

[文章编号] 1007-7405(2015)01-0065-05

Double 图的 Kirchhoff 指标

黄勤英

(集美大学理学院, 福建 厦门 361021)

[摘要] 一个图的 Kirchhoff 指标定义为 $Kf(G) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n r_{ij}/2$, 其中 r_{ij} 是顶点 v_i 和 v_j 之间的电阻距离. 首先得到了一个图的 Kirchhoff 指标与其 double 图的 Kirchhoff 指标之间的关系式, 然后利用此关系式分别确定了具有前三大和前三小 Kirchhoff 指标的 double 树.

[关键词] Kirchhoff 指标; double 图; 广义树变换

[中图分类号] O 157.1

[文献标志码] A

The Kirchhoff Index of Double Graph

HUANG Qin-ying

(School of Science, Jimei University, Xiamen 361021, China)

Abstract: The Kirchhoff index of a graph G is defined as $Kf(G) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n r_{ij}/2$ where r_{ij} is the resistance distance between v_i and v_j . In this paper, a relation between the Kirchhoff index of a graph and that of its double graph was obtained, then using this relation the double trees with the first three maximum and minimum values of Kirchhoff index respectively were determined.

Key words: Kirchhoff index; double graph; generalized tree shift

0 引言

设 G 是一个简单连通图, 其中顶点集 $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. 若 v_i 和 v_j 之间的最短路距离用 d_{ij} 表示, 则图 G 的 Wiener 指标定义^[1]为 $W(G) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n d_{ij}/2$. 1993 年, Klein 等^[2]利用电网络理论定义了图上一个新的距离函数——电阻距离, 即把图 G 看作一个电网络, 其中每一条边看作一个单位电阻, 则 v_i 和 v_j 之间的等效电阻称为 v_i 和 v_j 之间的电阻距离, 记为 r_{ij} . 类似于 Wiener 指标, 基于电阻距离, 图 G 的 Kirchhoff 指标^[2-3]定义为: $Kf(G) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n r_{ij}/2$. 很显然, $r_{ij} \leq d_{ij}$, 等式成立当且仅当 v_i 和 v_j 之间存在唯一的路^[2]. 因此对任意 n 个顶点的连通图有 $W(G) \geq Kf(G)$, 等号成立当且仅当 G 是一棵树. 本文主要讨论 double 图的 Kirchhoff 指标与原图 Kirchhoff 指标的关系及其应用. 首先给出 double 图的定义.

定义 1^[4] 设 G 是顶点集为 $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 的图, 取 G 的一个复制, 其对应的顶点集为 $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$, 对每一个 i , 令 u_i 与 v_i 的所有邻点相连接. 这时所得到的图称为 G 的 double 图, 记作 D_2G , 其中 $V(D_2G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n, u_1, u_2, \dots, u_n\}$.

[收稿日期] 2014-04-23

[修回日期] 2014-06-04

[基金项目] 国家自然科学基金资助项目(11171134, 11301217); 福建省自然科学基金资助项目(2011J01015)

[作者简介] 黄勤英(1991—), 女, 硕士生, 从事组合图论方向研究.

Double 这种变换最初是用来构造不同谱但是同能量的图，之后文献 [5 - 6] 都对 double 图的一些基本性质进行了研究. 下面主要对 double 图的 Kirchhoff 指标进行研究.

1 Double 图的 Kirchhoff 指标

本节主要给出了一个图的 Kirchhoff 指标与其 double 图的 Kirchhoff 指标之间的关系式. 首先引入一些记号和已知结论.

