Minimum Wiener Index Value and Polar Graph of Book Graphs

Fuyi Wei^{1,*}, Yongyu Yang¹, Meijun Liang¹, Qu Wei²

¹Institute of Mathematics and Information Software College, South China Agricultural University, Guangzhou, China

²School of Accountancy, Central University of Finance and Economics, Beijing, China

Email address:

weifuyi@scau.edu.cn (Fuyi Wei), 271960884@qq.com (Yongyu Yang), 1152448561@qq.com (Meijun Liang)

*Corresponding author

To cite this article:

Fuyi Wei, Yongyu Yang, Meijun Liang, Qu Wei. Minimum Wiener Index Value and Polar Graph of Book Graphs. *Science Discovery*. Vol. 4, No. 4, 2016, pp. 213-219. doi: 10.11648/j.sd.20160404.12

Received: June 13, 2016; Accepted: June 14, 2016; Published: July 20, 2016

Abstract: Topological molecular index, which is widely applied in QSPR/QSAR studies of chemical theory, is one of the most active research fields in modern chemical graph theory. Wiener index is the sum of the distance between any two points in the graph. In this paper, we use the method of graph theory, we define three transformations, and prove the six lemma, get minimum value of the wiener index of book graphs, and determines the book graph with smallest wiener index.

Keywords: Book Graph, Wiener Index, Minimum Values, Polar Diagram

书图的维纳指数的极小值与极图

魏福义^{1*}, 杨泳愉¹, 梁美君¹, 魏趣²

¹数学与信息学院, 华南农业大学, 广州, 中国

²会计学院, 中央财经大学, 北京, 中国

邮箱

weifuyi@scau.edu.cn (魏福义), 271960884@qq.com (杨泳愉), 1152448561@qq.com (梁美君)

摘要: 分子拓扑指数被广泛地应用于理论化学的定量结构性质和活性关系的研究中, 图中任意两点间的距离之和称为维纳指数。本文运用图论的方法, 定义了三种变换, 证明了六个引理, 得到了书图的维纳指数的最小值, 并且确定了维纳指数达到最小的极图。

关键词: 书图, 维纳指数, 极小值, 极图

1. 引言

在一个无向图 $G(V, E)$ 中, 任意两个不同顶点 u, v 都有路径相连, 则图 G 称为连通图; 顶点 u, v 之间的最短路的长度称为 u, v 之间的距离, 记为 $d(u, v)$; 与顶点 u 关

联的边数称为 u 的度, 记为 $d(u)$, 度为1的顶点称为悬挂点; 没有圈的简单连通无向图称为树。一个顶点数大于或者等于3的含圈连通无向图 G_1 , 其含有唯一的一条边 e , 满足其任意的两个诱导圈的公共边恰好是边 e , 则图 G_1 称为书图 (见图1, 其中虚线圆形是以圈上点为根点的树)。

图1 书图 G_1 。

边 e 的两个顶点 u_1 、 u_2 称为 G_1 的公共顶点，图上的其它非悬挂的顶点称为非公共顶点。书图 G_1 删除它的全部树（保留根点）所得的图象一本书，边 e 为书背，每个圈和以圈上的点为根点的树构成的图称为书的“页”图。设图 $D(V_1, E_1)$ 和 $H(V_2, E_2)$ 为两个连通无向图，若存在双映射 $f: V_1 \rightarrow V_2, \forall (v_i, v_j) \in E_1$ ，当且仅当 $(f(v_i), f(v_j)) \in E_2$ ，则图 $D(V_1, E_1)$ 和 $H(V_2, E_2)$ 称为同构，记为 $D \cong H$ 。用 $d_D(u, v)$ 和 $d_H(u, v)$ 分别表示顶点 u, v 在图 D 和图 H 中的距离。图 G 的顶点集和边集分别为 $V(G)$ 、 $E(G)$ ， G 的顶点数和边数分别用 $|V(G)|$ 和 $|E(G)|$ 表示。若 $|V(G)| < +\infty$ ，图 G 为有限图。本文只研究有限连通书图。

图 G 的维纳指数定义为图中任意两点间的距离之和，记为 $W(G)$ ，即

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

维纳指数是在研究化学分子结构模型中提出的拓扑指数之一[1-4]，并已被证实能够揭示物质中分子之间的性能关系。文献[5-6]中综述了维纳指数近五十年的研究成果。文献[7]中给出了书图的相关概念。本文研究了书图的维纳指数的最小值，并确定了达到最小的维纳指数的极图。

