

文章编号: 1004-4353(2020)01-0020-04

随机多边形网格链图的 ABC 指数

陈维楠, 魏首柳*, 杨世永, 郑升
(闽江学院 数学与数据科学学院, 福建 福州 350108)

摘要: 针对一类多边形网格链图, 利用概率和递归的方法研究了其 ABC 指数的计算问题, 并给出了 ABC 指数的数学期望表达式. 根据该表达式, 计算了含有 n 个多边形的所有网格链图 ABC 指数的平均值.

关键词: ABC 指数; 数学期望; 多边形网格链图; 平均值

中图分类号: O157.5

文献标志码: A

Atom-bond connectivity index in a random polygonal chain

CHEN Weinan, WEI Shouliu*, YAN Shiyong, ZHENG Sheng
(College of Mathematics and Data Science, Minjiang University, Fuzhou 350108, China)

Abstract: For a type of polygonal chain, the calculation problem about the ABC index was studied by the methods of probability and recursion. We obtain an exact formula for the expected value of ABC index in a random polygonal chain. Based on the formula above, we present the average value of the ABC index with respect to all the polygonal chains with n polygons.

Keywords: ABC index; expected value; polygonal chain; average value

0 引言

1947 年, H. Wiener^[1]首次提出了分子拓扑指数(Wiener 指数). 因分子拓扑指数对研究有机化合物的定量结构-性质相关性(QSPR)和定量结构-活性相关性(QSAR)具有重要作用, 所以受到国内外学者的广泛关注, 并得到了进一步发展, 如 Randic 指数、Wiener 指数、Merrifield-Simmons 指数、Harmonic 指数、代数-几何指数、Zagreb 指数、扩展 Zagreb 指数和原子键连通性指数, 等等^[2]. 1998 年, Estrada 等^[3]首次提出了原子键连通性指数(简称 ABC 指数), 该指数是一个关于分子图的拓扑不变量, 其定义为

$$ABC(G) = \sum_{v_i v_j \in E(G)} \sqrt{\frac{d_i + d_j - 2}{d_i d_j}}, \quad (1)$$

其中 G 表示一个包含顶点集 $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 和边集 $E(G)$ 的图(或分子图), d_i 表示其顶点 v_i 的度数. 在研究烷烃等化合物的热形成过程中, 因 ABC 指数可作为一个有效的预测性指数, 因此其在烷烃的稳定性以及环烷烃的应变能等研究中得到了广泛应用^[3-4]. 近年来, 许多国内外学者研究了多种特殊图类 ABC 指数的计算问题. 例如: 文献[5-6]研究了不同特征或有条件限制的树的 ABC 指数以及它们的各种数学性质; 林文水等^[7]证明了 Gutman 提出的关于极小 ABC 指数的树的猜想; 文献[8-9]对具有给定度序列图的 ABC 指数问题进行了研究; 文献[10-11]对双圈图和化学双圈图的 ABC 指数进行了研究; 文献[12-13]刻画了具有极值 ABC 指数的树状六边形网格图的极图及其构成; 陈锦松等^[14]建立了

收稿日期: 2019-11-30

* 通信作者: 魏首柳(1978—), 男, 博士, 教授, 研究方向为图论及其应用.

基金项目: 福建省自然科学基金资助项目(2015J01589); 教育部大学生创新创业项目(201910395009)

一个图的移边变换与 ABC 指数的关系公式; Ke^[15] 研究了苯环系统和蒽蒽系统在自由边界条件下的 ABC 指数的表达式,并且给出了具有极大和极小 ABC 指数的树状苯环系统;文献[16]研究了 8.8.4 格子图和 8.8.6 格子图在自由边界条件下的 ABC 指数. 文献[17]研究了柱面、轮胎曲面、克莱因瓶和莫不乌斯带上的四边形网格图的 ABC 指数,并得到了其精确表达式;武琳等^[18] 研究了图的 ABC 指数与直径之间的关系;文献[19-20]用差分方程和递归等方法分别研究了随机五边形网格链图、六边形网格链图和螺旋六边形网格链图的 ABC 指数的数学期望表达式. 基于上述研究,本文利用类似文献[19-20]的方法研究一般随机多边形网格链图的 ABC 指数.

