

文章编号:1008-7826(2007)04-0025-06

具有最大 Wiener-Hosoya 指标的树

冯惠英¹, 钱建国²

(1. 福建林业职业技术学院, 福建 南平 353000; 2. 厦门大学 数学科学学院, 福建 厦门 361005)

摘要: 为进一步研究分子的性质, M.Randic 在文[2]中首先介绍了 Wiener-Hosoya 指标. Wiener-Hosoya 指标能够用 $h(T) = \sum_{e \in E(T)} (h(e) + h[e])$ 组合原理来表示, 我们是去计算 Wiener 指标 W 而不是去计算 Hosoya topologic

指标 Z. 本文主要讨论对于给定的顶点数时具有最大的 Wiener-Hosoya 指标的树.

关键词: 最大; Wiener-Hosoya 指标; 树

中图分类号: O157.5 **文献标识码:** A

1 前言

著名的 Wiener 指标 W 是指分子中任意两个碳原子之间的距离的和. 在计算时我们常用公式

$$W = \sum_e W(e)$$

来表示, 这里 e 是指所有连接碳原子的键, W(e) 是指 e 两边碳原子个数的乘积. Hosoya topologic 指标 Z 是计算相关图中 k 条(k=0,1,2,3...)不相交的边. Hosoya[1]发现了计算 Z 的一个优美组合原理^[3], 它可以表示成

$$Z(G) = Z(G-e) + Z(G-ee)$$

这里 G-e 是指图中删去一条边 e, G-ee 是指同一图中删去边 e 以及和它所有相连的边. 这个组合原理可以把一个很大的分子分解成很多小的部分.

Wiener 指标 w 和 Hosoya topologic 指标 Z 这两个数都被广泛地用来描述分子的结构, 性质和活性等方面的研究. Wiener 指标是第一个用来描述路长为 3 的分子的结构和性质的符号, Hosoya topologic 指标 Z 是第一个在分子简单回归问题上发现的不变量.

设 e 是树 T 的一条边, 我们用 $h_T(e)$ 表示 T-e 时每一部分顶点个数的乘积, 用 $h_T[e]$ 表示 T-{u,v} 后各部分顶点个数的乘积, 这里 {u,v} 是指边 e 的两个顶点. 对任意的树 T, M.Randic 介绍了一个新的图论描述符号---Wiener-Hosoya 指标^[2], 它可以定义为

$$h(T) = \sum_{e \in E(T)} (h(e) + h[e])$$

如果 e 是悬挂边, 那么 $h[e]$ 就认为是 0. 正如 Randic 他自己指出的一样, Wiener-Hosoya 指标能够用上面组合原理来表示, 我们是去计算 W 而不是去计算 Z. Wiener-Hosoya 指标有很多不同的性质, 例如 Wiener-Hosoya 指标比很多简单的拓扑指数有明显的低的退化, 它可以更准确地描述如庚烷, 辛烷和癸烷等的同分异构体的性质特征^[3].

在这篇文章中, 我们主要研究对于给定顶点数时具有最大的 Wiener-Hosoya 指标的树.

2 给定的顶点数的最大树

收稿日期: 2007-05-28

作者简介: 冯惠英(1974-), 女, 福建省建瓯市人, 讲师, 研究生.

引理 1 T_1 和 T_2 是有 $n(n \geq 17)$ 个顶点的两棵树, 下图 1 中的操作后 Wiener-Hosoya 指标增加, 即 $h(T_1) < h(T_2)$. 这里 $S_i (i=1, 2, \dots, k)$ 都是指树.

