

شاخص‌های آن‌تروپی-انرژی گراف برای رتبه‌بندی گره‌های تأثیرگذار در شبکه‌های پیچیده و اجتماعی

فرشاد صفایی^۱، محمدمهدی عمادی کوچک^۲، محمد امین^۳*

*نویسنده مسئول، دریافت: ۱۳۹۹/۰۹/۲۵، بازنگری: ۱۳۹۹/۱۰/۰۱، پذیرش: ۱۳۹۹/۱۰/۲۰

^۱ دانشکده مهندسی و علوم کامپیوتر، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران

^۲ دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات، تهران، ایران

^۳ دانشکده مهندسی و علوم کامپیوتر، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران

چکیده

رتبه‌بندی گره‌های تأثیرگذار با استفاده از روش‌های تحلیل کمی، از اهمیت به‌سزایی در شبکه‌های پیچیده و اجتماعی برخوردار است. بسیاری از مکانیزم‌ها در شبکه‌های پیچیده همچون دینامیک‌های انتشار، برهمکنش‌های آبخاری و همگام‌سازی در شبکه به میزان قابل ملاحظه‌ای توسط بخش کوچکی از گره‌های تأثیرگذار تحت تأثیر قرار می‌گیرند. به‌منظور استقرار روش‌های نوین و کارآمد، در این مقاله ما از شاخص‌های نیمه-محلی مبتنی بر آن‌تروپی-انرژی-تعمیم‌یافته گراف جهت رتبه‌بندی کارآمد گره‌های تأثیرگذار استفاده می‌کنیم. به‌ویژه، آشکار می‌کنیم که معیارهای محلی آن‌تروپی مانند آن‌تروپی شانون، ون نیومن و نیز آن‌تروپی‌های تعمیم‌یافته گراف چگونه همراه با معیارهای سراسری انرژی که با ساخت ماتریس‌های مستخرج از گراف در ارتباط‌اند، می‌توانند جهت ارزیابی اهمیت گره‌ها در شبکه‌های پیچیده و اجتماعی مورد استفاده قرار بگیرند. با به‌کارستن این معیارها بر روی شبکه‌ها نشان می‌دهیم که از میان شاخص‌های مبتنی بر آن‌تروپی-انرژی تعمیم‌یافته گراف، کدامیک از منظر تبیین اهمیت گره‌ها کارآمدتر است و در برابر تغییرات ناگهانی حذف گره‌ها پایداری بیشتری دارد.

کلمات کلیدی: انرژی‌های گراف، آن‌تروپی‌های تعمیم‌یافته گراف، اهمیت گره، شاخص‌های گراف، شبکه‌های پیچیده و اجتماعی

۱- مقدمه

شکل انتزاعی و در قالب ساختارهای شبکه‌های پیچیده، درک، بررسی و یافتن راه-حل‌هایی جهت ابهام‌زدایی از بسیاری از مشکلات موجود در علوم مختلف زیستی، اجتماعی، اقتصادی، مهندسی و مانند آن امکان‌پذیر خواهد شد. شبکه‌های پیچیده می‌توانند در هر جایی دیده شوند که از جمله می‌توان به اینترنت، WWW، شبکه ترافیک، شبکه سراسری توزیع برق، شبکه‌های اجتماعی و بسیاری دیگر از شبکه‌های دنیای واقعی اشاره داشت [۱]. این قبیل شبکه‌ها برای زندگانی ما آسانی و رفاه فراوانی را به ارمغان می‌آورند و از سوی دیگر، در اغلب حالات، خرابی یک گره کلیدی و تأثیرگذار به آسیب عمده‌ای در کل شبکه منتهی خواهد شد. مشخص گردیده که بسیاری از مکانیزم‌ها همچون دینامیک‌های انتشار^۱، برهمکنش‌های آبخاری^۲ و همگام‌سازی در شبکه، توسط بخش کوچکی از گره‌های

استفاده از انتزاع جهت بررسی مسایل و چالش‌های موجود در جهان پیرامون ما یکی از روش‌های توصیه شده در مدل‌سازی سیستم‌های پیچیده است. این امر به معنای ساده‌سازی امور مهم و پیچیده در بستری قابل درک و البته در یک مقیاس قابل بررسی است که بهترین گزینه برای جلوگیری از سردرگمی در مطالعات و طبقه‌بندی مناسب اطلاعات کلان به شمار می‌رود. شبکه‌های پیچیده در واقع یک شکل انتزاعی از جهان پیرامون ما هستند که شامل نهادها و اعضای است که به فراخور کاربدهایشان در تعامل با یکدیگرند. شبکه‌های پیچیده قادرند گستره‌ای از بزرگ‌ترین چالش‌ها تا کوچک‌ترین آن‌ها را در قالب مؤلفه‌ها و ارتباطات حاکم میان آن‌ها به نمایش بگذارند. بدین ترتیب، با مدل‌سازی و تبدیل چالش‌های پیرامونی به

۲- پیش زمینه

پیش از مرور معیارهای مختلف و نیز ارائه روش پیشنهادی، در این بخش، برخی تعاریف پایه و نوشت‌گذاری را که در سراسر این مقاله مورد استفاده قرار خواهند گرفت، فراهم می‌کنیم. یک گراف، زوج مرتب $G(V, E)$ است که شامل یک مجموعه رأس V همراه با مجموعه لبه $E \subseteq V \times V$ است. اگر $(u, v) \in E$ یعنی رأس‌های u و v از طریق لبه (u, v) به یکدیگر متصل باشند، می‌گوییم که u مجاور v است.

گراف بدون جهت گرافی است در آن لبه‌ها هیچ سویی ندارند؛ بدین معنی که لبه (u, v) همانند لبه (v, u) تلقی می‌شود. بدین ترتیب، هر یک از رؤس u و v می‌توانند رأس آغازین یا پایانی باشند. طوقه، لبه‌ای است که دو گره انتهایی آن مشابه‌اند. دو لبه را موازی یکدیگر (چندگانه) می‌گوییم هرگاه هر دوی این لبه‌ها نقاط انتهایی مشابهی داشته باشند. بدین ترتیب، گراف ساده، گرافی است که حاوی هیچ طوقه و لبه‌های موازی نیست. در سراسر این مقاله هرکجا که از گراف یاد می‌کنیم، منظورمان گراف ساده، بدون جهت و بدون وزن است مگر آنکه به‌صراحت بیان گردد.

امروزه بخش مهمی از نظریه جبری گراف به بررسی و مطالعه طیف ماتریس‌های مستخرج از گراف اختصاص یافته است. منظور از طیف گراف، ماتریس‌هایی است که به شکلی یکتا می‌توانند ساختار گراف را نمایش دهند. برای مثال، طیف ماتریس مجاورت، ماتریس لاپلاسیان و ماتریس فاصله، نمونه‌هایی از این دست به شمار می‌روند. گراف‌ها را می‌توان مستقلاً و یا به کمک ماتریس‌های مرتبط با آن‌ها مطالعه کرد.

تعریف ۱ [۱۲]: هر درایه (i, j) از ماتریس مجاورت $A(G)$ از گراف $G(V, E)$ به شکل زیر قابل تعریف است.

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & (u_i, v_j) \in E \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

تعریف ۲ [۱۲]: ماتریس مجاورت نرمال شده گراف G به صورت $\tilde{A} = D(G)^{-1/2} A(G) D(G)^{-1/2}$ بیان می‌شود و درایه (i, j) آن عبارتست از:

$$\tilde{A}_{ij} = \begin{cases} 1 / \sqrt{d_i d_j} & \text{if } (u_i, v_j) \in E \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

تعریف ۳ [۱۲]: ماتریس لاپلاسیان L (ترکیبی L^3) از گراف $G(V, E)$ به صورت $L(G) = D(G) - A(G)$ تعریف می‌شود که $D(G) = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n)$ بیانگر ماتریس قطری از درجات رؤس گراف در طول قطر و درایه‌های صفر در جاهای دیگر است. تعریف هر عنصر $L(G)$ عبارتست از:

$$L_{ij} = \begin{cases} -1 & \text{if } (u_i, v_j) \in E \\ d_i & \text{if } u_i = v_j \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

تعریف ۴ [۱۲]: ماتریس لاپلاسیان نرمال شده گراف G به صورت $\tilde{L}(G) = D(G)^{-1/2} L(G) D(G)^{-1/2}$ بیان می‌شود و درایه (i, j) آن عبارتست از:

مهم و کلیدی به شدت تحت تأثیر قرار می‌گیرند [۲-۷]. بدین ترتیب، تعیین گره‌های تأثیرگذار در شبکه‌های پیچیده دارای مزایای فراوان و مشخصی است. برای نمونه، در انتشار شبکه ویروس، این امر می‌تواند به یافتن و کنترل منبع کلیدی انتشار جهت پیشگیری از انتشار بیشتر ویروس کمک شایانی کند. در شبکه‌های پیچیده با مقیاس بزرگ، پشتیبانی از سرورها و ایجاد طراحی‌های افزونه^۳ بر طبق اهمیت سرورها، نه تنها به بهبود استحکام شبکه می‌تواند یاری برساند، بلکه همچنین برای نگهداشت منابع نیز سودمند باشد. به طور خلاصه، تعیین و رتبه‌بندی گره‌های کلیدی و تأثیرگذار و سپس حفاظت از آن‌ها می‌تواند به افزایش بقاء و استحکام شبکه‌های پیچیده منجر گردد.

از آنجاکه کارهای تعدادی از دانشمندان پیشرو در تعیین مرکزیت و اهمیت عوامل در شبکه‌های اجتماعی مورد توجه قرار گرفته است، تعیین مهم‌ترین گره‌های مرکزی در شبکه‌های پیچیده در طی این سال‌ها به‌وفور مطالعه شده است [۸]؛ بنابراین، شاخص‌های متعددی برای سنجش آن‌ها پیشنهاد گردیده است که از آن جمله می‌توان به درجه [۱]، نزدیکی^۴ [۱]، خروج از مرکز^۵ [۱]، H-index [۹]، بردار ویژه^۶ [۱]، رتبه‌بندی پیچ^۷، مرکزیت اطلاعات^۸، بینیت^۹، بار ترافیکی و امثال آن اشاره داشت [۱۰]. اغلب روش‌های شناخته شده برای رتبه‌بندی گره‌ها از اطلاعات ساختاری شبکه بهره می‌جویند.

از سویی، مشخص گردیده که پیچیدگی ساختاری نیز یکی از مهم‌ترین خواص شبکه‌های پیچیده است. آن‌تروپی شبکه معمولاً جهت تبیین میزان اطلاعات رمز شده در ساختار شبکه و ارزیابی پیچیدگی ساختاری آن مورد بهره‌برداری واقع می‌شود [۱۱]. اخیراً شاهد تلاش‌هایی بوده‌ایم که تمرکز آن‌ها بر تبیین پیچیدگی‌های شبکه با محوریت معیارهای مبتنی بر آن‌تروپی بوده است.

در مقاله حاضر، برای رتبه‌بندی اهمیت گره‌ها، به اطلاعات ساختاری شبکه‌های پیچیده و معیارهای ترکیبی آن‌تروپی و انرژی که می‌توانند به‌عنوان ابزارهایی بنیادی در خدمت اکتساب اطلاعات ساختاری آن قرار بگیرند توسل جست‌ایم. سهم و مشارکت پژوهشی ما در کار حاضر، وام‌گیری از شاخص‌های مبتنی بر آن‌تروپی و انرژی بوده است که برای شناسایی پیچیدگی ساختاری در سطح گراف و تشخیص اهمیت مؤلفه‌ها در سطح گره می‌تواند به نحو کارآمدی مورد استفاده قرار گیرد. منظور از اهمیت گره در این مقاله تغییرات آن‌تروپی قبل و بعد از حذف گره‌ها از شبکه است. با این حال لازم به ذکر است که اطلاعات ساختاری در اینجا در سطح سامانه‌ای (نیمه محلی^{۱۰}) و نه صرفاً محلی است و چون با استفاده از ترکیب آن‌تروپی و انرژی، اطلاعات ساختاری زیادی از گراف به دست می‌آید، کارایی بهتری نیز حاصل خواهد گشت. ما آزمون‌های تجربی را بر روی تعدادی از شبکه‌های واقعی و ساختگی انجام خواهیم داد تا برتری روش پیشنهادی را نمایش دهیم. به کمک روش‌های ریاضی، انواع آن‌تروپی‌های شبکه را که بر اساس انرژی‌های ماخوذ از آن قابل تعریف هستند، برای رتبه‌بندی گره‌های شبکه مورد استفاده قرار داده و از مقایسه آن‌ها با یکدیگر بهترین روش را استخراج و معرفی خواهیم کرد.

مابقی مقاله در ۷ بخش به شرح زیر ساماندهی شده است. بخش ۲ تعاریف و مقدمات موردنیاز برای مطالعه و درک سایر بخش‌های مقاله را به‌اختصار ارائه می‌دهد. در بخش ۳ انواع طیف گراف و انرژی‌های مرتبط با آن معرفی خواهند شد. در بخش ۴ آن‌تروپی‌های تعمیم‌یافته گراف^{۱۱} و انرژی‌های مرتبط با آن‌ها مطرح می‌شوند. در بخش ۵ روش پیشنهادی مبتنی بر شاخص‌های آن‌تروپی-انرژی گراف همراه با یک الگوریتم ساده جهت رتبه‌بندی گره‌های تأثیرگذار توصیف می‌شود. نتایج تجربی حاصل از روش پیشنهادی بر روی شبکه‌های واقعی و مصنوعی همراه با مقایسه کارآمد شاخص‌های مختلف مبتنی بر آن‌تروپی-انرژی در بخش ۶ گزارش خواهد شد. سرانجام نتیجه‌گیری‌های ضروری، تفسیرها و خط‌مشی کارهای آتی در بخش ۷ بررسی خواهند گردید.

ماتریس $R\beta(G) = D(G)^\beta A(G)D(G)^\beta = \gamma_{ij} \text{ }_{n \times n}$ عمومی^{۱۸} رندیج نام دارد که درایه (i,j) آن به صورت زیر تعریف می شود.

$$\gamma_{ij} = \begin{cases} 1 / \sqrt{d_i d_j} & \text{if } (u_i, v_j) \in E \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (۸)$$

۲-۱- طیف گرافها و انرژی آنها

در این بخش ما جهت ارزیابی پیچیدگی ساختاری گرافها از معیارهای مبتنی بر انرژی طیفی گراف استفاده می کنیم. با وجودی که معیارهای متعددی جهت تبیین خواص ساختاری گرافها وجود دارد، معیارهای نسبتاً ناچیزی و مرتبطی با قابلیت پیچیدگی محاسباتی کم و قدرت کلاس بندی بالا وجود دارند. در این مقاله ما یک تکنیک ساده و کارآمد را نمایان می سازیم که قابل اعمال به تمامی گرافها است. در ادامه، تعدادی مفاهیم مقدماتی را که خاستگاه اولیه آنها از فیزیک و شیمی است به حوزه هایی از نظریه گراف و علم شبکه برای مطالعه خواص شبکه های پیچیده اعمال می کنیم. برای اینکه بتوان درک ژرف تری از رویکرد پیشنهادی داشت، ابتدا این تعاریف را به اختصار شرح می دهیم.