1 基本定义

一个长度为 n 的多边形链图是指在一系列的圈 O_1, O_2, \dots, O_n 中通过在每一对相邻的圈之间添加一座“桥”(或割边)而连接成的图. 如果所有的圈均为 l -多边形(或 l -圈),则称之为 l -多边形链图,记作 $P_l C_n$. 对于 $1 \leq i \leq n$, 多边形 O_i 被称作 $P_l C_n$ 的第 i 个多边形. 图 1 为 $n=1, 2$ 时的唯一多边形链图. 图 2 为一般的 l -多边形链图 $P_l C_n$, 其中 v_{n-1} 是 $P_l C_{n-1}$ 的第 $n-1$ 个多边形 O_{n-1} 的一个顶点. 注意到,在两个相邻的多边形之间添加一座“桥”的方式有多种,所以对 $n \geq 3$ 的 $P_l C_n$ 不是唯一的. 不妨设 $O_{n-1} = x_1 x_2 \dots x_l x_1$ 为 $n \geq 3$ 的 $P_l C_{n-1}$ 的第 $n-1$ 个多边形,且有一座“桥”联接顶点 x_1 和 v_{n-2} , 其中 v_{n-2} 为 $P_l C_{n-1}$ 的第 $n-2$ 个多边形 O_{n-2} 的一个顶点. 令 $k = \lfloor \frac{l}{2} \rfloor$, 则由对称性可知,有 k 种联接 $P_l C_{n-1}$ 的第 $n-1$ 个多边形 O_{n-1} 和新的外部 l -多边形 O_n 的方式. 不妨设 $P_l C_n^i$ 为通过联接新的外部 l -多边形 O_n 的一个顶点和第 $n-1$ 个多边形 O_{n-1} 的一个顶点 x_{i+1} ($1 \leq i \leq k$) 后的图, 如图 3 所示. 因从一个固定的 $P_l C_{n-1}$ 得到 $P_l C_n$ 的过程是一个随机过程,因此可设从一个固定的 $P_l C_{n-1}$ 得到 $P_l C_n^i$ 的概率为 p_i , 且

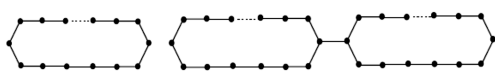
$$\sum_{i=1}^k p_i = 1.$$


图 1 $n=1, 2$ 时的唯一多边形链图

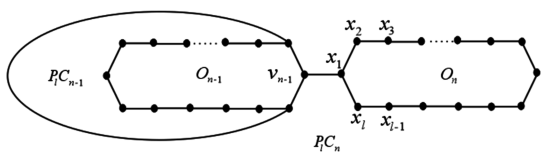


图 2 长度为 n 的 l -多边形链图 $P_l C_n$

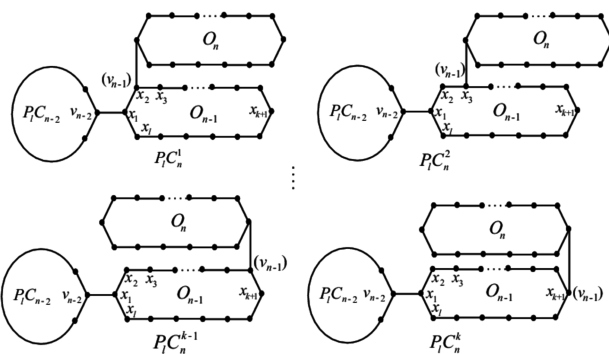


图 3 一般的 l -多边形链图的 k 种连接方式

对于 $n \geq 3$, 假设概率 p_i ($1 \leq i \leq k$) 都是常数且与 n 无关, 则上述描述的过程是一个马尔可夫链过程. 关联概率后的 l -多边形链称作随机 l -多边形链, 且记作 $P_l C_n(p_1, p_2, \dots, p_k)$.

