

# 双圈图的 Total Mostar 指标的极值\*

张玉静, 刘蒙蒙

(兰州交通大学 数理学院, 兰州 730070)

**摘要:**令  $G$  是一个连通图, 图  $G$  的顶点集是  $V(G)$ , 边集是  $E(G)$ 。图  $G$  的 total Mostar 指标定义为:  $S_1(G) = \sum_{e=uv \in E(G)} |t_u(e) - t_v(e)|$ , 其中  $t_u(e)$  表示图  $G$  中到顶点  $u$  的距离比到顶点  $v$  的距离更近的顶点和边的数目,  $t_v(e)$  表示图  $G$  中到顶点  $v$  的距离比到顶点  $u$  的距离更近的顶点和边的数目。为了确定  $n$  阶双圈图的 total Mostar 指标的极值及极值图, 根据双圈图中的圈是否存在公共边分成 2 类, 证明每类图的 total Mostar 指标大于等于极值图的 total Mostar 指标, 得到了  $n$  阶双圈图的 total Mostar 指标的极值, 拓展了 total Mostar 指标的理论研究范围。

**关键词:** 双圈图; total Mostar 指标; 极值图

**中图分类号:** O157.5

**文献标志码:** A

**文章编号:** 1672-6693(2026)01-0034-12

本文只考虑无向有限的简单连通图, 所使用的图论术语和概念请参考文献[1]。对于简单连通图  $G$ , 定义图  $G$  的顶点集为  $V(G)$ , 边集  $E(G)$ , 并且有  $|V(G)| = n, |E(G)| = m$ 。对顶点  $u \in V(G), d_G(u)$  表示图  $G$  中顶点  $u$  的度, 即图  $G$  中与顶点  $u$  关联的边的个数。度为 1 的顶点称为悬挂点, 与悬挂点关联的边称为悬挂边。  $C_n$  和  $P_n$  表示长度为  $n$  的圈和路。对于  $u, v \in V(G)$ , 连接  $u$  和  $v$  的最短路径的长度称为  $u$  和  $v$  之间的距离, 记作  $d_G(u, v)$ 。图  $G$  中顶点  $x$  和边  $e = uv$  之间的距离是:  $d_G(x, e) = \min\{d_G(x, u), d_G(x, v)\}$ 。图  $G$  中边  $e_1 = u_1v_1$  和边  $e_2 = u_2v_2$  之间的距离是:  $d_G(e_1, e_2) = \min\{d_G(u_1, e_2), d_G(v_1, e_2)\}$ 。边数比顶点数多 1 的连通图称为双圈图。

对于边  $e = uv \in E(G)$ , 可定义以下集合:

$$\begin{aligned} N_u(e) &= \{w \in V(G) \mid d(u, w) < d(v, w)\}, M_u(e) = \{f \in E(G) \mid d(u, f) < d(v, f)\}; \\ N_v(e) &= \{w \in V(G) \mid d(v, w) < d(u, w)\}, M_v(e) = \{f \in E(G) \mid d(v, f) < d(u, f)\}; \\ N_0(e) &= \{w \in V(G) \mid d(u, w) = d(v, w)\}, M_0(e) = \{f \in E(G) \mid d(u, f) = d(v, f)\}. \end{aligned}$$

其中:  $n_u(e), n_v(e), n_0(e)$  分别表示  $N_u(e), N_v(e), N_0(e)$  中顶点的数目,  $m_u(e), m_v(e), m_0(e)$  分别表示  $M_u(e), M_v(e), M_0(e)$  中边的数目。根据定义知,  $n_u(e) + n_v(e) + n_0(e) = n, m_u(e) + m_v(e) + m_0(e) = m$ 。此外, 定义:

$$T_u(e) = N_u(e) \cup M_u(e), T_v(e) = N_v(e) \cup M_v(e), T_0(e) = N_0(e) \cup M_0(e),$$

其中:  $t_u(e), t_v(e), t_0(e)$  分别表示  $T_u(e), T_v(e), T_0(e)$  中顶点和边的总数目, 则:

$$t_u(e) + t_v(e) + t_0(e) = n + m.$$

在图论中, 拓扑指标是用于描述图的结构特征的一种数值指标。2018 年, Došlić 等人<sup>[2]</sup>提出了 Mostar 指标的定义, 即:

$$S(G) = \sum_{e=uv \in E(G)} |n_u(e) - n_v(e)|.$$

此外, 文献[2]还给出了树和单圈图的 Mostar 指标的极值。Tepeh 等人<sup>[3]</sup>得到了双圈图的 Mostar 指标的极值及相应的极值图。文献[4-7]也给出了其他 Mostar 指标的研究结果。

\* 收稿日期: 2025-05-15 修回日期: 2025-12-04 网络出版时间: 2026-03-19T18:25

资助项目: 国家自然科学基金面上项目 (No. 11961040)

第一作者简介: 张玉静, 女, 研究方向为图论及应用, E-mail: zhangyujing04@163.com; 通信作者简介: 刘蒙蒙, 女, 教授, 博士, E-mail: liumm05@163.com

网络出版地址: <https://link.cnki.net/urlid/50.1165.N.20260319.1523.004>

2019 年, Arockiaraj 等人<sup>[8]</sup>将 Mostar 指标推广到边 Mostar 指标, 图  $G$  的边 Mostar 指标定义为:

$$S_e(G) = \sum_{e=uv \in E(G)} |m_u(e) - m_v(e)|.$$

文献[9]得出了树和单圈图的边 Mostar 指标的极值, 并且确定了给定边数和圈数的仙人掌图的边 Mostar 指标的上界。Alex 等人<sup>[10]</sup>、Ghalavand 等人<sup>[11]</sup>和 Wang<sup>[12]</sup>等人对双圈图的边 Mostar 指标的极值问题都进行了研究。

Arockiaraj 等人<sup>[8]</sup>还提出了 total Mostar 指标, 对图  $G$  的 total Mostar 指标定义为:

$$S_t(G) = \sum_{e=uv \in E(G)} |t_u(e) - t_v(e)|.$$

文献[13-14]计算了石墨烯、 $\alpha$  型石墨炔等一些化学分子的 Mostar、边 Mostar 和 total Mostar 指标的表达式。文献[15]得到了给定阶数和圈数的仙人掌图的 total Mostar 指标的上界。本文得到了  $n$  阶双圈图的 total Mostar 指标的极值, 并刻画了相应的极值图。

图  $\theta_{a,b,c}$  是由 2 个顶点  $x$  和  $y$  将长度分别为  $a, b, c$  的 3 条不交路  $P_a, P_b, P_c$  连接而成。根据  $\theta_{a,b,c}$  的对称性, 不妨假设  $a \geq b \geq c \geq 1$ , 显然  $|V(\theta_{a,b,c})| \geq 4$ 。

**定理 1** 设  $G$  是阶数  $n \geq 4$  的双圈图, 则:

$$S_t(G) \geq \begin{cases} 8, & \text{当 } n=4 \text{ 时, 当且仅当 } G \cong \theta_{2,2,1} \text{ 时等号成立(图 1a);} \\ 12, & \text{当 } n=5 \text{ 时, 当且仅当 } G \cong \theta_{2,2,2} \text{ 或 } \theta_{3,2,1} \text{ 时等号成立(图 1b、1c);} \\ 3n-4, & \text{当 } n \geq 6 \text{ 且为偶数时, 当且仅当 } G \cong \theta_{n-3,2,2} \text{ 时等号成立(图 1d);} \\ 3n-3, & \text{当 } n \geq 7 \text{ 且为奇数时, 当且仅当 } G \cong \theta_{n-3,2,2} \text{ 时等号成立(图 1d).} \end{cases}$$

**定理 2** 设  $G$  是阶数  $n \geq 10$  的双圈图, 则  $S_t(G) \leq 2n^2 - 42$ , 等号成立当且仅当  $G \cong G_n(4,4)$ , 如图 1e 所示。

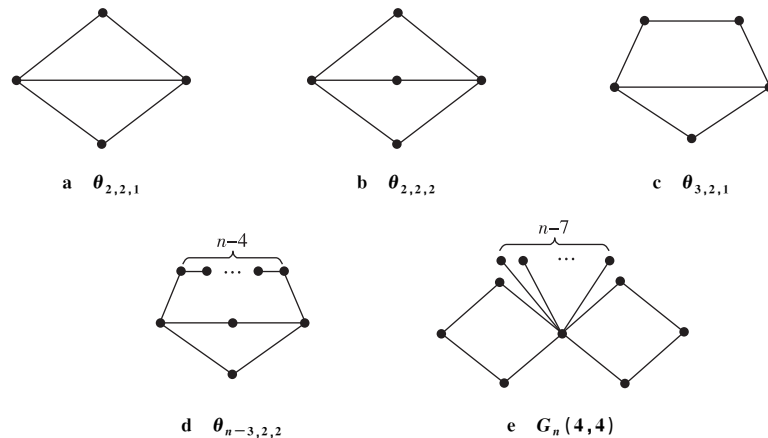


图 1 双圈图的 total Mostar 指标的极值图

Fig. 1 Extremal graphs for the total Mostar index in bicyclic graphs

## 1 预备知识

为方便起见, 用  $\tilde{\varphi}_G(e) = |t_u(e) - t_v(e)|$  表示边  $e$  对图  $G$  的 total Mostar 指标的贡献, 则图  $G$  的 total Mostar 指标可表示为  $S_t(G) = \sum_{e=uv \in E(G)} \tilde{\varphi}_G(e)$ 。

