

单圈图的 Merrifield-Simmons 指数的极值图

肖正明

(湖南工业大学, 湖南 株洲 412008)

摘要: 用 $i(G)$ 表示图 G 的 Merrifield-Simmons 指数, 定义为 G 的独立集数目。利用图的关于 Merrifield-Simmons 指数的变换技巧, 研究了单圈图的 Merrifield-Simmons 指数, 得到 Merrifield-Simmons 指数前八大的单圈图, 刻画了极值图。

关键词: Merrifield-Simmons 指数; 独立集; 单圈图

中图分类号: O157.6

文献标志码: A

文章编号: 1673-9833(2009)04-0030-03

Extremal Graphs with Respect to Merrifield-Simmons Index of Unicyclic Graphs

Xiao Zhengming

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

Abstract: Uses $i(G)$ to denote Merrifield-Simmons index of graph G and defines it as the number of the independent sets of G . Investigates the Merrifield-Simmons index of unicyclic graphs by the technique of graphs transformation on Merrifield-Simmons index, obtains the first eight largest unicyclic graphs with respect to Merrifield-Simmons index, and depicts the extremal graphs.

Keywords: Merrifield-Simmons index; independent sets; unicyclic graph

1 基本概念和术语

$G = (V, E)$ 表示顶点集为 V 、边集为 E 的简单连通图, $n = |V|$, $m = |E|$ 分别表示其顶点数和边数。 $N_G(x)$ 表示顶点 x 的邻域, 度数为 1 的顶点称为叶, 与 1 个叶子邻接的顶点称为茎, 茎与叶子相连的边称为悬挂边, 图 G 的围长是指 G 中的最短圈的长度, 若 G 中没有圈, 则定义 G 的围长为无穷大。用 G_g 表示围长为 g 的圈, 单圈图是指顶点数与边数相等的连通图。 U_n 表示 n 个顶点的单圈图的集合, G_n^g 表示 n 个顶点、围长为 g 的单圈图的集合。

$G_{g,1}^{(n)}$ 表示在围长为 g 的单圈图的圈 C_g 的 1 点上连接 $n-g$ 片叶子的图。当 $g \geq 4$ 时, $G_{g,2}^{(n)}$ 表示在围长为 g 的单圈图的圈 C_g 上 1 点 v 上连接 $n-g-1$ 片叶子以及在 $w(w \in C_g, d(w, v) = 2)$ 上连接 1 条边的图; 特别地: 当 $g=3$

时, $G_{g,2}^{(n)}$ 表示在 C_3 的 2 个不同顶点 v 和 w 上分别连接 $n-4$ 和 1 条边的单圈图。 $S_{p,q,r}(p, q, r \geq 0$ 且 $p+q+r=n-3)$ 表示将 $K_{1,p}$, $K_{1,q}$, $K_{1,r}$ 的中心分别粘在 C_3 的 3 个顶点所得的单圈图, 如图 1 所示。

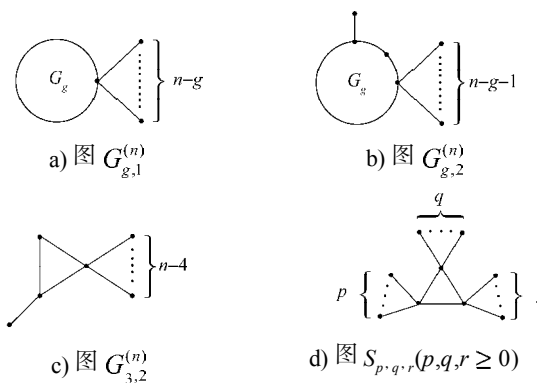


图 1 4 类单圈图

Fig. 1 Four unicyclic graphs

收稿日期: 2009-03-31

作者简介: 肖正明 (1962-), 男, 湖南石门人, 湖南工业大学教师, 硕士研究生, 主要研究方向为图论及其应用,

E-mail: hngdggw@126.com

P_n 、 S_n 分别表示 n 个顶点的路和星图。

S 是图 G 的 1 个顶点集, 若在 S 中任意 2 个顶点均不相邻, 则称 S 是 G 的 1 个独立集, 空集是 1 个独立集。拓扑指数是从化合物的结构图衍生出来的不变量, G 的独立集数目记为 $i(G)$, 在理论化学上, $i(G)$ 称为图 G 的 Merrifield-Simmons 指数或 σ -指数^[1], 在所有图的拓扑指数的研究中, Merrifield-Simmons 指数具有重要代表意义。

