

固定直径单圈图的最小超级萨格勒布指数

郭晓婷, 邵燕灵*

(中北大学 数学学院, 山西 太原 030051)

摘要:本文解决了当一个单圈图的直径与顶点个数满足一定条件的情况下,其超级萨格勒布指数(HM指数)的最小值及对应的极图刻画问题。首先在单圈图直径不变的前提下采用移除一条悬挂路的变换,使得单圈图的悬挂点个数减少,并讨论了变换前后两个图的超级萨格勒布指数的关系。其次,根据单圈图中悬挂点的个数,分类研究了其超级萨格勒布指数的最小值。最后经过比较,获得该类图的最小超级萨格勒布指数及对应的极图。

关键词:单圈图;超级萨格勒布指数;悬挂点;极图

中图分类号:O157.5 **文献标志码:**A **文章编号:**0253-2395(2025)02-0367-06

The Minimum Hyper-Zagreb Index of Unicyclic Graphs with Fixed Diameter

GUO Xiaoting, SHAO Yanling*

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

Abstract: This paper solves the problem of the minimum hyper-Zagreb index (HM index) and its corresponding extremal graph characterization when the diameter and the number of vertices of a unicyclic graph satisfy certain conditions. Firstly, the number of pendent vertices is reduced by the transformation of removing a pendent path on the premise that the diameter of the unicyclic graph is unchanged, and the relationship between the hyper-Zagreb indices of the two graphs before and after the transformation is discussed. Secondly, the minimum value of the hyper-Zagreb index is studied classically according to the number of pendent vertices in the unicyclic graph. Finally, the minimum value of the hyper-Zagreb index and the corresponding extremal graph are obtained by comparison.

Key words: unicyclic graph; hyper-Zagreb index; pendent vertex; extremal graph

0 引言

设 G 是一个顶点集为 $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, 边集为 $E(G)$ 的简单连通图, 其中顶点数 $|V(G)| = n$, 边数 $|E(G)| = m$, 顶点 $v_i \in V(G)$ 的度 $d_G(v_i)$ 是 G 中与 v_i 关联的边的数目(简记为 $d(v_i)$), 邻集 $N_G(v_i)$ 表示与顶点 v_i 相邻的所有顶点的集合, 其中 $i = 1, 2, \dots, n$ 。若 $d_G(u) = 1$, 则称顶点 u 为图 G 的悬挂点。若 $P = v_0 v_1 v_2 \dots v_t$ 是图 G 的一条 t 长路, 若 $d_G(v_0) = 1, d_G(v_1) = \dots = d_G(v_{t-1}) = 2, d_G(v_t) \geq 3$, 则 P 称为图 G 的一条悬挂路(记作 P_t)。图 G 中两个顶点 u, v 之间的距离 $d_G(u, v)$ 是指从顶点 u 到顶点 v 最短路的长度。若 $D(G) = \max\{d_G(u, v) | u, v \in V(G)\}$, 则称 $D(G)$ 为图 G 的直径(简记为 D), 若顶点 $u, v \in V(G)$ 且有 $d_G(u, v) = D(G)$, 则称 u, v 之间的最短路 P 为 G 的一条直径路。单圈图是有 n 个顶点和 n 条边的连通图, 用 U_n 表示所有 n 阶单圈图的集合, 记 C_n 是 n 阶圈。

收稿日期:2024-01-06;接受日期:2024-06-03

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(202303021211154)

作者简介:郭晓婷(1995-),女,山西朔州人,硕士研究生,研究方向为组合数学。E-mail:2010024509@qq.com

*通信作者:邵燕灵(SHAO Yanling),E-mail:yishao@nuc.edu.cn

引文格式:郭晓婷,邵燕灵.固定直径单圈图的最小超级萨格勒布指数[J].山西大学学报(自然科学版),2025,48(2):367-372. DOI:10.13451/j.sxu.ns.2024085.

