

文章编号: 1005-0523(2025)01-0120-07



## 平面二部图的Clar覆盖多项式

刘莹<sup>1</sup>, 王广富<sup>2</sup>, 高新宇<sup>1</sup>

(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:** Clar覆盖多项式是表征分子图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, 可以深入探讨相关分子图的共振理论及其性质。基于平面二部图的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; 推导出一类特殊图的Clar覆盖多项式的递推关系, 并利用生成函数的方法计算两类Cata型平面二部图的Clar覆盖多项式的显式表达式。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

**本文引用格式:** 刘莹, 王广富, 高新宇. 平面二部图的Clar覆盖多项式[J]. 华东交通大学学报, 2025, 42(1): 120-126.

## The Clar Covering Polynomials of Plane Bipartite Graphs

Liu Ying<sup>1</sup>, Wang Guangfu<sup>2</sup>, Gao Xinyu<sup>1</sup>

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

**Abstract:** 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 properties can be thoroughly investigated. 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. Recurrence relationship for Clar covering polynomials of a special class of graphs are derived. In turn, explicit expressions the Clar covering polynomials of two classes of catacondensed plane bipartite graphs are computed using the generating function method. 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

**Citation format:** LIU Y, WANG G F, GAO X Y. The Clar covering polynomials of plane bipartite graphs[J].

收稿日期: 2024-02-24

基金项目: 国家自然科学基金项目(11861032, 11961026); 江西省自然科学基金项目(20202BABL201010)

Journal of East China Jiaotong University, 2025, 42(1): 120–126.

化学图论作为图论的一个重要分支,在过去几十年中受到了广泛关注。化学图论中的模型用图结构表示分子,用顶点表示原子,用边表示原子间的化学键。通过研究模型中的一些指数,可以更方便地理解化合物的性质<sup>[1-3]</sup>。其中,Kekulé结构和Clar结构可用于预测各种化合物的化学和物理性质,在化合物的相关理论中起着核心作用。用 $K(G)$ 表示图 $G$ 中的Kekulé结构数目,图 $G$ 的完美匹配是覆盖图 $G$ 中所有顶点的独立边的集合。自1865年Kekulé首次提出Kekulé结构的概念以来,各类图的Kekulé结构数得到了广泛研究<sup>[4-5]</sup>。

为了比较分子间的共振稳定性,在Herndon-Hosoya模型中,首次提出了(广义)Clar结构的概念<sup>[6]</sup>。近二十年来,许多学者研究了各类图的Clar结构及其相关性质<sup>[7-15]</sup>。

文献[10]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<sup>[16]</sup>。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。

2006年,Gutman等<sup>[17]</sup>计算了多重线性六边形链的Clar覆盖多项式。2010年,Chen等<sup>[18]</sup>计算出一类Peri型苯图的Clar覆盖多项式的显式表达式。2020年,He等<sup>[19]</sup>报告了基本Peri型苯类的Clar覆盖多项式的闭式公式。2022年,Furtula等<sup>[20]</sup>将Clar覆盖多项式广义化,计算了苯系物广义Clar覆盖多项式的递推公式,并给出了计算苯链广义Clar覆盖多项式的算法。

本文首先将文献[16]中的定理推广到平面二部图,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得出两类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<sup>[7]</sup>如下

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

式中: $\mathbb{C}$ 为 $G$ 中所有Clar覆盖的集合; $C$ 为 $G$ 的一个Clar覆盖; $h(C)$ 为 $C$ 中包含的面数。

**定理1**<sup>[10]</sup> 设 $G$ 是一个平面二部图,则以下命题成立:

- 1)  $\rho(G, 0) = K(G)$ , 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2**<sup>[10]</sup> 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3**<sup>[10]</sup> 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2所示),那么  $P(G) = wP(G - s) + P(G - xy) + P(G - x - y)$ ;

