学校编码：10384　　分类号：　　密级：
学号：B200423016　　UDC：

厦 门 大 学

博 士 学 位 论 文

多角链关于拓扑指标的一些极值问题

Some Extremal Problems on the Topological Indices of Polygonal Chains

曹 月 芬

指导教师姓名：张福基　教授
专 业 名 称：应 用 数 学

论文提交日期：2008 年 5 月
论文答辩时间：2008 年 6 月
学位授予日期：2008 年　月

答辩委员会主席：
评　　阅　　人：

2008 年 5 月

厦门大学学位论文原创性声明

兹呈交的学位论文，是本人在导师指导下独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考的其他个人或集体的研究成果，均在文中以明确方式标明。本人依法享有和承担由此论文产生的权利和责任。

声明人（签名）：

年　月　日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人完全了解厦门大学有关保留、使用学位论文的规定。厦门大学有权保留并向国家主管部门或其指定机构送交论文的纸质版和电子版，有权将学位论文用于非赢利目的的少量复制并允许论文进入学校图书馆被查阅，有权将学位论文的内容编入有关数据库进行检索，有权将学位论文的标题和摘要汇编出版。保密的学位论文在解密后适用本规定。

本学位论文属于

1、保密（ ），在 年解密后适用本授权书。

2、不保密（ ）

（请在以上相应括号内打“∨”）

作者签名： 日期： 年 月 日

导师签名： 日期： 年 月 日

摘　要

如果一个简单无向图 $G=(V,\ E)$ 的每个顶点代表分子中的一个原子，每条边代表原子之间形成的化学键，这种图就叫分子图。众所周知, 图论学科的产生与发展与化学分子图的研究非常密切. 分子拓扑指数以及分子图的不变量的研究是现代化学图论中最活跃的研究领域之一. 对于化学分子图的某些拓扑性质, 人们已经得到了很多结果, 其中有关数学方面的研究主要集中在覆盖问题、非同构计数问题、匹配计数、独立点集计数与相关的排序问题等方面.

在图论中, 匹配数 (在化学上称为 Hosoya 指标)、独立集数 (在化学上称为 Merrifield-Simmons 指标) 和 $Wiener$ 指标是三个具有重要意义的图参数. 它们有着明显的应用背景; 是化学图论中应用比较广泛的拓扑指数, 因而考虑相关的极值问题是很自然的. 对于前两个参数, [47] 和 [2] 中已经分别给出了四角链及六角链的一些结果, 对于 $Wiener$ 数, [67] 给出了六角链的一些结果. 本文主要把这些结果推广到一般的多角链.

下面是本文的主要结果:

1. 在第二章中我们首先讨论五角链关于 k-匹配数和 k-独立集数等参数的极值问题. 设 $\mathcal{A}_n$ 表示所有 n 阶五角链的集合. 对于任意的五角链 $A_n\in\mathcal{A}_n$, 分别用 $m_k(A_n)$ 和 $i_k(A_n)$ 表示 A_n 的 k–匹配数和 k–独立集数. 我们证明了对于任意的五角链 $A_n\in\mathcal{A}_n$ 和任意的 $k\geq 0$, 有 $m_k(Z_n^2)\leq m_k(A_n)\leq m_k(Z_n^1)$, $i_k(Z_n^2)\geq i_k(A_n)\geq i_k(Z_n^1)$. 对于所有的 k, 不等式左边等号成立仅当 $A_n=Z_n^2$; 对于所有的 k, 不等式右边等式成立仅当 $A_n=Z_n^1$. 这里 Z_n^1 和 Z_n^2 分别表示第一类链和第二类链 (见图 4 (a) 和 4 (b)).

2. 在第三章中我们进一步讨论了一般的 h–多角链 $(h>5)$ 关于 k-匹配数和 k-独立集数等参数的极值问题. 设 $\mathcal{A}_n$ 表示所有 n 阶多角链的集合. 对于任意的多角链 $A_n\in\mathcal{A}_n$, 分别用 $m_k(A_n)$ 和 $i_k(A_n)$ 表示 A_n 的 k–匹配数和 k–独立集数. 我们证明了对于任意的多角链 $A_n\in\mathcal{A}_n$ 和任意的 $k\geq 0$, 有 $m_k(Z_n^2)\leq m_k(A_n)\leq m_k(Z_n^1)$, $i_k(Z_n^2)\geq i_k(A_n)\geq i_k(Z_n^1)$. 对于所有的 k, 不等式左边等号成立仅当 $A_n=Z_n^2$; 对于所有的 k, 不等式右边等式成立仅当 $A_n=Z_n^1$. 这里 Z_n^1 和 Z_n^2 分别表示第一类链和第二类链 (见图 6 (a) 和 6 (b)).