2. 主要定理

对于任意的书图，可以通过三种变换得到达到最小维纳指数的极图。

变换 A ：把图 G_1 中任意一棵树变成以原来圈上根点为中心点的同阶星图，其它结构不变。

设书图 G_1 通过变换 A 后得到的图为 G'_1 （见图2），记为 $A(G_1) = G'_1$ 。

图2 书图 G'_1 。

性质2.1 设 $A(G_1) = G'_1$ ，则 $W(G_1) \geq W(G'_1)$ ，等式成立当且仅当 $G_1 \cong G'_1$ 。

证明不妨设 G_1 中的树 T_1 的阶为 $k_3 + 1$ （含根点），变换 A 把图 G_1 中的树 T_1 变成同阶星图 S_1 所得图记为 G'_1 （见图2）。

对于顶点 $u, v \in V(G_1)$ ，及对应顶点 $u', v' \in V(G'_1)$ ，当 u, v 至少有一个不属于 $V(T_1)$ 时， $d_G(u, v) \geq d_{G'}(u', v')$ ，等式成立当且仅当 u, v 都不属于 $V(T_1)$ ，或属于 $V(T_1)$ 的顶点与根点相邻。

当 u, v 都属于 $V(T_1)$ 时，

$$\begin{aligned} \sum_{u, v \in V(T_1)} d(u, v) &= \sum_{(u, v) \in E(T_1)} d(u, v) + \sum_{(u, v) \notin E(T_1)} d(u, v) \\ &= k_3 + \sum_{(u, v) \notin E(T_1)} d(u, v) \geq k_3 + 2[C_{k_3+1}^2 - k_3] \end{aligned}$$

等式成立当且仅当 T_1 中不相邻的顶点的距离为2，即 T_1 为星图（见图2和图3）。

图3 书图 G''_1 。

直接计算： $W(G''_1) \geq W(G'_1)$ ，等式成立当且仅当 $k_3 = 1$ ，此时 $G'_1 \cong G''_1$ 。

由上述讨论知： $W(G_1) \geq W(G'_1)$ ，等式成立当且仅当 $G_1 \cong G'_1$ 。证毕。

$$(5) \sum_{u \in V_2, v \in V_3} d_{G_2}(u, v) - \sum_{u' \in V'_2, v' \in V'_3} d_{G'_2}(u', v') = 0.$$

由以上讨论知:

$$W(G_2) - W(G'_2) \geq (i-j)s \cdot m + (i-j)s \cdot q \\ = (i-j)s \cdot (m+q)$$

即 $W(G_2) \geq W(G'_2)$ 等号成立当且仅当 $i=j$ 或 $m+q=0$ 。

同理可证: 若 $B(G_2) = \tilde{G}'_2$, 则 $W(G_2) > W(G'_2)$ 证毕。

不妨设运用变换 B “ y ” 次, 把图 G_2 中非公共顶点上的悬挂点都移动到公共顶点上, 即把 G_2 变换成 G_3 (见图7), 记为 $B^{(y)}(G_2) = G_3$ 。

图7 书图 G_3 。

引理2.2 设 $B^{(y)}(G_2) = G_3$, 则 $W(G_2) > W(G_3)$ 。

证明 由性质2.2知: $W(G_2) \geq W(G'_2)$, 分情况讨论不等式成立条件如下:

(1) $m+q=0$ (即 $G_2 \cong U_1$), 只有一个或两个相邻的非公共顶点有悬挂点时, 即

$G_2 \cong G_3$, $W(G_2) = W(G_3)$; 当有两个不相邻或三个及以上非公共顶点上有悬挂点时, 通过变换 B y 次把悬挂点移动到公共顶点后, 不满足 $m+q=0$, 故 $W(G_2) > W(G_3)$;

(2) 当所有页上的悬挂点都满足 $i=j=0$, 即 $G_2 \cong G_3$, $W(G_2) = W(G_3)$; 当 $i=j \neq 0$ 时通过有限次变换 B 总会使得 $i \neq j$, 因此 $W(G_2) > W(G_3)$ 。

综上所述: 当 $G_2 \cong G_3$, $W(G_2) = W(G_3)$; 其余情况下 $B^{(y)}(G_2) = G_3$, 得 $W(G_2) > W(G_3)$ 。证毕。

