

一类3正则图的Balaban指数

武军秀,高玉斌*

(中北大学 数学学院,山西 太原 030051)

摘要:本文解决了3正则图 L_n 的Balaban指数计算问题。采用分类讨论的方法,给出了 L_n 的Balaban指数计算公式,并利用该公式,分别得到了该类正则图Balaban指数的易于计算的上、下界。计算结果表明,本文所得上界优于已有文献所给出的结果,且当图的阶数大于等于42时,该上界与精确值相差不超过0.1。

关键词:Balaban指数;3正则图;距离;上、下界

中图分类号:O157.5 **文献标志码:**A **文章编号:**0253-2395(2024)05-0935-08

Balaban Index of a Kind of 3-regular Graph

WU Junxiu, GAO Yubin*

(School of Mathematics, North University of China, Taiyuan 030051, China)

Abstract: This paper solves the computing problems of Balaban index for 3-regular graph L_n . By using the method of classification discussion, a formula for the Balaban index of L_n is given and the upper and lower bounds that are easy to compute is acquired from this formula. The results show that the upper bound obtained in this paper is superior to the existing one, and if the order is greater than or equal to 42, the difference between the upper bound and the exact value is less than 0.1.

Key words: Balaban index; 3-regular graph; distance; upper and lower bound

0 引言

设 $G=(V(G),E(G))$ 是一个顶点数为 $|V(G)|=n$,边数为 $|E(G)|=m$ 的简单连通图。顶点 $v \in V(G)$ 的度 $d_G(v)$ 是 G 中与 v 关联的边的数目,简记为 $d(v)$ 。若任意顶点 $v \in V(G)$,有 $d(v)=3$,则称 G 是3正则图。若 $E' \subseteq E(G)$,则 $G-E'$ 表示从 G 中删除 E' 中的边所得到的子图,图 G 中顶点 u, v 之间的距离 $d_G(u, v)$ 是指 G 中从 u 到 v 最短路的长度,简记为 $d(u, v)$ ^[1]。用 $w(v)$ 表示 G 中所有顶点到点 v 的距离之和。1982年,著名学者Balaban提出了Balaban指数(简称为 J 指数^[2-3]),定义为 $J(G)=\frac{m}{m-n+2} \sum_{w \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{w(u)w(v)}}$,其中 m, n 分别为 G 的顶点数与边数, $w(v)$ 是指 G 中所有顶点到点 v 的距离之和,且该定义中的分母 $m-n+2$ 使得具有相同顶点数量的单圈图与双圈图更好地进行比较^[4]。

Balaban指数作为一类重要的拓扑指数,可应用于苯磺的碳酸酐酶抑制药的QSAR研究^[5]。通过对含有6~9个碳原子的烷烃同分异构体进行排序,Balaban等发现,由Balaban指数产生的排序与

收稿日期:2023-05-17;接受日期:2023-10-12

基金项目:山西省回国留学人员科研项目(2022-149);山西省自然科学基金(20210302124212)

作者简介:武军秀(1999-),女,山西吕梁人,硕士研究生,研究方向为图论及其应用。E-mail:3012642285@qq.com

*通信作者:高玉斌(GAO Yubin),E-mail:ybgao@nuc.edu.cn

引文格式:武军秀,高玉斌.一类3正则图的Balaban指数[J].山西大学学报(自然科学版),2024,47(5):935-942. DOI:10.13451/j.sxu.ns.2023157

由 Wiener 指数产生的排序是相似的,而且 Balaban 指数具有更好的识别能力,因此, Balaban 指数也称为敏锐的 Wiener 指数^[6]。

目前有关 Balaban 指数的数学性质已取得了一系列研究成果。如: Das^[7]刻画了链图中 Balaban 指数的极大图;方炜等^[8]给出了仙人掌图 Balaban 指数的上界,并刻画了极图;Chen 等^[9]给出了双圈图 Balaban 指数紧的上界;Zhou 等^[10]给出了图的 Balaban 指数紧的上、下界;Sun^[11]给出了树中 Balaban 指数的上、下界;Deng^[12]刻画了 Balaban 指数在树中的极大、极小以及第二大、第二小图;Knor 等^[13]给出了 k 正则图的若干上界,提出 L_n 是立方体中具有极小 Balaban 指数的猜想,并指出很难找到 $J(L_n)$ 的一个好的上界;邓波等^[14]改进了 Knor 等提出的两类 3 正则图的相关结果,并获得了 $J(L_n)$ 的一个上界;Ahmad 等^[15]得到了一类正则图的 Balaban 指数计算公式。关于其他的一些研究成果,可查阅文献[16-19]。

