implica comunque che i due vertici abbiano molte proprietà in comune.

Definizione 3.12 (Vertici cospettrali). Due vertici i, j di un grafo orientato (\mathcal{G}, A) si dicono *cospettrali* se per ogni $k \geq 0$, vale $[A^k]_{ii} = [A^k]_{jj}$.

Due vertici isomorfi sono necessariamente cospettrali, ma non vale il viceversa. Per il grafo in figura 12, sono riportati nella tabella i valori di $[A^k]_{ii}$. Come per i grafi walk regular, è sufficiente verificare che $[A^k]_{ii} = [A^k]_{jj}$ per $0 \leq k \leq n - 1$ per determinare la cospettralità di i, j ; nella tabella sono assenti $k = 0, 1$ per cui è banalmente vero.

Per quanto detto sopra i vertici 3,7,8 sono cospettrali. Tuttavia 7 e 8 sono isomorfi tra di loro, ma non sono isomorfi a 3: ogni automorfismo lascia fisso il vertice 6 perché è l'unico di grado 4, dunque $\{7, 8\}$ si scambiano o rimangono fissi.

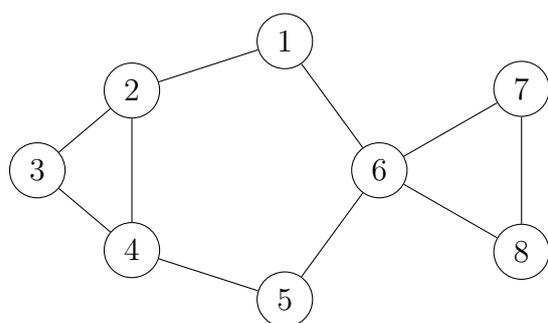


Figura 12

	$k \longrightarrow$					
$[A^k]_{ii}$	2	3	4	5	6	7
1	2	0	9	6	49	64
2	3	2	13	18	68	130
3	2	2	8	14	42	88
4	3	2	13	18	68	130
5	2	0	9	6	49	64
6	4	2	20	20	110	160
7	2	2	8	14	42	88
8	2	2	8	14	42	88

Osserviamo che un grafo è walk regular se e solo se tutte le coppie di vertici sono cospettrali.

Così come le misure di centralità basate su funzioni di matrice danno lo stesso peso a tutti i vertici di un grafo walk-regular, misure basate sulla Subgraph Centrality non riescono a distinguere due vertici cospettrali.

Proposizione 3.3. Sia A una matrice e i, j due vertici cospettrali. Allora per ogni funzione di matrice $f(\cdot)$ definita su A , $[f(A)]_{ii} = [f(A)]_{jj}$.

Dimostrazione. Date f ed A , per la proposizione 1.12 esiste un polinomio $p(x) = \sum_{k=0}^m c_k x^k$ tale che $p(A) = f(A)$. L'ipotesi di cospettralità è che $[A^k]_{ii} = [A^k]_{jj}$ per ogni k , dunque:

$$[f(A)]_{ii} = [p(A)]_{ii} = \sum_{k=0}^m c_k [A^k]_{ii} = \sum_{k=0}^m c_k [A^k]_{jj} = [p(A)]_{jj} = [f(A)]_{jj} \quad \square$$

Questo vuol dire che due vertici cospettrali non si possono distinguere tramite la Resolvent o Exponential Subgraph Centrality per ogni possibile scelta del parametro. Per i limiti visti nel corollario 2.1, in grafi semplici neanche la Eigenvector Centrality riesce a distinguerli (e tantomeno la Degree Centrality, perché $d(i) = [A^2]_{ii} = [A^2]_{jj} = d(j)$). Vale anche il viceversa [4]:

Proposizione 3.4. Sia \mathcal{G} un grafo orientato [pesato] con matrice di adiacenza A .

1. Se $SC(i, \beta) = SC(j, \beta)$ per tutti i β in un intervallo [insieme con un punto di accumulazione], allora i e j sono cospettrali.
2. Se $RC(i, \alpha) = RC(j, \alpha)$ per tutti gli α in un intervallo [insieme con un punto di accumulazione], allora i e j sono cospettrali.

Dimostrazione. Per la proposizione 1.11, si ha:

$$SC(i, \beta) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \beta^k [A^k]_{ii}$$

dove c_k sono i coefficienti della serie di Taylor centrata in 0 di e^x . Sia $g(\beta)$ la seguente differenza:

$$g(\beta) = SC(i, \beta) - SC(j, \beta) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \beta^k ([A^k]_{ii} - [A^k]_{jj})$$

$g(\beta)$ è una funzione analitica, e la sua espansione in serie di Taylor ha come coefficienti $c_k ([A^k]_{ii} - [A^k]_{jj})$. Per ipotesi esiste un intervallo \mathcal{I} (in realtà basta un insieme con un punto di accumulazione) tale che per ogni $\beta \in \mathcal{I}$, $SC(i, \beta) = SC(j, \beta)$, ovvero $g(\beta) = 0$. Visto che g è una funzione analitica, se è nulla su un dominio non discreto, vuol dire che g è nulla ovunque. Dunque i coefficienti sono tutti nulli, ovvero $[A^k]_{ii} = [A^k]_{jj}$ per ogni k , come richiesto.

La dimostrazione per la Resolvent Subgraph Centrality è analoga, sostituendo a e^x la funzione $\frac{1}{1-x}$, che è anch'essa analitica ristretta a un dominio opportuno. \square

Osserviamo che avere $RC(i, \alpha) = RC(j, \alpha)$ o $SC(i, \beta) = SC(j, \beta)$ per un solo valore del parametro non implichi la cospettralità, come abbiamo visto con il fenomeno dell'interlacciamento. Ci chiediamo se questo risultato possa essere migliorato; la risposta è sì, ed esistono dei bound dall'alto: se $RC(i, \alpha)$, $RC(j, \alpha)$ coincidono per n valori di α , allora i e j sono cospettrali, e analogamente per l'Exponential Subgraph Centrality.

Il seguente grafo è un esempio in cui due vertici non cospettrali hanno la stessa Eigenvector Centrality. I vertici 2,3,4 hanno grado 4, i vertici 1,5 hanno grado 5. L'autovettore di Perron è $(2, 2, 2, 2, 2, 1, 1)$ con autovalore 4. A meno di riscalare, $EC(1) = EC(5) = EC(2) = EC(3) = EC(4) = 2$, dunque due classi non cospettrali di vertici hanno la stessa Eigenvector Centrality.

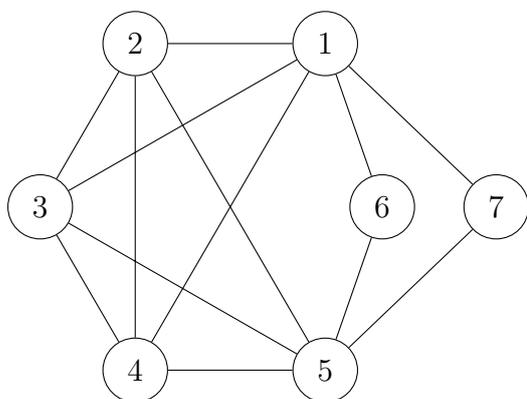


Figura 13

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\rho(A) = 4$$

$$v \text{ autovettore di Perron} \\ v = (2, 2, 2, 2, 2, 1, 1)$$

Definizione 3.13 (Funzione generatrice dei cammini). Data A matrice (con relativo grafo pesato \mathcal{G}), definiamo la *funzione generatrice dei cammini* per il vertice i nel seguente modo:

$$W_A(i, t) = \sum_{k=0}^{\infty} [A^k]_{ii} t^k$$

Proposizione 3.5. Sia A matrice con raggio spettrale $\rho > 0$. Allora per ogni i , il raggio di convergenza della serie di potenze di $W_A(i, t)$ è $\frac{1}{\rho}$. Nel caso $\rho = 0$, il raggio di convergenza è infinito.

