arXiv:2302.07170v2 [math.CO] 9 Sep 2024

五边形圆柱与莫比乌斯链的度基尔霍夫指数、Gutman 指数和舒尔茨指数刻画

Md. Abdus Sahir*和 Sk. Md. Abu Nayeem†

阿利亚大学数学与统计学系，印度加尔各答新城，邮编 700160。

摘要

连通图的度基尔霍夫指数定义为归一化拉普拉斯矩阵所有非零特征值倒数之和，并分别乘以该图的总度。近期，多项研究得到了各种类图的度基尔霍夫指数的显式表达式。本文给出了五边形圆柱和莫比乌斯链的度基尔霍夫指数的闭式公式。此外，我们还计算了这些图的 Gutman 指数和舒尔茨指数。

MSC（2020）：主要分类：05C09，05C12；次要分类：05C50。

关键词：五边形链、圆柱链、莫比乌斯链、度基尔霍夫指数、凯梅尼常数、舒尔茨指数、Gutman 指数。

1 引言

考虑 G $=$(V, E)，它是一个连通的无向图，且不含自环或重边。G 的顶点表示为 $\{v_1, v2, \ldots, v_{|V|}\}$，其边表示为 E $=\{e_1, e2, \ldots, e_{|E|}\}$。G 中与顶点 v_i 相 incident 的边数称为该顶点的度，记为 d_i。图的拉普拉斯矩阵 L(G) $=(l_{ij})$ 和归一化拉普拉斯矩阵 $\mathscr{L}$(G) $=(\ell_{ij})$ 定义如下：

$$l_{ij} = \begin{cases} -1 & \text{if } v_i \sim v_j \\ d_i & \text{if } i = j \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases}$$

*第一作者谨此感谢印度大学拨款委员会通过高级研究奖学金资助本研究。电子邮箱：abdussahir@gmail.com

†通讯作者。电子邮箱：nayeem.math@aliah.ac.in

$$\ell_{ij} = \begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{d_i d_j}} & \text{if } v_i \sim v_j \\ 1 & \text{if } i = j \\ 0 & \text{otherwise} \cdot \end{cases}$$

拓扑指数是用于表征图 G 拓扑结构的数值度量。拓扑指数通常包含多种图参数，包括阶、大小、顶点对之间的距离、顶点的度、离心率等。维纳指数 [22],是古老拓扑指数家族中的重要成员，由 H. Wiener 于 1947年首次提出，定义为 $\mathrm{Wn(G)} = \frac{1}{2}\sum_{V=1}^{iV}\sum_{|j=1}$ d_{ij}，其中 d_{ij}表示顶点对 v_i与 v_j之间的距离。舒尔茨指数 [20],由 H. P. Schultz 于 1989 年提出，定义为 $\mathrm{Sc(G)} = \frac{1}{2}\sum_{V=1}^{iV}\sum_{|j=1}(\mathrm{d}_i + \mathrm{d}_j)\mathrm{d}_{ij}$，是维纳指数的加权版本。1994年，Gutman 提出了维纳指数的另一种加权变体，定义为 $\mathrm{Gut(G)} = \frac{1}{2}\sum_{V=1}^{iV}\sum_{|j=1}\mathrm{d}_i\mathrm{d}_j\mathrm{d}_{ij}$，后来这一指数被称为古特曼指数 [4]。

受维纳指数成功的启发，近四十年后，Klein 和 Randi´c 于 1993年提出了一种新颖的结构描述符拓扑指数，即基尔霍夫指数 [11]。图 G 的基尔霍夫指数按公式 $\mathrm{Kf(G)} = \frac{1}{2}\sum_{V=1}^{iV}\sum_{|j=1}\mathrm{r}_{ij}$计算，其中 r_{ij}表示顶点 v_i与 $\mathrm{v}j$之间的有效电阻。计算有效电阻时，将边视为单位电阻，并应用欧姆定律。2007年，Chen 和 Zhang 提出了度基尔霍夫指数 [2], ，其定义为 $\mathrm{Kf^*(G)} = \frac{1}{2}\sum_{|V=1}^{iV}\sum_{|j=1}\mathrm{d}_i\mathrm{d}_j\mathrm{r}_{ij}\cdot$对于连通图，拉普拉斯矩阵和归一化拉普拉斯矩阵的所有特征值均为正，最小特征值除外。设 $\{0 = \lambda_1 < \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_{|V|}\}$ 和 $\{0 = \lambda_1 < \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_{|V|}\}$ 分别表示图 G 的拉普拉斯矩阵与归一化拉普拉斯矩阵的谱，其中 $(|V| \geq 2)$。研究人员已明确揭示了基尔霍夫指数与拉普拉斯谱之间的联系，以及度基尔霍夫指数与归一化拉普拉斯谱之间的联系。

基尔霍夫指数也可由以下定理进行解释，该定理分别由 Gutman 和 Mohar [5] 以及 Zhu等人 [24]证明。

定理 1. *[5, 24]* 设 G 是一个简单连通图。G 的基尔霍夫指数 *is*

$$\mathrm{Kf}(G) = |V| \sum_{i=2}^{|V|} \frac{1}{\lambda_i} \cdot$$

类似地，度基尔霍夫指数可按如下方式计算。

定理 2. *[2]*L 设 G 为一个简单连通图。则 G 的度基尔霍夫指数为

$$\mathrm{Kf}^*(G) = 2|E| \sum_{i=2}^{|V|} \frac{1}{\lambda_i} \cdot$$

凯梅尼常数是与马尔可夫链 [12]研究相关的重要图不变量，也可以利用归一化拉普拉斯谱计算。

定理 3. *[1]* 连通图 G 的凯梅尼常数为

$$\mathrm{Kc}(G) = \sum_{i=2}^{|V|} \frac{1}{\lambda_i},$$

即，Kc(G) = $\frac{1}{2|E|}$ · Kf*(G)·

以下定理可利用拉普拉斯谱或归一化拉普拉斯谱 [3]，确定连通图 G 的生成树总数。

定理 4. *[3]* 连通图 G 的生成树总数为

$$\tau(G) = \frac{1}{|V|}\prod_{i=2}^{|V|}\lambda_i = \frac{1}{2|E|}\prod_{i=1}^{|V|} d_i \prod_{i=2}^{|V|}\lambda_i.$$

由于这两种结构描述符在图论、网络系统、分子化学及其他相关领域都有重要应用，近年来，研究者对图的基尔霍夫指数和度基尔霍夫指数产生了浓厚兴趣。求出任意一般图类的基尔霍夫指数和度基尔霍夫指数的显式公式并非易事。但是，如果能为某个特定图类找到合适的自同构，就可以利用分解定理推导出它们的显式公式。

Klein和Randi´c [11] 证明，基尔霍夫指数不可能超过维纳指数，且仅当G为树时等号成立。Gutman [4] 证明，对于树T，维纳指数与古特曼指数满足以下关系：Gut(T) = 4 Wn(T) − (2|V | − 1)(|V | − 1)。类似地，Klein等人 [10] 建立了维纳指数与舒尔茨指数之间的关系，其公式为Sc(T) = 4 Wn(T) − |V |(|V | − 1)。

文献中已有线性六边形链 [9], 六边形M¨obius链 [16], 线性交叉六边形链 [18], 线性多格骨牌链 [8], 圆柱型苯撑链 [17], 随机多边形链 [13], 广义苯撑 [25], 圆柱型，以及M¨obius八边形链 [15], 线性五边形衍生链 [14, 23] 的度基尔霍夫指数公式。Wang和Zhang [21] 于2010年得到了五边形链基尔霍夫指数的计算公式，He等人[6] 于2018年得到了相同链图的度基尔霍夫指数公式。尽管过去几年许多研究者已计算出若干圆柱型/M¨obius链的基尔霍夫指数和度基尔霍夫指数公式，但尚未研究圆柱型/M¨obius五边形链的相关公式。最近，Sahir和Nayeem [19]得到了圆柱型五边形链和M¨obius五边形链的基尔霍夫指数显式公式。作为这一方向先前研究的延续，我们现给出五边形圆柱链P_n（见图1）和五边形M¨obius链P'_n（见图2）的度基尔霍夫指数、凯梅尼常数、古特曼指数和舒尔茨指数的显式公式，这些图分别有 |V | = 5n（n ≥ 2）个顶点和|E| = 7n条边。对于上述图，我们还推导出舒尔茨指数与古特曼指数之间的关系，并比较不同n值下的古特曼指数与度基尔霍夫指数。

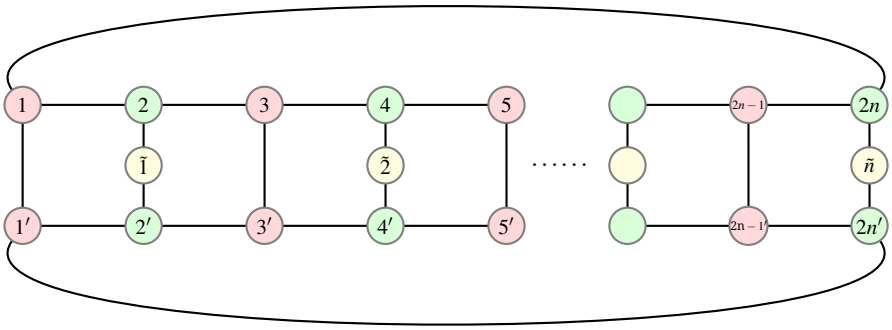

图 1：五边形圆柱链 P_n.

