Pure Mathematics 理论数学, 2023, 13(10), 2948-2953
Published Online October 2023 in Hans. https://www.hanspub.org/journal/pm
https://doi.org/10.12677/pm.2023.1310302

Hans汉斯

关于自环图的能量的下界

邹林芳

福建师范大学数学与统计学院，福建 福州

收稿日期：2023年9月11日；录用日期：2023年10月13日；发布日期：2023年10月24日

摘　要

设图$G=(V(G),E(G))$是阶为n的简单图。令$S\subseteq V(G)$且$|S|=\sigma$，设图G_S是对图G中属于S的每个顶点增加一个自环所得到的图。图G_S的能量定义为$E(G_S)=\sum_{i=1}^{n}\left|\lambda_i(G_S)-\frac{\sigma}{n}\right|$，其中$\lambda_1(G_S),\cdots,\lambda_n(G_S)$是图$G_S$的邻接矩阵的特征值。在本文中，我们利用自环图的邻接矩阵的特征值的性质构造了满足不等式条件的实数序列。运用分析不等式的技巧，我们得到了自环图G_S的能量$E(G_S)$的下界。

关键词

特征值，自环图，能量

The Lower Bound on the Energy of the Self-Loops Graph

Linfang Zou

School of Mathematics and Statistics, Fujian Normal University, Fuzhou Fujian

Received: Sep. 11th, 2023; accepted: Oct. 13th, 2023; published: Oct. 24th, 2023

Abstract

Let $G=(V(G),E(G))$ be a simple graph of order n. Let $S\subseteq V(G)$ and $|S|=\sigma$, and let G_S be the graphobtained from G by adding a self-loop to each vertex belonging to S in graph G. The energy of G_S is defined as $E(G_S)=\sum_{i=1}^{n}\left|\lambda_i(G_S)-\frac{\sigma}{n}\right|$, where $\lambda_1(G_S),\cdots,\lambda_n(G_S)$ are the eigenvalues of the adjacency matrix of G_S. In this paper, by using the property of eigenvalues of the adjacency

文章引用: 邹林芳. 关于自环图的能量的下界[J]. 理论数学, 2023, 13(10): 2948-2953.
DOI: 10.12677/pm.2023.1310302

matrix of the self-loops graph G_S, we construct the sequence of real numbers satisfying some conditions of the inequality. By means of inequality analysis technique, we get the lower bound of the energy $E(G_S)$ of the self-loops graph G_S.

Keywords

Eigenvalues, Self-Loops Graph, Energy

1. 引言

研究带有自环的图的能量可以为其独特的属性和行为提供新的见解，这些属性和行为是普通图能量无法捕获的。自环是一条连接顶点和自身的边，它可以表示各种类型的化学信息。自环的一个重要用途是表示杂原子，即碳和氢以外的原子。在化学图论中，杂原子可以用自环来表示，表明它们有一个未配对的电子，使它们具有高度的反应性。在有机化学中，氮、氧、硫等杂原子常存在于胺、酰胺、醇、硫醇等官能团中，参与化学反应。带有未配对电子的杂原子的存在可以增加分子的反应性，因此在分析化合物的化学性质时考虑自环是很重要的，文献[1] [2] [3]的结果成为研究自环图的基础。一个简单图的能量的相关研究源自于共轭分子(分子轨道)HMO 的总 π-电子能量，它在热力学及其分子结构中有十分重要的意义，能解释碳氢化合物形成过程中产生的能量。总 π-电子能量的计算为其分子图的所有特征值的绝对值之和[4]。

在 2022 年，Gutman 等学者在文献[5]中首次将简单图能量推广到带自环的图能量中并且给出了它的相关性质和能量的上界。对于文献[5]中提出的“图 G 是阶为 n 的简单图，$S \subseteq V(G)$ 且 $|S| = \sigma$，图 G_S 是对图 G 中属于 S 的每个顶点增加一个自环所得到的图，若 $1 \le \sigma \le n-1$，则图 G 的能量总是严格小于自环图 G_S 的能量”这一猜想，Jovanovic 等学者在[6]中构造了一类反例图否定了该猜想。文献[7]和[8]的作者分别将图的拉普拉斯能量概念和基于度的拓扑指数、关联矩阵及其能量概念从简单图扩展到具有自环的图中，并推导出了相应的特征值性质和能量的上界，这进一步地丰富了能量的相关研究领域。Jahanbani 在文献[9]和[10]中得到了一些图能量的下界。在[11]中 Jahanbani 等学者分别利用邻接矩阵的直径、图中圈长为 4 的数目、图的色数得到了图的能量的下界。Milovanovic 等学者研究了一类 McClelland 类型的图能量的上界[12]。在文献[13]中，Akbari 等学者研究了一些带有自环的特殊图类的谱，并且用另外一种方法证明了 Gutman 等人在[5]中得到的自环图能量的上界。受到以上结果的启发，本文主要研究了自环图能量的下界，特别地，当图的自环数 $\sigma = 0$ 时，我们得到的下界恰好为一个已知的简单图能量的下界[11]。

