

树的第三小与第四小ABC能量

付彦杰,高玉斌*

(中北大学 数学学院,山西 太原 030051)

摘要:为了在所有 $n \geq 13$ 阶树中,寻找第三小与第四小ABC能量的树,本文运用图的删边变换、不等式的放缩及Coulson型积分公式的推论,给出此问题的结果。结果表明在所有 $n \geq 13$ 阶树中, A_n 与 B_n 分别为唯一具有第三小与第四小ABC能量的树。所得结果对后续树的ABC能量极值问题研究具有一定的借鉴价值,也有利于推测相关化学分子结构的性质。

关键词:图;ABC矩阵;ABC特征值;删边变换

中图分类号:O157.5 **文献标志码:**A **文章编号:**0253-2395(2025)02-0322-10

Trees with the Third and Fourth Minimum ABC Energy

FU Yanjie, GAO Yubin*

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

Abstract: In order to find the trees with the third and fourth minimum ABC energy among all trees on $n \geq 13$ vertices, the results of this problem are given by using edge deletion operation of graphs, the reduction of inequality and the corollary of the Coulson-type integral formula. The results show that among all tree of $n \geq 13$ vertices, A_n and B_n are the unique tree with the third and fourth minimum ABC energy, respectively. The obtained results have certain reference value for the study of the ABC energy of extrema value problem of trees, and it is also useful to speculate on the properties of the relevant chemical molecular structure.

Key words: graph; ABC matrix; ABC eigenvalues; edge deletion

0 引言

设 G 是一个简单连通图,其顶点集为 $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$,边集为 $E(G)$, $d_G(v_i)$ 表示图 G 中顶点 v_i 的度, $A(G)$ 为图 G 的邻接矩阵。设 $\lambda_1(G), \lambda_2(G), \dots, \lambda_n(G)$ 表示 $A(G)$ 的特征值,则图 G 的能量 $\epsilon(G)$ 被定义为 $\epsilon(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i(G)|^{[1]}$ 。这个概念可以用来近似一个分子的电子总能量。极值图论的基本的问题之一是在一些重要图类中寻找极值。例如树^[1-9]、单圈图^[10-12]、双圈图^[13-15]等等。

分子拓扑指数是定义在化合物分子图上的数值不变量,Estrada等^[16]定义了一个图 G 的ABC指数为

$$I_{ABC}(G) = \sum_{v_i, v_j \in E(G)} \sqrt{\frac{d_i + d_j - 2}{d_i d_j}}.$$

收稿日期:2023-06-07;接受日期:2023-12-04

基金项目:山西省回国留学人员科研资助项目(2022-149)

作者简介:付彦杰(1997-),男,山西长治人,硕士研究生,研究方向为组合数学。E-mail:18636538301@163.com

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

引文格式:付彦杰,高玉斌.树的第三小与第四小ABC能量[J].山西大学学报(自然科学版),2025,48(2):322-331. DOI:10.13451/j.sxu.ns.2023164.

ABC指数已经被证明可以描述烷烃的形成热,并且精度可以与密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)方法相当。在文献[17]中,作者给出了广义ABC指数的概率解释,这种解释足以涵盖分子背景下极化键的情况,并且以ABC矩阵的形式引入这些概率的矩阵表示。图 G 的ABC矩阵定义为 $\Omega(G)=(r_{ij})_{n \times n}$,其中

$$r_{ij} = \begin{cases} \sqrt{\frac{d_i + d_j - 2}{d_i d_j}}, & v_i v_j \in E(G), \\ 0, & v_i v_j \notin E(G). \end{cases}$$

在这种矩阵表示的基础上,一些与ABC矩阵的特征值有关的指标开始逐渐被研究,例如ABC能量。图 G 的ABC矩阵的特征值 $\rho_1(G), \rho_2(G), \dots, \rho_n(G)$ 称为图 G 的ABC-特征值,图 G 的ABC能量被定义为^[17]

$$\epsilon_{ABC}(G) = \sum_{i=1}^n |\rho_i(G)|.$$

在文献[18-19]中,作者分别给出了ABC能量的一个上界和下界。

在所有 n 阶树中,对具有极小ABC能量的树的排序问题被一些学者关注。在文献[2]中,作者证明了在所有 n 阶树中, S_n 是唯一具有最小ABC能量的树;在文献[3]中,作者确定了在所有 $n(n \geq 7)$ 阶树中, S_n^* (如图1)是唯一具有第二小ABC能量的树。在此基础上,本文将进一步去刻画具有第三小与第四小ABC能量的树的结构。所得结果对后续树的ABC能量极值问题研究具有一定的借鉴价值,也有利于推测相关化学分子结构的性质。

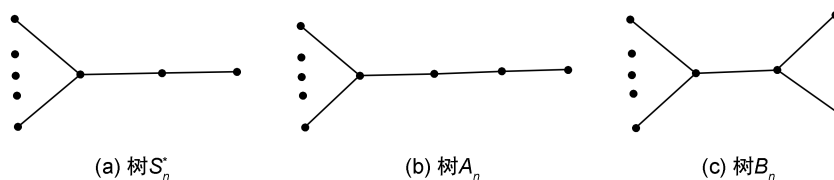


图1 三个特殊的树

Fig. 1 Three special trees

1 引理

设 P_n 表示 n 阶路。 $N_T(u)$ 表示在树 T 中,与顶点 u 相邻的顶点组成的集合。 S_n 是 n 阶星图, S_n^* (如图1)是通过在 S_{n-1} 的一个悬挂顶点处添加一条悬挂边形成的树。 A_n (如图1)是通过连接 P_2 的一个顶点与 S_{n-2} 的一个悬挂顶点形成的树。 B_n (如图1)是通过在 S_{n-1}^* 的度为2的顶点处添加一条悬挂边形成的树。