分子拓扑指数是定义在化合物分子图上的数值不变量,它与相应化合物的物理、化学和生物性质密切相关。1972年,Gutman和Trinajstić^[1]提出了著名的萨格勒布指数 $M_1(G) = \sum_{uv \in E(G)} d_G(u) + d_G(v)$ 和 $M_2(G) = \sum_{uv \in E(G)} d_G(u)d_G(v)$,萨格勒布指数在定量结构性质关系(Quantitative Structure-Property Relationship, QSPR)和定量结构活性关系(Quantitative Structure-Activity Relationship, QSAR)研究中的应用已经赢得了药理学、物理化学等学科的认可^[2-3]。随后,Zhou等^[4]提出了 Harmonic 指数 $H(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{2}{d_G(u) + d_G(v)}$,Furtula等^[5]提出了增强型萨格勒布指数 $AZI(G) = \sum_{uv \in E(G)} \left(\frac{d_G(u)d_G(v)}{d_G(u) + d_G(v) - 2} \right)^3$ 。在2013年,Shirdel等^[6]提出了超级萨格勒布指数(hyper-Zagreb index, 记作HM指数),其定义为 $I_{HM}(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d_G(u) + d_G(v))^2$ 。

现在,分子拓扑指数已达到上百种之多, HM指数作为分子拓扑指数之一,它具有预测化合物燃烧焓、生成焓、升华焓、汽化焓等物理化学性质的潜力,这吸引了学者们的广泛关注。Falahati-Nezhad等^[7]给出HM指数的界,Gutman^[8]研究了HM指数与 \overline{HM} 指数之间的关系,Gao等^[9]研究了树、单圈图、双圈图的HM指数的上下界,Liu等^[10]给出了完美匹配仙人掌图的HM指数的上界, Menaka等^[11]研究了一些乘积图的HM指数,Rizwan等^[12]给出了特殊树中HM指数的极值,2023年Hayat等^[13]研究了给定线段树中HM指数的上下界以及HM指数在QSPR回归建模中的应用,并且提出了两个未解决的问题,即在固定直径和匹配数的连通图中寻找HM指数的上下界、在给定顶点连通度和边连通度的图中寻找HM指数的上下界。给定直径单圈图的分子拓扑指数的极值是近年来研究的一个热点^[14-17],然而固定直径单圈图的最小HM指数尚不清楚,于是本文对其进行了研究,获得了直径 $D \geq 4$ 且 $D + 2 \leq n \leq 2D - 1$ 的 n 阶单圈图中最小的HM指数。

1 预备知识

引理1^[9] 设 G 是有 $n \geq 3$ 个顶点的单圈图,则 $I_{HM}(G) \geq I_{HM}(C_n) = 16n$ 。

引理2 设 G 是一个 n 阶单圈图, P 是图 G 的一条直径路, $v \in V(G)$ 是图 G 的一个悬挂点,且 $v \notin V(P)$, P' 是一个以 v 为端点的悬挂路。设 G' 是由图 G 移除悬挂路 P' 得到的图,悬挂路 P' 的长为 s ,则 $D(G') = D(G)$,且 $I_{HM}(G) > I_{HM}(G') + 16s$ 。

证明 设 u 是图 G 中距离顶点 v 最近且 $d_G(u) \geq 3$ 的顶点,则 P' 是连接 u 到 v 的一条路。记顶点 x 是 u 在悬挂路 P' 上的邻点。显然 $G' \subset G$, $D(G') = D(G)$ 。

若 $s = 1$ 时,则 $x = v$,且

$$I_{HM}(G) - I_{HM}(G') = (d_G(u) + 1)^2 + \sum_{y \in N_G(G) \setminus \{x\}} \left((d_G(u) + d_G(y))^2 - (d_G(u) - 1 + d_G(y))^2 \right) > (d_G(u) + 1)^2 \geq 16。$$

若 $s \geq 2$ 时,

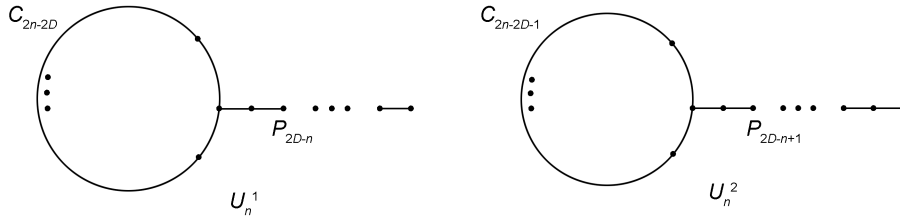
$$I_{HM}(G) - I_{HM}(G') = (d_G(u) + 2)^2 + 16(s - 2) + 9 + \sum_{y \in N_G(G) \setminus \{x\}} \left((d_G(u) + d_G(y))^2 - (d_G(u) - 1 + d_G(y))^2 \right) > (d_G(u) + 2)^2 + 16(s - 2) + 9 \geq 16s。$$

