

一类三圈图的Hosoya指标的极小值

久血吉

青海民族大学数学与统计学院, 青海 西宁

收稿日期: 2023年6月25日; 录用日期: 2023年7月26日; 发布日期: 2023年8月2日

摘要

令 $\mathcal{G}_{n,n+2}$ 表示 n 个顶点 $n+2$ 条边的所有三圈图的集合。图的Hosoya指标是指匹配多项式的所有系数的绝对值之和。本文中我们刻画了一类三圈图 $\mathcal{G}_{n,n+2}$ 的Hosoya 指标的第二小到第四小以及对应的极图。

关键词

三圈图, 匹配多项式, Hosoya指标

The Hosoya Index of a Class of Tricyclic Graphs

Xueji Jiu

School of Mathematics and Statistics, Qinghai Minzu University, Xining Qinghai

Received: Jun. 25th, 2023; accepted: Jul. 26th, 2023; published: Aug. 2nd, 2023

Abstract

Let $\mathcal{G}_{n,n+2}$ be the collection of all connected tricyclic graphs with n vertices and $n+2$ edges. The sum of absolute value of all coefficients of matching polynomial is called

Hosoya index. In this paper, we determine 2nd to 4th minimal Hosoya index of a Class of Tricyclic Graphs.

Keywords

Tricyclic Graphs, Matching Polynomial, Hosoya Index

Copyright © 2023 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

图的匹配总数是一个图形不变量,该图形不变量是关于结构化学.在化学文献中,这种图形不变量被称为分子图的 Hosoya 指标.它被应用于与沸点,熵,计算键阶的相关性,以及化学结构的编码 [1-3].因此,分子图的 Hosoya 指标的排序在化学中是最精确的.令 $G = (V(G), E(G))$ 是一个图,其中 $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 是图 G 的顶点集, $E(G) = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ 是 G 的边集.

图 G 的匹配多项式 $\mu(G, x)$ 定义为

$$\mu(G, x) = \sum_{k \geq 0} (-1)^k m(G, k) x^{n-2k},$$

其中 $m(G, k)$ 表示为图 G 的 k -匹配数目.关于匹配的详细阐述请参考 [4, 5].

图 G 的 Hosoya 指标用 $Z(G)$ 表示,是匹配多项式 $\mu(G, x)$ 的所有系数的绝对值之和,即

$$Z(G) = \sum_{k \geq 0} m(G, k).$$

Hosoya 指标由日本化学家 Hosoya 1971年提出的.这个指标与分子图的特征多项式密切相关,它在物理数学都有重要应用.许多研究人员研究了 Hosoya 指标(例如,见 [6-8]).Wanger 和 Gutman [9] 对图的 Hosoya 指标给了一个综述,Hosoya 指标的研究进展做了重要的研究.Wanger [1] 刻画了具有 n 个顶点的树中路 P_n 具有最大 Hosoya 指标和星 S_n 具有最小 Hosoya 指标.Hou [10] 分别给出具有给定匹配大小的树 Hosoya 指标的最小和第二大.在 [11, 12] 中,Liu 和 Ou 分别对直径为4的树的 Hosoya 指标的最大值.Ou [13] 证明了对没有完美匹配的树具有最大 Hosoya 指标的特征.在 [12] 中 Ou 证明了直径为5的树的 Hosoya 指标的最大值.欧见平 [14] 和 [15] 分别研究了单圈图 Hosoya 指标的最小值和最大值.邓汉元 [16] 和 [17] 分别研究了双圈图 Hosoya 指标的最小值和最大值.黄余凤等人 [18]

研究了固定大小图的 Hosoya 指标的上下界.刘魏军等人 [19] 确定了具有 n 个顶点,直径为4的单圈图的最大 Hosoya 指标,并解决了 Wanger 和 Gutman 在2010年提出的关于小直径单圈图的问题.Takao Komatsu [20] 展示了如何使用分支连续分数计算给定树或圈类型图的 Hosoya 指标,刘岩等人 [21] 研究了三圈图 Hosoya 指标的最大值以及对应的极图.李书超等人 [22] 确定了所有三圈图中具有最小 Hosoya 指标的图.令 $\mathcal{G}_{n,n+2}$ 是具有 n 个顶点 $n+2$ 的边所有三圈图的集合.Dalati [23] 等人对三圈图的结构进行了研究,任何一个三圈图都属于作为19种点诱导子图中的一种.然而检查三圈图结构,不难看出存在4种同构的图.因此实际上 \mathcal{G}_n 有十五种非同构组成,即 $\mathcal{G}_n = \bigcup_{i=1}^{15} \mathcal{G}_n^i$.其中 \mathcal{G}_n^i 表示所有包含 $G_i (i = 1, 2, 3, \dots, 15)$ 作为点导出子图的集合.本文在吴廷增和 So 研究的基础上进一步研究一类三圈图 Hosoya 指标的第二小,第三小和第四小以及对应的极图.

2. 准备知识

令 $G = (V(G), E(G))$ 是一个简单的连通图,其中 $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 表示图 G 的顶点集, $E(G) = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ 表示图 G 的边集. $(n, n+2)$ 表示具有 n 个顶点 $n+2$ 边的所有三圈图.令点 $u \in V(G)$ 是图 G 的任意一个顶点,与点 u 邻接的点的集合称为点 v 的邻集,记作 $N(u)$.令 $v \in V(G)$, G 中与顶点 v 关联的边的个数称为 v 的度,记 $d_G(v)$ 或 d_v ,我们把度为1的点称为悬挂点.令 G_1, G_2 两个连通图,其中 $V(G_1) \cap V(G_2) = \{v\}$.令 $G = G_1 v G_2$ 是一个图,并且, $V(G) = V(G_1) \cup V(G_2), V(G_1) \cap V(G_2) = \{v\}, E(G) = E(G_1) \cup E(G_2)$. P_n, C_n, F_n, T_n, S_n 分别表示含有 n 个顶点的路,圈,森林,树,星. S_n^+ 为 S_n 中相连两个悬挂点得到的图.

