

文章编号:1673-5005(2014)01-0186-05

doi:10.3969/j.issn.1673-5005.2014.01.029

给定度序列的毛毛虫图的维纳指标

谭尚旺, 王东方, 魏宁宁

(中国石油大学理学院, 山东青岛 266580)

摘要:一个连通图的维纳指标定义为它的所有不同顶点对之间距离的和。给出图的两个变换以及计算这两个变换下新图维纳指标的公式, 借助这两个变换刻划所有给定度序列的毛毛虫图中具有最小维纳指标的图。

关键词:维纳指标; 树; 毛毛虫; 直径; 度序列

中图分类号:O157.5 文献标志码:A

Wiener index of caterpillars with a given degree sequence

TAN Shang-wang, WANG Dong-fang, WEI Ning-ning

(College of Science in China University of Petroleum, Qingdao 266580, China)

Abstract: Wiener index of a connected graph is the sum of distances among all pairs of vertices in the graph. Two graphic transformations and the formulas for obtaining Wiener index of new graphs were given. With these transformations, the trees having the smallest Wiener index among all caterpillars with a given degree sequence were characterized.

Key words: Wiener index; tree; caterpillar; diameter; degree sequence

1 问题的提出

本文中讨论的图都是无环和无重边的简单图, 未定义的记号和术语见文献[1]。令 G 是顶点集和边集分别为 $V(G)$ 和 $E(G)$ 的一个连通图。 G 的 1 度点称为 G 的叶或悬挂点, 关联叶的边称为 G 的悬挂边, 两个不同顶点 u 和 v 之间的距离 $d_G(u, v)$ 就是 G 中连接这两个顶点的最短路的边数。为了方便, 记 $d_G(u, u) = 0$ 。对顶点 $v \in V(G)$, 令 $W(G, v)$ 表示 v 与 G 中所有其它顶点之间距离的和, $\deg_G(v)$ 表示 v 在 G 中的度, 并且 $N_G(v)$ 表示 v 在 G 中的所有邻接顶点的集合。

连通图 G 的维纳指标 $W(G)$ 定义为 G 中所有不同顶点对之间距离的和, 即

$$W(G) = \sum_{\{u, v\} \subseteq V(G)} d_G(u, v) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} W(G, v). \quad (1)$$

图的维纳指标是基于距离的一个不变量, 是与分子分支密切相关的最古老的拓扑指标之一, 是化学家维纳在 1947 年设计和研究之后命名的^[2-4]。维纳指

标的许多化学应用是用来处理非循环的有机分子, 其中这些有机分子的图是树。目前, 维纳指标已经取得了许多结论, 关于维纳指标的综述和维纳指标的化学应用及数学文献见[5]~[10]及其引用的文献。

Entringer 等^[11] 证明了路 P_n 是所有 n 点树中具有最大维纳指标的唯一图, 而星 S_n 是所有 n 点树中具有最小维纳指标的唯一图。Deng^[11] 确定了顶点数 $n \geq 9$ 的所有化学树中维纳指标具有第一最大值到第十七最大值的所有树。Dong 和 Guo^[7] 确定了所有 n 点树中维纳指标具有第一最小值到第十五最小值的所有树。Wang 和 Guo^[12] 确定了给定顶点数和直径的所有树中维纳指标最小的树。Fishermann 等^[13] 和 Rada^[14] 分别独立地确定了给定顶点数和最大度的所有树中维纳指标最小的树。令 $\pi = (d_1, d_2, \dots, d_n)$ 是满足 $d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_n$ 的一个非负整数序列, 如果 π 是某个简单连通图的顶点度序列, 则称 π 是可图的。Zhang 等^[15] 提出了下述问题: 对给定的一个可图序列 π , 令

$$\Gamma(\pi) = \{G : G \text{ 连通并且 } \pi \text{ 是 } G \text{ 的度序列}\},$$

收稿日期:2012-12-05

基金项目:国家自然科学基金项目(11371372)

