文章编号:1672-058X(2012)06-0004-05

给定悬挂点的三圈图的零阶广义 Randic 指数

詹丽丽,刘素勤
(安徽大学 数学科学学院,合肥 230039)

摘　要:对于简单的连通图 G,它的零阶广义 Randic 指数 $^0R_\alpha(G)$ 定义为 $\sum_{v\in V(G)}[d_G(v)]^\alpha$,其中 α 是一个给定的实数,$d_G(v)$ 是 G 中顶点 v 的度. 简单连通图 G 的零阶广义 Randic 指数是化学图论中一个重要的拓扑指数,其在化学领域中有着广泛的研究及应用. 基于此对于任意的 $\alpha(\neq 0,1)$,它给出了顶点个数为 n,悬挂点为 k 的所有三圈图的零阶广义 Randic 指数 $^0R_\alpha$ 的一些紧的界.

关键词:三圈图;零阶广义 Randic 指数;悬挂点;紧的界
中图分类号:O157.6　　**文献标志码:** A

1　概　述

给定简单连通图 $G=(V(G),E(G))$,其中 $V(G)$,$E(G)$ 分别表示 G 的顶点集和边集. 图 G 的 Randic 指数定义为 $R(G)=\sum_{(u,v)\in E(G)}[d_G(u)d_G(v)]^{-\frac{1}{2}}$,其中 $d_G(u)$ 表示顶点 u 的度数[1].

Randic 证实这一指数是和相关的各种物理化学性质不同类别的有机化合物密切相关的[1]. Randic 指数和它的一些变式受到广泛关注,已运用于很多方面. 特别地,零阶广义 Randic 指数定义[2]为 $^0R_\alpha(G)=\sum_{v\in V(G)}[d_G(v)]^\alpha$,其中 α 为任意实数. 一些好的结果能在文献[2-11]中找到.

此处研究含有 k 个悬挂点的简单连通三圈图的一般 $^0R_\alpha$ 的极值价值,以及一些有上界和下界的的一类图. 因为 $^0R_0(G)=|V(G)|$ 和 $^0R_1(G)=2|V(G)|+2$,故只需考虑 $\alpha\neq 0,1$.

现在来介绍一些符号和定义,未定义的图论的术语和符号,可参考文献[12]. C_n 表示有 n 个顶点的圈;图 G 中顶点的个数称为图的阶;T_n 是有 n 个顶点和 $n+2$ 条边的简单连通三圈图;度数为 1 的顶点称悬挂点;在此用 $T_{n,k}(n-k>5)$ 表示有 n 个顶点,k 个悬挂点的三圈图. 引进度序列 $D(G)=(d_1,d_2,\cdots,d_n)$,其中 d_i 表示第 i 个点的度数,且 $d_1\geqslant d_2\geqslant\cdots\geqslant d_n$. 则含有度序列 $D=(d_1,d_2,\cdots,d_n)$ 的一般零阶广义 Randic 指数 $^0R_\alpha(D)=\sum_{i=1}^n d_i^\alpha$,其中 α 是实数. 对任意图 G,有

令 $D_{n,k}(n-k\geqslant 5)=\{(d_1,d_2,\cdots,d_n)\mid d_1\geqslant d_2\geqslant\cdots\geqslant d_n$ are positive int egers with $d_{n-k}\geqslant 2,d_{n-k+1}=1$ and $\sum_{i=1}^n d_i=2n+4\}$.

收稿日期:2011-11-12;**修回日期:**2011-12-21.

