arXiv:2305.02925v2 [cs.DM] 7 Apr 2024

树和连通图的 Sombor 指数类图不变量的最大值

米兰·巴希奇´c[a],*

[a]尼什大学理学院与数学学院

摘要。 Gutman 提出了一组新颖的基于顶点度的图不变量，记作$SO_1, SO_2, \ldots\ldots SO_6$。这些不变量基于一种新的图不变量框架，通过几何推理构造而成。受 Z. Tang、Q. Li 和 H. Deng 提出的未解决问题启发，具有极值 *Sombor* 指数类图不变量的树，MATCH 数学与计算化学通讯**90**（2023）203–222], ，我们分别求得了顶点数给定的分子树集合中SO_5 和SO_6 的最大值，并求得了一类连通图中SO_5 的最大值。

1. 引言

基于顶点度的拓扑指数（VDB）因其在数学 [4–6、8、10、11、14–16, 18, 20, 21] 和化学 [2, 3, 7, 13, 17]中的潜在应用而迅速受到广泛关注。在过去几十年里，研究重点一直是 VDB 指数的代数和组合性质。最近，Gutman 提出了若干 VDB 图不变量SO_1, SO_2, SO_3, SO_4, SO_5, SO_6, ，这些不变量可通过几何论证构造 [9]。Gutman 在论文结尾[9] 指出，考察这些基于几何的拓扑指数的性质，并探究它们是否适用于实际应用，将会很有意义。与 Sombor 指数、Zagreb 指数、遗忘拓扑指数和 Randi´c 指数等其他基于度的指数相比，它们展现出不同的数学特征，因此从数学角度看，值得进一步研究。

近年来，人们研究了这些基于几何的不变量的数学和化学性质。在 [12], 中，作者确定了能够使 Sombor 指数 *SO* 达到最大值和最小值的若干类树和连通图。近来，人们获得了具有固定顶点数的连通图类和（分子）树类中 $SO_1, SO_2, SO_3, SO_4, SO_5, SO_6$ （Sombor 指数类图不变量）的一些界，并刻画了使 SO_1, SO_2, SO_3 和 SO_4 [19]达到极值的分子树。研究人员还检验了基于几何的不变量在模拟烷烃热力学性质（如偏心因子、熵和汽化焓）方面的用途，发现它们是有效的预测指标。此外，人们还研究了 Sombor 指数类图不变量的化学适用性，并证明几乎所有这些指数在预测物理化学性质方面都比一些常用指数（例如第一

2020 《数学》学科分类. 05C09, 11A07, 26C15, 26C10.关键词. 基于顶点度的图不变量，分子树，极值。

电子邮箱：basic_milan@yahoo.com（Milan Ba˘si´c）

Zagreb 指数（M_1）、遗忘拓扑指数（F）、连通性指数（R）、和连通性指数（SCI）以及 Sombor 指数（SO））[19]。最近，已在树类中获得不变量 $SO_3, SO_4, SO_5,$ 和 SO_6 的极值；对于不变量 SO_3 和SO_4，也已在连通图类中获得其极值。此外，不变量 SO_5 和 SO_6 的紧确界已被确立 [1]。

受 [19], 中所提出的未解决问题的启发，解决这些问题将有助于更全面地研究 Sombor 指数类图不变量。我们确定了某些 Sombor 指数类图不变量的最大值，并在具有固定顶点数的分子树类和某一特定类的连通图中确定了极值图。具体而言，我们分别确定了具有指定顶点数的分子树集合中SO_5 和SO_6, 的最大值。此外，我们还确定了将图的连接运用于两个给定阶数的特定图所得到的图集合中SO_5 的最大值。我们推测，后一个问题的解也能解决一般问题：在连通图类中寻找SO_5 的最大值及其相应的极值图。总体而言，本文中的证明基于数论、多项式理论与多元函数分析之间的联系，并分为许多不同的情形。试图在连通图集合中确定SO_6 的最大值将更加困难，可能需要考察远多于先前研究中的情形，并运用更复杂的数学技术（例如不等式理论和初等图论）。结论部分所列出的若干未来研究方向，对该问题尚未解决的方面提供了更为详细的认识。

令$d_G(u)$表示图G中顶点u 的度，其中G的顶点集和边集分别记为$V(G)$和$E(G)$。此外，我们将图G的最小度和最大度分别记为 $\delta(G)$和 $\Delta(G)$。这些记号以及以下定义将构成本文使用的主要术语。

定义 1.1. 对于边集为 $E(G)$的连通图 G，定义如下的索博尔指数类顶点度数图不变量，记为 SO_5 和 SO_6：

$$SO_5(G) = 2\pi \sum_{uv\in E(G)} \frac{|\, d_G^2(u) - d_G^2(v)\,|}{\sqrt{2} + 2\sqrt{d_G^2(u) + d_G^2(v)}}$$

$$SO_6(G) = \pi \sum_{uv\in E(G)} \left(\frac{d_G^2(u) - d_G^2(v)}{\sqrt{2} + 2\sqrt{d_G^2(u) + d_G^2(v)}} \right)^2 .$$

设函数f和 1 定义为$f(a, b) = \; |_a \; {}^2 - {}^2 |ba^2+b^2\,'$ 以及~~$1(a, b) =$~~ $f^2(a, b)$。

