给定最大匹配数的树的零阶广义 Randić 指标

林启法 [1], 钱建国 [2]

(1. 宁德师范高等专科学校数学系, 福建 宁德 352100; 2. 厦门大学数学科学学院, 福建 厦门 361005)

摘要：图 G 的零阶广义 Randić 指标定义为 ${}^0R_\alpha(G)=\sum_{v\in V(G)}d(v)^\alpha$, 其中 $d(v)$ 为图 G 的顶点 v 的度,α 为任意实数. 研究了树的零阶广义 R_α 指标的极值问题, 利用分析和图的理论, 确定了任意给定最大匹配数的树的最大和最小 R_α 的值，并刻画了达到该极值的树.

关键词：树; 零阶广义 Randić 指标; 最大匹配数

中图分类号：O157.5 **文献标识码**：A **文章编号**：1008-5513(2010)02-0339-06

1 引言

设图 $G=(V(G),E(G))$，其中 $V(G)$ 和 $E(G)$ 分别表示 G 的顶点集和边集. 对任意实数 α, 图 G 的广义 Randić 指标 (或连通指标) 定义为

$$R_\alpha=R_\alpha(G)=\sum_{uv\in E(G)}(d(u)d(v))^\alpha,$$

其中 $d(u)$ 表示顶点 u 的度, $(d(u)d(v))^\alpha$ 是边 uv 的权. 特别地, $R_{-\frac{1}{2}}$ 被称为 Randić 指标, 它是由著名化学家 Randić于 1975 年首先提出的 [1], 该指标与有机物的结构和物理化学性质有着非常紧密的联系, 因而吸引了许多化学家和数学家的关注并取得了大量的研究成果 [2,10-11]. 在 1977 年,Kier 和 Hall[12] 发展了 Randić 指标, 定义了零阶 Randić 指标, 即 ${}^0R(G)=\sum_{v\in V(G)}d(v)^{-\frac{1}{2}}$. 之后, Li 和 Zheng [13] 又提出了图的零阶广义 Randić 指标, 即 ${}^0R_\alpha={}^0R(G)=\sum_{v\in V(G)}d(v)^\alpha$, 其中 α 为任意非零实数. 对零阶 Randić指标的研究, 近几年也取得了许多成果, 详见 [14-17]. 特别地, 当 $-1\le\alpha<0$ 和 $0<\alpha<1$ 时, 林和钱 [18] 确定了给定最大匹数的树的零阶广义 Randić 指标的最小值和最大值. 本文将 α 的讨论范围拓广到任意实数, 即: 对任意实数 α, 确定了任意给定最大匹配数的树的零阶广义 Randić 指标的最大和最小值及达到该极值的树, 这一结果使该极值问题得到了完全地解决.

2 预备知识

先介绍一些术语和概念. 设图 $G=(V(G),E(G))$, 其中 $V(G)$ 和 $E(G)$ 分别表示 G 的顶点集和边集, $N(v)$ 和 $d(v)$ 分别表示顶点 v 的邻集和度, $P(n)$ 表示顶点数为 n 的路. 设 M 是

收稿日期：2008-02-10.

基金项目：国家自然科学基金 (10831001), 福建省教育厅科技项目 (JA08266), 宁德师范高等专科学校科研项目 (2008102).

作者简介：林启法 (1969-), 硕士, 研究方向：图论及其应用.

图 G 的一个最大匹配, 称 M 中元素的个数为图 G 的最大匹配数, 若 M 饱和图 G 的每个顶点, 称图 G 为完美匹配图. 度为 1 的顶点称为悬挂点, 与 1 度点相关联的边称为悬挂边, $S_{1,n-1}$ 表示顶点数为 n 的星图, 星图中唯一非悬挂点的顶点称为中心点 (记为 v_{n-1}). $\mathcal{T}(n,m)$ 表示最大匹配数为 m 顶点数为 n 的树的集合 ($n \geqslant 2m$).

设 F 为按如下方式递归定义的树集:

(i) 对任意的正整数 $k(k \geq 2)$, $S_{1,k} \in F$;

(ii) 若树 $T \in F$, 则对任意的正整数 $k(k \geq 2)$, $T \odot S_{1,k} \in F$, 其中 $T \odot S_{1,k}$ 表示把星图 $S_{1,k}$ 的一个悬挂点与树 $T \in F$ 的一个悬挂点粘在一起得到的树.

