

平面二部图的 Clar 覆盖多项式

刘莹¹, 王广富², 高新宇¹

(1. 华东交通大学理学院, 江西 南昌 330013; 2. 烟台大学数学与信息科学学院, 山东 烟台 264000)

摘要:【目的】分子图的 Clar 覆盖多项式是表征共轭体系电子结构的一种方法。通过研究平面二部图的 Clar 覆盖多项式, 可以很好地研究相关分子图的共振理论及其相关性质。【方法】基于平面二部图 Clar 覆盖多项式的相关定理, 利用生成函数的方法计算平面二部图的 Clar 覆盖多项式。【结果】推导出一类特殊图的 Clar 覆盖多项式的递推关系。进而利用生成函数的方法计算两类 Cata 型平面二部图 Clar 覆盖多项式的显式表达式。【结论】根据平面二部图的 Clar 覆盖多项式, 可以了解化学分子的电子结构, 预测其化学性质和反应行为, 并设计新的分子结构。

关键词: 平面二部图; Clar 覆盖多项式; 递推关系; 显式表达式

中图分类号: O157.5

文献标志码: A

The Clar covering polynomials of plane bipartite graphs

Liu Ying¹, Wang Guangfu², Gao xinyu¹

(1. School of Science, East China Jiaotong University, Nanchang 330013, China; 2. School of Mathematics and Information Sciences, Yantai University, Yantai 264000, China)

Abstract: 【Objective】The Clar covering polynomial of molecular graphs is a method to characterize the electronic structure of conjugated systems. By studying the Clar covering polynomials of plane bipartite graphs, the resonance theory of related molecular graphs and their related properties can be well studied. 【Methods】Based on the theorem related to Clar covering polynomials of plane bipartite graphs, the method of generating functions is utilized to compute Clar covering polynomials of plane bipartite graphs. 【Results】Recurrence relations for Clar covering polynomials of a special class of graphs are derived. In turn, explicit expressions for the Clar covering polynomials of two classes of catacondensed plane bipartite graphs are computed using the generating function method. 【Conclusion】On the Clar covering polynomials of plane bipartite graphs, it is possible to understand the electronic structure of chemical molecules, predict their chemical properties and reaction behavior, and design new molecular structures.

Key words: plane bipartite graphs; the Clar covering polynomial; recurrence relations; explicit expressions

化学图论^[1,2]在过去几十年中受到了越来越多的关注。通过研究化学分子模型中的一些指数, 可以更方地理解化合物的性质^[3-5]。其中, Kekulé 结构和 Clar 结构是用于预测各种化合物化学和物理性质的参数, 在化合物的相关理论中起着核心作用。用 $K(G)$ 表示图 G 中 Kekulé 结构的数目。近年来, 各类图的 Kekulé 结构数得到了广泛研究^[6-9]。

为了比较分子间的共振稳定性, 在 Herndon-Hosoya 模型^[10]中, 首次提出了 (广义) Clar 结构的概念。近二十年来, 很多人研究了各类图的 Clar 结构及其相关性质^[11-19]。在[14]中, 张和平定义一个六边形系统 H 的 Clar 覆盖是 H 的一个生成

子图 C , C 中每个分支要么是一个六边形, 要么是一条边。Clar 结构是指具有六边形数最多的 Clar 覆盖。当六边形被替换为一个内面的边界时, Clar 覆盖和 Clar 结构的概念就可以扩展到平面二部图中^[20]。对于平面二部图 G , 如果 G 的生成子图 Q 中每个分支都是一条边或一个内面的边界, 那么 Q 就被称作是 G 的 Clar 覆盖。具有内面数最多的 Clar 覆盖被称为 G 的 Clar 结构。在此基础上, 张和平和张福基^[14]首次提出了分子结构图的 Clar 覆盖多项式 (也被称为张-张多项式), 它可以用来计算许多重要参数。近年来, Clar 覆盖多项式也吸引了人们广泛的关注和研究^[21-24]。但直接计算出某图类的 Clar 覆盖多项式还是很困难的。

本文首先将 [19]中的定理推广到到平面二部图, 推导了一类特殊图 Clar 覆盖多项式的递推关系。然后通过次相邻面之间距离的奇偶性将 Cata 型平面二部图进行分类, 用生成函数的方法计算出两类 Cata 型平面二部图的 Clar 覆盖多项式。