作者简介:谭尚旺(1965-), 男, 教授, 硕士, 研究方向为图论。E-mail:tswang@sina.com。

求 $\Gamma(\pi)$ 中所有图的维纳指标的上(下)界并且刻划达到上(下)界的所有极图。

Zhang 等^[15]研究了上述问题的一个特殊类,即对给定的树的一个度序列,刻划了具有最小维纳指标的极图,也确定了给定最大度、叶数或匹配数的所有树中具有最小维纳指标的极图。对上述问题,Zhang 等^[16]也研究了给定度序列的所有树中具有最大维纳指标的极图。Székely 和 Wang^[17]确定了具有最大子树个数的二元树。

一个树称为毛毛虫图,如果从这个树中删去所有的叶后产生一个路。对一些图类,尽管已经发现了改变图的维纳指标的一些变换和寻求具有最小或最大维纳指标极图的一些方法^[13-17],但这些变换和方法在求给定度序列的毛毛虫图中具有最小维纳指标的极图时是无效的。本文的动机来源于上述结论,尤其是文献[15]提出的上述问题,本文中刻划了给定度序列的所有毛毛虫图中具有最小维纳指标的极图。

2 图的两个变换

给出图的两个变换并确定计算新图维纳指标的公式,用来确定具有最小维纳指标的极端毛毛虫图。

引理 1^[18] 令 u 是连通图 G 的一个割点, G_1 和 G_2 是 G 的两个连通子图。如果 $V(G_1) \cap V(G_2) = \{u\}$ 且 $G_1 \cup G_2 = G$, 则 $W(G) = W(G_1) + W(G_2) + (|V(G_1)| - 1)W(G_2, u) + (|V(G_2)| - 1)W(G_1, u)$ 。

引理 2^[5] 令 uv 是连通图 G 的一个割边, G_1 和 G_2 是 $G - uv$ 中分别包含 u 和 v 的两个分支。记 $n_1 = |V(G_1)|$, $n_2 = |V(G_2)|$, 则 $W(G) = W(G_1) + W(G_2) + n_1 W(G_2, v) + n_2 W(G_1, u) + n_1 n_2$ 。

定理 1 令 u 是连通图 G 的一个割点, G_1 和 G_2 是 G 的两个连通子图并且 $V(G_1) \cap V(G_2) = \{u\}$, $G_1 \cup G_2 = G$, $N_{G_1}(u) = \{u_1, u_2, \dots, u_s\}$ 。对 G_2 中不同于 u 的另外一个点 v , 记 $G' = G - \{uu_1, uu_2, \dots, uu_s\} + \{vu_1, vu_2, \dots, vu_s\}$, $n_1 = |V(G_1)|$, 则

$$W(G) - W(G') = (n_1 - 1)\{[W(G, u) - W(G, v)] + (n_1 - 1)d_G(u, v)\}. \quad (2)$$

特别地, 如果 $W(G, u) \geq W(G, v)$, 则 $W(G) > W(G')$ 。

证明 令 $G'_1 = G_1 - \{uu_1, uu_2, \dots, uu_s\} + \{vu_1, vu_2, \dots, vu_s\}$, 则

$V(G'_1) \cap V(G_2) = \{v\}$, $G'_1 \cup G_2 = G$, $G'_1 \cong G_1$, 其中 G'_1 的顶点 v 是 G' 的割点, 且它对应 G_1 的顶点 u 。因此, 得