引理成立,证毕。

2 固定直径的 n 阶单圈图的最小HM指数

本节中,我们将给出直径 $D \geq 4$ 且 $D + 2 \leq n \leq 2D - 1$ 的 n 阶单圈图的最小HM指数。

定理 1 设 G 是直径为 $D \geq 4$ 的 n 阶单圈图,若 $D + 2 \leq n \leq 2D - 2$, 则 $I_{HM}(G) \geq 16(n - 4) + 84$, 等号成立当且仅当 G 同构于如图 1 所示的图 U_n^1 和 U_n^2 之一。



注: C_{2n-2D} 是一个 $(2n - 2D)$ 阶圈, P_{2D-n} 是一条 $(2D - n)$ 长悬挂路, U_n^1 是在圈 C_{2n-2D} 的一个顶点上连接一条 $(2D - n)$ 长的悬挂路 P_{2D-n} 得到。 $C_{2n-2D-1}$ 是一个 $(2n - 2D - 1)$ 阶圈, P_{2D-n+1} 是一条 $(2D - n + 1)$ 长悬挂路, U_n^2 是在圈 $C_{2n-2D-1}$ 的一个顶点上连接一条 $(2D - n + 1)$ 长的悬挂路 P_{2D-n+1} 得到。

图 1 n 阶单圈图 U_n^1 和 U_n^2

Fig. 1 Unicyclic graphs U_n^1 and U_n^2 of order n

证明 因为 $n \leq 2D - 2$, 故 G 至少包含一个悬挂点, 考虑以下三种情形。

情形 1 图 G 恰好有一个悬挂点。

此时, 图 G 必然是在圈 C_l 的一个顶点 w 上连接一条 t 长的悬挂路 P_t 得到, 其中 $l \geq 3, t \geq 1, n = l + t, d(w) = 3$, 如图 2 所示。

情形 1.1 若 $t = 1$ 时, 则 $D = \lfloor \frac{l}{2} \rfloor + 1, n = l + 1$ 。

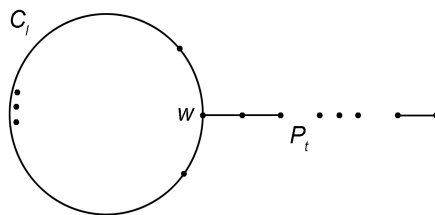
当 l 为偶数, 则 $D = \frac{l}{2} + 1, n = l + 1$, 从而 $n = 2D - 1$ 与 $D + 2 \leq n \leq 2D - 2$ 矛盾。

当 l 为奇数, 则 $D = \frac{l-1}{2} + 1, n = l + 1$, 从而 $n = 2D$ 与 $D + 2 \leq n \leq 2D - 2$ 矛盾。

情形 1.2 若 $t \geq 2$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(l + t - 4) + 3 \times 25 + 9 = 16(n - 4) + 84。$$

由于 $D = \lfloor \frac{l}{2} \rfloor + t, n = l + t$, 故当 l 为偶数, 则 $n - D = \frac{l}{2}$, 从而 $l = 2n - 2D, t = 2D - n$, 此时 $G \cong U_n^1$ 。当 l 为奇数, 则 $n - D = \frac{l+1}{2}$, 从而 $l = 2n - 2D - 1, t = 2D - n + 1$, 此时 $G \cong U_n^2$ 。



注: C_l 是一个 l 阶圈, w 是圈 C_l 上的一个顶点, P_t 是一条 t 长悬挂路。

图 2 恰好有一个悬挂点的 n 阶单圈图

Fig. 2 Unicyclic graph of order n with exactly one pendent vertex

情形 2 图 G 恰好有两个悬挂点。

则图 G 必然同构于如图 3 所示的三个图 G_1, G_2, G_3 之一。

情形 2.1 $G \cong G_1$, 其中 $t_1 \geq t_2 \geq 1, l \geq 3$ 且 $l + t_1 + t_2 = n$ 。

情形 2.1.1 顶点 u 与顶点 v 相邻。

(1) 当 $t_1 = t_2 = 1$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(n - 3) + 86 > 16(n - 4) + 84。$$

(2) 当 $t_1 \geq 2, t_2 = 1$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(l + t_1 - 4) + 3 \times 25 + 36 + 9 = 16(n - 5) + 120 > 16(n - 4) + 84。$$

