文章编号:1005-0523(2009)03-0088-04

关于三叶图的能量变换

陈志文

(青海师范大学 数学系,青海 西宁 810008)

摘要:图的能量是图的邻接矩阵的特征值的绝对值之和，记为 $E(G)$。用 $G(n,r)$表示为具 r 个圈的 n 阶仙人掌图集，当 $r=3$ 且每个圈为三角形时，称图 G 为三叶图。主要讨论 n 阶三叶图之间的能量变换关系。首先得到 $m(G,k)$与 $b_i(G)$的关系;其次得到此类图之间满足变换关系Ⅰ、Ⅱ下的能量关系;并证得当 $T\cong S_k,k\geqslant 2$ 时的三叶图具有最小能量。

关 键 词:三叶图;特征多项式;图的能量

中图分类号:O157.5 **文献标识码**:A

本文仅考虑简单图,用 $V(G)$、$\varepsilon(G)$、$p(G)$和 $q(G)$分别表示图 G 的顶点集、边集、点和边数。更多的符号可以参考[1]。

令图 G 是 n 个点的简单连通图,$A(G)$是图 G 的邻接矩阵,矩阵 $A(G)$的特征多项式为

$$\phi(G,\lambda)=\det(\lambda A-I)=\sum_{i=0}^{n}a_i\lambda^{n-i} \tag{1}$$

其中 I 表示 n 阶的单位矩阵。图 G 的特征方程,$\phi(G,\lambda)=0$ 的 n 个根,设为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$,定义为图 G 的特征值。由于矩阵 $A(G)$是实对称的,图 G 的特征值均为实数。

在化学上,共轭的碳氢化合物形成时,释放的能量与总的 π-电子能量紧密相关,在氢化合物里,所有的 π-电子的总能量的计算可以归入到公式

$$E(G)=\sum_{i=1}^{n}|\lambda_i| \tag{2}$$

(2)式右边定义可以扩充到所有图 G,无论 G 是否代表共轭电子系统的碳原子结构图。据此方式,设 G 为任意图,利用(1)式可以定义 $E(G)$称它为图 G 的能量。关于图 G 的能量,最著名的是 Coulson 公式

$$E(G)=(1/\pi)\int_0^{+\infty}(1/x^2)\ln[(\sum_{i=0}^{\lfloor n/2\rfloor}(-1)^i a_{2i}x^{2i})^2+(\sum_{i=0}^{\lfloor n/2\rfloor}(-1)^i a_{2i+1}x^{2i+1})^2]\mathrm{d}x \tag{3}$$

其中 $a_0,a_1,a_2,\cdots,a_n$ 为图 G 特征多项式的系数。对于 $0\leqslant i\leqslant\lfloor n/2\rfloor$,令 $b_i(G)=(-1)^i a_{2i}$, $b_{i+1}(G)=(-1)^{i+1}a_{2i+1}$。显然 $b_1=1$,b_2 等于图 G 的边数。根据(3)式,对 $i=1,2,\cdots,\lfloor n/2\rfloor$,$E(G)$是关于 $b_i(G)$的严格单调函数。如果任意图 G_1,G_2 对于 $i\geqslant 0$,都有 $b_i(G_1)\geqslant b_i(G_2)$,则可称图 G_1 不小于 G_2,记做 $G_1\succeq G_2$ 或者 $G_2\preceq G_1$。进一步地,如果对于某个 j,使得 $b_j(G_1)\geqslant b_j(G_2)$,我们就记 $G_1\succ G_2$。由(3)式,对于任意图 G_1,G_2,有

$$G_1\succeq G_2\Leftrightarrow E(G_1)\geqslant E(G_2),\ G_1\succ G_2\Leftrightarrow E(G_1)>E(G_2) \tag{4}$$

