

基于 *Kirchhoff* 指标的极值多边形链

李成敏^{1*}, 边红^{1†}, 于海征²

¹新疆师范大学, 数学科学学院, 新疆 乌鲁木齐

²新疆大学, 数学与系统科学学院, 新疆 乌鲁木齐

收稿日期: 2023年11月22日; 录用日期: 2023年12月7日; 发布日期: 2024年1月19日

摘要

令 G 是一个简单连通图。图 G 的 *Kirchhoff* 指标是图 G 中所有顶点对之间的电阻距离之和。图 G 的电阻距离等效于将图 G 中的每条边替换为一个单位电阻后得到的电网络 N 中任意节点对之间的有效电阻。一个包含 $n+2$ 个多边形和 $n+1$ 个四边形的链, 使得其中每个四边形的两条平行边各与一个多边形有一条公共边, 这样的链被称为多边形链。本文利用电网络的标准技术和 S, T -同分异构体的 *Kirchhoff* 指标的比较结果, 刻画了 *Kirchhoff* 指标达到最大的极值多边形链为线性多边形链 L_n , *Kirchhoff* 指标达到最小的极值多边形链为螺旋多边形链 D_n 。此结果推广了杨玉军等人以及张雷雷刻画的基于 *Kirchhoff* 指标的极值亚苯基链的结果。

关键词

Kirchhoff 指标, 多边形链, 电阻距离, S, T -同分异构体

Extremal Polygonal Chains with Respect to the *Kirchhoff* Index

Chengmin Li^{1*}, Hong Bian^{1†}, Haizheng Yu²

¹School of Mathematical Sciences, Xinjiang Normal University, Urumqi Xinjiang

²College of Mathematics and System Sciences, Xinjiang University, Urumqi Xinjiang

* 第一作者。

† 通讯作者。

Received: Nov. 22nd, 2023; accepted: Dec. 7th, 2023; published: Jan. 19th, 2024

Abstract

Let G be a simple connected graph. The *Kirchhoff* index of a graph is the sum of the resistance distance between all vertex pairs in the graph G . The resistance distance in a graph is equivalent to the effective resistance between any node pairs in the electrical network obtained by replacing each edge in the graph G with a unit resistance. A chain containing $n + 2$ polygons and $n + 1$ squares such that each of the two parallel edges in squares has a common edge with a polygon is denoted as polygonal chains. In this paper, we use the standard techniques of electrical networks and the compare result of the *Kirchhoff* index of the S,T-isomers, characterize that the extremal polygonal chain with the maximal *Kirchhoff* index is the linear polygonal chain L_n and the extremal polygonal chain with the minimal *Kirchhoff* index is the helicene polygonal chain D_n , which generalizes the extremal *Kirchhoff* index of phenylene chains by Yujun Yang *et al.* and Leilei Zhang.

Keywords

Kirchhoff Index, Polygonal Chains, Resistance Distance, S,T-Isomers

Copyright © 2024 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/>



1. 介绍

本文只考虑简单连通图 $G = (V(G), E(G))$, 其中 $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. Klein 和 Randić [1]于 1993 年首次提出了电阻距离的概念. 图 G 中任意一个顶点对 v_i, v_j 之间的电阻距离等效于将图 G 中的每条边替换为一个单位电阻后得到的电网络 N 中任意一个节点对之间的有效电阻, 记作 $\Omega_G(v_i, v_j)$. *Kirchhoff* 指标是图 G 中所有顶点对之间的电阻距离之和, 表示为

$$Kf(G) = \sum_{v_i, v_j \subseteq V(G)} \Omega_G(v_i, v_j). \quad (1)$$

拓扑指标是定量描述分子结构的图参数, 近些年许多的专家学者都致力于研究拓扑指标与图结构之间的关系, 其中研究一些具有最大和最小拓扑指标的图类的极图和极值是一个非常重要的研究方向. 在图论中, 电阻距离相较于一般的距离 (图中任意两个顶点之间的最短路径) 来说, 能够更好的衡量图中每个顶点之间的关系, 从而帮助我们加深对图结构的理解. 而在电网络理论中, *Kirchhoff* 指标与电网络的稳定性密切相关, 它是评估电网络稳定性的一个重要性能指标. *Kirchhoff* 指标相当于电网络 N 中电流的平均功耗, 若 *Kirchhoff* 指标越小, 这就意味着电网络 N 在单位时间内电流的平均功耗越小, 则电网络的稳定性就越好. *Kirchhoff* 指标作为一种拓扑指标, 不仅有助于描述数学中图形的相关性质, 而且在化学和物理领域也发挥着相应的重要作用 [2-4].

对于图 $G = (V(G), E(G))$ 和 $v_k \in V(G)$, v_k 的电阻偏心率指标指顶点 v_k 与图 G 中所有其他顶点之间的电阻距离之和, 记作

$$\Omega_G(v_k) = \sum_{\substack{v_i \neq v_k \\ v_i \in V(G)}} \Omega_G(v_k, v_i). \tag{2}$$

S, T -同分异构体类似于化学中分子式相同但结构不同的同分异构体. 它表示为一个可以划分成 A 和 B 两部分的图 G , 且这两部分可以用两种不同的方式双向连接起来 (如图 1 所示).

