

一些图运算的调和指标与调和多项式的线图*

米热古丽·外力

(新疆财经大学 统计与数据科学学院, 新疆 乌鲁木齐 830012)

摘要: 本文给出了边意义下调和指标及调和多项式关于笛卡儿积、Corona 积、联图、笛卡儿和以及字典积等图运算的计算公式. 边意义下的该指标关于上述运算中图的若干上下界是基于凸函数积分的已知结果得到的.

关键词: 拓扑指标; 线图; 调和指标; 调和函数; 逆度

DOI: 10.13568/j.cnki.651094.651316.2020.06.15.0001

中图分类号: O157.5 **文献标识码:** A **文章编号:** 2096-7675(2021)05-0540-09

引文格式: 米热古丽·外力. 一些图运算的调和指标与调和多项式的线图[J]. 新疆大学学报(自然科学版)(中英文), 2021, 38(5): 540-548.

英文引文格式: Wali Mihrigul. Edge version of harmonic index and harmonic polynomial of some graph operations[J]. Journal of Xinjiang University(Natural Science Edition in Chinese and English), 2021, 38(5): 540-548.

Edge Version of Harmonic Index and Harmonic Polynomial of Some Graph Operations

Wali Mihrigul

(College of Statistics and Data Science, Xinjiang University of Finance and Economics, Urumqi Xinjiang 830012, China)

Abstract: In this paper we computed explicit formulas for the edge version of harmonic index and harmonic polynomial of many well known classes of graph Operations: Cartesian product, Corona product, join, Cartesian sum and lexicographic product. Some upper and lower bounds for the edge harmonic indices of these operations of graphs, in terms of related indices, are derived from known bounds on the integral of a product on nonnegative convex functions.

Key words: topological indices; harmonic index; harmonic polynomial; inverse degree; products of graphs

0 引言

假设图 G 是一个具有顶点集 $V(G)$ 和边集 $E(G)$ 的简单图. d_v 是顶点 v 的度, 是顶点 v 相连接的顶点个数. 度为 1 的顶点为悬挂点. 边 $e \in E(G)$ 的度 d_e 是在 $V(L(G))$ 中跟它相邻的顶点的个数. $L(G)$ 是图 G 的线图, 是线图中点定义为图 G 的边, 如果对应的边在 G 中有一个公共顶点, 则线图中对应的两个顶点相邻. 线图在结构化学中有着非常重要作用, 但近年来在化学图论中却很少被重视. 1981年, Bertz 研究分子分支时在线图的基础上引入了第一个拓扑指标^[1], 在此基础上, 学者们引入了许多基于线图的拓扑指标^[2-4]. 关于线图在化学中的应用, 我们可参考文章[5-7].

在化学中, 分子结构描述符被用来构造分子的信息, 这被称为拓扑指标. 它们在图同构意义下是不变的. 有许多拓扑指标是由图中的顶点度来定义的^[8-13]. 文献[14]首次引入了基于顶点的度的调和指标 $H(G)$, 被定义为

$$H(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{2}{d_u + d_v}$$

调和多项式在[15]中定义为:

* 收稿日期: 2020-06-15

基金项目: 国家自然科学基金项目(11971406).

作者简介: 米热古丽·外力(1985-), 女, 博士生, 从事图论及其应用的研究, E-mail: 381883720@qq.com.

$$H(G, x) = \sum_{uv \in E(G)} x^{d_u + d_v - 1}$$

这个多项式来自于 $2 \int_0^1 H(G, x) dx = H(G)$, 在[16]中, Nazar等人根据图 G 的线图中各边的端点的度引入了调和指标的边的形式, 定义为:

$$H_e(G) = \sum_{ef \in E(L(G))} \frac{2}{d_e + d_f}$$

类似地, 调和多项式的边形式为

$$H_e(G, x) = \sum_{ef \in E(L(G))} x^{d_e + d_f - 1}$$

我们可以知道 $2 \int_0^1 H_e(G, x) dx = H_e(G)$.

因此, 在这篇文章中我们给出了经典乘积图, 如笛卡儿积、Corona 积、联图、笛卡儿和以及字典积等的调和指标与边调和多项式的边的形式.

1 定义和一些已知结果

命题1^[16] 设 G 是 n 个顶点的 k -正则图, 则

(1) $H_e(G, x) = kn(k-1)x^{4k-5}$.

(2) $H(G) = \frac{kn}{4(k-1)}$.

并且他们在完全图 K_n (n 个顶点的完全图)、 C_n (n 个顶点的圈)、 Π_n (n 边棱镜)、 A_n (n 边反棱镜)、 $K_{m,n}$ (n_1+n_2 个顶点的完全二部图)、 W_n ($n \geq 4$ 的轮图)、 H_n (执掌图)、 L_n (阶梯图)和 P_n (线性五苯图)上得到了一些结果.

命题2 我们有如下结果

(1) $H_e(K_n, x) = n(n-1)(n-2)x^{4n-9}$ 且 $H_e(K_n) = \frac{n(n-1)}{4}$.

(2) $H_e(C_n, x) = 2nx^3$ 且 $H_e(C_n) = \frac{n}{2}$.

(3) $H_e(\Pi_n, x) = 12nx^{11}$ 且 $H_e(\Pi_n) = n$.

(4) $H_e(A_n, x) = 30nx^{19}$ 且 $H_e(A_n) = \frac{3n}{2}$.

(5) $H_e(K_{m,n}, x) = mn(m+n-2)x^{2m+2n-5}$ 且 $H_e(K_{m,n}) = \frac{mn}{2}$.

(6) $H_e(W_n, x) = 2nx^7 + n(n-1)x^{2n+1} + 4nx^{n+4}$ 且 $H_e(W_n) = \frac{n}{4} + \frac{n(n-1)}{2(n+1)} + \frac{4n}{n+5}$.

