

The Maximal Wiener Index of Unicyclic Graph with Given Diameter and Order

Huimin Wang, Yuanpei Wang, Chenchen Cao, Qiang Sun*

School of Mathematical Science, Yangzhou University, Yangzhou Jiangsu
Email: *qsun1987@163.com

Received: Feb. 25th, 2020; accepted: Mar. 9th, 2020; published: Mar. 16th, 2020

Abstract

The Wiener index of a graph is one of the most very well-researched topological indices, *i.e.* graph theoretic invariants of molecular graphs. Some interesting questions remain largely unsolved despite being easy to state and comprehend. In this paper, we investigate a conjecture proposed by DelaVina and Waller [1], namely, the graphs of order $2d + 1$ and diameter d have Wiener index less or equal than the cycle of order $2d + 1$. In this paper, we proved that this conjecture is true for unicyclic graphs with vertices outside of the cycle not too many.

Keywords

Wiener Index, Unicyclic Graph, Maximum

给定直径和阶的具有最大Wiener指标的单圈图

王惠敏, 王元培, 曹陈琛, 孙 强*

扬州大学数学科学学院, 江苏 扬州
Email: *qsun1987@163.com

收稿日期: 2020年2月25日; 录用日期: 2020年3月9日; 发布日期: 2020年3月16日

摘 要

图的Wiener指标是图论中研究的比较深刻的拓扑指标之一, 结果很丰富, 同时也有许多有趣的问题没有被解决, 尽管这些问题很容易表述也很容易被理解。在这篇文章中, 我们着重研究由DelaVina和Waller [1]提出的一个猜想, 即: 点数是 $2d + 1$, 直径为 d 的图的Wiener指标都不超过点数是 $2d + 1$ 的圈的。本文证明了该猜想对于单圈且圈外顶点数不多的图是正确的。

*通讯作者。

关键词

Wiener指标, 单圈图, 最大值

Copyright © 2020 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 研究背景

1.1. 研究历史

令 $G = (V, E)$ 是一个简单的连通图。图 G 的 Wiener 指标是指图 G 中所有点对的距离和, 即

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

其中 $d_G(u,v)$ 表示 u,v 之间的距离。

Wiener 指标是由 Harold Wiener [2] 最先发现的, 用以研究烷烃沸点的一种分子拓扑指标, 它是指无环烷烃图中碳原子对之间键的数量的集合。1971 年, Hosoya 证明了 Wiener 指标等于分子图中的直径矩阵的元素总和的一半, 由此, Wiener 指标的定义被延伸到了有圈图中。

在近些年中, Wiener 指标的最大与最小问题吸引了许多学者的研究, 并有了一定的发现。Entringer, Jackson 和 Snyder [3] 在 1976 年用到了 $W(G)$ 的定义。随着有关于 Wiener 指标的深入, 更多的结果被发现 [4] [5]。在所有阶为 n 的图中, 路具有最大 Wiener 指标, 星图具有最小 Wiener 指标。有关于给定条件下图的 Wiener 指标极值问题有许多, 如: 周波教授 [6] 研究了给定点数与匹配数的图的最小 Wiener 指标。于桂海教授 [7] 刻画了给定周长的具有极大与极小 Wiener 指标的图。在这些问题中, 由 DelaVina 和 Waller [1] 提出的猜想极大地促进了 Wiener 指标的研究:

猜想 1: 阶为 $2d+1$, 直径为 $d > 2$ 的连通图 G 中, 具有最大 Wiener 指标的图是圈。

为了研究这个猜想, 我们将问题范围从连通图缩小到单圈图。在本文中, 我们将研究给定直径和阶的具有最大 Wiener 指标的单圈图。我们将证明以下定理:

定理 1: 在阶为 $2d+1$, 直径为 d , 圈的阶为 $2d+1-k$ 的单圈图 G 中, 如果 $d > \frac{(k+1)^2}{4}$, 则 $W(G) \leq W(C)$, 圈 $C = u_0 u_1 u_2 \cdots u_{2d} u_0$ 。

1.2. 术语介绍

我们简单介绍一下本文会用到的符号, 对未说明的符号请参考文献 [5]。在本文中, 我们主要研究简单的无向图 $G = (V, E)$, V, E 分别表示图的点集和边集。 $d_G(u,v)$ 表示点 u,v 之间的距离, 即连接 u,v 两点的最短路的长度。连接点 u 的边数称为 u 的度, 度为 1 的点称为悬挂点。路是由无重复的顶点和边构成的序列 $v_0, e_1, v_1, \cdots, e_k, v_k$, 对于 $1 \leq i \leq k$, 边 e_i 的顶点为 v_{i-1} 和 v_i 。如果路的顶点 $v_0 = v_k$, 则它构成圈。连通的无圈图称为树, 只有一个圈的图称为单圈图。

我们定义 $G = C_{u_0 u_1 u_2 \cdots u_{2d-k}} (T_0 T_1 T_2 \cdots T_{2d-k})$ 是阶为 $2d+1$ 的单圈图, 它有着阶为 $2d+1-k$ 的圈 $C(2d+1-k) = u_0 u_1 u_2 \cdots u_{2d-k} u_0$ 与链接在圈上的树 $T_0, T_1, \cdots, T_{2d-k}$ 。当 T_i 的阶为 0 时, T_i 不存在。

为了方便证明中的叙述, 下面我们介绍几个特殊的定义:

1.2.1. 定义 1

令 $B(n_i, l_i)$ 是阶为 n_i ，直径为 $l_i - 1$ 的扫帚树，其图形是阶为 $n_i - l_i + 3$ 的星状树，其中一条边被分割成 $l_i - 2$ 条边的路。如图 1 所示，我们将路上的顶点标为 $v_{i,1}, v_{i,2}, \dots, v_{i,l_i-1}$ ，并且顶点 v_{i,l_i-1} 是度为 $n_i - l_i + 1$ 的点。令其他与顶点 v_{i,l_i-1} 相连的悬挂点按逆时针标为 $v_{i,l_i}, v_{i,l_i+1}, \dots, v_{i,n_i}$ 。

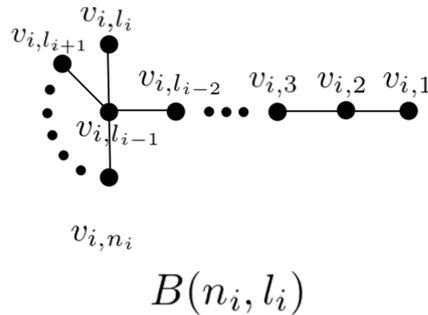


Figure 1. Definition 1- $B(n_i, l_i)$

图 1. 定义 1- $B(n_i, l_i)$

1.2.2. 定义 2

令图 H 是图 G 的子图。 x_1x_2 是图 H 的边， x_1x_3 是图 $G - H$ 的边， 则图 $H - x_1x_2 + x_1x_3$ 定义为由图 H 删去边 x_1x_2 并加上边 x_1x_3 的图。

