DOI:10.13718/j.cnki.xsxb.2019.06.004

完全 K 部图的 Hosoya 指标和 Merrifield-Simmons 指标极图①

陈　兰

青海民族大学 数学与统计学院,西宁 810007

摘要: 图的 Hosoya 指标和 Merrifield-Simmons 指标是化学图论中两个重要的拓扑指标. 考虑点数为 n 的完全 K 部图集合 $K_{n_1,n_2,\cdots,n_k}$,证明了在图集 $K_{n_1,n_2,\cdots,n_k}$ 中 $K_{\underbrace{1,1,\cdots,1}_{k-1个},n-k+1}$ 具有最小的 Hosoya 指标和最大的 Merrifield-Simmons 指标,并且图 $K_{\underbrace{q,q,\cdots,q}_{k-r个},\underbrace{q+1,\cdots,q+1}_{r个}}$ 在 $K_{n_1,n_2,\cdots,n_k}$ 中具有最小的 Merrifield-Simmons 指标和最大的 Hosoya 指标,其中 $n=kq+r$,$0\leqslant r<k$.

关　键　词: Hosoya 指标; Merrifield-Simmons 指标; 完全 K 部图

中图分类号: O157.5　　**文献标志码:** A　　**文章编号:** 1000-5471(2019)06-0014-04

本文所考虑的图都是有限、无向的简单图. 设图 G 是一个化学分子结构图模型,即一个具有 n 个顶点的连通图. 图 G 的 Hosoya 指标和 Merrifield-Simmons 指标分别定义为图的包括空边集在内的对集(独立边集)总数和包括空点集在内的点独立集总数,图 G 的这两个指标分别记为 $z(G)$ 和 $i(G)$. 图的 Hosoya 指标的概念由文献[1]引入. 文献[2]首先提出了图的 Fibonacci 数的概念,即 Merrifield-Simmons 指标,F_n 是第 n 个 Fibonacci 数,满足 $F_0=0$,$F_1=1$,$F_{n+1}=F_n+F_{n-1}$. 文献[3]给出了图的 Merrifield-Simmons 指标和 Hosoya 指标的计算公式. 这两种指标均是研究物质分子结构与物理和化学性质之间的拓扑参数,将其应用到化学分子图研究中,其中一个重要方向是研究给定图类的 Hosoya 指标和 Merrifield-Simmons 指标的极大或极小图. 关于 Hosoya 指标或 Merrifield-Simmons 指标,已经得到了很多图类的极图[4-12].

用 $N_G(v)$ 表示图 G 中点 v 的邻点集,且 $N_G[v]=\{v\}\cup N_G(v)$,并用 P_n,S_n 和 K_n 分别表示 n 点路、n 点星和 n 点完全图,其它没有定义的图论的概念和术语可参考文献[13].

用 $K_{n_1,n_2,\cdots,n_k}$ 表示各部顶点数分别是 $n_1,n_2,\cdots,n_k$ 的 n 阶完全 k 部图集合. 本文证明了图 $K_{\underbrace{1,1,\cdots,1}_{k-1个},n-k+1}$ 在 $K_{n_1,n_2,\cdots,n_k}$ 中具有最大的 Merrifield-Simmons 指标和最小的 Hosoya 指标,确定了图 $K_{\underbrace{1,1,\cdots,1}_{k-1个},n-k+1}$ 的 Merrifield-Simmons 指标值,并证明了图 $K_{\underbrace{q,q,\cdots,q}_{k-r个},\underbrace{q+1,\cdots,q+1}_{r个}}$ 在 $K_{n_1,n_2,\cdots,n_k}$ 中具有最小的 Merrifield-Simmons 指标和最大的 Hosoya 指标,其中 $n=kq+r$,$0\leqslant r<k$.

引理 1[3]　设 G 是一个图,v 是 G 的一个顶点,$w\sim v$ 表示 G 中和顶点 v 相邻的顶点,则有

$$z(G)=z(G-v)+\sum_{w\sim v}z(G-\{w,v\})$$

注 1　根据引理 1,对于两连通图 G_1 和 G_2,若 G_1 是 G_2 的去点或去边真子图,则有

$$z(G_1)<z(G_2)$$

---

① 收稿日期:2018-08-13

基金项目:国家自然科学基金项目(11561056);青海省自然科学基金项目(2016-Z-914).