Dimostrazione. Data $f(x) = \frac{1}{1-x}$, la sua espansione in serie di Taylor in 0 è $f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} x^k$ con raggio di convergenza 1. Se $t < \frac{1}{\rho}$ allora $\rho(tA) < 1$, dunque si può applicare la proposizione 1.11 per ottenere che $f(tA) = \sum_{k=0}^{\infty} t^k A^k$ e dunque $[f(tA)]_{ii} = W_A(i, t)$ per ogni i . \square

Sia $B(t) = I - tA$, allora $B(t)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} t^k A^k$. Si ha che $W_A(i, t)$ è l' i -esima entrata diagonale di questa matrice, ed è possibile calcolarla facendo uso della matrice aggiunta:

$$W_A(i, t) = [B(t)^{-1}]_{ii} = (-1)^{2i} \frac{\det(B_{[i]})}{\det B} = \frac{\det(I - t A_{[i]})}{\det(I - t A)} \quad (3.2)$$

dove $B_{[i]}$ è la matrice $(n - 1) \times (n - 1)$ ottenuta da B rimuovendo l' i -esima riga e l' i -esima colonna. L'espressione 3.2 è importante, in quanto lega matrici ridotte, i loro minori, le funzioni generatrici dei cammini, e la Katz Centrality, e permette di giungere alla seguente proposizione [27]:

Teorema 3.1. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo orientato [pesato], e sia ρ il raggio spettrale di A . Siano i, j due vertici. I seguenti fatti sono equivalenti:

1. per ogni k , $[A^k]_{ii} = [A^k]_{jj}$ (ovvero i, j sono cospettrali)
2. Le funzioni $W_A(i, t) = W_A(j, t)$ sono uguali per ogni $t \in [0, \frac{1}{\rho}]$
3. Per ogni proiettore spettrale E_h di A e ogni parte nilpotente N_h con indice b_h , per ogni $1 \leq k \leq b_h - 1$, si ha $[E_h]_{ii} = [E_h]_{jj}$ e $[N_h^k]_{ii} = [N_h^k]_{jj}$.
4. $A_{[i]}$ e $A_{[j]}$ hanno lo stesso spettro con molteplicità.

Dimostrazione. 1) \Rightarrow 2) $W_A(i, t)$ e $W_A(j, t)$ sono serie di potenze in t con tutti i coefficienti uguali, dunque sono la stessa funzione.

2) \Rightarrow 1) $W_A(i, t)$ e $W_A(j, t)$ sono funzioni analitiche in t che coincidono su un intervallo, dunque devono avere necessariamente gli stessi coefficienti.

3) \Rightarrow 1) Si ha che $A^k = \sum_{h=1}^d (\mu_h E_h + N_h)^k$. Ricordiamo che E_h è idempotente, che $E_h N_h = N_h E_h = N_h$ e $N_h^{b_h} = 0$, da cui si deduce:

$$\begin{aligned} A^k &= \sum_{h=1}^d (\mu_h E_h + N_h)^k = \sum_{h=1}^d \left(\mu_h^d E_h + \sum_{l=1}^{b_h-1} \binom{d}{l} \mu_h^{d-l} N_h^l \right) \\ [A^k]_{ii} &= \sum_{h=1}^d \left(\mu_h^d [E_h]_{ii} + \sum_{l=1}^{b_h-1} \binom{d}{l} \mu_h^{d-l} [N_h^l]_{ii} \right) = \\ &= \sum_{h=1}^d \left(\mu_h^d [E_h]_{jj} + \sum_{l=1}^{b_h-1} \binom{d}{l} \mu_h^{d-l} [N_h^l]_{jj} \right) = [A^k]_{jj} \end{aligned}$$

1) \Rightarrow 3) Per ogni E_h e N_h , esistono polinomi $p_h(x)$ e $q_h(x)$ tali che $p_h(A) = E_h$ e $q_h(A) = N_h$. Questo vuol dire:

$$[E_h]_{ii} = [p_h(A)]_{ii} = [p_h(A)]_{jj} = [E_h]_{jj}$$

E per ogni $k \geq 1$:

$$[N_h^k]_{ii} = [q_h(A)^k]_{ii} = [q_h(A)^k]_{jj} = [N_h^k]_{jj}$$

4) \Rightarrow 2) L'ipotesi di 4) equivale a dire che $A_{[i]}$ e $A_{[j]}$ hanno lo stesso polinomio caratteristico.

$$P_{A_{[i]}}(x) = \det(xI - A_{[i]}) = \det(xI - A_{[j]}) = P_{A_{[j]}}(x)$$

Utilizzando che $\frac{1}{x^n} \det(xI - A_{[i]}) = \det(I - \frac{1}{x} A_{[i]})$, sostituendo $t = \frac{1}{x}$ si ottiene:

$$W_A(i, t) = \frac{\det(I - tA_{[i]})}{\det(I - tA)} = \frac{\det(I - tA_{[j]})}{\det(I - tA)} = W_A(j, t)$$

2) \Rightarrow 4) Si ha che $\frac{\det(I-tA_{[i]})}{\det(I-tA)} = \frac{\det(I-tA_{[j]})}{\det(I-tA)}$ per ogni t nell'intervallo di definizione, dunque $\det(I-tA_{[i]}) = \det(I-tA_{[j]}) \forall t \in (0, \frac{1}{\rho})$. Entrambi i determinanti sono dei polinomi in t di grado $n-1$; inoltre sono legati ai polinomi caratteristici di $A_{[i]}$ e $A_{[j]}$ come visto sopra. Visto che coincidono per tutti i valori di t in un intervallo devono coincidere come polinomi, cioè hanno gli stessi coefficienti. Utilizzando il cambio di variabile $t = \frac{1}{x}$ otteniamo che $A_{[i]}$, $A_{[j]}$ hanno lo stesso polinomio caratteristico. \square

Osserviamo che la proposizione è comunque vera se si richiede nel punto 2) che $W_A(i, t)$ e $W_A(j, t)$ coincidano per un qualsiasi intervallo (o anche insieme contenuto in $(0, \frac{1}{\rho})$ con un punto di accumulazione interno). Infatti, il principio di uguaglianza di funzioni analitiche continua a valere in questo caso. Inoltre, se A è diagonalizzabile (per esempio per \mathcal{G} semplice), allora la condizione del punto 3) si semplifica, richiedendo solo che $[E_h]_{ii} = [E_h]_{jj}$ per ogni h .

Abbiamo visto esempi di vertici i, j cospettrali ma non isomorfi. I due grafi ottenuti da \mathcal{G} rimuovendo i vertici i, j hanno lo stesso polinomio caratteristico e lo stesso spettro, ma in generale non sono isomorfi tra di loro. Lo spettro di un grafo non è dunque un invariante completo, però permette comunque di ottenere molte informazioni sul grafo.

Legata a questi aspetti, c'è la congettura di ricostruzione, proposta da Kelly e Ulam [39]. Essa afferma che conoscendo gli n grafi ottenuti rimuovendo un vertice da \mathcal{G} , è possibile determinare univocamente \mathcal{G} . Attualmente è un problema aperto; è stato però dimostrato vero per alcune classi di grafi (per esempio alberi o grafi regolari). Un possibile controesempio alla congettura deve essere necessariamente formato da due grafi cospettrali. Per inciso, i vertici cospettrali sono stati introdotti in [46] per mostrare che quasi tutti gli alberi sono cospettrali a qualche altro grafo.

Vediamo dunque che studiare le condizioni sotto le quali due vertici risultano cospettrali può dare risultati utili in molti ambiti della teoria dei grafi.

Nell'ultima parte della dimostrazione di 3.1 ci si è ricondotti a dimostrare un'uguaglianza di polinomi sapendo che coincidono su un intervallo. Si può ottenere lo stesso risultato con un'ipotesi più debole:

Teorema 3.2. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo orientato [pesato] con n vertici. Siano i, j due vertici tali che $RC(i, \alpha) = RC(j, \alpha)$ per n valori distinti di α . Allora i e j sono cospettrali.

