

随机正十边形链的Hosoya指数研究

张静洁

青海师范大学数学与统计学院, 青海 西宁

收稿日期: 2026年4月15日; 录用日期: 2026年5月8日; 发布日期: 2026年5月19日

摘要

化学图论是化学与图论交叉的一个活跃领域。拓扑指数是不随图顶点编序而改变的图不变量, 能将复杂分子结构转化为可计算的数值, 是化学图论中建立分子结构与性质定量关系的核心工具。本文研究的Hosoya指数是化学图论中极具价值的一类拓扑指数, 由日本化学家Hosoya于1971年提出, 定义为图 G 中所有匹配的数目之和。其数值变化与烷烃的沸点、分子稳定性等物理化学性质密切相关。本文研究随机正十边形链关于Hosoya指数的期望。在该链中, 两个相邻的十边形通过割边以随机方式连接。通过概率图方法将随机结构转化为可量化的数学结构, 并建立递推公式, 推导出随机正十边形链中Hosoya指数的期望表达式。

关键词

随机正十边形链, Hosoya指数, 期望

On the Hosoya Index of Random Regular Decagonal Chains

Jingjie Zhang

College of Mathematics and Statistics, Qinghai Normal University, Xining Qinghai

Received: April 15, 2026; accepted: May 8, 2026; published: May 19, 2026

Abstract

Chemical graph theory is an active interdisciplinary field bridging chemistry and graph theory. Topological indices are graph invariants that do not change with vertex labeling; they convert complex molecular structures into computable numerical values and serve as core tools for establishing quantitative structure-property relationships in chemical graph theory. The Hosoya index studied in this paper is a highly valuable type of topological index in chemical graph theory. Proposed by Japanese chemist Hosoya in 1971, it is defined as the total number of matchings in a graph G . Its numerical

variation is closely related to physicochemical properties of alkanes, such as boiling point and molecular stability. This paper investigates the expectation of the Hosoya index for random regular decagonal chains. In such a chain, two adjacent decagons are connected by a cut edge in a random manner. By employing probabilistic graph methods, the random structure is transformed into a quantifiable mathematical structure. A recurrence relation is then established, and the expected expression of the Hosoya index for random regular decagonal chains is derived.

Keywords

Random Regular Decagonal Chain, Hosoya Index, Expectation

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

本文所考虑的图均为有限、无向的简单图。设 $G = (V(G), E(G))$ 是一个图，用 $V(G)$ 、 $E(G)$ 、 $|V(G)|$ 和 $|E(G)|$ 分别表示图 G 的顶点集、边集、顶点数和边数。令 e 和 x 分别为图 G 的一条边和一个顶点，用 $G - e$ 表示图 G 删去边 e 后得到的图，用 $G - x$ 表示图 G 删去顶点 x (及关联的边) 后得到的图。对任意顶点 $v \in V(G)$ ，称 $N_G(v) = \{u | uv \in E\}$ 为图 G 中 v 的邻点集。称 $N_G[v] = \{v\} \cup N_G(v)$ 为图 G 中 v 的闭邻集。图 G 中所有顶点的个数称为图 G 的阶。 P_n 、 C_n 和 K_n 分别表示 n 阶的路、圈和完全图。

在化学图论领域，拓扑指数作为分子结构的数值不变量，已成为定量构性关系研究的核心工具[1][2]。自 1947 年 Wiener 开创以来[3]，研究者发展了数以百计的拓扑指数[4][5]，用于预测分子的物理化学性质、生物活性及药物设计[1][2]。

聚合物链的拓扑结构对其宏观性质具有决定性影响[6]。从线性链、环状链到支化链、多环链，不同的拓扑连接方式会导致截然不同的热力学行为、动力学特性和功能表现[6]。近年来，随机聚合物链模型因其能够捕捉真实高分子体系的统计涨落特性而受到广泛关注[7]-[9]。

随机正十边形链 G_n 是一个连通图，是由 n 个正十边形 H_1, H_2, \dots, H_n 组成的，其中对任意的正整数 i 和 j ($1 \leq i < j \leq n$)，当且仅当 $j = i + 1$ 时， H_i 和 H_j 才由一条割边连接，且每一个正十边形和一条割边的公共顶点是三度点[10]。称 H_1 和 H_n 分别为 G_n 的始端和末端。对于 G_n 的第 k 个正十边形 H_k 上的顶点，从它与第 $k - 1$ 个正十边形 H_{k-1} 连接割边的端点起，按顺时针方向依次标记为 $x_{k,1}, x_{k,2}, \dots, x_{k,10}$ ， $k \in \{2, 3, \dots, n\}$ 。在 G_{n-1} 的末端 H_{n-1} 通过割边连接一个新的正十边形构成 G_n ，如图 1 所示。

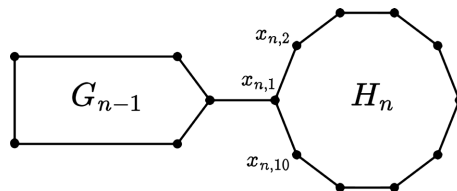


Figure 1. Random regular decagonal chain G_n

图 1. 随机正十边形链 G_n

在 G_n 中，当 $n = 1, 2$ 时， G_n 仅有一种结构；当 $n \geq 3$ 时， G_n 的末端 H_n 通过割边与 G_{n-1} 的末端 H_{n-1} 有