$$W(G'_1) = W(G_1), W(G'_1, v) = W(G_1, u).$$

由引理 1 得

$$W(G) = W(G_1) + W(G_2) + (|V(G_2)| -$$

$$1)W(G_1, u) + (n_1 - 1)W(G_2, u).$$

$$W(G') = W(G'_1) + W(G_2) + (|V(G_2)| -$$

$$1)W(G'_1, v) + (n_1 - 1)W(G_2, v).$$

进而

$$W(G) - W(G') = (n_1 - 1)[W(G_2, u) - W(G_2, v)]. \quad (3)$$

容易发现

$$W(G, u) = \sum_{a \in V(G_1)} d_G(a, u) + \sum_{a \in V(G_2)} d_G(a, u) =$$

$$W(G_1, u) + W(G_2, u).$$

$$W(G, v) = \sum_{a \in V(G_1)} d_G(a, v) + \sum_{a \in V(G_2)} d_G(a, v) =$$

$$W(G_1, u) + (n_1 - 1)d_{G_2}(u, v) + W(G_2, v).$$

因此, 得到

$$W(G, u) - W(G, v) = [W(G_2, u) - W(G_2, v)] - (n_1 - 1)d_{G_2}(u, v). \quad (4)$$

由于 $d_{G_2}(u, v) = d_G(u, v)$, 于是由式(3)和(4)得到式(2)。此外, 由式(2)附加断言显然成立。定理证毕。

定理 2 令 u, v, a, b 是连通图 G 的 4 个顶点且 $uv, ab \in E(G)$, $ua, vb \notin E(G)$ 。记 $k = d_G(v, a)$, $G' = G - \{uv, ab\} + \{ua, vb\}$ (图 1)。如果 uv 和 ab 都是 G 的割边, 则

$$W(G') - W(G) = \frac{1}{4}\{[W(G, b) - W(G, u)] + [W(G, v) - W(G, a)]\} \{[W(G, u) - W(G, b)]k + [W(G, a) - W(G, v)](k + 2)\}. \quad (5)$$

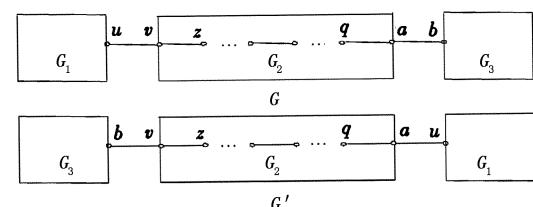


图 1 定理 2 中从 G 到 G' 的图

Fig. 1 Diagrams from G to G' in theorem 2

证明 令 G_1, G_2 和 G_3 是 $G - uv - ab$ 中分别包含顶点 u, v 和 b 的 3 个分支, Q 是 $G - uv$ 中包含顶点 v 的分支。记 $n_i = |V(G_i)|$, $i = 1, 2, 3$ 。

取 G 的割边 uv 和 Q 的割边 ab 分别作为引理 2 中的边 uv , 由引理 2 得

$$W(G) = W(G_1) + W(Q) + n_1 W(Q, v) + |V(Q)|W(G_1, u) + n_1 |V(Q)|. \quad (6)$$

$$\begin{aligned} W(Q) &= W(G_2) + W(G_3) + n_2 W(G_3, b) + \\ n_3 W(G_2, a) + n_2 n_3. \end{aligned} \quad (7)$$

由 $W(G, u)$ 的定义和 G 的假设得

$$\begin{aligned} W(Q, v) &= \sum_{x \in V(G_2)} d_Q(v, x) + \sum_{y \in V(G_3)} d_Q(v, y) = \\ \sum_{x \in V(G_2)} d_{G_2}(v, x) + \sum_{y \in V(G_3)} [d_G(v, b) + d_{G_3}(b, y)] &= \\ W(G_2, v) + (k+1)n_3 + W(G_3, b). \end{aligned} \quad (8)$$

既然 $|V(Q)| = n_2 + n_3$, 于是由式(6) ~ (8) 得

$$\begin{aligned} W(G) &= \sum_{i=1}^3 W(G_i) + n_1 [W(G_2, v) + W(G_3, b)] + \\ n_2 [W(G_1, u) + W(G_3, b)] + n_3 [W(G_1, u) + W(G_2, a)] + (n_1 + n_3)n_2 + n_1 n_3(k+2). \end{aligned} \quad (9)$$