证明: 和前面的引理证明一样, 我们列出那些 $h_{T_1}(e) \neq h_{T_2}(e)$ 或 $h_{T_1}[e] \neq h_{T_2}[e]$ 的边:

$$h_{T_1}(e_1) = n-1, \quad h_{T_1}[e_1] = 0, \quad h_{T_1}[f_i] = \phi_i \prod_{j \neq i}^k s_j$$

$$h_{T_2}(e_1) = 2(n-2), \quad h_{T_2}[e_1] = \prod_{j=1}^k s_j, \quad h_{T_2}[f_i] = 2\phi_i \prod_{j \neq i}^k s_j$$

这里, ϕ_i 指 S_i 中去掉与 f_i 关联的点后各分支顶点数的乘积. (下面 ϕ_i 同此意) 而且我们可以很容易得出, 所有不在上面列出的边 e , 都有 $h_{T_1}(e) = h_{T_2}(e)$ 且 $h_{T_1}[e] = h_{T_2}[e]$. 所以

$$h(T_2) - h(T_1) = 2(n-2) + s_1 s_2 \cdots s_k + 2 \sum_{i=1}^k \phi_i \prod_{j=1}^k s_j - (n-1) - \sum_{i=1}^k \phi_i \prod_{j=1}^k s_j > 0$$

引理 2 对任意有 $n(n \geq 17)$ 个顶点的树 T , 下图 2 中的两个操作后 Wiener-Hosoya 指标增加, 即当 $m > 0$ 时, $h(T_1) < h(T_2)$; 当 $m=0$ 时, $h(T_1) < h(T_3)$. 这里 $S_i (i=1, 2, \dots, k)$ 是指含有多于一个顶点的树.

证明: 我们列出那些 $h_{T_1}(e) \neq h_{T_2}(e)$ 或 $h_{T_1}[e] \neq h_{T_2}[e]$ 的边:

$$h_{T_1}(e_2) = n-1 = \omega_1^1, \quad h_{T_2}(e_2) = 2(n-2) = \omega_1^2,$$

$$h_{T_1}[e_2] = 0 = \omega_2^1, \quad h_{T_2}[e_2] = (m+1) \prod_{j=1}^k s_j = \omega_2^2$$

$$h_{T_1}(f_0) = (m+3)(n-m-3) = \omega_3^1, \quad h_{T_2}(f_0) = (m+1)(n-m-1) = \omega_3^2$$

$$h_{T_1}[f_0] = \prod_{j=1}^k s_j = \omega_4^1, \quad h_{T_2}[f_0] = 2 \prod_{j=1}^k s_j = \omega_4^2$$

$$h_{T_1}[f_i] = (m+3) \phi_i \prod_{j=1, j \neq i}^k s_j = \omega_5^1, \quad h_{T_2}[f_i] = 2(m+1) \phi_i \prod_{j=1, j \neq i}^k s_j = \omega_5^2$$

很容易我们可以得到 $\sum_{i=1}^5 \omega_i^2 - \sum_{i=1}^5 \omega_i^1 > 0$.

另一方面, 所有不在上面列出的边, 我们都可以很容易得出. $h_{T_1}(e) = h_{T_2}(e), h_{T_1}[e] = h_{T_2}[e]$ 所以显然有 $h(T_2) - h(T_1) > 0$. 同理, 我们也可以证明 $h(T_3) - h(T_1) > 0$

引理 3 T_1 和 T_2 是有 $n(n \geq 17)$ 个顶点的两棵树, 下图 3 中的操作后 Wiener-Hosoya 指标增加, 即 $h(T_1) < h(T_2)$. 这里 $S_i (i=1, 2, \dots, k)$ 是指含有多于一个顶点的树.

证明: 和前面的引理证明一样, 我们列出那些 $h_{T_1}(e) \neq h_{T_2}(e)$ 或 $h_{T_1}[e] \neq h_{T_2}[e]$ 的边:

$$h_{T_1}(e_0) = (r-1) 2^m 3^t (\sum_{i=1}^k s_i + 1) = \omega_1^1, \quad h_{T_2}(e_0) = (r-1) (\sum_{i=1}^k s_i + 1 + 2m + 3t) = \omega_1^2$$

$$\sum_{i=1}^m h_{T_1}[e_i] = m r 2^{m-1} 3^t (\sum_{i=1}^k s_i + 1) = \omega_2^1, \quad \sum_{i=1}^m h_{T_2}[e_i] = m(r+1) 2^{m-1} 3^t \prod_{i=1}^k s_i = \omega_2^2$$