Dimostrazione. Utilizzando l'espressione 3.2, si ha:

$$RC(i, \alpha) = [(I - tA)^{-1}]_{ii} = W_A(i, \alpha) = \frac{\det(I - \alpha A_{[i]})}{\det(I - \alpha A)}$$

L'ipotesi che $RC(i, \alpha) = RC(j, \alpha)$ implica che $\det(I - \alpha A_{[i]}) = \det(I - \alpha A_{[j]})$ per gli stessi n valori di α . $A_{[i]}$ e $A_{[j]}$ sono matrici di dimensione $n-1$, quindi i determinanti sono polinomi di grado $n-1$ in α e coincidono per n valori distinti, dunque coincidono come polinomi e hanno tutti i coefficienti uguali.

Quindi vale l'ipotesi 2) del teorema 3.1 e dunque i, j sono cospettrali. \square

Corollario 3.2. In un grafo orientato [pesato] (\mathcal{G}, A) , se due vertici i, j non sono cospettrali, le Resolvent Subgraph Centrality $RC(i, \alpha), RC(j, \alpha)$ possono interlacciarsi al massimo $n - 1$ volte.

Nel caso in cui \mathcal{G} è semplice la stima dall'alto del numero di interlacciamenti può essere ridotto. Useremo il seguente teorema, la cui dimostrazione si può trovare in [30]:

Teorema 3.3 (Interlacciamento di Cauchy o Separazione di Poincaré). Sia A una matrice reale simmetrica $n \times n$, S una matrice $n \times p$ con $p < n$ tale che $S^\top S = I_p$. Sia $B = S^\top A S$, anch'essa reale simmetrica. Siano $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n$ gli autovalori di A e $\eta_1 \geq \dots \geq \eta_p$ quelli di B . Allora per ogni i , $1 \leq i \leq p$ si ha:

$$\lambda_i \geq \eta_i \geq \lambda_{n-p+i} \quad (3.3)$$

In particolare, se $p = n - 1$ e S è l'identità I_n a cui è tolta la j -esima colonna, allora B diviene la matrice ridotta $B = A_{[j]}$. Per gli autovalori si ha:

$$\lambda_1 \geq \eta_1 \geq \lambda_2 \geq \eta_2 \geq \dots \geq \lambda_{n-1} \geq \eta_{n-1} \geq \lambda_n$$

Teorema 3.4. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo semplice su n vertici, e supponiamo che A abbia d autovalori distinti. Siano i, j due vertici tali che $RC(i, \alpha) = RC(j, \alpha)$ per d valori di α compresi nell'intervallo $(0, \frac{1}{\rho(A)})$. Allora i e j sono cospettrali.

Dimostrazione. Siano $\mu_1 \geq \dots \geq \mu_d$ gli autovalori di A non ripetuti, e sia m_h la molteplicità di μ_h . Per il teorema 3.3, $A_{[i]}$ ha $m_h - 1$ autovalori compresi tra μ_h e μ_h , dunque ha $m_h - 1$ autovalori uguali a μ_h (contati con molteplicità).

Quindi conosciamo con certezza $\sum_{h=0}^d (m_h - 1) = n - d$ autovalori dei $n - 1$ totali di $A_{[i]}$, dunque il polinomio caratteristico di $A_{[i]}$ sarà della forma:

$$P_{A_{[i]}}(x) = \left(\prod_{h=0}^d (x - \mu_h)^{m_h - 1} \right) (x - \gamma_1) \dots (x - \gamma_{d-1}) = q_i(x) \prod_{h=0}^d (x - \mu_h)^{m_h - 1}$$

dove i γ_k sono gli altri autovalori di $A_{[i]}$, possibilmente uguali tra di loro o a qualcun altro dei μ_h . Vale una formula analoga per $A_{[j]}$:

$$P_{A_{[j]}}(x) = \left(\prod_{h=0}^d (x - \mu_h)^{m_h - 1} \right) (x - \theta_1) \dots (x - \theta_{d-1}) = q_j(x) \prod_{h=0}^d (x - \mu_h)^{m_h - 1}$$

Dunque $P_{A_{[i]}}(x)$ e $P_{A_{[j]}}(x)$ sono polinomi di grado $n - 1$ che hanno un fattore di grado $n - d$ in comune; per dimostrare che sono coincidenti, ci basta confrontare $q_i(x)$ e $q_j(x)$. L'ipotesi che $RC(i, \alpha) = RC(j, \alpha)$ per d valori $\alpha = \alpha_1, \dots, \alpha_d$ implica che $P_{A_{[i]}}(x)$ e $P_{A_{[j]}}(x)$ coincidano su d valori $x = \frac{1}{\alpha_1}, \dots, \frac{1}{\alpha_d}$. Visto che $\alpha_l < \frac{1}{\rho(A)}$, si ha $x_l > \rho(A) \geq \mu_h$, quindi gli x_l non sono zeri del fattore comune di grado $n - d$. Dunque $q_i(x)$ e $q_j(x)$ coincidono sui d valori x_l . Essendo polinomi di grado $d - 1$, segue che sono lo stesso polinomio e $P_{A_{[i]}}(x) = P_{A_{[j]}}(x)$. Segue che i, j sono cospettrali per il teorema 3.1. \square

Corollario 3.3. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo semplice, e sia d il numero di autovalori distinti di A . Se due vertici i, j non sono cospettrali, le Resolvent Subgraph Centrality $RC(i, \alpha), RC(j, \alpha)$ possono interlacciarsi al massimo $d - 1$ volte.

Il numero di interlacciamenti limitato da d vale anche per la Subgraph Centrality. Per dimostrarlo ci servirà il seguente lemma:

Proposizione 3.6. Siano $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ reali distinti e siano c_1, \dots, c_n reali (non necessariamente distinti). Si definisca la seguente funzione:

$$f(\beta) = c_1 e^{\beta \lambda_1} + c_2 e^{\beta \lambda_2} + \dots + c_n e^{\beta \lambda_n}$$

Si supponga che $f(\beta)$ non sia costante, ovvero che i c_i non siano tutti nulli, e se c'è un solo $c_j \neq 0$, allora il relativo $\lambda_j \neq 0$.

Allora l'equazione $f(\beta) = 0$ ha al massimo $n - 1$ soluzioni, e $f(\beta) = a$ con $a \neq 0$ ne ha al massimo n .

Dimostrazione. Procediamo per induzione su n . Nel caso $n = 1$ si ha $f(\beta) = c_1 e^{\beta \lambda_1}$, che è una funzione iniettiva e mai nulla se $c_1 \neq 0$.

Assumiamo ora che la tesi sia vera per qualsiasi $f_n(\beta)$ somma di n addendi esponenziali, e dimostriamolo per $f_{n+1}(\beta) = c_1 e^{\beta \lambda_1} + \dots + c_n e^{\beta \lambda_n} + c_{n+1} e^{\beta \lambda_{n+1}}$.

Senza perdita di generalità possiamo assumere che $c_{n+1} \neq 0$. Si ha che

$$\begin{aligned} f_{n+1}(\beta) = 0 &\iff \frac{f_{n+1}(\beta)}{c_{n+1} e^{\beta \lambda_{n+1}}} = 0 \\ \frac{f_{n+1}(\beta)}{c_{n+1} e^{\beta \lambda_{n+1}}} &= \frac{c_1}{c_{n+1}} e^{\beta(\lambda_1 - \lambda_{n+1})} + \dots + \frac{c_n}{c_{n+1}} e^{\beta(\lambda_n - \lambda_{n+1})} + 1 = \\ &= d_1 e^{\beta \mu_1} + \dots + d_n e^{\beta \mu_n} + 1 = g_n(\beta) + 1 \end{aligned}$$

dove $d_i = \frac{c_i}{c_{n+1}}$ e $\mu_i = \lambda_i - \lambda_{n+1}$. Si ha che $\frac{f_{n+1}(\beta)}{c_{n+1} e^{\beta \lambda_{n+1}}} = 0$ se e solo se $g_n(\beta) = -1$; però $g_n(\beta)$ è una somma di n addendi esponenziali, dunque per ipotesi induttiva ci sono al massimo n soluzioni a $g_n(\beta) = -1$, che sono le stesse di $f_{n+1}(\beta) = 0$.

Sia ora $a \neq 0$, e supponiamo che l'equazione $f_{n+1}(\beta) = a$ abbia k soluzioni $\beta_1 < \beta_2 < \dots < \beta_k$.