通过交换式(9)的 v 和 a , 得

$$\begin{aligned} W(G') &= \sum_{i=1}^3 W(G_i) + n_1 [W(G_2, a) + W(G_3, b)] + \\ n_2 [W(G_1, u) + W(G_3, b)] + n_3 [W(G_1, u) + \\ W(G_2, v)] + (n_1 + n_3)n_2 + n_1 n_3(k+2). \end{aligned} \quad (10)$$

于是由式(9) 和(10) 得

$$W(G') - W(G) = (n_1 - n_3)[W(G_2, a) - W(G_2, v)]. \quad (11)$$

容易发现

$$\begin{aligned} W(G, b) - W(G, u) &= \sum_{x \in V(G_1)} [d_G(b, x) - d_G(u, x)] + \\ \sum_{x \in V(G_2)} [d_G(b, x) - d_G(u, x)] + \sum_{x \in V(G_3)} [d_G(b, x) - \\ d_G(u, x)] = \sum_{x \in V(G_1)} d_G(b, u) + \sum_{x \in V(G_2)} [d_{G_2}(a, x) - \\ d_{G_2}(v, x)] - \sum_{x \in V(G_3)} d_G(b, u) = (n_1 - n_3)(k+2) + \\ [W(G_2, a) - W(G_2, v)]. \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} W(G, v) - W(G, a) &= \sum_{x \in V(G_1)} [d_G(v, x) - d_G(a, x)] + \\ \sum_{x \in V(G_2)} [d_G(v, x) - d_G(a, x)] + \sum_{x \in V(G_3)} [d_G(v, x) - \\ d_G(a, x)] = -\sum_{x \in V(G_1)} d_G(v, a) + \sum_{x \in V(G_2)} [d_{G_2}(v, x) - \\ d_{G_2}(a, x)] + \sum_{x \in V(G_3)} d_G(v, a) = -(n_1 - n_3)k + \\ [W(G_2, v) - W(G_2, a)]. \end{aligned} \quad (13)$$

于是由式(12) 和(13) 得

$$n_1 - n_3 = \frac{1}{2} \{ [W(G, b) - W(G, u)] + [W(G, v) - \\ W(G, a)] \}.$$

$$W(G_2, a) - W(G_2, v) = \frac{1}{2} \{ [W(G, u) - W(G, b)] + \\ [W(G, a) - W(G, v)](k+2) \}.$$

因此,由式(11) 得到式(5)。定理证毕。

3 给定度序列的毛毛虫图中具有最小维纳指标的图

确定给定度序列的毛毛虫图中具有最小维纳指标的极图。

令 $P_d = v_0 v_1 \cdots v_d$ 是直径为 d 的路。熟知,任一个直径为 d 的树 T 都能通过在 P_d 的顶点 v_i ($i = 2, 3, \dots, d-1$) 上悬挂适当的树 T_i 而得到。令 $C(s_1, s_2, \dots, s_{d-1})$ 表示通过在 P_d 的顶点 v_i ($i = 2, 3, \dots, d-1$) 上增加 $s_i = |V(T_i)| - 1$ 个悬挂边得到的毛毛虫图。Wang 和 Guo^[12] 已经证明

$$W(T) \geq W(C(s_1, s_2, \dots, s_{d-1}))$$

等式成立,当且仅当 $T \cong C(s_1, s_2, \dots, s_{d-1})$ 。

基于上述结论,令 $C(\pi)$ 表示度序列为 π 的所有毛毛虫图的集合,其中 $\pi = (d_1, d_2, \dots, d_n)$, $d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_s \geq 2 > d_{s+1} = \dots = d_n = 1$ 。容易发现, $C(\pi)$ 中的所有毛毛虫图都有相同的直径 $d = 1 + s$ 。令 C_M 是 $C(\pi)$ 中具有最小维纳指标的一个毛毛虫图。假设 $s \geq 3$ (否则, $C(\pi)$ 仅包含一个星图或双星图),且假设 d_1, d_2, \dots, d_n 中至少有两个是不同的(否则, $n = 1$ 或 2, 问题是平凡的)。下面总假设 $P_M = v_0 v_1 \cdots v_d$ 是 C_M 的一个最长路,研究 C_M 的性质和结构。

