Biophysics 生物物理学, 2015, 3(3), 59-66
Published Online August 2015 in Hans. http://www.hanspub.org/journal/biphy
http://dx.doi.org/10.12677/biphy.2015.33006

Hans汉斯

Some Conclusions on Modified Wiener Index and Modified Hyper-Wiener Index

Yun Gao[1], Wei Gao[2*]

[1]Department of Editorial, Yunnan Normal University, Kunming Yunnan
[2]School of Information, Yunnan Normal University, Kunming Yunnan
Email: gy64gy@sina.com, *gaowei@ynnu.edu.cn

Received: Jul. 27th, 2015; accepted: Aug. 11th, 2015; published: Aug. 18th, 2015

Abstract

As a class of parameter in chemical, modified wiener index and modified hyper-wiener index are used to measure the structure and characters of molecular. In this paper, we present some results on modified wiener index and modified hyper-wiener index for line graph and several classes of graphs.

Keywords

Theoretical Chemistry, Wiener Index, Modified Wiener Index, Line Graph

修改的维纳指数和修改的超维纳指数的若干结果

高 云[1]，高 炜[2*]

[1]云南师范大学学报编辑部，云南 昆明
[2]云南师范大学信息学院，云南 昆明
Email: gy64gy@sina.com, *gaowei@ynnu.edu.cn

收稿日期：2015年7月27日；录用日期：2015年8月11日；发布日期：2015年8月18日

*通讯作者。

文章引用：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.
http://dx.doi.org/10.12677/biphy.2015.33006

摘　要

修改的维纳指数和修改的超维纳指数作为一类化学参数用来衡量分子的化学结构和化学性质。本文给出线图和一些特殊图类修改的维纳指数和修改的超维纳指数的若干结果。

关键词

理论化学，维纳指数，修改的维纳指数，线图

1. 引言

在理论化学中，常用图模型来表示分子结构，用顶点来表示原子，边表示它们之间的化学键。而化学分子的特性常常用一些参数来衡量，比如PI指数、维纳指数、Randic 指数等等。相关内容可参考[1]-[5]。本文只考虑无向、简单、有限图。设G是一个图，它的顶点集合和边集分别用$V(G)$和$E(G)$来表示。文中所用符号和标记若没有特别说明则与[6]一致。

一个图的维纳指数$W(G)$是图中所有顶点对的距离之和：

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

其中$d(u,v)$表示顶点u和v在G中的距离。修改的维纳指数$W_\lambda(G)$作为一般维纳指数的推广，其定义如下：

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

其中λ是实数。作为超维纳指数的推广，[7]定义了修改的超维纳指数如下：

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

其中λ是实数。有关维纳相关指数的研究是近年来理论化学研究的热点，相关内容可参考[8]-[10]。本文将研究线图和一些特殊图类的修改维纳指数和修改的超维纳指数，给出若干结果。

2. 线图的维纳相关指数

定理1. 设G是有n个顶点，m条边的连通图，且v_i的度为d_i。若G的直径$Diam(G)\le 2$且G的任意一个导出子图都不同构于下面的F_1，F_2和F_3。

设$L(G)$为G的线图，则有：

$$W_\lambda(L(G))=\left(-m+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} d_i^2\right)+\left(\frac{m(m+1)}{2}-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} d_i^2\right)2^\lambda,$$

$$WW_\lambda(L(G))=\left(-m+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} d_i^2\right)+\left(\frac{m(m+1)}{2}-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} d_i^2\right)\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}.$$

证明： 由线图的定义可知$|V(L(G))|=m$，$|E(L(G))|=-m+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} d_i^2$。若$Diam(G)\le 2$，则

$$W_\lambda(G)=m+\left(\frac{n(n-1)}{2}-m\right)2^\lambda.$$

$$WW_\lambda(G)=m+\left(\frac{n(n-1)}{2}-m\right)\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}.$$

对一个直径不超过2的连通图，易知在导出子图不同构于F_1，F_2和F_3的条件下，其线图的直径也不会超过2。从而有

$$W_\lambda(L(G))=\left(-m+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}d_i^2\right)+\left(\frac{m(m-1)}{2}+m-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}d_i^2\right)2^\lambda,$$

$$WW_\lambda(L(G))=\left(-m+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}d_i^2\right)+\left(\frac{m(m-1)}{2}+m-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}d_i^2\right)\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}.$$

