

学校编码: 10384

分类号: 密级:

学号: B17020051403019

UDC:

厦 门 大 学

博 士 学 位 论 文

Wiener 指数的若干极值问题和戴帽纳米管的
Wiener(Hosoya) 多项式

On the extremal Wiener indices of graphs and
Wiener (Hosoya) polynomials of capped nanotubes

林 晓 霞

指导教师姓名: 郭晓峰 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

兹提交的学位论文，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

分子拓扑指数 (topological index) 是定义在化合物分子图上的数值不变量 (numerical descriptor), 它与相应化合物的物理、化学和生物性质密切相关, 因而被广泛应用于确定“量子结构性质关系 (QSPR)”和“量子结构活性关系 (QSAR)”, 进而用于预测新的化合物的物理、化学和生物性质. 拓扑指数在组合优化、网络优化等领域也有广泛应用.

Wiener 指数最初是由 Harold Wiener 在 1947 年为了确定烷烃的沸点而引入的一个分子拓扑指数. 对于一个连通图 G , G 的 Wiener 指数被定义为 G 中所有顶点对 (无序) 的距离之和. Wiener 指数在通讯、设备定位、密码学等方面也有诸多应用. 自二十世纪七十年代以来, Wiener 指数已得到了广泛深入的研究, 其中, 对特定图类中具有极端 Wiener 指数的图的研究, 是在化学和数学上都有重要意义的热门前沿课题, 已经获得了较大的进展.

Wiener 多项式 (在本文中称为 Hosoya 多项式) 是由 Hosoya 提出的, 它是关于图中距离分布的生成函数. Wiener 指数容易由 Hosoya 多项式得到. 但正如著名数学化学家 Ivan Gutman 所说: 计算 Hosoya 多项式要远比计算 Wiener 指数困难得多. 目前对 Hosoya 多项式的研究尚处于起步阶段, 只有不多的几篇文章在国际杂志上发表. 台湾著名的图论专家叶永南等人分别于 1996 年 [51] 和 2004 年 [52] 给出了一类高度对称的树和几类较规则化学图上的 Hosoya 多项式的公式, 2007 年 [?] 给出了复合图、线图、剖分图、全图与原图的 Hosoya 多项式之间关系. 著名数学化学家 Ivan Gutman 于 2001 年 [?] 给出了几类具有周期性的苯链的 Hosoya 多项式的公式. 东欧化学家 M.V.Diudea 于 2002 年 [?] 通过计算机演绎出一类非常对称的环面六角系统的 Hosoya 多项式的公式. 徐守军和张和平等人 [?, ?] 给出了开口纳米管的 Hosoya 多项式.

本文研究一般图的 Wiener 指数的若干极值问题和戴帽纳米管上的 Hosoya 多项式. 我们把图的 Wiener 指数和极图理论中一些常见的参数 (如连通度、边连通度、色数、团数等) 联系起来, 刻画了给定阶数与连通度 (或色数) 的具有最小 Wiener 指数的图, 刻画了给定阶数与团数的具有最小 Wiener 指数和最大 Wiener 指数的图. 对戴帽纳米管, 由于帽子结构的多样性和不规则性, 以及纳米管上顶点间的距离会因帽子的加入而改变, 戴帽纳米管上的 Hosoya 多项式的

计算比开口纳米管更为困难. 我们研究了纳米管上顶点间的距离因帽子发生改变的顶点子集的区域, 进而将戴帽纳米管划分为 3 个部分使得每一部分的顶点对在这一部分的距离与在整个戴帽纳米管中的距离相同, 并基于每一部分的图的 Hosoya 多项式, 以及不同部分之间的顶点对的距离, 得到了计算锯齿型戴帽纳米管和扶手型戴帽纳米管的 Hosoya 多项式的一般计算方法.

本文的主要结果如下:

1. 一般图的 Wiener 指数的若干极值问题.