引理3 如果 u 和 v 都不是 P_M 的叶并且 $W(C_M, u) \geq W(C_M, v)$, 则

$$\deg_{C_M}(u) \leq \deg_{C_M}(v).$$

证明 假设 $\deg_{C_M}(u) > \deg_{C_M}(v)$ 。既然 v 不是 P_M 的悬挂点,于是

$$\deg_{C_M}(u) \geq \deg_{C_M}(v) + 1 \geq 3.$$

这表明在顶点 u 处存在一个不包含在 P_M 上的悬挂边。令 $s = \deg_{C_M}(u) - \deg_{C_M}(v)$, uu_1, uu_2, \dots, uu_s 是 C_M 中顶点 u 处不包含在 P_M 上的 s 个悬挂边。记 $T' = C_M - \{uu_1, uu_2, \dots, uu_s\} + \{vu_1, vu_2, \dots, vu_s\}$, 则 $T' \in C(\pi)$ 。由定理1得 $W(T') < W(C_M)$, 这与 C_M 的假设矛盾。引理证毕。

引理4 如果 u 是 P_M 的一个悬挂点并且 v 不是 P_M 的悬挂点,则

$$W(C_M, v) < W(C_M, u).$$

证明 假设 $W(C_M, v) \geq W(C_M, u)$ 。不妨设 $u = v_0$ 并且 $v = v_i$ ($1 \leq i \leq d-1$)。记

$$N_{C_M}(v) = \{v_{i-1}, v_{i+1}, a_1, a_2, \dots, a_t\}.$$

令 $T' = C_M - \{v_i v_{i+1}, v_i a_1, v_i a_2, \dots, v_i a_t\} + \{v_0 v_{i+1}, v_0 a_1, v_0 a_2, \dots, v_0 a_t\}$, 则 $T' \in C(\pi)$ 。由定理1得 $W(T') < W(C_M)$, 这与 C_M 的假设矛盾。引理证毕。

引理5 令 u, v, a, b 是 P_M 上依次从左到右的4个不同顶点,其中 uv 和 ab 是 P_M 的两个边。记 $k = d_{C_M}(v, a)$, 则

$$\Delta(u, v, a, b) = \{[W(C_M, b) - W(C_M, u)] + [W(C_M, v) - W(C_M, a)]\} \times \{[W(C_M, u) - W(C_M, b)]k + [W(C_M, a) - W(C_M, v)](k+2)\} \geq 0.$$

证明 假设 $\Delta(u, v, a, b) < 0$ 。令

$$T' = C_M - \{uv, ab\} + \{ua, vb\},$$

则 $T' \in C(\pi)$ 。由定理2得

$$W(T') - W(C_M) = \frac{1}{4}\Delta(u, v, a, b) < 0,$$

这与 C_M 的假设矛盾。引理证毕。

引理6 如果存在非负整数 $0 \leq p < q \leq d$, 使 $W(C_M, v_p) = W(C_M, v_q)$, 则

$$\deg_{C_M}(v_i) = \deg_{C_M}(v_{d-i}), i = 0, 1, \dots, \left\lfloor \frac{d-1}{2} \right\rfloor.$$

证明 首先, 证明下式:

$$W(C_M, v_i) = W(C_M, v_{d-i}), i = 0, 1, \dots, \left\lfloor \frac{d-1}{2} \right\rfloor. \quad (14)$$