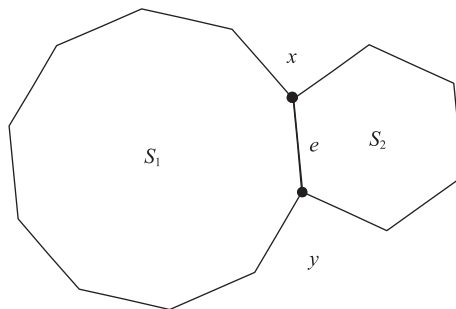


图1  $s_1, s_2$  具有公共边  $e = xy$   
Fig. 1  $s_1, s_2$  share an edge  $e = xy$

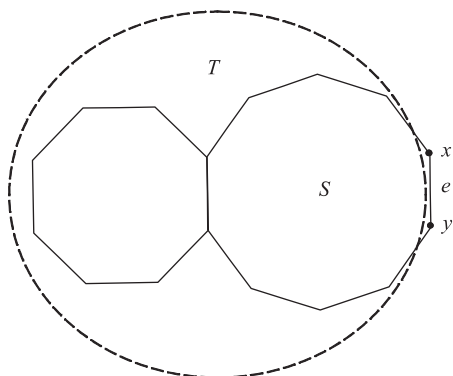


图2  $e=xy$  只位于圈  $s$  上

Fig. 2  $e=xy$  being an edge that lies only on a cycle  $s$

3) 如果  $e=xy$  是  $G$  中一条割边(如图3所示), 那么  $P(G)=P(G-xy)+P(G-x-y)$ 。

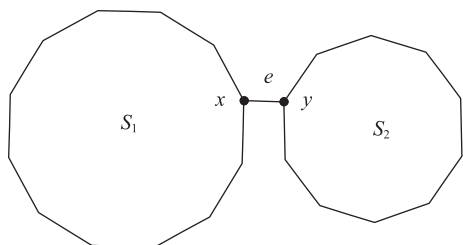


图3 边  $e=xy$  是一条割边

Fig. 3  $e=xy$  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** 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4(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4(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命题(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

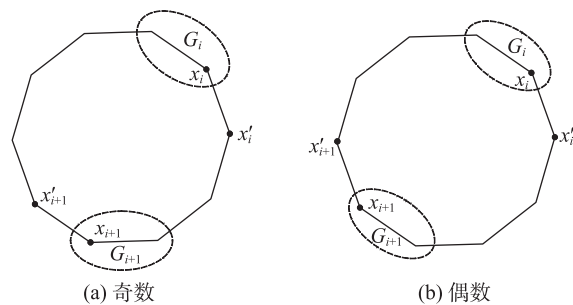


图4  $G_i$  和  $G_{i+1}$  之间的距离

Fig. 4 The distance between  $G_i$  and  $G_{i+1}$

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

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。

**推论 2** 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3展开边  $x_i x'_i$ :  $P(G) = wP(G-s) + P(G-x_i x'_i) + P(G-x_i - x'_i)$ 。其中,  $P(G-s) = \prod_{i=1}^n P(G'_i)$ ;  $P(G-x_i x'_i) = P(G-x_i x'_i - x_2 x'_2 - \dots - x_n x'_n) = \prod_{i=1}^n P(G_i)$ ;  $P(G-x_i - x'_i) = P(x'_1 - x_2 - x'_2 - \dots - x_n - x'_n) = \prod_{i=1}^n P(G'_i)$ 。因此,  $P(G) = wP(G-s) + P(G-x_i x'_i) + P(G-x_i - x'_i) = \prod_{i=1}^n P(G_i) + (w+1) \prod_{i=1}^n P(G'_i)$ 。

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  $e_2$  黏合起来得到一条新的边  $e=xy$ 。将  $G_1$  与  $G_2$  的外围边黏合得到的图记为  $G_1 \cup_{xy} G_2$  [21](如图5所示)。