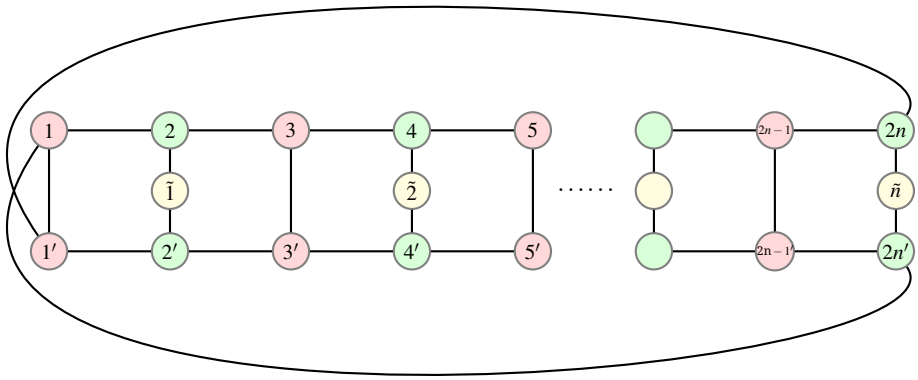

图 2：五边形莫比乌斯链 P¨obius chain P'_n.

2 预备知识

自同构 π: V $\to$ V 是一个双射，具有如下性质：在 G 中，若 u 与 v 相邻，当且仅当 π(u) 与 π(v) 在 G 中相邻。自同构 π给出了顶点集 V 的划分：$V_0 = \{v\tilde{1}, v\tilde{2}, \ldots, v_{\tilde{p}}\}$, $V_1 = \{v_1, v2, \ldots, v_q\}$ 以及 $V_2 = \{v'_1, v'_2, \ldots, v'_q\}$，其中 $\pi(v\tilde{i}) = v\tilde{i}$对所有 $v_{\tilde{i}} \in V0$ 均成立，$\pi(v_i) = v'_i$对所有 $v_i \in V_1$均成立，且 $\pi(v'_i) = v_i$对所有 $v'_i \in V_2$均成立。容易将π分解为长度为 1 和 2 的互不相交置换循环之积，即，

$$\pi = (v_{\tilde{1}})(v_{\tilde{2}}) \cdots (v_{\tilde{p}})(v_1, v'_1)(v_2, v'_2) \cdots (v_q, v'_q),$$

其中 p + 2q = |V |。适当重新标记顶点后，归一化拉普拉斯矩阵 $\mathscr{L}$(G) 可表示如下：

$$\mathscr{L}(G) = \begin{pmatrix} \mathscr{L}_{00} & \mathscr{L}_{01} & \mathscr{L}_{02} \\ \mathscr{L}_{10} & \mathscr{L}_{11} & \mathscr{L}_{12} \\ \mathscr{L}_{20} & \mathscr{L}_{21} & \mathscr{L}_{22} \end{pmatrix},$$

其中，子矩阵 $\mathscr{L}_{ij}$对应于相应顶点集 V_i和 V_j中的顶点，i, j =0, 1, 2。

Let,

$$\mathscr{L}_A(G) = \left(\begin{array}{c|c} \mathscr{L}_{00} & \sqrt{2}\mathscr{L}_{01} \\ \hline \sqrt{2}\mathscr{L}_{10} & \mathscr{L}_{11} + \mathscr{L}_{12} \end{array} \right) \tag{1}$$

and

$$\mathscr{L}_S(G) = \mathscr{L}_{11} - \mathscr{L}_{12}. \tag{2}$$

下面的引理称为归一化拉普拉斯分解引理 ma.

引理 1. *[9]*令 $\phi(\mathscr{L}(G)) = \det(yI - \mathscr{L}(G))$ 表示归一化拉普拉斯矩阵 $\mathscr{L}$(G) 的特征多项式，其中 I 是适当大小的单位矩阵。则

$$\phi(\mathscr{L}(G)) = \phi(\mathscr{L}_A(G)) \cdot \phi(\mathscr{L}_S(G)),$$

其中，$\mathscr{L}_A$(G) 和 $\mathscr{L}_S$(G) 分别由方程 (1) 和 (2) 给出。

为简洁起见，以下用 $\mathscr{L}_A$ 代替 $\mathscr{L}_A(P_n)$，并用 $\mathscr{L}_S$ 代替 $\mathscr{L}_S(P_n)$。对于五边形莫比乌斯链 P′，带撇号的类似记号（′）同样适用。因此，

$$\mathscr{L}_{00} = \mathscr{L}'_{00} = I_n, \mathscr{L}_{01} = \mathscr{L}'_{01} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}_{n \times 2n},$$

$$\mathscr{L}_{11} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{3} & 0 & \cdots & 0 & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 1 & -\frac{1}{3} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 0 & 0 & \cdots & -\frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix}_{2n \times 2n}, \mathscr{L}_{12} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}_{2n \times 2n},$$

and $\mathscr{L}'_{11} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{3} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\frac{1}{3} & 1 & -\frac{1}{3} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -\frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix}_{2n\times 2n}$, $\mathscr{L}'_{12} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} & 0 & 0 & \cdots & 0 & -\frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\frac{1}{3} & 0 \\ -\frac{1}{3} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}_{2n\times 2n}$.

So,

$$\mathscr{L}_A = \mathscr{L}'_A = \left(\begin{array}{cccc|cccccc} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & 0 & 0 & \cdots & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \cdots & 0 & -\frac{1}{3} & 1 & -\frac{1}{3} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \cdots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \cdots & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{3} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{array}\right)_{3n\times 3n},$$

$$\mathscr{L}_S = \begin{pmatrix} \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 1 & -\frac{1}{3} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} & \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3} & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -\frac{1}{3} & \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -\frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix}_{2n\times 2n}$$

$$= \frac{1}{3}\cdot \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 3 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 3 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 4 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}_{2n\times 2n},$$

and

$$\mathscr{L}_S' = \begin{pmatrix} \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 1 & -\frac{1}{3} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} & \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3} & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -\frac{1}{3} & \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -\frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix}_{2n\times 2n}$$

$$= \frac{1}{3}\cdot \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 3 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 3 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 4 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}_{2n\times 2n} .$$

Let

$$\phi(\mathscr{L}_A) = y^{3n} + \gamma_1 y^{3n-1} + \cdots + \gamma_{3n-2} y^2 + \gamma_{3n-1} y \ (\text{since } \mathscr{L}_A \text{ is singular}, \gamma_{3n} = 0), \quad (3)$$

$$\text{and } \phi(\mathscr{L}_S) = y^{2n} + \delta_1 y^{2n-1} + \cdots + \delta_{2n-2} y^2 + \delta_{2n-1} y + \delta_{2n}. \quad (4)$$

因此，$\gamma_i = (-1)^i \cdot$（$3n$阶主子式的数量），以及 $\delta_j = (-1)^j \cdot$（$\sum_{i=1}^{2n}$ j阶主子式的数量）。

设 $\{0 = \rho_1 < \rho_2 \le \cdots \le \rho_{3n}\}$表示 $\mathscr{L}_A$的特征值，$\{\mu_1 \le \mu_2 \le \cdots \le \mu_{2n}\}$表示 $\mathscr{L}_S$的特征值。根据引理 1，图 P_n 的归一化拉普拉斯谱为

$$\{0 = \rho_1 < \rho_2 \le \cdots \le \rho_{3n}\} \bigcup \{\mu_1 \le \mu_2 \le \cdots \le \mu_{2n}\}.$$

设 M 为一个 $p \times q$ 矩阵，$Y \subset \{1,2,\ldots,p\}$，$Z \subset \{1,2,\ldots,q\}$。M(Y |Z) 表示由 M 删除 Y 和 Z 中相应的行和列后得到的子矩阵。我们将方阵 $W = (w_{ij})$ 的 w_{kl}余因子记为 cf(W (k, l))。我们将适当大小的列向量 e_i记作其除第 i 个元素为 1 外，其余元素均为 0 的列向量。方阵 $W = (w_{ij})$ 的（经典）伴随矩阵 adj(W) 定义为 $\text{adj}(W) = (\text{cf}(W(i,j)))^T$.

3 度-基尔霍夫指数的推导

根据定理 2，P_n, $(n \ge 2)$ 的度基尔霍夫指数为

$$Kf^*(P_n) = 14n\left(\sum_{i=2}^{3n}\frac{1}{\rho_i} + \sum_{j=1}^{2n}\frac{1}{\mu_j}\right). \quad (5)$$

根据根与系数的关系，我们得到 $\sum_{3n=2}\frac{1}{\rho_i}=-\frac{\gamma_{3n-2}}{\gamma_{3n-1}}$ i和 $\sum_{2n=1}\frac{1}{\mu_i}=$ j$-\frac{\delta_{2n-1}}{\delta_{2n}}=-\ {}^{\delta_{2n-1}}\mathscr{L}_S\det(\ )$.

