

DOI:10.19431/j.cnki.1673-0062.2019.05.011

三个圈图的两类冠图的 ABC 指数

刘海琴

(山西农业大学 文理学院,山西 太谷 030801)

摘要:图 G 和 H 两者的点冠图,记作 $G \circ H$,定义为使图 G 的每一顶点分别与图 H 的一个拷贝的所有顶点相连。类似地,三个图的冠图记作 $G_1 \circ G_2 \circ G_3$,定义为 $(G_1 \circ G_2) \circ G_3$,三个图 G_1, G_2, G_3 的剖分点一边冠图记为 $G_1^S \circ (G_2^V \circ G_3^E)$ 。图的 ABC 指数定义为: $ABC(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{d(u) + d(v) - 2}{d(u)d(v)}}$,其中 $E(G)$ 表示图 G 的边集, $d(u), d(v)$ 分别表示对应边的两顶点 u, v 的度。主要研究了三个圈图的两类冠图的 ABC 指数。

关键词:冠图;剖分点一边冠图;ABC 指数

中图分类号:0157 **文献标志码:**A **文章编号:**1673-0062(2019)05-0064-04

The Atom-Bond Connectivity Index of Two Kinds of Corona Graphs of Three Cycle Graphs

LIU Haiqin

(College of Arts and Sciences, Shanxi Agricultural University, Taigu, Shanxi 030801, China)

Abstract: The corona graph of G and H , recorded as $G \circ H$, defined as joining every vertex of G to each vertex of one copy of H . Analogously, the corona graph of three graphs denoted as $G_1 \circ G_2 \circ G_3$, defined as $(G_1 \circ G_2) \circ G_3$. The subdivision vertex-edge corona graph of G_1 with G_2 and G_3 , denoted by $G_1^S \circ (G_2^V \circ G_3^E)$. A novel atom-bond connectivity index for a (molecular) graph is defined as $\sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{d(u) + d(v) - 2}{d(u)d(v)}}$, where $E(G)$ is the edge set of G , $d(u), d(v)$ are the vertex degree of u, v , respectively. In this paper, the atom-bond connectivity index of two kinds of corona graphs of three cycle graphs have been calculated.

key words: corona graph; the subdivision vertex-edge corona graph; ABC index

收稿日期:2019-06-03

基金项目:山西农业大学科技创新基金项目(2014010);山西省青年科技研究基金项目(201801D221013)

作者简介:刘海琴(1981-),女,讲师,博士研究生,主要从事组合数学方面的研究。E-mail:3525327764@qq.com

0 引言

分子拓扑指数理论是在图的不变量基础之上建立起来的,它旨在用这个拓扑不变量,在分子的物理化学性质及生物分子的活性之间建立起某种对应关系。这种拓扑指数在一定程度上反映了分子的本性,它的以键合原子和键联方式为主,认为这两个方面决定了分子的结构和功能。由于拓扑指数这一概念可以反映分子主要的结构信息,同时,也由于对应的拓扑指数法在数学处理上相比于量子化学更为简单。因此,在化学、生物、药理学、医学、物理学甚至社会科学中都具有巨大的应用价值。

1998年由 Estrad 等人提出一种新的拓扑指数—原子键连通性指数(the atom-bond connectivity index,简称ABC指数),它是一种基于顶点度的拓扑指数。对于图 G ,它的ABC指数^[1]

定义为: $ABC(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{d(u) + d(v) - 2}{d(u)d(v)}}$,其中 $E(G)$ 表示图 G 的边集, $d(u), d(v)$ 分别表示对应边的两顶点 u, v 的度。

自ABC指数提出以来,对化学分子结构图、树图、单圈图以及双圈图的ABC指数的研究和刻画已有许多结论,也提出了许多新的概念和方法^[1-3]。其中对树图的ABC指数的刻画,目前为止仍然有未解决的问题,寻找具有最小值的树仍然是一个开放性的问题。本文考虑了在对三个圈图合成运算(冠图)的背景下,对应图的ABC指数的变化。其中冠图的定义于1970年由 Frucht 和 Harary 首次提出。

1 主要结论

定义1 设 G_1 和 G_2 为顶点数为 n_1, n_2 ,边数为 m_1, m_2 的简单图,冠图 $G_1 \circ G_2$ 是由图 G_1 和 G_2 合成的图,其中使图 G_1 的每个顶点分别与图 G_2 的一个拷贝的所有顶点相连^[4]。

