doi:10.16055/j.issn.1672-058X.2015.0004.003

单圈图的次小 Randic 指数

桂 云

(蚌埠学院 数理系,安徽 蚌埠 233000)

摘 要:一个图 G 的 Randic 指数定义为 $R(G)=\sum_{(x,y)\in E(G)}[d(x)d(y)]^{-\frac{1}{2}}$,Randic 指数是分子拓扑学中的重要指数;一种物质的理化性质与其分子结构图的 Randic 指数有相关性;Randic 指数主要的研究是寻找某种类型图的 Randic 指数极值或次极值;具有最小 Randic 指数的单圈图为 S_n^+,在此基础上导出具有次小 Randic 指数的单圈图 G_n^*.

关键词:单圈图;次小;Randic 指数

中图分类号:O157.5 **文献标识码:**A **文章编号:**1672-058X(2015)04-0012-04

广义 Randic 指数定义为 $R_\alpha(G)=\sum_{xy\in E(G)}[d(x)d(y)]^\alpha(\alpha\neq 0)$,其中 α 为任意实数,$d(x)$ 表示顶点 x 的度,$E(G)$ 表示图 G 的边集.Randic 指数可以看作广义 Randic 指数在 $\alpha=-\frac{1}{2}$ 的特殊情形.用到的相关概念与符号如下:$V(G)$ 表示图 G 的顶点集;$|V(G)|$ 表示图 G 顶点个数;G 中所有与顶点 x 相邻接的顶点组成的集合记为 $N(x)$;度为 1 的顶点称为悬挂点;无圈的连通图称为树;n 个顶点的树若有 $n-1$ 个悬挂点,则称为星,记为 S_n;恰有一个圈的简单连通图称为单圈图,S_n^+ 表示从星 S_n 的两个悬挂点添加一个边所构成的单圈图.其他未定义的术语与符号参阅文献[1].Randic 指数的研究目前已有了大量的成果,部分成果可以参阅文献[2-5].

1 引理与结论

引理 1[2] G_n 是 n 个顶点的简单连通图,则 $R(G_n)\leqslant\frac{n}{2}$,当且仅当 G_n 为正则图时等号成立.

引理 2[3] G_n 是 n 个顶点($n\geqslant 3$)的单圈图,则 $R(G_n)\geqslant\frac{n-3}{\sqrt{n-1}}+\frac{2}{\sqrt{2(n-1)}}+\frac{1}{2}$,当且仅当 $G_n=S_n^+$ 时等号成立,S_n^+ 的结构如图 1 所示.

引理 3 若 $x\geqslant 1,y\geqslant 2$,则 $h(x,y)=\frac{x+1}{\sqrt{y}}+\frac{y-1-x}{\sqrt{2y}}-\frac{x}{\sqrt{y-1}}-\frac{y-1-x}{\sqrt{2(y-1)}}$ 关于 x 单调递减.

证明 通过求导易证.

引理 4 若 $y\geqslant 2$,则 $g(y)=\frac{y-1}{\sqrt{y}}+\frac{1}{\sqrt{2y}}-\frac{y-2}{\sqrt{y-1}}+\frac{1}{\sqrt{2(y-1)}}$ 关于 y 单调递减.

收稿日期:2014-08-18;**修回日期:**2014-09-26.

作者简介:桂云(1979-),男,安徽蚌埠人,助教,硕士,从事图论研究.

证明　$\frac{dg(y)}{dy}=\frac{1}{2}(\frac{1}{\sqrt{y}}-\frac{1}{\sqrt{y-1}})+(\frac{\sqrt{2}-1}{2\sqrt{2}})(\frac{1}{y\sqrt{y}}-\frac{1}{(y-1)\sqrt{y-1}})<0$,故结论成立.

定理1　G_n 是 n 个顶点($n\geqslant 5$)的单圈图,且 $G_n\neq S_n^+$,则

$$R(G_n)\geqslant f(n)=\frac{n-4}{\sqrt{n-2}}+\frac{1}{\sqrt{2(n-2)}}+\frac{1}{\sqrt{3(n-2)}}+\frac{1}{\sqrt{6}}+\frac{1}{\sqrt{3}}$$

当且仅当 $G_n=G_n^*$ 时等号成立,G_n^* 结构如图2所示.