因此，由 (5) 可得，对于 $n\geq 2$,

$$\mathrm{Kf}^*(P_n)=14n\left(-\frac{\gamma_{3n-2}}{\gamma_{3n-1}}-\frac{\delta_{2n-1}}{\det(\mathscr{L}_S)}\right)\cdot \tag{6}$$

类似地，对于 $n\geq 2$,

$$\begin{aligned}\mathrm{Kf}^*(P_n') &= 14n\left(\sum_{i=2}^{3n}\frac{1}{\rho_i}+\sum_{j=1}^{2n}\frac{1}{\mu_j'}\right)\\ &= 14n\left(-\frac{\gamma_{3n-2}}{\gamma_{3n-1}}-\frac{\delta_{2n-1}'}{\det(\mathscr{L}_S')}\right).\end{aligned} \tag{7}$$

为计算上述表达式中涉及的比值，将用到以下引理。

引理 2（矩阵行列式引理）。 *[7]* 设 W 为一个 n 阶方阵。则 $\det(W+uv^T)=\det(W)+v^T\mathrm{adj}(W)u$, 其中 u 和 v 是大小为 n 的列向量。

引理 3（舒尔行列式公式）。 *[7]* 设 $A=\left(B_1\ B_4^{\ 2}\right)B_3\ B$ 为一个 $(p+q)\times(p+q)$ 矩阵，其块 B_1, B_2, B_3 和 B_4 的阶分别为 $p\times p$、$p\times q$、$q\times p$ 和 $q\times q$。若 B_1 可逆，则 $\det(A)=\det(B_1)\cdot\det\left(B_4-B_3B_1^{-1}B_2\right)$.

在 [19], Sahir 和 Nayeem 推导出了以下引理，我们也将在研究中使用这些引理。

Lemma 4. *[19] Let* $R_i=\begin{pmatrix}-2&1&0&\cdots&0&0&0\\1&-2&1&\cdots&0&0&0\\0&1&-2&\cdots&0&0&0\\\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots&\vdots\\0&0&0&\cdots&-2&1&0\\0&0&0&\cdots&1&-2&1\\0&0&0&\cdots&0&1&-2\end{pmatrix}$ *be a* $i\times i$ *matrix. Then* $\det(R_i)=(-1)^i\cdot(1+i)$.

引理 5. *[19]* 设

$$R_{i,j}=\left(\begin{array}{cccc|c|cccc}-2&1&\cdots&0&0&0&\cdots&0&0\\1&-2&\cdots&0&0&0&\cdots&0&0\\0&1&\cdots&0&0&0&\cdots&0&0\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots\\0&0&\cdots&-2&1&0&\cdots&0&0\\\hline 0&0&\cdots&1&-3&1&\cdots&0&0\\\hline 0&0&\cdots&0&1&-2&\cdots&0&0\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots\\0&0&\cdots&0&0&0&\cdots&-2&1\\0&0&\cdots&0&0&0&\cdots&1&-2\end{array}\right)$$

是一个 i $\times$i 矩阵，其第 (j, j)-个（j $\leq$i）元素为 -3。则 det(R$_{i,j}$) $=(-1)^i \cdot (1+$i $+$j $+$i j $-$j^2)。

引理 6. *[19]* 设

$$R=\left(\begin{array}{ccccc|c|ccccc} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -3 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 \end{array}\right)$$

是一个 2n $\times$2n 矩阵，其中 R 的第 (2i, 2i) 个元素为 -3。则 det(R) $=$2n。

引理 7. *[19]* 设

$$S=\left(\begin{array}{ccccccc|ccccc} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 \end{array}\right)$$

是一个 (2n $-$1) $\times$(2n $-$1) 矩阵，其中对角块的大小分别为 (i $-$n $-$1) 和 (3n $-$i)，i $\in$ {n $+$1、n $+$2、.....、3n}。那么 det(S) $=-$2n。

引理8. 设

$$W_1 = \left(\begin{array}{ccccc|c|ccccc|c|ccc|cc} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -3 & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 & -3 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 \end{array}\right)$$

是一个 2n $\times$2n 矩阵，其中 (2i, 2i) 项和 (2 j,2 j) 项均为 -3，其中 i, j(> i) $\in\{1,2,\ldots,n\}$。那么 det(W$_1$) $=4n+8ij-4n(i-j)-4(i^2+j^2)$。

证明. 设

$$T_{p,s,t} = R_{p,s} - e_t e_t^T = \left(\begin{array}{ccccc|c|ccccc|c|ccc|cc} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -3 & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 & -3 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 \end{array}\right)$$

是一个 p $\times$p 矩阵，其中 T$_{p,\ s,\ t}$的第 (s, s) 和第 (t,t) 个元素为 -3，s,t(> s) $\in$

$\{1,2,\ldots,\mathrm{p}\}$。应用引理 2 可得,

$$\begin{aligned}
\det(T_{p,s,t}) &= \det(R_{p,s}) - \mathrm{cf}(R_{p,s}(t,t)) \\
&= \det(R_{p,s}) - (-1)^{t+t}\det(R_{t-1,s})\cdot\det(R_{p-t}) \\
&= (-1)^p\cdot(1+p+s+ps-s^2) \\
&\qquad -(-1)^{t-1}\cdot(1+(t-1)+s+(t-1)s-s^2)\cdot(-1)^{p-t}(1+p-t) \\
&\qquad\qquad \text{(by Lemma 4 and Lemma 5)} \\
&= (-1)^p\cdot\big(pt(s+1)+s(p+t)+(p+s+t+1)-s^2(p+2-t)-t^2(s+1)\big). \qquad (8)
\end{aligned}$$

现在，连续两次应用引理 2，并利用 (8)，得到

$$\begin{aligned}
\det(W_1) &= \det(T_{2n,2i,2j}) - \det(T_{2n-2,2i-1,2j-1}) - 2 \\
&= 4n + 8ij - 4n(i-j) - 4(i^2+j^2).
\end{aligned}$$

□

引理 9。设

$$W_2 = \begin{pmatrix} R_{i-n-1} & \mathbf{0} & e_1 e_{3n-j}^T \\ \mathbf{0} & R_{j-i-1} & \mathbf{0} \\ e_{3n-j}e_1^T & \mathbf{0} & R_{3n-j} \end{pmatrix}$$

其中 i, j(>i) $\in \{\mathrm{n}+1, \mathrm{n}+2, \ldots, 3\mathrm{n}\}$ 是一个 $(2\mathrm{n}-2)\times(2\mathrm{n}-2)$ 矩阵。则 $\det(\mathrm{W}_2) = 2\mathrm{i}\,\mathrm{j} + 2\mathrm{n}(\mathrm{j}-\mathrm{i}) - (\mathrm{i}^2+\mathrm{j}^2)$。

证明。连续两次应用引理 2，得到:

$$\begin{aligned}
\det(W_2) &= \det(R_{i-n-1})\cdot\det(R_{j-i-1})\cdot\det(R_{3n-j}) - \det(R_{i-n-2})\cdot\det(R_{j-i-1})\cdot(R_{3n-j-1}) \\
&= \det(R_{j-i-1})\cdot\big(\det(R_{i-n-1})\cdot\det(R_{3n-j}) - \det(R_{i-n-2})\cdot\det(R_{3n-j-1})\big) \\
&= (-1)^{j-i-1}(j-i) \\
&\quad \cdot\big((-1)^{i-n-1}(i-n)\cdot(-1)^{3n-j}(3n-j+1) - (-1)^{i-n-2}(i-n-1)\cdot(-1)^{3n-j-1}(3n-j)\big) \\
&= (j-i)\cdot((i-n)\cdot(3n-j+1) - (i-n-1)\cdot(3n-j)) \\
&= 2ij + 2n(j-i) - (i^2+j^2).
\end{aligned}$$

□

引理 10。设

$$P = \left(\begin{array}{ccccc|c|ccccc}
-2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\
1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -3 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 \\
1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2
\end{array}\right)$$

是一个 2n $\times$2n 矩阵，其中第 (2i, 2i) 个元素为 -3，$W_3 = P(\{j - n\}|\{j - n\})$，且 $i \in \{1,2,\ldots,n\}$，$j \in \{n+1, n+2, \ldots\ldots, 3n\}$。于是

$$\det(W_3) = \begin{cases} (j-n)^2 - 4(j-n)i + 4i^2 - 2n - 2n(j-n-2i), & if\ 2i \le j-n \\ (j-n)^2 - 4(j-n)i + 4i^2 - 2n + 2n(j-n-2i), & if\ 2i > j-n\ . \end{cases}$$

证明。对以下情形应用引理 2。

情形 1。当 $2i \le j - n$。

$\det(W_3) = \det(R_{j-n-1,2i}) \cdot \det(R^{3n-j}) - \det(R_{j-n-2,2i-1}) \cdot \det(R^{3n-j-1}) = (-1)^{j-n-1}(1 + (j-n-1) + (2i) + (j-n-1)(2i) - (2i)^2) \cdot (-1)^{3n-j}(1+3n-j) - (-1)^{j-n-2}(1 + (j-n-2) + (2i-1) + (j-n-2)(2i-1) - (2i-1)^2) \cdot (-1)^{3n-j-1}(3n-j)$（由引理 4 和引理 5）$= -[(1 + (j-n-1) + (2i) + (j-n-1)(2i) - (2i)^2) \cdot (1+3n-j) - (1 + (j-n-2) + (2i-1) + (j-n-2)(2i-1) - (2i-1)^2) \cdot (3n-j)] = (j-n)^2 - 4(j-n)i + 4i^2 - 2n - 2n(j-n-2i)$。

