第 47 卷 第 4 期 西南师范大学学报(自然科学版) 2022 年 4 月
Vol. 47 No. 4 Journal of Southwest China Normal University (Natural Science Edition) Apr. 2022

DOI:10.13718/j.cnki.xsxb.2022.04.005

随机五角链和随机螺旋五角链的 Randić 指标①

张海东， 王维忠

兰州交通大学 数理学院，兰州 730070

摘要：对随机五角链和随机螺旋五角链分类讨论，利用对一阶常系数非齐次线性差分方程求解的方法得到了 3 类随机五角链和随机螺旋五角链的 Randić 指标的期望值，且分别得到了它们所成集的 Randić 指标的均值.

关 键 词：随机五角链；随机螺旋五角链；Randić 指标；期望值；均值

中图分类号：O157.5 **文献标志码**：A **文章编号**：1000－5471(2022)04－0030－07

The Randić Index in Random Pentagonal Chains and Random Spiro Pentagonal Chains

ZHANG Haidong, WANG Weizhong

Department of Mathematics, Lanzhou Jiaotong University, Lanzhou 730070, China

Abstract: For the classification of Random Pentagonal Chains and Random Spiro Pentagonal Chains, the expected values of Randić indices of three kinds of Random Pentagonal Chains and Random Spiro Pentagonal Chains are obtained by solving the first-order nonhomogeneous linear difference equation with constant coefficients, and the average values of Randić indices of their sets are obtained respectively.

Key words: Random Pentagonal Chains; Random Spiro Pentagonal Chains; Randić index; expected value; average value

本文考虑的图均为简单无向连通图. 设图 G 的顶点集为 $V(G)=\{v_1, v_2, \cdots, v_n\}$，边集为 $E(G)$. 记 d_v 为图 G 中顶点 v 的度，且 (d_i, d_j) 表示度分别为 d_i 和 d_j 的两顶点间的边，图 G 中边为 (d_i, d_j) 的数目记为 $m_{d_i d_j}(G)$，其他符号可参见文献[1].

文献[2] 定义了 Randić 指标

$$R(G)=\sum_{uv\in E(G)}\frac{1}{\sqrt{d_u d_v}}$$

Randić 指标是重要的拓扑指标之一，它起初主要用于描述饱和碳氢化合物中碳原子骨架的分支程度. 研究表明，Randić 指标与碳氢化合物中的沸点、色谱保留时间、表面积等物理化学性质有密切的相关性.

---

① 收稿日期：2021－05－27

基金项目：国家自然科学基金项目(11561042，11961040)；甘肃省自然科学基金项目(20JR5RA418).

作者简介：张海东，硕士研究生，主要从事代数图论的研究.

通信作者：王维忠，博士，教授.

在化学、药物化学和药理学等众多领域都有很重要的应用.

若连通图 G 中任意顶点的度小于 5，则称其为分子图. 文献[3]研究了随机聚苯链的 Wiener 指标，之后文献[4]分别定义了 α,β,γ -随机五角链. 受文献[5]的启发，本文引入随机螺旋五角链，即将 α -随机五角链的所有割边收缩之后所成的随机五角链.

文献[6-7]分别给出了随机螺旋链和随机聚苯链的 Atom-Bond Connectivity 指标与 Geometric-Arithmetic 指标的期望值. 文献[8]讨论了线性六角链的 Kirchhoff 指标. 文献[9]刻画了随机聚苯链的第一类 Zagreb 指标和 Randić 指标. 受文献[10-12]的启发，本文研究了随机五角链和随机螺旋五角链的 Randić 指标.

1　随机五角链的 Randić 指标

定义 1[4]　由 n 个五边形构成的 α -五角链 B_n 可视为把由 $n-1$ 个五边形构成的 α -五角链 B_{n-1} 和一个五边形通过一条边相连所得(如图 1). 当 $n\geqslant 3$ 时，B_n 中最后一个五边形有两种连接方式，分别记为 B_n^1 与 B_n^2(如图 2). 因从 B_{k-1} 到 $B_k(k=3,4,\cdots,n)$ 是随机的，故将在 α -五角链末端通过逐步增加五边形所得的五角链称为 α -随机五角链.