1.2.3. 定义 3

在图 $G = (V, E)$ 中， 令 H_1 和 H_2 是图 G 的子图， 图 H'_1 和 H'_2 分别由图 H_1 和 H_2 变化而来， 则有 $G' = G - H_1 - H_2 + H'_1 + H'_2$ ， $\omega_G(H_1, H_2) = \sum_{v_i \in H_1, v_j \in H_2} d(v_i, v_j)$ 和 $\Delta W_{G'}(H_1, H_2) = \omega_{G'}(H'_1, H'_2) - \omega_G(H_1, H_2)$ 。

1.2.4. 定义 4

令 $G = C_{u_0u_1 \dots u_{2d-k}}(T_0T_1T_2 \dots T_{2d-k})$ ， 定义 $G_{d,i}(2d+1) = C_{u_0u_1 \dots u_{2d-k}}(B(n_0, l_0), B(n_1, l_1), \dots, B(n_{2d-k}, l_{2d-k}))$ 是 $T_0, T_1, \dots, T_{2d-k}$ 均为扫帚树 $B(n_0, l_0), B(n_1, l_1), \dots, B(n_{2d-k}, l_{2d-k})$ ， 且 $B(n_j, l_j)$ 与圈 C 之间以边 $v_{j,1}u_j (0 \leq j \leq 2d-k)$ 相连的图 G ， 其中 d 为图的直径， $2d+1$ 为图的阶， i 为图中所有阶不为 0 的扫帚树的总数。

1.2.5. 定义 5

在图 $G = G_{d,i}(2d+1) = C_{u_0u_1 \dots u_{2d-k}}(B(n_0, l_0), B(n_1, l_1), \dots, B(n_{2d-k}, l_{2d-k}))$ 中， 若扫帚树 $B(n_i, l_i)$ 和 $B(n_j, l_j) (i \neq j)$ 满足 $l_i + l_j + d_G(u_i, u_j) = d$ ， 则令 $P(i, j) = \{B(n_i, l_i), B(n_j, l_j)\}$ 。

2. 引理和结论

为了证明定理 1， 我们首先引入几个引理。

2.1. 引理 1

扫帚树 $B(n_i, l_i)$ 的 Wiener 指标为：

$$W(B(n_i, l_i)) = \sum_{j=1}^{l_i-1} j(l_i - j - 1) + 2C_{n_i-l_i+1}^2 + (n_i - l_i + 1) \sum_{i=1}^{l_i-1} j$$

2.2. 引理 2

令图 G 为一个阶为 $2d+1$ ，直径为 d 的单圈图，圈 C 是图 G 的一个阶为 $2d+1-k$ 的子图。如图 2，令 v_1 为图 $G-C$ 的一个度大于等于 3 的顶点，同时与 v_2 和 v_3 相连，且有 v_2 和 v_3 到圈 C 的直径是 v_1 到圈 C 的直径加 1，即 $d(C, v_2) = d(C, v_3) = d(C, v_1) + 1$ 。保证图 G 的直径不变，将图 G 变化为图 $G' = G - v_1v_2 + v_2v_3$ 。当 $d > k$ 时，有 $W(G') \geq W(G)$ 。

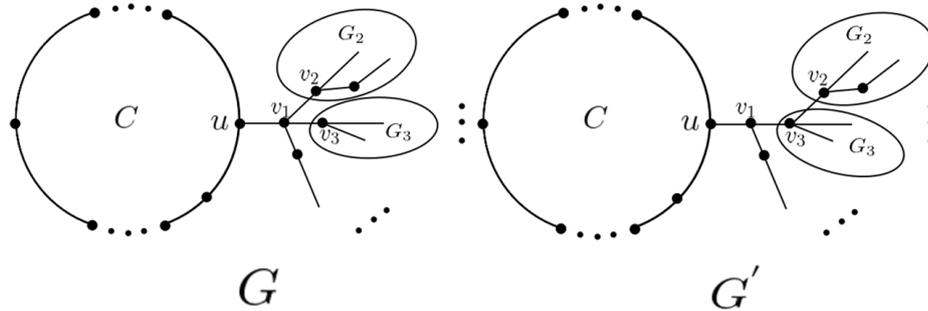


Figure 2. Lemma 1
图 2. 引理 1

证明：图 G_1, G_2, G_3 都是图 G 删去边 v_1v_2 和 v_1v_3 得到的部分，其中 $v_1 \in G_1, v_2 \in G_2, v_3 \in G_3$ 并且 $C \in G_1$ 。保证图 G 的直径不变，令 $G' = G - v_1v_2 + v_2v_3$ ，则有 $\Delta W = W(G') - W(G) = n(G_2)[n(G_1) - n(G_3)]$ 。

当 $d > k$ 时，有 $n(G_1) > n(G_3)$ ，则 $\Delta W > 0$ ，即 $W(G') \geq W(G)$ 。

2.3. 引理 3

令图 G 为一个阶为 $2d+1$ ，直径为 d 的单圈图，圈 C 是图 G 的一个阶为 $2d+1-k$ 的子图。如图 3， H_0 是图 $G-C$ 的子图，且扫帚树 $B(n_i, l_i), B(n_j, l_j)$ 是图 G 的子图且链接于同一个顶点 v 。 $l_i = l_j, n_i - n_j > 0$ 且 $v \notin B(n_i, l_i), v \notin B(n_j, l_j)$ 。令 $G' = G - B(n_i, l_i) - B(n_j, l_j) + B(n_i - 1, l_i) + B(n_j + 1, l_j)$ ，当 $d > k$ 时，有 $W(G') \geq W(G)$ 。

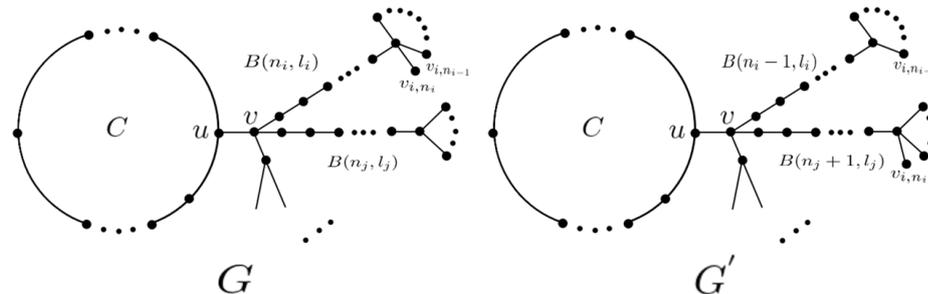


Figure 3. Lemma 3
图 3. 引理 3

证明：由条件可知： $\Delta W = W(G') - W(G) = (2l_i - 2)(n_i - 1 - n_j)$ 。
明显当 $n_i - n_j > 0$ 时， $\Delta W \geq 0$ ，即 $W(G') \geq W(G)$ 。

