第 42 卷　第 3 期　　数学理论与应用　　Vol.42　No.3
2022 年 9 月　　MATHEMATICAL THEORY AND APPLICATIONS　　Sep. 2022

树的指数型反遗忘指数的极值问题

曾明瑶 [1,2]　　邓汉元 [2,*]

(1. 怀化学院数学与计算科学学院, 怀化, 418000;
2. 湖南师范大学数学与统计学院, 长沙, 410081)

摘　要　设 G 为简单图, $E(G)$ 为其边集, 则 G 的指数型反遗忘指数 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(G)=\sum_{uv\in E(G)}\mathrm{e}^{\left(\frac{1}{d_G^2(u)}+\frac{1}{d_G^2t(v)}\right)}$, 其中 $d_G(u)$ 为 G 中顶点 u 的度. 本文首先给出树的指数型反遗忘指数 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}$ 的极小值和对应的极图, 然后研究当 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}$ 达到极大值时对应的极图的一些结构性质.

关键词　树　指数型反遗忘指数　极值　极图

The Extremal Value of Exponential Inverse Forgotten Index of a Tree

Zeng Mingyao[1,2]　　Deng Hanyuan[2,*]

(1. School of Mathematics and Computation Science, Huaihua University, Huaihua 418000, China;
2. School of Mathematics and Statistics, Hunan Normal University, Changsha 410081, China)

Abstract　For a simple graph G with edge set $E(G)$, the exponential inverse forgotten index of G is defined as $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(G)=\sum_{uv\in E(G)}\mathrm{e}^{\left(\frac{1}{d_G^2(u)}+\frac{1}{d_G^2(v)}\right)}$, where $d_G(u)$ is the degree of the vertex u in G. In this paper, firstly, we give the minimum value of exponential inverse forgotten index of a tree and determine its corresponding extremal graph. Then, we investigate the maximum value of the exponential inverse forgotten index and describe the structural characteristics of the extremal graph.

Key words　Tree　Exponential inverse forgotten index　Extremal value　Extremal graph

doi: 10.3969/j.issn.1006-8074.2022.03.005

1　引言

拓扑指数起源于 1947 年, Wiener 提出在化学中用拓扑指数研究分子结构图的相关性质. 此后, 科研工作者们提出了一系列用来描述分子结构图的各种数学、化学性质的拓扑指数. 在数学、化学文献中, 有大量的分子结构描述符 (拓扑指数) , 被用于研究分子结构之间的相关性. 一个特殊的类别是基于顶点度的拓扑指数 (简称 VDB 拓扑指数), 它在图中的研究备受学者青睐.

1972 年, 一些化学家在研究 π-电子能量结构的依存性时, 发现能量依赖于分子结构图顶点度的平方和 (也就是后来定义的第一类 Zagreb 指数), 同时发现顶点度的立方和对能量也有影响[1], 但这类拓扑指数却未被进一步研究, 而是被遗忘, 因此称为遗忘指数.

国家自然科学基金项目 (No. 11971164) 和湖南省自然科学基金项目 (No. 2020JJ4423) 资助

通信作者: 邓汉元 (1965-), 教授, 博士, 从事图论, 组合数学研究; E-mail: hydeng@hunnan.edu.cn

收稿日期: 2021 年 11 月 27 日

在数学、化学文献中, 目前已有一些关于遗忘指数的研究, 如 Furtula, Gutman[2] 以第一类 Zagreb 指数和第二类 Zagreb 指数为桥梁, 给出了关于图的遗忘指数的界; Li 和 Zhao 在 [3] 中讨论树的遗忘指数, 得到了其极值并刻画了对应的极树; Basavanagoud 和 Patil[4] 给出了图与其补图的遗忘指数之间的关系; Elumalal[5] 等给出了给定顶点数、边数、最大和最小顶点度的树的遗忘指数的各种下界. 关于遗忘指数的更多研究内容可参考 [6-9].

Rada 在 [10] 中给出了普通的 VDB 拓扑指数的定义: 令 $\mathcal{G}_n$ 表示有 n 个非孤立顶点的图集, 考虑集合

$$K=\{(i,j)\in N\times N|1\leq i\leq j\leq n-1\}.$$

对于图 $G\in\mathcal{G}_n$, 用 $m_{i,j}(G)$ 表示 G 中连接度为 i 和 j 的顶点的边数, 在 $\mathcal{G}_n$ 上的 VDB 拓扑指数是由 $\{\varphi_{i,j}\}_{(i,j)\in K}$ 诱导的函数 $\varphi:\mathcal{G}_n\to\mathbb{R}$, 满足对任意图 $G\in\mathcal{G}_n$,

$$\varphi(G)=\sum_{(i,j)\in K}m_{i,j}(G)\varphi_{i,j}.$$

$\varphi_{i,j}$ 选取不同形式的函数时, 对应着不同的 VDB 拓扑指数. 有关 VDB 拓扑指数的细节可参考 [11-14].

