文章编号：1674-8085(2017)01-0014-04

六角系统图的 BEC 码和反强迫数

余　勤，辛玉忠，*梁晓东

（新疆大学数学与系统科学学院，新疆，乌鲁木齐 830046）

摘　要：一个六角系统可以由它的边界的形状唯一确定，表示为边界边码，简称 BEC 码。若连通图 G 的边子集 S 满足 G-S 有唯一的完美匹配，则称最小的 S 的基数为图 G 的反强迫数。给出了一个算法，可以运用 BEC 码计算六角链的反强迫数。

关键词：六角系统图；六角链；BEC 码；反强迫数

中图分类号：O157.5　**文献标识码**：A　DOI:10.3969/j.issn.1674-8085.2017.01.003

THE BEC CODE AND THE ANTI-FORCING NUMBER OF HEXAGONAL SYSTEM

YU Qin, XIN Yu-zhong, *LIANG Xiao-dong

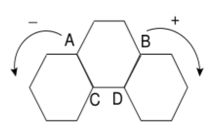
(School of Mathematics and System Sciences, Xinjiang University, Urumqi, Xingjiang 830046, China)

Abstract: A hexagonal system is uniquely determined by the shape of its boundary, which is represented by the boundary edges code (BEC). The anti-forcing number is the smallest number of edges which have to be removed any hexagonal system remains with a unique perfect matching. Furthermore, we give an algorithm to calculate the anti-forcing number of hexagonal chains by using their BEC.

Key words: hexagonal system graph; hexagonal chain; BEC code; anti-forcing number

1　基本概念

六角系统（或称苯系统）是一个由正六边形构成的平面二连通系统。在文献[1]中，Hansen 等人提出一个六角系统可以由它的边界的形状唯一确定，表示为边界边码，简称 BEC 码。一个六角系统 H 的 BEC 码定义如下：从 H 的任意一个度数为 3 的外部顶点开始，沿着 H 的外边界，用数字连续记录所遇到的六角块在外部边界上的边数（其中同一个六角块的边在边界上最多可能出现 3 次，因此一个六角块可能会有 1，2 或 3 个数字出现在 BEC 码中），进一步地，对 H 所有可能的这类编码进行排序，以其中字典序最大者作为该六角系统的 BEC 码。图 1 显示了一个六角系统的 BEC 码的构造过程。



	−	+
A	5153	3515
B	3515	5153
C	5351	1535
D	1535	5351

图 1　BEC 代码的构造

Fig.1 The structure of BEC

图 G 的一个独立边的集合称为 G 的一个匹配。对于 G 的一个匹配 M，如果 G 的每一个顶点都与 M 中的一条边关联，则称 M 是 G 的一个完美匹配（在化学图论中称为 Kekule’结构）。在文献[2-3]中，Vukicevic’和 Trinajstic’介绍了反强迫数的定义：设 G=(V,E)是至少含有一个完美匹配的连通图，对于任

收稿日期：2016-09-19；修改日期：2016-10-06

作者简介：余　勤(1990-)，女，河南驻马店人，硕士生，主要从事图与网络优化研究(E-mail：1194859946@qq.com);
辛玉忠(1991-)，男，青海海东人，硕士生，主要从事图与网络优化研究(E-mail：592362651@qq.com);
*梁晓东(1970-)，男，新疆乌鲁木齐人，副教授，博士，硕士生导师，主要从事图与网络优化研究(E-mail:liangxd1970@sina.com).