下面我们将介绍一些图变换,使图的 Hosoya 指标变小.

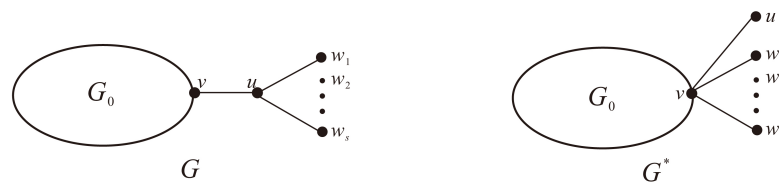


Figure 1. G, G^*

图 1. G, G^*

定义2.1 令 $uv \in E(G), N_G(u) = \{v, w_1, w_2, \dots, w_s\}$, 其中 $d(w_i) = 1 (1 \leq i \leq s)$. 令 $G^* = G - \{uw_1, uw_2, \dots, uw_s\} + \{vw_1, vw_2, \dots, vw_s\}$.我们将图 G 变换到 $G_i^* (i = 1, 2)$ 定义为变换I(见图 1).

引理2.1 [16] 令 G 和 G^* 如上述定义2.1所描述.则 $Z(G) > Z(G^*)$.



Figure 2. G, G^*

图 2. G, G^*

定义2.2 令 G_0 是 k 阶连通图, $P_k = x_1, x_2, \dots, x_k (k \geq 3)$ 为包含于 G 内部的一条路, 其中 $d_{G(x_i)} = 2 (i = 1, 2, \dots, k - 1)$. G^* 是通过 G 中删除 x_2x_3 并与 x_1x_3 连接在一起得到的图. 我们把图 G 变换到 G^* 定义为变换 II (见图 2).

引理2.2 [23] 图 G 和 G^* 如定义 2.2 所描述, 则 $Z(G) \geq Z(G^*)$, 当且仅当 $G \cong G^*$ 时等式成立.

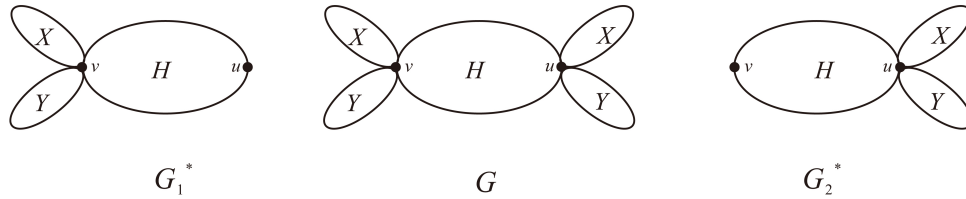


Figure 3. G_1^*, G, G_2^*

图 3. G_1^*, G, G_2^*

定义2.3 令 H, X 和 Y 是三个连通图. 假设 u, v 是 H 的两个顶点, v' 是 X 的一个顶点, u' 是 Y 的一个顶点. 令 G 是 H 中顶点 u, v 分别与 X 中的顶点 v' 和 Y 中的顶点 u' 粘接在一起得到的图, 令 G_1^* 是 H 中顶点 v 与 X 中的顶点 v' 和 Y 中的顶点 u' 粘接在一起得到的图, 令 G_2^* 是 H 中顶点 u 与 X 中的顶点 v' 和 Y 中的顶点 u' 粘接在一起得到的图. 我们将图 G 变换到 $G_i^* (i = 1, 2)$ 定义为变换 III (见图 3).

引理2.3 [24] 令 G_1^* 和 G_2^* 如上述定义 2.3 所描述. 则 $Z(G) > Z(G_1^*)$ 或 $Z(G) > Z(G_2^*)$.



Figure 4. G_1, G_2

图 4. G_1, G_2

定义2.4 令 G_0 是非平凡连通图, $u_0 \in V(G_0), H \cong C_3$ 且 $u, v \in V(H)$. 假设 $G = (G_0 \triangleright u_0 = u \triangleleft H)$. 假设 T 是 n 阶的树, 其中心是顶点 w . 如果 $G_1 = (G \triangleright u = w \triangleleft T), G_2 = (G \triangleright v = w \triangleleft T)$. 我们把图 G_1 变换到 G_2 定义为变换 IV (见图 4).

引理2.4 [23] 令 $G_1 = (G \triangleright u = w \triangleleft T), G_2 = (G \triangleright v = w \triangleleft T)$. 如定义 2.4 所描述, 则 $Z(G_1) < Z(G_2)$.

最后, 我们给出一些对下面的证明和结果有用的引理.

引理2.5 [25] 图 G 的 Hosoya 指标满足如下性质

- (i) 如果 $uv \in E(G)$, 则 $Z(G) = Z(G - uv) + Z(G - u - v)$.
- (ii) 如果 $v \in V(G)$, 则 $Z(G) = Z(G - v) + \sum_{u \in N_G(v)} Z(G - u - v)$.