定义 2[4]　由 n 个五边形构成的 β -五角链 C_n 可视为把由 $n-1$ 个五边形构成的 β -五角链 C_{n-1} 和一个五边形用一条共用边相连所得(如图 3). 当 $n\geqslant 3$ 时，C_n 中最后一个五边形有两种连接方式，分别记为 C_n^1 与 C_n^2(如图 4). 因从 C_{k-1} 到 $C_k(k=3,4,\cdots,n)$ 是随机的，故将在 β -五角链末端通过逐步增加五边形所得的五角链称为 β -随机五角链.

定义 3[4]　由 n 个五边形构成的 γ -五角链 D_n 可视为把由 $n-1$ 个五边形构成的 γ -五角链 D_{n-1} 和一个五边形通过两条边相连所得(如图 5). 当 $n\geqslant 3$ 时，D_n 中最后一个五边形有两种连接方式，分别记为 D_n^1，D_n^2(如图 6). 因从 D_{k-1} 到 $D_k(k=3,4,\cdots,n)$ 是随机的，故将在 γ -五角链末端通过逐步增加五边形所得的五角链称为 γ -随机五角链.

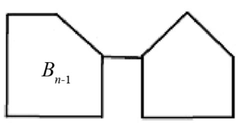
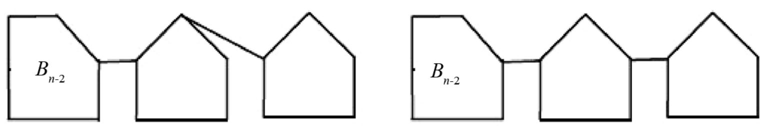


图 1　α -五角链 B_n



(a) B_n^1　(b) B_n^2

图 2　α -五角链的两种局部结构

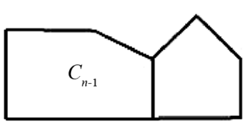
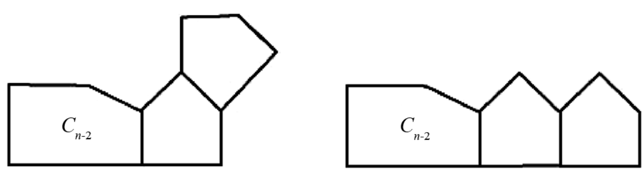


图 3　β -五角链 C_n



(a) C_n^1　(b) C_n^2

图 4　β -五角链的两种局部结构

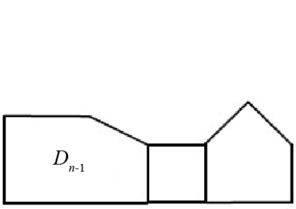
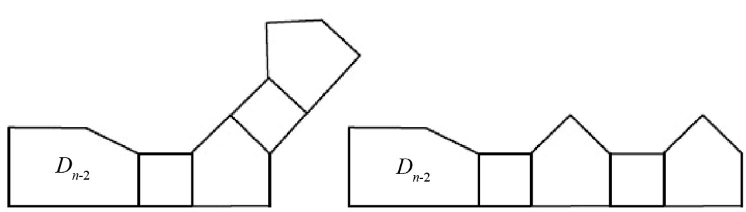


图 5　γ -五角链 D_n



(a) D_n^1　(b) D_n^2

图 6　γ -五角链的两种局部结构

设从 $B_{n-1}(C_{n-1};D_{n-1})$ 到 $B_n^1(C_n^1;D_n^1)$ 的概率为 $p(p_1;p_2)$，则从 $B_{n-1}(C_{n-1};D_{n-1})$ 到 $B_n^2(C_n^2;D_n^2)$ 的概率为 $1-p(1-p_1;1-p_2)$. 令 $R_n^{(\alpha)}(p)(R_n^{(\beta)}(p_1),R_n^{(\gamma)}(p_2))$ 分别表示由 n 个五边形构成且从 $B_{n-1}(C_{n-1};D_{n-1})$ 到 $B_n^1(C_n^1;D_n^1)$ 的概率为 $p(p_1;p_2)$ 的 α-(β-，γ-) 随机五角链. 注意到 $R(R_n^{(\alpha)}(p))$，$R(R_n^{(\beta)}(p_1))$ 及 $R(R_n^{(\gamma)}(p_2))$ 均为随机变量，记它们的期望值分别为

$$E_n^\alpha=E[R(R_n^{(\alpha)}(p))] \qquad E_n^\beta=E[R(R_n^{(\beta)}(p_1))] \qquad E_n^\gamma=E[R(R_n^{(\gamma)}(p_2))]$$

接下来考虑 t-随机五角链的 Randić 指标的期望，$t\in\{\alpha,\beta,\gamma\}$.

