Tesi di Laurea Triennale in Matematica

Misure di centralità in grafi

Dimostrazione della congettura di Estrada e interlacciamento di misure

Candidato
Nikita Deniskin

Relatore prof. Michele Benzi

Università di Pisa

25 settembre 2020

I grafi sono un modello per molte reti reali: pagine web, traffico aereo, reti sociali, interazioni tra neuroni, ecc.

I grafi sono un modello per molte reti reali: pagine web, traffico aereo, reti sociali, interazioni tra neuroni, ecc. In tali contesti, spesso serve trovare i vertici "più importanti" di un grafo.

I grafi sono un modello per molte reti reali: pagine web, traffico aereo, reti sociali, interazioni tra neuroni, ecc. In tali contesti, spesso serve trovare i vertici "più importanti" di un grafo.

Misura di centralità

Una *misura di centralità* è una funzione $f: V \to \mathbb{R}^+$, tale che più un vertice i è "importante" e "ben collegato", maggiore è f(i).

I grafi sono un modello per molte reti reali: pagine web, traffico aereo, reti sociali, interazioni tra neuroni, ecc. In tali contesti, spesso serve trovare i vertici "più importanti" di un grafo.

Misura di centralità

Una *misura di centralità* è una funzione $f: V \to \mathbb{R}^+$, tale che più un vertice i è "importante" e "ben collegato", maggiore è f(i).

Ci concentriamo su alcune misure di centralità basate sull'algebra lineare; per esse mostreremo alcuni risultati originali, in particolare dimostreremo la congettura di Estrada.

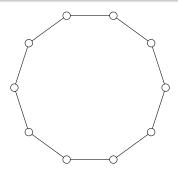
I grafi sono un modello per molte reti reali: pagine web, traffico aereo, reti sociali, interazioni tra neuroni, ecc. In tali contesti, spesso serve trovare i vertici "più importanti" di un grafo.

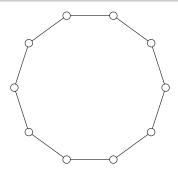
Misura di centralità

Una *misura di centralità* è una funzione $f: V \to \mathbb{R}^+$, tale che più un vertice i è "importante" e "ben collegato", maggiore è f(i).

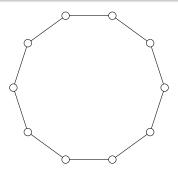
Ci concentriamo su alcune misure di centralità **basate sull'algebra lineare**; per esse mostreremo alcuni risultati originali, in particolare dimostreremo la congettura di Estrada.

Sotto quali condizioni una misura di centralità assegna lo stesso peso a due vertici "diversi"?





Tutti i vertici sono indistinguibili, dunque ogni misura di centralità "naturale" deve assegnare lo stesso peso a ogni vertice.



Tutti i vertici sono indistinguibili, dunque ogni misura di centralità "naturale" deve assegnare lo stesso peso a ogni vertice.

Può accadere che una misura di centralità assegni lo stesso peso a due vertici "diversi".

Grafi \iff Matrici

A ogni grafo possiamo associare una matrice di adiacenza A, mettendo $A_{ii}=1$ se c'è un arco $i \rightarrow j$, e 0 altrimenti.

Se il grafo è non orientato allora A è simmetrica. In particolare, è ortogonalmente diagonalizzabile: $A = QDQ^{\top}$.

Grafi \iff Matrici

A ogni grafo possiamo associare una matrice di adiacenza A, mettendo $A_{ij}=1$ se c'è un arco $i \to j$, e 0 altrimenti.

Se il grafo è non orientato allora A è simmetrica. In particolare, è ortogonalmente diagonalizzabile: $A = QDQ^{\top}$.

Proposizione

Per A matrice di adiacenza di un grafo $\mathcal G$ si ha:

 $[A^k]_{ij} =$ numero di cammini da i a j di lunghezza k

Funzioni di Matrice

Definizione

Sia A matrice diagonalizzabile con autovalori $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, $A = QDQ^{-1}$. Sia f una funzione definita sullo spettro di A a valori in \mathbb{C} . Allora:

$$A = Q$$
 D $Q^{-1} = Q \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & \\ & & \lambda_2 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix} Q^{-1}$

Se A non è diagonalizzabile, la definizione è un po' più complicata. f inoltre deve rispettare alcune condizioni di regolarità aggiuntive.

Funzioni di Matrice

Definizione

Sia A matrice diagonalizzabile con autovalori $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, $A = QDQ^{-1}$. Sia f una funzione definita sullo spettro di A a valori in \mathbb{C} . Allora:

Se A non è diagonalizzabile, la definizione è un po' più complicata. f inoltre deve rispettare alcune condizioni di regolarità aggiuntive.

Proposizione

Sia A matrice con raggio spettrale $\rho(A)$.

Se f(x) è analitica in x=0 con raggio di convergenza $R>\rho(A)$, con sviluppo in serie di Taylor:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + \dots$$

Allora f(A) si può calcolare come:

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k = c_0 I + c_1 A + c_2 A^2 + c_3 A^3 + \dots$$

Lavoreremo con le seguenti due funzioni di matrice.