(iii) 如果 G_1, G_2, \dots, G_k 为 G 的连通分支, 则

$$Z(G) = \prod_{i=1}^k Z(G_i).$$

引理2.6 [26] 令 G 是一个图, $u, v \in V(G)$. 假设 $G_{s,t}$ 是通过悬挂顶点 s, t 分别与顶点 u, v 黏在一起得到的图, 则

$$Z(G_{s+i,t-i}) < Z(G_{s,t}), 1 \leq i \leq t; Z(G_{s-i,t+i}) < Z(G_{s,t}), 1 \leq i \leq s.$$

3. 一类三圈图的 Hosoya 指标的极小值

Wu 和 So [27] 中考虑了三圈图 Hosoya 指标, 并得到了每一类三圈图 Hosoya 指标的极小值.

下面第一类图以及对应的极图定义如下



Figure 5. $G_1(p, q, m), G_1^*(3, 3, 3, n-7)$

图 5. $G_1(p, q, m), G_1^*(3, 3, 3, n-7)$

$p, q, m \geq 3$, 令 $G_1(p, q, m)$ 定义为 C_p 中一个大于等于 2 度顶点与 $B_1(q, m)$ 中的一个大于等于 4 度顶点黏在一起得到的图, 其中 $n = p + q + m - 2$ (见图 5).

$n \geq 8$, 令 $G_1^*(3, 3, 3, n-7)$ 定义为 C_3 中的一个顶点和 $B_1^*(3, 3, n-5)$ 中的一个大于等于 4 度顶点黏在一起得到的图, (见图 5).

定理3.1 [27] 令 $G \in \mathcal{G}_{n, n+2}^1$ 是 $n(n \geq 8)$ 个顶点的三圈图, 则 $Z(G) \geq Z(G_1^*(3, 3, 3, n-7)) = 8n - 24$.

3.1. $G \in \mathcal{G}_{n, n+2}^1(p, q, m)$ Hosoya 指标的第二小到第四小

通过定理 3.1 和引理 2.1, 2.2, 2.3, 2.4 我们得到如下一个事实. 令 $G \in \mathcal{G}_{n, n+2}^1(p, q, m) - G_1^*(3, 3, 3, n-7)$ 的阶为 n . 通过反复应用定义 2.1, 2.2, 2.3, 2.4 中提出的变换 I, II, III 和 IV, 特别地, 我们将其 G 变换到 $G_1^*(3, 3, 3, n-7)$. 也就是说, 存在图 $G^{(i)} (0 \leq i \leq l)$ 使得

$$G = G^0 \hookrightarrow G^1 \hookrightarrow G^2 \hookrightarrow \dots \hookrightarrow G^{l-1} \hookrightarrow G^l = G_1^*(3, 3, 3, n-7), \quad (2)$$

其中 $G^{l-1} \neq G_1^*(3, 3, 3, n-7)$. 这意味着 G^{l-1} 有 4 种可能的结构, (见图 6).

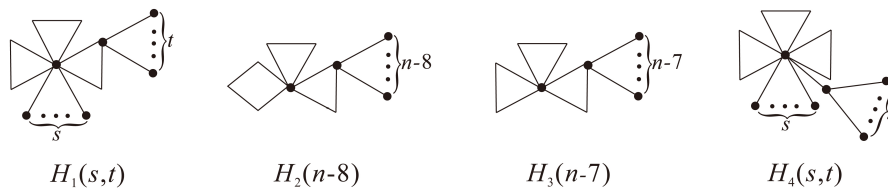


Figure 6. $H_1(s, t), H_2(n - 8), H_3(n - 8), H_4(s, t)$

图 6. $H_1(s, t), H_2(n - 8), H_3(n - 8), H_4(s, t)$

引理3.1 令 $H_1(s, t)$ 是一个阶为 $n = s + t + 7$ 的图,其中 $n \geq 9, s \geq 1, t \geq 1$,则 $Z(H_1(s, t)) \geq 11n - 48$,当且仅当 $H_1(s, t) \cong H_1(n - 8, 1)$ 时等式成立.

证明 根据引理2.6,我们得 $Z(H_1(s, t)) \geq Z(H_1(n - 8, 1)) = 11n - 48$ 或 $Z(H_1(s, t)) \geq Z(H_1(1, n - 8)) = 20n - 124$.所以 $Z(H_1(s, t)) \geq 11n - 48$,当且仅当 $H_1(s, t) \cong H_1(n - 8, 1)$ 时等式成立.

引理3.2 令 $H_4(s, t)$ 是一个阶为 $n = s + t + 8$ 的图,其中 $n \geq 9, s \geq 0, t \geq 1$,则 $Z(H_4(s, t)) \geq 16n - 103$,当且仅当 $H_4(s, t) \cong H_4(n - 9, 1)$ 时等式成立.

证明 根据引理2.6,我们得 $Z(H_4(s, t)) \geq Z(H_4(n - 8, 1)) = 16n - 103$ 或 $Z(H_4(s, t)) \geq Z(H_4(0, n - 8)) = 31n - 210$.所以 $Z(H_4(s, t)) \geq 16n - 103$,当且仅当 $H_4(s, t) \cong H_4(n - 9, 1)$ 时等式成立.

定理3.2 令 $G \in \mathcal{G}_{n, n+2}^1(p, q, m)$ 的阶为 $n(n \geq 16)$.则 $Z(G) \geq 12n - 54 > 11n - 48$, 当且仅当 $G \cong H_1(n - 8, 1)$ 时等式成立.