引理1 当 $n \geq 13$ 时, $\epsilon_{ABC}(B_n) < 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2}$ 。

证明 经计算, B_n 的特征多项式和能量如下

$$\phi_{ABC}(B_n, x) = x^{n-4} \left(x^4 - \frac{3n^2 - 19n + 34}{3n-9} x^2 + \frac{4(n-4)^2}{3n-9} \right),$$

$$\epsilon_{ABC}(B_n) = \frac{\sqrt{6(n-3)} \sqrt{3n^2 - 19n + 34 + \sqrt{*}} + \sqrt{6(n-3)} \sqrt{3n^2 - 19n + 34 - \sqrt{*}}}{3(n-3)},$$

其中 $*$ = $9n^4 - 162n^3 + 1093n^2 - 3212n + 3460$ 。下面将证明

$$\frac{\sqrt{6(x-3)} \sqrt{3x^2 - 19x + 34 + \sqrt{*}} + \sqrt{6(x-3)} \sqrt{3x^2 - 19x + 34 - \sqrt{*}}}{3(x-3)} < 2\sqrt{x-6} + 2\sqrt{2}.$$

上式等价于

$$(3\sqrt{2}x - 9\sqrt{2}) \sqrt{x-6} - 2\sqrt{3}(x-4) \sqrt{x-3} - x + 1 > 0.$$

设 $f(x) = (3\sqrt{2}x - 9\sqrt{2})\sqrt{x-6} - 2\sqrt{3}(x-4)\sqrt{x-3} - x + 1 (x \geq 13)$ 。因为

$$\frac{df}{dx} = 3\sqrt{2x-12} + \frac{3\sqrt{2}x - 9\sqrt{2}}{2\sqrt{x-6}} - \frac{\sqrt{3}(x-4)}{\sqrt{x-3}} - 2\sqrt{3}\sqrt{x-3} - 1 \geq 2\sqrt{9x-27} - 2\sqrt{3}\sqrt{x-3} - \sqrt{3}\sqrt{x-3} - 1 = (6-3\sqrt{3})\sqrt{x-3} - 1 > 0,$$

故 $f(x) \geq f(13) \approx 1.66$ 。证毕。

引理 2^[2] 设 $T \in \mathcal{T}(n)$, B 为 n 阶非负实对称矩阵, 若 $\Omega(T) \geq B$, 则 $\epsilon_{ABC}(T) \geq \epsilon(B)$ 。进一步, 若存在 $1 \leq i, j \leq n$, 使得 $\Omega(T)_{ij} > B_{ij}$, 则 $\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon(B)$ 。

设 $uv \in E(T)$, 并记 $T - uv = T_1 \cup T_2$, 其中 T_1, T_2 分别是 $T - uv$ 包含顶点 u, v 的连通分支。分别用 $\Omega(T)_{V(T_1)}, \Omega(T)_{V(T_2)}$ 表示由 T_1, T_2 的顶点生成的 $\Omega(T)$ 的子矩阵。

引理 3^[3] 设 $uv \in E(T), T - uv = T_1 \cup T_2$, 其中 T_1, T_2 分别是 $T - uv$ 包含顶点 u, v 的连通分支, 则

$$\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon(\Omega(T)_{V(T_1)}) + \epsilon(\Omega(T)_{V(T_2)})。$$

若 $uv \in E(T)$ 不是悬挂边, 且对任意 $w \in (N_T(u) \cup N_T(v)) \setminus \{u, v\}$, 有 $d_T(w) \leq 2$, 则

$$\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon_{ABC}(T_1) + \epsilon_{ABC}(T_2)。$$

引理 4^[2] 设 $T \in \mathcal{T}(n) (n \geq 3)$, 则 $\epsilon_{ABC}(T) \geq 2\sqrt{n-2}$, 等式成立当且仅当 $T \cong S_n$ 。

设 $P_5 = v_1v_2v_3v_4v_5, P_6^*$ 是通过在 P_5 的 v_2 顶点处添加一个悬挂顶点形成的树。

引理 5^[3] 设 $n \geq 5$, 在 $\mathcal{T}(n)$ 中 (除 S_n 外), 当 $n = 5$ 时, P_5 是唯一具有最小 ABC 能量的树。当 $n = 6$ 时, P_6^* 是唯一具有最小 ABC 能量的树。当 $n \geq 7$ 时, S_n^* 是唯一具有最小 ABC 能量的树。

引理 6^[2] 设 $t \geq 2, x_i \geq 3 (i = 1, 2, \dots, t), \sum_{i=1}^t x_i \geq 8$, 则

$$\sum_{i=1}^t \sqrt{x_i - 2} \geq \sqrt{\sum_{i=1}^t x_i + t - 3}。$$

引理 7 设 $f(x) = 2\sqrt{x-a} + b - 2\sqrt{x-6} - 2\sqrt{2}$, 其中 $x \geq 13$ 。

(i) 若 $a = 7, b = 2 + \sqrt{2}$ 时, $f(x) > 0$;

(ii) 若 $a = 8, b = \frac{19}{5}$ 时, $f(x) > 0$;

(iii) 若 $a = 9, b = \frac{23}{5}$ 时, $f(x) > 0$;