2 随机多边形网格链图的 ABC 指数

为了推导方便,继续沿用上述的相关符号和定义. 如果图 G 中一条边的 2 个顶点的度分别为 i 和 j , 则称此边为图 G 的 (i, j) -边, 用 $n_{ij}(G)$ 表示其边数. 如图 2 所示, 假设 $P_l C_n$ 是在一个长为 $n-1$ 的 l -多边形链图 $P_l C_{n-1}$ 上联接一个外部的新的 l -多边形 O_n 而得到的一个长为 n 的 l -多边形链图, 其中 $O_n = x_1 x_2 \dots x_l$. 由 l -多边形链图的定义可知, $P_l C_n$ 只有 $(2, 2)$ -边、 $(2, 3)$ -边和 $(3, 3)$ -边. 所以, 公式(1)可以转化为

$$ABC(P_l C_n) = \frac{\sqrt{2}}{2} n_{22}(P_l C_n) + \frac{\sqrt{2}}{2} n_{23}(P_l C_n) + \frac{2}{3} n_{33}(P_l C_n). \quad (2)$$

由公式(2)可知,只需要确定 $P_l C_n$ 的 3 类边的数目 $n_{22}(P_l C_n)$ 、 $n_{23}(P_l C_n)$ 和 $n_{33}(P_l C_n)$, 然后将其代入公式(2)即可计算出 l -多边形链图 $P_l C_n$ 的 ABC 指数.

因 $P_l C_n(p_1, p_2, \dots, p_k)$ 是一个长度为 n 的随机 l -多边形链图, 所以 $ABC(P_l C_n(p_1, p_2, \dots, p_k))$ 是一个随机变量, 本文用 $E_n = E[ABC(P_l C_n(p_1, p_2, \dots, p_k))]$ 表示其数学期望.

定理 1 设 $P_l C_n(p_1, p_2, \dots, p_k)$ 是一个长度为 n 的随机 l -多边形链图($n \geq 2$), 则

$$E[ABC(P_l C_n(p_1, p_2, \dots, p_k))] = \left[\left(\frac{2}{3} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) p_1 + \frac{\sqrt{2}}{2} l + \frac{2}{3} \right] n + \left(\sqrt{2} - \frac{4}{3} \right) p_1 - \frac{2}{3}.$$

证明 当 $n=2$ 时, $P_l C_n(p_1, p_2, \dots, p_k)$ 只含有 2 个 l -多边形, 且它们之间由一座“桥”联接, 因此有 $n_{33}(P_l C_n)=1$, $n_{23}(P_l C_n)=4$, $n_{22}(P_l C_n)=2l-4$. 将 $n_{33}(P_l C_n)$ 、 $n_{23}(P_l C_n)$ 和 $n_{22}(P_l C_n)$ 代入公式(2)

可以求得: $E_1 = E[ABC(P_l C_2(p_1, p_2, \dots, p_k))] = \frac{\sqrt{2}}{2} \times 2l + \frac{2}{3} = l\sqrt{2} + \frac{2}{3}$.

当 $n \geq 3$ 时, 由图 3 所示的非同构联接方式可得出 $n_{22}(P_l C_n)$ 、 $n_{23}(P_l C_n)$ 和 $n_{33}(P_l C_n)$.

1) 如果 $P_l C_{n-1}$ 以概率 p_1 的联接方式生成 $P_l C_n^1$, 则 $n_{22}(C_l P_n^1) = n_{22}(C_l P_{n-1}) + l - 3$, $n_{23}(C_l P_n^1) = n_{23}(C_l P_{n-1}) + 2$, $n_{33}(C_l P_n^1) = n_{33}(C_l P_{n-1}) + 2$. 将 $n_{22}(P_l C_n)$ 、 $n_{23}(P_l C_n)$ 和 $n_{33}(P_l C_n)$ 代入公式(2)可以求得 $ABC(C_l P_n^1) = ABC(C_l P_{n-1}) + \frac{\sqrt{2}}{2}(l-1) + \frac{4}{3}$.

