

# The Modified Wiener Index, Calculation of Harary Exponent and Multiplicative Wiener Index of Jahangir Graphs

Jing Zhang, Wei Gao

School of Information, Yunnan Normal University, Kunming Yunnan  
Email: 568956116@qq.com

Received: Apr. 29<sup>th</sup>, 2016; accepted: May 15<sup>th</sup>, 2016; published: May 20<sup>th</sup>, 2016

Copyright © 2016 by authors and Hans Publishers Inc.  
This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).  
<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

---

## Abstract

Compounds, materials and drugs can be represented as a graph model, where the atom is represented by a vertex and a chemical bond between atoms is expressed by an edge. The topological indices defined on the molecular graph can help researchers understand the chemical, pharmacological characteristics of the chemical structure. In this paper, we determine the modified Wiener index, Hararyindex and multiplicative Wiener index of Jahangir graph  $J_{3,m}$ .

## Keywords

Wiener Index, Modified Wiener Index, Harary Index, Multiplicative Wiener Index

---

# Jahangir图的修改的维纳指数, Harary指数和乘法维纳指数计算

张晶, 高炜

云南师范大学信息学院, 云南 昆明  
Email: 568956116@qq.com

收稿日期: 2016年4月29日; 录用日期: 2016年5月15日; 发布日期: 2016年5月20日

## 摘要

化合物、材料和药物一般可以用图模型来表示, 其中原子用顶点来表示, 原子之间的化学键用边来表示。而定义在分子图上的拓扑指数可帮助研究者了解该化学结构的化学、药理学特征。本文给出Jahangir图 $J_{3,m}$ 的修改的维纳指数, Harary指数和乘法维纳指数计算公式。

## 关键词

维纳指数, 修改的维纳指数, Harary指数, 乘法维纳指数

## 1. 引言

目前而言, 化学图论已经成为一门新兴学科, 备受国内外学者的关注[1]。近年来, 化学实验条件和生物验证技术在逐步完善, 越来越多的新物质亟需验证, 因此这需要通过大量的前期化学实验、生物检验技术等操作来对它们的物理、化学性质和生物特征进行鉴定, 与此同时也导致了从事这一研究领域的研究者的实验量的增加, 投入研究的人力、时间、实验器材、实验经费等也极为耗费。而经过研究者之前的大量实验数据证明, 化合物以及多数药物的相关分子结构与其本身的物理性质和化学性质有密不可分的关系。因此我们可以通过定义分子结构的相关指数来计算内在联系以确定物质的特性。通过此方法, 可以减少实验者的工作量, 同时也大大降低投入研究经费、实验器材的耗费, 使研究者即使不用做实验也可以通过指标计算来获得物质特性。维纳指数是化学研究中经典的拓扑指数之一[2]-[4], 设 $G$ 是一个图, 用 $V(G)$ 和 $E(G)$ 来表示它的顶点集合和边集。其他具体参考[5] [6]。

近十年来, 一些重要的拓扑指数被陆续定义[7]-[10]。修改的维纳指数是原维纳指数的扩展, 定义为

$$W_\lambda(G) = \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} d(u,v)^\lambda,$$

其中 $\lambda$ 是非零实数。可见当 $\lambda=1$ 时, 修改的维纳指数即为维纳指数。

修改的超维纳指数是超维纳指数的扩展, 定义为

$$WW_\lambda(G) = \frac{1}{2} \left( \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} d(u,v)^{2\lambda} + \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} d(u,v)^\lambda \right).$$

乘法维纳指数是维纳指数的另一种表现形式, 定义为

$$\pi(G) = \prod_{\{u,v\} \subseteq V(G)} d(u,v).$$

此外, 对数乘法维纳指数定义为

$$\Pi(G) = \text{Ln} \left( \sqrt{2 \prod_{\{u,v\} \subseteq V(G)} d(u,v)} \right).$$

Harary指数是一类和维纳指数相关的指标, 定义为

$$H(G) = \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} \frac{1}{d(u,v)}.$$