(iv) 若 $x \geq 15, a = 9, b = 4$ 时, $f(x) > 0$ 。

证明 容易验证 $f(x) = 2\sqrt{x-a} + b - 2\sqrt{x-6} - 2\sqrt{2} (x \geq 13, 7 \leq a \leq 9)$ 为单调递增函数。

若 $a = 7, b = 2 + \sqrt{2}$ 时, $f(13) \approx 0.1932$, 故 (i) 成立。若 $a = 8, b = \frac{19}{5}$ 时, $f(13) \approx 0.1522$, 故 (ii)

成立。若 $a = 9, b = \frac{23}{5}$ 时, $f(13) \approx 0.46$, 故 (iii) 成立。若 $x \geq 15, a = 9, b = 4$ 时, $f(15) \approx 0.0706$,

故 (iv) 成立。证毕。

引理 8 若 $x \geq 13$, 则 $f(x) = 2\sqrt{\frac{11}{6}} + 2\sqrt{x-7 + \sqrt{2x-16}} - 2\sqrt{2} - 2\sqrt{x-6} > 0$ 。

证明
$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{\sqrt{x-6}\sqrt{2x-16} + \sqrt{x-6} - \sqrt{x-7 + \sqrt{2x-16}}\sqrt{2x-16}}{\sqrt{x-7 + \sqrt{2x-16}}\sqrt{2x-16}\sqrt{x-6}}。$$

因为

$$(\sqrt{x-6}\sqrt{2x-16} + \sqrt{x-6})^2 - (\sqrt{x-7 + \sqrt{2x-16}}\sqrt{2x-16})^2 = 3x - 22 + 4\sqrt{2x-16} > 0,$$

所以 $\frac{df(x)}{dx} > 0$, 故 $f(x)$ 为单调递增函数。又因为 $f(13) \approx 0.6418$, 所以 $f(x) > 0$ 。证毕。

引理9 若 $x \geq 13$, 则 $f(x) = 2 + 2\sqrt{x-6} + \sqrt{2x-14} - 2\sqrt{2} - 2\sqrt{x-6} > 0$ 。

证明 $\frac{df(x)}{dx} = \frac{\sqrt{x-6}\sqrt{2x-14} + \sqrt{x-6} - \sqrt{x-6} + \sqrt{2x-14}\sqrt{2x-14}}{\sqrt{x-6} + \sqrt{2x-14}\sqrt{2x-14}\sqrt{x-6}}$ 。因为

$$(\sqrt{x-6}\sqrt{2x-14} + \sqrt{x-6})^2 - (\sqrt{x-6} + \sqrt{2x-14}\sqrt{2x-14})^2 = x-6 + 2\sqrt{2x-14} > 0,$$

所以 $\frac{df(x)}{dx} > 0$, 故 $f(x)$ 为单调递增函数。又因为 $f(13) \approx 0.3496$, 所以 $f(x) > 0$ 。证毕。

引理10 设 $f(x, y) = 2\sqrt{x-2} + 2\sqrt{y-2} - 2\sqrt{x+y-a} - 2\sqrt{2}$ 。

(i) 若 $a = 6, x \geq 4, y \geq 4$ 时, $f(x, y) \geq 0$;

(ii) 若 $a = 5, x \geq 7, y \geq 7$ 时, $f(x, y) > 0$ 。

证明 若 $a = 5$ 或 6 时, 经过求导计算可得: 若 $x \geq 4$ 时, $f(x, y)$ 关于 y 单调递增; 若 $y \geq 4$ 时, $f(x, y)$ 关于 x 单调递增。又因为若 $a = 6$ 时, $f(4, 4) = 0$, 所以 (i) 成立。若 $a = 5$ 时, $f(7, 7) \approx 0.116$, 所以 (ii) 成立。证毕。

引理11 设 $T \in \mathcal{T}(n) (n \geq 13)$ 。

(i) 设 $u_1v_1 \in E(T)$, $T - u_1v_1 = T_1 \cup T_2$, 其中 T_1, T_2 分别是 $T - u_1v_1$ 包含顶点 u_1, v_1 的连通分支。若对于任意 $w \in (N_T(u_1) \cup N_T(v_1)) \setminus \{u_1, v_1\}$, 有 $d_T(w) \leq 2$ 且 $|V(T_1)| = n_1 \geq |V(T_2)| = n_2 \geq 4$, 则 $\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon_{ABC}(B_n)$ 。

(ii) 设存在 $u_2v_2 \in E(T)$, 使得 $T - u_2v_2 \cong P_2 \cup T_3$, 其中 P_2, T_3 是 $T - u_2v_2$ 的两个连通分支。又存在 $u_3v_3 \in E(T_3)$, 使得 $T_3 - u_3v_3 \cong P_2 \cup T_4$, 其中 P_2, T_4 是 $T_3 - u_3v_3$ 的两个连通分支。若对于任意 $w_1 \in (N_T(u_2) \cup N_T(v_2)) \setminus \{u_2, v_2\}$, $w_2 \in (N_{T_3}(u_3) \cup N_{T_3}(v_3)) \setminus \{u_3, v_3\}$ 有 $d_T(w_1) \leq 2$ 和 $d_{T_3}(w_2) \leq 2$, 则 $\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon_{ABC}(B_n)$ 。

