

A Kind of Graphs with the Second and Third Minimal Hosoya Index

Cuo Zhuoma

Department of Mathematics, Qinghai Normal University, Xining
Email: 2353498508@qq.com

Received: Dec. 19th, 2013; revised: Jan. 10th, 2014; accepted: Jan. 22nd, 2014

Copyright © 2014 Cuo Zhuoma. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited. In accordance of the Creative Commons Attribution License all Copyrights © 2014 are reserved for Hans and the owner of the intellectual property Cuo Zhuoma. All Copyright © 2014 are guarded by law and by Hans as a guardian.

Abstract: The Hosoya index of a graph is defined as the total number of matchings of the graph. Vertex gluing graph is defined as the cycle in graph only one common vertex. In this paper, we characterize the graphs with the second and third minimal Hosoya Index, respectively, among the connected graphs with m -matchings and the given cyclomatic number.

Keywords: Hosoya Index; m -Matching; Vertex Gluing Graph

一类图的第二小和第三小 Hosoya 指标

卓玛措

青海师范大学数学系, 西宁
Email: 2353498508@qq.com

收稿日期: 2013 年 12 月 19 日; 修回日期: 2014 年 1 月 10 日; 录用日期: 2014 年 1 月 22 日

摘要: 图的 Hosoya 指标是指这个图的所有匹配的个数。点粘接图是指图中所含的圈只有一个公共顶点的图。本文在包含 m -匹配的点粘接双圈图中刻画了具有第二小和第三小 Hosoya 指标的此类图, 并以此为基础在所有包含 m -匹配的点粘接图中刻画了具有第二小和第三小 Hosoya 指标的此类图。

关键词: Hosoya 指标; m -匹配; 点粘接图

1. 引言

Hosoya 指标最早由日本化学家 Haruo Hosoya 在文献[1]中引入了以结构描述符号为基础的分子图, 他将其命名为拓扑指标, 记作: Z 。并且他发现该指标与碳氢化合物的物理化学性质, 尤其是与它的沸点联系紧密。这个指标后来被命名为 Hosoya 指标。自此以后, 有很多作者研究了 Hosoya 指标^[2-7]。

本文所考虑的图都是有限的、无向的简单图。设图 G 是一个化学分子结构图模型, 即为一个具有 n 个顶点的连通图, 则图 G 的 Hosoya 指标 $Z(G)$, 是指一个图的所有匹配情况的数目之和, 其中包括空集。所谓 G 中的两边独立是指这两条边在 G 中不相邻。图 G 的一个 k -匹配是指 k 个相互独立的边组成的集合。 $Z(G, k)$ 表示图 G 的 k -匹配数。于是, Hosoya 指标是如下定义的: $Z(G) = \sum_{k \geq 0} Z(G, k)$, 即 $Z(G)$ 表示一个图中所有匹配情况的数目之和, 规定: 对任意图 $Z(G, 0) = 1$, $Z(G, 1)$ 等于图 G 的边数。令 $G(n)$ 表示 n 个顶点的一类图, 若我们将 $G(n)$

中所有图的 Hosoya 指标 Z_1, Z_2, \dots, Z_m 按递增的顺序排列为: $Z_1 < Z_2 < Z_3 < \dots < Z_m$, 则称 Z_1 所对应的图是此类图中 Hosoya 指标最小的图。同理, 我们称 Z_2 所对应的图是此类图中 Hosoya 指标第二小或次小的图。依此类推, 可定义此类图中 Hosoya 指标第三小、第四小、 \dots 、第 m 小的图。