2.4. 引理 4

令图 G 为一个阶为 $2d+1$ ，直径为 d 的单圈图，圈 C 是图 G 的一个阶为 $2d+1-k$ 的子图。如图 4， H_0 是图 $G-C$ 的子图，且扫帚树 $B(n_i, l_i), B(n_j, l_j)$ 是图 G 的子图且链接于同一个顶点 v 。 $l_i = l_j, n_i - n_j = 0$ 或 1，

且 $v \notin B(n_i, l_i), B(n_j, l_j)$ 。令 $G' = G - B(n_i, l_i) - B(n_j, l_j) + B(n_i + n_j, l_i)$ ，当 $d > \frac{(k+1)^2}{4}$ 时，有 $W(G') > W(G)$ 。

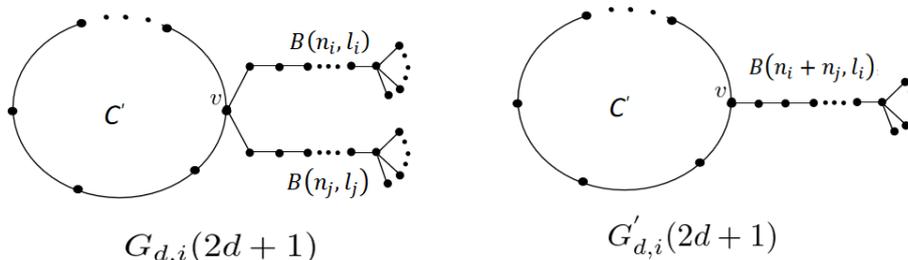


Figure 4. Lemma 4
图 4. 引理 4

证明：令 $C' = G - B(n_i, l_i) - B(n_j, l_j)$

$$\begin{aligned} \Delta W &= W(G') - W(G) \\ &= [W(C') + \omega_G(B(n_i + n_j, l_i)) + \omega_G(B(n_i + n_j, l_i), C')] \\ &\quad - [W(C') + W(B(n_i, l_i)) + W(B(n_j, l_j)) + \omega_G(B(n_i, l_i), B(n_j, l_j)) \\ &\quad + \omega_G(B(n_i, l_i), C') + \omega_G(B(n_j, l_j), C')] \\ &= [W(C') + \omega_G(B(n_i + n_j, l_i)) + \omega_G(B(n_i + n_j, l_i), C')] \\ &\quad - [W(C') + W(B(n_i, l_i)) + W(B(n_j, l_j)) + \omega_G(B(n_i, l_i), B(n_j, l_j)) \\ &\quad + \omega_G(B(n_i, l_i), C') + \omega_G(B(n_j, l_j), C')] \\ &= [W(B(n_i + n_j, l_i)) - W(B(n_i, l_i)) - W(B(n_j, l_j)) - \omega_G(B(n_i, l_i), B(n_j, l_j))] \\ &\quad + [\omega_G(B(n_i + n_j, l_i), C') - \omega_G(B(n_i, l_i), C') - \omega_G(B(n_j, l_j), C')] \\ &= [W(B(n_i + n_j, l_i)) - W(B(n_i, l_i)) - W(B(n_j, l_j)) - (n_i \omega_j + n_j \omega_i)] \\ &\quad + n(C') \sum_{k=1}^{l_i-1} k \end{aligned}$$

其中 $\omega_i = d_{B(n_i, l_i)}(v) = \sum_{k=1}^{l_i} k + l_i(n_i - l_i)$ 。

当 $l_i = l_j = l$ ， $n_i = n_j = n$ 时， $2n + n(C') = 2d + 1$ ，则有

$$\Delta W = \frac{1}{3}(l-1)(3dl + l^2 - 2l - 6n^2) > \frac{1}{3}(6d - 6n^2) > 2 \times \frac{(k+1)^2}{4} - 2 \times \left(\frac{k}{2}\right)^2 = k + \frac{1}{2} > 0。所以，当 $d > \frac{(k+1)^2}{4}$ 时， $W(G') > W(G)$ 。$$

当 $l_i = l_j = l$ ， $n_i = n_j + 1 = n + 1$ 时， $2n + 1 + n(C') = 2d + 1$ 时，则有

$$\begin{aligned} \Delta W &= (l-1) \left(\frac{1}{3}l^2 - \frac{1}{6}l + dl - 2n^2 - 2n \right) - 2 > \frac{1}{3} \times 2^2 - \frac{1}{6} \times 2 + 2d - 2n^2 - 2n - 2 \\ &> -2 \times \left(\frac{k-1}{2}\right)^2 - 2 \times \frac{k-1}{2} + 2 \times \frac{(k+1)^2}{4} - 1 = k > 0 \end{aligned}$$

。所以，当 $d > \frac{(k+1)^2}{4}$ 时， $W(G') > W(G)$ 。

2.5. 结论 1 (扫帚变换)

令图 G 为一个阶为 $2d+1$, 直径为 d 的单圈图, 圈 C 是图 G 的一个阶为 $2d+1-k$ 的子图。通过以下步骤可以将单圈图 G 中链接在圈 C 上的任意一支树 T_i 变成扫帚树, 使得 Wiener 指标增加。令 T_i 与圈 C 链接于圈上的点 u_i 。

第一步: 当 $d > k$ 时, 反复进行引理 2 中的变换, 直到 T_i 的所有悬挂点都与顶点 u_i 的距离相等, 在此过程中 G 的 Wiener 指标不断增大。

第二步: 由引理 3 可知, 当 $d > k$ 时, 任意选取两个扫帚树 $B(n_i, l_i), B(n_j, l_j) \subset T_i$ 满足条件: $l_i = l_j$ 和 $n_i - n_j \geq 0$, 通过反复进行将 $B(n_i, l_i)$ 和 $B(n_j, l_j)$ 变为 $B(n_i - 1, l_i)$ 和 $B(n_j + 1, l_j)$ 的变化, 我们可以不断增加 Wiener 指标, 直到 $n'_i = n'_j$ 或者 $n'_i = n'_j + 1$ 。再根据引理 4, 当 $d > \frac{(k+1)^2}{4}$ 时, 将 $B(n'_i, l_i)$ 和 $B(n'_j, l_j)$ 变为 $B(n'_i + n'_j, l_i)$, 此过程中 G 的 Wiener 指标不断增大, 反复步骤二直至 T_i 变成扫帚树。