(iii) 设存在 $u_4v_4 \in E(T)$, 使得 $T - u_4v_4 \cong P_2 \cup T_5$, 其中 P_2, T_5 是 $T - u_4v_4$ 的两个连通分支。又存在 $u_5v_5 \in E(T_5)$, 使得 $T_5 - u_5v_5 \cong P_3 \cup T_6$, 其中 P_3, T_6 是 $T_5 - u_5v_5$ 的两个连通分支。若对于任意 $w_3 \in (N_T(u_4) \cup N_T(v_4)) \setminus \{u_4, v_4\}$, $w_4 \in (N_{T_5}(u_5) \cup N_{T_5}(v_5)) \setminus \{u_5, v_5\}$ 有 $d_T(w_3) \leq 2$ 和 $d_{T_5}(w_4) \leq 2$, 则 $\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon_{ABC}(B_n)$ 。

(iv) 设存在 $u_6v_6 \in E(T)$, 使得 $T - u_6v_6 \cong P_3 \cup T_7$, 其中 P_3, T_7 是 $T - u_6v_6$ 的两个连通分支。又存在 $u_7v_7 \in E(T_7)$, 使得 $T_7 - u_7v_7 \cong P_3 \cup T_8$, 其中 P_3, T_8 是 $T_7 - u_7v_7$ 的两个连通分支。若对于任意 $w_5 \in (N_T(u_6) \cup N_T(v_6)) \setminus \{u_6, v_6\}$, $w_6 \in (N_{T_7}(u_7) \cup N_{T_7}(v_7)) \setminus \{u_7, v_7\}$ 有 $d_T(w_5) \leq 2$ 和 $d_{T_7}(w_6) \leq 2$, 则 $\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon_{ABC}(B_n)$ 。

证明 (i) 通过引理3、引理4及引理10(i)得

$$\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon_{ABC}(T_1) + \epsilon_{ABC}(T_2) \geq 2\sqrt{n_1-2} + 2\sqrt{n_2-2} \geq 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n)。$$

(ii) 通过引理3及引理4得

$$\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon_{ABC}(T_3) + \epsilon_{ABC}(P_2) > \epsilon_{ABC}(T_4) + 2\sqrt{2} \geq 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n)。$$

(iii) 通过引理3、引理4及引理7(i)得

$$\begin{aligned} \epsilon_{ABC}(T) &> \epsilon_{ABC}(T_5) + \epsilon_{ABC}(P_2) > \epsilon_{ABC}(T_6) + \sqrt{2} + 2 \geq \\ &2\sqrt{n-7} + 2 + \sqrt{2} > 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n)。 \end{aligned}$$

(iv) 通过引理3、引理4及引理7(ii)得

$$\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon_{ABC}(T_7) + \epsilon_{ABC}(P_3) > \epsilon_{ABC}(T_8) + 4 \geq 2\sqrt{n-8} + 4 > 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n)。$$

证毕。

2 主要结论

引理 12 若 $n > 13$ 时, $\epsilon_{ABC}(B_n) < \epsilon_{ABC}(P_n)$ 。

证明 由引理 3 及引理 4, 可得

$$\epsilon_{ABC}(P_n) > \epsilon_{ABC}(P_{n-4}) + \epsilon_{ABC}(P_4) > 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n)。$$

证毕。

引理 13 若 $n > 13$ 时, $\epsilon_{ABC}(A_n) < \epsilon_{ABC}(B_n)$ 。

证明 设 A_n, B_n 的 ABC-特征多项式分别为

$$\phi_{ABC}(A_n, x) = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (-1)^k a_{2k} x^{n-2k}, \phi_{ABC}(B_n, x) = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (-1)^k b_{2k} x^{n-2k},$$

其中 $a_0 = b_0 = 1$ 。易知,

$$a_2 = \frac{2n^2 - 13n + 26}{2n - 6}, b_2 = \frac{3n^2 - 19n + 34}{3n - 9},$$
$$a_4 = \frac{(n-4)^2}{n-3} + \frac{1}{4}, b_4 = \frac{4(n-4)^2}{3(n-3)},$$
$$a_{2k} = b_{2k} = 0 \text{ (当 } k \geq 3 \text{ 时)}。$$

故

$$a_2 - b_2 = \frac{10-n}{6n-18} < 0,$$
$$a_4 - b_4 = \frac{(n-4)^2}{n-3} + \frac{1}{4} - \frac{4(n-4)^2}{3(n-3)} = \frac{-4n^2 + 35n - 73}{12n - 36} < 0,$$

所以 $\epsilon_{ABC}(A_n) < \epsilon_{ABC}(B_n)$ 。证毕。

设 $T \in \mathcal{T}(n) (n \geq 13)$, 用 $R(T)$ 表示 T 中度至少为 3 的顶点集合。

引理 14 设 $n > 13, T \in \mathcal{T}(n) \setminus \{S_n, S_n^*, A_n\}$ 且 $|R(T)| = 1$, 则 $\epsilon_{ABC}(B_n) < \epsilon_{ABC}(T)$ 。

证明 设 $R(T) = \{v\}, T - v = n_1 P_1 \cup n_2 P_2 \cup \dots \cup n_m P_m, \sum_{i=1}^m i n_i + 1 = n$ 。考虑以下情形。

情形 1 存在 $4 \leq i$, 使得 $n_i \neq 0$ 。则存在一条边 uv , 使得 $T - uv = T_1 \cup T_2$, 其中 T_1, T_2 分别 $T - uv$ 包含顶点 u, v 的连通分支。并且对于任意 $w \in (N_T(u) \cup N_T(v)) \setminus \{u, v\}$, 有 $d_T(w) \leq 2$ 且 $|V(T_1)| = n_1 \geq |V(T_2)| = n_2 \geq 4$, 则由引理 11(i) 可得结论。