Applicando ripetutamente il teorema di Rolle, otteniamo che esistono $k - 1$ punti $\gamma_1, \dots, \gamma_{k-1}$ con $\beta_i < \gamma_i < \beta_{i+1}$ e tali che $f'_{n+1}(\gamma_i) = 0$.

$$f'_{n+1}(\gamma) = c_1 \lambda_1 e^{\gamma \lambda_1} + \dots + c_n \lambda_n e^{\gamma \lambda_n} + c_{n+1} \lambda_{n+1} e^{\gamma \lambda_{n+1}}$$

Se almeno per un i si ha $c_i \lambda_i \neq 0$, allora vale il risultato dimostrato precedentemente ed esistono al massimo $n - 1$ soluzioni a $f'_{n+1}(\gamma) = 0$, dunque $k - 1 \leq n - 1$ e $k \leq n$.

Se invece $c_i \lambda_i = 0$ per tutti gli i , allora $f'_{n+1}(x) = 0$ per ogni x , dunque $f_{n+1}(x)$ è costante, il che contraddice l'ipotesi iniziale. \square

Corollario 3.4. Siano $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ reali distinti e β_1, \dots, β_n reali distinti. Allora la matrice M con $M_{ij} = e^{\beta_i \lambda_j}$ è non singolare.

Dimostrazione. Supponiamo che la matrice sia singolare, allora le colonne di M sono linearmente dipendenti ed esistono dei coefficienti c_1, \dots, c_n , non tutti nulli, tali che

$$\sum_{j=1}^n c_j e^{\beta_i \lambda_j} = 0 \text{ per ogni } i.$$

Inoltre nessuna entrata della matrice è nulla, quindi ci sono almeno due $c_j \neq 0$.

Questo vuol dire che la funzione $f(\beta) = \sum_{j=1}^n c_j e^{\beta \lambda_j}$ rispetta le ipotesi della proposizione

3.6, dunque l'equazione $f(\beta) = 0$ ha al massimo $n - 1$ soluzioni, mentre β_1, \dots, β_n dovrebbero soddisfarla, da cui l'assurdo. \square

Teorema 3.5. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo orientato [pesato] con A diagonalizzabile. Sia d il numero di autovalori distinti di A , e assumiamo che siano tutti reali. Dati i, j due vertici, se $[e^{\beta A}]_{ii} = [e^{\beta A}]_{jj}$ per d valori di β , allora i, j sono cospettrali.

Dimostrazione. Sia $A = QDQ^{-1}$, allora utilizzando la formula 1.9 per $f(x) = e^{\beta x}$ si ottiene:

$$[e^{\beta A}]_{ii} = \sum_{h=1}^d e^{\beta \mu_h} [E_h]_{ii}$$

Una formula analoga vale per il vertice j . Sia $f(\beta)$ la seguente funzione:

$$f(\beta) = [e^{\beta A}]_{ii} - [e^{\beta A}]_{jj} = \sum_{h=1}^d e^{\beta \mu_h} C_h$$

con $C_h = [E_h]_{ii} - [E_h]_{jj}$.

L'ipotesi è che $f(\beta) = 0$ per d valori di β . Tuttavia per la proposizione 3.6 questo è impossibile a meno che tutti i coefficienti siano nulli, cioè $C_h = 0$ per ogni h e di conseguenza $f(\beta)$ sia identicamente nulla. Dunque per ogni β si ha $[e^{\beta A}]_{ii} = [e^{\beta A}]_{jj}$, e per la proposizione 3.4 questo vuol dire che i, j sono cospettrali. \square

Corollario 3.5. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo orientato [pesato] con A diagonalizzabile. Sia d il numero di autovalori distinti di A , che assumiamo essere tutti reali. Dati i, j due vertici non cospettrali, le centralità $SC(i, \beta)$ e $SC(j, \beta)$ possono coincidere per al massimo $d - 1$ valori di β .

Abbiamo visto che ci possono essere al massimo $d - 1$ interlacciamenti sia per l'Exponential che per la Resolvent Subgraph Centrality. Questo in realtà è una stima abbastanza larga: nella maggioranza dei casi ci sono 0 o 1 interlacciamenti. Il grafo più piccolo che ha 2 interlacciamenti per l'Exponential Subgraph Centrality ha 9 vertici, ed è rappresentato in figura 14.

Invece il grafo più piccolo che ha interlacciamento doppio per la Resolvent Subgraph Centrality ha 10 vertici, in figura 15.

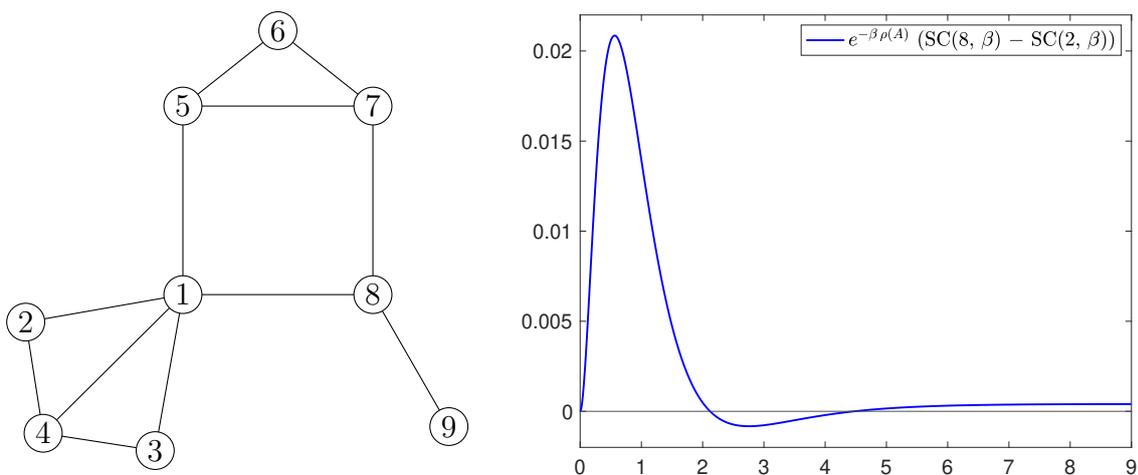


Figura 14: A sinistra, grafo con 9 vertici. I vertici 2 e 3 sono isomorfi, e c'è interlacciamento doppio dell'Exponential Subgraph Centrality per i vertici 2 e 8. A destra, grafico della funzione $e^{-\beta \rho(A)} (SC(8, \beta) - SC(2, \beta))$: si annulla in $\beta \approx 2.12, 4.48$.

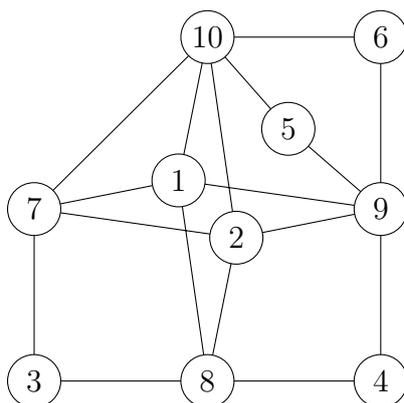
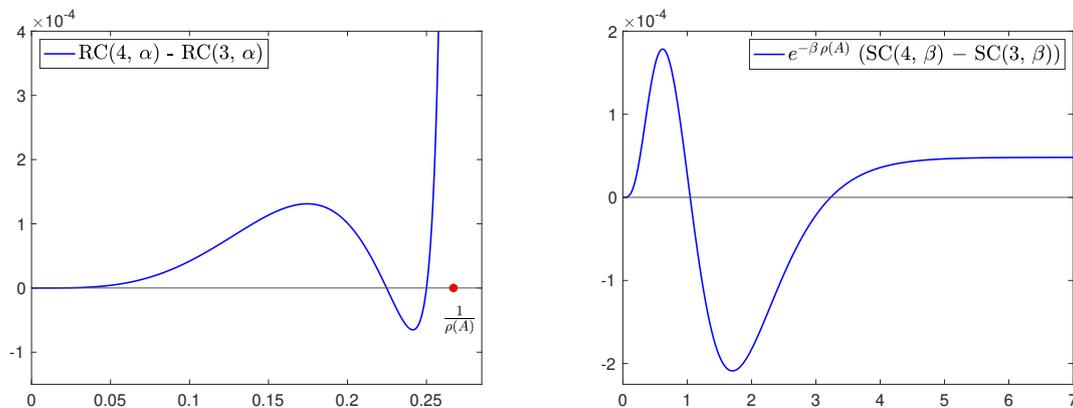


Figura 15: In alto, grafo con 10 vertici. In basso a sinistra, interlacciamento doppio della Resolvent Subgraph Centrality tra i vertici 3 e 4. In basso a destra, interlacciamento doppio dell'Exponential Subgraph Centrality per gli stessi vertici.