作者简介:陈　兰(1962-),女,教授,主要从事图论与组合数学的研究.

引理 2[3]　设 G 是一个图，v 是 G 的一个顶点，则有

$$i(G)=i(G-v)+i(G-N_G[v])$$

引理 3[3]　$i(P_n)=F_{n+2}$，$i(K_n)=n+1$，$i(S_n)=2^{n-1}+1$.

引理 4[3]　$z(P_n)=F_{n+1}$，$z(S_n)=n$.

引理 5[3]　若 $G_1,G_2,\cdots,G_t$ 是图 G 的连通分支，则有：

(i) $i(G)=\prod\limits_{k=1}^{t} i(G_k)$；

(ii) $z(G)=\prod\limits_{k=1}^{t} z(G_k)$.

令 $z(n_1, n_2, \cdots, n_k)$ 和 $i(n_1, n_2, \cdots, n_k)$ 分别表示 n 阶完全 k 部图 $K_{n_1,n_2,\cdots,n_k}$ 的 Hosoya 指标和 Merrifield-Simmons 指标.

定理 1　设 $G\in K_{n_1,n_2,\cdots,n_k}$，则有 $z(G)\geqslant z(\underbrace{1,1,\cdots,1}_{k-1\text{个}}, n-k+1)$，等式成立当且仅当 $G\cong K_{\underbrace{1,1,\cdots,1}_{k-1\text{个}},n-k+1}$.

证　先说明一下 $K_{n_1,n_2,\cdots,n_k}$ 中各部顶点数相差最大数的含义. 如 $k=4$，$n=9$ 时的 Hosoya 指标有 $z(2,2,2,3)$，$z(1,2,3,3)$，$z(1,2,2,4)$，$z(1,1,3,4)$，$z(1,1,2,5)$ 和 $z(1,1,1,6)$，它们从大到小排列，其中各部顶点相差最大数分别是 1,2,3,3,4 和 5，$z(1,1,1,6)$ 是各部顶点相差最大数最大的. 一般地，显然图 $K_{\underbrace{1,1,\cdots,1}_{k-1\text{个}},n-k+1}$ 是在 $K_{n_1,n_2,\cdots,n_k}$ 中各部顶点数相差最大数最大的. 下面证明 $K_{\underbrace{1,1,\cdots,1}_{k-1\text{个}},n-k+1}$ 在 $K_{n_1,n_2,\cdots,n_k}$ 中的 Hosoya 指标最小，故只需证明在 $K_{n_1,n_2,\cdots,n_k}$ 中各部顶点数相差最大数越大 Hosoya 指标越小.

假设存在两个独立集点数 n_1，n_2 满足 $n_2>n_1$.

当 $k=2$ 时，对 k_{n_1-1,n_2+1} 和 k_{n_1,n_2} 运用引理 1，有：

$$z(n_1-1, n_2+1)=z(n_1-1, n_2)+(n_1-1)z(n_1-2, n_2)$$

$$z(n_1, n_2)=z(n_1-1, n_2)+n_2 z(n_1-1, n_2-1)$$

$$\begin{aligned}z(n_1, n_2)-z(n_1-1, n_2+1)=&n_2 z(n_1-1, n_2-1)-(n_1-1)z(n_1-2, n_2)=\\&n_2[z(n_1-2, n_2-1)+(n_2-1)z(n_1-2, n_2-2)]-\\&(n_1-1)[z(n_1-2, n_2-1)+(n_1-2)z(n_1-3, n_2-1)]=\\&n_2(n_2-1)z(n_1-2, n_2-2)-(n_1-1)(n_1-2)z(n_1-3, n_2-1)+\\&[n_2 z(n_1-2, n_2-1)-(n_1-1)z(n_1-2, n_2-1)]>\\&n_2(n_2-1)z(n_1-2, n_2-2)-(n_1-1)(n_1-2)z(n_1-3, n_2-1)>\\&n_2(n_2-1)(n_2-2)z(n_1-3, n_2-3)-\\&(n_1-1)(n_1-2)(n_1-3)z(n_1-4, n_2-2)>\cdots>\\&n_2(n_2-1)(n_2-2)\cdots(n_2-n_1+3)z(2, n_2-n_1+2)-\\&(n_1-1)(n_1-2)(n_1-3)\cdots 2z(1, n_2-n_1+3)\end{aligned}$$