情形 2 存在 $4 \leq i$, 使得 $n_i = 0$ 。

情形 2.1 $n_3 = 0$ 。

若 $n_2 = 0$ 时, $T \cong S_n$; 若 $n_2 = 1$ 时, $T \cong S_n^*$; 若 $n_2 \geq 2$ 时, 则由引理 11(ii) 可得结论。

情形 2.2 $n_3 = 1$ 。

若 $n_2 = 0$ 时, $T \cong A_n$; 若 $n_2 = 1$ 时, 则由引理 11(iii) 可得结论。若 $n_2 \geq 2$ 时, 则由引理 11(ii) 可得结论。

情形 2.3 $n_3 \geq 2$ 。

由引理 11(iv) 可得结论。证毕。

引理 15 设 $n > 13, T \in \mathcal{T}(n)$ 且 $|R(T)| \geq 2$ 。若在 $R(T)$ 中没有相邻顶点, 则 $\epsilon_{ABC}(B_n) < \epsilon_{ABC}(T)$ 。

证明 设 $u, v \in R(T), P_l = uv_1 \dots v_{l-2}v$ 是连接 u, v 的一条路径, 其中 $d_T(v_1) = \dots = d_T(v_{l-2}) = 2$ 。分以下几种情形讨论。

情形 1 $l \geq 4$ 。

由引理 11(i) 可得结论。

情形 2 $l = 3$ 。

设 T_1, T_2 分别是 $T - uv_1 - v_1v$ 包含顶点 u, v 的连通分支, 并且 $|V(T_1)| = s, |V(T_2)| = t, t + s + 1 = n$ 。

情形 2.1 $s = 3$ 。

(i) 若 $T_2 \neq S_{n-4}$ 时, T 的 ABC 矩阵可写为 $\Omega(T) = \begin{pmatrix} B & C \\ C^T & D \end{pmatrix}$, 其中

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}} & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} 0_{3 \times 1} & 0_{3 \times (t-1)} \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & 0_{1 \times (t-1)} \end{pmatrix}, D = \Omega(T)_{V(T_2)}$$

设 $A = \begin{pmatrix} B & 0 \\ 0 & \Omega(T) \end{pmatrix}$, 很容易得到 $\Omega(T) > A$ 。由引理 2、引理 5 及引理 8 可得

$$\begin{aligned} \epsilon_{ABC}(T) &> \epsilon(A) = \epsilon(B) + \epsilon_{ABC}(T_2) \geq \\ &2\sqrt{\frac{11}{6}} + 2\sqrt{n-7 + \frac{1}{n-6}} + \sqrt{2}\sqrt{n-8 + \frac{1}{n-6}} > 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n) \end{aligned}$$

(ii) 若 $T_2 \cong S_{n-4}$ 时, 则

$$\epsilon_{ABC}(T) = \frac{\sqrt{6}(\sqrt{(n-4)(3n^2-23n+47+\sqrt{*})} + \sqrt{(n-4)(3n^2-23n+47-\sqrt{*})})}{3(n-4)},$$

其中 $* = 9n^4 - 204n^3 + 1711n^2 - 6060n + 8425$ 。

现证明 $\epsilon_{ABC}(B_n) < \epsilon_{ABC}(T)$ 。等价于证明

$$\sqrt{6}\sqrt{n-4}(n-3)\sqrt{11n^2-106n+259} - 4\sqrt{3}(n-4)^2\sqrt{n-3} - n^2 + 6n - 5 > 0。$$

因为由 Maple 计算得出 $\sqrt{6}\sqrt{n-4}(n-3)\sqrt{11n^2-106n+259} - 4\sqrt{3}(n-4)^2\sqrt{n-3} - n^2 + 6n - 5 < 0$ 的整数解为 $\{6, 7, 8\}$, 所以当 $n \geq 13$ 时, 结论成立。

情形 2.2 $3 < s < 7$ 。

情形 2.2.1 T_1 是星图。则 T 的 ABC 矩阵可写为 $\Omega(T) = \begin{pmatrix} B' & C' \\ C'^T & D' \end{pmatrix}$, 其中

$$B' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & \sqrt{\frac{s-1}{s}} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \sqrt{\frac{s-1}{s}} & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \sqrt{\frac{s-1}{s}} & 0 \\ \sqrt{\frac{s-1}{s}} & \sqrt{\frac{s-1}{s}} & \dots & 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} \\ 0 & 0 & \dots & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 \end{pmatrix}_{(s+1) \times (s+1)}, C' = \begin{pmatrix} 0_{(s+1) \times 1} & 0_{(s+1) \times (t-1)} \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & 0_{1 \times (t-1)} \end{pmatrix},$$

$D' = \Omega(T)_{V(T_2)}$ 。设 $A' = \begin{pmatrix} B' & 0 \\ 0 & \Omega(T_2) \end{pmatrix}$, 很容易得到 $\Omega(T) > A'$ 。由引理 2 及引理 4 可得

$$\begin{aligned} \epsilon_{ABC}(T) > \epsilon(A') = \epsilon(B') + \epsilon_{ABC}(T_2) \geq \\ \frac{\sqrt{2s(2s^2 - 3s + 2)}}{s} + 2\sqrt{n-s-3} > 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n). \end{aligned} \tag{1}$$