Abbiamo controllato computazionalmente che non ci sono interlacciamenti doppi per grafi fino a 8 vertici, mentre circa 150 dei 270000 grafi con 9 vertici presentano interlacciamento doppio dell'Exponential Subgraph Centrality. Controllando esaustivamente non abbiamo trovato grafi piccoli con interlacciamento triplo, soltanto alcuni generati casualmente con circa $n \approx 300$ vertici; molto probabilmente esistono grafi notevolmente più piccoli con interlacciamento triplo.

Questa evidenza sperimentale porta a dire che le stime trovate nei corollari 3.2, 3.3, 3.5 sono molto larghe. Osserviamo però che le dimostrazioni si basano su lemmi validi per qualsiasi matrice (eventualmente simmetrica o diagonalizzabile) A , non solo per matrici con entrate in $\{0, 1\}$. I risultati ottenuti sono quindi validi in generale per grafi pesati (anche con pesi negativi), per questo è ragionevole aspettarsi molte più restrizioni per grafi non pesati, dove A può avere solo entrate 0 o 1.

Inoltre sono molto più frequenti fenomeni di interlacciamento doppio per l'Exponential Subgraph Centrality che per la Resolvent. Per esempio, in figura 15 si vede che la “valle” sotto l'asse delle ascisse della RC è più piccola di quella della SC . In molti dei casi in cui c'è interlacciamento doppio per la SC , il grafico della differenza delle RC presenta una valle che però non scende sotto lo 0; non ci sono quindi punti di interlacciamento.

Abbiamo visto che vertici cospettrali hanno la stessa centralità (Exponential e Resolvent) per tutti i valori del parametro; abbiamo visto che è vero anche il viceversa, prima supponendo che le centralità coincidano per tutti i valori in un intervallo, poi solo con un numero finito.

Nella prossima sezione mostreremo che è sufficiente che l'Exponential Subgraph Centrality di i e j coincidano per un solo valore di β per stabilire la cospettralità, a patto che β sia algebrico. Questo è un notevole miglioramento delle stime precedenti, anche se non garantisce il non interlacciamento di due vertici non cospettrali (però, dimostra che il β a cui avviene l'interlacciamento è necessariamente trascendente).

3.3 Dimostrazione della congettura di Estrada

Ripercorriamo la storia della congettura, con i vari risultati intermedi che si sono ottenuti e con generalizzazioni proposte.

L'Exponential Subgraph Centrality è stata introdotta da Estrada e Rodríguez-Velázquez in [20] per $\beta = 1$, e successivamente è stata generalizzata per altri valori di β in [17, 18]. Nel primo articolo, una delle motivazioni per l'introduzione di questa misura di centralità è che riesce a distinguere vertici in alcuni grafi regolari (come quello in figura 11), dove altre misure fallivano. È stata proposta la seguente congettura:

Congettura 1. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo semplice, che sia anche 1-subgraph regular. Allora la Degree, Eigenvector, Closeness, Betweenness Centrality sono uguali per tutti i nodi del grafo.

Ricordiamo che un grafo è β -subgraph regular se $SC(i, \beta) = SC(j, \beta)$ per ogni i, j .

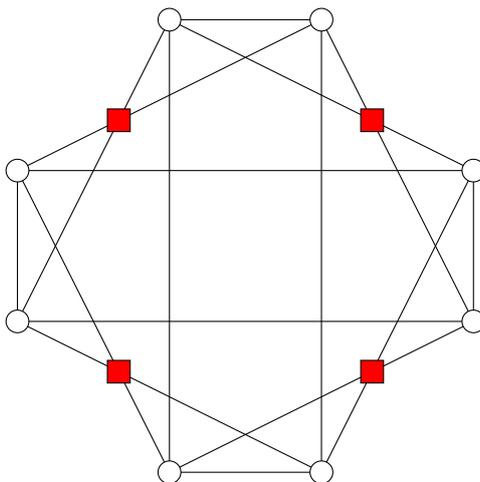


Figura 16: Grafo walk-regular in cui Betweenness e Closeness Centrality non danno lo stesso peso a tutti i vertici. Non è né transitivo per vertici, né distance-regular, né semisimmetrico.

È stato trovato un controesempio da Rombach e Porter [42] per la Closeness e Betweenness Centrality, con il grafo in figura 16; è un esempio di grafo walk-regular non facente parte di nessuna delle tre categorie descritte nella proposizione 3.2.

Il grafo ha 12 vertici, divisi in due classi di isomorfismo; la prima ha 8 vertici, rappresentati in figura con pallini bianchi, di cui ne indicheremo uno generico con b ; la seconda ne ha 4, rappresentati con quadrati rossi, e ne indicheremo uno generico con r .

Per la Betweenness Centrality si ha $BC(r) = 8$ e $BC(b) = 7$, mentre per la Closeness Centrality $CC(r) = \frac{1}{19}$ e $CC(b) = \frac{1}{18}$. Dunque queste misure di centralità possono distinguere vertici di un grafo walk-regular. Si osservi che in questo caso danno ordinamenti diversi: per la Betweenness Centrality sono più importanti i rossi, mentre per la Closeness Centrality i bianchi.

La congettura 1 però è rimasta aperta per quanto riguarda la Degree e la Eigenvector Centrality. Nel 2013 Estrada ha proposto il seguente rafforzamento in [14]:

Congettura 2. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo semplice. \mathcal{G} è 1-subgraph regular se e solo se è walk-regular.

Come abbiamo visto, un grafo walk-regular è necessariamente β -subgraph regular per tutti i valori di β ; inoltre la Degree ed Eigenvector Centrality non riescono a distinguere i suoi vertici. La parte non facile è dimostrare che un grafo non walk-regular non può essere 1-subgraph regular.

Una quantità legata all'Exponential Subgraph Centrality di parametro generico è la *walk entropy* di un grafo [16, 17], definita nel seguente modo:

$$S(\mathcal{G}, \beta) = - \sum_{i=1}^n p_i \log(p_i) \quad \text{con } p_i = \frac{[e^{\beta A}]_{ii}}{\text{Tr}(e^{\beta A})} \quad (3.4)$$

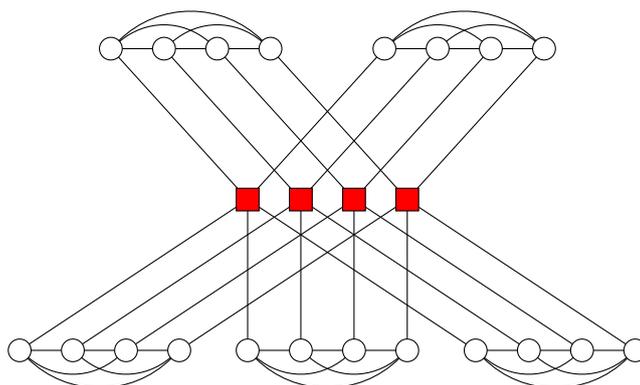


Figura 17: Grafo non walk-regular ma che è β -subgraph regular per $\beta \approx 0.498, 1.911$.

Si vede facilmente che il massimo di $S(\mathcal{G}, \beta)$ è $\log(n)$ e che può essere raggiunto solo se tutti i p_i sono uguali, cioè se \mathcal{G} è β -subgraph regular.

Nel 2014 [16] è stato congetturato che un grafo è walk-regular se è solo se è β -subgraph regular per ogni $\beta > 0$. Questo è stato dimostrato da Benzi nello stesso anno in [4], in maniera simile a come abbiamo visto nella proposizione 3.4. In quest'ultimo articolo è stato proposto il seguente rafforzamento della congettura 2:

Congettura 3. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo semplice e sia $\beta > 0$. \mathcal{G} è β -subgraph regular se e solo se è walk-regular.