作者简介:詹丽丽(1987-),女,安徽宣城人,硕士研究生,从事组合数学研究.

$$\text{令 } D^0_{n,k}=\begin{cases} D_{n,k} & \text{if } n-k>6\\ D_{n,k}\backslash(n,\overbrace{2,\cdots,2}^{5},\overbrace{1,\cdots,1}^{n-6}) & \text{if } n-k=6\\ D_{n,k}\backslash(n,3,2,2,2,\overbrace{1,\cdots,1}^{n-5})\backslash(n+1,2,2,2,2,\overbrace{1,\cdots,1}^{n-5}) & \text{if } n-k=5\end{cases}$$

令 $D'_{n,k}=\{D(G)\mid G\in T_{n,k}\}$,注意到 $D=(d_1,d_2,\cdots,d_n)\in D_{n,k}$,在 $d_1,d_2,\cdots,d_n$ 中有 k 个度等于 1 的点,即 $d_{n-k+1}=d_{n-k+2}=\cdots=d_n=1$,且 $D_{n,k}'\subseteq D^0_{n,k}\subseteq D_{n,k}$. 令 $D_{1(n,k)}=(\overbrace{3+\mu_{n,k},\cdots,3+\mu_{n,k}}^{k+4-\lambda_{n,k}},\overbrace{2+\mu_{n,k},\cdots,2+\mu_{n,k}}^{n-2k-4+\lambda_{n,k}},\overbrace{1,\cdots,1}^{k})$,其中 $\mu_{n,k}=\left|\dfrac{k+3}{n-k}\right|$,$\lambda_{n,k}=(n-k)\mu_{n,k}$,这些将在引理 5(i)中证明,且

$$D_2(n,k)=\begin{cases}(k+6,\overbrace{2,\cdots,2}^{n-k-1},\overbrace{1,\cdots,1}^{k}) & \text{if } n-k>6\\ (k+5,3,2,2,2,2,\overbrace{1,\cdots,1}^{n-6}) & \text{if } n-k=6\\ (k+4,3,3,2,2,\overbrace{1,\cdots,1}^{n-5}) & \text{if } n-k=5\end{cases}$$

不难证明 $D_1(n,k),D_2(n,k)\in D^0_{n,k}$.

其余的如下. 在第 2 部分,确定正整数的序列,即 $D_1(n,k)$ 和 $D_2(n,k)$,含有 $D^0_{n,k}$ 的零阶 Randic 指数极值,能看出 $D_1(n,k)$ 和 $D_2(n,k)$ 都是一些阶为 n 和悬挂点为 k 的三圈图的度序列. 在第 3 部分,可以表明,在三圈图 $T_{n,k}$,在 $D^0_{n,k}$ 中有极值的序列仍然是极值图的度序列(图 1 – 图 4).

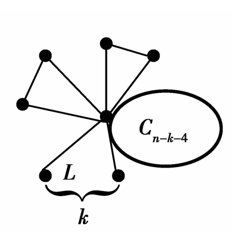

图 1　$T''_{n,k}(n-k)>6$

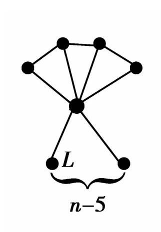

图 2　$T''_{n,n-5}$

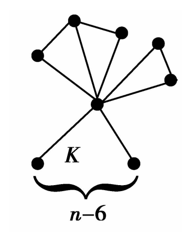

图 3　$T''_{n,n-6}$

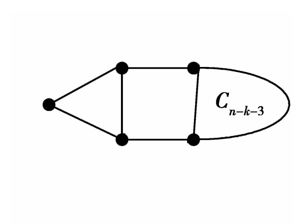

图 4　H_{n-k}

2　引　理

在这部分,给定一些将被用于结果的引理.

引理 1[8]　若 $x,y\in N,\alpha\in R$,且满足 $x-2\geqslant y\geqslant 1$,则

$$\begin{cases}(x-1)^\alpha+(y+1)^\alpha<x^\alpha+y^\alpha & \text{if } \alpha<0 \text{ or } \alpha>1\\ (x-1)^\alpha+(y+1)^\alpha>x^\alpha+y^\alpha & \text{if } 0<\alpha<1\end{cases}$$