对应的Harary多项式则定义为

$$H(G, x) = \sum_{\{u, v\} \subseteq V(G)} \frac{1}{d(u, v)} x^{d(u, v)}.$$

上述 Harary 指数通常称为第一类 Harary 指数, 而第二类和第三类 Harary 指数则定义为

$$H_1(G) = \sum_{\{u, v\} \subseteq V(G)} \frac{1}{d(u, v) + 1},$$

$$H_2(G) = \sum_{\{u, v\} \subseteq V(G)} \frac{1}{d(u, v) + 2}.$$

更一般地, 广义 Harary 指数则定义为

$$H_t(G) = \sum_{\{u, v\} \subseteq V(G)} \frac{1}{d(u, v) + t},$$

其中  $t$  是一个非负整数。

设  $J_{3,m}$  为 Jahangir 图 ( $\forall m \geq 3$ ) 有  $3m+1$  个和  $4m$  条边。图 1 给出  $J_{3,4}$  和  $J_{3,6}$  的示意图。

本文对  $J_{3,m}$  图进行图结构分析, 把所有顶点对根据它们之间的距离进行分类, 最后根据指数的计算公式来得到若干结果。

## 2. $J_{3,m}$ 图的相关指数计算

**定理 1:**  $J_{3,m}$  图的修改维纳指数为

$$W_\lambda(J_{3,m}) = 4m + \frac{1}{2}m(m+9) \cdot 2^\lambda + 2m(m-1) \cdot 3^\lambda + (2m-5) \cdot 4^\lambda.$$

**证明:** 对  $\forall m \geq 3$ , 从 Jahangir 图  $J_{3,m}$  的定义可知, 在图中顶点的数量为  $|V(J_{3,m})| = 2m + m + 1 = 3m + 1$ , 其中  $2m$  个顶点度为 2,  $m$  个顶点度为 3, 中心顶点  $c$  的度为  $m$ 。  $J_{3,m}$  图的边数为

$$|E(J_{3,m})| = \frac{2 \times 2m + 3 \times m + m \times 1}{2} = 4m.$$

设  $d(J_{3,m}, k)$  表示  $J_{3,m}$  中距离为  $k$  的顶点对的个数。

把 Jahangir 图中的顶点集  $V(J_{3,m})$  基于  $d_v$  划分为若干部分用  $V_2, V_3, \dots, V_m$  来表示, 得

$$V_k = \{v \in V(J_{3,m}) | d_v = k\}$$

其中

$$V_2 = \{v \in V(J_{3,m}) | d_v = 2\} \rightarrow |V_2| = 2m,$$

$$V_3 = \{v \in V(J_{3,m}) | d_v = 3\} \rightarrow |V_3| = m,$$

$$V_m = \{c \in V(J_{3,m}) | d_c = 3\} \rightarrow |V_m| = 1.$$

由此可得

$$d(J_{3,m}, 1) = 4m$$

同理可得

$$d(J_{3,m}, 2) = \frac{1}{2} [2m + 3(2m) + m(2 + (m-1))] = \frac{1}{2}(m^2 + 9m)$$

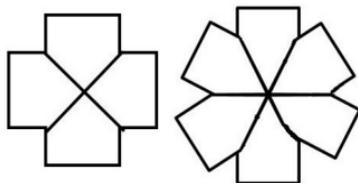


Figure 1.  $J_{3,4}$  and  $J_{3,6}$  in Jahangir graphs

图 1. Jahangir 图中  $J_{3,4}$  和  $J_{3,6}$

$$d(J_{3,m}, 3) = \frac{1}{2} [0 + 2m(2 + (m-2)) + m(2 + 2(m-3))] = 2m(m-1)$$

$$d(J_{3,m}, 4) = m(1 + 2(m-3)) = m(2m-5).$$

由以上分析可知

$$W_\lambda(J_{3,m}) = 4m \cdot 1^\lambda + \frac{1}{2}m(m+9) \cdot 2^\lambda + 2m(m-1) \cdot 3^\lambda + (2m-5) \cdot 4^\lambda.$$

类似定理 1 的证明过程, 可得如下结论:

**定理 2:**  $J_{3,m}$  图的修改超维纳指数为

$$WW_\lambda(J_{3,m}) = 4m + \frac{1}{2} \times \frac{1}{2}m(m+9)(2^\lambda + 2^{2\lambda}) + \frac{1}{2} \times 2m(m-1)(3^\lambda + 3^{2\lambda}) + \frac{1}{2} \times m(2m-5) \times (4^\lambda + 4^{2\lambda}).$$