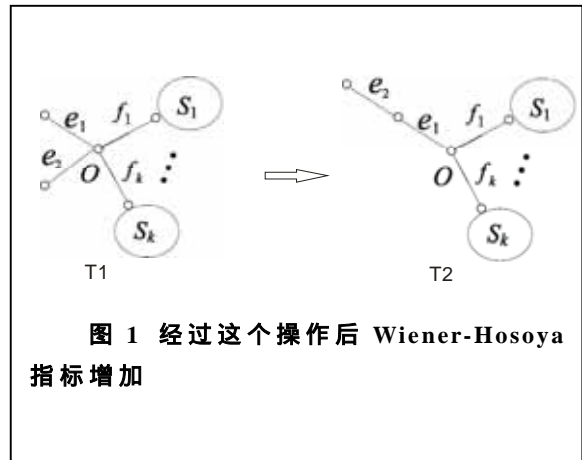


图 1 经过这个操作后 Wiener-Hosoya 指标增加

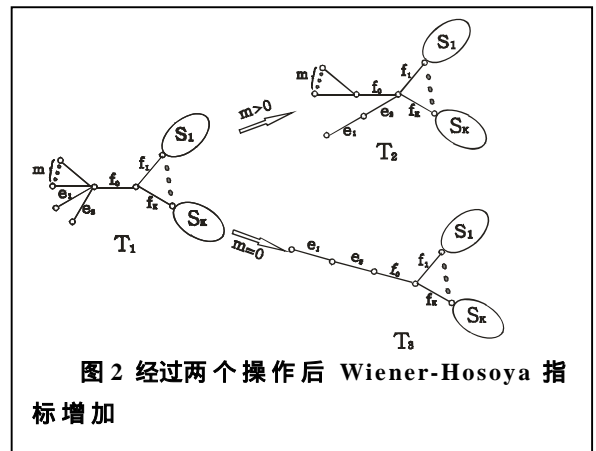


图 2 经过两个操作后 Wiener-Hosoya 指标增加

$$h_{T_1}(f_0) = (r + 2m + 3t + 1) \left(\sum_{i=1}^k s_i + 1 \right) = \omega_3^1, \quad h_{T_2}(f_0) = (r + 1) \left(\sum_{i=1}^k s_i + 3t + 2m + 1 \right) = \omega_3^2$$

$$\sum_{i=1}^k h_{T_1}[f_i] = \sum_{i=1}^k \left[(r + 3t + 2m + 1) \phi_i \prod_{j \neq i} s_j \right] = \omega_4^1, \quad h_{T_2}[f_i] = (r + 1) 2^m 3^t \phi_i \prod_{j \neq i} s_j = \omega_4^2$$

$$\sum_{i=1}^r h_{T_1}[a_i] = r 2^{m+1} 3^{t-1} \left(\sum_{i=1}^k s_i + 1 \right) = \omega_5^1, \quad \sum_{i=1}^r h_{T_2}[a_i] = t(r + 1) 2^{m+1} 3^{t-1} \prod_{i=1}^k s_i = \omega_5^2$$

很容易我们可以得到 $\sum_{i=1}^5 \omega_i^2 - \sum_{i=1}^5 \omega_i^1 > 0$

另一方面, 所有不在上面列出的边, 我们都可以很容易得出 $h_{T_1}(e) = h_{T_2}(e)$ 且 $h_{T_1}[e] = h_{T_2}[e]$. 所以显然有 $h(T_2) - h(T_1) > 0$.

引理 4 对任意有 $n (n \geq 17)$ 个顶点的树 T , 下图 4 中的两个操作后 Wiener-Hosoya 指标增加. 即当 $r > 4$ 时, $h(T_1) < h(T_2)$; 当 $r = 4$ 时, $h(T_1) < h(T_3)$. 这里 $S_i (i = 1, 2, \dots, k)$ 是指含有多于一个顶点的树.