La prima è $f(x) = e^x$:

$$e^{\beta A} = I + \beta A + \frac{1}{2} \beta^2 A^2 + \frac{1}{3!} \beta^3 A^3 + \dots$$

dove $\beta > 0$ è un parametro.

Lavoreremo con le seguenti due funzioni di matrice.

La prima è $f(x) = e^x$:

$$e^{\beta A} = I + \beta A + \frac{1}{2} \beta^2 A^2 + \frac{1}{3!} \beta^3 A^3 + \dots$$

dove $\beta > 0$ è un parametro.

La seconda è $f(x) = \frac{1}{1-\alpha x}$:

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

Serve $\alpha<\frac{1}{\rho(A)}$, in questo modo αA ha raggio spettrale <1 e vale l'espansione in serie di potenze.

• **Degree Centrality** $DC(i) = \deg(i)$ è il grado di i. Si può calcolare come $DC(i) = [A^2]_{ii} = [A 1]_i$.

- **Degree Centrality** $DC(i) = \deg(i)$ è il grado di i. Si può calcolare come $DC(i) = [A^2]_{ii} = [A1]_i$.
- **Eigenvector Centrality** (simile al PageRank): per il teorema di Perron-Frobenius, $\rho(A)$ è autovalore semplice di A; il relativo autovettore v ha tutte componenti positive. EC(i) = v(i).

- **Degree Centrality** $DC(i) = \deg(i)$ è il grado di i. Si può calcolare come $DC(i) = [A^2]_{ii} = [A 1]_i$.
- **Eigenvector Centrality** (simile al PageRank): per il teorema di Perron-Frobenius, $\rho(A)$ è autovalore semplice di A; il relativo autovettore v ha tutte componenti positive. EC(i) = v(i).
- Exponential Subgraph Centrality $SC(i, \beta) = [e^{\beta A}]_{ii}$ con parametro $\beta \in (0, \infty)$.

- **Degree Centrality** $DC(i) = \deg(i)$ è il grado di i. Si può calcolare come $DC(i) = [A^2]_{ii} = [A 1]_i$.
- **Eigenvector Centrality** (simile al PageRank): per il teorema di Perron-Frobenius, $\rho(A)$ è autovalore semplice di A; il relativo autovettore v ha tutte componenti positive. EC(i) = v(i).
- Exponential Subgraph Centrality $SC(i, \beta) = [e^{\beta A}]_{ii}$ con parametro $\beta \in (0, \infty)$.
- Resolvent Subgraph Centrality $RC(i, \alpha) = [(I \alpha A)^{-1}]_{ii}$ con parametro $\alpha \in (0, \frac{1}{\rho(A)})$.

- **Degree Centrality** $DC(i) = \deg(i)$ è il grado di i. Si può calcolare come $DC(i) = [A^2]_{ii} = [A 1]_i$.
- **Eigenvector Centrality** (simile al PageRank): per il teorema di Perron-Frobenius, $\rho(A)$ è autovalore semplice di A; il relativo autovettore v ha tutte componenti positive. EC(i) = v(i).
- Exponential Subgraph Centrality $SC(i, \beta) = [e^{\beta A}]_{ii}$ con parametro $\beta \in (0, \infty)$.
- Resolvent Subgraph Centrality $RC(i, \alpha) = [(I \alpha A)^{-1}]_{ii}$ con parametro $\alpha \in (0, \frac{1}{\rho(A)})$.
- Katz Centrality $KC(i, \alpha) = [(I \alpha A)^{-1} \mathbb{1}]_i$ Total Communicability $TC(i, \beta) = [e^{\beta A} \mathbb{1}]_i$

$$e^{\beta A} = I + \beta A + \frac{1}{2} \beta^2 A^2 + \frac{1}{3!} \beta^3 A^3 + \dots$$

$$e^{\beta A} = I + \beta A + \frac{1}{2} \beta^2 A^2 + \frac{1}{3!} \beta^3 A^3 + \dots$$

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

$$e^{\beta A} = I + \beta A + \frac{1}{2} \beta^2 A^2 + \frac{1}{3!} \beta^3 A^3 + \dots$$

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

 $SC(i, \beta)$ rappresenta una somma pesata dei cammini chiusi che partono e tornano in i, con coefficiente $\frac{\beta^k}{k!}$.

$$e^{\beta A} = I + \beta A + \frac{1}{2} \beta^2 A^2 + \frac{1}{3!} \beta^3 A^3 + \dots$$

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

 $SC(i, \beta)$ rappresenta una somma pesata dei cammini chiusi che partono e tornano in i, con coefficiente $\frac{\beta^k}{k!}$.

Se $SC(i, \beta)$ è grande, il vertice i riesce a comunicare meglio con il resto del grafo.

$$e^{\beta A} = I + \beta A + \frac{1}{2} \beta^2 A^2 + \frac{1}{3!} \beta^3 A^3 + \dots$$

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

 $SC(i,\beta)$ rappresenta una somma pesata dei cammini chiusi che partono e tornano in i, con coefficiente $\frac{\beta^k}{k!}$.