تعریف ۱۲ [۱۲]: اگر $G(V, E)$ یک (n, m) -graph ساده همبند و بدون جهت با $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ به عنوان مقادیر ویژه ماتریس مجاورت آن باشد، در این صورت k امین گشتاور طیفی^{۱۹} G به شکل زیر قابل تعریف است.

$$M_k(G) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k \quad (۹)$$

در معادله بالا این امکان وجود دارد که اگر G دوبخشی و مقادیر ویژه λ_i ها منفی باشند، $M_k(G)$ برای مقادیر فرد k تولید صفر کند. برای غلبه بر این محدودیت، دهمر و همکارانش [۱۳] کمیت های شبه گشتاور^{۲۰} را پیشنهاد دادند که در آنها به جای توان های مقادیر ویژه، از قدر مطلق استفاده شده است. بدین ترتیب داریم.

$$M_k^*(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^k \quad (۱۰)$$

جزئیات مربوط به نظریه طیفی گرافها را می توان در مقاله نطفه ای^{۲۱} [۲۵] دهمر و ایلی^{۲۲} پیدا کرد. یکی از کاربردهای قابل اعتنای شیمیایی در تئوری گراف بر اساس ارتباط نزدیک بین مقادیر ویژه گراف و سطوح انرژی اوربیتال مولکولی الکترون های π - در هیدروکربن های الحاقی^{۲۳} بوده است. مشخصاً، ایوان گوتمن [۱۴] تعریف زیر از انرژی گراف را معرفی کرده است.

تعریف ۱۳ [۱۴]: فرض کنید $G(V, E)$ یک (n, m) -graph ساده همبند و بدون جهت و مقادیر ویژه ماتریس مجاورت گراف (مولکولی)

بدون جهت $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ باشد، در این صورت انرژی گراف G عبارتست از:

$$E_G = 2 \sum_{j: \lambda_j > 0} \lambda_j = \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \quad (۱۱)$$

تساوی آخر ناشی از این حقیقت است که این قبیل مولکول های الحاقی می توانند با گراف های دوبخشی نمایش داده شوند و بدین ترتیب طیف های ماتریس مجاورت آنها متقارن است. این مفهوم سپس توسط ایوان گوتمن به هر

$$\tilde{L}_{ij} = \begin{cases} -1 / \sqrt{d_i d_j} & \text{if } (u_i, v_j) \in E \\ 1 & \text{if } u_i = v_j \text{ and } d_j \neq 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (۴)$$

ماتریس لاپلاسین نرمال شده، نیمه معین مثبت^{۱۴} است؛ بدین ترتیب تمامی مقادیر ویژه اش نامنفی اند. عامل نرمال سازی بدین معنی است که بزرگ ترین مقدار ویژه آن کوچک تر از یا مساوی با ۲ است (تساوی هنگامی برقرار است که G دوبخشی^{۱۵} باشد). از این رو، تمامی مقادیر ویژه ماتریس لاپلاسین نرمال در محدوده صفر و ۲ قرار دارد.

تعریف ۵ [۱۲]: ماتریس $Q(G)$ از گراف G ماتریس لاپلاسین بدون علامت^{۱۶} نام دارد و به صورت $Q(G) = D(G) + A(G)$ تعریف می شود.

تعریف ۶ [۱۲]: ماتریس لاپلاسین بدون علامت نرمال شده به صورت $\tilde{Q}(G) = D(G)^{-1/2} Q(G) D(G)^{-1/2}$ تعریف می شود.

تعریف ۷ [۱۲]: ماتریس وقوع^{۱۷} $I(G)$ از گراف ساده $G(V, E)$ با مجموعه رئوس $V = \{v_i : i = 1, 2, \dots, n\}$ و مجموعه لبه $E = \{e_i : i = 1, 2, \dots, m\}$ نشان داده شده و درایه (i, j) آن به صورت زیر تعریف می شود.

$$I_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if vertex } v_i \text{ is incident to the edge } e_j \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (۵)$$

تعریف ۸ [۱۲]: فرض کنید G یک گراف همبند با مجموعه رئوس $V = \{v_i : i = 1, 2, \dots, n\}$ و مجموعه لبه $E = \{e_i : i = 1, 2, \dots, m\}$ باشد، ماتریس فاصله G با $l(G) = l_{ij} \text{ }_{n \times n}$ بیان می شود که l_{ij} بیانگر فاصله بین رئوس v_i و v_j در گراف G است.

تعریف ۹ [۱۲]: فرض کنید G یک گراف ساده با مجموعه رئوس $V = \{v_i : i = 1, 2, \dots, n\}$ و مجموعه لبه $E = \{e_i : i = 1, 2, \dots, m\}$ باشد، ماتریس مجاورت رندیج G (یا ماتریس رندیج) با $R(G) = r_{ij} \text{ }_{n \times n}$ نشان داده شده و درایه (i, j) آن به صورت زیر تعریف می شود.

$$r_{ij} = \begin{cases} 1 / \sqrt{d_i d_j} & \text{if } (u_i, v_j) \in E \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (۶)$$

تعریف ۱۰ [۱۲]: فرض کنید G یک گراف ساده با مجموعه رئوس $V = \{v_i : i = 1, 2, \dots, n\}$ و مجموعه لبه $E = \{e_i : i = 1, 2, \dots, m\}$ و d_i درجه رأس v_i باشد، ماتریس $RI(G) = D(G)^{-1/2} I(G)$ به سائز $n \times m$ ماتریس وقوع رندیج نام دارد که درایه (i, j) آن به صورت زیر تعریف می شود.

$$RI_{ij} = \begin{cases} 1 / \sqrt{d_i} & \text{if } v_i \text{ incident to } e_j \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (۷)$$

تعریف ۱۱ [۱۲]: فرض کنید G یک گراف ساده با مجموعه رئوس $V = \{v_i : i = 1, 2, \dots, n\}$ و مجموعه لبه $E = \{e_i : i = 1, 2, \dots, m\}$ باشد،

$$LE_G = \sum_{i=1}^n |\gamma_i| \quad (12)$$

که $\gamma_i = \mu_i - 2m/n$ به‌ازای $i = 1, 2, \dots, n$ است و مقدار ویژه کمکی^{۲۱} نام دارد. چنانچه ماکزیمم و مینیمم درجه‌های گراف را به ترتیب با Δ و δ نمایش دهیم، کمیت $\delta \leq 2m/n \leq \Delta$ بیانگر متوسط درجه رأسی گراف G است. در [۲۳]، بین خواص LE_G و E_G یک همانندی برقرار شده است؛ هرچند که برخی اختلافات مشخص نیز میان آن‌ها مشهود است.

ثابت شده که کران‌های زیر برقرارند [۲۳]

$$LE_G \leq \sqrt{2Mm} \quad (13)$$

$$2\sqrt{M} \leq LE_G \leq 2M \quad (14)$$

که در آن $2M = m + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (d_i - 2m/n)^2$. هنگامیکه G منتظم باشد $M=m$ خواهد شد. یعنی، در حالت منتظم بودن گراف، به کران ارائه شده توسط مک‌لند دست خواهیم یافت.

۲-۲- آنترپوی‌های تعمیم‌یافته گراف

در نظریه اطلاعات، تعریف آنترپوی (شانون) برحسب متوسط مقدار اطلاعات گنج‌یافته شده در یک پیام است که از طریق کانال واقع بین فرستنده و گیرنده انتقال داده می‌شود. در مکانیک کلاسیک آماری، آنترپوی گیبس^{۲۲} به‌عنوان آنترپوی آماری توزیع ریزحالاتی^{۲۳} تفسیر می‌گردد که معرف درشت‌حالت‌های سیستم هستند. همچنین، آنترپوی ون نیومن^{۲۴} (QE) معادل نسخه کوانتومی آنترپوی کلاسیک گیبس در حوزه مکانیک کوانتومی است.

تعریف ۱۵ [۱۲]: در نظر بگیرد $p = (p_1, \dots, p_n)$ یک بردار احتمال باشد، یعنی $0 \leq p_i \leq 1$ و $\sum_{i=1}^n p_i = 1$ ، در این صورت آنترپوی شانون p به شکل زیر تعریف می‌شود.

$$I(p) = -\sum_{i=1}^n p_i \log p_i \quad (15)$$

همچنین فرض کنید $(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ یک چندتایی از اعداد صحیح نامنفی $\lambda_i \in \mathbb{N}$ باشد. این چندتایی، توزیع احتمال p را شکل می‌دهد به طوری که

$$p_i = \lambda_i / \sum_{j=1}^n \lambda_j, i = 1, 2, \dots, n \quad (16)$$

بدین سیاق، آنترپوی چندتایی $(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ عبارتست از:

$$I(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = \log \sum_{i=1}^n \lambda_i - \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i}{\sum_{j=1}^n \lambda_j} \log \lambda_i \quad (17)$$

آنترپوی‌های گراف عمدتاً به دو کلاس تقسیم می‌شوند. دسته اول و اغلب معیارهای کلاسیک آنترپوی گراف بر اساس یک رابطه هم‌ارزی با استفاده از یک سنجه گراف مانند X هستند که به یک گراف متناهی قابل اعمال است. این رابطه هم‌ارزی، گراف را به k کلاس هم‌ارزی X_i افراز می‌کند و بدین ترتیب تعریفی از توزیع احتمال را با دانستن $\sum_{i=1}^k |X_i| / |X| = 1$ امکانپذیر می‌سازد. کلاس

دوم که توسط دهمر [۱۲] معرفی شده، کلاس دیگری از آنترپوی‌های گراف است که به تعیین افزای‌های ناشی از روابط هم‌ارزی توسط سنجه‌ای مانند X اتکاء ندارد. دهمر برای تعریف این معیارها، یک مقدار احتمال را به هر رأس $v_i \in V$

گرافی (نه ضرورتاً دوبخشی) تعمیم داده شد و او آن را با نام انرژی گراف آن‌گونه که امروزه همگی ما می‌شناسیم نام‌گذاری کرد.

مفهوم انرژی گراف برخاسته از زمینه مطالعات هیدروکربن‌های الحاقی است که در شیمی به‌عنوان متد HMO^{۲۳} شناخته شده است. در این زمینه، کل انرژی مولکول الحاقی (در اینجا گراف G) با معادله (۳) تعریف می‌شود. به‌زودی با تعمیم این مفهوم به سایر گراف‌ها، تمامی معانی فیزیکی و شیمیایی آن به طور کامل از میان رفت. با این حال، انرژی گراف به‌عنوان یک سنجه گراف می‌تواند اطلاعات ساختاری مهمی را درباره گراف به ما عرضه دارد.

معمولاً دو کلاس مهم از مسایل ریاضی به انرژی گراف می‌پردازند. یک کلاس در صدد یافتن کران‌های بالا و پایین انرژی گراف است. کلاس دیگر به دنبال تعیین مقادیر بیشینه انرژی برای کلاس مفروضی از گراف‌ها است و نیز گراف‌های اکستریمال متناظر را تبیین می‌کند. برای نمونه، در [۱۵] نشان داده شده در صورتی که گراف G فاقد رأس ایزوله باشد، $2\sqrt{m} \leq E_G \leq 2m$ (نامساوی زمانی به تساوی تبدیل خواهد شد که G یک گراف کامل دوبخشی $K_{n,n}$ باشد).

همچنین، اگر G یک (n,m) -graph باشد، در این صورت $E_G \leq \sqrt{2mn}$ است (نامساوی زمانی به تساوی تبدیل خواهد شد اگر و تنها اگر G یک گراف منتظم با درجه $0 < \alpha < 1$ باشد) [۱۶]. کولن و مولتون^{۲۴} [۱۷] نیز کران‌های بالایی را برای انرژی گراف ارائه داده‌اند. در [۱۵] یک نتیجه پایه‌ای نشان داده شده و آن این است که انرژی درخت T بین گراف ستاره Sn و گراف مسیر Pn کراندار می‌شود. هیو و همکارانش^{۲۵} [۱۸] انرژی ماکزیمال را در بین تمامی گراف‌های دوبخشی دو حلقه‌ای^{۲۶} تعیین کرده و آندریانتیان و واگنر^{۲۷} [۱۹] مقدار ماکزیمم انرژی گراف را در مجموعه‌ای از تمامی گراف‌هایی با عدد سیکلوماتیک^{۲۸} k تعیین کرده است.

اخیراً استرادا و بنزی [۲۰] ثابت کرده‌اند که انرژی گراف را می‌توان از مجموع ردهای^{۲۹} توان‌های زوج ماتریس مجاورت وزن‌دار با یک شیوه مشخص استخراج کرد و به کمک همین نحوه نمایش مؤلفین مقاله توانسته‌اند کران‌های جدیدی را برای انرژی به‌عنوان مجموعه‌هایی از مشارکت‌های زیرگراف‌ها و قطعاتی مانند C_n (حلقه‌هایی به طول n)، P_n (گراف مسیر n رأسی)، Sn (گراف ستاره با n رأس)، D_n (گراف الماس)، F (زیرگرافی شامل یک مربع با رأس آویزان^{۳۰}) و H (زیرگرافی شامل دو مثلث که در یک رأس مشترک هستند) ارائه دهند.

علی‌رغم نوآوری و ارزشمندی کار این مؤلفین، آن‌ها در برآورد کمیت میزان مشارکت حلقه هشت گره‌ای در هشتمین گشتاور طیفی ماتریس مجاورت آن و نیز در محاسبه کران بالای مقدار مشارکت حلقه هشت رأسی در کل انرژی گراف، دچار خطاهای محاسباتی شده‌اند. صفایی، کشکویی و فتیحی [۲۱] ضمن تصحیح این خطاها، چگونگی محاسبه سهم زیرگراف‌ها در کل انرژی گراف را شرح داده و کران بالای انرژی گراف را برای برخی زیرگراف‌های تشکیل‌دهنده آن که در مقاله اصلی محاسبه نشده است، با دقت بیشتری محاسبه کرده‌اند.

مضافاً این نویسندگان در [۲۲] مسئله ارزیابی اهمیت گراف‌ها در شبکه‌های پیچیده و اجتماعی را خاطر نشان ساخته و روش جدیدی را برای رتبه‌بندی اهمیت گراف‌ها بر اساس میزان مشارکت آن‌ها در طیف انرژی گراف گزارش کرده‌اند. همچنین، برای محاسبه سهم انرژی گراف‌ها در کل انرژی یک گراف، یک فرمول عمومی ارائه کرده‌اند که می‌توان بر اساس آن، مقدار کل انرژی گراف را بر اساس گراف‌های سازنده آن برآورد کرد.

طیف لاپلاسین گراف G شامل μ_1, \dots, μ_n است که طیف ماتریس لاپلاسین آن نام دارد.

