特定树和单圈图下的增强型萨格勒布指数

甘　露，杜　颖，曹晓丽

(湖北师范大学数学与统计学院，湖北　黄石　435002)

摘要:图的增强型萨格勒布指数(augmented Zagreb index,AZI)是化学图论中一种新的拓扑指数,在化学中有很多应用.该指数由Furtula等提出,已被证实在辛烷和正庚烷的热形成研究中是一个有价值的预测性指数.本文将计算一些特定树和单圈图的AZI数值.

关键词:增强型萨格勒布(AZI);树;单圈图;烷烃;环烷烃

中图分类号:O157.6　　**DOI**:10.19789/j.1004-9398.2021.01.001

0　引　言

拓扑指数是分子结构的数学描述符,实现分子结构的数值化,反映分子的拓扑性质.近年来,研究图,尤其是分子图的拓扑指数的性质及应用,受到一些数学化学工作者的关注.1998年,Estrada等[1]提出了原子键连通性指数(atom-bond connectivity index,ABC指数).该指数的定义为

$$\mathrm{ABC}(G)=\sum_{uv\in E(G)}\sqrt{\frac{d_u+d_v-2}{d_ud_v}},$$

其中$E(G)$是边的集合,d_u和d_v分别是点u和点v的度.在2010年,Furtula等[4]提出了图的增强型萨格勒布指数(augmented Zagreb index,AZI),该指数的定义为

$$\mathrm{AZI}(G)=\sum_{uv\in E(G)}\left(\frac{d_ud_v}{d_u+d_v-2}\right)^3.$$

该指数的预测能力已被证实在研究烷烃的热形成中,比ABC指数的预测能力更强,由于AZI提出时间不长,目前的研究成果不多,其部分数学性质在文献[2-7]中已被研究.本文将计算一些特定树和单圈图的AZI.

本文通过给出某些特殊树的AZI,计算某些特殊单圈图的AZI均为连通图,所有点的度不超过4的连通图称为化学图,其分子结构图可能类似于某些图,这是化学中应用图论的一个主要原因.

1　特殊树及烷烃的AZI

分支B_i是使i条长度为2的悬挂路与P_2的一个端点v相邻形成的树,显然顶点v在分支B_i中的度为$i+1$(见图1).

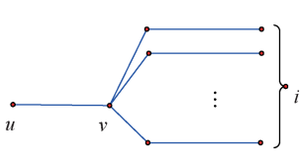


图1　分支B_i

树$T_n^{B_k}$是将$P_n=v_1v_2\cdots v_n$的每个2度点与2个B_k的点u等同以及P_n的每个1度点和3个B_k的点u等同得到的(见图2).

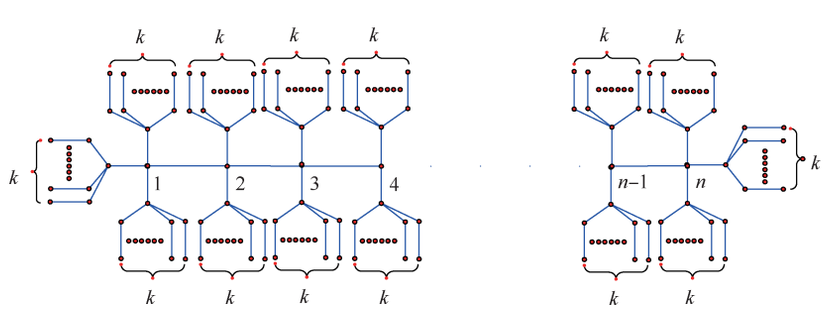


图2　树$T_n^{B_k}$

收稿日期:2019-09-06

在本节中,给出了特殊树 $T_n^{B_k}$ 的AZI的公式.