对于图的阶为 n , 连通度 (或, 边连通度) 为 k 的图, 我们证明了具有最小 Wiener 指数的图是 $G[1, k, n - k - 1]$. 对于图的阶为 n 和色数为 k 的图, 我们证明了具有最小 Wiener 指数的图是 $T_{k,n}$. 对于图的阶为 n 和团数为 $cl(G) = k < n - 1$ 的图, 我们证明了具有最小 Wiener 指数的图是 $T_{k,n}$, 具有最大 Wiener 指数的图是 $K_k \cdot P_{n-k}$. 其中, 图 $G[1, k, n - k - 1]$, $T_{k,n}$, $K_k \cdot P_{n-k}$ 的定义见 §2.1.

2. 锯齿型戴帽纳米管的 Hosoya 多项式.

对锯齿型戴帽纳米管 $T(p, q)[C, D]$ 的 Hosoya 多项式的计算, 我们首先证明了当 $t \geq \lceil \frac{m+2}{2} \rceil$ 时, 纳米管的第 t 层 C_t 上的顶点对的距离与它们在 $T(p, q)[C, D]$ 中的距离相同, 其中 $m = \max\{d_{B(C)}(v_i, v_j) - d_C(v_i, v_j) \mid v_i, v_j \in V(B(C))\} \geq 0$. 基于这个结果, 我们把锯齿型戴帽纳米管的帽子 C 和 D 分别扩大到 C^* 和 D^* , 得到 $T(p, q)[C, D]$ 的相伴锯齿型戴帽纳米管 $T(p, q^*)[C^*, D^*]$, 并将锯齿型戴帽纳米管分成三部分 $T(p, q^* - 2)$, C^* 和 D^* , 使得每一部分的任意两个顶点的距离等于它们在锯齿型戴帽纳米管中的距离. 进而得到锯齿型戴帽纳米管的 Hosoya 多项式的一般表达式, 并给出例子说明这个方法的具体应用.

3. 扶手型戴帽纳米管的 Hosoya 多项式.

由于扶手锯齿型戴帽纳米管与锯齿型戴帽纳米管结构不同, 求扶手型戴帽纳米管的 Hosoya 多项式比求锯齿型戴帽纳米管的 Hosoya 多项式更困难. 同样我们首先证明了当 $q - 1 - \lceil \frac{1}{2}(m_D + p - r(m_D) + \delta_{r(m_D)}) \rceil \geq t \geq \lceil \frac{1}{2}(m_C + p - r(m_C) + \delta_{r(m_C)}) \rceil$ 时, 在 $T_A(p, q)$ 上的第 L_t 层的任意两个顶点的距离和它在扶手型戴帽纳米管 $T_A(p, q)[C, D]$ 上的第 t 层 L_t 的距离是相等的, 其中 $m_C = \max\{d_{B(C)}(v_i, v_j) - d_C(v_i, v_j) \mid v_i, v_j \in V_a(C)\} > 0$, $m_D =$

$\max\{d_{B(D)}(v_i, v_j) - d_D(v_i, v_j) \mid v_i, v_j \in V_a(D)\} > 0$, 当 k 是奇数时 $\delta_k = 1$, 当 k 是偶数时 $\delta_k = 0$. 基于这个结果, 我们把扶手型戴帽纳米管的帽子 C 和 D 分别扩大到 C^* 和 D^* , 得到 $T_A(p, q)[C, D]$ 的相伴扶手型戴帽纳米管 $T_A(p, q^*)[C^*, D^*]$, 并将扶手型戴帽纳米管分成三部分 $T_A(p, q^* - 2)$, C^* 和 D^* , 使得每一部分的任意两个顶点的距离等于它们在扶手型戴帽纳米管中的距离. 进而得到扶手型戴帽纳米管的 Hosoya 多项式的一般表达式, 并给出例子说明这个方法的具体应用.

关键词: Wiener 指数; Hosoya 多项式; 锯齿型戴帽纳米管; 扶手型戴帽纳米管.