意 $S \subseteq E$，如果 G-S 具有唯一的完美匹配（或 Kekule'结构），称 S 为 G 的一个反强迫集。图 G 的最小反强迫集的基数称为 G 的反强迫数，记为 af(G)。

本文用 BEC 码来表示卡拉稠型的六角系统，给出了计算六角链的反强迫数的算法。

2　卡拉稠型六角系统及其 BEC 码

一个六角系统是一个没有割点的平面二连通系统，其中每个内面都是正六边形，任意两个正六边形或者不交，或者恰有一条公共边。六角系统可以分为卡拉稠型六角系统和非卡拉稠型六角系统两类。在非卡拉稠型六角系统中，存在三个六角块共享一个顶点。而在卡拉稠型六角系统中，不存在三个六角块共享一个顶点。卡拉稠型六角系统可进一步划分为有分支和无分支两类。无分支的卡拉稠型六角系统又称为六角链，其中任何一个六角块至多与另外两个六角块相邻。而有分支的卡拉稠型六角系统中则至少有一个六角块与另外三个六角块相邻。如果从一个六角系统中去掉一个六角块，这个六角系统仍然连通，则称这个六角块是可删除的。

命题 1 设 H 是一个六角系统，则从 H 中删除一个六角块有以下 5 种合法的方式：

(1) BEC 码中代码'5'对应的六角块可以被删除，该六角块被删除后，对应的 BEC 码中的三个数字'*a*5*b*'替换为一个数字'(*a*+*b*+1)' (如图 2(a))；

(2) BEC 码中代码'4'对应的六角块可以被删除，该六角块被删除后，对应的 BEC 码中的三个数字'*a*4*b*'替换为两个数字'(*a*+1)(*b*+1)'(如图 2(b))；

(3) 如果 BEC 码中代码'3'对应的六角块可以被删除，则该六角块被删除后，对应的 BEC 码中的三个数字'*a*3*b*'替换为三个数字'(*a*+1)1(*b*+1)'(如图 2(c))；

(4) 如果 BEC 码中代码'2'对应的六角块可以被删除，则该六角块被删除后，对应的 BEC 码中的三个数字'*a*2*b*'替换为四个数字'(*a*+1)11(*b*+1)'(如图 2(d))；

(5) 如果 BEC 码中代码'1'对应的六角块可以被删除，则该六角块被删除后，对应的 BEC 码中的三个数字'*a*1*b*'替换为五个数字'(*a*+1)111(*b*+1)'(如图 2(e))。

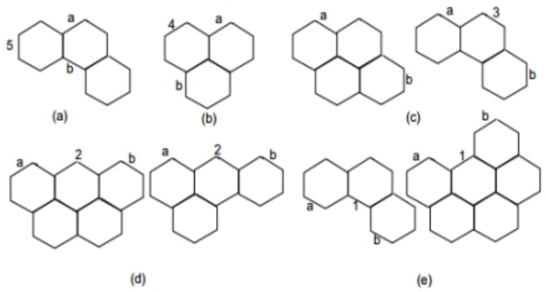


图 2 六角块的删除

Fig.2 Delete　of　hexagon

命题 2 设 H 是一个六角系统，如果一个六角块 h 在 BEC 码中的代码为'n'，且可以被删除，则删除 h 后，H 中的内部顶点数减少 5-*n* 个。

推论 1 设 H 是一个六角系统，删除一个与 BEC 码中代码'5'对应的六角块，H 中的内部顶点数不变。

引理 1 H 是一个卡拉稠型六角系统当且仅当 H 中的内部顶点数为 0。

引理 2 设 H 是一个卡拉稠型六角系统，则 H 的 BEC 码中一定含有数字'5'，但不含数字'4'。

证明　如果 H 的 BEC 码中含有数字'4'，则由命题 2 可知，H 中至少有一个内部顶点，与引理 1 矛盾。因此，H 的 BEC 码中不含数字'4'。

假设 H 的 BEC 码中不含数字'5'。因为 H 的 BEC 码中不含数字'4'，所以 H 的 BEC 码中的所有数字一定小于等于'3'。对于任何一个数字'*n*'（*n*=1,2,3），如果一个六角块 h 在 BEC 码中对应的代码为'n'，且可以被删除，则由命题 2 可知，删除 h 后，H 中的内部顶点数会减少 5-*n* 个。因此 H 至少有两个内部顶点，与引理 1 矛盾。从而，H 的 BEC 码中一定含有数字'5'。引理得证。

