

一类多边形随机链的 Edge-Wiener 指数*

王红勇, 姜 琴
(南华大学数理学院, 湖南 衡阳 421001)

摘 要: Edge-Wiener 指数是一种新的反映物质物理化学性质的拓扑不变量, 它与著名的 Wiener 指数有着紧密的联系。为了能比较全面地研究一类重要的多边形链的相关性质, 结合差分方程和概率论领域一些方法, 给出了此类多边形随机链 Edge-Wiener 指数的期望的具体表达式。作为应用, 找到了一类取 Edge-Wiener 指数极值的多联苯链并重新得到了一些现已发表的结果。最后, 研究了 Edge-Wiener 指数的渐近行为。

关键词: Edge-Wiener 指数; 多边形随机链; 期望

中图分类号: O174 文献标志码: A 文章编号: 0529-6579 (2015) 02-0048-03

Note on the Edge-Wiener Indices of a Class of Random Polygonal Chains

WANG Hongyong, JIANG Qin

(School of Mathematics and Physics, University of South China, Hengyang 421001, China)

Abstract: Edge-Wiener index is a new topological invariant which is used in the study of physicochemical properties of chemical compounds and is closely associated with the Wiener index. To investigate the related properties of a class of important polygon chains comprehensively, an explicit expression for the expected value of the Edge-Wiener indices of a class of random polygonal chains is given. For applications, the Polyphenyl chains which can achieve the maximum and minimum of the Edge-Wiener indices is found. And some results that have been published in recent papers are revealed. Finally the asymptotic behaviour of Edge-Wiener indices is also considered.

Key words: Edge-Wiener index; random polygonal chains; expected value

Wiener 指数是最早出现的描述化学分子性质的拓扑不变量之一, 它是由 Harold Wiener 引入的, 事实证明 Wiener 指数与物质的沸点, 汽化热等有关。正因如此, Wiener 指数引起了化学家和数学家浓厚的研究兴趣^[1-4]。而作为与 Wiener 指数联系紧密的 Edge-Wiener 指数^[5], 近几年来受到众多学者的关注。文献 [6] 讨论了图的 Edge-Wiener 指数的界, 文献 [7] 讨论了 Edge-Wiener 指数与 Gutman 指数的关系, 文献 [8] 讨论了极值多联苯链等等。本文研究一类较为常见的随机链, 我们的结果涵盖了文献 [8] 中的一些结论, 同时方法也有

所不同。

1 准备知识

设 G 是一个顶点数为 n , 边数为 m 的连通图, 它的顶点记为 $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, 边集记为 $E(G) = \{f_1, f_2, \dots, f_m\}$ 。记边 $f_i = uv$ 和边 $f_j = xy$ 的距离为 $d(f_i, f_j)$, 其定义为

$$d(f_i, f_j) = \min\{d(u, x), d(u, y), d(v, x), d(v, y)\} + 1$$

据此, 图 G 的 Edge-Wiener 指数定义为

$$W_e(G) = \sum_{i < j} d(f_i, f_j) =$$

* 收稿日期: 2014-04-17

基金项目: 湖南省自然科学基金资助项目 (14JJ6020); 衡阳市科技局资助项目 (2013KJ20); 博士启动基金资助项目 (2011XQD36); 南华大学科研平台资助项目

作者简介: 王红勇 (1982 年生), 男; 研究方向: 渐近分析、化学图论; 通讯作者: 姜琴; E-mail: sysuwhyj@aliyun.com

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m d(f_i, f_j) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m d(f_i | G)$$

其中 $d(f_i | G) = \sum_{j=1}^n d(f_i, f_j)$ 。以下，我们记一个多边形的边数为 Δ ，一个随机变量 X 的数学期望记为 $E(X)$ 。