引理 2[8]　若 $x,y\in N,\alpha\in R$,且满足 $x\geqslant y\geqslant 2$,则

$$\begin{cases}(x+1)^\alpha+(y-1)^\alpha>x^\alpha+y^\alpha & \text{if } \alpha<0 \text{ or } \alpha>1\\ (x+1)^\alpha+(y-1)^\alpha<x^\alpha+y^\alpha & \text{if } 0<\alpha<1\end{cases}$$

引理 3　若 $D=(d_1,d_2,\cdots,d_n)\in D_{n,k}$且有 d_i,d_j 满足 $d_i-2\geqslant d_j\geqslant 2$,则存在另一个整数序 $D'\in D_{n,k}$满足

$$\begin{cases}{}^0R_\alpha(D)>{}^0R_\alpha(D') & \text{for } \alpha<0 \text{ or } \alpha>1\\ {}^0R_\alpha(D)>{}^0R_\alpha(D') & \text{for } 0<\alpha<1\end{cases}$$

引理 4 若 $D=(d_1,d_2,\cdots,d_n)\in D_{n,k}$,且 d_i,d_j 满足 $d_i\geqslant d_j\geqslant 3$,则存在另一整数序 $D'\in D_n$ 满足

$$\begin{cases}{}^0R_\alpha(D)\ <{}^0R_\alpha(D') & \text{for } \alpha<0 \text{ or } \alpha>1\\ {}^0R_\alpha(D)\ >{}^0R_\alpha(D') & \text{for } 0<\alpha<1\end{cases}$$

引理 5 若 $D\in D^0_{n,k}$,有

(i) ${}^0R_\alpha(D)=\begin{cases}\min\limits_{D'\in D^0_{n,k}}{}^0R_\alpha(D') & \text{for } \alpha<0 \text{ or } \alpha>1\\ \max\limits_{D'\in D^0_{n,k}}{}^0R_\alpha(D') & \text{for } 0<\alpha<1\end{cases}$,则 $D=D_1(n,k)$.

(ii) 若${}^0R_\alpha(D)=\begin{cases}\max\limits_{D'\in D^0_{n,k}}{}^0R_\alpha(D') & \text{for } \alpha<0 \text{ or } \alpha>1.\\ \min\limits_{D'\in D^0_{n,k}}{}^0R_\alpha(D') & \text{for } 0<\alpha<1\end{cases}$,则 $D=D_2(n,k)$

证明 (i) 假设 $D_0\in D_{n,k}$,${}^0R_\alpha(D)=\begin{cases}\min\limits_{D'\in D^0_{n,k}}{}^0R_\alpha(D') & \text{for } \alpha<0 \text{ or } \alpha>1\\ \max\limits_{D'\in D^0_{n,k}}{}^0R_\alpha(D') & \text{for } 0<\alpha<1\end{cases}$.

通过引理 3,$D_0=(\overbrace{\Delta,\cdots\Delta}^{x},\overbrace{\Delta-1,\cdots,\Delta-1}^{n-k-x},\overbrace{1,\cdots,1}^{k})$,其中 Δ 和 x 均为正整数,且 $1\leqslant x\leqslant n-k$. 考虑到 D_0 顶点度的和,有

$$k+x\Delta+(n-k-x)(\Delta-1)=2n+4\Rightarrow x=3n-2k+4-(n-k)\Delta\Rightarrow$$

$$1\leqslant 3n-2k+2-(n-k)\Delta\leqslant n-k\Rightarrow\frac{2n-k+4}{n-k}\leqslant\Delta\leqslant\frac{3n-2k+3}{n-k}\Rightarrow$$

$$2+\frac{k+4}{n-k}\leqslant\Delta\leqslant 3+\frac{k+3}{n-k}\Rightarrow 2+\left|\frac{k+4}{n-k}\right|\leqslant\Delta\leqslant 3+\left|\frac{k+3}{n-k}\right|$$

因为 $2+\left|\frac{k+4}{n-k}\right|=3+\left|\frac{k+3}{n-k}\right|$,$\Delta=3+\left|\frac{k+3}{n-k}\right|=3+\mu_{n,k}$,$\lambda_{n,k}=(n-k)\mu_{n,k}$,所以

$$x=3n-2k+4-(n-k)\Delta=3n-2k+4-(n-k)(3+\mu_{n,k})=k+4-\lambda_{n,k}$$

且 $n-k-x=n-2k-4+\lambda_{n,k}$,所以 $D_0=D_1(n,k)$.