(7) $H_e(H_n, x) = 4nx^8 + 4nx^{n+7} + n(n-1)x^{2n+3} + 2nx^{n+4} + 2nx^{11}$, $H_e(H_n) = \frac{4n}{9} + \frac{4n}{n+8} + \frac{n(n-1)}{2(n+2)} + \frac{2n}{n+5} + \frac{n}{n+6}$.

(8) $H_e(L_n, x) = 8x^4 + 16x^6 + 2(6n-14)x^7$, 当 $n > 2$. $H_e(L_n, x) = 8x^4 + 4x^5 + 8x^6$, 当 $n = 2$, $H_e(L_n) = \frac{105n+517}{70}$, 当 $n > 2$. $H_e(L_n) = \frac{358}{105}$, 当 $n = 2$.

(9) $H_e(P_n, x) = 8x^3 + 8x^4 + (36n-8)x^5 + (48n-16)x^6 + (8n-8)x^7$, $H_e(P_n) = \frac{97n}{7} - \frac{107}{105}$.

命题3^[17] 如果 G 是有 m 条边的图, 则

(1) 对每一个 $k > 0$ 且 $x \in [0, \infty)$ 时 $H^k(G, x) \geq 0$;

(2) $(0, \infty)$ 上 $H(G, x) > 0$ 且 $H(G, x)$ 在 $[0, \infty)$ 上严格单调增;

(3) $H(G, x)$ 是在 $[0, \infty)$ 上的严格凸函数当且仅当 G 对路图 P_2 的并集不同构; 且对每一个 $x \in [0, 1]$ 有 $0 = H(G, 0) \leq H(G, x) \leq H(G, 1) = m$.

图 G_1 和 G_2 的笛卡儿积 $G_1 \times G_2$ 的点集为 $V(G_1 \times G_2) = V(G_1) \times V(G_2)$, 如果 $u_i = u_k$ 且 $v_j v_l \in E(G_2)$, 或者 $u_i u_k \in E(G_1)$ 且 $v_j = v_l$, $(u_i, v_j)(u_k, v_l)$ 时, $(u_i, v_j)(u_k, v_l)$ 是 $G_1 \times G_2$ 的边.

给定的两个图 G_1 和 G_2 的 Corona 乘积 $G_1 \circ G_2$ 定义为通过相加得到的图. 取 G_2 的 $V(G_1)$ 个拷贝连接到 G_1 上的每一个点, 并且第 i 个拷贝的每个顶点连接到 $v_i \in V(G_1)$.

连图 $G_1 + G_2$ 定义为取 G_1 的一个拷贝和 G_2 的一个拷贝, 把 G_1 的每一个顶点连接到 G_2 上的每一个点所得到的图.

两个图 G_1 和 G_2 的笛卡儿和 $G_1 \oplus G_2$, 顶点集为 $V(G_1 \oplus G_2) = V(G_1) \times V(G_2)$, 如果 $u_i u_k \in E(G_1)$ 或 $v_j v_l \in E(G_2)$, 则 $(u_i, v_j)(u_k, v_l)$ 是 $G_1 \oplus G_2$ 的边.

两个图 G_1 和 G_2 的字典积 $G_1 \odot G_2$, $V(G_1) \times V(G_2)$ 作为顶点集使得 $V(G_1 \odot G_2)$ 的两个不同的点 $(u_i, v_j), (u_k, v_l)$, 如果 $u_i u_k \in E(G_1)$ 或者 $u_i = u_k$ 则 $v_j v_l \in E(G_2)$ 时是相连的.

我们引入另一个拓扑指标. 图 G 的逆度 $ID(G)$ 被定义为

$$ID(G) := \sum_{u \in V(G)} \frac{1}{d_u} = \sum_{uv \in E(G)} \left(\frac{1}{d_u^2} + \frac{1}{d_v^2} \right),$$

图 G 的逆多项式为

$$ID(G, x) := \sum_{u \in V(G)} x^{d_u - 1}.$$

因此, 我们得到 $\int_0^1 ID(G, x) dx = ID(G)$. 下面的结果总结了[17]中逆度数多项式的一些有趣的性质.

命题4 如果图 G 是 n 个顶点和 k 个悬挂点的图, 那么

(1) 对每一个 $j \geq 0$ 且 $x \in [0, \infty)$ 有 $ID^{(j)}(G, x) \geq 0$;

(2) 在 $(0, \infty)$ 上 $ID(G, x) > 0$;

(3) G 当且仅当与路图 P_2 的并集不同构时 $ID(G, x)$ 在 $[0, \infty)$ 上是严格增的;

(4) G 当且仅当与路径图的并集不同构时 $ID(G, x)$ 在 $[0, \infty)$ 上是严格凸的, 并且对每一个 $x \in [0, 1]$, 有 $k = ID(G, 0) \leq ID(G, x) \leq ID(G, 1) = n$.

2 主要结果

下面的引理有助于计算线图的顶点的度.

引理 1 设图 G , $u, v \in V(G)$ 和 $e = uv \in E(G)$. 那么

$$d_e = d_u + d_v - 2.$$

引理 2 给定图 G , 则

$$\sum_{u \in V(G)} d_u = 2|E(G)|.$$

定理1 给定两个图 G_1 和 G_2 , 笛卡儿积 $G_1 \times G_2$ 的边调和多项式是

$$H_e((G_1 \times G_2), x) = \frac{1}{x^2} H(G_1, x) ID(G_2, x^2) + \frac{1}{x^2} H(G_2, x) ID(G_1, x^2).$$

证明 分别用 n_1 和 n_2 表示 G_1 和 G_2 的顶点数.