Hou 在文献[8]中对于包含 m -匹配的树刻画了具有最小和第二小 Hosoya 指标的图。Yu 和 Tian 在文献[9]中对于包含 m -匹配的单圈图刻画了具有最小和第二小 Hosoya 指标的图。Ye 在文献[10]中对于包含 m -匹配的单圈图刻画了具有第三小至第六小 Hosoya 指标的图。并且在文献[9]中作者对于包含 m -匹配的点粘接双圈图刻画了具有最小 Hosoya 指标的图。本文在包含 m -匹配的点粘接双圈图中刻画了具有第二小和第三小 Hosoya 指标的此类图, 并以此为基础在所有包含 m -匹配的点粘接图中刻画了具有第二小和第三小 Hosoya 指标的此类图。本文提到的点粘接图是指图中所含的圈只有一个公共顶点的图。

2. 预备知识

设 M 是图 G 的一个匹配。如果点 v 和 M 中的一条边相连, 就称 M 饱和点 v , 记作: $v \in M$, 否则称 M 不饱和点 v , 记作 $v \notin M$ 。如果 M 饱和了图 G 的所有点, 则称 M 是完美匹配。如果图 G 中再也找不到一个匹配 M' , 且 $|M'| > |M|$, 则称 M 是最大匹配。显然, 完美匹配是最大匹配。我们用 $\alpha'(G)$ 表示 G 中最大匹配所含边数。

设 $G(n, t, m)$ 表示阶数为 n , $\alpha'(G) = m$ 并且含有 t 个三角形的点粘接图集。设 $U(n, m)$ 表示阶数为 n 且 $\alpha'(G) = m$ 的所有单圈图集。设 $B(n, m)$ 表示阶数为 n 且 $\alpha'(G) = m$ 的所有点粘接双圈图集。设图 $G_1(n, t, m)$ 是有一个公共顶点的 t 个三角形构成的图, 并且在此公共顶点上粘上 $m-t-1$ 条长度为 2 的路和 $n-2m+1$ 条悬挂边(如图 1)。简而言之, 我们可以分别用 $G_1(n, 1, m)$ 和 $G_1(n, 2, m)$ 表示 $U_1(n, m)$ 和 $B_1(n, m)$ (如图 1)。设图 $G_2(n, t, m)$

