DOI:10.13718/j.cnki.xsxb.2019.04.002

基于圈收缩的图的(Sum-)Balaban 指标①

邓 波[1,2,3], 苏雪丽[1], 任小敏[1]

1. 青海师范大学 数学与统计学院,西宁 810008;2. 藏文信息处理教育部重点实验室,西宁 810008;
3. 广东石油化工学院 理学院,广东 茂名 525000

摘要:连通图 G 的 Balaban 指标(也叫 J 指标)的定义是

$$J(G)=\frac{m}{m-n+2}\sum_{uv\in E(G)}\frac{1}{\sqrt{\sigma_G(u)\sigma_G(v)}}$$

连通图 G 的 Sum-Balaban 指标定义为

$$SJ(G)=\frac{m}{m-n+2}\sum_{uv\in E(G)}\frac{1}{\sqrt{\sigma_G(u)+\sigma_G(v)}}$$

其中 m,n 分别是图 G 的边数和点数,$\sigma_G(u)$ 表示 G 中从顶点 u 到其它各个顶点的距离之和. Balaban 指标和 Sum-Balaban 指标被广泛应用于 QSAR 和 QSPR 的研究. 证明了:经过圈收缩后,一类单圈图的 Balaban 指标和 Sum-Balaban 指标是增大的. 观察 Balaban 指标和 Sum-Balaban 指标在圈收缩操作中的变化规律,对这两类拓扑指标提出了一种新的比较方法.

关 键 词:Balaban 指标;Sum-Balaban 指标;距离

中图分类号:**O157.5** **文献标志码**:**A** **文章编号**:1000-5471(2019)04-0007-04

对简单图 G,分别用 $m(G)$ 和 $n(G)$ 表示 G 的边集和顶点集,其边数和点数分别记为 $m=m(G)$ 和 $n=n(G)$. $N_G(v)$ 表示顶点 v 在 G 中的邻集. 在图 G 中,顶点 u 和 v 的距离记为 $d_G(u,v)$,顶点 u 到其它各顶点的距离之和记为 $\sigma_G(u)$,即 $\sigma_G(u)=\sum\limits_{\omega\in V(G)}d_G(u,\omega)$. 文献[1]介绍了一种关于连通图的新的拓扑指标,称为 Balaban 指标,或简称为 J 指标:

$$J(G)=\frac{m}{m-n+2}\sum_{uv\in E(G)}\frac{1}{\sqrt{\sigma_G(u)\sigma_G(v)}}$$

类似地,Sum-Balaban 指标[2]为

$$SJ(G)=\frac{m}{m-n+2}\sum_{uv\in E(G)}\frac{1}{\sqrt{\sigma_G(u)+\sigma_G(v)}}\tag{1}$$

Balaban 指标和 Sum-Balaban 指标都是非常有用的且具有良好性质的分子描述器,被广泛应用于 QSAR 和 QSPR 的各方面的研究[1-2]. 更多关于 Balaban 指标、Sum-Balaban 指标和其它化学指标的研究,参考文献[3-11].

设 $U_0=U_n(S_{w_1},S_{w_2},\cdots,S_{w_g})$(见图 1)是一个围长为 g 的单圈图,其中 S_{w_i} 是以圈上的点 w_i 为中心的星图,对 $1\leqslant i\neq j\leqslant g$,满足 $|n(S_{w_i})-n(S_{w_j})|\leqslant 1$. 图 U_1(见图 2)是由 U_0 经过收缩边 w_1w_2,并把 w_1w_2 变成悬挂边得到的,即

① 收稿日期:2018-05-26
基金项目:青海省科技厅项目(2018-ZJ-925Q,2017-ZJ-790);国家自然科学基金项目(11701311,QY201907);广东省自然科学基金项目-博士启动项目(2016A030310307).
作者简介:邓 波(1983-),男,副教授,博士,主要从事图论的研究.

$$U_1 = U_0 - \{w_2 x: x \in N_{U_0}(w_2) \backslash \{w_1\}\} + \{w_1 x: x \in N_{U_0}(w_2) \backslash \{w_1\}\}$$