情形 2。当 $2i > j - n$ 时。

$\det(W_3) = \det(R_{j-n-1}) \det(R_{3n-j,2n-2i+1}) - \det(R_{j-n-2}) \det(R_{3n-j-1,2n-2i}) = (-1)^{j-n-1}(j-n) \cdot (-1)^{3n-j}(1 + (3n-j) + (2n-2i+1) + (3n-j)(2n-2i+1) - (2n-2i+1)^2) - (-1)^{j-n-2}(j-n-1) \cdot (-1)^{3n-j-1}(1 + (3n-j-1) + (2n-2i) + (3n-j-1)(2n-2i) - (2n-2i)^2)$（根据引理 4 和引理 5）$= -[(j-n) \cdot (1 + (3n-j) + (2n-2i+1) + (3n-j)(2n-2i+1) - (2n-2i+1)^2) - (j-n-1)(1 + (3n-j-1) + (2n-2i) + (3n-j-1)(2n-2i) - (2n-2i)^2)] = (j-n)^2 - 4(j-n)i + 4i^2 - 2n + 2n(j-n-2i)$.

□

引理11。 *[19]*设

$$N = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 3 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 3 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 4 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

and

$$N' = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 3 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 3 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 4 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

为两个阶为 2n 的矩阵。于是

$$\sum_{i=1}^{2n}\det(N(\{i\}|\{i\}))=\sum_{i=1}^{2n}\det(N'(\{i\}|\{i\}))=\frac{7\sqrt{6}n}{24}\left[\left(\sqrt{3}+\sqrt{2}\right)^{2n}-\left(\sqrt{3}-\sqrt{2}\right)^{2n}\right],$$

$\det(N)=(\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n}+(\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n}-2$, *and* $\det(N')=(\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n}+(\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n}+2$.

引理 12. 对于 $n\geq 2$,

$$\sum_{i=2}^{3n}\frac{1}{\rho_i}=-\frac{\gamma_{3n-2}}{\gamma_{3n-1}}=\frac{49n^2+42n-19}{42}.$$

3_n证明。由（3）可得$\gamma_{3n-1}=\sum_{i=1}\det(-\mathscr{L}_A(\{i\}|\{i\}))$.

现在，令 $i\in\{1,2,\ldots,n\}$。因此，$\det(-\mathscr{L}_A(\{i\}|\{i\}))=\begin{vmatrix} I_{n-1} & -\sqrt{2}\mathscr{L}_{01}(\{i\}|\{\}) \\ -\sqrt{2}\mathscr{L}_{01}(\{\}|\{i\}) & Q \end{vmatrix}$，其中 $Q=-\mathscr{L}_{11}-\mathscr{L}_{12}$。利用舒尔行列式公式，得到 $\det(-\mathscr{L}_A(\{i\}|\{i\}))=\det(-I_{n-1})\cdot\det\left(Q+2\mathscr{L}_{01}(\{i\}|\{\})^T\cdot\mathscr{L}_{01}(\{i\}|\{\})\right)$，其中 $i\in\{1,2,\ldots,n\}$。

Now,

$$Q+2\mathscr{L}_{01}(\{i\}|\{\})^T\cdot\mathscr{L}_{01}(\{i\}|\{\})=\frac{1}{3}R.$$

因此，根据引理 6，当 $i\in\{1,2,\ldots,n\}$ 时，$\det(-\mathscr{L}_A(\{i\}|\{i\}))=(-1)^{n-1}\cdot\frac{1}{3^{2n}}\cdot 2n$。

当 $i\in\{n+1、n+2、\ldots\ldots、3n\}$ 时，

$\det(-\mathscr{L}_A(\{i\}|\{i\}))=\begin{vmatrix} I_n & -\sqrt{2}\mathscr{L}_{01}(\{\}|\{i-n\}) \\ -\sqrt{2}\mathscr{L}_{01} & Q[i-n] \end{vmatrix}$.

利用舒尔行列式公式，当 $i\in\{n+1、n+2、\ldots\ldots、3n\}$ 时，有 $\det(-\mathscr{L}_A(\{i\}|\{i\}))=\det(-I_n)\cdot\det\left(Q[i-n]+2\mathscr{L}_{01}(\{\}|\{i-n\})^T\cdot\mathscr{L}_{01}(\{\}|\{i-n\})\right)$.

Now,

$$Q[i-n]+2\mathscr{L}_{01}(\{\}|\{i-n\})^T\cdot\mathscr{L}_{01}(\{\}|\{i-n\})=\frac{1}{3}S.$$

因此，根据引理 7，$\det(-\mathscr{L}_A(\{i\}|\{i\}))=(-1)^{n+1}\cdot\frac{1}{3^{2n-1}}\cdot 2n$，其中 $i\in\{n+1,\ n+2,\ \ldots,\ 3n\}$。因此，

$$\begin{aligned}\gamma_{3n-1} &= \sum_{i=1}^{3n}\det(-\mathscr{L}_A(\{i\}|\{i\})) \\ &= \sum_{i=1}^{n}\det(-\mathscr{L}_A(\{i\}|\{i\}))+\sum_{i=n+1}^{3n}\det(-\mathscr{L}_A(\{i\}|\{i\})) \\ &= (-1)^{n-1}\cdot\frac{1}{3^{2n}}\cdot 2n^2+(-1)^{n+1}\cdot\frac{1}{3^{2n-1}}\cdot 4n^2 \\ &= (-1)^{n-1}\cdot\frac{14n^2}{3^{2n}}. \end{aligned}\tag{9}$$

再次由（3）可得

$$\begin{aligned}\gamma_{3n-2} &= \sum_{1\le i<j\le 3n}\det(-\mathscr{L}_A(\{i,j\}|\{i,j\}))\\ &= \sum_{1\le i<j\le n}\det(-\mathscr{L}_A(\{i,j\}|\{i,j\}))+\sum_{n+1\le i<j\le 3n}\det(-\mathscr{L}_A(\{i,j\}|\{i,j\}))\\ &\quad+\sum_{\substack{1\le i\le n,\\ n+1\le j\le 3n}}\det(-\mathscr{L}_A(\{i,j\}|\{i,j\})).\end{aligned}$$

对于 $i,j(>i)\in\{1,2,\ldots,n\}$，利用舒尔行列式公式，

$$\begin{aligned}\det(-\mathscr{L}_A(\{i,j\}|\{i,j\})) &= \begin{vmatrix}-I_{n-2} & -\sqrt{2}\mathscr{L}_{01}(\{i,j\}|\{\})\\ -\sqrt{2}\mathscr{L}_{01}(\{i,j\}|\{\})^T & Q\end{vmatrix}\\ &= \det(-I_{n-2})\cdot\det(Q+2\mathscr{L}_{01}(\{i,j\}|\{\})^T\cdot\mathscr{L}_{01}(\{i,j\}|\{\}))\\ &= (-1)^{n-2}\cdot\det\left(\frac{1}{3}W_1\right),\end{aligned}$$

其中 $Q+2\mathscr{L}_{01}(\{i,j\}|\{\})^T\cdot\mathscr{L}_{01}(\{i,j\}|\{\})=\frac{1}{3}W_1$.

由引理8可知，$\det(W_1)=4n+8ij-4n(i-j)-4(i^2+j^2)$，因此，$\det(-\mathscr{L}_A(\{i,j\}|\{i,j\}))=(-1)^{n-2}\frac{1}{3^{2n}}\cdot 4\left[n+2ij-n(i-j)-(i^2+j^2)\right]$，其中 $i,j(>i)\in\{1,2,\ldots,n\}$。

对于 $i,j(>i)\in\{n+1,\ n+2,\ \ldots,\ 3n\}$，利用舒尔行列式公式，

$$\det(-\mathscr{L}_A(\{i,j\}|\{i,j\})) = \begin{vmatrix}-I_n & -\sqrt{2}\mathscr{L}_{01}(\{\}|\{i-n,j-n\})\\ -\sqrt{2}\mathscr{L}_{01}(\{\}|\{i-n,j-n\})^T & Q(\{i-n,j-n\}|\{i-n,j-n\})\end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned}&= \det(-I_n)\cdot\det(Q(\{i-n,j-n\}|\{i-n,j-n\})+2\mathscr{L}_{01}(\{\}|\{i-n,j-n\})^T\cdot\mathscr{L}_{01}(\{\}|\{i-n,j-n\}))\\ &= (-1)^n\cdot\det\left(\frac{1}{3}W_2\right),\end{aligned}$$