本文解决了文献[13]中提出的 3 正则图 L_n 的 Balaban 指数计算问题。采用分类讨论的方法,给出了 $J(L_n)$ 的计算公式,并利用该公式,分别得到了 $J(L_n)$ 的上、下界。计算结果表明,本文所得上界优于文献[14]所给上界,且当图的阶数大于等于 42 时,该上界与精确值相差不超过 0.1。

1 准备工作

定义 1^[14] 如果 4 不能整除 n , 则图 L_n 是通过用两端点是 2 度点的边, 把 $\frac{n-10}{4}$ 个 $K_4 - e$ 连接到一条路上, 且在路的两端连接两个具有 5 个点的悬挂块得到的(具体见文献[13]的图 2); 如果 4 能整除 n , 则图 L_n 是通过用两端点是 2 度点的边, 把 $\frac{n-12}{4}$ 个 $K_4 - e$ 连接到一条路上, 且在路的两端分别连接一个有 5 个点的悬挂块和一个有 7 个点的悬挂块得到的(具体见文献[13]的图 3)。显然, L_n 是 3 正则图。

引理 2^[14] 对任意偶数 $n \geq 10$, 有 $J(L_n) \leq \frac{48}{n+4}$ 。

2 正则图 L_n 的 Balaban 指数

定理 1 设 $n \geq 10$ 为偶数, 则当 $4 \nmid n$ 时,

$$\begin{aligned}
 J(L_n) = & \frac{3n}{n+4} \left(\frac{32}{\sqrt{(3n^2-26n+96)(3n^2-18n+48)}} + \frac{64}{\sqrt{(3n^2-10n+8)(3n^2-18n+48)}} + \right. \\
 & \frac{16}{3n^2-10n+8} + \frac{16}{\sqrt{(3n^2-26n+96)(3n^2-34n+176)}} + \frac{8}{3n^2-42n+280} + \\
 & \frac{16}{\sqrt{(3n^2-34n+176)(3n^2-42n+280)}} + \frac{16}{\sqrt{(3n^2-50n+400)(3n^2-42n+280)}} + \\
 & \left. \sum_{k=0}^{\frac{n-18}{4}} \left(\frac{16}{\sqrt{(96k^2+(-24n+272)k+3n^2-34n+176)(96k^2+(-24n+336)k+3n^2-42n+280)}} + \right. \right. \\
 & \frac{16}{\sqrt{(96k^2+(-24n+400)k+3n^2-50n+400)(96k^2+(-24n+336)k+3n^2-42n+280)}} + \\
 & \left. \frac{8}{\sqrt{(96k^2+(-24n+400)k+3n^2-50n+400)(96k^2+(-24n+464)k+3n^2-58n+544)}} + \right. \\
 & \left. \left. \frac{8}{96k^2+(-24n+336)k+3n^2-42n+280} \right) \right) \circ
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