证明 根据引理2.5,2.6,我们得 $Z(H_2(n - 8)) = 12n - 43$ 和 $Z(H_3(n - 7)) = 16n - 80$,结合定理3.1,引理3.1,3.2,(2)得到 $Z(G) \geq 12n - 54 > 11n - 43 > 8n - 24$,当且仅当 $G \cong H_1(n - 8, 1)$ 时等式成立.

现在我们根据(2)在 $\mathcal{G}_{n, n+2}^1(p, q, m)$ 中找到了第二小和第三小以及对应的极图.下面我们再次寻找 G^{l-1} 和 G^{l-2} 中的第二小和第三小以及对应的极图.反复应用变换I,II,III和IV,确定 G^{l-2} 中 $H_1(s, t), H_2(n - 8), H_3(n - 7)$ 的结构.并确定 Hosoya 指标的下界.

反复应用变换I,II,III和IV, G^{l-2} 中 $H_1(s, t)$ 可能有6种结构(见图 7).

引理3.3 令 $H_1^1(s, t, u)$ 是一个阶为 $n = s + t + u + 7$ 的图,其中 $n \geq 11, s \geq 1, t \geq 1, u \geq 1$, 则 $Z(H_1^1(s, t, u)) \geq 16n - 73$,当且仅当 $H_1^1(s, t, u) \cong H_1^1(n - 9, 2, 0)$ 时等式成立.

证明 假设在 $H_1^1(s, t, u)$ 中 s, t, u 两两同时为1时,根据引理2.6,我们得 $Z(H_1^1(n - 9, 1, 1)) = 16n - 68, Z(H_1^1(1, 1, n - 9)) = 30n - 22$ 和 $Z(H_1^1(1, n - 9, 1)) = 33n - 239$.

假设 $H_1^1(s, t, u)$ 中 s, t, u 最多一个为1时,根据引理2.6,我们得 $Z(H_1^1(s, t, u)) = 8n + 4st + 4su + 7ut + 2sut + 1$,假设 $f(s, t, u) = -8n + 4st + 4su + 7ut + 2sut + 1 - (16n - 73) = 4s(t + u - 2) + (7u - 8)t + 2u(st - 4) + 74$,如果 $s = 1, t \geq 2$ 或 $u \geq 2$.则 $f(s, t, u) = 4(u - 2) + (7u - 8)2 - 4u + 74 > 0$.如果 $t = 1, s \geq 2$ 或 $u \geq 2$.则 $f(s, t, u) = 4(u - 2) + (7u - 8)2 - 4u + 74 > 0$.如果 $u = 1, s \geq 2$ 或 $t \geq 2$.则 $f(s, t, u) = 4s(t - 1) - t + 2(st - 4) + 74 > 0$. 所以 $Z(H_1^1(s, t, u)) \geq 16n - 73$,当且仅当 $H_1^1(s, t, u) \cong H_1^1(n - 9, 2, 0)$ 时等式成立.

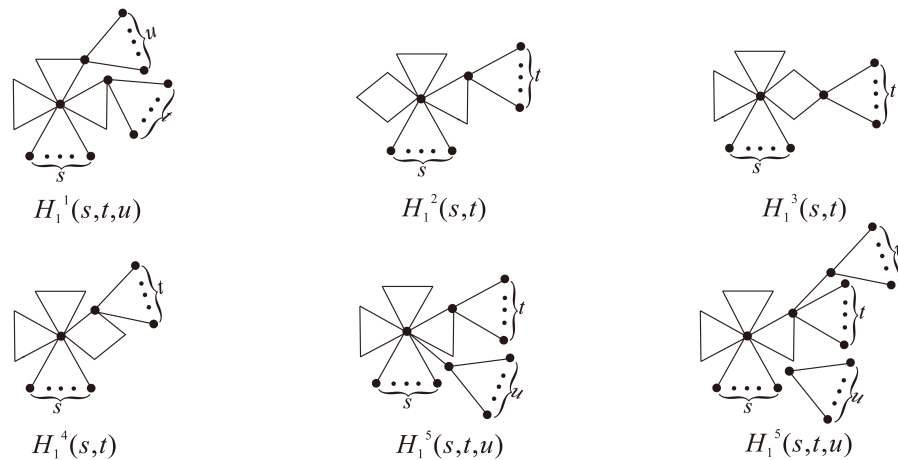


Figure 7. $H_1^1(s, t, u), H_1^2(s, t), H_1^3(s, t), H_1^4(s, t), H_1^5(s, t, u), H_1^6(s, t, u)$

图 7. $H_1^1(s, t, u), H_1^2(s, t), H_1^3(s, t), H_1^4(s, t), H_1^5(s, t, u), H_1^6(s, t, u)$

引理3.4 令 $H_1^2(s, t)$ 是一个阶为 $n = s + t + 8$ 的图,其中 $n \geq 10, s \geq 1, t \geq 1$,则 $Z(H_1^2(s, t)) \geq 18n - 85$, 当且仅当 $H_1^2(s, t) \cong H_1^2(n - 9, 1)$ 时等式成立.

证明 根据引理2.6,我们得 $Z(H_1^2(s, t)) \geq Z(H_1^2(n - 9, 1)) = 18n - 85$ 或 $Z(H_1^2(s, t)) \geq Z(H_1^2(n - 9, 1)) = 30n - 203$.所以 $Z(H_1^2(s, t)) \geq 18n - 85$,当且仅当 $H_1^2(s, t) \cong H_1^2(n - 9, 1)$ 时等式成立.