其中 $Q(\{i-n,j-n\}|\{i-n,j-n\})+2\mathscr{L}_{01}(\{\}|\{i-n,j-n\})^T\cdot\mathscr{L}_{01}(\{\}|\{i-n,j-n\})=\frac{1}{3}W_2$.由引理 9 可知，$\det(W_2)=2ij+2n(j-i)-(i^2+j^2)$，因此，

$$\det(-\mathscr{L}_A(\{i,j\}|\{i,j\}))=(-1)^n\cdot\frac{1}{3^{2n-2}}\cdot[2ij+2n(j-i)-(i^2+j^2)],\ \text{for } i,j(>i)\in\{n+1,n+2,\ldots,3n\}.$$

同理，对于 $i\in\{1,2,\ldots,n\}$，以及 $j\in\{n+1,\ n+2,\ \ldots,\ 3n\}$，

$$\det(-\mathscr{L}_A(\{i,j\}|\{i,j\})) = \begin{vmatrix}-I_{n-1} & -\sqrt{2}\mathscr{L}_{01}(\{i\}|\{j-n\})\\ -\sqrt{2}\mathscr{L}_{01}(\{i\}|\{j-n\})^T & Q(\{j-n\}|\{j-n\})\end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned}&= \det(-I_n)\cdot\det(Q(\{j-n\}|\{j-n\})+2\mathscr{L}_{01}(\{i\}|\{j-n\})^T\cdot\mathscr{L}_{01}(\{i\}|\{j-n\}))\\ &= (-1)^{n-1}\cdot\det\left(\frac{1}{3}W_3\right),\end{aligned}$$

其中 $Q(\{j-n\}|\{j-n\})+2\mathscr{L}_{01}(\{i\}|\{j-n\})^T\cdot\mathscr{L}_{01}(\{i\}|\{j-n\})=\frac{1}{3}W_3$. 由引理 10 可知,

$$\det(W_3)=\begin{cases}(j-n)^2-4(j-n)i+4i^2-2n-2n(j-n-2i), & \text{if } 2i\le j-n\\ (j-n)^2-4(j-n)i+4i^2-2n+2n(j-n-2i), & \text{if } 2i>j-n\,.\end{cases}$$

因此,

$$\begin{aligned}\gamma_{3n-2} &= (-1)^{n-2}\cdot\frac{1}{3^{2n+1}}\cdot(n^4+6n^3-7n^2)+(-1)^n\cdot\frac{1}{3^{2n-1}}\cdot(4n^4-n^2)+(-1)^n\cdot\frac{1}{3^{2n}}\cdot(4n^4+12n^3-n^2)\\ &= (-1)^n\cdot\frac{49n^2+42n-19n^2}{3^{2n+1}}.\end{aligned}$$

因此 $\sum_{3n=2}\frac{1}{\rho_i}=-\frac{\gamma_{3n-2}}{\gamma_{3n-1}}=\frac{49\,i\,n^2+42n\quad-19}{42}$. □

引理 13. 对于 $n\ge 2$,

$$\sum_{i=1}^{2n}\frac{1}{\mu_i}=\frac{\frac{7\sqrt{6}n}{8}\left[\left(\sqrt{3}+\sqrt{2}\right)^{2n}-\left(\sqrt{3}-\sqrt{2}\right)^{2n}\right]}{(\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n}+(\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n}-2}$$

and

$$\sum_{i=1}^{2n}\frac{1}{\mu_i'}=\frac{\frac{7\sqrt{6}n}{8}\left[\left(\sqrt{3}+\sqrt{2}\right)^{2n}-\left(\sqrt{3}-\sqrt{2}\right)^{2n}\right]}{(\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n}+(\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n}+2}.$$

证明。我们有 $\delta_{2n-1}=\delta'_{2n-1}=(-1)^{2n-1}\cdot{}^{2}\sum_{n=1}\mathscr{L}_{S}{}_{i}(\{i\}|\{i\})=(-1)^{2n-1}\cdot{}^{2}\sum_{n=1}\mathscr{L}'{}_{iS}(\{i\}|\{i\})$。由于$\mathscr{L}_S=\frac{1}{3}N$ 且 $\mathscr{L}'_S=\frac{1}{3}N'$，因此由引理11

$$\begin{aligned}-\delta_{2n-1}=-\delta'_{2n-1}&=\frac{1}{3^{2n-1}}\sum_{i=1}^{2n}\det(N(\{i\}|\{i\}))=\frac{1}{3^{2n-1}}\sum_{i=1}^{2n}\det(N'(\{i\}|\{i\}))\\ &=\frac{1}{3^{2n-1}}\left(\frac{7\sqrt{6}n}{24}\left[\left(\sqrt{3}+\sqrt{2}\right)^{2n}-\left(\sqrt{3}-\sqrt{2}\right)^{2n}\right]\right).\end{aligned}$$

因此，根据引理11，当 $n\ge 2$ 时,

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{2n}\frac{1}{\mu_i} &= -\frac{\delta_{2n-1}}{\det(\mathscr{L}_S)}\\ &= \frac{\frac{1}{3^{2n-1}}\left(\frac{7\sqrt{6}n}{24}\left[\left(\sqrt{3}+\sqrt{2}\right)^{2n}-\left(\sqrt{3}-\sqrt{2}\right)^{2n}\right]\right)}{\frac{1}{3^{2n}}\left((\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n}+(\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n}-2\right)}\\ &= \frac{\frac{7\sqrt{6}n}{8}\left[\left(\sqrt{3}+\sqrt{2}\right)^{2n}-\left(\sqrt{3}-\sqrt{2}\right)^{2n}\right]}{(\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n}+(\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n}-2},\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{2n}\frac{1}{\mu_i'} &= -\frac{\delta_{2n-1}}{\det(\mathscr{L}_S')}\\ &= \frac{\frac{1}{3^{2n-1}}\left(\frac{7\sqrt{6}n}{24}\left[\left(\sqrt{3}+\sqrt{2}\right)^{2n}-\left(\sqrt{3}-\sqrt{2}\right)^{2n}\right]\right)}{\frac{1}{3^{2n}}\left((\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n}+(\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n}+2\right)}\\ &= \frac{\frac{7\sqrt{6}n}{8}\left[\left(\sqrt{3}+\sqrt{2}\right)^{2n}-\left(\sqrt{3}-\sqrt{2}\right)^{2n}\right]}{(\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n}+(\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n}+2}.\end{aligned}$$

□

利用关系式 (6)、(7)、引理 12 和引理 13，可得以下定理。

定理 5. 对于 $n \geq 2$，P_n 的度基尔霍夫指数 $Kf^*(P_n)$ 和 P_n' 的 $Kf^*(P_n')$ 为,

$$Kf^*(P_n) = 14n\left(\frac{49n^2+42n-19}{42}+\frac{\frac{7\sqrt{6}n}{8}\left[\left(\sqrt{3}+\sqrt{2}\right)^{2n}-\left(\sqrt{3}-\sqrt{2}\right)^{2n}\right]}{(\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n}+(\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n}-2}\right),$$

and

$$Kf^*(P_n') = 14n\left(\frac{49n^2+42n-19}{42}+\frac{\frac{7\sqrt{6}n}{8}\left[\left(\sqrt{3}+\sqrt{2}\right)^{2n}-\left(\sqrt{3}-\sqrt{2}\right)^{2n}\right]}{(\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n}+(\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n}+2}\right).$$

下面的定理由定理 3 和定理 5 推导得出。

定理 6. 对于 $n \geq 2$，P_n 的凯梅尼常数 $Kc(P_n)$ 和 P'_n 的凯梅尼常数 $Kc(P'_n)$ 分别为：

$$Kc(P_n) = \left(\frac{49n^2+42n-19}{42} + \frac{\frac{7\sqrt{6}n}{8}\left[\left(\sqrt{3}+\sqrt{2}\right)^{2n} - \left(\sqrt{3}-\sqrt{2}\right)^{2n}\right]}{(\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n}+(\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n}-2} \right),$$

and

$$Kc(P'_n) = \left(\frac{49n^2+42n-19}{42} + \frac{\frac{7\sqrt{6}n}{8}\left[\left(\sqrt{3}+\sqrt{2}\right)^{2n} - \left(\sqrt{3}-\sqrt{2}\right)^{2n}\right]}{(\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n}+(\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n}+2} \right).$$

利用定理 4，我们得到 P_n 和 P'_n 的生成树总数公式如下。

推论 1. P_n 的生成树总数为

$$\tau(P_n) = 2^n \cdot n \cdot \left((\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n} + (\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n} - 2\right)$$

P'_n 的生成树总数为

$$\tau(P'_n) = 2^n \cdot n \cdot \left((\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n} + (\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n} + 2\right).$$