当 $4|n$ 时,

$$\begin{aligned}
 J(L_n) = & \frac{3n}{n+4} \left(\frac{16}{\sqrt{(3n^2-18n+32)(3n^2-26n+80)}} + \frac{32}{\sqrt{(3n^2-18n+32)(3n^2-10n-8)}} + \right. \\
 & \frac{16}{\sqrt{(3n^2-38n+208)(3n^2-30n+128)}} + \frac{16}{\sqrt{(3n^2-22n+72)(3n^2-30n+128)}} + \\
 & \frac{32}{\sqrt{(3n^2-22n+72)(3n^2-14n+24)}} + \frac{8}{\sqrt{(3n^2-26n+80)(3n^2-34n+160)}} + \\
 & \frac{8}{\sqrt{(3n^2-46n+320)(3n^2-38n+208)}} + \frac{8}{3n^2-10n-8} + \frac{8}{3n^2-30n+128} + \\
 & \frac{8}{3n^2-14n+24} + \frac{16}{\sqrt{(3n^2-62n+608)(3n^2-54n+456)}} + \\
 & \left. \frac{16}{\sqrt{(3n^2-46n+320)(3n^2-54n+456)}} + \frac{8}{3n^2-54n+456} + \right. \\
 & \sum_{k=0}^{\frac{n-20}{4}} \left(\frac{16}{\sqrt{(96k^2-24nk+3n^2+272k-34n+160)(96k^2-24nk+3n^2+336k-42n+264)}} + \right. \\
 & \frac{16}{\sqrt{(96k^2-24nk+3n^2+400k-50n+384)(96k^2-24nk+3n^2+336k-42n+264)}} + \\
 & \left. \frac{8}{\sqrt{(96k^2-24nk+3n^2+400k-50n+384)(96k^2-24nk+3n^2+464k-58n+528)}} + \right. \\
 & \left. \left. \frac{8}{96k^2-24nk+3n^2+336k-42n+264} \right) \right). \tag{2}
 \end{aligned}$$

证明 为方便,我们记

$$f = \sum_{i=1}^n i, g_1 = \sum_{i=1}^n 3i, g_2 = \sum_{i=1}^n (3i-1), g_3 = \sum_{i=1}^n (3i-2), g_4 = \sum_{i=1}^n (3i+1).$$

情形 1 $4 \nmid n$. 显然 $K_4 - e$ 的个数为 $\frac{n-10}{4}$. 如图 1 所示。

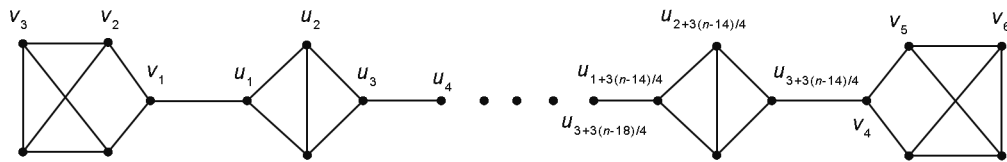


图 1 $L_n(4 \nmid n)$

Fig. 1 $L_n(4 \nmid n)$

情形 1.1 $n = 10$.

易知, $w(v_1) = 17, w(v_2) = 21, w(v_3) = 26$, 则

$$J(L_{10}) = \frac{30}{14} \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{w(u)w(v)}} = \frac{30}{14} \left(\frac{4}{\sqrt{w(v_1)w(v_2)}} + \frac{8}{\sqrt{w(v_2)w(v_3)}} + \frac{2}{w(v_3)} + \frac{1}{w(v_1)} \right) \approx 1.48.$$

情形 1.2 $n = 14$.

易知, $w(v_1) = 40, w(v_2) = 48, w(v_3) = 57, w(u_1) = 36, w(u_2) = 35$, 则

$$J(L_{14}) = \frac{42}{18} \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{w(u)w(v)}} = \frac{42}{18} \left(\frac{4}{\sqrt{w(v_1)w(v_2)}} + \frac{8}{\sqrt{w(v_2)w(v_3)}} + \frac{2}{w(v_3)} + \right.$$

$$\left. \frac{2}{\sqrt{w(v_1)w(u_1)}} + \frac{4}{\sqrt{w(u_1)w(u_2)}} + \frac{1}{w(u_2)} \right) \approx 1.10。$$

情形 1.3 $n \geq 18$ 。

$$w(v_1) = w(v_4) = 1 + 2 + f\left(\frac{3n-18}{4}\right) + 1 + 2 + g_2\left(\frac{n-6}{4}\right) + \frac{3n-18}{4} = \frac{3}{8}n^2 - \frac{13}{4}n + 12。$$

$$w(v_2) = w(v_5) = 1 + f\left(\frac{3n-14}{4}\right) + 1 + 2 + g_1\left(\frac{n-6}{4}\right) + \frac{3n-14}{4} = \frac{3}{8}n^2 - \frac{9}{4}n + 6。$$

$$w(v_3) = w(v_6) = f\left(\frac{3n-10}{4}\right) + 1 + 1 + g_4\left(\frac{n-6}{4}\right) + \frac{3n-10}{4} = \frac{3}{8}n^2 - \frac{5}{4}n + 1。$$