设 G 是 n 个顶点的简单连通图，其中 $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. 用 d_i 表示顶点 $v_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 的度， $D = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n)$ 表示 G 的度对角矩阵. 图 G 的邻接矩阵用 $A = (a_{ij})$ 表示，其中若 v_i 和 v_j 相邻， $a_{ij} = 1$ ；否则 $a_{ij} = 0$. 图 G 的 Laplacian 矩阵 $L = D - A$ 的特征值称为图 G 的 Laplacian 特征值. 若用 $0 = \mu_1 < \mu_2 \leq \dots \leq \mu_n$ 表示图 G 的 Laplacian 特征值，则有如下已知结论： i) $Kf(G) = n \sum_{i=2}^n (1/\mu_i)$ ； ii) G 的 double 图 D_2G 的 $2n$ 个 Laplacian 特征值为 $2d_1, 2d_2, \dots, 2d_n, 2\mu_1, 2\mu_2, \dots, 2\mu_n$. 其中： i) 可参见文献 [7 - 8]； ii) 可参见文献 [5].

由 i)、ii) 可得定理 1.

定理 1 设 G 是 n 个顶点的简单连通图，其中 $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ ， d_i 为顶点 $v_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 的度，则

$$Kf(D_2G) = n \sum_{i=1}^n (1/d_i) + Kf(G). \tag{1}$$

证明 设 $0 = \mu_1 < \mu_2 \leq \dots \leq \mu_n$ 是 G 的 Laplacian 特征值，则由 ii) 知， D_2G 的 Laplacian 特征值为 $2d_1, 2d_2, \dots, 2d_n, 2\mu_1, 2\mu_2, \dots, 2\mu_n$. 所以由 i) 得： $Kf(D_2G) = 2n \{ \sum_{i=1}^n [1/(2d_i)] + \sum_{i=2}^n [1/2\mu_i] \} = n \sum_{i=1}^n (1/d_i) + n \sum_{i=2}^n (1/\mu_i) = n \sum_{i=1}^n (1/d_i) + Kf(G)$ ，证毕.

由定理 1 可以看出，如果一个图的 Kirchhoff 指标及其度序列已知，则很容易得到其 double 图的 Kirchhoff 指标，如对图 1 中的路 P_4 和圈 C_4 ，既然 $Kf(P_4) = W(P_4) = 10$ ， $Kf(C_4) = 5$ ，所以 $Kf(D_2P_4) = 22$ ， $Kf(D_2C_4) = 13$. 特别地，当 G 是一棵树时，图 G 的 Kirchhoff 指标就等于它的 Wiener 指标，而关于树的 Wiener 指标已有很多研究成果，下面利用定理 1 来研究 double 树关于其 Kirchhoff 指标的极图.

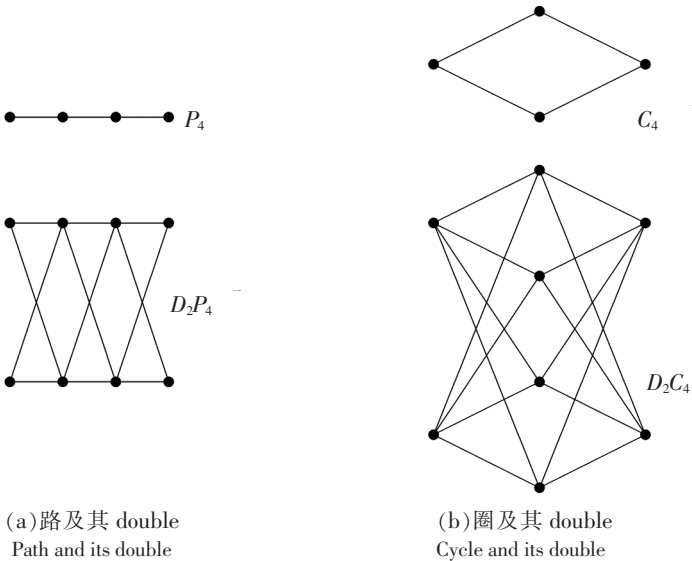


图 1 路和圈及其 double
Fig.1 Path, cycle and their doubles

2 Double 树关于其 Kirchhoff 指标的极图

设 T 是 n 个顶点的树, T 中度为 1 的顶点称为叶点. 具有 $n-1$ 个叶点的树称为星图, 记为 S_n ; 恰有 2 个叶点的树称为路, 记为 P_n . 为了确定 double 树关于其 Kirchhoff 的极图, 首先介绍广义树变换 GTS 的定义, 它是由 Csikváari 在文献 [9] 中引入的.