تعریف ۱۴ [۲۳]: اگر $G(V, E)$ یک (n,m) -graph با مقادیر ویژه لاپلاسین

μ_1, \dots, μ_n باشد، در این صورت انرژی لاپلاسین گراف G عبارتست از:

فرض کنید G یک (n,m) -graph ساده بدون جهت و $A(G)$ ماتریس مجاورت آن و $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ مقادیر ویژه A باشند. اگر $f = |\lambda_i|$ باشد در این صورت [۱۲]

$$p^f(v_i) = |\lambda_i| / \sum_{j=1}^n |\lambda_j| \quad (۲۳)$$

بدین ترتیب، آنتروپی‌های تعمیم یافته شانون، رینی و داروچی برای گرافی با مرتبه n به صورت زیر تعریف می‌شوند [۱۲ و ۱۵]

$$\begin{cases} I^1(G) = \sum_{i=1}^n \frac{|\lambda_i|}{\sum_{j=1}^n |\lambda_j|} \left[1 - \frac{|\lambda_i|}{\sum_{j=1}^n |\lambda_j|} \right] \\ I_\alpha^2(G) = \frac{1}{1-\alpha} \log \left[\sum_{i=1}^n \left(\frac{|\lambda_i|}{\sum_{j=1}^n |\lambda_j|} \right)^\alpha \right], \quad \alpha \neq 1 \\ I_\alpha^3(G) = \frac{1}{2^{1-\alpha} - 1} \sum_{i=1}^n \left(\frac{|\lambda_i|}{\sum_{j=1}^n |\lambda_j|} \right)^\alpha - 1, \quad \alpha \neq 1 \end{cases} \quad (۲۴)$$

۳- ارتباط بین آنتروپی‌های تعمیم یافته گراف و انرژی‌های گراف

با توجه به اینکه تأثیر یک گره در شبکه به نحو بسزایی تحت تأثیر ساختار توپولوژیکی آن شبکه قرار داشته و بازتابی از آن است، رویکرد ما در این مقاله بر اساس معیار مبتنی بر وارپانس آنتروپی-انرژی است که ناشی از حذف گره‌های تأثیرگذار در شبکه است. این معیار از کل اطلاعات ساختاری شبکه جهت ارزیابی اهمیت گره‌ها بهره‌مند می‌شود.

در این بخش، با استفاده از مفهوم انرژی گراف و گشتاورهای طیفی، یک پل ارتباطی بین آنتروپی‌های تعمیم یافته و انرژی‌های ماتریس‌های مرتبط با گراف که در بخش پیشین معرفی کردیم، برقرار می‌کنیم. سپس، به کمک این پل ارتباطی، روش پیشنهادی خود را برای رتبه‌بندی گره‌های گراف مبتنی بر انرژی و آنتروپی‌های تعمیم یافته آن مطرح خواهیم ساخت. بایسته است اشاره کنیم که در مطالعه ما، توابع اطلاعاتی معرفی شده در بخش پیشین، می‌توانستند بر مبنای درجه، نزدیکی، بینیت نیز تعریف شوند و یا عملگرهایی باشند که بر روی مقادیر ویژه ماتریس‌های مستخرج و مرتبط با گراف عمل می‌کنند.

تعریف ۱۹ [۱۲]: اگر G یک (n,m) -graph و E_G بیانگر انرژی گراف باشد در این صورت برای $\alpha \neq 1$ ، آنتروپی-انرژی تعمیم یافته شانون، رینی و داروچی بر اساس ماتریس مجاورت $A(G)$ به ترتیب به شکل زیر قابل تعریف است.

$$\begin{cases} I^1(G) = 1 - 2m / E_G^2 \\ I_\alpha^2(G) = \frac{1}{1-\alpha} \log \frac{M_\alpha^*}{E_G^\alpha} \\ I_\alpha^3(G) = \frac{1}{2^{1-\alpha} - 1} \left(\frac{M_\alpha^*}{E_G^\alpha} - 1 \right) \end{cases} \quad (۲۵)$$

منتسب می‌کند و توزیع احتمال $(p^f(v_1), p^f(v_2), \dots, p^f(v_n))$ را ارائه می‌دهد که $|V| = n$ است. تابع f ، که تابع اطلاعات نام دارد، عناصر گراف را به مقادیر حقیقی نامنفی نگاهت می‌کند.
تعریف ۱۶ [۱۲]: برای هر رأس v_i در گراف G و تابع اطلاعاتی دلخواهی مانند $f(v_i) \geq 0$ داریم.

$$p^f(v_i) = f(v_i) / \sum_{j=1}^n f(v_j) \quad (۱۸)$$

چون $\sum_{i=1}^n p^f(v_i) = 1$ می‌توان $p^f(v_i)$ را به عنوان احتمالات تفسیر کرد و بدین ترتیب آنتروپی گراف زیربنایی^{۳۵} را تعریف کنیم.

تعریف ۱۷ [۱۲ و ۱۵]: آنتروپی گراف G با تابع اطلاعاتی f به شکل زیر تعریف می‌شود.

$$\begin{aligned} I_f(G) &= -\sum_{i=1}^n p^f(v_i) \log p^f(v_i) \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{f(v_i)}{\sum_{j=1}^n f(v_j)} \log \frac{f(v_i)}{\sum_{j=1}^n f(v_j)} \\ &= \log \sum_{j=1}^n f(v_j) - \sum_{i=1}^n \frac{f(v_i)}{\sum_{j=1}^n f(v_j)} \log f(v_i) \end{aligned} \quad (۱۹)$$

با استفاده از این تعریف و به کار بستن تقریب درجه دو در آنتروپی شانون یعنی $-x \ln x \approx x(1-x)$ (برای زمانی که $x \rightarrow 0$ یا $x \rightarrow 1$ برقرار است)، آنتروپی را می‌توان با فرمول زیر تقریب زد.

$$I_f(G) \approx \sum_{i=1}^n p^f(v_i) [1 - p^f(v_i)] = \sum_{i=1}^n \frac{f(v_i)}{\sum_{j=1}^n f(v_j)} \left[1 - \frac{f(v_i)}{\sum_{j=1}^n f(v_j)} \right] \quad (۲۰)$$

به دنبال مقاله نطفه‌ای شانون [۲۴]، چندین تعمیم از معیار آنتروپی توسط دهمر و همکارانش پیشنهاد گردیده است. یکی از مهم‌ترین این معیارها، آنتروپی رینی^{۳۶} [۱۲ و ۱۵] نام دارد که به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$I_\alpha^r(P) = \frac{1}{1-\alpha} \log \sum_{i=1}^n (p_i)^\alpha, \quad \alpha \neq 1 \quad (۲۱)$$

به قسمی که $P = (p(v_1), p(v_2), \dots, p(v_n))$. بد نیست اضافه کنیم که در حالت حدی $\alpha \rightarrow 1$ ، به آنتروپی شانون به عنوان یک مورد خاص دست خواهیم یافت.
در [۱۲ و ۱۵]، دهمر و موشویتز کلاس جدیدی از معیارها موسوم به معیارهای تعمیم یافته را معرفی کردند که برگرفته از توابعی بود که توسط آنتروپی رینی و آنتروپی داروچی^{۳۷} تعریف شده بودند.

تعریف ۱۸ [۱۲]: اگر G یک (n,m) -graph باشد در این صورت:

$$\begin{cases} I^1(G) = \sum_{i=1}^n p^f(v_i) [1 - p^f(v_i)] \\ I_\alpha^2(G) = \frac{1}{1-\alpha} \log \left(\sum_{i=1}^n p^f(v_i)^\alpha \right), \quad \alpha \neq 1 \\ I_\alpha^3(G) = \frac{1}{2^{1-\alpha} - 1} \sum_{i=1}^n p^f(v_i)^\alpha - 1, \quad \alpha \neq 1 \end{cases} \quad (۲۲)$$

که $I^1(G)$ ، $I_\alpha^2(G)$ و $I_\alpha^3(G)$ به ترتیب آنتروپی‌های شانون، رینی و داروچی نام دارند.

نرمال، مقدار یکسانی را برحسب مرتبهٔ گراف و شاخص رندیج به دست می‌دهد. بدین سیاق، اهمیت روابط فوق در ارتباطدهی آن‌تروپی‌های تعمیم یافته با شاخص رندیج و موضوع مهم ناهمگنی گراف‌ها است و کران‌های شاخص رندیج نیز برای آن‌تروپی اول کاملاً برقرار هستند. دهمر و همکارانش [۱۲] کران‌های پایین و بالا را برای آن‌تروپی اول به صورت $1 - \frac{1}{n} - \frac{1}{n\delta} \leq I_{LQ}^1(G) \leq 1 - \frac{1}{n} - \frac{1}{n\Delta}$ گزارش کرده‌اند. مجدداً در صورتی که گراف منتظم باشد نامساوی به مساوی تبدیل خواهد شد. به بیان دیگر، تابع $I_{\bar{L}}^1(G)$ یا $I_Q^1(G)$ می‌تواند به خوبی بازتابی از ناهمگنی و در نتیجه تبیین اهمیت گره‌ها در گرافهای تحت بررسی باشد.

تعریف ۲۲ [۱۲]: اگر G یک (n,m) -graph، $I(G)$ ماتریس وقوع Q و G ماتریس لاپلاسیان بدون علامت آن باشد و نیز فرض کنیم q_1, q_2, \dots, q_n مقادیر ویژه $Q(G)$ و $\sqrt{q_1}, \sqrt{q_2}, \dots, \sqrt{q_n}$ مقادیر تکین $I(G)$ باشند، در این صورت برای $1 \neq \alpha$ ، آن‌تروپی-انرژی تعمیم یافتهٔ شانون، رینی و داروچی بر اساس ماتریس وقوع $I(G)$ به ترتیب به صورت زیر قابل تعریف است.

$$\begin{cases} I_I^1(G) = 1 - \frac{2m}{IE_G^2} \\ I_{\alpha I}^2(G) = \frac{1}{1-\alpha} \log \frac{M_{\alpha I}^*}{IE_G^\alpha} \\ I_{\alpha I}^3(G) = \frac{1}{2^{1-\alpha} - 1} \left(\frac{M_{\alpha I}^*}{IE_G^\alpha} - 1 \right) \end{cases} \quad (28)$$

به قسمی که $IE_G = \sum_{i=1}^n \sqrt{q_i}$ میانگر انرژی وقوع گراف G و $M_{\alpha I}^* = \sum_{i=1}^n \sqrt{q_i}^\alpha$ است.

معادلهٔ بالا به خوبی همبستگی میان آن‌تروپی تعمیم یافته گراف را با انرژی گراف بر اساس ماتریس وقوع بیان می‌کند. در [۱۲] ثابت شده که $0 \leq I_I^1(G) \leq 1 - 1/n$ است و در صورتی که تعداد لبه‌ها یعنی $m=0$ (گراف با رؤس ایزوله) باشد، هر دو نامساوی چپ و راست به تساوی تبدیل می‌شوند. همچنین اگر $m=1$ یا $m=0$ باشد، نامساوی چپ به تساوی تبدیل خواهد شد.

تعریف ۲۳ [۱۲]: اگر G یک (n,m) -graph همبند و $l(G) = l_{ij}$ فاصله l_{ij} باشد که درایه‌های آن، l_{ij} ، فاصله‌های ژئودزی بین رؤس هستند و همچنین فرض کنیم l_1, l_2, \dots, l_n مقادیر ویژه $I(G)$ باشند، اگر $W_k(G) = \sum_{i \geq 1} \sum_{i < j \leq n} l_{ij}^k$ گشتاور k ام فاصله در گراف G تعریف گردد، در این صورت برای $1 \neq \alpha$ ، آن‌تروپی-انرژی تعمیم یافتهٔ شانون، رینی و داروچی بر اساس ماتریس فاصله $D(G)$ به ترتیب به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\begin{cases} I_D^1(G) = 1 - \frac{4}{DE_G^2} (2WW(G) - W(G)) \\ I_{\alpha D}^2(G) = \frac{1}{1-\alpha} \log \frac{M_{\alpha D}^*}{DE_G^\alpha} \\ I_{\alpha D}^3(G) = \frac{1}{2^{1-\alpha} - 1} \left(\frac{M_{\alpha D}^*}{DE_G^\alpha} - 1 \right) \end{cases} \quad (29)$$

تعریف ۲۰ [۱۲]: اگر G یک (n,m) -graph، $Q(G)$ ماتریس لاپلاسیان بدون علامت Q گراف G ، $D(G)$ میانگر ماتریس قطری درجهٔ رأسی G و $A(G)$ ماتریس مجاورت G باشد و نیز فرض کنیم q_1, q_2, \dots, q_n مقادیر ویژه $Q(G)$ باشند، در این صورت برای $1 \neq \alpha$ آن‌تروپی-انرژی تعمیم یافتهٔ شانون، رینی و داروچی بر اساس ماتریس لاپلاسیان بدون علامت $Q(G)$ به ترتیب به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\begin{cases} I_Q^1(G) = 1 - \frac{1}{4m^2} (M_1 + 2m) \\ I_{\alpha Q}^2(G) = \frac{1}{1-\alpha} \log \frac{M_{\alpha Q}^*}{(2m)^\alpha} \\ I_{\alpha Q}^3(G) = \frac{1}{2^{1-\alpha} - 1} \left(\frac{M_{\alpha Q}^*}{(2m)^\alpha} - 1 \right) \end{cases} \quad (26)$$

به قسمی که $M_1 = \sum_{i=1}^n q_i^2$ شاخص اول زاگرب و $M_{\alpha Q}^* = \sum_{i=1}^n |q_i|^\alpha$ گشتاور α ام مقادیر ویژه ماتریس لاپلاسیان بدون علامت است. در [۱۲] نشان داده شده که $1 - \frac{1}{2m} - \frac{1}{n} \leq I_Q^1(G) \leq 1 - \frac{1}{2m} - \frac{1}{2n} - \frac{\Delta^2 + \delta^2}{4n\Delta\delta}$ که Δ و δ به ترتیب ماکزیمم و مینیمم درجه G هستند. در حالتی که G منتظم باشد، نامساوی به تساوی تبدیل خواهد شد.

تعریف ۲۱ [۱۲]: اگر G یک (n,m) -graph، $\tilde{L}(G)$ ماتریس لاپلاسیان نرمال شدهٔ G ، $\tilde{Q}(G)$ ماتریس لاپلاسیان بدون علامت نرمال شدهٔ G و $D(G)$ میانگر ماتریس قطری درجهٔ رأسی G باشد و نیز فرض کنیم q_1, q_2, \dots, q_n مقادیر ویژه $Q(G)$ و $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ مقادیر ویژه $L(G)$ باشند در این صورت برای $1 \neq \alpha$ ، آن‌تروپی-انرژی تعمیم یافتهٔ شانون، رینی و داروچی بر اساس ماتریس لاپلاسیان بدون علامت نرمال شدهٔ $Q(G)$ به ترتیب به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\begin{cases} I_{\tilde{L}}^1(G) = I_{\tilde{Q}}^1(G) = 1 - \frac{1}{n^2} (n + 2R_{-1}) \\ I_{\alpha \tilde{Q}}^2(G) = \frac{1}{1-\alpha} \log \frac{M_{\alpha \tilde{Q}}^*}{n^\alpha} \\ I_{\alpha \tilde{Q}}^3(G) = \frac{1}{2^{1-\alpha} - 1} \left(\frac{M_{\alpha \tilde{Q}}^*}{n^\alpha} - 1 \right) \end{cases} \quad (27)$$

به قسمی که $R_{-1} = \sum_{(i,j) \in E} (d_i d_j)^{-1}$ شاخص رندیج تعمیم یافته به‌زای $\beta=-1$ است. شاخص عمومی رندیج به صورت $R_\beta = \sum_{(u_i, v_j) \in E} 1 / \sqrt[\beta]{d_i d_j}$ است. این شاخص به طور گسترده‌ای در ریاضیات و فیزیک بررسی شده و در شیمی و علوم بیومولکولی کاربرد دارد.