A questa tuttavia è stato trovato un controesempio da Sullivan et al. in [32, 36]; questo ha mostrato l'incorrettezza di una dimostrazione proposta precedentemente in [15].

Il grafo del controesempio ha 24 vertici ed è illustrato in figura 17.

L'idea alla base della sua costruzione è di sfruttare l'interlacciamento tra le Subgraph Centrality. I vertici di questo grafo formano due classi di isomorfismo, una con 20 vertici (indicati con pallini bianchi) e una con 4 (indicati con quadrati rossi). Ognuno dei 5 gruppi da 4 di vertici bianchi forma un sottografo completo con matrice di adiacenza M ; i vertici rossi connettono vertici bianchi di gruppi diversi. La matrice di adiacenza dell'intero grafo è A , rappresentata nella seguente forma a blocchi.

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} 0 & I & I & I & I & I \\ I & M & 0 & 0 & 0 & 0 \\ I & 0 & M & 0 & 0 & 0 \\ I & 0 & 0 & M & 0 & 0 \\ I & 0 & 0 & 0 & M & 0 \\ I & 0 & 0 & 0 & 0 & M \end{pmatrix}$$

Chiamati r un generico vertice rosso e b uno bianco, si ha che $DC(r) = 5$, $DC(b) = 4$ e $EC(r) = 0.2353$, $EC(b) = 0.1973$. Dunque non possiamo utilizzare il corollario 2.1 per dimostrare l'esistenza dell'interlacciamento. Tuttavia si ha che $SC(r, 1) = 6.481$ e $SC(b, 1) = 7.175$; per continuità questo significa che c'è un interlacciamento per $\beta_1 < 1$

e un altro per $\beta_2 > 1$, come si può vedere in figura 18.

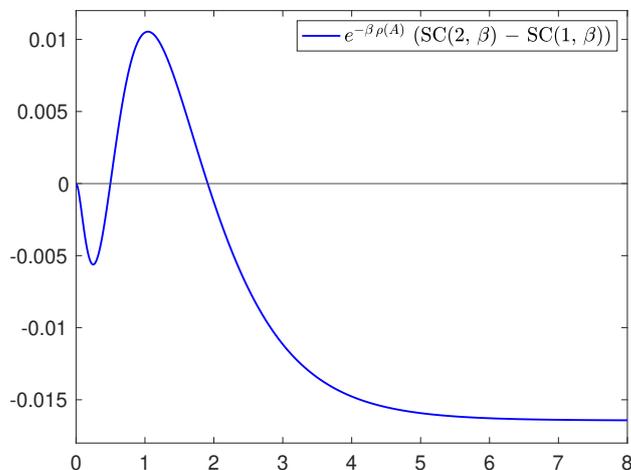


Figura 18: Interlacciamento doppio dell'Exponential Subgraph Centrality tra un vertice rosso e uno bianco del grafo in figura 17. I valori per cui c'è interlacciamento sono $\beta_1 \approx 0.498$, $\beta_2 \approx 1.911$.

Però visto che le classi di isomorfismo dei vertici sono solo due, questo vuol dire che l'interlacciamento coinvolge tutti i vertici. Dunque \mathcal{G} è β_1, β_2 -subgraph regular, pur non essendo walk-regular e neppure regolare. In [32] è stata applicata questa idea per costruire una famiglia infinita di grafi non walk-regular, per i quali c'è interlacciamento contemporaneo di tutti i vertici.

Alla luce del controesempio, in [36] è stata proposta la seguente modifica della congettura 3:

Congettura 4. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo semplice e sia $\beta > 0$ razionale. \mathcal{G} è β -subgraph regular se e solo se è walk-regular.

In questa sezione mostreremo che la congettura 4 è vera se si richiede che β è algebrico. Inoltre, il risultato che vedremo è più forte: al posto di confrontare contemporaneamente tutti i vertici di un grafo (e il concetto di walk-regularity), dimostreremo che se $SC(i, \beta) = SC(j, \beta)$ per β algebrico, allora i, j sono necessariamente cospettrali. Questo dimostra la congettura 3 in quanto un grafo è β -subgraph regular se tutti i vertici hanno la stessa Exponential Subgraph Centrality di parametro β , ed è walk-regular se tutti i vertici sono cospettrali.

Ricordiamo che $a \in \mathbb{C}$ è un numero algebrico se esiste un polinomio non nullo $p(x) \in \mathbb{Q}[x]$ tale che $p(a) = 0$. L'insieme dei numeri algebrici è un campo e verrà indicato con $\overline{\mathbb{Q}}$. Ci serviranno i due seguenti lemmi:

Proposizione 3.7. Sia B una matrice $n \times n$ con tutte le entrate $B_{ij} \in \overline{\mathbb{Q}}$. Sia $\text{Ker}(B) \subseteq \mathbb{C}^n$ il nucleo di B con $\dim \text{Ker}(B) = d \geq 1$. Allora esiste una base $\{v_1, \dots, v_d\}$ di $\text{Ker}(B)$ tale che tutte le componenti di ogni vettore sono numeri algebrici.

Dimostrazione. Possiamo pensare a B come una trasformazione lineare dello spazio vettoriale $\overline{\mathbb{Q}}^n$ sul campo $\overline{\mathbb{Q}}$. Applicando l'algoritmo di eliminazione di Gauss alle righe di B , troviamo una base del nucleo di B (visto in $\overline{\mathbb{Q}}^n$) data da $\{v_1, \dots, v_d\}$, con $v_i \in \overline{\mathbb{Q}}^n$. Siccome $\overline{\mathbb{Q}} \subseteq \mathbb{C}$, allora $\{v_1, \dots, v_d\}$ è una base di $\text{Ker}(B)$ visto come sottospazio di \mathbb{C}^n . \square

Proposizione 3.8. Sia B una matrice $n \times n$ con tutte le entrate in $\overline{\mathbb{Q}}$. Se B non è singolare, allora l'inversa B^{-1} ha tutte le entrate in $\overline{\mathbb{Q}}$.

Dimostrazione. L'inversa di B può essere calcolata esplicitamente:

$$[B^{-1}]_{ij} = (-1)^{i+j} \frac{1}{\det(B)} \det(B_{[j,i]})$$

dove $\det(B_{[j,i]})$ è il minore della matrice ottenuta da B rimuovendo l' i -esima riga e la j -esima colonna. Naturalmente $\det(B)$ e $\det(B_{[j,i]})$ sono entrambi numeri algebrici, dunque $[B^{-1}]_{ij} \in \overline{\mathbb{Q}}$ per ogni i, j . \square

Introduciamo ora il Teorema di Lindemann-Weierstrass, che è la chiave della dimostrazione. Il teorema è stato dimostrato nel 1882 unendo risultati ottenuti da Hermite, Lindemann e Weierstrass, e si può considerare una pietra miliare della Teoria dei Numeri Trascendenti, in quanto è la prima dimostrazione della trascendenza di π e per la grande generalità del risultato.

Teorema 3.6 (Lindemann-Weierstrass). Siano a_1, \dots, a_n numeri algebrici distinti. Allora gli esponenziali e^{a_1}, \dots, e^{a_n} sono linearmente indipendenti sui numeri algebrici. In altre parole, per ogni scelta di $c_1, \dots, c_n \in \overline{\mathbb{Q}}$ non necessariamente distinti, si ha:

$$c_1 e^{a_1} + \dots + c_n e^{a_n} = 0 \iff c_i = 0 \quad \forall 1 \leq i \leq n. \quad (3.5)$$

Si veda [2] per una dimostrazione breve, [44] per una dimostrazione simile a quella originale o [9] per una dimostrazione facente uso delle approssimanti di Padé.

Si notino alcune conseguenze del teorema: scegliendo $a_1 = 1$ e $a_2 = 0$ si ottiene che e è trascendente, e scegliendo $a_1 = i\pi$ e $a_2 = 0$ si ottiene che π è trascendente.