定义: 把图 G_3 中 u_1 上的全部悬挂点移动到 u_2 上所得的图记为 G_4 (见图8)。

图8 书图 G_4 。

引理2.3 $W(G_3) \geq W(G_4)$, 等式成立当且仅当 $G_3 \cong G_4$ 。

证明

$W(G_3) - W(G_4) = 3k'_1 \cdot k'_2 - 2k'_1 \cdot k'_2 = k'_1 \cdot k'_2 \geq 0$,
 $W(G_3) \geq W(G_4)$, 等式成立当且仅当 $k'_1 = 0$ 或 $k'_2 = 0$,
 即 $G_3 \cong G_4$, 证毕。

任意取 G_4 中长为 l ($l > 3$) 的一个圈和顶点 u_2 的悬挂边构成的图记为 U_2 (见图9)。

图9 页图 U_2 。

变换 C : 把 G_4 内的页图 U_2 换成长为3的一个圈, 且在 u_2 点增加 $(l-3)$ 个悬挂点, 其余部分不变所得的图为 G'_4 (见图10), 记为 $C(G_4) = G'_4$ 。

图10 页图 G'_4 。

性质2.4 设图 U_2 为图 G_4 的一个页图, $C(G_4) = G'_4$, 则 $W(G_4) \geq W(G'_4)$, 等式成立当且仅当 $k'_1 + k'_2 = 0$ 且 U_2 的圈长为4或者 $G_4 \cong C_5$, C_5 表示圈长为5的单圈图。

证明 设 u_3 和 u_0 分别表示页图 U_2 中与 u_2, u_1 相邻的

$$H = \{u \in U_2 \mid d(u, u_1) \geq 2, d(u, u_2) \geq 2\},$$

非公共顶点,

$$J = G_4 / \{(u_3, u_0) \cup H\},$$

$\forall u, v \in V(G_4)$ 及对应点 $u', v' \in V(G'_4)$, 分情况讨论:

(1) 当 $|H| = 0$, 即 U_2 的圈长为4。

由 $C(G_4) = G'_4$, 即

$$E(G'_4) = E(G_4) \cup \{(u_2, u_0), (u_1, u_3)\} / \{(u_0, u_1), (u_0, u_3)\}$$

则 $W(G_4) - W(G'_4) = k'_1 + k'_2 \geq 0$

$$\text{故 } W(G_4) \geq W(G'_4)$$

等式成立当且仅当 $k'_1 + k'_2 = 0$ 且 U_2 的圈长为4。

(2) 当 $|H| > 0$, 不妨设 $|H| = x, |J| = p \geq 2$, 分情况讨论:

(2.1) $u, v \in H$

$$\begin{aligned} & \sum_{u, v \in H} d_{G_4}(u, v) - \sum_{u', v' \in H'} d_{G'_4}(u', v') \\ &= \frac{x(x-1)(x+1)}{6} - x(x-1) = \frac{x(x-1)(x-5)}{6} \end{aligned}$$

(2.2) $u \in H, v \in \{u_0, u_3\}$

$$\begin{aligned} & \sum_{u \in H, v \in \{u_0, u_3\}} d_{G_4}(u, v) - \sum_{u' \in H', v' \in \{u'_0, u'_3\}} d_{G'_4}(u', v') \\ &= \begin{cases} x(x-3), x \leq 4 \\ \left[\sum_{i=5}^x (2 + \lfloor \frac{i}{2} \rfloor) + 10 - 2x \right] \times 2, x > 4 \end{cases} \end{aligned}$$

(2.3) $u \in H, v \in J$

$$\sum_{u \in H, v \in J} d_{G_4}(u, v) - \sum_{u' \in H', v' \in J'} d_{G'_4}(u', v') \geq x + x \left\lceil \frac{p + (k'_1 + k'_2)}{2} \right\rceil - 1 \quad (2.4)$$

$u, v \notin H$ 时, 分四种情况讨论:

$$(2.4.1) \quad d_{G_4}(u_0, u_3) - d_{G'_4}(u'_0, u'_3) = \begin{cases} 0, x = 1 \\ 1, x > 1 \end{cases};$$

$$(2.4.2) \quad \sum_{u, v \in J} d_{G_4}(u, v) - \sum_{u', v' \in J'} d_{G'_4}(u', v') = 0;$$

$$(2.4.3) \quad \sum_{v \in J} d_{G_4}(u_0, v) - \sum_{v' \in J'} d_{G'_4}(u'_0, v') = k'_1 + k'_2;$$

$$(2.4.4) \quad \sum_{v \in J} d_{G_4}(u_3, v) - \sum_{v' \in J'} d_{G'_4}(u'_3, v') = \left\lceil \frac{p - (k'_1 + k'_2)}{2} \right\rceil.$$

把上述各式相加, 可得:

当 $x = 1, p = 2, k'_1 + k'_2 = 0$ 时, $W(G_4) - W(G'_4) = 0$, 即 $G_4 \cong C_5$; 当 $x = 1$ 且 $p > 2$ 或 $x > 1$ 时, $W(G_4) - W(G'_4) > 0$.