استرادا [۹] یک تفسیر جدیدی از این شاخص را پیشنهاد کرده و مفهوم جدیدی از آن را در سیستم‌های زیستی، شیمی و سایر حوزه‌های پژوهشی که از گراف استفاده می‌کنند تفسیر داده است. او شاخص پیشنهادی‌اش را با الهام از شاخص رندیج مطرح ساخته و فرمول‌بندی‌اش از این شاخص را به‌عنوان یک کمینه‌سازی با فرم درجه دو ارائه داده که ماتریس لاپلاسیان گراف را دربر دارد. استرادا با این فرمول‌بندی نشان داده که شاخص رندیج می‌تواند به نحو بسیار کارآمدی در تعریف جدیدی از ناهمگنی گراف‌ها و شبکه‌های پیچیده عمل کند. ذکر چند نکته در معادلات بالا حائز اهمیت است. یکی اینکه آن‌تروپی-انرژی تعمیم یافته $I^1(G)$ برای هر دو ماتریس لاپلاسیان نرمال و لاپلاسیان بدون علامت

به قسمی که $M_{\alpha R}^* = \sum_{i=1}^n |r_i|^\alpha$ گشتاور α م مقادیر ویژه ماتریس رندبج، $RE_G = \sum_{i=1}^n |r_i|$ انرژی رندبج گراف G و R_1 شاخص رندبج تعمیم یافته به‌ازای $\beta=1$ است.

در [۱۲] ثابت شده که $I_R^1(G) \leq 1 - 1/n$ و تساوی زمانی برقرار خواهد شد که تنها و تنها اگر گراف ایزوله بوده یا اینکه درجهٔ تمامی رئوسش برابر ۱ باشد.

در اینجا، مفهوم شاخص رندبج در حقیقت یک ماتریس مربعی متقارن، یعنی $R(G)$ ، را به گراف G ارتباط می‌دهد. در [علیخانی و قنبری] چندجمله‌ای مشخصه^{۴۹} و انرژی رندبج برای تعدادی گراف معین از قبیل گراف مسیر P_n ، گراف سیکل C_n (زوج)، گراف ستاره S_n و گراف دوستی^{۵۰} F_n محاسبه شده است. این مؤلفین نشان داده‌اند که به‌ازای هر عدد طبیعی $m \geq 2$ ، یک گراف G وجود دارد که $RE_G = m$ است. آن‌ها همچنین ثابت کرده‌اند که انرژی رندبج برای گراف‌های ستاره برابر ۲ و معادل با انرژی رندبج گراف دوبخشی کامل $K_{1,m-1}$ است.

بد نیست در اینجا اشاره کنیم که برطبق الگوریتمی که استرادا و استرادا [۳۰] برای ساخت گرافی با ماکزیمم مقدار مجموع فاصله ارائه داده‌اند، می‌توان چنین استنتاج کرد که در میان گراف‌هایی با n رأس، ستاره بیشترین متوسط کوتاه‌ترین فاصله را دارد که عبارتست از $\bar{l}(S_n) = 2 - 2/n$ و برای گراف آگاه که خود از طریق یک فرآیند تکراری از ستاره قابل ساخت است، $\bar{l} = 2 - 4/n$.

به‌سادگی دیده می‌شود که به‌ازای $n \rightarrow \infty$ ، مقدار متوسط فاصله ژئودزی در هر دو گراف به مقدار ثابت ۲ میل می‌کند. به واژهٔ دیگر، هراندازه که چگالی گراف‌ها افزایش پیدا کند، متوسط فاصله ژئودزی آفت سریع‌تری می‌یابد و در نتیجه گراف‌هایی با ناهمگنی بیشتر (برحسب مجموع فاصله) ضرورتاً متوسط فاصله کوتاه‌تری دارند. بدین ترتیب، به نظر می‌رسد که با ترسیم نمودار همبستگی پیرسون در می‌یابیم که ترکیب آنتروپی-انرژی مبتنی بر ماتریس فاصله، به‌عنوان شاخص جهت ارزیابی اهمیت گره‌ها، با متوسط طول ژئودزی در ارتباط است و خط برآزش آن از قانون قدرت تبعیت خواهد کرد. بدین معنی که، معیارهای آنتروپی-انرژی از توزیع‌های دم کلفت پیروی می‌کنند و لذا بهتر می‌توانند میزان ناهمگنی و درنتیجه اهمیت گره‌های شبکه را گزارش کنند.

تعریف ۲۵ [۱۲]: اگر G یک (n,m) -graph ساده، $RI_G = \rho_{ij}^{n \times m}$ ماتریس وقوع رندبج G و فرض کنیم $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$ نقاط تکین ماتریس $RI(G)$ باشند و نیز فرض کنیم که U مجموعه تمامی رئوس ایزولهٔ G و W مجموعه مابقی رئوس در V یعنی $V = V(G) \setminus U$ باشد، در این صورت برای $\alpha \neq 1$ ، آنتروپی-انرژی تعمیم یافتهٔ شانون، رینی و داروچی بر اساس ماتریس وقوع رندبج $RI(G)$ به ترتیب به‌صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\begin{cases} I_{RI}^1(G) = 1 - \frac{r}{R_1 E_G^2} \\ I_{\alpha R}^2(G) = \frac{1}{1-\alpha} \log \frac{M_{\alpha RI}^*}{R_1 E_G^\alpha} \\ I_{\alpha R}^3(G) = \frac{1}{2^{1-\alpha} - 1} \left(\frac{M_{\alpha RI}^*}{R_1 E_G^\alpha} - 1 \right) \end{cases} \quad (31)$$

به قسمی که $M_{\alpha RI}^* = \sum_{i=1}^n |\sigma_i|^\alpha$ گشتاور α م مقادیر ویژه ماتریس وقوع رندبج، $R_1 E_G = \sum_{i=1}^n |\sigma_i|$ انرژی ماتریس وقوع رندبج و r کاردینالیته مجموعهٔ W است.

به قسمی که $M_{\alpha D}^* = \sum_{i=1}^n |l_i|^\alpha$ و $DE_G = \sum_{i=1}^n |l_i|$ انرژی فاصلهٔ گراف G است. همچنین در این معادله، $W(G) = W_1(G) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n S(i)$ و $WW(G) = W_1(G) + W_2(G) / 2$ و وضعیت مجموع فاصله گره i در گراف G است.

در فرمول‌بندی فوق، به‌وضوح شاهد وجود یک ارتباط معنادار میان آنتروپی با انرژی تعریف شده بر اساس ماتریس فاصله و نیز شاخص‌های وینر (که آن‌ها نیز مبتنی بر مجموع فواصل‌اند) هستیم. شاخص وینر، همبستگی قابل‌توجهی با گراف مولکولی G و برخی خواص شیمیایی مولکول دارد. معیار فاصله، سنجهٔ مهمی هم در ارزیابی استحکام گراف‌ها، هم برآورد میزان ناهمگنی آن‌ها و به‌ویژه رتبه‌بندی اهمیت گره‌ها است؛ زیرا فاصلهٔ یک گره از سایر گره‌های آن گراف را نشان می‌دهد. برای مثال، در بحث انتشار اطلاعات (بیماری‌ها)، فاصله می‌تواند نشان‌دهندهٔ میزان تأخیر زمانی‌ای باشد که اطلاعات (بیماری) از گره‌ای مفروض به سایر گره‌های موجود و قابل‌دسترس از این گره در شبکه انتشار پیدا می‌کنند.

تحلیل توزیع درجه نیز، به‌منظور سنجش میزان ناهمگنی و اهمیت گره‌های تشکیل‌دهندهٔ گراف، شاید در شبکه‌های بزرگ امری امکان‌پذیر باشد، لیکن در شبکه‌ای کوچک ممکن است برای داشتن یک برآزش مناسب^{۴۴} از این توزیع‌ها، به قدر کافی نقاط داده‌ای وجود نداشته باشد. همچنین، ممکن است مقایسه ناهمگنی شبکه‌هایی با انواع مختلفی از توزیع‌ها نیز به‌سادگی مقدور نباشد. توزیع‌های آماری مختلفی در شبکه‌های پیچیده مورد مطالعه قرار گرفته‌اند که از آن میان می‌توان به توزیع‌های مقدار ویژه [۲۵] و توزیع فاصله گره به گره [۲۶-۲۹] اشاره داشت. در حقیقت، معیار توزیع مجموع فاصله با توزیع درجه گره‌ها در شبکه همانندی دارد. این توزیع را استرادا و همکارش [۳۰] برای نخستین بار به‌عنوان یک معیار جهت سنجش میزان ناهمگنی در گراف‌ها مورد استفاده قرار دادند و نکته جالب توجه این است که این معیار در بسیاری از سنجه‌های مهم مانند شاخص وینر [۲۹]، شاخص بالابان^{۴۵} [۳۱]، متوسط کوتاه‌ترین فاصله، مرکزیت نزدیکی^{۴۶} [۳۲] و معیار نزدیکی دانکالچو^{۴۷} [۳۳] دیده می‌شود. شاخص اخیر خود معیار مهمی جهت سنجش آسیب‌پذیری و در نتیجه اهمیت گره‌ها در گراف‌ها است و در واقع چیزی به جز جایگذاری مقدار $1/2$ در چندجمله‌ای وینر-هوسایا^{۴۸} نیست که خود یک چندجمله‌ای شناخته‌شده در گراف‌های شیمیایی است. شاید مهم‌ترین و جالب‌ترین ویژگی چندجمله‌ای وینر-هوسایا این باشد که مشتق آن در مقدار ۱ عدد وینر را به دست می‌دهد. با این حال، تاکنون پژوهشی درخور بر روی آن جهت نمایش ارتباط آن با میزان تاب‌آوری گراف‌ها و سنجش اهمیت گره‌ها در شبکه‌های پیچیده انجام نشده است. دهمر و همکارانش [۱۲] خاطر‌نشان ساخته‌اند که $0 \leq I_D^1(G) \leq 1 - 1/n$.

تعریف ۲۴ [۱۲]: اگر G یک (n,m) -graph ساده و $r_{ij}^{n \times n}$ ماتریس رندبج G باشد و فرض کنیم r_1, r_2, \dots, r_n مقادیر ویژه $R(G)$ باشند، در این صورت برای $\alpha \neq 1$ ، آنتروپی-انرژی تعمیم یافتهٔ شانون، رینی و داروچی بر اساس ماتریس رندبج $R(G)$ به شکل زیر تعریف می‌شود.

$$\begin{cases} I_{RI}^1(G) = 1 - \frac{2R_1}{RE_G^2} \\ I_{\alpha R}^2(G) = \frac{1}{1-\alpha} \log \frac{M_{\alpha R}^*}{RE_G^\alpha} \\ I_{\alpha R}^3(G) = \frac{1}{2^{1-\alpha} - 1} \left(\frac{M_{\alpha R}^*}{RE_G^\alpha} - 1 \right) \end{cases} \quad (30)$$

در [۱۲] ثابت شده که:

$$1 - \frac{r}{n} \leq I_{RI}^1(G) \leq 1 - \frac{r}{n^2 - 3n + 4 + 2\sqrt{2(n-1)(n-2)}}$$

و تساوی سمت چپ هنگامی برقرار خواهد شد اگر و تنها اگر $G \approx K_2$ ؛ تساوی راست نیز زمانی برقرار است که $G \approx K_n$.

تعریف ۲۶ [۱۲]: اگر G یک (n, m) -graph و γ_{ij} ماتریس رندبج عمومی G^{α} باشد و فرض کنیم $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n$ مقادیر ویژه ماتریس $R\beta(G)$ باشند، در این صورت برای $\alpha \neq 1$ ، آن‌تروپی-انرژی تعمیم یافته شانون، رینی و داروچی بر اساس ماتریس رندبج عمومی $R\beta(G)$ به ترتیب به صورت زیر قابل تعریف است.

$$\begin{cases} I_{R\beta}^1(G) = 1 - \frac{2R_{2\beta}}{R_{\beta}E_G} \\ I_{\alpha R\beta}^2(G) = \frac{1}{1-\alpha} \log \frac{M_{\alpha R\beta}^*}{R_{\beta}E_G^{\alpha}} \\ I_{\alpha R\beta}^3(G) = \frac{1}{2^{1-\alpha} - 1} \left(\frac{M_{\alpha R\beta}^*}{R_{\beta}E_G^{\alpha}} - 1 \right) \end{cases} \quad (۳۲)$$

به قسمی که $M_{\alpha R\beta}^* = \sum_{i=1}^n |\gamma_i|^{\alpha}$ گشتاور α م مقادیر ویژه ماتریس رندبج عمومی، $R_{\beta}E_G = \sum_{i=1}^n |\gamma_i|$ آن‌تروپی رندبج عمومی و $R_{2\beta}$ شاخص رندبج عمومی گراف G به‌ازای پارامتر 2β است.

۳-۱- آن‌تروپی ون نویمن (کوانتومی)

برای تبیین پیچیدگی شبکه، در [۳۴] یک تخمین از آن‌تروپی ون نویمن (QE) بر مبنای سنج‌های گراف ارائه و ارتباطی با شاخص ناهمگنی استرادا [۹] برقرار گردیده است. افزون بر این، ارتباط بین شاخص استرادا با زمان سفر d^2 در حالت حدی و برای گراف‌هایی با اندازه بزرگ نیز نشان داده شده است. در کار این مؤلفین، فرم ساده شده‌ای از آن‌تروپی QE برای یک گراف، توسعه داده شده که می‌تواند برحسب آماره‌های درجه گره محاسبه گردد. بایستی اذعان داشت که همان‌طور که آن‌تروپی شانون با مقادیر ویژه ماتریس چگالی شبکه در ارتباط است، شاخص QE نیز اساساً در مکانیک آماری تعریف شده است.

در این زیربخش، هدف ما بررسی معیار QE جهت تبیین اهمیت گره‌ها در گراف و همچنین بیان ارتباط آن با آن‌تروپی تعمیم‌یافته $I^1(G)$ (به معادله (۲۴)) نگاه کنید) است. تا جایی که می‌دانیم، این موضوع برای نخستین بار در این مقاله ارائه می‌گردد.

پازرینی و سورینی d^2 [۳۵]، آن‌تروپی ون نویمن یا کوانتومی (QE) را از طریق یک نگاهت بین لاپلاسین‌های گسسته و حالات کوانتومی به دست آورده‌اند. چنانچه لاپلاسین گسسته را به وسیله وارون حجم یک گراف مقیاس‌بندی کنیم، به ماتریس چگالی دست می‌یابیم که آن‌تروپی آن می‌تواند به کمک طیف لاپلاسین گسسته، محاسبه گردد. با در نظر داشتن اینکه آن‌تروپی شانون با مقادیر ویژه لاپلاسین نرمال شده در ارتباط است، شاخص QE گراف نیز با طیف ویژه d^2 لاپلاسین نرمال شده ارتباط دارد. چنین معیاری قادر به تمایز ساختارهای مختلف و نیز رتبه‌بندی اهمیت مؤلفه‌های تشکیل‌دهنده آن خواهد بود.