结论证毕。□

推论1. 设G是一个有n个顶点的连通r正则图。若G的直径 $Diam(G)\le 2$ 且G的任意一个导出子图都不同构于图1中的F_1，F_2和F_3。则有

$$W_\lambda(L(G))=\left(-\frac{nr}{2}+\frac{nr^2}{2}\right)+\left(\frac{nr}{4}\left(\frac{nr}{2}+1\right)-\frac{nr^2}{2}\right)2^\lambda,$$

$$WW_\lambda(L(G))=\left(-\frac{nr}{2}+\frac{nr^2}{2}\right)+\left(\frac{nr}{4}\left(\frac{nr}{2}+1\right)-\frac{nr^2}{2}\right)\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}.$$

证明： 根据正则图的定义，有 $m=\frac{nr}{2}$，$d_i=r$。代入定理1即得结论。□

定理2. 设G是一个连通图，其顶点集合 $V(G)=\{v_1,v_2,\cdots,v_n\}$，边集合 $E(G)=\{e_1,e_2,\cdots,e_m\}$。设$v_i$的度为$d_i$。若 $e=uv$ 是G的任意一条边，则e的度定义为 $d(e)=d_u+d_v-2$。若 $\lambda>0$，则有

$$W_\lambda(L(G))\ge\sum_{i=1}^{n}\frac{d_i(d_i-1)}{2}+\frac{1}{2}\sum_{e\in E(G)}2^\lambda(m-1-d(e)),$$

$$WW_\lambda(L(G))\ge\sum_{i=1}^{n}\frac{d_i(d_i-1)}{2}+\frac{1}{2}\sum_{e\in E(G)}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}(m-1-d(e)).$$

上式等号成立的充分必要条件为：G的直径 $Diam(G)\le 2$ 且G的任意一个导出子图都不同构于图1中的F_1，F_2和F_3。

若 $\lambda<0$，则有

$$W_\lambda(L(G))\le\sum_{i=1}^{n}\frac{d_i(d_i-1)}{2}+\frac{1}{2}\sum_{e\in E(G)}2^\lambda(m-1-d(e)),$$

$$WW_\lambda(L(G))\le\sum_{i=1}^{n}\frac{d_i(d_i-1)}{2}+\frac{1}{2}\sum_{e\in E(G)}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}(m-1-d(e)).$$

同理，上式等号成立的充分必要条件为：G的直径 $Diam(G)\le 2$ 且G的任意一个导出子图都不同构于图1中的F_1，F_2和F_3。

证明： 下面只给出 $\lambda>0$ 情况的证明，对于 $\lambda<0$ 的情景可用类似的方法得到结论。

对于每个顶点v_i而言，有d_i条边和它相关联，这些边在$L(T)$中构成顶点数为d_i的完全图。因此这d_i个顶

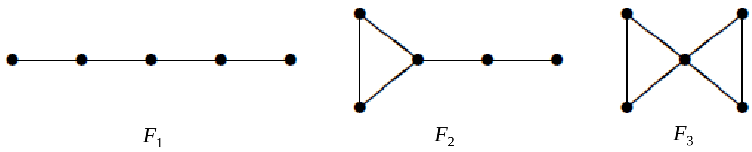

Figure 1. The avoiding induced subgraphs
图 1. G 的导出子图的禁图

点之间的距离和以及距离平方和均为 $\frac{d_i(d_i-1)}{2}$。

对于边 $e=uv$，它一共关联了 $d(e)=d_u+d_v-2$ 条边。因此e在G中不关联的边共有 $m-1-d(e)$ 条。在 $L(G)$ 中，e与这 $m-1-d(e)$ 个顶点的距离至少为2。从而有

$$W_\lambda(L(G)) \ge \sum_{i=1}^{n}\frac{d_i(d_i-1)}{2}+\frac{1}{2}\sum_{e\in E(G)}2^\lambda(m-1-d(e)),$$

$$WW_\lambda(L(G)) \ge \sum_{i=1}^{n}\frac{d_i(d_i-1)}{2}+\frac{1}{2}\sum_{e\in E(G)}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}(m-1-d(e)).$$