2.6. 引理 5 [8]

阶为 m 的圈 C 上的一个顶点 u 到圈上其他各点的距离和为:

$$d_{C_m}(u) = \begin{cases} \frac{1}{4}m^2 & (\text{当 } m \text{ 是偶数}) \\ \frac{1}{4}(m^2 - 1) & (\text{当 } m \text{ 是奇数}) \end{cases}$$

阶为 m 的圈 C 的 Wiener 指标为:

$$W(C_m) = \begin{cases} \frac{1}{8}m^3 & (\text{当 } m \text{ 是偶数}) \\ \frac{1}{8}m(m^2 - 1) & (\text{当 } m \text{ 是奇数}) \end{cases}$$

2.7. 引理 6

令图 G 是一个阶为 $2d+1$, 直径为 d 的单圈图, 圈 C 是图 G 的一个阶为 $2d+1-k$ 的子图。在单圈图 G 上有扫帚树 $B(n_i, l_i)$ 链接在圈 C 上的点 u_i 上。令 $G' = G - v_{i, l_i - 1}v_{i, l_i - 2} + v_{i, l_i - 2}v_{i, l_i}$, 当 $d > k$ 时, 有 $W(G') \geq W(G)$ 。

证明: 令 $G' = G - v_{i, l_i - 1}v_{i, l_i - 2} + v_{i, l_i - 2}v_{i, l_i}$, 有 $\Delta W = W(G') - W(G) = (n_i - l_i)(2d - n_i + l_i - 1)$ 。

当 $d > k$ 时, 有 $\Delta W > 0$, 即 $W(G') > W(G)$ 。

2.8. 引理 7

在图 $G = G_{d,i}(2d+1) = C_{u_0 u_1 \dots u_{2d-k}}(B(n_0, l_0), B(n_1, l_1), \dots, B(n_{2d-k}, l_{2d-k}))$ 中, 令集合 $\mathcal{P} = \{P \subset G_{d,i}(2d+1)\}$, 图中必定存在一支中心扫帚树 $B(n_i, l_i)$ 有 $B(n_i, l_i) \in \mathcal{P}(i, j)$ 。若不存在, 必定可以通过引理 6 获得一个存在中心扫帚树且 Wiener 指标更大的图 G' 。

证明: 当 $i=1$ 时, 令唯一的一支扫帚树为中心扫帚树。

当 $i > 1$ 时, 若集合 $\mathcal{P} = \{P \in G_{d,i}(2d+1)\}$ 中不存在 $P(i, j)$, 反复通过引理 6 中的变化, 我们必定可以得到一个有更大 Wiener 指标, 且集合 $\mathcal{P} = \{P \in G_{d,i}(2d+1)\}$ 不为空的情况。

当集合 \mathcal{P} 中只有一个 $P(i, j)$, 则令 $P(i, j)$ 上两支扫帚树中直径较大的一支为中心扫帚树。

当集合 \mathcal{P} 中有两个或以上 $P(i, j)$, 如果不存在 $B(n_i, l_i) \in \mathcal{P}(i, j)$, 我们将情况分为以下三种:

情况 1: 在图 $G_{d,4}(2d+1)$ 中, 将扫帚树任意标为 $B(n_a, l_a)$, $B(n_b, l_b)$, $B(n_c, l_c)$ 和 $B(n_d, l_d)$, 若存在 $P(a, c)$ 和 $P(b, d)$, 且 $n_a \geq n_c$, $n_b \geq n_d$, 我们可以得出: $l_b + l_d \geq \frac{k-1}{2}$, $l_a + l_c \geq \frac{k-1}{2}$, $l_a + l_b + l_c + l_d \leq k$ 。

因此, 我们可以得到: $l_a + l_c = \frac{k-1}{2}$ 且 $l_b + l_d = \frac{k+1}{2}$; 或者 $l_a + l_c = l_b + l_d = \frac{k-1}{2}$ 。此时令 $B(n_b, l_b)$ 与 $B(n_d, l_d)$ 中直径较大的一支为中心扫帚树。

情况 2: 在图 $G_{d,5}(2d+1)$ 中, 将扫帚树顺时针标为 $B(n_a, l_a)$, $B(n_b, l_b)$, $B(n_c, l_c)$, $B(n_d, l_d)$ 和 $B(n_e, l_e)$ 。显然该图可以被刻画为: $l_a + l_c = l_b + l_d = \frac{k-1}{2}$, $l_e = n_e = 1$ 。假设 $n_a + n_b \geq n_c + n_d$ 。令

$G' = G - B(n_e, l_e) + B(n_{e-1}, l_{e-1})$ 且 $n_e = l_e = n_{e-1} = l_{e-1} = 1$, 很明显 Wiener 指标会增长, 有如下

$\Delta W = n_d(n_a + n_b - n_c - n_d) > 0$ 。因此总存在一个有着更大 Wiener 指标的图 $G_{d,4}(2d+1)$ 存在不为空的 P 。

情况 3: 在图 $G_{d,i}(2d+1)$, $i > 5$, 将扫帚树顺时针标为 $B(n_a, l_a)$, $B(n_b, l_b)$, $B(n_c, l_c)$, $B(n_d, l_d)$ 等, 假设存在 $P(a, c)$ 和 $P(b, d)$, 我们可以得到 $l_a + l_c \geq \frac{k-1}{2}$ 且 $l_b + l_d \geq \frac{k-1}{2}$, $l_a + l_b + l_c + l_d \leq k-2$, 条件相互矛盾, 因此不可能存在不包含中心扫帚树的 P , 该情况不存在。

2.9. 引理 8

在图 $G = G_{d,i}(2d+1)$ 中, $i \geq 1, k \geq 1$, 则存在一个图 $G' = G_{d,i-1}(2d+1)$, 其中 $n(B(n_i, l_i)) \geq 0$, 当 $d \geq \frac{9k}{2}$, 有 $W(G') \geq W(G)$ 。

证明: 任意选取一支扫帚树记为 $B(n_0, l_0)$ 。如图 5, $B(n_0, l_0)$ 链接于圈 C 上顶点 u_0 , 从 u_0 开始将圈上的顶点顺时针(或逆时针)记为 $u_1, u_2, \dots, u_{2d-k}$ 。 $v_{0,1}$ 和 $v_{0,2}$ 是在 $B(n_0, l_0)$ 上的两个顶点, 令