1 一些性质和递推关系

设 G 是平面二部图, 将图 G 的 Clar 覆盖多项式定义^[11]如下:

$$P(G, w) = \sum_{C \in \mathbb{C}} w^{h(C)}$$

其中, \mathbb{C} 是 G 中所有 Clar 覆盖的集合; C 表示 G 的一个 Clar 覆盖; $h(C)$ 表示 C 中包含的面数。

定理 1.1^[14] 设 G 是一个平面二部图, 则以下命题成立:

(1) $\sigma(G, 0) = K(G)$ 。图 G 包含 0 个面的 Clar 结构的数目等于 G 中 Kekulé 结构的数目;

(2) Clar 覆盖多项式中第 i 项的系数等于包含 i 个面的 Clar 覆盖的数目。

定理 1.2^[14] 设 G 是一个平面二部图, G_1, G_2, \dots, G_s 是 G 的 s 个连通分支。那么

$$P(G, w) = \prod_{i=1}^s P(G_i, w)。$$

下文中, 为方便起见, 我们将图 G 的 Clar 覆盖多项式 $P(G, w)$ 简称为 $P(G)$ 。

定理 1.3^[14] 设 G 是一个平面二部图, $e = xy$ 是 G 中一条边, 则以下命题成立:

(1) 如果 s_1, s_2 是 G 中具有公共边 $e = xy$ 的相邻面(如图 1(a)所示), 那么

$$P(G) = w \sum_{i=1}^2 P(G - s_i) + P(G - xy) + P(G - x - y)。$$

(2) 如果 $e = xy$ 是只位于一个圈 s 上的边(如图 1(b)所示), 那么

$$P(G) = wP(G - s) + P(G - xy) + P(G - x - y)。$$

(3) 如果 $e = xy$ 是 G 中一条割边(如图 1(c)所示), 那么

$$P(G) = P(G - xy) + P(G - x - y)。$$

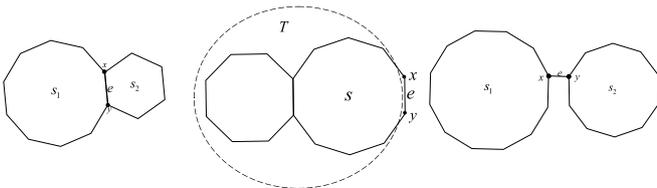


图 1 (a) s_1, s_2 具有公共边 $e = xy$ (b) 边 $e = xy$ 只位于圈 s 上 (c) 边 $e = xy$ 是一条割边

Fig. 1 (a) s_1, s_2 share an edge $e = xy$

(b) $e = xy$ being an edge that lies only on a cycle s

(c) $e = xy$ being a cut edge.

设 G 是一个平面图。图 G 外部面边界上的边称为 G 的外围边, 直接和外部面相邻的内面称为外围面。设 s 是 G 中所有顶点都在外部面上的外围面; $G_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 是平面二部图 G 中互不相交的分支, 且均与 s 相邻, 即 $E(G_i) \cap E(s) = e_i$ 。将 G_i 和 G_j 之间的距离定义为边 e_i 和 e_j 之间的距离。下面我们给出这类特殊平面二部图 G 的一些结论。

推论 1.4 将 G_i 和 G_{i+1} 之间直接连接 G_i 的边记为 $e = x_i x'_i$, 其中 $x_i \in V(G_i)$ 。

(1) 如果 G_i 和 G_{i+1} 之间的距离是奇数(如图 2(a)所示), 那么

$$P(G - x_i x'_i) = P(G - x_i x'_i - x_{i+1} x'_{i+1});$$

$$P(G - x_i - x'_i) = P(G - x_i - x'_i - x_{i+1} - x'_{i+1})。$$

(2) 如果 G_i 和 G_{i+1} 之间的距离是偶数(如图 2(b)所示), 那么

$$P(G - x_i x'_i) = P(G - x_i x'_i - x_{i+1} - x'_{i+1});$$

$$P(G - x_i - x'_i) = P(G - x_i - x'_i - x_{i+1} x'_{i+1})。$$

证明: (1) 当 G_i 和 G_{i+1} 之间的距离是奇数时, G_i 和 G_{i+1} 之间有偶数个顶点。根据定理 1.3

(3) 可知

$$P(G - x_i x'_i) = P(G - x_i x'_i - x_{i+1} x'_{i+1}) + P(G - x_i x'_i - x_{i+1} - x'_{i+1})。$$