2 主要定理及其证明

以下总假设所讨论的多边形的边数是偶数，记为 $\Delta = 2k, k \geq 2$ 。本文所考虑的多边形链可以看作是一些多边形的线性组合，要求链中任意两个多边形之间由一条边连接。图 1 表示由一个和两个多边形所组成的链，更一般地，个数为 n 的多边形链 C_n 可以看作是由个数为 $n-1$ 的多边形链 C_{n-1} 再加一个多边形所构成（图 2）。记多边形个数为 n 的随机链为 $R_n (n > 2)$ ，它可以通过逐个增加多边形的过程得到。不难看出，由第 $m (= 1, 2, \dots, n)$ 步到第 $m+1$ 步的变化过程中，共有 k 种可能：(i) $C_m \rightarrow C_{m+1}^1$ ，设其概率为 p_1 ；(ii) $C_m \rightarrow C_{m+1}^2$ ，设其概率为 p_2 ；... (iii) $C_m \rightarrow C_{m+1}^{k-1}$ ，设其概率为 p_{k-1} ；(iii) $C_m \rightarrow C_{m+1}^k$ ，设其概率为 $1 - p_1 - p_2 - \dots - p_{k-1}$ （图 3）。这里我们假设以上多边形添加的过程是零阶马尔科夫过程，意即这些概率 p_1, p_2, \dots, p_{k-1} 均与 m 无关。

定理 2 设 $n \geq 1$ ，则有

$$E(W_e(R_{n+1})) = \frac{(2k+1)a}{6} n^3 + \frac{1}{2}(4k^3 + 8k^2 - 3k - 3)n^2 + \frac{1}{6}[18k^3 + 24k^2 - 9k - 9 - (2k+1)a]n + k^3 \quad (1)$$

其中 $a = (2k+1)[2p_1 + 3p_2 + \dots + kp_{k-1} + (k+1)(1 - p_1 - p_2 - \dots - p_{k-1})]$ 。

证明 由多边形链的构造，可知

(i) 对任意的边 $e \in C_{n-1}$ ，有 $d(f_i, e) = d(e_{n-1}, e) + i, i = 1, 2, \dots, k$ 且 $d(f_i, e) = d(e_{n-1}, e) + 2k + 1 - i, i = k + 1, k + 2, \dots, 2k$ ；

(ii) C_{n-1} 有 $\delta \triangleq 2k \cdot (n-1) + n - 2$ 条边；

(iii) $\sum_{j=1}^{2k} d(f_i, f_j) = k^2, i = 1, 2, \dots, 2k$ 。



图 1 一个和两个多边形组成的链

基于以上事实，不难得到如下关系

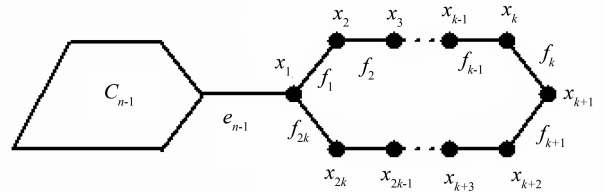


图 2 n 个多边形组成的链

Fig. 2 A polygon chain with n polygons

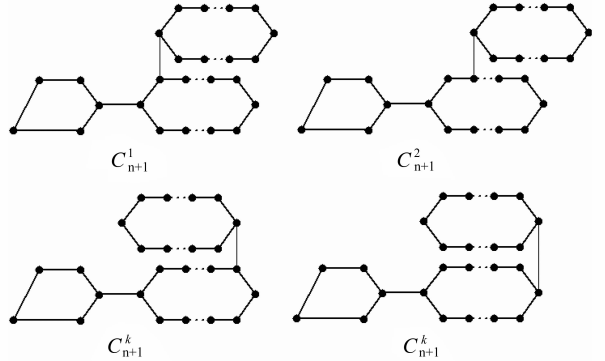


图 3 第 $n+1$ 个多边形有 k 种不同的连接方式

Fig. 3 The k types of local arrangements in polygon chains with $n+1$ polygons

$$d(f_1 | C_n) = d(f_{2k} | C_n) = d(e_{n-1} | C_{n-1}) + 1 \times \delta + k^2 + 1 \quad (2)$$