由引理 1 及引理 4，有

$$\begin{aligned}&z(2, n_2-n_1+2)-z(1, n_2-n_1+3)=\\&z(1, n_2-n_1+2)+(n_2-n_1+2)z(1, n_2-n_1+1)-(n_2-n_1+4)=\\&(n_2-n_1+3)+(n_2-n_1+2)^2-(n_2-n_1+4)=\\&(n_2-n_1+2)^2-1>0\end{aligned}$$

当 $k\geqslant 3$ 时，对 $K_{n_1,n_2,n_3,\cdots,n_k}$ 和 $K_{n_1-1,n_2+1,n_3,\cdots,n_k}$ 运用引理 1，有：

$$\begin{aligned}z(n_1, n_2, n_3, \cdots, n_k)=&z(n_1-1, n_2, n_3, \cdots, n_k)+n_2 z(n_1-1, n_2-1, n_3, \cdots, n_k)+\\&n_3 z(n_1-1, n_2, n_3-1, \cdots, n_k)+\cdots+n_k z(n_1-1, n_2, n_3, \cdots, n_k-1)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}z(n_1-1, n_2+1, n_3, \cdots, n_k)=&z(n_1-1, n_2, n_3, \cdots, n_k)+(n_1-1)z(n_1-2, n_2, n_3, \cdots, n_k)+\\&n_3 z(n_1-1, n_2, n_3-1, \cdots, n_k)+\cdots+n_k z(n_1-1, n_2, n_3, \cdots, n_k-1)\end{aligned}$$

$$z(n_1, n_2, n_3, \cdots, n_k)-z(n_1-1, n_2+1, n_3, \cdots, n_k)=$$

$n_2 z(n_1-1, n_2-1, n_3, \cdots, n_k)-(n_1-1)z(n_1-2, n_2, n_3, \cdots, n_k)=$
$n_2[z(n_1-2, n_2-1, n_3, \cdots, n_k)+(n_2-1)z(n_1-2, n_2-2, n_3, \cdots, n_k)+$
$n_3 z(n_1-2, n_2-1, n_3-1, \cdots, n_k)+\cdots+n_k z(n_1-2, n_2-1, n_3, \cdots, n_k-1)]-$
$(n_1-1)[z(n_1-2, n_2-1, n_3, \cdots, n_k)+(n_1-2)z(n_1-3, n_2-1, n_3, \cdots, n_k)+$
$n_3 z(n_1-2, n_2-1, n_3-1, \cdots, n_k)+\cdots+n_k z(n_1-2, n_2-1, n_3, \cdots, n_k-1)]=$
$n_2(n_2-1)z(n_1-2, n_2-2, n_3, \cdots, n_k)-(n_1-1)(n_1-2)z(n_1-3, n_2-1, n_3, \cdots, n_k)+$
$(n_2-n_1+1)[z(n_1-2, n_2-1, n_3, \cdots, n_k)+n_3 z(n_1-2, n_2-1, n_3-1, n_4, \cdots, n_k)+\cdots+$
$n_k z(n_1-2, n_2-1, n_3, \cdots, n_k-1)]>$
$n_2(n_2-1)z(n_1-2, n_2-2, n_3, \cdots, n_k)-(n_1-1)(n_1-2)z(n_1-3, n_2-1, n_3, \cdots, n_k)>\cdots\cdots>$
$n_2(n_2-1)(n_2-2)\cdots(n_2-n_1+3)z(2, n_2-n_1+2, n_3, \cdots, n_k)-$
$(n_1-1)(n_1-2)(n_1-3)\cdots 2z(1, n_2-n_1+3, n_3, \cdots, n_k)>$
$n_2(n_2-1)(n_2-2)\cdots(n_2-n_1+3)(n_2-n_1+2)z(1, n_2-n_1+1, n_3, \cdots, n_k)-$
$(n_1-1)(n_1-2)(n_1-3)\cdots 2\cdot 1z(n_2-n_1+2, n_3, \cdots, n_k)>0.$