定理 1.1　设 n 和 k 是正整数(且 $n \geqslant 1, k \geqslant 2$),树 $T_n^{B_k}$ 的AZI为

$$\mathrm{AZI}(T_n^{B_k}) = 32(n+1)k + 128(n+1)\left(\frac{k+1}{k+3}\right)^3 + \left(\frac{8}{3}\right)^3 (n-1).$$

证明　在树 $T_n^{B_k}$ 中,显然有 $2n+2$ 个 B_k 分支.在每一个 B_k 中包含3类边.类型1:该边有2个端点,一端度为1,一端度为2,共有 k 条此边;类型2:该边有2个端点,一端度为2,一端度为 $k+1$,共有 k 条此边;类型3:该边的2个端点,一端度为 $k+1$,一端度为4,共有1条此边.路径 P_n 中有 $n-1$ 条边且每条边的端点的度都为4.

由图的AZI的定义,得到

$$\mathrm{AZI}(G) = (2n+2)k\left(\frac{1\times 2}{1+2-2}\right)^3 + (2n+2)k\left[\frac{(k+1)\times 2}{k+1+2-2}\right]^3 + (2n+2)\left[\frac{(k+1)\times 4}{k+1+4-2}\right]^3 + (n-1)\left(\frac{4\times 4}{4+4-2}\right)^3 = 32(n+1)k + 128(n+1)\left(\frac{k+1}{k+3}\right)^3 + \left(\frac{8}{3}\right)^3 (n-1).$$

烷烃是碳氢化合物,分子中的碳原子都以单键相连,其余价键都与氢结合而成,其化学式为 $G = \mathrm{C}_n\mathrm{H}_{2n+2}$,其骨架结构如图3所示.

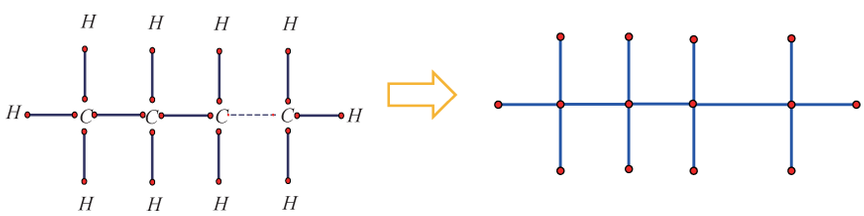


图3　$\mathrm{C}_n\mathrm{H}_{2n+2}$ 骨架结构

定理 1.2　设 $n \geqslant 1$ 且 $n \in \mathbf{N}^+$,则图 $G = \mathrm{C}_n\mathrm{H}_{2n+2}$(烷烃)的AZI指数为

$$\mathrm{AZI}(\mathrm{C}_n\mathrm{H}_{2n+2}) = \left(\frac{4}{3}\right)^3 (2n+2) + \left(\frac{8}{3}\right)^3 (n-1).$$

证明　用数学归纳法证明,当 $n=1$ 时,$G = \mathrm{C}_1\mathrm{H}_4$,骨架结构如图4所示.

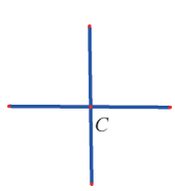


图4　$\mathrm{C}_1\mathrm{H}_4$ 骨架结构

显然,$\mathrm{AZI}(\mathrm{CH}_4) = 4\times\left(\frac{4\times 1}{4+1-2}\right)^3 = \frac{256}{27}$,当 $n=1$ 时 $\mathrm{AZI} = \left(\frac{4}{3}\right)^3(2n+2) + \left(\frac{8}{3}\right)^3(n-1)$ 成立.

假设当 $n = k(k>1)$ 时,$\mathrm{AZI}(\mathrm{C}_k\mathrm{H}_{2k+2}) = \left(\frac{4}{3}\right)^3(2k+2) + \left(\frac{8}{3}\right)^3(k-1)$,其骨架结构如图5所示.

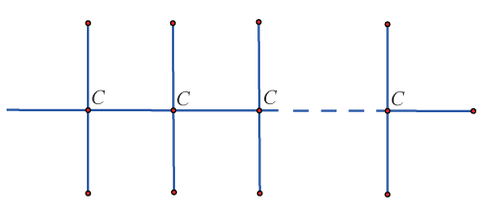


图5　$\mathrm{C}_k\mathrm{H}_{2k+2}$ 骨架结构

当 $n = k+1$ 时,其图为 G',骨架结构如图6所示.