Abstract

Molecular topological indices are the numerical descriptors defined on molecular graphs of compounds, which are closely related to physical, chemical and biological properties of the corresponding compounds. So molecular topological indices have been widely applied to determine the “quantitative structure-property relations (QSPR)” and “quantitative structure-activity relations (QSAR)”, and to predict physical, chemical and biological properties of new compounds. They are also widely applied in combinatorial optimizations, network optimizations and other areas.

In order to determine the boiling points of alkanes Harold Wiener proposed the Wiener index, the first topological index, in 1947. For a graph G , its Wiener index is defined as the sum of the distances of all pairs of vertices of G . Wiener index also has many applications in communication, facility location, cryptology, etc. Since 1970s, many investigation on Wiener indices have been extensively and in-depth made, in which the investigations for the graphs having extreme Wiener indices in some special families of graphs are popular and forefront topics with important significance in chemistry and mathematics, and have gotten considerable progress.

Wiener polynomial (also called Hosoya Polynomial) is proposed by Hosoya. It is generating function of the distribution of distances between vertices of a graph. The Wiener indexes can be easily got from the Hosoya polynomials. But as the well-known mathematician and chemist Ivan Gutman said: the calculations of Hosoya polynomials are far more difficult than the Wiener index. Now investigations for Hosoya polynomials are in the initial stage. Only a few articles are published in the international magazines. In 1996 [51] and 2004 [52], Yeh Yongnan et al. determined the formula of the Hosoya polynomials for a family of trees with highly symmetry, and some chemical graphs. In 2007, they [54] showed the relations between Hosoya polynomial of a graph G and the Hosoya polynomials of compound graph, line graph, subdivision graph, total graph of G . In 2001, Ivan Gutman [48] gave the formula of the Hosoya polynomials for some families

of benzenoid chains with period. In 2002, M. V. Diudea deduced the formula of the Hosoya polynomials for a family of toroidal polyhexes. Xu Shoujun and Zhang Heping [56,57] gave the Hosoya polynomials of zig-zag open-ended nanotubes and armchair open-ended nanotubes.

In this dissertation, we study the extreme problems of the Wiener indices of general graphs, and the Hosoya polynomials of the capped nanotubes. We connect the Wiener index with some well-known graph-theoretical parameters such as connectivity, edge-connectivity, chromatic number and clique number. We characterize the graphs with a given order and connectivity (or chromatic number) and with minimum Wiener index, and the graphs with a given order and clique number and with minimum Wiener index or maximum Wiener index. For the capped nanotubes, since the diversity and the irregularity of the caps, and the distances of pairs of vertices in nanotube may be changed after adding caps, the calculating of the Hosoya polynomials of the capped nanotubes is much more difficult than the open nanotubes. We study the area in a nanotube in which the distances of pairs of vertices may be changed after adding caps, and divide the capped nanotube into three parts so that any two vertices in a same part have same distance in both the part and whole capped nanotube. Base on the Hosoya polynomials of every part and the distances of pairs of vertices in different parts, we give a general method for calculating Hosoya polynomials of zig-zag capped nanotubes and armchair capped nanotubes.

The main results of the paper are as follows:

1. The extreme problems of the Wiener indices of general graphs.

We prove that among all the graphs with n vertices and connectivity k (resp. edge connectivity k), the Wiener index is minimized by the graph $G[1, k, n - k - 1]$; among all the graphs with n vertices and chromatic number k , the Wiener index is minimized by the graph $T_{k,n}$, and among all graphs with n vertices and clique number k , the Wiener index is minimized by the graph $T_{k,n}$ and is maximized by the graph $K_k \cdot P_{n-k}$, where the definitions of $G[1, k, n - k - 1]$, $T_{k,n}$, $K_k \cdot P_{n-k}$ see §2.1.