Fibonacci 序列^[1]定义为:

$$F(0)=0, F(1)=1, F(n)=F(n-2)+F(n-1)(n \geq 2)。$$

本文所要研究的是单圈图的 Merrifield-Simmons 指数, 并给出 Merrifield-Simmons 指数前 8 大单圈图。文中图论术语请见参考文献[2]。

2 Merrifield-Simmons 指数前 8 大单圈图

2.1 基本引理

引理 1^[3] i) 若图 G 是由 K 个分支 $G_1, G_2, G_3, \dots, G_k$ ($k \geq 1$) 组成的, 则 $i(G) = \prod_{i=1}^k i(G_i)$;

$$\text{ii) } i(G) = i(G - \{x\}) + i(G - N_G[x])。$$

引理 2^[4] $i(S_n) = 2^{n-1} + 1$, $i(P_n) = F(n+2)$, 当 $n \geq 3$ 时, $i(C_n) = F(n-1) + F(n+1)。$

引理 3^[5] 设 uv 是 G 的 1 条边, $N_G(u) = \{v, w_1, w_2, \dots, w_s\}$, 其中 w_1, w_2, \dots, w_s 为 G 的叶子, 对 G 施行变换得 G' , $G' = G - \{uw_1, uw_2, \dots, uw_s\} + \{vw_1, vw_2, \dots, vw_s\}$, 则 $i(G') > i(G)。$

引理 4^[6] 设 u, v 是图 G 的 2 个顶点, u_1, u_2, \dots, u_s 是连接在顶点 u 上的叶子, v_1, v_2, \dots, v_t 是连接在 v 上的叶子, 对 G 实行变换得到 $G' = G - \{uu_1, uu_2, \dots, uu_s\} + \{vu_1, vu_2, \dots, vu_s\}$, $i(G') > i(G)。$

2.2 U_n 中图的 Merrifield-Simmons 指数

定理 1^[7] 设 $G \in U_n^k$, 则 $i(G) \leq i(G_{k,1}^{(n)})$, 等号成立当且仅当 $G \cong G_{k,1}^{(n)}。$

定理 2 设 $k \geq 3$, 则 $i(G_{k,1}^{(n)}) > i(G_{k+1,1}^{(n)})$,

$$i(G_{k,2}^{(n)}) > i(G_{k+1,2}^{(n)})。$$

证明 因 $i(G_{k,1}^{(n)}) = F(k-1) + 2^{n-k} F(k+1)$, 则有

$$\begin{aligned} i(G_{k,1}^{(n)}) - i(G_{k+1,1}^{(n)}) &= \\ F(k-1) + 2^{n-k} F(k+1) - F(k) - 2^{n-k-1} F(k+2) &= \\ 2^{n-k-1} F(k-1) - F(k-2) > 0, \end{aligned}$$

从而有 $i(G_{k,1}^{(n)}) > i(G_{k+1,1}^{(n)})。$

类似可证 $i(G_{k,2}^{(n)}) > i(G_{k+1,2}^{(n)})。$

此外, 若 $G \in U_n^k \setminus G_{k,1}^{(n)}$, 则 $i(G) < i(G_{k,2}^{(n)})。$

2.3 按圈长讨论单圈图的 Merrifield-Simmons 指数

2.3.1 当圈长为 3 时

设 $S_{m,n}$ 是将星图 $K_{1,m}$ 与 $K_{1,n}$ 的“中心”(即非悬挂点)用 1 条边连接得到的图, $i(S_{m,n}) = 2^{m+n} + 2^m + 2^n。$