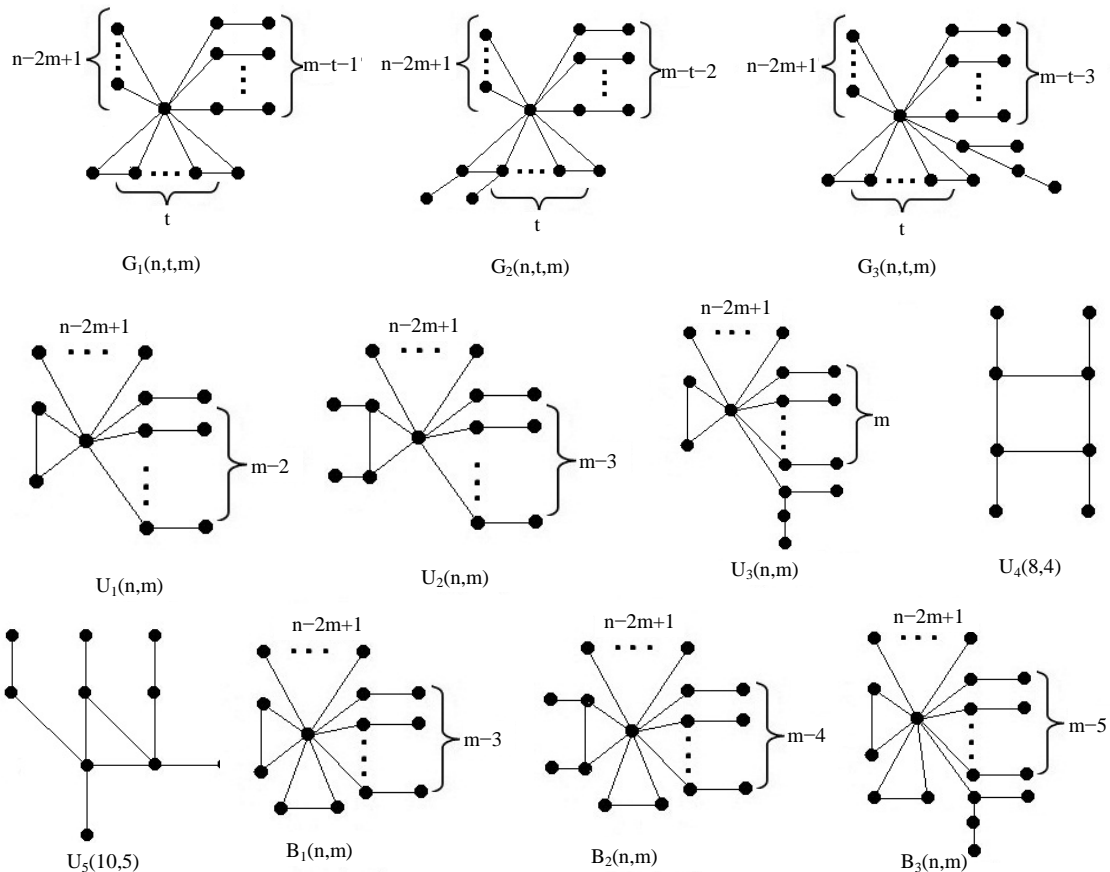


Figure 1. Some unicyclic graphs and bicyclic graphs with m -matching
图 1. 一些具有 m -匹配的单圈图和双圈图

也是有一个公共顶点的 t 个三角形构成的图, 并且在此公共顶点上粘上 $m-t-2$ 条长度为 2 的路和 $n-2m+1$ 条悬挂边, 最后将从 $G_1(n,t,m)$ 中取出的一条长度为 2 的路作为悬挂点粘在任意一个三角形的另外两个端点上(如图 1)。简而言之, 我们可以分别用 $G_2(n,1,m)$ 和 $G_2(n,2,m)$ 表示 $U_2(n,m)$ 和 $B_2(n,m)$ (如图 1)。设 $G_3(n,t,m)$ 是有一个公共顶点的 t 个三角形构成的图, 并且在此公共顶点上粘上 $m-t-3$ 条长度为 2 的路和 $n-2m+1$ 条悬挂边, 最后将从 $G_2(n,t,m)$ 中取出的长度为 2 的路粘在此处取出的长度为 2 的路的 2 度点上(如图 1)。同理, 我们可以分别用 $G_3(n,1,m)$ 和 $G_3(n,2,m)$ 表示 $U_3(n,m)$ 和 $B_3(n,m)$ (如图 1)。

若 $W \subseteq V(G)$, 则用 $G-W$ 表示 G 的子图, 这个子图是通过删去 W 中的所有点以及与这些点相关连的边而得到的。类似地, 若 $E' \subseteq E(G)$, 则 $G-E'$ 是 G 的子图, 这个子图是通过删去 E' 中的所有边以后得到的。若 $W = \{v\}$ 且 $E' = \{xy\}$, 则记作: $G-v$ 和 $G-xy$ 。用 $N_G(v)$ 表示图 G 中点 v 和点 v 的邻点组成的集合。

引理 1.^[7] 设 G 是一个图且 $v \in V(G)$, 设 v_1, v_2, \dots, v_l 是 v 的邻点, 则有:

$$Z(G) = Z(G-v) + \sum_{i=1}^l Z(G - \{v, v_i\})$$

引理 2.^[7] 设 G 是一个图且 uv 是图 G 的一条边, 则有:

$$Z(G) = Z(G-uv) + Z(G - \{u, v\})$$

由引理 2 可得:

推论 1. 设 G 是一个图。若 $u \in V(G)$ 是 G 的一个悬挂点且 v 是 u 的唯一的邻点, 则有:

$$Z(G) = Z(G-u) + Z(G - \{u, v\})$$

引理 3.^[7] 设图 G 是由 G_1, G_2, \dots, G_t t 个分支构成的, 则有:

$$Z(G) = \prod_{i=1}^t Z(G_i)$$

引理 4.^[7] 设 P_n 和 S_n 分别是 n 个点的路和星, 则对于所有 n 个点的树 T 有:

$$n = Z(S_n) \leq Z(T) \leq Z(P_n) = F_{n+1}$$

其中 F_n 是第 n 个 Fibonacci 数且: $F_0 = 0, F_1 = 1$ 。

引理 5.^[10] 设 G 是一个图, 并且 G_1 是图 G 的子图, 则有: $Z(G) \geq Z(G_1)$, 并且更进一步有: 若 $|E(G_1)| < |E(G)|$, 则有: $Z(G_1) < Z(G)$ 。

引理 6.^[10] 设 G 是一个图且 $\alpha'(G) = k (k \geq 1)$, 并且 $G \neq lK_1 \cup kK_2 (l \geq 0)$, 则有:

$$Z(G) \geq 5 \cdot 2^{k-2}$$

等号成立当且仅当 $G \cong P_4 \cup (k-2)K_2 \cup l'K_1, (l' \geq 0)$ 。

引理 7.^[9] 设 $G \in U(n,m) (n \geq 2m, m \geq 4)$, 则有:

$$Z(G) \geq 2^{m-2} (2n - 3m + 4)$$

等号成立当且仅当 $G \cong U_1(n,m)$ (如图 1)。

引理 8.^[9] 设 $G \in U(n,m) (n \geq 2m, m \geq 4)$, $G \notin U_1(n,m)$, 则有:

$$Z(G) \geq 2^{m-4} (10n - 15m + 13)$$

等号成立当且仅当 $G \cong U_2(n,m)$ (如图 1)。

引理 9.^[10] 设 $G \in U(n,m) \setminus \{U_1(n,m), U_2(n,m)\} (n \geq 2m, m \geq 4)$, 则有:

$$Z(G) \geq 2^{m-4} (10n - 15m + 14)$$

等号成立当且仅当 $G \in \{U_3(n, m), U_4(8, 4), U_5(10, 5)\}$ (如图 1)。

引理 10.^[9] 设 $G \in B(n, m) (n \geq 2m, m \geq 4)$, 则有:

$$Z(G) \geq 2^{m-2} (2n - 3m + 5)$$

等号成立当且仅当 $G \cong B_1(n, m)$ (如图 1)。

引理 11.^[9] 设 $G \in G(n, t, m)$, 其中 $n \geq 2m$, 并且 $0 \leq t \leq m-1$ 。则有:

$$Z(G) \geq 2^{m-2} (2n - 3m + t + 3)$$

等号成立当且仅当 $G \cong G_1(n, t, m)$ (如图 1)。

3. 主要结果和证明

3.1. $B(n, m)$ 中具有第二小和第三小 Hosoya 指标的图

定理 1. 设图 $G \in B(n, m)$, $G \notin B_1(n, m) (n \geq 2m, m \geq 4)$, 则有:

$$Z(G) \geq 2^{m-4} (10n - 15m + 18)$$

等号成立当且仅当 $G \cong B_2(n, m)$ 。

证明: 设图 $G \in B(n, m) (n \geq 2m, m \geq 4)$, 并且 M 是图 G 的一个 m -匹配。我们总可以从图 G 的圈中找出一条边 uv , 使得 $uv \notin M$, 则 $G-uv$ 是一个 n 个点的连通单圈图。此外, $\alpha'(G-uv) = m$ (因为 $G-uv$ 是 G 的一个子图, 由引理 5, 我们有 $\alpha'(G-uv) \leq \alpha'(G) = m$, 注意到 M 是 $G-uv$ 的一个 m -匹配, 我们有: $\alpha'(G-uv) \geq m$, 因此, $\alpha'(G-uv) = m$)。因此 $G-uv \in U(n, m)$, 下面我们将分以下三种情形讨论:

1) $G-uv \cong U_1(n, m)$, 且 $G \cong B_1(n, m)$, 则 $G \in \{B_2(n, m), G_1, G_2, G_3, G_4\}$ (G_1, G_2, G_3, G_4 见图 2)。

