文章编号:1000-5862(2017)05-0521-05

具有第3大 Wiener 指数的有向图

江云涛,高玉斌*,赵玉杰
(中北大学理学院,山西 太原 030051)

摘要:通过有向图的 Wiener 指数,可以给有向网络的平均距离和节点的中介中心性赋有限的值,进而应用于大规模网络的分析. 在所有 n 阶有向图中,有向圈 $\overrightarrow{C}_n$ 能取到极大 Wiener 指数,$\overrightarrow{C}_n^+$ 能取到第2大 Wiener 指数,利用反证法及分类讨论法对有向图的 Wiener 指数进行研究,得出了具有第3大 Wiener 指数的有向图,并刻画了相应的极图.

关键词:Wiener 指数;有向图;平均距离;网络
中图分类号:O 157.5 文献标志码:A DOI:10.16357/j.cnki.issn1000-5862.2017.05.14

0 引言

设 $G=(V,E)$ 是一个简单连通图,V 和 E 分别为 G 的顶点集和边集,用 $d_G(u,v)$ 表示图 G 中顶点 u 和 v 之间的距离,G 的 Wiener 指数是指图 G 中所有顶点对之间的距离之和,即

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

Wiener 指数是化学家 H. Wiener 首次提出来的,在1947—1948年间,H. Wiener 根据碳分子之间路径距离的计数,提出了一个刻画分子结构的 Wiener 指数,并利用该指数研究了饱和碳氢化合物的分子结构与物理特性(沸点、摩尔体积、折射率、烷烃异构与蒸发热等)之间的关系. 由于在当时化学图论尚未形成,因此,H. Wiener 未利用图论专业术语. H. Hosoya 在1971年给出了一个用图论术语表述的公式,即 Wiener 指数等于碳氢化合物中所有最短碳-碳键路径之和. 已经被证实,Wiener 指数在定量结构关系(QSPR)中是个非常有用的量,同时它也被应用于通讯网络、密码学、建筑学等领域的研究[1-11].

近年来,有向图的 Wiener 指数引起了大家的关注[12-15],它可以在有向大网络中用于给节点的平均距离和中介中心性赋值,进而应用于大规模网络的分析. 本文将研究有向图的 Wiener 指数.

1 基本概念和相关结论

首先介绍一些基本概念. 设 $D(V,A)$ 是一个 n 阶有向图,其中 $V=V(D)$ 是图 D 的顶点集,$A(D)$ 是图 D 的弧集,D 是强连通的当且仅当它的每对有序点对之间都存在有向路. 设弧 $xy\in A(D)$,称 x 是 y 的内邻点,y 是 x 的外邻点. 任取 $u\in V(D)$,u 的入度是它内邻点的数目,用 $id_D(u)$ 表示;出度是它外邻点的数目,用 $od_D(u)$ 表示.

本文讨论的有向图均为无环无重弧的强连通有向图,并用 $d_D(u,v)$ 表示图 D 中从点 u 到点 v 的距离.

定义1 设 D 是一个 n 阶有向图,它的 Wiener 指数是

$$W(D)=\sum_{(u,v)\in V(D)\times V(D)} d_D(u,v).$$

任取 $u\in V(D)$,定义点 u 的 Wiener 指数为

$$w_D(u)=\sum_{v\in V(D)} d_D(u,v).$$

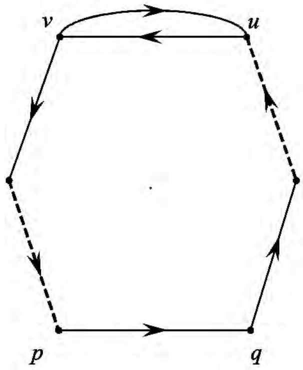
显然,图的 Wiener 指数与图中各点的 Wiener 指数有以下关系:$W(D)=\sum_{u\in V(D)} w_D(u)$.