2. Hosoya polynomials of the capped zig-zag nanotubes.

In order to calculate Hosoya polynomials of the capped zig-zag nanotubes, we first prove that if $t \geq \lceil \frac{m+2}{2} \rceil$, then any two vertices on the cycle C_t in $T(p, q)$ have same distance in both C_t and $T(p, q)[C, D]$, where $m = \max\{d_{B(C)}(v_i, v_j) - d_C(v_i, v_j) \mid v_i, v_j \in V(B(C))\} \geq 0$. Then we expand the caps C and D of zig-zag nanotubes to the caps C^* and D^* to get the associated capped zig-zag nanotube $T(p, q^*)[C^*, D^*]$. We divide the capped zig-zag nanotube into three parts C^* , D^* , and $T(p, q^* - 2)$ so that any two vertices in a part have same distance in both the part and $T(p, q^*)[C^*, D^*]$. We give a general method for calculating Hosoya polynomials of capped zig-zag nanotubes. As an application, the Hosoya polynomials of two capped zig-zag nanotubes are deduced.

3. Hosoya polynomials of the capped armchair nanotubes.

Because of the different structure of capped zig-zag nanotubes and capped armchair nanotubes, it is more difficult to calculate Hosoya polynomials of capped armchair nanotubes. Similarly, we first prove that if $q - 1 - \lceil \frac{1}{2}(m_D + p - r(m_D) + \delta_{r(m_D)}) \rceil \geq t \geq \lceil \frac{1}{2}(m_C + p - r(m_C) + \delta_{r(m_C)}) \rceil$, then any two vertices in the layer L_t in $T_A(p, q)$ have same distance in both $T_A(p, q)$ and $T_A(p, q)[C, D]$, where $m_C = \max\{d_{B(C)}(v_i, v_j) - d_C(v_i, v_j) \mid v_i, v_j \in V_a(C)\} > 0$, $m_D = \max\{d_{B(D)}(v_i, v_j) - d_D(v_i, v_j) \mid v_i, v_j \in V_a(D)\} > 0$, $\delta_k = 1$ if k is odd and $\delta_k = 0$ if k is even. Then we expand the caps C and D of the capped armchair nanotube to the caps C^* and D^* to get the associated capped armchair nanotube $T_A(p, q^*)[C^*, D^*]$. We divide the capped armchair nanotube into three parts C^* , D^* , and $T_A(p, q^* - 2)$ so that any two vertices in a part have same distance in both the part and $T_A(p, q^*)[C^*, D^*]$, and then give a general method for calculating Hosoya polynomials of capped armchair nanotubes. As an application, the Hosoya polynomials of two capped zig-zag nanotubes are deduced.

Key Words: Wiener index, Hosoya polynomial, capped zig-zag nanotubes, capped armchair nanotubes.

目 录

摘 要	I
Abstract	IV
第一章 序言	
§1.1 背景与相关问题及研究进展	1
§1.2 本文主要结果	9
第二章 Wiener 指数的若干极值问题	
§2.1 引言	16
§2.2 Wiener 指数的若干极值问题	18
第三章 锯齿型戴帽纳米管的 Hosoya 多项式	
§3.1 引言	22
§3.2 锯齿型戴帽纳米管的 Hosoya 多项式	25
§3.3 应用	31
第四章 扶手型戴帽纳米管的 Hosoya 多项式	
§4.1 引言	36
§4.2 扶手型戴帽纳米管的 Hosoya 多项式	39
§4.3 应用	48
参考文献	53
作者在攻读博士学位期间完成的有关学术论文	62
致 谢	63

Contents

Abstract (in Chinese)	I
Abstract (in English)	IV
Chapter 1 Introduction	
§1.1 Some background and progress of the research	1
§1.2 Main results	9
Chapter 2 On the extremal Wiener indices of graphs	
§2.1 Introduction	16
§2.2 On the extremal Wiener indices of some graphs	18
Chapter 3 Hosoya polynomials of the capped zig-zag nanotubes	
§3.1 Introduction	22
§3.2 Hosoya polynomials of the capped zig-zag nanotubes	25
§3.3 Application	30
Chapter 4 Hosoya polynomials of the capped armchair nanotubes	
§4.1 Introduction	36
§4.2 Hosoya polynomials of the capped armchair nanotubes	38
§4.3 Application	48
References	53
Major Academic Achievements	62
Acknowledgement	63