2. 分子树类中 SO_5 和 SO_6 的最大值

分子树记作MT，是最大度不超过 4 的树。本节将确定连通分子树集合中函数SO_5 和SO_6 的最大值。

定理 命题 2.1. 设 MT 是一个阶为 n（$n \geq 5$）的连通分子树，则有以下不等式 ho ld

$$(i)\ SO_5(MT) \leq \begin{cases} 2\pi\left(\frac{f(1,4)+f(2,4)}{2}n + \frac{3f(1,4)-5f(2,4)}{2}\right), & n \equiv 1 \pmod 4 \\ 2\pi\left(\frac{f(1,4)+f(2,4)}{2}n + f(1,2) - 2f(2,4)\right), & n \equiv 2 \pmod 4 \\ 2\pi\left(\frac{f(1,4)+f(2,4)}{2}n + \frac{2f(3,4)+4f(1,3)-f(1,4)-7f(2,4)}{2}\right), & n \equiv 3 \pmod 4 \\ 2\pi\left(\frac{f(1,4)+f(2,4)}{2}n + 2f(1,4) - 4f(2,4)\right), & n \equiv 0 \pmod 4 \end{cases}$$

$$\textit{(ii)}\ SO_6(MT) \le \begin{cases} \pi\left(\frac{g(1,4)+g(2,4)}{2}n + \frac{3g(1,4)-5g(2,4)}{2}\right), & n \equiv 1 \pmod 4 \\ \pi\left(\frac{g(1,4)+g(2,4)}{2}n + 2g(1,4) - 5f(2,4) + g(3,4)\right), & n \equiv 2 \pmod 4 \\ \pi\left(\frac{g(1,4)+g(2,4)}{2}n + \frac{5g(1,4)-11g(2,4)}{2}\right), & n \equiv 3 \pmod 4 \\ \pi\left(\frac{g(1,4)+g(2,4)}{2}n + 2g(1,4) - 4f(2,4)\right), & n \equiv 0 \pmod 4. \end{cases}$$

证明。 设 n_i 表示分子树中度数等于 i 的顶点数，其中 $1 \le i \le 4$。分子树中端点度数分别为i和j 的边数（其中 $1 \le i$、$j \le 4$）记为 m^{ij}。对于任意一个阶为n 且有 m 条边、最大度为 4 的图，以下等式成立

$$\begin{aligned} &n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = n, \\ &n_1 + 2n_2 + 3n_3 + 4n_4 = 2m, \\ &m_{12} + m_{13} + m_{14} = n_1, \\ &m_{12} + 2m_{22} + m_{23} + m_{24} = 2n_2, \\ &m_{13} + m_{23} + 2m_{33} + m_{34} = 3n_3, \\ &m_{14} + m_{24} + m_{34} + 2m_{44} = 4n_4. \end{aligned} \tag{1}$$

利用$m = n - 1$这一事实，我们观察到，可以用$m_{12}, m_{13}, m_{22}, m_{23}$ 和m_{33}来表示变量$n_1, n_2, n_3, n_4\ m_{14},$ 和m_{24}。

函数 $SO_5(MT)$ 和 $SO_6(MT)$ 可分别表示为 $SO_5(MT) = 2\pi$ X f (d_i, d_j) 和 $SO_6(MT) =$ij∈E(MT)π X 1(d_i, d_j)。利用 f(i, i) $= g$(i, i) $= 0$ 这一事实，这些函数可写为如下形式 ij∈E(MT)

$$\begin{aligned} \frac{SO_5(MT)}{2\pi} &= \frac{n(f(1,4)+f(2,4))}{2} \cdot f(1,4) + \left(\frac{3f(1,4)}{2} - \frac{5f(2,4)}{2}\right) + m_{12}\left(f(1,2) - \frac{3f(1,4)}{2} + \frac{f(2,4)}{2}\right) + \\ &+ m_{13}\left(f(1,3) - \frac{7f(1,4)}{6} + \frac{f(2,4)}{6}\right) - m_{22}\left(\frac{f(1,4)}{2} + \frac{f(2,4)}{2}\right) + \\ &+ m_{23}\left(f(2,3) - \frac{f(1,4)}{6} - \frac{5f(2,4)}{6}\right) + m_{33}\left(\frac{f(1,4)}{6} - \frac{7f(2,4)}{6}\right) + \\ &+ m_{34}\left(f(3,4) + \frac{f(1,4)}{3} - \frac{4f(2,4)}{3}\right) + m_{44}\left(\frac{f(1,4)}{2} - \frac{3f(2,4)}{2}\right). \end{aligned} \tag{2}$$

受仅有非负常数乘以n这一事实的启发，我们证明了，当存在这样的树时，使SO_5 达到最大值的分子树是满足相邻顶点u 和v 的度数条件（d_u,d_v) ∈{(1, 4), (2, 4)}的树。通过分析求解（1）时涉及的模运算，我们可以推断，当树的阶满足$n \equiv 1$ （模 4）时，这些树存在。考虑到式（2）中乘以m^{ij} 的负常数的绝对值，可以进一步进行模运算分析，从而证明，使SO_5 达到最大值的树仅包含（1, 4）和（2, 4）边，并且当$n \equiv 2$（模 4）时恰有一条（1, 2）边；当$n \equiv 3$ （模 4）时恰有一条（3, 4）边和两条（1, 3）边；当$n \equiv 0$（模 4）时恰有一条（4, 4）边。

同样地，我们可以证明，当考察仅包含类型为 (1, 4) 和 (2, 4) 的边的树时，SO_6 取得最大值，具体而言，当 $n \equiv 1 \pmod 4$ 时成立。对于其余情形，最优树除包含边 (1, 4) 和 (2, 4) 外，还包含一条 (3, 4) 边（当 $n \equiv 2 \pmod 4$ 时）、恰好两条 (4, 4) 边（当 $n \equiv 3 \pmod 4$ 时），以及恰好一条 (4, 4) 边（当 $n \equiv 0 \pmod 4$ 时）。

在上述所有情形中，(1,4) 边和 (2,4) 边的具体数量可通过方程组 (1) 计算得出。

□

3. 一类连通图中SO_5的最大值

本节分析在所有阶为 n 的连通图中，哪些图可能达到最大 SO_5。

假设关于 SO_5 最大值的极值图，其度序列仅有两个不同的值，即 $\delta(G) = \delta$ 和 $\Delta(G) = \Delta$。我们注意到，度数为 Δ 的顶点在G中构成一个大小为l 的团作为子图，其中l 表示度数为 Δ的顶点数，而度数为 δ 的顶点构成一个独立集。如果情况相反，即度数为 Δ的两个顶点之间不存在边，例如u 和v，那么在它们之间添加一条边后，我们将得到一个图G_1。此时，我们有

$$SO_5(G_1) - SO_5(G) = 2\pi \sum_{uw\in E(G)} (f(\Delta+1, d_w) - f(\Delta, d_w)) + \sum_{vw\in E(G)} (f(\Delta+1, d_w) - f(\Delta, d_w) > 0),$$