پازرینی و سورینی استدلال کردند که لاپلاسین ترکیبی می‌تواند به‌عنوان ماتریس چگالی یک گراف بدون جهت، تفسیر گردد. بدین ترتیب، تعریف شاخص QE برای یک گراف و محاسبه آن از طریق مقادیر ویژه لاپلاسین ترکیبی متناظر، امکان‌پذیر خواهد بود. با این حال، از آنجاکه آن‌تروپی کوانتومی بر محاسبه طیف

لاپلاسین نرمال‌شده تکیه دارد، پیچیدگی محاسباتی آن برحسب تعداد گره‌ها از مرتبه پیچیدگی ۳ خواهد بود. در [۳۴] برای اینکه انجام محاسبات کارآمدتر گردد، نشان داده شده که چگونه می‌توان معیار QE را به نحو آسان‌تری تبدیل کرد و محاسبات آن را تقریب زد. خلاصه‌سازی تقریب QE به طور جزئی و مفصل در کار هن و دیگران d^2 [۳۴] ارائه داده شده است. هن به کمک معیار QE ، ارتباط آن را با تعدادی از شاخص‌های مختلف تبیین ساختاری گراف از جمله شاخص ناهمگنی استرادا (H-index) [۹] و تابع زتای ریمان d^2 نشان داده است. همچنین در ارتباط با پژوهش استرادا، ارتباط با توزیع زمان سفر در یک گراف نیز مشخص شده است. علی‌رغم اینکه پازرینی و سورینی از لاپلاسین سنتی در محاسبات خویش بهره گرفته‌اند، در مقاله حاضر، ما به‌منظور ساده‌سازی، از ماتریس لاپلاسین نرمال شده $\tilde{L}(G)$ استفاده خواهیم کرد. البته لازم به ذکر است که گزینه نرمال‌سازی در تحلیل‌های ما برای رتبه‌بندی اهمیت گره‌ها، یک امر ضروری محسوب نمی‌شود؛ زیرا هر دو ماتریس لاپلاسین و لاپلاسین نرمال‌شده می‌توانند ماتریس‌های چگالی معتبری را ایجاد کنند. افزون بر این، مقیاس‌بندی مقادیر ویژه، وابستگی عملکردی آن‌تروپی با درجه را تحت تأثیر خویش قرار نمی‌دهد. به‌ویژه اینکه، بزرگ‌ترین مقدار ویژه ماتریس لاپلاسین با دو برابر بزرگ‌ترین درجه رأسی در گراف کراندار می‌شود در حالی که مقادیر ویژه ماتریس لاپلاسین نرمال‌شده بین ۰ و ۲ است.

بدین ترتیب، آن‌تروپی ون نویمن یا کوانتومی گراف (QE) با مقادیر ویژه لاپلاسین نرمال‌شده متناظر با گراف معادل بوده و به شکل زیر قابل تعریف است [۳۵].

$$I_{QE} \triangleq - \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i}{n} \ln \frac{\mu_i}{n} \quad (۳۳)$$

که در آن $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ مقادیر ویژه ماتریس لاپلاسین نرمال‌شده $\tilde{L}(G)$ هستند.

با استفاده از این تعریف و به‌کار بستن تقریب درجه دو در آن‌تروپی شانون، یعنی $-x \ln x \approx x(1-x)$ (برای حالات $x \rightarrow 0$ یا $x \rightarrow 1$)، لین هن و همکارانش [۳۴] آن‌تروپی QE را به شکل زیر تقریب زده‌اند.

$$I_{QE} \approx \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i}{n} \left(1 - \frac{\mu_i}{n}\right) = \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i}{n} - \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i^2}{n^2} \quad (۳۴)$$

با مقایسه معادلات (۲۴) و (۳۴) درمی‌یابیم که آن‌تروپی کوانتومی I_{QE} بسیار شبیه به آن‌تروپی شانون تعمیم یافته مبتنی بر ماتریس مجاورت $I^1(G)$ است که به جای ضرب n به مجموع مقادیر ویژه ماتریس گراف نرمال شده است. این امر ما را به بررسی این موضوع ترغیب می‌کند که اساساً بهره‌برداری از چه ترکیبی از شاخص‌های آن‌تروپی-انرژی تعمیم یافته و نیز استفاده از کدامیک از ماتریس‌های متناظر با گراف بهتر می‌تواند به تبیین پیچیدگی ساختاری و مسأله رتبه‌بندی گره‌های مهم در گراف منجر گردد. این موضوع که سهم اصلی پژوهشی ما در این مقاله است، در بخش نتایج تجربی و با نتایج برآمده از آزمون‌های شبیه‌سازی مورد بررسی دقیق قرار خواهد گرفت.

تقریب آن‌تروپی کوانتومی، تضمین‌کننده صحت آن‌تروپی درجه ۲ است. زیرا وقتی اندازه گراف خیلی بزرگ باشد ($n \rightarrow \infty$)، داریم $\mu_i/n \rightarrow 0$. تقریب درجه دو برای گراف‌های بدون جهت نیز این امکان را فراهم می‌کند تا شاخص QE برحسب ردّ لاپلاسین نرمال و ردّ مربع لاپلاسین نرمال‌شده (با استفاده از این حقیقت که $\text{Trace}(\tilde{L}(G)^n) = \sum_i \mu_i^n$) به‌صورت زیر بیان گردد.

بدین ترتیب به کمک آن‌ها می‌توان برای آن‌تروپی‌های تعمیم یافته نیز کران‌های بالا و پایین را به دست آورد.

برای نمونه، دهمر و همکارانش نشان داده‌اند که برای $I^1(G) \leq 1 - 1/n$ و همچنین $1/2 \leq I^1(G) \leq 1 - 1/2m$ در حالت حدی و برای شبکه‌های بسیار بزرگ، مقدار آن‌تروپی تعمیم یافته به ۱- مجانب خواهد شد و مجدداً با نگاه به معادله (۲۵) می‌بینیم که چنانچه انرژی گراف افزایش یابد با همین کران برای آن‌تروپی نیز رو به رو خواهیم بود. در ادامه بایسته است به دو نکته مهمی که همبستگی معنادار مثبتی با مفاهیم آن‌تروپی و انرژی گراف دارند اشاره‌ای داشته باشیم.

نخست این‌که آن‌تروپی یک شبکه در حقیقت یک معیار کمی برای توصیف استحکام^{۵۸} آن است و به‌عنوان یکی از معیارهای مشخصهٔ توپولوژی شناخته می‌شود. در واقع، این کمیت با ظرفیتی مرتبط است که شبکه قادر به تحمل تغییرات در پیکربندی خود تحت محدودیت‌های مختلف محیطی است. میزان استحکام یک شبکه تحت حملات تصادفی یا هدفمند را می‌توان با معیارهای مختلفی محک زد که یکی از مهم‌ترین این معیارها آن‌تروپی شبکه است که می‌توان آن را به‌عنوان درجه‌ای از بی‌نظمی در یک سیستم معین تعریف کرد.

طبق تعریف، گوییم یک سیستم در حالت تعادل^{۵۹} قرار دارد اگر برای تعداد مفروضی گره، ماکزیمم آن‌تروپی را داشته باشد. تعادل معرف حالتی است که هیچ نیروی پتانسیل رانشی^{۶۰} در شبکه برای تغییر در پیکربندی آن وجود نداشته باشد. بدین سیاق، هنگامی‌که تمرکز ما بر این جنبه از استحکام شبکه‌ها معطوف باشد، بایستی سعی کنیم تا شبکه را به کمک یک مکانیزم، برای مثال بازپیکربندی در توپولوژی، در حالت تعادل قرار دهیم که این امر با افزایش آن‌تروپی آن همراه خواهد بود. بدین ترتیب، معیار آن‌تروپی شبکه می‌تواند مشخصات شبکه‌های پیچیده را به گونه بهتری نمایش دهد و همچنین مفهوم شبکه‌های متعادل به کمک آن‌تروپی قابل معرفی خواهد بود. آن‌تروپی می‌تواند به‌عنوان یک معیار کمی برای توصیف میزان انحراف شبکه از وضعیت تعادل تفسیر گردد.

با توجه به مطالب ذکر شده و بر اساس تعریف آن‌تروپی‌های تعمیم یافته، برای ارزیابی استحکام شبکه، نیازمند تابع توزیعی هستیم که بتواند شبکه تحت بررسی را تبیین کند. می‌دانیم که آن‌تروپی شبکه با احتمال قرارگیری آن در یک حالت مفروض ارتباط دارد. اصطلاح "حالت" در هر سیستم را می‌توان به طرق مختلفی تعریف کرد و در مبحث شبکه نیز گزینه‌های متعددی برای تعریف "حالت" در شبکه وجود دارد که همان‌طور که اشاره شد یکی از پرکاربردترین آن‌ها تعداد لبه‌هایی است که با یک گره در ارتباط‌اند که به‌عنوان درجهٔ گره شناخته شده است.

از سویی می‌دانیم که برطبق تعریف، دومین کوچک‌ترین مقدار ویژه ماتریس لاپلاسیس گراف را اتصال‌پذیری جبری^{۶۱} می‌نامند [۱۴] و این معیار توسط چندین پژوهشگر مورد بررسی قرار گرفته و نشان داده شده است که در هنگام تحلیل آسیب‌پذیری شبکه می‌تواند اطلاعات سودمند و دقیقی را عرضه کند و بیانگر اتصال‌پذیری گراف است؛ یعنی مقادیر بزرگ‌تر آن معادل با استحکام بیشتر گراف خواهد بود. به بیان دیگر، پارگی و تکه‌تکه شدن گراف کمتر شده و با افزایش این معیار، تلاش در جهت ناهمبند ساختن آن (گسست و پارگی گراف به مؤلفه‌های همبند کوچک‌تر) دشوارتر خواهد شد.

برخی پژوهشگران نیز استدلال کرده‌اند که در هنگام استفاده از مقادیر ویژه گراف به‌منظور ارزیابی استحکام آن، بهتر است از تمامی آن‌ها و نه فقط از دومین کوچک‌ترین مقدار ویژه (اتصال‌پذیری جبری) استفاده کنیم. بر این اساس به همبستگی معنادار مثبتی بین استحکام و انرژی گراف خواهیم رسید. یعنی، هر دو معیار آن‌تروپی و انرژی گراف با میزان استحکام شبکه ارتباط تنگاتنگی دارند و الزامی است که با خود نیز همبستگی مثبتی داشته باشند. این امر آشکارا از معادلاتی که در بخش‌های پیشین نشان داده شد قابل استنتاج خواهد بود. لازم به

$$I_{QE} = \frac{\text{Trace}(\tilde{L}(G))}{n} - \frac{\text{Trace}(\tilde{L}(G)^2)}{n^2} \quad (۳۵)$$

از سویی، چون $\mu_i \geq 0$ است

$$\text{Trace}(\tilde{L}(G)) = n$$

و

$$\text{Trace}(\tilde{L}(G)^2) = n + 2 \sum_{(u_i, n_j) \in E} 1 / (d_i d_j) = n + R_{-1}$$

که R_{-1} شاخص رندبیج تعمیم یافته به‌ازای $\beta=1$ است. بنابراین، عبارت بالا به سادگی قابل تقریب به $I_{QE} = 1 - 1/n - 2R_{-1}/n^2$ خواهد بود که همان $I_Q^1(G) = I_Q^1(G)$ در معادله (۲۷) است.

به واژه دیگر، شاخص‌های آن‌تروپی-انرژی تعمیم یافته گراف که توسط دهمر و همکارانش ارائه شده‌اند می‌توانند شاخص آن‌تروپی کوانتومی را که پیش‌تر توسط تعدادی از پژوهشگران به شکلی جداگانه مورد توجه قرار گرفته بود، پوشش داده و نیز به شکل کارآمدی برای تبیین پیچیدگی ساختاری گراف‌ها و شبکه‌های پیچیده و مضافاً به‌عنوان رویکردی کارآمد جهت تبیین گره‌های تاثیرگذار در گراف‌ها مورد بهره‌برداری قرار گیرد.

همان‌طور که می‌بینیم معادلات (۲۷) و (۳۵) شامل دو شاخص از ساختار گراف هستند که شاخص اول بیانگر تعداد رؤس گراف است در حالیکه شاخص دوم به آماره‌های درجه برای زوج رؤسی اتکا دارد که توسط یک لبه به همدیگر اتصال یافته‌اند. افزون بر این، پیچیدگی محاسباتی این معادلات برحسب اندازهٔ گراف، از مرتبهٔ ۲ است که به‌مراتب از آن‌تروپی اصلی ساده‌تر خواهد بود. صحت معادلات فوق بستگی به‌دقت تقریب درجهٔ ۲ در آن‌تروپی شانون خواهد داشت.

بد نیست اشاره کنیم که می‌توان عبارت دقیق‌تری برای شاخص QE با استفاده از تقریب سری‌های تیلور^{۵۷} برای آن‌تروپی شانون با نقطه بسط x_0 در مقدار متوسط μ_i / n ، یعنی $x_0 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i}{n} = \text{Trace}(\tilde{L}(G)) / n^2 = 1/n$ به دست آورد. بدین ترتیب، عبارت تیلور مرتبه دو برای $x \ln x$ حول نقطه بسط x_0 به‌صورت $x \ln x \approx -x(-\ln x_0 - x / (2x_0)) - x_0 / 2$ قابل بیان است. از جایگذاری این تقریب در آن‌تروپی شانون می‌توان شاخص QE را با سریهای تیلور به‌صورت زیر تقریب زد.

$$I'_{QE} = \ln n - \frac{1}{2n} \sum_{(u_i, n_j) \in E} 1 / (d_i d_j) = \ln n - R_{-1} / (2n) \quad (۳۶)$$

چنانچه بخواهیم تقریب سری تیلور آن‌تروپی کوانتومی را با تقریب درجهٔ ۲ مقایسه کنیم، خواهیم داشت.

$$I'_{QE} = nI_{QE} / 2 + \ln n + (1 - n) / 2 \quad (۳۷)$$

در معادله فوق می‌بینیم که تقریب درجهٔ ۲ شاخص آن‌تروپی کوانتومی، یعنی I_{QE} ، از طریق مقیاس‌بندی و سپس یک آفست مرتبط با تعداد رؤس گراف قابل تبدیل به تقریب تیلور (I'_{QE}) است که البته این اختلاف در تحلیل پیچیدگی ساختاری گراف‌ها تاثیری برجای نمی‌گذارد.

در پایان این زیربخش و برای جمع‌بندی بایستی اشاره کنیم که معادلات (۲۵) تا (۳۷) آشکارا به ارتباط میان کمیت‌های آن‌تروپی‌های تعمیم یافته گراف و انرژی آن دلالت دارند. همچنین واضح است که می‌توان کران‌های بالا و پایینی را که برای انرژی گراف ارائه شده‌اند، به آن‌تروپی‌های تعمیم یافته نیز اعمال کرد.

یک گراف بینجامد، به معنای تمایل گراف به ناهمگنی بیشتر است و مجدداً اهمیت چنین گره‌ای می‌تواند در اولویت قرار بگیرد.

بدین سیاق، هر اندازه که حذف یک گره به تغییرات (واریانس) شدیدتری در شاخص آن‌تروپی-انرژی‌های تعمیم یافته در یک گراف منجر گردد، اهمیت آن گره در شبکه و تأثیر آن در کل ساختار اجزای آن بیشتر خواهد بود. از این رو، معیار شدت تغییرات آن‌تروپی-انرژی تعمیم یافته گراف می‌تواند به‌عنوان یک ابزار سودمند در شناسایی گره‌های اثرگذار در ساختار آن شبکه تلقی گردد و به همین دلیل است که در مطالعه حاضر، ما از آن به‌عنوان شاخصی جهت ارزیابی اهمیت و رتبه‌بندی گره‌های تأثیرگذار بهره‌جسته‌ایم.

