

给定最大度单圈图的最小维纳指数

张 珊

浙江理工大学计算机科学与技术学院, 浙江 杭州

收稿日期: 2023年5月9日; 录用日期: 2023年6月12日; 发布日期: 2023年6月20日

摘 要

近年来, 随着结构图理论和拓扑图理论在计算机网络、图像处理等领域的应用, 越来越多的图论分支理论被研究拓展, 各种应用瓶颈也催生出更实际更严格的定理结论。在基站分布拓扑网络、社会关系网络等布局设计领域, 代价作为衡量效率的重要指标被多方面深入研究。维纳指数是拓扑结构中最经典应用最广泛的指标之一, 反应了图中任意节点对平均距离, 通过降低图的维纳指数可极大减少网络布局消耗。本文定义了一类给定阶 n 和最大度 Δ 的围长为3的单圈图, 并刻画了具有最小维纳指数的单圈图结构。

关键词

单圈图, 维纳指数, \mathcal{T} -单圈图, 悬挂树

The Minimum Wiener Index of Unicyclic Graphs with Giving Maximum Degree

Shan Zhang

School of Computer Science and Technology, Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou Zhejiang

Received: May 9th, 2023; accepted: Jun. 12th, 2023; published: Jun. 20th, 2023

Abstract

In recent years, with the application of structure graph theory and topological graph theory in computer network, image processing and other fields, more and more branch theories of graph theory have been studied and expanded, and the bottlenecks of various application also give rise to more practical and rigorous theorem conclusions. In the field of layout design such as base station distribution topology network and social relationship network, cost has been in-depth studied as an important indicator to measure efficiency. Wiener index is one of the most classic and widely used indicators in topology, reflecting the average distance of any node pair in the graph, and greatly reducing the network layout consumption by reducing the Wiener index of the graph. This paper defines a class of unicyclic graphs with a girth of 3 for a given order n and the maximum degree Δ ,

and characterizes the structure of the unicyclic graph with the smallest Wiener index.

Keywords

Unicyclic Graph, Wiener Index, \mathcal{T} -Unicyclic-Graph, Hanging-Tree

Copyright © 2023 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. 引言

维纳指数被认为是最经典和最广泛的拓扑指数之一。维纳指数首次被用于研究化学分子图的定稿和筛选, 然后对各种物理大型线进行优化, 这些都可以作为图论的一部分, 如通信网络、社会网络分析和运筹学, 见[1] [2] [3] [4]。维纳索引不仅使各种给定图的边界更加清晰, 而且还保持其合成指数, 如超维纳索引、斯坦纳维纳索引和绕道索引。这些理论的每一个进步都为应用学科提供了新的思路和策略。经过二十多年的研究, 树或其他连接图的维纳指数的边界不断收紧和表示不同的条件, 如顶点的数量、边数、度序列、最大度、直径、匹配数等, 在[5] [6] [7] [8] [9]。特别地, 在[10]中, 它通过给定的度序列确定了所有具有最大拉普拉斯谱半径的极值树, [11]利用偶次的顶点来表征具有最小维纳指数的图的结构。

特别地, 单圈图的最小维纳指数也得到了广泛的研究。例如, [12] [13]确定了所有具有给定匹配数的单圈图中单圈图的最小维纳指数。在[14]中, 它通过给定的周长来描述所有单圈图中具有最小和最大维纳指数的单圈图。[15] [16] [17]定义了所有具有 n 个顶点和固定直径的单圈图中的最小维纳指数。[18]通过给定具有垂直顶点的周长来确定单圈图的最小维纳指数。[19] [20]确定了在所有具有给定垂直顶点的单圈图中维纳指数最小的单圈图。

本文定义了一类给定 n 阶、最大度 Δ 的单圈图, 并刻画了具有最小维纳指数的单圈图结构。

2. 预备知识

2.1. 基础知识

设 $G=(V, E)$ 是一个简单无向的连通图, 其中点集 $V(G)=\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, 边集 $E(G)=\{(u, v) | u, v \in V(G)\}$ 。图所有顶点个数称作阶数, 记作 n 。图中顶点连接的边数称作该顶点的度, 记作 Δ 。图的圈是指从任意顶点经非重复边和顶点到起点所形成的闭合回路, 圈的边数记作围长 g 。将有且仅有一个圈的简单连通图称作单圈图, 若单圈图除去圈上所有边, 则形成不多于 g 个以顶点为根的树, 该树称作单圈图的悬挂树。维纳指数是指图中任意不重复两点距离之和, 记作 $W(G)$, 表示为

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

其中 $d(u, v)$ 表示 u 与 v 的距离。或

$$W(G) = \sum_{e=ij \in E(G)} n_e(i) n_e(j).$$

其中 $n_e(i)$ 表示与边 $e=ij$ 中顶点 i 相连的边数。

2.2. $\mathcal{T}(R, \Delta)$

在Fischermann [20]中, 定义一类树, 记作 $\mathcal{T}(R, \Delta)$, 其结构如图 1 所示, 定义 2.1 给出图结构的定义:

定义 1: (Fischermann [20]) 对于 $\Delta \geq 3$, 记 $R \in \{\Delta-1, \Delta\}$, 令 $M_0(R, \Delta) = 1$, $M_k(R, \Delta) = 1 + R + R(\Delta-1) + \dots + R(\Delta-1)^{k-1}$, 其中 $k \geq 1$. 对于任意 n , 都有一些 $k \geq 0$, 使得

$$M_k(R, \Delta) \leq n < M_{k+1}(R, \Delta),$$

又令 $n - M_k(R, \Delta) = m(\Delta-1) + r$, 其中 $0 \leq r < \Delta-1$. 令 $\mathcal{T}(R, \Delta)$ 是一类 n 阶树族, 其点集属于平面嵌入结构, 有如下 $\mathcal{T}(R, \Delta)$ 结构:

- 1) 所有点都在某一 h_i 层, 其中 $0 \leq i \leq k+1$;
- 2) 有且仅有一点位于 h_0 层, 在 h_i 层有 $\min\{R, n-1\}$ 个邻居节点;
- 3) 位于 h_j 层的任何一点都在 h_{j-1} 层有且仅有一个邻居节点, 在 h_{j+1} 层有 $\Delta-1$ 个邻居节点, 其中 $1 \leq j \leq k-1$;
- 4) 对于位于 h_k 层上最左边的 $m+1$ 个顶点, $v_1, v_2, \dots, v_m, v_{m+1}$, v_{m+1} 在 h_{k+1} 上有 r 个邻居, 其他顶点在 h_{k+1} 上都有 $\Delta-1$ 个邻居。

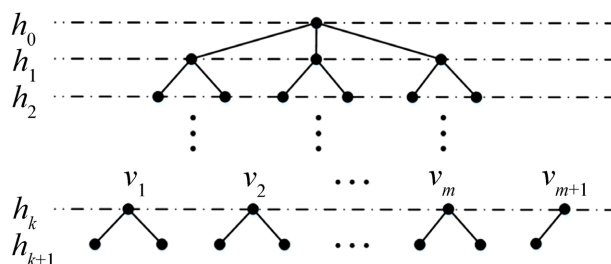


Figure 1. $\mathcal{T}(R, \Delta)$

图 1. $\mathcal{T}(R, \Delta)$

2.3. \mathcal{T} -子树和 \mathcal{T} -单圈图

令 $\mathcal{U}_\Delta(n_1, n_2, \dots, n_g)$ 是一类 n 阶 ($n = n_1 + n_2 + \dots + n_g$), 围长为 g , 最大度为 Δ 的单圈图, 简写作 $\mathcal{U}(\Delta, g, n)$. 有一单圈图 $U \in \mathcal{U}(\Delta, g, n)$, 其单圈记作 $C_g = v_1 v_2 \dots v_g v_1$, 根节点为 v_i 的悬挂树记作 T_i , 设有 $k+1$ 层, 且 $|T_i| = n_i$, 其中 $i = 1, 2, \dots, g$. 另记该悬挂树的根节点位于 h_0 层, 则层数依次记作 h_1, h_2, \dots, h_k , 令 V_{h_i} 是位于 h_i 层的点集, 显然, $|V_{h_0}| = 1$. 该类单圈图的示例如图 2 所示。

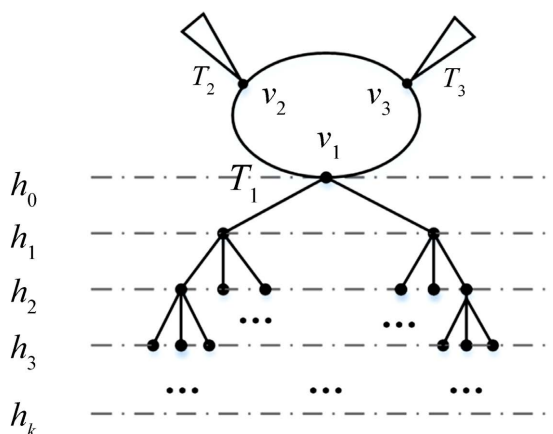


Figure 2. Hanging-tree T_i

图 2. 悬挂树 T_i

定义 2: [\mathcal{T} -子树] 设 $U \in \mathcal{U}(\Delta, g, n)$, 令 $T = (V, E)$ 是单圈图中根为 v_x 的悬挂树 T_i 中最大的子树, 该子树的根节点是 v_i 的子节点。若 $T \in \mathcal{T}(\Delta - 1, \Delta)$, 那么将 T 记作 T_i 的 \mathcal{T} -子树。

若根节点为 v_i 的悬挂树 T_i 是由 v_i 和 \mathcal{T} -子树组成, 那么将这类 T_i 记作 \mathcal{T} -悬挂树。将 h_0, h_1, \dots, h_k 层的所有点的数量记作 $\tilde{M}(\Delta, k)$, 那么将得到 T_i 中每层的点数最大值, 如表 1 所示。如果 $(\Delta - 1)^{k-1} < |T_i| < (\Delta - 1)^k$, 那么称 T_i 是 k 层不饱和的。

Table 1. The maximum number of vertices each layer of T_i

表 1. T_i 县中每层的点数最大值

h_i	$ V_{h_i} $	$\tilde{M}(\Delta, k)$
0	1	1
1	$\Delta - 2$	$\Delta - 1$
2	$(\Delta - 2)(\Delta - 1)$	$(\Delta - 1)^2$
3	$(\Delta - 2)(\Delta - 1)^2$	$(\Delta - 1)^3$
...
k	$(\Delta - 2)(\Delta - 1)^{k-1}$	$(\Delta - 1)^k$