定义 2^[9] 设 T 是 n 个顶点的树, $P = v_i x \cdots z v_j$ 是 T 中连接 v_i 和 v_j 的唯一的. 若路 P 的所有内部顶点 (若存在) 的度都为 2, 则由 T 删去 v_j 和 $N(v_j) \setminus \{z\}$ 之间的边 ($N(v_j)$ 表示 v_j 的邻集), 同时添加 v_i 和 $N(v_j) \setminus \{z\}$ 之间的边, 所得到的图 T' 显然还是一棵树, 记为 $T' = GTS(T, v_i, v_j)$. 这种变换称为广义树变换 GTS (generalized tree shift) (见图 2).

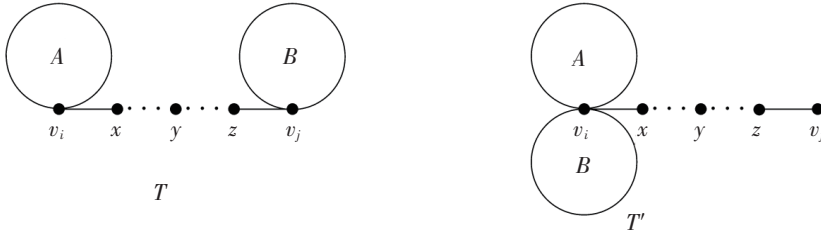


图 2 T 和 T'
Fig.2 T and T'

由广义树变换的定义知, 若 v_i, v_j 的度至少有一个为 1, 则 $T' = GTS(T, v_i, v_j) \cong T$; 若 v_i, v_j 的度都大于 1, 则 T' 的叶点数比 T 的叶点数恰好增加 1, 这时称广义树变换为真的. 因为对任意一棵叶点数小于 $n-1$ 的树, 都存在相邻的两个顶点 v_i, v_j , 它们的度都大于 1, 所以一定可以通过一次真的广义树变换得到一个叶点数增加 1 的树. 同理, 对任意一棵叶点数大于 2 的树, 都可以通过一次真的广义树逆变换得到一个叶点数减少 1 的树. 如果 T_1 可由 T_2 通过一系列广义树变换得到, 则称 $T_1 \geq T_2$. 很显然 \geq 是 n 个顶点的所有树构成的集合 T^n 上的一个偏序关系. 若记此偏序集为 (T^n, \geq) , 则 (T^n, \geq) 中有唯一的极大元素——星图 S_n , 唯一的极小元素——路 P_n , 且此偏序集中每层的叶子数均相同^[9]. 为了研究广义树变换对 double 树的 Kirchhoff 指标的影响, 还需要 Csikváari 在文献 [9] 中得到的一个结论.

引理 1^[9] 若 $T' = GTS(T, v_i, v_j)$, 则它们的 Kirchhoff 指标 (即 Wiener 指标) 有如下关系:
$$Kf(T) - Kf(T') = W(T) - W(T') = n_1 n_2 (n_3 - 1), \tag{2}$$
 其中: n_1 和 n_2 分别表示 A 和 B 中的顶点数目, A 是从 v_j 到此点必经过 v_i 的点的集合, B 是从 v_i 到此点必经过 v_j 的点的集合; n_3 表示路 $P = v_i x \cdots z v_j$ 上的顶点数目 ($n_1 + n_2 + n_3 = n$) (见图 2).

为了简单起见, 下面所指的广义树变换都是真的, 则有定理 2.

定理 2 设 T 是 $n(n \geq 8)$ 个顶点的树, $v_i, v_j \in V(T)$. 若 $T' = GTS(T, v_i, v_j)$, 则 $Kf(D_2 T') < Kf(D_2 T)$.