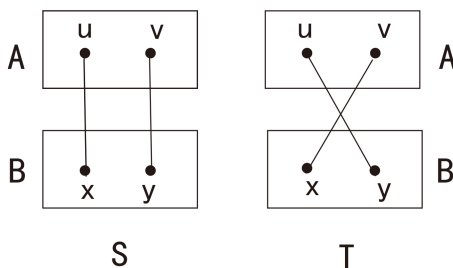


Figure 1. S, T -isomers and Two two-way connection models

图 1. S, T -同分异构体和两种双向连接方式

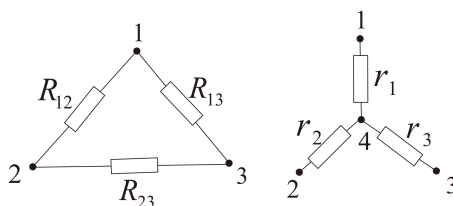


Figure 2. Δ -Y transformation

图 2. Δ -Y 变换

串联规则指图的总电阻 R 等效于图中所有单个电阻之和, 即 $R = R_1 + R_2 + \dots + R_n$. 并联规则指图的总电阻的倒数 $\frac{1}{R}$ 等效于图中所有单个电阻的倒数之和, 即 $\frac{1}{R} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} + \dots + \frac{1}{R_n}$.

令 Δ -网络和 Y -网络的电阻如图 2 所示, 若两个网络之间的电阻满足

$$r_1 = \frac{R_{12}R_{13}}{R_{12} + R_{13} + R_{23}}, r_2 = \frac{R_{12}R_{23}}{R_{12} + R_{13} + R_{23}}, r_3 = \frac{R_{13}R_{23}}{R_{12} + R_{13} + R_{23}}$$

则称为 Δ - Y 变换.

令图 $G = (V(G), E(G))$, 其中 $E(G) = (e_1, e_2, \dots, e_n)$. 边赋权图是指图 G 的边集 $E(G)$ 中的每一条边 e_i 都有一个赋权函数 $\omega^* : E(G) \rightarrow R^+$, 使得 $\omega^*(e_i) = y_i, i = 1, 2, \dots, n$.

本文只考虑多边形链. 令图 $L(Q)$ 是一个有 $2n + 3$ 个四边形的线性四边形链 (如图 3(a) 所示), 可以通过在 $L(Q)$ 的第 1, 3rd, 5th, \dots , $(2n + 3)$ th 个四边形上添加 $2k$ 个顶点得到多边形链, 其中 $k \geq 1$ 且 k 是正整数 (如图 3(b) 所示). 因此这里有 $2k + 1$ 种添加顶点的方法, 即在四边形的顶边添加 $0, 1, 2, \dots, 2k$ 个顶点, 其余顶点添加到同一四边形的底边上. 从这个角度出发, 假设第一个多边形 $L(Q)_1$ 和最后一个多边形 $L(Q)_2$ 是通过在顶边添加 k 个顶点得到的, 剩下的 n 个多边形用 $\omega_i \in \{0, 1, \dots, 2k\} (i = 1, 2, \dots, n)$ 表示. 那么我们可以用 $P(W)$ 表示具有 $n + 2$ 个多边形和 $n + 1$ 个四边形的多边形链, 其中每个四边形的两条平行边各与一个多边形有一条公共边且 $W = (\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n)$. 含有 $\omega_i \neq k$ 的多边形链 $P(W)$ 称为 "all - kink" 链. 多边形链 $P(\underbrace{k, k, \dots, k}_n)$ 称为线性多边形链, 用 L_n 表示. 多边形链 $P(\underbrace{0, 0, \dots, 0}_n)$ (与 $P(\underbrace{2k, 2k, \dots, 2k}_n)$ 同构) 称为螺旋多边形链, 用 D_n 表示.

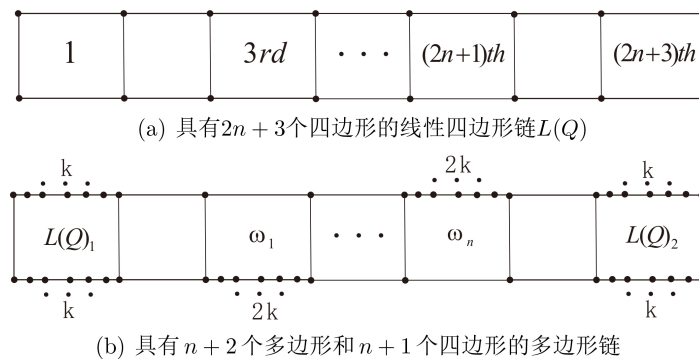


Figure 3. Add vertices to a linear quadrilateral chain to get a polygonal chain

图 3. 在线性四边形链中添加顶点得到多边形链

在 2014 年, 杨玉军和 Klein [5] 提出了 S, T -同分异构体的 $Kirchhoff$ 指标的比较定理, 证明了具有最大 $Kirchhoff$ 指标的六角链为直六角链, 并指出具有最小 $Kirchhoff$ 指标的六角链应该在 "all - kink" 链中.