定理 3 当 $l \geq m \geq n \geq 0$ 时,

$$i(S_{l+1,m-1,n}) > i(S_{l,m,n}), i(S_{l,m+1,n-1}) > i(S_{l,m,n})。$$

证明 因为

$$\begin{aligned} i(S_{l,m,n}) &= i(S_{l-1,m,n}) + 2^{l-1} i(S_{m,n}) = \\ i(S_{l-2,m,n}) + 2^{l-2} i(S_{m,n}) + 2^{l-1} i(S_{m,n}) &= \dots = \\ i(S_{0,m,n}) + (2^l - 1) i(S_{m,n}) &= 2^{m+n+l} + 2^{m+n} + 2^{l+n} + 2^{l+m}, \end{aligned}$$

所以有:

$$\Delta_1 = i(S_{l+1,m-1,n}) - i(S_{l,m,n}) = 2^n (2^l - 2^{m-1}) > 0$$

$$\Delta_2 = i(S_{l,m+1,n-1}) - i(S_{l,m,n}) = 2^l (2^m - 2^{n-1}) > 0。$$

从而定理结论成立。

$G_{3,3}^{(n)}$ 是将 $K_{1,n-5}$ 与 $K_{1,2}$ 分别粘接在 C_3 上的 2 个相邻顶点得到的图, $G_{3,4}^{(n)}$ 是将 $K_{1,n-6}$ 与 $K_{1,3}$ 分别粘接在 C_3 上的 2 个顶点得到的图, $G_{3,5}^{(n)}$ 是将 $K_{1,n-5}$ 粘接在 C_3 上的 1 个顶点上, 同时将 K_2 分别粘接到另 2 个顶点上得到的图, $G_{3,6}^{(n)}$ 是将 $K_{1,n-6}$, $K_{1,2}$ 与 K_2 分别粘接在 C_3 上的 3 个顶点得到的图。 $G_{3,3}^{(n)}$ 、 $G_{3,4}^{(n)}$ 、 $G_{3,5}^{(n)}$ 、 $G_{3,6}^{(n)}$ 分别如图 2 所示。

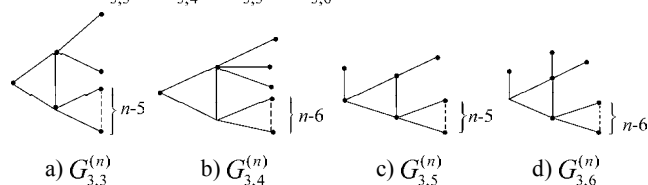


图 2 4 类特殊单圈图

Fig. 2 Four special unicyclic graphs

经计算有:

$$i(G_{3,3}^{(n)}) = 9 \times 2^{n-5} + 4, i(G_{3,4}^{(n)}) = 17 \times 2^{n-6} + 8,$$

$$i(G_{3,5}^{(n)}) = 8 \times 2^{n-5} + 4, i(G_{3,6}^{(n)}) = 14 \times 2^{n-6} + 8。$$

设 $S_{p,q,r}^n = \{S_{p,q,r}^n | p+q+r+3=n\}$ 表示所有形如 $S_{p,q,r}^n$ 的 n 阶单圈图的集合。由引理 3、引理 4、定理 3 及上述计算结果可知: 当 $n \geq 9$ 时, S_{Δ}^n 中图的 Merrifield-Simmons 指数排序为:

$$\begin{aligned} i(G_{3,1}^{(n)}) &> i(G_{3,2}^{(n)}) > i(G_{3,3}^{(n)}) > i(G_{3,3}^{(n)}) > i(G_{3,4}^{(n)}) > \\ i(G_{3,5}^{(n)}) &> i(G_{3,6}^{(n)}) > \dots。 \end{aligned}$$