证明。由定理 4,

$$\begin{aligned}
\tau(P_n) &= \frac{1}{14n} \cdot \left(\prod_{i=1}^{5n} d_i\right) \cdot \left(\prod_{i=2}^{3n} \rho_i \prod_{j=1}^{2n} \mu_j\right) \\
&= \frac{2^n 3^{4n} \cdot (-1)^{3n-1} \gamma_{3n-1} \cdot \det(\mathscr{L}_S)}{14n} \\
&= \frac{2^n 3^{4n} \cdot \frac{14n^2}{3^{2n}} \cdot \frac{1}{3^{2n}} \left((\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n} + (\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n} - 2\right)}{14n} \\
&= 2^n \cdot n \cdot \left((\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n} + (\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n} - 2\right).
\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
\tau(P'_n) &= \frac{1}{14n} \cdot \left(\prod_{i=1}^{5n} d_i\right) \cdot \left(\prod_{i=2}^{3n} \rho_i \prod_{j=1}^{2n} \mu'_j\right) \\
&= \frac{2^n 3^{4n} \cdot (-1)^{3n-1} \gamma_{3n-1} \cdot \det(\mathscr{L}'_S)}{14n} \\
&= \frac{2^n 3^{4n} \cdot \frac{14n^2}{3^{2n}} \cdot \frac{1}{3^{2n}} \left((\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n} + (\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n} + 2\right)}{14n} \\
&= 2^n \cdot n \cdot \left((\sqrt{3}-\sqrt{2})^{2n} + (\sqrt{3}+\sqrt{2})^{2n} + 2\right).
\end{aligned}$$

□

Sahir 和 Nayeem [19] 利用 P_n 和 P'_n的拉普拉斯特征值，得到了 P_n 和 P'_n 的生成树总数的相同公式。

4 不同指数之间的关系

对于 P_n 和 P'_n，我们计算 Schultz 指数和 Gutman 指数。

定理 7. 具有 5n个顶点的五边形圆柱链 P_n 的古特曼指数 Gut(P_n) 为

$$\mathrm{Gut}(P_n) = \begin{cases} 49n^3 + 64n^2 + 5n, & \textit{if } n \textit{ is even} \\ 49n^3 + 64n^2 + 4n, & \textit{if } n \textit{ is odd.} \end{cases}$$

证明. 五边形圆柱链 P_n 的顶点（见图 1）可分类如下。

1. a型顶点是指不与任何2度顶点相邻的3度顶点。因此，标签为 $\{1, 1', 3, 3', \ldots, 2n-1、2n-1'\}$ 的顶点称为 a型顶点。 2. b型顶点是指与一个2度顶点相邻的3度顶点。因此，标签为 $\{2, 2', 4, 4', \ldots, 2n、2n'\}$ 的顶点称为 b型顶点。 3. c型顶点是指度为2的顶点。因此，标签为 $\{\tilde{1}, \tilde{2}, \ldots, \tilde{n}\}$ 的顶点称为 c型顶点。

此外，标签为 $\{1, 2, 3, \ldots, 2n\}$ 和 $\{1', 2', 3', \ldots, 2n'\}$ 的顶点分别称为上顶点和下顶点。

现在我们有以下观察结果。

1. 一个 a 型上顶点与.....之间的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$ 之和

(a) the vertices with labels $\{1, 2, 3, \ldots, 2n\}$ is $9\left(2\sum_{i=1}^{n-1} i + n\right) = 9n^2$, and

(b) the vertices with labels $\{1', 2', 3', \ldots, 2n'\}$ is $9\left(2\sum_{i=1}^{n} i + n\right) = 9(n^2 + 2n)$.

2. 一个 a 型下顶点与.....之间的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$ 之和

(a) the vertices with labels $\{1, 2, 3, \ldots, 2n\}$ is $9\left(2\sum_{i=1}^{n} i + n\right) = 9(n^2 + 2n)$, and

(b) the vertices with labels $\{1', 2', 3', \ldots, 2n'\}$ is $9\left(2\sum_{i=1}^{n-1} i + n\right) = 9n^2$.

3. 类型为 a 的顶点（无论是上顶点还是下顶点）与标签为 $\{\tilde{1}, \tilde{2}, \ldots, \tilde{n}\}$ 的顶点之间的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$ 之和为

$$\begin{cases} 6\left(4\sum_{i=1}^{n/2} i\right) = 6\left\{\frac{n}{2}(n+2)\right\}, \text{if } n \text{ is even} \\ 6\left(4\sum_{i=1}^{(n+1)/2} i - (n+1)\right) = 6\left\{\frac{1}{2}(n+1)^2\right\}, \text{if } n \text{ is odd.} \end{cases}$$

4. 类型为 b 的上顶点与.....之间的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$ 之和

(a) 标签为 $\{1,2,3,\ldots,2n\}$ 的顶点是 $9\left(2\sum_{n-1i=1} i + n\right) = 9n^2,,$ 以及 (b) 标签为 $\{1',2',3',\ldots,2n'\}$ 的顶点是 $9\left(2_n\Sigma_{i=1} i + (n+1)\right) = 9(n+1)^2.$

5. 加权距离的总和 下顶点类型为 b 的顶点与.....之间的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$ 的总和

(a) the vertices with labels $\{1,2,3,\ldots,2n\}$ is $9\left(2\sum_{i=1}^{n} i + (n+1)\right) = 9(n+1)^2$, and

(b) the vertices with labels $\{1',2',3',\ldots,2n'\}$ is $9\left(2\sum_{i=1}^{n-1} i + n\right) = 9n^2.$

6. 类型为 b 的顶点（无论是上顶点还是下顶点）与标签为 $\{\tilde{1},\tilde{2},\ldots,\tilde{n}\}$ 的顶点之间的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$ 的总和为

$$\begin{cases} 6\left(2\sum_{i=1}^{n/2}(2i-1)+n\right) = 6\left\{\frac{n}{2}(n+2)\right\}, \text{if } n \text{ is even} \\ 6\left(2\sum_{i=1}^{(n+1)/2}(2i-1)-1\right) = 6\left\{\frac{1}{2}(n+1)^2-1\right\}, \text{if } n \text{ is odd.} \end{cases}$$

7. 类型为 c 的顶点与.....之间的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$ 的总和

(a) 标签为 $\{1,2,3,\ldots,2n\}$ 的顶点是 $6\left(2_n\Sigma_{i=1} i + n\right) = 6(n^2+2n),$

(b) 标签为 $\{1',2',3',\ldots,2n'\}$ 的顶点是 $6\left(2_n\Sigma_{i=1} i + n\right) = 6(n^2+2n),$

(c) 标签为 $\{\tilde{1},\tilde{2},\ldots,\tilde{n}\}$ 的顶点是

$$\begin{cases} 4\left(4\sum_{i=1}^{n/2} i + n - 2\right) = 4\left\{\frac{n^2+4n-4}{2}\right\}, \text{if } n \text{ is even} \\ 4\left(4\sum_{i=1}^{(n+1)/2} i - 4\right) = 4\left\{\frac{(n+1)(n+3)}{2} - 4\right\}, \text{if } n \text{ is odd.} \end{cases}$$

因此，五边形圆柱链 P_n 的 Gutman 指数 Gut(P_n) 为

$$\begin{aligned} \mathrm{Gut}(P_n) &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5n}\sum_{j=1}^{5n} d_i d_j d_{ij} \\ &= \frac{\sum_{j=1}^{2n}\left(\begin{smallmatrix} 9(n^2+n^2+2n+n^2+(n+1)^2) \\ +6(\frac{n}{2}(n+2)+\frac{n}{2}(n+2)+n^2+2n)\end{smallmatrix}\right) + \sum_{j=1}^{n} 4\left(\frac{n^2+4n-4}{2}\right)}{2} \\ &= \frac{2n\left(48n^2+60n+9\right)+n(2n^2+8n-8)}{2} \\ &= 49n^3+64n^2+5n, \text{if } n \text{ is even,} \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
\mathrm{Gut}(P_n) &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5n}\sum_{j=1}^{5n} d_i d_j d_{ij} \\
&= \frac{\sum_{j=1}^{2n}\begin{pmatrix} 9(n^2+n^2+2n+n^2+(n+1)^2) \\ +6(\frac{1}{2}(n+1)^2+\frac{1}{2}(n+1)^2-1+n^2+2n)\end{pmatrix} + \sum_{j=1}^{n} 4\left(\frac{(n+1)(n+3)}{2}-4\right)}{2} \\
&= \frac{2n\left(48n^2+60n+9\right)+n(2n^2+8n-10)}{2} \\
&= 49n^3+64n^2+4n, \text{if } n \text{ is odd.}
\end{aligned}$$

□

接下来，我们给出下面五边形 M¨obius 链 P_n' 的另一个自同构，这将有助于求出 P_n' 的 Gutman 指数。

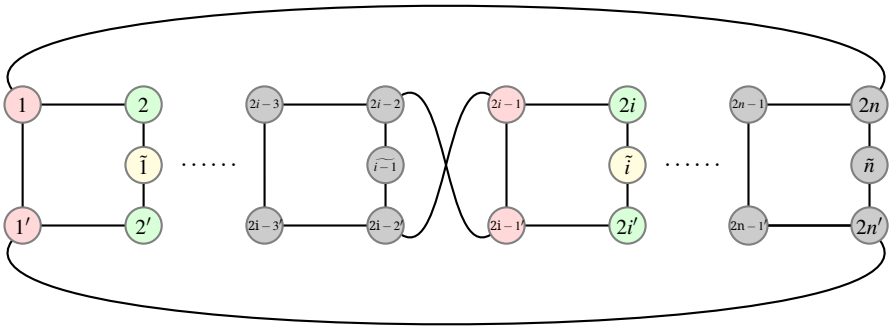

图3：莫比乌斯五边形链 P_n'. 的另一种表示

定理 8. 具有 5n个顶点的五边形莫比乌斯链 P_n' 的古特曼指数 Gut(P_n') 为

$$\mathrm{Gut}(P_n') = \begin{cases} 49n^3+64n^2-13n, & \textit{if } n \textit{ is even} \\ 49n^3+64n^2-14n, & \textit{if } n \textit{ is odd.} \end{cases}$$