证明　若 G_n 是 n 个顶点的圈,则 G_n 为正则图,由引理1知 $R(G_n)=\frac{n}{2}$.故以下讨论时均假定 G_n 不是 n 个顶点的圈.

对 n 进行数学归纳.

当 $n=5$ 时可直接验证,5个顶点的单圈图只有图3所示4种:

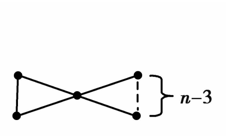

图1　S_n^+ 结构图

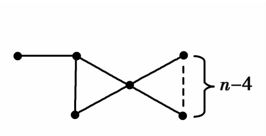

图2　G_n^* 结构图

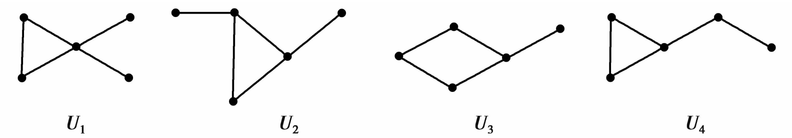

图3　5个顶点单圈图的结构图

易知 $R(U_1)=2.2071$(最小),$R(U_2)=2.3045$(次小),$R(U_3)=2.3938$,$R(U_4)=2.4319$,结论成立.

现考虑 $n\geqslant 6$ 的情形,记 PV 为 G_n 中的悬挂点集,因为 G_n 不是 n 个顶点的圈,故 $PV\neq\varnothing$.令 $u\in PV$,v 是 u 的相邻点,则 $d(v)\geqslant 2$,记 $W(u)=\{y\,|\,y\in N(v)\setminus\{u\},d(y)=1\}$,按如下方式选取 u_0:

1) u_0 的选取使 $W(u_0)$ 中的元素最多;

2) 在满足1)的条件下,$d(v)$ 最小.

记 $d(v)=d$,$N(v)\setminus\{u_0\}=\{y_1,y_2,\cdots,y_{d-1}\}$.令 $G'=G_n-u_0$,则 G' 是 $n-1$ 个顶点的单圈图.记 S 为 G_n 中除 u_0v 外与顶点 v 关联的边的 Randic 指数和,S' 为 G' 中与顶点 v 关联的边的 Randic 指数和,则

$$S=\sum_{i=1}^{d-1}\frac{1}{\sqrt{dd(y_i)}}\ ,\ S'=S\sqrt{\frac{d}{d-1}}$$

以下分别讨论 $G'=S_{n-1}^+$ 与 $G'\neq S_{n-1}^+$ 时的结果.

若 $G'=S_{n-1}^+$,则 G_n 只有图4所示2种图.

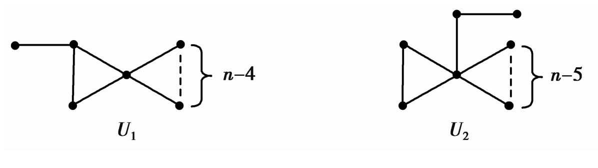

图4　$G'=S_{n-1}^+$ 时 G_n 结构图

$$R(U_1)=f(n),R(U_2)=\frac{n-5}{\sqrt{n-2}}+\frac{3}{\sqrt{2(n-2)}}+\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{1}{2}$$

$$R(U_2)-R(U_1)=(\sqrt{2}-1-\frac{1}{\sqrt{3}})\frac{1}{\sqrt{n-2}}+\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{1}{2}-\frac{1}{\sqrt{6}}-\frac{1}{\sqrt{3}}$$

显然 $\left(\sqrt{2}-1-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)\frac{1}{\sqrt{n-2}}+\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{1}{2}-\frac{1}{\sqrt{6}}-\frac{1}{\sqrt{3}}$ 关于 n 单调递增,且 $n=6$ 时,$R(U_2)-R(U_1)=0.13994>0$,故 $n\geqslant 6$ 时,$R(U_2)>R(U_1)$,结论成立.

若 $G' \neq S_{n-1}^{+}$,由归纳假设 $R(G') \geqslant f(n-1)$,得

$$R(G_n) = R(G') + \frac{1}{\sqrt{d}} + S - S' \geqslant f(n-1) + \frac{1}{\sqrt{d}} + S\left(1 - \sqrt{\frac{d}{d-1}}\right) = f(n) + g(n) + h(d)$$

其中

$$g(n) = f(n-1) - f(n) = \left(n - 5 + \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{n-3}} - \frac{1}{\sqrt{n-2}}\right) - \frac{1}{\sqrt{n-2}}$$

$$h(d) = \frac{1}{\sqrt{d}} + \left(1 - \sqrt{\frac{d}{d-1}}\right)\sum_{i=1}^{d-1}\frac{1}{\sqrt{dd(y_i)}}$$

情形 1 $d(y_i) \geqslant 2, i=1,2,\cdots,d-1$ 时.