推论 2 如果 H 是一个六角链，则 H 的 BEC 码中有且只有两个'5'码。

由命题 1 可知，对于一个卡拉稠型六角系统 H，如果一个六角块 h 在 BEC 码中对应的代码为'5'，则可以被删除。代码中的三类数码'153','351','252'可以被一个数字'5'来代替。代码中的数码'151'可以被一个数字'3'来代替。代码中的数码'152','251'可以被一个数字'4'来代替，把上面的操作称为对 H 的收缩。

定理 1 H 是一个卡拉稠型六角系统当且仅当 H 的 BEC 码可以被收缩为'55'。

证明　必要性。如果 H 是一个六角链，由推论

6 可知，H 的 BEC 码的数字中有且仅有两个'5'码。另外，H 中只可能出现以下三种可以被收缩的情况：'...351..', '...153...', '...252...'。显然，H 最终可以被收缩为'55'。

如果 H 是一个有分支的卡拉稠型六角系统，令 A 是 H 的一个分支，且 A 是一个六角链，则 A 的 BEC 码中数字'5'只有一个。经过针对'...351...', '...153...'， '...252...'三种情况进行一系列的收缩之后，最终 A 将被收缩到'5'，并且这个'5'两边的两个数字均为'1'，即'...151...'。 再进行一次收缩，代码中的这三个数码'151'可以被数字'3'代替。从而，H 的分支减少一个。重复以上操作，H 最终可以收缩为一个六角链，从而 H 最终可以收缩为'55'。

充分性。由收缩的定义不难得到，经过收缩六角系统的内部顶点数不会发生改变。如果 H 的 BEC 代码可以收缩到'55'，则 H 的内部顶点数为 0，即'55'的内部顶点数。由引理 1，H 是一个卡拉稠型六角系统。

3 六角链的 BEC 码和反强迫数

如果一个卡拉稠型六角系统没有分支，则称这个六角系统为六角链。在一个六角链中，每个六角块最多与两个六角块相邻。在文献[4]中，作者介绍了一个得到六角链极小反强迫集的算法，从而可以得到这个六角链的反强迫数。在本文中，给出了一个算法，可以由一个六角链的 BEC 码计算出它的反强迫数。

在一个六角链中，片段是指包含两个端点六角块的一个极大的线性链，图 3 显示了一个长为 5 的片段 S：

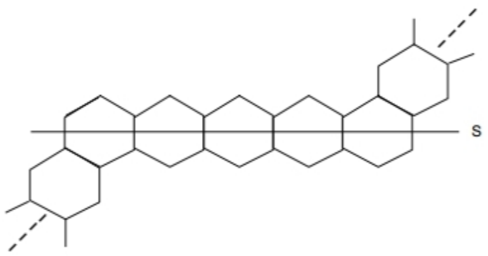


图 3 在六角链中长为 5 的片段
Fig.3 A segment s with length 5 in a hexagonal chain

引理 3 [4] 令 G 是一个六角链，A 是 G 的一个反强迫集。则对 G 的任意六角块 H，包含 H 的片段至少向 A 中贡献一条边。

引理 4 令 H 是一个六角链，则 H 的 BEC 码中有 $2n-2$ 个数字，其中 n 是六角链中六角块的个数。

证明 由六角链的定义可知，一个六角链恰有两个终端六角块各与一个六角块相邻，其他的 n-2 个六角块都有两个六角块与之相邻。因为每个终端六角块在 BEC 码中贡献一个数字，而其他六角块在 BEC 码中都贡献两个数字。所以含有 n 个六角块的六角链的 BEC 码中共有 2n-2 个数字。

引理 5 令 H 是一个六角链，则 H 的 BEC 码中的每个数字'3'都与另一个数字'1'一一对应。

证明 因为 H 是一个六角链，由六角链定义可知，每个六角块最多与两个六角块相邻。除了端六角快之外，其他任一六角快都有两段外部边，如果其中一段对应数字'3'，则另一段一定对应数字'1'。

算法 1：由六角链的 BEC 码得到其反强迫数

输入：一个六角链 H 的 BEC 码。

输出：六角链 H 的反强迫数 *af*(H)。

1) 将 BEC 码用 e(H)表示，$e(\mathrm{H})=(k_1,k_2,\cdots,k_m)$，其中，$m$=2$n$-2，$n$ 是六角链中六角块的个数。令 H 的反强迫数 *af*(H)=0。