(3) 当 $t_1 \geq 2, t_2 \geq 2$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(l + t_1 + t_2 - 7) + 4 \times 25 + 36 + 2 \times 9 = 16(n - 7) + 154 > 16(n - 4) + 84。$$

情形2.1.2 顶点 u 与顶点 v 不相邻。

(1) 当 $t_1 = t_2 = 1$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(n - 4) + 100 > 16(n - 4) + 84。$$

(2) 当 $t_1 \geq 2, t_2 = 1$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(l + t_1 - 5) + 5 \times 25 + 9 = 16(n - 6) + 134 > 16(n - 4) + 84。$$

(3) 当 $t_1 \geq 2, t_2 \geq 2$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(l + t_1 + t_2 - 8) + 6 \times 25 + 2 \times 9 = 16(n - 8) + 168 > 16(n - 4) + 84。$$

情形2.2 $G \cong G_2$, 其中 $t_1 \geq t_2 \geq 1, l \geq 3$ 且 $l + t_1 + t_2 = n$ 。

(1) 当 $t_1 = t_2 = 1$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(n - 4) + 122 > 16(n - 4) + 84。$$

(2) 当 $t_1 \geq 2, t_2 = 1$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(l + t_1 - 4) + 25 + 3 \times 36 + 9 = 16(n - 5) + 142 > 16(n - 4) + 84。$$

(3) 当 $t_1 \geq 2, t_2 \geq 2$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(l + t_1 + t_2 - 6) + 4 \times 36 + 2 \times 9 = 16(n - 6) + 162 > 16(n - 4) + 84。$$

情形2.3 $G \cong G_3$, 其中 $q \geq 1, t_1 \geq t_2 \geq 1, l \geq 3$ 且 $l + q + t_1 + t_2 = n$ 。

(1) 当 $q = t_1 = t_2 = 1$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(n - 3) + 86 > 16(n - 4) + 84。$$

(2) 当 $q \geq 2, t_1 = t_2 = 1$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(l + q - 2) + 4 \times 25 = 16(n - 4) + 100 > 16(n - 4) + 84。$$

(3) 当 $q \geq 2, t_1 \geq 2, t_2 = 1$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(l + q + t_1 - 5) + 5 \times 25 + 9 = 16(n - 6) + 134 > 16(n - 4) + 84。$$

(4) 当 $q \geq 2, t_1 \geq 2, t_2 \geq 2$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(l + q + t_1 + t_2 - 8) + 6 \times 25 + 2 \times 9 = 16(n - 8) + 168 > 16(n - 4) + 84。$$

(5) 当 $q = 1, t_1 \geq 2, t_2 \geq 2$ 时,

$$I_{HM}(G) = 16(l + t_1 + t_2 - 6) + 36 + 4 \times 25 + 2 \times 9 = 16(n - 7) + 154 > 16(n - 4) + 84。$$

情形3 图 G 至少有三个悬挂点。

设图 G 有 $r \geq 3$ 个悬挂点。假设 P 是图 G 的一条直径路, 则直径路 P 至多包含图 G 的两个悬挂点, 从而图 G 至少有 $(r - 2)$ 个悬挂点不在直径路 P 上, 由引理2可知, 则存在一个 $n_1 (n_1 < n)$ 阶单圈图 $G' \subset G$, 它恰好包含两个悬挂点, 并且有 $D(G') = D(G)$, 使得 $I_{HM}(G) > I_{HM}(G') + 16(n - n_1)$ 。再根据情形2可知, $I_{HM}(G') \geq 16(n_1 - 4) + 84$, 故