证明: 和前面的引理证明一样, 我们列出那些 $h_{T_1}(e) \neq h_{T_2}(e)$ 或 $h_{T_1}[e] \neq h_{T_2}[e]$ 的边:

$$h_{T_1}[f_i] = r \phi_i \prod_{j=1, j \neq i}^k s_j = \omega_1^1, \quad h_{T_2}[f_i] = 3(r-3) \phi_i \prod_{j=1, j \neq i}^k s_j = \omega_1^2$$

$$h_{T_1}(e_r) = r(n-r) = \omega_2^1, \quad h_{T_2}(e_r) = 3(n-3) = \omega_2^2$$

$$h_{T_1}[e_r] = (r-1) \prod_{i=1}^k s_i = \omega_3^1, \quad h_{T_2}[e_r] = 2(r-3) \prod_{i=1}^k s_i = \omega_3^2$$

$$h_{T_1}(e_{r-1}) = (r-1)(n-r+1) = \omega_4^1, \quad h_{T_2}(e_{r-1}) = 2(n-2) = \omega_4^2$$

$$h_{T_1}[e_{r-1}] = (r-2)(n-r) = \omega_5^1, \quad h_{T_2}[e_{r-1}] = n-3 = \omega_5^2$$

$$h_{T_1}(e_{r-2}) = (r-2)(n-r+2) = \omega_6^1, \quad h_{T_2}(e_{r-2}) = n-1 = \omega_6^2$$

$$h_{T_1}[e_{r-2}] = (r-3)(n-r+1) = \omega_7^1, \quad h_{T_2}[e_{r-2}] = 0 = \omega_7^2$$

$$h_{T_1}[e_{r-3}] = (r-4)(n-r+2) = \omega_8^1, \quad h_{T_2}[e_{r-3}] = 3(r-4) \prod_{i=1}^k s_i = \omega_8^2$$

而且我们可以很容易得到 $\sum_{i=1}^8 \omega_i^2 - \sum_{i=1}^8 \omega_i^1 > 0$

另一方面, 所有不在上面列出的边, 我们都可以很容易得出 $h_{T_1}(e) = h_{T_2}(e)$ 且 $h_{T_1}[e] = h_{T_2}[e]$. 所以显然有 $h(T_2) - h(T_1) > 0$. 同理我们也可以证明 $h(T_3) - h(T_1) > 0$.

3 结论

如果一棵树至多有一个顶点的度大于或等于 3, 就叫这棵树为一个 spider. 设 S 是一个 spider, 它只有一个顶点的度大于或等于 3, 我们就用 o 来表示这个顶点且把 $S - \{o\}$ 的各部份叫做 S 的腿, 这个 spider 也可以表示成 $S(l_1, l_2, \dots, l_k)$, 其中 $l_i (i = 1, 2, \dots, k)$ 表示腿长为 i