为了更好地研究拓扑指数的区分性质, Rada 在 [14] 中介绍了指数型 VDB 拓扑指数. 给定一类 VDB 拓扑指数 φ, 指数型 VDB 拓扑指数 e^{φ} 定义为

$$\mathrm{e}^{\varphi}(G)=\sum_{(i,j)\in K}m_{i,j}(G)\mathrm{e}^{\varphi_{i,j}}.$$

图 G 的遗忘指数和反遗忘指数都是 VDB 指数, 分别定义为

$$\mathcal{F}(G)=\sum_{uv\in E(G)}(d_G^2(u)+d_G^2(v))=\sum_{(i,j)\in K}m_{i,j}(G)(i^2+j^2),$$

$$\frac{1}{\mathcal{F}}(G)=\sum_{uv\in E(G)}\left(\frac{1}{d_G^2(u)+d_G^2(v)}\right)=\sum_{(i,j)\in K}m_{i,j}(G)\left(\frac{1}{i^2}+\frac{1}{j^2}\right),$$

其中 $d_G(u)$ 为 G 中 u 的顶点度, $E(G)$ 为图 G 的边集. G 的指数型遗忘指数定义为

$$\mathrm{e}^{\mathcal{F}}(G)=\sum_{(i,j)\in K}m_{i,j}(G)\mathrm{e}^{i^2+j^2};$$

G 的指数型反遗忘指数定义为

$$\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(G)=\sum_{(i,j)\in K}m_{i,j}(G)\mathrm{e}^{\frac{1}{i^2}+\frac{1}{j^2}}.$$

遗忘指数的广泛研究与应用以及一系列的研究结果表明, 遗忘指数与反遗忘指数在数学领域有重要意义. 但是关于反遗忘指数的研究结果比较少, 且还没有文献对指数型反遗忘指数进行研究. 为了更好地研究拓扑指数的判别、区分性质, 指数型反遗忘指数的研究是很有必要的.

鉴于指数型 VDB 指数的良好数学性质, 本文将根据 Rada 引进的指数型 VDB 指数, 首先给出树的指数型反遗忘指数 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}$ 的极小值和对应的极图, 然后研究当 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}$ 达到极大值时对应的极图的一些结构性质.

2 树的指数型遗忘指数的极小值

在这一节中, 我们考虑指数型反遗忘指数的极小值, 并刻画对应的极图特征. 用 $\mathcal{T}_n$ 表示所有 n 阶树的集合.

引理 1 若 T 是关于 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}$ 在 $\mathcal{T}_n(n \geq 5)$ 中的一棵最大树, 则 T 中必有长至少为 2 的悬挂路.

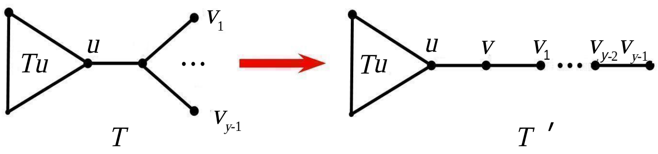

图 1 引理 1 中树 T 和树 T'

证明 若 T 中悬挂路长均为 1, 则存在如图 1 所示的分支点 $v \in V(T)$, 满足 $N_T(v) \setminus \{u\} = \{v_1, v_2, \cdots, v_{y-1}\}$, 其中 $uv \in E(T)$, $d_T(u) = x \geq 3$, $d_T(v_i) = 1(1 \leq i \leq y-1)$. 设 $d_T(v) = y \geq 2$. 令 $T' = T - \{vv_1, vv_2, \cdots, vv_{y-1}\} + \{vv_1, v_1v_2, \cdots, v_{y-2}v_{y-1}\}$, 此时 T' 中有一条长为 y 的悬挂路 $P_y = uvv_1 \cdots v_{y-1}$, 且在 T' 中 $d_{T'}(v) = d_{T'}(v_1) = d_{T'}(v_2) = \cdots = d_{T'}(v_{y-2}) = 2$, $d_{T'}(v_{y-1}) = 1$, 则

$$\begin{aligned}
&\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T') - \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T) \\
={}& \left[\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{4}} + (y-2)\mathrm{e}^{\frac{1}{4}+\frac{1}{4}} + \mathrm{e}^{\frac{1}{4}+1}\right] - \left[\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{y^2}} + (y-1)\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1}\right] \\
={}& \left(\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{4}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{y^2}}\right) + (y-2)\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1}\right) + \left(\mathrm{e}^{\frac{5}{4}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1}\right) \\
={}& \mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}}\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}\right) + e\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}\right) + (y-2)\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1}\right) \\
={}& \left(\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}} + \mathrm{e}\right)\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}\right) + (y-2)\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1}\right) \\
<{}& 2\mathrm{e}\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}\right) + (y-2)\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1}\right).
\end{aligned}$$