这将导致矛盾。类似地，如果两个度为 Δ 的顶点之间存在一条边，例如 u 和v，那么移除这条边后，我们将得到一个图G_2，其中

$$SO_5(G_2) - SO_5(G) = 2\pi \sum_{uw\in E(G)} (f(\delta, d_w) - f(\delta-1, d_w)) + \sum_{vw\in E(G)} (f(\delta-1, d_w) - f(\delta, d_w) > 0),$$

这再次与我们的假设矛盾。因此，我们推断，图 G 中度数为 Δ 和 δ 的顶点之间的边数等于 $\delta(n - l)$，这意味着

$$SO_5(G) = 2\pi \cdot \delta(n-l) f(\delta, \Delta) \le 2\pi \cdot \delta(n-\delta) f(\delta, n-1)$$

因为 $\delta \le l$（所有度数为 δ 的顶点的邻居都属于度数为 Δ 的顶点）。

因此，我们在阶为 n 的图中寻找极值图，记作 $M_{n,\ k}$。这类图由阶为 $n-k$ 的空图（记作 K_{n-k}）与阶为 k 的完全图作图的连接构造而成，其中 $1 \le k \le n$。显然，该图包含度数为 k 或 $n-1$ 的顶点，其中 $n_k = n - k$ 且 $n_{n-1} = k$。注意，

$$SO_5(M_{n,k}) = 2\pi \cdot k(n-k) f(k, n-1) = 2\pi \cdot k(n-k) \cdot \frac{(n-1)^2 - k^2}{\sqrt{2} + 2\sqrt{(n-1)^2 + k^2}}. \tag{3}$$

定理 3.1。设 G 是一个阶为 n（$n > 2$）的连通图，满足对每个顶点 $v \in V(G)$，都有 $d(v) \in \{\delta(G), \Delta(G)\}$，则下列不等式成立

$$SO_5(G) \le \max_{i\in\{\lfloor c_0 n\rfloor - 1, \lfloor c_0 n\rfloor, \lceil c_0 n\rceil\}} SO_5(M_{n,i})$$

其中，c 由下式给出

$$c_0 = -\frac{1}{12}\sqrt{4\sqrt[3]{6\sqrt{7422}+505} - \frac{92}{\sqrt[3]{6\sqrt{7422}+505}} - 31} - \frac{1}{12} + \frac{1}{2}\sqrt{-\frac{1}{9}\sqrt[3]{6\sqrt{7422}+505} - \frac{31}{18} + \frac{23}{9\sqrt[3]{6\sqrt{7422}+505}} + \frac{25}{18\sqrt{4\sqrt[3]{6\sqrt{7422}+505} - \frac{92}{\sqrt[3]{6\sqrt{7422}+505}} - 31}}}.$$

证明。 根据（3），可得

$$SO_5(G) \leq 2\pi \cdot \delta(n-\delta) \cdot \frac{(n-1)^2-\delta^2}{\sqrt{2}+2\sqrt{(n-1)^2+\delta^2}} = 2\pi \cdot F(\delta).$$

由于$n > 2$ 为固定值，不等式右侧是一个单变量函数，将在证明的其余部分进行分析。函数$F(\delta)$在以下某些情形下取得最大值： $\delta = 1$，或 $\delta = n-1$，或$F'(\delta) = 0$。

情形 $\delta = 1$ 等价于G 是星图S_n。此时，函数的值等于$SO_5(S_n) = 2\pi F(1) = 2\pi \frac{n^3-3n^2+2n\sqrt{2}+2\sqrt{n^2-2n+2}}{}$。

当 $\delta = n-1$ 时，等价于G 是完全图K_n。容易计算得出$SO_5(K_n) = F(n-1) = 0$，这表示F的最小值。

为了求出$F(\delta)$的最大值，需要确定其驻点。显然，$F(\delta)$的一阶导数等于

$$\begin{aligned}
F'(\delta) &= \frac{((n-2\delta)((n-1)^2-\delta^2)+(n\delta-\delta^2)(-2\delta))(\sqrt{2}+2\sqrt{(n-1)^2+\delta^2})}{(\sqrt{2}+2\sqrt{(n-1)^2+\delta^2})^2} - \\
&- \frac{(n\delta-\delta^2)((n-1)^2-\delta^2)\cdot\frac{2\delta}{\sqrt{\delta^2+(n-1)^2}}}{(\sqrt{2}+2\sqrt{(n-1)^2+\delta^2})^2} \\
&= -\frac{2(n-\delta)\delta^2}{2\sqrt{\delta^2+(n-1)^2}+\sqrt{2}} - \frac{\delta\cdot\left((n-1)^2-\delta^2\right)}{2\sqrt{\delta^2+(n-1)^2}+\sqrt{2}} + \\
&+ \frac{(n-\delta)\left((n-1)^2-\delta^2\right)}{2\sqrt{\delta^2+(n-1)^2}+\sqrt{2}} - \frac{2(n-\delta)\delta^2\cdot\left((n-1)^2-\delta^2\right)}{\sqrt{\delta^2+(n-1)^2}\left(2\sqrt{\delta^2+(n-1)^2}+\sqrt{2}\right)^2}.
\end{aligned}$$

经过简要计算，一阶导数的分子等于

$$\begin{aligned}
T(\delta) &= 6\delta^5-4\delta^4 n+6\delta^3(n-1)^2+\delta^2\left(-6n^3+12n^2-6n\right)+ \\
&+ \delta\left(-4n^4+16n^3-24n^2+16n-4\right)+2n^5-8n^4+12n^3-8n^2+2n+ \\
&+ \sqrt{2\delta^2+2(n-1)^2}\cdot(4\delta^3-3\delta^2 n-2\delta(n-1)^2+n(n-1)^2).
\end{aligned}$$