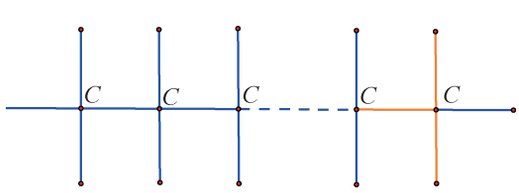


图6　G' 骨架结构

可知,图6在图5的基础上增加了3条边,则图6的AZI为

$$\mathrm{AZI}(G') = \mathrm{AZI}(G) + 2\times\left(\frac{1\times 4}{1+4-2}\right)^3 + \left(\frac{4\times 4}{4+4-2}\right)^3 = \left(\frac{4}{3}\right)^3(2k+2) + \left(\frac{8}{3}\right)^3(k-1) + 2\times\left(\frac{4}{3}\right)^3 + \left(\frac{8}{3}\right)^3 = \left(\frac{4}{3}\right)^3(2k+4) + \left(\frac{8}{3}\right)^3 k.$$

所以,当 $n = k+1$ 时,也满足 $\mathrm{AZI}(G) = \left(\frac{4}{3}\right)^3(2n+2) + \left(\frac{8}{3}\right)^3(n-1)$.

综上,当 $n \geqslant 1$ 时,图 $G = C_nH_{2n+2}$(烷烃)的 AZI 为

$$AZI(G) = \left(\frac{4}{3}\right)^3 (2n+2) + \left(\frac{8}{3}\right)^3 (n-1).$$

2　特殊的单圈图及环烷烃的 AZI

U_n^p 是 n 阶圈上每一个顶点都与 p 个悬挂点相邻得到的单圈图(见图 7).

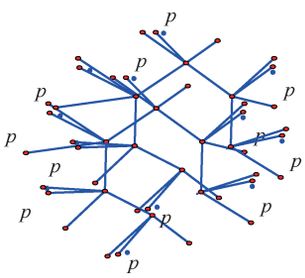


图 7　U_n^p 单圈

定理 2.1　设 $n \geqslant 3, p \geqslant 1$ 且 $n, p \in \mathbf{N}^+$,则 U_n^p 单圈图的 AZI 是

$$AZI(U_n^p) = np\frac{(p+2)^3}{(p+1)^3} + n\frac{(p+2)^6}{(2p+2)^3}.$$

证明　用数学归纳法证明,当 $n = 3$ 时,则图 $G \cong U_3^p$,于是有

$$AZI(G) = 3p\frac{[1\times(p+2)]^3}{[1+(p+2)-2]^3} + 3\times \frac{[(p+2)\times(p+2)]^3}{[(p+2)+(p+2)-2]^3} = 3p\frac{(p+2)^3}{(p+1)^3} + 3\times\frac{(p+2)^6}{(2p+2)^3},$$

从而当 $n = 3$ 时公式是成立的.假设当 $n = k(k \geqslant 4)$ 时,U_k^p 的 AZI 满足公式,现证 $n = k+1$ 时,U_{k+1}^p 的 AZI 满足公式.U_k^p 单圈图如图 8 所示,令 e 表示连接点 v_1 和点 v_k 的边.

令图 9 中的顶点 u_1 分别与 u_2、u_3 和 p 个悬挂点

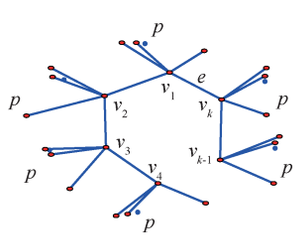


图 8　U_k^p 单圈

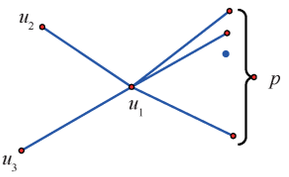


图 9　H 单圈

相连.将 H 连接到图 8 $U_k^p - \{e\}$ 上,使 u_2 与 v_1 重合,u_3 与 v_k 重合,记 $u_1 = v_{k+1}$,得 U_{k+1}^p 单圈图(见图 10).