第一章 序 言

§1.1 背景与相关问题及研究进展

分子拓扑指数是定义在化合物分子图上的数值不变量, 它与相应化合物的物理、化学和生物性质密切相关, 因而被广泛应用于确定化合物的“量子结构性质关系 quantitative structure-property relations (QSPR)”和“量子结构活性关系 quantitative structure-activity relations (QSAR)”, 进而用于预测新的化合物的物理、化学和生物性质. 与实际测量化合物的各种性质相比, 计算就显得比较简单, 因此在过去二十年里, 分子拓扑指数在 QSPA 和 QSAR 中的应用已经赢得物理化学、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 (参见已出版的专著 [9-13]).

Wiener 指数是最早被引入的分子拓扑指数. 1947 年, 在题为“从结构上决定链烷沸点”的文章中, 物理化学家 Harry Wiener [7] 介绍了一个依赖于链烷的分子图 (即, 一棵树) 的值 W , 后来被称为 Wiener 指数, 并且给出了 W 与链烷沸点之间的一个漂亮关系式, 即, 用下面公式来估计链烷的沸点 (bp):

$$bp = \alpha W + \beta P + \gamma$$

这里 α, β , 和 γ 为经验常数, P 为极性数 (polarity number), 即, 分子图中距离为 3 的顶点对的数目. Wiener 随后也证明 W 与有机化合物的其它物理化学性质, 如, 分子体积, 折射指数, 蒸发所需的热量等性质有关. 比较著名的分子拓扑指数还有 Randić 指数, Zagreb 指数, Hosoya 指数等等. 有关这些参数的化学应用和数学性质, 可看文献 [16-31]. 以及 MATCH Commun. Math. Comput. Chem. [14] 与 Discrete Appl. Math. [15] 的两个专辑. Wiener 指数在 QSPA 和 QSAR 模型中的成功应用已经刺激了基于图中距离的拓扑指数的发展. 其中包括 Harary 指数, hyper-Wiener 指数, Schultz 指数, 改进的 Schultz 指数, 广义的 Wiener 指数, Kirchhoff 指数等.

Wiener 指数研究的两个密切相关的基本问题是: (a) Wiener 指数与图的结构的关系; (b) 怎样有效地计算 Wiener 指数, 尤其是在不用计算机的情况下 (即所谓的“纸笔方法”).

上述问题所取得的显著的进展是有关树与六角系统的 Wiener 指数研究成果。Dorbrynin 与 Gutman 等人 [16,17] 分别对有关树与六角系统方面的已有结论、猜想及未解决的问题做了综述.

在某个给定的图类中找出具有极端 Wiener 指数的图的问题, 在化学应用和数学上都有很大的意义, 并且已经有了许多的结果 [23-32]. 文献 [23-28] 所考虑的图类是树, 而文献 [29-32] 所考虑的图类是所有的连通图.

确定具有最大和最小 Wiener 指数的图的研究进展简述如下:

1. Entringer 等人 [19] 证明在给定顶点数 n 的树中, Wiener 指数最大的树是路 P_n , 而 Wiener 指数最小的树是星图 S_n .

2. Šoltés [?] 确定了在给定顶点数和边数的连通图中 Wiener 指数的界.

3. 在给定 n 个顶点和给定最大度 Δ 的树中, Shu-Chung Liu [?] 确定了具有最小 Wiener 指数的是 $D_{n,\Delta}$. 一个顶点数为 n 最大度为 Δ 的树被称为 Dendrimer (记为 $D_{n,\Delta}$), 当它被定义为如下: $D_{1,\Delta}$ 是由标号为 1 的单点组成的树, 树 $D_{n,\Delta}$ 的顶点集为 $\{1, 2, \dots, n\}$, 它是在树 $D_{n-1,\Delta}$ 的标号最小且度 $< \Delta$ 的那个点上连一个标号为 n 的悬挂点所得到的树. Fischermann 等人 [?] 较晚也独立证明了同样的结论.

