

# 一类单圈图的度距离

李俊锋, 夏方礼

(湖南城市学院 数学与计算科学系, 湖南 益阳 413000)

**摘要:** 图  $G=(V, E)$  表示顶点集为  $V$ 、边集为  $E$  的所有的简单连通图的集合, 研究了棒棒糖图  $L(n, k)$  的度距离,  $L(n, k)$  是将一条长为  $n-k$  的路的一个端点连接到圈  $C_k$  的一个顶点  $v$  上得到的一类特殊的单圈图。

**关键词:** 距离; Wiener 指数; 度距离; 棒棒糖图。

中图分类号: O157.6

文献标志码: A

文章编号: 1673-9833(2010)02-0001-03

## The Degree Distance of A Class of Unicyclic Graph

Li Junfeng, Xia Fangli

(Department of Mathematics and Computing Science, Hunan City University, Yiyang Hunan 413000, China)

**Abstract:** Let  $G=(V, E)$  be a graph set with vertex set  $V$  and edge set  $E$ . The lollipop graph  $L(n, k)$  is a class of special unicyclic graphs which comes from joining a vertex of  $P_{n-k}$  to one vertex  $v$  of the cycle  $C_k$ . The degree distance of  $L(n, k)$  is investigated.

**Keywords:** distance; Wiener index; degree distance; Lollipop graph

### 0 引言

在化学图论中, 为刻画分子的结构性质引入了拓扑指数的概念。在化学理论中, 基于图的顶点间距离的拓扑指标, 对刻画分子图以及建立分子结构与特征之间的关系有着重要的作用, 同时被广泛应用于预测化合物的物理化学性质和生物活性。

图  $G=(V, E)$  表示顶点集为  $V$ 、边集为  $E$  的所有的简单连通图的集合。设  $G$  是一个  $n$  阶图,  $G$  中顶点  $v$  的度  $d(v)$  是指所连接的边的数目, 图中两个顶点之间的距离  $d_G(u, v)$  是指它们之间的最短路径所包含的边的数目。设  $D_G(u)$  表示  $G$  中顶点  $u$  到所有其它顶点的距离之和,  $D_G(G) = \sum_{x, y \in V(G)} d_G(x, y)$ 。

最早被提出来的一个拓扑指数是 Wiener 指数<sup>[1]</sup>, 它是由美国化学家 Wiener 在 1947 年考察烷烃的沸点与分子结构的关系时提出的。后来数学家 Hosoya 给出了

它的具体数学表达式:

$$W(G) = \sum_{\{x, y\} \in E(G)} d_G(x, y) \quad (1)$$

数学化学家 Dobrynin 和 Kochetova 及 Gutman 在文献[2]中引入了一个新的拓扑指数——图的度距离, 它是分子拓扑指数 (MTI) 的重要组成部分, 在早期的研究中被称为 MTI'。分子拓扑指数 MTI 也称为 Schultz 指数, 是由数学化学家 Schultz 在 1989 年最早提出的, 定义为:

$$D'(G) = \frac{1}{2} \sum_{\{x, y\} \in E(G)} [d(x) + d(y)] d_G(x, y) \quad (2)$$

图的度距离被提出来以后, 得到了广泛的研究, 文献[3]中证明了星图  $S_n$  是所有  $n$  阶简单连通图中具有最小度距离的唯一图, 其它有关图的度距离的研究参考文献[4-6]。本文讨论一类特殊的单圈图——棒棒糖图  $L(n, k)$  的度距离, 给出  $L(n, k)$  的度距离的表达式, 以

收稿日期: 2009-08-12

基金项目: 湖南省科技厅科技基金资助项目 (2009sk3026)

通信作者: 李俊锋 (1969-), 男, 湖南益阳人, 湖南城市学院副教授, 硕士, 主要研究方向为函数论与应用图论,

E-mail: lijunfengttt@sina.com

及它的 Wiener 指数与度距离之间的关系式, 从而可以通过研究  $L(n, k)$  的 Wiener 指数就可以得到它的度距离。同样, 得到  $L(n, k)$  的度距离也可以得到它的 Wiener 指数。

文中的相关图论术语可以参考文献[7]。

## 1 基本引理

**定义 1**<sup>[8]</sup> 棒棒糖图  $L(n, k)$ , 是将 2 个顶点不相交的图  $C_k$  的一个顶点和  $P_{n-k}$  的一个末端点用一条边连接得到的  $n$  阶单圈图,  $L(n, k)$  如图 1 所示。