$G'_{d,i}(2d+1) = G_{d,i}(2d+1) - u_0 u_1 - u_0 u_{2d-k} - v_{0,1} v_{0,2} - u_0 v_{0,1} - v_{0,2} v_{0,3} + v_{0,1} u_0 + v_{0,1} u_1 + v_{0,2} u_0 + v_{0,2} u_{2d-k} + u_0 v_{0,3}$ 时, 该图的 Wiener 指标会增加。

当 k 是奇数时, $2d-k$ 为奇数, 设 $2m+1 = 2d-k$ 。

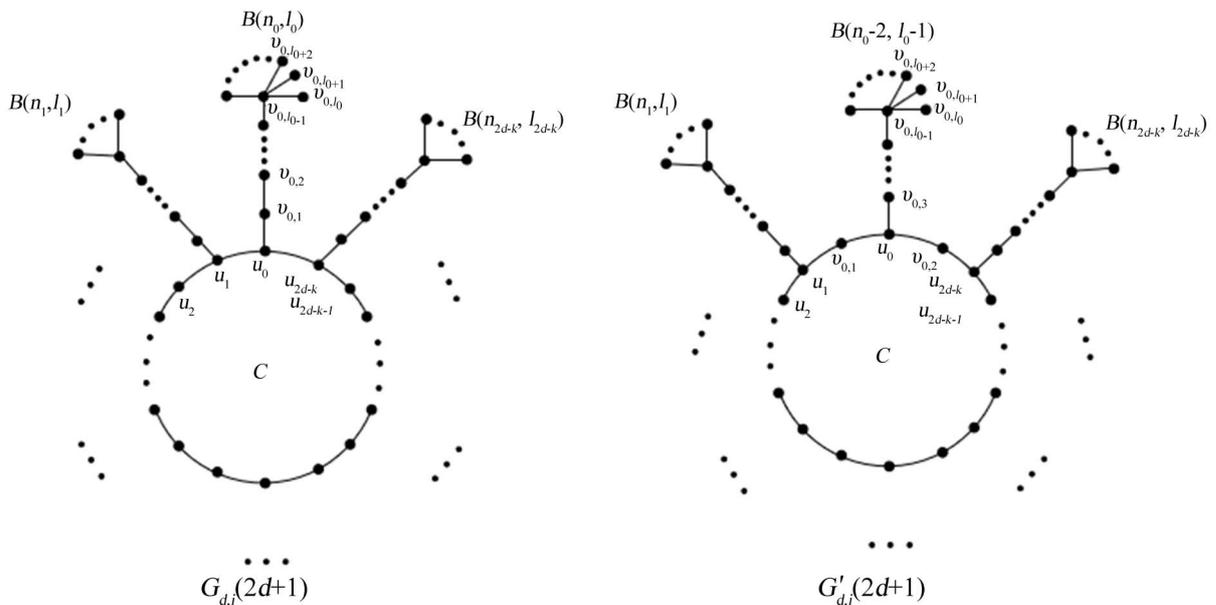


Figure 5. Lemma 8

图 5. 引理 8

$B(n_j, l_j) (1 \leq j \leq m-1)$ 和 $B(n_i, l_i) (1 \leq i \leq 2m+1, i \neq j)$ 之间 Wiener 指标的变化为:

$$\Delta W_{GG'} \left(B(n_j, l_j), \bigcap_{i=1, i \neq j}^{2m+1} B(n_i, l_i) \right) = 2n_j \sum_{i=m+j+2}^{2m+1} n_i$$

$B(n_0, l_0)$ 和 $B(n_i, l_i) (1 \leq i \leq 2m+1)$ 之间 Wiener 指标的变化为:

$$\Delta W_{GG'} (B(n_0, l_0), B(n_i, l_i)) = - \left[\sum_{i=1}^{2m+1} n_i (n_0 - 1) + 2n_{m+1} \right]$$

$B(n_0, l_0)$ 自身 Wiener 指标的变化为:

$$\Delta W_{GG'} (B(n_0, l_0)) = n_0 - 1$$

$B(n_i, l_i) (i = 1, 2, \dots, 2m, 2m+1)$ 和圈之间 Wiener 指标的变化为:

$$\Delta W_{GG'} (B(n_i, l_i), C) = \sum_{i=1}^m [2(m-i)+1] (n_i + n_{2m+2-i}) + n_{m+1}$$

$B(n_0, l_0)$ 和圈之间 Wiener 指标的变化为:

$$\Delta W_{GG'} (B(n_0, l_0), C) = W(C_{2d+3-k}) - W(C_{2d+1-k}) + d_{C_{2d+1-k}}(u) + 3(2d+1-k) - (n_0-2)(2d-k+2)$$

由此, 图的 Wiener 指标变化为:

$$\begin{aligned} \Delta W(G) &= \Delta W(B(n_1, l_1), B(n_2, l_2), \dots, B(n_m, l_m), B(n_{m+1}, l_{m+1}), \dots, \\ &\quad B(n_{2m}, l_{2m}), B(n_{2m+1}, l_{2m+1}), B(n_0, l_0), C) \\ &= 2 \sum_{j=1}^{m-1} n_j \sum_{i=m+j+2}^{2m+1} n_i - \left[\sum_{i=1}^{2m+1} n_i (n_0 - 1) + 2n_{m+1} \right] + (n_0 - 1) \\ &\quad + \sum_{i=1}^m [2(m-i)+1] (n_i + n_{2m+2-i}) + n_{m+1} + \left\{ \frac{(2d+3-k)^3}{8} - \frac{(2d+1-k)^3}{8} \right. \\ &\quad \left. + 2 \times \frac{(2d+1-k)^2}{4} + 3(2d+1-k) - (n_0-2)(2d-k+2) \right\} \\ &= 2 \sum_{j=1}^{m-1} n_j \sum_{i=m+j+2}^{2m+1} n_i - [(k-n_0)(n_0-1) + 2n_{m+1}] + (n_0-1) \\ &\quad + \sum_{i=1}^m [2(m-i)+1] (n_i + n_{2m+2-i}) + n_{m+1} + \frac{(2m+4)^3}{8} - \frac{(2m+2)^3}{8} \\ &\quad - 2 \times \frac{(2m+2)^2}{4} - (n_0+1)(2d+1-k) - (n_0-2) \\ &= 2 \sum_{j=1}^{m-1} n_j \sum_{i=m+j+2}^{2m+1} n_i + \sum_{i=1}^m [2(m-i)+1] (n_i + n_{2m+2-i}) - (k-n_0)(n_0-1) \\ &\quad + m^2 + 5m + 5 + [(n_0-1) - (2n_0)](2d+1-k) - n_{m+1} + 1 \\ &> (n_0-1)(2d+n_0-2k+1) + m^2 + 5m + 6 - 2k \times (2m+2) - k \\ &> (m+1)(m-4k+2) + 2m - k + 4 \end{aligned}$$