在 2019 年, 杨玉军和王大勇 [6] 刻画了具有最大 $Kirchhoff$ 指标的亚苯基链为线性亚苯基链, 而具有最小 $Kirchhoff$ 指标的亚苯基链应该在 "all - kink" 链中.

在 2022 年 6 月, 杨玉军和孙文胜 [7] 刻画了具有最大 $Kirchhoff$ 指标的 "all - kink" 六边形链为之字形六边形链, 具有最小 $Kirchhoff$ 指标的 "all - kink" 六边形链为螺旋六边形链.

在 2022 年 9 月, Ma Qi [8] 在 *arxiv* 上发布了具有最小和最大 $Kirchhoff$ 指标的八边形链.

在 2023 年 1 月, 孙文胜和杨玉军 [9]刻画了具有最小和最大 *Kirchhoff* 指标的五边形链.

在 2023 年 6 月, 张雷雷 [10]刻画了具有最小 *Kirchhoff* 指标的 "all - kink" 亚苯基链, 即螺旋亚苯基链.

2. 主要结果

令 G_1 是一个包含 n 个多边形 P_1, P_2, \dots, P_n 和 n 个四边形 S_1, S_2, \dots, S_n 的多边形链, 其中 c_i, d_i 是四边形 S_i 中顶边的顶点, e_i, f_i 是四边形 S_i 中底边的顶点, $i = 1, 2, \dots, n$. 令 G_2 是一个包含 n 个多边形 P_1, P_2, \dots, P_n 和 $n - 1$ 个四边形 S_1, S_2, \dots, S_{n-1} 的多边形链, 其中 c_i, d_i 是四边形 S_i 中顶边的顶点, e_i, f_i 是四边形 S_i 中底边的顶点, $i = 1, 2, \dots, n - 1$, 且顶点 h 是多边形 P_1 中度为 2 的顶点.

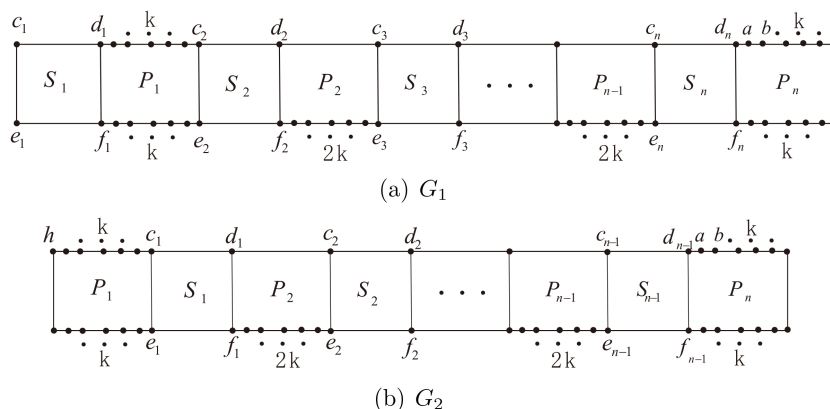


Figure 4. Polygonal chains G_1 and G_2

图 4. 多边形链 G_1 和 G_2

引理 2.1. 如果 G_1 是一个赋权图, 且边 $d_n f_n$ 的权重为 1. 令顶点 a 是顶点 d_n 在多边形 P_n 中度为 2 的邻点, 且顶点 b 是顶点 a 的另一个邻点, 那么 $\Omega_{G_1}(c_1, a) < \Omega_{G_1}(c_1, b)$ (如图 4(a)所示).

证明: 为了证明 $\Omega_{G_1}(c_1, a) < \Omega_{G_1}(c_1, b)$, 我们需要简化图 G_1 . 首先用新的边 $c_1 d_1$ 替换 $c_1 d_1$ 之间的路径, 用新的边 $c_1 f_1$ 替换 $c_1 e_1 f_1$ 之间的路径, 可以得到一个三角形网络, 如图 5(a)所示. 通过 Δ -Y 变换, 我们可以把它变成一个以 p_1 为中心的 $c_1 p_1 d_1 f_1$ Y- 网络, 记作为 $G_1^{(1)}$, 如图 5(b)所示. 不断重复上述步骤, 最终可以得到一个与 G_1 等价的简化网络 $G_1^{(2n-1)}$, 如图 5(d)所示. 令边 $d_n p_{2n-1}$ 的权重为 x , 边 $f_n p_{2n-1}$ 的权重为 y , 根据图 5(c) 到图 5(d)的 Δ -Y 变换, 很容易得到 $0 < x < 1, 0 < y < 1$, 那么有

$$\Omega_{G_1}(c_1, a) = \Omega_{G_1^{(2n-1)}}(c_1, a) = \Omega_{G_1^{(2n-1)}}(c_1, p_{2n-1}) + \frac{(x+1)(y+2+2k)}{x+y+3+2k}, \tag{3}$$

$$\Omega_{G_1}(c_1, b) = \Omega_{G_1^{(2n-1)}}(c_1, b) = \Omega_{G_1^{(2n-1)}}(c_1, p_{2n-1}) + \frac{(x+2)(y+1+2k)}{x+y+3+2k}. \tag{4}$$

因此, 由公式 (3) 和公式 (4) 有 $\Omega_{G_1}(c_1, a) - \Omega_{G_1}(c_1, b) = \frac{x-y-2k}{x+y+3+2k} < 0$.

