arXiv:2602.01262v1 [math.CO] 1 Feb 2026

最大度为 6 时具有最大 σ-不规则性的树

米兰·巴希´奇[a], *

[a]塞尔维亚尼什的尼什大学

摘要

σ-不规则性指数 $\sigma(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d_G(u) - d_G(v))^2$ 衡量图的边上总的度不平衡。我们研究固定阶为 n 、最大度有界为 $\Delta = 6$的树类中 $\sigma(T)$ 的极值问题。借助惩罚函数框架，并结合握手恒等式与同余论证，我们确定了 n 模6每个剩余类对应的 $\sigma(T)$ 的精确最大值，并证明惩罚函数的可能最小值为 0，10，20，22，30，和 40。对于每种情况，我们根据度数计数和边重数，完整刻画了所有达到最大值的树。在六个剩余类中的五个中，所有极值树仅包含度数为 1，2，和 6 的顶点；而对于 $n \equiv 3$ （模 6），还会出现一个涉及度数为 3 的顶点的额外例外族。这些结果拓展了此前关于较小度界下 σ-不规则性的研究，并展现了随着最大度增大，该问题的组合复杂性迅速增长。

关键词： σ-不规则性；极值树；最大度；基于度的指标；图优化*2000 MSC*： 05C09, 11A07, 90C27, 90C05

1. 引言

如果一个图的所有顶点并非具有相同的度，则称其为不规则图。长期以来，在理论与应用图论中，人们一直对量化图偏离规则性的程度感兴趣

*通讯作者电子邮箱： basic_milan@yahoo.com（Milan Ba˘si´c）

提交至《组合优化杂志》的预印本 *2026*年*2*月*3*日

。最早用于衡量度异质性的指标之一是 Snijders 提出的度方差 [13]。后来，Albertson [3] 引入了一种重要的不规则性指数

$$\mathrm{irr}(G) \;=\; \sum_{uv\in E(G)} \big|d(u)-d(v)\big|,$$

现在通常称为*Albertson*不规则性。这一不变量已得到广泛研究；例如，参见 [3, 1, 9]及其中的参考文献。

基于度的不规则性度量在多个应用领域中发挥着重要作用，包括网络科学和数学化学。它们已用于量化通信网络和社会网络中的结构异质性 [6], ，也被用作化合物定量结构-性质关系（QSPR）中的分子描述符 [11, 7]。这些应用推动了人们寻找对较大的局部度差异更敏感的其他不规则性指数。

在这类变体中，一个特别有用的是所谓的 σ-不规则性指数，或简称 σ-指数，其定义适用于任意图 $G=(V,E)$：

$$\sigma(G) \;=\; \sum_{uv\in E(G)} \big(d(u)-d(v)\big)^2.$$

这一指数可视为 Albertson 度量的二次类比。通过将度差平方， $\sigma(G)$突出了相邻顶点之间较大的局部差异，因此是结构不规则性的敏感指标。 σ-指数在 [2], 中得到了系统研究，文中刻画了给定阶下具有最大 σ-不规则性的极值图。 [8], 进一步探讨了其基本性质，并解决了逆σ-指数问题。 [12]中还开展了更多研究，并将该指数与其他不规则性度量进行了比较。Arif等人 [4]研究了包括 σ-指数在内的不规则性指数，针对由两个主要特征值刻画的图族进行分析，并将所得数值用于定量构效关系分析。

一个自然且活跃的研究方向是探讨在各种结构约束条件下，$\sigma(G)$的极值问题。对于固定阶的一般连通图，Abdo、Dimitrov和Gutman [2]确定了使 $\sigma(G)$达到最大值的唯一图。因此，自然会提出这样的问题：当可行图类受到限制时，这一问题会如何变化？树类是其中最重要的限制条件之一，它在数学上具有基础性，在应用中也有很高的相关性。

在化学背景下，树是没有圈的分子图；在此情形中，当顶点度不超过4时，通常称其为化学树 。文献[10], 研究了化学树的 σ-不规则性，并对所有固定阶的化学树中使 σ 达到最大的树给出了完整刻画。

近期，Dimitrov等人 [5]开始系统研究在给定最大度 Δ 的条件下， σ-极值树。他们针对任意 $\Delta \geq 3$，建立了 σ-极大树的一般结构性质，随后详细研究了 $\Delta = 5$ 的情形。在该情形下，他们证明，每棵使 $\sigma(G)$ 最大且满足 $\Delta(G) = 5$ 的 n 阶树只包含度为 1、2 和 5 的顶点。此外，这类极值树中的边几乎都连接叶子与度为 5 的顶点，或连接度为 5 的顶点与度为 2 的顶点；连接两个度为 5 的顶点或两个度为 2 的顶点的边则极为罕见。这些发现支持一种普遍的经验判断：当最大度 Δ 固定时，如果树的度分布高度两极分化，即有许多度为 Δ 的顶点和许多叶子，而度为 2 的顶点数量与 Δ 阶顶点相当，主要充当连接两种极端的连接点，那么这棵树往往具有更大的 σ-不规则性。

本文将这一研究计划推进到下一个情形 $\Delta = 6$ ，并确定了在满足 $\Delta(G) = 6$ 的条件下，所有 n 顶点树中具有最大 σ-不规则性的树。我们的结果表明，对于 $\Delta = 5$观察到的结构范式依然成立，同时还呈现出一种额外的结构特征。对于 n 的大多数取值，具有 $\Delta = 6$ 的 σ-极大树拥有与 $\Delta = 5$ 情形中相同的度集 $\{1, 2, 6\}$：度数为 6 的顶点通过度数为 2 的顶点与许多叶子相连。然而，当顶点数满足 $n \equiv 3$ （模 6）时，还会出现一种额外的极值构型。在这一例外情形下， σ-极大树包含一个度数为 3 的顶点，因此其度集变为 $\{1, 2, 3, 6\}$。据我们所知，这是首次需要使用度数不为 1、2 或 Δ 的顶点，才能在给定最大度约束下构造一棵 σ-极大树。

本文组织如下。第2节介绍记号，并为具有 $\Delta = 6$的树推导 $\sigma(G)$的惩罚分解，从而将极值问题归约为关于边－度重数的优化问题。第3节建立一系列结构引理，在 n 模6的大多数剩余类中排除度为3、4和5的顶点，仅保留一个例外情形。第4节陈述并证明六个主要定理，完整刻画 $\Delta = 6$ 的 σ-极大树在 n 模6的每个同余类中的情形，并为所有

极值族给出显式构造。最后，第5节包含总结性评论和未来研究方向，包括向更大最大度推广的可能性。

2. 预备知识与记号

令 $d_G(u)$表示图 G中顶点 u 的度。我们首先介绍本文研究的主要不变量。

定义2.1。 对于边集为 $E(G)$的连通图 G ， σ-规则性指数 定义为

$$\sigma(G) \;=\; \sum_{uv\in E(G)} \big(d_G(u) - d_G(v)\big)^2. \tag{1}$$

$\sigma(G)$的表达式可改写如下。对于 $1 \le i \le j \le \Delta$，令$m_{i,\,j}$ 表示连接度为 i 的顶点和度为 j的顶点的边数。于是

$$\sigma(G) = \sum_{1\le i\le j\le \Delta} m_{i,j}\,(i-j)^2 = \sum_{1\le i\le j\le \Delta} \sigma_{i,j}\,m_{i,j},$$

其中我们记

$$\sigma_{i,j} = (i-j)^2.$$

这提供了一种更简洁、更方便的记号。

本文中我们始终讨论最大度为 $\Delta = 6$ 的树。设 T 是一棵有 n 个顶点、最大度为 $\Delta = 6$ 的树。对于 $1 \le i \le 6$，记 n_i 为度为 i 的顶点数；对于 $1 \le i \le j \le 6$，记 $m_{i,\,j}$ 为连接一个度为 i 的顶点和一个度为 j 的顶点的边数。

变量 n_i 和 $m_{i,\,j}$ 满足以下恒等式，对每个

最大度为 $\Delta = 6$ 的树 T：

$$
\begin{aligned}
n_1 + n_2 + \cdots + n_6 &= n, && (2)\\
n_1 + 2n_2 + \cdots + 6n_6 &= 2n - 2, && (3)\\
m_{12} + m_{13} + m_{14} + m_{15} + m_{16} &= n_1, && (4)\\
m_{12} + 2m_{22} + m_{23} + m_{24} + m_{25} + m_{26} &= 2n_2, && (5)\\
m_{13} + m_{23} + 2m_{33} + m_{34} + m_{35} + m_{36} &= 3n_3, && (6)\\
m_{14} + m_{24} + m_{34} + 2m_{44} + m_{45} + m_{46} &= 4n_4, && (7)\\
m_{15} + m_{25} + m_{35} + m_{45} + 2m_{55} + m_{56} &= 5n_5, && (8)\\
m_{16} + m_{26} + m_{36} + m_{46} + m_{56} + 2m_{66} &= 6n_6. && (9)
\end{aligned}
$$

我们定义

$$
P(T) = \sum_{(i,j)\in S} F(i,j)\, m_{i,j}, \qquad S = \{(i,j) : 1 \le i \le j \le 6,\ (i,j) \notin \{(1,6),(2,6)\}\},
$$

其中系数 $F(i,j)$ 为

$$
\begin{aligned}
F(1,2) &= -\sigma_{1,2} + \tfrac{5}{3}\sigma_{1,6} - \tfrac{2}{3}\sigma_{2,6},\\
F(1,3) &= -\sigma_{1,3} + \tfrac{4}{3}\sigma_{1,6} - \tfrac{1}{3}\sigma_{2,6},\\
F(1,4) &= -\sigma_{1,4} + \tfrac{7}{6}\sigma_{1,6} - \tfrac{1}{6}\sigma_{2,6},\\
F(1,5) &= -\sigma_{1,5} + \tfrac{16}{15}\sigma_{1,6} - \tfrac{1}{15}\sigma_{2,6},\\
F(2,2) &= \tfrac{2}{3}\sigma_{1,6} - \sigma_{2,2} + \tfrac{1}{3}\sigma_{2,6},\\
F(2,3) &= \tfrac{1}{3}\sigma_{1,6} - \sigma_{2,3} + \tfrac{2}{3}\sigma_{2,6},\\
F(2,4) &= \tfrac{1}{6}\sigma_{1,6} - \sigma_{2,4} + \tfrac{5}{6}\sigma_{2,6},\\
F(2,5) &= \tfrac{1}{15}\sigma_{1,6} - \sigma_{2,5} + \tfrac{14}{15}\sigma_{2,6},\\
F(3,3) &= \sigma_{2,6} - \sigma_{3,3},\\
F(3,4) &= -\tfrac{1}{6}\sigma_{1,6} + \tfrac{7}{6}\sigma_{2,6} - \sigma_{3,4},\\
F(3,5) &= -\tfrac{4}{15}\sigma_{1,6} + \tfrac{19}{15}\sigma_{2,6} - \sigma_{3,5},\\
F(3,6) &= -\tfrac{1}{3}\sigma_{1,6} + \tfrac{4}{3}\sigma_{2,6} - \sigma_{3,6},\\
F(4,4) &= -\tfrac{1}{3}\sigma_{1,6} + \tfrac{4}{3}\sigma_{2,6} - \sigma_{4,4},\\
F(4,5) &= -\tfrac{13}{30}\sigma_{1,6} + \tfrac{43}{30}\sigma_{2,6} - \sigma_{4,5},\\
F(4,6) &= -\tfrac{1}{2}\sigma_{1,6} + \tfrac{3}{2}\sigma_{2,6} - \sigma_{4,6},\\
F(5,5) &= -\tfrac{8}{15}\sigma_{1,6} + \tfrac{23}{15}\sigma_{2,6} - \sigma_{5,5},\\
F(5,6) &= -\tfrac{3}{5}\sigma_{1,6} + \tfrac{8}{5}\sigma_{2,6} - \sigma_{5,6},\\
F(6,6) &= -\tfrac{2}{3}\sigma_{1,6} + \tfrac{5}{3}\sigma_{2,6} - \sigma_{6,6}.
\end{aligned}
$$

表 1 按递增顺序列出了 $\Delta = 6$ 对应的所有 $F(i,\ j)$ 值。

2.1. $\sigma(T)$ 的分解与约化优化问题

在本节中，我们从握手方程组 (2)–(9) 中消去变量 $m_{1,\ 6}$ 和 $m_{2,\ 6}$，并将其显式表示为其余边重数 $m_{i,\ j}$（$i,\ j$）以及阶 n 的函数。

表 1：惩罚函数 $F(i,j)$ 在 $\Delta = 6$ 下的取值，按行以递增顺序排列，其中 $(i,j) \in S = \{(i,j) : 1 \le i \le j \le 6, (i,j) \notin \{(1,6),(2,6)\}\}$。

$(i,\ j)$	$F(i,\ j)$	(i,j)	$F(i,j)$
(3, 6)	4.0	(4, 6)	7.5
(2, 5)	7.6	(1, 5)	9.6
(3, 5)	9.6	(5, 6)	9.6
(6, 6)	10.0	(4, 5)	11.1
(5, 5)	11.2	(4, 4)	13.0
(3, 4)	13.5	(2, 4)	13.5
(3, 3)	16.0	(1, 4)	17.5
(2, 3)	18.0	(2, 2)	22.0
(1, 3)	24.0	(1, 2)	30.0
(1, 1)	40.0		