根据双圈图和  $\theta$  图的定义, 可以将双圈图分为 2 种类型:  $\mathcal{B}_n^1$  是恰好包含 2 个圈的  $n$  阶双圈图的集合;  $\mathcal{B}_n^2$  是包含 3 个圈的  $n$  阶双圈图集合, 即如果  $G \in \mathcal{B}_n^2$ , 则它必有 1 个子图同构于  $\theta(a, b, c)$ 。令  $\mathcal{B}_n = \mathcal{B}_n^1 \cup \mathcal{B}_n^2$ 。

**引理 1** 设  $G$  是一个边数为  $m$  的  $n$  阶连通图,  $e=uv \in E(G)$ , 则:

$$\tilde{\varphi}_G(e) = n + m - t_0(e) - 2\min\{t_u(e), t_v(e)\}. \tag{1}$$

**证明** 因为  $t_u(e) + t_v(e) + t_0(e) = n + m$ , 若  $t_u(e) \geq t_v(e)$ , 则:

$$\tilde{\varphi}_G(e) = |t_u(e) - t_v(e)| = t_u(e) - t_v(e) = n + m - t_0(e) - 2t_v(e);$$

若  $t_u(e) < t_v(e)$ , 则:

$$\tilde{\varphi}_G(e) = |t_u(e) - t_v(e)| = t_v(e) - t_u(e) = n + m - t_0(e) - 2t_u(e).$$

所以,式(1)成立。

证毕

**引理 2** 设  $G$  是一个边数为  $m$  的  $n$  阶连通图,  $e = uv$  是图  $G$  的一条割边。则:

$$\tilde{\varphi}_G(e) = n + m - 1 - 2\min\{t_u(e), t_v(e)\}. \tag{2}$$

**证明** 若  $e = uv$  是连通图的一条割边,则  $T_0(e) = \{e\}, t_0(e) = 1$ ,根据式(1)可知,式(2)显然成立。

证毕

**引理 3** 设  $G$  是一个边数为  $m$  的  $n$  阶连通图,  $e = uv$  是图  $G$  的一条割边,则:

$$\tilde{\varphi}_G(e) \leq n + m - 3, \tag{3}$$

当且仅当  $e = uv$  是图  $G$  中的一条悬挂边时等号成立。

**证明** 因为  $t_u(e) = n_u(e) + m_u(e) \geq 1, t_v(e) = n_v(e) + m_v(e) \geq 1$ ,则根据式(2)有:

$$\tilde{\varphi}_G(e) \leq n + m - 1 - 2 \times 1 = n + m - 3,$$

等号成立当且仅当  $e = uv$  是图  $G$  中的一条悬挂边。

证毕

**引理 4** 设  $G$  是阶数为  $n$ ,边数为  $m$  的连通图,  $e = uv$  是  $G$  的非悬挂边的割边,将  $e$  收缩为一点  $w$ ,并在  $w$  上添加一条悬挂边  $wz$ ,得到的图记为  $G'$ ,如图 2 所示,则  $S_t(G) < S_t(G')$ 。

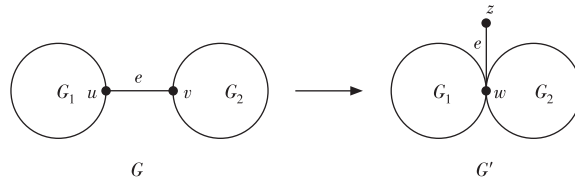


图 2 割边变换

Fig. 2 Cut-edge transformation

**证明** 对于除  $uv$  外的其他边  $e$ ,显然有  $\tilde{\varphi}_G(e) = \tilde{\varphi}_{G'}(e)$ 。由于  $e = uv$  是  $G$  的非悬挂边的割边,根据式(2)可以得到:

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_G(e) &= n + m - 1 - 2\min\{t_u(e), t_v(e)\} \leq n + m - 1 - 2 \times 3 = n + m - 7, \\ \tilde{\varphi}_{G'}(e) &= n + m - 3. \end{aligned}$$

因此,  $S_t(G) < S_t(G')$ 。

证毕

如果一个连通图的每一个块要么是圈,要么是割边,则称这个图为仙人掌图。对于连通图中的一个圈,如果这个圈除 1 个顶点外的所有顶点的度都是 2,则称这个圈为端块圈。如果一个仙人掌图的所有圈恰好有 1 个公共顶点,则称这个仙人掌图为丛。设  $G_n(l_1, \dots, l_k)$  是由  $k$  个长度分别为  $l_1, l_2, \dots, l_k$  的端块圈和将  $n + k - 1 - \sum_{i=1}^k l_i$  条悬挂边附加到这  $k$  个圈的唯一公共顶点上构成的丛。

**引理 5**<sup>[15]</sup> 设  $G$  是具有  $k$  个圈的  $n$  阶仙人掌图,  $l_1, \dots, l_k$  分别是  $k$  个圈的长度,且在  $G$  中奇圈的个数是  $t$ ,其中  $1 \leq k \leq \lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor, 0 \leq t \leq k$ 。如果  $2n + k > 18$  且  $n \geq 3k + 1$ ,则:

$$S_t(G) \leq 2n^2 + 3nk - 6n - 25k + k^2 + 4,$$

当且仅当  $G \cong G_n(\underbrace{4, \dots, 4}_k)$  时等号成立,即  $G$  中所有端块圈的圈长为 4,如图 3 所示。

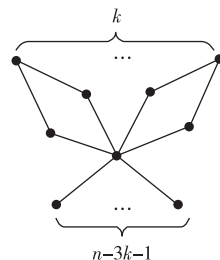


图 3 仙人掌图的 total Mostar 指标的极值图

Fig. 3 Extremal graphs of the total Mostar index of cactus graphs

## 2 定理 1 的证明

**引理 6** 设  $G \cong \theta_{a,b,c}$ ,  $e = uv \in E(P_i)$  ( $i \in \{a, b, c\}$ ), 则:

- 1)  $\tilde{\varphi}(e) = 0$  当且仅当  $P_i$  的长度为奇数,  $e$  是  $P_i$  的中心边。
- 2)  $\tilde{\varphi}(e) \neq 1$ 。
- 3)  $\tilde{\varphi}(e) = 2$  当且仅当满足下列条件之一:
  - i)  $x \in T_u(e), y \in T_v(e)$  (或  $x \in T_v(e), y \in T_u(e)$ ), 并且  $P_i$  的长度为偶数,  $e$  与  $P_i$  的中点关联;
  - ii)  $e \in E(\theta_{n-2,2,1}) \cap E(P_a)$ , 并且  $a = n - 2$  为偶数,  $e$  与  $P_a$  的中点关联。

**证明** 为了证明结论成立, 根据  $\theta_{a,b,c}$  的对称性, 分为以下 3 种情形讨论。

情形 1, 若  $x \in T_u(e), y \in T_v(e)$ , 则  $\tilde{\varphi}(e) = 2|k - h|$ , 其中  $h = d(x, e), k = d(y, e)$ 。

显然, 在  $P_i$  上距离  $u$  近的点 and 边的个数比距离  $v$  近的点 and 边的个数多  $2(h - k)$ , 在  $P_j$  ( $j \neq i$ ) 上距离  $u$  近的点 and 边的个数比距离  $v$  近的点 and 边的个数多  $2(k - h)$ , 所以有:

$$\tilde{\varphi}_G(e) = |t_u(e) - t_v(e)| = |4(k - h) + 2(h - k)| = 2|k - h|。$$

情形 2, 若  $x, y \in T_u(e)$ , 则  $\tilde{\varphi}(e) = 2(|V| - g) + 1$ , 其中  $g$  是包含  $e$  的最短圈的长度。

在此种情形下, 包含  $e$  的最短圈上距离  $u$  近的顶点和边的个数等于距离  $v$  近的顶点和边的个数, 在  $G$  上剩余的顶点和边都距离  $u$  近。所以  $\tilde{\varphi}_G(e) = 2|G| + 1 - 2g = 2(|G| - g) + 1$ 。因为  $G$  是简单图, 所以没有 2 条边连接同一对顶点, 故  $|G| - g \geq 1$ , 因此  $\tilde{\varphi}_G(e) \geq 3$ 。