五种连接方式, 这种局部排列分别表示为 G_n^1 , G_n^2 , G_n^3 , G_n^4 , G_n^5 , 如图 2 所示。

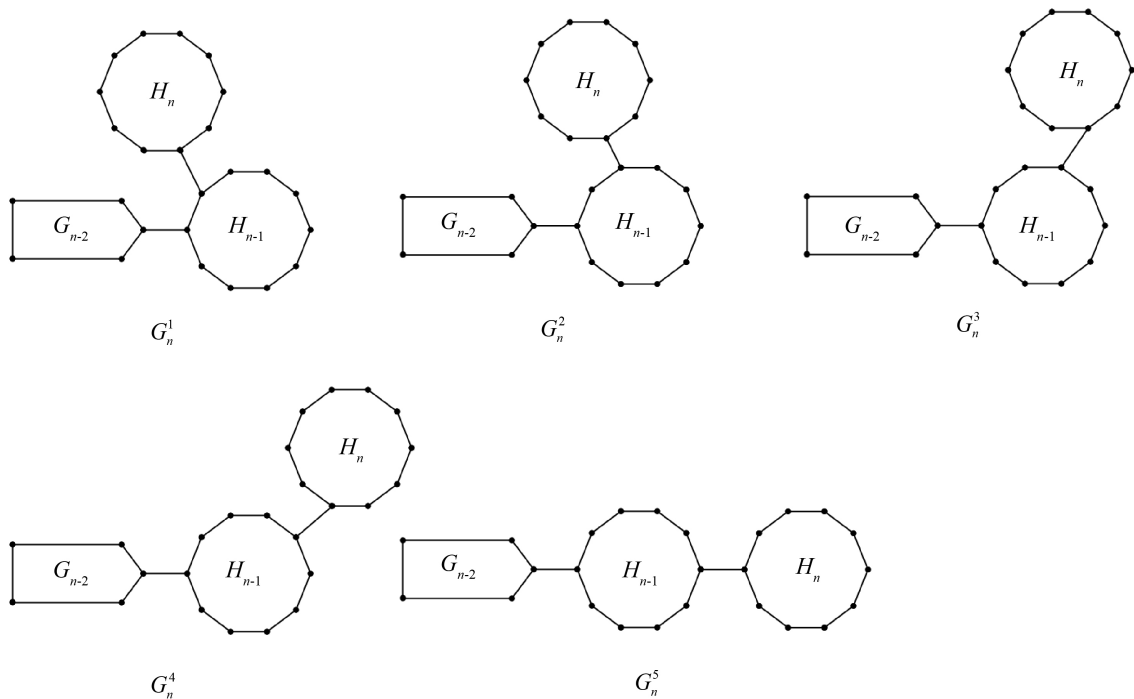


Figure 2. The five possible connection modes in the random regular decagon chain G_n

图 2. 随机正十边形链 G_n 中的五种可能连接方式

一个含有 n 个正十边形的随机正十边形链 $G_n(p_1, p_2, p_3, p_4, p_5)$ (其中 $\sum_{i=1}^5 p_i = 1$), 是通过割边逐步增加

末端的正十边形得到的, 在之后的每一步 $t = (3, 4, \dots, n)$ 中都会有五种随机排列:

- $G_{t-1} \rightarrow G_t^1$ 的概率表示为 p_1 ;
- $G_{t-1} \rightarrow G_t^2$ 的概率表示为 p_2 ;
- $G_{t-1} \rightarrow G_t^3$ 的概率表示为 p_3 ;
- $G_{t-1} \rightarrow G_t^4$ 的概率表示为 p_4 ;
- $G_{t-1} \rightarrow G_t^5$ 的概率表示为 p_5 ;

其中概率 p_1, p_2, p_3, p_4, p_5 为常数, 与步长参数 t 无关。并且, 定义 $G_n(1, 0, 0, 0, 0)$, $G_n(0, 1, 0, 0, 0)$, $G_n(0, 0, 1, 0, 0)$, $G_n(0, 0, 0, 1, 0)$, $G_n(0, 0, 0, 0, 1)$, 分别为元链 M_n , 正交链 O_n^1 , O_n^2 , O_n^3 , 对链 P_n [10]。

对于 n 阶的简单图 G , 若图 G 中的两条边没有公共端点, 则称这两条边相互独立。设 $A \subseteq E(G)$, 若 A 中任意两条边均相互独立, 则称 A 为图 G 的一个匹配。特别地, 空集视为任何图的一个匹配。图 G 的 k -匹配是指由 G 中 k 条相互独立的边构成的子集, 用 $\mu(G, k)$ 表示 G 中 k -匹配的数目。显然, $\mu(G, 0) = 1$,

$\mu(G, 1) = |E(G)|$ 。图 G 的 Hosoya 指数定义为图 G 中所有匹配的数目, 记为 $\mu(G)$, 即 $\mu(G) = \sum_{k=0}^n \mu(G, k)$

[11]-[14]。

本文涉及 Fibonacci 数列 $\{f_n\}$, 其定义为: $f_0 = 0, f_1 = 1$, 且满足递推关系 $f_n = f_{n-1} + f_{n-2}$, $n \geq 2$ 。该

数列的通项公式为: $f_n = \frac{1}{\sqrt{5}}(\phi^n - (-\phi)^{-n})$, 其中 $\phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ [15]。