Se $SC(i, \beta)$ è grande,il vertice i riesce a comunicare meglio con il resto del grafo.

Analogamente per la Resolvent Centrality:

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

◆ロト ◆個 ト ◆ 恵 ト ◆ 恵 ・ 夕 Q ○

Qual è il ruolo di α e β in queste centralità?

Qual è il ruolo di α e β in queste centralità?

Teorema (Benzi e Klymko, 2015)

Sia $\mathcal G$ un grafo non orientato, connesso e non bipartito. Allora:

- Per $\alpha, \beta \to 0$, le centralità $RC(\cdot, \alpha)$ e $SC(\cdot, \beta)$ si comportano come la Degree Centrality.
- Per $\alpha \to \frac{1}{\rho(A)}$, $\beta \to \infty$, le centralità $RC(\cdot, \alpha)$ e $SC(\cdot, \beta)$ si comportano come l'Eigenvector Centrality.

Qual è il ruolo di α e β in queste centralità?

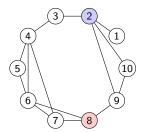
Teorema (Benzi e Klymko, 2015)

Sia $\mathcal G$ un grafo non orientato, connesso e non bipartito. Allora:

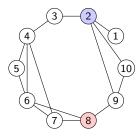
- Per $\alpha, \beta \to 0$, le centralità $RC(\cdot, \alpha)$ e $SC(\cdot, \beta)$ si comportano come la Degree Centrality.
- Per $\alpha \to \frac{1}{\rho(A)}$, $\beta \to \infty$, le centralità $RC(\cdot, \alpha)$ e $SC(\cdot, \beta)$ si comportano come l'Eigenvector Centrality.

 α e β si possono vedere come delle manopole di "zoom", per dare più importanza alla struttura locale (Degree) o globale (Eigenvector) del grafo.

$$DC(2) = 4 > 3 = DC(8)$$
 $EC(2) = 0.29 < 0.34 = EC(8)$

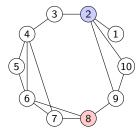


$$DC(2) = 4 > 3 = DC(8)$$
 $EC(2) = 0.29 < 0.34 = EC(8)$



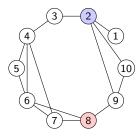
Per β piccolo, $SC(2, \beta) > SC(8, \beta)$

$$DC(2) = 4 > 3 = DC(8)$$
 $EC(2) = 0.29 < 0.34 = EC(8)$



Per
$$\beta$$
 piccolo, $SC(2,\beta) > SC(8,\beta)$ Per β grande, $SC(2,\beta) < SC(8,\beta)$

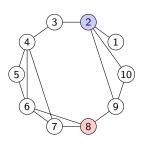
$$DC(2) = 4 > 3 = DC(8)$$
 $EC(2) = 0.29 < 0.34 = EC(8)$

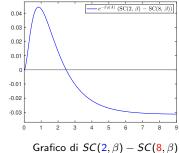


Per β piccolo, $SC(2,\beta) > SC(8,\beta)$ Per β grande, $SC(2,\beta) < SC(8,\beta)$ Per continuità, esiste β_0 (\approx 2.48) tale che $SC(2,\beta_0) = SC(8,\beta_0)$.

$$DC(2) = 4 > 3 = DC(8)$$

$$EC(2) = 0.29 < 0.34 = EC(8)$$

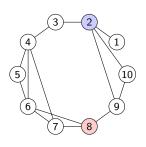


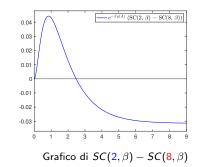


Per β piccolo, $SC(2,\beta) > SC(8,\beta)$ Per β grande, $SC(2,\beta) < SC(8,\beta)$ Per continuità, esiste β_0 (≈ 2.48) tale che $SC(2, \beta_0) = SC(8, \beta_0)$.

$$DC(2) = 4 > 3 = DC(8)$$

$$EC(2) = 0.29 < 0.34 = EC(8)$$



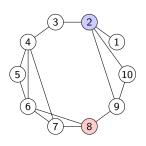


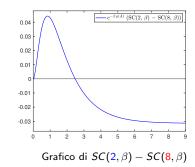
Per β piccolo, $SC(2,\beta) > SC(8,\beta)$ Per β grande, $SC(2,\beta) < SC(8,\beta)$ Per continuità, esiste β_0 (\approx 2.48) tale che $SC(2,\beta_0) = SC(8,\beta_0)$.

Chiamiamo questo fenomeno interlacciamento.

$$DC(2) = 4 > 3 = DC(8)$$

$$EC(2) = 0.29 < 0.34 = EC(8)$$





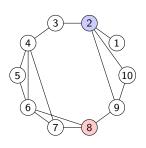
Per β piccolo, $SC(2,\beta) > SC(8,\beta)$ Per β grande, $SC(2,\beta) < SC(8,\beta)$ Per continuità, esiste β_0 (≈ 2.48) tale che $SC(2,\beta_0) = SC(8,\beta_0)$.