引理3.5 令 $H_1^3(s, t)$ 是一个阶为 $n = s + t + 8$ 的图,其中 $n \geq 11, s \geq 1, t \geq 1$,则 $Z(H_1^3(s, t)) \geq 14n - 56$, 当且仅当 $H_1^3(s, t) \cong H_1^3(n - 9, 1)$ 时等式成立.

证明 根据引理2.6,我们得 $Z(H_1^3(s, t)) \geq Z(H_1^3(n - 9, 1)) = 14n - 56$ 或 $Z(H_1^3(s, t)) \geq Z(H_1^3(1, n - 9)) = 22n - 136$.所以 $Z(H_1^3(s, t)) \geq 14n - 56$,当且仅当 $H_1^3(s, t) \cong H_1^3(n - 9, 1)$ 时等式成立.

引理3.6 令 $H_1^4(s, t)$ 是一个阶为 $n = s + t + 8$ 的图,其中 $n \geq 11, s \geq 1, t \geq 1$,则 $Z(H_1^4(s, t)) \geq 19n - 91$, 当且仅当 $H_1^4(s, t) \cong H_1^4(n - 9, 1)$ 时等式成立.

证明 根据引理2.6,我们得 $Z(H_1^4(s, t)) \geq Z(H_1^4(n - 9, 1)) = 19n - 91$ 或 $Z(H_1^4(s, t)) \geq Z(H_1^4(n - 9, 1)) = 35n - 249$.所以 $Z(H_1^4(s, t)) \geq 19n - 91$,当且仅当 $H_1^4(s, t) \cong H_1^4(n - 9, 1)$ 时等式成立.

引理3.7 令 $H_1^5(s, t, u)$ 是一个阶为 $n = s + t + u + 8$ 的图,其中 $n \geq 12, s \geq 0, t \geq 0, u \geq 0$, 则 $Z(H_1^5(s, t, u)) \geq 11n - 48$,当且仅当 $H_1^5(s, t, u) \cong H_1^5(n - 9, 1, 0)$ 时等式成立.

证明 根据引理2.6,首先 $s \geq 0, t \geq 0, u \geq 0$ 需要分以下四种情况讨论:

(I) 当 $s = 0, t = 1$ 或 $u = 1$ 时有两种子情况:

- (i) $Z(H_1^5(s, t, u)) \geq Z(H_1^5(0, 1, n - 9)) = 49n - 81,$
- (ii) $Z(H_1^5(s, t, u)) \geq Z(H_1^5(0, n - 9, 1)) = 37n - 262.$

(II) 当 $t = 0, s = 1$ 或 $u = 1$ 时有两种子情况:

- (i) $Z(H_1^5(s, t, u)) \geq Z(H_1^5(1, 0, n - 9)) = 39n - 290,$
- (ii) $Z(H_1^5(s, t, u)) \geq Z(H_1^5(n - 9, 0, 1)) = Z(H_4(n - 9, 1)) = 16n - 103.$

(III)当 $u = 0, s = 1$ 或 $t = 1$ 时有两种子情况此情况的图与 $H_1(s, t)$ 图同构,所以不需要在此情况下作比较.

- (i) $Z(H_1^5(s, t, u)) \geq Z(H_1^5(n - 9, 1, 0)) = Z(H_1(n - 8, 1)) = 11n - 48,$
- (ii) $Z(H_1^5(s, t, u)) \geq Z(H_1^5(1, n - 9, 0)) = Z(H_1(1, n - 8)) = 20n - 124.$

(IV) 当 s, t, u 其中任意两个同时为零时有三种子情况:

- (i) $Z(H_1^5(s, t, u)) \geq Z(H_1^5(n - 10, 1, 1)) = 24n - 124,$
- (ii) $Z(H_1^5(s, t, u)) \geq Z(H_1^5(1, 1, n - 10)) = 51n - 459.$
- (iii) $Z(H_1^5(s, t, u)) \geq Z(H_1^5(1, n - 10, 1)) = 38n - 299.$

所以 $Z(H_1^5(s, t, u)) \geq 11n - 43,$ 当且仅当 $H_1^5(s, t, u) \cong H_1^5(n - 9, 1, 0)$ 时等式成立.

引理3.8 令 $H_1^6(s, t, u)$ 是一个阶为 $n = s + t + u + 8$ 的图,其中 $n \geq 9, s \geq 0, t \geq 0, u \geq 0,$ 则 $Z(H_1^6(s, t, u)) \geq 16n - 103,$ 当且仅当 $H_1^6(s, t, u) \cong H_1^6(n - 9, 0, 1)$ 时等式成立.

证明 根据引理2.6,首先 $s \geq 0, t \geq 0, u \geq 0$ 需要分以下四种情况讨论:

(I) 当 $s = 0, t = 1$ 或 $u = 1$ 时有两种子情况:

- (i) $Z(H_1^6(s, t, u)) \geq Z(H_1^6(0, 1, n - 9)) = 16n - 93,$
- (ii) $Z(H_1^6(s, t, u)) \geq Z(H_1^6(0, n - 9, 1)) = 30n - 193.$

(II) 当 $t = 0, s = 1$ 或 $u = 1$ 时有两种子情况:

- (i) $Z(H_1^6(s, t, u)) \geq Z(H_1^6(1, 0, n - 9)) = 21n - 120,$
- (ii) $Z(H_1^6(s, t, u)) \geq Z(H_1^6(n - 9, 0, 1)) = Z(H_4(n - 9, 1)) = 16n - 103.$