M. Knor 等[15]已经给出了具有极大和第2大 Wiener 指数的有向图. 本文研究的是具有第3大 Wiener 指数的有向图.

为了表述方便,还将用到以下概念和记号. 不包含相反弧的有向图称为简单有向图. 用 $\overleftrightarrow{P}_n$ 表示 n 阶有

收稿日期:2017-03-25
基金项目:国家自然科学基金(11071227)资助项目.
通信作者:高玉斌(1962-),男,山西太原人,教授,主要从事组合数学、图论及其在相关学科中的应用研究. E-mail:ybgao@nuc.edu.cn

向路，$\vec{C}_n$ 表示 n 阶有向圈，设 uv、pq 是 $\vec{C}_n$ 上的 2 条不相邻的弧(即 $vp\notin A(\vec{C}_n)$，$qu\notin A(\vec{C}_n)$)，在 $\vec{C}_n$ 上增加 1 条弧 vu 得到的有向图记为 $\vec{C}_n^{+}$(见图 1)，在 $\vec{C}_n$ 上增加 2 条弧 vu，qp 得到的有向图记为 $\vec{C}_n^{++}$(见图 2).



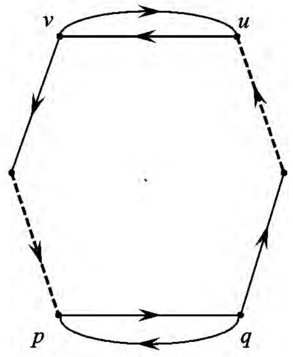


图 1　1 对相反弧的有向图　图 2　2 对相反弧不相邻的有向图

下面给出一些有用的引理.

引理 1[13]　设 D 是一个有向图，将 D 中所有弧逆向得到有向图 D^-，则 $W(D)=W(D^-)$.

引理 2[13]　设 D 是 n 阶有向图，则 $W(D)\leqslant\binom{n}{2}n$. 等号成立当且仅当 D 同构于有向圈 $\vec{C}_n$.

引理 3[15]　在所有 $n(n\geqslant3)$ 阶有向图中，有向图 $\vec{C}_n^{+}$ 取到第 2 大 Wiener 指数，且

$$W(\vec{C}_n^{+})=\binom{n}{2}n-n+2.$$

若 $n=3$，则有 2 种有向图可以取到第 2 大 Wiener 指数，分别是 $\vec{C}_3^{+}$ 和 $\overleftrightarrow{P}_3$.

引理 4[15]　当 $n\geqslant4$ 时，不同构于 $\vec{C}_n$ 的简单有向图的 Wiener 指数至多为 $\binom{n}{2}n-3n+9$. 当 $n=5$ 时，能取到 Wiener 指数值为 $\binom{n}{2}n-3n+9$ 的简单有向图只有 3 种(见图 3).

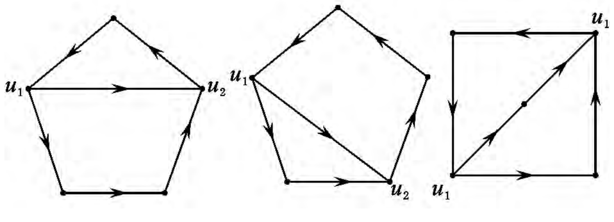


图 3　当 $n=5$ 时的简单有向图

引理 5[15]　设 D 是 n 阶有向图，若存在一点 $x\in V(D)$，使得 $od_D(x)=0$ 或 $id_D(x)=0$，则

$$W(D)\leqslant\binom{n}{2}n-\frac{1}{2}n^2+\frac{1}{2}n.$$

由引理 2 和引理 3 知，在所有 n 阶有向图中，$\vec{C}_n$、$\vec{C}_n^{+}$ 分别取得第 1 大、第 2 大 Wiener 指数，本文将刻画取得第 3 大 Wiener 指数的 n 阶有向图，并给出 n 阶有向图的第 3 大 Wiener 指数.

2　重要引理

引理 6　当 $n\geqslant5$ 时，$W(\vec{C}_n^{++})=\binom{n}{2}n-2n+4$.

证　显然，在 $\vec{C}_n^{++}$ 中，

$w_{\vec{C}_n^{++}}(v)=w_{\vec{C}_n^{++}}(q)=1+1+2+\cdots+(n-2)=\binom{n}{2}-n+2$.

$\forall x\in V(\vec{C}_n^{++})(x\neq v$ 且 $x\neq q)$，有 $w_{\vec{C}_n^{++}}(x)=\binom{n}{2}$.

因此 $W(\vec{C}_n^{++})=\binom{n}{2}n-2n+4$.