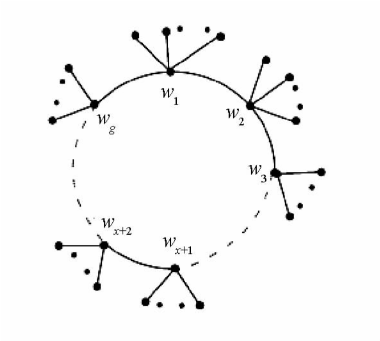

图 1 单圈图 U_0

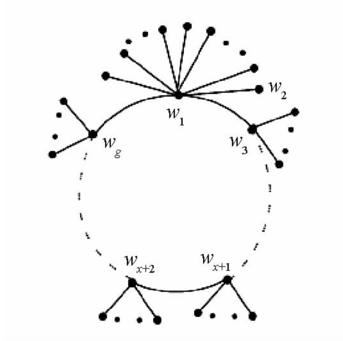

图 2 单圈图 U_1

定理 1 $SJ(U_0) < SJ(U_1)$.

证 从图 U_0 到图 U_1 可以看到，除了顶点 w_2 外，其它顶点的距离之和都变小了. 即对 $u \in V(U_0)$(或 $u \in V(U_1)$)，有 $\sigma_{U_0(u)} > \sigma_{U_1(u)}$，以及 $\sigma_{U_0(w_2)} < \sigma_{U_1(w_2)}$. 因此，对任意边 $uv \in E(U_0)(E(U_1))$，$u, v \neq w_2$，有：

$$\sigma_{U_0}(u) + \sigma_{U_0}(v) > \sigma_{U_1}(u) + \sigma_{U_1}(v)$$

$$\sum_{\substack{uv \in E(U_0) \\ u, v \neq w_2}} \frac{1}{\sqrt{\sigma_{U_0}(u) + \sigma_{U_0}(v)}} < \sum_{\substack{uv \in E(U_1) \\ u, v \neq w_2}} \frac{1}{\sqrt{\sigma_{U_1}(u) + \sigma_{U_1}(v)}} \tag{2}$$

对于顶点 w_1, w_2，由于圈的收缩，容易看到在 U_0 中 w_2 与其它顶点的距离之和大于在 U_1 中 w_1 与其它顶点的距离之和，即 $\sigma_{U_0}(w_2) > \sigma_{U_1}(w_1)$. 因此，对于 $w_2 u \in E(U_0)$，$u \in D_{U_0}(w_2)$ 和 $w_1 u \in E(U_1)$，有 $u \in D_{U_1}(w_1) \cap D_{U_0}(w_2)$，其中 $D_{U_1}(w_1) \cap D_{U_0}(w_2) = D_{U_0}(w_2)$，则：

$$\sigma_{U_0}(w_2) + \sigma_{U_0}(u) > \sigma_{U_1}(w_1) + \sigma_{U_1}(u)$$

$$\sum_{\substack{w_2 u \in E(U_0) \\ u \in D_{U_0}(w_2)}} \frac{1}{\sqrt{\sigma_{U_0}(w_2) + \sigma_{U_0}(u)}} < \sum_{\substack{w_1 u \in E(U_1) \\ u \in D_{U_0}(w_2)}} \frac{1}{\sqrt{\sigma_{U_1}(w_1) + \sigma_{U_1}(u)}} \tag{3}$$

由图 U_0 可以看到，连接顶点 w_2 的边有 $w_1 w_2, w_2 w_3$ 和悬挂边. 接下来需要证明如下不等式：

$$\frac{1}{\sqrt{\sigma_{U_0}(w_1) + \sigma_{U_0}(w_2)}} + \frac{1}{\sqrt{\sigma_{U_0}(w_2) + \sigma_{U_0}(w_3)}} < \frac{1}{\sqrt{\sigma_{U_1}(w_1) + \sigma_{U_1}(w_2)}} + \frac{1}{\sqrt{\sigma_{U_1}(w_1) + \sigma_{U_1}(w_3)}} \tag{4}$$