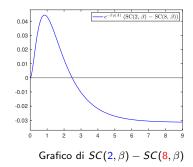
Chiamiamo questo fenomeno interlacciamento.

Esistono esempi di interlacciamento doppio e triplo!

$$DC(2) = 4 > 3 = DC(8)$$

$$EC(2) = 0.29 < 0.34 = EC(8)$$





Per β piccolo, $SC(2,\beta) > SC(8,\beta)$ Per β grande, $SC(2,\beta) < SC(8,\beta)$ Per continuità, esiste β_0 (\approx 2.48) tale che $SC(2,\beta_0) = SC(8,\beta_0)$.

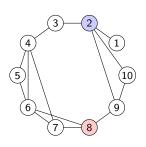
Chiamiamo questo fenomeno interlacciamento.

Esistono esempi di interlacciamento doppio e triplo!

Quando ci può essere un interlacciamento tra due vertici "diversi"?

$$DC(2) = 4 > 3 = DC(8)$$

$$EC(2) = 0.29 < 0.34 = EC(8)$$



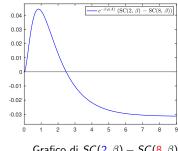


Grafico di $SC(2, \beta) - SC(8, \beta)$

Per β piccolo, $SC(2, \beta) > SC(8, \beta)$ Per β grande, $SC(2, \beta) < SC(8, \beta)$ Per continuità, esiste β_0 (≈ 2.48) tale che $SC(2, \beta_0) = SC(8, \beta_0)$.

Chiamiamo questo fenomeno interlacciamento.

Esistono esempi di interlacciamento doppio e triplo!

Quando ci può essere un interlacciamento tra due vertici "diversi"?

Quanti ce ne possono essere, al massimo?

Cosa vuol dire che due vertici sono "diversi"?

Cosa vuol dire che due vertici sono "diversi"? Condizione forte:

Definizione

Due vertici i, j sono *isomorfi* se esiste un automorfismo del grafo φ tale che $\varphi(i) = j$.

Cosa vuol dire che due vertici sono "diversi"? Condizione forte:

Definizione

Due vertici i,j sono *isomorfi* se esiste un automorfismo del grafo φ tale che $\varphi(i)=j$.

Condizione più debole:

Definizione

Due vertici i,j sono *cospettrali* se per ogni $k \geq 0$, $A_{ii}^k = A_{jj}^k$

Per Hamilton-Cayley, è sufficiente controllare per $k \le n-1$.

Cosa vuol dire che due vertici sono "diversi"? Condizione forte:

Definizione

Due vertici i,j sono *isomorfi* se esiste un automorfismo del grafo φ tale che $\varphi(i)=j$.

Condizione più debole:

Definizione

Due vertici i,j sono *cospettrali* se per ogni $k \ge 0$, $A_{ii}^k = A_{jj}^k$

Per Hamilton-Cayley, è sufficiente controllare per $k \le n-1$.

Definizione

Un grafo è walk-regular se tutti i suoi vertici sono cospettrali tra di loro. È equivalente a chiedere che A^k abbia diagonale costante per ogni $k \ge 0$.

Proposizione

Se i, j sono cospettrali, per qualsiasi funzione di matrice f si ha

$$f(A)_{ii} = f(A)_{jj}$$

Proposizione

Se i, j sono cospettrali, per qualsiasi funzione di matrice f si ha

$$f(A)_{ii} = f(A)_{jj}$$

Segue che la Resolvent e l'Exponential Subgraph Centrality danno sempre lo stesso peso a vertici cospettrali, per qualsiasi α, β .

$$SC(i,\beta) = [e^{\beta A}]_{ii}$$
 $RC(i,\alpha) = [(I - \alpha A)^{-1}]_{ii}$

Abbiamo ottenuto la seguente stima per il numero di interlacciamenti:

Teorema

Sia \mathcal{G} un grafo non orientato con matrice di adiacenza A. Sia d il numero di autovalori distinti di A e siano i,j due vertici non cospettrali. Allora:

- Le Resolvent Subgraph Centrality $RC(i, \cdot)$ e $RC(j, \cdot)$ possono interlacciarsi al massimo d-1 volte.
- Le Exponential Subgraph Centrality $SC(i, \cdot)$ e $SC(j, \cdot)$ possono interlacciarsi al massimo d-1 volte.

Data B matrice, si può scrivere l'entrata generica della sua inversa come:

$$B_{ii}^{-1} = \frac{\det(B \setminus \{i, i\})}{\det B}$$

 $B \setminus \{i, i\}$ si ottiene da B rimuovendo l'i-esima riga e l'i-esima colonna.

Data B matrice, si può scrivere l'entrata generica della sua inversa come:

$$B_{ii}^{-1} = \frac{\det(B \setminus \{i, i\})}{\det B}$$

 $B \setminus \{i, i\}$ si ottiene da B rimuovendo l'i-esima riga e l'i-esima colonna.