显然，α-五角链的边只可能是(2，2)，(2，3)，(3，3). 于是由 Randić 指标的定义可得

$$R(B_n)=\frac{1}{2}m_{2,2}(B_n)+\frac{1}{\sqrt{6}}m_{2,3}(B_n)+\frac{1}{3}m_{3,3}(B_n) \tag{1}$$

故 α-五角链的 Randić 指标取决于 $m_{2,2}(B_n)$，$m_{2,3}(B_n)$ 和 $m_{3,3}(B_n)$ 的值.

定理 1 设 $R_n^{(\alpha)}(p)$ 是一个 n 长的 α-随机五角链，其中 $n\geqslant 2$，则

$$E_n^\alpha=\left(\frac{5-2\sqrt{6}}{6}p+\frac{5+4\sqrt{6}}{6}\right)n+\frac{2\sqrt{6}-5}{3}p+\frac{5-2\sqrt{6}}{3}$$

证 当 $n=2$ 时，直接计算得

$$E[R(B_2)]=\frac{2\sqrt{6}}{3}+\frac{10}{3}$$

当 $n>2$ 时，显然 $m_{2,2}(B_n)$，$m_{2,3}(B_n)$，$m_{3,3}(B_n)$ 的值由图 2 中的两种结构确定.

情形 1 设 B_{n-1} 到 B_n^1 的概率为 p，则

$$m_{2,2}(B_n^1)=m_{2,2}(B_{n-1})+2 \qquad m_{2,3}(B_n^1)=m_{2,3}(B_{n-1})+2 \qquad m_{3,3}(B_n^1)=m_{3,3}(B_{n-1})+2$$

由(1) 式得

$$R(B_n^1)=R(B_{n-1})+\frac{5}{3}+\frac{\sqrt{6}}{3} \tag{2}$$

情形 2 设 B_{n-1} 到 B_n^2 的概率为 $1-p$，则

$$m_{2,2}(B_n^2)=m_{2,2}(B_{n-1})+1 \qquad m_{2,3}(B_n^2)=m_{2,3}(B_{n-1})+4 \qquad m_{3,3}(B_n^2)=m_{3,3}(B_{n-1})+1$$

由(1) 式得

$$R(B_n^2)=R(B_{n-1})+\frac{5}{6}+\frac{2\sqrt{6}}{3} \tag{3}$$

结合(2)，(3) 式得

$$E_n^\alpha=E[R(R_n^{(\alpha)}(p))]=pR(B_n^1)+(1-p)R(B_n^2)=R(B_{n-1})+\frac{5-2\sqrt{6}}{6}p+\frac{5+4\sqrt{6}}{6}$$

又因 $E[E_n^\alpha]=E_n^\alpha$，应用期望算子可得

$$E_n^\alpha=E_{n-1}^\alpha+\frac{5-2\sqrt{6}}{6}p+\frac{5+4\sqrt{6}}{6} \tag{4}$$

注意到(4) 式为一阶常系数非齐次差分方程，显然其所对应的齐次方程的通解为 $E^\alpha=C$，这里 C 为常数. 设 $E^{\alpha'}=kn$ 为(4) 式的一个特解，将其代入(4) 式可得

$$k=\frac{5-2\sqrt{6}}{6}p+\frac{5+4\sqrt{6}}{6}$$

故(4) 式的通解为

$$E_n^\alpha=E^{\alpha'}+E^\alpha=\left(\frac{5-2\sqrt{6}}{6}p+\frac{5+4\sqrt{6}}{6}\right)n+C$$