بدین ترتیب، الگوریتم مورد استفاده در پژوهش حاضر فرآیندی دومرحله‌ای است. ابتدا، برای هر گره در شبکه مقدار تغییرات را بر اساس رابطه (۳۸) محاسبه می‌شود که حاصل آن یک دنباله عددی است که اهمیت گره‌ها در شبکه را بازگو می‌کند. سپس، دنباله مزبور را به ترتیب نزولی مرتب می‌سازیم. لازم به ذکر است که چنانچه تعداد گره‌های شبکه زیاد باشد می‌توان k گره مرتبه بالا از گره‌های شبکه را در نظر گرفت و تأثیر و اهمیت آن‌ها را تحت حملات هدفمند مورد ارزیابی قرار داد.

۴-۱- ارزیابی کارایی الگوریتم پیشنهادی

برای ارزیابی صحت فرآیند رتبه‌بندی پیشنهادی می‌توان از روش‌های گوناگونی بهره جست. برای نمونه می‌توان به روش مبتنی بر دینامیزم انتقال اشاره داشت. با این حال، شاید یکی از سراسرترین این روش‌ها و درعین حال کارآمدترین آن‌ها، روشی است که میزان آسیب شبکه را که در اثر حذف گره پدید آمده، معادل با اهمیت آن گره در نظر می‌گیرد. این روشی است که ما در این مقاله جهت ارزیابی رویکرد رتبه‌بندی پیشنهادی مورد استفاده قرار داده‌ایم.

معیار راندمان محلی شبکه E_{loc}^{62} ، که توسط لاتورا و مارچیئوری [۳۶] پیشنهاد گردیده، می‌تواند بازتاب مناسبی از میزان همبندی و در نتیجه استحکام شبکه باشد. این معیار در حقیقت متوسط راندمان را بر روی تمامی زیرگراف‌های یک شبکه تعریف می‌کند و عبارتست از [۳۶]

$$E_{loc}(G) = \frac{1}{n} \sum_{v_i \in V} E(G_i) \quad (39)$$

که در آن

$$E(G_i) = \frac{1}{d_i(d_i - 1)} \sum_{l \neq m \in V} l'_{lm} \quad (40)$$

و d_i بر درجه گره v_i در زیرگراف G_i دلالت دارد و l'_{lm} بیانگر مسیر کوتاه بین گره‌های v_l و v_m در G_i است. به بیان دیگر، راندمان محلی متوسط کوتاه‌ترین مسیرها بین همسایگان گره i را پس از حذف یا خرابی این گره محاسبه می‌کند.

نسخه E_{glob} در واقع نتایج محلی را بر روی تمامی گره‌های گراف متوسط-گیری می‌کند. $E_{loc} \approx 0$ بیانگر یک ساختار شبه درخت و $E_{loc} \approx 1$ بیانگر شبکه‌ای با همبندی کامل است. این معیار، یک معیار محلی و ایستا بوده و در بازه $[0,1]$ نرمال شده و محاسبه‌پذیر است.

بد نیست اشاره کنیم که هر افزایشی در معیار راندمان با یک کاهش در متوسط فاصله ژئودزی متناظر است و به‌علاوه، برای افزایش E_{loc} لازم است تا درجه خوشه‌بندی E^3 شبکه نیز افزایش یابد. خوشه‌بندی بالا در شبکه‌های پیچیده بیانگر آن است که آن‌ها از نظر محلی بسیار کارآمدند. برطبق بررسی‌هایی که توسط لاتورا و مارچیئوری انجام پذیرفته [۳۶]، گزارش شده است که راندمان محلی برای شبکه‌های ارتباطی و ساخته دست آدمی همچون WWW و اینترنت علیرغم داشتن تعداد گره و لبه زیاد چیزی در حدود 0.3 و برای سیستم‌های باز^{۶۴}

ذکر است که ارتباط بین دو معیار آن‌تروپی و انرژی جهت تبیین شبکه‌ها خود موضوعی است که تاکنون در پژوهشی شاهد بررسی و مطالعه آن نبوده‌ایم.

اما مورد دیگر که هدف اصلی ما در این مقاله نیز هست، این است که چگونه به کمک معیار آن‌تروپی-انرژی می‌توان تأثیر گره را در ساختار شبکه تبیین کرد. همان‌طور که گفته شد، آن‌تروپی شبکه که همبسته با انرژی آن است می‌تواند به شکل کارآمدی میزان اطلاعات رمز شده در ساختار شبکه را تبیین کند. بدین ترتیب، منطقی است تا میزان اهمیت گره‌ها در گراف‌ها و شبکه‌های پیچیده را با رویکردی مبتنی بر تغییرات آن‌تروپی-انرژی تعریف کنیم. این موضوعی است که آن را با جزئیات بیشتر در بخش بعدی ارائه خواهیم داد.

۴- الگوریتم پیشنهادی برای رتبه‌بندی گره‌های

تأثیرگذار در شبکه بر اساس انرژی-آن‌تروپی‌های

تعمیم یافته گراف

در بخش پیش دیدیم که آن‌تروپی یک گراف کمیته مبتنی بر نظریه اطلاعات است که می‌تواند برای سنجش پیچیدگی ساختاری آن مورد استفاده قرار بگیرد. تعمیم‌های متعددی از معیار آن‌تروپی گراف در بخش پیشین ارائه شد و ارتباط دقیق میان آن‌تروپی‌های تعمیم یافته گراف، انرژی‌های آن و نیز شاخص‌های توپولوژیکی گراف ارائه گردید. در این بخش بنا داریم تا بر اساس شاخص‌های آن‌تروپی-انرژی تعمیم یافته گراف، الگوریتمی را برای رتبه‌بندی مهم‌ترین گره‌های شبکه پیشنهاد کنیم. اما پیش از آن لازم است تا از اهمیت و تأثیر گره در شبکه تعریف مشخصی ارائه دهیم.

تعریف ۲۷: فرض کنید f تابع اطلاعاتی گراف G و $Im(v_i)$ بیانگر اهمیت گره v_i در G باشد، اهمیت گره v_i با مفهوم واریانس آن‌تروپی تعریف می‌کنیم و عبارتست از:

$$Im(v_i) = |I(G) - I(G \setminus v_i)| \quad (38)$$

که در اینجا $G \setminus v_i$ گراف تغییر یافته به دلیل حذف گره v_i و لبه‌های متعلق به آن از گراف و $I(G \setminus v_i)$ به ترتیب بیانگر مقادیر آن‌تروپی-انرژی تعمیم یافته قبل و پس از حذف گره v_i از شبکه هستند.

بدین ترتیب، اهمیت گره v_i در گراف G می‌تواند برحسب شدت تغییرات (واریانس) در آن‌تروپی-انرژی تعمیم یافته مرتبط با آن تعریف گردد. تعبیر فیزیکی شدت تغییرات این است که تغییرات در شاخص آن‌تروپی-انرژی تعمیم یافته کل سیستم تا چه میزان از فرآیند حذف گره یا گره‌های مهم شبکه تأثیر می‌پذیرد. حذف هر گره باعث ایجاد تغییرات ساختاری در ساختار شبکه و متعاقب آن تغییر در درایه‌های ماتریس‌های متناظر مستخرج از گراف خواهد شد که در نتیجه موجب تغییرات در مقادیر آن‌تروپی و انرژی در قبل و بعد از حذف گره از شبکه می‌گردد. شدت تغییرات ناشی از حذف یک گره از شبکه در مقایسه با حذف گره-ای دیگر به‌گونه‌ای است که می‌تواند بازگوکننده اهمیت آن گره در شبکه مزبور باشد.

مقادیر آن‌تروپی-انرژی‌های تعمیم یافته یک گراف، شاخص‌هایی برای تبیین ناهمگنی آن هستند. پس چنانچه حذف یک گره منجر به افزایش این شاخص گردد به معنای آن خواهد بود که شبکه تمایل به همگن شدن بیشتر دارد و در نتیجه وجود چنین گره‌ای در شبکه از اهمیت بیشتری برخوردار خواهد بود. در دیگر سو، اگر حذف یک گره به کاهش شدید آن‌تروپی-انرژی‌های تعمیم یافته در

$$\text{Sim}_l(C_1, C_2) = \frac{1}{l} S(|V|, l, C_1, C_2) \quad (42)$$

بدین ترتیب، مشابهت بین دو معیار $C1$ و $C2$ به آسانی قابل تعریف است.

$$\text{Sim}(C_1, C_2) = w_l \sum_{l=1}^{|V|} \text{Sim}_l(C_1, C_2) \frac{1}{l} \quad (43)$$

که در آن پارامتر وزنی w_l عبارتست از $\sum_{l=1}^{|V|} \frac{1}{l}$

آشکارا دیده می‌شود که اگر دو معیار $C1$ و $C2$ کاملاً مشابهت داشته باشند، معادله (۴۳) مقدار ۱ را باز می‌گرداند. بدین ترتیب می‌توان به آسانی معیارهای مختلف را با یکدیگر مورد سنجش و بررسی قرار داد.

برای مقایسه معیارهای مختلف مبتنی بر آنترپی-انرژی در سه شبکه کاراته، آنزیم و مغز، ما نتایج مشابهت را در یک ماتریس دو بعدی با ۲۸ سطر و ستون برحسب یک نقشه حرارتی^{۶۶} نمایش داده‌ایم. شکل ۴ این نقشه حرارتی را برای سه شبکه مزبور به تصویر کشیده است. رنگ‌های سرد نزدیک به آبی بیانگر افزایش شباهت بین دو معیار (عدد نزدیک به ۱) و رنگ‌های گرم متمایل به قرمز دلالت بر کاهش مشابهت (عدد نزدیک به ۰) دارند. برای مثال آنترپی‌های شانون مبتنی بر ماتریس‌های فاصله و وقوع بسیار مشابه با آنترپی‌های رینی از همین نوع هستند و بدین ترتیب می‌توان اندازه داده‌های مورد مقایسه را تا حد زیادی کاهش داد و تا حد زیادی از سردرگمی مقایسه میان معیارهای متعدد کاست.

۶- نتیجه‌گیری و کارهای آتی

در این مقاله ما از شاخص‌های آنترپی-انرژی تعمیم‌یافته گراف جهت رتبه‌بندی کارآمد گره‌های تاثیرگذار در شبکه‌های پیچیده و اجتماعی استفاده کردیم. معیارهای محلی آنترپی مانند آنترپی شانون، ون نویمن و نیز آنترپی‌های تعمیم یافته گراف همگی با ماتریس‌های مستخرج از گراف در ارتباطند و به نحو کارآمدی می‌توانند جهت ارزیابی اهمیت گره‌ها در شبکه‌ها مورد استفاده قرار بگیرند. حذف گره‌های مهم و تاثیرگذار در شبکه سبب تغییرات ساختاری در ماتریس‌های مستخرج از گراف شده و در نتیجه انرژی و آنترپی آن را تغییر می‌دهد. در این مقاله از معیار شدت تغییرات در آنترپی که ناشی از حذف گره‌های مؤثر در شبکه است برای نمایش اهمیت گره‌ها و رتبه‌بندی آن‌ها در گراف استفاده کردیم. با به‌کارستن این معیارها بر روی شبکه‌ها واقعی نشان داده شده که از میان شاخص‌های مبتنی بر آنترپی-انرژی تعمیم‌یافته گراف، آنترپی ون نویمن (کوانتومی) می‌تواند از منظر تبیین اهمیت گره‌های اثرگذار در شبکه، کارآمدتر از مابقی آنترپی‌ها عمل کند و در برابر تغییرات ناگهانی حذف گره‌ها پایداری بیشتری داشته باشد. کار گزارش شده در این مقاله قابل به‌چندین روش توسعه است. ما تعداد نسبتاً محدودی از مدل‌ها و داده‌های تجربی را بررسی کردیم. لیکن، با مطالعه طیف گسترده‌ای از گراف‌ها و مجموعه داده‌های دنیای واقعی می‌توان این نکته را به‌دقت بررسی کرد که آیا روش پیشنهادی قادر به رتبه‌بندی گره‌ها و یال‌ها و مهم‌تر از همه کشف و شناسایی آنومالی در شبکه‌ها هست یا خیر. به‌عنوان یک کار پژوهشی آتی در راستای کار فعلی می‌توان به تبیین پیچیدگی ساختاری شبکه‌های پیچیده و اجتماعی به کمک معیارهای آنترپی-انرژی و شناسایی میزان ناهمگنی و نیز تحلیل تغییرات ساختاری در شبکه‌های تغییرپذیر و تکامل‌یافته با زمان اشاره داشت. همچنین می‌توان معیارهای مورد بحث را به گراف‌ها و شبکه‌های جهت‌دار، گراف‌های وزن‌دار، برچسب‌دار و همچنین ابرگراف‌ها توسعه داد که تاکنون در ادبیات تحقیق، پژوهش درخوری درباره آن‌ها انجام نشده است.

مانند مترو بسیار ناچیز است. در مقابل، در شبکه‌های زیستی مانند مغز گره به این مقدار ۶۹٪ و برای آمیب *C.elegans* در حدود ۴۶٪ گزارش شده است. این امر نشان‌دهنده استحکام زیاد شبکه‌های زیستی و بسته ماندن مغز در برابر شبکه‌های باز و ساختگی است.

به طور خلاصه، هراندازه که میزان راندمان یک شبکه بیشتر باشد، همبندی و در نتیجه استحکام آن شبکه نیز بالاتر خواهد بود. در این مقاله ما از نرخ آفت^{۶۵} راندمان محلی شبکه که به‌صورت زیر تعریف می‌شود، بهره برده‌ایم.

که در آن $E_{loc}(G_0)$ راندمان محلی اولیه شبکه (قبل از حمله) و $E_{loc}(G_k)$ راندمان محلی شبکه پس از انجام حمله هدفمند و حذف k گره سرلیست است. هراندازه کمیت ρ_k بیشتر باشد، آسیب‌پذیری شبکه در برابر حملات هدفمند ناشی از حذف گره‌ها بیشتر بوده و در نتیجه آن گره‌ها از اهمیت و تأثیر بیشتری برخوردارند.