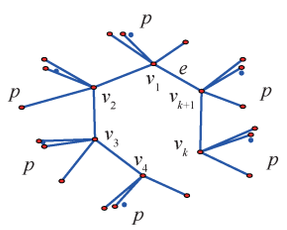


图 10　U_{k+1}^p 单圈

可知,图 10 是在图 8 的基础上增加了 p 个悬挂点和一条边,则图 10 的 AZI 为

$$AZI(U_{k+1}^p) = AZI(U_k^p) + p\frac{(p+2)^3}{(p+1)^3} + p\frac{(p+2)^6}{(2p+2)^3} = (k+1)p\frac{(p+2)^3}{(p+1)^3} + (k+1)\frac{(p+2)^6}{(2p+2)^3}.$$

显然,当 $n = k+1$ 时,也满足 $AZI(U_n^p) = np\frac{(p+2)^3}{(p+1)^3} + n\cdot\frac{(p+2)^6}{(2+2)^3}$.由此可知,图 7 的 AZI 是

$$AZI(U_n^p) = np\frac{(p+2)^3}{(p+1)^3} + n\cdot\frac{(p+2)^6}{(2p+2)^3}\ (n \geqslant 3).$$

定理 2.1 中,如果 $p = 2$,则可得到化学中环烷烃 (C_nH_{2n}) 的 AZI,其骨架结构如图 11 所示.

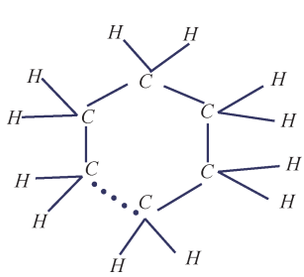


图 11　C_nH_{2n} 骨架结构

推论 2.1　环烷烃 C_nH_{2n} 的 AZI 为 $AZI(C_nH_{2n}) = \frac{640}{27}n$.

证明　定理 2.1 中令 $p = 2$ 可得.

参 考 文 献

[1] ESTRADA E, TORRES L, RODRIGUEZ L, et al. An atom-bond connectivityindex: modelling the enthalpy of formation of alkanes[J]. Indian J Chem, 1998, 37A: 849-855.

[2] XING R, ZHOU B. Extremal trees with fixed degree sequence for atom-bond connectivity index[J]. Filomat, 2012, 26(4): 683-688.

[3] GAN L, LIU B, YOU Z. The ABC index of tress with given degree sequence[J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2012, 68: 137-145.

[4] FURTULA B, GRAOVAC A, VUKICEVIC D. Augmented Zagreb index[J]. J Math Chem, 2010, 48: 370-380.

[5] HUANG Y, LIU B, GAN L. Augmented Zagreb index of connected graphs[J]. MATCH Commun Math Comput Chem, 2012, 67: 483-494.

[6] HUANG Y. Trees with given diameter minimizing the augmented Zagreb index and maximizing the ABC index[J]. Commun Math Res, 2017, 33(1): 8-18.

[7] MOHAMMED M A, ATAN K A, KHALAF A M, et al. On the atom bond connectivityindex of certain trees and unicyclic graphs[C]//2015 International Conference on Research and Education in Mathematics (ICREM7). Kuala Lumper IEEE, 2015: 205-210.

Certain trees and unicyclic graphs for AZI index

GAN Lu, DU Ying, CAO Xiaoli

(School of Mathematics and Statistics, Hubei Normal University, Huangshi Hubei 435002)

Abstract: The augmented Zagreb index (AZI) of a graph, which is a valuable predictive index in the study of the heat of formation in octanes and heptanes. In this paper, we obtain the general formular of the AZI for certain trees and unicyclic graphs, and their application in chemistry.

Keywords: augmented Zagreb index(AZI); tree; unicyclic graph; alkanes; cycloalkanes

(责任编辑:马田田)