3. 在第四章中我们给出了第二类链 Z_n^2 (见图 6 (b)) 的匹配 (系数) 多项式.

4. 在第五章中我们讨论了一般的 h–多角链 ($h \geq 5$) 关于 $Wiener$ 数的极值问题. 设 $W(A_n)$ 表示 A_n 的 $Wiener$ 数, 我们证明了对于任意的多角链 $A_n \in \mathcal{A}_n$, 有 $W(Z_n^2) \leq W(A_n) \leq W(Z_n^3)$. 不等式左边等号成立仅当 $A_n = Z_n^2$; 不等式右边等号成立仅当 $A_n = Z_n^3$. 这里 Z_n^2 和 Z_n^3 分别表示第二类链和第三类链 (见图 14 (b) 和 14 (a)).

关键词： 多角链; 拓扑指标; 极值问题.

Abstract

Let $G = (V,\ E)$ be a simple, undirected graph. If each vertex of G represents an atom of molecule and each edge represents the chemical bond between the atoms respectively, then G is called an molecular graph. It is well known that the appearance and the development of graph theory are closely connected with the research of chemical molecular graph. The study of molecular topological indices and the invariants of molecular graph is one of the most active area in the modern chemical graph theory. For some topological properties of the chemical molecular graph, many results have been achieved. The mathematical research about them mainly focuses on tiling problem, enumerations, matchings counting, independent sets counting and related ordering problem, etc.

In graph theory, matching numbers (called Hosoya index in the chemistry), independent numbers (called Merrifield- Simmons index in the chemistry) and Wiener index are three important parameter. They have significant applied background and widely use in chemical graph theory. It is naturally to consider the extremal problem with respective to these topological indices. For first and second indices, [47] and [2] had given some results on polyomino chains and hexagonal chains. For Wiener index, [67] had given some results on hexagonal chains. In this thesis, we extend the main results to a more general case.

Here are main results in this paper:

In chapter 2, we discuss the extremal pentagonal chains on k-matchings and k-independent sets. Denote by $\mathcal{A}_n$ the set of the pentagonal chains with n pentagons. For any pentagonal chain $A_n \in \mathcal{A}_n$, let $m_k(A_n)$ and $i_k(A_n)$ be the number of k–matchings and k–independent sets of A_n, respectively. In the second chapter, we show that for any $A_n \in \mathcal{A}_n$ and any $k \geq 0$, $m_k(Z_n^2) \leq m_k(A_n) \leq m_k(Z_n^1)$ and $i_k(Z_n^2) \geq i_k(A_n) \geq i_k(Z_n^1)$, with the left of equalities holding for all k only if $A_n = Z_n^2$; the right of equalities holding for all k only if $A_n = Z_n^1$, where Z_n^1 and Z_n^2 are the chain of type one and the chain of type two, respectively (see figure 4 (a) and 4 (b)).

In chapter 3, we further discuss the extremal h–polygonal chains ($h > 5$) on k–matchings and k–independent sets. Denote by $\mathcal{A}_n$ the set of the polygonal chains with n polygons. For any $A_n \in \mathcal{A}_n$, let $m_k(A_n)$ and $i_k(A_n)$ be the number of k–matchings and k–independent sets of A_n, respectively. In the third chapter, we show that for any polygonal chain $A_n \in \mathcal{A}_n$ and any $k \geq 0$, $m_k(Z_n^2) \leq m_k(A_n) \leq m_k(Z_n^1)$ and $i_k(Z_n^2) \geq i_k(A_n) \geq i_k(Z_n^1)$, with the left of equalities holding for all k only if $A_n = Z_n^2$; the right of equalities holding for all k only if $A_n = Z_n^1$, where Z_n^1 and Z_n^2 are the chain of type one and the chain of type two, respectively (see figure 6 (a) and 6 (b)).

In chapter 4, we give the matching (coefficient) polynomial of the chain of type two Z_n^2 (see figure 6 (b)).