则 $\Omega_{G_1}(c_1, a) < \Omega_{G_1}(c_1, b)$, 证明完成.

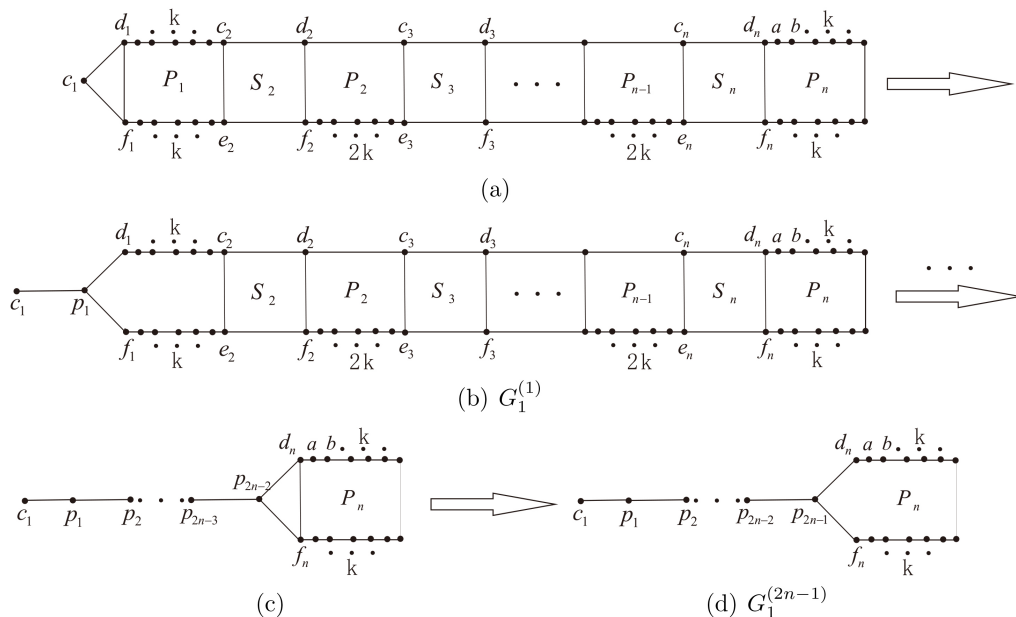


Figure 5. Steps for simplify the graph G_1

图 5. 化简 G_1 的步骤

推论 2.2. 如果 G_1 是一个赋权图, 且边 $d_n f_n$ 的权重为 1, 令顶点 a 是顶点 d_n 在多边形 P_n 中的邻点, 且顶点 b 是顶点 a 的另一个邻点, 那么 $\Omega_{G_1}(e_1, a) < \Omega_{G_1}(e_1, b)$.

证明: $\Omega_{G_1}(e_1, a) < \Omega_{G_1}(e_1, b)$ 的证明与引理 2.1 的证明类似.

引理 2.3. 如果 G_2 是一个赋权图, 且边 $d_{n-1} f_{n-1}$ 的权重为 1. 令顶点 a 是顶点 d_{n-1} 在多边形 P_n 中的度为 2 的邻点, 且顶点 b 是顶点 a 的另一个邻点, 对于 $V(P_1) \setminus \{c_1, e_1\}$ 中的任意顶点 h 都有 $\Omega_{G_2}(h, a) < \Omega_{G_2}(h, b)$ (如图 4(b)所示).

证明: $\Omega_{G_2}(h, a) < \Omega_{G_2}(h, b)$ 的证明与引理 2.1 的证明类似.

引理 2.4. [5] 令 S, T, A, B, u, v, x, y 的定义如图 1. 所示, 那么

$$Kf(S) - Kf(T) = \frac{[\Omega_A(u) - \Omega_A(v)][\Omega_B(y) - \Omega_B(x)]}{2 + \Omega_A(u, v) + \Omega_B(x, y)}.$$

定理 2.5. 在所有包含 $n + 2$ 个多边形和 $n + 1$ 个四边形的多边形链中, 螺旋多边形链 D_n 的 *Kirchhoff* 指标最小.

证明: 假设 $G(P)$ 是 "all - kink" 链, $W = (\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n)$, 其中 $\omega_i \neq k, i = 1, 2, \dots, n$, 且 $G(P)$ 在所有多边形链中具有最小的 *Kirchhoff* 指标. 在不失一般性的前提下, 令 $\omega_1 = 0$. 如果 $G(P) \neq D_n$, 那么一定存在一个整数 i , 使得 $\omega_i = 0$, 且 $\omega_{i+1} = 2k, 1 \leq i \leq n - 1$. 令四边形 S_i 中位于 P_i 和 P_{i+1} 之间的顶点为 c_i, d_i, e_i, f_i (如图 6(a)所示). 令图 G 是从 $G(P)$ 中删除边 $\{c_i d_i, e_i f_i\}$ 并添加两条新边 $\{c_i f_i, d_i e_i\}$ 后得到的图 (如图 6(b)所示), 那么 $G(P)$ 和 G 是 S, T -同