不妨令 $f(y) = 2\mathrm{e}\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}\right) + (y-2)\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1}\right)$. 对 $f(y)$ 求导, 有

$$\begin{aligned}
f'(y) &= \frac{4}{y^3}\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1} + \left(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1}\right) + \frac{2(y-2)}{y^3}\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1} \\
&= \left(\frac{2}{y^2} - 1\right)\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1} + \mathrm{e}^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned}$$

再对 $f(y)$ 求二阶导, 得

$$f''(y) = -\frac{4}{y^3}\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1} + \left(\frac{2}{y^2} - 1\right)\left(-\frac{2}{y^3}\right)\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1} = \frac{-2y^2-4}{y^5}\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1} < 0.$$

故 $f'(y)$ 为严格单调递减函数, 对于 $y > 3$, 有

$$f'(y) < f'(3) = -\frac{7}{9}\mathrm{e}^{\frac{10}{9}} + \mathrm{e}^{\frac{1}{2}} < 0,$$

从而 $f(y)$ 也为严格单调递减函数, 且

$$f(y) < f(3) = 2\mathrm{e}\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{3^2}}\right) + \left(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{3^2}+1}\right) = 2\mathrm{e}^{\frac{5}{4}} + \mathrm{e}^{\frac{1}{2}} - 3\mathrm{e}^{\frac{10}{9}} < 0.$$

综上, 我们可以得到

$$\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T') < \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T),$$

矛盾, 故 T 中必有长至少为 2 的悬挂路.

在证明过程中, 我们发现 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}$ 在 $\mathcal{T}_n$ 中达到极小值时, 对应的极图 T 形如毛毛虫树这种特殊结构. 接下来给出毛毛虫树的定义.

定义 1 ([15]) 设 $T \in \mathcal{T}_n$. 称 T 为毛毛虫树, 若 $P_k = v_1v_2\cdots v_k$ 为 T 中含有 k 个顶点的路, 且在顶点 v_1 上附着 a_1 个悬挂点, 在顶点 v_2 上附着 a_2 个悬挂点,$\cdots$, 在顶点 v_k 上附着 a_k 个悬挂点, 其中 $a_i \geq 0(i = 1, \cdots, k)$. 我们称 $P_k = v_1v_2\cdots v_k$ 为毛毛虫树 T 的主路, 并把这样的树记为 $cp(k; a_1, a_2, \cdots, a_k)$, 如图 2.

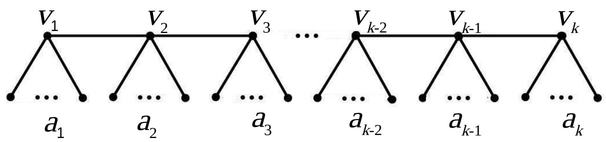

图 2 毛毛虫树 $cp(k; a_1, a_2, \cdots, a_k)$

引理 2 若 T 是关于 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}$ 在 $\mathcal{T}_n(n \geq 5)$ 中的一棵最小树, 则 T 为毛毛虫树.

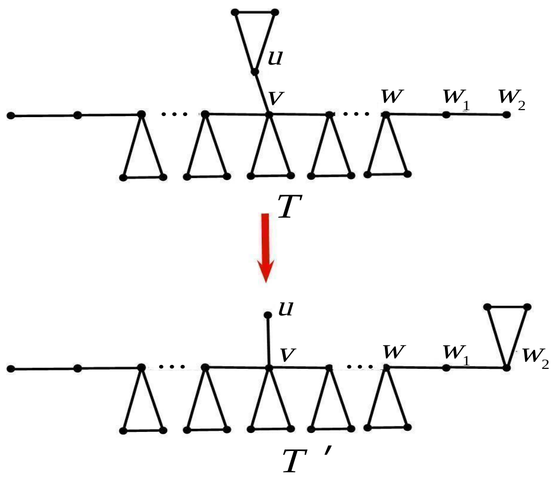

图 3 引理 2 中树 T **和树** T'