若G的直径 $Diam(G)\le 2$ 且G的任意一个导出子图都不同构于图1中的F_1，F_2和F_3，则 $Diam(L(G))\le 2$ 成立。e与这 $m-1-d(e)$ 个顶点在 $L(G)$ 中的距离恰好为2，从而

$$W_\lambda(L(G)) = \sum_{i=1}^{n}\frac{d_i(d_i-1)}{2}+\frac{1}{2}\sum_{e\in E(G)}2^\lambda(m-1-d(e)),$$

$$WW_\lambda(L(G)) = \sum_{i=1}^{n}\frac{d_i(d_i-1)}{2}+\frac{1}{2}\sum_{e\in E(G)}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}(m-1-d(e)).$$

反过来要使上式成立，那么G中任意两条不关联的边在 $L(G)$ 中的距离必须为2。设 e_i 和 e_j 在 $L(G)$ 中的距离为2，则存在G中的边 e_k 同时与 e_i 和 e_j 关联。这时G的任意一个导出子图都不同构于图1中的3个禁图，且 $Diam(G)\le 2$。结论证毕。□

若G是一个r-正则图，那么 $m=\frac{nr}{2}$，$d_i=r$，$d(e)=2r-2$。运用定理2的结论可得如下推论。

推论2. 设G是一个有n个顶点的连通r正则图。若 $\lambda>0$，则

$$W_\lambda(L(G)) \ge \frac{nr(r-1)}{2}+\frac{nr}{4}2^\lambda\left(\frac{nr}{2}+1-2r\right),$$

$$WW_\lambda(L(G)) \ge \frac{nr(r-1)}{2}+\frac{nr}{4}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}\left(\frac{nr}{2}+1-2r\right).$$

上式等号成立的充分必要条件为：G的直径 $Diam(G)\le 2$ 且G的任意一个导出子图都不同构于图1中的F_1，F_2和F_3。

若 $\lambda<0$，则

$$W_\lambda(L(G)) \le \frac{nr(r-1)}{2}+\frac{nr}{4}2^\lambda\left(\frac{nr}{2}+1-2r\right),$$

$$WW_\lambda(L(G)) \le \frac{nr(r-1)}{2}+\frac{nr}{4}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}\left(\frac{nr}{2}+1-2r\right).$$

同理，上式等号成立的充分必要条件为：G的直径 $Diam(G)\le 2$ 且G的任意一个导出子图都不同构于

图1中的F_1，F_2和F_3。

下面两个定理讨论树的线图的维纳相关指数计算公式。

定理3. 设T是一个树，$V(T)=\{v_1,\cdots,v_n\}$且v_i的度记为$d_i\,(i=1,2,\cdots,n)$。$L(T)$表示T的线图，则

$$W_\lambda(L(T))=\sum_{i=1}^{n}\frac{d_i(d_i-1)}{2}+\sum_{i<j}\left[1+d(v_i,v_j)\right]^{\lambda}(d_i-1)(d_j-1),$$

$$WW_\lambda(L(T))=\sum_{i=1}^{n}\frac{d_i(d_i-1)}{2}+\sum_{i<j}\frac{\left[1+d(v_i,v_j)\right]^{\lambda}+\left[1+d(v_i,v_j)\right]^{2\lambda}}{2}(d_i-1)(d_j-1).$$

证明： 线图$L(T)$的顶点即为原图T的边。对于每个顶点v_i而言，有d_i条边和它相关联，这些边在$L(T)$中构成顶点数为d_i的完全图。因此这d_i个顶点之间的距离和以及距离平方和均为

$$\binom{d_i}{2}=\frac{d_i(d_i-1)}{2},\quad i=1,2,\cdots,n. \tag{1}$$

设v_i, v_j是T中的顶点，它们的度分别为d_i, d_j。设$x_1,x_2,\cdots,x_{d_i-1}$是顶点v_i在T中所关联的边，$y_1,y_2,\cdots,y_{d_j-1}$是顶点v_j在T中所关联的边，且满足x_l和y_k没有公共顶点($1\le l\le d_i-1$，$1\le k\le d_j-1$)，同时这些边都不在v_i, v_j之间的路径上。由此可知x_l和y_k在$L(T)$中的距离为$1+d(v_i,v_j)$。从而关联v_i的边$x_1,x_2,\cdots,x_{d_i-1}$和关联v_j的边$y_1,y_2,\cdots,y_{d_j-1}$之间的距离和以及距离平方和分别为：