$$d(f_2 | C_n) = d(f_{2k-1} | C_n) = d(e_{n-1} | C_{n-1}) + 2 \times \delta + k^2 + 2 \quad (3)$$

$$d(f_{k-1} | C_n) = d(f_{k+2} | C_n) = d(e_{n-1} | C_{n-1}) + (k-1) \times \delta + k^2 + k - 1 \quad (4)$$

$$d(f_k | C_n) = d(f_{k+1} | C_n) = d(e_{n-1} | C_{n-1}) + k \times \delta + k^2 + k \quad (5)$$

$$d(e_{n-1} | C_n) = d(e_{n-1} | C_{n-1}) + k^2 + k \quad (6)$$

及

$$W_e(C_n) = W_e(C_{n-1}) + (2k+1) \cdot d(e_{n-1} | C_{n-1}) + (k+1)k \cdot \delta + k^3 + k^2 + k \quad (7)$$

边值条件为 $W_e(C_0) = d(f_0 | C_0) = 0$ 。在 (7) 式中用 $n+1$ 替换 n ，有

$$W_e(C_{n+1}) = W_e(C_n) + (2k+1) \cdot d(e_n | C_n) + (k^2 + k)(2k+1)n + k^3 \quad (8)$$

对于随机链 R_n 而言， $d(e_n | R_n)$ 是随机变量，记它的数学期望为 $U_n = E(d(e_n | R_n))$ 。考虑到链的对称性，共有 k 种情形需要讨论。

情形 1, $C_n \rightarrow C_{n+1}^1$ ，此时边 e_n 接于顶点 x_2 或

Fig. 1 The polygon chains with one and two polygons

x_{2k} , 而 $d(e_n | C_n)$ 由 (2) 式给出;

情形 2, $C_n \rightarrow C_{n+1}^2$, 此时边 e_n 接于顶点 x_3 或 x_{2k-1} , 而 $d(e_n | C_n)$ 由 (3) 式给出;

⋮

情形 $k-1$, $C_n \rightarrow C_{n+1}^{k-1}$, 此时边 e_n 接于顶点 x_k 或 x_{k+2} , 而 $d(e_n | C_n)$ 由 (4) 式给出;

情形 k , $C_n \rightarrow C_{n+1}^k$, 此时边 e_n 接于顶点 x_{k+1} , 而 $d(e_n | C_n)$ 由 (5) 式给出。

若以上 k 种情形发生的概率分别为 p_1, p_2, \dots, p_{k-1} 和 $1 - p_1 - p_2 - \dots - p_{k-1}$, 则

$$U_n = p_1 [d(e_{n-1} | R_{n-1}) + 2 \cdot \delta + k^2 + 2k - 1] + p_2 [d(e_{n-1} | R_{n-1}) + 3 \cdot \delta + k^2 + 2k] + \dots + p_{k-1} [d(e_{n-1} | R_{n-1}) + (k-1) \cdot \delta + k^2 + 3k - 3] + (1 - p_1 - p_2 - \dots - p_{k-1}) [d(e_{n-1} | R_{n-1}) + k \cdot \delta + k^2 + 3k - 2] \quad (9)$$

对 (9) 式两边求期望, 则有

$$U_n = U_{n-1} + an + b \quad (10)$$

其中

$$a = (2k+1)[2p_1 + 3p_2 + \dots + kp_{k-1} + (k+1)(1 - p_1 - p_2 - \dots - p_{k-1})],$$

$$b = k^2 + 2k - 3 - a$$

初始条件为 $U_0 = 0$ 。结合 (10) 式, 可得

$$U_n = \frac{a}{2}n^2 + (\frac{a}{2} + b)n \quad (11)$$

将 (9) 式中的链换成相应的随机链, 并代入 (12) 式, 有

$$E(W_e(R_{n+1})) = E(W_e(R_n)) + \frac{(2k+1)a}{2}n^2 + [4k^3 + 8k^2 - 3k - 3 - \frac{(2k+1)a}{2}]n + k^3$$