特别地, 设 $F(n,m)$ 表示 F 中最大匹配数为 m 顶点数为 n 的树集. 易见 $F(n,m)$ 中的树是由 m 个星图 $S_{1,k}$ 按上述方式连接而成的, 且每个星图 $S_{1,k}$ 的中心点 v_k 的度为 k(即 $d(v_k)=k$).

对任意树 $T \in F(n,m)$, 通过简单地计算, 得到

$$n = |V(T)| = \sum_{i=1}^{m}(d(v_k)-1)+m+1 = \sum_{i=1}^{m} d(v_k)+1 = mk+1,$$

即 $k=\frac{n-1}{m}$, 而且有

$$\begin{aligned}
{}^0R_\alpha(T) =& 2+\sum_{i=1}^{m}(d(v_k)-2)+(m-1)2^\alpha+\sum_{i=1}^{m} d(v_k)^\alpha \\
=&(n-1)+(m-1)(2^\alpha-2)+\sum_{i=1}^{m} d(v_k)^\alpha \\
=&(n-1)+(m-1)(2^\alpha-2)+\frac{m(n-1)^\alpha}{m^\alpha}.
\end{aligned}$$

设树 $T^0(n,m)$ 是由 $m-1$ 条边粘到星图 $S_{1,n-m}$ 的 $m-1$ 个悬挂点. 显然 $T^0(n,m)$ 是一棵最大匹配数为 m 顶点数为 n 的树. 特别地, 当 $n=2m$, 树 $T^0(2m,m)$ 是顶点数为 $2m$ 的完美匹配树. 通过简单地计算, 得到

$${}^0R_\alpha(T^0(n,m)) = (n-m)+(m-1)2^\alpha+(n-m)^\alpha \; .$$

3 主要结果

对任意树 $T \in \mathcal{T}(n,m)$, 易得下面两个简单的结果:

(i) 当 $\alpha=0, {}^0R_\alpha(T)=\sum\limits_{v\in V(T)} d(v)^\alpha = n$, 这里 n 是树 T 的顶点数;

(ii) 当 $\alpha=1, {}^0R_\alpha(T)=\sum\limits_{v\in V(T)} d(v)^\alpha = 2e$, 这里 e 是树 T 的边数.

因此, 对任意实数 α, 我们仅考虑两种情况: $\alpha \in (0,1)$ 和 $\alpha \in (-\infty,0)\cup(1,+\infty)$.

下面五个引理将在定理 1 的证明中会被用到.

引理 1 设函数 $f(x)=x^\alpha-(x-1)^\alpha-(2^\alpha-1)$, 这里 x 为不小于 2 的正整数, 则

(i) $f(x) \leqslant 0$, 如果 $\alpha \in (0,1)$;

(ii) $f(x) \geqslant 0$, 如果 $\alpha \in (-\infty,0)\cup(1,+\infty)$;

且 (i) 和 (ii) 式等号成立当且仅当 x=2.

证明 注意到, 当 $x=2$ 时, 函数 $f(x)=0$. 考虑 $x\geqslant 3$, 由拉格朗日中值定理, 则至少存在一点 $\xi_1\in(x-1,x)$, 使得 $x^\alpha-(x-1)^\alpha=\alpha\xi_1^{\alpha-1}$, 以及至少存在一点 $\xi_2\in(1,2)$, 使得 $(2^\alpha-1)=\alpha\xi_2^{\alpha-1}$, 这里 $1<\xi_2<2\leqslant(x-1)<\xi_1<x$. 于是,$f(x)=\alpha(\xi_1^{\alpha-1}-\xi_2^{\alpha-1})$; 再由拉格朗日中值定理, 则至少存在一点 $\xi\in(\xi_2,\xi_1)$, 使得 $f(x)=\alpha(\alpha-1)\xi^{\alpha-2}(\xi_1-\xi_2)$, 显然,$\xi^{\alpha-2}$ 和 $(\xi_1-\xi_2)$ 是正数, 因此, 如果 $\alpha\in(0,1)$, 则 $f(x)<0$; 如果 $\alpha\in(-\infty,0)\cup(1,+\infty)$, 则 $f(x)>0$. 故, 引理 1 证毕.