很自然地,$D=D_1(n,k)$,因为 $D_0=D_1(n,k)\in D^0_{n,k}$和 $D^0_{n,k}\subseteq D_{n,k}$.

(ii) 假设 $D_3\in D_{n,k}$,${}^0R_\alpha(D_3)=\begin{cases}\max\limits_{D'\in D_{n,k}}{}^0R_\alpha(D') & \text{for } \alpha<0 \text{ or } \alpha>1\\ \min\limits_{D'\in D_{n,k}}{}^0R_\alpha(D') & \text{for } 0<\alpha<1\end{cases}$.

由引理 4,$D_3=(\Delta,\overbrace{2,\cdots,2}^{n-k-1},\overbrace{1,\cdots,1}^{k})$,其中 Δ 为正整数. 由于 $D_3\in D_{n,k}$,所以 $\Delta+2(n-k-1)+k=2n+4$,即 $\Delta=k+6$,进一步得到 $D_3=(k+6,\overbrace{2,\cdots,2}^{n-k-1},\overbrace{1,\cdots,1}^{k})$.

若 $n-k>6$,则 $D=D_3=D_2(n,k)$,因为 $D^0_{n,k}=D_{n,k}$.

若 $n-k=6$,即 $n-k=6$,则

$$D_{n,k}=\{(d_1,d_2,d_3,d_4,\overbrace{1,\cdots,1}^{n-5})\mid d_1\geqslant d_2\geqslant d_3\geqslant d_4\geqslant 2 \text{ and } d_1+d_2+d_3+d_4=k+14\}$$

通过以上证明,在所有的 $D'\in D_{n,k}$中,D_3 有最大(最小)零阶 Randic 指数${}^0R_\alpha(D')$,其中 $\alpha<0$ 或 $\alpha>1(0<$

$\alpha<1$). 假设在所有的 $D'\in D_{n,k}$ 中, $D_4=(x_1,x_2,x_3,x_4,x_5,\overbrace{1,\cdots,1}^{n-6})$ 有次大(次小)零阶 Randic 指数 ${}^0R_\alpha(D')$, 其中 $\alpha<0$ 或 $\alpha>1$($0<\alpha<1$), 则得到 $D_4=(k+5,3,2,2,2,2,\overbrace{1,\cdots,1}^{n-6})$. 事实上, 能通过引理 2 一步得到 $x_1=k+5$, $x_2=3$, $x_3=x_4=x_5=x_6=2$. 首先, 假设 $x_6\geqslant3$, 则 $x_1\geqslant x_6\geqslant3$. 令 $\tilde{D}_4=(x_1+1,x_2,x_3,x_4,x_5,x_6-1,\overbrace{1,\cdots,1}^{n-5})$, 所以, 由引理 2, 有

$$\begin{cases}{}^0R_\alpha(\tilde{D}_4)>{}^0R_\alpha(D_4) & \text{for } \alpha<0 \text{ or } \alpha>1\\ {}^0R_\alpha(\tilde{D}_4)<{}^0R_\alpha(D_4) & \text{for } 0<\alpha<1\end{cases}$$

且 $\tilde{D}_4\neq D_3$, 这和 D_4 是相反的, 则 $x_6=2$. 相同地, 也能得到 $x_3=x_4=x_5=2$ 且 $x_2=3$. 所以, $D=D_4=D_2(n,n-6)$. 相似地, 能证明 $D_{n,n-5}=D^0_{n,n-5}(n+1,2,2,2,2,\overbrace{1,\cdots,1}^{n-5})(n,3,2,2,2,\overbrace{1,\cdots,1}^{n-5})$, 其中 $n-k=5$.