定义 3: [\mathcal{T} -单圈图] (Zhang [20])单圈图 $U \in \mathcal{U}(\Delta, g, n)$, 若它所有悬挂树 T_1, T_2, \dots, T_g 都是 \mathcal{T} -悬挂树, 则将 U 称为 \mathcal{T} -单圈图。

3. 相关引理

本文研究围长 $g = 3$, 最大度 $\Delta \geq 4$ 的 $U, \bar{U} \in \mathcal{U}(\Delta, g, n)$ 的维纳指数极值图结构。为方便下文解释, 将其分别记作 $U(\Delta, n_1, n_2, n_3)$ 、 $\bar{U}(\Delta, n'_1, n'_2, n'_3)$, 简记作 U, \bar{U} , 其 \mathcal{T} -悬挂树分别记作 $T_1, T_2, T_3, T'_1, T'_2, T'_3$, 其中 $n_1 \geq n_2 \geq n_3$, $k_1 \geq k_2 \geq k_3$, 令 $A = \Delta - 1$ 。

引理 1: 设最大度 $\Delta \geq 4$ 的 \mathcal{T} -悬挂树 T 是 h_k 层饱和的, 则其根节点 v 与 T 中所有顶点的距离和

$$W(v, T) = (k + 1) \times A^k - \frac{A^{k+1} - 1}{A - 1}.$$

引理 2: 设最大度 $\Delta \geq 4$ 的 \mathcal{T} -悬挂树 T 是 h_k 层饱和的, 则 h_k 中最末顶点 u 与 T 该层中所有顶点之间的距离和为

$$W(u, h_k) = 4kA^{k-1} + \frac{2 - 2A^k}{A - 1}.$$

引理 3: 设最大度 $\Delta \geq 4$ 的 \mathcal{T} -悬挂树 T 是 h_k 层饱和的, 则 h_k 中最末顶点 u 与 T 中所有顶点之间的距离和为

$$W(u, T) = \frac{(4k + 1) \times A^k - A + 2k}{A - 1} - \frac{2A^{k+1} + 4A^k - 2A - 4}{(A - 1)^2} + 1.$$

引理 4: 设最大度 $\Delta \geq 4$ 的 \mathcal{T} -悬挂树 T 是 h_k 层饱和的, 则 T 的维纳指数为

$$W(T) = \sum_{i=1}^k R \times A^{i-1} \times \left[1 + W(u)_{T_{i-1}} + \frac{1}{2} W(u, h_i) \right],$$

其中 $W(u)_{T_{i-1}}$ 是 h_{i-1} 上 u 和 $h_0 \sim h_{i-1}$ 上每个顶点之间的距离和。

4. 主要结论

$U(\Delta, n_1, n_2, n_3)$ 到 $\bar{U}(V, n'_1, n'_2, n'_3)$ 的四种图变换形式(如图 3 和图 4 所示):

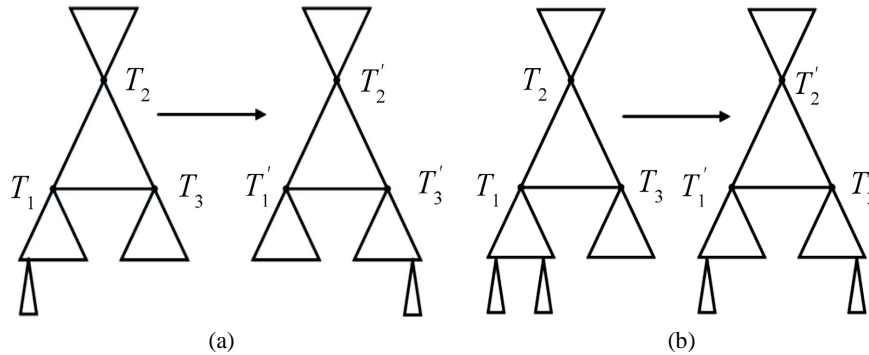


Figure 3. Graph operation 1: k_3 is saturated

图 3. 图转换 1: k_3 饱和

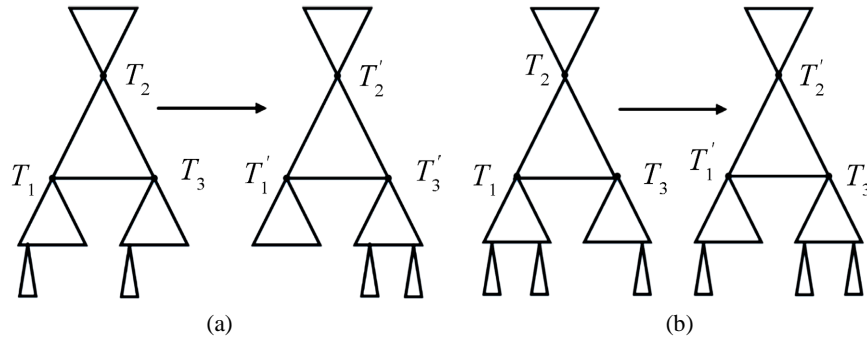


Figure 4. Graph operation 2: k_3 is unsaturated

图 4. 图转换 2: k_3 不饱和

引理 5: 设 \mathcal{T} -单圈图 $U, \bar{U} \in \mathcal{U}(\Delta, 3, n)$, 其中当 $\Delta=4, k_1-k_3 \geq 4$; 或当 $\Delta=5, k_1 \geq 3 \times k_3 + 6$, U 的 \mathcal{T} -悬挂树满足 $n_1 = A^{k_1-1} + |V_{h_{k_1}}|, n_2 = A^{k_2}, n_3 = A^{k_3}$, 若 $|V_{h_{k_1}}| \leq (A-1) \times A^{k_3}$, 则将 T_1 的 h_{k_1} 上所有顶点移至 T_3 , 使其 k_1-1 层饱和, 得到新 \mathcal{T} -单圈图 \bar{U} 的 \mathcal{T} -悬挂树满足 $n'_1 = A^{k_1-1}, n'_2 = n_2, n'_3 = n_3 + |V_{h_{k_1}}|$, 则有