证明 若 T 是关于 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}$ 在 $\mathcal{T}_n(n \geq 5)$ 中的一棵最小树, 由引理 1 知, T 中必有长为 2 的悬挂路, 不妨记为 $P_1 = ww_1w_2$. 显然 T 中可以找到一条包含 P_1 的最长路 P_2, 且 T 中存在

分支点 v, 满足 $uv \in E(T), v \in V(P_2), u \notin V(P_2)$, $d_T(u) = x \geq 2$, 否则 T 为毛毛虫树. 设 $d_T(v) = y \geq 3$, u 的邻域 $N_T(u) = \{v, u_1, u_2, \cdots, u_{x-1}\}$, 对应的 $d_T(u_i) = x_i (i = 1, 2, \cdots, x-1)$. 令 $T' = T - \{uu_1, uu_2, \cdots, u_{x-1}\} + \{w_2u_1, w_2u_2, \cdots, w_2u_{x-1}\}$, 则

$$\begin{aligned}
&\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T') - \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T) \\
&= \left[\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1} + \mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{4}} + \sum_{i=1}^{x-1} \mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{x_i^2}}\right] - \left[\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+\frac{1}{x^2}} + \mathrm{e}^{\frac{1}{4}+1} + \sum_{i=1}^{x-1} \mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{x_i^2}}\right] \\
&= \left(\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}} + \mathrm{e}^{\frac{1}{4}+1}\right) + \left(\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{4}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+\frac{1}{x^2}}\right) \\
&= \mathrm{e}\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{4}}\right) + \mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}}\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}\right) \\
&= \left(\mathrm{e} + \mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}}\right)\left(\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{4}}\right) < 0,
\end{aligned}$$

即

$$\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T') < \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T).$$

事实上, 若 T 中存在分支顶点 u' 且分支顶点 u' 不在最长路 P_2 上, 则可以继续重复上述变换, 直至这样的分支点不存在. 故要使 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)$ 达到极小值, 则 T 为毛毛虫树.

引理 3 若 $T = cp(k; a_1, a_2, \cdots, a_k)$ 是关于 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}$ 在 $n \geq 5$ 阶毛毛树中的一棵最小树, 则 $a_i = 0 (i = 1, 2, \cdots, k)$, 即 T 为路 P_n, 且

$$\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(P_n) = 2\mathrm{e}^{\frac{5}{4}} + (n-3)\mathrm{e}^{\frac{1}{2}}.$$

证明 为了方便接下来的计算, 我们首先考虑函数 $f(y) = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}}(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}) + (\mathrm{e}^{\frac{1}{2}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1})$. 由于

$$f'(y) = \frac{2}{y^3}\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}} + \frac{2}{y^3}\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1} > 0,$$

所以 $f(y)$ 为单调递增函数,

$$\begin{aligned}
f(y) &= \mathrm{e}^{\frac{1}{2}}(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}) + (\mathrm{e}^{\frac{1}{2}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1}) \\
&< \lim_{y\to\infty} \mathrm{e}^{\frac{1}{2}}(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}) + (\mathrm{e}^{\frac{1}{2}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1}) \\
&= \mathrm{e}^{\frac{1}{2}}(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} - 1) + (\mathrm{e}^{\frac{1}{2}} - \mathrm{e}) \\
&= \mathrm{e}^{\frac{3}{4}} - \mathrm{e} \\
&< 0.
\end{aligned}$$

接下来, 我们令 $P_k = v_1v_2\cdots v_k$ 为毛毛虫树 $cp(k; a_1, a_2, \cdots, a_k)$ 的主路, 且 $a_{k-1} = a_k = 0$, 否则由引理 1 中变换, 可以找到更小树满足条件.

T 为毛毛虫树, 必然存在这样的分支顶点 v_i, 使距离 $d_T(v_i, v_k)$ 最短, 且 $a_i \neq 0$. 不妨设 $d_T(v_{i-1}) = x \geq 2$, $d_T(v_{i+1}) = 2$, $d_T(v_i) = y \geq 3$, v_i 的邻域 $N_T(v_i) = \{v_{i-1}, v_{i+1}, w_1, \cdots, w_{y-2}\}$, 则 $d_T(w_1) = d_T(w_2) = \cdots = d_T(w_{y-2}) = 1$. 令 $T' = T - \{v_iw_1, v_iw_2 \cdots, v_iw_{y-2}\} +$

$\{v_kw_1, v_kw_2\cdots, v_kw_{y-2}\}$(如图 4), 则

$$
\begin{aligned}
& \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T')-\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)\\
={}& [\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{4}}+(y-1)\mathrm{e}^{\frac{1}{4}+\frac{1}{4}}+\mathrm{e}^{\frac{1}{4}+1}]-[\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+\frac{1}{x^2}}+(y-2)\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1}+\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+\frac{1}{4}}+\mathrm{e}^{\frac{1}{4}+1}]\\
={}& \mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}}(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}}-\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}})+(y-2)(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}}-\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1})+(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}}-\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+\frac{1}{4}})\\
={}& (\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}}+\mathrm{e}^{\frac{1}{4}})(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}}-\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}})+(y-2)(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}}-\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1})\\
\le{}& \mathrm{e}^{\frac{1}{2}}(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}}-\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}})+(y-2)(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}}-\mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1})\\
<{}& 0.
\end{aligned}
$$

故 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T')<\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)$.