假设 $W(C_M, v_{p+1}) \neq W(C_M, v_{q-1})$, 不妨设 $W(C_M, v_{p+1}) < W(C_M, v_{q-1})$ 。考虑 P_M 上的4个不同顶点: $u = v_p, v = v_{p+1}, a = v_{q-1}, b = v_q$, 容易发现 $\Delta(u, v, a, b) = [W(C_M, v) - W(C_M, a)][W(C_M, a) - W(C_M, v)](k+2) < 0$ 。这与引理5的结论矛盾。因此, $W(C_M, v_{p+1}) = W(C_M, v_{q-1})$ 。用 $p+1$ 和 $q-1$ 分别代替上面的 p 和 q , 重复上述过程可得

$$W(C_M, v_{p+i}) = W(C_M, v_{q-i}), 0 \leq i \leq \frac{q-p-1}{2}. \quad (15)$$

假设 $W(C_M, v_{p-1}) \neq W(C_M, v_{q+1})$, 不妨设 $W(C_M, v_{p-1}) > W(C_M, v_{q+1})$ 。考虑 P_M 上的4个不同顶点: $u = v_{p-1}, v = v_p, a = v_q, b = v_{q+1}$ 。容易发现 $\Delta(u, v, a, b) = [W(C_M, b) - W(C_M, u)][W(C_M, u) - W(C_M, b)]k < 0$ 。

这与引理5的结论矛盾。因此, $W(C_M, v_{p-1}) = W(C_M, v_{q+1})$ 。用 $p-1$ 和 $q+1$ 分别代替上面的 p 和 q , 重复上述过程可得

$$W(C_M, v_{p-i}) = W(C_M, v_{q+i}), 0 \leq i \leq \min\{p, d-q\}. \quad (16)$$

假设 $p \neq d-q$, 不妨设 $p < d-q$ 。由 $p+q < d$ 知, v_0 是 P_M 的一个悬挂点, 而 v_{p+q} 是 P_M 的非悬挂点。在式(16)中取 $i=p$, 得 $W(C_M, v_0) = W(C_M, v_{p+q})$, 这与引理4的结论矛盾。因此, 得到

$$p = d - q. \quad (17)$$

由式(15) ~ (17) 得到式(14)。

其次, 对 $1 \leq i \leq \left\lfloor \frac{d-1}{2} \right\rfloor$, 假设 $\deg_{C_M}(v_i) \neq \deg_{C_M}(v_{d-i})$ 。不妨设

$$\deg_{C_M}(v_i) > \deg_{C_M}(v_{d-i}).$$

由式(14)得 $W(C_M, v_i) \geq W(C_M, v_{d-i})$, 于是由引理3得 $\deg_{C_M}(v_i) \leq \deg_{C_M}(v_{d-i})$, 这与假设矛盾。引理证毕。

令 $P = v_0 v_1 \cdots v_d$ 是毛毛虫图 C 的一个最长路。

如果对所有的 $0 \leq i \leq \left\lfloor \frac{d-1}{2} \right\rfloor$, 都有 $\deg_C(v_i) = \deg_C(v_{d-i})$, 则称 C 是对称的。不失一般性, 下面总假设

$$W(C_M, v_0) \geq W(C_M, v_d). \quad (18)$$

引理7 (1) 如果 $d=2s$ 是一个偶数, 则

$$W(C_M, v_0) \geq W(C_M, v_{2s}) \geq W(C_M, v_1) \geq W(C_M, v_{2s-1}) \geq W(C_M, v_2) \geq W(C_M, v_{2s-2}) \geq \cdots \geq W(C_M, v_{s-1}) \geq W(C_M, v_{s+1}) \geq W(C_M, v_s).$$

(2) 如果 $d=2s+1$ 是一个奇数, 则

$$W(C_M, v_0) \geq W(C_M, v_{2s+1}) \geq W(C_M, v_1) \geq W(C_M, v_{2s}) \geq W(C_M, v_2) \geq W(C_M, v_{2s-1}) \geq \cdots \geq W(C_M, v_s) \geq W(C_M, v_{s+1}).$$