由于 $P(G - x_i x'_i - x_{i+1} - x'_{i+1})$ 的每一个连通分支都不含有 Kekulé 结构, 因此也不含 Clar 结构, 即 $P(G - x_i x'_i - x_{i+1} - x'_{i+1}) = 0$ 。

$$\text{因此 } P(G - x_i x'_i) = P(G - x_i x'_i - x_{i+1} x'_{i+1})。$$

类似地, $P(G - x_i - x'_i - x_{i+1} x'_{i+1}) = 0$ 。因此

$$P(G - x_i - x'_i) = P(G - x_i - x'_i - x_{i+1} - x'_{i+1})。$$

(2) 当 G_i 和 G_{i+1} 之间的距离是偶数时, 可以通过类似的方法证明结论成立。 ■

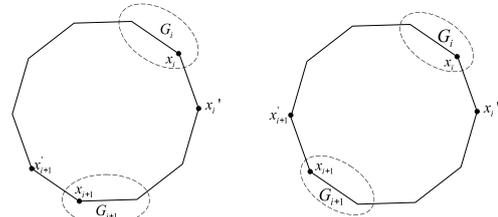


图 2 (a) G_i 和 G_{i+1} 之间的距离是奇数

(b) G_i 和 G_{i+1} 之间的距离是偶数

Fig.2 (a) The distance between G_i and G_{i+1} is odd

(b) The distance between G_i and G_{i+1} is even

推论 1.5 如果任意两个 $G_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 之间的距离是 1, 那么

$$P(G) = \prod_{i=1}^n P(G_i) + (w+1) \prod_{i=1}^n P(G_i - x_i - x'_{i+1}),$$

其中 $i \equiv 0 \pmod n$, x_i, x'_i 是 G_i 和 C_{2n} 的公共点。

证明: 设 $G'_i = G_i - x_i - x'_{i+1}$, $i \equiv 0 \pmod n$ 。利用定理 1.3 (2) 展开边 $x_i x'_1$:

$$P(G) = wP(G-s) + P(G-x_1 x'_1) + P(G-x_1 - x'_1)。$$

其中,

$$P(G-s) = \prod_{i=1}^n P(G'_i);$$

$$P(G-x_1 x'_1) = P(G-x_1 x'_1 - x_2 x'_2 - \dots - x_n x'_n) = \prod_{i=1}^n P(G_i);$$

$$P(G-x_1 - x'_1) = P(G-x_1 - x'_1 - x_2 - x'_2 - \dots - x_n - x'_n) = \prod_{i=1}^n P(G'_i)。$$

因此,

$$P(G) = wP(G-s) + P(G-x_1 x'_1) + P(G-x_1 - x'_1) = \prod_{i=1}^n P(G_i) + (w+1) \prod_{i=1}^n P(G'_i)。$$

设 G_1 和 G_2 是两个互不相交且具有 Kekulé 结构的平面二部图。 $e_1 = x_1 y_1 \in E(G_1)$ 和 $e_2 = x_2 y_2 \in E(G_2)$ 是外围边。我们把 e_1 和 e_2 粘合起来得到一条新的边 $e = xy$ 。将 G_1 与 G_2 的外围边粘合得到的图记为 $G_1 \cup_{xy} G_2$ (如图 3 所示)。

引理 1.6 两个平面图 G_1 和 G_2 通过粘边得到的图 $G_1 \cup_{xy} G_2$ 依然是平面图。

证明: 利用平面图的欧拉公式即证。

定理 1.7 $G_1 \cup_{xy} G_2$ 的 Clar 覆盖多项式为

$$P(G_1 \cup_{xy} G_2) = P(G_1 - x - y)P(G_2) + P(G_1)P(G_2 - x - y) - P(G_1 - x - y)P(G_2 - x - y)。$$

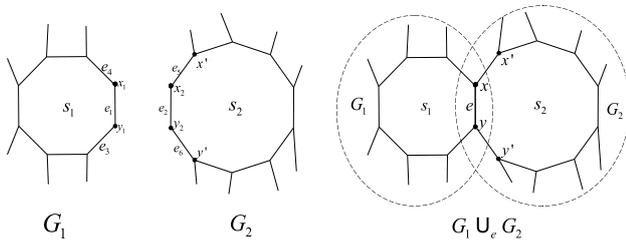


图 3 两个图的粘边过程

Fig.3 The process of gluing the edges of two graphs

证明: 利用定理 1.3 (2) 展开 G_1, G_2 中的边 xy 可以得到如下两个递推公式:

$$P(G_1) = wP(G_1 - s_1) + P(G_1 - x - y) + P(G_1 - xy),$$

$$P(G_2) = wP(G_2 - s_2) + P(G_2 - x - y) + P(G_2 - xy)。$$

利用定理 1.3 (1) 展开 $G_1 \cup_{xy} G_2$ 中边 xy :

$$P(G_1 \cup_{xy} G_2) = wP(G_1 \cup_{xy} G_2 - s_1) + wP(G_1 \cup_{xy} G_2 - s_2) + P(G_1 \cup_{xy} G_2 - xy) + P(G_1 \cup_{xy} G_2 - x - y)。$$