关于 $E(G)$的其他结论可参见文献[2~7]。

为了方便起见,我们需要定义一些特殊的图,P_n 是一条 n 阶路,S_n 是具有 n 个顶点的星图。如果图 G 的每个块或是边,或是圈,则称 G 为仙人掌图。用 $G(n,r)$表示为具有 r 个圈的 n 阶的仙人掌图集。很明显,$G(n,0)$都是树图,而 $G(n,1)$都是单圈图。对 $u\in V(G)$,分别用 $d(u)$与 $N(u)$表示顶点 u 的度和邻集。当 $r\geqslant 3$,$n\geqslant 9$ 时,且每个圈为三角形,则称图 G 为三叶图,当 $T\cong S_k$,$k\geqslant 2$ 时,记 C^3_{3,S_k},如图1。

如果 G_1,G_2,G_3 都是 n 阶三叶图,而且定义变换 I 和变换 II,如图2与图3。本文主要讨论的是三叶图的这两种变换的能量变化关系。

收稿日期:2009-03-23

作者简介:陈志文(1982-),男,江西崇仁人,硕士生,研究方向为图论与组合。

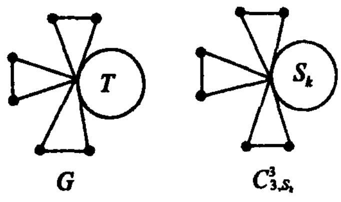

图1 G 与 C^3_{3,S_k}

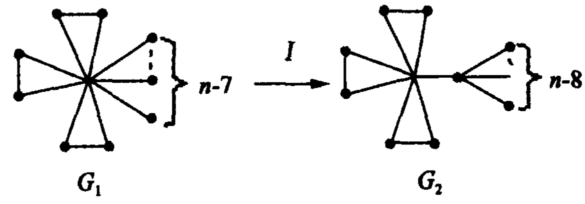

图2 变换 I

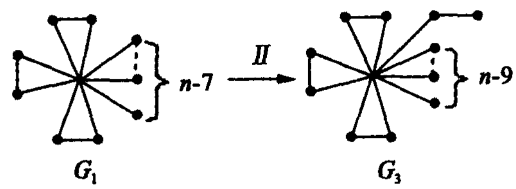

图3 变换 II

1 基本引理

记 G 的 k-匹配数目为 $m(G,k)$,即 G 中 k 条互不相邻的边数。对于任意图 $G,m(G,1)=G$ 的边数,规定 $m(G,0)=1$。因为 k-匹配边恰好关联 $2k$ 个顶点,所以当 $2k>n$ 时,$m(G,k)=0$。

引理 1.1[2] 如果 G 是 n 个顶点的简单图,uv 为图 G 的悬挂边,其中 v 为悬挂点。那么,对于 $2\leqslant i\leqslant n$,都有

$$m(G,k)=m(G-v,k)=+m(G-u-v,k-1),$$

其中 $G-v$ 表示图 G 删掉点 v 以及与点 v 相关联的边后剩下的图,图 $G-v-u$ 表示图 G 别掉点 v,点 u 以及相关联的边后剩下的图。

引理 1.2[3]**(Sach 定理)** 如果 G 是 n 阶图,且它的特征多项为 $\phi(G,\lambda)=\sum_{i=0}^{n}a_i\lambda^{n-i}$,对于 $i\geqslant 1$,则有

$$a_i=\sum_{S\in L_i}(-1)^{p(S)}2^{c(S)}$$

其中 L_i 表示图 G 中顶点数为 i 的 Sach 图,即所有分支要么为 K_2,要么为圈的图,$p(S)$ 表示图 S 的连通分支个数;$c(S)$ 表示图 S 中所含圈的个数,$a_0=1$。

2 主要结论

定理 2.1 设 $G\in\{G_1,G_2,G_3\}$ 的 n 阶三叶图,则

(1) 当 $i=2k$ 时,有 $b_{2k}=|a_{2k}|=m(G,k)$;

(2) 当 $i=2k+1$ 时,有 $b_{2k+1}=|a_{2k+1}|=6m(G-C_3,k-1)$。

证明:因为 G 中的每个圈均为三角形,则所有的 L_i 的分支或是 $C_3\cup sK_2,s\geqslant 0$,或是全为 $tK_2,t\geqslant 1$。