$$w(u_{3k+1}) = f(3k+3) + f\left(\frac{3n-10}{4} - 3k-3\right) + g_3\left(\frac{n-6}{4} - k\right) + g_2(k+1) + \frac{3n-10}{4} - 3k-3 + 3k+3 = \frac{3}{8}n^2 + \frac{(-24k-34)n}{8} + 12k^2 + 34k + 22。$$

$$w(u_{3k+2}) = f(3k+4) + f\left(\frac{3n-10}{4} - 3k-4\right) + g_1\left(\frac{n-10}{4} - k\right) + g_1(k+1) + \frac{3n-10}{4} - 3k-4 + 3k+4 + 1 = \frac{3}{8}n^2 + \frac{(-24k-42)n}{8} + 12k^2 + 42k + 35。$$

$$w(u_{3k+3}) = f(3k+5) + f\left(\frac{3n-10}{4} - 3k-5\right) + g_2\left(\frac{n-10}{4} - k\right) + g_3(k+2) + \frac{3n-10}{4} - 3k-5 + 3k+5 = \frac{3}{8}n^2 + \frac{(-24k-50)n}{8} + 12k^2 + 50k + 50。$$

$$w(u_{3k+4}) = \frac{3}{8}n^2 + \frac{(-24k-58)n}{8} + 12(k+1)^2 + 34k + 56。$$

$$J(L_n) = \frac{3n}{n+4} \left(\frac{4}{\sqrt{w(v_1)w(v_2)}} + \frac{8}{\sqrt{w(v_2)w(v_3)}} + \frac{2}{w(v_3)} + \frac{2}{\sqrt{w(v_1)w(u_1)}} + \sum_{k=0}^{\frac{n-18}{4}} \frac{1}{\sqrt{w(u_{3k+3})w(u_{3k+4})}} + \sum_{k=0}^{\frac{n-14}{4}} \left(\frac{2}{\sqrt{w(u_{3k+1})w(u_{3k+2})}} + \frac{2}{\sqrt{w(u_{3k+2})w(u_{3k+3})}} + \frac{1}{w(u_{3k+2})} \right) \right) \quad (3)$$

利用 Maple 软件, 将上述顶点的距离和代入(3)式, 得证。当 $n = 10, 14$ 时, 结果满足(1)式。

情形 2 $4|n$ 。显然 $K_4 - e$ 的个数为 $\frac{n-12}{4}$ 。如图 2 所示。

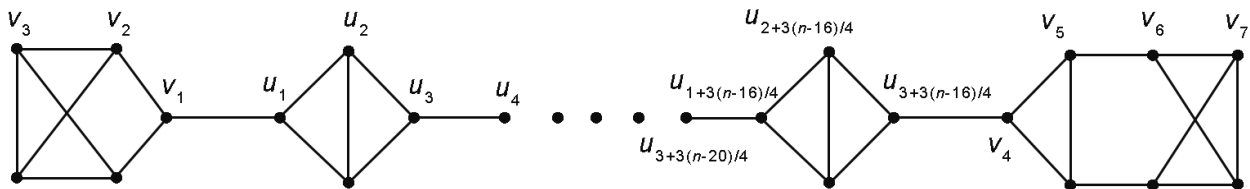


图2 $L_n(4|n)$

Fig. 2 $L_n(4|n)$

情形 2.1 $n = 12$ 。

易知, $w(v_1) = 25, w(v_2) = 31, w(v_3) = 38, w(v_4) = 23, w(v_5) = 25, w(v_6) = 30, w(v_7) = 36$, 则

$$J(L_{12}) = \frac{36}{16} \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{w(u)w(v)}} =$$

$$\frac{36}{16} \left(\frac{2}{\sqrt{\omega(v_1)\omega(v_2)}} + \frac{4}{\sqrt{\omega(v_2)\omega(v_3)}} + \frac{1}{\omega(v_3)} + \frac{2}{\sqrt{\omega(v_4)\omega(v_5)}} + \frac{2}{\sqrt{\omega(v_5)\omega(v_6)}} + \frac{4}{\sqrt{\omega(v_6)\omega(v_7)}} + \frac{1}{\omega(v_5)} + \frac{1}{\omega(v_7)} + \frac{1}{\sqrt{\omega(v_1)\omega(v_4)}} \right) \approx 1.36。$$