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

Data B matrice, si può scrivere l'entrata generica della sua inversa come:

$$B_{ii}^{-1} = \frac{\det(B \setminus \{i, i\})}{\det B}$$

 $B \setminus \{i, i\}$ si ottiene da B rimuovendo l'i-esima riga e l'i-esima colonna.

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

Analogamente sia $q_j(\alpha) = \det(I - \alpha A \setminus \{j, j\}).$

Data B matrice, si può scrivere l'entrata generica della sua inversa come:

$$B_{ii}^{-1} = \frac{\det(B \setminus \{i, i\})}{\det B}$$

 $B \setminus \{i, i\}$ si ottiene da B rimuovendo l'i-esima riga e l'i-esima colonna.

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

Analogamente sia $q_j(\alpha) = \det(I - \alpha A \setminus \{j, j\})$. $q_i(\alpha)$ e $q_j(\alpha)$ sono polinomi di grado n-1; se A ha d autovalori distinti, hanno un fattore di grado n-d in comune.

Data *B* matrice, si può scrivere l'entrata generica della sua inversa come:

$$B_{ii}^{-1} = \frac{\det(B \setminus \{i, i\})}{\det B}$$

 $B \setminus \{i, i\}$ si ottiene da B rimuovendo l'i-esima riga e l'i-esima colonna.

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

Analogamente sia $q_j(\alpha) = \det(I - \alpha A \setminus \{j, j\})$. $q_i(\alpha)$ e $q_j(\alpha)$ sono polinomi di grado n-1; se A ha d autovalori distinti, hanno un fattore di grado n-d in comune.

Se $q_i(\alpha) = q_j(\alpha)$ per d valori distinti di α allora i polinomi coincidono; si dimostra che questo implica che i e j sono cospettrali.

Data B matrice, si può scrivere l'entrata generica della sua inversa come:

$$B_{ii}^{-1} = \frac{\det(B \setminus \{i, i\})}{\det B}$$

 $B \setminus \{i, i\}$ si ottiene da B rimuovendo l'i-esima riga e l'i-esima colonna.

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

Analogamente sia $q_j(\alpha) = \det(I - \alpha A \setminus \{j, j\})$. $q_i(\alpha)$ e $q_j(\alpha)$ sono polinomi di grado n-1; se A ha d autovalori distinti, hanno un fattore di grado n-d in comune.

Se $q_i(\alpha) = q_j(\alpha)$ per d valori distinti di α allora i polinomi coincidono; si dimostra che questo implica che i e j sono cospettrali.

Dunque per i,j non cospettrali, i polinomi possono coincidere al massimo per d-1 valori, e di conseguenza anche le Resolvent Subgraph Centrality $RC(i,\alpha)$ e $RC(j,\alpha)$. \square

L'Exponential Subgraph Centrality è stata definita da Estrada nel 2005. Uno dei motivi per cui è stata introdotta è che per alcuni grafi regolari varie misure di centralità danno lo stesso peso a *tutti* i vertici, mentre l'Exponential Subgraph Centrality non è costante su tutti i vertici.

L'Exponential Subgraph Centrality è stata definita da Estrada nel 2005. Uno dei motivi per cui è stata introdotta è che per alcuni grafi regolari varie misure di centralità danno lo stesso peso a *tutti* i vertici, mentre l'Exponential Subgraph Centrality non è costante su tutti i vertici.

Per questo, è stata proposta la seguente congettura:

Congettura

Sia $\beta > 0$. Un grafo è walk-regular \iff se $SC(\cdot, \beta)$ assegna lo stesso peso a tutti i vertici.

L'Exponential Subgraph Centrality è stata definita da Estrada nel 2005. Uno dei motivi per cui è stata introdotta è che per alcuni grafi regolari varie misure di centralità danno lo stesso peso a *tutti* i vertici, mentre l'Exponential Subgraph Centrality non è costante su tutti i vertici.

Per questo, è stata proposta la seguente congettura:

Congettura

Sia $\beta > 0$. Un grafo è walk-regular \iff se $SC(\cdot, \beta)$ assegna lo stesso peso a tutti i vertici.

La freccia \Rightarrow è vera per ogni β , perché una funzione di matrice da sempre lo stesso valore a tutti i vertici di un grafo walk-regular.

L'Exponential Subgraph Centrality è stata definita da Estrada nel 2005. Uno dei motivi per cui è stata introdotta è che per alcuni grafi regolari varie misure di centralità danno lo stesso peso a *tutti* i vertici, mentre l'Exponential Subgraph Centrality non è costante su tutti i vertici.

Per questo, è stata proposta la seguente congettura:

Congettura

Sia $\beta > 0$. Un grafo è walk-regular \iff se $SC(\cdot, \beta)$ assegna lo stesso peso a tutti i vertici.

La freccia \Rightarrow è vera per ogni β , perché una funzione di matrice da sempre lo stesso valore a tutti i vertici di un grafo walk-regular.

La freccia \Leftarrow claima che $SC(\cdot, \beta)$ riesce a distinguere tutti i grafi non walk-regular.