$$h(T'_1) - h(T'_3) \leq h(T_1) - h(T_3), W(\bar{U}) \leq W(U).$$

证明: 如图 3(a)所示, 可知层数和点数的变化:

$$k'_1 = k_1 - 1, k'_2 = k_2, k'_3 = k_3 + 1.$$

设 \mathcal{T} -悬挂树 $T_1 = T_1^0 + V_1, T_3 = T_3^0 + \bar{V}_1$, 其中 T_1^0 是 k_1-1 层饱和的, T_3^0 是 k_3 层饱和的, $|V_1| = |V_{h_{k_1}}|$ 。考虑到图转换的结果变化, 可知 $\Delta W = W(U) - W(\bar{U}) = \sum_{x \in U} d(V_1, x) - \sum_{y \in \bar{U}} d(\bar{V}_1, y)$, 分为以下四步:

1) $W(V_1, T_2 \cup T_2')$ 和 $W(\bar{V}_1, T_2 \cup T_2')$ 。

$$\begin{aligned} W_1 &= W(V_1, T_2 \cup T_2') - W(\bar{V}_1, T_2 \cup T_2') \\ &= |V_1| \times (k_1 - k_3 - 1) \cdot n_2. \end{aligned}$$

2) $W(V_1, T_1^0)$ 和 $W(\bar{V}_1, T_3^0)$ 。

$$\begin{aligned} W(V_1, T_1^0) &= |V_1| \times (W(u, T_1^0) + |T_1^0|), \\ W(\bar{V}_1, T_3^0) &= \bar{V}_1 \times (W(u, T_3^0) + T_3^0). \end{aligned}$$

3) $W(V_1, T_3)$ 和 $W(\bar{V}_1, T_1^0)$ 。

$$\begin{aligned} W(V_1, T_3) &= W(V_1, T_3^0) = |V_1| \times (W(v, T_3^0) + (k_1 + 1) \times |T_3^0|), \\ W(\bar{V}_1, T_1^0) &= |\bar{V}_1| \times [W(\bar{V}_1, T_1^0) + (k_3 + 2) \times |T_1^0|]. \end{aligned}$$

4) $W(V_1)$ 和 $W(\bar{V}_1)$ 。

二者在图中的结构相同，因此其差值为 0。

已知 $|T_1^0| = A^{k_1-1}, |T_3| = |T_3^0| = A^{k_3}, |V_1| = \bar{V}_1$ ，由引理 1、2、3 和 4 可得：

$$\begin{aligned} &W(U) - W(\bar{U}) \\ &= W(V_1, T_1^0) + W(V_1, T_2) + W(V_1, T_3) + W(V_1) \\ &\quad - W(\bar{V}_1, T_1^0) - W(\bar{V}_1, T_2) - W(\bar{V}_1, T_3^0) - W(\bar{V}_1) \\ &\geq |V_1| \times \left\{ \left[\frac{5-A}{A-1} \times k_1 - k_3 - \frac{4A+2}{(A-1)^2} \right] \times A^{k_1-1} + \left[k_1 - \frac{5-A}{A-1} \times k_3 + \frac{A^2-2A+7}{(A-1)^2} \right] \times A^{k_3} \right. \\ &\quad \left. + (k_1 - k_3) \times \left(n_2 + \frac{2}{A-1} \right) \right\}. \end{aligned}$$

当 $A=3$ ，即 $\Delta=4$ ，可得

$$\begin{aligned} &W(U(4, n_1, n_2, n_3)) - W(\bar{U}(4, n'_1, n'_2, n'_3)) \\ &= |V_1| \times \left\{ \left(k_1 - k_3 - \frac{7}{2} \right) \times 3^{k_1-1} + \left(k_1 - k_3 + \frac{7}{2} \right) \times 3^{k_3} + (k_1 - k_3) \times (n_2 + 1) \right\}. \end{aligned}$$

设 $k_1 - k_3 \geq 4$ ，则各个单项式系数都为正，则有 $W(U(4, n_1, n_2, n_3)) \geq W(\bar{U}(4, n'_1, n'_2, n'_3))$ 。

当 $A=4$ ，即 $\Delta=5$ ，可得

$$\begin{aligned} &W(U(5, n_1, n_2, n_3)) - W(\bar{U}(5, n'_1, n'_2, n'_3)) \\ &= |V_1| \times \left\{ \left(\frac{1}{3} \times k_1 - k_3 - 2 \right) \times 4^{k_1-1} + \left(k_1 - \frac{1}{3} \times k_3 + \frac{5}{3} \right) \times 4^{k_3} + (k_1 - k_3) \times \left(n_2 + \frac{2}{3} \right) \right\}. \end{aligned}$$

