鲁东大学学报(自然科学版)
Journal of Ludong University(Natural Science Edition) 2020,36(1):24—27

特殊树的冠积的 Merrifield-Simmons 指标和 Hosoya 指标

索郎王青,田双亮,杨 青

(西北民族大学 数学与计算机科学学院,兰州 730030)

摘要: 本文研究了双星图、毛毛虫树与任意图的冠积的 Merrifield-Simmons 指标和 Hosoya 指标,并给出了具体的表达式.

关键词: 毛毛虫树; 双星图; Merrifield-Simmons 指标; Hosoya 指标; 冠积

中图分类号: O157.5 **文献标志码**: A **文章编号**: 1673-8020(2020)01-0024-04

Hosoya 指标是由日本化学家 Haruo Hosoya 于 1971 年在文献[1]中提出并研究,表示图 G 中所有匹配的数目,简称 H 指标,记为 $\mu(G)$.Merrifield-Simmons 指标是 1989 年美国化学家 Richard E.Merrifield 和 Howard E.Simmons 在文献[2]中引入的化学拓扑指标,表示图 G 中所有独立集的数目,简称 M-S 指标,记为 $\sigma(G)$.这两个拓扑指标是化学图论中两个非常重要的拓扑指标,它们与物质的沸点、熵、化学键的计算和化学结构等有着密切的联系,并且常被用来描述有机化合物的物理化学特征与药理特征,相关应用研究参见文献[2—3].目前,国内外学者对这类指标的研究主要在于计数和排序两个方面,如文献[4]研究了单圈图中最大的 M-S 指标和最小的 H 指标,文献[5—6]确定了双圈图中最小的 M-S 指标和 H 指标,文献[7]研究了三圈图中最小的 M-S 指标和最大的 H 指标,文献[8-9]研究了当给定最大度或连通度时关于 M-S 指标和 H 指标的极值图,文[10-11]研究了一些运算图的 M-S 指标和 H 指标的计数问题.受这些文献的启发,本文研究特殊树与任意图的冠积的 M-S 指标和 H 指标的计数问题.

1 预备知识

设 $G=(V,E)$ 是一个简单连通图,$V(G)$ 和 $E(G)$ 分别表示图 G 的顶点集与边集.设 e 和 v 分别为图 G 的一条边和一个顶点,图 G 删去边 e 得到的图用 $G-e$ 表示,如果 $G-e$ 是不连通的,则 e 是图 G 的一条割边.用 $G-v$ 表示图 G 删去顶点 v(及关联的边)得到的图.图 G 中顶点 v 的邻点集用 $N_G(v)$ 表示,顶点 v 的闭邻点集为 $N_G[v]=\{v\}\cup N_G(v)$.

定义 1[10] 连接两个星图的中心点后得到的图称为双星图,记为 S_n^2.

定义 2[10] 除主路上的点以外的点都是悬挂点的树称为毛毛虫树,记为 M_n.

定义 3[12] 设 G 与 H 是顶点数分别为 n 和 m、边数分别为 n_1 和 m_1 的简单图,图 G 与 H 的冠积 $G\circ H$ 表示由图 G 的每个顶点分别与图 H 的一个拷贝的所有顶点相连接得到的图.如图 1 所示的双星图与任意图 H 的冠积记为 $S_n^2\circ H$,如图 2 所示的毛毛虫树与任意图 H 的冠积记为 $M_n\circ H$.

引理 1[13] 设 G 是一个简单连通图,对任意的 $u,v\in V(G)$,$e=uv\in E(G)$,则

1) $\sigma(G)=\sigma(G-v)+\sigma(G-N_G[v])$; 2) $\sigma(G)=\sigma(G-e)-\sigma(G-(N_G[u]\cup N_G[v]))$.

收稿日期: 2019-09-15; 修回日期: 2019-11-25

基金项目: 国家民委科研项目(14XBZ018); 应用数学国家民委重点学科(11080327); 数学甘肃省重点学科(11080318); 西北民族大学中央高校基本科研业务费专项资金资助研究生项目(Yxm2019111,Yxm2019113)

第一作者简介: 索郎王青(1994—),男,藏族,四川阿坝人,硕士研究生,研究方向为图论与组合数学.E-mail: suolwq@163.com

通信作者简介: 田双亮(1965—),男,四川安岳人,教授,硕士研究生导师,研究方向为图论与组合优化、系统模拟与仿真等.E-mail: sl_tian@163.com

引理 2[13]　设 G 是一个简单连通图，对任意的 $u,v\in V(G)$，$e=uv\in E(G)$，则

1) $\mu(G)=\mu(G-e)+\mu(G-u-v)$； 2) $\mu(G)=\mu(G-v)+\sum_{x\in N_G(v)}\mu(G-\{v,x\})$.