用 $U_n'^3$ 表示至少有 1 个顶点与 C_3 上点的距离大于或等于 2 的单圈图的集合, 则 $U_n'^3 = U_n^3 - S_{\Delta}^n$, 由引理 3 及引理 4 可知, 在 $U_n'^3$ 中 Merrifield-Simmons 指数最大的图是将 $K_{l,i}$ ($l \geq 1$) 悬挂在 $S_{i,j,k}$ ($i, j \geq 0, k > 1$) 中与 C_3 距离为 1 的 1 个顶点上的图, 记为 $R_{i,j,k(l)}$, 其中 $i+j+k+l+3=n$,

如图3所示。

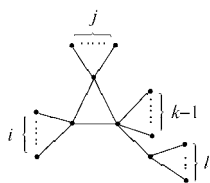


图3 单圈图 $R_{i,j,k(l)}$

Fig. 3 The unicyclic graph $R_{i,j,k(l)}$

定理4 设 $i \geq j \geq 1$, 有 $i(R_{i+1,j-1,k(l)}) > i(R_{i,j,k(l)})$, 特别地, $i(R_{i,j,k(l)}) < i(R_{i+j,0,k(l)})$ 。

证明 $i(R_{i,j,k(l)}) = 2^{k-1} i(S_{i,j}) + 2^l i(S_{i,j,k-1}) = 2^{k-1} (2^{i+j} + 2^i + 2^j) + 2^l (2^{i+j+k-1} + 2^{i+j} + 2^{i+k-1} + 2^{j+k-1})$, 所以, $i(R_{i+1,j-1,k(l)}) = 2^{n-4} + 2^{i+j+k-1} + 2^{i+k+l} + 2^{j+k+l-3} + 2^{i+j+l} + 2^{i+k} + 2^{j+k-2}$,

从而

$$\Delta = i(R_{i+1,j-1,k(l)}) - i(R_{i,j,k(l)}) = 2^{k-2} (2^l + 1) (2^{i+1} - 2^i) > 0。$$

类似地, $i \geq 1$ 时有 $i(R_{i,0,k(l)}) < i(R_{0,0,k+l(l)})$ 。

为方便记, 用 $G_{3,1}^{(n)}$ 表示 $R_{0,0,n-4(1)}$, 用 $R_{k(l)}$ 表示 $R_{0,0,k(l)}$ (这里 $k+l+3=n$)。这样, 在 U_n^{*3} 中 Merrifield-Simmons 指数最大的是 $G_{3,1}^{(n)}$, 其次就是 $R_{k(l)}$ 中的图。

定理5 设 $n \geq 6$, $l \geq 2$, $k+l+3=n$, 则

$$i(G_{3,5}^{(n)}) > i(R_{k(l)})。$$

证明 $i(R_{k(l)}) = 6 \times 2^{n-5} + 2^l + 3 \times 2^{n-4-l}$ 。

令 $f(l) = 2^l + \frac{k}{2^l}$, ($l \in [2, n-4]$), 由于 $f(l)$ 单调递增, $f(l)$ 在端点 $l=n-4$ 处取得最大值, 所以 $\{i(R_{k(l)})\}_{\max} = i(R_{1(n-4)}) = 8 \times 2^{n-5} + 3$, 从而有 $i(R_{k(l)}) < i(G_{3,5}^{(n)})$ 。

综合上面的讨论得定理6。

定理6 当 $n \geq 9$ 时, 在 U_n^3 中图的 Merrifield-Simmons 指数的1个排序为:

$$i(G_{3,1}^{(n)}) > i(G_{3,2}^{(n)}) > i(G_{3,3}^{(n)}) > i(G_{3,4}^{(n)}) > i(G_{3,5}^{(n)}) > \dots。$$