设 $k_1 - k_3 \geq 4$ ，则各个单项式系数都为正，则有 $W(U(5, n_1, n_2, n_3)) \geq W(\bar{U}(5, n'_1, n'_2, n'_3))$ 。

□

引理 6: 设 \mathcal{T} -单圈图 $U, \bar{U} \in \mathcal{U}(\Delta, 3, n)$ ，其中当 $\Delta=4, k_1 - k_3 \geq 4$ ；或当 $\Delta=5, k_1 \geq 3 \times k_3 + 6$ ， U 的 \mathcal{T} -悬挂树满足 $n_1 = A^{k_1-1} + |V_{h_{k_1}}|, n_2 = A^{k_2}, n_3 = A^{k_3}$ ，若 $(A-1) \times A^{k_3} < |V_{h_{k_1}}| \leq (A-1) \times A^{k_1-1}$ ，则将 T_1 的 h_{k_1} 上 $(A-1) \times A^{k_3}$ 个顶点移至 T_3 ，使其 $k_3 + 1$ 层饱和，得到新 \mathcal{T} -单圈图 \bar{U} 的 \mathcal{T} -悬挂树满足 $n'_1 = n_1 - (A-1) \times A^{k_3}, n'_2 = n_2, n'_3 = A^{k_3+1}$ ，则有

$$h(T'_1) - h(T'_3) \leq h(T_1) - h(T_3), W(\bar{U}) \leq W(U).$$

证明: 如图 3(b)所示, 可知层数和点数的变化:

$$k'_1 = k_1, k'_2 = k_2, k'_3 = k_3 + 1.$$

设 \mathcal{T} -悬挂树 $T_1 = T_1^0 + V_1 + V_2, T'_3 = T_3^0 + \bar{V}_1$, 其中 T_1^0 是 $k_1 - 1$ 层饱和的, T_3^0 是 k_3 层饱和的, $|V_1| = (A-1) \times A^{k_3}$. 考虑到图转换的结果变化, 可知 $\Delta W = W(U) - W(\bar{U}) = \sum_{x \in U} d(V_1, x) - \sum_{y \in \bar{U}} d(\bar{V}_1, y)$, 分为以下五步, 前四步与引理 5 的证明类似, 第五步为 $W(V_1, V_2)$ 与 $W(\bar{V}_1, V_2)$ 的差, 分为两种情况。

情况 1: T_1 是 k_1 饱和的。

$$\begin{aligned} |V_2| &= A^{k_3} + (A-1) \times A^{k_3+1} + (A-1) \times A^{k_3+2} + \cdots + (A-1) \times A^{k_1-1} + A^{k_1} \\ &= (A-1) \times A^{k_1} - (A-1) \times A^{k_3}, \\ W(V_1, V_2) &= |V_1| \times \left[(A-1) \times (k_3+1) \times A^{k_3} + (A-1) \times (k_3+2) \times 2 \times A^{k_3+1} \right. \\ &\quad \left. + (A-1) \times (k_3+3) \times 2 \times A^{k_3+2} + \cdots + (A-1) \times k_1 \times 2 \times A^{k_1-1} \right. \\ &\quad \left. + (A-1) \times (k_1+1) \times A^{k_1} \right], \\ W(V_1, V_2) &= |V_1| \times 2(A-1) \times \left\{ A^{k_1} \times \left[1 + \frac{A \times k_1}{A-1} - \frac{A}{(A-1)^2} \right] - A^{k_3} \times \left[1 + \frac{k_3}{A-1} - \frac{A}{(A-1)^2} \right] \right\}. \\ W(V_1, V_2) - W(\bar{V}_1, V_2) &= |V_1| \times (A-1) \times \left\{ \left[\frac{A+1}{A-1} \times k_1 - k_3 - \frac{A^2+1}{A-1} \right] \times A^{k_1} + \left[k_1 - \frac{A-3}{A-1} \times k_3 + \frac{A^2+1}{(A-1)^2} \right] \times A^{k_3} \right\} \\ &> 0. \end{aligned}$$

前四部分的距离差之和与第五部分均大于零, 结论成立。

情况 2: T_1 是 k_1 不饱和的。

2-1:

$$\begin{aligned} |V_2| &= A^{k_3} + (A-1) \times A^{k_3+1} + (A-1) \times A^{k_3+2} + \cdots + (A-1) \times A^{k_1-1} + m \\ &= A^{k_1} - (A-1) \times A^{k_3} + m, \\ W(V_1, V_2) &= |\bar{V}_1| \times \left[2 \times \left(k_1 - \frac{A^2 - 4A + 6}{A-1} \right) \times A^{k_1} - \left(2A - 2 + 2k_3 - \frac{2A}{A-1} \right) \times A^{k_3} + 2(k_1+1) \times m \right], \\ W(\bar{V}_1, V_2) &= |\bar{V}_1| \times (k_1 + k_3 + 3) \times \left[A^{k_1} - (A-1) \times A^{k_3} + m \right], \\ W(V_1, V_2) - W(\bar{V}_1, V_2) &= |V_1| \times \left\{ \left(k_1 - \frac{2A^2 - A + 1}{A-1} \right) \times A^{k_1} + \left[(A-1) \times k_1 + (A-1) \times k_3 + \frac{A^2+1}{A-1} \right] \times A^{k_3} - (k_1 + k_3 + 3) \times m \right\}. \end{aligned}$$