其中,

$$wP(G_1 \cup_{xy} G_2 - s_1) = wP(G_1 - s_1)P(G_2 - x - y) = P(G_2 - x - y)[P(G_1) - P(G_1 - x - y) - P(G_1 - xy)];$$

$$wP(G_1 \cup_{xy} G_2 - s_2) = wP(G_1 - x - y)P(G_2 - s_2) = P(G_1 - x - y)[P(G_2) - P(G_2 - x - y) - P(G_2 - xy)];$$

$$P(G_1 \cup_{xy} G_2 - x - y) = P(G_1 - x - y)P(G_2 - x - y)。$$

因为 G_1 和 G_2 都有 Kekulé 结构, 因此

$$P(G_1 \cup_{xy} G_2 - xy) = P(G_1 - x - y)P(G_2 - xy) + P(G_1 - xy)P(G_2 - x - y)。$$

综上所述,

$$P(G_1 \cup_{xy} G_2) = P(G_1 - x - y)P(G_2) + P(G_1)P(G_2 - x - y) - P(G_1 - x - y)P(G_2 - x - y)。$$

2 Cata 型平面二部图的 Clar 覆盖多项式

两个面是次相邻的, 如果两个面都与同一个面相邻, 如图 4 中的面 1 和 3。如果链图中任意两个次相邻面之间的距离奇偶性相同, 且包含满足要求的面数最多, 则将其称为极大线性链。两个极大线性链相邻当且仅当这两个极大线性链包含一个公共面。特别地, 对于只包含两个面的极大线性链, 我们规定其中任意两个次相邻面之间的距离为偶数。

本节中, 将根据次相邻面之间距离的奇偶性把 Cata 型平面二部图分为以下四种类型, 分别计算其 Clar 覆盖多项式的递推关系和显式表达式。

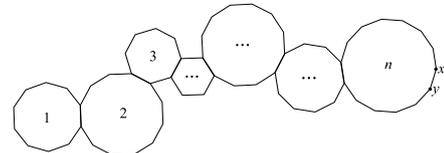


图 4 任意两个次相邻面之间的距离均为奇数

Fig.4 Distance between any two sub-adjacent faces is odd

设 G 是有 n 个极大线性链 ($n \geq 1$) 的平面二部图, n 个极大线性链中的面数分别为 r_1, r_2, \dots, r_n ($r_i \geq 2, i = 1, 2, \dots, n$), 将其记为 $Gl(r_1, r_2, \dots, r_n)$ 。在不引起混淆的情况下, 简记为 $Gl(r_n)$ 。

$Gl(r_n)$ 可以分为以下四种情况:

- (1) r_1 中任意两个次相邻面之间距离均为偶数;
- (2) r_1 中任意两个次相邻面之间距离均为奇数;

(3) $r_i(i=1,2,\dots,n)$ 中任意两个次相邻面之间的距离为偶数, 由 r_i 和 r_{i+1} 的公共面连接的两个面之间的距离为奇数。

(4) $r_i(i=1,2,\dots,n)$ 中任意两个次相邻面之间的距离为奇数, 由 r_i 和 r_{i+1} 的公共面连接的两个面之间的距离为偶数。

下面将分别研究这四种类型。其中 (1) (3) 满足[14]中六角形系统的距离特性, 因此可以直接通过六角形系统 Clar 覆盖多项式推导得出, 本文不再过多赘述。

2.1 r_1 中任意两个次相邻面之间的距离均为奇数

定理 2.1 当 r_1 中任意两个次相邻面之间的距离均为奇数时, $Gl(r_1)$ 的 Clar 覆盖多项式为

$$P(Gl(r_1)) = \sum_{k_1+2k_2=n} \left(\binom{k_1+k_2}{k_1} I^{k_1} (w+1)^{k_2} \right) + (w+1) \sum_{k_1+2k_2=n-1} \left(\binom{k_1+k_2}{k_1} I^{k_1} (w+1)^{k_2} \right). \quad (1)$$