类似地,三个图的冠图记作 $G_1 \circ G_2 \circ G_3$,定义为 $(G_1 \circ G_2) \circ G_3$ 。

若 $G_1 = C_4, G_2 = P_2, G_3 = C_3$,则 $G_1 \circ G_2 \circ G_3$ 如图1所示。

将三个圈图记为 C_1, C_2, C_3 ,对应顶点数分别为 n_1, n_2, n_3 ,则对应的边数也是 n_1, n_2, n_3 。将冠图 $C_1 \circ C_2 \circ C_3$ 中的所有边按照如下几种情况分类:

(1)图 C_1 的边集记为 E_1, n_1 个图 C_2 的拷贝

的边集 $E_2, n_1(1+n_2)$ 个图 C_3 的拷贝的边集记为 E_3 。

$$ABC(E_1) = n_1 \sqrt{\frac{2(2+n_2+n_3)-2}{(2+n_2+n_3)^2}} = \frac{n_1 \sqrt{2(1+n_2+n_3)}}{2+n_2+n_3}$$

$$ABC(E_2) = n_1 n_2 \sqrt{\frac{2(3+n_3)-2}{(3+n_3)^2}} = \frac{n_1 n_2 \sqrt{2(2+n_3)}}{3+n_3}$$

$$ABC(E_3) = n_1(1+n_2)n_3 \sqrt{\frac{3+3-2}{9}} = \frac{2n_1(1+n_2)n_3}{3}$$

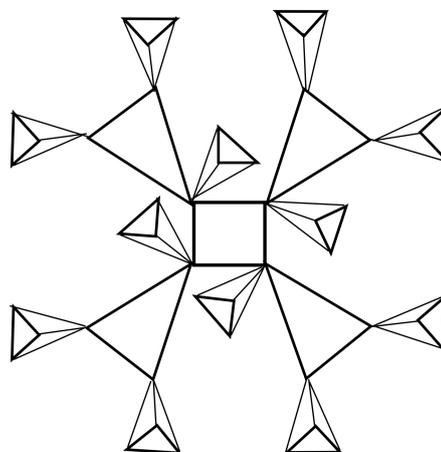


图1 $G_1 \circ G_2 \circ G_3$, 其中 $G_1 = C_4, G_2 = P_2, G_3 = C_3$
Fig.1 $G_1 \circ G_2 \circ G_3$, and $G_1 = C_4, G_2 = P_2, G_3 = C_3$

(2)边集 E_4 ,其中所含边的两顶点一个为图 C_1 的顶点 $v_{1i}(i=1,2,\dots,n_1)$,另一个顶点为与顶点 v_{1i} 相连接的第 i 个图 C_2 的拷贝的顶点 $v_{2j}(j=1,2,\dots,n_2)$ 。

$$ABC(E_4) = n_1 n_2 \sqrt{\frac{(3+n_3)+(2+n_2+n_3)-2}{(3+n_3)(2+n_2+n_3)}} = \frac{n_1 n_2 \sqrt{3+n_2+2n_3}}{(3+n_3)(2+n_2+n_3)}$$

(3)边集 E_5 ,其中所含边的两顶点一个为第 i 个图 C_2 拷贝 C_{2i} 的顶点 $v_{2j}(j=1,2,\dots,n_2)$,另一个顶点为与 C_{2i} 的一个顶点相连的图 C_3 的拷贝的顶点 $v_{3k}(k=1,2,\dots,n_3)$ 。

$$ABC(E_5) = n_1 n_2 n_3 \sqrt{\frac{(3+n_3)+3-2}{3(3+n_3)}} =$$

$$n_1 n_2 n_3 \sqrt{\frac{4+n_3}{3(3+n_3)}}$$

(4) 边集 E_6 , 其中所含边的顶点一个为图 C_1 的顶点 v_{1i} ($i=1, 2, \dots, n_1$), 另一个顶点为与图 C_1 相连的图 C_3 拷贝的顶点 v_{3k} ($k=1, 2, \dots, n_3$)。

$$ABC(E_6) = n_1 n_3 \sqrt{\frac{3 + (2 + n_2 + n_3) - 2}{3(2 + n_2 + n_3)}} = n_1 n_3 \sqrt{\frac{3 + n_2 + n_3}{3(2 + n_2 + n_3)}}$$