如果 $(u_i, v_j) \in V(G_1 \times G_2)$, 则 $d_{(u_i, v_j)} = d_{u_i} + d_{v_j}$, 如果 $(u_i, v_k)(u_j, v_k) \in E(G_1 \times G_2)$, 则对应的边调和多项式为

$$x^{d_{u_i} + d_{v_k} - 2 + d_{u_j} + d_{v_k} - 2 - 1} = x^{2d_{v_k}} x^{d_{u_i} + d_{u_j} - 5}$$

因此,

$$\sum_{k=1}^{n_2} \sum_{u_i, u_j \in E(G_1)} x^{2d_{v_k} + d_{u_i} + d_{u_j} - 5} = \sum_{k=1}^{n_2} (x^2)^{d_{v_k} - 1} \sum_{u_i, u_j \in E(G_1)} x^{d_{u_i} + d_{u_j} - 1} x^{-2} = \frac{1}{x^2} ID(G_2, x^2) H(G_1, x)$$

同样地, 对应 $(u_k, v_i)(u_k, v_j) \in E(G_1 \times G_2)$ 的多项式是 $\frac{1}{x^2} H(G_2, x) ID(G_1, x^2)$.

引理3^[18] 设 f_1, \dots, f_k 是 $[0, 1]$ 上的非负的凸函数, 则

$$\int_0^1 \prod_{i=1}^k f_i(x) dx \geq \frac{2^k}{k+1} \prod_{i=1}^k \int_0^1 f_i(x) dx.$$

引理4^[19] 设 f_1, \dots, f_k 是 $[0, 1]$ 上的非负的凸函数, 则

$$\int_0^1 \prod_{i=1}^k f_i(x) dx \leq \frac{2}{k+1} \left(\prod_{i=1}^k \int_0^1 f_i(x) dx \right)^{1/k} \left(\prod_{i=1}^k (f_i(0) + f_i(1)) \right)^{1-1/k}.$$

定理2 给定两个图 G_1 和 G_2 , 顶点 n_1 和 n_2 , 边 m_1 和 m_2 , 笛卡儿积 $G_1 \times G_2$ 的边调和指标满足下面的不等式:

$$H_e(G_1 \times G_2) \geq -\frac{4}{9} H(G_1) ID(G_2) - \frac{4}{9} H(G_2) ID(G_1). \\ H_e(G_1 \times G_2) \leq \frac{2}{3} (m_1 n_2 H(G_1) ID(G_2))^{1/2} + \frac{2}{3} (m_2 n_1 H(G_2) ID(G_1))^{1/2}.$$

证明 命题3和4给出 $H(G_1, x), ID(G_2, x^2), H(G_2, x), ID(G_1, x^2)$ 是非负凸函数. 因此, 由引理3可知

$$\begin{aligned} \int_0^1 2\frac{1}{x^2}H(G_1, x)ID(G_2, x^2)dx &\geq \frac{2^2}{2+1} \int_0^1 H(G_1, x)dx \int_0^1 2\frac{1}{x^2}ID(G_2, x^2)dx \\ &\geq \frac{4}{3} \int_0^1 \frac{1}{x^4}dx \int_0^1 H(G_1, x)dx \int_0^1 2xID(G_2, x^2)dx = -\frac{4}{9}H(G_1)ID(G_2). \end{aligned}$$

同样地,

$$\int_0^1 2\frac{1}{x^2}H(G_2, x)ID(G_1, x^2)dx \geq -\frac{4}{9}H(G_2)ID(G_1).$$

由上述不等式, 定理1 和 $H(G_1 \times G_2) = 2 \int_0^1 H(G_1 \times G_2, x)dx$ 给出下界. 由引理4, 命题3 和命题4,

$$\int_0^1 2\frac{1}{x^2}H(G_1, x)ID(G_2, x^2)dx \leq \frac{2}{3} \int_0^1 (\int_0^1 H(G_1, x)dx \int_0^1 2xID(G_2, x^2)dx)^{1/2} = \frac{2}{3}(m_1n_2H(G_1)ID(G_2))^{1/2}.$$

$$\begin{aligned} \int_0^1 2\frac{1}{x^2}H(G_1, x)ID(G_2, x^2)dx &\leq \frac{1}{2} \left(\int_0^1 \frac{1}{x^4}dx \int_0^1 H(G_1, x)dx \int_0^1 2xID(G_2, x^2)dx \right)^{\frac{1}{3}} (2H(G_1, 1)ID(G_2, 1))^{\frac{2}{3}} \\ &= -\frac{1}{6} (m_1^2n_2^2H(G_1)ID(G_2))^{\frac{1}{3}}. \end{aligned}$$

由这些不等式得出

$$\int_0^1 2\frac{1}{x^2}H(G_1, x)ID(G_2, x^2)dx \leq \min\left\{\frac{2}{3}(m_1n_2H(G_1)ID(G_2))^{\frac{1}{2}}, -\frac{1}{6}(m_1^2n_2^2H(G_1)ID(G_2))^{\frac{1}{3}}\right\}.$$

同样地 $\int_0^1 2\frac{1}{x^2}H(G_2, x)ID(G_1, x^2)dx \leq \min\left\{\frac{2}{3}(m_2n_1H(G_2)ID(G_1))^{\frac{1}{2}}, -\frac{1}{6}(m_2^2n_1^2H(G_2)ID(G_1))^{\frac{1}{3}}\right\}.$

由这些不等式, 定理1 和 $H(G_1 \times G_2) = 2 \int_0^1 H(G_1 \times G_2, x)dx$ 可以给出上界.

