

图的 Seidel Laplacian-Estrada 指标

孔祥瑞, 吴宝丰

(上海理工大学 理学院, 上海 200093)

摘要: 设 G 为简单图, d_i 表示顶点 v_i 的度, G 的 Seidel Laplacian 矩阵 $S_L(G)$ 是一个对角元为 $n-1-2d_i$, 非对角元为 ± 1 的实对称矩阵, 当顶点 v_i 和 v_j 相邻时, $(S_L(G))_{ij}=1$, 否则, $(S_L(G))_{ij}=-1$ 。引入并研究了 Seidel Laplacian 矩阵的 Estrada 指标, 给出了该指标的上、下界, 以及它与 Seidel Laplacian 能量之间的关系。

关键词: Seidel Laplacian 矩阵; Seidel Laplacian-Estrada 指标; Seidel Laplacian 能量; 界
中图分类号: O 157.5 **文献标志码:** A

Seidel Laplacian-Estrada Index of Graphs

KONG Xiangyu, WU Baofeng

(College of Science, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China)

Abstract: Let G be a simple graph and d_i be the degree of the vertex v_i . The Seidel Laplacian matrix of a graph G is a real symmetric matrix with diagonal elements of $n-1-2d_i$ and off-diagonal elements of ± 1 . If the vertices v_i and v_j are adjacent, $(S_L(G))_{ij}=1$, and otherwise, $(S_L(G))_{ij}=-1$. The Seidel Laplacian-Estrada index was introduced and investigated. The upper and lower bounds for the Seidel Laplacian-Estrada index, and the relationship between the Seidel Laplacian-Estrada index and the Seidel Laplacian energy are provided.

Keywords: Seidel Laplacian matrix; Seidel Laplacian-Estrada index; Seidel Laplacian energy; bound

1 基本概念

本文研究的图均为简单无向图, 有 m 条边、 n 个顶点, 记为 G , 它的补图用 $\bar{G}$ 表示。图的 Seidel 矩阵 $S(G)$ 定义为 $J-I-2A(G)$ (见文献[1]), 其中, J 为全 1 矩阵, I 为单位矩阵, $A(G)$ 为图 G 的邻接矩阵, 易知 $S(G)=A(\bar{G})-A(G)$ 。设 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 表示 Seidel 矩阵的特征值, 则图 G 的 Seidel 能量定义为

$$E_S(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|, \text{ Seidel-Estrada 指标定义为 } SEE(G) = \sum_{i=1}^n e^{\lambda_i} \text{ (见文献[2])}。$$

设 d_i 表示顶点 v_i 的度, 文献[3]给出了图 G 的 Seidel Laplacian 矩阵的定义, 即 $S_L(G) = D_S(G) - S(G)$, 其中, $D_S(G) = \text{diag}(n-1-2d_1, n-1-2d_2, \dots, n-1-2d_n)$ 。Seidel Laplacian 矩阵是一个对角元为 $n-1-2d_i$, 非对角元为 ± 1 的实对称矩阵, 当顶点

收稿日期: 2018-05-07

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (11301340); 沪江基金资助项目 (B14005)