若仍存在分支点 v_j, 满足 $a_j\neq 0$, 则重复上述变换, 直至 $a_j=0(j=1,2,\cdots,k)$. 因此, 关于 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}$ 在 n 阶毛毛树中的一棵最小树为路 P_n.

此时 $m_{1,2}=2, m_{2,2}=n-3$,

$$
\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)=\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(P_n)=\sum_{(i,j)\in K} m_{i,j}\mathrm{e}^{\frac{1}{i^2}+\frac{1}{j^2}}=2\mathrm{e}^{\frac{5}{4}}+(n-3)\mathrm{e}^{\frac{1}{2}}.
$$

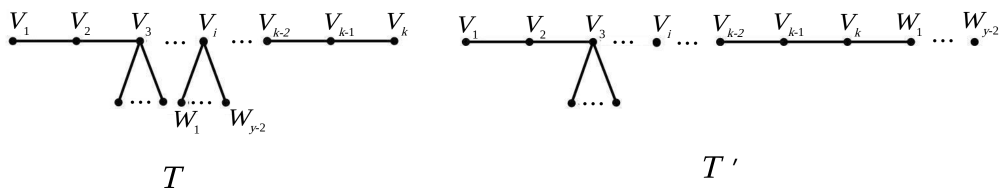

图 4 引理 3 中树 T 和树 T'

由上述引理 1-3 直接可得树关于指数型反遗忘指数的极小值和对应的极图.

定理 1 若 $T\in\mathcal{T}_n(n\geq 5)$ 且 $T\ncong P_n$, 则 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)>\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(P_n)>2\mathrm{e}^{\frac{5}{4}}+(n-3)\mathrm{e}^{\frac{1}{2}}$.

3 树的指数型遗忘指数的极大值

下面将分析指数型反遗忘指数的极大值问题. 首先, 构造贪婪树, 然后研究 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)$ 达到极大值时极值树的一些结构性质.

定义 2 ([16, 17]) 若给定树 T 的度序列, 则根据以下算法 (1)-(4) 构造而成的树称为贪婪树.

(1) 标记 T 中最大度顶点为 $v_{0,1}$(称 $v_{0,1}$ 为根);

(2) 标记顶点 $v_{0,1}$ 的邻点为 $v_{1,1}, v_{1,2},\cdots$, 且它们的顶点度不大于 $d_T(v_{0,1})$, 同时满足 $d_T(v_{1,1})\geq d_T(v_{1,2})\geq\cdots$;

(3) 标记除 $v_{0,1}$ 外, 顶点 $v_{1,1}$ 的其余邻点为 $v_{2,1}, v_{2,2},\cdots$, 且它们的顶点度不大于 $d_T(v_{1,j})(j\geq 1)$, 同时满足 $d_T(v_{2,1})\geq d_T(v_{2,2})\geq\cdots$; 再用同样方法标记 $v_{1,2}, v_{1,3},\cdots$;

(4) 对于新标记的顶点重复 (3) 的做法, 直至所有顶点标记完.

用 $h(v)$ 表示贪婪树中根到顶点 v 的距离; 称顶点 $v_{i,j}(i,j\geq 1)$ 为顶点 $v_{i-1,j}$ 的父亲, 顶点 $v_{i-1,j}(i,j\geq 1)$ 为顶点 $v_{i,j}$ 的儿子.

引理 4 令 $f(x,y)=\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{y^2}}$, $g(x,y)=f(x,y)-f(x-1,y)$, $x,y\geq 1$.
(1) 若固定 y, 则 $f(x,y)$ 关于 x 严格单调递减;
(2) 若固定 y, 则 $g(x,y)<0$ 且 $g(x,y)$ 关于 x 严格单调递增.

证明 (1) 若固定 $y\geq 1$, 则

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}=-\frac{2}{x^3}\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{y^2}}<0,$$

从而结论成立.