定理3 n_1 和 n_2 分别是给定两个图 G_1 和 G_2 的顶点, Corona 乘积图 $G_1 \circ G_2$ 的边调和多项式为

$$H_e((G_1 \circ G_2), x) = x^{2n_2-2}H(G_1, x) + n_1H(G_2, x) + x^{n_2}ID(G_1, x)ID(G_2, x).$$

证明 $u \in V(G_1)$ 在 $G_1 \circ G_2$ 中的一个顶点的度为 $d_u + n_2$, 且 $v \in V(G_2)$ 的任意拷贝 v' 在 $G_1 \circ G_2$ 中的度为 $d_v + 1$. 如果 $u_i u_j \in E(G_1)$, 那么 $G_1 \circ G_2$ 对应的边调和多项式为

$$x^{d_{u_i} + n_2 + d_{u_j} + n_2 - 2 - 1} = x^{2n_2 - 1} x^{d_{u_i} + d_{u_j} - 1} x^{-1}$$

则,

$$\sum_{u_i u_j \in E(G_1)} x^{2n_2 - 1} x^{d_{u_i} + d_{u_j} - 1} x^{-1} = x^{2n_2 - 1} x^{-1} \sum_{u_i u_j \in E(G_1)} x^{d_{u_i} + d_{u_j} - 1} = x^{2n_2 - 2} H(G_1, x).$$

如果 $v_i v_j \in E(G_2)$, $G_1 \circ G_2$ 对应的边调和多项式为

$$x^{d_{v_i} + 1 + d_{v_j} + 1 - 2 - 1} = x^{d_{v_i} + d_{v_j} - 1}$$

则,

$$\sum_{v_i v_j \in E(G_2)} x^{d_{v_i} + d_{v_j} - 1} = \sum_{v_i v_j \in E(G_2)} x^{d_{v_i} + d_{v_j} - 1} = H(G_2, x).$$

如果我们加上对应 G_2 的 n_1 个拷贝的多项式, 那么我们得到 $n_1 H(G_2, x)$. 如果 $u_i v'_j \in E(G_1 \circ G_2)$, 顶点 $u_i \in V(G_1)$ 和 $v_j \in V(G_2)$, 则对应的边调和多项式为

$$x^{d_{u_i} + n_2 + d_{v_j} + 1 - 2 - 1} = x^{n_2} x^{d_{u_i} - 1} x^{d_{v_j} - 1}$$

则,

$$\sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} x^{n_2} x^{d_{u_i} - 1} x^{d_{v_j} - 1} = x^{n_2} ID(G_1, x) ID(G_2, x).$$

所以不等式成立.

定理4 给定两个图 G_1 和 G_2 , n_1 和 n_2 分别为顶点数, m_1 和 m_2 分别为边数, 并且 k_1 和 k_2 分别为悬挂点, Corona积 $G_1 \circ G_2$ 的边调和指标满足以下不等式

$$H_e(G_1 \circ G_2) \geq \frac{4}{3n_2-1}H(G_1) + n_1H(G_2) + \frac{4}{n_2-1}ID(G_1)ID(G_2),$$

$$H_e(G_1 \circ G_2) \leq \frac{2}{3} \left(\frac{2m_1}{2n_2-1}H(G_1) \right)^{1/2} + n_1H(G_2)^{1/2} + \left(\frac{1}{n_2+1}ID(G_1)ID(G_2)(n_1+k_1)^2(n_2+k_2)^2 \right)^{1/3}.$$

证明 由引理3可得

$$\int_0^1 2x^{n_2-2}H(G, x)dx \geq \frac{2^2}{3} \int_0^1 x^{2n_2-2}dx \int_0^1 2H(G_1, x)dx \geq \frac{4}{3} \int_0^1 x^{n_2-2}dx \int_0^1 2H(G_1, x)dx = \frac{4}{3} \frac{1}{2n_2-1}H(G_1).$$

所以, 我们得到

$$\int_0^1 2n_1H(G_2, x)dx \geq n_1 \int_0^1 2H(G_2, x)dx = n_1H(G_2)$$

并且

$$\int_0^1 2x^{n_2}ID(G_1, x)ID(G_2, x)dx \geq \frac{8}{4} \int_0^1 2x^{n_2}dx \int_0^1 ID(G_1, x)dx \int_0^1 ID(G_2, x)dx = \frac{4}{n_2-1}ID(G_1)ID(G_2).$$

由这些不等式, 定理3和 $H(G_1 \circ G_2) = 2 \int_0^1 H(G_1 \circ G_2, x)dx$ 给出下界. 由引理4和命题3得出

$$\int_0^1 2x^{2n_2-2}H(G_1, x)dx \leq \frac{2}{3} \left(\int_0^1 x^{2n_2-2}dx \int_0^1 2H(G_1, x)dx \right)^{1/2} (2H(G_1, 1))^{1/2} = \frac{2}{3} \left(\frac{2m_1}{2n_2-1}H(G_1) \right)^{1/2}.$$

$$\int_0^1 2n_1H(G_2, x)dx \leq \frac{2n_1}{2} \left(\int_0^1 2H(G_2, x)dx \right) (2H(G_2, 1)) = n_1H(G_2)$$

由命题3和命题4得出

$$\int_0^1 2x^{n_2}ID(G_1, x)ID(G_2, x)dx \leq \frac{2}{4} 2 \left(\int_0^1 x^{n_2}dx \int_0^1 ID(G_1, x)dx \int_0^1 ID(G_2, x)dx \right)^{1/3} \\ ((ID(G_1, 1) + ID(G_1, 0))(ID(G_2, 1) + ID(G_2, 0)))^{2/3} = \left(\frac{1}{n_2+1}ID(G_1)ID(G_2)(n_1+k_1)^2(n_2+k_2)^2 \right)^{1/3}.$$

由这些不等式, 定理3和 $H(G_1 \circ G_2) = 2 \int_0^1 H(G_1 \circ G_2, x)dx$ 可得上界.

定理5 给定两个图 G_1 和 G_2 , n_1 和 n_2 分别为顶点, 连图 $G_1 + G_2$ 的边调和多项式为

$$H(G_1 + G_2) = x^{2n_2-2}H(G_1, x) + x^{2n_1-2}H(G_2, x) + x^{n_1+n_2}ID(G_1, x)ID(G_2, x).$$

证明 $u \in V(G_1)$ 是度 $d_u + n_2$ 在 $G_1 + G_2$ 中的顶点, $v \in V(G_2)$ 是度 $d_v + n_1$ 在 $G_1 + G_2$ 中的顶点.