4. Fischermann 等人在 [?] 中证明了在顶点度不是 1 就是 $\Delta (n \equiv 2 \pmod{\Delta - 1})$ 的图中, 具有最大 Wiener 指数的图是删掉 1 度点后所得的图是一条路的图.

5. 给定顶点数和悬挂点数的树中, 具有最大 Wiener 指数的树由 Shi [?] 和 Entringer [?] 先后独立确定, 具有最小 Wiener 指数的树由 Burns 和 Entringer [?] 给出.

6. Dankelmann [?] 证明了, 对给定顶点数 n 和独立数 $\alpha (2 \leq \alpha \leq n - 1)$ 的图 G , 有 $W(G) \leq W(G_{(n,\alpha)})$, 其中 $G_{(n,\alpha)}$ 是这样的图:

(a) 若 $1 \leq \alpha \leq 2$, 设 G_1, G_2 是顶点数分别为 $n_1 = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor - k + 1, n_2 = \lceil \frac{n}{2} \rceil - k + 1$ 的完全图, 将路 P_{2k-2} 的两个端点分别与 G_1, G_2 中的每个顶点相连所得的图记为 $G_{n,\alpha}$.

(b) 若 $2 \leq \alpha \leq n - 1$, 设 G_1, G_2 是顶点数分别为 $n_1 = k - \lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor, n_2 = k - \lceil \frac{n-1}{2} \rceil$ 的空图, 将路 $P_{2n-2k-1}$ 的两个端点分别与 G_1, G_2 中的每个点相

连所得的图记为 $G_{n,\alpha}$.

7. 在 Dankelmann 的同一篇文章中作为以上结论 6 的推论: 在给定顶点数 $n(n > 4)$ 和匹配数 $\beta > 1$ (显然 $\beta \geq \frac{1}{2}n$) 的连通图 G 中, $W(G) \geq W(\tilde{G}_{n,\beta})$, 其中 $\tilde{G}_{n,\beta}$ 是这样的图: 设 G_1, G_2 是顶点数分别为 $n_1 = \lceil \frac{n+1}{2} \rceil - k, n_2 = \lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor - k$ 的两个空图, 将 P_{2k-1} 的两个端点 v_1, v_2 分别和 G_1, G_2 中所有顶点相连, 所得的图为 $\tilde{G}_{n,\beta}$.

对一般的图, J. Plesnik[?] 确定了 n 个顶点的直径为 d 的图类的 Wiener 指数的下界, 并证明了给定 n 个顶点的所有 2- 连通图中, 圈 C_n 的 Wiener 指数最大. 在所有阶为 n 且直径为 d 的连通图中, Plesnik[39] 得到了 W 最小的图 (不唯一). 当 $d < n - 1$ 时, 它们是含圈图. 令 $\mathcal{G}_{n,\alpha} (\mathcal{G}(n, \beta))$ 表示由所有阶为 n 且独立数为 α (匹配数为 β) 的连通图所构成的集合. Dankelmann[?, ?] 给出了 $\mathcal{G}_{n,\alpha}$ 与 $\mathcal{G}(n, \beta)$ 中平均距离 (等价于 Wiener 指数) 最小与最大的图. 具体结论如下: 在 $\mathcal{G}_{n,\alpha}$ 中平均距离最小的图为 $K_{n-\alpha} \vee \alpha K_1 (1 \leq \alpha \leq n - 1)$, 平均距离最大的图为 $G_{n,\alpha}$ (当 $(2 \leq \alpha \leq \frac{n}{2})$) 或 $D(n, \lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor - \beta, \lceil \frac{n+1}{2} \rceil - \beta$ (当 $\frac{n}{2} \leq \alpha \leq n - 1)$). 在 $\mathcal{G}(n, \beta)$ 中平均距离最小的图为 $K_\beta \vee (n - \beta) K_1$ (当 $1 \leq \beta \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$) 或 K_n (当 $\beta \geq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$), 平均距离最大的图为 $D(n, \lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor - \beta, \lceil \frac{n+1}{2} \rceil - \beta$ (当 $n > 1, \beta > 1$)).