证明: 设 $r_1 = n$ 。将 $P(Gl(r_1))$ 简记为 f_n 。

利用定理 1.3 (2) 展开图 6 中边 xy 得到:

$$f_n = w f_{n-2} + f_{n-1} + f_{n-2} = (w+1) f_{n-2} + f_{n-1},$$

初始条件为 $f_0 = 1; f_1 = w + 2$ 。

假设 $f_n(n \geq 0)$ 的生成函数为

$$F(z) = \sum_{i=0}^{\infty} z^i f_i.$$

可以推导出

$$F(z) = [1 + (w+1)z][1 - z[1 + (w+1)z]]^{-1},$$

其中

$$\{1 - z[1 + (w+1)z]\}^{-1} = \sum_{k>0} \left\{ \sum_{k_1+2k_2=k} \binom{k_1+k_2}{k_1} I^{k_1} (w+1)^{k_2} \right\} z^k.$$

将上述表达式代入 $F(z)$, 并使 z^n 的系数相等得到

$$f_n = \sum_{k_1+2k_2=n} \left(\binom{k_1+k_2}{k_1} I^{k_1} (w+1)^{k_2} \right) + (w+1) \sum_{k_1+2k_2=n-1} \left(\binom{k_1+k_2}{k_1} I^{k_1} (w+1)^{k_2} \right).$$

当 $n \geq 2$ 时成立。 ■

通过分析公式 (3.1), 我们可以得到以下结果:

$$(1) K(Gl(r_1)) = \sum_{k_1+2k_2=n} \binom{k_1+k_2}{k_1} + \sum_{k_1+2k_2=n-1} \binom{k_1+k_2}{k_1}.$$

$$(2) \sigma(Gl(r_1)) = \begin{cases} \frac{n+1}{2}, & n \text{ 是奇数} \\ \frac{n}{2}, & n \text{ 是偶数} \end{cases},$$

$$\sigma(Gl(r_1), \sigma(Gl(r_1))) = \begin{cases} 1, & n \text{ 是奇数} \\ \frac{n+2}{2}, & n \text{ 是偶数} \end{cases}.$$

2.2 $r_i(i=1,2,\dots,n, n \geq 2)$ 中任意两个次相邻面之间的距离均为奇数

设 $Gl(r_n)$ 每个极大线性链中的次相邻面之间的距离为奇数, 并且 r_i 和 r_{i+1} 恰好有一个公共面 f 。假设 r_i 中与 f 相邻的面为 f_i , r_{i+1} 中与 f 相邻的面为 f_{i+1} 。此时 f_i 和 f_{i+1} 之间的距离是偶数(如图 5(a)所示)。设 $Gl(r_n - 1)$ 表示从 $Gl(r_n)$ 删去最后一个外围面后得到的图(如图 5(b)所示)。

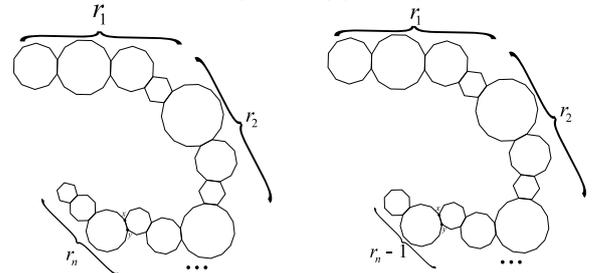


图 5 (a) $Gl(r_n)$ (b) $Gl(r_n - 1)$

Fig.5 (a) $Gl(r_n)$ (b) $Gl(r_n - 1)$

定理 2.2 当 $r_i(i=1,2,\dots,n, n \geq 2)$ 中次相邻面之间的距离为奇数时, $Gl(r_n)$ 的 Clar 覆盖多项式为

$$P(Gl(r_n)) = \left[\frac{f_{r_n-1} - f_{r_n-2}}{f_{r_n-1} - f_{r_n-2}} (f_{r_n-3} - f_{r_n-4}) + f_{r_n-2} \right] P(Gl(r_{n-1})) - \frac{(f_{r_n-1} - f_{r_n-2})(f_{r_n-2} f_{r_n-3} - f_{r_n-4} f_{r_n-1})}{f_{r_n-1} - f_{r_n-2}} P(Gl(r_{n-2}))$$

$r_i \geq 4$, 初始条件为 $P(Gl(r_1)) = f_{r_1}$;

$$P(Gl(r_2)) = f_{r_1-2} f_{r_2-1} + f_{r_1} f_{r_2-2} - f_{r_1-2} f_{r_2-2}.$$

特别地, 如果 $r_1 = r_2 = \dots = r_n = m$, 设

$$\Theta_i = \sum_{k_1+2k_2=i} \left(\binom{k_1+k_2}{k_1} (f_{m-2} + f_{m-3} - f_{m-4})^{k_1} (-1)^{k_2} (f_{m-2} f_{m-3} - f_{m-4} f_{m-1})^{k_2} \right),$$

