

指数型Sombor指标在完美匹配的单圈图中的极值问题

史铭义, 冉启航, 陈萌, 朱焱

华东理工大学数学学院, 上海

收稿日期: 2024年9月28日; 录用日期: 2024年10月21日; 发布日期: 2024年10月30日

摘要

Sombor指标是一种离散数学图论中的拓扑指标, 能够清晰地反应图的特征。讨论拓扑指标的极值问题能够分析图的基本性质。本文讨论了在完美匹配的单圈图当中, 指数型Sombor指标的极值问题。其中指数型Sombor指标定义为:

$$e^{SO(G)} = \sum_{uv \in E(G)} e^{\sqrt{d_G^2(u) + d_G^2(v)}}$$

本文的主要结论是:

若 $G \in U_{2m,m}$, 则

$$e^{SO(G)} \leq e^{SO(U_{2m,m})}$$

且 $e^{SO(U_{2m,m})} \leq (m-2)e^{\sqrt{5}} + me^{\sqrt{(m+1)^2+4}} + e^{2\sqrt{2}} + e^{\sqrt{(m+1)^2+1}}$

等号成立当且仅当 $G \cong U_{2m,m}$, 其中 m 为图 G 的匹配数。

关键词

离散数学, 图论, 拓扑指标, Sombor指标, 单圈图, 完美匹配, 极值

Extreme Value of Exponential Sombor Index in Unicyclic Graph with Perfect Matching

Mingyi Shi, Qihang Ran, Meng Chen, Yan Zhu

School of Mathematics, East China University of Science and Technology, Shanghai

Received: Sep. 28th, 2024; accepted: Oct. 21st, 2024; published: Oct. 30th, 2024

Abstract

The Sombor Index is a Topological Index in Discrete Mathematical Graph Theory which can clearly reflect the characteristics of the graph. While the Extreme value of Topological Index is the key to analyse the basic properties of the graph. This paper discusses the Extreme Value of Exponential Sombor Index in Unicyclic Graph with Perfect Matching. The exponential Sombor index is defined as:

$$e^{SO(G)} = \sum_{uv \in E(G)} e^{\sqrt{d_G^2(u) + d_G^2(v)}}$$

The main result of this paper is:

If $G \in U_{2m,m}$,

Then $e^{SO(G)} \leq e^{SO(U_{2m,m})}$,

$$e^{SO(U_{2m,m})} \leq (m-2)e^{\sqrt{5}} + me^{\sqrt{(m+1)^2+4}} + e^{2\sqrt{2}} + e^{\sqrt{(m+1)^2+1}}$$

If and only if $G \cong U_{2m,m}$ the equal sign is established, Where m is the matching number of Graph G .

Keywords

Discrete Mathematics, Graph Theory, Topological Index, Sombor Index, Unicyclic Graph, Perfect Matching, Extreme Value

Copyright © 2024 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

1.1. 图论指标的意义与指数型Sombor指标的来源

拓扑指标是离散数学中图论的一种不变量，用于反映图结构的特征。在众多的拓扑指标当中，基于顶点度的拓扑指标又在化学图论中扮演重要的角色。例如1975年由Milan Randić提出的Randić指标 [1]，其定义为：

$$R(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d(u) \cdot d(v)}}$$

Randić指标最初用于量化分子的分支程度，并被广泛应用于化学图论，尤其是在预测分子活性、稳定性和反应性方面表现出色。又例如在2009年由Toufik Mansour和Matthias Schork提出的Padmakar-Ivan指标 [2] (PI指标)，其定义为：

$$PI(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d(u) + d(v))$$

PI指标最早在化学图论中得到应用，用于描述分子图的性质，特别是在分析复杂有机化合物的结构特征时，PI指标展示了其独特的优势，如与分子的沸点和溶解度之间的相关性。

本文将要介绍的拓扑指标为Sombor指标，它于2021年由Ivan Gutman提出 [3]，定义为：

$$SO(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2}$$

Sombor指标的提出拓宽了图论拓扑指标的应用范围，尤其是在分子图的结构特征分析中。2024年B. Kirana、M. C. Shanmukha和A. Usha发表文章 [4]，对Sombor指标采用回归模型，对其进行了线性，二次，三次回归分析，研究表明Sombor指标在计算化学，QSPR研究中具有广泛的应用。2021年，Liu H.等人探讨了化学图当中Sombor指标的排序与其在化学领域的应用 [5]。结果表明Sombor指标在药物设计和材料科学当中有重要的作用。