求解由 (2)–(9) 得到的线性方程组，我们得到

$$\begin{aligned} m_{1,6} = \frac{2n}{3} + \frac{4}{3} - \frac{5}{3}m_{1,2} - \frac{4}{3}m_{1,3} - \frac{7}{6}m_{1,4} - \frac{16}{15}m_{1,5} - \frac{2}{3}m_{2,2} - \frac{1}{3}m_{2,3} \\ - \frac{1}{6}m_{2,4} - \frac{1}{15}m_{2,5} + \frac{1}{6}m_{3,4} + \frac{4}{15}m_{3,5} + \frac{1}{3}m_{3,6} + \frac{1}{3}m_{4,4} + \frac{13}{30}m_{4,5} \\ + \frac{1}{2}m_{4,6} + \frac{8}{15}m_{5,5} + \frac{3}{5}m_{5,6} + \frac{2}{3}m_{6,6}, \end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{aligned} m_{2,6} = \frac{n}{3} - \frac{7}{3} + \frac{2}{3}m_{1,2} + \frac{1}{3}m_{1,3} + \frac{1}{6}m_{1,4} + \frac{1}{15}m_{1,5} - \frac{1}{3}m_{2,2} - \frac{2}{3}m_{2,3} \\ - \frac{5}{6}m_{2,4} - \frac{14}{15}m_{2,5} - m_{3,3} - \frac{7}{6}m_{3,4} - \frac{19}{15}m_{3,5} - \frac{4}{3}m_{3,6} - \frac{4}{3}m_{4,4} \\ - \frac{43}{30}m_{4,5} - \frac{3}{2}m_{4,6} - \frac{23}{15}m_{5,5} - \frac{8}{5}m_{5,6} - \frac{5}{3}m_{6,6}. \end{aligned} \tag{11}$$

这些恒等式用于定理 4.1 的证明，将 $\sigma(T)$ 分解为仅取决于 n 的常数项和惩罚项 $P(T)$。事实上，将 (10)–(11) 代入 $\Sigma(T) = \sum_{1 \le i \le j \le 6} \sigma_{i,\ j} m_{i,\ j}$，其中 $\sigma_{i,\ j} = (i-j)^2$，，然后合并同类项，即可得到

$$\Sigma(T) = C(n) - P(T),$$

with

$$P(T) = \sum_{(i,j) \in S} F(i,j)\, m_{i,j}.$$

本文中，设 $\mathcal{T}_n^{(6)}$ 为所有具有 n 个顶点且最大度为 $\Delta = 6$ 的树所构成的族。对于 $n \geq 1$，定义

$$P_{\min}(n) := \min\{P(T) : T \in \mathcal{T}_n^{(6)}\}.$$

由于 $\sigma(T)$ 与仅取决于 n 的常数相差 $-P(T)$，因此在 $\mathcal{T}_{(6)n}$ 上最大化 $\sigma(T)$ 等价于在 $\mathcal{T}_{(6)n}$ 上最小化 $P(T)$。

3. 极值范围内的结构排除

为了确定 $P(T)$ 的所有极小化者，我们首先证明，在与极值相关的惩罚范围内，不会出现度数 4 和 5 的顶点，而度数 3 的顶点只会出现在一个明确的例外构型中。这将后续的分类讨论简化为少量边类型。

3.1. 排除度数 4 和 5

引理 3.1。设 $\Delta = 6$，且 T 为一棵树。

- 若 $P(T) \leq 30$，则 $n_5 = 0$。
- 若 $n \not\equiv 0$（模 6）且 $P(T) \leq 40$，则 $n_5 = 0$。

证明。假设 $n_5 \geq 1$。由度为 5 的握手方程 (8)，我们得到

$$m_{1,5} + m_{2,5} + m_{3,5} + m_{4,5} + 2m_{5,5} + m_{5,6} = 5n_5.$$

我们分两种情形讨论。

情形 1： $n_5 = 1$。那么恰有一个度为 5 的顶点，因此不存在类型为 (5，5) 的边，且 $m_{5,\,5} = 0$。

因此，

$$m_{1,5} + m_{2,5} + m_{3,5} + m_{4,5} + m_{5,6} = 5.$$

根据表 1，在与度 5 相邻且另一端点不同于 5 的边类型中，最小值为 $F(2, 5) = 7.6$。因此，

$$P(T) \geq 7.6\big(m_{1,5} + m_{2,5} + m_{3,5} + m_{4,5} + m_{5,6}\big) = 7.6 \cdot 5 = 38.$$

特别地， $P(T) \le 30$ 不可能；若 $P(T) \le 40$，则必有 $P(T) = 38$。此外，由于 $38 < 40$，且每个正值 $F(i, j)$ 都至少为 4，等式 $P(T) = 38$ 迫使

$$m_{2,5} = 5 \qquad \text{and} \qquad m_{i,j} = 0 \text{ for all } (i,j) \in S \setminus \{(2,5)\}.$$

现在，度为 6 的握手行 (9) 化简为

$$m_{1,6} + m_{2,6} = 6n_6,$$

因此 $m_{1,6} + m_{2,6} \equiv 0$ （模 6）。另一方面，边计数给出

$$m_{1,6} + m_{2,6} = (n-1) - m_{2,5} = (n-1) - 5 = n - 6.$$

因此 $n \equiv 0$ （模 6），这与第二个断言中的假设 $n \not\equiv 0$ （模 6）矛盾。

情形 2： $n_5 \ge 2$。由度为 5 的握手方程 (8)，我们有 $2m_{5,5} \le 5n_5$，因此 $m_{5,5} \le \frac{5n_5}{2}$。

根据表 1，在所有与度 5 顶点关联的边类型中，F 的最小值出现在 $(2,5)$，此时 $F(2,5) = 7.6$，而 $F(5,5) = 11.2$。

因此，

$$P(T) \;\ge\; 11.2\, m_{5,5} + 7.6\big(5n_5 - 2m_{5,5}\big) \;=\; 7.6 \cdot 5n_5 - 4.0\, m_{5,5}.$$

利用 $m_{5,5} \le \frac{5n_5}{2}$ 可得

$$P(T) \;\ge\; 7.6 \cdot 5n_5 - 4.0 \cdot \frac{5n_5}{2} \;=\; 28n_5 \;\ge\; 56,$$

这与两个界 $P(T) \le 30$ 和 $P(T) \le 40$ 均矛盾。

□

接下来我们讨论度为 4 的顶点。由于与度为 4 的顶点相 incident 的边所对应的最小惩罚值已经相对较大（参见表 1），这些顶点一旦出现，便会迅速使 $P(T)$ 超过此处考虑的极值阈值。这一观察引出了以下排除结果。

引理 3.2。 令 $\Delta = 6$，且令 T 为一棵具有 n 个顶点的树。

- *If* $P(T) < 30$, *then* $n_4 = 0$.

- 如果 $n \not\equiv 1$（模 6）且 $P(T) = 30$，那么 $n_4 = 0$。
- 若 $n \not\equiv \{0, 1, 2\}$（模 6）且 $30 < P(T) \leq 40$，则 $n_4 = 0$。

证明。假设 $n_4 \geq 1$。

由 4 度握手方程可得

$$m_{1,4} + m_{2,4} + m_{3,4} + m_{4,5} + m_{4,6} + 2m_{4,4} = 4n_4 \geq 4.$$

因此，度 4 顶点至少有 4 个关联端。事实上，若 $m_{4,\,4} = 0$，则由 $4n_4 \geq 4$ 可立即得出；若 $m_{4,\,4} \geq 1$，则必有 $n_4 \geq 2$，从而 $4n_4 \geq 8$。由表 1 可知，与度 4 顶点关联的所有边类型中，最小惩罚为 $F(4,\,6) = 7.5$，因此

$$P(T) \;\geq\; 4 \cdot 7.5 \;=\; 30.$$

这就证明了第一项。

情形 1： $P(T) = 30$ **且** $n_4 \geq 1$。上述界取等迫使度 4 顶点的所有关联端都来自 $(4,\,6)$ 边。因此

$$n_4 = 1, \qquad m_{4,6} = 4, \qquad m_{i,j} = 0 \text{ for all } (i,j) \in S \setminus \{(4,6)\}.$$

令 $x = m_{1,\,6}$ 和 $y = m_{2,\,6}$。根据边计数可得

$$x + y + 4 = n - 1,$$

而 6 度握手方程（9）给出

$$x + y + 4 = 6n_6.$$

因此 $6n_6 = n - 1$，即 $n \equiv 1$（模 6）。所以，如果 $n \not\equiv 1$（模 6），那么 $P(T) = 30$ 不可能具有 $n_4 \geq 1$，这就证明了第二项。

情形 2： $30 < P(T) \leq 40$ **和** $n \not\equiv \{0, 1, 2\}$（模 6）。首先假设$n_4 \geq 2$。那么

$$m_{1,4} + m_{2,4} + m_{3,4} + m_{4,5} + m_{4,6} + 2m_{4,4} = 4n_4 \geq 8.$$

如果 $m_{4,\,4} = 0$，那么所有关联都来自与度 4 相连的边，其类型为 $(1,\,4)$、$(2,\,4)$、$(3,\,4)$、$(4,\,5)$ 或 $(4,\,6)$。其中最小的惩罚是 $F(4,\,6) = 7.5$，因此

$$P(T) \;\geq\; 8 \cdot 7.5 \;=\; 60 \;>\; 40,$$

矛盾。

若 $m_{4,\ 4} \geq 1$，则一条 (4，4)–边以 13 的代价贡献两个关联，剩余至少六个关联的代价至少为 $6 \cdot 7.5 = 45$。因此

$$P(T) \geq 13 + 45 = 58 > 40,$$

再次矛盾。

因此，$n_4 \geq 2$ 不可能成立，我们必须有 $n_4 = 1$。

根据引理 3.1（应用于 $P(T) \leq 40$ 以及 $n \not\equiv 0$ (模 6)），我们还得到 $n_5 = 0$，从而有 $m_{4,\ 5} = 0$ 和 $m_{4,\ 4} = 0$。因此，4 度握手化为

$$m_{1,4} + m_{2,4} + m_{3,4} + m_{4,6} = 4.$$

情形 2.1： $m_{4,\ 6} \leq 2$。于是 $m_{1,\ 4} + m_{2,\ 4} + m_{3,\ 4} \geq 2$，因此至少有两个关联来自 (1，4)、(2，4) 或 (3，4)。根据表 1，每个这样的关联的惩罚至少为 13。5。因此

$$P(T) \geq 2 \cdot 7.5 + 2 \cdot 13.5 = 42 > 40,$$

矛盾。因此 $m_{4,6} \in \{3, 4\}$。

情形 2.2： $m_{4,6} = 4$。则 $m_{1,4} = m_{2,4} = m_{3,4} = 0$，且剩余惩罚预算至多为 $P(T) - 30 \leq 10$。由于 $F(3, 6) = 4$ 与 $F(6, 6) = 10$ 是 S 中不超过 10 的仅有取值（其中 $n_5 = 0$），我们必有

$$m_{i,j} = 0 \text{ for all } (i, j) \in S \setminus \{(3, 6), (4, 6), (6, 6)\}, \qquad m_{3,6} \leq 2, \quad m_{6,6} \leq 1.$$

设 $x = m_{1,6}$, $y = m_{2,6}$, $t = m_{3,6}$ 与 $b = m_{6,6}$。边计数给出

$$x + y + t + b + 4 = n - 1, \tag{12}$$

且 6 度握手方程给出

$$x + y + t + 4 + 2b = 6n_6. \tag{13}$$

由 (13) 减去 (12)，得

$$b = 6n_6 - (n - 1).$$

由于 $n \not\equiv \{0, 1\}$ （模 6），我们得到 $b \geq 2$，这与 $b \leq 1$ 矛盾。因此这种情形不可能。

情形 2.3： $m_{4,\ 6} = 3$。那么

$$m_{1,4} + m_{2,4} + m_{3,4} = 1.$$

情形 2.3(a)：唯一的非$(4,6)$**边是**$(1,4)$。那么

$$P(T) \ \geq \ 3 \cdot 7.5 + 17.5 \ = \ 40,$$

s或 $P(T) = 40$，且不能再出现其他（$i,\ j$） $\in S$。因此 $m_{6,6} = m_{3,6} = 0.$

设 $x = m_{1,6}$ 和 $y = m_{2,6}$。由边计数可得

$$x + y + 3 + 1 = n - 1 \quad \Rightarrow \quad x + y = n - 5,$$

而由6度握手引理可得

$$x + y + 3 = 6n_6.$$

因此 $6n_6 = n - 2$，这与 $n \not\equiv 2$ (模 6)矛盾。

情形 2.3(b)：唯一的非$(4,6)$**边是**$(2,4)$ **或**$(3,4)$。那么

$$P(T) \ \geq \ 3 \cdot 7.5 + 13.5 \ = \ 36,$$

因此，剩余预算至多为 4。由于 $F(3,6) = 4$ 是 S 中不超过 4 的唯一可行正值，我们必须有

$$m_{i,j} = 0 \text{ for all } (i,j) \in S \setminus \{(3,6),(4,6),(2,4),(3,4)\}, \qquad m_{3,6} \leq 1.$$

3度握手方程变为

$$m_{3,4} + m_{3,6} = 3n_3.$$

由于 $m_{3,4} \in \{0,1\}$ 和 $m_{3,6} \leq 1$，这就推出

$$m_{3,4} = m_{3,6} = 0, \qquad n_3 = 0.$$

现在通过边计数可得

$$x + y + 3 + 1 = n - 1 \quad \Rightarrow \quad x + y = n - 5,$$

而 6度握手给出

$$x + y + 3 = 6n_6.$$

因此再次得到 $6n_6 = n - 2$，这与 $n \not\equiv 2$ (模 6) 矛盾。

由于所有情况都会导致矛盾，我们得出结论： $n_4 = 0$ 当且仅当 $n \not\equiv \{0,1,2\}$（模 6）且 $30 < P(T) \leq 40$。这证明了第三项。 □

