

# 单圈图Sigma指数的极大值

汤晓儀

广东工业大学数学与统计学院, 广东 广州

收稿日期: 2025年2月17日; 录用日期: 2025年3月9日; 发布日期: 2025年3月19日

## 摘要

无向连通图  $G$  的Sigma指数定义为  $\sigma(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d_G(u) - d_G(v))^2$ , 其中,  $d_G(u)$  和  $d_G(v)$  分别表示顶点  $u$  和  $v$  在图  $G$  中的度。本文研究了  $n$  阶单圈图的Sigma指数, 用不同的方法讨论了其最大值。在本文中, 我们也得到了单圈图中Sigma指数第二大值, 并刻画了其极图。

## 关键词

Sigma指数, Albertson指数, 单圈图

# On the Maximum Sigma Index of Unicyclic Graphs

Xiaoyi Tang

Department of Mathematics and Statistics, Guangdong University of Technology, Guangzhou Guangdong

Received: Feb. 17<sup>th</sup>, 2025; accepted: Mar. 9<sup>th</sup>, 2025; published: Mar. 19<sup>th</sup>, 2025

## Abstract

The sigma of an undirected graph  $G$  is defined as  $\sigma(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d_G(u) - d_G(v))^2$ , where  $d_G(u)$  and  $d_G(v)$  denote the degrees of vertices  $u$  and  $v$ , respectively. In this paper, we investigate the Sigma index of  $n$ -vertex unicyclic graphs and discuss its maximum value using different methods. Furthermore, we determine the second largest Sigma index and extremal graph among unicyclic graphs.

## Keywords

Sigma Index, Albertson Index, Unicyclic Graphs



## 1. 引言

### 1.1. 研究背景

设  $G=(V,E)$  为  $n$  阶简单无向连通图, 其中  $V(G)=\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$  为图  $G$  的顶点集,  $E(G)=\{uv \mid u, v \in V(G)\}$  为图  $G$  的边集. 设顶点  $u \in V(G)$ , 与  $u$  相邻的所有顶点组成的集合称为顶点  $u$  的邻域, 记为  $N_G(u)$ . 在图  $G$  中与  $u$  关联的边数, 称为顶点  $u$  在图  $G$  中的度, 记为  $d_G(u)$ . 此外, 图  $G$  中顶点的最大度和最小度分别记为  $\Delta(G)$  和  $\delta(G)$ , 度为 1 的顶点称为悬挂点; 若  $\Delta(G)=\delta(G)$ , 则称图  $G$  为正则图, 否则称之为非正则图. 如何量化图的非正则程度是图论中的一个重要的研究课题, 为此多个学者定义并研究了量化图的非正则指数, 图的非正则性质在化学领域和神经网络[1]-[6]等科学领域都发挥着重要的作用. 其中, 最著名的非正则指数是由 Albertson [7]提出的 Albertson 指数:

$$\text{Alb}(G) = \sum_{uv \in V(G)} |d_G(u) - d_G(v)|$$

以及 Bell 提出的 Bell 指数[8]:

$$B(G) = \sum_{u \in V(G)} \left( d_G(u) - \frac{2m}{n} \right)^2.$$

图的 Sigma 指数由 Gutman 等人在文献[9]中第一次提出, 它是 Albertson 指数的一种拓展, 用符号  $\sigma(G)$  表示, 其定义如下:

$$\sigma(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d_G(u) - d_G(v))^2.$$

该指数作为衡量图的非正则性质的重要工具, 进一步丰富了图论在化学和网络科学等领域的应用.

2018 年, Gutman 等在文献[9]中定义了图的 Sigma 指数, 并研究了 Sigma 指数的逆问题, 他们证明了图的 Sigma 指数是一个偶数, 并构造了一类图来说明 Sigma 指数能够覆盖所有正偶数. 在该研究中, 他们还建立了 Sigma 指数与遗忘指数  $F(G)$  和第二 Zagreb 指数  $M_2(G)$  之间的联系:

$$\sigma(G) = F(G) - 2M_2(G).$$

其中,  $F(G) = \sum_{u \in V(G)} d_G^3(u) = \sum_{uv \in E(G)} (d_G^2(u) + d_G^2(v))$  和  $M_2(G) = \sum_{uv \in E(G)} d(u)d(v)$ , 这一发现为后续研究图的 Sigma 指数相关性质开辟了新途径.