在下列引理中, 能得到 $D_1(n,k)$ 和 $D_2(n,k)$ 是一些阶为 n 和悬挂点为 k 的三圈图的度序列.

引理 6　$D_1(n,k),D_2(n,k)\in D'_{n,k}$.

证明　首先, $D_1(n,k)\in D'(n,k)$, H_{n-k} 是由 C_3,C_4,C_{n-k-3} 组成, 如图 4 所示, C_3 和 C_4 有一共同边, C_4 与 C_{n-k-3} 有一公共边, 其中两公共边不同. 若 $k<n-k-3$, 即 $k<\frac{1}{2}(n-3)$, 取任意 k 点, 记为 $v_1,v_2,\cdots,v_k$, H_{n-k} 中有 $n-k-4$ 个度为 2 的点, 从 H_{n-k} 中通过连结一个悬挂点 u_i 到 v_i 构成的图记为 $T'_{n,k}$, 其中 $i=1,2,\cdots,k$.

若 $k\geqslant n-k-3$, 即 $k\geqslant\frac{1}{2}(n-3)$, 在 H_{n-k} 中附加一个悬挂点到每个度为 2 的点上, 得到的图记为 $F_{2n-2k-4}$, 则 $F_{2n-2k-4}$ 中除悬挂点外, 其余点的度都为 3. 在 $F_{2n-2k-4}$ 中, 在 $n-2k-4+\lambda_{n,k}$ 个度为 3 的每个点上附加 $\mu_{n,k}-1$ 个悬挂点且在剩下的度为 3 的点上附加 $\mu_{n,k}$ 个悬挂点后得到的图, 记为 $T'_{n,k}$. 不难发现, $T'_{n,k}\in T_{n,k}$ 且 $D(T'_{n,k})=D_1(n,k)$, 所以, $D_1(n,k)\in D'_{n,k}$.

其次, 证明 $D_2(n,k)\in D'_{n,k}$. 当 $n-k>6$ 时, 令 $T''_{n,k}$ 是由两个 C_3 和 C_{n-k-4} 组成, 如图 1 所示, 且 3 个图交于一个公共点, 且有 k 个悬挂点连结在此公共点. 当 $n-k=6$, $n-k=5$ 时, 得到 $D'_{n,n-6}$(图 3), $D'_{n,n-5}$(图 2). 很明显地, $T''_{n,k}\in T_{n,k}$ 且 $D(T''_{n,k})=D_2(n,k)$, 其中 $n-k\geqslant5$, 所以 $D_2(n,k)\in D'_{n,k}$.

3　结　论

令 $T(n,k)=k+(n-2k-4+\lambda_{n,k})(2+\mu_{n,k})^\alpha+(k+4-\lambda_{n,k})(3+\mu_{n,k})^\alpha$, 且

$$\Phi(n,k)=\begin{cases}k+(n-k-1)\cdot2^\alpha+(k+6)^\alpha & \text{if } n-k>6\\ k+3^\alpha+4\cdot2^\alpha+(k+5)^\alpha & \text{if } n-k=6\\ k+2\cdot(2^\alpha)+2\cdot(3^\alpha)+(k+4)^\alpha & \text{if } n-k=5\end{cases}$$

确定三圈图 $T_{n,k}$ 的零阶广义 Randic 指数的且给定度序列的极值.

定理 1　令 $G\in T_{n,k}$, (i) 若 $\alpha<0$ 或 $\alpha>1$, 则 $T(n,k)\leqslant{}^0R_\alpha(G)\leqslant\Phi(n,k)$ 且有 ${}^0R_\alpha(G)=T(n,k)(\Phi(n,k))$ 当且仅当 $D(G)=D_1(n,k)(D(G)=D_2(n,k))$; (ii) 若 $0<\alpha<1$, 则 $\Phi(n,k)\leqslant{}^0R_\alpha(G)\leqslant T(n,k)$, 且有 ${}^0R_\alpha(G)=\Phi(n,k)(T(n,k))$ 当且仅当 $D(G)=D_2(n,k)(D(G)=D_1(n,k))$.