3.2. 排除度3

剔除度数为 3 的顶点要微妙得多。与度数 4 和 5 不同，度数为 3 的顶点可通过 (3，6) 类型的边，以相对较低的惩罚代价与 6 度顶点相互作用。因此，能否将其排除不仅取决于惩罚阈值，还取决于 n 上的同余条件。因此，我们分别处理范围 $P(T) \le 10$、$10 < P(T) \le 22$、$22 < P(T) \le 30$ 和 $30 < P(T) \le 40$。

引理 3.3. 设 $\Delta = 6$，且 T 是一棵有 n 个顶点的树。

- 若 $P(T) \le 10$，则 $n_3 = 0$。
- 若 $n \not\equiv \{0, 1\}$ (模 6) 且 $10 < P(T) \le 22$，则 $n_3 = 0$。

证明。反设 $n_3 \ge 1$。

在第 1 项中，由于 $P(T) \le 10 < 30$，引理 3.2（第 1 项）给出 $n_4 = 0$，而引理 3.1 给出 $n_5 = 0$。在第 2 项中，$P(T) \le 22 < 30$ 同样由引理 3.2（第 1 项）得到 $n_4 = 0$，并由引理 3.1 得到 $n_5 = 0$。因此，在这两项中，

$$n_4 = n_5 = 0.$$

由于 $F(1, 3) = 24 > 22$，我们必须有

$$m_{1,3} = 0.$$

在第 1 项中，$P(T) \le 10$ 和 $F(2, 3) = 18$ 也意味着 $m_{2,3} = 0$。在第 2 项中，$m_{2,3} \ge 2$ 会得到 $P(T) \ge 36 > 22$，因此只需排除 $m_{2,3} = 1$。

结合 3度握手以及 $n_4 = n_5 = 0$ 和 $m_{1,3} = 0$，我们得到

$$m_{2,3} + 2m_{3,3} + m_{3,6} = 3n_3.$$

若 $m_{2,3} = 1$，则 $2m_{3,3} + m_{3,6} \equiv 2$ (模 3)。若 $m_{3,3} \ge 1$，则 $P(T) \ge 18 + 16 = 34 > 22$，这不可能；因此 $m_{3,3} = 0$。于是 $m_{3,6} \equiv 2$ (模 3)，因此 $m_{3,6} \ge 2$ 和

$$P(T) \ge 18 + 2 \cdot 4 = 26 > 22,$$

再次不可能。因此，

$$m_{2,3} = 0.$$

当 $n_4 = n_5 = 0$、$m_{1,3} = 0$ 且 $m_{2,3} = 0$ 时，3度握手化简为

$$2m_{3,3} + m_{3,6} = 3n_3.$$

如果 $m_{3,\ 3} \geq 1$，那么 $n_3 \geq 2$，而最便宜的可能性 $m_{3,\ 3} = 1$、 $m_{3,\ 6} = 4$ 给出

$$P(T) \geq 16 + 4 \cdot 4 = 32 > 22,$$

不可能。因此

$$m_{3,3} = 0, \qquad m_{3,6} = 3n_3 \geq 3.$$

由于 $F(3,\ 6) = 4$，我们有 $P(T) \geq 4m_{3,\ 6}$。因此：

- 在第 1 项中， $P(T) \geq 12 > 10$，矛盾；
- 在第 2 项中， $P(T) \leq 22$ 迫使 $m_{3,\ 6} = 3$，从而 $n_3 = 1$。

在第 2 项中，三个 (3，6)–边已经对 $P(T)$ 贡献了 12。由于$F(2,\ 2) = 22$ 且 $F(1,\ 2) = 30$，任何类型为 (2，2) 或 (1，2) 的边都会迫使$P(T) > 22$。因此

$$m_{2,2} = 0, \qquad m_{1,2} = 0.$$

此外， $P(T) \leq 22$ 意味着 $m_{6,\ 6} \leq 1$。

令 $x = m_{1,\ 6}$、 $y = m_{2,\ 6}$ 和 $b = m_{6,\ 6} \in \{0, 1\}$。通过边计数可得

$$x + y + m_{3,6} + b = n - 1,$$

并且 6度握手给出

$$x + y + m_{3,6} + 2b = 6n_6.$$

将这两个方程相减可得

$$b = 6n_6 - (n - 1), \qquad \text{so} \qquad b \equiv -(n - 1) \pmod 6.$$

由于 $b \in \{0, 1\}$，这迫使

$$n \equiv 1 \text{ or } 0 \pmod 6,$$

这与第 2 项中的假设矛盾。

我们得出结论： $n_3 = 0$ 在两项中均成立，证明完毕。 □

引理 3.4. 设 $\Delta = 6$，且 T 是一棵有 n 个顶点的树。假设 $n \not\equiv \{0, 1, 2\}$（模 6），且 $22 < P（T） \leq 30$。那么 $n_3 = 0$。

证明。反设 $n_3 \geq 1$。

由于 $P(T) \leq 30$，引理 3.1（第一项）推出 $n_5 = 0$。此外，由于$n \neq 1 \pmod 6$且 $P(T) \leq 30$，引理 3.2（第一项和第二项）推出$n_4 = 0$。因此

$$n_4 = n_5 = 0.$$

现在我们证明$m_{1,3} = 0$。假设 $m_{1,3} \geq 1$。由于 $n_3 \geq 1$，3度握手方程迫使至少有三条边具有一个3度端点。其中一条边属于 $(1,3)$ 类型，另外两条边至少贡献 $2 \cdot F(3,6) = 8$，因为对于每个 i，$F(3,i) \geq F(3,6) = 4$。因此

$$P(T) \geq F(1,3) + 2 \cdot 4 = 24 + 8 = 32 > 30,$$

矛盾。因此 $m_{1,3} = 0$。

接下来我们证明 $m_{2,3} = 0$。反设 $m_{2,3} \geq 1$。

若 $m_{3,3} \geq 1$，则

$$P(T) \geq F(2,3) + F(3,3) = 18 + 16 = 34 > 30,$$

这是不可能的。

因此 $m_{3,3} = 0$。结合 3度握手以及 $n_4 = n_5 = 0$和 $m_{1,3} = 0$，我们得到

$$m_{2,3} + m_{3,6} = 3n_3.$$

若 $m_{2,3} \geq 2$，则 $P(T) \geq 2F(2,3) = 36 > 30$，这不可能。因此 $m_{2,3} = 1$。于是上述等式给出 $m_{3,6} \equiv 2 \pmod 3$，所以 $m_{3,6} \in \{2, 5, 8, \dots\}$。由于 $P(T) \leq 30$，必有 $m_{3,6} = 2$，因此

$$P(T) \geq 18 + 2 \cdot 4 = 26.$$

现在我们排除构型 $m_{2,3} = 1, m_{3,3} = 0, m_{3,6} = 2$。因为$n_4 = n_5 = 0$ 且 $m_{1,3} = m_{3,3} = 0$，除 $(2,3)$ 和 $(3,6)$ 以外，每条 S–边都必须是类型 $(2,2)$ 或 $(1,2)$。由于 $P(T) \leq 30$，且上述贡献已经是 26，因此最多只能再容纳 4 个 F–成本。但 $F(2,2) = 22$且 $F(1,2) = 30$，因此

$$m_{2,2} = m_{1,2} = 0.$$

此外，$F(6,6) = 10$意味着 $m_{6,6} = 0$，否则 $P(T) \geq 36 > 30$。因此，在这个子情形中，唯一的 S–边恰好是一个 $(2,3)$ 边和两个 $(3,6)$ 边。

令 $x = m_{1,6}$ 且 $y = m_{2,6}$。边计数得

$$x + y + m_{2,3} + m_{3,6} = n - 1,$$

并且 6 度握手方程（使用 $n_4 = n_5 = 0$ 、$m_{6,\,6} = 0$）为

$$x + y + m_{3,6} = 6n_6.$$

相减可得

$$-m_{2,3} = 6n_6 - (n-1).$$

由于 $m_{2,3} = 1$，我们得到

$$n - 1 \equiv 1 \pmod 6 \qquad \text{and therefore} \qquad n \equiv 2 \pmod 6,$$

这与既定假设 $n \not\equiv 2$ (模 6) 矛盾。因此，这种构型不可能成立，我们得出 $m_{2,3} = 0$。

有了 $n_4 = n_5 = 0$, $m_{1,3} = 0$，以及$m_{2,3} = 0$，3度握手引理简化为

$$2m_{3,3} + m_{3,6} = 3n_3.$$

如果 $m_{3,3} \geq 1$，那么 $n_3 \geq 2$，而最省的可能情况 $m_{3,3} = 1$, $m_{3,6} = 4$ 给出

$$P(T) \geq 16 + 4 \cdot 4 = 32 > 30,$$

不可能。因此

$$m_{3,3} = 0, \qquad m_{3,6} = 3n_3 \geq 3.$$

由于 $F(3,\ 6) = 4$，我们有 $P(T) \geq 12$。根据 $P(T) \leq 30$，可得$m_{3,\,6} \in \{3, 6\}$。

由于 $m_{3,\,6} \geq 3$ 对 $P(T)$ 的贡献已至少为 12，任何正的$m_{2,\,2}$都会导致 $P(T) \geq 12 + 22 = 34 > 30$，而任何正的 $m_{1,\,2}$都会导致 $P(T) \geq 12 + 30 = 42 > 30$。因此

$$m_{2,2} = 0, \qquad m_{1,2} = 0.$$

此外，$P(T) \leq 30$ 意味着 $m_{6,\,6} \leq 1$。

令 $x = m_{1,\,6}$，$y = m_{2,\,6}$ 以及 $b = m_{6,\,6} \in \{0, 1\}$。边计数得

$$x + y + m_{3,6} + b = n - 1,$$

而 6 度握手方程为

$$x + y + m_{3,6} + 2b = 6n_6.$$

相减得

$$b = 6n_6 - (n-1), \qquad \text{so} \qquad b \equiv -(n-1) \pmod 6.$$

由于 $b \in \{0,1\}$，这迫使

$$n \equiv 0 \text{ or } 1 \pmod 6,$$

这与假设 $n \not\equiv \{0,1\}$ （模 6）矛盾。

因此 $n_3 = 0$，证明完毕。 □

引理 3.5. 设 $\Delta = 6$，且 T 是一棵具有 n 个顶点的树，使得

$$30 < P(T) \leq 40 \qquad and \qquad n \equiv 3 \text{ or } 4 \pmod 6.$$

那么，要么 $n_3 = 0$，要么 $n \equiv 3$ （模 6），并且以下例外模式成立：

(E1) $P(T) = 40$，$m_{2,3} = 2$，$m_{3,6} = 1$，$m_{1,3} = m_{3,3} = 0$，以及 $m_{i,j} = 0$ 对于所有 $(i, j) \in S \setminus \{(2,3),(3,6)\}$。

证明。假设 $n_3 \geq 1$。

由于 $P(T) \leq 40$ 且 $n \not\equiv 0$ (模 6)（此处 $n \equiv 3$，4（模 6）），引理 3.1（第二项）推出 $n_5 = 0$。此外，由于 $30 < P(T) \leq 40$ 且 $n \not\equiv \{0,1,2\}$(模 6)（对 $n \equiv 3$，4 成立），引理 3.2（第三项）得出 $n_4 = 0$。因此

$$n_4 = n_5 = 0. \tag{14}$$

结合 (14)，3 度握手行 (6) 变为

$$m_{1,3} + m_{2,3} + 2m_{3,3} + m_{3,6} = 3n_3. \tag{15}$$

我们先证明

$$m_{1,3} = 0. \tag{16}$$

事实上，若 $m_{1,3} \geq 1$，则 $P(T) \geq F(1,3) = 24$。若 $m_{1,3} \geq 2$，则 $P(T) \geq 2F(1,3) > 40$，这就产生矛盾。由于 $n_3 \geq 1$，等式 (15) 要求至少再有两条与度数 3 相邻的边；根据 (14)，每条这样的边类型为 (3，3) 或 (3，6)。若其中一条是 (3，3)，则 $P(T) \geq 24+16+4 = 44 > 40$，不可能；因此两条都必须是 (3，6)。于是 $P(T) \geq 24+2\cdot 4 = 32$，而要保持 ≤ 40，剩余预算至多为 8。不会出现其他 $(i, j) \in S$，因为每条额外的 S–边都有 $F(i, j) \geq 10$。因此，

$m_{1,3} = 1$，$m_{3,6} = 2$，$m_{2,3} = m_{3,3} = 0$，以及 $m_{i,j} = 0$ 对所有 $(i,j) \in S \setminus \{(1,3),(3,6)\}$.