$$I_{HM}(G) > 16(n_1 - 4) + 84 + 16(n - n_1) = 16(n - 4) + 84。$$

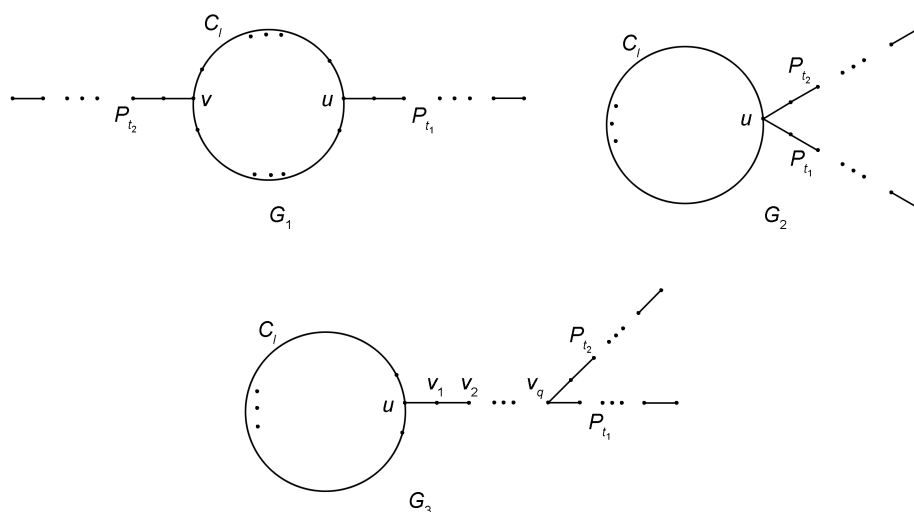
综上所述, 定理1成立, 证毕。

定理2 设 G 是一个直径为 $D \geq 4$ 的 n 阶单圈图, 若 $n = 2D - 1$ 时, 则 $I_{HM}(G) \geq 16(n - 2) + 50$, 等号成立当且仅 G 同构于如图4所示的图 U_n^3 。

证明 若 $G \cong C_n$, 则 $n = 2D$ 或 $n = 2D + 1$, 故 G 至少包含一个悬挂点。考虑下面两种情形。

情形1 图 G 恰好有一个悬挂点。

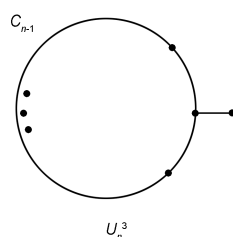
此时, 图 G 必然是在圈 C_l 的一个顶点 w 上连接一条 t 长的悬挂路 P_t 得到, 其中 $l \geq 3, t \geq 1, l + t = n, d(w) = 3$, 如图2所示。



注: C_l 是一个 l 阶圈, u, v 是圈 C_l 上的顶点, P_{t_1} 是一条 t_1 长悬挂路, P_{t_2} 是一条 t_2 长悬挂路, $uv_1v_2 \cdots v_q$ 是一条 q 长路。

图3 恰好有两个悬挂点的 n 阶单圈图

Fig. 3 Unicyclic graphs of order n with exactly two pendent vertices



注: C_{n-1} 是一个 $(n-1)$ 阶圈, U_n^3 是在圈 C_{n-1} 的一个顶点上连接一条 1 长的路得到。

图4 n 阶单圈图 U_n^3

Fig. 4 Unicyclic graph U_n^3 of order n

情形 1.1 若 $t = 1$ 时, 则 $G \cong U_n^3, l = n - 1, D = \left\lfloor \frac{n-1}{2} \right\rfloor + 1$, 故 $n = 2D - 1$ 或 $n = 2D$ 。此时

$$I_{HM}(G) = 16(l - 1) + 2 \times 25 = 16(n - 2) + 50。$$

情形 1.2 若 $t \geq 2$ 时, 且

$$I_{HM}(G) = 16(n - 4) + 3 \times 25 + 9 = 16(n - 4) + 84 > 16(n - 2) + 50。$$

情形 2 图 G 至少有两个悬挂点。

根据定理 1 证明中的情形 2 和 3 可知,

$$I_{HM}(G) > 16(n - 4) + 84 > 16(n - 2) + 50。$$

综上所述, 定理 2 成立, 证毕。

3 结论

基于文献 [13] 提出来的两个未解决的问题, 本文只刻画出了直径 $D \geq 4$ 的 n 阶单圈图的最小 HM 指数, 当 $D + 2 \leq n \leq 2D - 2$ 时, 最小 HM 指数为 $16(n - 4) + 84$, 当 $n = 2D - 1$ 时, 最小 HM 指数为 $16(n - 2) + 50$ 。由于本文只研究了一部分, 所以今后会继续考虑固定匹配数连通图的 HM 指数的上下界、固定匹配数和直径特殊图的 HM 指数的上下界等问题。

参考文献:

[1] GUTMAN I, TRINAJSTIĆ N. Graph Theory and Molecular Orbitals. Total π -electron Energy of Alternant Hy-

drocarbons[J]. Chem Phys Lett, 1972, 17(4): 535-538. DOI: 10.1016/0009-2614(72)85099-1.