情形 3, 若  $x \in T_u(e), y \in T_0(e)$ , 则  $\tilde{\varphi}(e) \geq 2c - 1$ 。

在此种情形下, 包含  $e$  的最短圈  $C$  的长度是奇数, 令  $C = P_i \cup P_j$ , 再令  $z_l \in T_0(e) \cap (V \setminus C)$  是距离边  $e$  最近的顶点, 其中  $l$  表示在  $P_q$  ( $q \neq i, j$ ) 上从  $y$  到  $z_l$  的路径的长度。如果  $z_l z_{l+1} \notin T_0(e)$ , 则:

$$d(x, z_l) = d(z_l, y) + d(x, y) = d(z_l, y) + c,$$

所以有:

$$\tilde{\varphi}_G(e) = 2d(x, z_l) - 1 = 2d(z_l, y) + 2c - 1 \geq 2c - 1,$$

当且仅当  $d(z_l, y) = 0$  时等号成立, 即  $b = c$ 。

如果  $z_l z_{l+1} \in T_0(e)$ , 则  $d(x, z_{l+1}) = d(x, y) + d(y, z_l) = d(y, z_l) + c$ , 所以有:

$$\tilde{\varphi}_G(e) = 2d(x, z_{l+1}) = 2d(y, z_l) + 2c \geq 2c,$$

当且仅当  $d(z_l, y) = 0$  时等号成立, 即  $b = c + 1$ 。

在情形 2 和情形 3 下,  $\tilde{\varphi}_G(e) \neq 0$ 。由情形 1 知,  $\tilde{\varphi}_G(e) = 0$  当且仅当  $h = k$ , 即  $P_i$  的长度为奇数,  $e$  是  $P_i$  的中心边。

在情形 1 和情形 2 下, 显然  $\tilde{\varphi}_G(e) \neq 1$ 。在情形 3 下, 若  $\tilde{\varphi}_G(e) \geq 2c$ , 显然  $\tilde{\varphi}_G(e) \neq 1$ ; 若  $\tilde{\varphi}_G(e) = 2c - 1 = 1$ , 则  $c = 1$ , 与  $G$  是简单图矛盾。因此, 在  $G$  中  $\tilde{\varphi}_G(e) = 1$ 。

在情形 2 下  $\tilde{\varphi}_G(e) \neq 2$ 。根据情形 1, 当  $|k - h| = 1$  时有  $\tilde{\varphi}_G(e) = 2$ , 即  $P_i$  的长度为偶数,  $e$  与  $P_i$  的中点关联。根据情形 3, 令  $\tilde{\varphi}_G(e) = 2c = 2$ , 则  $c = 1, b = 2, a = n - 2$ , 根据情形 3 的证明过程知, 当  $e \in E(\theta_{n-2,2,1}) \cap E(P_a)$  时,  $a = n - 2$  为偶数,  $e$  与  $P_a$  的中点关联时有  $\tilde{\varphi}_G(e) = 2$ 。证毕

当  $n = 4$  时,  $G \cong \theta_{2,2,1}$ , 且  $S_t(\theta_{2,2,1}) = 8$ 。当  $n = 5$  时,  $G \cong \theta_{2,2,2}$  或  $\theta_{3,2,1}$  或  $H_1$  或  $H_2$  或  $H_3$ , 如图 4 所示。并且  $S_t(\theta_{2,2,2}) = S_t(\theta_{3,2,1}) = 12, S_t(H_1) = 22, S_t(H_2) = 16, S_t(H_3) = 20$ , 所以当  $n = 5$  时,  $S_t(G) \geq 12$ , 当且仅当  $G \cong \theta_{3,2,1}$  或  $\theta_{2,2,2}$  时等号成立。

下面证明  $n \geq 6$  的双圈图的 total Mostar 指标的下界。

**引理 7** 设  $n \geq 6$ , 如果  $n$  为奇数, 则  $S_t(\theta_{n-3,2,2}) = 3n - 3$ ; 如果  $n$  为偶数, 则  $S_t(\theta_{n-3,2,2}) = 3n - 4$ 。

**证明** 若  $n$  为奇数, 则与  $P_a, P_b$  和  $P_c$  的中点关联的 6 条边有  $\tilde{\varphi}(e) = 2$ , 对于  $\theta_{n-3,2,2}$  上的其他边有  $\tilde{\varphi}(e) = 3$ , 所以有:

$$S_t(\theta_{n-3,2,2}) = 2 \times 6 + 3 \times (n - 5) = 3n - 3。$$

若  $n$  为偶数, 则  $P_b$  和  $P_c$  上的边有  $\tilde{\varphi}(e)=2, P_a$  的中心边有  $\tilde{\varphi}(e)=0$ , 对于  $P_a$  上的其他边有  $\tilde{\varphi}(e)=3$ , 所以有:

$$S_t(\theta_{n-3,2,2})=2 \times 4+3 \times(n-4)=3 n-4 . \quad \text{证毕}$$

根据引理 7, 当  $n \geq 6$  时, 有  $S_t(\theta_{n-3,2,2}) \leq 3 n-3$ . 因此, 接下来需要证明, 对于除  $\theta_{n-3,2,2}$  外的双圈图  $G$ , 均有  $S_t(G) > S_t(\theta_{n-3,2,2})$ , 即  $S_t(G) > 3 n-3$ .

对于图  $G$  中的路  $P:=u_0 u_1 u_2 u_3 \cdots u_r$ , 如果  $u_0$  与  $u_r$  中一个顶点的度为 1, 另一个顶点的度不小于 3,  $P$  上其余顶点的度都为 2, 则称  $P$  是图  $G$  的一条悬挂路。

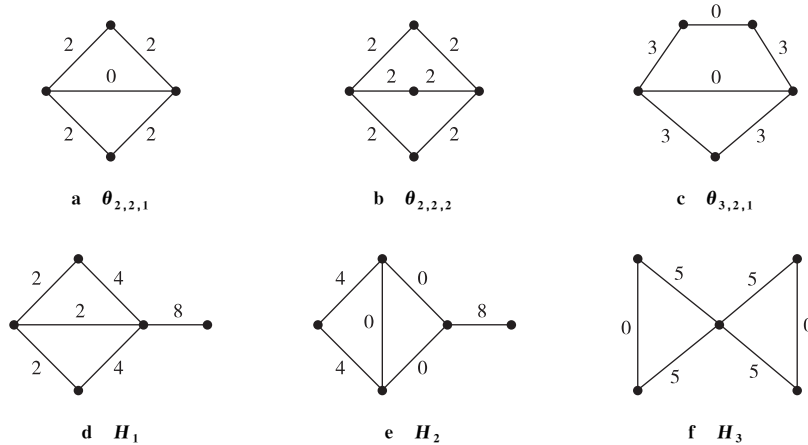


图 4 图  $\theta_{2,2,1}, \theta_{2,2,2}, \theta_{3,2,1}, H_1, H_2, H_3$  中每条边对 total Mostar 指标的贡献

Fig. 4 Contribution of each edge to the total Mostar index in graphs  $\theta_{2,2,1}, \theta_{2,2,2}, \theta_{3,2,1}, H_1, H_2, H_3$

引理 8 设  $G \in \mathcal{B}_n (n \geq 6)$ , 若  $G$  至少包含 2 条悬挂路或 1 条  $n \geq 3$  的悬挂路, 则  $S_t(G) > S_t(\theta_{n-3,2,2})$ 。

证明 假设  $G'$  是不包含悬挂边的双圈图。根据式 (3),  $G$  中的悬挂边有  $\tilde{\varphi}_G(e)=2 n-2$ 。若  $G$  至少包含 2 条悬挂路, 则  $S_t(G) \geq 2(2 n-2) > 3 n-3$ 。若  $G$  包含 1 条  $n \geq 3$  的悬挂路, 则根据式 (2) 知, 与悬挂边相邻的边有  $\tilde{\varphi}_G(e)=2 n-6$ , 所以  $S_t(G) \geq 2 n-6+2 n-2=4 n-8 > 3 n-3$ 。

综上所述,  $S_t(G) > 3 n-3 > S_t(\theta_{n-3,2,2})$ 。证毕

定理 3 若  $G \in \mathcal{B}_n^1 (n \geq 6)$ , 则  $S_t(G) > S_t(\theta_{n-3,2,2})$ 。

证明 如果  $G$  至少包含 2 条悬挂路或 1 条  $n \geq 3$  的悬挂路, 根据引理 8,  $S_t(G) > S_t(\theta_{n-3,2,2})$ 。如果  $G \cong G'$  或  $G \cong G' \cup \{e\}$ , 其中  $G'$  是不包含悬挂边的双圈图。令  $C_a$  和  $C_b$  表示  $G'$  中的 2 个圈,  $t$  为连接  $C_a$  和  $C_b$  的路径的长度, 记为  $P_{u_1-u_2}$ , 其中  $u_1$  和  $u_2$  分别在圈  $C_a$  和  $C_b$  中, 如果  $t=0$ , 则  $u_1=u_2$ 。令  $e_1$  和  $e_2$  是与  $u_1$  关联的  $C_a$  中的边,  $f_1$  和  $f_2$  是与  $u_2$  关联的  $C_b$  中的边。为了证明结论成立, 分为以下 3 种情形进行讨论。

情形 1, 若  $G \cong G'$ , 则  $n=a+b+t-1$ , 并且  $\tilde{\varphi}_G(e_1)=\tilde{\varphi}_G(e_2)=2 b+2 t-1, \tilde{\varphi}_G(f_1)=\tilde{\varphi}_G(f_2)=2 a+2 t-1$ 。则:

$$S_t(G) \geq \tilde{\varphi}_G(e_1)+\tilde{\varphi}_G(e_2)+\tilde{\varphi}_G(f_1)+\tilde{\varphi}_G(f_2)=4 b+4 t+4 a+4 t-4=4 n+4 t .$$