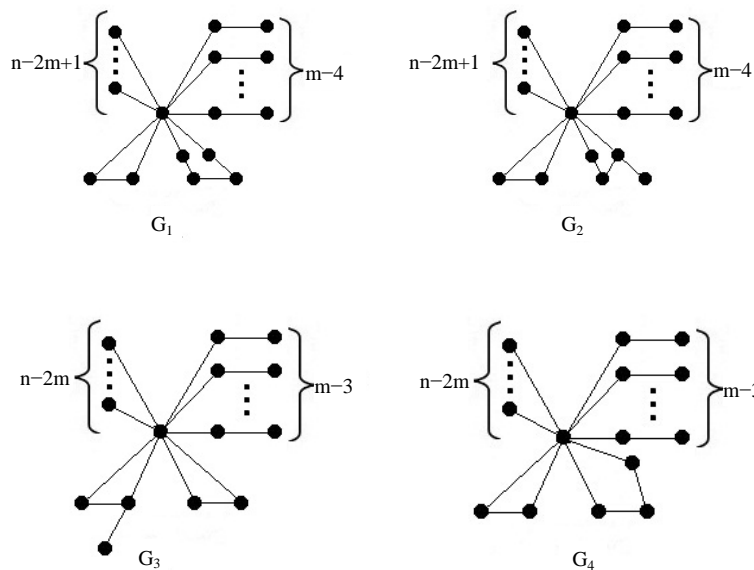


Figure 2. Some bicyclic graphs with m -matching
图 2. 一些具有 m -匹配的双圈图

由引理 1 直接计算可得:

$$Z(B_2(n, m)) = 2^{m-4} (10n - 15m + 18)$$

$$Z(G_1) = 2^{m-4}(10n - 15m + 22)$$

$$Z(G_2) = 2^{m-4}(10n - 15m + 20)$$

$$Z(G_3) = 2^{m-4}(12n - 18m + 18)$$

$$Z(G_4) = 2^{m-4}(12n - 18m + 22)$$

由此，由上可知： $Z(G_i) > Z(B_2(n, m))$, $(i=1, 2, 3, 4)$ 。

2) $G - uv \neq U_1(n, m)$ ，且 $G \neq B_1(n, m)$ 。由引理 8 得： $Z(G - uv) \geq 2^{m-4}(10n - 15m + 13)$ 等号成立当且仅当 $G - uv \cong U_2(n, m)$ 。

注意到： $G - \{u, v\}$ 是 $(m-2)$ -匹配，则有： $Z(G - \{u, v\}) \geq 2^{m-2}$ 等号成立当且仅当 $G - \{u, v\} \cong (n-2m+2)K_1 \cup (m-2)K_2$ 。容易看出： uv 必有一点是 $U_2(n, m)$ 中的一个 $(n-m)$ 度点，另一个是 $U_2(n, m)$ 中的一个 3 度点，这种情形是不可能出现的。由引理 6 得： $Z(G - \{u, v\}) \geq 5 \cdot 2^{m-4}$ 等号成立当且仅当 $G - \{u, v\} \cong (m-4)K_2 \cup P_4 \cup (n-2m+2)K_1$ 。

由引理 2 得：

$$\begin{aligned} Z(G) &= Z(G - uv) + Z(G - \{u, v\}) \\ &\geq 2^{m-4}(10n - 15m + 13) + 5 \cdot 2^{m-4} \\ &= 2^{m-4}(10n - 15m + 18) \\ &= Z(B_2(n, m)) \end{aligned}$$

等号成立当且仅当 $G - uv \cong U_2(n, m)$ ，且 $G - \{u, v\} \cong (m-2)K_2 \cup P_4 \cup (n-2m+2)K_1$ 。容易看出 uv 中的一个端点是 $U_2(n, m)$ 中的一个 $(n-m)$ 度点，另一个端点是 $U_2(n, m)$ 中一个邻接于 2 度点的悬挂点，因此等号成立当且仅当 $G \cong B_2(n, m)$ 。