特别地，$m_{6,6} = 0$。从 6 度握手方程中减去边数方程（与前面的情形相同），得到 $-m_{1,3} = 6n_6 -(n-1)$，因此 $n \equiv 2$（模 6），这与 $n \equiv 3,4$（模 6）矛盾。因此，(16) 成立。

现在考虑 $m_{2,3}$。由于 $3F(2,3) = 54 > 40$，我们有 $m_{2,3} \le 2$。

如果 $m_{2,3} = 2$，则 $P(T) \ge 2F(2,3) = 36$。方程 (15) 迫使至少有一条额外的边与度数 3 相关联，而代价最小的可能性是 (3,6)，代价为 4。因此 $P(T) \ge 40$，并且由于 $P(T) \le 40$ 我们必须有 $P(T) = 40$且恰好有一条这样的边。因此

$$m_{2,3} = 2, \qquad m_{3,6} = 1, \qquad m_{1,3} = m_{3,3} = 0,$$

并且所有其他 S–变量均为 0。与标准同余检验（从度为 6 的握手行中减去边数）一样，这迫使 $n \equiv 3$(模 6)。因此，对于 $n \equiv 3$ (模 6)，我们恰好得到例外模式 (E1)。

我们现在排除情形 $m_{2,3} = 1$。

假设 $m_{2,\ 3} = 1$。由 $m_{1,\ 3} = 0$，方程 (15) 变为

$$1 + 2m_{3,3} + m_{3,6} = 3n_3.$$

首先，我们断言 $m_{3,\ 3} = 0$。事实上，若 $m_{3,\ 3} \ge 1$，则 $n_3 \ge 2$，满足上述恒等式的最小代价方式是 $m_{3,\ 3} = 1$ 和 $m_{3,\ 6} = 3$，由此得到

$$P(T) \ge F(2,3) + F(3,3) + 3F(3,6) = 18 + 16 + 12 = 46 > 40,$$

矛盾。因此 $m_{3,\ 3} = 0$。

由 $m_{3,\ 3} = 0$，3度握手引理可化简为

$$1 + m_{3,6} = 3n_3,$$

因此 $m_{3,\ 6} \equiv 2$（模 3），进而 $m_{3,\ 6} \in \{2, 5, 8, \dots\}$。由于 $P(T) \le 40$且 $F(3,\ 6) = 4$，我们必有 $m_{3,\ 6} \in \{2, 5\}$。

子情形 $m_{3,\ 6} = 5$。那么 $n_3 = 2$ 且

$$P(T) \ge F(2,3) + 5F(3,6) = 18 + 20 = 38.$$

因此，最多还可增加 2 个惩罚，所以不会再出现 $(i,\ j) \in S$；特别是，

$$m_{6,6} = m_{2,2} = m_{1,2} = m_{1,3} = m_{3,3} = 0.$$

设 $x = m_{1,\ 6}$ 且 $y = m_{2,\ 6}$。边计数可得

$$x + y + m_{2,3} + m_{3,6} = n - 1,$$

而度为 6 的握手行给出（因为 $m_{6,\ 6} = 0$）

$$x + y + m_{3,6} = 6n_6.$$

将这两个等式相减，得到

$$-m_{2,3} = 6n_6 - (n - 1),$$

因此 $6n_6 - (n-1) = -1$，即 $n \equiv 2$（模 6），这与 $n \equiv 3,\ 4$（模 6）矛盾。因此 $m_{3,\ 6} \neq 5$。

子情形 $m_{3,\ 6} = 2$。那么 $n_3 = 1$ 并且

$$P(T) \ \geq \ F(2,3) + 2F(3,6) \ = \ 18 + 8 \ = \ 26.$$

为了保持 $P(T) \leq 40$，我们可以有 $m_{6,\ 6} \leq 1$（因为 $F(6,\ 6) = 10$），并且必须有 $m_{2,\ 2} = m_{1,\ 2} = 0$（因为 $F(2,\ 2) = 22$ 且 $F(1,\ 2) = 30$）。令$b = m_{6,\ 6} \in \{0, 1\}$，并再次记 $x = m_{1,\ 6},\ \ y = m_{2,\ 6}$。边计数给出

$$x + y + m_{2,3} + m_{3,6} + b = n - 1,$$

并且由6度握手引理可得

$$x + y + m_{3,6} + 2b = 6n_6.$$

相减可得

$$b - m_{2,3} = 6n_6 - (n - 1).$$

由于$m_{2,3} = 1$和 $b \in \{0, 1\}$，我们得到 $6n_6 - (n-1) \in \{-1, 0\}$，因此 $n \equiv 1$或 2（模 6），这再次与 $n \equiv 3$,4（模 6）矛盾。因此$m_{3,6} \neq 2$ 也成立。

两个子情形都导致矛盾，因此$m_{2,3} \neq 1$。因此，

$$m_{2,3} = 0.$$

最后，假设 $m_{2,3} = 0$ （并且仍然 $m_{1,3} = 0$）。那么 (15) 化简为

$$2m_{3,3} + m_{3,6} = 3n_3.$$

情形 1： $m_{3,3} \geq 2$。那么 $2m_{3,3} \geq 4$，因此

$$m_{3,6} = 3n_3 - 2m_{3,3} \leq 3n_3 - 4.$$

特别地，$n_3 \geq 3$。最廉价的实现是 $m_{3,\,3} = 2$和 $m_{3,\,6} = 5$，由此得到

$$P(T) \;\geq\; 2F(3,3) + 5F(3,6) \;=\; 2 \cdot 16 + 5 \cdot 4 \;=\; 52 \;> 40,$$

矛盾。因此 $m_{3,\,3} \leq 1$。

情形 2： $m_{3,\,3} = 1$。于是 $2 + m_{3,\,6} = 3n_3$，所以 $m_{3,\,6} \equiv 1$（模 3）且 $n_3 \geq 2$。最小的可能性是 $m_{3,\,6} = 4$，从而得到

$$P(T) \;\geq\; F(3,3) + 4F(3,6) \;=\; 16 + 16 \;=\; 32.$$

为了保持在 $P(T) \leq 40$ 以内，所有剩余的 S–边的总成本至多为 8。由于 S 中除 $(3, 6)$ 外最小的正值是 $F(6,\ 6) = 10$，因此不允许再有 S– 边。于是 $m_{6,\,6} = m_{2,\,2} = m_{1,\,2} = 0$。

令 $x = m_{1,\,6}$ 和 $y = m_{2,\,6}$。边计数得到

$$x + y + 5 = n - 1,$$

而 6度握手方程给出

$$x + y + 4 = 6n_6.$$

相减得

$$6n_6 - (n-1) = -1, \qquad \text{so} \qquad n \equiv 2 \pmod 6,$$

与 $n \equiv 3,\ 4$（模 6）矛盾。因此这种情形不可能。

情形 3： $m_{3,\,3} = 0$。那么$m_{3,\,6} = 3n_3 \in \{3, 6, 9\}$ 因为 $P\ (T)$ ≤ 40。**子情形 3.1：** $m_{3,\,6} = 9$。那么

$$P(T) \;\geq\; 9F(3,6) \;=\; 36.$$

若要超过 30，同时保持 $P(T) \leq 40$，我们最多可以再增加 4 个惩罚。但每条其他的 S–边都有 $F(i,\ j) \geq 10$，因此无法再添加 S–边。因此 $m_{6,\,6} = m_{2,\,2} = m_{1,\,2} = 0$。

设 $x = m_{1,\ 6}$ 和 $y = m_{2,\ 6}$。边计数可得

$$x + y + 9 = n - 1,$$

并且 6 度握手方程给出

$$x + y + 9 = 6n_6.$$

相减可得

$$6n_6 - (n-1) = 0, \qquad \text{so} \qquad n \equiv 1 \pmod 6,$$

这与 $n \equiv 3$，4（模 6）矛盾。因此，这个子情形不可能成立。

子情形3.2： $m_{3,\ 6} = 6$。那么

$$P(T) \ \geq \ 6F(3,6) \ = \ 24.$$

要超过 30，我们必须再增加至少 7 的惩罚。唯一允许的S–边是 (6，6)（代价为 10），因为 (1， 2)（代价为 30）和 (2， 2)（代价为 22）会迫使 $P(T) > 40$。

因此 $m_{1,\ 2} = m_{2,\ 2} = 0$ 和 $m_{6,\ 6} \in \{1, 2\}$。
设 $x = m_{1,\ 6}$， $y = m_{2,\ 6}$ 以及 $b = m_{6,\ 6}$。边计数得

$$x + y + 6 + b = n - 1,$$

而 6 度握手方程给出

$$x + y + 6 + 2b = 6n_6.$$

相减得

$$b = 6n_6 - (n-1), \qquad \text{so} \qquad b \equiv -(n-1) \pmod 6.$$

若 $b = 1$，则 $n \equiv 0$ （模 6）；若 $b = 2$，则 $n \equiv 5$ （模 6）。两者都与 $n \equiv 3$，4（模 6）矛盾。因此，此子情形不可能成立。

子情形3.3： $m_{3,\ 6} = 3$。那么 $n_3 = 1$ 和三条 (3，6)–边对 $P(T)$ 的贡献为 12。若要超过 30，同时保持 $P(T) \leq 40$，我们必须再增加 19 到 28 的惩罚。唯一可行的 S–边是 (6，6)（代价为 10）和 (2，2)（代价为 22）。

因此，唯一的可能性是

$$(b, c) = (0, 1) \quad \text{or} \quad (b, c) = (2, 0),$$

其中 $b = m_{6,\ 6}$ 以及 $c = m_{2,\ 2}$。

设 $x = m_{1,6}$ 且 $y = m_{2,6}$。边计数得

$$x + y + 3 + b + c = n - 1,$$

而 6 度握手方程给出

$$x + y + 3 + 2b = 6n_6.$$

两式相减得

$$b - c = 6n_6 - (n-1), \qquad \text{so} \qquad b - c \equiv -(n-1) \pmod 6.$$

若 $(b, c) = (0, 1)$，则 $b - c = -1$ 且 $n \equiv 2$（模 6）。若 $(b, c) = (2, 0)$，则 $b - c = 2$ 且 $n \equiv 5$（模 6）。两者均与 $n \equiv 3, 4$（模 6）矛盾。因此，此子情形不可能成立。

由于所有满足 $m_{2,3} = 0$ 且 $n_3 \geq 1$ 的情形都会导致矛盾，我们得出结论：$n_3 \geq 1$ 只能以例外模式 (E1) 出现，且 $n \equiv 3$（模 6）。

□

4. $P(T)$ 和 $\sigma(T)$ 的极值构型

排除除少数可行度模式以外的所有模式后，我们现在着手确定对每个模6的 n 剩余类， $P(T)$的最小值，并描述所有达到该最小值的树。由于$\sigma(T)$与一个仅取决于 n的常数相差 $-P(T)$，这也就完整解决了在 $\mathcal{T}_{(6)n}$ 上最大化 $\sigma(T)$的问题。

我们确定最小值

$$P_{\min}(n) = \min\{P(T) : T \in \mathcal{T}_n^{(6)}\}$$

对于 n 模6 的每个剩余类，并描述所有极小化树。等价地，这给出了 $\mathcal{T}_{(6)n}$ 中所有树的 $\sigma(T)$ 最大值，因为 $\sigma(T)$ 与一个仅取决于 n 的常数项相差 $-P(T)$。最小惩罚仅取决于 n 模 6，且恰好取六个值：

$$P_{\min}(n) = \begin{cases} 0, & n \equiv 1 \pmod 6, \\ 10, & n \equiv 0 \pmod 6, \\ 20, & n \equiv 5 \pmod 6, \\ 22, & n \equiv 2 \pmod 6, \\ 30, & n \equiv 4 \pmod 6, \\ 40, & n \equiv 3 \pmod 6. \end{cases}$$

在后续定理中，对于每个剩余类，我们都会给出所有极小化树的显式参数描述（用 $m_{i,\ j}$ 和 n_i 表示）。

4.1. 极小化者的参数描述

定理 4.1。设 $n \geq 7$。那么

$$P_{\min}(n) = 0 \quad \textit{if and only if} \quad n \equiv 1 \pmod 6.$$

此外，若 $T \in \mathcal{T}_{(6)_n}$ 满足 $P(T) = 0$，则

$$m_{1,6} = \frac{2n+4}{3}, \qquad m_{2,6} = \frac{n-7}{3}, \qquad m_{i,j} = 0 \textit{ for all } (i,j) \in S,$$

相应的度分布为

$$n_1 = \frac{2n+4}{3}, \qquad n_2 = \frac{n-7}{6}, \qquad n_6 = \frac{n-1}{6}, \qquad n_3 = n_4 = n_5 = 0.$$

证明。 我们证明两个方向的蕴含关系。

我们先利用握手方程组施加的线性约束，重写相关变量。设 $T \in \mathcal{T}_n^{(6)}$。由 (10)–(11) 可知，量 $m_{1,6}$ 和 $m_{2,6}$ 可以表示为 n 及其余变量 $m_{i,j}$ 的线性函数，其中 $(i,j) \in S$:

$$m_{1,6} = \frac{2n}{3} + \frac{4}{3} + \sum_{(i,j)\in S} \alpha_{i,j}\, m_{i,j}, \tag{17}$$

$$m_{2,6} = \frac{n}{3} - \frac{7}{3} + \sum_{(i,j)\in S} \beta_{i,j}\, m_{i,j}. \tag{18}$$

将 (17)–(18) 代入 $\Sigma(T) = \sum_{1\leq i\leq j\leq 6} \sigma_{i,j} m_{i,j}$，其中 $\sigma_{i,j} = (i-j)^2$,并重新排列各项，可得

$$\Sigma(T) = C(n) - P(T),$$

with

$$P(T) = \sum_{(i,j)\in S} F(i,j)\, m_{i,j}.$$

根据表 1，系数满足

$$F(i,j) > 0 \quad \text{for all } (i,j) \in S. \tag{19}$$

这一正性立即给出 $\Sigma(T)$ 的上界。事实上，由（19）可得

$$\Sigma(T) \le C(n),$$

并且，当所有以 S 为指标的变量都为零时，等号成立，亦即，

$$m_{i,j} = 0 \quad \text{for all } (i,j) \in S. \tag{20}$$

等价地，该条件可表述为 $P(T) = 0$。

接下来，我们推导等号情形对 n 施加的算术限制。假设对某个 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$，有 $P(T) = 0$。则 (20) 成立，且 (17)–(18) 可化简为

$$m_{1,6} = \frac{2n+4}{3}, \qquad m_{2,6} = \frac{n-7}{3}. \tag{21}$$

因此，所有其余满足 $(i,j) \in S$ 的变量 $m_{i,j}$ 均为零。相应的度数计数为

$$n_1 = m_{1,6}, \qquad n_2 = \frac{m_{2,6}}{2}, \qquad n_6 = \frac{m_{1,6}+m_{2,6}}{6}, \qquad n_3 = n_4 = n_5 = 0.$$