下述引理为后续的计算推导奠定了理论基础。

引理 1 [16] 设 G 是一个简单的连通图, 对任意的 $v \in V(G)$, $uv \in E(G)$, 则

- (i) $\mu(G) = \mu(G - uv) + \mu(G - \{u, v\})$;
 (ii) $\mu(G) = \mu(G - v) + \sum_{x \in N_G(v)} \mu(G - \{v, x\})$ 。

引理 2 [16] 若 G_1, G_2, \dots, G_k 是图 G 的连通分支, 则 $\mu(G) = \prod_{i=1}^k \mu(G_i)$ 。

引理 3 [16] 对于 n 阶的路 P_n , 有 $\mu(P_n) = f_{n+1}$ 。

引理 4 [16] 对于 n 阶的圈 C_n , 有 $\mu(C_n) = f_{n+1} + f_{n-1}$ 。

2. 主要结论

定理 在随机正十边形链 G_n 中 Hosoya 指数的期望值

$$E(\mu(G_n)) = \frac{123\sqrt{A^2+4B}-123A+36308}{(A+\sqrt{A^2+4B})\sqrt{A^2+4B}} \times \left(\frac{A+\sqrt{A^2+4B}}{2}\right)^n + \frac{-123\sqrt{A^2+4B}-123A+36308}{(\sqrt{A^2+4B}-A)\sqrt{A^2+4B}} \times \left(\frac{A-\sqrt{A^2+4B}}{2}\right)^n.$$

其中 $A = 9p_1 - 4p_2 + p_3 - p_4 + 148$, $B = -1053p_1 + 492p_2 - 123p_3 + 123p_4 - 50$ 。

分别令 $p_1 = 1, p_2 = 1, p_3 = 1, p_4 = 1, p_5 = 1$ 我们可以从定理 1 中得到元链 M_n , 正交链 O_n^1, O_n^2, O_n^3 和对链 P_n 的 Hosoya 指数的推论:

推论 在随机正十边形链中元链 M_n , 正交链 O_n^1, O_n^2, O_n^3 和对链 P_n 的 Hosoya 指数

$$\begin{aligned} \mu(M_n) &= \left(\frac{89689\sqrt{413}+1157}{6377546} + \frac{1157}{2206}\right) \left(\frac{7\sqrt{413}+157}{2}\right)^n - \left(\frac{89689\sqrt{413}-1157}{6377546} - \frac{1157}{2206}\right) \left(\frac{157-7\sqrt{413}}{2}\right)^n \\ \mu(O_n^1) &= \left(\frac{51\sqrt{5626}+5626}{11252}\right) (\sqrt{5626}+72)^n - \left(\frac{51\sqrt{5626}-5626}{11252}\right) (72-\sqrt{5626})^n \\ \mu(O_n^2) &= \left(\frac{97\sqrt{21509}+21509}{43018}\right) \left(\frac{\sqrt{21509}+149}{2}\right)^n - \left(\frac{97\sqrt{21509}-21509}{43018}\right) \left(\frac{149-\sqrt{21509}}{2}\right)^n \\ \mu(O_n^3) &= \left(\frac{9\sqrt{181}+181}{362}\right) \left(\frac{11\sqrt{181}+147}{2}\right)^n - \left(\frac{9\sqrt{181}-181}{362}\right) \left(\frac{147-11\sqrt{181}}{2}\right)^n \\ \mu(P_n) &= \left(\frac{49\sqrt{5426}+5426}{10852}\right) (\sqrt{5426}+74)^n - \left(\frac{49\sqrt{5426}-5426}{10852}\right) (74-\sqrt{5426})^n. \end{aligned}$$

3. 主要结论的证明

对于随机正十边形链的 Hosoya 指数是一个随机变量。在该部分的讨论过程中, 我们将得到计算它期望值 $E(\mu(G_n(p_1, p_2, p_3, p_4, p_5)))$ 的一个公式。为了方便后续的推导, 我们定义一个映射 $\varphi: I \rightarrow \mathcal{F}$, 其中 $I = \{1, 2, 3, 4, 5\}$ 是一个图末端五种不同连接情形的编号集合, $\mathcal{F} = \{A, B, C, D, E\}$ 是五类不同图形的标记集合。进一步的对应关系是 $\varphi(1) = A, \varphi(2) = B, \varphi(3) = C, \varphi(4) = D, \varphi(5) = E$ 。在下面计算推导过程中会涉及到末端不同的五类图形 $A_k^i, B_k^i, C_k^i, D_k^i, E_k^i$, 其中 $i \in I, k \in \{1, 2, \dots, n-1\}$, 如图 3 所示。