第一作者: 孔祥瑞 (1994-), 女, 硕士研究生。研究方向: 代数图论。E-mail: 1070737104@qq.com

通信作者: 吴宝丰 (1978-), 男, 讲师。研究方向: 代数图论。E-mail: bauferm@usst.edu.cn

v_i 和 v_j 相邻时, $(S_L(G))_{ij} = 1$, 否则, $(S_L(G))_{ij} = -1$ 。由于 $S_L(G)$ 的行和均为0, 所以, 它必有特征值0。 $S_L(G)$ 的谱, 即它的所有特征值构成的多重集合, 称为图 G 的 Seidel Laplacian 谱, 如完全图 K_n 的 Seidel Laplacian 谱为 $\{0, (-n)^{(n-1)}\}$, 完全二部图 $K_{p,q}$ 的 Seidel Laplacian 谱为 $\{(p-q)^{(p-1)}, (q-p)^{(q-1)}, 0, -(p+q)\}$ 。易知 $S_L(\bar{G}) = -S_L(G)$, 所以, 补图的 Seidel Laplacian 谱完全由原图的谱确定。设 $D(G) = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n)$ 为度对角矩阵, 注意到 $D_S(G) = D(\bar{G}) - D(G)$, 于是, $S_L(G) = L(\bar{G}) - L(G)$, 其中, $L(G) = D(G) - A(G)$ 表示图 G 的 Laplacian 矩阵。

图 G 的 Laplacian 能量定义为 $E_L(G) = \sum_{i=1}^n \left| \mu_i - \frac{2m}{n} \right|$, 其中, μ_i 为 $L(G)$ 的特征值。类似地, 图 G 的 Seidel Laplacian 能量定义为^[3]

$$E_{SL}(G) = \sum_{i=1}^n \left| \sigma_i - \frac{n(n-1)-4m}{n} \right|$$

其中, $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$ 为 $S_L(G)$ 的特征值。令 $\xi_i = \sigma_i - \frac{n(n-1)-4m}{n} (i = 1, 2, \dots, n)$, 则 $\sum_{i=1}^n \xi_i = 0$, 于是, 图 G 的 Seidel Laplacian 能量可以表示为

$$E_{SL} = E_{SL}(G) = \sum_{i=1}^n |\xi_i|$$

图的 Estrada 指标有若干种, 见文献[4-7]以及它们的参考文献。类似 Seidel-Estrada 指标, 本文引入图的 Seidel Laplacian-Estrada 指标, 定义为

$$SLEE = SLEE(G) = \sum_{i=1}^n e^{\xi_i}$$

现研究图的 Seidel Laplacian-Estrada 指标, 给出该指标的上、下界以及它与 Seidel Laplacian 能量之间的关系。

2 Seidel Laplacian-Estrada 指标的上下界

为方便起见, 设 $\xi_1 \geq \xi_2 \geq \dots \geq \xi_n$, 令 $S_k(G) = \sum_{i=1}^n \xi_i^k$, $S^k(G) = \sum_{i=1}^n |\xi_i|^k$, 其中, $S_0(G) = S^0(G) = n$, $S_1(G) = 0$, $S^1(G) = E_{SL}(G)$ 。令 $Z_1(G) = \sum_{i=1}^n d_i^2$, 称为图 G 的第一 Zagreb 指标, 它的数学性质在文献[8-9]中有研究。

引理 1^[3] 设 G 为 m 边的 n 阶图, 则 $S^2(G) =$

$$S_2(G) = \sum_{i=1}^n \xi_i^2 = M, \text{ 其中, } M = n(n-1) + 4Z_1(G) - \frac{16m^2}{n}。$$

引理 2 (Hölder 不等式^[10]) 设 $p, q > 1, \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$, 则对于任意 $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T, Y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T \in \mathbb{R}^n$, 有

$$\left| \sum_{k=1}^n x_k y_k \right| \leq \left(\sum_{k=1}^n |x_k|^p \right)^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{k=1}^n |y_k|^q \right)^{\frac{1}{q}}$$

定理 1 设 $k > 2$, 则 $S^k(G) = \sum_{i=1}^n |\xi_i|^k \geq M^{\frac{k}{2}} n^{1-\frac{k}{2}}$ 。