[2] HOSAMANI S, PERIGIDAD D, JAMAGOUD S, et al.

- QSPR Analysis of Certain Degree Based Topological Indices[J]. *J Stat Appl Pro*, 2017, **6**(2): 361–371. DOI: 10.18576/jsap/060211.
- [3] BHATIA K S, GUPTA A K, SAXENA A K. Physico-chemical Significance of Topological Indices: Importance in Drug Discovery Research[J]. *Curr Top Med Chem*, 2023, **23**(29): 2735–2742. DOI: 10.2174/1568026623666230731103309.
- [4] ZHOU B, TRINAJSTIĆ N. On a Novel Connectivity Index[J]. *J Math Chem*, 2009, **46**(4): 1252–1270. DOI: 10.1007/s10910-008-9515-z.
- [5] FURTULA B, GRAOVAC A, VUKIČEVIĆ D. Augmented Zagreb Index[J]. *J Math Chem*, 2010, **48**(2): 370–380. DOI: 10.1007/s10910-010-9677-3.
- [6] SHIRDEL G H, REZAPOUR H, SAYADI A M. The Hyper-Zagreb Index of Graph Operations[J]. *Iran J Math Chem*, 2013, **4**(2): 213–220. DOI: 10.22052/IJMC.2013.5294.
- [7] FALAHATI-NEZHAD F, AZARI M. Bounds on the Hyper-zagreb Index[J]. *J Appl Math Inform*, 2016, **34**(3_4): 319–330. DOI: 10.14317/jami.2016.319.
- [8] GUTMAN I. On Hyper-Zagreb Index and Coindex[J]. *Bull Sci Math*, 2017, **42**: 1–8. <https://www.jstor.org/stable/26359059>.
- [9] GAO W, JAMIL M K, JAVED A, *et al.* Sharp Bounds of the Hyper-zagreb Index on Acyclic, Unicyclic, and Bicyclic Graphs[J]. *Discrete Dyn Nat Soc*, 2017, **2017**: 6079450. DOI: 10.1155/2017/6079450.
- [10] LIU H C, TANG Z K. The Hyper-Zagreb Index of Cacti with Perfect Matchings[J]. *AKCE Int J Graphs Comb*, 2020, **17**(1): 422–428. DOI: 10.1016/j.akcej.2019.03.022.
- [11] MENAKA S, MANIKANDAN R S. The Hyper Zagreb Index of some Product Graphs[J]. *J Math Comput Sci*, 2021, **11**(2): 1753–1766. DOI: 10.28919/jmcs/5392.
- [12] RIZWAN M, SHAHAB S, AHMAD BHATTI A A, *et al.* On the Hyper Zagreb Index of Trees with a Specified Degree of Vertices[J]. *Symmetry*, 2023, **15**(7): 1295. DOI: 10.3390/sym15071295.
- [13] HAYAT S, KHAN M A, KHAN A, *et al.* Extremal Hyper-Zagreb Index of Trees of Given Segments with Applications to Regression Modeling in QSPR Studies [J]. *Alex Eng J*, 2023, **80**: 259–268. DOI: 10.1016/j.aej.2023.08.051.
- [14] 王敏, 刘蒙蒙. 给定直径的单圈图的边修正 Szeged 指标的下界[J]. *数学进展*, 2023, **52**(1): 25–45. DOI: 10.11845/sxjz.20210436.
- WANG M, LIU M M. The Lower Bound of Edge Revised Szeged Index of Unicyclic Graphs with Given Diameter[J]. *Adv Math CHINA*, 2023, **52**(1): 25–45. DOI: 10.11845/sxjz.20210436.
- [15] TAN S W. The Minimum Wiener Index of Unicyclic Graphs with a Fixed Diameter[J]. *J Appl Math Comput*, 2018, **56**(1): 93–114. DOI: 10.1007/s12190-016-1063-2.
- [16] ZHONG L P. The Minimum Harmonic Index for Unicyclic Graphs with Given Diameter[J]. *Discuss Math Graph Theory*, 2018, **38**(2): 429–442. DOI: 10.7151/dmgt.2007.
- [17] ALFURAIDAN M R, DAS K C, VETRÍK T, *et al.* General Randić Index of Unicyclic Graphs with Given Diameter[J]. *Discrete Appl Math*, 2022, **306**: 7–16. DOI: 10.1016/j.dam.2021.09.016.