当 $d \geq \frac{9k}{2}$, $m-4k+2 = d - \frac{9k}{2} + \frac{3}{2} > 0$, 有 $\Delta W(G) > 0$ 。

当 $l_0 \geq 3$ 时, 该图的 Wiener 指标会不断增加。

当 k 是偶数时, $2d - k$ 为偶数, 设 $2m = 2d - k$ 。

就如同奇数情况下, 图的 Wiener 指标变化为:

$$\begin{aligned} \Delta W(G) &= \Delta W(B(n_1, l_1), B(n_2, l_2), \dots, B(n_m, l_m), B(n_{m+1}, l_{m+1}), \dots, \\ &\quad B(n_{2m}, l_{2m}), B(n_0, l_0) - v_{0, l_0} - v_{0, l_0+1}, v_{0, l_0}, v_{0, l_0+1}, C) \\ &= \sum_{j=1}^{m-1} n_j \left(2 \sum_{i=m+1+j}^{2m} n_i + n_{m+1+j} \right) - \sum_{i=1}^{2m} n_i (n_0 - 1) + (n_0 - 1) + \sum_{i=1}^m (2m - 2i)(n_i + n_{2m+1-i}) \\ &\quad + \left\{ \frac{(2d+3-k)^3 - (2d+3-k)}{8} - \left[\frac{(2d+1-k)^3 - (2d+1-k)}{8} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 2 \times \frac{(2d+1-k)^2 - 1}{4} + 3(2d+1-k) \right] - (n_0 - 2)(2d - k + 2) \right\} \\ &> \sum_{j=1}^{m-1} n_j \left(2 \sum_{i=m+1+j}^{2m} n_i + n_{m+1+j} \right) + \sum_{i=1}^m (2m - 2i)(n_i + n_{2m+1-i}) \\ &\quad + (2d - 2k + n_0 + 1)(n_0 - 1) + m^2 + 4m + 4 - 2k \times (2m + 1) \\ &> (m+1)(m - 4k + 3) + 1 \end{aligned}$$

当 $d \geq \frac{9k}{2}$, $m - 4k + 3 = d - \frac{9k}{2} + 3 > 0$, 有 $\Delta W(G) > 0$ 。

当 $l_0 \geq 3$ 时, 该图的 Wiener 指标会不断增加。

根据引理 7, 存在一支中心扫帚树 $B(n_i, l_i)$, 我们将它标为 $B(n_0, l_0)$, 从它开始将图上扫帚树顺时针依次标为 $B(n_1, l_1), \dots, B(n_{2d-k}, l_{2d-k})$, 可以找到一支顶点数不为 0 的 $B(n_i, l_i)$ 满足: $d_G(u_i, u_0) = \max d_G(u_j, u_0)$, ($1 \leq j \leq 2d - k$), 我们将图上扫帚树和圈上的点重新标记, 将 $B(n_i, l_i)$ 记为 $B(n_0, l_0)$ (特别地, 当 $i = 1$ 时, 将中心扫帚树记为 $B(n_0, l_0)$), $B(n_0, l_0)$ 链接在圈 C 上的顶点为 u_0 , 从 u_0 开始将圈上的顶点顺时针(或逆时针)记为 $u_1, u_2, \dots, u_{2d-k}$, 将中心扫帚树记为 $B(n_c, l_c)$, 保证 $d - \frac{k}{2} \leq c \leq 2d - k$ 。

当 $B(n_c, l_c)$ 中 $l_c < d - d(C)$ 时, 根据 $B(n_0, l_0)$ 中 l_0 的大小, 分类讨论:

情况 1: 当 $i > 1$, 且 $B(n_0, l_0)$ 中 $l_0 \geq 3$ 或 $n_0 = l_0 = 2$ 时, 对 $B(n_0, l_0)$ 反复上述变化。

情况 2: 当 $i > 1$, 且 $B(n_0, l_0)$ 中 $n_0 > l_0 = 2$ 时, 有:

如果 $l_c + l_0 + d_G(u_c, u_0) = d$, 对中心扫帚树 $B(n_c, l_c)$ 作一次上述变化, 此时可以得到图 $G' = G_{d-1, i}(2d+1) = C_{u_0 u_1 \dots u_{2d-k+2}}(B(n_0, l_0), B(n_1, l_1), \dots, B(n_{2d-k+2}, l_{2d-k+2}))$, 且 $W(G') > W(G)$ 。

再根据引理 6, 令 $B(n_0, l_0)$ 删去边 $v_{0, l_0-1} v_{0, l_0-2}$, 加上边 $v_{0, l_0-2} v_{0, l_0}$, 可以得到 $G'' = G_{d, i}(2d+1) = C_{u_0 u_1 \dots u_{2d-k+2}}(B(n_0, l_0), B(n_1, l_1), \dots, B(n_{2d-k+2}, l_{2d-k+2}))$, 且 $W(G'') > W(G')$ 。根据不等式的传递性, $W(G'') > W(G)$, 此时 $l_0 = 3$, 回到情况 1。

如果 $l_c + l_0 + d_G(u_c, u_0) < d$, 根据引理 6, 令 $B(n_0, l_0)$ 删去边 $v_{0, l_0-1} v_{0, l_0-2}$, 加上边 $v_{0, l_0-2} v_{0, l_0}$, 此时 $l_0 = 3$, 回到情况 1。

情况 3: 当 $i = 1$ 且 $B(n_0, l_0)$ 中 $l_0 > 1$ 时, 对 $B(n_0, l_0)$ 作一次上述变化, 可以得到图

$G' = G_{d-1, i}(2d+1) = C_{u_0 u_1 \dots u_{2d-k+2}}(B(n_0, l_0), B(n_1, l_1), \dots, B(n_{2d-k+2}, l_{2d-k+2}))$, 且 $W(G') > W(G)$ 。

再根据引理 6, 令 $B(n_0, l_0)$ 删去边 $v_{0, l_0-1} v_{0, l_0-2}$, 加上边 $v_{0, l_0-2} v_{0, l_0}$, 可以得到

$G'' = G_{d, i}(2d+1) = C_{u_0 u_1 \dots u_{2d-k+2}}(B(n_0, l_0), B(n_1, l_1), \dots, B(n_{2d-k+2}, l_{2d-k+2}))$, 且 $W(G'') > W(G')$ 。根据不等式的传递性, $W(G'') > W(G)$, 反复进行该变化。