结合初始条件 $E[R(B_2)]=\dfrac{2\sqrt{6}}{3}+\dfrac{10}{3}$ 可得

$$C=\frac{2\sqrt{6}-5}{3}p+\frac{5-2\sqrt{6}}{3}$$

因此，当 $n\geqslant 2$ 时，有

$$E_n^{\alpha}=E[R(R_n^{(\alpha)}(p))]=\left(\frac{5-2\sqrt{6}}{6}p+\frac{5+4\sqrt{6}}{6}\right)n+\frac{2\sqrt{6}-5}{3}p+\frac{5-2\sqrt{6}}{3}$$

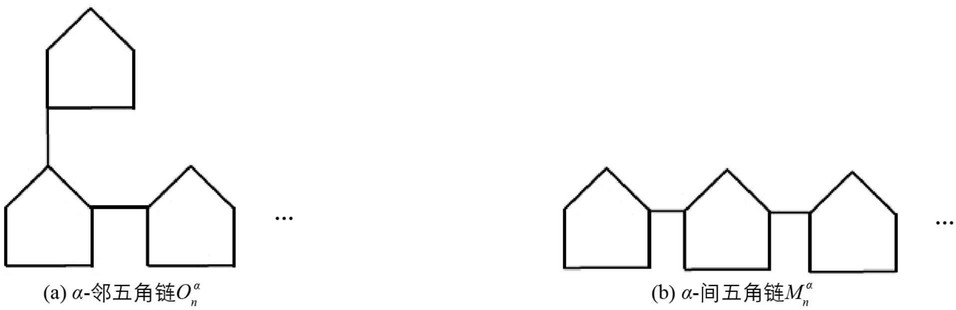


图 7　α -邻五角链和 α -间五角链

显然，如图 7 所示的 α -邻五角链 O_n^{α} 就是 $R_n^{(\alpha)}(1)$，而 α -间五角链 M_n^{α} 就是 $R_n^{(\alpha)}(0)$. 于是由定理 1 得：

推论 1　α -邻五角链 O_n^{α} 和 α -间五角链 M_n^{α} 的 Randić 指标分别为

$$R(O_n^{\alpha})=\frac{5+\sqrt{6}}{3}n$$

$$R(M_n^{\alpha})=\frac{5+4\sqrt{6}}{6}n+\frac{5-2\sqrt{6}}{3}$$

定理 2　设 $R_n^{(\beta)}(p_1)$ 是一个 n 长的 β -随机五角链，其中 $n\geqslant 2$，则

$$E_n^{\beta}=E[R(R_n^{(\beta)}(p_1))]=\left(\frac{\sqrt{6}}{3}+\frac{2}{3}\right)n+1$$

证　证明方法与定理 1 完全相似，不再赘述.

定理 3　设 $R_n^{(\gamma)}(p_2)$ 是一个 n 长的 γ -随机五角链，其中 $n\geqslant 2$，则

$$E_n^{\gamma}=E[R(R_n^{(\gamma)}(p_2))]=\left(\frac{\sqrt{6}}{3}+\frac{5}{3}\right)n$$

证　证明方法与定理 1 完全相似，不再赘述.

下面考虑 t -五角链集($t\in\{\alpha,\beta,\gamma\}$) 的 Randić 指标的均值.

设 $PC_n^{(t)}$ 是 n 长的 t -五角链的集合($t\in\{\alpha,\beta,\gamma\}$)，则 $PC_n^{(t)}$ 的 Randić 指标的均值定义为

$$R_{\mathrm{avr}}(PC_n^{(t)})=\frac{1}{|PC_n^{(t)}|}\sum_{G\in PC_n^{(t)}}R(G)$$

因在 $PC_n^{(t)}$ 中每个 t -五角链出现的概率相等，即

$$p=1-p=\frac{1}{2}\qquad p_1=1-p_1=\frac{1}{2}\qquad p_2=1-p_2=\frac{1}{2}$$

故由定理 1、定理 2、定理 3 分别可得下列定理 4、定理 5、定理 6.