证明 首先证明(1)。由式(18)和引理4得

$$W(C_M, v_0) \geq W(C_M, v_{2s}) \geq W(C_M, v_1). \quad (19)$$

对 $1 \leq i \leq s-1$, 根据式(19), 假设已经知道 $W(C_M, v_0) \geq W(C_M, v_{2s}) \geq \cdots \geq W(C_M, v_{i-1}) \geq W(C_M, v_{2s-i+1}) \geq W(C_M, v_i)$ 。

下面证明 $W(C_M, v_i) \geq W(C_M, v_{2s-i})$ 。如果 $W(C_M, v_i) < W(C_M, v_{2s-i})$, 则考虑 P_M 的4个不同顶点: $u = v_{i-1}, v = v_i, a = v_{2s-i}, b = v_{2s-i+1}$ 。既然

$z(C_M, u) \geq W(C_M, b), W(C_M, v) < W(C_M, a)$, 于是 $\Delta(u, v, a, b) < 0$, 与引理5的结论矛盾。因此, $W(C_M, v_i) \geq W(C_M, v_{2s-i})$ 。上述结论也表明 $W(C_M, v_0) \geq W(C_M, v_{2s}) \geq W(C_M, v_1) \geq W(C_M, v_{2s-1})$ 。 (20)

对 $1 \leq j \leq s-2$, 根据式(20), 假设已知

$$W(C_M, v_0) \geq W(C_M, v_{2s}) \geq W(C_M, v_1) \geq W(C_M, v_{2s-1}) \geq \cdots \geq W(C_M, v_j) \geq W(C_M, v_{2s-j}).$$

下面证明 $W(C_M, v_{2s-j}) \geq W(C_M, v_{j+1})$ 。如果 $W(C_M, v_{2s-j}) < W(C_M, v_{j+1})$, 则考虑 P_M 的4个不同顶点: $u = v_{2s-j+1}, v = v_{2s-j}, a = v_{j+1}, b = v_j$ 。既然 $W(C_M, u) \geq W(C_M, b), W(C_M, v) < W(C_M, a)$, 于是 $\Delta(u, v, a, b) < 0$, 与引理5的结论矛盾。因此, $W(C_M, v_{2s-j}) \geq W(C_M, v_{j+1})$ 。

由上述两方面的讨论和归纳法原理, 完成了

(1) 的证明。

(2) 的证明与(1) 的证明类似。

假设式(18) 成立, 即 $W(C_M, v_0) \geq W(C_M, v_d)$ 。记 $\deg_{C_M}(v) = \deg(v)$, 则由引理 3 和引理 7, 当 $d = 2s$ 时,

$$\begin{aligned} 1 &= \deg(v_0) = \deg(v_{2s}) < \deg(v_1) \leq \deg(v_{2s-1}) \leq \\ &\leq \deg(v_2) \leq \deg(v_{2s-2}) \leq \deg(v_3) \leq \deg(v_{2s-3}) \leq \dots \\ &\leq \deg(v_{s-1}) \leq \deg(v_{s+1}) \leq \deg(v_s). \end{aligned}$$

当 $d = 2s + 1$ 时,

$$\begin{aligned} 1 &= \deg(v_0) = \deg(v_{2s+1}) < \deg(v_1) \leq \deg(v_{2s}) \leq \\ &\leq \deg(v_2) \leq \deg(v_{2s-1}) \leq \deg(v_3) \leq \deg(v_{2s-2}) \leq \dots \\ &\leq \deg(v_s) \leq \deg(v_{s+1}). \end{aligned}$$

这表明, 对给定的树的一个度序列 $\pi = (d_1, d_2, \dots, d_n)$, 图 C_M 是唯一确定的。因此, 得到下面的结论。

定理 3 对给定的树的任一个度序列 π, C_M 是 $C(\pi)$ 中具有最小维纳指标的唯一图。

图 2 和图 3 分别显示了两个具有最小维纳指标的毛毛虫图, 其中

$$\pi_1 = (10, 9, 8, 7, 7, 7, 6, 5, 4, 3, 2, \overbrace{1, \dots, 1}^{48}, 1), d = 12.$$

$$\pi_2 = (10, 10, 8, 8, 7, 7, 5, 5, 3, 3, 2, 2, \overbrace{1, \dots, 1}^{46}), d = 11.$$