2) 从 H 的 BEC 码的首位数字'5'开始，选取直至下一个数字'5'之间的代码，记为 E。从 E 的第一个'5'开始，向后搜索 E 中是否含有数字'3'或者'1'。

3)如果 E 中不包含数字'3'或者'1'，说明 H 是一个线性链，则 *af*(H)=1，算法结束。

4) 如果搜索到数字'3'或者'1'，则令 *af*(H)=*af*(H)+1。并从这个数字开始，继续搜索下一个'3'或者'1'。 如果没有找到，则算法结束。

5) 如果找到了下一个'3'或者'1'，但找到的这个数字不是上一个'3'或者'1'的后继数字，则 *af*(H)=*af*(H)+1，否则保持 *af*(H) 值不变。继续寻找下一个'3'或者'1'，返回步骤 4。

定理 2 令 H 是一个六角链，则算法 1 的输出值就是 H 的反强迫数 *af*(H)。

证明 因为 H 是一个六角链，由引理 4，H 的 BEC 码中有 2n-2 个数字，其中 n 是 H 中六角块的个数。即除了两个端六角块在 BEC 码中贡献一个代码以外，其他的六角块在 BEC 码中都贡献两个代码，因此，只需选取两个 5 之间的代码就可以得

到与 H 的形态一一对应的码段。

不妨设算法 1 所得反强迫集的基数为 k。从算法的执行过程以及引理 5，不难发现，由那些对 k 做出贡献的数字'3'对应的外部边的中间那条边和数字'1'对应的原BEC码中的数字'3'对应的外部边的中间那条边组成的边的集合，正是 H 的一个反强迫集（如图 4 所示）。从而，$af(\mathrm{H}) \le k$ 。

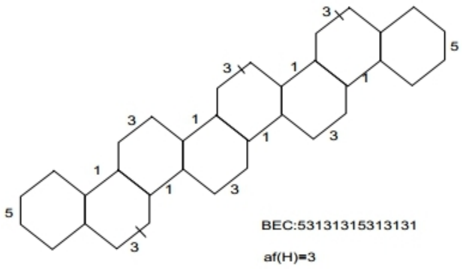


图 4 反强迫数为 af(G)=3

Fig.4 The anti-forcing number equal to three

另一方面，由引理 3，H 的任何一个反强迫集至少要包含 H 的每个片段中的一条边，而算法 1 所确定的边集恰符合这一要求的下界，因而 $af(H) \ge k$ 。 定理得证。

参考文献:

[1] Hansen P, Lebatteux C, Zheng M. The boundary-edges code for polyhexes[J]. Journal of Molecular Structure: THEOCHEM, 1996, 363(2): 237-247.

[2] Vukiĕević D, Trinajstić N. On the anti-forcing number of benzenoids[J]. Journal of mathematical chemistry, 2007, 42(3): 575-583.

[3] Vukičević D, Trinajstić N. On the anti-Kekulé number and anti-forcing number of cata-condensed benzenoids[J]. Journal of mathematical chemistry, 2008, 43(2): 719-726.

[4] Deng H. The anti-forcing number of hexagonal chains1[J]. MATCH Commun. Math. Comput.Chem., 2007, 58:675-682.

[5] Li X. Hexagonal systems with forcing single edges[J]. Discrete applied mathematics, 1997, 72(3): 295-301.

[6] Zhang Q Q, Hong B, Elkin V. On the anti-Kekule Number and Anti-Forcing Number of Cata-condensed Phenylenes [J]. MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 2011,65: 799-806.

[7] Lei H, Yeh Y N, Zhang H. Anti-forcing numbers of perfect matchings of graphs[J]. Discrete Applied Mathematics, 2016, 202: 95-105.

[8] Zhang H, Zhang F. Plane elementary bipartite graphs[J]. Discrete Applied Mathematics, 2000, 105(1): 291-311.