(1) 若 $i=2k$,根据 Sach 定理,L_i 的分支中不存在 C_3,即 L_i 的分支全为 K_2。又由图的连通分支的定义有,每个 L_i 的分支中的 K_2 都是互不相邻的,结合匹配的定义,每个 L_i 分支的 K_2 的边集就相当于 G 的一个 k 匹配。

又 $a_{2k}=\sum_{S\in L_i}(-1)^k2^0=\sum_{S\in L_i}(-1)^k$,而 L_i 的个数恰好等于 $m(G,k)$,所以可得到 $b_{2k}=|a_{2k}|m(G,k)$。

(2) 若 $i=2k+1$,根据 Sach 定理,L_i 的分支中存在且一唯的 C_3,剩下的分支全为 K_2。即 $L_i=C_3\cup sK_2$,同理可证,$a_{2k+1}=6(-1)^km(G-C_3,k-1)$,从而有

$$b_{2k+1}=|a_{2k+1}|=6m(G-C_3,k-1)。$$

定理 2.2 如果 G_1,G_2 都为 n 阶三叶图且满足变换 I 的关系,则 $E(G_1)<E(G_2)$。

证明:由引理 1,2 和定理 2.1,可以得到

$$a_1=0,a_2=-n-2,a_3=-6,a_4=3n,a_5=12,$$
$$a_6=14-3n,a_7=-6,a_8=n-7,a_9=0$$
$$a_1'=0,a_2'=-n-2,a_3'=-6,a_4'=9n-58,$$
$$a_5'=6n-36,a_6'=18n-78,a_7'=-12n-90,a_8'=7n-55,a_9'=0$$

所以可以得到 G_1,G_2 的特征多项式,

$$\phi(G_1,\lambda)=\lambda^n-(n+2)\lambda^{n-2}-6\lambda^3+(3n-9)\lambda^{n-4}+12\lambda^{n-5}$$
$$-(3n-14)\lambda^{n-6}-6\lambda^{n-7}+(n-7)\lambda^{n-8}$$
$$\phi(G_2,\lambda)=\lambda^n-(n+2)\lambda^{n-2}-6\lambda^3+(9n-58)\lambda^{n-4}+(6n-36)\lambda^{n-5}$$
$$+(18n-78)\lambda^{n-6}-(12n+90)\lambda^{n-7}+(7n-55)\lambda^{n-8}$$

由(3)式,可设函数,

$$f_1(x)=[1+(n+2)x^2+(3n-9)x^4+(3n-14)x^6+(n-7)x^8]^2+(6x^3+12x^5+6x^7)^2$$
$$f_2(x)=[1+(n+2)x^2+(9n-58)x^4+(18n-78)x^6+(7n-55)x^8]^2$$
$$+[6x^3+(6n-36)x^5+(12n-90)x^7]^2$$

根据上面的函数,由引理1.2及定理2.1有,

$$E(G_1)-E(G_2)=(1/\pi)\int_0^{+\infty}(1/x^2)\ln f_1(x)/f_2(x)\mathrm{d}x$$

再设函数

$$F(x)=f_1(x)-f_2(x)=-2(6n-49)x^4-4(3n^2-11n-81)x^6$$
$$-(102n^2-974n-2\,355)x^8-6(59n^2-619n-1\,434)x^{10}$$
$$-(579n^2-6\,410n-18\,478)x^{12}-2(195n^2-2\,581n+8\,224)x^{14}$$
$$-12(4n^2-63n+248)x^{16}$$

由初等函数的性质,当 $n\geqslant 9$ 时,多项式 $F(x)$ 的每项系数对于都小于零,则有 $F(x)<0(x>0)$。从而,可得 $E(G_1)<E(G_2)$。