情况 4: 当 $B(n_0, l_0)$ 中 $l_0 = 1$ 时, 见引理 9, 引理 8 得证。

当 $B(n_c, l_c)$ 中 $l_c = d - d(C)$ 时, 对中心扫帚树 $B(n_c, l_c)$ 作一次上述变化, 此时可以得到图 $G' = G_{d-1, i}(2d+1) = C_{u_0 u_1 \dots u_{2d-k+2}}(B(n_0, l_0), B(n_1, l_1), \dots, B(n_{2d-k+2}, l_{2d-k+2}))$, 且 $W(G') > W(G)$, 此时回到 $l_c < d - d(C)$ 的情况。

2.10. 引理 9

如图 6, 在引理 8 中, 当 $n_0 \geq 1$ 且 $l_0 = 1$, $B(n_0, l_0)$ 上的悬挂点标记为 $v_{0,1}, \dots, v_{0, n_0}$, 令 $G'_{d,i}(2d+1) = G_{d,i}(2d+1) - u_0 u_1 + v_{0,1} u_1$, 该图 Wiener 指标增大。

证明: 根据引理 7, 存在一支中心扫帚树 $B(n_i, l_i)$, 我们将它标为 $B(n_0, l_0)$, 从它开始将图上扫帚树顺时针依次标为 $B(n_1, l_1), \dots, B(n_{2d-k}, l_{2d-k})$, 可以找到一支顶点数不为 0 的 $B(n_i, l_i)$ 满足: $d_G(u_i, u_0) = \max d_G(u_j, u_0)$, $(1 \leq j \leq 2d - k)$, 我们将图上扫帚树和圈上的点重新标记, 将 $B(n_i, l_i)$ 记为 $B(n_0, l_0)$ (特别地, 当 $i = 1$ 时, 将中心扫帚树记为 $B(n_0, l_0)$), $B(n_0, l_0)$ 链接在圈 C 上的顶点为 u_0 , 从 u_0 开始将圈上的点顺时针(或逆时针)记为 $u_1, u_2, \dots, u_{2d-k}$, 将中心扫帚树记为 $B(n_c, l_c)$, 保证 $d - \frac{k}{2} \leq c \leq 2d - k$ 。

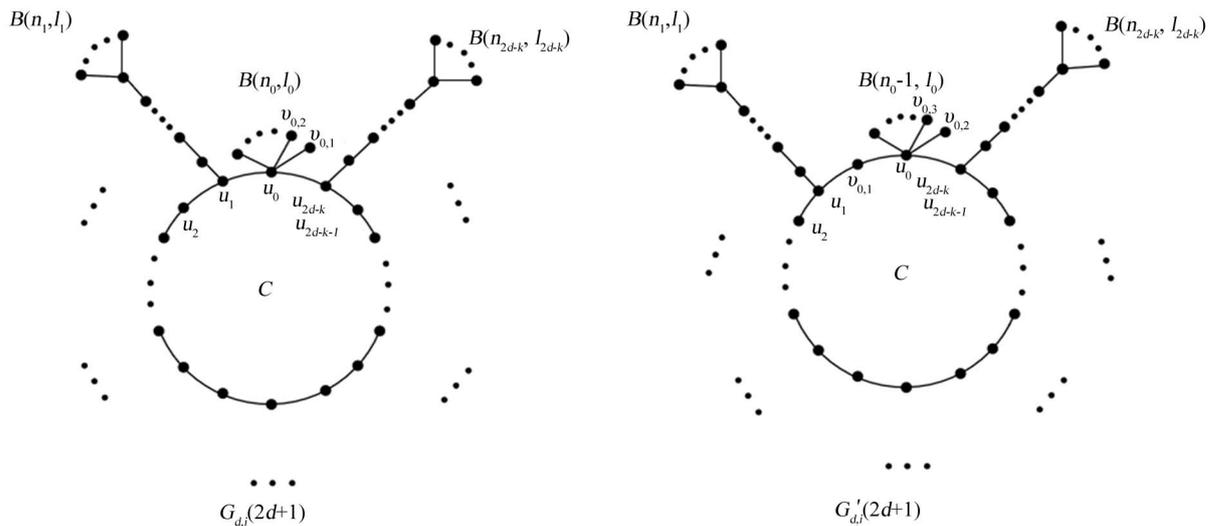


Figure 6. Lemma 9
图 6. 引理 9

情况 1: 当 k 是奇数时, $2d - k$ 为奇数, 设 $2m + 1 = 2d - k$ 。

很明显, $B(n_0, l_0)$ 和 $B(n_i, l_i), i = 1, \dots, 2m + 1$ 之间 Wiener 指标变化为:

$$\Delta W_{GG'} \left(B(n_0, l_0), \bigcap_{i=1}^{2m+1} B(n_i, l_i) \right) = \sum_{i=1}^m n_i (n_0 - 2) - n_{m+1}$$

$B(n_j, l_j) (1 \leq j \leq m - 1)$ 和 $B(n_i, l_i) (1 \leq i \leq 2m + 1, i \neq j)$ 之间 Wiener 指标的变化为:

$$\Delta W_{GG'} \left(B(n_j, l_j), \bigcap_{i=1, i \neq j}^{2m+1} B(n_i, l_i) \right) = n_j \sum_{i=m+j+2}^{2m+1} n_i$$

$B(n_i, l_i) (i = 1, 2, \dots, 2m)$ 和圈之间 Wiener 指标变化为:

$$\Delta W_{GG'} (B(n_i, l_i), C) = \sum_{i=1}^m [(m - i + 1)n_i + n_{2m+2-i}(m - i)]$$

$B(n_0, l_0)$ 和圈之间 Wiener 指标变化为:

$$\Delta W_{GG'}(C, B(n_0, l_0)) = W(C_{2d+2-k}) - [W(C_{2d+1-k}) + d_{C_{2d+1-k}}(u) + (2d+1-k)] + m(n_0 - 1)$$