**引理 1** 两个平面图  $G_1$  和  $G_2$  通过黏边得到的图  $G_1 \cup_{xy} G_2$  依然是平面图。

**证明:** 利用平面图的欧拉公式即证。

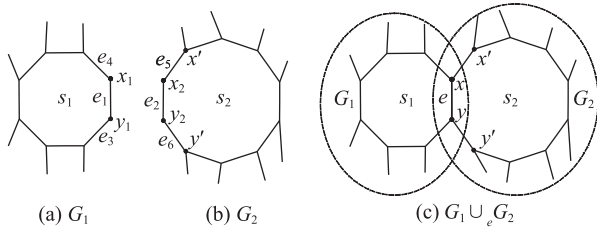


图5 两个图的黏边过程

Fig. 5 The process of gluing the edges of two graphs

定理4  $G_1 \cup_{xy} G_2$  的Clar覆盖多项式为

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

证明:利用定理3展开  $G_1, G_2$  中的边  $xy$  可以得到两个递推式:  $P(G_1) = wP(G_1 - s_1) + P(G_1 - x - y) + P(G_1 - xy)$ ,  $P(G_2) = wP(G_2 - s_2) + P(G_2 - x - y) + P(G_2 - xy)$ 。利用定理3展开  $G_1 \cup_{xy} G_2$  中的边  $xy$ :  $P(G_1 \cup_{xy} G_2) = wP(G_1 \cup_{xy} G_2 - s_1) + wP(G_1 \cup_{xy} G_2 - s_2)P(G_1 \cup_{xy} G_2 - xy) + P(G_1 \cup_{xy} G_2 - x - y)$  其中,  $wP(G_1 \cup_{xy} G_2 - s_1) = wP(G_1 - x - y)P(G_2 - x - y) = P(x - y)[P(G_1) - P(G_1 - x - y) - P(G_1 - xy)]$ ;  $wP(G_1 \cup_{xy} G_2 - s_2) = wP(G_1 - x - y)P(G_2 - s_2) = P(G_1 - x - y)[P(G_2) - P(G_2 - x - y) - P(G_2 - xy)]$ ;  $P(G_1 \cup_{xy} G_2 - x - y) = P(G_1 - x - y)P(G_2 - x - y)$ 。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6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

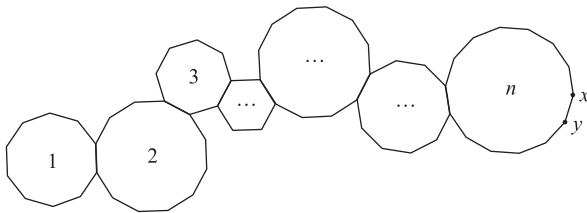


图6 任意两个次相邻面之间的距离均为奇数

Fig. 6 Distance between any two sub-adjacent faces is odd

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。

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4种情况:

情况1)  $r_1$  中任意两个次相邻面之间距离均为偶数;

情况2)  $r_1$  中任意两个次相邻面之间距离均为奇数;

情况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;

情况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。

下面分别研究这4种情况。其中情况1)情况3)满足文献[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5 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

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

证明:设  $r_1 = n$ 。将  $P(Gl(r_1))$  简记为  $f_n$ 。利用定理3展开图6中边  $xy$  得到:  $f_n = wf_{n-2} + f_{n-1} + f_{n-2} = (w+1)f_{n-2} + f_{n-1}$ 。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  $\{1 - z[1 + (w+1)z]\}^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \sum_{k_1+2k_2=k} \binom{k_1+k_2}{k_1} I^{k_1} (w+1)^{k_2} \right\} z^k$ 。将上述表达式代入  $F(z)$ , 并使  $z^n$  的系数相等得

$$f_n = \sum_{k_1+2k_2=n} \binom{k_1+k_2}{k_1} I^{k_1} (w+1)^{k_2} + (w+1) \sum_{k_1+2k_2=n-1} \binom{k_1+k_2}{k_1} I^{k_1} (w+1)^{k_2}, \text{ 当 } n \geq 2 \text{ 时}$$

成立。

通过分析式(1),我们可以得到以下结果:

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

$$\sum_{k_1+2k_2=n-1} \binom{k_1+k_2}{k_1};$$

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

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

**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7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8所示)。

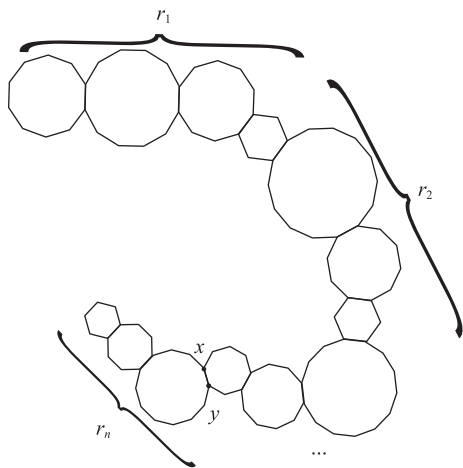


图7  $Gl(r_n)$   
Fig. 7  $Gl(r_n)$

**定理 6** 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

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

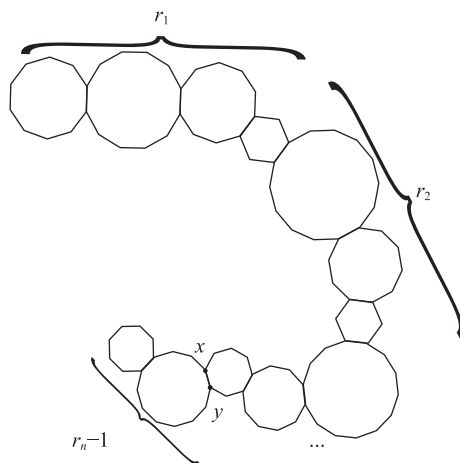


图8  $Gl(r_n - 1)$   
Fig. 8  $Gl(r_n - 1)$

初始条件为:  $P(Gl(r_1)) = f_{r_1}$ ;  $P(Gl(r_2)) = f_{r_1} f_{r_2-2} - f_{r_1-2} f_{r_2-2} \circ$

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:  $l(r_n) = (f_{r_n-1} - f_{r_n-2}) l(r_{n-1} - 2) + f_{r_n-2} l(r_{n-1})$ ,  $l(r_n - 2) = (f_{r_{n-1}-3} - f_{r_{n-1}-4}) l(r_{n-1} - 2) + f_{r_{n-1}-4} l(r_{n-1})$ 。通过化简可以得到

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

初始条件为:  $l(r_1) = f_{r_1}$ ;  $l(r_2) = f_{r_1-2} f_{r_2-1} + f_{r_1} f_{r_2-2} - f_{r_1-2} f_{r_2-2} \circ$

对于式(3),如果  $r_1 = r_2 = \dots = r_n = m$ , 将  $l(r_n)$  简记为  $l_n$ 。式(3)简化为  $l_n = (f_{m-2} + f_{m-3} - f_{m-4}) l_{n-1} - (f_{m-2} f_{m-3} - f_{m-4} f_{m-1}) l_{n-2} \circ$  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  $L_n(z) = \sum_{i=1}^{\infty} z^i l_i$ 。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  $l_n = f_m \Theta_{n-1} + (f_{m-1} f_{m-2} - f_{m-2}^2 - f_{m-3} f_m + f_{m-4} f_m) \Theta_{n-2} + f_m (f_{m-2} f_{m-3} - f_{m-4} f_{m-1}) \Theta_{n-3}$ 。

通过分析式(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:  $K(Gl(r_n)) = K(f_m)M_1 + (K(f_{m-1})K(f_{m-2}) - K(f_{m-2})^2 - K(f_{m-3})K(f_m) + K(f_{m-4})K(f_m))M_2 + K(f_m)(K(f_{m-2})K(f_{m-3}) - K(f_{m-1})K(f_{m-4}))M_3$ 。

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

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

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

### 2.3 应用

根据上述结果和递推关系,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。

例1 假设  $r_i$  和  $r_{i+1} (r_i \geq 2, i=1, 2, \dots, n-1)$  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9所示)。

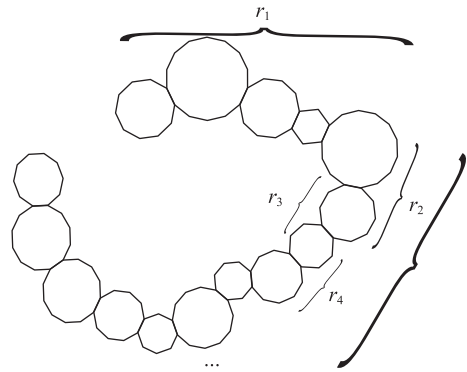


图9  $r_i$  和  $r_{i+1}$  中次相邻面之间距离的奇偶性不同  
Fig. 9 The parity of the distances between sub-adjacent faces in  $r_i$  and  $r_{i+1}$  is different

设  $s$  是  $G$  中所有顶点都在外部面上的外围面;  $h_{i-1} (i=m, n, k, t)$  是平面二部图  $G$  中与  $s$  相邻的互不相交的分支(如图10所示)。