定理 1 设有三个圈图记为 C_1, C_2, C_3 , 对应顶点数分别为 n_1, n_2, n_3 , 则对应的边数也是 n_1, n_2, n_3 。其冠图 $C_1 \circ C_2 \circ C_3$ 的 ABC 指数为:

$$ABC(C_1 \circ C_2 \circ C_3) = \frac{n_1 \sqrt{2(1+n_2+n_3)}}{2+n_2+n_3} + \frac{n_1 n_2 \sqrt{2(2+n_3)}}{3+n_3} + \frac{2n_1(1+n_2)n_3}{3} + n_1 n_2 \sqrt{\frac{3+n_2+2n_3}{(3+n_3)(2+n_2+n_3)}} + n_1 n_2 n_3 \sqrt{\frac{4+n_3}{3(3+n_3)}} + n_1 n_3 \sqrt{\frac{3+n_2+n_3}{3(2+n_2+n_3)}}$$

三个图 G_1, G_2, G_3 的剖分点一边冠图记为 $G_1^S \circ (G_2^V \circ G_3^E)$ [5]。其中, G_1^S 为 G_1 的细分图 [6], 即将原来 G_1 的每条边换成 2 长的路后得到的图。这样得到的细分图的顶点可分为两类, 一类为原来 G_1 的顶点, 另一类为对应每条边上新插入的顶点。将图 G_1 的每一个旧的顶点与 G_2 的一个拷贝的所有顶点相连, 将图 G_1 的每一个新插入的顶点与 G_3 的一个拷贝的所有顶点相连, 即为 $G_1^S \circ (G_2^V \circ G_3^E)$ 。若 $G_1 = C_4, G_2 = P_2, G_3 = C_3$, 则 $G_1^S \circ (G_2^V \circ G_3^E)$ 如图 2 所示。

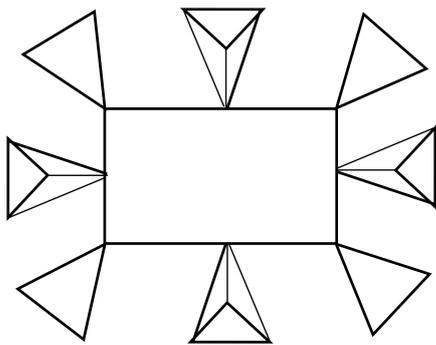


图 2 $G_1^S \circ (G_2^V \circ G_3^E)$, 其中 $G_1 = C_4, G_2 = P_2, G_3 = C_3$

Fig. 2 $G_1^S \circ (G_2^V \circ G_3^E)$, and $G_1 = C_4, G_2 = P_2, G_3 = C_3$

考虑三个圈图的剖分点一边冠图的 ABC 指

数, 将三个单圈图记为 C_1, C_2, C_3 , 对应顶点数分别为 n_1, n_2, n_3 , 则对应的边数也是 n_1, n_2, n_3 。同理, 将图中的边集按照如下三种类型分类:

(1) 图 C_1^S 的边集 E_1 , 所有图 C_2 的拷贝的边集 E_2 , 所有图 C_3 的拷贝的边集 E_3 。

$$ABC(E_1) = 2n_1 \sqrt{\frac{(2+n_2) + (2+n_3) - 2}{(2+n_2)(2+n_3)}} = 2n_1 \sqrt{\frac{2+n_2+n_3}{(2+n_2)(2+n_3)}}$$

$$ABC(E_2) = n_1 n_2 \sqrt{\frac{3+3-2}{9}} = \frac{2n_1 n_2}{3}$$

$$ABC(E_3) = n_1 n_3 \sqrt{\frac{3+3-2}{9}} = \frac{2n_1 n_3}{3}$$

(2) 边集 E_4 , 其中所含边的顶点一个为图 C_1 的旧顶点 v_{1i} ($i=1, 2, \dots, n_1$), 另一个顶点为与点 v_{1i} 相连接的第 i 个图 C_2 的拷贝的顶点 v_{2j} ($j=1, 2, \dots, n_2$)。

$$ABC(E_4) = n_1 n_2 \sqrt{\frac{3 + (2 + n_2) - 2}{3(2 + n_2)}} = n_1 n_2 \sqrt{\frac{3 + n_2}{3(2 + n_2)}}$$