**定理 3:**  $J_{3,m}$  图中的广义 Harary 指数为

$$H_t(J_{3,m}) = 4m \times \frac{1}{1+t} + \frac{1}{2}m(m+9) \times \frac{1}{2+t} + 2m(m-1) \times \frac{1}{3+t} + m(2m-5) \times \frac{1}{4+t}.$$

在定理 3 中取  $t = 0, 1, 2$ , 则分别得到 Harary 指数, 第二类 Harary 指数和第三类 Harary 指数如下:

$$H_1(J_{3,m}) = \frac{17}{12}m^3 + 5m - \frac{2}{3},$$

$$H_2(J_{3,m}) = \frac{2}{5}m^2 + 2m,$$

$$H_3(J_{3,m}) = \frac{103}{120}m^2 + \frac{51}{60}m.$$

**定理 4:**  $J_{3,m}$  图的乘法维纳指数为

$$\pi(J_{3,m}) = 2^{\frac{1}{2}m(m+9)} 3^{2m(m-1)} 4^{m(2m-5)}.$$

**推论 1:**  $J_{3,m}$  图的对数乘法维纳指数为

$$\Pi(J_{3,m}) = \ln \left( \sqrt{2 \left( 1^{4m} \times 2^{\frac{1}{2}m(m+9)} \times 3^{2m(m-1)} \times 4^{m(2m-5)} \right)} \right).$$

### 3. 总结

目前修改的维纳指数、Harary 指数和乘法维纳指数计算已经作为一类化学参数用来衡量分子的化学结构和化学性质, 同时也预示着化学图论在化学和数学的共同作用下成为当前一个较新的研究领域。在我看来, 随着新的化合物、药物和材料不断被发现, 采用化学实验方法及生物技术操作等方法来鉴定其

化学结构的性能、性质及用途无疑将会耗用大量人力、时间、物力以及研究经费, 且研究过程存在不可预知的困难。而运用化学图论定义指数对分子结构进行计算的方法来对新化合物的性质进行鉴定, 如此次利用修改的维纳指数, Harary 指数和乘法维纳指数来对 Jahangir 图进行图结构分析, 通过指数计算来得到相关结果。

### 参考文献 (References)

- [1] 祝宝宣. 代数图论中的若干问题[D]: [博士学位论文]. 大连: 大连理工大学, 2011.
- [2] 于玲, 叶永升. 路与圈的联图的 Wiener 指数[J]. 淮北师范大学学报(自然科学版), 2011, 32(1): 1-3.
- [3] Wiener, H. (1947) Structural Determination of Paraffin Boiling Points. *Journal of the American Chemical Society*, **69**, 17-20.
- [4] 于玲, 叶永升. 路的笛卡尔积图的 Wiener 指数[J]. 淮阴师范学院学报(自然科学版), 2012, 11(1): 13-16.
- [5] Gao, Y., Gao, W. and Liang, L. (2014) Revised Szeged Index and Revised Edge Szeged Index of Certain Special Molecular Graphs. *International Journal of Applied Physics and Mathematics*, **4**, 417-425.  
<http://dx.doi.org/10.17706/ijapm.2014.4.6.417-425>
- [6] Bondy, J.A. and Murty, S.R. (1976) Graph theory with applications. Macmillan Press, London, 1-40.  
[http://dx.doi.org/10.1007/978-1-349-03521-2\\_1](http://dx.doi.org/10.1007/978-1-349-03521-2_1)
- [7] Xi, W.F. and Gao, W. (2014) Geometric-Arithmetic Index and Zagreb Indices of Certain Special Molecular Graphs. *Journal of Advances in Chemistry*, **10**, 2254-2261.
- [8] 高云, 高炜. 修改的维纳指数和修改的超维纳指数的若干结果[J]. 生物物理学, 2015, 3(3): 59-66.
- [9] 许冬冬, 高炜. 超维纳指数的若干结果[J]. 云南师范大学学报(自然科学版), 2014, 34(5): 46-50.
- [10] Farahani, M.R. and Gao, W. (2016) On Multiplicative and Redefined Version of Zagreb Indices of  $v$ -Phenylenic Nanotubes and Nanotorus. *British Journal of Mathematics & Computer Science*, **13**, 1-8.  
<http://dx.doi.org/10.9734/BJMCS/2016/22752>