定理 4　n 长的 α -五角链集 $PC_n^{(\alpha)}$ 的 Randić 指标的均值为

$$R_{\mathrm{avr}}(PC_n^{(\alpha)})=\left(\frac{5}{4}+\frac{\sqrt{6}}{2}\right)n+\frac{5}{6}-\frac{\sqrt{6}}{3}$$

注 1　由定理 1 和推论 1 易得，$\{O_n^{\alpha},M_n^{\alpha}\}$ 的 Randić 指标的均值

$$\frac{R(O_n^{\alpha})+R(M_n^{\alpha})}{2}=R_{\mathrm{avr}}(PC_n^{(\alpha)})$$

定理 5　n 长的 β -五角链集 $PC_n^{(\beta)}$ 的 Randić 指标的均值为

$$R_{\text{avr}}(PC_n^{(\beta)})=\left(\frac{\sqrt{6}}{3}+\frac{2}{3}\right)n+1$$

定理 6 n 长的 γ -五角链集 $PC_n^{(\gamma)}$ 的 Randić 指标的均值为

$$R_{\text{avr}}(PC_n^{(\gamma)})=\left(\frac{\sqrt{6}}{3}+\frac{5}{3}\right)n$$

2 随机螺旋五角链的 Randić 指标

定义 4 一个 n 长的螺旋五角链 SP_n 是指通过收缩 α -五角链 B_n 的所有割边所得的五角链(如图 8). 当 $n\geqslant 3$ 时, 在 SP_{n-1} 后添加一个五边形有两种方式, 分别记为 SP_n^1, SP_n^2(如图 9). 因从 SP_{k-1} 到 SP_k 是随机选择($k=3,4,\cdots,n$), 故将末端逐步添加五边形的螺旋五角链称为随机螺旋五角链. 假设 SP_{k-1} 到 SP_k^1, SP_k^2 的概率分别为 p_3, $1-p_3$($k=3,4,\cdots,n$). 令 $SP_n(p_3)$ 表示由 n 个五边形构成, 且从 SP_{n-1} 到 SP_n^1 的概率为 p_3 的随机螺旋五角链.

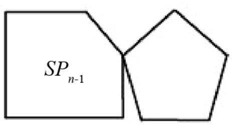
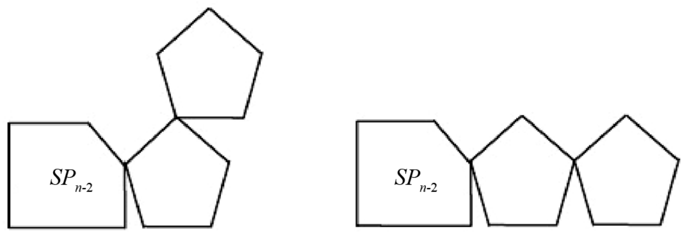


图 8 螺旋五角链 SP_n



(a) SP_n^1 (b) SP_n^2

图 9 螺旋五角链的两种局部结构

注意到螺旋五角链的边只可能是(2, 2),(2, 4),(4, 4), 由 Randić 指标的定义得

$$R(SP_n)=\frac{1}{2}m_{2,2}(SP_n)+\frac{1}{\sqrt{8}}m_{2,4}(SP_n)+\frac{1}{4}m_{4,4}(SP_n) \tag{5}$$

故计算 $SP_n(p_3)$ 的 Randić 指标取决于 $m_{2,2}(SP_n)$, $m_{2,4}(SP_n)$ 和 $m_{4,4}(SP_n)$ 的值. 显然 $R(SP_n(p_3))$ 为随机变量, 令其期望为 $E_n=E[R(SP_n(p_3))]$.

定理 7 设 $SP_n(p_3)$ 是一个 n 长的随机螺旋五角链, 其中 $n\geqslant 2$, 则

$$E_n=\left[\left(\frac{3}{4}-\frac{\sqrt{2}}{2}\right)p_3+\frac{1}{2}+\sqrt{2}\right]n+\left(\sqrt{2}-\frac{3}{2}\right)p_3+2-\sqrt{2}$$

证 当 $n=2$ 时, 通过直接计算可得

$$E[R(SP_2)]=3+\sqrt{2}$$

当 $n>2$ 时, $m_{2,2}(SP_n)$, $m_{2,4}(SP_n)$ 及 $m_{4,4}(SP_n)$ 的值可由图 9 中的两种结构来确定.