因为 $\sigma_{U_1}(w_1) < \sigma_{U_0}(w_2)$ 和 $\sigma_{U_1}(w_3) < \sigma_{U_0}(w_3)$，则

$$\sigma_{U_1}(w_1) + \sigma_{U_1}(w_3) < \sigma_{U_0}(w_2) + \sigma_{U_0}(w_3) \tag{5}$$

如果 $\sigma_{U_0}(w_1) + \sigma_{U_0}(w_2) \geq \sigma_{U_1}(w_1) + \sigma_{U_1}(w_2)$，则由(5)式，不等式(4)成立. 否则，

$$\sigma_{U_0}(w_1) + \sigma_{U_0}(w_2) < \sigma_{U_1}(w_1) + \sigma_{U_1}(w_2) \tag{6}$$

当 U_0 的围长是偶数时，可以看出，对顶点 w_2，其增加的部分 $\sigma_{U_1}(w_2) - \sigma_{U_0}(w_2)$ 等于顶点 w_1 的减少部分 $\sigma_{U_0}(w_1) - \sigma_{U_1}(w_1)$，故

$$\sigma_{U_0}(w_1) + \sigma_{U_0}(w_2) = \sigma_{U_1}(w_1) + \sigma_{U_1}(w_2)$$

因此，只需讨论 U_0 的围长是奇数的情况. 可以看到：

$$\sigma_{U_0}(w_2) = \sum_{\substack{u \in V(U_0) \\ u \notin D_{U_0}(w_2)}} d_{U_0}(w_2, u) + \sum_{v \in D_{U_0}(w_2)} d_{U_0}(w_2, v) =$$

$$\sum_{\substack{u \in V(U_0) \\ u \notin D_{U_0}(w_2)}} d_{U_0}(w_2, u) + d_{U_0}(w_2) - 2$$

$$\sigma_{U_1}(w_3) = \sum_{\substack{u \in V(U_1) \\ u \notin D_{U_0}(w_2)}} d_{U_1}(w_3, u) + \sum_{v \in D_{U_0}(w_2)} d_{U_1}(w_3, v)$$

从图 U_0 到图 U_1，我们有：

$$\sum_{\substack{u \in V(U_0) \\ u \notin D_{U_0}(w_2)}} d_{U_0}(w_2, u) - \sum_{\substack{u \in V(U_1) \\ u \notin D_{U_0}(w_2)}} d_{U_1}(w_3, u) \geq d_{U_0}(w_3) - 1 \tag{7}$$

$$\sum_{v\in D_{U_0}(w_2)} d_{U_1}(w_3, v) - \sum_{v\in D_{U_0}(w_2)} d_{U_0}(w_2, v) = d_{U_0}(w_2) - 2 \tag{8}$$

由 $\Delta(U_0) = d_{U_0}(w_3) \geq d_{U_0}(w_2)$ 和(7),(8) 式，故 $\sigma_{U_1}(w_3) < \sigma_{U_0}(w_2)$. 因此，由 $\sigma_{U_1}(w_1) < \sigma_{U_0}(w_1)$，可得

$$\sigma_{U_1}(w_1) + \sigma_{U_1}(w_3) < \sigma_{U_0}(w_1) + \sigma_{U_0}(w_2) \tag{9}$$

不失一般性，设

$$\sigma = \sigma_{U_0}(w_1) + \sigma_{U_0}(w_2) \leqslant \sigma_{U_0}(w_2) + \sigma_{U_0}(w_3)$$

则存在非负整数 k_1，满足 $\sigma_{U_0}(w_2) + \sigma_{U_0}(w_3) = \sigma + k_1$. 类似地，由(6) 式和(9) 式，存在正整数 k_2 和 k_3，分别满足 $\sigma_{U_1}(w_1) + \sigma_{U_1}(w_2) = \sigma + k_2$ 和 $\sigma_{U_1}(w_1) + \sigma_{U_1}(w_3) = \sigma - k_3$. 如果 $k_1 \geqslant k_2$，则

$$\frac{1}{\sqrt{\sigma_{U_0}(w_2) + \sigma_{U_0}(w_3)}} < \frac{1}{\sqrt{\sigma_{U_1}(w_1) + \sigma_{U_1}(w_2)}}$$