最后一个不等式成立是因为 $K_{n_2-n_1+2, n_3, \cdots, n_k}$ 是 $K_{1, n_2-n_1+1, n_3, \cdots, n_k}$ 去掉点数 1 和 n_2-n_1+1 两部之间所有的边所得到的真子图. 根据注 1，有

$$z(1, n_2-n_1+1, n_3, \cdots, n_k)>z(n_2-n_1+2, n_3, \cdots, n_k)$$

又因为

$$n_2(n_2-1)(n_2-2)\cdots(n_2-n_1+3)(n_2-n_1+2)>(n_1-1)(n_1-2)(n_1-3)\cdots 2\cdot 1$$

结论成立.

定理 2 设 $G \in K_{n_1, n_2, \cdots, n_k}$，则有 $z(G) \leqslant z(\underbrace{q, q, \cdots, q}_{k-r\text{个}}, \underbrace{q+1, q+1, \cdots, q+1}_{r\text{个}})$，等式成立当且仅当 $G \cong K_{\underbrace{q, q, \cdots, q}_{k-r\text{个}}, \underbrace{q+1, q+1, \cdots, q+1}_{r\text{个}}}$，其中 $n=kq+r$，$0 \leqslant r<k$.

证 显然图 $K_{\underbrace{q, q, \cdots, q}_{k-r\text{个}}, \underbrace{q+1, q+1, \cdots, q+1}_{r\text{个}}}$ 是 $K_{n_1, n_2, \cdots, n_k}$ 中各部顶点数最多相差 1 的 n 阶完全 k 部图. 仿定理 1 可证明此定理.

定理 3 设 $G \in K_{n_1, n_2, \cdots, n_k}$，则有 $i(G) \leqslant i(\underbrace{1, 1, \cdots, 1}_{k-1\text{个}}, n-k+1)$，等式成立当且仅当 $G \cong K_{\underbrace{1, 1, \cdots, 1}_{k-1\text{个}}, n-k+1}$，并且 $i(\underbrace{1, 1, \cdots, 1}_{k-1\text{个}}, n-k+1)=2^{n-k+1}+k-1$.

证 显然图 $K_{\underbrace{1, 1, \cdots, 1}_{k-1\text{个}}, n-k+1}$ 是在 $K_{n_1, n_2, \cdots, n_k}$ 中各部顶点数相差最大数最大的. 下面证明 $K_{\underbrace{1, 1, \cdots, 1}_{k-1\text{个}}, n-k+1}$ 在 $K_{n_1, n_2, \cdots, n_k}$ 中的 Merrifield-Simmons 指标最大，故只需证明在 $K_{n_1, n_2, \cdots, n_k}$ 中各部顶点数相差最大数越大 Merrifield-Simmons 指标越大.

不失一般性，假设存在两个独立集点数 n_1，n_2，满足 $n_2>n_1$.

对 $K_{n_1-1, n_2+1, n_3, \cdots, n_k}$ 和 $K_{n_1, n_2, n_3, \cdots, n_k}$ 运用引理 2 及引理 3、引理 5，有:

$$i(n_1-1, n_2+1, n_3, \cdots, n_k)=i(n_1-1, n_2, n_3, \cdots, n_k)+2^{n_2}$$
$$i(n_1, n_2, n_3, \cdots, n_k)=i(n_1-1, n_2, n_3, \cdots, n_k)+2^{n_1-1}$$

所以

$$i(n_1-1, n_2+1, n_3, \cdots, n_k)-i(n_1, n_2, n_3, \cdots, n_k)=2^{n_2}-2^{n_1-1}>0$$

下面计算图 $K_{\underbrace{1, 1, \cdots, 1}_{k-1\text{个}}, n-k+1}$ 的 Merrifield-Simmons 指标. 运用引理 3，有

$$i(\underbrace{1, 1, \cdots, 1}_{k-1\text{个}}, n-k+1)=i(\underbrace{1, 1, \cdots, 1}_{k-2\text{个}}, n-k+1)+1=i(\underbrace{1, 1, \cdots, 1}_{k-3\text{个}}, n-k+1)+2=\cdots=$$
$$i(1, n-k+1)+k-2=2^{n-k+1}+1+k-2=2^{n-k+1}+k-1$$

结论成立.