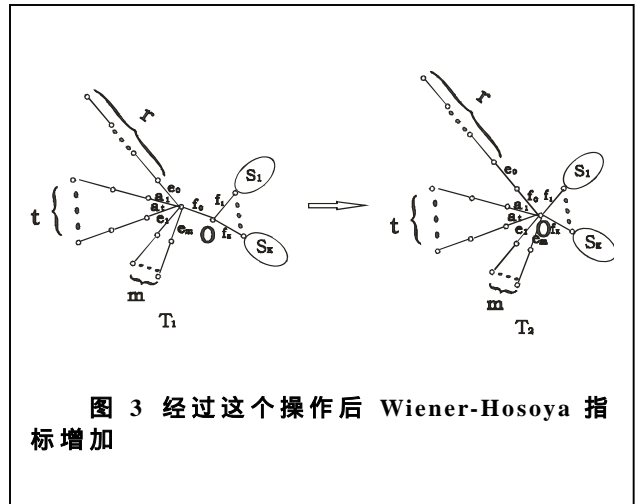


图 3 经过这个操作后 Wiener-Hosoya 指标增加

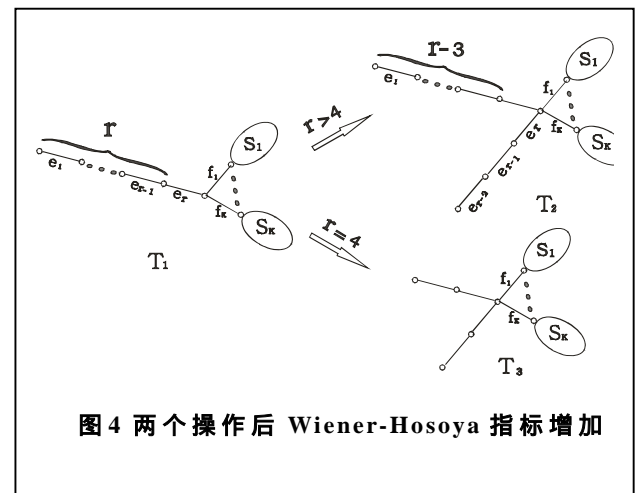


图 4 两个操作后 Wiener-Hosoya 指标增加

的腿的总数, k 是它最长腿的长度. 如 $S(2,1,3,1)$ 就表示腿长为 1 的有两根, 腿长为 2 的有一根, 腿长为 3 的有 3 根, 腿长为 4 的有一根. 如下图:

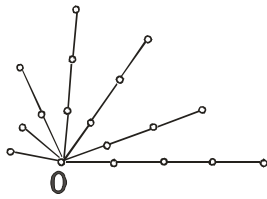


图 5 表示 spider $S(2,1,3,1)$

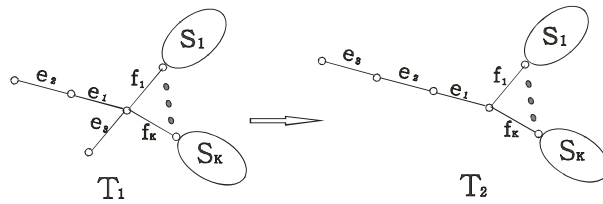


图 6 经过这个操作后 Wiener-Hosoya 指标增加

定理 1 对任意的树 $T(n \geq 17)$, 总有一个直径为 6 的 spider S , 使得 $h(T) \leq h(S)$.

证明: 首先, 证明任意树 T 可化成一个 spider. 对于任意的树 T , 我们先用引理 3, 再用引理 1, 反复使用这两个引理, 最后可以把这棵树化成一个 spider.

接着, 证明可以把这个 spider 所有腿长等于 1 和大于 3 的变成腿长为 2 或 3 的 spider.

当腿长为 1 的分枝总数为偶数, 即 $l_1 = 2m, (m \in \mathbb{Z})$ 时, 我们用引理 4, 可以把它们化成腿长等于 2 的分枝.

当腿长为 1 的分枝总数为奇数, 即 $l_2 = 2m + 1, (m \in \mathbb{Z})$ 时, 总有一根腿长为 1 的分枝没有化成腿长为 2 或腿长为 3, 下面我们证明 $h(S(1, l_2, l_3, \dots, l_k)) < h(S(0, l_2 - 1, l_3 + 1, \dots, l_k))$. 如图 6

我们列出那些 $h_{T_1}(e) \neq h_{T_2}(e)$ 或 $h_{T_1}[e] \neq h_{T_2}[e]$ 的边:

$$\begin{aligned} h_{T_1}(e_2) &= n - 1 = \omega_1^1, & h_{T_2}(e_2) &= 2(n - 2) = \omega_1^2, \\ h_{T_1}[e_2] &= 0 = \omega_2^1, & h_{T_2}[e_2] &= n - 3 = \omega_2^2, \\ h_{T_1}(e_1) &= 2(n - 2) = \omega_3^1, & h_{T_2}(e_1) &= 3(n - 3) = \omega_3^2, \\ h_{T_1}[e_i] &= \prod_{j=1}^k s_j = \omega_4^1, & h_{T_2}[e_i] &= 2 \prod_{j=1}^k s_j = \omega_4^2, \\ h_{T_1}[f_i] &= 2 \phi_i \prod_{j=1, j \neq i}^k s_j = \omega_5^1, & h_{T_2}[f_i] &= 3 \phi_i \prod_{j=1, j \neq i}^k s_j = \omega_5^2 \end{aligned}$$

很容易我们可以得到 $\sum_{i=1}^5 \omega_i^2 - \sum_{i=1}^5 \omega_i^1 > 0$

另一方面, 所有不在上面列出的边, 我们都可以很容易得出 $h_{T_1}(e) = h_{T_2}(e) + h_{T_1}[e] = h_{T_2}[e]$. 所以显然有 $h(T_2) - h(T_1) > 0$, 即 $h(S(1, l_2, l_3, \dots, l_k)) < h(S(0, l_2 - 1, l_3 + 1, \dots, l_k))$.

