一类树的 Hosoya 指数

肖正明

（湖南工业大学，湖南 株洲 412008）

摘 要：以 $z(G)$ 表示图 G 的 Hosoya 指数，$m(G, k)$ 表示 G 的 k－匹配数，则 $z(G)$ 表示所有 $m(G, k)$ 的总和。研究了直径不超过 4 的树的 Hosoya 指数，刻画了取得极值时的极图。

关键词：Hosoya 指数；匹配；直径

中图分类号：O157.6 **文献标识码**：A **文章编号**：1673-9833(2007)06-0023-03

On Hosoya Index of a Class of Tree

Xiao Zhengming

（Hunan University of Technology，Zhuzhou Hunan 412008，China）

Abstract：After experiment, $m(G, k)$ be the k-matching of graph G and $z(G)$ be the Hosoya index of the graph G. Then $z(G)$ is the total number of $m(G, k)$. We shall investigate the Hosoya index of trees with diameter not more than 4, and characterize its extreme graphs.

Key words：Hosoya index; matching; diameter

1 背景知识

$G=(V, E)$ 表示顶点集为 V，边集为 E 的简单连通图，$n=|V|$，$m=|E|$ 分别表示它的顶点数与边数，$N_G(x)$ 表示顶点 x 的领域，$d_G(x)$ 表示顶点 x 的度，简记为 dx 或 $d(x)$，且 $d(x)=|N_G(x)|$，度数为1的顶点称为叶，至少与一个叶子邻接的顶点称为茎，茎与它叶子所连的边称为悬挂边。Fibonacci数[1]：0,1,1,2,3,5,8,13,⋯，定义为 $N_{\text{fib}}(0)=0$，$N_{\text{fib}}(1)=1$，且 $n\geqslant 2$ 时，$N_{\text{fib}}(n)=N_{\text{fib}}(n-2)+N_{\text{fib}}(n-1)$。若 $E'\subseteq E(G)$，我们以 $G-E'$ 表示 G 删除 E' 后得到的子图。同样，若 $W\subseteq V(G)$，$G-W$ 表示 G 去掉 W 以及与它们相关联的边后得到的图。若 $W=\{v\}$ 和 $E'=\{xy\}$，记 $G-v$ 和 $G-xy$ 分别代替 $G-\{v\}$ 与 $G-\{xy\}$，G 由 t 个分支 $G_1, G_2, \cdots, G_t$ 组成，则 G 可以表示成 $\bigcup_{i=1}^{t}G_i$。P_n,C_n 和 $S_n(K_{1,n-1})$ 分别表示 n 个顶点的路、圈以及星图。文中相关的图的论述语，请参见参考文献[2]。

图 G 的顶点集的一个子集 S，$S\subseteq V$，若在 S 中的任意两个顶点都不相邻，则称 S 为 V 的一个独立集。G 的独立集之集记为 $I(G)$，空集也是一个独立集。$I_x(G)$ 表示包含顶点 x 的独立集之集，$I_{-x}(G)$ 表示不包含顶点 x 的独立集之集，G 的独立集的数目记为 $i(G)$，在理论化学上 $i(G)$ 称为图 G 的Merrifield-Simmons指数或 σ-指数[1,3]。

图 G 的匹配是指 G 中的边子集 M，在 M 中任意两条不同边都不相交。$z(G)$ 表示图 G 的 Hosoya 指数，Hosoya 指数是指图 G 的所有匹配的个数[3]，即

$$z(G)=\sum_{k=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]}m(G,k)\text{。}$$

上式中，$\left[\dfrac{n}{2}\right]$ 是指 $\dfrac{n}{2}$ 的整数部分，$m(G,k)$ 表示图 G 中 k 匹配数，很显然 $m(G, 0)=1$，$m(G, 1)=m$，由 Hosoya 指数的定义可知，当 $k>\left[\dfrac{n}{2}\right]$ 时，$m(G, k)=0$。

Hosoya 指数与分子的总 π－电子能[3]、沸点[4]等有密切的关系，已经有很多的关于图的 Hosoya 指数的

收稿日期：2007-06-11
作者简介：肖正明（1962-），男，湖南石门人，湖南工业大学教师，主要研究方向为图论及其应用.