从已经有的这么多的关于 Wiener 指数的极值问题的研究中, 我们发现对一般图的研究结果较少, 我们将对一般图的 Wiener 指数的极值问题的进行深入研究.

数学上的计数多项式的概念最早由 Polya 在 1936 年引入到化学中来的, 直到上个世纪七十年代, 才引起化学家的注意. 不同计数多项式可以被应用到不同的化学领域. 例如, 分子图特征多项式的谱与分子轨道的能级相对应, 通过对特征多项式的分析可以更好理解非饱和碳氢化合物全局电子结构. 由 Farrell[?] 提出的匹配多项式可以用来分析和讨论多圈碳氢化合物的六隅体的刻画 (有些文献中称此多项式为参考多项式 [40] 或无圈多项式 [41]). 由 Hosoya 和 Yamaguch[?] 提出芳香烃的碳氢化合物上六隅体多项式对于分析化合物中哪些芳香族六隅体能够加强整个分子的稳定性是至关重要的.

1988 年日本化学家 Haruo Hosoya [?] 引入了关于图距离分布的生成函数, 称为 Wiener 多项式 (Hosoya 多项式). 它能够充分地体现分子图中距离分布情况. Wiener 指数很容易由 Wiener 多项式得到. 正如 Gutman 等人文章 [?] 中

所说: “Hosoya 多项式中包含的关于图中距离的信息要比至今提出的任何一个基于图中距离的拓扑指数所含信息量多得多”. 因此, 致力于这方面的研究的文献也很丰富, 理论方面的研究见 [46,47], 计算方面的研究见 [48-55]. 此外, I. Gutman [?] 和叶永南 [?] 引入了基于图中距离和顶点的度的多项式族. 对 Hosoya 多项式的研究, 由于起步较晚, 并且比相关拓扑指数的研究困难, 目前只有不多几篇文章在国际杂志上发表. 台湾著名的图论专家叶永南等人分别于 1996 年 [?] 和 2004 年 [?] 给出了一类高度对称的树和几类较规则化学图上的 Hosoya 多项式的公式, 2007 年 [?] 给出了复合图、线图、剖分图、全图与原图的 Hosoya 多项式之间关系; 著名数学化学家 I.Gutman 于 2001 年给出了几类具有周期性的苯链的 Hosoya 多项式的公式; 东欧化学家 M.V.Diudea 于 2002 年通过计算机演绎出一类非常对称的环面六角系统的 Hosoya 多项式的公式; 徐守军给出了开口纳米管 [?, ?] 和苯链上的 Hosoya 多项式和广义 Hosoya 多项式的公式, 以及它们的系数分布等性质.

下面列出几个已知的结论:

定理 1.1 [?]. 令 $K_n, K_{m,n}, P_n, W_n$, 和 C_n 为完全图、完全图二部图、路、轮和圈. P 表示 Petersen 图. 以下给出这些图的 Wiener 多项式:

1. $W(K_n; q) = \binom{n}{2} q.$
2. $W(K_{m,n}; q) = mnq + \left[\binom{m}{2} + \binom{n}{2} \right] q^2.$
3. $W(W_n, q) = (2n - 2)q + \frac{(n-1)(n-4)}{2} q^2$
4. $W(P; q) = 15q + 30q^2.$
5. $W(P_n, q) = (n - 1)q + (n - 2)q^2 + \cdots + q^{n-1}.$
6. $W(C_{2n}, q) = 2n(q + q^2 + \cdots + q^{n-1}) + nq^n.$
7. $W(C_{2n+1}, q) = (2n + 1)(q + q^2 + \cdots + q^{n-1} + q^n).$