不等式(1)成立是因为:若 $3 < s < 7$ 时,

$$f(n, s) = \frac{\sqrt{2s(2s^2 - 3s + 2)}}{s} + 2\sqrt{n-s-3} - 2\sqrt{n-6} - 2\sqrt{2}$$

关于 n 单调递增, 并且 $f(13, s) > 0$ 。

情形 2.2.2 T_1 不是星图。

(i) 若 $s = 4$ 时, $T_1 \cong P_4$ 。设 $T_1 = u_1uu_2u_3$, 由引理 3、引理 4 及引理 7(i) 可得

$$\begin{aligned} \epsilon_{ABC}(T) > \sqrt{2} + \epsilon_{ABC}(T - u_2 - u_3) \geq \sqrt{2} + \epsilon_{ABC}(P_3) + \epsilon_{ABC}(T_2) \geq \\ 2 + \sqrt{2} + 2\sqrt{n-7} > 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n). \end{aligned}$$

(ii) 若 $s = 5$ 时, $T_1 \cong P_5$ 或 S_5^* 。因为 $\epsilon_{ABC}(P_5) < \epsilon_{ABC}(S_5^*) \approx 3.9831$, 所以我们只考虑 $T_1 \cong S_5^*$ 。

若 $T_1 \cong S_5^*$ 时, 由引理 3、引理 4 及引理 7(ii) 得

$$\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon_{ABC}(T_1) + \epsilon_{ABC}(T_2) \geq 3.9831 + 2\sqrt{n-8} > 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n)。$$

(iii) 若 $s = 6$ 时, 则 $T_1 \cong T_{6.1}$ 或 $T_{6.2}, T_{6.3}, T_{6.4}, T_{6.5}$ (如图 2 所示)。

因为 $\epsilon_{ABC}(T_{6.4}) > \epsilon_{ABC}(T_{6.5}) > \epsilon_{ABC}(T_{6.2}) > \epsilon_{ABC}(T_{6.1}) > \epsilon_{ABC}(T_{6.3}) \approx 4.6260$, 所以我们只考虑 $T_1 \cong T_{6.3}$ 。

若 $T_1 \cong T_{6.3}$ 时, 由引理 3、引理 4 及引理 7(iii) 得

$$\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon_{ABC}(T_1) + \epsilon_{ABC}(T_2) \geq 4.6260 + 2\sqrt{n-9} > 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n)。$$

情形 2.3 $s \geq 7, 7 \leq t \leq n - 8$ 。

由引理 3、引理 4 及引理 10(ii) 可得

$$\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon_{ABC}(T_1) + \epsilon_{ABC}(T_2) \geq 2\sqrt{s-2} + 2\sqrt{t-2} > 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n)。$$

证毕。

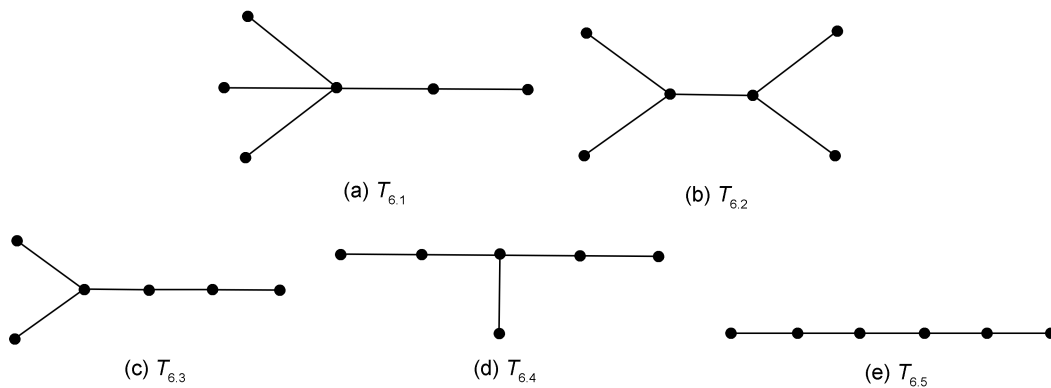


图 2 所有的 6 阶树

Fig. 2 All trees with 6 vertices

引理 16 设 $n > 13, T \in \mathcal{T}(n)$ 且 $|R(T)| \geq 2$ 。若在 $R(T)$ 中存在相邻顶点, 则 $\epsilon_{ABC}(B_n) \leq \epsilon_{ABC}(T)$, 等式成立当且仅当 $T \cong B_n$ 。

证明 设 $E^0 = \{uv \in E(T) | d(u), d(v) \geq 3\}$, $T - E^0 = xP_1 \cup yP_2 \cup T_1 \cup \dots \cup T_z$, 其中 T_1, \dots, T_z 为 $T - E^0$ 中至少有 3 个顶点的连通分支。设 $|V(T_i)| = s_i$, 不失一般性假设 $3 \leq s_z \leq s_{z-1} \leq \dots \leq s_2 \leq s_1$, 则可以得到^[3]

$$2(n-1) = x + 2n - z,$$

所以 $z \geq x + 2$ 。现讨论以下几种情形。

情形1 $y=0, z=2$ 。

若 $y=0, z=2$ 时, $x=0, s_1+s_2=n$ 。

情形1.1 $s_1 \geq 4, s_2 \geq 4$ 。

由引理11(i)可得结论。

情形1.2 $s_1=3, s_2 \geq 10$ 。

若 $s_1=3, s_2 \geq 10$ 时, $T_2 \cong S_{n-3}$ 或 $T_2 \neq S_{n-3}$ 。

(i) $T_2 \cong S_{n-3}$ 时, $T \cong B_n$ 。

(ii) $T_2 \neq S_{n-3}$ 时, 由引理3、引理5及引理9可得

$$\epsilon_{ABC}(T) > \epsilon_{ABC}(T_1) + \epsilon_{ABC}(T_2) \geq 2\sqrt{n-6 + \frac{1}{n-5} + \sqrt{2}} \sqrt{n-7 + \frac{1}{5} + 2} > 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n)。$$