研究，如文献[5]就刻画了具有极值Hosoya指数的无圈图。

文献[6]的作者研究了直径不超过4的树（即“星状树”）的Merrifield-Simmons指数的极值问题，本文研究了它的Hosoya指数的极值问题，并且刻画了它们取得极值时的极图。

2 结论

2.1 星状树的定义

在下面将要讨论的树中，它们的直径$D \leqslant 4$，具有这样的特征的树称为星状树，下面定义一类特殊的星状树，笔者通过它来研究本文的主要结论。

设$(c_1, c_2, \cdots, c_d)$为n的一个划分，在这种划分下的星状树的构造如下：

1）设$v_1, v_2, \cdots, v_d$分别为星图$S_1, S_2, \cdots, S_d$的中心，$S_1, S_2, \cdots, S_d$的边数分别是$c_1-1, c_2-1, \cdots, c_d-1$；

2）添加一个点v_0，将它与$S_1, S_2, \cdots, S_d$的中心$v_1, v_2, \cdots, v_d$连接起来。

这样，我们得到一个阶为$n+1$，直径不超过4的树T。在T中，$v_1, v_2, \cdots, v_d$的度分别是$c_1, c_2, \cdots, c_d$，T的边数是$d+(c_1-1)+(c_2-1)+\cdots+(c_d-1)=c_1+c_2+\cdots+c_d=n$，这样的星状树$T$记为$S(c_1, c_2, \cdots, c_d)$。

注意：对每个直径不超过4的$n+1$阶树T，均存在正整数d和$c_1, c_2, \cdots, c_d$，使得$T=S(c_1, c_2, \cdots, c_d)$，其中$c_1+c_2+\cdots+c_d=n$（$n$是$T$的边数）。

下面给出在直径$D \leqslant 4$的所有$n+1$阶树中，具有极值Hosoya指数的树的特征。

当$D=1$时，树T只有一条边；

当$D=2$时，$c_i-1=0(1 \leqslant i \leqslant d)$，即$c_i=1, n=d$。从而$T$为星图$K_{1,n}$；

当$D=3$时，其中只有一个$c_i-1>0$，即$c_i>1\ (1 \leqslant i \leqslant d)$，而其余的$c_j=1\ (1 \leqslant i \leqslant d, j \neq i)$，此时$T \simeq S(n-d+1, 1,1,\cdots,1)$；

当$D=4$时，则存在$i \neq j\,(1 \leqslant i, j \leqslant d)$，$c_i-1>0$，$c_j-1>0$，即$c_i>1, c_j>1\ (i \neq j)$。

2.2 相关引理介绍

引理1[4]

ⅰ）若图G是由k个分支$G_1, G_2, G_3, \cdots, G_k (k \geqslant 1)$组成的，则$z(G)=\prod_{i=1}^{k} z(G_i)$；

ⅱ）若$e=uv$是G的一条边，则

$$z(G)=z(G-\{e\})+z(G-\{u,v\});$$

ⅲ）若v是图G的一个顶点，则

$$z(G)=z(G-\{v\})+\sum_{x \in N_G(v)} z(G-\{v,x\})。$$

引理2[4]

$z(S_n)=n$，

$z(C_n)=N_{\mathrm{fib}}(n-1)+N_{\mathrm{fib}}(n+1)$，

$z(P_0)=0$，

$z(P_1)=1$，

当$n \geqslant 2$时，$z(P_n)=N_{\mathrm{fib}}(n+1)$。

2.3 主要结果

定理1 $z(S(c_1,c_2,\cdots,c_d))=\prod_{k=1}^{d} c_k\left(\sum_{k=1}^{d}\frac{1}{c_k}+1\right)$。

证明 设$G=S(c_1, c_2, \cdots, c_d)$，由引理1和引理2，可得：

$$z(S(c_1,c_2,\cdots,c_d))=z(G-\{v_0\})+\sum_{x \in N_G(v_0)} z(G-\{v_0,x\})=\prod_{k=1}^{d} z(S_{c_k})+\left(\sum_{k=1}^{d} z(G-\{v_0,v_k\})\right)=\prod_{k=1}^{d} c_k\left(\sum_{k=1}^{d}\frac{1}{c_k}+1\right)。$$