引理 7　设 D 是 $n(n\geqslant5)$ 阶有向图，若 $W(D)\geqslant W(\vec{C}_n^{++})$，则

(i) $\forall v\in V(D)$，$1\leqslant od(v)\leqslant2$ 且 $1\leqslant id(v)\leqslant2$;

(ii) D 中至多存在 2 个点 v_1，v_2，使得 $od(v_1)=od(v_2)=2$;

(iii) D 中至多存在 2 个点 u_1，u_2，使得 $id(u_1)=id(u_2)=2$.

证　(i) 假设存在一点 $v\in V(D)$，使得 $od(v)=0$ 或 $id(v)=0$，由引理 5 知，

$$W(D)\leqslant\binom{n}{2}n-\frac{1}{2}n^2+\frac{1}{2}n<\binom{n}{2}n-2n+4=W(\vec{C}_n^{++}).$$

矛盾. 故 $\forall v\in V(D)$，$od(v)\geqslant1$ 且 $id(v)\geqslant1$.

假设存在一点 $v\in V(D)$，使得 $od(v)\geqslant3$，则从点 v 出发距离为 1 的点至少有 3 个，且不存在从点 v 出发距离为 $n-1$ 和 $n-2$ 的点. 由于 $id(v)\geqslant1$，$\exists u\in V(D)$ 使 $uv\in A(D)$，则从点 u 出发距离为 2 的点至少有 3 个，且不存在从点 u 出发距离为 $n-1$ 和 $n-2$ 的点. 显然

$$w_D(v)\leqslant\binom{n}{2}-(n-1)+1-(n-2)+1,$$

$$w_D(u)\leqslant\binom{n}{2}-(n-1)+2-(n-2)+2,$$

故

$$W(D)\leqslant\binom{n}{2}n-4n+12<\binom{n}{2}n-2n+4=W(\vec{C}_n^{++}).$$

矛盾. 从而 $\forall v\in V(D)$，$od(v)\leqslant2$.

结合引理 1 知，$\forall v \in V(D)$，$id(v) \leqslant 2$.

(ii) 假设 D 中存在 3 个不同的点 v_1，v_2 和 v_3，使得 $od(v_1) = od(v_2) = od(v_3) = 2$. 从点 v_1 出发距离为 1 的点有 2 个且不存在从点 v_1 出发距离为 $n-1$ 的点，有 $w_D(v_1) \leqslant \binom{n}{2} - (n-1) + 1$.

同理可得

$$w_D(v_2) \leqslant \binom{n}{2} - (n-1) + 1,$$

$$w_D(v_3) \leqslant \binom{n}{2} - (n-1) + 1.$$

故 $W(D) \leqslant \binom{n}{2} - 3n + 6 < W(\vec{C}_n^{++})$. 矛盾. 则 D 中至多存在 2 个点 v_1，v_2，使得 $od(v_1) = od(v_2) = 2$.

(iii) 由(ii)及引理 1 知，结论成立.

引理 8　只包含 2 个圈并且 2 个圈的公共部分只有一个点的 $n(n \geqslant 3)$ 阶双圈有向图的 Wiener 指数小于等于 $(n^3 - 2n^2 + 3n - 2)/2$.

证　假设有向图 D 是只包含 2 个圈并且 2 个圈的公共部分只有一个点的 $n(n \geqslant 3)$ 阶双圈有向图，其中一个圈长为 $k(2 \leqslant k \leqslant n-1)$，另一个长为 $n+1-k$，

$$W(D) = \binom{k}{2}k + \binom{n+1-k}{2}(n+1-k) + 2[(n-k)(1+2+\cdots+k-1) + (k-1)\cdot(1+2+\cdots+n+1-k-1)] = \binom{k}{2}k + \binom{n+1-k}{2}(n+1-k) + k(k-1)(n-k) + (k-1)(n+1-k)(n+1-k-1) = [k^2(n-1) + k(-n^2+1) + n^3 - n]/2.$$

当 $k=2$ 或 $k=n-1$ 时，$W(D)$ 取到极大值. 故

$$W(D) \leqslant (n^3 - 2n^2 + 3n - 2)/2.$$

3　主要结论

定理 1　在所有 $n(n \geqslant 3)$ 阶有向图中取得第 3 大 Wiener 指数的有向图的具体情况为

(i) 当 $n=3$ 时，取得第 3 大 Wiener 指数的有向图(见图 4)，且 Wiener 指数是 7；

(ii) 当 $n=4$ 时，取得第 3 大 Wiener 指数的有向图(见图 5)，且 Wiener 指数是 21；

(iii) 当 $n=5$ 时，取得第 3 大 Wiener 指数的有向图(见图 3 和图 6)，且 Wiener 指数是 44；

(iv) 当 $n \geqslant 6$ 时，取得第 3 大 Wiener 指数的有向图是 $\vec{C}_n^{++}$，且 Wiener 指数是 $\binom{n}{2}n - 2n + 4$.