情形 2, 若  $G \cong G' \cup \{e\}$ , 悬挂边附加在路  $P_{u_1-u_2}$  的某一个顶点上, 则  $n=a+b+t$ , 且  $\tilde{\varphi}_G(e_1)=\tilde{\varphi}_G(e_2)=2 b+2 t+1, \tilde{\varphi}_G(f_1)=\tilde{\varphi}_G(f_2)=2 a+2 t+1$ 。则:

$$S_t(G) \geq \tilde{\varphi}_G(e_1)+\tilde{\varphi}_G(e_2)+\tilde{\varphi}_G(f_1)+\tilde{\varphi}_G(f_2)=4 b+4 t+4 a+4 t+4=4 n+4 t+4 .$$

情形 3, 若  $G \cong G' \cup \{e\}$ , 根据对称性, 不妨假设悬挂边附加在  $C_a$  上, 则  $n=a+b+t$ , 并且  $\tilde{\varphi}_G(e_1) \geq 2 b+2 t-3, \tilde{\varphi}_G(e_2) \geq 2 b+2 t-3, \tilde{\varphi}_G(f_1)=\tilde{\varphi}_G(f_2)=2 a+2 t+1$ 。则:

$$S_t(G) \geq \tilde{\varphi}_G(e_1)+\tilde{\varphi}_G(e_2)+\tilde{\varphi}_G(f_1)+\tilde{\varphi}_G(f_2) \geq 2(2 b+2 t-3)+2(2 a+2 t+1)=4(a+b+t) b+4 t-4=4 n+4 t-4 .$$

综上所述,  $S_t(G) \geq 4n + 4t - 4$ 。根据  $t \geq 0, n \geq 6$ , 有  $S_t(G) \geq 4n + 4t - 4 \geq 4n - 4 > 3n - 3$ 。 证毕

**定理 4** 设  $G \in \mathcal{B}_n^2(n \geq 6)$ , 则  $S_t(G) > S_t(\theta_{n-3,2,2})$ 。

**证明** 如果  $G$  至少包含 2 条悬挂路或 1 条  $n \geq 3$  的悬挂路, 根据引理 8,  $S_t(G) > S_t(\theta_{n-3,2,2})$ 。如果  $G \cong \theta_{a,b,c}$  或  $G \cong \theta_{a,b,c} \cup \{e\}$ , 令  $e_1 = xx_1, e_2 = xx_2, e_3 = xx_3$  分别是  $\theta_{a,b,c}$  中与  $x$  关联的 3 条边,  $f_1, f_2, f_3$  分别是  $\theta_{a,b,c}$  中与  $y$  关联的 3 条边, 其中,  $\{e_1, f_1\} \in E(P_a), \{e_2, f_2\} \in E(P_b), \{e_3, f_3\} \in E(P_c)$ 。

令  $\tilde{\varphi}[\tilde{\varphi}(e_1), \tilde{\varphi}(e_2), \tilde{\varphi}(e_3)]$  是  $e_1, e_2, e_3$  这 3 条边在  $\theta_{a,b,c}$  中的贡献, 根据  $\theta_{a,b,c}$  的对称性,  $f_1, f_2, f_3$  与  $e_1, e_2, e_3$  的贡献相同。下面对  $e_1, e_2, e_3$  在  $\theta_{a,b,c}$  中的贡献进行讨论。

1) 对于  $e_1 = xx_1$ , 在路  $P_a \cup P_c$  上距离  $x$  近的点 and 边的个数等于距离  $x_1$  近的点 and 边的个数。如果  $a = b \leq c + 1$ , 则在路  $P_b$  上的边  $f_2$  距离  $x$  和  $x_1$  一样近, 在  $P_b$  上剩余的点和边都距离  $x$  近, 所以  $\tilde{\varphi}(e_1) = 2b - 2$ 。其余情况即  $a \geq c + 2$  或  $a = c + 1, b = c$  则在  $P_b$  上的点和边都距离  $x$  近, 所以  $\tilde{\varphi}(e_1) = 2b - 1$ 。

2) 对于  $e_2 = xx_2$ , 在路  $P_b \cup P_c$  上距离  $x$  近的点 and 边的个数等于距离  $x_2$  近的点 and 边的个数。

i) 如果  $a \geq b \geq c + 2$ , 则在路  $P_a$  上的点和边都距离  $x$  近, 所以  $\tilde{\varphi}(e_2) = 2a - 1$ 。

ii) 如果  $a \geq b = c + 1$ , 令  $z_l \in V(P_a) \cap T_0(e_2)$  是距离  $e_2$  最远的顶点, 其中  $l$  表示在  $P_a$  上从  $y$  到  $z_l$  的路径的长度。若  $z_l z_{l+1} \notin T_0(e)$ , 则  $c + l = a - l, l = \frac{a-c}{2}$ , 所以距离  $x$  近的点 and 边的个数为  $2(a-l) - 1 = a + c - 1$ , 在路  $P_a$  上剩余的点和边距离  $x$  和  $x_2$  一样近, 所以  $\tilde{\varphi}(e_2) = a + c - 1$ 。同理, 若  $z_l z_{l+1} \in T_0(e)$ , 则  $c + l = a - l - 1$ , 所以有:

$$\tilde{\varphi}(e_2) = 2(a - l - 1) = a + c - 1.$$

iii) 如果  $a \geq b = c$ , 若  $a + b$  是偶数, 则在路  $P_a$  上距离  $x$  近的点 and 边的个数为  $2\left(\frac{a+b-2}{2}\right) = a + b - 2$ , 在路  $P_a$  上距离  $x_2$  近的点 and 边的个数为  $a - b$ , 所以  $\tilde{\varphi}(e_2) = 2b - 2$ 。同理, 若  $a + b$  是奇数, 则有  $\tilde{\varphi}(e_2) = 2b - 2$ 。

3) 对于  $e_3 = xx_3$ , 在路  $P_a \cup P_c$  上距离  $x$  近的点 and 边的个数等于距离  $x_3$  近的点 and 边的个数。如果  $b + c$  是偶数, 则在路  $P_b$  上距离  $x$  近的点 and 边的个数为  $2\left(\frac{b+c-2}{2}\right) = b + c - 2$ , 在路  $P_b$  上距离  $x_3$  近的点 and 边的个数为  $(2b - 1 - 1) - (b + c - 2) = b - c$ , 所以  $\tilde{\varphi}(e_3) = 2c - 2$ 。同理, 如果  $b + c$  是奇数,  $\tilde{\varphi}(e_3) = 2c - 2$ 。

接下来的计算中将用到以下事实: 如果  $G$  是通过在  $\theta_{a,b,c}$  上附加 1 条边构成的图, 且对于任意的边  $e \in E(\theta_{a,b,c})$ , 对  $S_t(\theta_{a,b,c})$  的贡献为  $\tilde{\varphi}(e)$ , 则边  $e$  对  $S_t(G)$  的贡献至少为  $\tilde{\varphi}(e) - 2$ 。为了证明结论成立, 分为以下 4 种情形讨论。

情形 1,  $b \geq c + 2, a \geq b$ , 则在  $\theta_{a,b,c}$  中有  $\tilde{\varphi}[2b - 1, 2a - 1, 2c - 2]$ 。若  $G \cong \theta_{a,b,c} \cup \{e\}$ , 则  $n = a + b + c$ 。当  $c = 1$  时, 显然在  $P_c$  上只有一条边  $e = xy$ , 并且  $\tilde{\varphi}_G(xy) \geq 0$ , 考虑在  $P_a$  和  $P_b$  上与  $x$  和  $y$  关联的 4 条边和悬挂边的贡献有:

$$S_t(G) \geq 2(2b - 3 + 2a - 3) + 2n - 2 = 4a + 4b + 2n - 14 = 6n - 18,$$

根据  $n \geq 6$  有:  $(6n - 18) - (3n - 3) = 3n - 15 > 0$ , 即  $S_t(G) > 3n - 3$ 。

当  $c \geq 2$  时,  $n \geq 3c + 4 \geq 10$ , 考虑与  $x$  和  $y$  关联的 6 条边和悬挂边的贡献有:

$$S_t(G) \geq 2(2b - 3 + 2a - 3 + 2c - 4) + 2n - 2 = 4(a + b + c) + 2n - 22 = 6n - 22,$$

根据  $n \geq 10$  有:  $6n - 22 > 3n - 3$ 。

若  $G \cong \theta_{a,b,c}$ , 则  $n = a + b + c - 1$ 。当  $c = 1$  时,  $\tilde{\varphi}_G(xy) = 0$ 。考虑与  $x$  和  $y$  关联的 5 条边的贡献有:

$$S_t(G) \geq 2(2b - 1 + 2a - 1) = 4n - 4,$$

当  $c \geq 2$  时, 考虑与  $x$  和  $y$  关联的 6 条边的贡献有:

$$S_t(G) \geq 2(2b - 1 + 2a - 1 + 2c - 2) = 4(a + b + c) - 8 = 4n - 4,$$

根据  $n \geq 6$  有:  $4n - 4 > 3n - 3$ 。

情形 2,  $b = c + 1, a \geq b + 1$ , 则在  $\theta_{a,b,c}$  中  $\tilde{\varphi}[2b - 1, a + c - 1, 2c - 2]$ , 若  $G \cong \theta_{a,b,c} \cup \{e\}$ , 则  $n = a + b + c$ 。若  $c \geq 2$ , 考虑与  $x$  和  $y$  关联的 6 条边和悬挂边的贡献有:

$$S_t(G) \geq 2(2b - 3) + 2(a + c - 3) + 2(2c - 4) + 2n - 2 = 4n + 6c - 20 \geq 4n - 8,$$

根据  $n \geq 6$  有:  $4n - 8 > 3n - 3$ .