情形 1 设 SP_{n-1} 到 SP_n^1 的概率为 p_3, 则

$$m_{2,2}(SP_n^1)=m_{2,2}(SP_{n-1})+2 \qquad m_{2,4}(SP_n^1)=m_{2,4}(SP_{n-1})+2 \qquad m_{4,4}(SP_n^1)=m_{4,4}(SP_{n-1})+1$$

因此由(5)式得

$$R(SP_n^1)=R(SP_{n-1})+\frac{5}{4}+\frac{\sqrt{2}}{2} \tag{6}$$

情形 2 设 SP_{n-1} 到 SP_n^2 的概率为 $1-p_3$, 则

$$m_{2,2}(SP_n^2)=m_{2,2}(SP_{n-1})+1 \qquad m_{2,4}(SP_n^2)=m_{2,4}(SP_{n-1})+4 \qquad m_{4,4}(SP_n^2)=m_{4,4}(SP_{n-1})$$

因此由(5)式得

$$R(SP_n^2)=R(SP_{n-1})+\frac{1}{2}+\sqrt{2} \tag{7}$$

结合(6),(7)两式得

$$E_n = E[R(SP_n(p_3))] = p_3 R(SP_n^1) + (1-p_3) R(SP_n^2) = \\ p_3\left(R(SP_{n-1}) + \frac{5}{4} + \frac{\sqrt{2}}{2}\right) + (1-p_3)\left(R(SP_{n-1}) + \frac{1}{2} + \sqrt{2}\right) = \\ R(SP_{n-1}) + \left(\frac{3}{4} - \frac{\sqrt{2}}{2}\right) p_3 + \frac{1}{2} + \sqrt{2}$$

又因 $E[E_n] = E_n$，应用期望算子可得

$$E_n = E_{n-1} + \left(\frac{3}{4} - \frac{\sqrt{2}}{2}\right) p_3 + \frac{1}{2} + \sqrt{2} \tag{8}$$

注意到(8) 式为一阶常系数非齐次差分方程，显然其所对应的齐次方程的通解为 $E = C_1$，这里 C_1 为常数. 令 $E' = sn$ 是(8) 式的一个特解，将其代入(8) 式可得

$$s = \left(\frac{3}{4} - \frac{\sqrt{2}}{2}\right) p_3 + \frac{1}{2} + \sqrt{2}$$

从而(8) 式的通解为

$$E_n = E' + E = \left[\left(\frac{3}{4} - \frac{\sqrt{2}}{2}\right) p_3 + \frac{1}{2} + \sqrt{2}\right] n + C_1$$

由初始条件 $E[R(SP_2)] = 3 + \sqrt{2}$ 得

$$C_1 = \left(\sqrt{2} - \frac{3}{2}\right) p_3 + 2 - \sqrt{2}$$

故当 $n \geqslant 2$ 时，有

$$E_n = E[R(SP_n(p_3))] = \left[\left(\frac{3}{4} - \frac{\sqrt{2}}{2}\right) p_3 + \frac{1}{2} + \sqrt{2}\right] n + \left(\sqrt{2} - \frac{3}{2}\right) p_3 + 2 - \sqrt{2}$$