如果 $u_i u_j \in E(G_1)$, 那么 $G_1 + G_2$ 对应的边调和多项式为

$$x^{d_{u_i} + n_2 + d_{u_j} + n_2 - 2 - 1} = x^{2n_2 - 2} x^{d_{u_i} + d_{u_j} - 1}$$

则,

$$\sum_{u_i u_j \in E(G_1)} x^{2n_2 - 2} x^{d_{u_i} + d_{u_j} - 1} = x^{2n_2 - 2} \sum_{u_i u_j \in E(G_1)} x^{d_{u_i} + d_{u_j} - 1} = x^{2n_2 - 2} H(G_1, x).$$

如果 $v_i v_j \in E(G_2)$, 那么 $G_1 + G_2$ 对应的边调和多项式为

$$x^{d_{v_i} + n_1 + d_{v_j} + n_1 - 2 - 1} = x^{2n_1 - 2} x^{d_{v_i} + d_{v_j} - 1}.$$

因此我们可以得到

$$\sum_{v_i v_j \in E(G_2)} x^{2n_1 - 2} x^{d_{v_i} + d_{v_j} - 1} = x^{2n_1 - 2} \sum_{v_i v_j \in E(G_2)} x^{d_{v_i} + d_{v_j} - 1} = x^{2n_1 - 2} H(G_2, x).$$

如果 $u_i v_j \in E(G_1 + G_2)$, $u_i \in V(G_1)$ 和 $v_j \in V(G_2)$, 那么对应的边调和多项式为

$$x^{d_{u_i} + n_2 + d_{v_j} + n_1 - 2 - 1} = x^{n_1 + n_2 - 1} x^{d_{u_i} - 1 + d_{v_j} - 1}.$$

因此我们得到,

$$\sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} x^{n_1+n_2-1} x^{d_{u_i}-1} x^{d_{v_j}-1} = x^{n_1+n_2-1} \sum_{i=1}^{n_1} x^{d_{u_i}-1} \sum_{j=1}^{n_2} x^{d_{v_j}-1} = x^{n_1+n_2-1} ID(G_1, x) ID(G_2, x).$$

不等式成立.

定理6 设 G_1 和 G_2 是顶点分别为 n_1 和 n_2 的两个图, m_1 和 m_2 分别为两个图的边数, k_1 和 k_2 分别为悬挂点, 连图 $G_1 + G_2$ 的边调和指标满足

$$(1) H_e(G_1 + G_2, x) \geq \frac{4}{3(n_2-1)} H(G_1) + \frac{4}{3(2n_1-1)} H(G_2) + \frac{4}{n_1+n_2} ID(G_1) ID(G_2).$$

$$(2) H_e(G_1 + G_2, x) \leq \frac{2}{3} \left(\frac{2m_1}{2n_2-1} H(G_1) \right)^{1/2} + \frac{2}{3} \left(\frac{2m_2}{2n_1-1} H(G_2) \right)^{1/2} + \left(\frac{1}{n_1+n_2} ID(G_1) ID(G_2) (n_1+k_1)^2 (n_2+k_2)^2 \right)^{1/3}.$$

证明 我们在定理4 的证明中看到

$$\frac{4}{3(n_2-1)} H(G_1) \leq \int_0^1 2x^{2n_2-2} H(G_1, x) dx \leq \frac{2}{3} \left(\frac{2m_1}{2n_2-1} H(G_1) \right)^{1/2}.$$

同样, 我们可得

$$\frac{4}{3(2n_1-1)} H(G_2) \leq \int_0^1 2x^{2n_1-2} H(G_2, x) dx \leq \frac{2}{3} \left(\frac{2m_2}{2n_1-1} H(G_2) \right)^{1/2}.$$

由引理3

$$\begin{aligned} \int_0^1 x^{n_1+n_2-1} ID(G_1, x) ID(G_2, x) dx &\geq \frac{8}{4} \int_0^1 2x^{n_1+n_2-1} dx \int_0^1 ID(G_1, x) dx \int_0^1 ID(G_2, x) dx \\ &= 4 \frac{1}{n_1+n_2} ID(G_1) ID(G_2). \end{aligned}$$

由引理4 和命题4

$$\begin{aligned} \int_0^1 2x^{n_1+n_2-1} ID(G_1, x) ID(G_2, x) dx &\leq \frac{2}{4} \left(\int_0^1 x^{n_1+n_2-1} dx \int_0^1 ID(G_1, x) dx \int_0^1 ID(G_2, x) dx \right)^{1/3} \\ (ID(G_1, 1) + ID(G_1, 0) (ID(G_2, 1) + ID(G_2, 0)))^{2/3} &= \left(\frac{1}{n_1+n_2} ID(G_1) ID(G_2) (n_1+k_1)^2 (n_2+k_2)^2 \right)^{1/3}. \end{aligned}$$

由这些不等式, 定理5 和 $H(G_1 + G_2) = 2 \int_0^1 H(G_1 + G_2, x) dx$ 可得到不等式上下界.