其中 $1 \leq m \leq A^{k_1}$ 。

当 $A=3$, 即 $\Delta=4$, 设 $k_1 - k_3 - 3 \geq 0, k_2 \geq k_3$, 得到五部分之和大于零, 显然, 当 $k_1 \geq k_3 + 4$ 时, 结论成立。

当 $A=4$, 即 $\Delta=5$, 设 $k_1 \geq \frac{3}{5} \times k_3 + \frac{9}{5}, k_2 \geq k_3$, 得到五部分之和大于零, 显然, 当 $k_1 \geq 3 \times k_3 + 6$ 时,

结论成立。

2-2:

$$\begin{aligned} |V_2| &= A^{k_3} + (A-1) \times A^{k_3+1} + (A-1) \times A^{k_3+2} + \cdots + (A-1) \times A^t + n \\ &= A^{t+1} - (A-1) \times A^{k_3} + m, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W(V_1, V_2) &= |V_1| \times \frac{4}{A-1} \times \left\{ (3A + 2A \times k_3 - A^2 - A^2 \times k_3 + 1) \times A^{k_3} \right. \\ &\quad \left. + [A \times (t-1) - (t+2)] \times A^{t+1} + (A-1) \times (t+2) \times m \right\} \end{aligned}$$

$$W(\bar{V}_1, V_2) = |V_1| \times (k_1 + k_3 + 3) \times [A^{t+1} - (A-1) \times A^{k_3} + n],$$

$$\begin{aligned} &W(V_1, V_2) - W(\bar{V}_1, V_2) \\ &= |V_1| \times \left[\left(4t - k_1 - k_3 + \frac{A-5}{A-1} \right) \times A^{t+1} + \left[(A-1) \times k_1 + \left(\frac{4}{A-1} - 3 \times A + 3 \right) \times k_3 - 7 - A \right] \times A^{k_3} \right. \\ &\quad \left. + (4t - k_1 - k_3 + 1) \times m \right], \end{aligned}$$

其中 $k_3 + 1 \leq t \leq k_1 - 2$, $0 < m < (A-1) \times A^{t+1}$ 。

当 $A=3$, 即 $\Delta=4$, 设 $k_1 - k_3 \geq 4$, $k_2 \geq k_3$, 五部分距离差相加, 由引理 1、2、3 和 4 得

$$\begin{aligned} &W(U) - W(\bar{U}) \\ &= |V_1| \times \left\{ \left(k_1 - k_3 - \frac{7}{2} \right) \times 3^{k_1-1} + (k_1 - k_3) \times (3^{k_2} + 1) + \left(3k_1 - 5k_3 - \frac{15}{2} \right) \times 3^{k_3} \right. \\ &\quad \left. + (4t - k_1 - k_3 - 2) \times 3^{t+1} + (4t - k_1 - k_3 + 11) \times m \right\} \\ &> |V_1| \times \left\{ \left(k_1 - k_3 - \frac{7}{2} \right) \times 3^{k_1-1} + \left(4t + 3k_1 - 3k_3 - \frac{19}{2} \right) \times 3^{k_3} + (4t - k_1 - k_3 + 11) \times n + (k_1 - k_3) \right\} \\ &> 0. \end{aligned}$$

当 $A=4$, 即 $\Delta=5$, 可得五部分距离差相加, 由引理 1、2、3 和 4 得

$$\begin{aligned} 4t - k_1 - k_3 - \frac{1}{3} &\geq 0, \\ 3k_1 - \frac{23}{5} \times k_3 - 11 &\geq 0, \\ 3 \times k_3 - k_1 + 5 &\geq 0. \end{aligned}$$

因此, 当 $A=4$, 即 $\Delta=5$, $k_1 \geq 3 \times k_3 + 6$, 可得 $W(\bar{U}) \leq W(U)$ 。

□

引理 7: 设 \mathcal{T} -单圈图 $U, \bar{U} \in \mathcal{U}(\Delta, 3, n)$, 其中当 $\Delta=4, k_1 - k_3 \geq 4$; 或当 $\Delta=5, k_1 \geq 3 \times k_3 + 6$, U 的 \mathcal{T} -悬挂树满足 $n_1 = A^{k_1-1} + |V_{h_{k_1}}|, n_2 = A^{k_2}, n_3 = A^{k_3-1} + |V_{h_{k_3}}|$, 若 $1 \leq |V_{h_{k_3}}| < (A-1) \times A^{k_3-1}$,

$1 \leq |V_{h_{k_1}}| \leq (A-1) \times A^{k_3-1} - |V_{h_{k_3}}|$, 则将 T_1 的 h_{k_1} 上所有顶点移至 T_3 的 k_3 层, 使得 T_1 的 $k_1 - 1$ 层饱和, 得到新 \mathcal{T} -单圈图 \bar{U} 的 \mathcal{T} -悬挂树满足 $n'_1 = A^{k_1-1}, n'_2 = n_2, n'_3 = n_3 + |V_{h_{k_1}}|$, 则有

$$h(T'_1) - h(T'_3) \leq h(T_1) - h(T_3), W(\bar{U}) \leq W(U).$$

证明: 如图 4(a)所示, 可知层数和点数的变化:

$$k'_1 = k_1 - 1, k'_2 = k_2, k'_3 = k_3.$$

设 \mathcal{T} -悬挂树 $T_1 = T_1^0 + V_1, T_3 = T_3^0 + V_3 + \bar{V}_1$, 其中 T_1^0 是 $k_1 - 1$ 层饱和的, T_3^0 是 k_3 层饱和的, $|V_1| = |V_{h_{k_1}}|$, V_3 是原 T_3 中 h_{k_3} 上的顶点集。考虑到图转换的结果变化, 可知 $\Delta W = W(U) - W(\bar{U}) = \sum_{x \in U} d(V_1, x) - \sum_{y \in \bar{U}} d(\bar{V}_1, y)$,