情形2.2 $n = 16$ 。

易知, $\omega(v_1) = 54, \omega(v_2) = 64, \omega(v_3) = 75, \omega(v_4) = 46, \omega(v_5) = 52, \omega(v_6) = 61, \omega(v_7) = 71, \omega(u_1) = 48, \omega(u_2) = 45, \omega(u_3) = 44$, 则

$$J(L_{16}) = \frac{48}{20} \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{\omega(u)\omega(v)}} = \frac{48}{20} \times \left(\frac{2}{\sqrt{\omega(v_1)\omega(v_2)}} + \frac{4}{\sqrt{\omega(v_2)\omega(v_3)}} + \frac{1}{\omega(v_3)} + \frac{2}{\sqrt{\omega(v_4)\omega(v_5)}} + \frac{2}{\sqrt{\omega(v_5)\omega(v_6)}} + \frac{4}{\sqrt{\omega(v_6)\omega(v_7)}} + \frac{1}{\omega(v_5)} + \frac{1}{\omega(v_7)} + \frac{1}{\sqrt{\omega(v_1)\omega(u_1)}} + \frac{2}{\sqrt{\omega(u_1)\omega(u_2)}} + \frac{2}{\sqrt{\omega(u_2)\omega(u_3)}} + \frac{1}{\sqrt{\omega(u_3)\omega(v_4)}} + \frac{1}{\omega(u_2)} \right) \approx 1.03。$$

情形2.3 $n \geq 20$ 。

$$\omega(v_1) = 1 + 2 + f\left(\frac{3n-12}{4} - 2\right) + 1 + 2 + g_2\left(\frac{n-8}{4}\right) + \frac{3n-24}{4} + \frac{3n-20}{4} = \frac{3}{8}n^2 - \frac{13}{4}n + 10。$$

$$\omega(v_2) = 1 + f\left(\frac{3n-12}{4} - 1\right) + 1 + 2 + g_1\left(\frac{n-8}{4}\right) + \frac{3n-20}{4} + \frac{3n-16}{4} = \frac{3}{8}n^2 - \frac{9}{4}n + 4。$$

$$\omega(v_3) = f\left(\frac{3n-12}{4}\right) + 1 + 1 + g_4\left(\frac{n-8}{4}\right) + \frac{3n-16}{4} + \frac{3n-12}{4} = \frac{3}{8}n^2 - \frac{5}{4}n - 1。$$

$$\omega(v_4) = 1 + 2 + 3 + f\left(\frac{3n-12}{4} - 3\right) + 1 + 2 + 3 + g_2\left(\frac{n-8}{4}\right) + \frac{3n-12}{4} - 3 = \frac{3}{8}n^2 - \frac{19}{4}n + 26。$$

$$\omega(v_5) = 1 + 2 + f\left(\frac{3n-12}{4} - 2\right) + 1 + 2 + 2 + g_1\left(\frac{n-8}{4}\right) + \frac{3n-12}{4} - 2 = \frac{3}{8}n^2 - \frac{15}{4}n + 16。$$

$$\omega(v_6) = 1 + f\left(\frac{3n-12}{4} - 1\right) + 1 + 2 + 2 + g_4\left(\frac{n-8}{4}\right) + \frac{3n-12}{4} - 1 = \frac{3}{8}n^2 - \frac{11}{4}n + 9。$$

$$\omega(v_7) = f\left(\frac{3n-12}{4}\right) + 1 + 1 + g_2\left(\frac{n-4}{4}\right) + \frac{3n-12}{4} = \frac{3}{8}n^2 - \frac{7}{4}n + 3。$$

$$\omega(u_{3k+1}) = f(3k+3) + f\left(\frac{3n-12}{4} - 3k-3\right) + g_3\left(\frac{n-8}{4} - k\right) + \left(\frac{3n-12}{4} - 3k-3\right) - 1 + \left(\frac{3n-12}{4} - 3k-3\right) + g_2(k+1) + 3k+3 = \frac{3}{8}n^2 + \frac{(-24k-34)n}{8} + 12k^2 + 34k + 20。$$