当且仅当 $n \equiv 1$ 模 6 时，这些量才是整数。因此，条件 $P_{\min}(n) = 0$ 蕴含 $n \equiv 1$ 模 6。

还需验证这一同余条件也是充分条件。假设 $n \equiv 1$ 模 6。则 (21) 中的值均为非负整数。定义

$$m_{1,6} = \frac{2n+4}{3}, \qquad m_{2,6} = \frac{n-7}{3}, \qquad m_{i,j} = 0 \text{ for all } (i,j) \in S.$$

直接验证可知，握手方程组 (2)–(9) 中的所有方程均成立。因此，这些参数对应一棵有效的树 $T \in \mathcal{T}_n^{(6)}$。

对于这棵树，条件 (20) 成立，因此 $P(T) = 0$ 和 $\Sigma(T) = C(n)$。

结合必要性与充分性部分，我们得出，$P_{\min}(n) = 0$ 当且仅当 $n \equiv 1$ (模 6)。此外，上述论证表明，任何达到 $P(T) = 0$ 的树都必须取所述参数值，因此极小化构型是唯一的。

□

定理 4.2。设 $n \geq 12$。那么

$$P_{\min}(n) = 10 \quad \textit{if and only if} \quad n \equiv 0 \pmod 6.$$

此外，只有构型

$$m_{6,6} = 1, \qquad m_{1,6} = \frac{2n}{3}+2, \qquad m_{2,6} = \frac{n-12}{3}, \qquad m_{i,j} = 0 \textit{ for all } (i,j) \in S,$$

对应的度数计数为

$$n_1 = \frac{2n}{3} + 2, \qquad n_2 = \frac{n-12}{6}, \qquad n_6 = \frac{n}{6}, \qquad n_3 = n_4 = n_5 = 0.$$

证明。我们分别讨论必要性和充分性。

我们首先推导最小惩罚等于 10 时必须满足的限制条件。假设

$$P_{\min}(n) = 10. \tag{22}$$

根据定理 4.1，当且仅当 $n \equiv 1$（模 6）时，$P_{\min}(n) = 0$成立。因此，在假设 (22) 下，我们必然有

$$n \not\equiv 1 \pmod 6 \quad \text{and} \quad P(T) > 0 \text{ for all } T \in \mathcal{T}_n^{(6)}. \tag{23}$$

固定一棵满足 $P(T) = 10$ 的树 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$。现在我们分析这一等式的结构性推论。

我们首先排除中间度。由于 $P(T) \leq 10$，引理 3.1、3.2 和 3.3 蕴含

$$n_3 = n_4 = n_5 = 0. \tag{24}$$

接下来，我们排除单独贡献超过总惩罚的边类型。由表 1 可知，$F(1, 2) = 30 > 10$ 且 $F(2, 2) = 22 > 10$。因此，条件 $P(T) = 10$ 要求

$$m_{1,2} = m_{2,2} = 0. \tag{25}$$

在约束条件 (24) 和 (25) 下，剩余唯一允许的边类型为 $(1,6)$、$(2,6)$ 和 $(6,6)$。由于根据 (23)，$P(T) > 0$，因此至少必须存在一条由 S 编号的边。在所有正系数 $F(i, j)$

其中 $(i,\ j) \in S$，最小值为 $F(6,6) = 10$。因此，全部惩罚必须集中在一条 (6,6) 边上，从而得到

$$m_{6,6} = 1, \qquad m_{i,j} = 0 \text{ for all } (i,j) \in S \setminus \{(6,6)\}. \tag{26}$$

现在我们利用握手方程组确定其余参数。在上述约束条件 (26) 下，方程组化简为

$$m_{1,6} + m_{2,6} + 1 = n - 1, \qquad m_{1,6} + m_{2,6} + 2 = 6n_6,$$

以及

$$n_1 = m_{1,6}, \qquad n_2 = \frac{m_{2,6}}{2}.$$

解这个方程组可得

$$m_{1,6} = \frac{2n}{3} + 2, \qquad m_{2,6} = \frac{n-12}{3}. \tag{27}$$

当且仅当 $n \equiv 0$ (模 6) 时，这些表达式才是整数。因此，条件 $P_{\min}(n) = 10$ 意味着 $n \equiv 0$ (模 6)。

现在我们证明这个同余条件也是充分的。假设 $n \equiv 0$ (模 6)。根据 (27) 定义这些参数，并令 $m_{6,\ 6} = 1$且对于所有其他 $(i,\ j) \in S$，令 $m_{i,\ j} = 0$ 。直接验证可知，握手方程组 (2)–(9) 中的所有方程均成立，因此这些取值对应一棵有效的树 $T \in \mathcal{T}_n^{(6)}$。

对于这棵树，我们有 $P(T) = F(6,\ 6)\, m_{6,\ 6} = 10$，因此 $P_{\min}(n) \le 10.$

另一方面，假设树 $T' \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足 $P(T') < 10$。那么 $P(T') \le 10$，导出 (24) 和 (25) 的相同论证在此同样适用。在这些约束条件下，唯一允许的边类型为 (1，6)、(2，6) 和 (6，6)；在所有系数 $F(i,\ j)$ 中，满足 $(i,\ j) \in S$ 的最小值为 $F(6,\ 6) = 10$。因此，任何满足 $P(T') > 0$ 的树都必须满足 $P(T') \ge 10$；而 $P(T') = 0$ 不可能成立，因为根据 (23)，$n \not\equiv 1$（模 6）。因此，顶点数为 n 的树都不可能满足 $P(T') < 10$，从而$P_{\min}(n) = 10$。

结合必要性与充分性两部分，我们得出：当且仅当 $n \equiv 0$ （模 6）时，$P_{\min}(n) =$10，且极小化构型是唯一的。证明完毕。

□

定理 4.3。设 $n \geq 17$。则

$$P_{\min}(n) = 20 \quad \textit{if and only if} \quad n \equiv 5 \pmod 6.$$

在这种情况下，最小值唯一地由

$$m_{6,6} = 2, \qquad m_{1,6} = \frac{2n+8}{3}, \qquad m_{2,6} = \frac{n-17}{3}, \qquad m_{i,j} = 0 \textit{ for all } (i,j) \in S \backslash \{(6,6)\},$$

取得，并且相应的度数计数满足

$$n_1 = \frac{2n+8}{3}, \qquad n_2 = \frac{n-17}{6}, \qquad n_6 = \frac{n+1}{6}, \qquad n_3 = n_4 = n_5 = 0.$$

证明。 我们通过证明必要性和充分性来建立这一等价关系。

我们首先推导关于 n 的必要算术条件。假设 $P_{\min}(n) = 20$，并令 T 为一棵满足 $P(T) = 20$ 的树。

由定理 4.1 和定理 4.2 可知， $P_{\min}(n) = 0$ 当且仅当 $n \equiv 1$ （模 6）时成立，而 $P_{\min}(n) = 10$ 当且仅当 $n \equiv 0$（模 6）时成立。因此，在当前假设下，我们必有 $n \not\equiv 0, 1$（模 6）。

接下来分析 T 的度分布。由于 $P(T) = 20 < 30$，引理 3.1 和 3.2 排除了度为 5 和 4 的顶点。此外，不等式 $10 < P(T) \leq 22$ 与 $n \not\equiv 0, 1$（模 6）结合起来，使我们可以应用引理 3.3，从而排除度 3 顶点。因此，$n_3 = n_4 = n_5 = 0$。

在此限制下，唯一允许的边类型为 (1，6)、(2，6)、(1，2)、(2，2) 和 (6，6)。由表 1 可知， $F(1，2) = 30$，且 $F(2，2) = 22$，两者都超过总惩罚 20。因此，这两种边类型都不可能出现，我们必有 $m_{1,\,2} = m_{2,\,2} = 0$。

因此，惩罚可简化为 $P(T) = 10\, m_{6,\,6}$。
由于 $P(T) = 20$，这迫使 $m_{6,\,6} = 2$。
令 $x = m_{1,\,6}$ 和 $y = m_{2,\,6}$。边数给出

$$x + y + 2 = n - 1,$$

而对应于6度的握手方程给出

$$x + y + 4 = 6n_6.$$

将这两个方程相减，得到 $2 = 6n_6 - (n-1)$，这等价于同余条件 $n \equiv 5$ (模 6)。

至此，必要性的证明完成。

现在我们证明这个同余条件也是充分的。假设$n \equiv 5$（模 6），并定义

$$m_{6,6} = 2, \qquad m_{1,6} = \frac{2n+8}{3}, \qquad m_{2,6} = \frac{n-17}{3},$$

其余所有 $m_{i,j}$ 均取零，其中 $(i,j) \in S$。

取 $x = m_{1,6}$ 和 $y = m_{2,6}$，则关系

$$x + y + 2 = n - 1$$

满足边数条件。此外，

$$n_6 = \frac{x+y+4}{6} = \frac{n+1}{6}, \qquad n_2 = \frac{y}{2} = \frac{n-17}{6}, \qquad n_1 = x = \frac{2n+8}{3},$$

均为整数，因此握手方程组 (2)–(9) 中的每个方程都成立。由此，这些参数定义了一棵有效的树 T。

对于这棵树，我们有 $P(T) = 2\,F(6,6) = 20$，因此 $P_{\min}(n) \le 20$。

另一方面，假设存在一棵树 $T' \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足$P(T') < 20$。那么 $P(T') \le 20$，上述论证同样适用，从而得到 $n_3 = n_4 = n_5 = m_{1,\,2} = m_{2,\,2} = 0$。

在这些约束条件下，以 S 为指标的唯一允许的边类型是 (6，6)，惩罚项可化简为

$$P(T') = 10\, m_{6,6}.$$

由于 $P(T') > 0$(因为 $n \not\equiv 0,\ 1$（模 6）)，这意味着 $P(T') \ge 10$，且仅当 $m_{6,\,6} = 1$ 时等号成立，此时将得到 $P(T') = 10$。然而，根据定理 4.1 和定理 4.2，值 $P_{\min}(n) = 10$ 当且仅当 $n \equiv 0$(模 6) 时出现，这与当前假设 $n \equiv 5$ (模 6) 矛盾。

因此，阶为 $n \equiv 5$（模 6）的树都不可能满足 $P(T') < 20$，因此

$$P_{\min}(n) = 20.$$

最后，唯一性立即可得：条件 $P(T) = 20$ 迫使$m_{6,\,6} = 2$，而由不等式 $F(i,\ j) > 20$，所有其他由 S 索引的边类型均被排除。这就完成了证明。□

定理 4.4。设 $n \geq 14$。则

$$P_{\min}(n) = 22 \quad \textit{if and only if} \quad n \equiv 2 \pmod 6.$$

在这种情况下，最小值仅由

$$m_{2,2} = 1, \qquad m_{1,6} = \frac{2n+2}{3}, \qquad m_{2,6} = \frac{n-8}{3}, \qquad m_{i,j} = 0 \textit{ for all } (i,j) \in S \backslash \{(2,2)\},$$

达到，且相应的度数计数满足

$$n_1 = \frac{2n+2}{3}, \qquad n_2 = \frac{n-2}{6}, \qquad n_6 = \frac{n-2}{6}, \qquad n_3 = n_4 = n_5 = 0.$$

证明。我们再次证明必要性和充分性。

假设 $P_{\min}(n) = 22$，并令 T为一棵满足 $P(T) = 22$ 的树。根据定理 4.1 、 4.2 和 4.3，我们知道，数值 $P_{\min}(n) = 0$，10，20 分别恰好在 $n \equiv 1$，0，5（模 6）时出现。因此，在当前假设下，

$$n \not\equiv 0, 1, 5 \pmod 6.$$

接下来我们分析 T 的度分布。由于 $P(T) = 22 < 30$，引理 3.1 和 3.2 排除了度为 5 和 4 的顶点。此外，不等式 $10 < P(T) \leq 22$ 与 $n \not\equiv 0$，1（模 6）一起，使我们可以应用引理 3.3，从而排除度 3 顶点。因此，$n_3 = n_4 = n_5 = 0$。

在这一限制下，只可能出现度数 1、2 和 6。因此，允许的边类型为 (1，6)、(2，6)、(1，2)、(2，2) 和 (6，6)。由表 1 可知 $F(1,2) = 30 > 22$，这迫使 $m_{1,2} = 0$。

Let

$$x = m_{1,6}, \qquad y = m_{2,6}, \qquad a = m_{2,2}, \qquad b = m_{6,6}.$$

由于 $F(6,6) = 10$ 和 $F(2,2) = 22$，惩罚可写为

$$P(T) = 10\,b + 22\,a. \tag{28}$$

根据 (28)，等式 $P(T) = 22$ 有唯一的非负整数解

$$a = 1, \qquad b = 0. \tag{29}$$

现在我们确定由握手约束条件施加于 n的算术限制。边数给出

$$x + y + a + b = n - 1,$$

而度为6时的握手方程给出

$$x + y + 2b = 6n_6.$$

将这两个方程相减并利用 (29)，得到 $-1 = 6n_6 - (n - 1)$，这等价于 $n \equiv 2 \pmod 6$。这就证明了必要条件。

现在证明这个同余条件也是充分的。假设$n \equiv 2 \pmod 6$，并定义

$$m_{2,2} = 1, \qquad m_{1,6} = \frac{2n+2}{3}, \qquad m_{2,6} = \frac{n-8}{3},$$