In collaborazione con F. Ballini, abbiamo dimostrato il seguente risultato:

Teorema

Sia $\beta > 0$ un numero algebrico. Allora $SC(i, \beta) = SC(j, \beta)$ se e solo se i vertici i e j sono cospettrali.

In collaborazione con F. Ballini, abbiamo dimostrato il seguente risultato:

Teorema

Sia $\beta > 0$ un numero algebrico. Allora $SC(i, \beta) = SC(j, \beta)$ se e solo se i vertici i e j sono cospettrali.

Questo implica che la congettura è vera per β algebrico, poiché un grafo è walk-regular se e solo se tutti i vertici sono cospettrali tra di loro.

Siano a_1, \ldots, a_d algebrici distinti, allora gli esponenziali e^{a_h} sono linearmente indipendenti su \overline{Q} .

Ovvero, presi c_1, \ldots, c_d algebrici (non necessariamente distinti), si ha:

$$c_1e^{a_1}+\cdots+c_de^{a_d}=0 \quad \Longleftrightarrow \quad c_h=0 \ \forall \ 1\leq h\leq d$$

Siano a_1, \ldots, a_d algebrici distinti, allora gli esponenziali e^{a_h} sono linearmente indipendenti su \overline{Q} .

Ovvero, presi c_1, \ldots, c_d algebrici (non necessariamente distinti), si ha:

$$c_1e^{a_1}+\cdots+c_de^{a_d}=0 \quad \Longleftrightarrow \quad c_h=0 \ \forall \ 1\leq h\leq d$$

Dimostrazione proposizione:

Siano λ_k , $k=1,\ldots,n$ gli autovalori (eventualmente ripetuti) di A. Da $f(A)=Q\,f(D)\,Q^{\top}$ otteniamo:

$$f(A)_{ii} = \sum_{k=1}^{n} Q_{ik} f(\lambda_k) Q_{ki}^{\top} = \sum_{k=1}^{n} f(\lambda_k) Q_{ik}^{2}$$

Siano a_1, \ldots, a_d algebrici distinti, allora gli esponenziali e^{a_h} sono linearmente indipendenti su \overline{Q} .

Ovvero, presi c_1, \ldots, c_d algebrici (non necessariamente distinti), si ha:

$$c_1e^{a_1}+\cdots+c_de^{a_d}=0 \quad \Longleftrightarrow \quad c_h=0 \ \forall \ 1\leq h\leq d$$

Dimostrazione proposizione:

Siano λ_k , $k=1,\ldots,n$ gli autovalori (eventualmente ripetuti) di A. Da $f(A)=Q\,f(D)\,Q^{\top}$ otteniamo:

$$f(A)_{ii} = \sum_{k=1}^{n} Q_{ik} f(\lambda_k) Q_{ki}^{\top} = \sum_{k=1}^{n} f(\lambda_k) Q_{ik}^{2}$$

Raggruppiamo autovalori uguali in μ_h . $C_{h,i}$ dipende solo da Q e non da f:

$$f(A)_{ii} = \sum_{h=1}^{d} f(\mu_h) C_{h,i}$$



Siano a_1, \ldots, a_d algebrici distinti, allora gli esponenziali e^{a_h} sono linearmente indipendenti su \overline{Q} .

Ovvero, presi c_1, \ldots, c_d algebrici (non necessariamente distinti), si ha:

$$c_1e^{a_1}+\cdots+c_de^{a_d}=0 \quad \Longleftrightarrow \quad c_h=0 \ \forall \ 1\leq h\leq d$$

Dimostrazione proposizione:

Siano λ_k , $k=1,\ldots,n$ gli autovalori (eventualmente ripetuti) di A. Da $f(A)=Q\,f(D)\,Q^{\top}$ otteniamo:

$$f(A)_{ii} = \sum_{k=1}^{n} Q_{ik} f(\lambda_k) Q_{ki}^{\top} = \sum_{k=1}^{n} f(\lambda_k) Q_{ik}^{2}$$

Raggruppiamo autovalori uguali in μ_h . $C_{h,i}$ dipende solo da Q e non da f:

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

$$0=[e^{\beta A}]_{ii}-[e^{\beta A}]_{jj}$$

$$0 = [e^{eta A}]_{ii} - [e^{eta A}]_{jj} = \sum_{h=1}^{d} e^{eta \mu_h} (C_{h,i} - C_{h,j})$$

$$0 = [e^{\beta A}]_{ii} - [e^{\beta A}]_{jj} = \sum_{h=1}^{d} e^{\beta \mu_h} (C_{h,i} - C_{h,j})$$

Il polinomio caratteristico di A ha coefficienti interi, dunque le sue radici μ_h sono algebrici (distinti). Segue che i $\beta\mu_h$ sono algebrici distinti.

$$0 = [e^{\beta A}]_{ii} - [e^{\beta A}]_{jj} = \sum_{h=1}^{d} e^{\beta \mu_h} (C_{h,i} - C_{h,j})$$