那么 $Gl(r_n)$ 的 Clar 覆盖多项式为

$$l_n = f_m \Theta_{n-1} + (f_{m-1} f_{m-2} - f_{m-2}^2 - f_{m-3} f_m + f_{m-4} f_m) \Theta_{n-2} + f_m (f_{m-2} f_{m-3} - f_{m-4} f_{m-1}) \Theta_{n-3}. \quad (2)$$

证明: 将 $Gl(r_n)$ 简记为 $l(r_n)$ 。利用定理 1.7

展开边 xy , 得到 $l(r_n)$ 和 $l(r_n - 1)$ 的递推关系:

$$l(r_n) = (f_{r_n-1} - f_{r_n-2}) l(r_{n-1} - 2) + f_{r_n-2} l(r_{n-1})$$

$$l(r_n - 2) = (f_{r_n-3} - f_{r_n-4}) l(r_{n-1} - 2) + f_{r_n-4} l(r_{n-1}),$$

通过化简可以得到

$$l(r_n) = \left[\frac{f_{r_{n-1}} - f_{r_{n-2}}}{f_{r_{n-1}-1} - f_{r_{n-2}-2}} (f_{r_{n-1}-3} - f_{r_{n-1}-4}) + f_{r_{n-2}} \right] l(r_{n-1}) - \frac{(f_{r_{n-1}} - f_{r_{n-2}})(f_{r_{n-1}-2}f_{r_{n-1}-3} - f_{r_{n-1}-4}f_{r_{n-1}-1})}{f_{r_{n-1}-1} - f_{r_{n-2}-2}} l(r_{n-2}) \quad (3)$$

初始条件为 $l(r_1) = f_{r_1}$;

$$l(r_2) = f_{r_1-2}f_{r_2-1} + f_{r_1}f_{r_2-2} - f_{r_1-2}f_{r_2-2} \circ$$

对于公式(3), 如果 $r_1 = r_2 = \dots = r_n = m$, 将

$l(r_n)$ 简记为 l_n , 上式简化为

$$l_n = (f_{m-2} + f_{m-3} - f_{m-4})l_{n-1} - (f_{m-2}f_{m-3} - f_{m-4}f_{m-1})l_{n-2}$$

初始条件为 $l_1 = f_m$;

$$l_2 = f_{m-1}f_{m-2} + f_{m-2}f_m - f_{m-2}^2 \circ$$

假设 $l_n (n \geq 1)$ 的生成函数为

$$L_n(z) = \sum_{i=1}^{\infty} z^i l_i \circ$$

因此

$$L_n = \frac{f_m z + (f_{m-1}f_{m-2} - f_{m-2}^2 - f_{m-3}f_m + f_{m-4}f_m)z^2}{1 - z[f_{m-2} + f_{m-3} - f_{m-4} - z(f_{m-2}f_{m-3} - f_{m-4}f_{m-1})]} + \frac{f_m(f_{m-2}f_{m-3} - f_{m-4}f_{m-1})z^3}{1 - z[f_{m-2} + f_{m-3} - f_{m-4} - z(f_{m-2}f_{m-3} - f_{m-4}f_{m-1})]}$$

类似地, 可以推导出

$$l_n = f_m \ominus_{n-1} + (f_{m-1}f_{m-2} - f_{m-2}^2 - f_{m-3}f_m + f_{m-4}f_m) \ominus_{n-2} + f_m(f_{m-2}f_{m-3} - f_{m-4}f_{m-1}) \ominus_{n-3} \blacksquare$$

通过分析公式(2), 我们可以得到以下结论:

(1) 设

$$M_i = \sum_{k_1+2k_2=n-i} \binom{k_1+k_2}{k_1} (K(f_{m-2}) + K(f_{m-3}) - K(f_{m-4}))^{k_1} (-1)^{k_2} (K(f_{m-2})K(f_{m-3}) - K(f_{m-1})K(f_{m-4}))^{k_2},$$

如果 $r_1 = r_2 = \dots = r_n = m$, 那么 $Gl(r_n)$ 中的 Kekulé 结构数为:

$$\begin{aligned} & K(Gl(r_n)) \\ &= K(f_m)M_1 + (K(f_{m-1})K(f_{m-2}) - K(f_{m-2})^2 \\ &\quad - K(f_{m-3})K(f_m) + K(f_{m-4})K(f_m))M_2 \\ &\quad + K(f_m)(K(f_{m-2})K(f_{m-3}) - K(f_{m-1})K(f_{m-4}))M_3 \circ \end{aligned}$$