证明 令 $X = (\xi_1^2, \xi_2^2, \dots, \xi_n^2)^T, Y = (1, 1, \dots, 1)^T$, 由 Hölder 不等式 $|X^T Y| \leq \|X\|_p \|Y\|_q$ (其中, $p, q > 1, \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$), 可得 $\sum_{i=1}^n \xi_i^2 \leq \left(\sum_{i=1}^n |\xi_i^2|^p \right)^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{i=1}^n 1^q \right)^{\frac{1}{q}}$ 。因为, $\sum_{i=1}^n \xi_i^2 = M$, 所以, $\left(\sum_{i=1}^n |\xi_i|^{2p} \right)^{\frac{1}{p}} \geq \frac{M}{n^{1-\frac{1}{p}}}$, $\sum_{i=1}^n |\xi_i|^{2p} \geq M^p n^{1-p}$ 。令 $2p = k$, 此时满足 $p > 1$, 从而有 $S^k(G) = \sum_{i=1}^n |\xi_i|^k \geq M^{\frac{k}{2}} n^{1-\frac{k}{2}}$ 。

引理 3 设 G 为 m 边的 n 阶图, 则

a. $SLEE(G) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{S_k(G)}{k!}$ 。

b. $SLEE(G) = n + \sum_{k=2}^{\infty} \left(\frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n \xi_i^k \right)$ 。

证明 a. $SLEE(G) = \sum_{i=1}^n e^{\xi_i} = \sum_{i=1}^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\xi_i^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n \xi_i^k \right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{S_k(G)}{k!}$ 。

b. $SLEE(G) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{S_k(G)}{k!} = S_0(G) + S_1(G) + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{S_k(G)}{k!} = n + \sum_{k=2}^{\infty} \left(\frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n \xi_i^k \right)$ 。

引理 4 设 G 为 m 边的 n 阶图, $n \geq 2$, 则

a. 不可能有 $\xi_1 = \xi_2 = \dots = \xi_n$ 。

b. $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ 中不可能同时有整数和非整有理数。

证明 a. 假设 $\xi_1 = \xi_2 = \dots = \xi_n$, 根据 $\sum_{i=1}^n \xi_i = 0$, 可得 $\xi_i = 0 (i = 1, 2, \dots, n)$, 从而有 $\sigma_i = \frac{n(n-1)-4m}{n}$, 记为 σ 。由于 $S_L(G)$ 是实对称矩阵, 故存在可逆矩阵 P , 使得 $P^{-1}S_L(G)P = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) = \sigma I$ 。于是, $S_L(G) = P(\sigma I)P^{-1} = \sigma I$, 从而有 $S_L(G)$ 的非对角元全为0, 与 $S_L(G)$ 的定义矛盾。

b. 由于 $S_L(G)$ 的特征多项式是首系数为1的整

系数多项式, 故其特征值 $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$ 均为代数整数(即整数或无理数)。又 $\xi_i = \sigma_i - \frac{n(n-1)-4m}{n} (i = 1, 2, \dots, n)$, 于是, 当 $\frac{4m}{n}$ 为整数时, $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ 为整数或无理数; 当 $\frac{4m}{n}$ 为非整有理数时, $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ 则为无理数或非整有理数。因此, $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ 中不可能同时有整数和非整有理数。

引理 5 设 G 为 m 边的 n 阶图, $n \geq 2$, 则有:
a. $\xi_1 > 0$; b. $\xi_n < 0$ 。

证明 根据 $\xi_1 \geq \xi_2 \geq \dots \geq \xi_n$ 和 $\sum_{i=1}^n \xi_i = 0$, 可知 $\xi_1 \geq 0, \xi_n \leq 0$ 。假设 $\xi_1 = 0$, 则 $\xi_1 = \xi_2 = \dots = \xi_n = 0$, 与引理 4 的 a 矛盾, 所以, $\xi_1 > 0$ 。类似地, $\xi_n < 0$ 。

现考虑 Seidel Laplacian-Estrada 指标的界, 根据算术-几何平均值不等式, $SLEE(G) \geq n \sqrt[n]{e^{\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_n}} = n$, 当 $n \geq 2$ 时, 由引理 4 的 a 可知等号不成立, 所以, $SLEE > n$ 。下面的定理 2 改进了该下界, 其证明思想来源于文献[2]。