综上所述: $W(G_4) \geq W(G'_4)$, 等式成立当且仅当 $k'_1 + k'_2 = 0$ 且 U_2 的圈长为4或者 $G_4 \cong C_5$. 证毕。

不妨设图 G_4 中有 f 个圈长度大于3, 则对图 G_4 运用变换 C 共 f 次, 得到图 G_5 (见图 11), 记为 $C^{(f)}(G_4) = G_5$.

由性质 2.4 可得:

引理 2.4 设 $C^{(f)}(G_4) = G_5$, 则 $W(G_4) \geq W(G_5)$, 等式成立当且仅当 $G_4 \cong G_5$ 或者 $f = 1, k'_1 + k'_2 = 0, U_2$ 圈长为4或者 $G_4 \cong C_5$. C_5 , 表示圈长为5的单圈图。

证明 设 u_3 和 u_0 分别表示页图 U_2 中与 u_2, u_1 相邻的

$$H = \{u \in U_2 \mid d(u, u_1) \geq 2, d(u, u_2) \geq 2\},$$

非公共顶点,

$$J = G_4 / \{(u_3, u_0) \cup H\}.$$

$\forall u, v \in V(G_4)$ 及对应点 $u', v' \in V(G'_4)$, 分情况讨论:

(1) 当 $|H| = 0$, 即 U_2 的圈长为4。

由 $C(G_4) = G'_4$ 即

$$E(G'_4) = E(G_4) \cup \{(u_2, u_0), (u_1, u_3)\} / \{(u_0, u_1), (u_0, u_3)\},$$

则 $W(G_4) - W(G'_4) = k'_1 + k'_2 \geq 0$, 故

$$W(G_4) \geq W(G'_4),$$

等式成立当且仅当 $k'_1 + k'_2 = 0$ 且 U_2 的圈长为4。

(2) 当 $|H| > 0$, 不妨设 $|H| = x, |J| = p \geq 2$, 分情况讨论:

(2.1) $u, v \in H$

$$\begin{aligned} & \sum_{u, v \in H} d_{G_4}(u, v) - \sum_{u', v' \in H'} d_{G'_4}(u', v') \\ &= \frac{x(x-1)(x+1)}{6} - x(x-1) = \frac{x(x-1)(x-5)}{6} \end{aligned}$$

(2.2) $u \in H, v \in \{u_0, u_3\}$

$$\begin{aligned} & \sum_{u \in H, v \in \{u_0, u_3\}} d_{G_4}(u, v) - \sum_{u' \in H', v' \in \{u'_0, u'_3\}} d_{G'_4}(u', v') \\ & \geq x + x \left\lceil \frac{p + (k'_1 + k'_2)}{2} \right\rceil - 1 \end{aligned}$$

(2.4) $u, v \notin H$ 时, 分四种情况讨论:

- [2] Hosoya H. Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons [J]. Bull Chem Soc Japan, 1971, 44(9): 2332-2339.
- [3] Plesnik J. On the sum of all distances in a graph or digraph [J]. J Graph Theory, 1984, 8(1): 1-12.
- [4] Wiener H. Structural determination of paraffin boiling points [J]. J Am Chem Soc, 1947, 69(1): 17-20.
- [5] Gutman I, Klavzar S, Mohar B. Fifty years of the Wiener index [J]. MATCH Commun Math Comput hem, 1997, 35(1): 1-159.
- [6] Gutman I, Klavzar S, Mohar B. Fiftieth anniversary of the Wiener index [J]. Discrete Appl Math, 1997, 80 (1): 1-113.
- [7] Jiao Shijie, Zhou Bo, On the spectral radius of books [D]. South China Normal University. 2015.
- [8] R. Todeschini, V. Consonni, Handbook of Molecular Descriptors, Wiley-VCH, Weinheim, 2000.
- [9] Xiaotie Deng Jie Zhang, Equiseparability on terminal Wiener index, Applied Mathematics Letters 25(2012): 580-585.
- [10] Liu Wu-xin, Wei Fu-yi#, On the incidence Estrada index of graphs, Util. Math. 2015, 98: 43-52.
- [11] The Variable Wiener Index of Trees with Given Maximum Degree, Communications and Information Technology, 16-17, 2014, P36-37.