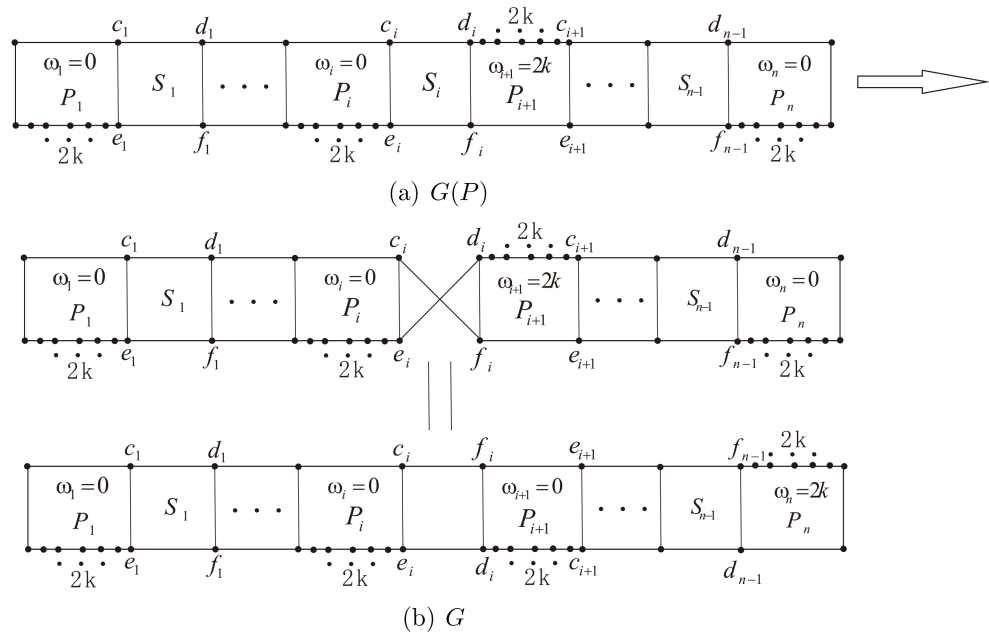


Figure 6. Graphs $G(P)$ and G in the proof of Theorem 2.5

图 6. 证明定理 2.5. 中的 $G(P)$ 和 G

分异构体. 令 A 和 B 是 $G - \{c_i f_i, d_i e_i\}$ 的两个分量, 且 $c_i, e_i \in V(A)$, $d_i, f_i \in V(B)$. 接下来将证明 $Kf(G) < Kf(G(P))$. 由引理 2.4., 有

$$Kf(G(P)) - Kf(G) = \frac{[\Omega_A(c_i) - \Omega_A(e_i)][\Omega_B(f_i) - \Omega_B(d_i)]}{2 + \Omega_A(c_i, e_i) + \Omega_B(d_i, f_i)}, \tag{5}$$

首先比较 $\Omega_A(c_i)$ 和 $\Omega_A(e_i)$ 的大小. 令 $V(A) = (\cup_{j=1}^{i-1} V(P_j) \setminus V(S_j)) \cup (\cup_{j=1}^{i-1} V(S_j) \setminus V(P_{j+1})) \cup V(P_i)$.

(i) 如果 $y \in V(P_j) \setminus V(S_j)$, $1 \leq j \leq i - 1$, 根据串联和并联规则, 可以将分量 A 简化为具有多边形 P_j, P_{j+1}, \dots, P_i 和四边形 $S_j, S_{j+1}, \dots, S_{i-1}$ 的赋权多边形链 (如图 7(a)所示). 由引理 2.3. 有 $\Omega_A(y, c_i) < \Omega_A(y, e_i)$. 因此

$$\sum_{y \in \cup_{j=1}^{i-1} V(P_j) \setminus V(S_j)} \Omega_A(y, c_i) < \sum_{y \in \cup_{j=1}^{i-1} V(P_j) \setminus V(S_j)} \Omega_A(y, e_i). \tag{6}$$

(ii) 如果 $y \in V(S_j) \setminus V(P_{j+1})$, $1 \leq j \leq i - 1$, 根据串联和并联规则, 可以将分量 A 简化为具有多边形 $P_{j+1}, P_{j+2}, \dots, P_i$ 和四边形 $S_j, S_{j+1}, \dots, S_{i-1}$ 的赋权多边形链 (如图 7(b)所示). 由引理 2.3. 有 $\Omega_A(y, c_i) < \Omega_A(y, e_i)$. 因此

$$\sum_{y \in \cup_{j=1}^{i-1} V(S_j) \setminus V(P_{j+1})} \Omega_A(y, c_i) < \sum_{y \in \cup_{j=1}^{i-1} V(S_j) \setminus V(P_{j+1})} \Omega_A(y, e_i). \tag{7}$$