定理7 图 G_1 和 G_2 的顶点分别为 n_1 和 n_2 , 笛卡儿和 $G_1 \oplus G_2$ 的边调和多项式为

$$\begin{aligned} H_e(G_1 \oplus G_2, x) &= x^{2n_1+n_2-5} H(G_1, x^{n_2}) ID^2(G_2, x^{n_1}) + x^{n_1+2n_2-5} H(G_2, x^{n_1}) ID^2(G_1, x^{n_2}) \\ &\quad + x^{n_1+n_2-5} H(G_1, x^{n_2}) H(G_2, x^{n_1}). \end{aligned}$$

证明 如果 $(u_i, v_j) \in V(G_1 \oplus G_2)$, 那么 $d_{(u_i, v_j)} = n_2 d_{u_i} + n_1 d_{v_j}$. 又如果 $(u_i, v_j)(u_k, v_l) \in E(G_1 \oplus G_2)$, $u_i u_k \in E(G_1)$ 或者 $v_j v_l \in E(G_2)$, 那么边调和多项式对应的多项式为

$$\begin{aligned} x^{n_2 d_{u_i} + n_1 d_{v_j} + n_2 d_{u_k} + n_1 d_{v_l} - 5} &= x^{n_1+n_2-5} (x^{n_2})^{d_{u_i} + d_{u_k} - 1} (x^{n_1})^{d_{v_j} + d_{v_l} - 1} \\ &= x^{2n_1+n_2-5} (x^{n_2})^{d_{u_i} + d_{u_k} - 1} (x^{n_1})^{d_{v_j} - 1} (x^{n_1})^{d_{v_l} - 1}. \end{aligned}$$

因此, $u_i u_k \in E(G_1)$, 相应的多项式的和是

$$\begin{aligned} \sum_{j,l=1}^{n_2} \sum_{u_i u_k \in E(G_1)} x^{n_1+n_2-5} (x^{n_2})^{d_{u_i} + d_{u_k} - 1} (x^{n_1})^{d_{v_j} + d_{v_l} - 1} \\ = x^{2n_1+n_2-5} \sum_{j=1}^{n_2} (x^{n_1})^{d_{v_j} - 1} \sum_{l=1}^{n_2} (x^{n_1})^{d_{v_l} - 1} \sum_{u_i u_k \in E(G_1)} (x^{n_2})^{d_{u_i} + d_{u_k} - 1} \\ = x^{2n_1+n_2-5} H(G_1, x^{n_2}) ID^2(G_2, x^{n_1}). \end{aligned}$$

同样, $v_j v_l \in E(G_2)$ 对应的多项式的和为

$$x^{n_1+2n_2-5} H(G_2, x^{n_1}) ID^2(G_1, x^{n_2})$$

两式相加, 我们有

$$\begin{aligned}
& \sum_{u_i u_k \in E(G_1)} \sum_{v_j v_l \in E(G_2)} x^{n_1+n_2-5} (x^{n_2})^{du_i+du_k-1} (x^{n_1})^{dv_j-dv_l-1} \\
&= x^{n_1+n_2-5} \sum_{u_i u_k \in E(G_1)} (x^{n_2})^{du_i+du_k-1} \sum_{v_j v_l \in E(G_2)} (x^{n_1})^{dv_j+dv_l-1} \\
&= x^{n_1+n_2-5} H(G_1, x^{n_2}) H(G_2, x^{n_1}).
\end{aligned}$$

因此, 不等式成立.

定理8 顶点 n_1 和 n_2 分别是图 G_1 和 G_2 的顶点, 且 m_1 和 m_2 分别是图 G_1 和 G_2 的边. 笛卡儿和 $G_1 \oplus G_2$ 的边调和指标满足

$$\begin{aligned}
(1) \quad H_e(G_1 \oplus G_2, x) &\geq \frac{-16}{5} \frac{1}{n_1^2 n_2} H(G_1) ID^2(G_2) + \frac{-16}{5} \frac{1}{n_1^2 n_2} H(G_2) ID^2(G_1) - \frac{2}{n_1 n_2} H(G_1) H(G_2). \\
(2) \quad H_e(G_1 \oplus G_2, x) &\leq \frac{-n_2}{2} \left(\frac{4m_1^2}{n_1^2} H(G_1) ID^2(G_2) \right)^{1/3} - \frac{n_1}{2} \left(\frac{4m_2^2}{n_2^2} H(G_2) ID^2(G_1) \right)^{1/3} - \frac{1}{3} \left(\frac{m_1 m_2}{n_1 n_2} H(G_1) H(G_2) \right)^{1/2}.
\end{aligned}$$

证明 由引理3

$$\begin{aligned}
\int_0^1 2x^{2n_1+n_2-5} H(G_1, x^{n_2}) ID^2(G_2, x^{n_1}) dx &\geq \frac{16}{5} \int_0^1 x^{-2} dx \int_0^1 2x^{n_2-1} H(G_1, x^{n_2}) dx \int_0^1 x^{n_1-1} ID(G_2, x^{n_1}) dx \\
&\int_0^1 x^{n_1-1} ID(G_2, x^{n_1}) dx = \frac{-16}{5} \frac{1}{n_1^2 n_2} H(G_1) ID^2(G_2).
\end{aligned}$$

且

$$\int_0^1 2x^{n_1+2n_2-5} H(G_2, x^{n_1}) ID^2(G_1, x^{n_2}) dx \geq \frac{-16}{5} \frac{1}{n_1^2 n_2} H(G_2) ID^2(G_1). \text{ 因此, 我们可以得到}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^1 2x^{n_1+n_2-5} H(G_1, x^{n_2}) H(G_2, x^{n_1}) dx &\geq \frac{8}{4} \int_0^1 x^{-3} dx \int_0^1 2x^{n_2-1} H(G_1, x^{n_2}) dx \int_0^1 x^{n_1-1} H(G_2, x^{n_1}) dx \\
&= \frac{-2}{n_1 n_2} H(G_1) H(G_2).
\end{aligned}$$