证明 由广义树变换的定义可知, 若 v_i, v_j 在 T 中的度分别为 $d_i (\geq 2)$ 和 $d_j (\geq 2)$, 则它们在 T' 中的度分别为 $d_i + d_j - 1$ 和 1, 而其他顶点的度不变, 所以由式 (1)、式 (2) 可得:

$$Kf(D_2 T) - Kf(D_2 T') = n[1/d_i + 1/d_j - 1/(d_i + d_j - 1) - 1] + n_1 n_2 (n_3 - 1). \tag{3}$$

下面分情况讨论. 由于 $n_1 + n_2 + n_3 = n$, 因此 $n_1, n_2, n_3 - 1$ 中至多两个为 1. 若恰有两个为 1, 则 $n_1 n_2 (n_3 - 1) = n - 3$ 且 d_i, d_j 中至少有一个等于 2 (因为这时 n_1, n_2 中至少有一个为 1), 不妨设 $d_i = 2$, 则由式 (3) 得: $Kf(D_2 T) - Kf(D_2 T') = n[1/(d_j(d_j + 1)) - 1/2] + n - 3 = n/[d_j(d_j + 1)] + n/2 - 3 > 0$. 如果 $n_1, n_2, n_3 - 1$ 中至多有一个是 1, 则 $n_1 n_2 (n_3 - 1) \geq 2(n - 4) \geq n(n \geq 8)$. 这时同样由式 (3) 得 $Kf(D_2 T) - Kf(D_2 T') > -n + n = 0$. 综上所述, 有 $Kf(D_2 T') < Kf(D_2 T)$. 证毕.

由定理 2, 可得到定理 3.

定理 3 设 T 是 $n(n \geq 8)$ 个顶点的树, 则 $Kf(D_2S_n) \leq Kf(D_2T) \leq Kf(D_2P_n)$, 左边等号成立当且仅当 T 为 S_n , 右边等号成立当且仅当 T 为 P_n .

证明 因为对任意一棵叶点数小于 $n-1$ 的树, 都可以通过一系列真的广义树变换变到 S_n , 而任意一棵叶点数大于 2 的树都可以通过一系列真的广义树逆变换变到 P_n , 所以由定理 2 得结论成立.

为了确定具有第二大、第三大和第二小、第三小 Kirchhoff 指标的 double 树, 需要做更多的准备工作, 首先给出两个引理.

引理 2^[10] 设 T 是一棵树, 则 $Kf(T) = W(T) = \sum_{e \in E(T)} n_1 n_2$, 其中 n_1 和 n_2 分别表示 $T-e$ 的两个分支的顶点数目, e 为 T 中任意一条边, $E(T)$ 为 T 的边集.

引理 3^[11] 设 T 是一棵 n 个顶点的树, 则 $Kf(T) = W(T) = \binom{n+1}{3} - \sum_u \sum_{1 \leq i < j < k \leq m} n_i n_j n_k$, 其中 u 取遍 T 中所有度大于等于 3 的顶点, m 表示对应顶点 u 的度, n_1, n_2, \dots, n_m 分别表示 $T-u$ 中 m 个分支的顶点数目.

下面用 $S(n-a, a)$ 表示有 $n-2$ 个叶点的树, 其中 $a, n-a(a \leq n-a, a \geq 2)$ 分别表示两个非叶点的度. 因为 3 个叶点的树可以看成把三条路的其中一个端点粘合在一起的图, 所以用 $P_{a,b,c}(a+b+c=n-1)$ 表示, 其中 $a, b, c(a \leq b \leq c)$ 分别表示这三条路的长. 则由引理 2、引理 3 以及定理 1, 可得到引理 4.