2) 如果 $P_l C_{n-1}$ 以概率 p_i 的联接方式生成 $P_l C_n^i$, 其中 $2 \leq i \leq k$, 则 $n_{22}(C_l P_n^i) = n_{22}(C_l P_{n-1}) + l - 4$, $n_{23}(C_l P_n^i) = n_{23}(C_l P_{n-1}) + 4$, $n_{33}(C_l P_n^i) = n_{33}(C_l P_{n-1}) + 1$. 将 $n_{22}(P_l C_n)$ 、 $n_{23}(P_l C_n)$ 和 $n_{33}(P_l C_n)$ 代入公式(2)可以求得 $ABC(C_l P_n^i) = ABC(C_l P_{n-1}) + \frac{\sqrt{2}}{2}l + \frac{2}{3}$, $2 \leq i \leq k$.

由上述 2 种情形的结果可得:

$$E_n = E[ABC(C_l P_n(p_1, p_2, \dots, p_k))] = p_1 ABC(C_l P_n^1) + p_2 ABC(C_l P_n^2) + \dots + p_k ABC(C_l P_n^k) = ABC(C_l P_{n-1}) + \left(\frac{2}{3} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) p_1 + \frac{\sqrt{2}}{2} l + \frac{2}{3},$$

即

$$E_n = ABC(C_l P_{n-1}) + \left(\frac{2}{3} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) p_1 + \frac{\sqrt{2}}{2} l + \frac{2}{3}. \quad (3)$$

注意到 $E[E_n] = E_n$, 将其应用于方程(3)可得如下递归式:

$$E_n = E_{n-1} + \left(\frac{2}{3} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) p_1 + \frac{\sqrt{2}}{2} l + \frac{2}{3}. \quad (4)$$

由式(4)和初始条件($n=2$ 时的情况)可计算得 $E_n = \left[\left(\frac{2}{3} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) p_1 + \left(\frac{\sqrt{2}}{2} l + \frac{2}{3} \right) \right] n + \left(\sqrt{2} - \frac{4}{3} \right) p_1 - \frac{2}{3}$, 定理得证.

3 多边形网格链图 ABC 指数的平均值

设 $S_l C_n$ 是由 n 个 l -多边形网格链图构成的一个集合, 定义 $S_l C_n$ 的所有 l -多边形网格链图的 ABC 指数的平均值为

$$ABC_{\text{平均值}}(S_l C_n) = \frac{1}{|S_l C_n|} \sum_{G \in S_l C_n} ABC(G).$$

由多边形网格链图的定义可知,发生在 $S_l C_n$ 中的每个元素出现的概率均相同,即 $p_1 = p_2 = \cdots = p_k$. 如果取 $p_1 = p_2 = \cdots = p_k = \frac{1}{k} = \frac{1}{\lfloor \frac{l}{2} \rfloor}$,则由定理 1 有下面结论.

定理 2 $S_l C_n$ 中所有元素的 ABC 指数的平均值为

$$ABC_{\text{平均值}}(S_l C_n) = \left[\left(\frac{2}{3} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \frac{1}{\lfloor l \rfloor} + \left(\frac{\sqrt{2}}{2} l + \frac{2}{3} \right) \right] n + \left(\sqrt{2} - \frac{4}{3} \right) \frac{1}{\lfloor l \rfloor} - \frac{2}{3}.$$

证明 将 $p_i = \frac{1}{k}$ ($i = 1, 2, \cdots, k$) 代入定理 1 可得

$$ABC_{\text{平均值}}(S_l C_n) = E \left[ABC \left(C_l P_n \left(\frac{1}{k}, \frac{1}{k}, \cdots, \frac{1}{k} \right) \right) \right] = \left[\left(\frac{2}{3} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \frac{1}{k} + \left(\frac{\sqrt{2}}{2} l + \frac{2}{3} \right) \right] n + \left(\sqrt{2} - \frac{4}{3} \right) \frac{1}{k} - \frac{2}{3} = \left[\left(\frac{2}{3} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \frac{1}{\lfloor l \rfloor} + \left(\frac{\sqrt{2}}{2} l + \frac{2}{3} \right) \right] n + \left(\sqrt{2} - \frac{4}{3} \right) \frac{1}{\lfloor l \rfloor} - \frac{2}{3},$$