定理 2.3 如果 G_1,G_3 都为 n 阶三叶图,且满足变换 II 的关系,则 $E(G_1)<E(G_3)$。

证明:由引理1,2和定理2.1,可得

$$a_1''=0,a_2''=-n-2,a_3''=-6,a_4''=4n-9,a_5''=18,$$
$$a_6''=6n-29,a_7''=-18,a_8''=4n-28,a_9''=-6,a_{10}''=0$$
$$\phi(G_3,\lambda)=\lambda^n-(n+2)\lambda^{n-2}-6\lambda^3+(4n-9)\lambda^{n-4}+18\lambda^{n-5}$$
$$+(6n-29)\lambda^{n-6}-18\lambda^{n-7}+(4n-28)\lambda^{-8}-6\lambda^{n-9}$$

也可设函数

$$f_3(x)=[1+(n+2)x^2+(4n-9)x^4+(6n-29)x^6+(4n-28)x^8]^2$$
$$+(6x^3+18x^5+18x^7+6x^9)^2$$
$$E(G_1)-E(G_3)=(1/\pi)\int_0^{+\infty}(1/x^2)\ln f_1(x)/f_3(x)\mathrm{d}x$$

令函数

$$H(x)=f_1(x)-f_3(x)=-2nx^4-2(n^2+5n-15)x^6-(13n^2-30n-30)x^8$$
$$-2(18n^2-116n+255)x^{10}-(53n^2-500n-1\,599)x^{12}$$
$$-6(7n^2-83n+322)x^{14}-3(5n^2-70n+317)x^{16}-36x^{18}$$

同理当 $n\geqslant 9$ 时,多项式 $H(x)$ 的每项系数都小于零,则 $H(x)<0(x>0)$。从而,可得 $E(G_1)<E(G_3)$。由定理2.1与定理2.2得

推论 2.4 如果 G 为图1中的 n 阶三叶图且 $T\cong S_k,n\geqslant 9,k\geqslant 2$,则此图具有最小能量。

参考文献:

[1] Bondy J A and Murty U S R. Graph Theory with Applications[M]. Amsterdam: North-Holland, 1976.

[2] Yan Weigan, Ye Luzhen. On the maximal energy and the Hosoya indexof a type of trees with many pendent vertices[J]. Match Commun Math Comput Chem, 2005, 53: 449 - 459.

[3] Hua Hongbo, Wang Maolin. Unicyclic graphs with given number of pendent vertices and minimal energy[J]. Linear Algera and its Application, 2007, 24: 1 - 14.

[4] Chen Ailian, An Chang, Wai C S. Energy ordering of unicycle graphs[J]. Match Commun Math Comput Chem, 2006, 55: 95 - 102.

[5] Zhou Bo, Li Feng. On minimal energy of trees of a prescribed diameter[J]. Journal of Mathematics Chemistry, 2006, 39: 465 - 473.

[6] Ye Luzhen, Chen Rongsi. Ordering of trees with a given bipartition by their energies and hosoya indices[J]. Match Commun Math Comput Chem, 2004, 52: 193 - 208.

[7] Yu Aimei, Lu Xuezheng. Minimum energy on tree with k-pendent vertices[J]. Linear Algera and its Application, 2006, 418: 625 - 633.

On Energy Changing of 3-leaves Graphs

CHEN Zhi-wen

(Department of Mathematics, Qinghai Normal University, Xining 810008, China)

Abstract: The energy of a graph is defined as the sum of the absolute value of eigenvalues of the adjacent matrix on the graph. $G(n, r)$ denotes the set of n order cacti graph with r cycles. When $r = 3$ and every cycls is triangle, it is called n order 3-leaves graph. In this paper, we mainly study the energy transformation raltion of 3-leaves graphs. Firstly, we get the relation between $m(G, k)$ and $b_i(G)$. Secondly, we obtain the energy connection between the graphs which satisfy the transformtion I or II. And we get that the 3-leaves graphs have the minimum energy when $T \cong S_k$, $k \geqslant 2$.

Key words: 3-leaves graph; characteristic polynomial; energy of graph

(责任编辑:吴泽九)