

1013 Wiener index と Hosoya polynomial

○ 細矢治夫 (お茶大 名誉)

1 Wiener index と Hosoya polynomial

Harold Wiener は 1947 年に、炭化水素分子の炭素原子骨格のグラフに対して w と p の二種類のインデックスを提出し、熱力学的諸量との相関関係 (QSAR) を議論した。¹⁾ この二つが最初のトポロジカル・インデックスとして認められている。 w に対する Wiener の定義は鎖式のグラフにしか適用されないが、演者は Z -インデックスを提出した 1972 年の論文の中で、距離行列 \mathbf{D} の要素を使って

$$w = \sum_{i < j} D_{ij} \quad (1)$$

と定義し直した。²⁾ 即ち、 w は距離行列 \mathbf{D} の非対角項の総和の半分である。これにより、 w は環式のグラフにも定義されるようになり、多くの研究者に使われるようになった。

更に 1988 年に演者は、次のような Wiener polynomial $H_G(x)$ を提出した。³⁾

$$H_G(x) = \sum_{k=1}^l d(G,k)x^k \quad (2)$$

ここで、 $d(G,k)$ は、グラフ G の中で最短 k 歩で結ばれる点 $i < j$ の組の数である。この $H_G(x)$ を形式的に x で微分することによって、

$$w = \sum_{k=1} k d(G,k) = H'_G(1) \quad (3)$$

と表すことができる。また、Wiener のもう一つのインデックス p (3 歩数) も $H_G(x)$ を使って

$$p = H_G'''(0)/6 \quad (4)$$

と表すことができる。この他にも、グラフの距離に関わる諸量が $H_G(x)$ によって系統的に関連づけられることが示され、グラフ理論を研究する多くの数学者の注目を集めるようになった。⁴⁻⁶⁾

これらとは独立に、演者は距離行列式 $S_G(x)$ を定義した。⁷⁾

$$S_G(x) = (-1)^N \det(\mathbf{D} - x\mathbf{E}) \quad S_G(x) = (-1)^N \det(\mathbf{D} - x\mathbf{E}). \quad (5)$$

ここで、 \mathbf{E} はグラフ G の点の数 N と同じ次数の単位行列である。

講演では、距離行列 \mathbf{D} に関連した $H_G(x)$ 、 $S_G(x)$ 、 w 等の最近の話題と進歩について紹介する。

- 1) H. Wiener, *J. Amer. Chem. Soc.*, **69** (1947) 17. 2) H. Hosoya, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **44** (1971) 2332.
3) H. Hosoya, *Discrete Applied Math.*, **19** (1988) 239. 4) A. R. Ashrafi and M. Ghorbani, *Digest J. Nanomaterials and Biostructures*, **4** (2009) 389. 5) A. M. Ali, A. A. Ali, and T. H. Ismail, *Hosoya Polynomials and Wiener Indices of Distances in Graphs*, Lambert, Germany (2010). 6) S. Klavzar and M. Mollard, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **68** (2012) 311. 7) H. Hosoya, M. Murakami, and M. Gotoh, *Natl. Sci. Rept. Ochanomizu Univ.*, **24** (1973) 27.