由引理4和命题3和4得

$$\begin{aligned}
& \int_0^1 2x^{2n_1+n_2-5} H(G_1, x^{n_2}) ID^2(G_2, x^{n_1}) dx \leq \int_0^1 2x^{n_2-1} H(G_1, x^{n_2}) x^{2n_1-2} ID^2(G_2, x^{n_1}) x^{-2} dx \\
&\leq \frac{2}{4} \left(\int_0^1 2x^{n_2-1} H(G_1, x^{n_2}) dx \int_0^1 x^{n_1-1} ID(G_2, x^{n_1}) dx \int_0^1 x^{-3} dx \int_0^1 x^{n_1-1} ID(G_2, x^{n_1}) dx \right)^{1/3} \cdot (2m_1 n_2^2)^{2/3} \\
&= \frac{-n_2}{2} \left(\frac{4m_1^2}{n_1^2} H(G_1) ID(G_2) \right)^{1/3}.
\end{aligned}$$

同理

$$\int_0^1 2x^{n_1+2n_2-5} H(G_2, x^{n_1}) ID^2(G_1, x^{n_2}) dx \leq \frac{-n_1}{2} \left(\frac{4m_2^2}{n_2^2} H(G_2) ID(G_1) \right)^{1/3}.$$

此外, 由引理4和命题3

$$\begin{aligned}
& \int_0^1 2x^{n_1+n_2-5} H(G_1, x^{n_2}) H(G_2, x^{n_1}) dx = \int_0^1 x^{-3} 2x^{n_2-1} H(G_1, x^{n_2}) 2x^{n_1-1} H(G_2, x^{n_1}) dx \\
&\leq \frac{-2}{3} \left(\int_0^1 2x^{n_2-1} H(G_1, x^{n_2}) dx \int_0^1 2x^{n_1-1} H(G_2, x^{n_1}) dx \right)^{1/2} (2H(G_1, 1) 2H(G_2, 1))^{1/2} \\
&= \frac{-1}{3} \left(\frac{m_1 m_2}{n_1 n_2} H(G_1) H(G_2) \right)^{1/2}.
\end{aligned}$$

由这些不等式, 定理7和 $H(G_1 \oplus G_2) = 2 \int_0^1 H(G_1 \oplus G_2, x) dx$ 可得不等式的上下界.

定理9 顶点 n_1 和 n_2 分别为图 G_1 和 G_2 的顶点. 字典积 $G_1 \odot G_2$ 的边调和多项式为

$$H_e(G_1 \odot G_2, x) = x^{2n_2-3} ID(G_1, x^{2n_2}) H(G_2, x) + x^{n_2-3} H(G_1, x^{n_2}) ID^2(G_2, x).$$

证明 设 $(u_i, v_j) \in V(G_1 \odot G_2)$, 则 $d(u_i, v_j) = n_2 d_{u_i} + d_{v_j}$. 如果 $(u_i, v_j)(u_i, v_k) \in E(G_1 \odot G_2)$, 那么对应的调和多项式为

$$x^{n_2 d_{u_i} + d_{v_j} - 2 + n_2 d_{u_i} + d_{v_k} - 2 - 1} = x^{2n_2 - 3} (x^{2n_2})^{d_{u_i} - 1} x^{d_{v_j} + d_{v_k} - 1}.$$

因此,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{v_j v_k \in E(G_2)} x^{2n_2 - 3} (x^{2n_2})^{d_{u_i} - 1} x^{d_{v_j} + d_{v_k} - 1} &= x^{2n_2 - 3} \sum_{i=1}^{n_1} (x^{2n_2})^{d_{u_i} - 1} \sum_{v_j v_k \in E(G_2)} x^{d_{v_j} + d_{v_k} - 1} \\ &= x^{2n_2 - 3} ID(G_1, x^{2n_2}) H(G_2, x). \end{aligned}$$

如果 $(u_i, v_j)(u_k, v_l) \in E(G_1 \odot G_2)$, $u_i u_k \in E(G_1)$, 那么对应的边调和多项式为

$$x^{n_2 d_{u_i} + d_{v_j} - 2 + n_2 d_{u_k} + d_{v_l} - 2 - 1} = x^{n_2 - 3} (x^{n_2})^{d_{u_i} + d_{u_k} - 1} x^{d_{v_j} - 1} x^{d_{v_l} - 1}$$

那么, 对应的多项式为

$$\begin{aligned} \sum_{u_i u_k \in E(G_1)} \sum_{j, l=1}^{n_2} x^{n_2 - 3} (x^{n_2})^{d_{u_i} + d_{u_k} - 1} x^{d_{v_j} - 1} x^{d_{v_l} - 1} &= x^{n_2 - 3} \sum_{u_i u_k \in E(G_1)} (x^{n_2})^{d_{u_i} + d_{u_k} - 1} \sum_{j=1}^{n_2} x^{d_{v_j} - 1} \sum_{l=1}^{n_2} x^{d_{v_l} - 1} \\ &= x^{n_2 - 3} H(G_1, x^{n_2}) ID^2(G_2, x). \end{aligned}$$

我们把这两项相加就得到了想要的等式.

定理10 顶点 n_1 和 n_2 分别是图 G_1 和 G_2 的顶点数, m_1 和 m_2 分别是边数, 并且 k_1 和 k_2 分别是悬挂点, 字典积 $G_1 \odot G_2$ 的边调和指标满足

$$H_e(G_1 \odot G_2) \geq \frac{-2}{3n_2} ID(G_1) H(G_2) - \frac{16}{5n_2} H(G_1) ID^2(G_2).$$

$$H_e(G_1 \odot G_2) \leq \frac{-2}{3} \left(\frac{n_1 m_2}{n_2} ID(G_1) H(G_2) \right)^{1/2} - \frac{1}{2} \left(\frac{4m_1^2}{n_2} H(G_1) ID^2(G_2) (n_2 + k_2)^4 \right)^{1/3}.$$