引理 2 设函数 $g(x)=\frac{(m-1)(n-x-1)^\alpha}{(m-1)^\alpha}-\frac{m(n-1)^\alpha}{m^\alpha}+x^\alpha$, 这里 $0<x<(n-1)$ 且 $n\geqslant 2m, m\geqslant 2$, 则

(i) $g(x)\leqslant 0$, 如果 $\alpha\in(0,1)$;

(ii) $g(x)\geqslant 0$, 如果 $\alpha\in(-\infty,0)\cup(1,+\infty)$;

且 (i) 和 (ii) 式等号成立当且仅当 $x=\frac{n-1}{m}$.

证明 首先注意到, 当 $x=\frac{n-1}{m}$ 时, 函数 $g(x)=0$; 其次求函数 $g(x)$ 的一阶导数

$$\frac{\mathrm{d}g(x)}{\mathrm{d}x}=\frac{-\alpha(m-1)(n-x-1)^{\alpha-1}}{(m-1)^\alpha}+\alpha x^{\alpha-1}=\frac{\alpha((mx-x)^{\alpha-1}-(n-x-1)^{\alpha-1})}{(m-1)^{\alpha-1}},$$

令 $\frac{\mathrm{d}g(x)}{\mathrm{d}x}=0$, 得 $x=\frac{n-1}{m}$, 将定义域分成两个区间: $(0,\frac{n-1}{m})$ 和 $(\frac{n-1}{m},n-1)$.

情形 1 如果 $\alpha\in(0,1)$, 当 $0<x<\frac{n-1}{m}$ 时, 有 $0<(xm-x)<(n-x-1)$, 则 $\frac{\mathrm{d}g(x)}{\mathrm{d}x}>0$, 于是, 函数 $g(x)$ 是单调递增的; 当 $\frac{n-1}{m}<x<n-1$ 时, 有 $0<(n-x-1)<(mx-x)$, 则 $\frac{\mathrm{d}g(x)}{\mathrm{d}x}<0$, 于是, 函数 $g(x)$ 是单调递减的; 因此, 如果 $\alpha\in(0,1)$, 当 $0<x<(n-1)$, 恒有 $g(x)\leqslant 0$.

情形 2 如果 $\alpha\in(-\infty,0)\cup(1,+\infty)$, 同理可证得, 当 $0<x<(n-1)$, 恒有 $g(x)\geqslant 0$. 故, 引理 2 证毕.

引理 3[19] 设 T 是顶点数为 $n(n>2)$ 的完美匹配树, 则树 T 中至少有两个悬挂点, 使得每个悬挂点都相邻一个 2 度点.

引理 4[19] 设 T 是顶点数为 $n(n>2)$ 最大匹配数为 m 的树 $(n>2m)$, 则树 T 中存在一个 m- 匹配 M 和一个悬挂点 v, 使得 M 不饱和顶点 v.

引理 5 设函数 $\phi(x)=x^\alpha-(x-1)^\alpha-(p^\alpha-(p-1)^\alpha)$, 这里 p 为某一不小于 3 的正整数, 而 x 为不小于 2 且不大于 p 的正整数, 则

(i) $\phi(x)\geqslant 0$, 如果 $\alpha\in(0,1)$;

(ii) $\phi(x)\leqslant 0$, 如果 $\alpha\in(-\infty,0)\cup(1,+\infty)$;

且 (i) 和 (ii) 式等号成立当且仅当 $x=p$.

证明 注意到, 当 $x=p$ 时, 函数 $\phi(x)=0$. 考虑 $2\leqslant x\leqslant p-1$, 由拉格朗日中值定理, 则至少存在一点 $\xi_1\in(x-1,x)$, 使得 $x^\alpha-(x-1)^\alpha=\alpha\xi_1^{\alpha-1}$, 以及至少存在一点 $\xi_2\in(p-1,p)$, 使得 $(p^\alpha-(p-1)^\alpha)=\alpha\xi_2^{\alpha-1}$, 这里 $(x-1)<\xi_1<x\leqslant(p-1)<\xi_2<p$. 于是,$\phi(x)=\alpha(\xi_1^{\alpha-1}-\xi_2^{\alpha-1})$; 再由拉格朗日中值定理, 则至少存在一点 $\xi\in(\xi_1,\xi_2)$, 使得 $\phi(x)=\alpha(\alpha-1)\xi^{\alpha-2}(\xi_1-\xi_2)$, 这里 $\xi^{\alpha-2}$ 是正数,$(\xi_1-\xi_2)$ 是负数, 因此, 如果 $\alpha\in(0,1)$, 则 $\phi(x)>0$; 如果 $\alpha\in(-\infty,0)\cup(1,+\infty)$, 则 $\phi(x)<0$. 故, 引理 5 证毕.