我们的目标是证明它在区间 $[1,n-1]$ 内有唯一零点。对于某个 $c \in \mathrm{R}$，函数 $T(cn)$ 等于

$$\begin{aligned}
T(cn) &= n^5\left(6c^5-4c^4+6c^3-6c^2-4c+2\right)+n^4\left(-12c^3+12c^2+16c-8\right)+ \\
&+ n^3\left((4c^3-3c^2-2c+1)\sqrt{n^2(2c^2+2)-4n+2}+6c^3-6c^2-24c+12\right)+ \\
&+ n^2\left(4c\sqrt{n^2(2c^2+2)-4n+2}+16c-2\sqrt{n^2(2c^2+2)-4n+2}-8\right)+ \\
&+ n\left(-2c\sqrt{n^2(2c^2+2)-4n+2}-4c+\sqrt{n^2(2c^2+2)-4n+2}+2\right).
\end{aligned}$$

为了确定首项系数为零时 $c \in \mathrm{R}$ 的取值，我们需要求多项式 $6c^5-4c^4+6c^3-6c^2-4c+2=0$ 的根。可以看出，$c=1$ 是这个五次多项式的一个根。其余四个根中，两个是复数，一个是负根，另一个是正根，记作 c_0，，约等于 0.365046124400441（其精确值见定理的断言）。

我们证明，属于区间 $[1,n-1]$ 的 $T(\delta)$ 的一个零点实际上落在区间 $(c_0n-0.5,c_0n)$ 内。在证明的其余部分，我们将使用数值表示法，而非精确形式。这样做可提高可读性，因为在大多数情况下，我们只需要知道这些值的符号，而不需要其精确形式。

我们可以计算函数$T(c_0n)$和$T(c_0n-0.5)$的值

$$\begin{aligned}
T(c_0n) &= -1.144n^4+n^3\left(0.129\sqrt{0.567n^2-n+\frac{1}{2}}+2.731\right)+\\
&+ n^2\left(-1.08\cdot\sqrt{0.567n^2-n+\frac{1}{2}}-2.16\right)+n\left(0.54\sqrt{0.567n^2-n+\frac{1}{2}}+0.54\right)\\
T(c_0n-0.5) &= 1.97n^4+n^3\left(-7.178+0.099\cdot\sqrt{2}\sqrt{0.479n^2-n+0.528}\right)+\\
&+ n^2\left(9.527+1.162\sqrt{2}\cdot\sqrt{0.479n^2-n+0.528}\right)+\\
&+ n\left(-5.383-2.129\sqrt{2}\cdot\sqrt{0.479n^2-n+0.528}\right)+\\
&+ 0.768\sqrt{2}\sqrt{0.479n^2-n+0.528}+1.063.
\end{aligned}$$

现在，我们证明，对于 $n\geq 3$，$T(c_0n)<0$。显然，乘以 n^4 的因子小于-1.14，而乘以 n^3 的因子小于 $0.14n+2.74$。另一方面，乘以 n^2 的因子小于 -2，而乘以 n 的因子小于 $n+0.54$。这意味着 $T(c_0n)<-1.14n^4+n^3(0.14n+2.74)-2n^2+n(n+0.54)$。注意，对于 $n\geq 3$，有$-1.14n^4+0.14n^4+2.74n^3<0$，且 $-2n^2+n^2+0.54n<0$，这意味着 $T(c_0n)<0$。

我们还证明了，当 n_0 时，$T(c_0n-0.5)>0$。显然，乘以 n^4 的因子大于 1.96，而乘以 n^3 的因子大于 -7.2。另一方面，乘以 n^2 的因子大于 9.5，乘以 n 的因子大于 $-2.13\sqrt{2}n-5.4$。由于其余加项显然均为正数，因此我们可以得出结论：$T(c_0n-0.5)>1.96n^4-7.2n^3+9.5n^2-2.13\sqrt{2}n^2-5.4n$。对于 $n\geq 4$，有 $1.96n^4-7.2n^3>0$，且 $9.5n^2-2.13\sqrt{2}n^2-5.4n>0$。通过直接计算，可以得出 $T(c_0n-0.5)>0$，当 $n=3$ 时成立。这意味着，当 $n\geq 3$ 时，$T(c_0n-0.5)>0$。

由于T是连续的，我们确认$T(\delta)$在区间（$c_0n-0.5$，c_0n）内存在一个零点，并且在证明的后续部分中，我们将证明所有根都存在于定义域 $[1,n-1]$上的该区间内。

现在定义如下两个多项式：$T_l(\delta)=T(\delta)-(q2\delta^2-2(n-1)^2+p0^2+(n-1)^2)\cdot(4\delta^3-3\delta^2n-2\delta(n-1)^2+n(n-1)^2)$，以及 $T_u(\delta)=T(\delta)-(q2\delta^2-2(n-1)^2+p2(n-1)^2)\cdot(4\delta^3-3\delta^2n-2\delta(n-1)^2+n(n-1)^2)$。由于 $p0^2+(n-1)^2\leq p\delta^2+(n-1)^2\leq p(n-1)^2+(n-1)^2$，且 $4\delta^3-3\delta^2n-2\delta(n-1)^2+n(n-1)^2\geq 0$，对于 $n>2$，~~显然当 $2\leq\delta\leq n-1$ 时，有 $T_l(\delta)\leq T(\delta)\leq T_u(\delta)$。~~这些多项式的精确形式