引理 4 对于 $n \geq 8$, 有: i) 若 $3 \leq a \leq \lfloor n/2 \rfloor$, 则 $Kf(D_2S(n-a, a)) > Kf(D_2S(n-a+1, a-1))$; ii) 若 $1 \leq a, 2 < b \leq c$ 且 $a+b+c=n-1$, 则 $Kf(D_2P(1, 1, n-3)) > Kf(D_2P(1, 2, n-4)) > Kf(D_2P(a, b, c))$.

证明 i) 由引理 2 直接计算可得: $Kf(S(n-a, a)) = W(S(n-a, a)) = \sum_{e \in E(S(n-a, a))} n_1 n_2 = (n-1)(n-2) + a(n-a)$. 再由定理 1 中的式 (1) 得: $Kf(D_2S(n-a, a)) = n[n-2+1/a+1/(n-a)] + (n-1)(n-2) + a(n-a) = n^2/[a(n-a)] + a(n-a) + (2n-1)(n-2)$. 所以, $Kf(D_2S(n-a, a)) - Kf(D_2S(n-a+1, a-1)) = n^2/[a(n-a)] + a(n-a) - n^2/[(a-1)(n-a+1)] - (a-1)(n-a+1) = -n^2(n-2a+1)/[a(n-a)(a-1)(n-a+1)] + n-2a+1 = (n-2a+1)\{1 - n^2/[a(n-a)(a-1)(n-a+1)]\}$. 当 $3 \leq a \leq \lfloor n/2 \rfloor$, 有 $(n-2a+1) > 0$ 且 $a(n-a) > n, (a-1)(n-a+1) > n$, 即 $1 - n^2/[a(n-a)(a-1)(n-a+1)] > 0$, 所以 $Kf(D_2S(n-a, a)) > Kf(D_2S(n-a+1, a-1))$.

ii) 对树 $P_{a,b,c}$ 来说, 它有三个 1 度顶点, 一个 3 度顶点, 其他都为 2 度顶点, 所以由引理 3 可知, $Kf(P(a, b, c)) = \binom{n+1}{3} - abc$. 再由式 (1) 可得: $Kf(D_2P(a, b, c)) = n(3 + (n-4)/2 + 1/3) + \binom{n+1}{3} - abc$. 由于 $a+b+c=n-1$ 是固定值, 因此当 $1 \leq a, 2 < b \leq c$ 时, $abc > 1 \cdot 2 \cdot (n-4) > 1 \cdot 1 \cdot (n-3)$, 即 $Kf(D_2P(1, 1, n-3)) > Kf(D_2P(1, 2, n-4)) > Kf(D_2P(a, b, c))$.

现在可以确定具有第二大、第三大和第二小、第三小 Kirchhoff 指标的 double 树.

定理 4 设 T 是 $n(n \geq 8)$ 个顶点的树, 且不为 S_n 和 P_n , 则 $Kf(D_2S(n-2, 2)) \leq Kf(D_2T) \leq Kf(D_2P(1, 1, n-3))$; 左边等号成立当且仅当 T 为 $S(n-2, 2)$, 右边等号成立当且仅当 T 为 $P(1, 1, n-3)$ (见图 3).

证明 因为 T 不为 S_n 和 P_n , 所以它的叶点数至多为 $n-2$, 至少为 3. 若 T 的叶点数小于 $n-2$, 则它可以通过一系列真的广义树变换变到某个 $n-2$ 个叶点的树 $S(n-a, a)$, 即 $Kf(D_2S(n-a, a)) < Kf(D_2T)$; 若 T 的叶点数大于 3, 则它可以通过一系列真的广义树逆变换变到某个 3 个叶点的树 $P(a, b, c)$, 即 $Kf(D_2T) < Kf(D_2P(a, b, c))$. 再由引理 4, 定理 4 得证. 证毕.

定理 5 设 T 是 $n(n \geq 8)$ 个顶点的树, 且不为 $S_n, S(n-2, 2), P_n$ 和 $P(1, 1, n-3)$, 则 $Kf(D_2 T_1) \leq Kf(D_2 T) \leq Kf(D_2 T_2)$, 左边等号成立当且仅当 T 为 T_1 , 右边等号成立当且仅当 T 为 T_2 , 其中 T_1, T_2 见图 4.