(2) 如果 $r_1 = r_2 = \dots = r_n = m$, 那么 $Gl(r_n)$ 的最高次项及其系数可以从下面两个等式中得出。

$$\sigma(Gl(r_n)) = \begin{cases} \frac{n}{2}(m-2) + \frac{3}{2}, & m \text{ 是奇数, 并且 } n \text{ 是奇数} \\ \frac{n}{2}(m-2) + 2, & m \text{ 是奇数, 并且 } n \text{ 是偶数} \\ \frac{m}{2} + \frac{n-1}{2}(m-2), & m \text{ 是偶数, 并且 } n \text{ 是奇数} \\ \frac{m}{2} + \frac{n-1}{2}(m-2), & m \text{ 是偶数, 并且 } n \text{ 是偶数} \end{cases}$$

$$\sigma(Gl(r_n), \sigma(Gl(r_n))) =$$

$$\begin{cases} \frac{n-1}{2}, & m \text{ 是奇数, 并且 } n \text{ 是奇数} \\ 1, & m \text{ 是奇数, 并且 } n \text{ 是偶数} \\ (-1)^{\frac{n-1}{2}} + \frac{(n-1)(m+2)}{4}, & m \text{ 是偶数, 并且 } n \text{ 是奇数} \\ (-1)^{\frac{n-4}{2}} + \frac{(n-4)(m+2)}{4}, & m \text{ 是偶数, 并且 } n \text{ 是偶数} \end{cases} \circ$$

2.3 应用

根据上述结果和递推关系, 我们可以计算各种分支 Cata 型平面二部图的 Clar 覆盖多项式。

设图 G 中 $r_{i+1}, r_{i+2}, \dots, r_{i+j}$ 都只包含两个面, 那么 $r_{i+1}, r_{i+2}, \dots, r_{i+j} (j \geq 1)$ 构成长度为 $j+1$, 且其中任意两个次相邻面之间的距离为奇数的极大线性链。此时, 图 G 属于类型(3)中的情况。

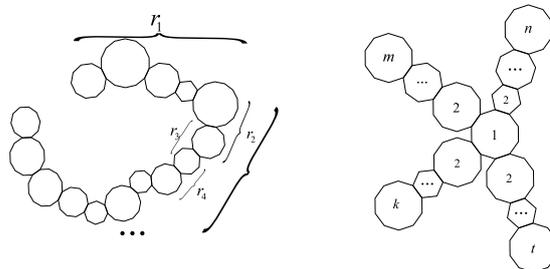


图 6 (a) r_i 和 r_{i+1} 中次相邻面之间距离的奇偶性不同

(b) 分支 Cata 型平面二部图

Fig.6 (a) The parity of the distances between sub-adjacent faces in r_i and r_{i+1} is different

(b) Branch catacondensed plane bipartite graphs

例 2.3 假设 r_i 和 $r_{i+1} (i \geq 2, i = 1, 2, \dots, n-1)$ 是相邻的相关序列。 r_i 和 r_{i+1} 中次相邻面之间距离的奇偶性不同 (如图 6(a)所示)。这类图的 Clar 覆盖多项式可通过类型(3)的递推公式求得。

设 s 是 G 中所有顶点都在外部面上的外周面; $h_{i-1} (i = m, n, k, t)$ 是平面二部图 G 中与 s 相邻的互不相交的分支 (如图 6(b)所示)。

例 2.4 图 6(b)中所示的分支 Cata 型平面二部图 G 的 Clar 覆盖多项式为

$$P(G) = h_{m-1}h_{n-1}h_{k-1}h_{t-1} + w + 1.$$

3 结论

1) 本文利用类比递推法证明了一类特殊图 Clar 覆盖多项式的递推关系。

2) 利用生成函数的方法计算了两类 Cata 型平面二部图 Clar 覆盖多项式的显式表达式。

3) 利用这一结果, 可以进一步计算出各种不同类型的分支 Cata 型平面二部图的 Clar 覆盖多项式。丰富了 Clar 覆盖多项式的相关理论研究。

参考文献:

- [1] Bonchev D, Chemical graph theory: introduction and fundamentals[M], CRC Press, 1991.
- [2] Wagner S, Wang H, Introduction to chemical graph theory[M], CRC Press, 2018.
- [3] Wang G F, Liu Y. The edge-Wiener index of zigzag nanotubes[J]. Applied Mathematics and Computation, 2020, 377: 125191.
- [4] Wang G F, Yan L, Zaman S, et al. The connective eccentricity index of graphs and its applications to octane isomers and benzenoid hydrocarbons[J]. International Journal of Quantum Chemistry, 2020, 120(18): e26334.
- [5] 涂淑玲, 王广富. 两类交叉四角链的拉普拉斯谱及其应用[J]. 华东交通大学学报, 2021, 38(5): 119-125.
TU S L, WANG G F. Laplacian spectrum of two classes of linear crossed polyomino chains and its applications[J]. Journal of East China Jiaotong University, 2021, 38(5): 119-125.
- [6] Zhang Y, Zhang H P. Hexagonal systems with the one-to-one correspondence between geometric and algebraic Kekulé structures[J]. Discrete Applied Mathematics, 2018, 238: 144-157.
- [7] Vukičević D, Randić M. On Kekulé structures of buckminsterfullerene[J]. Chemical physics letters, 2005, 401(4-6): 446-450.
- [8] Joice S L, Raja S M J. Minimum Number of Kekulé Structures of Certain Benzenoid Graphs and Pr[m,n]-Polyacenic Nanotubes[J]. Polycyclic Aromatic Compounds, 2022: 1-12.
- [9] Tudoran M A, Putz M V. Kekulé Structure[J]. New Frontiers in Nanochemistry: Concepts, Theories, and Trends: Volume 2: Topological Nanochemistry, 2020: 21.
- [10] Herndon W C, Hosoya H, Parameterized valence bond calculations for benzenoid hydrocarbons using clar structure[J]. Tetrahedron, 1984, 40(20): 3987-3995.
- [11] El-Basil S. Binomial-combinatorial properties of Clar structures[J]. Discrete applied mathematics, 1988, 19(1-3): 145-156.
- [12] Plavšić M, Trinajstić N, Klein D J. Clar structures in fractal benzenoids[J]. Croatica Chemica Acta, 1992, 65(2): 279-284.
- [13] Randić M, Hosoya H, Nakada K. On construction of Clar structures for large benzenoids[J]. Polycyclic Aromatic Compounds, 1995, 4(4): 249-269.
- [14] Zhang H P, Zhang F J. The Clar covering polynomial of hexagonal systems I[J]. Discrete applied mathematics,

1996, 69(1-2): 147-167.

- [15] Randić M, Balaban A T. Partitioning of Π -electrons in rings for Clar structures of benzenoid hydrocarbons[J]. Journal of chemical information and modeling, 2006, 46(1): 57-64.
- [16] Zhou S, Zhang H, Gutman I. Relations between Clar structures, Clar covers, and the sextet-rotation tree of a hexagonal system[J]. Discrete applied mathematics, 2008, 156(10): 1809-1821.
- [17] Zhai S, Alrowaili D, Ye D. Clar structures vs Fries structures in hexagonal systems[J]. Applied Mathematics and Computation, 2018, 329: 384-394.
- [18] Shi L, Zhang H. Counting Clar structures of (4, 6)-fullerenes[J]. Applied Mathematics and Computation, 2019, 346: 559-574.
- [19] He B H, Witek H A, Enumeration of Clar covers of parallelogram chains[J]. Discrete Applied Mathematics, 2021, 302: 221-233.
- [20] 张和平. 平面二部图的完美匹配理论[D]. 四川: 四川大学, 1994.
Zhang H P, Theory of perfect matching of plane bipartite graphs[D], Sichuan: Sichuan University, 1994.
- [21] Gutman I, Borovičanin B. Zhang-Zhang polynomial of multiple linear hexagonal chains[J]. Zeitschrift für Naturforschung A, 2006, 61(1-2): 73-77.
- [22] Chen D, Deng H, Guo Q. Zhang-Zhang polynomials of a class of pericondensed benzenoid graphs[J]. MATCH Commun. Math. Comput. Chem, 2010, 63(2).
- [23] He B H, Chou C P, Langner J, et al. Zhang-Zhang polynomials of ribbons[J]. Symmetry, 2020, 12(12): 2060.
- [24] Furtula B, Radenković S, Redžepović I, et al. The generalized Zhang-Zhang polynomial of benzenoid systems—theory and applications[J]. Applied Mathematics and Computation, 2022, 418: 126822.
- [25] Wang G F, Zhang H P. 11-embeddability under the edge-gluing operation on graphs[J]. Discrete Mathematics, 2013, 313(20): 2115-2118.



第一作者: 刘莹 (1998—), 女, 研究方向为图论及其应用。E-mail: liuying@ecjtu.edu.cn。



通信作者: 王广富 (1976—), 男, 教授, 硕士生导师, 研究方向为图论及其应用。E-mail: wgfmth@126.com。