定理 2 设 G 为 m 边的 n 阶图, $n \geq 2$, 则

$$SLEE(G) > \sqrt{n^2 + 2M}$$

证明 当 $n = 2, 3$ 时, 图 G 只有 6 种情形, 它们的 Seidel Laplacian-Estrada 指标和 $\sqrt{n^2 + 2m}$ 可以直接计算并作比较, 如表 1 所示, 显然, 当 $n = 2, 3$ 时结论成立。

表 1 图的 Seidel Laplacian-Estrada 指标和下界
Tab.1 Seidel Laplacian-Estrada index and lower bound of a graph

指标和下界	$2K_1$	K_2	$3K_1$	$K_1 \cup K_2$	P_3	K_3
$SLEE(G)$	3.086 2	3.086 2	5.571 9	11.014 6	7.339 2	8.124 8
$\sqrt{n^2 + 2M}$	2.828 4	2.828 4	4.582 6	5.131 6	5.131 6	4.582 6

考虑 $n \geq 4$ 情形。由于

$$SLEE^2(G) = \left(\sum_{i=1}^n e^{\xi_i} \right)^2 = \sum_{i=1}^n e^{2\xi_i} + 2 \sum_{i < j} e^{\xi_i} e^{\xi_j} \quad (1)$$

根据算术-几何平均值不等式, 有

$$2 \sum_{i < j} e^{\xi_i} e^{\xi_j} \geq n(n-1) \left(\prod_{i < j} e^{\xi_i} e^{\xi_j} \right)^{\frac{2}{n(n-1)}} =$$
$$n(n-1) \left[\left(\prod_{i=1}^n e^{\xi_i} \right)^{n-1} \right]^{\frac{2}{n(n-1)}} =$$
$$n(n-1) \left(e^{S_1(G)} \right)^{\frac{2}{n}} = n(n-1) \quad (2)$$

另外,

$$\sum_{i=1}^n e^{2\xi_i} = \sum_{i=1}^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\xi_i)^k}{k!} = \sum_{i=1}^n \frac{(2\xi_i)^0}{0!} + \sum_{i=1}^n \frac{(2\xi_i)^1}{1!} +$$
$$\sum_{i=1}^n \frac{(2\xi_i)^2}{2!} + \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 3} \frac{(2\xi_i)^k}{k!} =$$
$$n + 2S_1 + 2S_2 + \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 3} \frac{(2\xi_i)^k}{k!} =$$
$$n + 2M + \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 3} \frac{(2\xi_i)^k}{k!}$$

由于 $\sum_{k \geq 3} \frac{(2\xi_i)^k}{k!} \geq 8 \sum_{k \geq 3} \frac{\xi_i^k}{k!}$, 则取 $\gamma \in [0, 8]$ 时, 有

$$\sum_{i=1}^n e^{2\xi_i} \geq n + 2M + \gamma \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 3} \frac{\xi_i^k}{k!} =$$
$$n + 2M - \gamma n - \frac{1}{2} \gamma M + \gamma \sum_{i=1}^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\xi_i^k}{k!} =$$
$$n + 2M - \gamma n - \frac{1}{2} \gamma M + \gamma SLEE(G) \quad (3)$$

将式(2)和式(3)代入式(1), 可得

$$SLEE(G) \geq \frac{1}{2} \left(\gamma + \sqrt{(2n - \gamma)^2 + 2M(4 - \gamma)} \right) \quad (4)$$

考虑函数 $f(x) = x + \sqrt{(2n - x)^2 + 2M(4 - x)}$, 有

$$f'(x) = 1 - \frac{M + 2n - x}{\sqrt{(2n - x)^2 + 2M(4 - x)}}$$

当 $n \geq 4, 0 \leq x \leq 8$ 时, $f'(x) \leq 0$ 等价于 $M(M + 4n - 8) \geq 0$, 而后者恒成立, 故 $f(x)$ 单调递减。所以, 可以在式(4)中取 $\gamma = 0$, 可得 $SLEE(G) \geq \sqrt{n^2 + 2M}$ 。若上式等号成立, 则由式(2)可知, $e^{\xi_i + \xi_j} = e^{\xi_k + \xi_l}, i, j, k, l \in \{1, 2, \dots, n\}$, 从而有 $\xi_1 = \xi_2 = \dots = \xi_n$, 与引理 4 的 a 矛盾, 所以, 等号不成立。