۵- نتایج تجربی

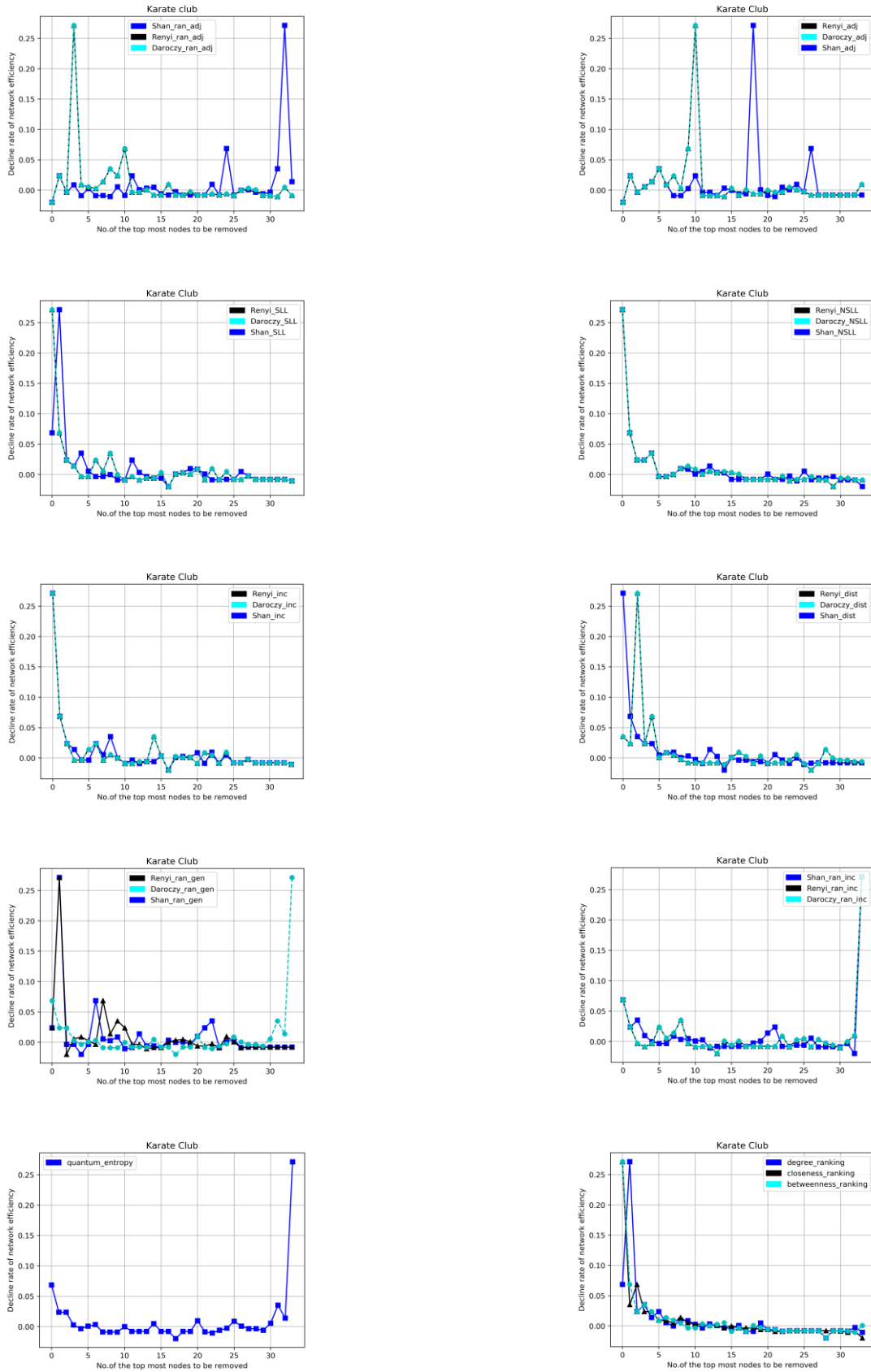
به‌منظور اعتبارسنجی رویکرد پیشنهادی، سه شبکه دنیای واقعی یعنی باشگاه کاراته زاخاری، شبکه مغز و شبکه آنزیم [۳۷-۳۹] مورد بررسی و تحلیل قرار گرفته‌اند. روشن است که روش پیشنهادی به شبکه وابسته نبوده و می‌تواند برای هر دو شبکه ساختگی و واقعی مورد استفاده قرار بگیرد. نتایج حاصل از آزمون‌های شبیه‌سازی در شکل‌های ۱ تا ۳ به تصویر کشیده شده‌اند. برای هر ماتریس مستخرج از گراف سه آنترپی شانون، رینی و داروچی استخراج شده‌اند. پارامتر $\alpha = 1/2$ در معادله (۲۲) برای آنترپی‌های رینی و داروچی منظور شده است. برای هر نمودار، سه آنترپی حاصل از ماتریس‌های مستخرج از گراف محاسبه شده است. هر نمودار با نماد X_Y نشان داده شده است که X بیانگر یکی از سه آنترپی شانون (*Shan*)، رینی (*Renyi*) و داروچی (*Daroczy*) است. Y هم نشان‌دهنده ماتریس مستخرج از گراف است که آنترپی X برای آن محاسبه شده است. ماتریس X می‌تواند مجاورت (*adj*)، لاپلاسین بدون علامت (*SLL*)، لاپلاسین بدون علامت نرمال شده (*NSLL*)، وقوع (*inc*)، فاصله (*dist*)، رندنج مجاورت (*ran_adj*)، رندنج وقوع (*ran_inc*) و رندنج عمومی (*ran_gen*) باشد. آنترپی ون نویمن (کوانتومی) نیز بطور جداگانه محاسبه شده است.

به طور کلی آنچه که از نتایج به دست آمده از نمودارهای شکل‌های ۱ تا ۳ مشخص می‌شود این است که آن آنترپی و ماتریس مستخرج از گراف می‌تواند برای رتبه‌بندی گره‌های مؤثر در گراف سودمند و کارآمد باشد که تغییرات و واریانس بیشتری را در قبال حذف گره‌ها از لیست گره‌های گراف از خود نشان دهد. از آنجا که ممکن است با افزایش تعداد ماتریس‌ها و نیز آنترپی‌های متناظر با آن‌ها با گزینه‌های مختلفی روبرو شویم و هم اینکه برخی از ماتریس‌ها و آنترپی‌ها نتایج یکسانی را به نمایش بگذارند، در این مقاله ما از یک روش ساده ولی کارآمد موسوم به مشابهت در دو معیار استفاده کرده‌ایم تا بدین ترتیب بتوانیم به یک مقایسه ساده و به دور از سردرگمی بین ۲۸ معیار ارائه شده در این مقاله دست یابیم.

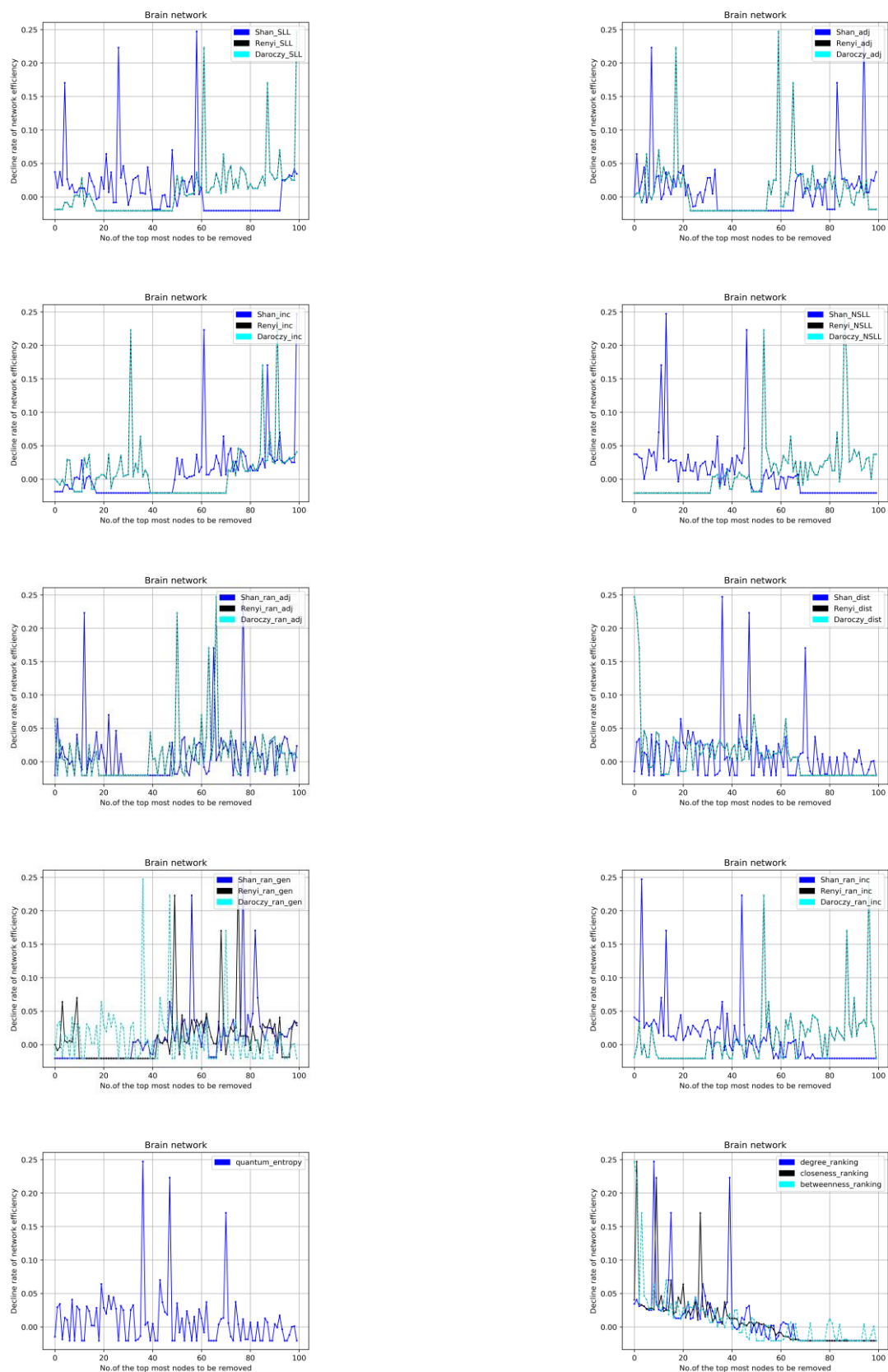
برای تعریف مشابهت و مقایسه فرض می‌کنیم که $S(l, C1, C2)$ بیانگر مجموعه اشتراک بین ۱ گره اول در سرلیست گره‌های گراف باشد که توسط دو معیار $C1$ و $C2$ مرتب شده‌اند. اگر تعداد کل گره‌های گراف را با $|V|$ نشان دهیم، می‌توانیم S را تعریف کنیم.

$$S(|V|, l, C_1, C_2) = \{v_i : 1 \leq i \leq |V|, v_i \in S(l, C_1) \cap S(l, C_2)\} \quad (41)$$

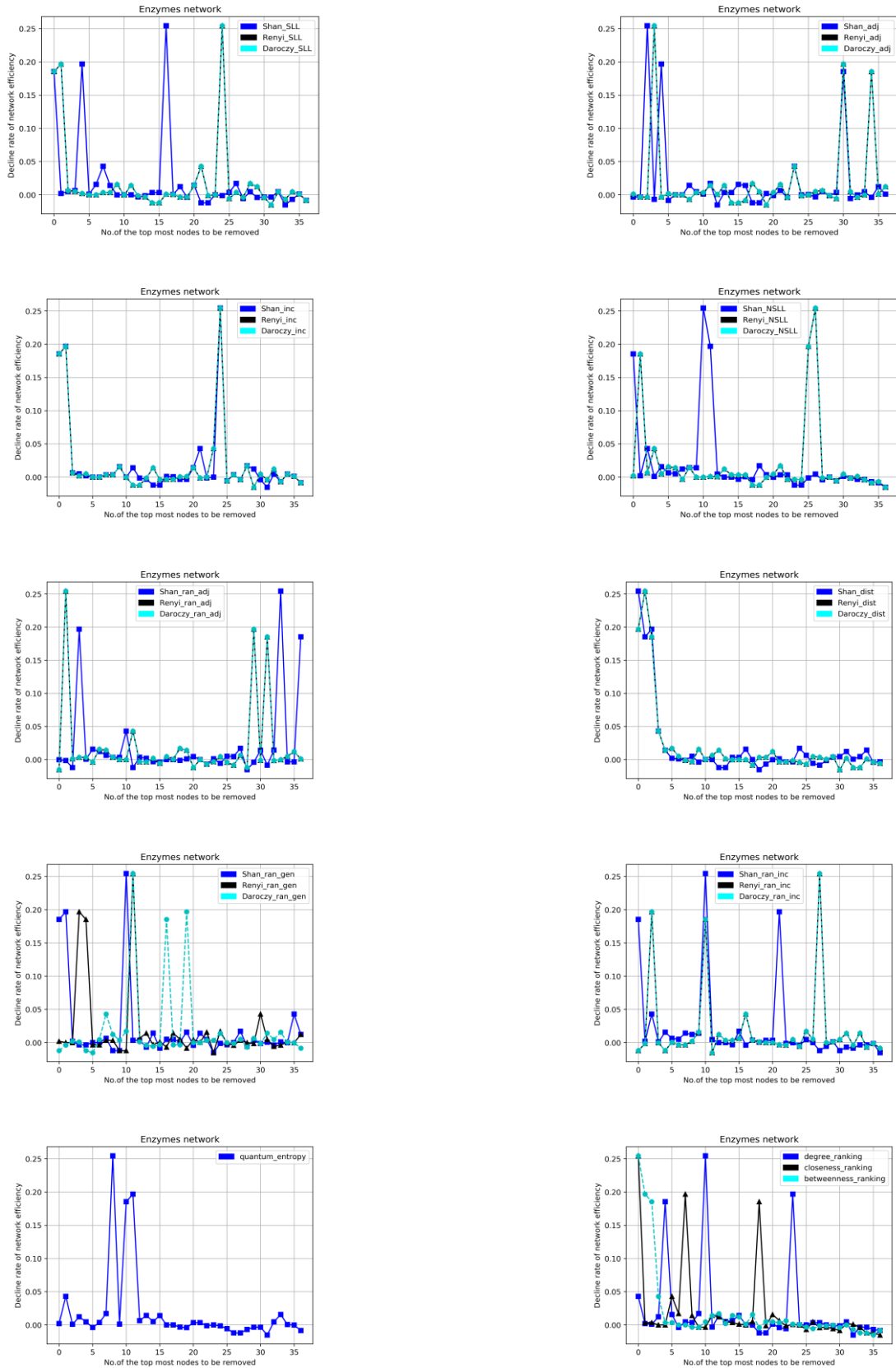
همچنین می‌توان مشابهت بین دو معیار $C1$ و $C2$ را برای مرتبه ۱ تعریف کرد.



شکل ۱: مقایسه نمودارهای نرخ افت برحسب تعداد گره‌های حذف شده مهم از شبکه باشگاه زاکاری برای انواع رویکردهای مختلف آنتروپی-انرژی، روش رتبه‌بندی مبتنی بر درجه، نزدیکی و بینیت و همچنین آنتروپی کوانتومی (ون نویمان).



شکل ۲: مقایسه نمودارهای نرخ افت برحسب تعداد گره‌های حذف شده مهم از شبکه مغز برای انواع رویکردهای مختلف انتروپی-انرژی، روش رتبه‌بندی مبتنی بر درجه، نزدیکی و بینیت و همچنین انتروپی کوانتومی (ون نویمن).



شکل ۳: مقایسه نمودارهای نرخ افت برحسب تعداد گره‌های حذف شده مهم از شبکه آیزیم برای انواع رویکردهای مختلف آنتروپی-انرژی، روش رتبه‌بندی مبتنی بر درجه، نزدیکی و بینیت و همچنین آنتروپی کوانتومی (ون نویمن).

۷- مراجع

[1] A-L. Barabási, Network science book, Boston, MA: Center for Complex Network, Northeastern University. Available online at: <http://barabasi.com/networksciencebook>, 2017.

[2] X. Li, Z.H. Liu, B.H. Wang, "On spreading dynamics on networks," *Complex Syst. Complexity Sci*, vol. 07, no. 2, pp. 33-37, 2010.