Il polinomio caratteristico di A ha coefficienti interi, dunque le sue radici μ_h sono algebrici (distinti). Segue che i $\beta\mu_h$ sono algebrici distinti. Scegliendo opportunamente Q, si dimostra che $C_{h,i}$, $C_{h,j}$ sono algebrici.

$$0 = [e^{\beta A}]_{ii} - [e^{\beta A}]_{jj} = \sum_{h=1}^{d} e^{\beta \mu_h} (C_{h,i} - C_{h,j})$$

Il polinomio caratteristico di A ha coefficienti interi, dunque le sue radici μ_h sono algebrici (distinti). Segue che i $\beta\mu_h$ sono algebrici distinti. Scegliendo opportunamente Q, si dimostra che $C_{h,i}$, $C_{h,j}$ sono algebrici.

$$0 = [e^{\beta A}]_{ii} - [e^{\beta A}]_{jj} = \sum_{h=1}^{d} e^{\beta \mu_h} (C_{h,i} - C_{h,j})$$

Il polinomio caratteristico di A ha coefficienti interi, dunque le sue radici μ_h sono algebrici (distinti). Segue che i $\beta\mu_h$ sono algebrici distinti. Scegliendo opportunamente Q, si dimostra che $C_{h,i}$, $C_{h,j}$ sono algebrici.

$$A_{ii}^k =$$

$$0 = [e^{\beta A}]_{ii} - [e^{\beta A}]_{jj} = \sum_{h=1}^{d} e^{\beta \mu_h} (C_{h,i} - C_{h,j})$$

Il polinomio caratteristico di A ha coefficienti interi, dunque le sue radici μ_h sono algebrici (distinti). Segue che i $\beta\mu_h$ sono algebrici distinti. Scegliendo opportunamente Q, si dimostra che $C_{h,i}, C_{h,j}$ sono algebrici.

$$A_{ii}^k = \sum_{h=1}^d \mu_h^k C_{h,i}$$

$$0 = [e^{\beta A}]_{ii} - [e^{\beta A}]_{jj} = \sum_{h=1}^{d} e^{\beta \mu_h} (C_{h,i} - C_{h,j})$$

Il polinomio caratteristico di A ha coefficienti interi, dunque le sue radici μ_h sono algebrici (distinti). Segue che i $\beta\mu_h$ sono algebrici distinti. Scegliendo opportunamente Q, si dimostra che $C_{h,i}$, $C_{h,j}$ sono algebrici.

$$A_{ii}^{k} = \sum_{h=1}^{d} \mu_{h}^{k} C_{h,i} = \sum_{h=1}^{d} \mu_{h}^{k} C_{h,j}$$

Sia $\beta > 0$ algebrico e presupponiamo che $SC(i, \beta) = SC(j, \beta)$, allora

$$0 = [e^{\beta A}]_{ii} - [e^{\beta A}]_{jj} = \sum_{h=1}^{d} e^{\beta \mu_h} (C_{h,i} - C_{h,j})$$

Il polinomio caratteristico di A ha coefficienti interi, dunque le sue radici μ_h sono algebrici (distinti). Segue che i $\beta\mu_h$ sono algebrici distinti. Scegliendo opportunamente Q, si dimostra che $C_{h,i}$, $C_{h,j}$ sono algebrici.

Per il teorema di Lindemann-Weierstrass, necessariamente $C_{h,i}-C_{h,j}=0$ per ogni h.

$$A_{ii}^{k} = \sum_{h=1}^{d} \mu_{h}^{k} C_{h,i} = \sum_{h=1}^{d} \mu_{h}^{k} C_{h,j} = A_{jj}^{k}$$

Sia $\beta > 0$ algebrico e presupponiamo che $SC(i, \beta) = SC(j, \beta)$, allora

$$0 = [e^{\beta A}]_{ii} - [e^{\beta A}]_{jj} = \sum_{h=1}^{d} e^{\beta \mu_h} (C_{h,i} - C_{h,j})$$

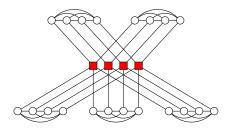
Il polinomio caratteristico di A ha coefficienti interi, dunque le sue radici μ_h sono algebrici (distinti). Segue che i $\beta\mu_h$ sono algebrici distinti. Scegliendo opportunamente Q, si dimostra che $C_{h,i}$, $C_{h,j}$ sono algebrici.

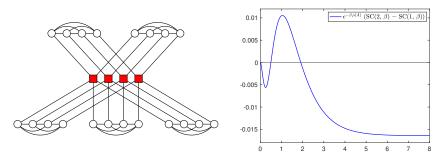
Per il teorema di Lindemann-Weierstrass, necessariamente $C_{h,i}-C_{h,j}=0$ per ogni h.

$$A_{ii}^{k} = \sum_{h=1}^{d} \mu_{h}^{k} C_{h,i} = \sum_{h=1}^{d} \mu_{h}^{k} C_{h,j} = A_{jj}^{k}$$

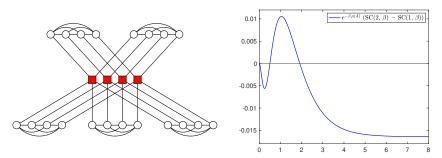
Questo vale per ogni k, dunque i e j sono cospettrali. \square

Perché solo per β algebrico e non per tutti i $\beta > 0$?