讨论图的拓扑指标的极值问题有助于更号地分析图的基本性质。在由Hechao Liu, Lihua You, Yufei Huang和Xueliang Tang所撰写的《On the reduced Sombor index and its applications》 [6]中，提出了约化下的指数型Sombor指标，其定义为：

$$e^{SO(G)} = \sum_{uv \in E(G)} e^{\sqrt{(d_G(u)-1)^2 + (d_G(v)-1)^2}}$$

本文将讨论标准指数形式的Sombor指标，其定义为：

$$e^{SO(G)} = \sum_{uv \in E(G)} e^{\sqrt{d_G^2(u) + d_G^2(v)}}$$

1.2. 预备知识

本论文中只考虑有限, 无向, 连通的简单图。

简单图: 无重边, 无自环, 无权值的图。

单圈图: 一个具有 m 个顶点和 m 条边的连通简单图。

$V = V(G)$: 图 G 的所有顶点的集合。

$E = E(G)$: 图 G 的所有边的集合。

$N(x)$: 对于图 G 中的一个顶点 x , 其所有邻点的集合。

$d(x)$: 对于图 G 中的一个顶点 x , x 的节点度, 等同于其相邻的顶点数目。

悬挂点: 度为1的顶点称为悬挂点。

PV : 图 G 中所有悬挂点的集合。

C_n : 具有 n 个顶点的圈。

$G' = (G \cdot u_2v_2) \cdot u_2u_3$: 在图 G 的基础上连续地将 u_2v_2 与 u_2u_3 收缩后得到的图(如图 1):

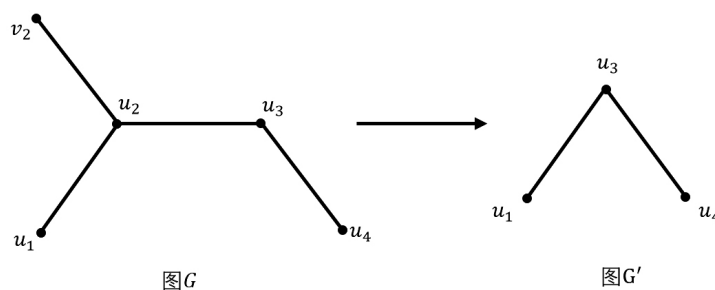


Figure 1. $G' = (G \cdot u_2v_2) \cdot u_2u_3$

图 1. $G' = (G \cdot u_2v_2) \cdot u_2u_3$

匹配与完美匹配: 对于图 G 的边之全集, 其子集 M 满足 M 中的任意两条边都没有共用的顶点, 则称 M 是一个匹配, 若 M 中的边覆盖了图 G 的所有顶点 (也称为 M 饱和), 则称匹配 M 是一个完美匹配。 $|M| = m$ 为 M 中的元素个数, 也称为匹配数。由于本文只考虑完美匹配的单圈图, 故记 $u_{2m,m}$ 为:

$$u_{2m,m} = \{G : G \text{ 是一个具有 } 2m \text{ 个顶点, } m \text{ 完美匹配的单圈图}\}$$

2. 引理

引理2.1. [7] 设 $G \in u_{2m,m}$, $m \geq 3$, 且令 T 是一附着于根 r 的树。如果 $v \in V(T)$ 是距离根 r 最近的顶点, 且 $d_G(v, r) \geq 2$, 则 v 是一个悬挂点且邻接一个度为2的顶点 u 。