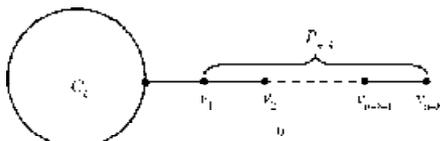


图 1 棒棒糖图  $L(n, k)$

Fig. 1 The lollipop graph  $L(n, k)$

**引理 1**<sup>[6]</sup> 设  $C_n$  是  $n$  个顶点的圈,  $v$  是  $C_n$  上的一个顶点, 则

$$\sum_{x \in C(n)} d_{C_n}(v, x) = \begin{cases} \frac{1}{4}n^2, & \text{当 } n \text{ 为偶数时,} \\ \frac{1}{4}(n^2 - 1), & \text{当 } n \text{ 为奇数时;} \end{cases}$$

$$W(C_n) = \begin{cases} \frac{1}{8}n^3, & \text{当 } n \text{ 为偶数时,} \\ \frac{1}{8}(n^3 - n), & \text{当 } n \text{ 为奇数时.} \end{cases}$$

**引理 2**<sup>[6]</sup> 设  $P_n$  是  $n$  个顶点的路, 则

$$W(P_n) = \binom{n+1}{3} = \frac{1}{6}n(n-1)(n+1).$$

## 2 主要结论

**定理 1**  $n$  阶棒棒糖图  $L(n, k)$  的度距离为:

$$W(L(n, k)) = \begin{cases} \frac{1}{24}(4n^3 + 5k^3 - 6nk^2 - 12k^2 + 12nk - 4n + 4k), & \text{当 } k \text{ 为偶数时,} \\ \frac{1}{24}(4n^3 - 5k^3 - 6nk^2 - 12k^2 + 12nk - 10n + 7k), & \text{当 } k \text{ 为奇数时;} \end{cases}$$

**证明** 如图 1 所示, 将  $L(n, k)$  中的顶点分为 2 类, 第一类: 圈  $C_k$  上的顶点; 第二类: 路  $P_{n-k}$  上的顶点。则根据 Wiener 指数的计算公式 (1), 将 Wiener 指数的计算分为 3 种情况:  $W_1(G)$ ——圈  $C_k$  上的顶点对的 Wiener 指数;  $W_2(G)$ ——路  $P_{n-k}$  上的顶点对的 Wiener 指数;  $W_3(G)$ ——圈  $C_k$  上的顶点与路  $P_{n-k}$  上的顶点对

Wiener 的指数。分别讨论如下:

**情形 1** 当  $k$  为偶数时,

$$W(G) = W(C_k) + \frac{1}{8}k^3,$$

$$W_2(G) = W(P_{n-k}) = \binom{n-k+1}{3} = \frac{1}{6}(n-k)(n-k)^2 - 1,$$

$$W_3(G) =$$

$$\sum_{i=1}^{n-k} \left\{ i + 2 \times \left[ (i+1) + \dots + \left( i + \left( \frac{k}{2} - 1 \right) \right) \right] - \left( i + \frac{k}{2} \right) \right\} = \frac{1}{4}(n-k)(-k^2 + 2nk + 2k),$$

从而,

$$W(G) = \sum_{i=1}^3 W_i(G) =$$

$$\frac{1}{24}(4n^3 + 5k^3 - 6nk^2 - 12k^2 + 12nk - 4n + 4k).$$

**情形 2** 当  $k$  为奇数时, 计算方法类似于情形 1, 可得:

$$W(G) = \sum_{i=1}^3 W_i(G) =$$

$$\frac{1}{24}(4n^3 + 5k^3 - 6nk^2 - 12k^2 + 12nk - 10n + 7k).$$

定理得证。

**定理 2**  $n$  阶棒棒糖图  $L(n, k)$  的度距离为:

$$D'(L(n, k)) =$$

$$\begin{cases} \frac{1}{12}(4n^3 + 5k^3 - 6nk^2 - 6k^2 + 6nk + 2n - 2k), \\ \text{当 } k \text{ 为偶数时,} \\ \frac{1}{12}(4n^3 + 5k^3 - 6nk^2 - 6k^2 - 6nk - 4n + k), \\ \text{当 } k \text{ 为奇数时.} \end{cases}$$

**证明** 同定理 1 的证明方法类似, 讨论分为 2 种情况:

**情形 1** 当  $k$  为偶数时,  $L(n, k)$  中的顶点分成 3 类,

1)  $u$ ; 2) 顶点  $v_{n-k}$ ; 3) 其余顶点。

从而  $D'(G)$  分解为 4 部分:

$$D'_1(G) = \frac{1}{2} \sum_{x, y \in C_k} d_G(x, y) [d(x) + d(y)] = \frac{1}{2}(1+3)(n-k) = 2(n-k),$$

$$D'_2(G) = \frac{1}{2} \sum_{x=v_{n-k}, y \in C_k} d_G(x, y) [d(x) + d(y)] = \frac{1}{2} \left( \sum_{x=v_{n-k}, y \in C_k} + \sum_{x \in C_k, y=v_{n-k}} \right) d_G(x, y) \cdot [d(x) + d(y)] =$$

$$\frac{3}{2} \left\{ \sum_{i=1}^{n-k-1} i + (k-1)(n-k) - 2 \left[ \sum_{i=1}^{\frac{k-1}{2}} i \right] + \frac{k}{2} \right\} = \frac{3}{4}n^2 - \frac{3}{8}k^2 - \frac{9}{4}n + \frac{9}{4}k,$$