定理 1 设树 $T\in\mathcal{T}(n,m)$. 当 $\alpha\in(0,1)$ 时,

$$n-m)+2^\alpha(m-1)+(n-m)^\alpha\leqslant\ {}^0R_\alpha(T)\leqslant(n-1)+(m-1)(2^\alpha-2)+\frac{m(n-1)^\alpha}{m^\alpha}\quad(1)$$

且第一个不等式等号成立当且仅当 $T\cong T^0(n,m)$; 第二个不等式等号成立当且仅当 $T\in F(n,m)$ 且 $k=\frac{n-1}{m}$; 当 $\alpha\in(-\infty,0)\cup(1,\infty)$ 时,

$$(n-1)+(m-1)(2^\alpha-2)+\frac{m(n-1)^\alpha}{m^\alpha}\leqslant {}^0R_\alpha(T)\leqslant(n-m)+2^\alpha(m-1)+(n-m)^\alpha \quad (2)$$

且第一个不等式等号成立当且仅当 $T\in F(n,m)$ 且 $k=\frac{n-1}{m}$; 第二个不等式等号成立当且仅当 $T\cong T^0(n,m)$.

证明 我们先证明 (1) 式第二个不等式成立. 对任意树 $T\in\mathcal{T}(n,m)$, 当 $m=1$ 时, T 是星图, (1) 式第二个不等式显然成立. 现假设 $m\geqslant 2$, 且对 m 用归纳法证明. 因为 $T\in\mathcal{T}(n,m)$ 为树图, 于是总存在顶点 $u\in V(T)$, 使得 $N(u)=\{u_0,u_1,u_2,\cdots,u_{t-1}\}(t\geqslant 2),d(u_0)\geqslant 2$ 且 $d(u_i)=1(i=1,2,\cdots,t-1)$. 易得, $T-uu_0=T'\cup T_u$, 这里 $T'\in\mathcal{T}(n-t,m-1)$ 且 $|V(T_u)|=t$. 方便起见, 不妨设 $d(u_0)=d(\geqslant 2)$. 如果 $0<\alpha<1$, 于是, 由归纳假设, 有

$$\begin{aligned}
{}^0R_\alpha(T)&={}^0R_\alpha(T')+t^\alpha+(t-1)+d^\alpha-(d-1)^\alpha\\
&\leqslant n-t-1+(m-2)(2^\alpha-2)+\frac{(m-1)(n-t-1)^\alpha}{(m-1)^\alpha}+t^\alpha+t-1+d^\alpha-(d-1)^\alpha\\
&=(n-1)+(m-1)(2^\alpha-2)+\frac{m(n-1)^\alpha}{m^\alpha}+\frac{(m-1)(n-t-1)^\alpha}{(m-1)^\alpha}-\frac{m(n-1)^\alpha}{m^\alpha}+\\
&\quad\ t^\alpha+d^\alpha-(d-1)^\alpha-(2^\alpha-1)\\
&\leqslant(n-1)+(m-1)(2^\alpha-2)+\frac{m(n-1)^\alpha}{m^\alpha}.
\end{aligned}$$

由归纳假设知, 上述第一个不等式等号成立当且仅当 $T'\in F(n-t,m-1)$ 且 $k=\frac{n-t-1}{m-1}$; 再由引理 1 和引理 2 知, 上述第二个不等式等号成立当且仅当 $d=2$ 且 $t=\frac{n-1}{m}$. 将 $t=\frac{n-1}{m}$ 代入 $k=\frac{n-t-1}{m-1}$, 易得, $k=\frac{n-1}{m}$. 因此, (1) 式中第二个不等式等号成立当且仅当 $T\in F(n,m)$ 且 $k=\frac{n-1}{m}$.