引理 3[13]　若 $G_1,G_2,\cdots,G_k$ 是图 G 的连通分支，其中 $k\geqslant 2$，则

1) $\sigma(G)=\prod_{i=1}^{k}\sigma(G_i)$；2) $\mu(G)=\prod_{i=1}^{k}\mu(G_i)$.

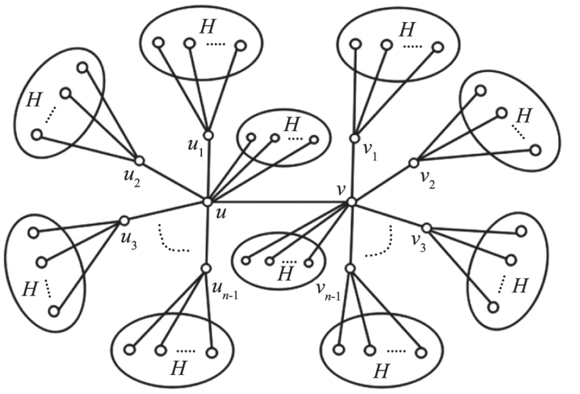

图 1　$S_n^2\circ H$

Fig.1 $S_n^2\circ H$

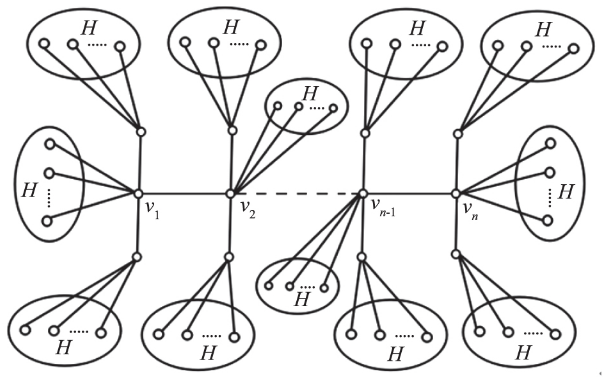

图 2 $M_n\circ H$

Fig.2 $M_n\circ H$

2　主要结果

定理 1　对任意正整数 $n(n\geqslant 3)$ 及 m 阶的任意图 H，有

$$\sigma(S_n^2\circ H)=(\sigma(H))^2\cdot(\sigma(H)+1)^{n-1}\cdot[\sigma(H)+1)^{n-1}+2(\sigma(H))^{n-2}].$$

证明　由引理 1~3 可得

$$\sigma(S_n^2\circ H)=\sigma(S_n^2\circ H-u_n)+\sigma(S_n^2\circ H-N_{S_n^2\circ H}[u_n])=$$
$$(\sigma(P_1\circ H))^{n-1}\cdot\sigma(H)\cdot\sigma(S_n\circ H)+(\sigma(P_1\circ H))^{n-1}\cdot(\sigma(H))^n=$$
$$\sigma(H)\cdot(\sigma(H)+1)^{n-1}\cdot[\sigma(H)\cdot(\sigma(H)+1)^{n-1}+(\sigma(H))^{n-1}]+(\sigma(H)+1)^{n-1}\cdot(\sigma(H))^n=$$
$$(\sigma(H))^2\cdot(\sigma(H)+1)^{n-1}\cdot[\sigma(H)+1)^{n-1}+2(\sigma(H))^{n-2}].$$

定理 2　对任意正整数 $n(n\geqslant 3)$ 及 m 阶的任意图 H，有

$$\sigma(M_n\circ H)=\frac{st^2+4s+2t-s^2t+(s+t)\cdot\sqrt{s^2t^2+4st^3}}{s^2t+4st^2+s\cdot\sqrt{s^2t^2+4st^3}}\cdot\left[\frac{st+\sqrt{s^2t^2+4st^3}}{2}\right]^n+$$
$$\frac{st^2+4s+2t-s^2t-(s+t)\cdot\sqrt{s^2t^2+4st^3}}{s^2t+4st^2-s\cdot\sqrt{s^2t^2+4st^3}}\cdot\left[\frac{st-\sqrt{s^2t^2+4st^3}}{2}\right]^n,$$

式中 $s=[\sigma(H)+1]^2$，$t=\sigma(H)$.