证明 由引理3

$$\begin{aligned} \int_0^1 2x^{2n_2 - 3} ID(G_1, x^{2n_2}) H(G_2, x) dx &\geq \frac{4}{3} \int_0^1 x^{2n_2 - 1} ID(G_1, x^{2n_2}) dx \int_0^1 2H(G, x) dx \int_0^1 x^{-2} dx \\ &= \frac{-4}{3} \frac{1}{2n_2} ID(G_1) H(G_2) = \frac{-2}{3n_2} ID(G_1) H(G_2). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_0^1 x^{n_2 - 3} H(G_1, x^{n_2}) ID^2(G_2, x) dx &\geq \frac{16}{5} \int_0^1 x^{-2} dx \int_0^1 2x^{n_2 - 1} H(G_1, x^{n_2}) dx \int_0^1 ID(G_2, x) dx \int_0^1 ID(G_2, x) dx \\ &= \frac{-16}{5n_2} H(G_1) ID^2(G_2) \end{aligned}$$

由引理4、命题3和4可得

$$\begin{aligned} \int_0^1 2x^{2n_2 - 3} ID(G_1, x^{2n_2}) H(G_2, x) dx &\leq \frac{-2}{3} \left(\int_0^1 x^{2n_2 - 1} ID(G_1, x^{2n_2}) dx \int_0^1 2H(G_2, x) dx \right)^{1/2} \\ (ID(G_1, 1) 2H(G_2, 1))^{1/2} &= \frac{-2}{3} \left(\frac{n_1 m_2}{n_2} ID(G_1) H(G_2) \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_0^1 2x^{2n_2 - 3} H(G_1, x^{n_2}) ID^2(G_2, x) dx &\leq \int_0^1 2x^{2n_2 - 1} H(G_1, x^{n_2}) ID^2(G_2, x) x^{-2} dx \\ &\leq \frac{-2}{4} \left(\int_0^1 2x^{2n_2 - 1} H(G_1, x^{n_2}) dx \int_0^1 ID(G_2, x) dx \int_0^1 ID(G_2, x) dx \right)^{1/3} \cdot 2H(G_1, 1) (ID(G_2, 1) \\ &\quad + ID(G_2, 0))^2)^{2/3} = \frac{-1}{2} \left(\frac{4m_1^2}{n_2} H(G_1) ID^2(G_2) (n_2 + k_2)^4 \right)^{1/3}. \end{aligned}$$

由这些不等式, 定理9 和 $H(G_1 \odot G_2) = 2 \int_0^1 H(G_1 \odot G_2, x) dx$ 可得不等式的上下界.

3 结论

调和指标描述了分子结构的化学性质, 是一种重要的拓扑指标. 本文主要研究了一些经典对称图, 如笛卡儿积, Corona 积, 联图, 笛卡儿和与字典积的运算, 并计算了调和指标与调和多项式的边的形式, 最后确定了它们的上下界.

参考文献:

- [1] BERTZ S H. The bond graph[J]. Chemical Society, Chemical Communications, 1995, 24: 2473-2670.
- [2] GUTMAN I, FURTULA B. Recent results in the theory of Randić index[M]. Kragujevac: University of Kragujevac and Faculty of Science, 2008: 282.
- [3] GUTMAN I, ESTRADA E. Topological indices based on the line graph of the molecular graph[J]. Chemical Information and Modeling, 1996, 36(3): 541-543.
- [4] IRANMANESH A, GUTMAN I, KHORMALI O, et al. The edge versions of the Wiener index[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2009, 61(3): 663-672.
- [5] GUTMAN I, POPOVIC L, MISHRA B K, et al. Application of line graphs in physical chemistry[J]. Predicting Surface Tension of Alkanes Serbian Chemical Society, 1997, 62(11): 1025-1029.
- [6] GUTMAN I, TOMOVIC Z. On the application of line graphs in quantitative structure property studies[J]. Serbian Chemical Society, 2000, 65: 577-580.
- [7] GUTMAN I, TOMOVIC Z. Modeling boiling points of cycloalkanes by means of iterated line graph sequences[J]. Chemical Information and Computer Sciences, 2001, 41(4): 1041-1045.
- [8] LI X L, SHI Y T. A survey on the Randić index[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2008, 59: 127-156.
- [9] GUTMAN I, FURTULA B. Recent results in the theory of randić index[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2008, 9-47.
- [10] NADEEM M F, ZAFAR S, ZAHID Z. Certain topological indices of the line graph of subdivision graphs[J]. Applied Mathematics and Computation, 2015, 271: 790-794.
- [11] NADEEM M F, ZAFAR S, ZAHID Z. On topological properties of the line graph of sub-division graphs of certain nanostructures[J]. Applied Mathematics and Computation, 2016, 273: 125-130.
- [12] RADA J, CRUZ R. Vertex-degree-based topological indices over graphs[J]. Applied Mathematics and Computing, 2014, 48(1/2): 603-616.
- [13] YU G H, FENG L H. On connective eccentricity index of graphs[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2013, 69(3): 611-628.
- [14] FAJTLOWICZ S. On conjectures of Graffiti[J]. Discrete Mathematics, 1988, 72(1/2/3): 113-118.
- [15] IRANMANESH M, SAHELI M. On the harmonic index and harmonic polynomial of Caterpillars with diameter four[J]. Iranian Journal of Mathematical Chemistry, 2015, 6(1): 41-49.
- [16] NAZAR R, SARDAR S, ZAFAR S, et al. Edge version of harmonic polynomial and harmonic index[J]. Applied mathematics and informatics, 2016, 34(5/6): 479-486.
- [17] JUAN C. Harmonic index and harmonic polynomial on graph operations[J]. Symmetry, 2018, 10(10): 456.
- [18] WRIGHT E M. An inequality for convex functions[J]. The American Mathematical Monthly, 1954, 61(9): 620.
- [19] CSISZAR V, MORI T F. Sharp integral inequalities for products of convex functions[J]. Inequalities in Pure and Applied Mathematics, 2007, 8(4): 94-112.

责任编辑: 赵新科