情形2 $y=0, z \geq 3$ 。

情形2.1 $\sum_{i=1}^{z-2} s_i \geq 8$ 。

若 $\sum_{i=1}^{z-2} s_i \geq 8$ 时, $n \geq 14$ 。若 $n=14$ 时, 直接计算, 结论成立。若 $n \geq 15$ 时, 由引理3、引理4、引理6及引理7(iv)可得

$$\begin{aligned} \epsilon_{ABC}(T) &> \sum_{i=1}^z \epsilon_{ABC}(T_i) \geq 2 \sum_{i=1}^z \sqrt{s_i - 2} \geq \\ &2 \sqrt{\sum_{i=1}^{z-2} s_i + (z-2) - 3 + 2\sqrt{s_{z-1} - 2} + 2\sqrt{s_z - 2}} \geq \\ &2\sqrt{n - s_z - s_{z-1} - 3 + 2\sqrt{s_{z-1} - 2} + 2\sqrt{s_z - 2}} \geq \\ &2\sqrt{n-9} + 4 > 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n)。 \end{aligned} \quad (2)$$

不等式(2)成立是因为设 $f(x, y) = 2\sqrt{n-x-y-3} + 2\sqrt{x-2} + 2\sqrt{y-2}$, 若 y 不变, $3 \leq x \leq \frac{n-y-1}{2}$ 时, $f(x, y)$ 关于 x 单调递增。同理若 x 不变, $3 \leq y \leq \frac{n-x-1}{2}$ 时, $f(x, y)$ 关于 y 单调递增。

情形2.2 $4 \leq \sum_{i=1}^{z-2} s_i \leq 7$ 。

若 $4 \leq \sum_{i=1}^{z-2} s_i \leq 7$ 时, 经过直接计算, 结论成立。

情形3 $y \geq 1, z \geq 3$ 。

情形3.1 $\sum_{i=1}^{z-1} s_i \geq 8$ 。

若 $\sum_{i=1}^{z-1} s_i \geq 8$ 时, $n \geq 13$ 。由引理3、引理4及引理6可得

$$\epsilon_{ABC}(T) > 2y \sqrt{\frac{2}{3}} + \sum_{i=1}^z \epsilon_{ABC}(T_i) \geq 2y \sqrt{\frac{2}{3}} + 2 \sum_{i=1}^z \sqrt{s_i - 2} \geq$$

$$2y \sqrt{\frac{2}{3}} + 2\sqrt{n - s_z - 2y + 2 - 4} + 2\sqrt{s_z - 2} \geq$$

$$2y \sqrt{\frac{2}{3}} + 2\sqrt{n-3-2y-2} + 2\sqrt{3-2} > \quad (3)$$

$$2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n)。 \quad (4)$$

不等式(3)成立是因为:若 $x \leq \frac{n-2y}{2}$ 时, $f(x) = 2y\sqrt{\frac{2}{3}} + 2\sqrt{n-x-2y-2} + 2\sqrt{x-2}$ 关于 x 单调递增。不等式(4)成立是因为:设 $f(x,y) = 2y\sqrt{\frac{2}{3}} + 2\sqrt{x-2y-5} + 2 - 2\sqrt{x-6} - 2\sqrt{2}$,若 y 不变时, $f(x,y)$ 关于 x 单调递增。若 x 不变时, $f(x,y)$ 关于 y 单调递增,并且 $f(13,1) \approx 0.4121 > 0$ 。

情形3.2 $\sum_{i=1}^{z-1} s_i \leq 7$ 。

若 $\sum_{i=1}^{z-1} s_i \leq 7$ 时, $z = 3, x \leq 1$ 。即 $s_1 + s_2 = 6$ 或 7 。先考虑 $s_1 + s_2 = 7$ 的情形。

(i)若 $x = 1$ 时, $n = 2y + 11$ 。由引理3可得

$$\begin{aligned} \epsilon_{ABC}(T) &> 2y\sqrt{\frac{2}{3}} + \epsilon_{ABC}(T_1) + \epsilon_{ABC}(T_2) + \epsilon_{ABC}(T_3) \geq 2y\sqrt{\frac{2}{3}} + 2\sqrt{2} + 4 = \\ &(n-11)\sqrt{\frac{2}{3}} + 2\sqrt{2} + 4 > 2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n). \end{aligned} \quad (5)$$

不等式(5)成立是因为:设 $f(x) = (x-11)\sqrt{\frac{2}{3}} + 2\sqrt{2} + 4 - 2\sqrt{x-6} - 2\sqrt{2}$, $f(x)$ 在 $x \geq 13$ 时单调递增并且 $f(13) \approx 0.43851 > 0$ 。