$$\omega(u_{3k+2}) = f(3k+4) + f\left(\frac{3n-12}{4} - 3k-4\right) + g_1\left(\frac{n-12}{4} - k\right) + \left(\frac{3n-12}{4} - 3k-4\right) - 1 + \left(\frac{3n-12}{4} - 3k-4\right) + g_1(k+1) + 3k+4+1 = \frac{3}{8}n^2 + \frac{(-24k-42)n}{8} + 12k^2 + 42k + 33。$$

$$\omega(u_{3k+3}) = f(3k+5) + f\left(\frac{3n-12}{4} - 3k-5\right) + g_2\left(\frac{n-12}{4} - k\right) + \left(\frac{3n-12}{4} - 3k-5\right) - 1 + \left(\frac{3n-12}{4} - 3k-5\right) + g_3(k+2) + 3k+5 = \frac{3}{8}n^2 + \frac{(-24k-50)n}{8} + 12k^2 + 50k + 48。$$

$$\begin{aligned}
&w(u_{3 \times \frac{n-16}{4} + 3}) = \frac{3}{8}n^2 - \frac{23}{4}n + 40。 \\
J(L_n) = &\frac{3n}{n+4} \left(\frac{2}{\sqrt{w(v_1)w(v_2)}} + \frac{4}{\sqrt{w(v_2)w(v_3)}} + \frac{1}{w(v_3)} + \frac{1}{\sqrt{w(v_1)w(u_1)}} + \right. \\
&\frac{2}{\sqrt{w(v_4)w(v_5)}} + \frac{2}{\sqrt{w(v_5)w(v_6)}} + \frac{4}{\sqrt{w(v_6)w(v_7)}} + \frac{1}{w(v_5)} + \frac{1}{w(v_7)} + \frac{1}{\sqrt{w(u_{3 \times \frac{n-16}{4} + 3})w(v_4)}} + \\
&\left. \sum_{k=0}^{\frac{n-20}{4}} \frac{1}{\sqrt{w(u_{3k+3})w(u_{3k+4})}} + \sum_{k=0}^{\frac{n-16}{4}} \left(\frac{2}{\sqrt{w(u_{3k+1})w(u_{3k+2})}} + \frac{2}{\sqrt{w(u_{3k+2})w(u_{3k+3})}} + \frac{1}{w(u_{3k+2})} \right) \right)。 \quad (4)
\end{aligned}$$

利用 Maple 软件, 将上述顶点的距离和代入(4)式, 得证。当 $n = 12, 16$ 时, 结果满足(2)式。证毕。

定理 2 对任意偶数 $n \geq 22$, 有 $J(L_n) < \frac{12n}{(n+4)(n-20)}$ 。

证明 情形 1 $4 \nmid n$ 。

见式(1), 取 $k = 0$ 可得到 $J(L_n)$ 的一个上界。当 $n \geq 22$ 时, $8n + 8 > 176$, 则

$$\begin{aligned}
J(L_n) &< \frac{3n}{n+4} \left(\frac{168}{3n^2 - 50n + 8} + \frac{48}{3n^2 - 58n + 176} \cdot \frac{n-14}{4} \right) = \\
&\frac{3n}{n+4} \left(\frac{168}{3n^2 - 58n + 8n + 8} + \frac{12(n-14)}{3n^2 - 58n + 176} \right) < \\
&\frac{3n}{n+4} \cdot \frac{12n}{3n^2 - 58n + 176} < \frac{3n}{n+4} \cdot \frac{12n}{3(n^2 - 20n)} = \frac{12n}{(n+4)(n-20)}。
\end{aligned}$$

情形 2 $4 | n$ 。

见式(2), 取 $k = 0$ 可得到 $J(L_n)$ 的一个上界。当 $n \geq 24$ 时, $12n - 8 > 160$, 则

$$\begin{aligned}
J(L_n) &< \frac{3n}{n+4} \left(\frac{152}{3n^2 - 46n - 8} + \frac{48}{3n^2 - 58n + 160} \cdot \frac{n-16}{4} \right) = \\
&\frac{3n}{n+4} \left(\frac{152}{3n^2 - 58n + 12n - 8} + \frac{12(n-16)}{3n^2 - 58n + 160} \right) = \\
&\frac{3n}{n+4} \cdot \frac{12n - 40}{3n^2 - 58n + 160} < \frac{3n}{n+4} \cdot \frac{12n}{3(n^2 - 20n)} = \frac{12n}{(n+4)(n-20)}。
\end{aligned}$$