同理可以得到下面定理：

定理 4　设 $G \in K_{n_1, n_2, \cdots, n_k}$，则有 $i(G) \geqslant i(\underbrace{q, q, \cdots, q}_{k-r个}, \underbrace{q+1, q+1, \cdots, q+1}_{r个})$，等式成立当且仅当 $G \cong K_{\underbrace{q, q, \cdots, q}_{k-r个}, \underbrace{q+1, q+1, \cdots, q+1}_{r个}}$，其中 $n = kq + r$，$0 \leqslant r < k$.

参考文献：

[1] HOSOYA H. Topological Index. A Newly Proposed Quantity Characterizing the Topological Nature of Structural Isomers of Saturated Hydrocarbons [J]. Bull Chem Soc Jpn，1971，44(9)：2332-2339.

[2] MERRIFIELD R E，SIMMONS H E. Topological Methods in Chemistry [M]. New York：Wiley，1989.

[3] GUTMAN I，POLANSKY O E. Mathematical Concepts in Organic Chemistry [M]. Berlin：Springer，1986.

[4] 陈　兰. 单圈图 Merrifield-Simmons 指标的第四大值 [J]. 西南师范大学学报(自然科学版)，2009，34(3)：24-27.

[5] 陈　兰. 具有第四大和第五大 Merrifield-Simmons 指标的 n 阶单圈图 [J]. 青海师范大学学报(自然科学版)，2010，26(1)：9-11.

[6] 田双亮，田文文，王　倩，等. 多元素链的 Merrifield-Simmons 指标和 Hosoya 指标 [J]. 山西大学学报(自然科学版)，2014，37(1)：48-52.

[7] 赵晓翠，田双亮，田文文. 几类图的 Merrifield-Simmons 指标及扇和轮的 Hosoya 指标 [J]. 山东理工大学学报(自然科学版)，2015，29(1)：27-31.

[8] 刘睿琳，田双亮，田文文. 五边形链的 Merrifield-Simmons 指标 [J]. 西北民族大学学报(自然科学版)，2016，37(2)：1-5.

[9] 许克祥. 关于 Hosoya 指标和 Merrifield-Simmons 指标的 k 色极图 [J]. 厦门大学学报(自然科学版)，2010，49(3)：312-315.

[10] 黄丽娜，李沐春，刘海忠. 图的邻点可区别 V-全色数的一个上界 [J]. 西南大学学报(自然科学版)，2017，39(12)：81-85.

[11] 王文杰，黄丽娜，李沐春. T-型六角系统的点可区别边染色 [J]. 西南大学学报(自然科学版)，2018，40(10)：77-82.

[12] 宋海洋，王淑玲，刘　嫚，等. 平面图的单射染色 [J]. 西南师范大学学报(自然科学版)，2017，42(4)：7-13.

[13] BONDY J A，MURTY U S R. Graph Theory with Applications [M]. New York：Macmillan Press，1976.

Extremal Complete K-Partite Graphs with Respect to Hosoya Index and Merrifield-Simmons Index

CHEN　Lan

School of Mathematics and Statistics，Qinghai Nationalities University，Xining 810007，China

Abstract：Hosoya index and Merrifield-Simmons index are the two valuable topological indices in chemical graph theory. We consider the Hosoya indices and Merrifield-Simmons indices of graphs in $K_{n_1, n_2, \cdots, n_k}$，where $K_{n_1, n_2, \cdots, n_k}$ denotes the set of graphs with order n and complete K-partite. In this paper we prove that in $K_{n_1, n_2, \cdots, n_k}$，the $K_{\underbrace{1, 1, \cdots, 1}_{k-1个}, n-k+1}$ has minimal Hosoya index and maximal Merrifield-Simmons index，and $K_{\underbrace{q, q, \cdots, q}_{k-r个}, \underbrace{q+1, \cdots, q+1}_{r个}}$ (where $n = kq + r$，$0 \leqslant r < k$) has maximal Hosoya index and minimal Merrifield-Simmons index.

Key words：Hosoya index；Merrifield-Simmons index；complete K-partite graph

责任编辑　廖　坤