当树的腿长大于或等于 4 时, 用引理 4 我们都可把它们化成腿长为 2 或腿长 3 的分枝.

定理 2 当 $n = 3k (k \geq 6)$ 时, 具有最大的 Wiener-Hosoya 指标的树是 $S(0, 1, \frac{n-3}{3})$; 当 $n = 3k + 1 (k \geq 6)$ 时, 具有最大的 Wiener-Hosoya 指标的树是 $S(0, 0, \frac{n-1}{3})$; 当 $n = 3k + 2 (k \geq 5)$ 时, 具有最大的 Wiener-Hosoya 指标的树是 $S(0, 2, \frac{n-5}{3})$.

证明: 由定理 1, 可知任意一棵树都会小于一个腿长都为 2 或 3 的 spider.

下面我们证明腿长为 2 的转变成为腿长为 3 的分枝, 它的 Wiener-Hosoya 指标增加. 设

T_1 和 T_2 是有 $n(n \geq 17)$ 个顶点的两棵树, 下图 7 中的操作后 Wiener-Hosoya 指标增加, 即 $h(T_1) < h(T_2)$, 这里 $S_i (i=1, 2, \dots, k)$ 是指含有多于一个顶点的树.

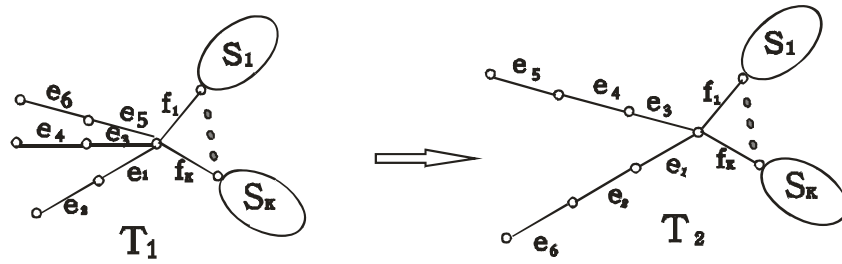


图 7 上面的操作后 Wiener-Hosoya 指标增加

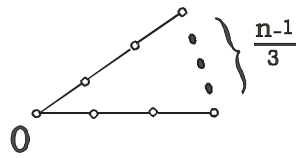
和前面的引理证明一样, 我们列出那些 $h_{T_1}(e) \neq h_{T_2}(e)$ 或 $h_{T_1}[e] \neq h_{T_2}[e]$ 的边:

$h_{T_1}(e_1) = 2(n-2) = \omega_1^1$	$h_{T_2}(e_1) = 3(n-3) = \omega_2^1$
$h_{T_1}(e_3) = 2(n-2) = \omega_2^1$	$h_{T_2}(e_3) = 3(n-3) = \omega_2^2$
$h_{T_1}(e_5) = 2(n-2) = \omega_3^1$	$h_{T_2}(e_5) = n-1 = \omega_3^2$
$h_{T_1}[e_1] = 4 \prod_{i=1}^k s_i = \omega_4^1$	$h_{T_2}[e_1] = 6 \prod_{j \neq i}^k s_j = \omega_4^2$
$h_{T_1}[e_3] = 4 \prod_{i=1}^k s_i = \omega_5^1$	$h_{T_2}[e_3] = 6 \prod_{i=1}^k s_i = \omega_5^2$
$h_{T_1}[e_5] = 4 \prod_{i=1}^k s_i = \omega_6^1$	$h_{T_2}[e_5] = 0 = \omega_6^2$
$h_{T_1}(e_2) = n-1 = \omega_7^1$	$h_{T_2}(e_2) = 2(n-2) = \omega_7^2$
$h_{T_1}(e_4) = n-1 = \omega_8^1$	$h_{T_2}(e_4) = 2(n-2) = \omega_8^2$
$h_{T_1}[e_2] = 0 = \omega_9^1$	$h_{T_2}[e_2] = n-3 = \omega_9^2$
$h_{T_1}[e_4] = 0 = \omega_{10}^1$	$h_{T_2}[e_4] = n-3 = \omega_{10}^2$
$h_{T_1}[f_i] = 8 \phi_i \prod_{j \neq i, j=1}^k s_j = \omega_{11}^1$	$h_{T_2}[f_i] = 9 \phi_i \prod_{j \neq i, j=1}^k s_j = \omega_{11}^2$