$T_l(\delta)$ 和 $T_u(\delta)$ 如下所示

$$\begin{aligned}
T_l(\delta) &= 6\delta^5 - 4\delta^4 n + 6\delta^3 (n-1)^2 + \delta^2\left(-6n^3 + 12n^2 - 6n\right) + \\
&+ \delta\left(-4n^4 + 16n^3 - 24n^2 + 16n - 4\right) + 2n^5 - 8n^4 + 12n^3 - 8n^2 + 2n + \\
&+ \sqrt{2\cdot 0^2 + 2(n-1)^2}\cdot(4\delta^3 - 3\delta^2 n - 2\delta(n-1)^2 + n(n-1)^2) \\
&= 6\delta^5 - 4\delta^4 n + \delta^3\left(6n^2 - 12n + 4\sqrt{2}n - 4\sqrt{2} + 6\right) + \\
&+ \delta^2\left(-6n^3 - 3\sqrt{2}n^2 + 12n^2 - 6n + 3\sqrt{2}n\right) + \\
&+ \delta\left(-4n^4 - 2\sqrt{2}n^3 + 16n^3 - 24n^2 + 6\sqrt{2}n^2 - 6\sqrt{2}n + 16n - 4 + 2\sqrt{2}\right) + \\
&+ 2n^5 - 8n^4 + \sqrt{2}n^4 - 3\sqrt{2}n^3 + 12n^3 - 8n^2 + 3\sqrt{2}n^2 - \sqrt{2}n + 2n \\
T_u(\delta) &= 6\delta^5 - 4\delta^4 n + 6\delta^3 (n-1)^2 + \delta^2\left(-6n^3 + 12n^2 - 6n\right) + \\
&+ \delta\left(-4n^4 + 16n^3 - 24n^2 + 16n - 4\right) + 2n^5 - 8n^4 + 12n^3 - 8n^2 + 2n + \\
&+ \sqrt{2\cdot(n-1)^2 + 2(n-1)^2}\cdot(4\delta^3 - 3\delta^2 n - 2\delta(n-1)^2 + n(n-1)^2) \\
&= 6\delta^5 - 4\delta^4 n + \delta^3\left(6n^2 - 4n - 2\right) + \delta^2\left(-6n^3 + 6n^2\right) + \\
&+ \delta\left(-4n^4 + 12n^3 - 12n^2 + 4n\right) + 2n^5 - 6n^4 + 6n^3 - 2n^2.
\end{aligned}$$

类似于我们对 $T(\delta)$ 所做的推导，可以得到 $T_l(c_0 n) < 0$、$T_u(c_0 n) < 0$、$T_l(c_0 n - 0.5) > 0$，以及 $T_u(c_0 n - 0.5) > 0$，其中 $n > 2$。这意味着多项式 $T_l(\delta)$ 和 $T_u(\delta)$ 在区间 $(c_0 n - 0.5, c_0 n)$ 内存在零点。现在，我们旨在证明，在区间 $[1, n-1]$ 内，多项式 $T_l(\delta)$ 和 $T_u(\delta)$ 的零点仅有这些。

多项式 $T_l(c_0 n)$ 和 $T_u(c_0 n)$ 的数值表示如下

$$\begin{aligned}
T_l(c_0 n) &= n^4\left(-1.144 + 0.065\sqrt{2}\right) + n^3\left(2.731 - 0.605\sqrt{2}\right) + n^2\left(-2.159 + 0.81\sqrt{2}\right) + n\left(0.54 - 0.27\sqrt{2}\right) \\
T_u(c_0 n) &= -1.014n^4 + 1.522n^3 - 0.54n^2.
\end{aligned}$$

对于 $n > 2$，有 $n^4(-1.144 + 0.065\sqrt{2}) + n^3(2.731 - 0.605\sqrt{2}) < 0$ 且 $n^2(-2.159 + 0.81\sqrt{2}) + n(0.54 - 0.27\sqrt{2}) < 0$。因此，对于 $n > 2$，有 $T_l(c_0 n) < 0$。另一方面，通过分析二次方程 $-1.014n^2 + 1.522n - 0.54$，容易看出，对于 $n > 2$，$T_u(c_0 n) < 0$。

多项式 $T_l(c_0 n - 0.5)$ 和 $T_u(c_0 n - 0.5)$ 可用数值表示如下

$$\begin{aligned}
T_l(c_0 n - 0.5) &= n^4\left(0.065\sqrt{2} + 1.97\right) + n^3\left(-7.178 + 0.691\sqrt{2}\right) + n^2\left(9.527 - 2.141\sqrt{2}\right) + \\
&+ n\left(-5.383 + 1.885\sqrt{2}\right) - 0.5\sqrt{2} + 1.0625 \\
T_u(c_0 n - 0.5) &= 2.099n^4 - 5.796n^3 + 5.245n^2 - 1.613n + 0.0625.
\end{aligned}$$

对于 $n \geq 4$，成立 $n^4(0.065\sqrt{2} + 1.97) + n^3(-7.178 + 0.691\sqrt{2}) > 0$ 且 $n^2(9.527 - 2.141\sqrt{2}) + n(-5.383 + 1.885\sqrt{2}) - 0.5\sqrt{2} + 1.0625 > 0$。可以计算出，对于 $n = 3$，$T_l(c_0 n - 0.5) > 0$。因此，对于 $n > 2$，有 $T_l(c_0 n - 0.5) > 0$。另一方面，我们可以分析多项式 $T_u(c_0 n - 0.5)$ 的加项。对于 $n \geq 3$，成立 $2.099n^4 - 5.796n^3 > 0$ 且 $5.245n^2 - 1.613n > 0$，这意味着对于 $n > 2$，$T_u(c_0 n - 0.5) > 0$。

现在，我们继续分析多项式 $T_l(\delta)$ 和 $T_u(\delta)$。T_l 和 T_u 的一阶导数

等于

$$\begin{aligned} T_l'(\delta) &= 30\delta^4 - 16\delta^3 n + \delta^2\left(18n^2 - 36n + 12\sqrt{2}n - 12\sqrt{2} + 18\right) + \\ &+ \delta\left(-12n^3 - 6\sqrt{2}n^2 + 24n^2 - 12n + 6\sqrt{2}n\right) - \\ &- 4n^4 - 2\sqrt{2}n^3 + 16n^3 - 24n^2 + 6\sqrt{2}n^2 - 6\sqrt{2}n + 16n - 4 + 2\sqrt{2} \\ T_u'(\delta) &= 30\delta^4 - 16\delta^3 n + \delta^2\left(18n^2 - 12n - 6\right) + \delta\left(-12n^3 + 12n^2\right) - 4n^4 + 12n^3 - 12n^2 + 4n. \end{aligned}$$