若  $c = 1$ , 则  $b = 2, a = n - 3 \geq 3$ , 根据  $\theta_{n-3,2,1}$  的对称性, 分为以下 3 种情形讨论.

i) 如果悬挂边与  $x$  关联, 则  $\tilde{\varphi}_G(e_1) = 5, \tilde{\varphi}_G(e_2) = n - 1$ , 考虑  $e_1, e_2$  和悬挂边的贡献有:

$$S_t(G) \geq 5 + n - 1 + 2n - 2 = 3n + 2 > 3n - 3;$$

ii) 如果悬挂边与  $x_2$  关联, 则  $\tilde{\varphi}_G(e_1) = 5, \tilde{\varphi}_G(e_2) = n - 5$ , 考虑  $e_1, e_2$  和悬挂边的贡献有:

$$S_t(G) \geq 5 + n - 5 + 2n - 2 = 3n - 2 > 3n - 3;$$

iii) 如果悬挂边与  $u \in V(P_a) \setminus \{x, y\}$  关联, 其中  $u$  距离  $x$  不比距离  $y$  远, 则  $\tilde{\varphi}_G(e_1) = 1, \tilde{\varphi}_G(e_2) = n - 1$ , 考虑  $e_1, e_2$  和悬挂边的贡献有:

$$S_t(G) \geq 1 + n - 1 + 2n - 2 = 3n - 2 > 3n - 3.$$

若  $G \cong \theta_{a,b,c}$ , 则  $n = a + b + c - 1$ . 如果  $c \geq 2$ , 则  $n \geq 3c + 2 \geq 8$ , 根据引理 6, 在  $G$  上使得  $\tilde{\varphi}_G(e) = 0$  的边至多有 3 条, 所以除了与  $x$  和  $y$  关联的 6 条边和使得  $\tilde{\varphi}_G(e) = 0$  的边外, 其他的边满足  $\tilde{\varphi}_G(e) \geq 2$ . 考虑图  $G$  所有边的贡献有:

$$S_t(G) \geq 2(2b - 1) + 2(a + c - 1) + 2(2c - 2) + 2(n + 1 - 6 - 3) = 4n + 6c - 20 \geq 4n - 8,$$

根据  $n \geq 8$  有:  $4n - 8 > 3n - 3$ .

如果  $c = 1$ , 则  $b = 2, a = n - 2$ , 即  $G \cong \theta_{n-2,2,1}$ , 有:

$$S_t(\theta_{n-2,2,1}) = \begin{cases} 5n - 13, & n \text{ 为奇数;} \\ 5n - 12, & n \text{ 为偶数.} \end{cases}$$

因此, 根据  $n \geq 6$  有  $S_t(\theta_{n-2,2,1}) \geq 5n - 13 > 3n - 3$ .

情形 3,  $b \leq c + 1, a = b$ , 则在  $\theta_{a,a,c}$  中有  $\tilde{\varphi}[2a - 2, 2a - 2, 2c - 2]$ . 若  $G \cong \theta_{a,a,c} \cup \{e\}$ , 则  $n = 2a + c$ . 当  $c = 1$  时,  $n \leq 3c + 2 = 5$ , 与  $n \geq 6$  矛盾. 当  $c \geq 2$  时, 考虑与  $x$  和  $y$  关联的 6 条边及悬挂边的贡献有:

$$S_t(G) \geq 4(2a - 4) + 2(2c - 4) + 2n - 2 = 8a + 4c + 2n - 26 = 6n - 26.$$

当  $n \geq 8$  时,  $6n - 26 > 3n - 3$ . 显然  $n \neq 7$  (否则, 如果  $n = 2a + c = 7$ , 则有  $a = b = 3, c = 1$  与  $b \leq c + 1$  矛盾). 当  $n = 6$  时,  $G \cong H_4$  或  $H_5$ , 如图 5 所示, 并且  $3n - 3 = 15$ . 通过计算得到  $S_t(H_4) = 22 > 15, S_t(H_5) = 26 > 15$ . 因此, 当  $n \geq 6$  时,  $S_t(G) > 3n - 3$ .

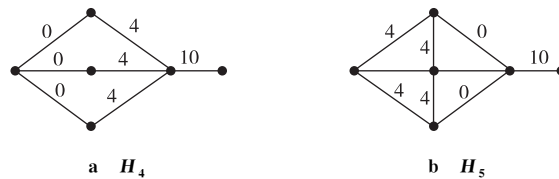


图 5 图  $H_4$  和  $H_5$  中每条边对 total Mostar 指标的贡献

Fig. 5 Contribution of each edge to the total Mostar index in graphs  $H_4$  and  $H_5$

若  $G \cong \theta_{a,a,c}$ , 则有  $n = 2a + c - 1$ . 当  $c = 1$  时, 则有  $n \leq 2c + 2 = 4$ , 与  $n \geq 6$  矛盾. 当  $c \geq 2$  时, 考虑与  $x$  和  $y$  关联的 6 条边和悬挂边的贡献有:

$$S_t(G) \geq 4(2a - 2) + 2(2c - 2) = 8a + 4c - 12 = 4n - 8,$$

根据  $n \geq 6$  有:  $4n - 8 > 3n - 3$ .

情形 4,  $b = c, a \geq b + 1$ , 则在  $\theta_{a,b,b}$  中有  $\tilde{\varphi}[2b - 1, 2b - 2, 2b - 2]$ . 根据  $b = c$  且  $G$  是简单图知  $b \geq 2$ . 若  $G \cong \theta_{a,b,b} \cup \{e\}$ , 则有  $n = a + 2b \geq 3b + 1$ . 如果  $b \geq 4$ , 则有  $n \geq 13$ . 根据引理 6, 在  $\theta_{a,b,b}$  中满足  $\tilde{\varphi}_G(e) = 0$  和  $\tilde{\varphi}_G(e) = 2$  的边的总数至多为 6, 所以在  $G$  中满足  $\tilde{\varphi}_G(e) = 0$  的边的总数至多为 6. 因此, 在  $G$  中除了悬挂边和与  $x, y$  关联的边及满足  $\tilde{\varphi}_G(e) = 0$  的边外, 其他的边有  $\tilde{\varphi}_G(e) \geq 1$ . 考虑  $G$  的所有边的贡献有:

$$S_t(G) \geq 2(2b - 3) + 4(2b - 4) + 2n - 2 + (n + 1 - 13) = 3n + 12b - 36 \geq 3n + 12 > 3n - 3.$$

如果  $b = 3$ , 则有  $G \cong \theta_{n-6,3,3} \cup \{e\}$ , 并且有  $n \geq 10$ . 显然在  $G$  中有  $\tilde{\varphi}_G(e_1) \geq 3, \tilde{\varphi}_G(e_2) \geq 2, \tilde{\varphi}_G(e_3) \geq 2$ . 根据引理 6, 在  $\theta_{n-6,3,3}$  中满足  $\tilde{\varphi}_G(e) = 0$  和  $\tilde{\varphi}_G(e) = 2$  的边的总数至多为 4, 所以在  $G$  中满足  $\tilde{\varphi}_G(e) = 0$  的边的总数至