(III)当 $u = 0, s = 1$ 或 $t = 1$ 时有两种子情况:

- (i) $Z(H_1^6(s, t, u)) \geq Z(H_1^6(n - 9, 2, 0)) = 17n - 89,$
- (ii) $Z(H_1^6(s, t, u)) \geq Z(H_1^6(1, n - 9, 0)) = Z(H_1(1, n - 8)) = 20n - 124.$

(IV) 当 s, t, u 其中任意两个同时为零时有三种子情况:

- (i) $Z(H_1^6(s, t, u)) \geq Z(H_1^6(n - 10, 1, 1)) = 28n - 160,$
- (ii) $Z(H_1^6(s, t, u)) \geq Z(H_1^6(1, 1, n - 10)) = 58n - 428.$
- (iii) $Z(H_1^6(s, t, u)) \geq Z(H_1^6(1, n - 10, 1)) = 39n - 273.$

所以 $Z(H_1^6(s, t, u)) \geq 16n - 93,$ 当且仅当 $H_1^6(s, t, u) \cong H_1^6(0, 1, n - 9)$ 时等式成立.

根据以上引理3.3,3.4,3.5,3.6,3.7,3.8作比较得到以下定理.

定理3.3 令 $G \in \{H_1^1(s, t), H_1^2(s, t), H_1^3(s, t), H_1^3(s, t), H_1^4(s, t), H_1^5(s, t, u), H_1^6(s, t, u)\}.$ 则 $Z(G) \geq 14n - 56 > 11n - 48,$ 当且仅当 $G \cong H_1^3(n - 9, 1)$ 时等式成立.

类似地,反复应用变换I,II,III和IV, G^{l-2} 中 $H_2(n - 8)$ 可能有8种结构(见图8).

引理3.9 令 $H_2^8(s, t)$ 是一个阶为 $n = s + t + 8$ 的图,其中 $n \geq 10, s \geq 0, t \geq 1,$ 则 $Z(H_2^8(s, t)) \geq$

$22n - 114$,当且仅当 $H_2^8(s, t) \cong H_2^8(1, n - 10)$ 时等式成立.

证明 根据引理2.6,我们得 $Z(H_2^8(s, t)) \geq Z(H_2^8(1, n - 10)) = 22n - 114$ 或 $Z(H_2^8(s, t)) \geq Z(H_2^8(0, n - 9)) = 50n - 391$.所以 $Z(H_2^8(s, t)) \geq 22n - 114$,当且仅当 $H_2^8(s, t) \cong H_2^8(1, n - 10)$ 时等式成立.

定理3.4 令 $G \in \{H_2^1(s, t), H_2^2(s, t), H_2^3(s, t), H_2^4(n - 8), H_2^5(n - 8), H_2^6(n - 8), H_2^7(n - 9), H_2^8(s, t)\}$. 则 $Z(G) \geq 14n - 56$,当且仅当 $G \cong H_2^2(n - 9, 1)$ 时等式成立.

证明 根据引理2.6,我们得 $Z(H_2^4(n - 8)) = 17n - 95, Z(H_2^5(n - 8)) = 19n - 102, Z(H_2^5(n - 8)) = 24n - 147, Z(H_2^6(n - 9)) = 20n - 101$, 图 $H_2^1(s, t) \cong H_1^1(s, t), H_2^2(s, t) \cong H_1^3(s, t), H_2^3(s, t) \cong H_1^4(s, t)$.再结合引理3.9我们得到 $Z(G) \geq 14n - 56$,当且仅当 $G \cong H_2^2(n - 9, 1)$ 时等式成立.

类似地,反复应用变换I,II,III和IV, G^{l-2} 中 $H_3(n - 7)$ 可能有5种结构(见图9).

引理3.10 令 $H_3^1(s, t)$ 是一个阶为 $n = s + t + 7$ 的图,其中 $n \geq 9, s \geq 1, t \geq 1$,则 $Z(H_3^1(s, t)) \geq 23n - 137$,当且仅当 $H_3^1(s, t) \cong H_3^1(1, n - 8)$ 或 $H_3^1(n - 8, 1)$ 时等式成立.

证明 根据引理2.6,我们得 $Z(H_3^1(s, t)) \geq Z(H_3^1(1, n - 8)) = Z(H_3^1(n - 8, 1)) = 23n - 137$. 所以 $Z(H_3^1(s, t)) \geq 23n - 137$,当且仅当 $H_3^1(s, t) \cong H_3^1(1, n - 8)$ 或 $H_3^1(n - 8, 1)$ 时等式成立.

引理3.11 令 $H_3^5(s, t)$ 是一个阶为 $n = s + t + 8$ 的图,其中 $n \geq 9, s \geq 0, t \geq 1$,则 $Z(H_3^5(s, t)) \geq 37n - 262$,当且仅当 $H_3^5(s, t) \cong H_3^5(n - 9, 1)$ 时等式成立.

证明 根据引理2.6,我们得 $Z(H_3^5(s, t)) \geq Z(H_3^5(0, n - 9)) = 51n - 376, Z(H_3^5(n - 9, 1)) = 37n - 262$.所以 $Z(H_3^5(s, t)) \geq 37n - 262$,当且仅当 $H_3^5(s, t) \cong H_3^5(n - 9, 1)$ 时等式成立.