Il seguente risultato è stato ottenuto insieme a F. Ballini [1]:

Teorema 3.7. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo orientato e supponiamo che A sia diagonalizzabile. Sia $\beta \neq 0$ un numero algebrico. Se $[e^{\beta A}]_{ii} = [e^{\beta A}]_{jj}$, allora i, j sono cospettrali.

Dimostrazione. Siano μ_1, \dots, μ_d gli autovalori distinti di A . Usiamo l'espressione 1.9 per la funzione e^x :

$$[e^{\beta A}]_{ii} = \sum_{h=1}^d e^{\beta \mu_h} [E_h]_{ii}$$

Consideriamo la seguente differenza:

$$0 = [e^{\beta A}]_{ii} - [e^{\beta A}]_{jj} = \sum_{h=1}^d e^{\beta \mu_h} ([E_h]_{ii} - [E_h]_{jj}) = \sum_{h=1}^d e^{\beta \mu_h} C_h \quad (3.6)$$

Vorremmo applicare il Teorema di Lindemann-Weierstrass a questa espressione; per farlo serve mostrare che gli esponenti $\beta\mu_h$ sono algebrici distinti e che i coefficienti $C_h = [E_h]_{ii} - [E_h]_{jj}$ sono algebrici.

Il polinomio caratteristico di A (che ha entrate 0 e 1) ha coefficienti interi, dunque le sue radici μ_h sono tutte numeri algebrici. Inoltre i μ_h sono tutti distinti e $\beta \neq 0$, che implica che i $\beta\mu_h$ sono tutti diversi al variare di h .

Guardiamo ora i coefficienti C_h . Per l'equazione 1.4, si ha:

$$C_h = \sum_{k \in \mathcal{I}_h} (Q_{ik} [Q^{-1}]_{ki} - Q_{jk} [Q^{-1}]_{kj})$$

L'equazione 3.6 vale per qualsiasi scelta di Q , a patto che valga $A = QDQ^{-1}$. Costruiamo quindi una matrice Q in modo che abbia tutte le entrate algebriche.

Per ogni autovalore μ_h , sia $B = A - \mu_h I$. Per la proposizione 3.7, possiamo trovare dei vettori $\{v_1, \dots, v_{m_h}\}$ che formano una base di $\text{Ker}(B)$, con tutte le entrate in $\overline{\mathbb{Q}}$.

Dunque possiamo costruire la matrice di similitudine Q che abbia come le m_h colonne relative all'autovalore μ_h pari ai vettori $\{v_1, \dots, v_{m_h}\}$. In tal modo Q ha tutte le entrate in $\overline{\mathbb{Q}}$, e analogamente Q^{-1} per la proposizione 3.8. Inoltre si ha $A = QDQ^{-1}$, come richiesto.

Segue che C_h è un numero algebrico, in quanto ottenuto da somme e prodotti di numeri algebrici.

Possiamo ora applicare il Teorema di Lindemann-Weierstrass al membro di destra dell'equazione 3.6, ottenendo che necessariamente $C_h = 0$ per ogni h .

Questo vuol dire che $[E_h]_{ii} = [E_h]_{jj}$ per ogni h , e per il teorema 3.1 ciò implica che i, j sono cospettrali. \square

Enunciamo ora alcuni corollari di questo teorema:

Corollario 3.6. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo orientato con A diagonalizzabile. Se per $\beta > 0$ algebrico \mathcal{G} è β -subgraph regular, allora \mathcal{G} è walk-regular.

Corollario 3.7. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo semplice. Se per $\beta > 0$ algebrico \mathcal{G} è β -subgraph regular, allora la Degree, Eigenvector, Exponential e Resolvent Subgraph Centrality sono uguali per tutti i vertici.

Corollario 3.8. Sia (\mathcal{G}, A) un grafo orientato con A diagonalizzabile. Se due vertici i, j non sono cospettrali e $[e^{\beta A}]_{ii} = [e^{\beta A}]_{jj}$, allora β è trascendente.

Quest'ultimo corollario ci dice che nel grafo della figura 17, i valori di $\beta_1 \approx 0.498, \beta_2 \approx 1.911$ che rende il grafo β_1, β_2 -subgraph regular sono necessariamente trascendenti.

Il teorema 3.7 vale per grafi semplici, e per grafi orientati che hanno matrice di adiacenza diagonalizzabile. Nel caso non diagonalizzabile, il problema sorge nell'espressione di $[e^{\beta A}]_{ii}$, perché compaiono i termini fuori diagonale della forma di Jordan, portando quindi a termini nella sommatoria del tipo $\frac{1}{h!} \mu_h^l e^{\beta \mu_h} [N_h^l]_{ii}$. In questo modo applicando

il Teorema di Lindemann-Weierstrass non si ottiene direttamente che $[E_h]_{ii} = [E_h]_{jj}$, dunque non segue che i e j siano cospettrali.

Tuttavia se per due vertici i, j e β algebrico si ha $SC(i, \beta) = SC(j, \beta)$, il Teorema di Lindemann-Weierstrass pone delle condizioni molto restrittive su A e sui suoi proiettori spettrali. Perciò molto probabilmente il teorema 3.7 resta vero anche nel caso in cui A non è diagonalizzabile.

Osserviamo infine che nella dimostrazione non si è richiesto che A abbia coefficienti 0 o 1, ma solo che gli autovalori μ_h fossero algebrici. In particolare, se A sta in $\overline{\mathbb{Q}}^{n \times n}$ (cioè tutte le sue entrate sono numeri algebrici), allora il polinomio caratteristico ha coefficienti in $\overline{\mathbb{Q}}$; essendo un campo algebricamente chiuso segue che anche le radici μ_h sono algebriche. Dunque la proposizione 3.7 rimane vera anche per grafi pesati con pesi algebrici.

Considerazioni conclusive

In questa tesi abbiamo analizzato misure di centralità basate sulla matrice di adiacenza di un grafo, in particolare la Resolvent Subgraph, Exponential Subgraph, Katz Centrality e la Total Communicability, oltre alla Degree e all'Eigenvector Centrality. Abbiamo visto che le prime quattro hanno comportamenti simili alla Degree Centrality per valori piccoli del parametro, e simili all'Eigenvector Centrality per valori grandi.

Siamo passati poi a vedere quando una misura come la Resolvent o l'Exponential Subgraph può assegnare lo stesso punteggio a due vertici non cospettrali, ovvero il fenomeno dell'interlacciamento. Per (\mathcal{G}, A) grafo su n vertici e con d autovalori distinti, abbiamo dimostrato ci possono essere al massimo $n - 1$ interlacciamenti per la Resolvent Subgraph Centrality; se A è diagonalizzabile allora ce ne possono essere al massimo $d - 1$ per l'Exponential Subgraph Centrality, e infine se \mathcal{G} è semplice ce ne possono essere al massimo $d - 1$ anche per la Resolvent Subgraph Centrality. Questi formano uno dei risultati originali ottenuti nella tesi.

Infine abbiamo dimostrato che per valori algebrici di β , l'Exponential Subgraph Centrality non può mai assegnare lo stesso punteggio a due vertici non cospettrali. Questo teorema, ottenuto in collaborazione con F. Ballini [1], fornisce una risposta completa a varie questioni come la Congettura di Estrada e alcune delle sue generalizzazioni, e rappresenta l'altro significativo risultato originale di questa tesi. Inoltre ciò implica che l'Exponential Subgraph Centrality ha il massimo potere risolutivo possibile tra le varie misure basate su funzioni di matrice di A , che non possono distinguere ulteriormente vertici cospettrali. Non è ancora nota una funzione "facile da calcolare" che distingua sempre vertici non isomorfi, però l'Exponential Subgraph Centrality riesce a distinguere sempre vertici non cospettrali.

Ci sono molti altri argomenti interessanti da studiare, a partire da quelli illustrati nella tesi. Per esempio: i risultati mostrati per l'Exponential Subgraph Centrality valgono anche per grafi orientati non diagonalizzabili?

Abbiamo visto la relazione tra vertici cospettrali e le f -SC, è naturale chiedersi se valgono risultati simili per misure del tipo f -TC, come Katz Centrality e Total Communicability: quanti interlacciamenti al massimo possono avere due vertici non isomorfi? Due vertici cospettrali hanno necessariamente le stesse KC e TC ?