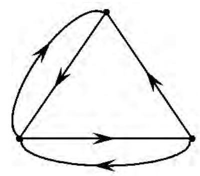
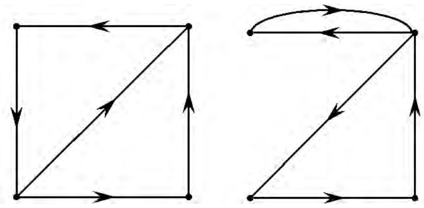


图 4　当 $n=3$ 时的有向图



(a)　　(b)

图 5　当 $n=4$ 时的有向图

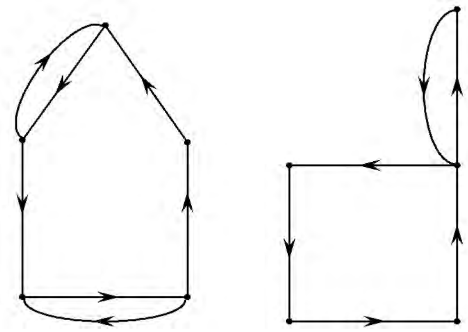


图 6　当 $n=5$ 时的有向图

证　设有向图 D 可以取到第 3 大 Wiener 指数，则由引理 1 和引理 3，可设 D 不同构于 $\vec{C}_n$，$\vec{C}_n^{+}$(当 $n=3$ 时，D 不同构于 $\vec{C}_3$，$\vec{C}_3^{+}$ 和 $\overleftrightarrow{P}_3$).

(i) 当 $n=3$ 时，图 D 只有 2 种可能：图 4 或双向 3 圈. 经计算，图 4 的 Wiener 指数为 7，双向 3 圈的 Wiener 指数为 6. 故结论成立.

(ii) 当 $n=4$ 时，依据 D 中包含最长圈的圈长对 D 进行分类讨论：

(a) 若 D 中包含最长圈的圈长为 4，则 D 有如下 4 种可能情况.

情况 1　在 4 长圈的基础上加 2 条相邻的逆向弧，D 的 Wiener 指数是 20.

情况 2　在 4 长圈的基础上加 2 条不相邻的逆向弧，D 的 Wiener 指数是 20.

情况 3　在 4 长圈的基础上选 2 个不相邻的点加一条有向弧(见图 5(a))，D 的 Wiener 指数是 21.

情况 4　在情况 3 的基础上加 1 条逆向弧，D 的 Wiener 指数是 19.

(b) 若 D 中包含最长圈的圈长为 3，则 D 有如下 2 种可能.

情况 1　如图 5(b) 所示，D 的 Wiener 指数是 21.

情况 2 在图 5(b) 的基础上加 1 条逆向弧,D 的 Wiener 指数是 19.

(c) 若 D 中包含最长圈的圈长为 2,则 $D = \overleftrightarrow{P}_4$,它的 Wiener 指数是 19.

综上,当 $n=4$ 时,取得第 3 大 Wiener 指数的有向图只能是图 5,其 Wiener 指数为 21. 结论成立.

(iii) 当 $n=5$ 时,经过计算,图 3 和图 6 的 Wiener 指数是 44.

假设存在一个 5 阶有向图 D 不同构于 $\vec{C}_5$,$\vec{C}_5^+$,和图 3 及图 6,但 $W(D) \geqslant 44 = W(\vec{C}_5^{++})$. 根据引理 7 和引理 1,$D$ 可分为以下 2 种情形.