定理 3 设 G 为 m 边的 n 阶图, $n \geq 2$, 则 $SLEE(G) < n - 1 - \sqrt{M} + e^{\sqrt{M}}$ 。

证明 根据引理 3 的 b, 有

$$SLEE(G) = n + \sum_{k=2}^{\infty} \left(\frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n \xi_i^k \right) \leq$$
$$n + \sum_{k=2}^{\infty} \left(\frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n |\xi_i|^k \right) = n + \sum_{k=2}^{\infty} \left(\frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n (\xi_i^2)^{\frac{k}{2}} \right) \leq$$
$$n + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\sum_{i=1}^n \xi_i^2 \right)^{\frac{k}{2}} = n - 1 - \sqrt{M} + e^{\sqrt{M}} \quad (5)$$

若式(5)等号成立, 则 $\xi_n = |\xi_n| \geq 0$, 与引理 5 的 b 矛盾, 所以, 等号不成立。

3 Seidel Laplacian-Estrada 指标与 Seidel Laplacian 能量之间的关系

设 n_+ 表示 $\xi_i(i=1,2,\cdots,n)$ 中正数的个数, 当 $n \geq 2$ 时, 由引理 5 的 a 可知, $n_+ \geq 1$ 。因为 $\sum_{i=1}^n \xi_i = 0$, 所以

$$E_{SL} = E_{SL}(G) = 2 \sum_{i=1}^{n_+} \xi_i = -2 \sum_{i=n_++1}^n \xi_i$$

定理 4 设 G 为 m 边的 n 阶图, $n \geq 2$, 则
$$\frac{e}{2} E_{SL}(G) + (n - n_+) e^{-\frac{E_{SL}(G)}{2(n-n_+)}} \leq SLEE(G) < n - 1 - E_{SL}(G) + e^{E_{SL}(G)} \quad (6)$$

式 (6) 左边等号成立当且仅当 $\xi_1 = \cdots = \xi_{n_+} = 1$ 且 $\xi_{n_++1} = \cdots = \xi_n$ 。特别地, 当 $G \cong K_{n/2,n/2}$ (n 为偶数) 时, 式 (6) 左边等号成立。

证明 a. 先证下界。
因为, $e^x \geq ex$ 当且仅当 $x = 1$ 时等号成立, 所以

$$\sum_{\xi_i > 0} e^{\xi_i} = \sum_{i=1}^{n_+} e^{\xi_i} \geq \sum_{i=1}^{n_+} e \xi_i = \frac{e}{2} E_{SL}$$

又因为

$$\sum_{\xi_i \leq 0} e^{\xi_i} = \sum_{i=n_++1}^n e^{\xi_i} \geq (n - n_+) \left(\prod_{i=n_++1}^n e^{\xi_i} \right)^{\frac{1}{n-n_+}} = (n - n_+) \left(e^{\sum_{i=n_++1}^n \xi_i} \right)^{\frac{1}{n-n_+}} = (n - n_+) e^{-\frac{E_{SL}}{2(n-n_+)}}$$

所以

$$SLEE(G) = \sum_{\xi_i > 0} e^{\xi_i} + \sum_{\xi_i \leq 0} e^{\xi_i} \geq \frac{e}{2} E_{SL} + (n - n_+) e^{-\frac{E_{SL}}{2(n-n_+)}} \quad (7)$$