因此由(9) 式，不等式(4) 成立. 否则

$$k_1 < k_2 \tag{10}$$

在 U_0 的围长是奇数的条件下，讨论 k_2 和 k_3 的关系. 令：

$$\Delta_1^- = \sigma_{U_0}(w_1) - \sigma_{U_1}(w_1) \qquad \Delta_2^+ = \sigma_{U_1}(w_2) - \sigma_{U_0}(w_2) \qquad \Delta_3^- = \sigma_{U_0}(w_3) - \sigma_{U_1}(w_3)$$

从 U_0 到 U_1，可以看出：

$$\Delta_1^- + (d_{U_0}(w_{\lfloor \frac{g}{2} \rfloor+2}) - 1) = \Delta_2^+ \qquad k_2 = \Delta_2^+ - \Delta_1^- \qquad k_3 = \Delta_1^- + \Delta_3^-$$

因此

$$k_2 = d_{U_0}(w_{\lfloor \frac{g}{2} \rfloor+2}) - 1 < \Delta_1^- + d_{U_0}(w_1) < \Delta_1^- + \Delta_3^- = k_3 \tag{11}$$

由 $\Delta(U_0) = d_{U_0}(w_3) < \Delta_1^-$，以及(10) 式和(11) 式，则有 $k_1 < k_2 < k_3$. 于是

$$\frac{1}{\sqrt{\sigma - k_3}} > \frac{1}{\sqrt{\sigma}} > \frac{1}{\sqrt{\sigma + k_1}} > \frac{1}{\sqrt{\sigma + k_2}} \tag{12}$$

因为对 $x > 0$，$\frac{1}{\sqrt{x}} - \frac{1}{\sqrt{x+s}}$ 是单调递减函数，其中 s 是正整数，$k_2 < s < k_3 + k_1$，则对 $\sigma - k_3 < \sigma$，我们有

$$\frac{1}{\sqrt{\sigma - k_3}} - \frac{1}{\sqrt{\sigma - k_3 + s}} > \frac{1}{\sqrt{\sigma}} - \frac{1}{\sqrt{\sigma + s}}$$

当 s 增加时，不等式的左边会变大；当 s 减少时，不等式的左边会变小. 因此

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{\sigma - k_3}} - \frac{1}{\sqrt{\sigma + k_1}} = {} & \frac{1}{\sqrt{\sigma - k_3}} - \frac{1}{\sqrt{\sigma - k_3 + (k_3 + k_1)}} > \\ & \frac{1}{\sqrt{\sigma - k_3}} - \frac{1}{\sqrt{\sigma - k_3 + (k_3 + k_1 - 1)}} > \cdots > \\ & \frac{1}{\sqrt{\sigma - k_3}} - \frac{1}{\sqrt{\sigma - k_3 + s}} > \frac{1}{\sqrt{\sigma}} - \frac{1}{\sqrt{\sigma + s}} > \\ & \frac{1}{\sqrt{\sigma}} - \frac{1}{\sqrt{\sigma + (s-1)}} > \cdots > \frac{1}{\sqrt{\sigma}} - \frac{1}{\sqrt{\sigma + k_2}}\end{aligned}$$

故有：

$$\frac{1}{\sqrt{\sigma - k_3}} - \frac{1}{\sqrt{\sigma + k_1}} > \frac{1}{\sqrt{\sigma}} - \frac{1}{\sqrt{\sigma + k_2}}$$

$$\frac{1}{\sqrt{\sigma}} + \frac{1}{\sqrt{\sigma + k_1}} - \frac{1}{\sqrt{\sigma + k_2}} - \frac{1}{\sqrt{\sigma - k_3}} < 0$$

因此，不等式(4) 成立. 由(2),(3),(4) 式和 Sum-Balaban 指标的定义，定理 1 成立.