Infine, le stime del numero di interlacciamenti sono molto larghe, in quanto valide per grafi pesati generici; sarebbe utile riuscire a diminuire tale stima per grafi non pesati, per i quali la matrice di adiacenza ha molte più restrizioni.

Bibliografia

- [1] F. Ballini, N. Deniskin, *Vertex distinction with subgraph centrality: A proof of Estrada's conjecture and some generalizations*, Linear Algebra Appl. 612 (2021), pp. 334-344.
- [2] A. Baker, *Transcendental Number Theory*, Cambridge University Press (1990), Chapter 1, pp. 1-8.
- [3] A. Bavelas, *Communication patterns in task-oriented groups*, J. Acoust. Soc. Am, Vol. 22, No.6 (1950), pp. 725-730.
- [4] M. Benzi, *A note on walk entropies in graphs*, Linear Algebra Appl. 445 (2014), pp. 395-399.
- [5] M. Benzi, E. Estrada, C. Klymko, *Ranking hubs and authorities using matrix functions*, Linear Algebra Appl., Vol. 438 (2013), pp. 2447-2474.
- [6] M. Benzi, C. Klymko, *On the limiting behavior of parameter-dependent network centrality measures* SIAM J. Matrix Anal. Appl, Vol. 36, No.2 (2015), pp. 686-706.
- [7] M. Benzi, C. Klymko, *Total communicability as a centrality measure* Journal of Complex Networks, Vol. 1, No. 2 (2013), pp. 124-149.
- [8] S. Brin e L. Page, *The anatomy of a large-scale hypertextual Web search engine*, Computer Networks and ISDN Systems, 33 (1998), pp. 107-117.
- [9] G. V. Chudnovsky, *Number Theory, Carbondale 1979: Proceedings of the Southern Illinois Number Theory Conference*, edited by M. B. Nathanson, Springer, Vol. 751 (2006), Chapter 4, pp. 45-69.
- [10] D. M. Cvetković, M. Doob, H. Sachs, *Spectra of Graphs*, Academic Press (1980).
- [11] D. M. Cvetković, P. Rowlinson, S. Simić, *Eigenspaces of Graphs*, Cambridge University Press (1997).
- [12] C. Dalfó, E.R. van Dam, M.A. Fiol, E. Garriga, B.L. Gorissen, *On Almost Distance-Regular Graphs*, J. Comb. Theory, Ser. A, Vol 118, No. 3 (2011).
- [13] E. R. van Dam, J. H. Koolen, H. Tanaka, *Distance-Regular Graphs*, Electron. J. Comb, DS22 (2016).

- [14] E. Estrada, *About the Discriminant Power of the Subgraph Centrality and Other Centrality Measures*, arXiv preprint <https://arxiv.org/abs/1305.6836>.
- [15] E. Estrada, J.A. de la Peña, *Maximum walk entropy implies walk regularity*, Linear Algebra Appl., Vol. 458 (2014), pp. 542-547.
- [16] E. Estrada, J.A. de la Peña, N. Hatano, *Walk entropies in graphs*, Linear Algebra Appl. 443C (2014), pp. 235–244.
- [17] E. Estrada, N. Hatano, *Statistical-mechanical approach to subgraph centrality in complex networks*, Chemical Physics Letters 439 (2007), pp. 247–251.
- [18] E. Estrada, N. Hatano, *Communicability in complex networks*, Physical Review E 77, 036111 (2008).
- [19] E. Estrada, N. Hatano, M. Benzi, *The physics of communicability in complex networks*, Phys. Rep., 514 (2012), pp. 89-119.
- [20] E. Estrada, J. A. Rodríguez-Velázquez, *Subgraph centrality in complex networks*, Physical Review E 71, 056103 (2005).
- [21] D. J. Felleman, D. C. Van Essen, *Distributed hierarchical processing in the primate cerebral cortex*, Cereb. Cortex, Vol 1, No. 1 (1991), pp. 1-47.
- [22] L. C. Freeman, *A Set of Measures of Centrality Based on Betweenness*, Sociometry, Vol. 40, No. 1 (1977), pp. 35-41.
- [23] F. G. Frobenius, *Über Matrizen aus nicht negativen Elementen*, Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin (1912), pp. 456-477.
- [24] J.R. Furlan Ronqui, G. Travieso, *Analyzing Complex Networks through Correlations in Centrality Measurements*, J. Stat. Mech.-Theory E., Vol.5 (2015).
- [25] C. Godsil, M. Farrell, B.D. McKay et al., MathOverflow post <https://web.archive.org/web/20200920080938/https://mathoverflow.net/questions/264016/>.
- [26] C. Godsil, G. Royle, *Algebraic Graph Theory*, Springer, Graduate Texts in Mathematics 207 (2001).
- [27] C. Godsil, J. Smith, *Strongly Cospectral Vertices*, arXiv preprint <https://arxiv.org/abs/1709.07975>.
- [28] C. Godsil, B.D. McKay, *Feasibility Conditions for the existence of Walk-Regular Graphs*, Linear Algebra Appl., Vol. 30 (1980), pp. 51-61.
- [29] N. J. Higham, *Functions of Matrices. Theory and Computation*, SIAM (2008).
- [30] R. A. Horn, C. R. Johnson, *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, 2nd ed. (2013).

- [31] R. A. Horn, C. R. Johnson, *Topics in Matrix Analysis*, Cambridge University Press, (1999).
- [32] E. Horton, K. Kloster, B. D. Sullivan, *Subgraph centrality and walk-regularity*, Linear Algebra Appl. 570 (2019), pp. 225-244.
- [33] J. C. Holladay, R. S. Varga, *On powers of non-negative matrices*, Proc. Amer. Math. Soc., Vol. 9 (1958), pp. 631-634.
- [34] L. Katz, *A new status index derived from sociometric data analysis*, Psychometrika, Vol. 18, No. 1 (1953), pp. 39-43.
- [35] J. Kleinberg, *Authoritative sources in a hyperlinked environment*, Journal of the ACM, Vol. 46, No. 5 (1999), pp. 604-632.
- [36] K. Kloster, D. Král, B. D. Sullivan, *Walk entropy and walk-regularity*, Linear Algebra Appl., Vol. 546 (2018), pp. 115-121.
- [37] B.D. McKay, A. Piperno, *Practical Graph Isomorphism, II*, J. Symbolic Computation, Vol 60 (2013), pp. 94-112.
- [38] C. D. Meyer, *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*, SIAM (2000).
- [39] C. St. J. A. Nash-Williamns, *The Reconstruction Problem*, Selected topics in graph theory, Academic Press (1978), pp. 205-236.
- [40] O. Perron, *Zur Theorie der Matrizes*, Mathematische Annalen, Vol. 64 (1907), pp. 248-263.
- [41] F.A. Rodrigues, *A Mathematical Modeling Approach from Nonlinear Dynamics to Complex Systems*, edited by E. E. N. Macau, Springer, NSCH, Vol. 22 (2019), Chapter 10, *Network Centrality: An Introduction*, pp. 177-196.
- [42] M. P. Rombach, M. A. Porter, *Discriminating Power of Centrality Measures*, arXiv preprint <https://arxiv.org/abs/1305.3146>.
- [43] P. Rowlinson, *Graph Connections*, Chapter 6 “Linear Algebra”, edited by L.W. Beineke and R.J. Wilson, Oxford Lecture Ser. Math. Appl., Vol. 5 (1997), pp. 86-99.
- [44] C. L. Siegel, *Transcendental Numbers*, Princeton University Press (1950), Chapter 1, pp. 1-30.
- [45] H. Schneider, *Wielandt’s proof of the exponent inequality for primitive nonnegative matrices*, Linear Algebra Appl., Vol. 353 (2002), pp. 5-10.
- [46] A. J. Schwenk, *Almost all trees are cospectral*, New Directions in the Theory of Graphs, Academic Press (1973), pp. 275-307.
- [47] H. Wielandt, *Unzerlegbare, nicht negative Matrizen*, Math. Zeit. 52 (1950), pp. 642-648 e Matematische Werke, de Gruyter, Berlin, Vol. 2 (1996), pp. 100-106.