情形 1 D 中仅存在一点 v,使得 $od(v)=2$. D 中存在唯一一点 u,使得 $id(u)=2$,由引理 7 知,若 $u=v$,则对任意的点 $w\neq v$,$od(w)=id(w)=1$,若 $u\neq v$,则 $id(v)=1$,$od(u)=1$,且对任意点 $w\neq u$,$w\neq v$ 有 $od(w)=id(w)=1$. 注意到 D 是不同构于 $\vec{C}_5^+$ 和图 7 的无环有向图,故 D 只能是图 7(a) 或者是一个简单有向图,图 7(a) 的 Wiener 指数是 42,矛盾;由引理 4 知,能够取到 Wiener 指数值为 44 的简单有向图只有 3 种,即图 3. 矛盾.

情形 2 D 中存在不同的 2 点 v_1 和 v_2,使得 $od(v_1)=od(v_2)=2$. 由引理 7 知,D 中至多有 2 对相反弧. 按照 D 中包含相反弧的数目将 D 分为 3 种情况:

(a) 若包含 0 对相反弧,则 D 是简单有向图,根据引理 4,矛盾.

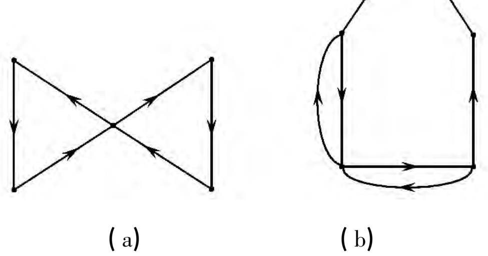
(b) 若包含 1 对相反弧,则

$$W(D) \leqslant \binom{5}{2} \times 5 - 3\times 5 + 9 - (5-1+1) = 39 < 44.$$

矛盾.

(c) 若包含 2 对相反弧,由于 D 不同构于 $\vec{C}_n^{++}$,则这 2 对相反弧必然相邻,如图 7(b) 所示,图 7(b) 的 Wiener 指数是 $43<44$. 矛盾.

故当 $n=5$ 时结论成立.



(a) (b)

图 7 无环有向图

(iv) 当 $n\geqslant 6$ 时,假设存在一个 n 阶有向图 D 不同构于 $\vec{C}_n$,$\vec{C}_n^+$ 和 $\vec{C}_n^{++}$,但 $W(D)\geqslant W(\vec{C}_n^{++})$. 依据引理 7,$D$ 可以分为 2 种情形:

情形 1 D 中仅存在一点 v,使得 $od(v)=2$. D 中存在唯一一点 u,使得 $id(u)=2$,由引理 7 知,若 $u=v$,则对任意的点 $w\neq v$,$od(w)=id(w)=1$,若 $u\neq v$,则 $id(v)=1$,$od(u)=1$,且对任意点 $w\neq u$,$w\neq v$ 有 $od(w)=id(w)=1$. 注意到 D 是不同构于 $\vec{C}_n^+$ 的无环有向图,故 D 是一个只包含 2 个圈并且 2 个圈的公共部分只有一个点的双圈有向图,由引理 8 知,

$$W(D) \leqslant \frac{n^3-2n^2+3n-2}{2} < \binom{n}{2}n - 2n + 4 = W(\vec{C}_n^{++}).$$

矛盾.

或者 D 是一个简单有向图,由引理 4 知,

$$W(D) \leqslant \binom{n}{2}n - 3n + 9 < \binom{n}{2}n - 2n + 4 = W(\vec{C}_n^{++}).$$

矛盾.

情形 2 D 中存在不同的 2 点 v_1 和 v_2,使得 $od(v_1)=od(v_2)=2$.

由引理 7 知,D 中至多有 2 对相反弧. 按照 D 中包含相反弧的数目将 D 分为 3 种情况.

(a) 若包含 0 对相反弧,则 D 是简单有向图,根据引理 4 知,

$$W(D) \leqslant \binom{n}{2}n - 3n + 9 < \binom{n}{2}n - 2n + 4 = W(\vec{C}_n^{++}).$$

矛盾.

(b) 若包含 1 对相反弧,则

$$W(D) \leqslant \binom{n}{2}n - 3n + 9 - (n-1+1) < \binom{n}{2}n - 2n + 4 = W(\vec{C}_n^{++}).$$

矛盾.

(c) 若包含 2 对相反弧,由于 D 不同构于 $\vec{C}_n^{++}$,则这 2 对相反弧必然相邻,如图 8 所示.