多为 4。因此,在  $G$  中除了悬挂边和与  $x$  关联的边及满足  $\tilde{\varphi}_G(e)=0$  的边外,其他的边有  $\tilde{\varphi}_G(e)\geq 1$ 。考虑  $G$  所有边的贡献有:

$$S_t(G)\geq 3+2+2+2n-2+(n+1-8)=3n-2>3n-3。$$

如果  $b=2$ ,则有  $c=2, a=n-4$ ,根据  $\theta_{n-4,2,2}$  的对称性,分为以下 3 种情形讨论。

i) 如果悬挂边与  $x$  关联,则有  $\tilde{\varphi}_G(e_1)=5, \tilde{\varphi}_G(e_2)=4, \tilde{\varphi}_G(e_3)=4$ ,所以在  $G$  中至多有 4 条使得  $\tilde{\varphi}_G(e)=0$  的边,剩余的边有  $\tilde{\varphi}_G(e)\geq 1$ 。考虑  $G$  的所有边的贡献有:

$$S_t(G)\geq 5+4+4+2n-2+(n+1-8)=3n+4>3n-3。$$

ii) 如果悬挂边与  $x_2$  关联,则有  $\tilde{\varphi}_G(e_1)=5, \tilde{\varphi}_G(e_2)=0, \tilde{\varphi}_G(e_3)=4$ ,所以在  $G$  中至多有 5 条使得  $\tilde{\varphi}_G(e)=0$  的边,剩余的边有  $\tilde{\varphi}_G(e)\geq 1$ 。考虑  $G$  的所有边的贡献有:

$$S_t(G)\geq 5+4+2n-2+(n+1-8)=3n>3n-3。$$

iii) 如果悬挂边与  $u\in V(P_a\setminus\{x,y\})$  关联,其中  $u$  离  $x$  不比离  $y$  远,则有  $\tilde{\varphi}_G(e_1)=1, \tilde{\varphi}_G(e_2)=4, \tilde{\varphi}_G(e_3)=4$ ,所以在  $G$  中至多有 4 条使得  $\tilde{\varphi}_G(e)=0$  的边,剩余的边有  $\tilde{\varphi}_G(e)\geq 1$ 。考虑  $G$  的所有边的贡献有:

$$S_t(G)\geq 1+4+4+2n-2+(n+1-8)=3n>3n-3。$$

若  $G\cong\theta_{a,b,b}$ ,则  $n=a+2b-1\geq 3b$ 。如果  $b\geq 4$ ,则有  $n\geq 12$ ,根据引理 6,在  $G$  中满足  $\tilde{\varphi}_G(e)=0$  和  $\tilde{\varphi}_G(e)=2$  的边的总数至多为 6,对于  $G$  中除了满足  $\tilde{\varphi}_G(e)=0, \tilde{\varphi}_G(e)=2$  的边以及与  $x$  和  $y$  关联的边外,其他的边有  $\tilde{\varphi}_G(e)\geq 3$ ,所以有:

$$S_t(G)\geq 2(2b-1)+4(2b-2)+3(n+1-12)=3n+12b-43\geq 3n+5>3n-3。$$

如果  $b=3$ ,则在  $G$  中有  $\tilde{\varphi}[5,4,4]$ 。根据引理 6,在  $G$  中满足  $\tilde{\varphi}_G(e)=0$  和  $\tilde{\varphi}_G(e)=2$  的边的总数至多为 4,对于  $G$  中除了满足  $\tilde{\varphi}_G(e)=0, \tilde{\varphi}_G(e)=2$  的边以及与  $x$  和  $y$  关联的边外,其他的边有  $\tilde{\varphi}_G(e)\geq 3$ ,所以有:

$$S_t(G)\geq 5\times 2+4\times 4+3(n+1-6-4)=3n-1>3n-3。$$

当  $b=2$  时,即  $G\cong\theta_{n-3,2,2}$ ,如图 1d 所示,结论得证。

证毕

最后,定理 1 可由定理 3 和定理 4 证明。

### 3 定理 2 的证明

**定理 5** 设  $G\in\mathcal{B}_n^1(n\geq 10)$ ,则  $S_t(G)\leq 2n^2-42$ ,当且仅当  $G\cong G_n(4,4)$  时等号成立,如图 1e 所示。

**证明** 因为  $G\in\mathcal{B}_n^2$ ,所以  $G$  是  $k=2$  的  $n$  阶仙人掌图,根据引理 5 有:

$$S_t(G)\leq 2n^2+3nk-6n-25k+k^2+4=2n^2-42,$$

当且仅当  $G\cong G_n(4,4)$  时等号成立,如图 1e 所示。

证毕

**定理 6** 设  $G\in\mathcal{B}_n^2(n\geq 10)$ ,则  $S_t(G)< 2n^2-42$ 。

**证明** 因为  $G\in\mathcal{B}_n^2$ ,所以  $G$  中包含与  $\theta_{a,b,c}$  同构的子图。假设  $G$  是具有最大 total Mostar 指标的双圈图,根据引理 4, $G$  中的割边都是悬挂边,并且对于双圈图中的悬挂边有  $\tilde{\varphi}_G(e)=2n-2$ 。为了证明结论成立,分为以下 5 种情形讨论。

情形 1,  $a+c\geq 5, b\geq 2$ 。

对于  $e\in E(P_a)\cup E(P_c)$ ,有  $\tilde{\varphi}(e)\leq 2n+1-2(a+c)$ ;对于  $e\in E(P_b)$ ,有  $\tilde{\varphi}(e)\leq 2n+1-2(b+c)$ 。因此得到:

$$S_t(G)\leq (a+c)[2n+1-2(a+c)]+b[2n+1-2(b+c)]+[n+1-(a+b+c)](2n-2)=2n^2-[2(a+c)^2-3(a+c)+2b^2-3b+2bc+2]\leq 2n^2-43<2n^2-42。$$

情形 2,  $a=3, b=3, c=1$ ,则  $G\cong\theta_{3,3,1}$ 。

显然,除了  $e=xy$  以外,与  $x, y$  关联的边有  $\tilde{\varphi}(e)\leq 2n-7$ ,在  $\theta_{3,3,1}$  中其他的边有  $\tilde{\varphi}(e)\leq 2n-12$ 。因此有:

$$S_t(G)\leq 4(2n-7)+3(2n-12)+(n-6)(2n-2)=2n^2-52<2n^2-42。$$

情形 3,  $a=3, b=2, c=1$ ,则  $G\cong\theta_{3,2,1}$ 。

假设  $x_1, x_2, x_3, x_4, x_5$  为如图 6a 所示的  $\theta_{3,2,1}$  的 5 个顶点,  $l_i$  为  $x_i$  上悬挂边的数量,其中  $l_i\geq 0$ ,显然  $\sum_{i=1}^5 l_i =$

$n-5$ 。当  $\theta_{3,2,1}$  中至少有 2 个顶点同时悬挂边时,根据  $\theta_{3,2,1}$  的对称性,又可分为以下 6 种情形讨论。

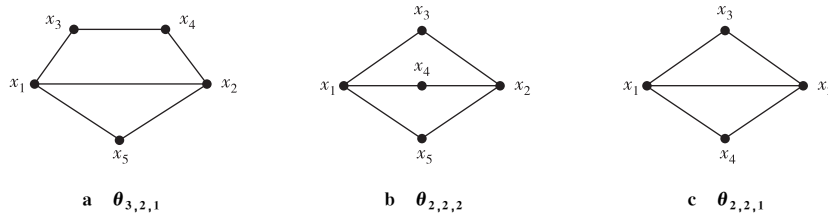


图 6  $\theta_{3,2,1}, \theta_{2,2,2}, \theta_{2,2,1}$

Fig. 6  $\theta_{3,2,1}, \theta_{2,2,2}, \theta_{2,2,1}$

当  $l_1 \geq 1, l_2 \geq 1$  时,有:

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_G(x_1x_2) &\leq 2n-14, \tilde{\varphi}_G(x_3x_4) \leq 2n-14, \tilde{\varphi}_G(x_1x_3) \leq 2n-7, \\ \tilde{\varphi}_G(x_2x_4) &\leq 2n-7, \tilde{\varphi}_G(x_1x_5) \leq 2n-9, \tilde{\varphi}_G(x_2x_5) \leq 2n-9. \end{aligned}$$

考虑所有边的贡献有:

$$S_t(G) \leq 2(2n-7) + 2(2n-9) + 2(2n-14) + (n-5)(2n-2) = 2n^2 - 50 < 2n^2 - 42.$$

当  $l_1 \geq 1, l_3 \geq 1$  时,有:

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_G(x_1x_2) &\leq 2n-10, \tilde{\varphi}_G(x_3x_4) \leq 2n-10, \tilde{\varphi}_G(x_1x_3) \leq 2n-11, \\ \tilde{\varphi}_G(x_2x_4) &\leq 2n-11, \tilde{\varphi}_G(x_1x_5) \leq 2n-7, \tilde{\varphi}_G(x_2x_5) \leq 2n-11. \end{aligned}$$

考虑所有边的贡献有:

$$S_t(G) \leq 2n-7 + 2(2n-10) + 3(2n-11) + (n-5)(2n-2) = 2n^2 - 50 < 2n^2 - 42.$$

当  $l_1 \geq 1, l_4 \geq 1$  时,有:

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_G(x_1x_2) &\leq 2n-14, \tilde{\varphi}_G(x_3x_4) \leq 2n-14, \tilde{\varphi}_G(x_1x_3) \leq 2n-11, \\ \tilde{\varphi}_G(x_2x_4) &\leq 2n-11, \tilde{\varphi}_G(x_1x_5) \leq 2n-9, \tilde{\varphi}_G(x_2x_5) \leq 2n-9. \end{aligned}$$

考虑所有边的贡献有:

$$S_t(G) \leq 2(2n-9) + 2(2n-11) + 2(2n-14) + (n-5)(2n-2) = 2n^2 - 58 < 2n^2 - 42.$$

当  $l_1 \geq 1, l_5 \geq 1$  时,有:

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_G(x_1x_2) &\leq 2n-12, \tilde{\varphi}_G(x_3x_4) \leq 2n-12, \tilde{\varphi}_G(x_1x_3) \leq 2n-7, \\ \tilde{\varphi}_G(x_2x_4) &\leq 2n-7, \tilde{\varphi}_G(x_1x_5) \leq 2n-11, \tilde{\varphi}_G(x_2x_5) \leq 2n-13. \end{aligned}$$