给定图 $G_1 = (V_1, E_1)$ 和 $G_2 = (V_2, E_2)$, 且对 $i = 1, 2, |V_i| = n_i, |E_i| = k_i$, 叶永南等人 [?] 对图的若干运算给出了相应的 Wiener 多项式:

1. 图的联 $G_1 + G_2$: $V(G_1 + G_2) = V_1 \cup V_2, E(G_1 + G_2) = E_1 \cup E_2 \cup \{uv :$

$u \in V_1, v \in V_2\}$

以下五种情形顶点集总是 $V_1 \times V_2$.

2. 卡氏积 $G_1 \times G_2$: $E(G_1 \times G_2) = \{(u_1, u_2)(v_1, v_2,) : u_1v_1 \in E_1, u_2 = v_2, \text{ or } u_2v_2 \in E_2 \text{ and } u_1 = v_1\}$.

3. 合成 $G_1[G_2]$: $E(G_1[G_2]) = \{(u_1, u_2)(v_1, v_2,) : u_1v_1 \in E_1, \text{ or } u_2v_2 \in E_2 \text{ and } u_1 = v_1\}$.

4. 析取 $G_1 \vee G_2$: $E(G_1 \vee G_2) = \{(u_1, u_2)(v_1, v_2,) : u_1v_1 \in E_1, \text{ or } u_2v_2 \in E_2 \text{ or both}\}$.

5. 对称差 $G_1 \oplus G_2$: $E(G_1 \oplus G_2) = \{(u_1, u_2)(v_1, v_2,) : u_1v_1 \in E_1, \text{ or } u_2v_2 \in E_2, \text{ but not both}\}$.

6. 张量积 $G_1 \otimes G_2$: $E(G_1 \otimes G_2) = \{(u_1, u_2)(v_1, v_2,) : u_1v_1 \in E_1, \text{ or } u_2v_2 \in E_2\}$.

定理 1.2 [?]. 1. $W(G_1 + G_2, q) = (k_1 + k_2 + n_1n_2)q + (\bar{k}_1 + \bar{k}_2)q^2$

2. $\bar{W}(G_1 \times G_2; q) = \bar{W}(G_1; q)\bar{W}(G_2; q)$

3. $W(G_1[G_2], q) = n_1(k_2q + \bar{k}_2q^2) + n_2^2W(G_1)$.

4. $W(G_1 \vee G_2, q) = (n_1^2k_2 + n_2^2k_1 - 2k_1k_2)q + (n_1\bar{k}_2 + n_2\bar{k}_1 + 2\bar{k}_1\bar{k}_2)q^2$.

5. $W(G_1 \oplus G_2, q) = (n_1k_2 + n_2k_1 + 2k_1\bar{k}_2 + 2k_2\bar{k}_1)q + (n_1\bar{k}_2 + n_2\bar{k}_1 + 2k_1k_2 + 2\bar{k}_1\bar{k}_2)q^2$.

令 $L(G)$, $S(G)$, $T(G)$ 分别表示图 G 的线图, 剖分图, 全图. 一个图与它的线图、剖分图、全图的 Hosoya 多项式之间关系如下:

定理 1.3 [?]. 对一个连通图 G , 有

$$W(S(G); q) = \frac{1}{q}W(T(G); q^2) + (1 - \frac{1}{q})[W(G; q^2) + W(L(G); q^2)].$$

定理 1.4 [?]. 对一个连通图 G , 有

$$(1) W(R(G); q) = W(T(G); q) + (q - 1)W(L(G); q),$$

$$(2) W(Q(G); q) = W(T(G); q) + (q - 1)W(G; q).$$

随着 C_{60} 的发现, 人们的注意力也投向了纳米管的存在. 碳纳米管由于其准一维结构特征和众多新颖的物理性能而引起材料界的广泛关注. 第一个 (多

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库