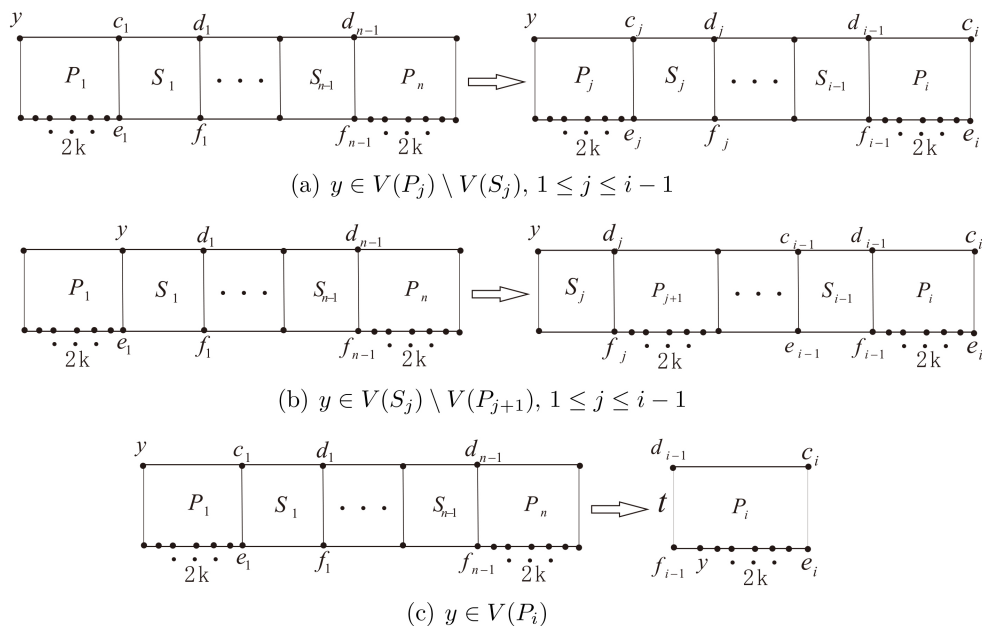


Figure 7. Three classes of vertices in the component A

图 7. 分支 A 中的三类顶点

(iii) 如果 $y \in V(P_i)$, 根据串联和并联规则, 可以将分量 A 简化为多边形 P_i (如图 7(c)所示). 令 $d_{i-1}f_{i-1} = t (0 < t < 1)$, 其他边的权重都为 1. 有

$$\begin{aligned} \sum_{y \in V(P_i)} \Omega_A(y, c_i) &= \frac{2k+t+2}{2k+t+3} + \frac{(t+1)(2k+2)}{2k+t+3} + \frac{(t+2)(2k+1)}{2k+t+3} + \dots \\ &\quad + \frac{(t+2k+1) \cdot 2}{2k+t+3} + \frac{2k+t+2}{2k+t+3}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{y \in V(P_i)} \Omega_A(y, e_i) &= \frac{2k+t+2}{2k+t+3} + \frac{2 \cdot (t+2k+1)}{2k+t+3} + \frac{(t+2)(2k+1)}{2k+t+3} + \dots \\ &\quad + \frac{(t+2k+1) \cdot 2}{2k+t+3} + \frac{2k+t+2}{2k+t+3}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{y \in V(P_i)} \Omega_A(y, c_i) - \sum_{y \in V(P_i)} \Omega_A(y, e_i) &= \frac{(t+1)(2k+2)}{2k+t+3} - \frac{2 \cdot (t+2k+1)}{2k+t+3} \\ &= \frac{2k(t-1)}{2k+t+3} < 0. \end{aligned}$$

因此

$$\sum_{y \in V(P_i)} \Omega_A(y, c_i) < \sum_{y \in V(P_i)} \Omega_A(y, e_i). \tag{8}$$

根据公式(6)-公式(8), 可以得到 $\Omega_A(c_i) < \Omega_A(e_i)$. 与上面的讨论类似, 可以得到 $\Omega_B(f_i) < \Omega_B(d_i)$, 则 $Kf(G) < Kf(G(P))$. 由于在所有多边形链中, $G(P)$ 的 *Kirchhoff* 指标最小, 存在矛盾. 因此 $G(P) = D_n$, 证明完成.

定理 2.6. 令 $P(W)$ 是一个包含 $n + 2$ 个多边形和 $n + 1$ 个四边形的多边形链, 其中 $W = (\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n)$. 如果存在某些整数 $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, 使得 $\omega_i \neq k$, 那么令 $W' = (\omega_1, \dots, \omega_{i-1}, k, 2k - \omega_{i+1}, \dots, 2k - \omega_n)$, 有 $Kf(P(W)) < Kf(P(W'))$.