多项式$T'_l(\delta)$和$T'_u(\delta)$中相邻系数之间的符号变化次数均为 3，其中$n > 2$。根据笛卡尔符号法则，可以得出多项式T'_l和T'_u的正实根数量为 1 或 3。假设这些多项式有三个正实根，则四个根均为实数。对具有实根的多项式T'_l和T'_u应用高斯-卢卡斯定理可知，它们的导数有三个实根。因此，我们将考察多项式T_l和T_u的二阶导数，其表达式为

$$\begin{aligned} T_l''(\delta) &= 120\delta^3 - 48\delta^2 n + \delta\left(36n^2 - 72n + 24\sqrt{2}n - 24\sqrt{2} + 36\right) - 12n^3 - 6\sqrt{2}n^2 + 24n^2 - 12n + 6\sqrt{2}n \\ T_u''(\delta) &= 120\delta^3 - 48\delta^2 n + \delta\left(36n^2 - 24n - 12\right) - 12n^3 + 12n^2. \end{aligned}$$

考察这些三次多项式D_l和D_u的判别式，其表达式为

$$\begin{aligned} D_l &= -35914752n^6 - 47195136\sqrt{2}n^5 + 177831936n^5 - 445699584n^4 + \\ &+ 225856512\sqrt{2}n^4 - 460422144\sqrt{2}n^3 + 710581248n^3 - 697932288n^2 + \\ &+ 487461888\sqrt{2}n^2 - 263761920\sqrt{2}n + 373248000n - 82114560 + 58060800\sqrt{2} \\ D_u &= -35914752n^6 + 83441664n^5 - 49185792n^4 - 6967296n^3 + 2820096n^2 + 4976640n + 829440。 \end{aligned}$$

由此可推得，当 $n > 2$ 时，它们为负数。实际上，我们注意到，当 $n \geq 4$ 时，以下不等式成立：$-35914752n^6 - 47195136\sqrt{2}n^5 + 177831936n^5 < 0$, $-445699584n^4 + 225856512\sqrt{2}n^4 - 460422144\sqrt{2}n^3 + 710581248n^3 < 0$, $-697932288n^2 + 487461888\sqrt{2}n^2 - 263761920\sqrt{2}n + 373248000n < 0$，且 $-82114560 + 58060800\sqrt{2} < 0$。当 $n = 3$ 时，通过直接计算可知 $D_l < 0$，因此 $n \geq 3$。另一方面，当 $n \geq 4$ 时，有 $-35914752n^6 + 83441664n^5 < 0$, $-2820096n^4 + 2820096n^2 < 0$, $-4976640n^4 + 4976640n < 0$，且 $-829440n^4 + 829440 < 0$。利用以下事实：$-2820096n^4 - 4976640n^4 - 829440n^4 > -49185792n^4$, ，将这些不等式两边对应相加，可得$-35914752n^6 + 83441664n^5 - 2820096n^4 + 2820096n^2 - 4976640n^4 + 4976640n - 829440n^4 + 829440 < 0$，其中 $n > 3$，因此当 $n > 3$ 时，$D_u < 0$。当 $n = 3$ 时，通过直接计算可得 $D_u < 0$。当 $n > 2$ 时，D_l 和 D_u 均为负数；又由于 $T''_l(\delta)$ 和 $T''_u(\delta)$ 的系数均为实数，因此存在两个非实复根。这与多项式 $T'_l(\delta)$ 和 $T'_u(\delta)$ 各有四个实根的假设矛盾，由此可知，这两个多项式恰有一个正实根。

此外，由于当 \(n\) > 2 时，$T'_l(0) < 0$ 且 $T'_u(0) < 0$，这表明多项式 T_l 和 T_u 从点 $\delta = 0$ 开始先递减，直至达到其导数的根，随后在定义域的其余部分递增，因此，T_l 和 T_u 唯一的驻点均为局部极小值。

假设多项式 T_l 的唯一驻点 x_0 位于区间 $(0, c_0 n - 0.5)$ 内。由于 x_0 是局部极小值，这意味着多项式 T_l 在区间 $(c_0 n - 0.5, n - 1)$ 内递增。因此，$T_l(c_0 n - 0.5) < T_l(c_0 n)$，这与我们此前已证明的 $T_l(c_0 n - 0.5) < 0$ 且 $T_l(c_0 n) > 0$ 相矛盾。由于局部极小值 x_0 属于区间 $(c_0 n - 0.5, n - 1])$，我们可以推断多项式 $T_l(\delta)$ 在区间 $(0, c_0 n - 0.5)$ 内递减。因此，

$T(\delta) \geq T_l(\delta) \geq T_l(c_0 n - 0.5) > 0$，对于 $\delta \in (0, c_0 n - 0.5)$，这表明函数$T(\delta)$ 在此区间内没有实零点。

此外，通过计算可知，$T_u(n-1) = -8n^4 + 28n^3 - 36n^2 + 20n - 4$，当 $n > 2$ 时该值为负。多项式 $T_u(\delta)$ 的导数只有一个正实根，对应于局部最小值。因此，我们得出结论：对于 $\delta \in (c_0 n, n-1]$，最大值出现在区间的端点处。由于对于 $\delta \in (c_0 n, n-1]$，有 $0 > \max T_u(n-1)$，$T_u(c_0 n) \geq T_u(\delta) \geq T(\delta)$，我们推断函数 $T(\delta)$ 在此区间内没有零点。

区间 $(c_0 n - 0.5, c_0 n)$ 包含函数 $T(\delta)$ 在定义域 $\delta \in (1, n)$ 内的所有零点。由于顶点度数为整数，能够取得最大值的唯一潜在候选项是$\lfloor c_0 n \rfloor - 1$、$\lfloor c_0 n \rfloor$和$\lceil c_0 n \rceil$。