$$D_3'(G) = \frac{1}{2} \sum_{d(x)+d(y)=2} d_G(x,y) [d(x)+d(y)] - \frac{1}{2} \left( \sum_{x,y \in C_k, x \neq y} + \sum_{x \in C_k, y \in U} + \sum_{x,y \in U} \right) d_G(x,y) [d(x)+d(y)] - \frac{(2+2)}{2} \left[ \binom{n-k+2}{3} - 2 \times \sum_{i=1}^{n-k-1} i - (n-k) \right] + \left[ (k-1) \sum_{i=1}^{n-k-1} i + \frac{k^2}{4}(n-k-1) \right] \left[ \frac{1}{8}k^3 - \frac{1}{4}k^2 \right] = \frac{1}{4}k^2(k-2) + \frac{1}{3}(n-k)(n-k-1)(n-k-2) - \frac{1}{2}(n-k-1)(2nk-2n+2k-k^2) = \frac{1}{3}n^3 + \frac{5}{12}k^3 - \frac{1}{2}nk^2 - 2n^2 - 2k^2 + 3nk + \frac{5}{3}n - \frac{5}{3}k,$$

$$D_4'(G) = \frac{1}{2} \sum_{d(x)+d(y)=2} d_G(x,y) [d(x)+d(y)] = \frac{1}{2} \left( \sum_{x,y \in C_k, x \neq y} + \sum_{x \in C_k, y \in U} \right) (d_G(x,y)) [d(x)+d(y)] = \frac{5}{2} \left[ \frac{1}{4}k^3 + \sum_{i=1}^{n-k-1} i \right] = \frac{5}{8}k^3 + \frac{5}{4}[(n-k)^2 - (n-k)].$$

从而,

$$D'(G) = \sum_{i=1}^4 D_i'(G) = 2(n-k) - \frac{3}{4}n^2 - \frac{3}{8}k^2 - \frac{9}{4}n + \frac{9}{4}k + \frac{1}{3}n^3 + \frac{5}{12}k^3 - \frac{1}{2}nk^2 - 2n^2 - 2k^2 - 3nk - \frac{5}{3}n - \frac{5}{3}k + \frac{5}{8}k^3 + \frac{5}{4}[(n-k)^2 - (n-k)] = \frac{1}{12}(4n^3 + 5k^3 - 6nk^2 - 6k^2 + 6nk - 2n - 2k).$$

**情形 2** 当  $k$  为奇数时, 类似于情形 1, 得

$$D'(G) = \sum_{i=1}^4 D_i'(G) = \frac{1}{12}(4n^3 + 5k^3 - 6nk^2 - 6k^2 + 6nk - 4n + k).$$

定理得证。

结合定理 1 与 2 易得下面的结论。

**定理 3**  $L(n,k)$  的 Wiener 指数与度距离的关系式:

$$D^*(L(n,k)) = 2W(L(n,k)) - \frac{(n-k)(k-1)}{2}.$$

参考文献:

- [1] Wiener H. Structural Determination of Paraffin Boiling Points [J]. J. Amer. Chem. Soc., 1947, 69: 17-20.
- [2] Ivan Gutman. Selected Properties of the Schultz Molecular Topological Index[J]. J Chem Inf Comput Sci, 1994, 34: 1087-1089.
- [3] 何秀萍. 树的度距离排序[J]. 福州大学学报: 自然科学版, 2002, 30(4): 479-481.  
He Xiuping. Ordering Trees by Their Degree Distance[J]. Journal of Fuzhou University: Natural Science, 2002, 30(4): 479-481.
- [4] 陈爱莲, 何秀萍. 单圈图的度距离序[J]. 福州大学学报: 自然科学版, 2004, 32(6): 664-668.  
Chen Ailian, He Xiuping. Ordering Unicyclic Graphs by Their Degree Distance[J]. Journal of Fuzhou University: Natural Science, 2004, 32(6): 664-668.
- [5] 何秀萍. 最小度距离的双圈图[J]. 数学研究, 2008, 41(4): 434-438.  
He Xiuping. The Bicyclic Graphs with Minimal Degree Distance[J]. Journal of Mathematical Study, 2008, 41(4): 434-438.
- [6] Ioan Tomescu. Note Some Extremal Properties of the Degree Distance of A Graph[J]. Discrete Applied Mathematics, 1999, 98: 159-163.
- [7] Bond J A, Murty U S R. Graph Theory with Applications [M]. New York: MacMillan Press, 1976.
- [8] 陈暑波, 夏方礼. 棒棒糖图的 Merrifield-Simmon 指数和 Hosoya 指数[J]. 湖南城市学院学报: 自然科学版, 2008, 17: 39-41.  
Chen Shubo, Xia Fangli. The Merrifield-Simmons Index and Hosoya Index of Lollipop Graphs[J]. Journal of Hunan City University: Natural Science, 2008, 17: 39-41.

(责任编辑: 罗立宇)