其余所有 $m_{i,\ j}$ 均为零，其中 $(i,\ j) \in S$。

取 $x = m_{1,\ 6}$ 以及 $y = m_{2,\ 6}$，则恒等式

$$x + y + 1 = n - 1$$

验证了边数。此外，

$$n_6 = \frac{x+y}{6} = \frac{n-2}{6}, \qquad n_2 = \frac{2+2y}{2} = \frac{n-2}{6}, \qquad n_1 = x = \frac{2n+2}{3},$$

都是整数，因此握手方程组 (2)–(9) 中的每个方程都成立。因此，这些参数定义了一棵有效的树 T。

对于这棵树，我们有

$$P(T) = F(2, 2) = 22,$$

因此 $P_{\min}(n) \le 22$。

另一方面，假设存在一棵树 $T' \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足$P(T') < 22$。那么 $P(T') \le 22$，并且上述推导出的相同结构限制仍然适用。特别地，引理 3.1 、3.2 和 3.3 推出 $n_3 = n_4 = n_5 = 0$，由 $F(1, 2) = 30 > 22$ 可得 $m_{1,2} = 0$。

在这些约束条件下，惩罚的形式为

$$P(T') = 10\, m_{6,6} + 22\, m_{2,2}.$$

若 $m_{2,2} \ge 1$，则 $P(T') \ge 22$，因此 $m_{2,2} = 0$ 必须成立。于是

$$P(T') = 10\, m_{6,6},$$

并且由于 $P(T') > 0$，我们得到 $P(T') \in \{10, 20\}$。

若 $P(T') = 10$，则由定理 4.2 可知必有 $n \equiv 0$ (模 6)，这与 $n \equiv 2$ (模 6) 矛盾。若 $P(T') = 20$，则由定理 4.3 可知必有 $n \equiv 5$ (模 6)，再次与 $n \equiv 2$ (模 6) 矛盾。因此，阶为 $n \equiv 2$ (模 6) 的树均不满足 $P(T') < 22$，故

$$P_{\min}(n) = 22.$$

最后，由 (28)–(29) 可立即得出唯一性，它们迫使 $(m_{2,\,2},\ m_{6,\,6}) = (1,\ 0)$。证明至此完成。 □

定理 4.5。设 $n \geq 22$。则

$$P_{\min}(n) = 30 \quad \textit{if and only if} \quad n \equiv 4 \pmod 6.$$

在此情形下，最小值由以下对象唯一达到：

$$m_{6,6} = 3, \qquad m_{1,6} = \frac{2n+10}{3}, \qquad m_{2,6} = \frac{n-22}{3}, \qquad m_{i,j} = 0 \textit{ for all } (i,j) \in S \backslash \{(6,6)\},$$

相应的度数计数满足

$$n_1 = \frac{2n+10}{3}, \qquad n_2 = \frac{n-22}{6}, \qquad n_6 = \frac{n+2}{6}, \qquad n_3 = n_4 = n_5 = 0.$$

证明。 我们再次推导充要条件。

假设 $P_{\min}(n) = 30$，并令 T 为满足 $P(T) = 30$ 的树。根据定理 4.1、4.2、4.3 和 4.4，较小的惩罚值 0、10、20 和 22 已分别由同余类 $n \equiv 1$，0，5，和 2（模 6）完全刻画。因此，在当前假设下，

$$n \not\equiv 0, 1, 2, 5 \pmod 6.$$

现在考察 T 的度分布。由于 $P(T) = 30$，引理 3.1 排除了度为 5 的顶点。此外，因为 $n \not\equiv 1$ （模 6），引理 3.2（第二种情形）排除了度为 4 的顶点。最后，由于 $P(T) > 22$ 且 $n \not\equiv 0$，1，2（模 6），引理 3.4 表明度为 3 的顶点不可能出现。因此， $n_3 = n_4 = n_5 = 0$。

在此限制下，只出现度数 1、2 和 6。因此，允许的边类型为 (1,6)、(2, 6)、(1, 2)、(2, 2) 和 (6, 6)。由表 1

可得 $F(1,2) = 30$, $F(2,2) = 22$, 以及 $F(6,6) = 10$。因此，惩罚可以写为

$$P(T) = 30\, m_{1,2} + 22\, m_{2,2} + 10\, m_{6,6}. \tag{30}$$

在约束 $P(T) = 30$ 下，在非负整数范围内求解 (30)，恰好得到两个候选解:

$$(m_{1,2}, m_{2,2}, m_{6,6}) = (1,0,0) \quad \text{or} \quad (0,0,3).$$

我们证明第一种情况不可能。假设 $m_{1,2} = 1$，并令$x = m_{1,6}$ 和 $y = m_{2,6}$。边数给出

$$x + y + 1 = n - 1,$$

而 6 度握手方程给出

$$x + y = 6n_6.$$

将这些关系相减可得 $-1 = 6n_6 - (n-1)$，这意味着 $n \equiv 2$(模 6)，与 $n \not\equiv 0, 1, 2, 5$ (模 6) 矛盾。因此，这种情况不可能发生。

因此,

$$m_{6,6} = 3, \qquad m_{1,2} = m_{2,2} = 0. \tag{31}$$

与前面一样，令 $x = m_{1,6}$ 和 $y = m_{2,6}$。现在边数给出

$$x + y + 3 = n - 1,$$

而 6 度握手方程变为

$$x + y + 6 = 6n_6.$$

将这些方程相减，得到 $3 = 6n_6 - (n-1)$，这等价于$n \equiv 4$ (模 6)。由此得出必要条件。

现在证明这个同余条件也是充分的。假设$n \equiv 4$ (模 6)，并定义

$$m_{6,6} = 3, \qquad m_{1,6} = \frac{2n+10}{3}, \qquad m_{2,6} = \frac{n-22}{3},$$

其余所有 $m_{i,\ j}$ 均为零，其中 $(i,\ j) \in S$。

采用这些取值后，边数和 6 度握手方程均得到满足，并且

$$n_1 = \frac{2n+10}{3}, \qquad n_2 = \frac{n-22}{6}, \qquad n_6 = \frac{n+2}{6}$$

均为非负整数。因此，握手方程组 (2)–(9) 中的所有方程均成立，且这些参数定义了一棵有效的树 T。

对于这棵树，

$$P(T) = 3\,F(6,6) = 30,$$

因此 $n \le 30$ 的 $P_{\min}$。另一方面，由 (30) 可知，$P(T)$ 能取到的更小值只有 0、10、20 和 22，它们恰好对应被排除的同余类。因此，阶为 $n \equiv 4$ (模 6) 的树都不可能满足 $P(T) < 30$，从而 $P_{\min}(n) = 30$。

最后，由 (30) 和 (31) 可得唯一性，它们迫使 $m_{6,\,6} = 3$ 并排除所有其他可能性。证明至此完成。 □

定理 4.6。 设 n 为正整数。则

$$P_{\min}(n) = 40 \quad \textit{if and only if} \quad n \equiv 3 \pmod 6.$$

此外，若 $n \equiv 3$ （模 6），则最小值 $P_{\min}(n) = 40$ 恰好由以下两个解族取得（用非零的 $m_{i,\,j}$ 表示，所有其他 $(i,\ j) \in S$ 均等于 0）：

(i) *(情形 $n_3 = 0$，适用于 $n \ge 27$)*

$$m_{6,6} = 4, \qquad m_{1,6} = \frac{2n+12}{3}, \qquad m_{2,6} = \frac{n-27}{3};$$

(ii) *(适用于 $n \ge 15$)*

$$m_{2,3} = 2, \qquad m_{3,6} = 1, \qquad m_{1,6} = \frac{2n+3}{3}, \qquad m_{2,6} = \frac{n-15}{3}.$$

证明。 假设 $P_{\min}(n) = 40$。根据定理 4.1、4.2、4.3、4.4 和 4.5，较小的最小惩罚值 0、10、20、22 和 30 分别仅在$n \equiv 1$、0、5、2和4（模 6）时出现。因此 $n \not\equiv 0$、1、2、4、5（模 6），从而 $n \equiv 3$ （模 6）。

以下假设 $n \equiv 3$（模 6）。由于值 30 仅在 $n \equiv 4$（模 6）时出现，因此我们有

$$P_{\min}(n) > 30. \tag{32}$$

因此，只需证明存在一棵树 T，使得 $P(T) = 40$，并且不存在满足 $30 < P(T) < 40$ 的树。

设 T 是任意一棵满足 $30 < P(T) \le 40$ 且 $n \equiv 3$（模 6）的树。由于 $n \not\equiv 0$（模 6）且 $P(T) \le 40$，引理 3.1（第二项）推出 $n_5 = 0$。此外，由于 $n \not\equiv 0, 1, 2$（模 6）且 $30 < P(T) \le 40$，引理 3.2（第三项）得出 $n_4 = 0$。因此

$$n_4 = n_5 = 0. \tag{33}$$

在 (33) 的条件下，我们应用引理 3.5。由于 $n \equiv 3$（模 6）且 $30 < P(T) \le 40$，要么 $n_3 = 0$，要么 T 满足引理 3.5 中的例外模式 (E1)。特别地，若 $n_3 > 0$，则必有 $P(T) = 40$，且 T 属于类型 (ii)（模式 (E1)）。因此，不存在满足 $n_3 > 0$ 且 $30 < P(T) < 40$ 的树；剩下只需在以下情形排除 $30 < P(T) < 40$

$$n_3 = 0. \tag{34}$$

假设 (34)。结合 (33)，只可能出现度数 1、2 和 6，因此允许的边类型为 (1，6)、(2，6)、(1，2)、(2，2) 和 (6，6)。令

$$x = m_{1,6}, \qquad y = m_{2,6}, \qquad a = m_{1,2}, \qquad c = m_{2,2}, \qquad b = m_{6,6}.$$

由表 1 可得 $F(1,\ 2) = 30$, $F(2,\ 2) = 22$，以及 $F(6,\ 6) = 10$，因此

$$P(T) = 30a + 22c + 10b. \tag{35}$$

对边进行计数可得

$$x + y + a + c + b = n - 1, \tag{36}$$

而 6 度握手方程给出

$$x + y + 2b = 6n_6. \tag{37}$$

用（37）减去（36）得

$$b - a - c = 6n_6 - (n - 1). \tag{38}$$

将（38）模6化简，并利用 $n \equiv 3$ （模 6）（因此 $n-1 \equiv 2$ （模 6）），得

$$b - a - c \equiv 4 \pmod 6. \tag{39}$$

若 $P(T) < 40$，则由 (35) 可知，唯一可能的取值为

$$P(T) \in \{0, 10, 20, 22, 30, 32\}.$$

当 $P(T) \leq 30$ 时，0、10、20、22 和 30 分别只在 $n \equiv$1，0，5，2，4（模 6）时出现；但这与 $n \equiv 3$（模 6）矛盾。对于 $P(T)$ =32，方程 (35) 强制得到 (a，c，b) =(0，1，1)，于是 $b-a-c=0$ 与 (39) 矛盾。因此，只要 (34) 成立，$P(T) \geq 40$。

此外，将 (39) 与 $P(T) = 40$ 结合，可得 (a，c，b) =(0，0，4)，因此，在 $n_3 = 0$ 的情况下，我们必须有

$$m_{6,6} = 4, \qquad m_{1,2} = m_{2,2} = 0. \tag{40}$$

现在证明 $P(T) = 40$ 可以达到。对于 $n \equiv 3$（模 6），特殊模式 (ii) 满足握手方程，并给出 $P(T) = 40$，因此 $P_{\min}(n) \leq 40$。此外，在情形 (i)（其中 $n_3 = 0$）下，约束条件 (40) 和 (36) 唯一确定

$$m_{1,6} = \frac{2n+12}{3}, \qquad m_{2,6} = \frac{n-27}{3},$$

so (i) 在这些值均为非负整数时，也能达到 $P(T) = 40$。

最后，(32) 排除了 $P_{\min}(n) \leq 30$；我们已经证明，没有任何树满足 $30 < P(T) < 40$，而族 (i) 和 (ii) 能达到 $P(T) = 40$。因此，对于所有 $n \equiv 3$ (模 6)，$P_{\min}(n) = 40$，且仅当属于 (i) 和 (ii) 时才能达到最小值。□

4.2. 极小化树的显式构造

以下每个定理都用变量 $m_{i,j}$ 和 n_i 对极小化构型作出了完整的参数描述。为补充这些代数刻画，接下来我们将给出所有极小化树的显式构造描述。每个构造引理都定义一个自然的树族，并证明树 $T \in \mathcal{T}_n^{(6)}$ 达到所述最小惩罚，当且仅当 T 属于该树族（相差一个同构）。

令 $k \geq 1$。令 $TT^1_{\text{opt}}(k)$ 表示由路径 $P_{2k+1} = v_1 v_2 \cdots v_{2k+1}$ 构成的树，并在每个偶数度顶点v_2，v_4，……，v_{2k}上各连接恰好四个悬挂顶点。

引理 4.7。 令 $k \geq 1$ 并设 $n = 6k + 1$。则 $TT^1_{\mathrm{opt}}(k)$ 的最大度为 6，且满足 $P(TT^1_{\mathrm{opt}}(k)) = 0$。此外，树 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足$P(T) = 0$ 当且仅当 $T \cong TT^1_{\mathrm{opt}}(k)$。