即 $ABC_{\text{平均值}}(S_l C_n) = \left[\left(\frac{2}{3} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \frac{1}{\lfloor l \rfloor} + \left(\frac{\sqrt{2}}{2} l + \frac{2}{3} \right) \right] n + \left(\sqrt{2} - \frac{4}{3} \right) \frac{1}{\lfloor l \rfloor} - \frac{2}{3}$, 因此定理 2 成立.

参考文献:

- [1] WIENER H. Structural determination of paraffin boiling points[J]. J Amer Chem Soc, 1947,69:17-20.
- [2] GUTMAN I. Degree-based topological indices[J]. Croat Chem Acta, 2013,86(4):351-361.
- [3] ESTRADA E, TORRES L, RODRIGUEZ L, et al. An atom-bond connectivity index: modelling the enthalpy of formation of alkanes[J]. Indian J Chem, 1998,37(A):849-855.
- [4] ESTRADA E. Atom-bond connectivity and the energetic of branched alkane[J]. Chem Phys Lett, 2008,463:422-425.
- [5] FURTULA B, GRAOVAC A, VUKICEVIC D. Atom-bond connectivity index of trees[J]. Discrete Appl Math, 2009,157:2828-2835.
- [6] XING R, ZHOU B, DU Z. Further results on atom-bond connectivity index of trees[J]. Discrete Appl Math, 2010,158:1536-1545.
- [7] LIN W, LIN X, GAO T, et al. Proving a conjecture of Gutman concerning trees with minimal ABC index[J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2013,69:549-557.
- [8] LIN W, GAO T, CHEN C, et al. On the minimal ABC index of connected graphs with given degree sequence[J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2013,69:571-578.
- [9] GAN L, LIU B, YOU Z. The ABC index of trees with given degree sequence[J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2012,68:137-145.
- [10] CHEN J, GUO X. The atom-bond connectivity index of chemical bicyclic graphs[J]. Appl Math J Chinese Uni, 2012,27(2):243-252.
- [11] 陈锦松,刘剑萍. 双圈图的原子键连通性指数[J]. 广西师范学院学报(自然科学版),2011,28(2):8-11.
- [12] CHEN J, LIU J, GUO X. Some upper bounds for the atom-bond connectivity index of graphs[J]. Appl Math Lett, 2012,25(7):1077-1081.
- [13] CHEN J, GUO X. Extreme atom-bond connectivity index of graphs[J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2011,65:713-722.
- [14] 陈锦松,刘剑萍. 图的移边变换与原子键连通性指数的关系[J]. 数学的实践与认识,2013,43(22):162-165.
- [15] KE X. Atom-bond connectivity index of benzenoid systems and fluoranthene congeners[J]. Poly Aroma Comp, 2012,32:27-35.
- [16] 魏首柳,柯小玲. 自由边界条件下的两类网格图的 ABC 指标[J]. 廊坊师范学院学报,2015,15(5):9-12.
- [17] 柯小玲. 曲面上的四边形网格图的 ABC 指标[J]. 闽江学院学报,2017,29(2):1-5.
- [18] 武琳,胡玉梅. 图的 ABC 指标与直径[J]. 河北科技大学学报,2016,37(6):552-555.
- [19] 杨世永,魏首柳,刘天,等. 随机聚环戊二烯链图的 ABC 指标[J]. 河南工程学院学报,2019,31(2):77-80.
- [20] KE X, WEI S, HUAN J. The atom-bond connectivity and geometric-arithmetic indices in random polyphenyl and spiro chains[J]. Poly Arom Comp, 2019,32:27-35.