证明　由引理 1~3 可得

$$\sigma(M_n\circ H)=\sigma(M_n\circ H-v_n)+\sigma(M_n\circ H-N_{M_n\circ H}[v_n])=$$
$$\sigma(H)\cdot(\sigma(P_1\circ H))^2\cdot\sigma(M_{n-1}\circ H)+(\sigma(H))^3\cdot(\sigma(P_1\circ H))^2\cdot\sigma(M_{n-2}\circ H)=$$
$$\sigma(H)\cdot(\sigma(H)+1)^2\cdot\sigma(M_{n-1}\circ H)+(\sigma(H))^3\cdot(\sigma(H)+1)^2\cdot\sigma(M_{n-2}\circ H).$$

令 $s=[\sigma(H)+1]^2$，$t=\sigma(H)$，则其特征方程为 $x^2-stx-st^3=0$，该方程的根为

$$x_1=\frac{st+\sqrt{s^2t^2+4st^3}}{2},x_2=\frac{st-\sqrt{s^2t^2+4st^3}}{2},$$

所以该递推关系的一般解为 $\sigma(M_n\circ H)=c_1x_1^n+c_2x_2^n$. 又因为 $\sigma(M_1\circ H)=st+t^2$，$\sigma(M_2\circ H)=2st+t^2+st^3$，

则由$\begin{cases} c_1x_1+c_2x_2=st+t^2 \\ c_1x_1^2+c_2x_2^2=2st+t^2+st^3 \end{cases}$解得

$$c_1=\frac{st^2+4s+2t-s^2t+(s+t)\cdot\sqrt{s^2t^2+4st^3}}{s^2t+4st^2+s\cdot\sqrt{s^2t^2+4st^3}},c_2=\frac{st^2+4s+2t-s^2t-(s+t)\cdot\sqrt{s^2t^2+4st^3}}{s^2t+4st^2-s\cdot\sqrt{s^2t^2+4st^3}}.$$

因此

$$\sigma(M_n\circ H)=\frac{st^2+4s+2t-s^2t+(s+t)\cdot\sqrt{s^2t^2+4st^3}}{s^2t+4st^2+s\cdot\sqrt{s^2t^2+4st^3}}\cdot\left[\frac{st+\sqrt{s^2t^2+4st^3}}{2}\right]^n+$$
$$\frac{st^2+4s+2t-s^2t-(s+t)\cdot\sqrt{s^2t^2+4st^3}}{s^2t+4st^2-s\cdot\sqrt{s^2t^2+4st^3}}\cdot\left[\frac{st-\sqrt{s^2t^2+4st^3}}{2}\right]^n.$$

定理3 对任意正整数n,m,当$H=\overline{K}_m$时,有

$$\mu(S_n^2\circ\overline{K}_m)=\left[(m+1)^n+3(m+1)^{n-2}+\sum_{i=2}^{n-3}(m+1)^i\right]^2+(m+1)^{2n-2}.$$

证明 由引理1~3可得

$$\mu(S_n^2\circ\overline{K}_m)=\mu(S_n^2\circ\overline{K}_m-uv)+\mu(S_n^2\circ\overline{K}_m-u-v)=(\mu(S_n\circ\overline{K}_m))^2+(m+1)^{2n-2}=$$
$$(\mu(S_n\circ\overline{K}_m-uu_1)+\mu(S_n\circ\overline{K}_m-u-u_1))^2+(m+1)^{2n-2}=$$
$$((m+1)\cdot\mu(S_{n-1}\circ\overline{K}_m)\cdot(m+1)^{n-2})+(m+1)^{2n-2}=$$
$$\cdots\cdots=\left[(m+1)^n+3(m+1)^{n-2}+\sum_{i=2}^{n-3}(m+1)^i\right]^2+(m+1)^{2n-2}.$$

定理4 对任意正整数n,m,当$H=\overline{K}_m$时,有

$$\mu(M_n\circ\overline{K}_m)=\frac{a^2+a\cdot\sqrt{a^2+4(m+1)^4}+2(m+1)^4}{a^2+a\cdot\sqrt{a^2+4(m+1)^4}+4(m+1)^4}\cdot\left[\frac{a+\sqrt{a^2+4(m+1)^4}}{2}\right]^n+$$
$$\frac{a^2-a\cdot\sqrt{a^2+4(m+1)^4}+2(m+1)^4}{a^2-a\cdot\sqrt{a^2+4(m+1)^4}+4(m+1)^4}\cdot\left[\frac{a-\sqrt{a^2+4(m+1)^4}}{2}\right]^n,$$

式中$a=(m+1)^3+2(m+1)$.

证明 由引理1~3可得

$$\mu(M_n\circ\overline{K}_m)=\mu(M_n\circ\overline{K}_m-v_{n-1}v_n)+\mu(M_n\circ\overline{K}_m-v_{n-1}-v_n)=$$
$$\mu(P_3\circ\overline{K}_m)\cdot\mu(M_{n-1}\circ\overline{K}_m)+(m+1)^4\cdot\mu(M_{n-2}\circ\overline{K}_m)=$$
$$[(m+1)^3+2(m+1)]\cdot\mu(M_{n-1}\circ\overline{K}_m)+(m+1)^4\cdot\mu(M_{n-2}\circ\overline{K}_m).$$

令$a=(m+1)^3+2(m+1)$,则其特征方程为$x^2-ax-(m+1)^4=0$,该方程的根为

$$x_1=\frac{a+\sqrt{a^2+4(m+1)^4}}{2},\ x_2=\frac{a-\sqrt{a^2+4(m+1)^4}}{2},$$

所以该递推关系的一般解为$\mu(M_n\circ\overline{K}_m)=c_1x_1^n+c_2x_2^n$.