下面证明 (1) 式第一个不等式成立. 注意到, 如果 $T\cong T^0(n,m)$, 结论显然成立. 先证明如果任意树 $T\in\mathcal{T}(2m,m)$, 则 (1) 式第一个不等式等号成立当且仅当 $T\cong T^0(2m,m)$. 如果 $m=1,2$, 则显然 $T^0(2m,m)\cong P(2m)$. 于是, (1) 式第一个不等式成立. 现假设 $m\geqslant 3$, 对 m 用归纳法证明, 因为 T 是顶点数为 $2m$ 的完美匹配树 (即 $T\in\mathcal{T}(2m,m)$), 由引理 3 知, 树 T 中有一个悬挂点 v 相邻一个 2 度点 w, 而且树 T 中存在唯一一个顶点 $u(\neq v)$, 使得 $uw\in E(T)$, 这样有 $2\leqslant d(u)\leqslant m$. 设 $T'=T-v-w$, 则 $T'\in\mathcal{T}(2(m-1),m-1)$. 如果 $0<\alpha<1$, 设 $d(u)=d$, 由归纳假设, 有

$$\begin{aligned}
{}^0R_\alpha(T)&={}^0R_\alpha(T')+2^\alpha+1+d^\alpha-(d-1)^\alpha\\
&\geqslant(m-1)+2^\alpha(m-2)+(m-1)^\alpha+2^\alpha+1+d^\alpha-(d-1)^\alpha\\
&=m+2^\alpha(m-1)+m^\alpha-m^\alpha+(m-1)^\alpha+d^\alpha-(d-1)^\alpha\\
&\geqslant m+2^\alpha(m-1)+m^\alpha.
\end{aligned}$$

由归纳假设知, 上述第一个不等式等号成立当且仅当 $T' \cong T^0(2(m-1), m-1)$; 再由引理 5 知, 上述第二个不等式等号成立当且仅当 $d = m$(即 $d(u) = m$). 因此,(1) 式第一个等式等号成立当且仅当 $T \cong T^0(2m, m)$.

下面假设 $n > 2m$, 对 n 进行归纳且假设对顶点数小于 n 的树结论均成立. 由引理 4 知, 树 T 有一个 m- 匹配 M 和一个悬挂点 v, 使得 M 不能饱和 v. 设 $uv \in E(T)$, 这样有 $2 \leqslant d(u) \leqslant n-m$. 设 $T' = T - v$, 则 $T' \in \mathcal{T}(n-1, m)$. 如果 $0 < \alpha < 1$, 设 $d(u) = d$, 由归纳假设, 有

$$\begin{aligned}
{}^0R_\alpha(T) &= {}^0R_\alpha(T') + 1 + d^\alpha - (d-1)^\alpha \\
&\geqslant (n-m-1) + 2^\alpha(m-1) + (n-m-1)^\alpha + 1 + d^\alpha - (d-1)^\alpha \\
&= (n-m) + 2^\alpha(m-1) + (n-m)^\alpha - (n-m)^\alpha + (n-m-1)^\alpha + \\
&\quad\ d^\alpha - (d-1)^\alpha \\
&\geqslant (n-m) + 2^\alpha(m-1) + (n-m)^\alpha.
\end{aligned}$$

由归纳假设知, 上述第一个不等式等号成立当且仅当 $T' \cong T^0(n-1, m)$; 再由引理 5 知, 上述第二个不等式等号成立当且仅当 $d = (n-m)$ (即 $d(u) = n-m$). 于是, 当 $n > 2m$ 时, (1) 式第一个不等式等号成立当且仅当 $T \cong T^0(n, m)$.

因此, 任意树 $T \in \mathcal{T}(n, m)(n \geqslant 2m)$, (1) 式第一个不等式等号成立当且仅当 $T \cong T^0(n, m)$. 故, 定理 1 中 (1) 式证明完毕.

运用定理 1 中 (1) 式第二个不等式的类似证明方法以及引理 1 和引理 2, 可以证明 (2) 式第一个不等式成立, 而且 (2) 式第一个不等式等号成立当且仅当 $T \in F(n, m)$ 且 $k = \frac{n-1}{m}$.