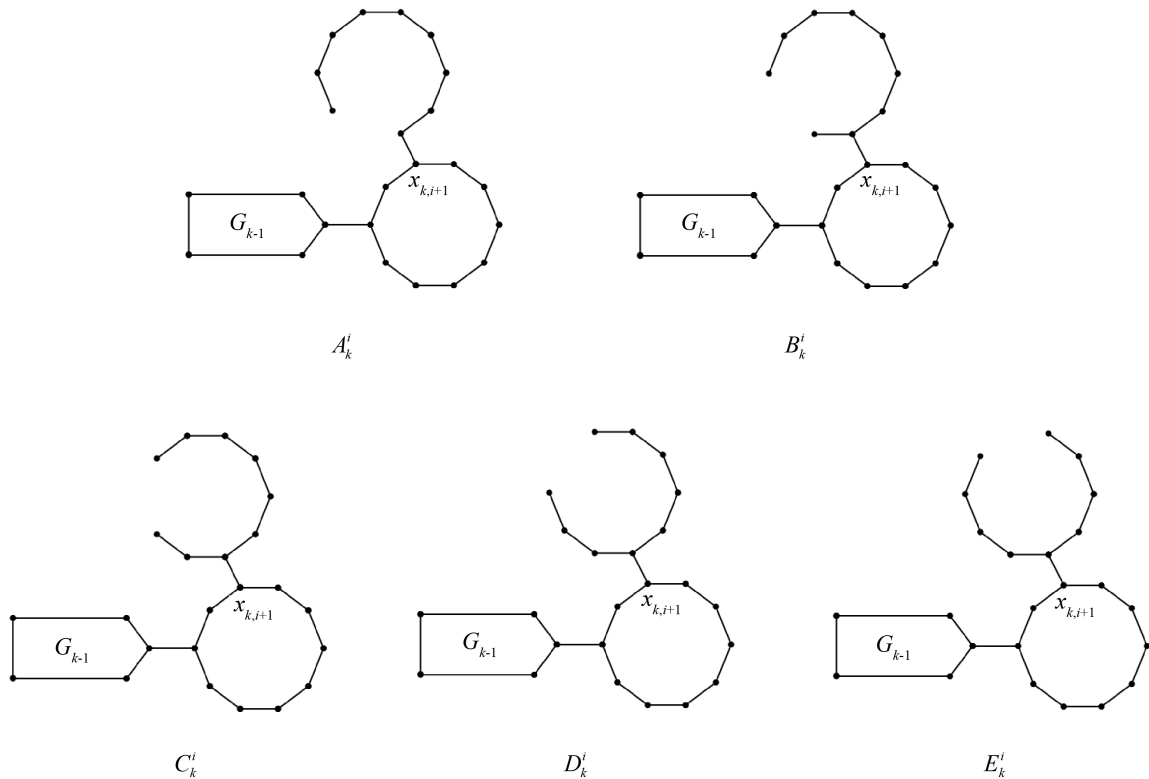


Figure 3. Five types of connection modes for terminal connections in the random regular decagon chain

图 3. 随机正十边形链中末端连接的五类连接方式

根据末端连接方式的不同, 随机正十边形链共分为五类情形, 分别记为 G_n^i , $i \in I$, 如图 2 所示。对于 G_n^i , 在考虑它的 Hosoya 指数时先考虑 $x_{n-1,i+1}x_{n,1}$ 这条边, 依据引理 1 和引理 2 得到相应的递推关系式, 然后考虑 $x_{n-2,i+1}x_{n-1,1}$ 这条边, 依据引理 1 和引理 2 得到相应的递推关系式, 其中 $i \in I$ 。

(1) 当 $G_n^i = G_n^1$ 时, 根据引理 1 和引理 2 得

$$\begin{aligned}\mu(G_n^1) &= \mu(G_n^1 - x_{n-1,2}x_{n,1}) + \mu(G_n^1 - \{x_{n-1,2}, x_{n,1}\}) \\ &= \mu(C_{10})\mu(G_{n-1}) + \mu(P_9)\mu(A_{n-2}^1) = 123\mu(G_{n-1}) + 55\mu(A_{n-2}^1).\end{aligned}$$

在图 3 中, 根据引理 1 和引理 2 可得到 $\mu(A_{n-2}^i), i \in I$ 的值

$$\begin{aligned}\mu(A_{n-2}^i) &= \mu(A_{n-2}^i - x_{n-2,i+1}x_{n-1,1}) + \mu(A_{n-2}^i - \{x_{n-2,i+1}, x_{n-1,1}\}) \\ &= \mu(P_9)\mu(G_{n-2}) + \mu(P_8)\mu(\varphi(i)_{n-3}) = 55\mu(G_{n-2}) + 34\mu(\varphi(i)_{n-3}).\end{aligned}$$

(2) 当 $G_n^i = G_n^2$ 时, 根据引理 1 和引理 2 得

$$\begin{aligned}\mu(G_n^2) &= \mu(G_n^2 - x_{n-1,3}x_{n,1}) + \mu(G_n^2 - \{x_{n-1,3}, x_{n,1}\}) \\ &= \mu(C_{10})\mu(G_{n-1}) + \mu(P_9)\mu(B_{n-2}^i) = 123\mu(G_{n-1}) + 55\mu(B_{n-2}^i).\end{aligned}$$

在图 3 中, 根据引理 1 和引理 2 可得到 $\mu(B_{n-2}^i), i \in I$ 的值

$$\begin{aligned}\mu(B_{n-2}^i) &= \mu(B_{n-2}^i - x_{n-2,i+1}x_{n-1,1}) + \mu(B_{n-2}^i - \{x_{n-2,i+1}, x_{n-1,1}\}) \\ &= \mu(P_9)\mu(G_{n-2}) + \mu(P_1)\mu(P_7)\mu(\varphi(i)_{n-3}) = 55\mu(G_{n-2}) + 21\mu(\varphi(i)_{n-3}).\end{aligned}$$

(3) 当 $G_n^i = G_n^3$ 时, 根据引理 1 和引理 2 得

$$\begin{aligned}\mu(G_n^3) &= \mu(G_n^3 - x_{n-1,4}x_{n,1}) + \mu(G_n^3 - \{x_{n-1,4}, x_{n,1}\}) \\ &= \mu(C_{10})\mu(G_{n-1}) + \mu(P_9)\mu(C_{n-2}^i) = 123\mu(G_{n-1}) + 55\mu(C_{n-2}^i).\end{aligned}$$