In chapter 5, we discuss the extremal h–polygonal chains ($h \geq 5$) on Wiener numbers. Let $W(A_n)$ be the Wiener number of A_n. In the fourth chapter, we show that for any polygonal chain $A_n \in \mathcal{A}_n$, $W(Z_n^2) \leq W(A_n) \leq W(Z_n^3)$, with the left of equalities holding for all k only if $A_n = Z_n^2$; the right of equalities holding for all k only if $A_n = Z_n^3$, where Z_n^2 and Z_n^3 are the chain of type two and the chain of type three, respectively (see figure 14 (b) and 14 (a)).

Key Words: Polygonal chains; Topological index; Extremal problem.

目 录

Contents

第一章　序　言

本论文研究多角链的拓扑指标. 本章首先介绍本文所需要的基本概念术语和符号. 然后指出本文研究问题的物理化学背景. 进而综述该领域的研究进展和本文所得到的主要结论.

§1.1　基本概念、术语和符号

设 $G=(V(G),\ E(G))$ 为有限无向简单图，其顶点集和边集分别用 $V(G)$ 和 $E(G)$来表示. 对于边 $e\in E(G)$ 和顶点 $v\in V(G)$, $G-e$ 表示从 G 中去边 e , $G-v$ 表示从 G 中去掉顶点 v 以及所有和 v 相关联的边. 如果顶点 v 是边 e 的一个端点,则称 v 与 e 相关联. 图 G 的边集的一个子集 M 称为 G 的一个匹配 (matching), 如果 G 中的每一个顶点至多与 M 中的一条边相关联; M 称为 G 的一个完美匹配 (perfect matching), 如果 G 中的每一个顶点恰好与 M 中的一条边相关联. 图 G 的一个匹配 M 称为 k-匹配, 如果 $|M|=k$. 我们用 $m(G)$ 表示 G 中的匹配数, 用 m_k 表示 G 中 k-匹配的数目, 显然 $m(G)=\sum\limits_{k\geq 0} m_k(G)$. 图不变量 $m(G)$ 是由 Hosoya [1] 提出的, 现在人们通常称为 Hosoya 指标.

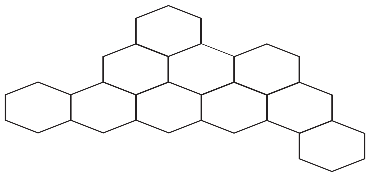
图 G 的顶点集的一个子集 I 称为 G 的一个独立集 (independent set), 如果 I 中的任意两个顶点都不相邻 (或者 I 的导出子图不含边). 设 $i(G)$ 表示 G 中的独立数. G 中的一个独立集 I 称为 k-独立集，如果 $|I|=k$. 记 $i_k(G)$ 表示 G 中的 k-独立集的数目. 显然, $i(G)=\sum\limits_{k\geq 0} i_k(G)$. 现在人们也把图不变量 $i(G)$ 称为 Merrified-Simmons 指标.

设 v 是 G 中的一个顶点, 用记号 $d_G(v)$ 来表示图 G 中顶点 v 的度, 即 v 在 G 中邻点的个数. 对于 G 中的两个顶点 $u,\ v$, 用记号 $d_G(u,v)$ 来表示图 G 中顶点 u 和 v 之间的距离 (即 u 和 v 之间最短路中边的条数). 如果含义明确时, 记号中的下标 G 可以省略, 即用 $d(v)$ 来替代 $d_G(v)$, 用 $d(u,v)$ 来替代 $d_G(u,v)$.

图 G 的 $Wiener$ 数用 $W(G)$ 来表示. 一个连通图 G 的 $Wiener$ 数是指图中所有无序顶点对之间的距离之和, 即:

$$W(G)=\sum_{u,v\in V(G)} d_G(u,v)$$

六角系统是一个有限 2–连通平面图, 其每一个内面的边界是边长为 1 的正六边形. 而一个六角链是指满足以下两个性质的六角系统: (1) 它没有一个顶点属于三个六边形; (2) 它没有一个六边形与多于两个的六边形相邻 [2]. 六角系统和六角链如图 1 所示.