证明。 固定 $k \geq 1$ 并令 $n = 6k+1$。根据定理 4.1，当且仅当 $n \equiv 1$ (模 6) 时，等式 $P(T) = 0$才可能成立，且此时极小化构型唯一。此外，若 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足 $P(T) = 0$，则

$$m_{1,6} = 4k + 2, \qquad m_{2,6} = 2k - 2, \qquad m_{i,j} = 0 \text{ for all } (i, j) \in S, \tag{41}$$

相应的度数计数满足

$$n_1 = 4k + 2, \qquad n_2 = k - 1, \qquad n_6 = k, \qquad n_3 = n_4 = n_5 = 0. \tag{42}$$

首先注意到 $TT^1_{\text{最优}}(k)$ 满足 (41)–(42)。事实上，定义路径上的每个偶数度顶点的度均为 6（两个路径邻点和四个悬挂邻点），每个内部奇数顶点的度均为 2，而两个端点的度均为 1。因此，$n_6 = k$、$n_2 = k - 1$、$n_1 = 4k + 2$以及所有边均属于类型 (1，6) 或 (2，6)，且恰有 $m_{1,6} = 4k + 2$ 和 $m_{2,6} = 2k - 2$。根据定理 4.1，这意味着 $P(TT^1_{\text{最优}}(k)) = 0$。

剩下要证明唯一性。设 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足 $P(T) = 0$，因此 (41)–(42) 成立。我们对 k 使用归纳法，证明 $T \cong TT^1_{\mathrm{opt}}(k)$。

对于 $k = 1$，有 $n = 7$，且 $(n_1, n_2, n_6) = (6,0,1)$，因此 T 是星 S_7，这与 $TT^1_{\mathrm{opt}}(1)$ 一致。

假设该结论对 k 成立，并考虑一棵阶为 $6(k+1)+1$、满足 $P(T) = 0$ 的树 T。那么每条边的类型都是 $(1, 6)$ 或 $(2, 6)$，且每个 6度顶点都只与度为 1 或 2 的顶点相邻。设 u 是 T 中一条最长路径的端点，v 是它的邻点。那么 u 是叶，且 $\deg(v) = 6$。由标准的最长路径论证可知，在 v 的其余邻点中，恰有四个是叶子，恰有一个的度为 2。

移除 v 及其四个悬挂邻点后得到一棵树 T'，其中 v 的唯一剩余邻点变成了一片叶。所得树的参数为

$$n'_6 = k, \qquad n'_2 = k - 1, \qquad n'_1 = 4k + 2,$$

而所有其他度均为零，因此再次满足参数为 k 的 (41)–(42)。根据归纳假设，$T' \cong TT^1_{\text{最优}}(k)$。

重新接上移除的构型，恰好相当于将 TT^1最优(k) 的定义路径延长一个偶数度顶点，并为其添加四个悬挂邻点。因此 $T \cong TT^1_{\text{opt}}(k+1)$。

因此，每棵满足 $P(T) = 0$ 的树 $T \in \mathcal{T}_{(6)\,6k+1}$ 都同构于 $TT^1{}_{\text{opt}}(k)$。由于 $TT^1{}_{\text{opt}}(k)$ 本身满足 $P(T) = 0$，证明完毕。 □

引理 4.8. 设 $k \geq 1$，并令 $n = 6k + 6$。令 $TT^6_{\text{opt}}(k)$ 表示由 $TT^1_{\text{opt}}(k)$ 细分一条奇数 i 和 $3 \leq i \leq 2k-1$的边 $v_i v_{i+1}$，再向新细分顶点连接四个悬挂顶点所得到的树族。

当且仅当 $T \in TT^6_{\text{opt}}(k)$时，树 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足 $P(T) = 10$。特别地，定理 *4.2* 中唯一的极小化构型属于$TT^6{}_{\text{opt}}(k)$。

证明. 固定 $k \geq 1$，并令 $n = 6k+6$。根据定理 4.2，树 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足$P(T) = 10$当且仅当 $n \equiv 0$(模 6)，且此时极小化构型唯一。此外，这样的树满足

$$m_{6,6} = 1, \qquad m_{1,6} = 4k + 6, \qquad m_{2,6} = 2k - 2, \tag{43}$$

and

$$n_1 = 4k + 6, \qquad n_2 = k - 1, \qquad n_6 = k + 1, \qquad n_3 = n_4 = n_5 = 0. \tag{44}$$

我们首先验证， $TT^6{}_{\text{opt}}(k)$ 中的每棵树都满足 (43)–(44)。从 $TT^1{}_{\text{opt}}(k)$ 出发，对一条具有奇数 i 和 $3 \leq i \leq 2k-1$ 的边 $v_i v_{i+1}$ 进行细分。在 $TT^1{}_{\text{opt}}(k)$ 中，这样的边属于 $(2,6)$ 型，因此细分后会得到一个新顶点 s，它与一个 2 度顶点和一个 6 度顶点相邻。将四个悬挂顶点连接到 s，会使其度数 $\deg(s)$ 从 2 增至 6，并增加四片叶子。因此，度为 6 的顶点数增加 1，叶子数增加 4，而 2 度顶点数保持不变。此外，恰好新生成一条 (6,6) 型边（即连接 s 与其 6 度邻居的边），其余所有边仍为 (1,6) 型或 (2,6) 型。因此，(43)–(44) 成立，并且根据定理 4.2，这样的树满足 $P(T) = 10$。

反之，设 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足 $P(T) = 10$。那么 (43)–(44) 成立，特别是 T 包含一条类型为 (6,6) 的唯一边。设 s 为该边的端点

，该端点与四个悬挂顶点相邻（此类顶点的存在性和唯一性由 (44) 得出）。

删除与 s 相邻的四个悬挂顶点，然后压缩 s，即删除 s ，并将其剩余的两条关联边替换为一条边。所得的树 T° 的阶为 $6k+1$，最大度为6，且仅包含类型为$(1,6)$和$(2,6)$的边。因此 T° 满足定理 4.1 的参数描述，并由引理 4.7 可得

$$T^\circ \cong TT^1_{\mathrm{opt}}(k).$$

将压缩过程逆转可知， T是由 $TT^1{}_{\text{最优}}(k)$通过对定义路径上恰好一条(2,6)-边进行细分而得到的，即一条边 v_iv_{i+1}，其中 i 与 $3 \le i \le 2k-1$为奇数，并向该新顶点连接四个悬挂顶点。因此 $T \in TT^6_{\mathrm{opt}}(k)$。 □

引理 4.9. 设 $k \ge 2$，并令 $n = 6k+5$。令 $TT^5_{\mathrm{opt}}(k)$ 表示由树$T_6 \in TT^6{}_{\text{最优}}(k-1)$ 通过对 T_6 的任意一条边用新顶点 s进行细分，然后向 s连接四个悬挂顶点而得到的树族。

那么，树 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足 $P(T) = 20$，当且仅当 $T \in TT^5_{\mathrm{opt}}(k)$。特别地，定理 *4.3* 中唯一的极小化构型属于$TT^5{}_{\text{最优}}(k)$。

证明。 固定 $k \ge 2$，并令 $n = 6k+5$。根据定理 4.3，树 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足$P(T) = 20$，当且仅当 $n \equiv 5$(模 6)，此时极小化构型唯一。此外，这样的树由以下条件刻画：

$$m_{6,6} = 2, \qquad m_{1,6} = 4k+6, \qquad m_{2,6} = 2k-4, \tag{45}$$

以及度频数

$$n_1 = 4k+6, \qquad n_2 = k-2, \qquad n_6 = k+1, \qquad n_3 = n_4 = n_5 = 0. \tag{46}$$

令 $T_6 \in TT^6{}_{\text{最优}}(k-1)$。那么 $|V(T_6)| = 6k$，且 $P(T_6) = 10$。任选 T_6 中的一条边 e，在其上细分，引入一个新顶点 s，并在 s 上附加四个悬挂顶点。细分会将边 e 替换为与 s 相 incident 的两条边，而四个悬挂顶点的附加使 deg(s) 增至 6。因此，树的阶增加 5，最大度仍为 6，并且产生一个新的 6度顶点和四个新的叶子。

如果被细分的边属于类型 (6，6)，那么这条边会被消去，并生成两条与 s 相接的新 (6，6)- 边；否则恰好生成一条

新 (6，6)-边。因此，$m_{6,\ 6}$ 恰好增加 1，$m_{1,\ 6}$增加 4，而 $m_{2,\ 6}$ 保持不变。由于 T_6 满足 $m_{6,\ 6}=1$,$m_{1,\ 6}=4k+2$，且 $m_{2,\ 6}=2k-4$，所得的树 T满足 (45)–(46)。根据定理 4.3，这意味着 $P(T)=20$，因此 $T\in TT^5_{\mathrm{opt}}(k)$。

反过来，设 $T\in\mathcal{T}_{(6)_n}$满足 $P(T)=20$。那么 (45)–(46) 成立。特别地，T 恰好包含两条类型为 (6，6) 的边。因此，由度为 6 的顶点诱导的子图中有一个顶点 s 恰好关联一条 (6，6) 边，而度约束迫使 s 恰好与四个悬挂顶点相邻。

移除 s 的四个悬挂邻点并压缩 s，也就是说，删除 s ，并将其余两条关联边替换为一条边。将所得的树记为 T°。此操作使阶减少 5，因此 $|V(T^\circ)|=6k$，并恰好移除一条 (6， 6) 边。因此， T° 满足定理 4.2 的参数描述。由引理 4.8，我们得到

$$T^\circ\in TT^6_{\mathrm{opt}}(k-1).$$

反向进行压缩可知， T 是由 T° 通过细分一条边并在细分顶点上附加四个悬挂顶点得到的。因此， $T\in TT^5{}_{\text{最优}}(k)$。

□

引理 4.10. 令 $k\geq 2$，并设 $n=6k+2$。令 $TT^2{}_{\mathrm{opt}}(k)$ 表示由 $TT^1{}_{\mathrm{opt}}(k)$ 经细分恰好一条边 v_iv_{i+1}（其 i 和 $3\leq i\leq 2k-1$ 均为奇数）得到的树族。

那么，树 $T\in\mathcal{T}_{(6)_n}$ 满足 $P(T)=22$，当且仅当 $T\in TT^2_{\mathrm{opt}}(k)$。特别地，每棵满足定理 *4.4* 中参数描述的树，都同构于 $TT^2{}_{\mathrm{opt}}(k)$ 中的一个成员。

证明. 固定 $k\geq 2$，并令 $n=6k+2$。根据定理 4.4，等式 $P(T)=22$ 仅当 $n\equiv 2$ （模 6）时才可能成立，且此时最小化构型唯一。特别地，若树 $T\in\mathcal{T}_{(6)_n}$ 满足 $P(T)=22$，则

$$m_{2,2}=1,\qquad m_{1,6}=4k+2,\qquad m_{2,6}=2k-2, \tag{47}$$

且度数计数满足

$$n_1=4k+2,\qquad n_2=k,\qquad n_6=k,\qquad n_3=n_4=n_5=0. \tag{48}$$

我们首先注意到，$TT^2_{\mathrm{opt}}(k)$ 中的每棵树都满足 (47)–(48)。事实上，从 $TT^1{}_{\text{最优}}(k)$ 出发，将一条具有奇数 i 的边 v_iv_{i+1} 细分，会产生

恰好一个度为 2 的新顶点，并引入一条类型为 (2，2) 的边，而其余所有度和边类型保持不变。因此，所得树恰好有一条 (2，2) 边，其余边的类型为 (1，6) 或 (2，6)，并且具有上述参数。根据定理 4.4，这意味着 $P(T) = 22$。

反过来，令 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足 $P(T) = 22$。那么 (47)–(48) 成立，特别是 T 包含唯一一条类型为 (2,2) 的边。将这条边收缩为一个度为 2 的顶点，得到一棵树 T°。这一操作使阶减一，消除了唯一的 (2,2) 边，并且只留下类型为 (1,6) 和 (2, 6) 的边。因此，T° 的阶为 $6k+1$，度数计数为

$$n_1^{\circ} = 4k+2, \qquad n_2^{\circ} = k-1, \qquad n_6^{\circ} = k, \qquad n_3^{\circ} = n_4^{\circ} = n_5^{\circ} = 0.$$

由定理 4.1 和引理 4.7，可得 $T^{\circ} \cong TT^1{}_{\mathrm{opt}}(k)$。

反向进行收缩后，树 T可由 $TT^1{}_{\mathrm{opt}}(k)$ 得到：将定义路径 P_{2k+1} 上恰好一条边细分，即将一条 v_iv_{i+1}具有奇数 i和 $3 \le i \le 2k-1$ 的边细分。因此，$T \in TT^2{}_{\mathrm{opt}}(k)$。

证明至此完成。 □

引理 4.11。令 $k \ge 4$ 并设 $n = 6k+4$。令 $TT^5{}_{\mathrm{opt}}(k-1)$ 为引理 *4.9* 中定义的、具有 $6(k-1)+5 = 6k-1$ 个顶点的树族。将$TT^4{}_{\mathrm{opt}}(k)$ 定义为如下树族：从一棵树 $T_5 \in TT^5_{\mathrm{opt}}(k-1)$ 中任取一条边，用一个新顶点 s将其细分，然后在 s上连接四个悬挂顶点。

那么，树 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足 $P(T) = 30$，当且仅当 $T \in TT^4_{\mathrm{opt}}(k)$。特别地，每棵满足定理 *4.5* 的参数描述的树都同构于 $TT^4{}_{\mathrm{opt}}(k)$中的一个成员。