3) $G - uv \notin \{U_1(n, m), U_2(n, m), U_4(8, 4), U_5(10, 5)\}$ 。由引理 9 得：

$$Z(G - uv) \geq 2^{m-4}(10n - 15m + 14)$$

等号成立当且仅当 $G - uv \cong U_3(n, m)$ 。

注意到： $G - \{u, v\}$ 是 $(m-2)$ -匹配，则有： $Z(G - \{u, v\}) \geq 2^{m-2}$ 等号成立当且仅当

$$G - \{u, v\} \cong (n-2m+2)K_1 \cup (m-2)K_2。$$

从而有：

$$\begin{aligned} Z(G) &= Z(G - uv) + Z(G - \{u, v\}) \\ &\geq 2^{m-4}(10n - 15m + 14) + 2^{m-2} \\ &= 2^{m-4}(10n - 15m + 18) \\ &= Z(B_2(n, m)) \end{aligned}$$

等号成立当且仅当 $G - uv \cong U_3(n, m)$ ，且 $G - \{u, v\} \cong (m-2)K_2 \cup (n-2m+2)K_1$ ，此时 uv 的一个端点必是 $U_3(n, m)$ 的一个 $(n-m)$ 度点，另一个是邻接于一个 3 度点的 2 度点，从而此时： $Z(G) \geq Z(B_2(n, m))$ 。综上所述，定理得证。

类似定理 1 的证明，并且根据引理 5、引理 6、引理 8、引理 5 和定理 1 可得下面的结果：

定理 2. $G \in B(n, m)$ ， $G \notin \{B_1(n, m), B_2(n, m)\}$ ($n \geq 2m, m \geq 4$)，则：

$$Z(G) \geq 2^{m-4}(10n - 15m + 19)$$

等号成立当且仅当 $G \cong B_3(n, m)$ 。

3.2. $G(n, t, m)$ 中具有第二小和第三小 Hosoya 指标的图

对于图 $G(n, t, m)$ ，我们根据引理 8 和定理 1 可以得到下面的一般结果：

定理 3. 设 G 是 $G(n, t, m)$ 中的一个图，并且 $G \notin G_1(n, t, m)$ ，其中 $n \geq 2m$ ，并且 $1 \leq t \leq m-1$ 。则：

$$Z(G) \geq 2^{m-4}(10n - 15m + 5t + 8)$$

等号成立当且仅当 $G \cong G_2(n, t, m)$ (如图 1)。

证明： 根据引理 8 可知结论对所有的 $2 \leq t \leq m-1$ 均成立。我们将对 t 进行归纳来证明以上结论。

当 $t=2$ 时，根据定理 1 可知结论成立，现在我们假设当 $t=k$ ($k \geq 3$) 时结论成立。

设图 G 是 $G(n, k+1, m)$ ($n \geq 2m, 3 \leq k \leq m-2$) 中的一个图并且 M 是图 G 的一个 m -匹配。我们总可以在 G 的一个圈中找到一条边 uv 使得 $uv \notin M$ 。很容易得 $G-uv \in G(n, k, m)$ ($n \geq 2m, 3 \leq k \leq m-2$)。(因为 $G-uv$ 是 G 的一个子图，所以有 $\alpha'(G-uv) \leq \alpha'(G) = m$ 。注意到 M 是 $G-uv$ 的一个 m -匹配，则有 $\alpha'(G-uv) \geq m$ 。因此 $\alpha'(G-uv) = m$ 。)

根据归纳假设可得：

$$Z(G-uv) \geq 2^{m-4}(10n - 15m + 5k + 8) \quad \text{①}$$

等号成立当且仅当 $G-uv \cong G_2(n, k, m)$ 。注意到 $G-\{u, v\}$ 有一个 $(m-2)$ -匹配，则有： $Z(G-\{u, v\}) \geq 2^{m-2}$ 。