考虑所有边的贡献有:

$$S_t(G) \leq 2(2n-7) + 2n-11 + 2(2n-12) + 2n-13 + (n-5)(2n-2) = 2n^2 - 52 < 2n^2 - 42.$$

当  $l_3 \geq 1, l_4 \geq 1$  时,有:

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_G(x_1x_2) &\leq 2n-14, \tilde{\varphi}_G(x_3x_4) \leq 2n-14, \tilde{\varphi}_G(x_1x_3) \leq 2n-13, \\ \tilde{\varphi}_G(x_2x_4) &\leq 2n-13, \tilde{\varphi}_G(x_1x_5) \leq 2n-9, \tilde{\varphi}_G(x_2x_5) \leq 2n-9. \end{aligned}$$

考虑所有边的贡献有:

$$S_t(G) \leq 2(2n-9) + 2(2n-13) + 2(2n-14) + (n-5)(2n-2) = 2n^2 - 62 < 2n^2 - 42.$$

当  $l_3 \geq 1, l_5 \geq 1$  时,有:

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_G(x_1x_2) &\leq 2n-12, \tilde{\varphi}_G(x_3x_4) \leq 2n-12, \tilde{\varphi}_G(x_1x_3) \leq 2n-11, \\ \tilde{\varphi}_G(x_2x_4) &\leq 2n-11, \tilde{\varphi}_G(x_1x_5) \leq 2n-11, \tilde{\varphi}_G(x_2x_5) \leq 2n-13. \end{aligned}$$

考虑所有边的贡献有:

$$S_t(G) \leq 3(2n-11) + 2(2n-12) + 2n-13 + (n-5)(2n-2) = 2n^2 - 60 < 2n^2 - 42.$$

当所有的悬挂边都附加在  $\theta_{3,2,1}$  的同一个顶点时,根据  $\theta_{3,2,1}$  的对称性有,  $G \cong H_6$  或  $H_7$  或  $H_8$ , 如图 7 所示, 经计算, 当  $n \geq 10$  时, 有:

$$S_t(H_6) = 2n^2 - 2n - 28 < 2n^2 - 42, S_t(H_7) = 2n^2 - 2n - 40 < 2n^2 - 42,$$

$$S_t(H_8) = 2n^2 - 4n - 30 < 2n^2 - 42.$$

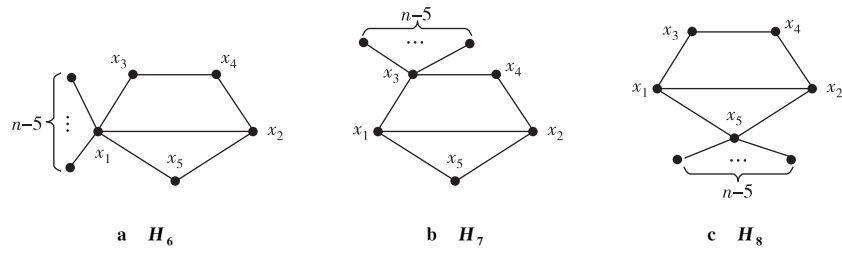


图 7  $H_6, H_7, H_8$   
Fig.7  $H_6, H_7, H_8$

综上所述,当  $n \geq 10$  时,  $S_t(G) < 2n^2 - 42$ 。

情形 4,  $a = 2, b = 2, c = 2$ , 则  $G \cong \theta_{2,2,2}$ 。

假设  $x_1, x_2, x_3, x_4, x_5$  为如图 6b 所示的  $\theta_{2,2,2}$  的 5 个顶点,  $l_i$  为  $x_i$  上悬挂边的数量, 其中  $l_i \geq 0$ , 显然

$\sum_{i=1}^5 l_i = n - 5$ 。当  $\theta_{2,2,2}$  中至少有 2 个顶点同时悬挂边时, 根据  $\theta_{2,2,2}$  的对称性, 又可分为以下 3 种情形讨论。

当  $l_1 \geq 1, l_2 \geq 1$  时, 对  $e \in E(\theta_{2,2,2})$  有  $\tilde{\varphi}_G(e) \leq 2n - 12$ , 考虑所有边的贡献有:

$$S_t(G) \leq 6(2n - 12) + (n - 5)(2n - 2) = 2n^2 - 62 < 2n^2 - 42。$$

当  $l_1 \geq 1, l_3 \geq 1$  时, 有:

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_G(x_1x_3) &\leq 2n - 12, \tilde{\varphi}_G(x_2x_4) \leq 2n - 12, \tilde{\varphi}_G(x_2x_5) \leq 2n - 12, \\ \tilde{\varphi}_G(x_2x_3) &\leq 2n - 12, \tilde{\varphi}_G(x_1x_4) \leq 2n - 8, \tilde{\varphi}_G(x_1x_5) \leq 2n - 8。 \end{aligned}$$

考虑所有边的贡献有:

$$S_t(G) \leq 2(2n - 8) + 4(2n - 12) + (n - 5)(2n - 2) = 2n^2 - 54 < 2n^2 - 42。$$

当  $l_3 \geq 1, l_4 \geq 1$  时, 有:

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_G(x_1x_3) &\leq 2n - 12, \tilde{\varphi}_G(x_1x_4) \leq 2n - 12, \tilde{\varphi}_G(x_2x_3) \leq 2n - 12, \\ \tilde{\varphi}_G(x_2x_4) &\leq 2n - 12, \tilde{\varphi}_G(x_1x_5) \leq 2n - 8, \tilde{\varphi}_G(x_2x_5) \leq 2n - 8。 \end{aligned}$$

考虑所有边的贡献有:

$$S_t(G) \leq 2(2n - 8) + 4(2n - 12) + (n - 5)(2n - 2) = 2n^2 - 54 < 2n^2 - 42。$$

当所有的悬挂边都附加在  $\theta_{2,2,2}$  的同一个顶点上, 根据  $\theta_{2,2,2}$  的对称性, 有  $G \cong H_9$  或  $H_{10}$ , 如图 8a、8b 所示, 经计算有:

$$S_t(H_9) = 2n^2 - 50 < 2n^2 - 42, S_t(H_{10}) = 2n^2 - 46 < 2n^2 - 42。$$

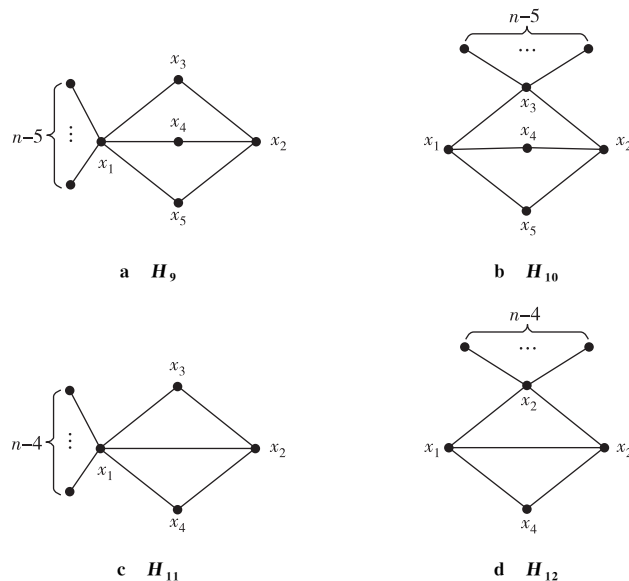


图 8  $H_9, H_{10}, H_{11}, H_{12}$   
Fig.8  $H_9, H_{10}, H_{11}, H_{12}$

综上所述,当  $n \geq 10$  时,  $S_t(G) < 2n^2 - 42$ 。

情形 5,  $a=2, b=2, c=1$ , 则  $G \cong \theta_{2,2,1}$ 。

假设  $x_1, x_2, x_3, x_4$  为如图 6c 所示的  $\theta_{2,2,1}$  的 4 个顶点,  $l_i$  为  $x_i$  上悬挂边的数量, 其中  $l_i \geq 0$ , 显然  $\sum_{i=1}^5 l_i = n - 4$ 。当  $\theta_{2,2,1}$  中至少有 3 个顶点同时悬挂边时, 根据  $\theta_{2,2,1}$  的对称性, 又可分为以下 2 种情形讨论。

当  $l_1 \geq 1, l_2 \geq 1, l_3 \geq 1$  时, 有:

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}_G(x_1x_2) &\leq 2n - 14, \tilde{\varphi}_G(x_1x_3) \leq 2n - 12, \tilde{\varphi}_G(x_2x_3) \leq 2n - 12, \\ \tilde{\varphi}_G(x_1x_4) &\leq 2n - 8, \tilde{\varphi}_G(x_2x_4) \leq 2n - 8.\end{aligned}$$

考虑所有边的贡献有:

$$S_t(G) \leq 2(2n - 8) + 2(2n - 12) + 2n - 14 + (n - 4)(2n - 2) = 2n^2 - 46 < 2n^2 - 42。$$