由顶点 u_0 的选择方式可知,对 $\forall u \in PV$,有 $W(u)=\varnothing$.首先说明 $d(v)=2$ 或 3.若 $d(v) \geqslant 4$,则 $G_n - v$ 中存在分支树 H 且 $|V(H)| \geqslant 2$,使得 H 至少包含$\{y_1, y_2, \cdots, y_{d-1}\}$中的一个顶点.不妨假设该顶点为 y_1,既然 $\forall u \in PV$ 有 $W(u)=\varnothing$,则存在 $u' \in V(H) \cap PV$ 和 $u'v' \in E(G_n)$,且 $d(v')=2$,这与顶点 u_0 的选择相矛盾.故有 $d(v)=d \leqslant 3$.

情形 1.1 $d=2$ 时,

$$g(n) + h(2) \geqslant \left(n - 5 + \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{n-3}} - \frac{1}{\sqrt{n-2}}\right) - \frac{1}{\sqrt{n-2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2}(1 - \sqrt{2})$$

当 $n \geqslant 6$,显然$\left(n-5+\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{1}{\sqrt{3}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{n-3}}-\frac{1}{\sqrt{n-2}}\right)>0$.再由单调性,可验证$-\frac{1}{\sqrt{n-2}}+\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{1}{2}(1-\sqrt{2})>0$,故 $g(n)+h(2)>0$,即 $n \geqslant 6$ 时,$R(G_n)>f(n)$,结论成立.

情形 1.2 $d=3$ 时,

$$g(n) + h(3) \geqslant \left(n - 5 + \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{n-3}} - \frac{1}{\sqrt{n-2}}\right) - \frac{1}{\sqrt{n-2}} + \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{2}{\sqrt{6}}\left(1 - \sqrt{\frac{3}{2}}\right) \tag{1}$$

当 $n=6,7,8$ 时,不等式(1)右边分别等于 0.070 55,0.120 008,0.152 544,均大于 0;当 $n \geqslant 9$,同情形 1.1,可证 $g(n)+h(3)>0$,即 $n \geqslant 6$ 时,$R(G_n)>f(n)$,结论成立.

情形 2 存在某些 $i, 1 \leqslant i \leqslant d-1$,使得 $d(y_i)=1$.

不失一般性,假设 $d(y_1)=d(y_2)=\cdots=d(y_k)=1$ 和 $d(y_i) \geqslant 2, k+1 \leqslant i \leqslant d-1$,因为 $k \geqslant 1$,所以

$$h(d) \geqslant \frac{1}{\sqrt{d}} + \left(1 - \sqrt{\frac{d}{d-1}}\right)\left(\frac{k}{\sqrt{d}} + \frac{d-1-k}{\sqrt{2d}}\right) = \frac{k+1}{\sqrt{d}} + \frac{d-1-k}{\sqrt{2d}} - \frac{k}{\sqrt{d-1}} - \frac{d-1-k}{\sqrt{2(d-1)}} \tag{2}$$

情形 2.1 若 $d = n-1$,则 $G_n = S_n^{+}$ 与 G_n 的选择矛盾.

情形 2.2 若 $d = n-2$,则 G_n 只有图 5 所示 3 种图.

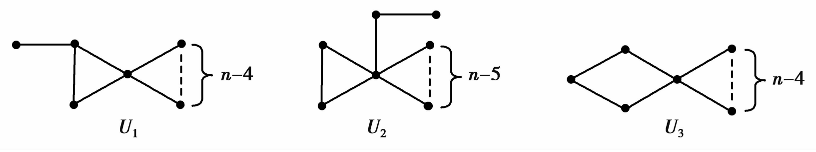

图 5 $d = n-2$ 时 G_n 结构图

$R(U_2)>R(U_1)$,定理 1 前述部分已证,且易证 $R(U_3)>R(U_1)$,结论成立.