[3] Z.H. Rong, M. Tang, X.F. Wang, "Annual inventory of complex networks," *J. Univ. Electron. Sci. Technol. China*, vol. 6, 2012. pp. 801-806.

[4] R. Albert, H. Jeong, A.L. Barabási, "Error and attack tolerance of complex networks," *Nature*, vol. 406, no. 6794, pp. 378-382, 2000.

[5] S.H. Strogatz, "Exploring complex networks," *Nature*, vol. 410, No. 6825, pp. 268-276, 2001.

[6] M. Kurant, P. Thiran, P. Hagmann, "Error and attack tolerance of layered complex networks," *Phys. Rev. E*, vol. 76, no. 2, pp. 026103, 2007.

[7] A.E. Motter, Y.C. Lai, "Cascade-based attacks on complex networks," *Phys. Rev. E*, vol. 66, no. 6, pp. 065102, 2002.

[8] Estrada, E.; Hatano, N. "A vibrational approach to node centrality and vulnerability in complex networks," *Phys. A Stat. Mech. Appl, Issue 17*, pp 3648-3660, 2009.

[9] E. Estrada, "Quantifying network heterogeneity," *Physical Review E*, vol. 82, no. 6, p.066102, 2010.

[10] Ai, Xinbo, "Node importance ranking of complex networks with entropy variation," *Entropy*, vol.19, no. 7, pp. 303, 2017.

[11] Anand, K.; Krioukov, D.; Bianconi, G. "Entropy distribution and condensation in random networks with a given degree distribution," *Phys. Rev. E Stat. Nonlinear Soft Matter Phys*, vol. 6, pp. 062807, 2014.

[12] Li, Xueliang, Z. Qin, M. Wei, I. Gutman, M. Dehmer. "Novel inequalities for generalized graph entropies-Graph energies and topological indices," *Applied Mathematics and Computation*, vol. 259, pp. 470-479, 2015.

[13] A. Mowshowitz, and M. Dehmer, "Entropy and the complexity of graphs revisited," *Entropy*, vol. 14, no. 3, p.559-570, 2012.

[14] I. Gutman, "The energy of a graph," *Ber Math-Statist Sekt Forschungsz Graz, Issue 103*, pp. 1-22, 1978.

[15] M. Dehmer, X. Li, Y. Shi, "Connections between Generalized Graph Entropies and Graph Energy," *Complexity*, vol. 21, Issue 1, Sept./Oct. 2015, pp. 35-41.

[16] B.J. McClelland, "Properties of the latent roots of a matrix: The estimation of π -electron energies," *J Chem Phys, Issue 54*, pp. 640-643, 1971.

[17] J. H. Koolen, V. Moulton, and I. Gutman, "Improving the McClelland inequality for total π -electron energy," *Chemical Physics Letters*, vol. 320, no. 3, pp. 213-216, 2000.

[18] B. Huo, Y Shi, X. Li, "Complete solution to a conjecture on the maximal energy of unicyclic graphs," *European journal of combinatorics*, vol. 32, no. 5, pp. 662-673, 2011.

[19] E.O.D. Andriantiana and S. Wagner, "Unicyclic graphs with large energy," *Linear Algebra and its Applications*, vol. 435, no. 6, pp.1399-1414, 2011.

[20] E. Estrada and M. Benzi, "What is the meaning of the graph energy after all?," *Discrete Applied Mathematics, Issue 230*, pp. 71-77, 2017.

[21] F. Safaei, F. Kashkoei Jahromi, S. Fathi, "A method for computing local contributions to graph energy based on Estrada-Benzi approach," *Discrete Applied Mathematics*, vol. 260, pp. 214-226, 2019.

[22] F. Safaei, F. Kashkoei Jahromi, S. Fathi, "Graphlets Importance Ranking in Complex Networks based on the Spectral Energy Contribution," *International Journal of Computer Mathematics: Computer Systems Theory*, pp. 1-14, 2020.

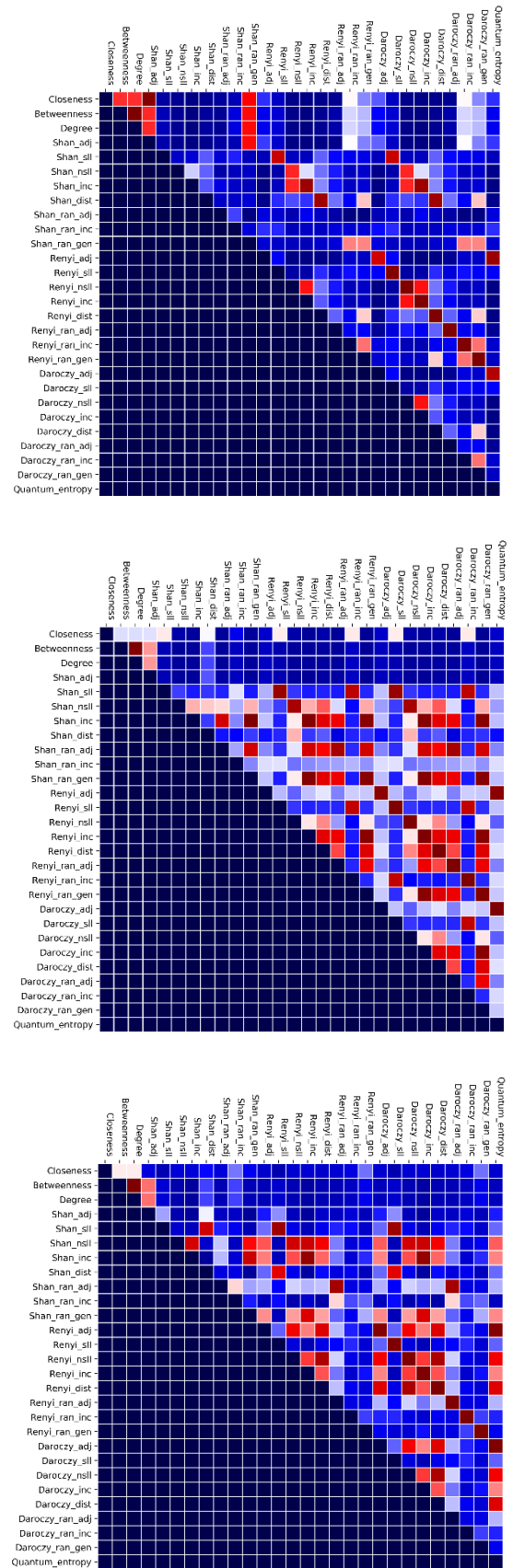
[23] I. Gutman and B. Zhou, "Laplacian energy of a graph," *Linear Algebra and its applications*, vol. 414, no. 1, pp. 29-37, 2006.

[24] C. E. Shannon, "A Mathematical Theory of Communication," *Bell System Technical Journal*, vol. 27, no. 3, p.379-423, 1948.

[25] M. Faloutsos, P. Faloutsos, C. Faloutsos, "On power-law relationships of the internet topology," *Comp. Comm. Rev. vol. 29*, pp. 251-262, 1999.

[26] S.N. Dorogovtsev, J.F.F. Mendes, A.N. Samukhin, "Metric structure of random networks," *Nucl. Phys. B 653*, pp. 307-338, 2003.

[27] K. Malarz, J. Karpinska, A. Kardas, K. Kulalowski, "Node-node distance distribution for growing networks," arXiv:cond-mat/0309255v2.



شکل ۴: مقایسه میزان مشابهت انواع رویکردهای مختلف رتبه‌بندی مبتنی بر آنتروپی-انرژی، روش رتبه‌بندی مبتنی بر درجه، نزدیکی و بینیت و نیز رویکرد آنتروپی کوانتومی (ون نویمان).

گردید و در سال ۱۳۹۸ دانش‌آموخته شد. زمینه‌های پژوهشی موردعلاقه او عبارت‌اند از شبکه‌های پیچیده، یادگیری و بینایی ماشین. آدرس پست الکترونیکی ایشان عبارت است:

m.amin.ce.sbu@gmail.com

- 1 Spreading Dynamics
- 2 Cascading Reactions
- 3 Redundant Design
- 4 Closeness
- 5 Eccentricity
- 6 Eigen Vector
- 7 Page Rank
- 8 Information Centrality
- 9 Betweenness
- 10 Semi-Local
- 11 Generalized Graph Entropies
- 12 Laplacian Matrix
- 13 Combinatorial
- 14 Positive Semi-Definite
- 15 Bipartite
- 16 Signless
- 17 Incidence
- 18 General
- 19 K-Th Spectral Moment
- 20 Moment-Like
- 21 Seminal
- 22 Conjugated Hydrocarbons
- 23 Hückel Molecular Orbital
- 24 Koolen And Moulton
- 25 Huo
- 26 Bipartite Bicyclic Graphs
- 27 Andriantiana And Wagner
- 28 Cyclomatic
- 29 Trace
- 30 Pendant
- 31 Auxiliary Eigenvalue
- 32 Gibbs Entropy
- 33 Microstates
- 34 Von Newman
- 35 Underlying Graph
- 36 Rényi
- 37 Daróczy
- 38 Signless Laplacian
- 39 Incidence
- 40 Singular Values
- 41 Distance Matrix
- 42 Wiener Index
- 43 Hyper-Wiener Index
- 44 Good Fit
- 45 Balaban
- 46 Closeness Centrality
- 47 Dangalchev
- 48 Hosoya-Weiner Polynomial
- 49 Characteristic Polynomial
- 50 Friendship
- 51 General
- 52 Commute Time
- 53 Passerini And Severini
- 54 Eigenspectrum
- 55 Han
- 56 Reiman Zeta Function
- 57 Taylor Series Approximation
- 58 Robustness
- 59 Equilibrium
- 60 Driving Potential Force
- 61 Algebraic Connectivity
- 62 Local Network Efficiency
- 63 Clustering Coefficient
- 64 Open System
- 65 Decline Rate
- 66 Heap Map

- [28] V.D. Blondell, J.-L. Guillaume, J.M. Hendrickx, R.M. Jungers, "Distance distribution in random graphs and application to network exploration," *Phys. Rev. E*, vol. 76, pp. 066101, 2007.
- [29] H. Wiener, "Structural determination of paraffin boiling points," *J. Amer. Chem. Soc.*, vol. 69, pp. 17-20, 1947.
- [30] E. Estrada and E. Vargas-Estrada, "Distance-sum heterogeneity in graphs and complex networks," *Applied Mathematics and Computation*, vol. 218, Issue 21, pp. 10393-10405, 2012.
- [31] A.T. Balaban, "Highly discriminating distance-based topological index," *Chem. Phys. Lett.*, vol. 89, pp. 399-404, 1982.
- [32] L.C. Freeman, "Centrality in networks: I. Conceptual clarification," *Social Networks*, Issue 1, pp. 215-239, 1979.
- [33] C. DANGALCHEV, "Residual closeness in networks," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Issue 365, pp. 556-564, 2006.
- [34] L. Han, F. Escolano, E.R. Hancock, R.C. Wilson, "Graph characterizations from von Neumann entropy," *Pattern Recognition Letters*, vol. 33, no. 15, pp.1958-1967, 2012.
- [35] F. Passerini and S. Severini, "Quantifying complexity in networks: the von Neumann entropy," *International Journal of Agent Technologies and Systems (IJATS)*, Vol. 1, no. 4, pp. 58-67, 2009.
- [36] V. Latora and M. Marchiori, "Efficient behavior of small-world networks," *Phys Rev Lett.*, vol. 87, no. 19, pp. 198701, 2001.
- [37] <http://www-personal.umich.edu/~mejn/netdata/>
- [38] M. Zare, Z. Rezvani, A. A. Benasich, "Automatic classification of 6-month-old infants at familial risk for language-based learning disorder using a support vector machine," *Clinical Neurophysiology*, Issue 127, pp. 2695-2703, 2016.
- [39] J. Kunegis, "KONECT: The Koblenz Network Collection," In Proc. Int. Web Observatory Workshop, 2013, pp. 1343-1350. Original website online: <http://konect.uni-koblenz.de/networks/>

فرشاد صفایی کارشناسی، کارشناسی ارشد و دکتری

خوبش را در مهندسی کامپیوتر، معماری سیستم‌های کامپیوتری از دانشگاه علم و صنعت ایران، به ترتیب، در سال‌های ۱۳۷۳، ۱۳۷۶ و ۱۳۸۶ دریافت کرد. او اکنون با درجه دانشجویی در دانشکده مهندسی و علوم کامپیوتر دانشگاه شهید بهشتی به تدریس و پژوهش اشتغال دارد.



زمینه‌های پژوهشی موردعلاقه او عبارت‌اند از مدل‌سازی و ارزیابی کارایی سیستم‌های کامپیوتری، شبکه‌های پیچیده و اجتماعی، شبکه‌های میان‌ارتباطی و سامانه‌های ذخیره‌سازی پیشرفته. آدرس پست الکترونیکی ایشان عبارت است:

f_saffaei@sbu.ac.ir

محمدعمادی کوچک کارشناسی خوبش را از

دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران جنوب در رشته مهندسی کامپیوتر، سخت‌افزار در سال ۱۳۹۴ و مدرک کارشناسی ارشد خود را از دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران جنوب در سال ۱۳۹۷ در رشته معماری سیستم‌های کامپیوتری دریافت کرد. او هم‌اکنون دانشجوی دکتری معماری سیستم‌های کامپیوتری در دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم تحقیقات است. زمینه‌های پژوهشی موردعلاقه او عبارت‌اند از شبکه‌های پیچیده و اجتماعی، طراحی شتاب‌دهنده‌های یادگیری عمیق و محاسبات کوانتومی. آدرس پست الکترونیکی ایشان عبارت است:

m.m.emadi@srbiau.ac.ir



محمد امین کارشناسی خود را از دانشگاه شهید بهشتی

تهران، در رشته مهندسی کامپیوتر، گرایش سخت‌افزار در سال ۱۳۹۶ دریافت کرد و با استفاده از جایزه استعداد درخشان تحصیلات تکمیلی وارد دوره کارشناسی ارشد همان دانشگاه در گرایش معماری سامانه‌های کامپیوتری



Graph Entropies-Graph Energies Indices for Identifying Influential Nodes in Complex Networks

Farshad Safaei ¹, Mehdi Emadi ², Mohammad Amin ³

^{1,3} Faculty of Computer Science and Engineering, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran

² Islamic Azad University, Science and Research Branch, Tehran, Iran

Abstract

The ranking of influential nodes using quantitative analysis methods is of a great importance in complex and social networks. Most of the mechanisms in complex networks such as spreading dynamics, cascading reactions, and network synchronization are significantly affected by a small part of the influential nodes. In this paper, to employ novel and efficient methods, we use semi-local indicators based on the graph generalized entropy-energy for efficient ranking of influential nodes. In particular, we reveal how the local entropy measures such as Shannon, Von-Neumann, and the generalized graph entropies, together with the global energy measures associated with the graph-derived matrices, can be used to evaluate the importance of nodes in complex and social networks. By applying these measures on networks, it can be deduced that among the generalized entropy-energy-based indicators, which one is more efficient in terms of quantifying the importance of nodes and more resistant against the sudden changes of the nodes removal.

Keywords: Graph Energies; Generalized Graph Entropies; Node Importance; Graph Indices; Complex Networks