引理2.2. [8] 令 $G \in u_{2m,m}$, 若 $PV \neq \emptyset$, 则对任意的顶点 $u \in V(G)$, 有

$$|N(u) \cap PV| \leq 1$$

引理2.3. [9] 令 x, y 为正整数, 且 $|N(u) \cap PV| \leq 1$, 令

$$f(x, y) = e^{\sqrt{x^2+y^2}} - e^{\sqrt{(x-1)^2+y^2}}$$

则对于固定的 y , $f(x, y)$ 关于 x 单调递增, 对于固定的 x , $f(x, y)$ 关于 y 单调递减

Proof.

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{xe^{\sqrt{x^2+y^2}}}{\sqrt{x^2+y^2}} - \frac{(x-1)e^{\sqrt{(x-1)^2+y^2}}}{\sqrt{(x-1)^2+y^2}}$$

$x \geq 1$ 下, $\frac{\partial f}{\partial x} > 0$, 类似的,

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{ye^{\sqrt{x^2+y^2}}}{\sqrt{x^2+y^2}} - \frac{ye^{\sqrt{(x-1)^2+y^2}}}{\sqrt{(x-1)^2+y^2}}$$

$y \geq 2$ 下, $\frac{\partial f}{\partial y} < 0$

□

3. 指数型Sombor指标在完美匹配的单圈图中的极值

定理3.1. 若 $G \in \mathcal{U}_{2m,m}$, 则

$$e^{SO(G)} \leq e^{SO(U_{2m,m})}$$

且

$$e^{SO(U_{2m,m})} \leq (m-2)e^{\sqrt{5}} + me^{\sqrt{(m+1)^2+4}} + e^{2\sqrt{2}} + e^{\sqrt{(m+1)^2+1}}$$

等号成立当且仅当 $G \cong U_{2m,m}$. (如图 2)

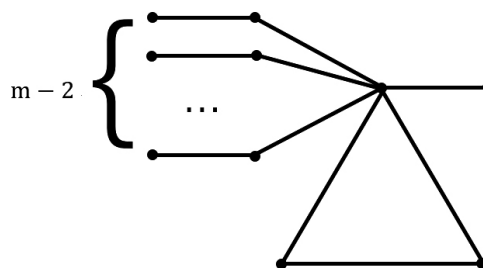


Figure 2. $U_{2m,m}$

图 2. $U_{2m,m}$

Proof. 我们对 m 使用数学归纳法, 显然 G 不是 C_4 。

当 $m = 2$ 时, 由引理2.2知 $G \cong U_{4,2}$, 满足定理3.1。下证 $m \geq 3$ 的情况:

Case1: 假设图 G 中存在一个悬挂点 v , 由引理2.1, 有一个2度点 u 与之相邻, $d(u) = 2$, $d(v) = 1$, 设 u 的除 v 外的另一个邻点为 w , $d(w) = t$, 而 w 的邻点为 $N(w) = \{u, w_1, w_2, \dots, w_{t-1}\}$, $t \geq 2$, 下

证 $t \leq m + 1$:

已知图 G 是具有完美匹配的单圈图, 匹配数为 m , 若 $t > m + 1$ (如图 3), 此时整个图 G 中的非圈上结点数为

$$|V(G)| \geq 4 + 2(t - 1) > 4 + 2(m - 2) > 2m$$

不再构成“单圈”, 与前提矛盾, 故 $t \leq m + 1$

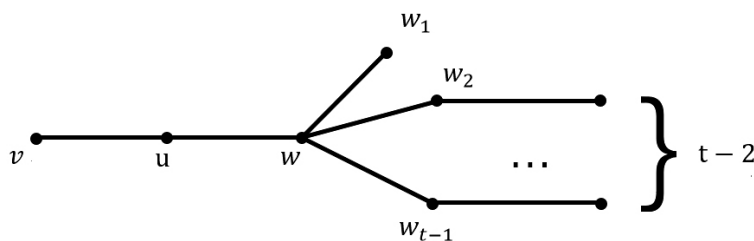


Figure 3. $t > m + 1$

图 3. $t > m + 1$

由引理 2.2, w 的邻点至多有一个悬挂点, 由此, 不妨设 $d(w_1) \geq 1$, $d(w_i) \geq 2$, $i = 2, 3, \dots, t-1$ 。令 $G' = G - u - v$, 由数学归纳法有:

$$e^{SO(G')} \leq e^{SO(U_{2m-2, m-1})}.$$

又有:

$$e^{SO(G)} = e^{SO(G')} + \sum_{i=1}^{t-1} \left(e^{\sqrt{t^2 + d^2(w_i)}} - e^{\sqrt{(t-1)^2 + d^2(w_i)}} + e^{\sqrt{t^2 + 2^2}} + e^{\sqrt{1^2 + 2^2}} \right) (I)$$

由引理 2.3:

$$\begin{aligned} e^{SO(G)} &\leq e^{SO(U_{2m-2, m-1})} + \sum_{i=1}^{t-1} \left(e^{\sqrt{t^2 + d^2(w_i)}} - e^{\sqrt{(t-1)^2 + d^2(w_i)}} + e^{\sqrt{t^2 + 2^2}} + e^{\sqrt{1^2 + 2^2}} \right) \\ &\leq e^{SO(U_{2m-2, m-1})} + e^{\sqrt{t^2 + d^2(w_1)}} - e^{\sqrt{(t-1)^2 + d^2(w_1)}} + \\ &\quad \sum_{i=2}^{t-1} \left(e^{\sqrt{t^2 + d^2(w_i)}} - e^{\sqrt{(t-1)^2 + d^2(w_i)}} + e^{\sqrt{t^2 + 2^2}} + e^{\sqrt{1^2 + 2^2}} \right) \\ &\leq e^{SO(U_{2m-2, m-1})} + e^{\sqrt{t^2 + 1}} - e^{\sqrt{(t-1)^2 + 1}} + (t-2)e^{\sqrt{t^2 + 4}} - (t-2)e^{\sqrt{(t-1)^2 + 4}} + e^{\sqrt{t^2 + 2^2}} + e^{\sqrt{1^2 + 2^2}} (II) \\ &\leq e^{SO(U_{2m-2, m-1})} + e^{\sqrt{(m+1)^2 + 1}} - e^{\sqrt{m^2 + 1}} + (m-1)e^{\sqrt{(m+1)^2 + 4}} - (m-1)e^{\sqrt{m^2 + 4}} + e^{\sqrt{(m+1)^2 + 2^2}} + \\ &\quad e^{\sqrt{1^2 + 2^2}} (III) \\ &= (m-3)e^{\sqrt{5}} + (m-1)e^{\sqrt{m^2 + 4}} + e^{2\sqrt{2}} + e^{\sqrt{m^2 + 1}} + e^{\sqrt{(m+1)^2 + 1}} - e^{\sqrt{m^2 + 1}} + (m-1)e^{\sqrt{(m+1)^2 + 4}} - \\ &\quad (m-1)e^{\sqrt{m^2 + 4}} + e^{\sqrt{(m+1)^2 + 4}} + e^{\sqrt{5}} \\ &= (m-2)e^{\sqrt{5}} + me^{\sqrt{(m+1)^2 + 4}} + e^{2\sqrt{2}} + e^{\sqrt{(m+1)^2 + 1}} \\ &= e^{SO(U_{2m, m})}. (IV) \end{aligned}$$

等号成立当且仅当 $G' \cong U_{2m-2, m-1}$, $d(w_1) = 1$, $d(w_i) = 2$, $i = 2, 3, \dots, t-1$ 。当 $t = m + 1$ 时, $G \cong U_{2m, m}$ 。

在上述证明与计算过程中:

(I): 将 $e^{SO(G)}$ 拆分为 $e^{SO(G')}$, 并用和式删补节点度数的改变所带来的影响, 便于使用数学归纳法。

(II): 对于和式, 取和式内部的最小值, 对于整个和式直接放缩为 $(t-2)$ 倍。

(III): 利用 $t \leq m+1$ 继续放缩。

(IV): 合并同类项。

Case2: G 中不存在与2度点相邻的悬挂点, 则 G 中的悬挂点与均与一个度数至少为3的点相邻。由引理2.1, 若 G 中存在悬挂点, 则悬挂点的邻点只能是圈 C_m 上的点 ($m \geq 3$)。

首先考虑圈 C_m 上不存在2度点的情况, 由于 G 是一个具有完美匹配的单圈图, 那么圈 C_m 上的每一个顶点都有且仅有一个悬挂点与之相连。若 $m = 3$, 在圈 u_1, u_2, u_3 中每个顶点有且仅有一个悬挂点, 记为 v_1, v_2, v_3 , 有:

$$e^{SO(U_{6,3})} - e^{SO(G)} = 3e^{2\sqrt{5}} + e^4 + e^{\sqrt{5}} + e^{2\sqrt{2}} - 3e^{3\sqrt{2}} - 3e^{\sqrt{10}} > 0.$$

满足定理3.1

若 $m > 3$, 在圈 $u_1, u_2, \dots, u_m$ 中考虑每个顶点都有一个悬挂点相连, 记为 $v_1, v_2, v_3, \dots, v_m$, 那么有:

$$\begin{aligned} e^{SO(U_{2m,m})} - e^{SO(G)} &= (m-2)e^{\sqrt{5}} + me^{\sqrt{(m+1)^2+4}} + e^{\sqrt{(m+1)^2+1}} + e^{2\sqrt{2}} - me^{3\sqrt{2}} - me^{\sqrt{10}} \\ &> e^{\sqrt{5}} + 3e^{2\sqrt{5}} + e^4 + e^{2\sqrt{2}} - 3e^{3\sqrt{2}} - 3e^{\sqrt{10}} \\ &> 0. \end{aligned}$$

故 $e^{SO(U_{2m,m})} > e^{SO(G)}$ 在 $m \geq 3$ 时成立。

然后我们考虑圈 C_m 上有2度点的情况, 即在 C_m 上存在顶点不与悬挂点相连。又 $G \neq C_{2m}$, 一定存在 $i \in \{2, 3, \dots, l\}$, 使得 $d(u_i) = 3$, $d(u_{i+1}) = 2$ 。不妨设 $d(u_2) = 3$, $d(u_3) = 2$, v_2 是 u_2 的邻点, $d(v_2) = 1$ 。如果 $d(u_4) = 3$, 由于 G 是完美匹配的, 那么 u_3 一定不被饱和, 矛盾。因此 $d(u_4) = 2$, 进一步可知, 圈 C_l 上的2度点一定与另一个2度点相邻。令 $G' = (G \cdot u_2v_2) \cdot u_2u_3$, (如图4)

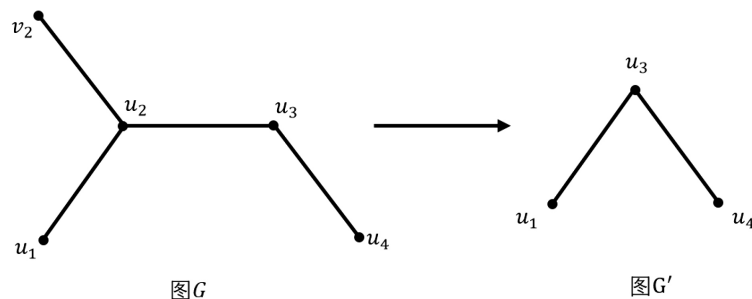


Figure 4. G'

图 4. G'