(a) 六角系统

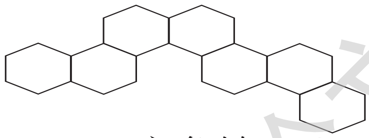
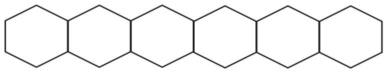

(b) 六角链

图 1: 六角系统和六角链

设 H 为六角链, 如果 H 中由度为 3 的顶点集导出的子图 (顶点集和与顶点集关联的边所构成的子图) 的每一个分支是 K_2, 则称 H 为直链; 如果 H 的度为 3 的顶点集导出的子图是一条路, 则称 H 为锯齿链 (zigzag chain). 含 n 个六角形的直链和锯齿链分别用 $L_n(H)$ 和 $Z_n(H)$ 表示 (图 2).


L_6(H)

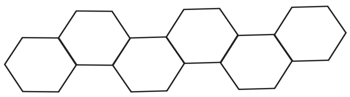

Z_6(H)

图 2: 直链和锯齿链

本文所使用的术语都是标准的, 对于在本文中出现但没有定义的符号和术语请参阅 [3], [4], [5], [6], [7].

§1.2 物理化学背景与主要论题

众所周知，图论学科的产生与发展与化学分子图的研究非常密切。实际上，若仅考虑原子间的连接关系，则用图或树状图来表示分子的结构是一件非常自然的事情。化学分子图理论对于新物质、新材料的研究一直起着非常重要的作用。上世纪末，伴随科技的飞速发展和生活水平的日益提高，制造业和医药领域对于新材料、新药物的需求与日俱增。如果盲目地合成这些新材料、新药物不仅造成时间上和经济上的浪费，而且也是不现实的。为了能有目的地、快捷地合成新物质，组合化学再次成为研究的热点。化学分子图的拓扑指标理论是组合化学的一个重要研究分支。所谓分子的一种拓扑指标是从分子图集合到实数集合的一个映射 i，也就是说，把每个分子图 G 对应于一个实数 $i(G)$，而这种对应往往是通过分子图的子图及其计数来建立的。计算化学家们通过大量的数据，用统计方法给出了分子的各种物理化学性质与它的指标值之间的数量关系。也就是说，一个分子图的拓扑指标值可以反映分子的物理化学性质和药物学。这方面的研究在理论化学中也称为 QSAR (quantitative structure-activity relations) 和 QSPR (quantitative structure-property relations) 理论. 这里 ‘property’ 是指物理化学性质, 而 ‘activity’ 表示它们化合物药理上和生物上的活性. 在过去二十年里, 在 QSPR 和 QSAR 中所应用的技巧已经赢得物理化学、有机化学、分析化学、药理化学、生物化学环境科学等学科的认可. 这些可参见已出版的专著 [8], [9], [10], [11].

数学上的计数多项式的概念最早是由 Polya 在 1936 年引入到化学中来的. 直到上个世纪七十年代, 才引起化学家们的注意. 不同计数多项式被运用到不同的化学领域. 例如, 通过对分子图特征多项式的谱研究可以得到分子轨道. 对特征多项式分析可以更好理解非饱和碳氢化合物全局电子结构. 由 Farrell [12] 提出匹配多项式可以用来分析和讨论多环碳氢化合物的六隅体的刻画.致力于匹配多项式这方面研究的文献可参见 [13], [14], [15], [16], [17], [18], [19], [20], [21]等.

§1.3 已有工作的综述

六角系统 (hexagonal system) 和四角系统在统计物理和化学上有着广泛的应用. 它们是组合数学中 "细胞生长" (cell-growth) 问题的一个研究对象. "细胞生长" 问题与动物的发育很类似: 从一个特定的正多边形 (相当于一个细胞) 开始, 在平面上一步步向外 "生长", 每生长一步即在其外围添加一个相同的细胞且至少有一条边完全重合. 如果一个细胞是正方形, 则生成的动物为 *polyominoes*; 如果细胞是一个正六边形或者等边三角形, 则分别称生成的动物为 *hexagonal animals* (*hexagonal system*) 或 *triangular animals* (参见图 3) [22].

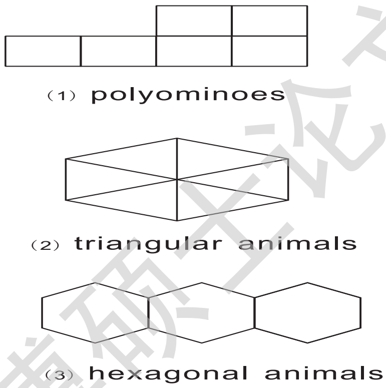


图 3:

Polyominoes 拥有很悠久的历史, 起源可以追溯到 20 世纪初, 但它们是现在才被 Golomb 和 Gardner 在他主编的 *Scientific American* 的 "*Mathematical Games*" 专栏中普及. 之后许多关于 *polyominoes* 的文章和问题出现在杂志 *RecreationalMathematics* 上 [22]. 六角系统是理论化学中苯碳氢化合物的自然图表示, 20 世纪中叶以来, 由于化学家对苯类碳氢化合物的关注, 关于六角系统的研究得到了迅速的发展. 可参见 Springer-Verlag 出版的几部专著 [23], [24], [25], [26], [27], [28], [29].