证明　只需验证定理 1(i), 因为定理 1(ii) 是相似的, 故省略.

假设 $\alpha<0$ 或 $\alpha>1$, 首先, 容易看出: 若 $D(G)=D_1(n,k)(D_2(n,k))$, 则 ${}^0R_\alpha(G)=T(n,k)(\Phi(n,k))$.

其次,由引理5,有

$$T(n,k)={}^0R_\alpha(D_1(n,k))=\min_{D'\in D^0_{n,k}}{}^0R_\alpha(D')\leqslant\min_{D'\in D'_{n,k}}{}^0R_\alpha(D')\leqslant{}^0R_\alpha(G)\leqslant\max_{D'\in D'_{n,k}}{}^0R(D')\leqslant$$

$$\max_{D'\in D^0_{n,k}}{}^0R_\alpha(D')={}^0R_\alpha(D_2(n,k))=\Phi(n,k)$$

$${}^0R_\alpha(G)=T(n,k),T(n,k)={}^0R_\alpha(D_1(n,k))=\min_{D'\in D^0_{n,k}}{}^0R_\alpha(D')=\min_{D'\in D'_{n,k}}{}^0R_\alpha(D')={}^0R_\alpha(G)$$

由引理5和引理6,$D(G)=D_1(n,k)$. 相似地,可得到,若${}^0R_\alpha(G)=\Phi(n,k)$,则$D(G)=D_2(n,k)$.

所以,定理1(i)成立.

4 结束语

现在,给定正整数序列的一般零阶 Randic 指数的定义:它是处理含有一般零阶 Randic 指数的图 G 的重要方法,若能得到一个适合的包含正整数的一组列序集合 D,其中包含 D'含有 G 中所有图的度序列,一般零阶 Randic 指数的序列极值可以是在 G 某些图的度序列.

参考文献:

[1] RANDIC M. On the characterization of molecular branching[J]. J Am Chem Soc,1975(97):6609-6615

[2] PAVLOVIC L. Maximal value of the zeroth-order Randic index[J]. Discr Appl,2003(127):615-626

[3] CHEN S,DENG H. Extremal$(n,n+1)$-graphs with respected to zeroth-order general Randic index[J]. J Math Chem,2007(42):555-564

[4] ZHANG S,WANG W,CHENG T C E. Bicyclic graphs with the first three smallest and largest values of the first general Zagreb index[J]. MATCH Commun Math Chem,2006(56):579-592

[5] HU Y,LI X,SHI Y,et al. Gutman,On molecular graphs with smallest zeroth-order general Randic index[J]. MATCH Commun. Math Comput Chem,2005(54):425-434

[6] LI X,SHI Y. $(n;m)$-graphs with maximum zeroth-order general Randic index for $\alpha\in(-1,0)$[J]. MATCH Commun Math Chem,2009(62):163-170

[7] PAVLOVIC L,LAZIC M,ALEKSIC T. More on Connected (n,m)-graphs with minimum and maxium zeroth-order general Randic index[J]. Discr Appl Math,2009(157):2938-2944

[8] LIN A,LUO R,ZHA X. On sharp bounds of the zero order Randic index of certain unicyclic graphs[J]. Appl Math Lett,2009(22):585-589

[9] HUA H,DENG H. On unicycle graphs with maximum and minimum zeroth-order general Randic index[J]. J Math Chem ,2007(41):173-181

[10] HU Y,LI X,SHI Y,et al. Connected (n,m)-graphs with minimum and maximum zeroth-order general Randic index[J]. Discr Appl Math,2007(155):1044-1054

[11] LI X,ZHAO H. Trees with the first three smallest and largest generalized topological indices[J]. MATCH Commun Math Chem,2004(50):57-62

[12] BONDY J A,MURTY U S R. Graph Theory[M]. Springer,Berlin,2008

(下转第15页)