(ii)若 $x = 0$ 时, $n = 2y + 10$ 。类似(i)的分析,结论成立。

通过类似分析,若 $s_1 + s_2 = 6$ 时,结论成立。

情形4 $y \geq 1, z = 2$ 。

若 $y \geq 1, z = 2$ 时, $x = 0, n = 2y + s_1 + s_2$ 。由引理3及引理4可得

$$\begin{aligned} \epsilon_{ABC}(T) &> 2y\sqrt{\frac{2}{3}} + \epsilon_{ABC}(T_1) + \epsilon_{ABC}(T_2) \geq 2y\sqrt{\frac{2}{3}} + 2\sqrt{s_1-2} + 2\sqrt{s_2-2} \geq \\ &2y\sqrt{\frac{2}{3}} + 2\sqrt{n-2y-s_2-2} + 2\sqrt{s_2-2} \geq 2y\sqrt{\frac{2}{3}} + 2\sqrt{n-2y-3-2} + 2\sqrt{3-2} > \\ &2\sqrt{n-6} + 2\sqrt{2} > \epsilon_{ABC}(B_n). \end{aligned}$$

证毕。

结合引理12—引理16,得到以下主要结论。

定理1 在 $\mathcal{T}(n) \setminus \{S_n, S_n^*\}$ 中, A_n 是唯一具有最小ABC能量的树。在 $\mathcal{T}(n) \setminus \{S_n, S_n^*, A_n\}$ 中, B_n 是唯一具有最小ABC能量的树。

参考文献:

- [1] GUTMAN I. Acyclic Systems with Extremal Hückel Π -electron Energy[J]. *Theor Chimica Acta*, 1977, **45**(2): 79-87. DOI: 10.1007/BF00552542.
- [2] GAO Y B, SHAO Y L. The Minimum ABC Energy of Trees[J]. *Linear Algebra Appl*, 2019, **577**: 186-203. DOI: 10.1016/j.laa.2019.04.032.
- [3] SONG X D, LI J P, ZHANG J B, et al. Trees with the Second-minimal ABC Energy[J]. *AIMS Math*, 2022, **7**(10): 18323-18333. DOI: 10.3934/math.20221009.
- [4] SHAO Y L, GAO Y B, GAO W, et al. Degree-based Energies of Trees[J]. *Linear Algebra Appl*, 2021, **621**: 18-28. DOI: 10.1016/j.laa.2021.03.009.
- [5] GAO Y B, GAO W, SHAO Y L. The Minimal Randić Energy of Trees with Given Diameter[J]. *Appl Math Comput*, 2021, **411**: 126489. DOI: 10.1016/j.amc.2021.126489.
- [6] ZHAO X, SHAO Y L, GAO Y B. On Randić Energy of Coral Trees[J]. *Match*, 2022, **88**(1): 157-170. DOI: 10.46793/match.88-1.157z.
- [7] SHAO Y L, GAO Y B. The Maximal Geometric-arithmetic Energy of Trees with at most Two Branched Vertices[J]. *Appl Math Comput*, 2019, **362**: 124528. DOI: 10.1016/j.amc.2019.06.042.
- [8] DADAH ANDRIANTIANA E O, WAGNER S, WANG

- H. Extremal Problems for Trees with Given Segment Sequence[J]. *Discrete Appl Math*, 2017, **220**: 20–34. DOI: 10.1016/j.dam.2016.12.009.
- [9] ZHOU B, LI F. On Minimal Energies of Trees of a Prescribed Diameter[J]. *J Math Chem*, 2006, **39**(3): 465–473. DOI: 10.1007/s10910-005-9047-8.
- [10] HOU Y P. Unicyclic Graphs with Minimal Energy[J]. *J Math Chem*, 2001, **29**: 163–168. DOI: 10.1023/A:1010935321906.
- [11] LI X L, ZHANG J B, ZHOU B. On Unicyclic Conjugated Molecules with Minimal Energies[J]. *J Math Chem*, 2007, **42**(4): 729–740. DOI: 10.1007/s10910-006-9116-7.
- [12] LI F, ZHOU B. Minimal Energy of Unicyclic Graphs of a Given Diameter[J]. *J Math Chem*, 2008, **43**(2): 476–484. DOI: 10.1007/s10910-006-9209-3.
- [13] HOU Y P. Bicyclic Graphs with Minimum Energy[J]. *Linear Multilinear A*, 2001, **49**(4): 347–354. DOI: 10.1080/03081080108818705.
- [14] ZHANG J B, ZHOU B. On Bicyclic Graphs with Minimal Energies[J]. *J Math Chem*, 2005, **37**(4): 423–431. DOI: 10.1007/s10910-004-1108-x.
- [15] LI X L, ZHANG J B. On Bicyclic Graphs with Maximal Energy[J]. *Linear Algebra Appl*, 2007, **427**(1): 87–98. DOI: 10.1016/j.laa.2007.06.022.
- [16] ESTRADA E, TORRES L, RODRIGUEZ L, GUTMAN I. An Atom–bond Connectivity Index: Modelling the Enthalpy of Formation of Alkanes[J]. *Indian J Chem*, 1998, **37A**: 849–855.
- [17] ESTRADA E. The ABC Matrix[J]. *J Math Chem*, 2017, **55**(4): 1021–1033. DOI: 10.1007/s10910-016-0725-5.
- [18] CHEN X D. On ABC Eigenvalues and ABC Energy[J]. *Linear Algebra Appl*, 2018, **544**: 141–157. DOI: 10.1016/j.laa.2018.01.011.
- [19] GHORBANI M, LI X L, HAKIMI-NEZHAAD M, *et al.* Bounds on the ABC Spectral Radius and ABC Energy of Graphs[J]. *Linear Algebra Appl*, 2020, **598**: 145–164. DOI: 10.1016/j.laa.2020.03.043.