在图 3 中, 根据引理 1 和引理 2 可得到 $\mu(C_{n-2}^i), i \in I$ 的值

$$\begin{aligned}\mu(C_{n-2}^i) &= \mu(C_{n-2}^i - x_{n-2,i+1}x_{n-1,1}) + \mu(C_{n-2}^i - \{x_{n-2,i+1}, x_{n-1,1}\}) \\ &= \mu(P_9)\mu(G_{n-2}) + \mu(P_2)\mu(P_6)\mu(\varphi(i)_{n-3}) = 55\mu(G_{n-2}) + 26\mu(\varphi(i)_{n-3}).\end{aligned}$$

(4) 当 $G_n^i = G_n^4$ 时, 根据引理 1 和引理 2 得

$$\begin{aligned}\mu(G_n^4) &= \mu(G_n^4 - x_{n-1,5}x_{n,1}) + \mu(G_n^4 - \{x_{n-1,5}, x_{n,1}\}) \\ &= \mu(C_{10})\mu(G_{n-1}) + \mu(P_9)\mu(D_{n-2}^i) = 123\mu(G_{n-1}) + 55\mu(D_{n-2}^i).\end{aligned}$$

在图 3 中, 根据引理 1 和引理 2 可得到 $\mu(D_{n-2}^i), i \in I$ 的值

$$\begin{aligned}\mu(D_{n-2}^i) &= \mu(D_{n-2}^i - x_{n-2,i+1}x_{n-1,1}) + \mu(D_{n-2}^i - \{x_{n-2,i+1}, x_{n-1,1}\}) \\ &= \mu(P_9)\mu(G_{n-2}) + \mu(P_3)\mu(P_5)\mu(\varphi(i)_{n-3}) = 55\mu(G_{n-2}) + 24\mu(\varphi(i)_{n-3}).\end{aligned}$$

(5) 当 $G_n^i = G_n^5$ 时, 根据引理 1 和引理 2 得

$$\begin{aligned}\mu(G_n^5) &= \mu(G_n^5 - x_{n-1,6}x_{n,1}) + \mu(G_n^5 - \{x_{n-1,6}, x_{n,1}\}) \\ &= \mu(C_{10})\mu(G_{n-1}) + \mu(P_9)\mu(E_{n-2}^i) = 123\mu(G_{n-1}) + 55\mu(E_{n-2}^i).\end{aligned}$$

在图 3 中, 根据引理 1 和引理 2 可得到 $\mu(E_{n-2}^i), i \in I$ 的值

$$\begin{aligned}\mu(E_{n-2}^i) &= \mu(E_{n-2}^i - x_{n-2,i+1}x_{n-1,1}) + \mu(E_{n-2}^i - \{x_{n-2,i+1}, x_{n-1,1}\}) \\ &= \mu(P_9)\mu(G_{n-2}) + \mu(P_4)\mu(P_4)\mu(\varphi(i)_{n-3}) = 55\mu(G_{n-2}) + 25\mu(\varphi(i)_{n-3}).\end{aligned}$$

基于上述五种情形的分析, 将各类情形的 Hosoya 指数按其发生的概率 p_i ($i \in I$ 且 $\sum_{i=1}^5 p_i = 1$) 进行加权平均, 得到随机正十边形链 Hosoya 指数的期望值:

$$E(\mu(G_n)) = \sum_{i=1}^5 p_i E(\mu(G_n^i)).$$

其中, 各类情形的期望 $E(\mu(G_n^i))$ ($i \in I$) 如下:

$$\begin{aligned}E(\mu(G_n^1)) &= 123E(\mu(G_{n-1})) + 55E(\mu(A_{n-2})) \\ &= 123E(\mu(G_{n-1})) + 3025E(\mu(G_{n-2})) + 1870[p_1E(\mu(A_{n-3})) \\ &\quad + p_2E(\mu(B_{n-3})) + p_3E(\mu(C_{n-3})) + p_4E(\mu(D_{n-3})) + p_5E(\mu(E_{n-3}))].\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}E(\mu(G_n^2)) &= 123E(\mu(G_{n-1})) + 55E(\mu(B_{n-2})) \\ &= 123E(\mu(G_{n-1})) + 3025E(\mu(G_{n-2})) + 1155[p_1E(\mu(A_{n-3})) \\ &\quad + p_2E(\mu(B_{n-3})) + p_3E(\mu(C_{n-3})) + p_4E(\mu(D_{n-3})) + p_5E(\mu(E_{n-3}))].\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E(\mu(G_n^3)) &= 123E(\mu(G_{n-1})) + 55E(\mu(C_{n-2})) \\
&= 123E(\mu(G_{n-1})) + 3025E(\mu(G_{n-2})) + 1430[p_1E(\mu(A_{n-3})) \\
&\quad + p_2E(\mu(B_{n-3})) + p_3E(\mu(C_{n-3})) + p_4E(\mu(D_{n-3})) + p_5E(\mu(E_{n-3}))]. \\
E(\mu(G_n^4)) &= 123E(\mu(G_{n-1})) + 55E(\mu(D_{n-2})) \\
&= 123E(\mu(G_{n-1})) + 3025E(\mu(G_{n-2})) + 1320[p_1E(\mu(A_{n-3})) \\
&\quad + p_2E(\mu(B_{n-3})) + p_3E(\mu(C_{n-3})) + p_4E(\mu(D_{n-3})) + p_5E(\mu(E_{n-3}))]. \\
E(\mu(G_n^5)) &= 123E(\mu(G_{n-1})) + 55E(\mu(E_{n-2})) \\
&= 123E(\mu(G_{n-1})) + 3025E(\mu(G_{n-2})) + 1375[p_1E(\mu(A_{n-3})) \\
&\quad + p_2E(\mu(B_{n-3})) + p_3E(\mu(C_{n-3})) + p_4E(\mu(D_{n-3})) + p_5E(\mu(E_{n-3}))].
\end{aligned}$$