从数学角度来看, 对 *polyominoes* 的研究主要集中在覆盖问题, 非同构计数问题, 匹配计数与排序等相关问题等几个方面上. 图的完美匹配在量子化学中化学家称之为 *Kekulé* 结构, 在统计物理上称之为 *Dimer* 构形. 人们已经证明四角系统的完美匹配与统计物理学中的 *dimer* 问题 (即用 $2MN$ 个 *dominoes* 不重不漏

的恰好覆盖一个 $2M \times 2N$ 矩形共有多少种不同的覆盖方法)有直接的联系, 参见 [30], [31], [32], [33], [34]. 四角系统完美匹配的存在性问题已经得到解决 [35]. 另外有关四角系统的匹配计数也已经有了许多重要的结果 [34], [36], [37], [38], [39].

而图关于匹配数的排序, 尤其是关于匹配数的极图, Gutman 等在早期文章中已经有所研究 [40], [41], [42], [43]. 1993年, Gutman 在 [44] 中就六角链的极值问题讨论了三个拓扑不变量: Hosoya 指标, 最大特征值和 Merrified-Simmons 指标. 他的工作大大推进了六角链关于不同类型的拓扑不变量的极值问题的研究. 并且他在 [44] 中提出这样的猜想, 即具有最大的 Hosoya 指标和最小的 Merrifield-Simmons 指标是锯齿 (zigzag) 链. 张莲珠在文 [45] 中证实了这一猜想. 文 [2] 中, L. Zhang 和 F. Zhang 获得了六角链关于 k-匹配数和 k-独立集数的极链. 在文献 [46] 中, L. Zhang 和 F. Tian 确定了树状六角系统的 Hosoya 指标和 Merrifield-Simmons 指标的上下界. 由于四角链和六角链本身所具有的相似性, 在文 [47] 中 Y. Zeng 和 F. Zhang 引进一个"双重标号", 从而确定了四角链关于 k-匹配数和 k-独立集数的极大极小链. 对于图的许多其它不变量, 如全 π-电能, 类似的排序或者极值问题也有所研究, 可参见 [48], [49], [50], [51], [52], [53], [54]. 在文 [52], [53] 中, F. Zhang 和 L. Wang、Z. Li 确定了六角链关于全 π- 电能的极链. 他们获得了类似于 [2] 中的结果. Haizhen Ren 和 Fuji Zhang 在文献 [55]-[59] 中就上述几个拓扑指标对 Double 六角链和 Fully-angular polyhex 链做了进一步的研究. 在文 [54] 中, J.Rada 和 A.Tineo 研究了多角链, 并证明了对于含有 $4n-2$ $(n \geq 2)$ 个顶点的多边形组成的多角链, 直链具有最小能量. 在文章中, 他们给出了一个反例，说明文中所得到的结果对八角链并不成立. 即对于一般的含有 $2n$ 个顶点的多边形组成的多角链就不一定成立. 关于四角链的另外一个反例可见 [47]. 这些结果表明对于含有 $2n$ 个顶点的多边形组成的多角链全 π-电能的极值问题与 [2] 中已经得出的关于六角链的极值结果无法统一起来. 这就使得我们需要进一步去讨论一般的多角链关于这几个拓扑指标的极链的规律. 幸运的是我们对 Hosoya 指标、Merrifield–Simmons 指标、$Wiener$ 指标所有极值问题可以有一个统一的表达形式.

图的另一个拓扑指标–$Wiener$ 指标 (数). $Wiener$ 指标是定义在化合物分子图上基于图中距离的拓扑指标, 也是所有拓扑指标中最古老的拓扑指标. 它是 1947 年由物理化学家 Harold Wiener 在 [60] 中最早提出的, 是用来估计化合物链烷的沸点, 在文 [60] 中 Wiener 得到了一个依赖于链烷分子图 (即一棵树) 的值