证明: 因为 $\omega_i \neq k$, 所以令 $\omega_i = 2k$ (其他情况证明类似). 令顶点 w, u, v, x, y 在多边形 P_i 中如图 8(a)所示分布, 其中 u, x 分别是 (k) th, $(k + 1)$ th 在多边形 P_i 顶边上插入的新顶点. 删除边 $\{ux, vy\}$ 并添加边 $\{uy, vx\}$ 后, 得到 $W' = (\omega_1, \dots, \omega_{i-1}, k, 2k - \omega_{i+1}, \dots, 2k - \omega_n)$ ($k > 1$) 如图 8(b)所示. $P(W)$ 和 $P(W')$ 是 S, T -同分异构体, 令 A 和 B 是 $P(W)' - \{uy, vx\}$ 的两个分量, 且 $u, v \in V(A)$, $x, y \in V(B)$. 有

$$Kf(P(W)) - Kf(P(W')) = \frac{[\Omega_A(u) - \Omega_A(v)][\Omega_B(y) - \Omega_B(x)]}{2 + \Omega_A(u, v) + \Omega_B(x, y)}. \tag{9}$$

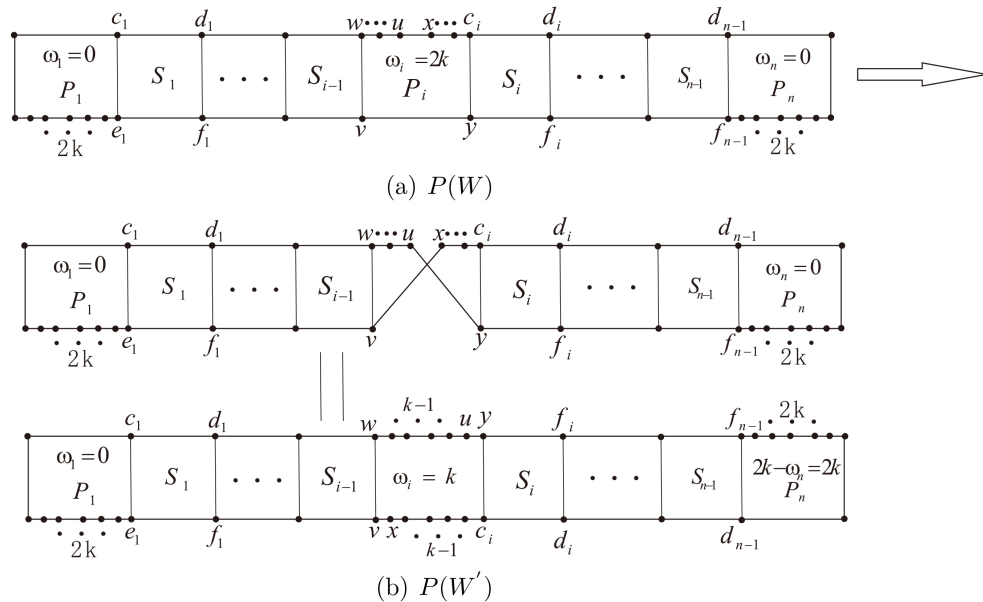


Figure 8. Graphs $P(W)$ and $P(W')$ in the proof of Theorem 2.6

图 8. 证明定理 2.6. 中的 $P(W)$ 和 $P(W')$

首先考虑分量 A 中 $\Omega_A(u)$ 和 $\Omega_A(v)$ 的大小.

(i) 令 $V^1 = (\cup_{j=1}^{i-1} V(P_j)) \cup (\cup_{j=1}^{i-1} V(S_j)) \setminus \{v\}$ ($1 < i < n$), 对 V^1 中的任意顶点 γ (即分量 A 中除 u, v 和 w 到 u 的路径上新插入的顶点外的所有顶点), 有

$$\Omega_A(u, \gamma) = \Omega_A(u, w) + \Omega_A(w, \gamma) = k + \Omega_A(w, \gamma).$$

根据串并联原理, 可以得到 $0 < \Omega_A(w, v) < 1$,

$$\Omega_A(v, \gamma) \leq \Omega_A(v, w) + \Omega_A(w, \gamma) < 1 + \Omega_A(w, \gamma).$$

因此,

$$\begin{aligned} \sum_{\gamma \in V^1} \Omega_A(u, \gamma) - \sum_{\gamma \in V^1} \Omega_A(v, \gamma) &= \sum_{\gamma \in V^1} (\Omega_A(u, \gamma) - \Omega_A(v, \gamma)) \\ &> \sum_{\gamma \in V^1} (k + \Omega_A(w, \gamma) - (1 + \Omega_A(w, \gamma))) \\ &= [(i-1)(2k+4) + 1](k-1). \end{aligned} \quad (10)$$

(ii) 令 $V^2 = V(A) \setminus ((\cup_{j=1}^{i-1} V(P_j)) \cup (\cup_{j=1}^{i-1} V(S_j)) \cup \{u\})$, 对 V^2 中的任意顶点 γ (即从 w 到 u 的路径上所有新插入的顶点), 令 $\Omega_A(v, w) = t$ ($0 < t < 1$), 有

$$\sum_{\gamma \in V^2} \Omega_A(u, \gamma) = (k-1) + (k-2) + \cdots + 3 + 2 + 1,$$

其中共有 $k-1$ 项.

$$\sum_{\gamma \in V^2} \Omega_A(v, \gamma) = (1+t) + (2+t) + \cdots + (k-3+t) + (k-2+t) + (k-1+t).$$

因此,

$$\sum_{\gamma \in V^2} \Omega_A(u, \gamma) - \sum_{\gamma \in V^2} \Omega_A(v, \gamma) = -(k-1)t. \quad (11)$$