特别地, 图 3 显示的毛毛虫图是对称的。

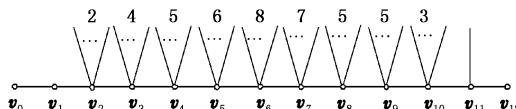


图 2 $C(\pi_1)$ 中具有最小维纳指标的毛毛虫图

Fig. 2 Caterpillar with the smallest Wiener index in $C(\pi_1)$

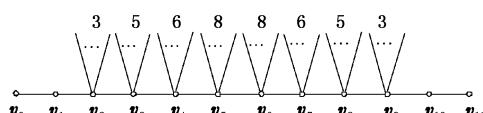


图 3 $C(\pi_2)$ 中具有最小维纳指标的毛毛虫图

Fig. 3 Caterpillar with the smallest Wiener index in $C(\pi_2)$

参考文献:

- [1] BONDY J A, MURTY U S R. Graph theory with applications [M]. New York: Macmillan Press, 1976.
- [2] WIENER H. Structural determination of paraffin boiling points [J]. J Am Chem Soc, 1947, 69:17-20.
- [3] HOSOYA H. Topological index: a newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons [J]. Bull Chem Soc Jpn, 1971, 44:2332-2339.
- [4] TODESCHINI R, CONSONNI V. Handbook of Molecular Descriptors [M]. Weinheim: Wiley-VCH Press, 2000.
- [5] DOBRYNIN A A, ENTRINGER R, GUTMAN I. Wiener index of trees: theory and applications [J]. Acta Appl Math, 2001, 66:211-249.
- [6] DENG H. The trees on $n \geq 9$ vertices with the first to seventeenth largest Wiener indices are chemical trees [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2007, 57:393-402.
- [7] DONG H, GUO X. Ordering trees by their Wiener indices [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2006, 56:527-540.
- [8] GUTMAN I, YEH Y N, LEE S L, et al. Wiener numbers of dendrimers [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 1994, 30:103-115.
- [9] XU K, TRINAJSTIC N. Hyper-Wiener and Harary indices of graphs with cut edges [J]. Util Math, 2011, 84: 153-163.
- [10] DIUDEA M V, KATONA G, MINAILIUC O M, et al. Wiener and hyper-Wiener indices in spiro-graphs [J]. Russ Chem Bull, 1995, 44:1601-1611.
- [11] ENTRINGER R C, JACKSON D E, SYNDER D A. Distance in graphs [J]. Czechoslovak Math J, 1976, 26:283-296.
- [12] WANG S J, GUO X F. Trees with extremal Wiener indices [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2008, 60:609-622.
- [13] FISHERMANN M, HOFFMANN A, RAUTENBACH D, et al. Wiener index versus maximum degree in trees [J]. Disc Appl Math, 2002, 122:127-137.
- [14] RADA J. Variation of the Wiener index under tree transformations [J]. Disc Appl Math, 2005, 148:135-146.
- [15] ZHANG X D, XIANG Q Y, XU L Q, et al. The Wiener index of trees with given degree sequences [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2008, 60:623-644.
- [16] ZHANG X D, LIU Y, HAN M X. Maximum Wiener index of trees with given degree sequence [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2010, 64:661-682.
- [17] SZEKELY L A, WANG H. Binary trees with the largest number of subtrees [J]. Discr Appl Math, 2007, 155: 374-385.
- [18] BALAKRISHNAN R, SRIDHARAN N, VISWANATHAN Iyer K. Wiener index of graphs with more than one cut-vertex [J]. Appl Math Lett, 2008, 21:922-927.

(编辑 修荣荣)