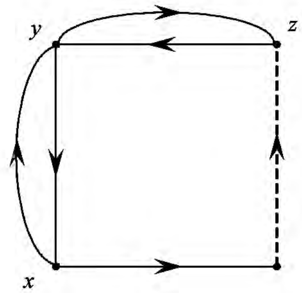


图 8 2 对相反弧相邻的有向图

故

$$w_D(x)=\binom{n}{2}-(n-1)+1-(n-2)+2=\binom{n}{2}-2n+6,$$

$$w_D(y)=\binom{n}{2}-(n-1)+1=\binom{n}{2}-n+2.$$

从而

$$W(D)=\binom{n}{2}(n-2)+\binom{n}{2}\times 2-3n+8<\binom{n}{2}n-2n+4=W(\vec{C}_n^{++}).$$

矛盾.定理 1 证毕.

4 参考文献

[1] Hriňáková K,Knor M,Škrekovski R,et al. A congruence relation for the Wiener index of graphs with a tree-like structure [J]. MATCH Commun Math Comput: Chem,2014,72(3):791-806.

[2] Kelenc A,Klavžar S,Tratnik N. The edge-Wiener index of benzenoid systems in linear time [J]. MATCH Commun Math Comput: Chem,2015,74(3):521-532.

[3] Knor M,Lužar B,Škrekovski R,et al. On Wiener index of common neighborhood graphs [J]. MATCH Commun Math Comput: Chem,2014,72(1):321-332.

[4] Knor M,Škrekovski R,Tepeh A. An inequality between the edge-Wiener index and the Wiener index of a graph [J]. Appl Math Comput,2015,269(1):714-721.

[5] Ma Jing,Shi Yongtang,Yue Jun. The Wiener polarity index of graph products [J]. Ars Comb,2014,116:235-244.

[6] 邢抱花,余桂东,段兰. 具有任意圈秩的图及线图的 Wiener 指数 [J]. 应用数学,2013,26(3):622-626.

[7] 刑抱花,邵云,余桂东. 具有最小 Wiener 指数的 3 圈图 [J]. 浙江大学学报:理学版,2014,41(3):254-257.

[8] 王红勇,江琴. 一类多边形随机链的 Edge-Wiener 指数 [J]. 中山大学学报:自然科学版,2015,54(2):48-50.

[9] 杨娜,杨林. Wiener 指数空间上的新定义及其对有机酮理化性质的 QSPR 研究 [J]. 西南大学学报:自然科学版,2012,34(7):62-66.

[10] 温长昆,任海珍. 基于 Wiener 指数的极值三角链 [J]. 山东大学学报:理学版,2013,48(2):53-56.

[11] 万花,任海珍. 一类 3 圈图的 Wiener 指数 [J]. 数学研究,2012,45(2):207-212.

[12] Knor M,Škrekovski R,Tepeh A. Some remarks on the Wiener index of oriented graphs [J]. Appl Math Comput,2016,273(1):631-636.

[13] Knor M,Škrekovski R,Tepeh A. Orientations of graphs with maximum Wiener index [J]. Discrete Appl Math,2016,211:121-129.

[14] Lin Huiqiu,Shu Jinlong. The distance spectral radius of digraphs [J]. Discrete Appl Math,2013,161(16/17):2537-2543.

[15] Knor M,Škrekovski R,Tepeh A. Digraphs with large maximum Wiener index [J]. Appl Math Comput,2016,284:260-267.

The Digraphs with the Third Maximum Wiener Index

JIANG Yuntao,GAO Yubin*,ZHAO Yujie

(School of Science,North University of China,Taiyuan Shanxi 030051,China)

Abstract: The extension to digraphs of Wiener index could be applicable in the topics of directed large networks, particularly because with this measure,one assigns finite values to the average distance and betweenness centrality of the nodes in a directed network. It is shown that among digraphs on n vertices,the directed cycle $\vec{C}_n$ achieves the maximum Wiener index,and $\vec{C}_n^+$ achieves the second maximum Wiener index. The Wiener index of directed graphs is studied by using reduction to absurdity and discussing method. The directed graphs with the third largest Wiener exponent are obtained and depict the corresponding extreme graphs.

Key words: Wiener index; directed graph; average distance; networks

(责任编辑:曾剑锋)