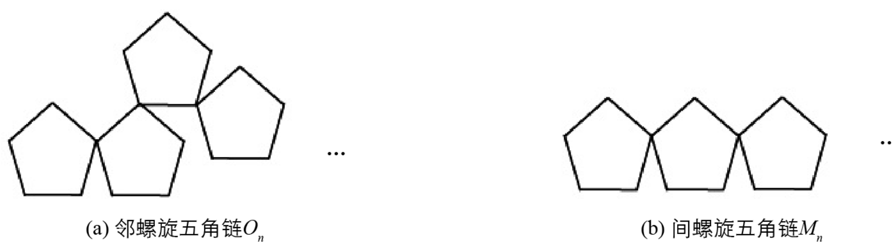


图 10　邻螺旋五角链和间螺旋五角链

显然，如图 10 所示的邻螺旋五角链 O_n 就是 $SP_n(1)$，而间螺旋五角链 M_n 就是 $SP_n(0)$. 故由定理 7 得：

推论 2　邻螺旋五角链 O_n 和间螺旋五角链 M_n 的 Randić 指标分别为

$$R(O_n) = \left(\frac{5}{4} + \frac{\sqrt{2}}{2}\right) n + \frac{1}{2}$$

$$R(M_n) = \left(\frac{1}{2} + \sqrt{2}\right) n + 2 - \sqrt{2}$$

接下来考虑螺旋五角链集的 Randić 指标的均值. 设 SC_n 是 n 长的螺旋五角链的集合，则 SC_n 的 Randić 指标的均值定义为

$$R_{\mathrm{avr}}(SC_n) = \frac{1}{|SC_n|} \sum_{G \in SC_n} R(G)$$

注意到，在集合 SC_n 中每个螺旋五角链出现的概率相等，即 $p_3 = 1 - p_3 = \frac{1}{2}$，故由定理 7 得：

定理 8　n 长的螺旋五角链集 SC_n 的 Randić 指标的均值为

$$R_{\mathrm{avr}}(SC_n) = \left(\frac{7}{8} + \frac{3\sqrt{2}}{4}\right) n + \frac{5}{4} - \frac{\sqrt{2}}{2}$$

注2　由定理7和推论2易得$\{O_n, M_n\}$的Randić指标的均值为

$$\frac{R(O_n)+R(M_n)}{2}=R_{\mathrm{avr}}(SC_n)=\left(\frac{7}{8}+\frac{3\sqrt{2}}{4}\right)n+\frac{5}{4}-\frac{\sqrt{2}}{2}$$

参考文献:

[1] 徐俊明. 图论及其应用[M]. 3版. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2010.

[2] RANDIĆ M. On Characterization of Molecular Branching [J]. Journal of the American Chemical Society, 1975, 97(23): 6609-6615.

[3] YANG W L, ZHANG F J. Wiener Index in Random Polyphenyl Chains [J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2012, 68(1): 371-376.

[4] WANG H Y, QIN J, GUTMAN I. Wiener Numbers of Random Pentagonal Chains [J]. Iranian Journal of Mathematical Chemistry, 2013, 4(1): 59-76.

[5] JAHANBANI A. The First Zagreb and Randić Indices in Random Spiro Chains [J/OL]. Polycyclic Aromatic Compounds, 2020, 471: 1-10 [2021-04-28]. https://doi,org/10.1080/10406638.2020.1809471.

[6] WEI S L, KE X L, HAO G L. Comparing the Excepted Values of Atom-Bond Connectivity and Geometric-Arithmetic Indices in Random Spiro Chains [J]. Journal of Inequalities and Applications, 2018, 45(1): 1-11.

[7] KE X L, WEI S L, HUANG J W. The Atom-Bond Connectivity and Geometric-Arithmetic Indices in Random Polyphenyl Chains [J]. Polycyclic Aromatic Compounds, 2020, 41(9): 1873-1882.

[8] YANG Y J, ZHANG H P. Kirchhoff Index of Linear Hexagonal Chains [J]. International Journal of Quantum Chemistry, 2008, 108(3): 503-512.

[9] JAHANBANI A. The Expected Values of the First Zagreb and Randić Indices in Random Polyphenyl Chains [J/OL]. Polycyclic Aromatic Compounds, 2020, 472: 1-10 [2021-04-28]. https://doi.org/10.1080/10406638.2020.1809472.

[10] 魏斌, 王维忠. 加权冠图的无符号拉普拉斯谱和正规拉普拉斯谱[J]. 西南大学学报(自然科学版), 2021, 43(8): 77-83.

[11] 杨笑蕊, 强会英, 纳仁花, 等. 两类特殊图的Szeged指标和修正Szeged指标[J]. 西南大学学报(自然科学版), 2020, 42(2): 29-35.

[12] 唐保祥, 任韩. 2类图完美对集数的计算公式[J]. 西南师范大学学报(自然科学版), 2020, 45(10): 13-15.

责任编辑　廖坤