证毕。

利用上述定理 1 中 L_n 的 Balaban 指数计算公式, 得到偶数 $n \geq 22$ 时 $J(L_n)$ 的上界, 改进了引理 2 中的结果。

定理 3 对于偶数 $n \geq 42$, $J(L_n) - \frac{12n}{(n+4)(n-20)} < \frac{1}{10}$ 。

证明 令 $f(n) = \frac{12n}{(n+4)(n-20)}$, 显然 $J(L_n)$ 与 $f(n)$ 均随 n 单调递减, 且函数 $J(L_n)$ 变化快于函

数 $f(n)$ 。若 $n = 42$, $J(L_{42}) \approx 0.41$, $f(42) \approx 0.50$, $J(L_{42}) - f(42) < \frac{1}{10}$ 。证毕。

定理 4 对于任意偶数 $n \geq 10$, 有 $J(L_n) > \frac{6n}{(n+4)(n-3)}$ 。

证明 情形 1 $4 \nmid n$ 。

显然, 当 $n = 10$ 时成立。当 $n \geq 14$ 时, $n^2 - 3n > 134$, 见式(1), 由于

$$96k^2 + (-24n + 464)k \geq 96\left(\frac{n-18}{4}\right)^2 + (-24n + 464) \cdot \frac{n-18}{4} = 8n - 144,$$

$$\text{则 } J(L_n) > \frac{3n}{n+4} \cdot \frac{12n}{3n^2 - 10n + 400} > \frac{3n}{n+4} \cdot \frac{12n}{3(n^2 - 3n + 134)} > \frac{6n}{(n+4)(n-3)}.$$

情形2 $4|n$.

显然,当 $n = 12$ 时成立。当 $n \geq 16$ 时, $n^2 - 3n > 203$, 见式(2), 由于

$$96k^2 + (-24n + 464)k \geq 96\left(\frac{n-20}{4}\right)^2 + (-24n + 464) \cdot \frac{n-20}{4} = 80 - 4n,$$

$$\text{则 } J(L_n) > \frac{3n}{n+4} \cdot \frac{12n}{3n^2 - 10n + 608} > \frac{3n}{n+4} \cdot \frac{12n}{3(n^2 - 3n + 203)} > \frac{6n}{(n+4)(n-3)}. \text{ 证毕。}$$

3 结束语

本文在定理1中给出了 L_n 的 Balaban 指数计算公式, 然后利用该公式得到了其上、下界。针对上界, 将其与文献[14]中的结果相比较, 可知, 若偶数 $n \geq 28$, 则

$$\frac{48}{(n+4)} - \frac{12n}{(n+4)(n-20)} = \frac{12}{(n+4)} \cdot \left(4 - \frac{n}{n-20}\right) = \frac{12}{(n+4)} \cdot \frac{3n-80}{n-20} > 0,$$

即本研究得到了更好的上界。同时, 由上述定理3可知, 若偶数 $n \geq 42$, 则该上界与 $J(L_n)$ 准确值相差不超过0.1, 所以可用该上界更好地估计 $J(L_n)$ 的值。

围绕文献[13]中关于立方体图中具有极小 Balaban 指数的猜想, 可进一步研究其他立方体图的 Balaban 指数, 将其与本文所得结果进行比较, 获得一些具有极小 Balaban 指数的立方体图的性质, 从而刻画出具有极小 Balaban 指数的立方体图。

参考文献:

- [1] BONDY J A, MURTY U S R. Graph theory with applications[M]. New York: American Elsevier Pub. Co., 1976.
- [2] BALABAN A T. Highly Discriminating Distance-based Topological Index[J]. *Chem Phys Lett*, 1982, **89**(5): 399-404. DOI: 10.1016/0009-2614(82)80009-2.
- [3] BALABAN A T. Topological Indices Based on Topological Distances in Molecular Graphs[J]. *Pure Appl Chem*, 1983, **55**(2): 199-206. DOI: 10.1351/pac198855020199.
- [4] KNOR M, ŠKREKOVSKI R, TEPEH A. Mathematical Aspects of Balaban Index[J]. *MATCH Commun Math Comput Chem*, 2018, **79**: 685-716.
- [5] THAKUR A, THAKUR M, KHADIKAR P V, et al. QSAR Study on Benzenesulphonamide Carbonic Anhydrase Inhibitors: Topological Approach Using Balaban Index[J]. *Bioorg Med Chem*, 2004, **12**(4): 789-793. DOI: 10.1016/j.bmc.2003.10.058.
- [6] 拉白, 邓波, 冶成福, 等. 三类正则图的 Balaban 指标[J]. *山东大学学报(理学版)*, 2020, **55**(4): 97-101. DOI: 10.6040/j.issn.1671-9352.0.2019.392.
- [7] DAS K C. On the Balaban Index of Chain Graphs[J]. *Bull Malays Math Sci Soc*, 2021, **44**(4): 2123-2138. DOI: 10.1007/s40840-020-01054-y.
- [8] 方炜, 余宏杰, 高玉斌, 等. 仙人掌图的最大 Balaban 指数和 sum-Balaban 指数[J]. *中国科学技术大学学报*, 2019, **49**(5): 368-376. DOI: 10.3969/j.issn.0253-2778.2019.05.003.
- [9] FANG W, YU H J, GAO Y B, et al. Maximum Balaban Index and Sum-Balaban Index of Cacti[J]. *J Univ Sci Technol China*, 2019, **49**(5): 368-376. DOI: 10.3969/j.issn.0253-2778.2019.05.003.
- [10] CHEN Z Q, DEHMER M, SHI Y T, et al. Sharp Upper Bounds for the Balaban Index of Bicyclic Graphs[J]. *MATCH Commun Math Comput Chem*, 2016, **75**: 105-128.
- [11] ZHOU B, TRINAJSTIĆ N. Bounds on the Balaban Index [J]. *Croat Chem Acta*, 2008, **81**(2): 319-323.
- [12] SUN L L. Bounds on the Balaban Index of Trees[J]. *MATCH Commun Math Comput Chem*, 2010, **63**: 813-818.
- [13] DENG H Y. On the Balaban Index of Trees[J]. *MATCH Commun Math Comput Chem*, 2011, **66**: 253-260.
- [14] KNOR M, ŠKREKOVSKI R, TEPEH A. Balaban Index of Cubic Graphs[J]. *MATCH Commun Math Comput Chem*, 2015, **73**: 519-528.
- [15] 邓波, 常彩冰, 王守中, 等. 正则图的 Balaban 指标[J]. *西南师范大学学报(自然科学版)*, 2016, **41**(6): 12-17 DOI:

- 10.13718/j.cnki.xsxb.2016.06.003.
- DENG B, CHANG C B, WANG S Z, *et al.* On Balaban Index of Regular Graphs[J]. *J Southwest China Norm Univ Nat Sci Ed*, 2016, **41**(6): 12–17. DOI: 10.13718/j.cnki.xsxb.2016.06.003.
- [15] AHMAD U, IMRAN M, ALANAZI A M, *et al.* On Distance-based Indices of Regular Dendrimers Using Automorphism Group Action[J]. *Main Group Met Chem*, 2023, **46**(1): 20220028. DOI: 10.1515/mgmc-2022-0028.
- [16] KNOR M, KOMORNÍK J, ŠKREKOVSKI R, *et al.* Some Remarks on Balaban and Sum-Balaban Index[J]. *Art Discrete Appl Math*, 2020, **3**(2): #P2.03. DOI: 10.26493/2590-9770.1241.7f8.
- [17] ZUO Y, TANG Y Q, WU R F, *et al.* Maximum Balaban Index and Sum-Balaban Index of Cacti[J]. *Discrete Math Algorithm Appl*, 2020, **12**(1): 2050001. DOI: 10.1142/s1793830920500019.
- [18] DENG B, ZHU X Y. Minimal Balaban Index on Two Classes of Graphs[J]. *Ars Comb*, 2019, **147**: 203–213.
- [19] ZHAO D M, CHU Y M, SIDDIQUI M K, *et al.* On Reverse Degree Based Topological Indices of Polycyclic Metal Organic Network[J]. *Polycycl Aromat Compd*, 2022, **42**(7): 4386–4403. DOI: 10.1080/10406638.2021.1891105.