又因为$\mu(M_1\circ\overline{K}_m)=a$,$\mu(M_2\circ\overline{K}_m)=a^2+(m+1)^4$,则由$\begin{cases} c_1x_1+c_2x_2=a \\ c_1x_1^2+c_2x_2^2=a^2+(m+1)4 \end{cases}$解得

$$c_1=\frac{a^2+a\cdot\sqrt{a^2+4(m+1)^4}+2(m+1)^4}{a^2+a\cdot\sqrt{a^2+4(m+1)^4}+4(m+1)^4},\ c_2=\frac{a^2-a\cdot\sqrt{a^2+4(m+1)^4}+2(m+1)^4}{a^2-a\cdot\sqrt{a^2+4(m+1)^4}+4(m+1)^4}.$$

因此

$$\mu(M_n\circ\overline{K}_m)=\frac{a^2+a\cdot\sqrt{a^2+4(m+1)^4}+2(m+1)^4}{a^2+a\cdot\sqrt{a^2+4(m+1)^4}+4(m+1)^4}\cdot\left[\frac{a+\sqrt{a^2+4(m+1)^4}}{2}\right]^n+$$

$$\frac{a^2 - a \cdot \sqrt{a^2 + 4(m+1)^4} + 2(m+1)^4}{a^2 - a \cdot \sqrt{a^2 + 4(m+1)^4} + 4(m+1)^4} \cdot \left[\frac{a - \sqrt{a^2 + 4(m+1)^4}}{2}\right]^n.$$

3 结语

图的结构运算作为研究图的重要工具,有助于确定结构更为复杂的图的一些拓扑指标.本文给出了双星图与任意图的冠积以及毛毛虫树与任意图的冠积关于 M-S 指标和 H 指标的表达式,后续工作中还可以考虑进行边冠积、强积、半强积等关于 M-S 指标和 H 指标的计数和排序问题研究.

参考文献:

[1] HOSOYA H.Topological index.A new proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons [J].Bulletin of the Chemical Society of Japan,1971,44(9):2332-2339.

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

[3] GUTMAN I,CYVIN S J.Introduction to the theory of benzenoid hydrocarbons [M].Berlin: Springer,1989.

[4] YAN Z,LIU H Q,LIU H G.The maximal Merrifield-Simmons indices and minimal Hosoya indices of unicyclic graphs [J].MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry,2008,59(1):157-170.

[5] DENG H Y.The smallest Merrifield-Simmons index of (n,n+1)-graphs [J].Mathematical and Computer Modeling,2009,49(1/2):320-326.

[6] DENG H Y.The smallest Hosoya index of (n,n+1)-graphs [J].Journal of Mathematical Chemistry,2008,43(1):119-133.

[7] LIU Y,ZHUANG W,LIANG Z F.Largest Hosoya index and smallest Merrifield-Simmons index in tricyclic graphs [J].MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry,2015,73(1):195-224.

[8] XU K X,LI J X,ZHONG L P.The Hosoya indices and Merrifield-Simmons indices of graphs with connectivity at most k [J].Applied Mathematics Letters,2012,25(3):476-480.

[9] XU K X,GUTMAN I.The greatest Hosoya index of bicyclic graphs with given maximum degree [J].MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry,2011,66(3):795-824.

[10] 陈妹君,田双亮.特殊树的字典积的 Merrifield-Simmons 指标 [J].鲁东大学学报(自然科学版),2016,32(1):11-13.

[11] REYHANI M H,ALIKHANI S,IRANMANESH M A.Hosoya and Merrifield-Simmons indices of some classes of corona of two graphs [J].Transactions on Combinatorics,2012,1(4):1-7.

[12] PEDERSEN A S P,VESTERGAARD PD.Bounds on the number of vertex independent sets in a graph [J].Taiwanese Journal of Mathematics,2006,10(6):1575-1587.

[13] GUTMAN I,POLANSKY O E.Mathematical concepts in organic chemistry [M].Berlin: Springer,1986.

Merrifield-Simmons Index and Hosoya Index of Corona Product of Special Trees

SUO Langwangqing, TIAN Shuangliang, YANG Qing

(College of Mathematics and Computer Science,Northwest Minzu University,Lanzhou 730030,China)

Abstract: In this paper,the Merrifield-Simmons index and Hosoya index of corona product of binary star and caterpillar tree with any graphs were investigated respectively.The corresponding explicit expressions were also presented.

Keywords: caterpillar tree; binary star; Merrifield-Simmons index; Hosoya index; corona product

(责任编辑　李秀芳)