2. 预备知识

设 G 是一个顶点集为 $V(G) = \{v_1, \cdots, v_n\}$ 和大小(边的数目)为 m 的简单图。用 $A(G) = [a_{ij}]$ 表示图 G 的邻接矩阵，若 v_i 和 v_j 相邻接，则 $a_{ij} = 1$，否则 $a_{ij} = 0$ [14]。对于一个 $n \times n$ 的复矩阵 M，定义是 $s[M] = \max_{ij} |\lambda_i - \lambda_j|$ 为复矩阵谱的直径，式中 $\lambda_1, \cdots, \lambda_n$ 表示复矩阵 M 的特征值[15]。众所周知，图 G 的邻接矩阵的特征值满足 $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i(G) = 0$ 和 $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2(G) = 2m$。

图 G 的能量 $E(G)$ 是由 Gutman [16]在 1978 年提出，定义如下：

$$E(G)=\sum_{i=1}^{n}|\lambda_i|, \tag{1}$$

其中 $\lambda_1,\cdots,\lambda_n$ 是邻接矩阵 $A(G)$ 的特征值。

设 $S\subseteq V(G)$ 且 $|S|=\sigma$ 。设 G_S 是在图 G 的基础上，对属于集合 S 中的每个顶点增加一个自环所得到的图。2021 年，Gutman 等学者在[5]中给出了 G_S 的邻接矩阵 $A(G_S)$ 的定义。矩阵 $A(G_S)$ 是一个 n 阶的对称矩阵，其中矩阵 $A(G_S)$ 的 (i,j) 元素定义为：

$$A(G_S)_{ij}=\begin{cases}1, & \text{如果}v_i\text{和}v_j\text{相邻;}\\ 0, & \text{如果}v_i\text{和}v_j\text{不相邻;}\\ 1, & \text{如果}i=j\text{且}v_i\in S;\\ 0, & \text{如果}i=j\text{且}v_i\notin S;\end{cases} \tag{2}$$

Gutman [5]等学者提出了自环图的能量概念，定义如下：

$$E(G_S)=\sum_{i=1}^{n}\left|\lambda_i(G_S)-\frac{\sigma}{n}\right|, \tag{3}$$

其中 $\lambda_1(G_S),\cdots,\lambda_n(G_S)$ 是矩阵 $A(G_S)$ 的特征值。

我们根据邻接矩阵 $A(G_S)$ 的定义和矩阵的迹的定义可以得到以下等式

$$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i(G_S)=\sigma. \tag{4}$$

本文主要研究了自环图 G_S 的能量 $E(G_S)$ 的下界。

3. 一些辅助引理

接下来我们给出一些引理和定理，它们在我们的结果证明过程中起着重要作用。

引理 1 [5]令 G_S 是一个阶为 n，边数为 m，并且有 σ 个自环的图。设 $\lambda_1(G_S),\cdots,\lambda_n(G_S)$ 是它的特征值，则有

$$\sum_{i=1}^{n}\left|\lambda_i(G_S)-\frac{\sigma}{n}\right|^2=2m+\sigma-\frac{\sigma^2}{n}. \tag{5}$$

定理 1 [5]设 G_S 是一个阶为 n，边数为 m，并且有 σ 个自环的图。则

$$E(G_S)\le\sqrt{n\left(2m+\sigma-\frac{\sigma^2}{n}\right)}. \tag{6}$$

定理 2 [11]设 G 是一个有 m 条边且邻接矩阵为 $A(G)$ 的简单连通图。则

$$E(G)\ge\frac{4m}{s\left[A(G)\right]}, \tag{7}$$

当 $G\cong K_n$ 和 $G\cong K_{\frac{n}{2},\frac{n}{2}}$ 时等号成立。

4. 主要结果及其证明

在下面的定理中，我们用 σ,n,m 和邻接矩阵 $A(G_S)$ 建立了自环图的能量 $E(G_S)$ 的下界。

定理 3 令 G_S 是一个阶为 n，边数为 m，并且有 σ 个自环和邻接矩阵为 $A(G_S)$ 的图。则有

$$E\left(G_S\right) \geq \frac{2\left(2m+\sigma-\dfrac{\sigma^2}{n}\right)}{s\left[A\left(G_S\right)\right]}. \tag{8}$$