初始条件为 $E(W_e(R_0)) = 0$, 经过化简, 可以证明 (1) 式成立。

3 应用

本节我们例举一些 (1) 式的应用。

推论 1 对固定的 $n \geq 2$, 当 $p_1 = p_2 = \dots = p_{k-1} = 0$ 时, $E(W_e(R_{n+1}))$ 取得最大值, 当 $p_1 = 1, p_2 = \dots = p_{k-1} = 0$ 时, $E(W_e(R_{n+1}))$ 取得最小值。

证明 经过简单的运算, 由定理 1 可知

$$E(W_e(R_{n+1})) = \frac{1}{2}(4k^3 + 8k^2 - 3k - 3)n^2 + \frac{1}{2}(6k^3 + 8k^2 - 3k - 3)n + k^3 +$$

$$\frac{(2k+1)an}{6}(n^2 - 1) \quad (12)$$

这里 $a = (2k+1)[2p_1 + 3p_2 + \dots + kp_{k-1} + (k+1)(1 - p_1 - p_2 - \dots - p_{k-1})]$, (12) 的最值取决于最后一项, 即取决于 a 的取值。显然, a 分别在 $p_1 = p_2 = \dots = p_{k-1} = 0$ 和 $p_1 = 1, p_2 = \dots = p_{k-1} = 0$ 时取得它的最大值和最小值, 推论得证。

特别地, 取 $k = 3$, 即 $\Delta = 6$ 时, 我们有

$$E(W_e(R_{n+1})) = 84n^2 + 111n + 27 + \frac{7an}{6}(n^2 - 1) \quad (13)$$

此时, $a = (2k+1)[2p_1 + 3p_2 + (k+1)(1 - p_1 - p_2)]$ 。当 $p_1 = p_2 = 0$ 时, 有

$$E(W_e(R_{n+1})) = \frac{98}{3}n^3 + 84n^2 + \frac{235}{3}n + 27 \quad (14)$$

上式和文献 [8] 中定理 3.2 的结果是一致的, 他们的定理 3.3, 3.4 也可以用我们的方法得到。最后, 我们给出 $E(W_e(R_{n+1}))$ 的渐近行为。

推论 2 当 $n \rightarrow \infty$ 时, 有 $E(W_e(R_{n+1})) \sim \frac{(2k+1)a}{6}n^3$ 。

参考文献:

- [1] GUTMAN I, KENNEDY J W, QUINTAS L V. Wiener numbers of random benzenoid chains [J]. Chemical Physics Letters, 1990, 173: 403-408.
- [2] YANG W L, ZHANG F J. Wiener index in random polyphenyl chains [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2012, 68: 371-376.
- [3] WANG H Y, QIN J, GUTMAN I. Wiener numbers of random pentagonal chains [J]. Iranian Journal of Mathematical Chemistry, 2013, 4 (1): 59-76.
- [4] CHEN A L, ZHANG F J. Wiener index and perfect matchings in random phenylene chains [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2009, 61: 623-630.
- [5] IRANMANESH A, GUTMAN I, KHORMALI O, et al. The edge versions of the Wiener index [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2009, 61: 663-672.
- [6] DANKELMANN P, GUTMAN I, MUKWEMBI S, et al. The edge-Wiener index of a graph [J]. Discrete Mathematics, 2009, 309: 3452-3457.
- [7] KNOR M, POTOČNIK P, ŠKREKOVSKI R. Relationship between the edge-Wiener index and the Gutman index of a graph [J]. Discrete Applied Mathematics, 2014, 167: 197-201.
- [8] DOU Y, BIAN H, GAO H P, et al. The polyphenyl chains with extremal edge-Wiener indices [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2010, 64: 757-766.