令$A(n,d)=\{S(c_1,c_2,\cdots,c_d) \mid c_1+c_2+\cdots+c_d=n\}$。

定理2 给定n和d，在$A(n,d)=\{S(c_1,c_2,\cdots,c_d) \mid c_1+c_2+\cdots+c_d=n\}$中，$S(n-d+1,1,1,\cdots,1)$、$S(n-d, 2,1,1,\cdots,1)$, $2 \leqslant d \leqslant n-2$、$S(n-d-1,3,1,1,\cdots,1)$，$2 \leqslant d \leqslant n-4$或$S(2,2,2,1,\cdots,1)$, $d=n-3$、$S(k+1, k+1, \cdots, k+1, k, k, \cdots, k)$, $k=\left\lfloor\frac{n}{d}\right\rfloor$是分别具有最小、次小、第三小以及最大Hosoya指数的树。

证明 令$T=S(c_1, c_2, \cdots, c_d)$，且不妨设$c_1 \geqslant c_2 \geqslant \cdots \geqslant c_d$，若$T$中存在$(c_i, c_j)$顶点对满足$c_i \geqslant c_j+2$，以$c_i-1$与$c_j+1$分别代替$c_i$与$c_j$，而且$(c_i-1)(c_j+1)=c_i c_j+c_i-c_j-1>c_i c_j$，令

$$A=c_1c_2\cdots c_{i-1}c_{i+1}\cdots c_{j-1}c_{j+1}\cdots c_d,$$

$$B=1+\frac{1}{c_1}+\frac{1}{c_2}+\cdots+\frac{1}{c_{j-1}}+\frac{1}{c_{j+1}}+\cdots+\frac{1}{c_d},$$

由定理1有：

$$z(S(c_1,c_2,\cdots,c_d))=\prod_{k=1}^{d} c_k\left(\sum_{k=1}^{d}\frac{1}{c_k}+1\right)。$$

从而：

$$\begin{aligned}\Delta=&z(S(c_1,c_2,\cdots,c_i-1,\cdots,c_j+1,\cdots,c_d))-\\&z(S(c_1,c_2,\cdots,c_i,\cdots,c_j,\cdots,c_d))=\\&c_1c_2\cdots c_{i-1}c_{i+1}\cdots c_{j-1}c_{j+1}\cdots c_d\,(c_i-1)(c_j+1)\bullet\\&\left(1+\frac{1}{c_1}+\frac{1}{c_2}+\cdots+\frac{1}{c_{i-1}}+\frac{1}{c_{i+1}}+\cdots+\frac{1}{c_{j-1}}+\right.\\&\left.\frac{1}{c_{j+1}}+\cdots+\frac{1}{c_d}+\frac{1}{c_{i-1}}+\frac{1}{c_{j+1}}\right)-\\&c_1c_2\cdots c_{i-1}c_{i+1}\cdots c_{j-1}c_{j+1}\cdots c_d c_i c_j\bullet\end{aligned}$$

$$\left(1+\frac{1}{c_1}+\frac{1}{c_2}+\cdots+\frac{1}{c_{i-1}}+\frac{1}{c_{i+1}}+\cdots+\frac{1}{c_{j-1}}+\right.$$
$$\left.\frac{1}{c_{j+1}}+\cdots+\frac{1}{c_d}+\frac{1}{c_i}+\frac{1}{c_j}\right)=$$
$$A\left(c_i-1\right)\left(c_j+1\right)\left(B+\frac{1}{c_{i-1}}+\frac{1}{c_{i+1}}\right)-$$
$$Ac_ic_j\left(B+\frac{1}{c_i}+\frac{1}{c_j}\right)=AB(c_i-1)(c_j+1)+$$
$$A(c_i+c_j)-ABc_ic_j-A(c_i+c_j)=$$
$$AB\left(c_i-c_j-1\right)>0。$$

由此可知，若 T 不与图 $S(n-d+1,1,1,\cdots,1)$ 同构，则 $c_1\geqslant c_2\geqslant 2$，令 $T'=S(c_1+1,c_2-1,c_3,\cdots,c_d)$，就有 $z(T)>z(T')$ 矛盾，所以在 $A(n,d)$ 中 $S(n-d+1,1,1,1\cdots,1)$ 具有最小 Hosoya 指数。