证明 设 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 和 $a_1,a_2,\cdots,a_n$ 是两个实数序列，其中 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 满足

$$\sum_{i=1}^{n}\left|x_i\right|=1, \sum_{i=1}^{n}x_i=0. \tag{9}$$

对于这样的序列，在专著[17]中证明了以下不等式

$$\left|\sum_{i=1}^{n}a_i x_i\right| \leq \frac{1}{2}\left(\max_{1\leq i\leq n}\left(a_i\right)-\min_{1\leq i\leq n}\left(a_i\right)\right). \tag{10}$$

设 $a_i=\lambda_i\left(G_S\right)-\dfrac{\sigma}{n}$， $x_i=\dfrac{\lambda_i\left(G_S\right)-\dfrac{\sigma}{n}}{\sum_{i=1}^{n}\left|\lambda_i\left(G_S\right)-\dfrac{\sigma}{n}\right|}$，其中 $i=1,\cdots,n$。则有

$$\sum_{i=1}^{n}x_i=\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(\lambda_i\left(G_S\right)-\dfrac{\sigma}{n}\right)}{\sum_{i=1}^{n}\left|\lambda_i\left(G_S\right)-\dfrac{\sigma}{n}\right|}=0,$$

$$\sum_{i=1}^{n}\left|x_i\right|=\frac{\sum_{i=1}^{n}\left|\lambda_i\left(G_S\right)-\dfrac{\sigma}{n}\right|}{\sum_{i=1}^{n}\left|\lambda_i\left(G_S\right)-\dfrac{\sigma}{n}\right|}=1. \tag{11}$$

满足了等式(9)的条件。因此，根据引理 1 和自环图的能量的定义，我们有

$$\frac{2m+\sigma-\dfrac{\sigma^2}{n}}{E\left(G_S\right)}=\left|\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(\lambda_i\left(G_S\right)-\dfrac{\sigma}{n}\right)^2}{\sum_{i=1}^{n}\left|\lambda_i\left(G_S\right)-\dfrac{\sigma}{n}\right|}\right| \leq \frac{1}{2}\left(\max_{1\leq i\leq n}\left(\lambda_i\left(G_S\right)-\frac{\sigma}{n}\right)-\min_{1\leq i\leq n}\left(\lambda_i\left(G_S\right)-\frac{\sigma}{n}\right)\right), \tag{12}$$

进一步我们得到

$$\frac{2m+\sigma-\dfrac{\sigma^2}{n}}{E\left(G_S\right)} \leq \frac{1}{2}\left(\max\left(\lambda_i\left(G_S\right)\right)-\min\left(\lambda_i\left(G_S\right)\right)\right)=\frac{1}{2}s\left[A\left(G_S\right)\right], \tag{13}$$

经过移项得到

$$E\left(G_S\right) \geq \frac{2\left(2m+\sigma-\dfrac{\sigma^2}{n}\right)}{s\left[A\left(G_S\right)\right]}. \tag{14}$$

特别地，当 $\sigma=0$ 时，即为定理 2。

结合定理 1 和定理 3 可以直接得到如下结论。

推论 1 令 G_S 是一个阶为 n，边数为 m，并且有 σ 个自环和邻接矩阵为 $A\left(G_S\right)$ 的图。则有

$$\frac{2\left(2m+\sigma-\frac{\sigma^2}{n}\right)}{s\left[A\left(G_S\right)\right]} \le E\left(G_S\right) \le \sqrt{n\left(2m+\sigma-\frac{\sigma^2}{n}\right)}. \tag{15}$$

5. 总结和讨论

在本文中，我们利用分析不等式的方法得到了自环图能量的下界，但这仅仅局限于分析不等式。对于图能量的研究方法还有很多，比如代数方法、矩阵论等方法，未来可以尝试利用这些方法探索出不同的上下界。对图能量的研究大多倾向于图的结构，而对它的应用研究得少，当然也有学者在图能量应用方面做了一些研究，如文献[18]探讨了图的能量在定量结构－性质/活性关系(QSPR/QSAR)中发挥的作用；文献[19]探讨了图的能量与熵有关。同样的，也可以将其类比到自环图的能量中，自环图的能量也可以作为一种有用的分子描述符，因为分子描述符是分子结构和物理化学性质的数学表示，这可以使研究人员更好地理解它的性质和行为。今后我们将倾向于探索自环图的应用，如探讨自环图的能量在定量结构－性质/活性关系(QSPR/QSAR)中发挥的作用和自环图能量与熵的关系等。