显然, 式 (7) 等号成立当且仅当 $\xi_1 = \cdots = \xi_{n_+} = 1$ 且 $\xi_{n_++1} = \cdots = \xi_n$ 。特别地, 当 $G \cong K_{n/2,n/2}$ 时, 此时 n 必为偶数, 易得 $S_L(K_{n/2,n/2})$ 的谱为 $\{0^{(n-1)}, -n\}$ 。又 $\frac{n(n-1)-4m}{n} = -1$, 故 $\xi_1 = \cdots = \xi_{n-1} = 1$, $\xi_n = 1 - n$, 式 (7) 等号成立。

b. 再证上界。
$$SLEE(G) = n + \sum_{k=2}^{\infty} \left(\frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n \xi_i^k \right) \leq n + \sum_{k=2}^{\infty} \left(\frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n |\xi_i|^k \right) \leq n + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\sum_{i=1}^n |\xi_i| \right)^k = n - 1 - E_{SL} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{E_{SL}^k}{k!} = n - 1 - E_{SL} + e^{E_{SL}} \quad (8)$$

若式 (8) 等号成立, 则 $\xi_n = |\xi_n| \geq 0$, 与引理 5 的 b 矛盾, 所以, 式 (8) 等号不成立。证毕。

若定理 4 中的式 (6) 左边不等式等号成立, 则有: a. $\frac{n_+}{n-n_+}$ 为整数; b. $\frac{4m}{n}$ 为整数; c. $S_L(G)$ 不同特征值只有 2 个: 0 和某非零整数。易知 $\xi_{n_++1} = \cdots = \xi_n = -\frac{n_+}{n-n_+}$ 。根据引理 4 的 b 可知, $\frac{n_+}{n-n_+}$ 必须为整数。此时, 图 G 的 Seidel Laplacian 谱为

$$\left\{ \left(n - \frac{4m}{n} \right)^{(n_+)}, \left(n - 1 - \frac{4m}{n} - \frac{n}{n-n_+} \right)^{(n-n_+)} \right\}$$

考虑到 $S_L(G)$ 的特征值为代数整数, 所以 $\frac{4m}{n}$ 为整数。又因为 $S_L(G)$ 必有特征值 0, 所以 $S_L(G)$ 的不同特征值只有 2 个: 0 和某非零整数。

当 G 为平凡图时, $n = 1$, $SLEE(G) = 1$, 易验证, 定理 2~4 中的所有上、下界都能取到等号。

参考文献:

[1] VAN LINT J H, SEIDEL J J. Equilateral point sets in elliptic geometry[J]. Indagationes Mathematicae (Proceedings), 1966, 28(3): 335-348.
[2] ASKARI J, IRANMANESH A, DAS K C. Seidel-Estrada index[J]. Journal of Inequalities and Applications, 2016, 2016: 120.
[3] RAMANE H S, JUMMANNAVER R B, GUTMAN I. Seidel Laplacian energy of graphs[J]. International Journal of Applied Graph Theory, 2017, 1(2): 74-82.
[4] DE LA PEÑA J A, GUTMAN I, RADA J. Estimating the Estrada index[J]. Linear Algebra and Its Applications, 2007, 427(1): 70-76.
[5] CHEN X, HOU Y P. Some results on Laplacian Estrada index of graphs[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2015, 73(1): 149-162.
[6] DAS K C, LEE S G. On the Estrada index conjecture[J]. Linear Algebra and Its Applications, 2009, 431(1): 1351-1359.
[7] ZHU B X. On the Laplacian Estrada index of graphs[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2011, 66(2): 769-776.
[8] GUTMAN I, DAS K C. The first Zagreb index 30 years after[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2004, 50(50): 83-92.
[9] BOROVIĆANIN B, DAS K C, FURTULA B, et al. Bounds for Zagreb indices[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2017, 78(1): 17-100.
[10] FINNER H. Some new inequalities for the range distribution, with application to the determination of optimum significance levels of multiple range tests[J]. Journal of the American Statistical Association, 1990, 85(409): 191-194.