由公式 (10)-公式 (11), 有

$$\begin{aligned} \Omega_A(u) - \Omega_A(v) &= \sum_{\gamma \in V(A)} \Omega_A(u, \gamma) - \sum_{\gamma \in V(A)} \Omega_A(v, \gamma) \\ &= \sum_{\gamma \in V(A) \setminus \{u, v\}} (\Omega_A(u, \gamma) - \Omega_A(v, \gamma)) = \sum_{\gamma \in V^1 \cup V^2} (\Omega_A(u, \gamma) - \Omega_A(v, \gamma)) \\ &= \sum_{\gamma \in V^1} (\Omega_A(u, \gamma) - \Omega_A(v, \gamma)) + \sum_{\gamma \in V^2} (\Omega_A(u, \gamma) - \Omega_A(v, \gamma)) \\ &= [(i-1)(2k+4) + 1](k-1) - (k-1)t \\ &= [((i-1)(2k+4) + 1) - t](k-1) > 0. \end{aligned}$$

与上面的讨论类似, 可以得到 $\Omega_B(y) - \Omega_B(x) < 0$. 因此 $Kf(P(W)) < Kf(P(W'))$, 证明完成.

通过定理 2.6. 的证明可知, 如果 $P(W)$ 不是线性多边形链, 那么每从 "all - kink" 多边形链

中“reverse kink”一次, $P(W')$ 的 *Kirchhoff* 指标都会增加, 不断重复“reverse kink”操作, 最终可以得到一个线性多边形链. 因此, 线性多边形链的 *Kirchhoff* 指标会达到最大, 则可以直接得到如下定理.

定理 2.7. 在所有包含 $n + 2$ 个多边形和 $n + 1$ 个四边形的多边形链中, 线性多边形链 L_n 的 *Kirchhoff* 指标最大.

3. 总结

本文利用电网络的标准技术和 S, T -同分异构体的 *Kirchhoff* 指标的比较结果刻画了在所有包含 $n + 2$ 个多边形和 $n + 1$ 个四边形的多边形链中, 螺旋多边形链 D_n 的 *Kirchhoff* 指标最小, 线性多边形链 L_n 的 *Kirchhoff* 指标最大. 当 $k = 1$ 时, 多边形链为亚苯基链, 则此结果推广了杨玉军等人 [6] 以及张雷雷 [10] 刻画的基于 *Kirchhoff* 指标的极值亚苯基链的结果.

基金项目

国家自然科学基金(No.12361072); 2023 新疆维吾尔自治区自然科学基金面上项目(2023D01A36)和2023新疆维吾尔自治区自然科学基金青年项目(2023D01B48); 2021 新疆维吾尔自治区自然科学基金联合项目(2021D01C078); 2023新疆维吾尔自治区研究生精品课项目《抽象代数》; 2022新疆师范大学教学创新团队项目.

参考文献

- [1] Klein, D.J. and Randic, M. (1993) Resistance Distance. *Journal of Mathematical Chemistry*, **12**, 81-95. <https://doi.org/10.1007/BF01164627>
- [2] Karelson, M., Lobanov, V.S. and Katritzky, A.R. (1996) Quantum-Chemical Descriptors in QSAR/QSPR Studies. *Chemical Reviews*, **96**, 1027-1044. <https://doi.org/10.1021/cr950202r>
- [3] Kook, W. and Lee, K.J. (2021) Kirchhoff Index of Simplicial Networks. *Linear Algebra and its Applications*, **626**, 1-19. <https://doi.org/10.1016/j.laa.2021.05.012>
- [4] Li, J. and Wang, W. (2021) The (Degree-) Kirchhoff Indices in Random Polygonal Chains. *Discrete Applied Mathematics*, **304**, 63-75. <https://doi.org/10.1016/j.dam.2021.06.020>
- [5] Yang, Y. and Klein, D.J. (2014) Comparison Theorems on Resistance Distances and Kirchhoff Indices of S, T -Isomers. *Discrete Applied Mathematics*, **175**, 87-93. <https://doi.org/10.1016/j.dam.2014.05.014>
- [6] Yang, Y. and Wang, D. (2019) Extremal Phenylene Chains with Respect to the Kirchhoff Index and Degree-Based Topological Indices. *IAENG International Journal of Applied Mathematics*, **49**, 274-280.
- [7] Yang, Y. and Sun, W. (2022) Minimal Hexagonal Chains with Respect to the Kirchhoff Index. *Discrete Mathematics*, **345**, Article 113099. <https://doi.org/10.1016/j.disc.2022.113099>

-
- [8] Ma, Q. (2022) Extremal Octagonal Chains with Respect to the Kirchhoff Index. arXiv:2209.10264
- [9] Sun, W. and Yang, Y. (2023) Extremal Pentagonal Chains with Respect to the Kirchhoff Index. *Applied Mathematics and Computation*, **437**, Article 127534. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2022.127534>
- [10] Zhang, L. (2023) The Minimum Kirchhoff Index of Phenylene Chains. *Discrete Applied Mathematics*, **340**, 69-75. <https://doi.org/10.1016/j.dam.2023.06.043>