很容易我们可以得到 $\sum_{i=1}^{11} \omega_i^2 - \sum_{i=1}^{11} \omega_i^1 > 0$

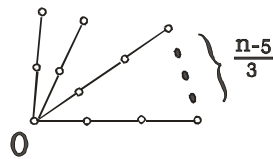
另一方面, 所有不在上面列出的边, 我们都可以很容易得出 $h_{T_1}(e) = h_{T_2}(e)$ 且 $h_{T_1}[e] = h_{T_2}[e]$. 所以显然有 $h(T_2) - h(T_1) > 0$

当 $n = 3k + 1$ 时, 所有腿长为 2 的分枝最后都可转化成腿长为 3 的 spider, 即具有最大的 Wiener-Hosoya 指标的树是 $S(0, 0, \frac{n-1}{3})$.



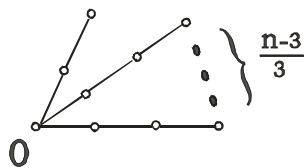
很容易算出： $h(S(0,0,\frac{n-1}{3})) = 2(n-1)3^{\frac{n-7}{3}} + \frac{1}{3}(7n^2 - 24n + 17)$

当 $n=3k+2$ 时，除 2 根腿长为 2 的以外，其它的都可转化成腿长为 3 的 spider，即具有最大的 Wiener-Hosoya 指标的树是 $S(0,2,\frac{n-5}{3})$ 。



很容易算出： $h(S(0,2,\frac{n-5}{3})) = 4(2n-1)3^{\frac{n-11}{3}} + \frac{1}{3}(7n^2 - 34n + 55)$

当 $n=3k$ 时，除 1 根腿长为 2 的分枝以外，其它的都可转化成腿长为 3 的 spider，即具有最大的 Wiener-Hosoya 指标的树是 $S(0,1,\frac{n-3}{3})$ 。



很容易算出： $h(S(0,1,\frac{n-3}{3})) = (4n-3)3^{\frac{n-9}{3}} + \frac{1}{3}(7n^2 - 29n + 36)$

由这个结果我们可以看出，具有最大的 Wiener-Hosoya 指标的树是有尽可能多的腿长为 3 的 spider。

参考文献：

- [1] H. Hosoya, K. Kawasaki and K. Mizutani, Topological index and thermodynamics properties, Empirical rules on the boiling points of saturated hydrocarbons[J]. Bull. Chem. Soc. Jpn., 1972, (45): 3415.
- [2] M. Randić, Wiener-Hosoya index -A novel graph theoretical molecular descriptor[J]. J.Chem. Inf. Comput. Sci., 2004, (44): 373-377.
- [3] Feng. Huiying, Qian jianguo《Minimum Trees With Respect To Wiener-Hosoya Index》[J]. Journal Of Mathematical Study, 2006,(6): 117-123.

Maximum Trees with Respect to Wiener-hosoya Index

FENG Hui-ying¹, QIAN Jian-guo²

(1. Fujian Forestry Vocational & Technical College, Nanping, Fujian 353000, China; 2. School of Mathematical Science, Xiamen University, Xiamen, Fujian 361005, China)

Abstract: Wiener-Hosoya index was firstly introduced by Randić in [2], which is expected to reveal some further properties of molecular. In this paper, the maximum trees (with respect to Wiener-Hosoya index) with given orders are determined.

Key words: Wiener-Hosoya index ; maximum ; trees

[责任编辑：林宝德]