当  $l_1 \geq 1, l_3 \geq 1, l_4 \geq 1$  时, 有:

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}_G(x_1x_2) &\leq 2n - 12, \tilde{\varphi}_G(x_2x_3) \leq 2n - 12, \tilde{\varphi}_G(x_2x_4) \leq 2n - 12, \\ \tilde{\varphi}_G(x_1x_3) &\leq 2n - 10, \tilde{\varphi}_G(x_1x_4) \leq 2n - 10.\end{aligned}$$

考虑所有边的贡献有:

$$S_t(G) \leq 2(2n - 10) + 3(2n - 12) + (n - 4)(2n - 2) = 2n^2 - 48 < 2n^2 - 42。$$

当  $\theta_{2,2,1}$  中有且只有 2 个顶点同时悬挂边时, 又可分为以下 2 种情形讨论。

当  $l_1 \geq 1, l_2 \geq 1, l_3 = l_4 = 0$ ,  $\tilde{\varphi}_G(x_1x_2) = 2|l_1 - l_2|$ , 显然  $l_1l_2 > 0$ , 根据三角不等式有:

$$2|l_1 - l_2| < 2(l_1 + l_2), \tilde{\varphi}_G(x_1x_3) = \tilde{\varphi}_G(x_1x_4) = 2l_1 + 2, \tilde{\varphi}_G(x_2x_3) = \tilde{\varphi}_G(x_2x_4) = 2l_2 + 2。$$

显然  $l_1 + l_2 = n - 4$ , 考虑所有边的贡献, 根据  $n \geq 10$  有:

$$\begin{aligned}S_t(G) &< 2(l_1 + l_2) + 2(2l_1 + 2) + 2(2l_2 + 2) + (n - 4)(2n - 2) = \\ &2n^2 - 10n + 16 + 6(l_1 + l_2) = 2n^2 - 10n + 16 + 6(n - 4) = 2n^2 - 4n - 8 < 2n^2 - 42.\end{aligned}$$

当  $l_1 \geq 1, l_3 \geq 1, l_2 = l_4 = 0$  时, 有  $\tilde{\varphi}_G(x_1x_2) = 2l_1, \tilde{\varphi}_G(x_1x_3) = |2l_1 + 2 - 2l_3|$ , 显然  $(2l_1 + 2) \times 2l_3 > 0$ , 根据三角不等式有:

$$\begin{aligned}|2l_1 + 2 - 2l_3| &< 2(l_1 + l_3) + 2, \tilde{\varphi}_G(x_1x_4) = 2(l_1 + l_3) + 2, \\ \tilde{\varphi}_G(x_2x_3) &= 2l_3 - 2, \tilde{\varphi}_G(x_2x_4) = 2l_3 + 2.\end{aligned}$$

显然,  $l_1 + l_3 = n - 4$ , 根据  $n \geq 10$  有  $n - l_3 = l_1 + 4 \geq 5$ , 考虑所有边的贡献有:

$$\begin{aligned}S_t(G) &< 2l_1 + 2 \times [2(l_1 + l_3) + 2] + 2l_3 - 2 + 2l_3 + 2 + (n - 4)(2n - 2) = \\ &2n^2 - 10n + 12 + 6(l_1 + l_3) + 2l_3 = 2n^2 - 10n + 12 + 6(n - 4) + 2l_3 = \\ &2n^2 - 2n - 12 - 2(n - l_3) \leq 2n^2 - 2n - 22,\end{aligned}$$

根据  $n \geq 10$  有  $2n^2 - 2n - 22 \leq 2n^2 - 42$ , 所以  $S_t(G) < 2n^2 - 42$ 。

当  $l_3 \geq 1, l_4 \geq 1, l_1 = l_2 = 0$  时, 有:

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}_G(x_1x_2) &= 0, \tilde{\varphi}_G(x_1x_3) \leq 2n - 10, \tilde{\varphi}_G(x_1x_4) \leq 2n - 10, \\ \tilde{\varphi}_G(x_2x_3) &\leq 2n - 10, \tilde{\varphi}_G(x_2x_4) \leq 2n - 10.\end{aligned}$$

考虑所有边的贡献有:

$$S_t(G) \leq 4(2n - 10) + (n - 4)(2n - 2) = 2n^2 - 2n - 32 < 2n^2 - 42。$$

当所有的悬挂边都附加在  $\theta_{2,2,1}$  的同一个顶点上时, 根据  $\theta_{2,2,1}$  的对称性, 有  $G \cong H_{11}$  或  $G \cong H_{12}$ , 如图 8c、8d 所示, 经计算, 当  $n \geq 10$  时, 有:

$$S_t(H_{11}) = 2n^2 - 4n - 8 < 2n^2 - 42, S_t(H_{12}) = 2n^2 - 2n - 24 < 2n^2 - 42。$$

综上所述, 当  $n \geq 10$  时,  $S_t(G) < 2n^2 - 42$ 。因此,  $\mathcal{B}_n^2$  中的双圈图的 total Mostar 指标都比  $G_n(4, 4)$  小。

证毕

最后, 定理 2 可由定理 5 和定理 6 证明。

#### 参考文献:

- [1] BONDY J A, MURTY U S R. Graph theory[M]. New York: Springer Publishing Company, 2008.

- [2] DOŠLIĆ T, MARTINJAK I, ŠKREKOVSKI R, et al. Mostar index[J]. *Journal of Mathematical Chemistry*, 2018, 56: 2995-3013.
- [3] TEPEH A. Extremal bicyclic graphs with respect to Mostar index[J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2019, 355: 319-324.
- [4] LIU G R, DENG K C. The maximum Mostar indices of unicyclic graphs with given diameter[J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2023, 439: 127636.
- [5] HAYAT F, ZHOU B. On cacti with large Mostar index[J]. *Filomat*, 2019, 33(15): 4865-4873.
- [6] ALI A, DOŠLIĆ T. Mostar index: results and perspectives[J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2021, 404: 126245.
- [7] DENG K C, LI S C. On the extremal values for the Mostar index of trees with given degree sequence[J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2021, 390: 125598.
- [8] AROCKIARAJ M, CLEMENT J, TRATNIK N. Mostar indices of carbon nanostructures and circumscribed donut benzenoid systems[J]. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2019, 119(24): e26043.
- [9] LIU H, SONG L, XIAO Q, et al. On edge Mostar index of graphs[J]. *Iranian Journal of Mathematical Chemistry*, 2020, 11(2): 95-106.
- [10] ALEX L, GOPALAPILLAI I. On a conjecture on edge Mostar index of bicyclic graphs[J]. *Iranian Journal of Mathematical Chemistry*, 2023, 14(2): 97-108.
- [11] GHALAVAND A, ASHRAFI A R, HAKIMI-NEZHAAD M. On mostar and edge mostar indices of graphs[J]. *Journal of Mathematics*, 2021, 2021(1): 6651220.
- [12] WANG H, LIU M M. The upper bound of the edge mostar index with respect to bicyclic graphs[J]. *Mathematics*, 2023, 11(11): 2506.
- [13] AROCKIARAJ M, CLEMENT J, TRATNIK N, et al. Weighted Mostar indices as measures of molecular peripheral shapes with applications to graphene, graphyne and graphdiyne nanoribbons[J]. *SAR and QSAR in Environmental Research*, 2020, 31(3): 187-208.
- [14] AKHTER S, IMRAN M, IQBAL Z. Mostar indices of SiO<sub>2</sub> nanostructures and melem chain nanostructures[J]. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2021, 121(5): e26520.
- [15] 张玉静, 刘蒙蒙. 仙人掌图的全 Mostar 指标的上界[J]. *吉林大学学报(理学版)*, 2026, 64(1): 77-86.  
ZHANG Y J, LIU M M. Upper bound of total mostar index of *Cactus* graph[J]. *Journal of Jilin University (Science Edition)*, 2026, 64(1): 77-86.

## Operations Research and Cybernetics

### The Extremes of the Total Mostar Index for Bicyclic Graphs

ZHANG Yujing, LIU Mengmeng

(School of Mathematics and Physics, Lanzhou Jiaotong University, Lanzhou 730070, China)

**Abstract:** Let  $G$  be a connected graph with vertex set  $V(G)$  and edge set  $E(G)$ . The total Mostar index of a graph  $G$  is defined as:

$$S_1(G) = \sum_{e=uv \in E(G)} |t_u(e) - t_v(e)|, \text{ where } t_u(e) \text{ denotes the number of vertices and edges closer to } u \text{ than to } v \text{ for an edge } uv \text{ in } G,$$

and  $t_v(e)$  denotes the number of vertices and edges closer to  $v$  than to  $u$  for an edge  $uv$  in  $G$ . To determine the extremal values and extremal graphs of the total Mostar index for bicyclic graphs of order  $n$ , based on whether the cycles share a common edge, bicyclic graphs are divided into two categories, and it proves that the total Mostar index of each category is greater than or equal to that of the extremal graphs. The extremal values of the total Mostar index for bicyclic graphs of order  $n$  are obtained. Thereby it extends the theoretical framework of the total Mostar index.

**Keywords:** bicyclic graph; total Mostar index; extremal graph

(责任编辑 黄颖)