等号成立当且仅当 $G-\{u, v\} \cong G_2(n-2m+2)K_1 \cup U(m-2)K_2$ ，容易看出 uv 中必有一个点是 $G_2(n, k, m)$ 中的一个 $(n-m+k-1)$ 度点，另一个端点是 $G_2(n, k, m)$ 中的一个 3 度点，这种情形是不可能的。由引理 6 得：

$$Z(G-\{u, v\}) \geq 5 \cdot 2^{m-4} \quad \text{②}$$

等号成立当且仅当 $G-\{u, v\} \cong (m-4)K_2 \cup P_4 \cup (n-2m+2)K_1$ 。由引理 2 和不等号①和②得：

$$\begin{aligned} Z(G) &= Z(G-uv) + Z(G-\{u, v\}) \geq 2^{m-4}(10n - 15m + 5k + 8) + 5 \cdot 2^{m-4} \\ &= 2^{m-4}(10n - 15m + 5k + 13) \\ &= (G_2(n, k+1, m)) \end{aligned} \quad \text{③}$$

③的等号成立当且仅当①和②中的等号同时成立。①中的等号成立当且仅当 $G-uv \cong G_2(n, k, m)$ 。②中的等号成立当且仅当 $G-\{u, v\} \cong (m-4)K_2 \cup P_4 \cup (n-2m+2)K_1$ 。

注意到：若 $G \in G(n, k+1, m)$ ， $G-uv \cong G_2(n, k, m)$ ， $G-\{u, v\} \cong (m-4)K_2 \cup P_4 \cup (n-2m+2)K_1$ 。根据 $3 \leq k \leq m-2$ ，容易看出 uv 中必有一个端点是 $G_2(n, k, m)$ 中的一个 $(n-m+k-1)$ 度点，另一个端点是 $G_2(n, k, m)$ 的一个与 2 度点相邻接的悬挂点。于是③的等号成立当且仅当 $G \cong G_2(n, k+1, m)$ 。定理得证。

类似定理 3 的证明，并且根据引理 9 和定理 2 可得下面的结果：

定理 4. 设 G 是 $G(n, t, m)$ 中的一个图，并且 $G \notin \{G_1(n, t, m), G_2(n, t, m)\}$ ，其中 $n \geq 2m$ ，并且 $1 \leq t \leq m-1$ 。则：

$$Z(G) \geq 2^{m-4}(10n - 15m + 5t + 9)$$

等号成立当且仅当 $G \cong G_3(n, t, m)$ 。

参考文献 (References)

- [1] Hosoya, H. (1971) Topological index, a newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydro-

carbons. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **44**, 2332-2339.

- [2] Cyvin, S.J. and Gutman, I. (1989) Hosoya index of fused molecules. *MATCH: Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **23**, 89-94.
- [3] Cyvin, S.J., Gutman, I. and Kolakovic, N. (1989) Hosoya index of some polymers. *MATCH: Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **24**, 105-117.
- [4] Gutman, I. (1988) On the Hosoya index of very large molecules. *MATCH: Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **23**, 95-103.
- [5] Turker, L. (2003) Contemplation on the Hosoya indices. *Journal of Molecular Structure: Theochem*, **623**, 57-77.
- [6] Bondy, J.A. and Murty, U.S.R. (1976) Graph theory with applications. North-Holland, Amsterdam.
- [7] Zhang, L.Z. and Tian, F. (2003) Extremal catacondensed benzenoids. *Journal of Mathematical Chemistry*, **34**, 111-122.
- [8] Hou, Y.P. (2002) On acyclic systems with minimal Hosoya index. *Discrete Applied Mathematics*, **119**, 251-257.
- [9] Yu, A.M. and Tian, F. (2006) A Kind of graphs with minimal Hosoya indices and maximal Merrifield-Simmons indices. *MATCH: Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **55**, 103-118.
- [10] Ye, C.F. (2012) Unicyclic graphs with the third smallest to sixth smallest Hosoya Index. *MATCH: Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **55**, 593-604.