证明。令 $k \ge 4$ 并设 $n = 6k+4$。根据定理 4.5，树 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足$P(T) = 30$，当且仅当它由以下内容唯一确定

$$m_{6,6} = 3, \qquad m_{1,6} = 4k+6, \qquad m_{2,6} = 2k-6, \qquad n_3 = n_4 = n_5 = 0. \quad (49)$$

取 $T_5 \in TT^5{}_{\mathrm{opt}}(k-1)$。则 $|V(T_5)| = 6k-1$ 且 $P(T_5) = 20$，因此根据定理 4.3，我们有

$$m_{6,6}(T_5) = 2, \qquad m_{1,6}(T_5) = 4k+2, \qquad m_{2,6}(T_5) = 2k-6, \qquad n_3 = n_4 = n_5 = 0.$$

任选 T_5 的一条 e 边，用一个新顶点 s 将其细分，并向 s连接四个悬挂顶点。这样阶增加 5，因此所得树有 $6k+4=n$ 个顶点，且 $\deg(s)=6$ 推出 $\Delta=6$。

无论 e 的类型如何，细分都会删除 e，并创建两条与 s 相接的边，而四个悬挂连接则增加四片新叶子。特别地，总共恰好新增一条类型为 (6，6) 的边，因此 $m_{6,\,6}$ 从 2 增至 3；此外，还新增四条类型为 (1，6) 的边，而 (2，6)-边的数量保持不变。因此，

$$m_{6,6}=3, \qquad m_{1,6}=4k+6, \qquad m_{2,6}=2k-6,$$

且 $n_3=n_4=n_5=0$ 仍然成立。因此，所得的树满足 (49)，由定理 4.5 可知 $P(T)=30$。于是，$TT^4_{\mathrm{opt}}(k)$ 中的每棵树都满足 $P(T)=30$。

反过来，设 $T\in\mathcal{T}_{(6)_n}$ 满足 $P(T)=30$。则 (49) 成立，因此特别有 $m_{6,\,6}=3$。于是，由度为 6 的顶点诱导的子图中存在一个顶点 s，它恰好与一条 (6，6)-边相接；度约束迫使 s 恰好与四个悬挂顶点相邻。移除这四个悬挂邻点，并压缩 s （删除 s，再将其余两条相接边替换为一条边）。将所得的树记为 T°。这使阶减少 5，因此 $|V(T^{\circ})|=6k-1$，并使 $m_{6,\,6}$ 恰好减少 1，得到 $m_{6,\,6}(T^{\circ})=2$，同时保持 $m_{2,\,6}$ 不变，并使 $m_{1,\,6}$ 减少 4。因此，T° 满足定理 4.3 中针对 $n=6k-1$ 的参数描述，从而 $P(T^{\circ})=20$。由引理 4.9 可得 $T^{\circ}\in TT^5_{\mathrm{opt}}(k-1)$。

逆向进行压缩可知，T 是通过细分 T° 的一条边，并在新顶点上连接四个悬挂顶点得到的，这恰好是 $TT^4_{\mathrm{opt}}(k)$的定义操作。因此，$T\in TT^4_{\mathrm{opt}}(k)$。 □

我们陈述以下引理，它给出了一个树族 $T\in\mathcal{T}_{(6)_n}$ 的构造，该树族满足定理4.6(i)中给出的参数描述。此处不提供证明，因为其证明依赖于与本小节各引理证明中所用技术类似的方法。

引理4.12。 令 $k\geq 5$，并设 $n=6k+3$。令 $TT^4_{\mathrm{opt}}(k-1)$ 为引理 ***4.11*** 中定义的、具有 $6(k-1)+4=6k-2$ 个顶点的树族。令 $TT^3_{(i)}(k)$表示由树 $T_4\in TT^4_{\mathrm{opt}}(k-1)$ 构造得到的树族：选取 T_4 的一条边 e，用一个新顶点 s 对 e 进行细分，然后在 s 上连接四个悬挂顶点。

当且仅当 $T \in TT^3_{(i)}(k)$ 时，树 $T \in \mathcal{T}_n^{(6)}$ 满足定理 *4.6*(i) 中的参数描述。特别地，定理 *4.6*(i) 中达到最小值的每棵树都同构于 $TT^3{}_{(i)}(k)$ 中的某个成员。

引理 4.13。令 $k \geq 2$ 并令 $n = 6k+3$。令 $TT^1_{\mathrm{opt}}(k)$ 为引理 *4.7* 中定义的、具有底层路径 $P_{2k+1} = v_1 v_2 \cdots v_{2k+1}$ 的 $6k+1$ 阶树。

将 $TT^3{}_{(ii)}(k)$ 定义为由 $TT^1{}_{\mathrm{opt}}(k)$ 通过选取两个奇数索引 $i < j$（满足 $3 \leq i < j \leq 2k-1$）并执行以下操作得到的树族：

删除两条边 $v_{i-1}v_i$ 和 $v_{j-1}v_j$，引入一个新顶点 s，并添加三条边

$$sv_{i-1}, \quad sv_i, \quad sv_j,$$

最后，将一个新叶 x 接到 v_{j-1} 上。

那么，树 $T \in \mathcal{T}_{(6)n}$ 满足定理 *4.6*(ii)中的参数描述，即

$$m_{2,3} = 2, \qquad m_{3,6} = 1, \qquad m_{1,6} = \frac{2n+3}{3} = 4k{+}3, \qquad m_{2,6} = \frac{n-15}{3} = 2k{-}4,$$

当且仅当 $T \in TT^3_{(ii)}(k)$。特别地，定理 *4.6*(ii) 中的每一棵极小树都同构于 $TT^3_{(ii)}(k)$ 中的某个成员。

证明。固定 $k \geq 2$ 并设 $n = 6k+3$。

从 $TT^1{}_{\mathrm{opt}}(k)$ 开始。在这棵树中，所有度都属于 $\{1, 2, 6\}$，并且

$$m_{1,6} = 4k+2, \qquad m_{2,6} = 2k-2, \qquad m_{a,b} = 0 \text{ for all other } (a,b) \in S.$$

选择奇数索引 $i < j$，使得 $3 \leq i < j \leq 2k-1$。那么 v_i 和 v_j 是度为 2 的内部奇顶点，而 v_{i-1} 和 v_{j-1} 是度为 6 的偶顶点。

删除边 $v_{i-1}v_i$ 和 $v_{j-1}v_j$。引入一个新顶点 s，并添加边 sv_{i-1}、sv_i和 sv_j。最后，将一个新叶 x 连接到 v_{j-1}。

经过这次修改，顶点 s 的度为 3，它恰好与一个度为 6 的顶点（即 v_{i-1}）以及两个度为 2 的顶点（即 v_i 和 v_j）相邻，因此 $m_{3,\,6} = 1$ 和 $m_{2,\,3} = 2$ 成立。

两条被删除的边去掉了两条类型为 (2,6) 的边，而新边xv_{j-1} 产生了一条类型为 (1,6) 的边；其余所有新边的类型均为 (2,3) 或 (3,6)。因此，

$$m_{1,6} = (4k+2) + 1 = 4k+3, \qquad m_{2,6} = (2k-2) - 2 = 2k-4,$$

并且没有其他 $m_{a,b}$ 变为非零。因此， $TT^3_{(ii)}(k)$ 中的每棵树都满足定理 4.6(ii) 中的参数描述。

反过来，设 $T \in \mathcal{T}_n^{(6)}$ 满足定理 4.6(ii) 中的参数描述。由于 $m_{3,6} = 1$ 和 $m_{2,3} = 2$，存在唯一一个度数为 3 的顶点 s，它恰好与一个 6度顶点 v_{i-1} 以及两个度数为 2 的顶点 v_i 和 v_j 相邻。v_i 和 v_j 各自恰有一个与 s 不同的邻点；由于不存在类型为 (1，2)、(2，2) 或 (3，3) 的边，这些邻点必为 6度顶点，分别记为 v_{i+1} 和 v_{j+1}。

此外，$m_{1,6} = 4k + 3$ 意味着存在一个与 6度顶点相邻的叶 x；该叶必与 v_{j-1} 相邻。

现在删除叶 x，并删除顶点 s 及其三条关联边，再添加边 $v_{i-1}v_i$ 和 $v_{j-1}v_j$。将所得的树记为 T°。这样恰好删除了两个顶点，因此 $|V(T^\circ)| = 6k + 1$。根据构造，T° 中的所有顶点的度都属于 $\{1, 2, 6\}$，且所有边的类型均为 (1，6) 或 (2，6)。此外，

$$m_{1,6}(T^\circ) = 4k+2, \qquad m_{2,6}(T^\circ) = 2k-2, \qquad m_{a,b}(T^\circ) = 0 \text{ for all other } (a, b) \in S.$$

因此，T° 满足定理 4.1 的参数描述，并且由引理 4.7 可得

$$T^\circ \cong TT^1_{\mathrm{opt}}(k).$$

反向进行上述约化可知，T 是通过选取奇数索引 $i < j$ 并严格执行 $TT^3{}_{(ii)}(k)$ 的定义中的操作，从 $TT^1{}_{\mathrm{opt}}(k)$ 得到的。因此 $T \in TT^3_{(ii)}(k)$。□

5. 结论

本文确定了固定阶 n、最大度为 $\Delta = 6$ 的树的 σ-不规则性指标的极值，并完整刻画了所有达到这些极值的树。我们证明，$\sigma(T)$ 的最大值严格取决于 n 模6后的剩余类，从而恰好得到六种情形，其惩罚值分别为 0，10，20，22，30，和 40。对于每种情形，我们都推导出明确的度分布和边类型重数，并通过具体的递归操作构造出所有极值树。

我们的分析有一个显著特点：即使对于中等的界 $\Delta = 6$，也需要进行大量分类讨论。证明结合了边类型惩罚表中的握手恒等式、同余论证和紧下界

。这已经揭示了该问题在树情形以及相对较小的最大度下所具有的显著组合复杂性。

结合关于 $\Delta = 4$ 和 $\Delta = 5$的早期结果，我们的发现表明了一个明确的总体趋势。随着 Δ 增大，可容许的局部度模式数量和极值树的结构多样性都会迅速增加。具体而言，我们预计，对于 $\Delta \geq 7$ ，极值构型将不再仅涉及度 $\{1, 2, \Delta\}$，还会包含其他中间度数；正如本文对 $n \equiv 3$ （模 6）的研究所观察到的那样，其中3度顶点出现在一个特殊的极值族中。

从更广泛的角度来看，对任意 Δ下使 σ达到最大值的树进行完整分类，似乎极具挑战性。模Δ 的剩余类数量不断增加，可行边类型的范围扩大，相关的惩罚系统也变得更加复杂。当 Δ较大时，沿用本文思路进行暴力分类讨论恐怕并不实际。

然而，我们的结果表明，对于模 Δ 的那些最小惩罚值仍然较小的同余类，或许仍有可能给出完整刻画。这指向了一个很有前景的研究方向：先解决“低惩罚”情形，再逐步将理论拓展到更大的 Δ。我们希望，本文建立的框架能为今后研究超越 $\Delta = 6$的 σ-不规则性极值问题提供有益基础。

参考文献

[1] H. Abdo、N. Cohen 和 D. Dimitrov，具有最大不规则性的图，*Filomat*，28（2014），1315–1322。[2]H. Abdo、D. Dimitrov 和 I. Gutman，具有最大 σ-不规则性的图，*Discrete Appl. Math.*，250（2018），57–64。[3] M. O. Albertson，图的不规则性，*Ars Combin.*，46（1997），219–225。[4] S. Arif、K. Hayat 和 S. Khan，不规则性指数的谱界及其在定量构效关系建模中的应用，*J. Appl. Math. Comput.*，72（2023），6351–6373。[5]D. Dimitrov、ˇZ. Kovijani´c Vuki´cevi´c、G. Popivoda、J. Sedlar、ˇR. Skrekovski 和 S. Vujoˇsevi´c，最大度为 5 的树的 σ-不规则性，*Discrete Appl. Math.*，382（2026），124–136。

[6] E. Estrada，量化网络异质性，*Phys. Rev. E*，82（2010），066102。[7] I. Gutman、P. Hansen 和 H. M´elot，极值图的变邻域搜索。10. 化学树不规则性指数的比较，化学信息与建模杂志，45（2005），222–230。[8] I. Gutman、M. Togan、A. Yurtta¸s、A. S. C¸evik 和 I. N. Cang¨ul，sigma指数的反问题，*MATCH*数学与计算机化学通讯，79（2018），491–508。[9] P. Hansen 和 H. M´elot，极值图的变邻域搜索。9. 图不规则性的界定，载于：*DIMACS* 离散数学与理论计算机科学丛书，第 69 卷，2005 年，第 253–264 页。[10] ˇZ. Kovijani´c Vuki´cevi´c、G. Popivoda、S. Vujoˇsevi´c、R. ˇSkrekovski 和 D. Dimitrov，化学树的 σ-不规则性，*MATCH*数学与计算机化学通讯，91（2024），267–282。[11] T. R´eti、R. Sharafdini、 ´A. Dr´egelyi-Kiss 和 H. Haghbin，在定量构效关系研究中用作分子描述符的图不规则性指数，*MATCH*数学与计算机化学通讯，79（2018），509–524。[12] T. R´eti，关于图不规则性指数的一些性质，特别关注 σ-指数，应用数学与计算，344（2019），107–115。[13] T. A. B. Snijders，度方差：图异质性的一个指标，社会网络，3（1981），163–174。