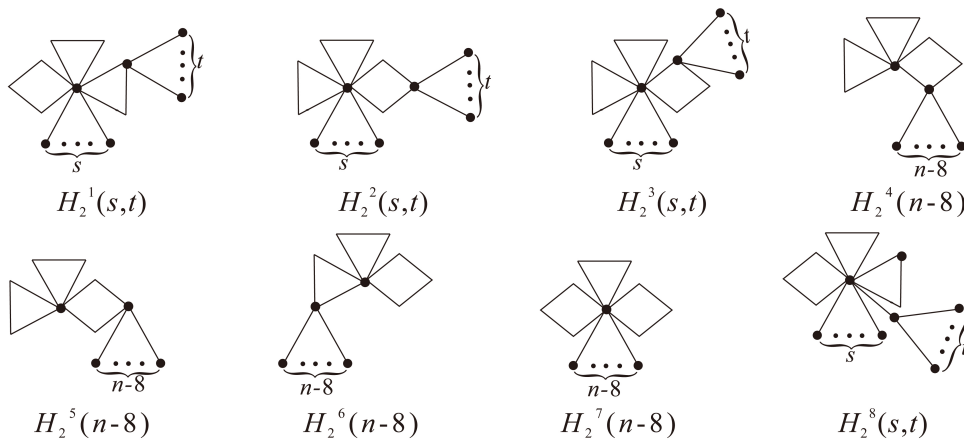


Figure 8. $H_2^1(s, t, u), H_2^2(s, t), H_2^3(s, t), H_2^4(n - 8), H_2^5(n - 8), H_2^6(n - 8), H_2^7(n - 9), H_2^8(s, t)$

图 8. $H_2^1(s, t, u), H_2^2(s, t), H_2^3(s, t), H_2^4(n - 8), H_2^5(n - 8), H_2^6(n - 8), H_2^7(n - 9), H_2^8(s, t)$

定理3.5 令 $G \in \{H_3^1(s, t), H_3^2(n - 8), H_3^3(n - 8), H_3^4(n - 8), H_3^5(s, t)\}$.则 $Z(G) \geq 17n - 95$,当且仅当 $G \cong H_3^3(n - 8)$ 时等式成立.

证明 根据引理2.6,我们得 $Z(H_3^2(n - 8)) = 26n - 158$,图 $H_3^3(s, t) \cong H_2^4(n - 8), H_3^4(n - 8) \cong H_2^5(n - 8)$.再结合引理3.10,3.11,我们得到 $Z(G) \geq 17n - 95$, 当且仅当 $G \cong H_3^3(n - 8)$ 时等式成立.

定理3.6 令 $G \in \mathcal{G}_{n,n+2}^1(p, q, m)$ 是一个 $n()$ 阶的三圈图. 则 $Z(G) \geq 14n - 56 = Z(H_1^3(n-9, 1)) > 12n - 54 = Z(H_2(n-8)) > 11n - 43 = Z(H_1(n-8, 1)) > 8n - 24 = Z(G_1^*(3, 3, 3, n-7))$.

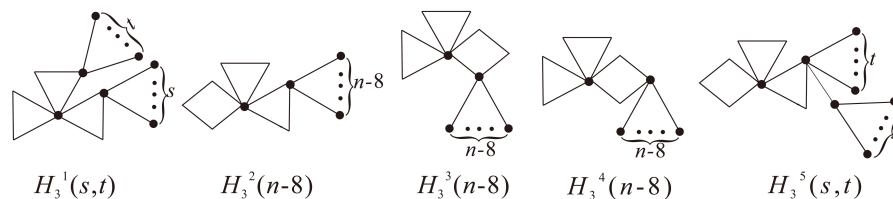


Figure 9. $H_3^1(s, t), H_3^2(n-8), H_3^3(n-8), H_3^4(n-8), H_3^5(s, t)$.

图 9. $H_3^1(s, t), H_3^2(n-8), H_3^3(n-8), H_3^4(n-8), H_3^5(s, t)$.

4. 结论

结合定理3.1,3.2,3.3,3.4,3.5我们得到了

定理3.6 令 $G \in \mathcal{G}_{n,n+2}^1(p, q, m)$ 是一个 $n()$ 阶的三圈图. 则 $Z(G) \geq 14n - 56 = Z(H_1^3(n-9, 1)) > 12n - 54 = Z(H_2(n-8)) > 11n - 43 = Z(H_1(n-8, 1)) > 8n - 24 = Z(G_1^*(3, 3, 3, n-7))$. 本文我们引用一类图的极小值图和反复引用四种变换反推这类图的第二小到第四小. 这种方法目前未引用过, 方法上是创新的. 引用此方法可以解决其他图形或图论领域的知识, 提供了研究的方法, 所以推动了图论研究的发展. 此外, 图论中还有一些新的拓扑指标与 Hosoya 指标密切相关, 为这些研究也奠定了基础.

基金项目

项目编号07M2022003.