情形 2.3 若 $d \leqslant n-3$,

G_n 为单圈图,故 $k \leqslant d-2$.由式(1)与引理 3 得

$$h(d) \geqslant \frac{d-1}{\sqrt{d}} + \frac{1}{\sqrt{2d}} - \frac{d-2}{\sqrt{d-1}} - \frac{1}{\sqrt{2(d-1)}} \tag{3}$$

$d \leqslant n-3$,由式(2)与引理 4 又可得

$$h(d) \geqslant \frac{n-4}{\sqrt{n-3}}+\frac{1}{\sqrt{2(n-3)}}-\frac{n-5}{\sqrt{n-4}}-\frac{1}{\sqrt{2(n-4)}}$$

$$g(n)+h(d) \geqslant (n-4+\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{1}{\sqrt{3}})(\frac{1}{\sqrt{n-3}}-\frac{1}{\sqrt{n-2}})-(n-5+\frac{1}{\sqrt{2}})(\frac{1}{\sqrt{n-4}}-\frac{1}{\sqrt{n-3}})=$$

$$\frac{1}{C}\left[(n-4+\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{1}{\sqrt{3}})(n-4+\sqrt{n-3}\sqrt{n-4})-(n-5+\frac{1}{\sqrt{2}})(\sqrt{n-3}\sqrt{n-2}+n-2)\right]$$

其中

$$C=\sqrt{n-2}\sqrt{n-3}\sqrt{n-4}(\sqrt{n-2}+\sqrt{n-3})(\sqrt{n-3}+\sqrt{n-4}) \overset{\sqrt{n-3}\sqrt{n-4}>n-3.6}{>}$$

$$\frac{1}{C}\left[(n-4+\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{1}{\sqrt{3}})(2n-7.6)-(n-5+\frac{1}{\sqrt{2}})(\sqrt{n-3}\sqrt{n-2}+n-2)\right] \overset{\frac{n-2+n-3}{2}>\sqrt{n-2}\sqrt{n-3}}{>}$$

$$\frac{1}{C}\left[(n-4+\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{1}{\sqrt{3}})(2n-7.6)-(n-5+\frac{1}{\sqrt{2}})(2n-4.5)\right] \tag{4}$$

$(n-4+\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{1}{\sqrt{3}})(2n-7.6)-(n-5+\frac{1}{\sqrt{2}})(2n-4.5)$ 是关于 n 的一次式且单调递增,易知 $n\geqslant 6$ 时,式(4)大于 0,故 $g(n)+h(d)>0$,即 $n\geqslant 6$ 时,$R(G_n)>f(n)$,结论成立.

此外,由情形 2.2 的讨论可知,当且仅当 $G_n=G_n^*$ 时,$R(G_n)=f(n)$,证毕.

2　结束语

S_n^+ 在单圈图中具有最小的 Randic 指数,在此基础上通过归纳递推与分类讨论的方法得到了具有次小 Randic 指数的单圈图 G_n^*.

参考文献:

[1] 徐俊明.图论及其应用[M].2 版.北京:中国科学技术大学出版社,2004
[2] LU M,LIU H,TIAN F.The Connectivity Index,MATCH Commun[J].Math Comput Chem,2004(51):149-154
[3] GAO J,LU M.On the Randic Index of Unicyclic Graphs[J].MATCH Commun Math Comput Chem,2005(53):377-384
[4] 张惠玲,曲安京.共轭单圈图的广义 Randic 指标[J].计算机与应用化学,2013,30(6): 648-650
[5] 詹丽丽,刘素勤.给定悬挂点的三圈图的零阶广义 Randic 指数[J].重庆工商大学学报:自然科学版,2012,29(6): 4-8

The Second Minimum Randic Index in Unicyclic Graphs

GUI Yun

(Department of Mathematics and Physics,Bengbu University,Bengbu 233000 China)

Abstract: The Randic index $R(G)$ of graph G is defined as $R(G)=\sum_{(x,y)\in E(G)}[d(x)d(y)]^{-\frac{1}{2}}$. The Randic index is an important index in molecular topology. There is a good correlation between physical and chemical properties of certain substance and Randic index of its molecular structure. Randic index is used to find the minimum and second minimum R-values in (pertinently chosen) classes of graphs. Unicyclic graph with minimum Randic index is S_n^+, on the basis of which, this paper gives the second minimum Randic index of unicyclic graphs G_n^*.

Key words: Unicyclic graph;second minimum;Randic index