2.3.2 当围长为4时

用 S_4^n 表示围长为4而且悬挂点到圈上的距离等于1的单圈图集, $G_{4,3}^{(n)}$ 表示在 C_4 的2个相邻顶点分别连接 K_2 与 $K_{1,n-5}$ 所得到的图, $G_{4,4}^{(n)}$ 表示在 C_4 的2个不相邻的顶点分别连接 $G_{1,2}$ 与 $K_{1,n-6}$ 所得到的图, $G_{4,5}^{(n)}$ 表示在 C_4 的2个不相邻的顶点分别连接 $K_{1,2}$ 、 $K_{1,n-6}$ 得到的图。经计算有:

$$i(G_{4,1}^{(n)}) = 10 \times 2^{n-5} + 2, i(G_{4,2}^{(n)}) = 9 \times 2^{n-5} + 3, \\ i(G_{4,3}^{(n)}) = 8 \times 2^{n-5} + 4, i(G_{4,4}^{(n)}) = 17 \times 2^{n-6} + 5,$$

$$i(G_{4,5}^{(n)}) = 14 \times 2^{n-6} + 8。$$

用 S_4^n 表示围长为4且至少有1个悬挂点到圈上点的距离大于或等于2的单圈图集, 类似于围长为3时的讨论。当 $G \in S_4^n$ 时, 有 $i(G) \leq 4 + 15 \times 2^{n-6}$, 等号成立当且仅当 $G \cong G_{4,1}^{(n)}$, 其中 $G_{4,1}^{(n)}$ 是 $G_{4,1}^{(n)}$ 的1个悬挂点上连接1条边得到的图。

根据以上计算结果和讨论可得定理7。

定理7 当 $n \geq 9$ 时, U_n^4 中图的 Merrifield-Simmons 指数的1个排序是:

$$i(G_{4,1}^{(n)}) > i(G_{4,2}^{(n)}) > i(G_{4,3}^{(n)}) > i(G_{4,4}^{(n)}) > i(G_{4,5}^{(n)}) > \dots。$$

2.3.3 当围长为5时

$G_{5,1}^{(n)}$ 是 U_n^5 中 Merrifield-Simmons 指数最大的图, 而 $i(G_{5,1}^{(n)}) = 8 \times 2^{n-5} + 3 < i(G_{4,3}^{(n)})$ 。

3 结论

综合2.2和2.3中的结果, 可得 Merrifield-Simmons 指数前八大的 n 阶单圈图。

定理8 设 $n \geq 9$, 则

$$i(G_{3,1}^{(n)}) > i(G_{3,2}^{(n)}) = i(G_{4,1}^{(n)}) > i(G_{3,3}^{(n)}) > i(G_{4,2}^{(n)}) > i(G_{3,4}^{(n)}) > i(G_{3,5}^{(n)}) > i(G_{4,3}^{(n)}) > \dots。$$

参考文献:

- [1] Merrifield R E, Simmons E H. Topological Methods in Chemistry[M]. New York: John Wiley & Sons, 1989.
- [2] Bondy J A, Murty U S R. Graphs Theory with Applications [M]. New York: The Macmillan Press, 1976.
- [3] Pedersen A S, Vestergaard P D. The Number of Independent Sets in Unicyclic Graphs[J]. Discrete Applied Math, 2005 (152): 246-256.
- [4] Li X, Zhao H, Gutman I. On the Merrifield-Simmons Index of Trees[J]. MATCH Common Math Comput Chem., 2005 (54): 389-402.
- [5] Wanger S G. Extremal Trees with Respect to Hosoya Index and Merrifield-Simmons Index[J]. MATCH Common Math Comput Chem., 2007(57): 221-233.
- [6] Deng H, Chen S. The Merrifield-Simmons Index in $(n, n+1)$ -Graphs[J]. Journal of Mathematical Chemistry, 2008(43): 75-91.
- [7] Deng H, Chen S. The Extremal Unicyclic Graphs with Respect to Hosoya Index and Merrifield-Simmons Index[J]. MATCH Common Math Comput Chem., 2008(59): 171-190.

(责任编辑: 罗立宇)