将上述五类情形的期望表达式 $E(\mu(G_n^i))$ 代入公式 $E(\mu(G_n)) = \sum_{i=1}^5 p_i E(\mu(G_n^i))$ 中, 并合并同类项, 可得:

$$\begin{aligned}
E(\mu(G_n)) &= 123E(\mu(G_{n-1})) + 55p_1E(\mu(A_{n-2})) + 55p_2E(\mu(B_{n-2})) \\
&\quad + 55p_3E(\mu(C_{n-2})) + 55p_4E(\mu(D_{n-2})) + 55p_5E(\mu(E_{n-2})) \\
&= 123E(\mu(G_{n-1})) + 3025E(\mu(G_{n-2})) \\
&\quad + (1870p_1^2 + 1155p_1p_2 + 1430p_1p_3 + 1320p_1p_4 + 1375p_1p_5)E(\mu(A_{n-3})) \\
&\quad + (1870p_1p_2 + 1155p_2^2 + 1430p_2p_3 + 1320p_2p_4 + 1375p_2p_5)E(\mu(B_{n-3})) \\
&\quad + (1870p_1p_3 + 1155p_2p_3 + 1430p_3^2 + 1320p_3p_4 + 1375p_3p_5)E(\mu(C_{n-3})) \\
&\quad + (1870p_1p_4 + 1155p_2p_4 + 1430p_3p_4 + 1320p_4^2 + 1375p_4p_5)E(\mu(D_{n-3})) \\
&\quad + (1870p_1p_5 + 1155p_2p_5 + 1430p_3p_5 + 1320p_4p_5 + 1375p_5^2)E(\mu(E_{n-3})).
\end{aligned}$$

类似地, 对末端子图 $A_{n-3}, B_{n-3}, C_{n-3}, D_{n-3}, E_{n-3}$ 进行递推, 并结合其末端连接的随机性, 得到以下期望表达式:

$$\begin{aligned}
E(\mu(A_{n-3})) &= \sum_{i=1}^5 p_i E(\mu(A_{n-3}^i)) \\
&= 55E(\mu(G_{n-3})) + 34[p_1E(\mu(A_{n-4})) + p_2E(\mu(B_{n-4})) \\
&\quad + p_3E(\mu(C_{n-4})) + p_4E(\mu(D_{n-4})) + p_5E(\mu(E_{n-4}))]. \\
E(\mu(B_{n-3})) &= \sum_{i=1}^5 p_i E(\mu(B_{n-3}^i)) \\
&= 55E(\mu(G_{n-3})) + 21[p_1E(\mu(A_{n-4})) + p_2E(\mu(B_{n-4})) \\
&\quad + p_3E(\mu(C_{n-4})) + p_4E(\mu(D_{n-4})) + p_5E(\mu(E_{n-4}))]. \\
E(\mu(C_{n-3})) &= \sum_{i=1}^5 p_i E(\mu(C_{n-3}^i)) \\
&= 55E(\mu(G_{n-3})) + 26[p_1E(\mu(A_{n-4})) + p_2E(\mu(B_{n-4})) \\
&\quad + p_3E(\mu(C_{n-4})) + p_4E(\mu(D_{n-4})) + p_5E(\mu(E_{n-4}))].
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E(\mu(D_{n-3})) &= \sum_{i=1}^5 p_i E(\mu(D_{n-3}^i)) \\
&= 55E(\mu(G_{n-3})) + 24[p_1E(\mu(A_{n-4})) + p_2E(\mu(B_{n-4})) \\
&\quad + p_3E(\mu(C_{n-4})) + p_4E(\mu(D_{n-4})) + p_5E(\mu(E_{n-4}))]. \\
E(\mu(E_{n-3})) &= \sum_{i=1}^5 p_i E(\mu(E_{n-3}^i)) \\
&= 55E(\mu(G_{n-3})) + 25[p_1E(\mu(A_{n-4})) + p_2E(\mu(B_{n-4})) \\
&\quad + p_3E(\mu(C_{n-4})) + p_4E(\mu(D_{n-4})) + p_5E(\mu(E_{n-4}))].
\end{aligned}$$