(2) 若固定 $y\geq 1$, 则 $g(x,y)=\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{y^2}}-\mathrm{e}^{\frac{1}{(x-1)^2}+\frac{1}{y^2}}$, 且

$$\begin{aligned}\frac{\partial g(x,y)}{\partial x}&=-\frac{2}{x^3}\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{y^2}}+\frac{2}{(x-1)^3}\mathrm{e}^{\frac{1}{(x-1)^2}+\frac{1}{y^2}}\\&>-\frac{2}{x^3}\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{y^2}}+\frac{2}{(x-1)^3}\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{y^2}}\\&=\left[\frac{2}{(x-1)^3}-\frac{2}{x^3}\right]\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{y^2}}>0,\end{aligned}$$

由此可知, 结论成立.

引理 5 设 $T\in\mathcal{T}_n(n\geq 5)$ 是使得 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)$ 达到最大值的一棵树, 则 T 为贪婪树.

证明 设 v_0 为 T 中最大度顶点, $d_T(v_0)=d_0=\Delta$, $d_T(v_i)=d_i(1\leq i<j\leq n-1)$. 若 T 不是贪婪树, 则存在 $d_i<d_j$, 其中 i,j 满足 $d_0\geq d_1\geq\cdots\geq d_{i-1}\geq d_j\geq d_k$. 于是 $d_j=\max\{d_i,d_{i+1},\cdots d_{n-1}\}$. 设 u_i 为 v_i 的父亲, u_j 为 v_j 的父亲, $h(v)$ 为 v 到最大度顶点的距离, 则 $h(v_j)\geq h(v_i)=h(u_i)-1$ 且 $h(v_j)\geq 2$. 此外 $u_iv_j\notin E(T)$, 且 $d_T(u_i)\geq d_T(v), v\in N_T(v_j)$. 否则交换 v_i,v_j 或 u_i,u_j 的位置, 此时无论 $u_j\notin N_T(v_i), u_jv_i\notin E(T)$, 还是 $u_j\in N_T(v_i), u_jv_i\in E(T)$, 均可令 $T'=T-u_iv_i-u_jv_j+u_iv_j+u_jv_i$, 而

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T')-\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)&=[f(u_i,v_j)+f(u_j,v_i)]-[f(u_i,v_i)+f(u_j,v_j)]\\&=[f(v_j,u_i)-f(v_i,u_i)]+[f(v_i,u_j)-f(v_j,u_j)]\\&=[g(v_j,u_i)+g(v_j-1,u_i)+\cdots+g(v_i,u_i)]\\&\quad-[g(v_i,u_i)+g(v_i-1,u_i)+\cdots+g(v_j,u_j)]\\&>0.\end{aligned}$$

故 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T')>\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)$, 与 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)$ 为最大值矛盾, 故 T 为贪婪树.

下面, 我们给出内部路与悬挂路的定义. 对于图 G 中一条长为 k 的路 $u_0u_1\cdots u_{k-1}u_k$, 若 $d_G(u_0)\geq 3$ 且对于 $1\leq i\leq k-1$, 有 $d_G(u_i)=2$, 则当 $d_G(u_k)\geq 3$ 时, 称它为图 G 的内部路; 当 $d_G(u_k)=1$ 时, 称它为图 G 的悬挂路.

引理 6 设 $T \in \mathcal{T}_n(n \geq 5)$ 是使得 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)$ 达到最大值的一棵树, 则 T 中无长度大于 2 的悬挂路与内部路.

证明 若 T 中存在长度大于 2 的悬挂路, 由引理1 的逆变换知, 这与 T 是使得 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)$ 达到最大的一棵树矛盾, 故 T 中悬挂路长至多为 2.

若 T 中存在长度大于 2 的最长内部路 $P_k = v_1v_2, \cdots, v_k(k \geq 3)$, 设 T_{v_1}, T_{v_k} 分别为 $T = v_1v_2, \cdots, v_k$ 且包含 v_1, v_k 的连通分支, 若 P 为 T 中一条包含 P_k 的最长路, 则必然可以找到一条悬挂边 vu, $(d(u) = 1)$ 不在 P 中, 否则 T 为路. 由定理 2, 这与 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)$ 达到极大值矛盾. 不妨设 $uv \in T_{v_1}$, 此时, 令 $T' = T - \{v_kw_k | w_k = N_T(v_k) \backslash \{v_{k-1}\}\} + \{uw_k | w_k = N_T(v_k) \backslash \{v_{k-1}\}\}$, $N(v_k) \in T_{v_k}$, 类似于引理 3 中的逆变换及计算可以得到, 若 T 中存在长度大于 2 的内部路, 则总可以找到更大的树满足要求, 与引理条件矛盾. 故 T 中无长度大于 2 的内部路.