参考文献

- [1] Gutman, I. and Polansky, O.E. (1986) *Mathematical Concepts in Organic Chemistry*. Springer, Berlin. <https://doi.org/10.1515/9783112570180>
- [2] Hosoya, H. (1971) Topological Index, a Newly Proposed Quantity Characterizing the Topological Nature of Structural Isomers of Saturated Hydrocarbons. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **44**, 2332-2339. <https://doi.org/10.1246/bcsj.44.2332>
- [3] Merrifield, R.E. and Simmons, H.E. (1989) *Topological Methods in Chemistry*. Wiley, New York.
- [4] Farrell, E.J. (1979) An Introduction to Matching Polynomials. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, **27**, 75-86. [https://doi.org/10.1016/0095-8956\(79\)90070-4](https://doi.org/10.1016/0095-8956(79)90070-4)
- [5] Godsil, C.D. and Gutman, I. (1981) On the Theory of the Matching Polynomial. *Journal of Graph Theory*, **5**, 137-144. <https://doi.org/10.1002/jgt.3190050203>

- [6] Chan, O., Gutman, I., Lam, T.K. and Merris, R. (1998) Algebraic Connections between Topological Indices. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, **38**, 62-65.
<https://doi.org/10.1021/ci970059y>
- [7] Cyvin, S.J. and Gutman, I. (1988) Hosoya Index of Fused Molecules. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **23**, 89-94.
- [8] Cyvin, S.J., Gutman, I. and Kolakovic, N. (1989) Hosoya Index of Some Polymers. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **24**, 105-117.
- [9] Wanger, S. and Gutman, I. (2010) Maxima and Minima of the Hosoya Index and the Merrifield-Simmons Index. *Acta Applicandae Mathematicae*, **112**, 323-34.
<https://doi.org/10.1007/s10440-010-9575-5>
- [10] Hou, Y. (2002) On Acyclic Systems with Minimal Hosoya Index. *Discrete Applied Mathematics*, **119**, 251-257. [https://doi.org/10.1016/S0166-218X\(01\)00306-7](https://doi.org/10.1016/S0166-218X(01)00306-7)
- [11] Liu, H. (2008) The Proof of a Conjecture Concerning Acyclic Molecular Graphs with Maximal Hosoya Index and Diameter 4. *Journal of Mathematical Chemistry*, **43**, 1199-1206.
<https://doi.org/10.1007/s10910-007-9256-4>
- [12] Ou, J. (2008) On Acyclic Molecular Graphs with Maximal Hosoya Index, Energy, and Short Diameter. *Journal of Mathematical Chemistry*, **43**, 328-337.
<https://doi.org/10.1007/s10910-006-9199-1>
- [13] Ou, J. (2006) Maximal Hosoya Index and Extremal Acyclic Molecular Graphs without Perfect Matching. *Applied Mathematics Letters*, **19**, 652-656.
<https://doi.org/10.1016/j.aml.2005.08.017>
- [14] Ou, J.P. (2007) On Extremal Unicyclic Molecular Graphs with Prescribed Girth and Minimal Hosoya Index. *Journal of Mathematical Chemistry*, **42**, 423-432.
<https://doi.org/10.1007/s10910-006-9112-y>
- [15] Ou, J.P. (2009) On Extremal Unicyclic Molecular Graphs with Maximal Hosoya Index. *Discrete Applied Mathematics*, **157**, 391-397. <https://doi.org/10.1016/j.dam.2008.06.006>
- [16] Deng, H. (2008) The Smallest Hosoya Index in $(n, n + 1)$ -Graphs. *Journal of Mathematical Chemistry*, **43**, 119-133. <https://doi.org/10.1007/s10910-006-9186-6>
- [17] Deng, H. (2008) The Largest Hosoya Index in $(n, n + 1)$ -Graphs. *Computer Model*, **48**, 940-948.
- [18] Huang, Y., Shi, L. and Xu, X. (2018) The Hosoya Index and the Merrifield-Simmons Index. *Journal of Mathematical Chemistry*, **56**, 3136-3146.
<https://doi.org/10.1007/s10910-018-0937-y>
- [19] Liu, W., Ban, J., Feng, L., Cheng, T., Emmert-Streib, F. and Dehmer, M. (2019) The maximum Hosoya Index of Unicyclic Graphs with Diameter at Most Four. *Symmetry*, **11**, Article 1034.
<https://doi.org/10.3390/sym11081034>

-
- [20] Komatsu, T. (2021) Asymmetric Circular Graph with Hosoya Index and Negative Continued Fractions. *Carpathian Mathematical Publications*, **13**, 608-618. <https://doi.org/10.15330/cmp.13.3.608-618>
- [21] Liu, Y., Zhang, W. and Liang, Z. (2015) Largest Hosoya Index and Smallest Merrifield-Simmons Index in Tricyclic Graphs. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **73**, 195-224.
- [22] Li, S. and Zhu, Z. (2010) Sharp Lower Bound for the Total Number of Matchings of Tricyclic Graphs. *The Electronic Journal of Combinatorics*, **179**, Article No. R132.
- [23] Dolati, A., Haghigat, M., Golalizadeh, S. and Safari, M. (2011) The Smallest Hosoya Index of Connected Tricyclic Graphs. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **65**, 57-70.
- [24] Liu, H., Yan, X. and Yan, Z. (2007) On the Merrifield-Simmons Indices and Hosoya Indices of Trees with a Prescribed Diameter. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **57**, 371-384.
- [25] Wagner, S. and Gutman, I. (2010) Maxima and Minima of the Hosoya Index and the Merrifield-Simmons Index: A Survey of Results and Techniques. *Acta Applicandae Mathematicae*, **112**, 323-346. <https://doi.org/10.1007/s10440-010-9575-5>
- [26] Ye, Y., Pan, X. and Liu, H. (2008) Ordering Unicyclic Graphs with Respect to Hosoya Indices and Merrifield-Simmons Indices. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **59**, 191-202.
- [27] So, W., Wu, T. and Lv, H. (2021) Sharp Bound on the Permanental Sums of a Graphs. *Graphs and Combinatorics*, **37**, 2423-2437. <https://doi.org/10.1007/s00373-021-02365-y>