根据上式, 可分别得到:

$$\begin{aligned}
&(1870p_1^2 + 1155p_1p_2 + 1430p_1p_3 + 1320p_1p_4 + 1375p_1p_5)E(\mu(A_{n-3})) \\
&= 55(1870p_1^2 + 1155p_1p_2 + 1430p_1p_3 + 1320p_1p_4 + 1375p_1p_5)E(\mu(G_{n-3})) \\
&\quad + 34p_1[E(\mu(G_{n-1})) - 123E(\mu(G_{n-2})) - 3025E(\mu(G_{n-3}))]. \\
&(1870p_1p_2 + 1155p_2^2 + 1430p_2p_3 + 1320p_2p_4 + 1375p_2p_5)E(\mu(B_{n-3})) \\
&= 55(1870p_1p_2 + 1155p_2^2 + 1430p_2p_3 + 1320p_2p_4 + 1375p_2p_5)E(\mu(G_{n-3})) \\
&\quad + 21p_2[E(\mu(G_{n-1})) - 123E(\mu(G_{n-2})) - 3025E(\mu(G_{n-3}))]. \\
&(1870p_1p_3 + 1155p_2p_3 + 1430p_3^2 + 1320p_3p_4 + 1375p_3p_5)E(\mu(C_{n-3})) \\
&= 55(1870p_1p_3 + 1155p_2p_3 + 1430p_3^2 + 1320p_3p_4 + 1375p_3p_5)E(\mu(G_{n-3})) \\
&\quad + 26p_3[E(\mu(G_{n-1})) - 123E(\mu(G_{n-2})) - 3025E(\mu(G_{n-3}))]. \\
&(1870p_1p_4 + 1155p_2p_4 + 1430p_3p_4 + 1320p_4^2 + 1375p_4p_5)E(\mu(D_{n-3})) \\
&= 55(1870p_1p_4 + 1155p_2p_4 + 1430p_3p_4 + 1320p_4^2 + 1375p_4p_5)E(\mu(G_{n-3})) \\
&\quad + 24p_4[E(\mu(G_{n-1})) - 123E(\mu(G_{n-2})) - 3025E(\mu(G_{n-3}))]. \\
&(1870p_1p_5 + 1155p_2p_5 + 1430p_3p_5 + 1320p_4p_5 + 1375p_5^2)E(\mu(E_{n-3})) \\
&= 55(1870p_1p_5 + 1155p_2p_5 + 1430p_3p_5 + 1320p_4p_5 + 1375p_5^2)E(\mu(G_{n-3})) \\
&\quad + 25p_5[E(\mu(G_{n-1})) - 123E(\mu(G_{n-2})) - 3025E(\mu(G_{n-3}))].
\end{aligned}$$

综上所述, 根据 $\sum_{i=1}^5 p_i = 1$ 即得关于 G_n 的 Hosoya 指数期望值的递推公式:

$$\begin{aligned}
E(\mu(G_n)) &= 123E(\mu(G_{n-1})) + 3025E(\mu(G_{n-2})) \\
&\quad + (34p_1 + 21p_2 + 26p_3 + 24p_4 + 25p_5)E(\mu(G_{n-1})) \\
&\quad - 123(34p_1 + 21p_2 + 26p_3 + 24p_4 + 25p_5)E(\mu(G_{n-2})) \\
&= (9p_1 - 4p_2 + p_3 - p_4 + 148)E(\mu(G_{n-1})) \\
&\quad + (-1053p_1 + 492p_2 - 123p_3 + 123p_4 - 50)E(\mu(G_{n-2})).
\end{aligned}$$

另外, 期望值存在两个极限:

$$E(\mu(G_1))=123, E(\mu(G_2))=18154$$

利用上述递推关系和边界条件, 我们可以得到:

定理 在随机正十边形链 G_n 中 Hosoya 指数的期望值

$$E(\mu(G_n)) = \frac{123\sqrt{A^2+4B}-123A+36308}{(A+\sqrt{A^2+4B})\sqrt{A^2+4B}} \times \left(\frac{A+\sqrt{A^2+4B}}{2}\right)^n + \frac{-123\sqrt{A^2+4B}-123A+36308}{(\sqrt{A^2+4B}-A)\sqrt{A^2+4B}} \times \left(\frac{A-\sqrt{A^2+4B}}{2}\right)^n.$$

其中 $A=9p_1-4p_2+p_3-p_4+148$, $B=-1053p_1+492p_2-123p_3+123p_4-50$ 。

分别令 $p_1=1, p_2=1, p_3=1, p_4=1, p_5=1$ 我们可以从定理 1 中得到元链 M_n , 正交链 O_n^1, O_n^2, O_n^3 和对链 P_n 的 Hosoya 指数的推论:

推论 在随机正十边形链中元链 M_n , 正交链 O_n^1, O_n^2, O_n^3 和对链 P_n 的 Hosoya 指数

$$\begin{aligned} \mu(M_n) &= \left(\frac{89689\sqrt{413}}{6377546} + \frac{1157}{2206}\right) \left(\frac{7\sqrt{413}+157}{2}\right)^n - \left(\frac{89689\sqrt{413}}{6377546} - \frac{1157}{2206}\right) \left(\frac{157-7\sqrt{413}}{2}\right)^n \\ \mu(O_n^1) &= \left(\frac{51\sqrt{5626}+5626}{11252}\right) (\sqrt{5626}+72)^n - \left(\frac{51\sqrt{5626}-5626}{11252}\right) (72-\sqrt{5626})^n \\ \mu(O_n^2) &= \left(\frac{97\sqrt{21509}+21509}{43018}\right) \left(\frac{\sqrt{21509}+149}{2}\right)^n - \left(\frac{97\sqrt{21509}-21509}{43018}\right) \left(\frac{149-\sqrt{21509}}{2}\right)^n \\ \mu(O_n^3) &= \left(\frac{9\sqrt{181}+181}{362}\right) \left(\frac{11\sqrt{181}+147}{2}\right)^n - \left(\frac{9\sqrt{181}-181}{362}\right) \left(\frac{147-11\sqrt{181}}{2}\right)^n \\ \mu(P_n) &= \left(\frac{49\sqrt{5426}+5426}{10852}\right) (\sqrt{5426}+74)^n - \left(\frac{49\sqrt{5426}-5426}{10852}\right) (74-\sqrt{5426})^n. \end{aligned}$$