基金项目

国家自然科学基金(12101126)；福建省自然科学基金(2023J01539)。

参考文献

[1] Gutman, I. (1979) Topological Studies on Heteroconjugated Molecules: Alternant Systems with One Heteroatom. *Theoretica Chimica Acta*, **50**, 287-297. https://doi.org/10.1007/BF00551336

[2] Gutman, I. (1990) Topological Studies on Heteroconjugated Molecules. VI. Alternant Systems with Two Heteroatoms. *Zeitschrift für Naturforschung A*, **45**, 1085-1089. https://doi.org/10.1515/zna-1990-9-1005

[3] Mallion, R.B., Schwenk, A.J. and Trinajstic, N. (1974) Graphical Study of Heteroconjugated Molecules. *Croatica Chemica Acta*, **46**, 171-182.

[4] Gutman, I. (2016) Total π-Electron Energy of Conjugated Molecules with Non-Bonding Molecular Orbitals. *Zeitschrift für Naturforschung A*, **71**, 161-164. https://doi.org/10.1515/zna-2015-0447

[5] Gutman, I., Redzepovic, I., Furtula, B. and Sahal, A.M. (2022) Energy of Graphs with Self-Loops. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **87**, 645-652. https://doi.org/10.46793/match.87-3.645G

[6] Jovanovic, I.M., Zogic, E. and Glogic, E. (2023) On the Conjecture Related to the Energy of Graphs with Self-Loops. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **89**, 479-488. https://doi.org/10.46793/match.89-2.479J

[7] Anchan, D.V., Dsouza, S., Gowtham, H.J. and Bhat, P.G. (2023) Laplacian Energy of a Graph with Self-Loops. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **90**, 247-258. https://doi.org/10.46793/match.90-1.247V

[8] Anchan, D.V., Dsouza, S., Gowtham, H.J. and Bhat, P.G. (2023) Sombor Energy of a Graph with Self-Loops. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **90**, 773-786. https://doi.org/10.46793/match.90-3.773A

[9] Jahanbani, A. (2017) Some New Lower Bounds for Energy of Graphs. *Applied Mathematics and Computation*, **296**, 233-238. https://doi.org/10.1016/j.amc.2016.10.019

[10] Jahanbani, A. (2018) Lower Bounds for the Energy of Graphs. *AKCE International Journal of Graphs and Combinatorics,* **15**, 88-96. https://doi.org/10.1016/j.akcej.2017.10.007

[11] Jahanbani, A. and Sheikholeslami, S.M. (2023) Some Lower Bounds for the Energy of Graphs in Terms of Spread of Matrix. *Mediterranean Journal of Mathematics*, **20**, Article No. 2. https://doi.org/10.1007/s00009-022-02204-1

[12] Milovanovic, I., Milovanovic, E., Altindag, B.S.B. and Matejic, M. (2022) McClelland-Type Upper Bounds for Graph Energy. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **88**, 141-155. https://doi.org/10.46793/match.88-1.141M

[13] Akbari, S., Menderj, H.A., Ang, M.H., Lim, J. and Ng, Z.C. (2023) Some Results on Spectrum and Energy of Graphs with Loops. *Bulletin of the Malaysian Mathematical Sciences Society*, **46**, Article No. 94. https://doi.org/10.1007/s40840-023-01489-z

[14] Brouwer, A.E. and Haemers, W.H. (2012) Spectra of Graphs. Springer, New York. https://doi.org/10.1007/978-1-4614-1939-6

[15] Gregory, D.A., Hershkowitz, D. and Kirkland, S.J. (2001) The Spread of the Spectrum of a Graph. *Linear Algebra and Its Applications*, **332-334**, 23-35. https://doi.org/10.1016/S0024-3795(00)00086-0

[16] Gutman, I. (1978) The Energy of a Graph. *Graz Forschungszentrum Mathematisch-Statistische Sektion Berichte*, **103**, 1-22.

[17] Milovanovic, I.Z. and Vasic, P.M. (1970) Analytic Inequalities. Springer, Berlin.

[18] Gutman, I., Vidovic, D., Cmiljanovic, N., Milosavljevic, S. and Radenkovic, S. (2003) Graph Energy—A Useful Molecular Structure-Descriptor. *Indian Journal of Chemistry A*, **42**, 1309-1311.

[19] Dehmer, M., Li, X.L. and Shi, Y.T. (2015) Connections between Generalized Graph Entropies and Graph Energy. *Complexity*, **21**, 35-41. https://doi.org/10.1002/cplx.21539