由此, 该图的 Wiener 指标变化有:

$$\begin{aligned} \Delta W(G) &= \Delta W(B(n_1, l_1), B(n_2, l_2), \dots, B(n_m, l_m), B(n_{m+1}, l_{m+1}), \dots, \\ &\quad B(n_{2m}, l_{2m}), B(n_{2m+1}, l_{2m+1}), B(n_0, l_0), C) \\ &= \sum_{j=1}^{m-1} n_j \sum_{i=m+j+2}^{2m+1} n_i + (n_0 - 2) \sum_{i=1}^m n_i - n_{m+1} + \sum_{i=1}^m [(m-i+1)n_i + (m-i)n_{2m+2-i}] \\ &\quad + \left\{ \frac{(2d+2-k)^3 - (2d+2-k)}{8} - \left[\frac{(2d+1-k)^3}{8} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(2d+1-k)^2}{4} + (2d+1-k) \right] \right\} + (n_0 - 1)m \\ &> \sum_{j=1}^{m-1} n_j \sum_{i=m+j+2}^{2m+1} n_i - (k-1) + \sum_{i=1}^m (m-i+1)n_i + \sum_{i=m+1}^{2m+1} (m-i)n_{2m+2-i} \\ &\quad + \left\{ \frac{(2m+3)^3 - (2m+3)}{8} - \left[\frac{(2m+2)^3}{8} + \frac{(2m+2)^2}{4} + (2m+2) \right] \right\} \\ &> -(k-1) + \frac{m^2 - m - 2}{2} = \frac{m^2 - m}{2} - k \end{aligned}$$

当 $d \geq \frac{9k}{2}$, $\frac{m^2 - m}{2} - k > 0$, 有 $\Delta W(G) > 0$ 。

情况 2: 当 k 是偶数时, $2d - k$ 为偶数, 设 $2m = 2d - k$ 。

与奇数情况类似, 该图的 Wiener 指标变化有:

$$\begin{aligned} \Delta W(G) &= \Delta W(B(n_1, l_1), B(n_2, l_2), \dots, B(n_m, l_m), B(n_{m+1}, l_{m+1}), \dots, \\ &\quad B(n_{2m}, l_{2m}), B(n_{2m}, l_{2m}), B(n_0, l_0), C) \\ &= \sum_{j=1}^{m-1} n_j \sum_{i=m+1+j}^{2m} n_i + (n_0 - 2) \sum_{i=1}^m n_i + \sum_{i=1}^m [(m-i+1)n_i + (m-i)n_{2m+1-i}] \\ &\quad + (n_0 - 1)m + \left\{ \frac{(2d+2-k)^3}{8} - \left[\frac{(2d+1-k)^3 - (2d+1-k)}{8} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(2d+1-k)^2}{4} + (2d+1-k) \right] \right\} \\ &> \sum_{j=1}^{m-1} n_j \sum_{i=m+1+j}^{2m} n_i - \sum_{i=1}^m n_i + \sum_{i=1}^m (m-i+1)n_i + \sum_{i=1}^m (m-i)n_{2m+1-i} \\ &\quad + \left\{ \frac{(2d+2-k)^3}{8} - \left[\frac{(2d+1-k)^3 - (2d+1-k)}{8} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(2d+1-k)^2}{4} + (2d+1-k) \right] \right\} \\ &> \frac{m^2 - m - 1}{2} - k \end{aligned}$$

当 $d \geq \frac{9k}{2}$ 时, $\frac{m^2 - m - 1}{2} - k > 0$, 有 $\Delta W(G) > 0$ 。

3. 定理 1 的证明

为了证明定理 1, 我们需要刻画阶为 $2d + 1$, 直径为 d 的单圈图的图形。令圈上的顶点数为 $2d + 1 - k$ 。根据结论 1, 我们可以证明当 $d > \frac{(k+1)^2}{4}$ 时, 在任意阶为 $2d + 1$, 直径为 d 的单圈图中, 具有最大的 Wiener 指标的图可以被刻画为 $G_{d,i}(2d + 1)$, 其中 $0 \leq i \leq k \leq d$ 。

此时根据引理 7, 我们可以确定一个中心扫帚树的存在。根据引理 8, 我们可以知道当 $d \geq \frac{9k}{2}$ 时, 对于任意的图 $G = G_{d,i}(2d + 1)$ 必定存在着一个具有更大 Wiener 指标的图 $G' = G_{d,i-1}(2d + 1)$, 依次推理, 当 $i = 0$ 时, 图 G 变为圈 $C = u_0 u_1 u_2 \cdots u_{2d} u_0$ 。

因此, 在阶为 $2d + 1$, 直径为 d 的单圈图中, 具有最大 Wiener 指标的图可以被刻画为圈 $C = u_0 u_1 u_2 \cdots u_{2d} u_0$, 即定理 1 得证。

致 谢

本论文历经 6 个月时间完成, 在研究与写作途中有许多的障碍与困难, 但是都在老师与同学们的帮助下度过。在此我们诚挚感谢我们的论文指导老师, 因为老师的悉心指导与不断督促, 我们才能在课题研究及论文写作上不断精益求精。同时也感谢本文所涉及到的各位专家学者, 本文很多的思路与启发都是来自于各个学者的研究文献。最后感谢我的同学们, 本文是我们共同完成, 一同创作的结果。本文因我们学术水平有限, 该论文仍有不足之处, 恳请各位学者与学友批评指正。

基金项目

扬州大学大学生科创基金项目, 本项目得到“江苏高校品牌专业建设工程资助项目(数学与应用数学, PPZY2015B109)”经费资助, 同时也得到国家自然科学基金项目(基金号: 11801494)的资助。

参考文献

- [1] DeLaVina, E. and Waller, B. (2008) Spanning Trees with Many Leaves and Average Distances. *Electronic Journal of Combinatorics*, **15**, 16. <https://doi.org/10.37236/757>
- [2] Wiener, H. (1947) Structural Determination of Paraffin Boiling Points. *Journal of the American Chemical Society*, **69**, 17-20. <https://doi.org/10.1021/ja01193a005>
- [3] Entringer, R.C., Jackson, D.E. and Snyder, D.A. (1976) Distance in Graphs. *Czechoslovak Mathematical Journal*, **26**, 283-296.
- [4] Bondy, J.A. and Murty, U. (2008) Graph Theory. Graduate Texts in Mathematics. 5th Edition, Springer, New York. <https://doi.org/10.1007/978-1-84628-970-5>
- [5] Broersma, H. and Tuinstra, H. (1998) Independent Trees and Hamilton Cycles. *Journal of Graph Theory*, **29**, 227-237. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0118\(199812\)29:4<227::AID-JGT2>3.0.CO;2-W](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0118(199812)29:4<227::AID-JGT2>3.0.CO;2-W)
- [6] Du, Z. and Zhou, B. (2010) Minimum on Wiener Indices of Trees and Unicyclic Graphs of the Given Matching Number. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **63**, 101-112.
- [7] Yu, G. and Feng, L. (2010) On the Wiener Index of Unicyclic Graphs with Given Girth. *Ars Combinatoria*, **94**, 361-369.
- [8] 汤自凯. 具有次大 Wiener 指数的单圈图[J]. 湖南文理学院学报(自然科学版), 2006, 18(4): 2-5.