令k 为这三个达到最大值的数值之一。对于$n > 2$，可以计算得$SO_5(M_{n,k}) \geq SO_5(S_n)$，其中$S_n$ 是一个阶为n 的星图，等号仅在$n = 3$ 和$n = 4$时成立。

□

假设图 G 使函数 SO_5 取得最大值，且其度序列中有三个不同的值，最小度为 δ。我们可以观察到

$$SO_5(G) = 2\pi \sum_{(i,j)\in E(G)} f(d(i), d(j)) \leq 2\pi \sum_{1\leq i<j\leq n-1} f(d(i), d(j)) \leq 2\pi \max\left(\sum_{1\leq i<j\leq n-1} f(x_i, x_j)\right),$$

其中 $\delta \leq x_i \leq n-1$。

$F(x_1, \ldots, x_n)$ 的偏导数 $= 2\pi$ P $_{1\leq i<j\leq n-1}$ $\frac{|}{-x^2{}_i}$ $\frac{}{\sqrt{2}+2}$ $\frac{-|x^2{}_j}{{}^2}$ $\frac{x_i+x^2{}_j}{\sqrt{}}$ 等于

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = 2\pi \cdot \sum_{ij\in E(G)} \frac{\frac{|x_i^2 - x_j^2|}{x_i^2 - x_j^2} \cdot 2x_i(\sqrt{2} + 2\sqrt{x_i^2 + x_j^2}) + \frac{|x_i^2 - x_j^2| \cdot 2x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}}{2 + 4(x_i^2 + x_j^2) + 4\sqrt{2x_i^2 + 2x_j^2}}.$$

显然，唯一的驻点是 $(x_1, \ldots, x_n)$，其中 $x_1 = \cdots = x_n$，且函数 F 的值为零，这表明这些驻点对应于局部（也是全局）最小值。另一方面，为了分析函数的最大值，我们只需要考虑作为定义域边界点的 x_i 值。考虑度序列中具有三个不同值的图，边界点 $(x_1, \ldots, x_n)$ 的坐标 x_i 可以取值 δ、$n-2$ 或 $n-1$。由于函数 F 在其中某些点处达到最大值，这并不意味着存在一个图 G，使其顶点的度属于集合 $\{\delta, n-2, n-1\}$。然而，函数 F 在其中某些点处达到最大值这一事实，并不能推断出存在一个图 G，其顶点的度属于集合 $\{\delta, n-2, n-1\}$。因此，在本节余下部分，我们将研究具有度序列 $(n-1, \ldots, n-1$ ___ $\{z\}$ 的图。

$, n-2$、.....、$n-2$ ___ $\{z\}$, δ、.....、δ ___ $\{z\}$ ），并说明确定

l k $n-k-l$

该类图中 SO_5 的最大值的复杂性。此外，基于计算机搜索测试，我们得出结论：对于度序列包含三个不同值的图类，关于 SO_5 最大值的极值图，应在度序列值属于集合 $\{\delta、n-2、n-1\}$ 的子集中寻找。

首先，我们可以采用本节前面使用的相同方法证明：在 G 中，度数为 $n-1$ 的顶点构成一个大小为 l 的团，而度数为 δ 的顶点构成一个独立集。度数为 $n-2$ 的顶点与图中除一个顶点以外的所有顶点相连；这个顶点的度数要么为 $n-2$，要么为 δ。设度数为 $n-2$ 且未与一个度数为 δ 的顶点相连的顶点数为 s，其中 $0 \leq s \leq k$。对于一个任意的度数为 δ 的顶点，设它在这 s 个顶点中的邻居数为 δ_1。连接度数为 δ 的顶点与 $n-2$ 度数的 s 个顶点的边数等于 $(n-k-l)\delta_1$。另一方面，由于

这 s 个顶点中的每个顶点都有 $n-k-l-1$ 个邻居，这些邻居来自 $n-k-l$ 个度数为 δ 的顶点，因此这 s 个顶点与 $n-k-l$ 个度数为 δ 的顶点之间相连的边总数为 $s(n-k-l-1)$，这意味着

$$(n-k-l)\delta_1 = s(n-k-l-1).$$

根据该方程，我们推导出以下几种情形：要么 $n-k-l$ 整除 s，且 $n-k-l-1$ dividesδ_1，要么 $\delta_1 = s = 0$。在第一种情形下，我们可以得出 $s = n-k-l$ 且 $\delta_1 = n-k-l-1$，因为我们可以在任意一个属于含有 s 个顶点的集合、度为 $n-2$ 的顶点与含有 $n-k-l$ 个度为 δ的顶点的集合中一个与之不相连的顶点之间建立双射。将 s 和 δ_1 代入最后一个方程，其中 $\delta = l + (k-s) + \delta_1$，最终得到 $\delta = k + l - 1$。鉴于 G 的度序列仅包含三个不同的值，我们发现

$$SO_5(G) = m_{n-1,n-2}f(n-1,n-2) + m_{n-1,\delta}f(n-1,\delta) + m_{n-2,\delta}f(n-2,\delta). \tag{4}$$

将$k = \delta - l + 1$ 代入关于$SO5$ 的方程，我们得到

$$SO_5(G_1) = (\delta-l+1)lf(n-1,n-2) + (n-\delta-1)lf(n-1,\delta) + (n-\delta-1)(\delta-l)f(n-2,\delta).$$

在第二种情形中，当 $\delta_1 = s = 0$ 时，显然有 $\delta = k+l$，这意味着 $k = \delta - l$。将 k 代入式（4），得到

$$SO_5(G_2) = (\delta-l)lf(n-1,n-2) + (n-\delta)lf(n-1,\delta) + (n-\delta)(\delta-l)f(n-2,\delta).$$