证明 对不为 $S_n, S(n-2, 2), P_n, P(1, 1, n-3)$ 树 T , 要使得 $Kf(D_2 T)$ 最小, 则 T 只可能有 $n-2$ 个或 $n-3$ 个叶点. 且由引理 4 知, $n-2$ 个叶点的树只需考虑 $S(n-3, 3)$. 若 T 的叶点数等于 $n-3$, 则它有图 5(a) 的形式, 其中 $n_1, n_3 > 0$ 且 $n_1 + n_2 + n_3 = n-3$. 如果 n_1, n_3 中至少有一个大于 1, 不失一般性, 设 $n_3 > 1$, 则 $S(n_1 + n_2 + 2, n_3 + 1) = GTS(T; v_1, v_2)$. 所以由定理 2 和引理 4 得, $Kf(D_2 T) > Kf(D_2 S(n_1 + n_2 + 2, n_3 + 1)) \geq Kf(D_2 S(n-3, 3))$. 若 $n_1 = n_3 = 1$, 即图 4 中的 T_1 . 则由定理 1, 引理 2 可知 $Kf(D_2 T_1) - Kf(D_2 S(n-3, 3)) = n(n-2+1/(n-3) + (n-3)(n-1) + 4(n-2) - n(n-2+1/3+1/(n-3)) - (n-1)(n-2) - 3(n-3) = -n/3 + 3 - 8 - 2 + 9 = 2 - n/3 < 0$. 所以对不为 $S_n, S(n-2, 2), P_n, P(1, 1, n-3)$ 树 $T, Kf(D_2 T_1) \leq Kf(D_2 T)$, 等号成立当且仅当 T 为 T_1 .

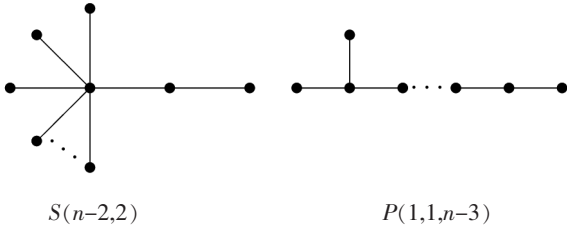


图 3 $S(n-2, 2)$ 和 $P(1, 1, n-3)$
Fig.3 $S(n-2, 2)$ and $P(1, 1, n-3)$

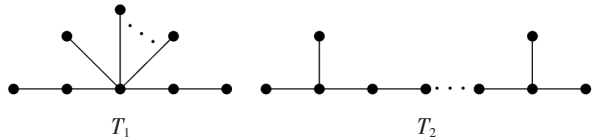


图 4 T_1 和 T_2
Fig.4 T_1 and T_2

同样, 对不为 $S_n, S(n-2, 2), P_n, P(1, 1, n-3)$ 树 T , 要使得 $Kf(D_2 T)$ 最大, 则 T 只可能有 3 个或 4 个叶点. 且由引理 4 知, 3 个叶点的树只需考虑 $P(1, 2, n-4)$. 现在设 T 是有 4 个叶点的树, 则它有图 5(d) 的形式, 其中 $n_1, n_2, n_3, n_4 > 0$. 如果 $n_i (i = 1, 2, 3, 4)$ 中至少有一个大于 1, 不失一般性, 令 $n_2 > 1$, 则 $T = GTS(P(n_1, n_2, n - n_1 - n_2 - 1; u, v))$. 再由定理 2 和引理 4 可知, $Kf(D_2 T) < Kf(D_2 P(n_1, n_2, n - n_1 - n_2 - 1)) \leq Kf(D_2 P(1, 2, n-4))$. 若 $n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = 1$, 也即是图 4 中的 T_2 . 则由定理 1, 引理 3 可得 $Kf(D_2 T_2) - Kf(D_2 P(1, 2, n-4)) = n(4 + 2/3 + (n-6)/2) + \binom{n+1}{3} - 2(n-3) - n(3 + 1/3 + (n-4)/2) - \binom{n+1}{3} + 2(n-4) = 4n/3 - n - 2 = n/3 - 2 > 0$. 所以 $Kf(D_2 T) \leq Kf(D_2 T_2)$, 等号成立当且仅当 T 为 T_2 . 证毕.