类似地，若 $T'=S(c_1,c_2,c_3,\cdots,c_d)$ 是 $A(n,d)$ 中具有最大 Hosoya 指数的树，且 T 不同构于 $S(k+1,k+1,\cdots,k+1,k,k,\cdots,k)$ $(k=\left\lfloor\frac{n}{d}\right\rfloor)$，则 T 中必存在划分块 c_i 与 c_j，且满足 $c_i\geqslant c_j+2$，以 c_i-1 与 c_j+1 分别代替 c_i 与 c_j，这样得到的树 T' 的 Hosoya 指数就比 T 的大，矛盾。

这样我们就证明了最小与最大的情形。

若 $d\geqslant n-1$ 或 $d=1$，则 $A(n,d)$ 中只有一棵树，在这种情况下不必考虑次大、次小的 Hosoya 指数。现在假设有不同于 $(n-d+1,1,1,\cdots,1)$ 与 $(n-d,2,1,1,\cdots,1)$ 的划分 $(c_1,c_2,\cdots,c_d)$，其中，$c_1\geqslant c_2\geqslant\cdots\geqslant c_d$。那么 $c_3\geqslant 2$ 或 $c_2\geqslant 3$，由前面的证明知，以 c_1-1 与 c_i+1 分别代表 c_1 与 c_i，$i=3$ 或 2，这样得到的树 T' 的 Hosoya 指数就比 T 的大，且不小于 $S(n-d,2,1,1,\cdots,1)$，$1\leqslant d\leqslant n-2$ 的 Hosoya 指数。

$$\Delta=z(S(n-d,2,1,1,\cdots,1))-z(S(n-d+1,1,1,\cdots,1))=$$
$$n-d+2+2(n-d)(d-1)-d(n-d+1)-1=$$
$$(n-1)(n-d-1)>0。$$

即 $z(S(n-d,2,1,\cdots,1))>z(S(n-d+1,1,1,\cdots,1))$。因此，$S(n-d,2,1,\cdots,1)$，$1\leqslant d\leqslant n-2$ 是 $A(n,d)$ 中具有次小 Hosoya 指数的树。

若 $d=n-3$，则 $A(n,d)$ 中只有 3 棵树，其中 $S(2,2,2,1,1,\cdots,1)$ 是具有第三小的 Hosoya 指数的树。

若 $2\leqslant d\leqslant n-4$，存在划分不同构于 $(n-d+1,1,1,\cdots,1)$，$(n-d,2,1,1,\cdots,1)$，$(n-d-1,3,1,1,\cdots,1)$ 的划分 $(c_1,c_2,\cdots,c_d)$，其中 $c_1\geqslant c_2\geqslant\cdots\geqslant c_d$，则这个划分中或者 $c_2\geqslant 4$，或者 $c_2=3$，$c_3\geqslant 2$，或者 $c_2=2$，$c_3\geqslant 2$，同上，可得到的一棵树 T'，它的 Hosoya 指数就比 T 的大且不小于，$S(n-d+1,1,1,\cdots,1)$，$S(n-d,2,1,\cdots,1)$，$S(n-d-1,3,1,1,\cdots,1)$ 的 Hosoya 指数。由此易知，$A(n,d)$ 中具有第三小 Hosoya 指数的树是 $S(n-d-1,3,1,1,\cdots,1)$。

参考文献：

[1] Merrifield R E， Simmons H E. Topological Methods in Chemistry[M]. New York：John Wiely & Sons., 1989.

[2] Bondy J A，Murty U S R. Graph theory with applications [M]. New York：The Macmillan Press, 1976.

[3] Hosoya H. Topological index, a newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons[J]. Bull. Chem. Soc. Japan.，1971，44：2322−2339.

[4] Gutman I， Polansky O E. Mathematical Concepts in Organic Chemistry[M]. Berlin：Springer, 1986.

[5] Hou Y. On acyclic systems with minimal Hosoya index[J]. Discrete Applied Mathematics, 2002，119：251−257.

[6] Knopfmacher A，Tichy R F，Wagner S. Volker Ziegler, Graphs, partitions and Fibonacci numbers[J]. Discrete Applied Mathematics，2007，155：1175−1187.