4. 结语

本文研究了随机正十边形链的 Hosoya 指数的期望, 有助于深入理解分子结构的拓扑性质与物理化学性质之间的内在关联。该研究可为新型化合物开发与药物分子设计提供理论支撑, 借助拓扑指数的优化筛选高活性结构, 从而推动材料科学与药物化学的创新发展。

本文的研究尚有若干重要问题亟待深入。首先, 需进一步研究 Hosoya 指数的方差与渐近分布——本文仅讨论了期望值, 而方差反映的是不同随机实现之间的涨落幅度, 对于评估拓扑指数的统计显著性至关重要, 基于鞅方法可证明该指数在适当标准化后收敛于正态分布。其次, 应将模型推广至含支链结构的随机十边形网络, 引入三分支、四分支节点后, 拓扑指数期望的递推关系将由线性递推扩展为非线性系统, 呈现出更复杂的动力学行为。最后, 建议开展数值模拟与实验数据对比, 将理论得到的 Hosoya 指数期望值与实际十元环聚合物的物理化学性质(如热稳定性、玻璃化转变温度)进行关联分析, 验证其在 QSAR/QSPR 模型中的预测能力, 从而真正实现从理论到应用的跨越。

参考文献

- [1] Basak, S.C. (2016) Mathematical Chemodescriptors and Biodescriptors: Background and Their Applications in the

- Prediction of Bioactivity/Toxicity of Chemicals. In: Singh, S., Ed., *Systems Biology Application in Synthetic Biology*, Springer India, 117-147. https://doi.org/10.1007/978-81-322-2809-7_10
- [2] Muratov, E.N., Bajorath, J., Sheridan, R.P., Tetko, I.V., Filimonov, D., Poroikov, V., *et al.* (2020) QSAR without Borders. *Chemical Society Reviews*, **49**, 3525-3564. <https://doi.org/10.1039/d0cs00098a>
- [3] Wiener, H. (1947) Structural Determination of Paraffin Boiling Points. *Journal of the American Chemical Society*, **69**, 17-20. <https://doi.org/10.1021/ja01193a005>
- [4] Knor, M., Škrekovski, R. and Tepeh, A. (2016) Mathematical Aspects of Wiener Index. *Ars Mathematica Contemporanea*, **11**, 327-352. <https://doi.org/10.26493/1855-3974.795.ebf>
- [5] 刘雅静. 几类图参数的极值问题研究[D]: [硕士学位论文]. 上海: 华东理工大学, 2021.
- [6] Micheletti, C., Marenduzzo, D. and Orlandini, E. (2011) Polymers with Spatial or Topological Constraints: Theoretical and Computational Results. *Physics Reports*, **504**, 1-73. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2011.03.003>
- [7] Sigarreta, S., Cruz-Suárez, H. and Torralbas Fitz, S. (2024) Degree-Based Topological Indices of a General Random Chain. *Communications in Combinatorics and Optimization*, 1-13. <https://doi.org/10.22049/cco.2024.30080.2301>
- [8] Sigarreta, S.C., Sigarreta, S.M. and Cruz-Suárez, H. (2022) On Degree-Based Topological Indices of Random Polyomino Chains. *Mathematical Biosciences and Engineering*, **19**, 8760-8773. <https://doi.org/10.3934/mbe.2022406>
- [9] Zhang, W., You, L., Liu, H. and Fang, X. (2025) The Expected Values and Variances for Degree-Based Topological Indices in Random Spiro Chains. *The Journal of Supercomputing*, **81**, Article No. 324. <https://doi.org/10.1007/s11227-024-06808-0>
- [10] Clayden, J., Greeves, N. and Warren, S. (2012) *Organic Chemistry*. 2nd Edition, Oxford University Press.
- [11] Bal, Y., Zhao, B. and Zhao, P. (2009) Extremal Merrifield-Simmons Index and Hosoya Index of Polyphenyl Chains. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **62**, 649-656.
- [12] Huang, G., Kuang, M. and Deng, H. (2015) The Expected Values of Hosoya Index and Merrifield-Simmons Index in a Random Polyphenylene Chain. *Journal of Combinatorial Optimization*, **32**, 550-562. <https://doi.org/10.1007/s10878-015-9882-x>
- [13] Liu, Y., Zhuang, W. and Liang, Z. (2015) Largest Hosoya Index and Smallest Merrifield-Simmons Index in Tricyclic Graphs. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **73**, 195-224.
- [14] Cruz, R. and Rada, J. (2022) Extremal Graphs for Exponential VDB Indices. *Kragujevac Journal of Mathematics*, **46**, 105-113. <https://doi.org/10.46793/kgjmat2201.105c>
- [15] Hafeez, S. and Farooq, R. (2020) On Generalized Inverse Sum Indeg Index and Energy of Graphs. *AIMS Mathematics*, **5**, 2388-2411. <https://doi.org/10.3934/math.2020158>
- [16] Dunlap, R.A. (1997) *The Golden Ratio and Fibonacci Numbers*. World Scientific. <https://doi.org/10.1142/3595>