$$\left[1+d(v_i,v_j)\right](d_i-1)(d_j-1), \tag{2}$$

$$\left[1+d(v_i,v_j)\right]^{2}(d_i-1)(d_j-1). \tag{3}$$

结合(1)~(3)，可知

$$W_\lambda(L(T))=\sum_{i=1}^{n}\frac{d_i(d_i-1)}{2}+\sum_{i<j}\left[1+d(v_i,v_j)\right]^{\lambda}(d_i-1)(d_j-1),$$

$$WW_\lambda(L(T))=\sum_{i=1}^{n}\frac{d_i(d_i-1)}{2}+\sum_{i<j}\frac{\left[1+d(v_i,v_j)\right]^{\lambda}+\left[1+d(v_i,v_j)\right]^{2\lambda}}{2}(d_i-1)(d_j-1).$$

结论证毕。□

3. 若干图类的维纳相关指数

定理4. 设G是有n个顶点的连通图，并包含团K_k。设$G(n,k)$为在G中删除K_k的边得到的图，$0\le k\le n-1$。若$\lambda>0$，则有

$$W_\lambda(G(n,k))\ge\frac{k(k-1)}{2}2^{\lambda}+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right],$$

$$WW_\lambda(G(n,k))\ge\frac{k(k-1)}{2}\frac{2^{\lambda}+2^{2\lambda}}{2}+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right],$$

等式成立当且仅当$G\cong K_n$。

若$\lambda<0$，则有

$$W_\lambda(G(n,k))\le\frac{k(k-1)}{2}2^{\lambda}+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right],$$

$$WW_\lambda\left(G(n,k)\right)\le\frac{k(k-1)}{2}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right].$$

同样，等式成立当且仅当$G\cong K_n$。

证明：下面只给出$\lambda>0$情况的证明，对于$\lambda<0$的情景可用类似的方法得到结论。

设$V(G)=\{v_1,v_2,\cdots,v_n\}$。不失一般性，设团$K_k$的顶点集为$S_1=\{v_1,v_2,\cdots,v_k\}$，$G$中剩下的顶点为$\{v_{k+1},v_{k+2},\cdots,v_n\}$。从而$S_1$中任意两个顶点在$G(n,k)$中的距离至少为2，剩余顶点对在$G(n,k)$中的距离至少为1。得到

$$W_\lambda\left(G(n,k)\right)\ge\frac{k(k-1)}{2}2^\lambda+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right],$$

$$WW_\lambda\left(G(n,k)\right)\ge\frac{k(k-1)}{2}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right].$$

若$G\cong K_n$，则可直接验证上式等号成立。

反过来，设$W_\lambda\left(G(n,k)\right)=\frac{k(k-1)}{2}2^\lambda+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right]$或者
$WW_\lambda\left(G(n,k)\right)=\frac{k(k-1)}{2}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right]$。若$G$不同构于$K_n$，则$G$中至少有一对顶点不相邻。不妨设$v_{k+1},v_{k+2},\cdots,v_{k+l}$在$G$中两两不相邻，其中$2\le l\le n-k$。从而

$$\begin{aligned}W_\lambda\left(G(n,k)\right)&\ge\frac{k(k-1)}{2}2^\lambda+\frac{l(l-1)}{2}2^\lambda+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}-\frac{l(l-1)}{2}\right]\\&=\frac{k(k-1)}{2}2^\lambda+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right]+\frac{l(l-1)}{2}\left[2^\lambda-1\right]\end{aligned}$$

或者

$$\begin{aligned}&WW_\lambda\left(G(n,k)\right)\\&\ge\frac{k(k-1)}{2}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}+\frac{l(l-1)}{2}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}-\frac{l(l-1)}{2}\right]\\&=\frac{k(k-1)}{2}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right]+\frac{l(l-1)}{2}\left[\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}-1\right]\end{aligned}$$

由于$2\le l\le n-k$并且$\lambda>0$，可知

$$\frac{k(k-1)}{2}2^\lambda+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right]+\frac{l(l-1)}{2}\left[2^\lambda-1\right]>\frac{k(k-1)}{2}2^\lambda+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right],$$

或者

$$\begin{aligned}&\frac{k(k-1)}{2}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right]+\frac{l(l-1)}{2}\left[\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}-1\right]\\&>\frac{k(k-1)}{2}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}+\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{k(k-1)}{2}\right]\end{aligned}$$