有 $G' \in u_{2m-2,m-1}$ 。设 $d(u_4) = 3$, 有:

$$\begin{aligned} e^{SO(G)} &= e^{SO(G')} + e^{\sqrt{9+d^2(u_1)}} - e^{\sqrt{4+4}} + e^{\sqrt{9+1}} + 2e^{\sqrt{9+4}} \\ &\leq e^{SO(U_{2m-2,m-1})} + e^{3\sqrt{2}} - e^{2\sqrt{2}} + e^{\sqrt{10}} + 2e^{\sqrt{13}}(V) \\ &= e^{SO(U_{2m,m})} + e^{\sqrt{4+m^2}} + e^{\sqrt{5}} + 2e^{\sqrt{4+m^2}} + e^{\sqrt{m^2+1}} - e^{\sqrt{4+(m+1)^2}} - e^{\sqrt{5}} - 2e^{\sqrt{4+(m+1)^2}} - e^{\sqrt{(m+1)^2+1}} + \\ &\quad e^{3\sqrt{2}} - e^{2\sqrt{2}} + e^{\sqrt{10}} + 2e^{\sqrt{13}} \\ &\leq e^{SO(U_{2m,m})} + 3e^{\sqrt{13}} + e^{\sqrt{5}} + e^{\sqrt{10}} - 3e^{2\sqrt{5}} - e^{\sqrt{5}} - e^{\sqrt{17}} + e^{3\sqrt{2}} + 2e^{\sqrt{13}} + e^{\sqrt{10}} - e^{2\sqrt{2}}(VI) \\ &< e^{SO(U_{2m,m})}. \end{aligned}$$

在上述证明与计算过程中:

(V): 利用上述假设。

(VI): 不等式放缩。

综上, 由数学归纳法 $e^{SO(G)} \leq e^{SO(U_{2m,m})}$ 成立。即定理3.1成立。 $\square$

基金项目

由大学生创新创业训练计划项目S202410251184资助。

参考文献

- [1] Randić, M. (1975) Characterization of Molecular Branching. *Journal of American Chemical Society*, **97**, 6609-6615. <https://doi.org/10.1021/ja00856a001>
- [2] Mansour, T. and Schork, M. (2009) The Vertex PI Index and Szeged Index of Bridge Graphs. *Discrete Applied Mathematics*, **157**, 1600-1606. <https://doi.org/10.1016/j.dam.2008.09.008>
- [3] Gutman, I. (2021) Some Properties of the Sombor Index. *Open Mathematics*, **19**, 611-619. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:231854420>
- [4] Kirana, B., Shanmukha, M.C. and Usha, A. (2024) Comparative Study of Sombor Index and Its Various Versions Using Regression Models for Top Priority Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. *Scientific Reports*, **14**, Article No. 69442. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-69442-z>
- [5] Liu, H., You, L. and Huang, Y. (2021) Ordering Chemical Graphs by Sombor Indices and Its Applications. arXiv:2103.05995. <https://arxiv.org/abs/2103.05995>
- [6] Liu, H., You, L., Huang, Y. and Tang, X. (2022) On the Reduced Sombor Index and Its Applications. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **87**, 567-580.
- [7] Chang, A. and Tian, F. (2003) On the Spectral Radius of Unicyclic Graphs with Perfect Matchings. *Linear Algebra and its Applications*, **370**, 237-250. [https://doi.org/10.1016/S0024-3795\(03\)00394-X](https://doi.org/10.1016/S0024-3795(03)00394-X)
- [8] Pan, X., Liu, H. and Xu, J.-M. (2005) Sharp Lower Bounds for the General Randić Index of Trees with a Give Size of Matching. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **54**, 465-480. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:15324631>
- [9] Chang, A. and Tian, F. (2003) On the Spectral Radius of Unicyclic Graphs with Perfect Matchings. *Linear Algebra and Its Applications*, **370**, 237-250. [https://doi.org/10.1016/S0024-3795\(03\)00394-X](https://doi.org/10.1016/S0024-3795(03)00394-X)