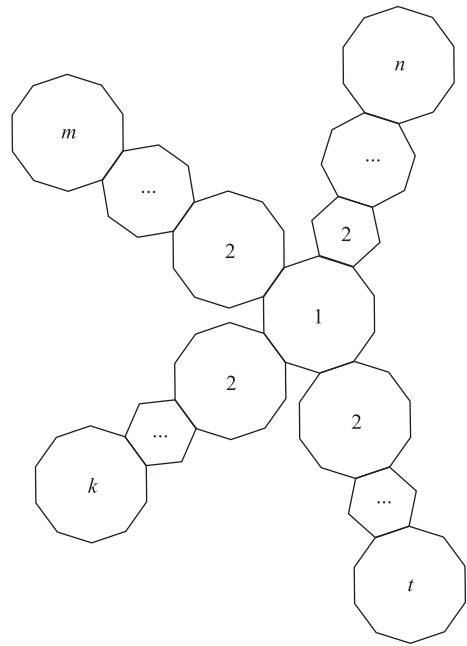


图10 分支 Cata 型平面二部图  
Fig. 10 Branch catacondensed plane bipartite graphs

例2 图10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) 利用类比递推法证明了一类特殊图的 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

面二部图的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。

#### 参考文献:

- [1] WANG G F, LIU Y. The edge-Wiener index of zigzag nanotubes[J]. Applied Mathematics and Computation, 2020, 377: 125191.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] VUKICEVIC D, RANDIC M. On Kekulé structures of buckminsterfullerene[J]. Chemical Physics Letters, 2005, 401(4/5/6): 446-450.
- [6] HERNDON W C, HOSOYA H. Parameterized valence bond calculations for benzenoid hydrocarbons using clar structure[J]. Tetrahedron, 1984, 40(20): 3987-3995.
- [7] EL-BASIL S. Binomial-combinatorial properties of Clar structures[J]. Discrete Applied mathematics, 1988, 19(1/2/3): 145-156.
- [8] PLAUSIC M, TRINAJSTIC N, KLEIN D J. Clar structures in fractal benzenoids[J]. Croatica Chemica Acta, 1992, 65(2): 279-284.
- [9] RANDIC M, HOSOYA H, NAKADA K. On construction of Clar structures for large benzenoids[J]. Polycyclic Aromatic Compounds, 1995, 4(4): 249-269.
- [10] ZHANG H P, ZHANG F J. The Clar covering polynomial of hexagonal systems I[J]. Discrete Applied Mathematics, 1996, 69(1/2): 147-167.
- [11] RANDIC M, BALABAN A T. Partitioning of  $\Pi$ -electrons in rings for Clar structures of benzenoid hydrocarbons[J]. Journal of Chemical Information and Modeling, 2006, 46(1): 57-64.
- [12] 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.
- [13] ZHAI S, ALROWAILI D, YE D. Clar structures vs Fries structures in hexagonal systems[J]. Applied Mathematics and Computation, 2018, 329: 384-394.
- [14] SHIL L, ZHANG H. Counting Clar structures of (4, 6)-fullerenes[J]. Applied Mathematics and Computation, 2019, 346: 559-574.
- [15] HE B H, WITEK H A. Enumeration of Clar covers of parallelogram chains[J]. Discrete Applied Mathematics, 2021, 302: 221-233.
- [16] 张和平. 平面二部图的完美匹配理论[D]. 成都: 四川大学, 1994.  
ZHANG H P. Theory of perfect matching of plane bipartite graphs[D]. Chengdu: Sichuan University, 1994.
- [17] GUTMAN I, BOROVCANIN B. Zhang-Zhang polynomial of multiple linear hexagonal chains[J]. Zeitschrift Für Naturforschung A, 2006, 61(1/2): 73-77.
- [18] 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): 31-64.
- [19] HE B H, CHOU C P, LANGNER J, et al. Zhang-Zhang polynomials of ribbons[J]. Symmetry, 2020, 12(12): 2060.
- [20] FURTULA B, RANDENKOVIC S, REDZEPOVIC I, et al. The generalized Zhang-Zhang polynomial of benzenoid systems: theory and applications[J]. Applied Mathematics and Computation, 2022, 418: 126822.
- [21] WANG G F, ZHANG H P. L1-embeddability under the edge-gluing operation on graphs[J]. Discrete Mathematics, 2013, 313(20): 2115-2118.



第一作者: 刘莹(1998—), 女, 硕士研究生, 研究方向为图论。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。E-mail: wgfmath@126.com。

(责任编辑: 姜红贵)