通过从 $SO_5(G_2)$ 中减去 $SO_5(G_1)$，我们得到우우우우우

$$SO_5(G_1) - SO_5(G_2) = lf(n-1,n-2) - lf(n-1,\delta) - (\delta-l)f(n-2,\delta) < 0,$$

由此可得，SO_5 的最大值应当在满足第二种情形条件的图类中寻找。

我们可以观察到，$SO_5(G_2)$ 表示一个二元函数，记为 $G(\delta,l)$。$G(\delta,l)$ 的偏导数为

$$\begin{aligned}\frac{\partial G}{\partial \delta} &= lf(n-1,n-2) - l\frac{\partial(\delta\cdot f(n-1,\delta))}{\partial\delta} - l\frac{\partial((n-\delta)\cdot f(n-2,\delta))}{\partial\delta} + \frac{\partial(\delta(n-\delta)\cdot f(n-2,\delta))}{\partial\delta}\\ \frac{\partial G}{\partial l} &= -2lf(n-1,n-2) + (n-\delta)f(n-1,\delta) - (n-\delta)f(n-2,\delta).\end{aligned}$$

显然，确定$G(\delta,l)$的驻点，远比求出函数$F(\delta) = \delta(n-\delta)\cdot f(n-1,\delta)$的驻点更具挑战性；而后者是前一个定理中的关键步骤。若将该问题视为带约束 $2 \le \delta \le n-3$ 和 $1 \le l \le \delta - 2$的优化问题，问题就会变得复杂得多。根据计算实验，我们观察到，在这些约束下，函数$G(\delta,l)$的最大值（其中 δ 和l 为实数）低于前一个定理所得的$F(\delta)$的最大值，其中 $2 \le \delta \le n-2$ 为整数。因此，我们推测$F(\delta)$的最大值对应于整个连通图类中SO_5 的最大值，进一步研究留待未来开展。

4. 总结

本文确定了顶点数给定的分子树集合中SO_5 和SO_6 的最大值。此外，我们还确定了通过对两个阶给定的特定图应用图的连接运算所得到的图集合中SO_5 的最大值。本文给出的证明通常基于数论、多项式理论与多变量函数分析之间的联系，涉及许多不同的情形。要完整地分类使SO_5 达到最大值的连通图集合，难度会大得多，因为这需要考察更复杂的多变量函数，而且涉及的情形可能多得多。值得注意的是，在分析单变量函数时，问题可归结为分析五次多项式，而这类多项式通常并非在所有情形下都有解。寻找SO_6的最大值则更加复杂；尽管在处理单变量函数时，该问题可以归结为分析十次多项式，但我们将其留待未来研究。

参考文献

[1] A. Ali, I. ˘Z. Milovanovi´c, M. A. Albalahi, M. A. Alanazi, E. A. Hamza, 《关于四种 Sombor 指数类图不变量的若干未解决问题的解答》, MATCH 数学与计算化学通讯 90 (2023) 505–512。[2] S. Alikhani, N. Ghanbari, 《聚合物的 Sombor 指数》, 数学与计算化学通讯 86 (2021) 715–728。[3] S. Amin, A. Ur Rehman Virk, M. A. Rehman, N. A. Shah, 《基于 Sombor 指数的树枝状大分子代数分析》, 《化学杂志》(2021)。[4] Y. Chen, H. Hua, 《Sombor 指数与 Merrifield-Simmons 指数之间的关系》, Filomat 37 (2023), 4785-4794。[5] R. Cruz, J. Rada, 《单圈图和双圈图中 Sombor 指数的极值》, 《数学化学杂志》59 (2021) 1098–1116。[6] K. C. Das, A. S. Cevik, I. N. Cangul, Y. Shang, 《论 Sombor 指数》, 《对称性》13 (2021)。[7] X. Fang, L. You, H. Liu, 《随机六边形链、亚苯基链中 Sombor 指数的期望值及若干化学图的 Sombor 指数》, 《国际量子化学杂志》121 (2021)。[8] I. Gutman, 《Sombor 指数的 TEMO 定理》, 《离散应用数学开放期刊》5 (2022) 25–28。[9] I. Gutman, 《Sombor 指数：回归几何》, 《离散应用数学开放期刊》5 (2022) 1–5。[10] B. Horoldagva, C. Xu, 《论图的 Sombor 指数》, 数学与计算化学通讯 86 (2021) 703–713。[11] H. Liu, 《关于 Sombor 指数的一个未解决问题的证明》, 《应用数学与计算》69 (2023) 2465—2471。[12] H. Liu, 《给定直径的单圈图的 Sombor 指数极值问题》, 《计算与应用数学》41 (2022)。[13] H. Liu, H. Chen, Q. Xiao, X. Fang, Z. Tang, 《化学图的 Sombor 指数及其在苯型烃沸点研究中的应用》, 《国际量子化学杂志》121 (2021)。[14] W. Ning, Y. Song, and K. Wang, 《进一步研究图的 Sombor 指数》, 《数学》10 (2022)。[15] M. R. Oboudi, 《论具有整数 Sombor 指数的图》, 《应用数学与计算》69 (2023) 941—952。[16] J. Rada, J. M. Rodr´ıguez, J. M. Sigarreta, 《Sombor 指数的一般性质》, 《离散应用数学》299 (2021) 87–97。[17] I. Red˘zepovi´c, 《Sombor 指数的化学适用性》, 《塞尔维亚化学会志》86 (2021) 445–457。[18] Y. Shang, 《单纯网络的 Sombor 指数与度相关性质》, 《应用数学与计算》419 (2022)。[19] Z. Tang, Q. Li, H. Deng, 《具有 Sombor 指数类图不变量极值的树》, MATCH 数学与计算化学通讯 90 (2023) 203–222。[20] S. O. ¨Unal, 《单生成半群图的张量积和笛卡尔积上的 Sombor 指数》, 《对称性》14 (2022)。[21] Z. Wang, Y. Mao, Y. Li, B. Furtula, 《论 Sombor 指数与其他基于度的指数之间的关系》, 《应用数学与计算》68 (2022) 1–17。