引理 7 设 $T \in \mathcal{T}_n(n \geq 5)$ 是使得 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)$ 达到最大值的一棵树, 则 T 中至多只有一条长度为 2 的悬挂路, 且当最大度顶点与悬挂点相邻时, 这条长度为 2 的悬挂路附在最大度顶点上.

证明 (1) 首先证明 T 中至多只有一条长度为 2 的悬挂路, 若 T 中存在两条长度为 2 的悬挂路 $P_1 = uu_1u_2, P_2 = vv_1v_2$, 不妨设 $d_T(u) = x \leq y = d_T(v), 2 \leq x \leq y$. 令 $T' = T - u_1u_2 + v_1u_2$, 则有

$$\begin{aligned}
& \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T') - \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T) \\
= & [\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+1} + \mathrm{e}^{\frac{1}{y^3}+\frac{1}{9}} + 2\mathrm{e}^{\frac{1}{9}+1}] - [\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{4}} + \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+\frac{1}{4}} + 2\mathrm{e}^{\frac{1}{4}+1}] \\
= & \mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}}(\mathrm{e} - \mathrm{e}^{\frac{1}{4}}) + \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}(\mathrm{e}^{\frac{1}{9}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{4}}) + 2\mathrm{e}(\mathrm{e}^{\frac{1}{9}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{4}}) \\
\geq & \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}(\mathrm{e} - \mathrm{e}^{\frac{1}{4}}) + \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}(\mathrm{e}^{\frac{1}{9}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{4}}) + 2\mathrm{e}(\mathrm{e}^{\frac{1}{9}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{4}}) \\
= & \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}(\mathrm{e} + \mathrm{e}^{\frac{1}{9}} - 2\mathrm{e}^{\frac{1}{4}}) + 2\mathrm{e}(\mathrm{e}^{\frac{1}{9}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{4}}) \\
\geq & \mathrm{e} + \mathrm{e}^{\frac{1}{9}} - 2\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} + 2\mathrm{e}(\mathrm{e}^{\frac{1}{9}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{4}}) \\
> & 0.
\end{aligned}$$

即 $\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T') > \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathcal{F}}}(T)$, 矛盾. 故 T 中至多只有一条长度为 2 的悬挂路.

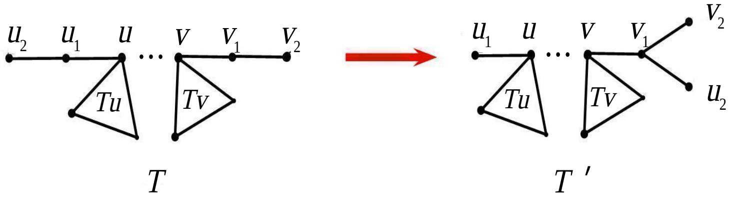

图 5 引理 7 的证明中, (1) 的树 T 和树 T'

(2) 若 u 为 T 中最大度顶点且与悬挂点 v 相邻, 下证这条长为 2 的悬挂路附在顶点 u 上. 如图 6, u 为 T 中最大度顶点且与悬挂点 v 相邻, ww_1w_2 为 T 中长为 2 的悬挂路. 设

$d_T(u) = x \geq y = d_T(w)$, 令 $T' = T - w_1w_2 + vw_2$, 则有

$$\begin{aligned}
&\mathrm{e}^{\frac{1}{F}}(T') - \mathrm{e}^{\frac{1}{F}}(T)\\
&= [\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+\frac{1}{4}} + \mathrm{e}^{\frac{1}{4}+1} + \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+1}] - [\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}+1} + \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}+\frac{1}{4}} + \mathrm{e}^{\frac{1}{4}+1}]\\
&= \mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}}(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} - \mathrm{e}) + \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}}(\mathrm{e} - \mathrm{e}^{\frac{1}{4}})\\
&= (\mathrm{e}^{\frac{1}{x^2}} - \mathrm{e}^{\frac{1}{y^2}})(\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} - \mathrm{e})\\
&> 0,
\end{aligned}$$

故 $\mathrm{e}^{\frac{1}{F}}(T') > \mathrm{e}^{\frac{1}{F}}(T)$. 事实上, 对任意的顶点 u' 与 v' 满足 $d_T(u') > d_T(v')$, 若 u' 上存在悬挂点, 则 v' 上无长度大于 1 的悬挂路.