容易看出定理 1 对 $J(G)$ 也成立. 本文所提出的新的比较方法是基于圈收缩变换的. 对于任意一个单圈图，经过圈收缩后，对于原图中的大部分顶点的距离之和都会变小，但存在唯一一个顶点 w_2 的距离之和是变大的. 考虑把图的边集划分为若干部分进行比较. 特别地，对含有顶点 w_2 的边，需要进行恰当的组合，再进行有效的比较. 定理 1 采用的方法也可以推广到双圈图以及 $k(k \geqslant 3)$ 圈图，有助于对这类化学指标进行值极刻画.

参考文献：

[1] BALABAN A T. Topological Indices Based on Topological Distances in Molecular Graphs [J]. Pure & Appl Chem, 1983, 55(2): 199-206.

[2] DENG H Y. On the Sum-Balaban Index [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2011, 66(2): 273-284.

[3] DONG H W, GUO X F. Character of Graphs with Extremal Balaban Index [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2010, 63(3): 799-812.

[4] ZHOU B, TRINAJSTIC N. Bounds on the Balaban Index [J]. Croat Chem Acta, 2008, 81(2): 319-323.

[5] SUN L L. Bounds on the Balaban Index of Trees [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2010, 63(3): 813-818.

[6] DENG H Y. On the Balaban Index of Trees [J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2011, 66(1): 253-260.

[7] GAO W, BABY S, SHAFIQ M K, et al. On Randic Indices of Single-Walled TiO2 Nanotubes [J]. UPB Scientific Bulletin(Series B), 2017, 79(1): 93-100.

[8] GAO W, JAMIL M K, JAVED A, et al. Sharp Bounds of the Hyper Zagreb Index on Acyclic, Unicylic and Bicyclic Graphs [J/OL]. Discrete Dynamics in Nature and Society, 2017, 2017: 1-5[2018-4-20]. https://doi.org/10.1155/2017/6079450.

[9] 钟　琴，牟谷芳. 矩阵 Hadamard 积谱半径的新上界 [J]. 西南师范大学学报(自然科学版)，2018，43(12)：1-5.

[10] 贾弯弯，王正攀. Rees 矩阵定理的简明刻画 [J]. 西南大学学报(自然科学版)，2017，39(12)：86-89.

[11] 钟　琴，周　鑫. 非负不可约矩阵 Perron 根的上界 [J]. 西南大学学报(自然科学版)，2017，39(10)：75-78.

On Sum-Balaban Index of Graphs Based on Contraction of Cycles

DENG Bo[1,2,3], SU Xue-li[1], REN Xiao-min[1]

1. School of Mathematics and Statistics, Qinghai Normal University, Xining 810008, China;
2. Tibetan intelligent information processing and Machine Translation Key Laboratory, Xining 810008, China;
3. College of Science, Guangdong University of Petrochemical Technology, Maoming Guangdong 525000, China

Abstract: The Balaban index (also called J index) of a connected graph G is denoted as

$$J(G)=\frac{m}{m-n+2}\sum_{uv\in E(G)}\frac{1}{\sqrt{\sigma_G(u)\sigma_G(v)}}$$

and the Sum-Balaban index of a connected graph G is denoted as

$$SJ(G)=\frac{m}{m-n+2}\sum_{uv\in E(G)}\frac{1}{\sqrt{\sigma_G(u)+\sigma_G(v)}}$$

where m, n are the edge number and vertex number of G, respectively, and $\sigma_G(u)$ (resp. $\sigma_G(v)$) denotes the total distance from u to all the other vertices of G. The Balaban index and the Sum-Balaban index have been widely used in various QSAR and QSPR studies. In this paper, we have proved that the Balaban index and the Sum-Balaban index increase by the contraction of cycles. Then we see the varieties of this operation and propose a new method for these two indices.

Key words: Balaban index; Sum-Balaban index; distance

责任编辑　廖　坤