(3) 边集 E_5 , 其中所含边的顶点一个为图 C_1 的新顶点 v'_{1i} ($i=1, 2, \dots, n_1$), 另一个顶点为与点 v'_{1i} 相连接的第 i 个图 C_3 的拷贝的顶点 v_{3j} ($j=1, 2, \dots, n_3$)。

$$ABC(E_5) = n_1 n_3 \sqrt{\frac{3 + (2 + n_3) - 2}{3(2 + n_3)}} = n_1 n_3 \sqrt{\frac{3 + n_3}{3(2 + n_3)}}$$

定理 2 设有三个圈图记为 C_1, C_2, C_3 , 对应顶点数分别为 n_1, n_2, n_3 , 则对应的边数也是 n_1, n_2, n_3 。其冠图 $G_1^S \circ (G_2^V \circ G_3^E)$ 的 ABC 指数为:

$$ABC(G_1^S \circ (G_2^V \circ G_3^E)) = 2n_1 \sqrt{\frac{2+n_2+n_3}{(2+n_2)(2+n_3)}} + \frac{2n_1 n_2}{3} + \frac{2n_1 n_3}{3} + n_1 n_2 \sqrt{\frac{3+n_2}{3(2+n_2)}} + n_1 n_3 \sqrt{\frac{3+n_3}{3(2+n_3)}}$$

对比以上两种不同的合成方式, 可见不同的合成运算对图的 ABC 指数影响较大。而且第一种合成方式所得 ABC 指数要远大于第二种合成方式所得 ABC 指数。这个性质在 ABC 指数的应用中有广泛的应用背景。

分子结构决定了分子的活性, 拓扑指数法表

达的定量关系,显示了分子的大小、分子的官能团种类、官能团的位置等因素对活性的影响,这为合成药物、抑制有害的化学组分有着直接的指导作用。

一种好的拓扑指数^[7-8]应该是能全方位多角度的反映分子结构的特性,为实际中的实验操作提供有力的理论支撑。例如,在高分子合成领域,拓扑指数作为分子的代码进入数据库^[9]。分子可以是真实的分子,也可以是想象中的分子。这样,为合成化学提供了分子的微观基础,用计算机模拟代替部分尝试性的实际操作,节省了大量的物力和人力,缩短了合成周期。通过对各种不同图类的拓扑指数进行对比,寻找最优的拓扑指数值,能为合成化学等领域提供理论指导。

参考文献:

- [1] ESTRADA E, TORRES L, RODRIGUEZ L, et al. An atom-bond connectivity index: modelling the enthalpy of formation of alkanes [J]. *Indian journal of chemistry*, 1998, 37(A): 849-855.
- [2] GAO Y B, SHAO Y L. The smallest ABC index of trees with n pendent vertices [J]. *Math communications in mathematical & in computer chemistry*, 2016, 76(1): 141-158.
- [3] 任敏,高玉斌. 单圈图的极小ABC指数[J]. *云南师范大学学报(自然科学版)*, 2017, 37(5): 20-26.
- [4] 徐立新. 冠图 $G_1 \circ G_2$ 与边冠图 $G_1 \square G_2$ 的维纳指数 [J]. *湘潭大学自然科学学报*, 2011, 33(4): 4-6.
- [5] LIU Q. Some results of resistance distance and Kirchhoff Index of subdivision vertex-edge corona for graphs [J]. *数学进展*, 2016, 45(2): 176-184.
- [6] 霍英杰,高玉斌. 线图、全图和细分图的第一几何-算数指数的上下界 [J]. *中北大学学报(自然科学版)* 2018, 39(1): 38-41.
- [7] 王狄建,肖香凤,汤自凯. 几类冠图的 Zagreb 指数 [J]. *邵阳学院学报(自然科学版)*, 2017, 14(4): 11-18.
- [8] MEHAR A M. Two degree-distance based topological descriptors of some product graphs [J]. *Discrete applied mathematics*, 2018, 236: 315-328.
- [9] 袁华,李梦阳,陈春妮,等. 基于拓扑指数对含氧有机化合物闪点的定量构效关系研究 [J]. *化学通报*, 2017, 80(4): 385-391.

(责任编辑:扶文静)