证明。我们将由标签为 {(2i − 1)、(2i − 1)′、2i、2i′, ˜i} 的顶点所诱导的子图称为 P_n' 的第 i 个块。

设 π^k: V (P_n') → V (P_n') 定义为 π^k(i) ≡(i+2k) (mod 2n), π^k(i′) ≡((i +2k) (mod 2n))′, 且 π^k(˜i) = ˜r，其中 r ≡(i+k) (mod n)，对每个 k ∈ {1,2,...,n−1} 均成立。那么对每个 k ∈ {1,2,...,n−1}，π^k 都是五边形莫比乌斯链 P_n' 的一个自同构（见图3），因此，每个块中各顶点到 P_n' 所有顶点的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$之和相同。因此，我们计算第一个块中各顶点到 P_n' 所有顶点的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$之和，再将该值乘以 n，便得到 P_n'. 任意一对顶点之间的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$之和。

1. 标签为 1 的顶点与$d_i d_j d_{ij}$之间的加权距离总和

(a) 标签为 $\{1,2,3,\ldots,2n\}$ 的顶点是 $9\left(2_n\Sigma_{i=1}i-1\right)=9\{n(n+1)-1\}$,

(b) 标签为 $\{1',2',3',\ldots,2n'\}$ 的顶点是 $9\left(2_n\Sigma_{i=1}i\right)=9\{n(n+1)\}$.

2. 标签为 $1'$ 的顶点之间加权距离 $d_i d_j d_{ij}$ 的总和，以及

(a) 标签为 $\{1,2,3,\ldots,2n\}$ 的顶点是 $9\left(2_n\Sigma_{i=1}i\right)=9\{n(n+1)\}$，(b) 标签为 $\{1',2',3',\ldots,2n'\}$ 的顶点是 $9\left(2_n\Sigma_{i=1}i-1\right)=9\{n(n+1)-1\}$.

3. 标签为 1 或 $1'$ 的顶点与标签为 $\{\tilde{1},\tilde{2},\ldots,\tilde{n}\}$ 的顶点之间的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$之和为

$$\begin{cases} 6\left(4\sum_{i=1}^{n/2} i\right)=6\left\{\frac{n}{2}(n+2)\right\}, \text{if } n \text{ is even} \\ 6\left(4\sum_{i=1}^{(n+1)/2} i-(n+1)\right)=6\left\{\frac{1}{2}(n+1)^2\right\}, \text{if } n \text{ is odd.} \end{cases}$$

4. 标签为 2 的顶点与以下顶点之间的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$之和:

(a) 标签为 $\{1,2,3,\ldots,2n\}$ 的顶点，其值为 $9\left(2_n\Sigma_{i=1}i-2\right)=9\{n(n+1)-2\}$；(b) 标签为 $\{1',2',3',\ldots,2n'\}$ 的顶点，其值为 $9\left(2_n\Sigma_{i=1}i+2\right)=9\{n(n+1)+2\}$.

5. 标签为 $2'$ 的顶点与以下对象之间的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$之和:

(a) the vertices with labels $\{1,2,3,\ldots,2n\}$ is $9\left(2\sum_{i=1}^{n} i+2\right)=9\{n(n+1)+2\}$,

(b) the vertices with labels $\{1',2',3',\ldots,2n'\}$ is $9\left(2\sum_{i=1}^{n} i-2\right)=9\{n(n+1)-2\}$.

6. 标签为 2 或标签为 $2'$ 的顶点与标签为 $\{\tilde{1},\tilde{2},\ldots,\tilde{n}\}$ 的顶点之间的加权距离 $d_i d_j d_{ij}$之和为

$$\begin{cases} 6\left(2\sum_{i=1}^{n/2}(2i-1)+n\right)=6\left\{\frac{n}{2}(n+2)\right\}, \text{if } n \text{ is even} \\ 6\left(2\sum_{i=1}^{(n+1)/2}(2i-1)-1\right)=6\left\{\frac{1}{2}(n+1)^2-1\right\}, \text{if } n \text{ is odd.} \end{cases}$$

˜7. 标签为 1 的顶点与加权距离 $d_i d_j d_{ij}$ 之间的总和为

(a) 标签为 $\{1,2,3,\ldots,2n\}$ 的顶点是 $6\left(2n\sum_{i=1} i + n\right) = 6\{n^2+2n\}$,

(b) 标签为 $\{1',2',3',\ldots,2n'\}$ 的顶点是 $6\left(2n\sum_{i=1} i + n\right) = 6\{n^2+2n\}$,

(c) 标签为 $\{\tilde{1},\tilde{2},\ldots,\tilde{n}\}$ 的顶点是

$$\begin{cases} 4\left(4\sum\limits_{i=1}^{n/2} i + n - 2\right) = 4\left\{\frac{n^2+4n-4}{2}\right\}, \text{if } n \text{ is even} \\ 4\left(4\sum\limits_{i=1}^{(n+1)/2} i - 4\right) = 4\left\{\frac{(n+1)(n+3)}{2} - 4\right\}, \text{if } n \text{ is odd.} \end{cases}$$

因此，五边形莫比乌斯链 P_n' 的古特曼指数 $Gut(P_n')$ 为

$$\begin{aligned} Gut(P_n') &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5n}\sum_{j=1}^{5n} d_i d_j d_{ij} \\ &= \frac{\sum\limits_{j=1}^{n}\left[2\left(\begin{smallmatrix}9(n(n+1)+n(n+1)-1+n(n+1)-2+n(n+1)+2)\\ +6(\frac{n}{2}(n+2)+\frac{n}{2}(n+2)+n^2+2n)\end{smallmatrix}\right)+4\left(\frac{n^2+4n-4}{2}\right)\right]}{2} \\ &= \frac{2n\left(48n^2+60n-9\right)+n(2n^2+8n-8)}{2} \\ &= 49n^3+64n^2-13n, \text{ if } n \text{ is even,} \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} Gut(P_n') &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5n}\sum_{j=1}^{5n} d_i d_j d_{ij} \\ &= \frac{\sum\limits_{j=1}^{n}\left[2\left(\begin{smallmatrix}9(n(n+1)+n(n+1)-1+n(n+1)-2+n(n+1)+2)\\ +6(\frac{1}{2}(n+1)^2+\frac{1}{2}(n+1)^2-1+n^2+2n)\end{smallmatrix}\right)+4\left(\frac{(n+1)(n+3)}{2}-4\right)\right]}{2} \\ &= \frac{2n\left(48n^2+60n-9\right)+n(2n^2+8n-10)}{2} \\ &= 49n^3+64n^2-14n, \text{ if } n \text{ is odd.} \end{aligned}$$

□

P_n 和 P_n' 的舒尔茨指数可通过类似的过程得到。

定理 9. 5n个顶点的 P_n 上 P_n 的舒尔茨指数 $Sc(P_n)$ 为

$$Sc(P_n) = \begin{cases} 35n^3+48n^2+2n, & \textit{if } n \textit{ is even} \\ 35n^3+48n^2+n, & \textit{if } n \textit{ is odd.} \end{cases}$$

证明。按照定理 7 证明中所述的不同情形，考虑 $(\mathrm{d}_i+\mathrm{d}_j)\mathrm{d}_{ij}$ 的取值，则五边形圆柱链 P_n 的舒尔茨指数 $\mathrm{Sc}(\mathrm{P}_n)$ 为

$$\begin{aligned}
\mathrm{Sc}(P_n) &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5n}\sum_{j=1}^{5n}(d_i+d_j)d_{ij} \\
&= \frac{\sum\limits_{j=1}^{2n}\begin{pmatrix}6(n^2+n^2+2n+n^2+(n+1)^2)\\ +5(\frac{n}{2}(n+2)+\frac{n}{2}(n+2)+n^2+2n)\end{pmatrix}+\sum\limits_{j=1}^{n}4\left(\frac{n^2+4n-4}{2}\right)}{2} \\
&= \frac{2n\left(34n^2+44n+6\right)+n(2n^2+8n-8)}{2} \\
&= 35n^3+48n^2+2n, \text{ if } n \text{ is even},
\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
\mathrm{Sc}(P_n) &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5n}\sum_{j=1}^{5n}(d_i+d_j)d_{ij} \\
&= \frac{\sum\limits_{j=1}^{2n}\begin{pmatrix}6(n^2+n^2+2n+n^2+(n+1)^2)\\ +5(\frac{1}{2}(n+1)^2+\frac{1}{2}(n+1)^2-1+n^2+2n)\end{pmatrix}+\sum\limits_{j=1}^{n}4\left(\frac{(n+1)(n+3)}{2}-4\right)}{2} \\
&= \frac{2n\left(34n^2+44n+6\right)+n(2n^2+8n-10)}{2} \\
&= 35n^3+48n^2+n, \text{ if } n \text{ is odd}.
\end{aligned}$$