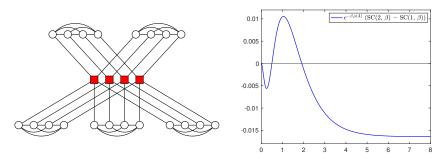


I 20 vertici bianchi sono tutti isomorfi tra di loro, cosi come i 4 rossi. Il grafico mostra la differenza $SC(bianco, \beta) - SC(rosso, \beta)$; ci sono due zeri per $\beta \approx 0.49, 1.91$.



I 20 vertici bianchi sono tutti isomorfi tra di loro, cosi come i 4 rossi. Il grafico mostra la differenza $SC(bianco, \beta) - SC(rosso, \beta)$; ci sono due zeri per $\beta \approx 0.49, 1.91$.

Per questi β l'Exponential Subgraph Centrality da lo stesso peso a tutti i vertici.



I 20 vertici bianchi sono tutti isomorfi tra di loro, così come i 4 rossi. Il grafico mostra la differenza $SC(bianco, \beta) - SC(rosso, \beta)$; ci sono due zeri per $\beta \approx 0.49, 1.91$.

Per questi β l'Exponential Subgraph Centrality da lo stesso peso a tutti i vertici. Tuttavia, per il teorema appena dimostrato questi β sono necessariamente trascendenti!

Conclusioni

- La RC e SC possono interlacciarsi al massimo d-1 volte per vertici non cospettrali.
- Ci basta un solo valore di β algebrico per distinguere vertici non cospettrali, utilizzando la SC.
- Non si conosce ancora una funzione "facile da calcolare" che assegni lo stesso valore a due vertici se e solo se sono isomorfi. Infatti, è legato al trovare tutti gli automorfismi di un grafo; attualmente non si conoscono algoritmi polinomiali per ciò.
- Tuttavia la SC riesce a distinguere vertici non cospettrali, e questo è il massimo potere risolutivo possibili per una misura derivante da funzioni di matrice.

Grazie per l'attenzione!

Bibliografia

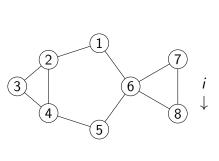
- F. Ballini, N. Deniskin, *Vertex distinction with subgraph centrality: a proof of Estrada's conjecture and some generalizations*, arXiv preprint (July 2020) https://arxiv.org/abs/2007.08956
- E. Estrada, J. A. Rodríguez-Velázquez, Subgraph centrality in complex networks, Physical Review Vol.71 Iss. 5 (2005)
- E. Estrada, J.A. de la Peña, N. Hatano, Walk entropies in graphs, Linear Algebra Appl. 443C (2014), pp. 235–244
- K. Kloster, D. Král, B. D. Sullivan, *Walk entropy and walk-regularity*, Linear Algebra Appl., Vol. 546 (2018), pp. 115-121.

Sia A matrice simmetrica di taglia n con μ_1, \ldots, μ_d autovalori distinti. Sia E_h il proiettore ortogonale sull'autospazio $V_h = \operatorname{Ker} A - \mu_h I$.

Sono equivalenti:

- 1 i e j sono cospettrali.
- ① Definita $W_A(i,t) = \sum_{k=0}^{\infty} t^k A_{ii}^k$, si ha che $W_A(i,t) = W_A(j,t)$ per ogni t in cui la serie converge.
- **1** Per ogni proiettore spettrale E_h di A, si ha che $[E_h]_{ii} = [E_h]_{jj}$
- **5** $A \setminus \{i, i\}$ e $A \setminus \{j, j\}$ hanno lo polinomio caratteristico.

Esempio di due vertici cospettrali non isomorfi (vertici 3 e 8).



$k \longrightarrow$							
	$[A^k]_{ii}$	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

Sia $\mathcal G$ un grafo non orientato con matrice di adiacenza A e sia d il numero di autovalori distinti di A. Siano i,j due vertici non cospettrali.

Allora le Exponential Subgraph Centrality $SC(i, \beta)$ e $SC(j, \beta)$ possono interlacciarsi al massimo d-1 volte.

Proposizione

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

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

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

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.

Per grafi non orientati, ogni vertice può svolgere due ruoli: quello di broadcaster e receiver. I broadcaster hanno tanti archi uscenti e riescono a diffondere bene le informazioni, mentre i receiver hanno tanti archi entranti e molti percorsi passano necessariamente per essi.

Katz Centrality, Total Communicability, PageRank, HITS sono esempi di misure che possono dare un peso per i broadcaster e uno per i receiver. (In generale i ranking ottenuti sono diversi)

Broadcaster: $TC(i, \alpha) = [e^{\beta A} \mathbb{1}]_i$ Receiver: $TC(i, \alpha) = [(e^{\beta A})^T \mathbb{1}]_i$

La SC e RC non riescono a distinguere broadcaster da authority.

Grazie per l'attenzione!