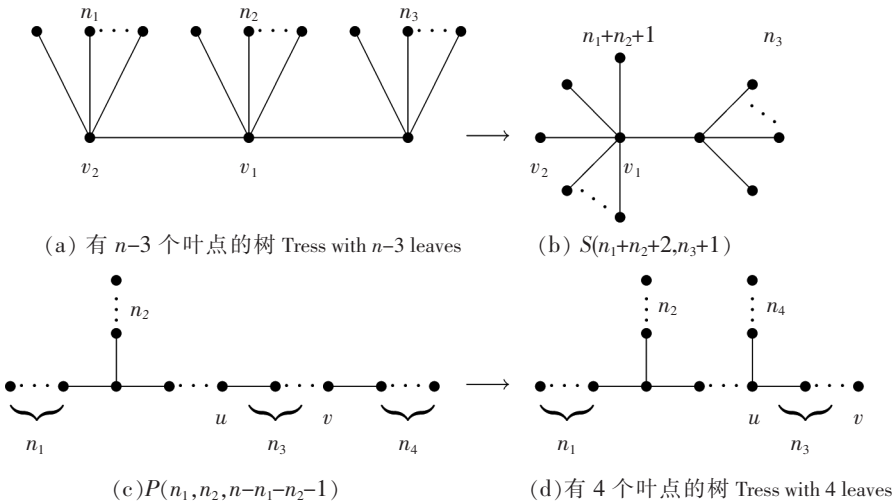


图 5 有 $n-3$ 个叶点的树和有 4 个叶点的树的广义树变换
Fig.5 GIS of tress with $n-3$ and 4 leaves

[参 考 文 献]

- [1] ENTRINGER R C, JACKON D E, SZÉKRLY D A. Distance in graphs [J]. Czechoslovak Mathematical Journal, 1976, 26(101): 283-296.
- [2] KLEIN D J, RANDIĆ M. Resistance distance [J]. Journal of Mathematical Chemistry, 1993, 12: 81-95.
- [3] BONCHEV D, BALABAN A T, LIU X, et al. Molecular cyclicity and centrality of polycyclic graphs I: cyclicity based on resistance distances or reciprocal distances [J]. International Journal of Quantum Chemistry, 1994, 50(1): 1-20.
- [4] INDULAL G, VIJAYAKUMAR A. On a pair of equienergetic graphs [J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2006, 55: 83-90.
- [5] MUNARINI E, CIPPO C P, SCAGLIOLA A, et al. Double graphs [J]. Discrete Mathematics, 2008, 308: 242-254.
- [6] XIN L W, YI W F. The number of spanning trees of double graphs [J]. Kragujevac Journal of Mathematics, 2011, 1: 183-190.
- [7] GUTMANI, MOHAR B. The quasi-Wiener and the Kirchhoff indices coincide [J]. Journal of Chemistry Information and Modeling, 1996, 36: 982-985.
- [8] ZHU H Y, Klein D J, LUKOVITS I. Extensions of the Wiener number [J]. Journal of Chemistry Information and modeling, 1996, 36: 420-428.
- [9] CSIKVÁRI P. On a poset of trees [J]. Combinatorica, 2010, 30: 125-137.
- [10] WIENER H. Structural determination of paraffin boiling points [J]. Journal of the American Chemical Society, 1947, 69: 17-20.
- [11] DOYLE J K, EGRAVER J. Mean distance in a graph [J]. Discrete Math, 1977, 7: 147-154.

(责任编辑 马建华 英文审校 黄振坤)