□

定理 10. 5n个顶点上的 P'_n 的舒尔茨指数 $\mathrm{Sc}(\mathrm{P}'_n)$ 为

$$\mathrm{Sc}(P'_n)=\begin{cases}35n^3+48n^2-10n, & \textit{if } n \textit{ is even}\\ 35n^3+48n^2-11n, & \textit{if } n \textit{ is odd.}\end{cases}$$

证明。与定理 8 类似，五边形莫比乌斯链 P'_n 的舒尔茨指数 $\mathrm{Sc}(\mathrm{P}'_n)$ 为

$$\begin{aligned}
\mathrm{Sc}(P'_n) &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5n}\sum_{j=1}^{5n}(d_i+d_j)d_{ij} \\
&= \frac{\sum\limits_{j=1}^{n}\left[2\begin{pmatrix}6(n(n+1)+n(n+1)-1+n(n+1)-2+n(n+1)+2)\\ +5(\frac{n}{2}(n+2)+\frac{n}{2}(n+2)+n^2+2n)\end{pmatrix}+4\left(\frac{n^2+4n-4}{2}\right)\right]}{2} \\
&= \frac{2n\left(34n^2+44n-6\right)+n(2n^2+8n-8)}{2} \\
&= 35n^3+48n^2-10n, \text{if } n \text{ is even},
\end{aligned}$$

and

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Sc}(P'_n) &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5n}\sum_{j=1}^{5n}(d_i+d_j)d_{ij} \\
&= \frac{\sum_{j=1}^{n}\left[2\left(\begin{smallmatrix}6(n(n+1)+n(n+1)-1+n(n+1)-2+n(n+1)+2)\\ +5(\frac{1}{2}(n+1)^2+\frac{1}{2}(n+1)^2-1+n^2+2n)\end{smallmatrix}\right)+4\left(\frac{(n+1)(n+3)}{2}-4\right)\right]}{2} \\
&= \frac{2n\left(34n^2+44n-6\right)+n(2n^2+8n-10)}{2} \\
&= 35n^3+48n^2-11n, \text{if } n \text{ is odd.}
\end{aligned}
$$

□

结合定理 7、定理 8、定理 9 和定理 10 中得到的结果，可得以下关系。

定理 11. Gut(P_n) 和 Sc(P_n) 的关系为

$$\mathrm{Gut}(P_n) = (14n^3+16n^2+3n)+\mathrm{Sc}(P_n),$$

且 Gut(P'_n) 和 Sc(P'_n) 的关系为

$$\mathrm{Gut}(P'_n) = (14n^3+16n^2-3n)+\mathrm{Sc}(P'_n).$$

五边形圆柱型链 P_n（M¨obius 链）的度基尔霍夫指数 Kf*(P_n)（Kf*(P'_n)）与古特曼指数 Gut(P_n)（Gut(P'_n)）之间不存在明确的关系，但当 n 增大时，古特曼指数趋近于度基尔霍夫指数的三倍。结合定理 5、定理 7 和定理 8，可得以下定理。

定理 12.

$$\lim_{n\to\infty}\frac{\mathrm{Gut}(P_n)}{\mathrm{Kf}^*(P_n)} = 3$$

and

$$\lim_{n\to\infty}\frac{\mathrm{Gut}(P'_n)}{\mathrm{Kf}^*(P'_n)} = 3.$$

5 结论

本文以闭式计算了五边形莫比乌斯链 $P^{¨}$ 和五边形圆柱链 P'_n 的度基尔霍夫指数、古特曼指数和舒尔茨指数。对于上述类型的图，我们推导出了舒尔茨指数与古特曼指数之间的关系。此外，我们发现，对于 P_n 和 P_n，当 n 足够大时，古特曼指数约为度基尔霍夫指数的三倍。

n	Gut(P_n)	$Kf^*(P_n)$	$\frac{Gut(P_n)}{Kf^*(P_n)}$	Gut(P'_n)	$Kf^*(P'_n)$	$\frac{Gut(P'_n)}{Kf^*(P'_n)}$
2	658	296.5	2.2192	622	291.6	2.1330
3	1911	818.6136	2.3344	1857	817.5	2.2716
4	4180	1724.2	2.4243	4108	1724	2.3828
5	7745	3110.1720	2.4902	7655	3110.1404	2.4613
6	12918	5074.2273	2.5458	12810	5074.2227	2.5245
7	19971	7714.3065	2.5888	19845	7714.3059	2.5725
8	29224	11128.4	2.6261	29080	11128.3999	2.6131
9	40941	15414.5062	2.6560	40779	15414.5062	2.6455
10	55450	20670.6249	2.6826	55270	20670.6249	2.6738
20	417700	148142.4997	2.8196	417340	148142.4997	2.8172
50	6285250	2151365.6234	2.9215	6284350	2151365.6234	2.9211
99	48172311	16278895.2499	2.9592	48170529	16278895.2499	2.9591

表1：Gut(P_n) 和 $Kf^*(P_n)$ 在不同 n 下的值。

参考文献

[1] S. Butler. 归一化拉普拉斯矩阵的代数方面，第 295–315 页。施普林格国际出版公司，查姆，2016年。[2] H. Chen 和 F. Zhang. 电阻距离与归一化拉普拉斯谱。《离散应用数学》，155(5):654–661，2007年。[3] F. R. K. Chung.《谱图论》。美国数学会，1997年。[4] I. Gutman. 舒尔茨分子拓扑指数的若干性质。《化学信息与计算机科学杂志》，34(5):1087–1089，1994年。[5] I. Gutman 和 B. Mohar. 准维纳指数与基尔霍夫指数相同。《化学信息与计算机科学杂志》，36(5):982–985，1996年。[6] C. He、S. Li、W. Luo 和 L. Sun. 计算线性五边形链的归一化拉普拉斯谱和生成树数。《计算与应用数学杂志》，344:381–393，2018年。[7] R. A. Horn 和 C. R. Johnson.《矩阵分析》。剑桥大学出版社，1985年。[8] J. Huang、S. Li 和 X. Li. 线性多格骨牌链的归一化拉普拉斯矩阵、度基尔霍夫指数和生成树。《应用数学与计算》，289:324–334，2016年。[9] J. Huang、S. Li 和 L. Sun. 线性六边形链的归一化拉普拉斯矩阵、度基尔霍夫指数和生成树。《离散应用数学》，207:67–79，2016年。

[10] D. J. Klein、Z. Mihalic、D. Plavsic 和 N. Trinajstic。分子拓扑指数：与维纳指数的关系。《化学信息与计算机科学杂志》，32(4):304– 305，1992年。[11] D. J. Klein 和 M. Randi´c。电阻距离。《数学化学杂志》，12(1):81–95，1993年。[12] M. Levene 和 G. Loizou。凯梅尼常数与随机冲浪者。《美国数学月刊》，109(8):741–745，2002年。[13] J. Li 和 W. Wang。随机多边形链中的（度）基尔霍夫指数。《离散应用数学》，304:63–75，2021年。[14] J.-B. Liu 和 K. Wang。一类线性网络的乘法度基尔霍夫指数与复杂度。《AIMS数学》，9(3):7111–7130，2024年。[15] J.-B. Liu、T. Zhang、Y. Wang 和 W. Lin。M¨obius/圆柱型八边形链的基尔霍夫指数与生成树。《离散应用数学》，307:22–31，2022年。[16] X. Ma 和 H. Bian。六边形 M¨obius 图的归一化拉普拉斯矩阵、度基尔霍夫指数与生成树。《应用数学与计算》，355:33–46，2019年。[17] X. Ma 和 H. Bian。圆柱形苯撑链的归一化拉普拉斯矩阵、度基尔霍夫指数与生成树。《多环芳香化合物》，41(6):1159–1179，2021年。[18] Y. Pan 和 J. Li。线性交叉六边形链的基尔霍夫指数、乘法度基尔霍夫指数与生成树。《国际量子化学杂志》，118(24):e25787，2018年。[19] M. A. Sahir 和 S. M. A. Nayeem。关于圆柱型/M¨obius 五边形链的基尔霍夫指数与生成树数。《离散应用数学》，326:47–61，2023年。[20] H. P. Schultz。《拓扑有机化学》。1. 烷烃的图论与拓扑指数。《化学信息与计算机科学杂志》，29(3):227–228，1989年。[21] Y. Wang 和 W. Zhang。线性五边形链的基尔霍夫指数。《国际量子化学杂志》，110(9):1594–1604，2010年。[22] H. Wiener。石蜡沸点的结构测定。《美国化学会志》，69(1):17–20，1947年。[23] Y. Zhang 和 X. Ma。关于线性五边形衍生链的归一化拉普拉斯谱及其应用。《公理》，12(10)，2023年。[24] H.-Y. Zhu、D. J. Klein 和 I. Lukovits。维纳数的推广。《化学信息与计算机科学杂志》，36(3):420–428，1996年。[25] Z. Zhu 和 J.-B. Liu。广义苯撑的归一化拉普拉斯矩阵、度基尔霍夫指数与生成树数。《离散应用数学》，254:256–267，2019年。