分为以下五步, 前四步与引理 5 的证明类似, 第五步为 $W(V_1, V_3)$ 与 $W(\bar{V}_1, V_3)$ 的差,

$$W(V_1, V_3) - W(\bar{V}_1, V_3) \geq |V_1| \times |V_3| \times (k_1 + 1 + k_3 - 2k_3) > 0.$$

五部分距离差均为非负, 结论成立。□

引理 8: 设 \mathcal{T} -单圈图 $U, \bar{U} \in \mathcal{U}(\Delta, 3, n)$, 其中当 $\Delta = 4, k_1 - k_3 \geq 4$; 或当 $\Delta = 5, k_1 \geq 3 \times k_3 + 6$, U 的 \mathcal{T} -悬挂树满足 $n_1 = A^{k_1-1} + |V_{h_{k_1}}|, n_2 = A^{k_2}, n_3 = A^{k_3-1} + |V_{h_{k_3}}|$, 若 $1 \leq |V_{h_{k_3}}| < (A-1) \times A^{k_3-1}$,

$(A-1) \times A^{k_3-1} - |V_{h_{k_3}}| < |V_{h_{k_1}}| \leq (A-1) \times A^{k_1-1}$, 则将 T_1 的 h_{k_1} 上部分顶点移至 T_3 的 k_3 层, 使其 $k_1 - 1$ 层饱和, 得到新 \mathcal{T} -单圈图 \bar{U} 的 \mathcal{T} -悬挂树满足 $n'_1 = A^{k_1-1}, n'_2 = n_2, n'_3 = n_3 + |V_{h_{k_1}}|$, 则有

$$h(T'_1) - h(T'_3) \leq h(T_1) - h(T_3), W(\bar{U}) \leq W(U).$$

证明: 如图 4(b)所示, 可知层数和点数的变化:

$$k'_1 = k_1, k'_2 = k_2, k'_3 = k_3.$$

设 \mathcal{T} -悬挂树 $T_1 = T_1^0 + V_1 + V_2, T_3 = T_3^0 + V_3 + \bar{V}_1$, 其中 T_1^0 是 $k_1 - 1$ 层饱和的, T_3^0 是 k_3 层饱和的, $|V_1| = |V_{h_{k_1}}|$, V_2, V_3 分别是原悬挂树中 h_{k_1}, h_{k_3} 上的顶点集。考虑到图转换的结果变化, 可知

$\Delta W = W(U) - W(\bar{U}) = \sum_{x \in U} d(V_1, x) - \sum_{y \in \bar{U}} d(\bar{V}_1, y)$, 分为以下五步, 前四步与引理 5 证明类似, 第五步为

$W(V_1, V_3) + W(V_1, V_2)$ 与 $W(\bar{V}_1, V_2) + W(\bar{V}_1, V_3)$ 的差。

考虑到 V_1, V_2, V_3, \bar{V}_1 在 \mathcal{T} -悬挂树中顶点分布, 将 V_2 划分为两部分, 其中一部分与 V_3 相等, 便可得 $W(V_1, V_3) = W(\bar{V}_1, V_2), W(V_1, V_2) = W(\bar{V}_1, V_3)$ 。

五部分距离差均为非负, 结论成立。□

定理 1: 设 \mathcal{T} -单圈图 $U(\Delta, n_1, n_2, n_3), \bar{U}(\Delta, n'_1, n'_2, n'_3) \in \mathcal{U}(\Delta, 3, n)$, 其中当 $\Delta = 4, k_1 - k_3 \geq 4$; 或当 $\Delta = 5, k_1 \geq 3 \times k_3 + 6$, 有 \mathcal{T} -悬挂树 $\bar{U}(\Delta, n'_1, n'_2, n'_3)$ 满足

$$W(\bar{U}(\Delta, n'_1, n'_2, n'_3)) \leq W(U(\Delta, n_1, n_2, n_3)).$$

证明: \mathcal{T} -单圈图 U 有四类图转换, 如图 3 和图 4 所示, 分别对应引理 1、2、3 和 4。

任一 \mathcal{T} -单圈图 U , 当 $\Delta = 4$ 且 $k_1 \geq k_3 + 4$; 或当 $\Delta = 5$ 且 $k_1 \geq 3 \times k_3 + 6$, 通过不断调整顶点分布, 使得 \mathcal{T} -悬挂树间层差降低, 最终有 $k_1 \geq k_2 \geq k_3$, $k_1 \geq k_3 + 4$ 或 $k_1 \geq 3 \times k_3 + 6$ 。□