运用定理 1 中 (1) 式第一个不等式的类似证明方法以及引理 3, 引理 4 和引理 5, 可以证明 (2) 式第二个不等式成立, 而且 (2) 式第二个不等式等号成立当且仅当 $T \cong T^0(n, m)$. 因此, 定理 1 证明完毕.

参 考 文 献

[1] Randić M. On characterization of molecular branching[J]. J. Amer. Chem. Soc., 1975,97:6609-6615.

[2] Hansen P, Mélot H. Variable neighborhood search for extremal graphs 6: Analyzing bounds for the connectivity index[J]. J. Chem. Inf. Comput. Sci., 2003,43:1-14.

[3] Caporossi G, Gutman I, Hansen P, Pavlović L. Graphs with maximum connectivity index[J]. Comput. Biol. Chem., 2003,27:85-90.

[4] Caporossi G, Gutman I, Hansen P. Variable neighborhood search for extremal graphs IV: Chemical trees with extremal connectivity index[J]. Comput. Chem., 1999,23:469-477.

[5] Gutman I, Miljković O, Caporossi G, et al. Alkanes with small and large Randić connectivity indices[J]. Chem. Phys. Lett., 1999,306:366-372.

[6] Araujo O, de la Peña J. A. Some bounds for the connectivity index of a chemical graph[J]. J. Chem. Inf. Comput. Sci., 1998,38:827-831

[7] Bollobás B, Erdös P. Graphs of extremal weights[J]. Ars. Combin., 1998,50:225-233.

[8] Liu H, Pan X, Xu J. On the Randić index of unicyclic conjugated molecules[J]. J. Math. Chem., 2006,40:135-143.

[9] Zhang L, Lu M, Tian F., Maximum Randić index on trees with K-pendant vertices[J]. J. Math. Chem., 2007,41:161-171.

[10] Chen X D, Qian J G,Conjugated trees with minimum general Randić index[J], Discrete Applied Mathematics. 2009,157: 1379-1386.

[11] Li X, Gutman I. Mathematical Aspects of Randić-Type Molecular Structure Descriptors[M]. Kragujevac, 2006.

[12] Kier L B, Hall L H. The nature of structure-activity relationships and their relation to molecular connectivity[J]. Europ. J. Med. Chem., 1977,12:307-312.

[13] Li X, Zheng J. An unified approach to the extremal trees for different indices[J]. Math. Comput. Chem., 2005,51:195-208.

[14] Pavlović L. Maximal value of the zeroth-order Randić index[J]. Discr. Appl. Math., 2003,127:615-626.

[15] Hu Y, Li X, Shi Y, Gutman I. On molecular graphs with smallest and greatest zeroth-order general Randić index[J]. MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 2005,54:425-434.

[16] Zhang S, Zhang H. Unicyclic graphs with the first three smallest and largest first general Zagreb index[J]. Match. Commun. Math. Comput. Chem., 2006,55:427-438.

[17] Hua H, Lin M, Wang H. On zeroth-order general Randić index of conjugated unicyclic graphs[J]. J. Math. Chem., 2007,43:737-748.

[18] 林启法, 钱建国. 给定最大匹配数的树的零阶广义 Randić 指标的界 [J]. 厦门大学学报: 自然科学版, 2008,47:153-157.

[19] Hou Y, Li J. Bounds on the largest eigenvalues of trees with a given size of mathing[J]. Lin. Algebra Appl., 2002,342:203-217.

Extremal trees with repected to zeroth-order general Randić index

LIN Qi-fa [1], QIAN Jian-guo [2]

(1.Department of Mathematics, Ningde Teachers College, Ningde 352100, China;

2.School of Mathematical Sciences, Xiamen University, Xiamen 361005, China)

Abstract: The zeroth-order general Randić index of a graph G is defined by ${}^0R_\alpha(G) = \sum_{v\in V(G)} d(v)^\alpha$, where α is a real number and $d(v)$ is the degree of v. In this paper, an upper bound and a lower bound for the trees with given size of the maximum matching are determined, respectively. Further, the corresponding extremal trees are characterized.

Keywords: tree, zeroth-order general Randić index, maximum matching

2000MSC: 05C70