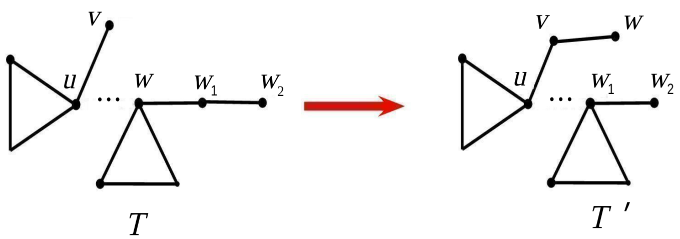

图 6　引理 7 的证明中, (2) 的树 T 和树 T'

结合引理 5、引理 6 和引理 7 容易得到, 当 $\mathrm{e}^{\frac{1}{F}}(T)$ 达到极大值时, 极图 T 的结构性质.

定理 2　设 $T \in \mathcal{T}_n(n \geq 5)$ 是使得 $\mathrm{e}^{\frac{1}{F}}(T)$ 达到最大值的一棵树, 则 T 为贪婪树, 且 T 中

(1) 无长度 $k \geq 2$ 的内部路;

(2) 无长度 $k \geq 3$ 的悬挂路;

(3) 至多只有一条长度 $k = 2$ 的悬挂路.

本文考虑了当 $\varphi_{ij} = i^\alpha + j^\alpha(\alpha \geq 1)$ 时, 指数型 VDB 拓扑指数 $\Sigma_{(i,j\in K)}m_{i,j}(G)\mathrm{e}^{\varphi_{ij}}$ 取得极值时, 对应的极树的结构, 并研究了当 $\alpha = -2$ 时, 对应的反遗忘指数取得极值时, 对应极树的结构性质.

至于 $\alpha < 1$ 时, 指数型 VDB 拓扑指数 $\Sigma_{(i,j\in K)}m_{i,j}(G)\mathrm{e}^{i^\alpha+j^\alpha}$ 取得极值的情况, 还不能通过本文的图变换和计算得到极值结果, 这将是我们未来进一步要研究的问题.

参考文献

[1] Gutman I, Trinajstić N. Graph theory and molecular orbitals total π-electron energy of alternant hydrocarbons[J]. Chemical Physics Letters, 1972, 17: 535-538.

[2] Furtula B, Gutman I. A forgotten topological index[J]. Journal of Mathematical Chemistry, 2015, 53(4): 1184-1190.

[3] Li X, Zhao H. Trees with the first three smallest and largest generalized topological index[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2004, 50: 57-62.

[4] Basavanagoud B, Patil S. A note on Hyper-Zagreb coindex of graph operation[J]. Journal of Applied Mathematical and Computer Science, 2017, 53(1-2): 647-655.

[5] Elumalal S, Mansourr T, Rostami M. On the bounds of the forgotten topological index[J]. Turkish Journal of Mathematics, 2017, 41(6): 1687-1702.

[6] Deng H. A unified approach to the extremal Zagreb indices for trees, unicyclic graphs and bicyclic graphs[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2007, 57(3): 597-616.

[7] Deng H, Sarala D, Ayyaswamy S. The Zagreb indices of four operations on graphs[J]. Applied Mathematics and Computation, 2016, 275: 422-431.

[8] Akhter S, Imran M. Computing the forgotten topological index of four operations on graphs[J]. Akce International Journal of Graphs and Combinatorics, 2017, 14(1): 70-79.

[9] Kazemi R, Behtoei A. The first Zagreb and forgotten topological indices of d-ary trees[J]. Hacettepe Journal of Mathematics and Ststistics, 2017, 46(4): 603-611.

[10] Rada J. Exponential vertex-degree-based topological indices and discrimination[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2019, 81(1): 29-41.

[11] Cruz R, Rada J. The path and the star as extremal values of vertex-degree-based topological indices among trees[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2019, 82(3): 715-732.

[12] Cruz R, Monsalve J, Rada J. Trees with maximum exponential Randić index[J]. Discrete Applied Mathematics, 2020, 283: 634-643.

[13] Gutman I. Degree-based topological indices[J]. Croatica Chemica Acta, 2013, 86(4): 351-361.

[14] Rada J, Bermudo S. Is every graph the extremal value of a vertex-degree-based topological index[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2019, 81(2): 315-323.

[15] Zhang P. Dey D. The degree profile and gini index of radom caterpillar trees[J]. Probability in the Engineering and Informational Sciences, 2019, 33(4): 511-527.

[16] Biyikoğlu T. Leydold J. Graphs with given degree sequence and maximal spectral radius[J]. The Electronic Journal of Combinatorics, 2008, 15(1): R119.

[17] Lin W, Huang L. On the trees with maximal augmented Zagreb index[J]. IEEE Access, 2018, 6(1): 69335-69341.