5. 总结展望

以上述单圈图定理为基础, 使用末层划分的图转换方法, 将转换过程按图结构分为四种情况, 以层差关系刻画两类单圈图极值图结构, 同时更正了前人结论。

本文研究了关于单圈图的维纳指数极图结构, 经过计算方式的探索与比较以及图结构分析, 取得一

定成果, 但是本文研究方向仍有值得探索的问题:

1) 给定阶数、最大度和围长的单圈图, 寻求合适的方法, 找到与 Δ 相关的函数 $n \geq f(\Delta)$ 限定, 得到维纳指数最小时的极图结构特点。

2) 将理论结果与实验数据相结合, 探索维纳指数极值图结构中层差、最大度、阶数, 甚至是围长的关系。

3) 将图论思想与模型结合, 用理学思想运用计算机技术, 学会用计算机技术便捷、有预见性地解决图论极值与极图问题。

基金项目

国家自然科学基金项目(12201273); 浙江省自然科学基金项目(LY21A010002)。

参考文献

- [1] Gao, X.R. and Yang, N. (2017) Establishment of the Index System for Paper Evaluation by Social Network Analysis. *Information Science*, **35**, 97-102, 144.
- [2] Gupta, S., Sunil, M. and Madan, A. (2002) Application of Graph Theory: Relationship of Eccentric Connectivity Index and Wiener's Index with Anti-Inflammatory Activity. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, **266**, 259-268. <https://doi.org/10.1006/jmaa.2000.7243>
- [3] Yang, N. and Yang, L. (2012) QSPR Study for a New Index Defined Based on the Wiener and Physicochemical Properties of Organic Ketones. *Journal of Southwest University*, **34**, 62-66.
- [4] Zhou, X.N. (2017) Application of Graph Theory in Channel Routing and Research of Wiener Index. Master's Thesis, Anhui University of Science and Technology, Huainan.
- [5] Casablanca, R.M. and Dankelmann, P. (2018) Distance and Eccentric Sequences to Bound the Wiener Index, Hosoya Polynomial and the Average Eccentricity in the Strong Products of Graphs. *Discrete Applied Mathematics*, **263**, 105-117. <https://doi.org/10.1016/j.dam.2018.07.009>
- [6] Entringer, R.C., Jackson, D.E. and Snyder, D.A. (1976) Distance in Graphs. *Czechoslovak Mathematical Journal*, **26**, 283-296. <https://doi.org/10.21136/CMJ.1976.101401>
- [7] Lin, H. (2014) Extremal Wiener Index of Trees with Given Number of Vertices of Even Degree Sequence. *Match-Communications In Mathematical and In Computer Chemistry*, **72**, 311-320.
- [8] Plesník, J. (1984) On the Sum of All Distances in a Graph or Digraph. *Journal of Graph Theory*, **8**, 1-21. <https://doi.org/10.1002/jgt.3190080102>
- [9] Soltés, L. (1991) Transmission in Graphs: A Bound and Vertex Removing. *Mathematica Slovaca*, **41**, 11-16.
- [10] Zhang, X.D. (2008) The Laplacian Spectral Radii of Trees with Degree Sequences. *Discrete Mathematics*, **308**, 3143-3150. <https://doi.org/10.1016/j.disc.2007.06.017>
- [11] Luo, P., Zhang, C.Q. and Zhang, X.D. (2020) Wiener Index of Unicycle Graphs with Given Number of even Degree Vertices, *Discrete Mathematics. Algorithms and Applications*, **12**, Article ID: 2050054. <https://doi.org/10.1142/S1793830920500548>
- [12] Chen, Y.H. and Zhang, X.D. (2012) The Wiener Index of Unicyclic Graphs with Girth and the Matching Number. *Ars Combinatoria*, **106**, 115-128.
- [13] Du, Z. and Bo, Z. (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.
- [14] Yu, G.H. and Feng, L.H. (2010) On the Wiener Index of Unicyclic Graphs with Given Girth. *Ars Combinatoria*, **94**, 361-369.
- [15] Du, Z.B. and Zhou, B. (2009) On the Reverse Wiener Indices of Unicyclic Graphs. *Acta Applicandae Mathematicae*, **106**, 293-306. <https://doi.org/10.1007/s10440-008-9298-z>
- [16] Ren, C.R. and Shi, J.S. (2018) On the Wiener Index of Unicyclic Graphs with Fixed Diameter. *Journal of East China University of Science and Technology*, **6**, 768-772.
- [17] Tan, S.W. (2018) The Minimum Wiener Index of Unicyclic Graphs with a Fixed Diameter. *Journal of Applied Mathematics and Computing*, **56**, 93-114. <https://doi.org/10.1007/s12190-016-1063-2>
- [18] Hong, Y., Liu, H.Q. and Wu, X.Y. (2011) On the Wiener Index of Unicyclic Graphs. *Hacettepe Journal of Mathematics*

ics and Statistics, **2**, 63-68.

- [19] Wu, Y. (2019) The Minimum Wiener Index of Unicyclic Graph with Given Pendant Vertices. *Advances in Computational Science and Computing*, **877**, 21-27. https://doi.org/10.1007/978-3-030-02116-0_3
- [20] Fischermann, M., Hoffmann, A. and Rautenbach, D. (2002) Wiener Index Versus Maximum Degree in Trees. *Discrete Applied Mathematics*, **122**, 127-137. [https://doi.org/10.1016/S0166-218X\(01\)00357-2](https://doi.org/10.1016/S0166-218X(01)00357-2)