这和假设矛盾，因此$G\cong K_n$。□

设G_1，G_2是G的两个子图。若$\left|V(G_1)\cap V(G_2)\right|=0$成立，则称$G_1$，$G_2$是独立的。

定理5. 设$(K_p)_i$ (其中$i=1,2,\cdots,k$)是完全图K_n中k个相互独立的完全子图。设图$G(n,p,k)$是从K_n中删除$(K_p)_i$的边而得到的图，其中$i=1,2,\cdots,k$，$1\le k\le\left\lfloor\frac{n}{p}\right\rfloor$，$0\le p\le n-1$。则

$$W_\lambda(G(n,p,k))=\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{kp(p-1)}{2}\right]+\frac{kp(p-1)}{2}2^\lambda,$$

$$WW_\lambda(G(n,p,k))=\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{kp(p-1)}{2}\right]+\frac{kp(p-1)}{2}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}.$$

证明： 对于每个$(K_p)_i$ $(i=1,2,\cdots,k)$其内部任意两个顶点在$G(n,p,k)$中的距离均为2。其余$\binom{n}{2}-\frac{kp(p-1)}{2}$对顶点在$G(n,p,k)$中的距离均为1。从而

$$W_\lambda(G(n,p,k))=\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{kp(p-1)}{2}\right]+\frac{kp(p-1)}{2}2^\lambda,$$

$$WW_\lambda(G(n,p,k))=\left[\frac{n(n-1)}{2}-\frac{kp(p-1)}{2}\right]+\frac{kp(p-1)}{2}\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}.$$

结论证毕。□

定理6. 设e_i (其中$i=1,2,\cdots,k$，$0\le k\le n-2$)是完全图K_n中与某个顶点v相关联的k条边。设$K_n(k)$是从K_n中删除边e_i $(i=1,2,\cdots,k)$得到的图。则有

$$W_\lambda(K_n(k))=\left[\frac{n(n-1)}{2}-k\right]+2^\lambda k,$$

$$WW_\lambda(K_n(k))=\left[\frac{n(n-1)}{2}-k\right]+\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}k.$$

证明： 易知在$K_n(k)$中，有k对顶点的距离为2，其余$\binom{n}{2}-k$对顶点的距离为1。从而

$$W_\lambda(K_n(k))=\left[\frac{n(n-1)}{2}-k\right]+2^\lambda k,$$

$$WW_\lambda(K_n(k))=\left[\frac{n(n-1)}{2}-k\right]+\frac{2^\lambda+2^{2\lambda}}{2}k.$$

结论证毕。□

基金项目

国家自然科学基金资助项目(11401519)。

参考文献 (References)

[1] Gao, Y., Xu, T.W., Liang, L. and Gao, W. (2015) Lower bounds for the general harmonic index of molecular graphs. *Journal of Basic and Applied Research International*, **7**, 144-152.

[2] Gao, W. and Shi, L. (2014) Wiener index of gear fan graph and gear wheel graph. *Asian Journal of Chemistry*, **26**, 3397-3400.

[3] 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

[4] Gao, Y., Liang, L. and Gao, W. (2015) Shultz polynomial and modified shultz polynomial of certain special molecular graphs. *Chemical Technology—An Indian Journal*, **11**, 17-26.

[5] Gao, Y., Liang, L. and Gao, W. (2015) Szeged polynomial and edge szeged polynomialof certain special molecular graphs. *Nano Science and Nano Technology—An Indian Journal*, **9**, 138-142.

[6] Bondy, J.A. and Murty, U.S.R. (1976) Graph theory with applications. Macmillan Press, London, 1-40.

[7] Xi, W.F. and Gao, W. (2014) λ-Modified extremal hyper-Wiener index of molecular graphs. *Journal of Applied Computer Science & Mathematics*, **18**, 43-46.

[8] Dou, J., Wang, Y. and Gao, W. (2014) Some characteristics on hyper-wiener index of graphs. *Journal of Chemical and Pharmaceutical Research*, **6**, 1659-1663.

[9] Pan, Y. (2013) Wiener number and hyper-wiener number of two types of polyomino systems. *Journal of Mathematical Study*, **46**, 260-269.

[10] Cash, G. (2002) Three methods for calculation of the hyper-wiener index of molecular graphs. *Journal of Chemical Information and Computer Science*, **42**, 571-576. http://dx.doi.org/10.1021/ci0100999