第 44卷 第 3期
2005年 5月
厦门大学学报 (自然科学版)
Journal of Xiamen University (Natural Science)
Vol. 44 No. 3
May 2005

·快 讯·

树按 Wiener指标的排序

郭晓峰 ,董哈微
(厦门大学数学科学学院 ,福建 厦门 361005)

摘要: n个顶点的树的集合记为 T_n. 连通图 G的 Wiener指标等于图 G中任意两点的距离和. 本文考虑 T_n 中树的按 Wiener指标排序的问题. 先对 T_n 中树按非悬挂边的数目分类 ,确定出具有 1条非悬挂边 , 2条非悬挂边 ,和 3条非悬挂边的树包括的图类. 根据 Wiener指标的计算公式及文中提到的变换方式 ,得到这些图类的序关系. 基于这些序关系 ,确定了 T_n 中具有最小 Wiener指标的前 15个树.

关键词: 序;树;Wiener指标

中图分类号: O 157. 6　　**文献标识码**: A　　**文章编号**: 0438-0479(2005)03-0297-02

1 背景介绍

Wiener指标是最古老的分子结构的拓朴指标之一. 它是由物理化学家 Harold Wiener[1]在 1947年提出的. 连通图 G的 Wiener指标是指图 G中任意两点的距离和 ,即

$$W = W(G) = \sum_{\{u,v\}\subseteq V(G)} d_G(u,v) \qquad (1)$$

其中 $V(G)$是 G的顶点集 , $d_G(u,v)$是 G中顶点 u和 v的距离.

正如 Dobrynin和 Gutman等人在文献 [2]中总结的那样 ,Wiener指标在理论化学中被广泛应用于描述分子结构. 同时 Wiener指标也被应用于通讯网络的研究 ,详见专辑 [3,4]. 而在树和六角系统的 Wiener指标方面的研究已经有了相当大的进展 [2,5] ,其中确定具有最大和最小 Wiener指标的树和六角系统的研究尤其受到关注. 自然地 ,关于 Wiener指标的序关系的研究也是有意义的. 本文研究树按其 Wiener指标的排序 ,基于树的变换和 Wiener指标的计算公式得到一些序关系. 根据这些序关系 ,我们确定了在 T_n 中具有最小 Wiener指标的前 15个树.

2 预备知识

将 T_n 按非悬挂边的数目分类 ,设 $T_n^i = \{T \mid T \in \mathrm{T}_n$,且恰有 i个非悬挂边 $\}$. 那么 $\mathrm{T}_n = \cup_{i=0}^{n-3} T_n^i$. 显然 ,集合 T_n^0和 T_n^{n-3}分别只含有 S_n和 P_n ,集合 T_n^1和 T_n^2包含下面两类图 ,即 $T_{i,j}^1$和 $T_{r,s,t}^2$ (如图 1) ,其中对 $T_{i,j}^1$, $i + j = n - 2$, $1 \leq i, j \leq n - 3$,对 $T_{r,s,t}^2$, $r + s + t = n - 3$, $r, t \geq 1$, $s \geq 0$

T_n^3 包含两类图 $T^{(1)}_{l_1,m_1,p_1,q_1}$ 和 $T^{(2)}_{l_2,m_2,p_2,q_2}$ (如图 2) ,其中 $l_1 + m_1 + p_1 + q_1 = n - 4$, $p_1 \geq 0$, $q_1, l_1, m_1 \geq 1$且 $l_2 + m_2 + p_2 + q_2 = n - 4$, $l_2, q_2 \geq 1$, $p_2, m_2 \geq 0$.

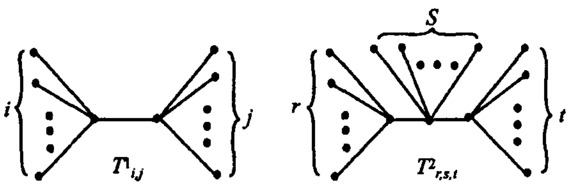

图 1 T_n^1和 T_n^2 中的树

Fig. 1 Trees in T_n^1 and T_n^2

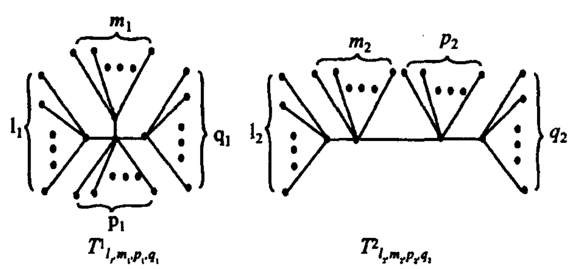

图 2 T_n^3 中的树

Fig. 2 Trees in T_n^3

3 主要结论

定理 1 T_n^1 中的树可以按 Wiener数排序如下:

$$W(T^1_{1,n-3}) < W(T^1_{2,n-4}) < \cdots < W(T^1_{\lfloor\frac{n-2}{2}\rfloor,\lceil\frac{n-2}{2}\rceil}).$$

定理 2 T_n^2 中的树按 Wiener指标排序如下:

收稿日期: 2005-01-20
基金项目:国家自然科学基金 (10331020)资助
作者简介:郭晓峰 (1945 -) ,男 ,教授.
xfguo@xmu. edu. cn

$$W(T^2_{1,n-5,1}) < W(T^2_{2,n-6,1}) = W(T^2_{n-4,0,1}) <$$
$$W(T^2_{3,n-7,1}) = W(T^2_{n-5,1,1}) < W(T^2_{2,n-7,2}) <$$
$$W(T^2_{4,n-8,1}) = W(T^2_{n-6,2,1}) < W(T^2_{3,n-8,2}) =$$
$$W(T^2_{n-5,0,2}) < W(T^2_{5,n-9,1}) = W(T^2_{n-7,3,1}) <$$
$$\cdots < W(T^2_{n-5-s,s+1,1}) = W(T^2_{s+3,n-7-s,1}) <$$
$$W(T^2_{n-6-s,s+1,2}) = W(T^2_{s+3,n-8-s,2}) < \cdots <$$
$$W(T^2_{\lceil\frac{n-s}{2}\rceil-2,s+1,\lfloor\frac{n-s}{2}\rfloor-2}) < W(T^2_{n-4-s,s,1}) =$$
$$W(T^2_{s+1,n-6-s,1}) < W(T) \qquad (2)$$

其中 $s \geq \lceil n-4-\sqrt{2n-7}\rceil$且 $T \in T^2_n$是任意不同于上述不等式中出现的树. 并且当 $n-s$是奇数时, $W(T^2_{\lceil\frac{n-s}{2}\rceil-2,s+1,\lfloor\frac{n-s}{2}\rfloor-2}) = W(T^2_{n-\lceil\frac{n-s}{2}\rceil-2,0,\lfloor\frac{n-s}{2}\rfloor-2})$.

定理 3　设 $n \geq 17$且 $T \in T^3_n\{T^{(1)}_{1,1,n-7,1}, T^{(1)}_{1,1,n-8,2}, T^{(2)}_{1,n-6,0,1}, T^{(1)}_{1,1,n-9,3}, T^{(2)}_{1,n-7,1,1}\}$,则

$$W(T^{(1)}_{1,1,n-7,1}) < W(T^{(1)}_{2,1,n-8,1}) = W(T^{(2)}_{1,n-6,0,1}) <$$
$$W(T^{(1)}_{3,1,n-9,1}) = W(T^{(2)}_{1,n-7,1,1}) < W(T).$$

定理 4　设 $T \in T_n \backslash \{S_n, T^1_{n-3,1}, T^1_{n-4,2}, T^1_{n-5,3}, T^1_{n-6,4}, T^2_{1,n-5,1}, T^2_{2,n-6,1}, T^2_{2,n-7,2}, T^2_{3,n-7,1}, T^2_{n-4,0,1}, T^2_{1,n-5,1}, T^{(1)}_{1,1,n-7,1}, T^{(1)}_{2,1,n-8,1}, T^{(2)}_{1,n-6,0,1}\}$, $n \geq 24$,则

$$W(S_n) < W(T^1_{n-3,1}) < W(T^1_{n-4,2}) <$$
$$W(T^2_{1,n-5,1}) < W(T^1_{n-5,3}) < W(T^2_{2,n-6,1}) =$$
$$W(T^2_{n-4,0,1}) < W(T^{(1)}_{1,1,n-7,1}) < W(T^1_{n-6,4}) <$$
$$W(T^2_{3,n-7,1}) = W(T^2_{1,n-5,1}) < W(T^2_{2,n-7,2}) <$$
$$W(T^{(1)}_{2,1,n-8,1}) = W(T^{(2)}_{1,n-6,0,1}) <$$
$$W(S(n,n-5)) < W(T).$$

参考文献:

[1] Wiener H. Structural determination of paraffin boiling points [J]. J. Am. Chem. Soc., 1947, 69: 17 - 20.

[2] Dobrynin A A, Gutman I, Klavžar S, et al Wiener index of Hexagonal systems[J]. Acta Appl Math, 2002, 72: 247 - 294.

[3] Bermond J C. Interconnected networks[J]. Discrete Appl Math, 1992, 32 - 38.

[4] Hsu D F. Interconnected Networks and Algorithms Networks [C]. 1993.

[5] Dobrynin A A, Entringer R, Gutman I Wiener index of trees: theory and applications[J]. Acta Appl Math, 2001, 66: 211 - 249.

Ordering Trees by Their Wiener Indices

GUO Xiao-feng, DONG Hai-wei

(School of Mathematical Science, Xiamen University, Xiamen 361005, China)

Abstract: The set of trees with n vertices is denoted by $\mathbf{T}_n$. In this paper, the problem of ordering trees in $\mathbf{T}_n$ by their Wiener indices is considered. At first, a partition for trees in $\mathbf{T}_n$ is given by the number of nonpendent edges. And the trees with one nonpendent edge, two nonpendent edges, and three nonpendent edges, respectively, contain four kinds of trees. According to the calculation formular and transformation, some order relations of these four kinds of trees in $\mathbf{T}_n$ are obtained. Base on the order relations, the trees in $\mathbf{T}_n$ with the first up to fifteenth smallest Wiener indices are determined.

Key words: order; tree; Wiener index