Abdo 等在文献[10]中刻画了所有连通图中具有最大 Sigma 指数的图的特征, 同时给出了图的 Sigma 指数的下界. 对于某些特定的图类, Réti 在文献[11]中将 Sigma 指数与若干著名的度量非正则性的指数进行了对比. Ali 等在文献[12]中确定了  $k$ -圈图中, 具有最大 Sigma 指数的唯一的图. Vukicevic 等在文献[13]中研究了在化学树(即度小于等于 4 的树)中最大 Sigma 指数的极值问题.

### 1.2. 预备知识

设  $G$  为  $n$  阶单圈图, 其唯一的圈  $C_r$  的顶点依次记为  $v_1, v_2, \dots, v_r$ . 删除图  $G$  中圈  $C_r$  上的边会得到  $r$  个顶点不交的树  $T_1, T_2, \dots, T_r$ , 其中树  $T_i$  与圈  $C_r$  恰好有一个公共顶点  $v_i$ , 其中  $1 \leq i \leq r$ . 我们将单圈图记作

$C_r(T_1, T_2, \dots, T_r)$ , 且  $T_i$  的顶点个数  $|V(T_i)| = t_i + 1$ 。显然, 任何圈长为  $r$  的  $n$  阶单圈图  $G$  都可以表示为  $C_r(T_1, T_2, \dots, T_r)$ , 且满足  $\sum_{i=1}^r t_i = n - r$ 。若对于  $i = 1, 2, \dots, r$ , 每一棵树  $T_i$  是以顶点  $v_i$  为中心、顶点数为  $t_i + 1$  的星图  $S_{t_i+1}$ , 此时我们记  $S_{n,r}(t_1, t_2, \dots, t_r) = C_r(T_1, T_2, \dots, T_r)$ 。特别地, 当  $t_1 = n - r$  且  $t_2 = \dots = t_r = 0$  时, 则我们记  $S_{n,r} = S_{n,r}(t_1, t_2, \dots, t_r)$ 。

对于连通图  $G$ , 给定边子集  $E_1 \subseteq E(G)$ ,  $G - E_1$  表示从图  $G$  中删除边子集  $E_1$  中所有的边而得到的子图。令  $\bar{G}$  表示图  $G$  的补图, 对于补图的边子集  $E_2 \subseteq E(\bar{G})$ ,  $G + E_2$  表示在图  $G$  的基础上, 添加边子集  $E_2$  中所有的边后所得到的图。

在本文中, 我们采用了一种新的方法对具有最大 Sigma 指数的单圈图进行了刻画。此外, 本文还确定了单圈图中 Sigma 指数第二大的图。

## 2. 结论及证明

**引理 2.1** 设  $G$  为一个连通图, 顶点  $w$  为图  $G$  的最大度点, 即  $d_G(w) = \Delta(G)$ 。若存在一个顶点  $u \neq w$  且  $u$  的邻域  $N_G(u) = \{u_1, u_2, \dots, u_k, v\}$ , 其中  $k \geq 1$ ,  $d_G(u_1) = d_G(u_2) = \dots = d_G(u_k) = 1$ , 且  $d_G(v) \geq 2$ , 则令  $G' = G - \{uu_i : 1 \leq i \leq k\} + \{wu_j : 1 \leq j \leq k\}$ , 如图 1 所示, 那么  $\sigma(G') > \sigma(G)$ 。

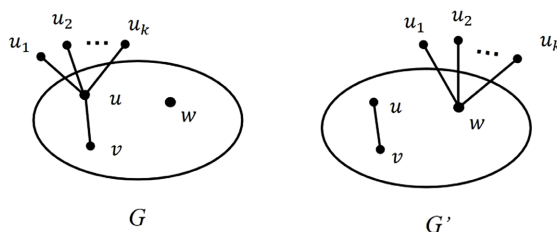


Figure 1. The graphs of  $G$  and  $G'$  in Lemma 2.1

图 1. 引理 2.1 中图  $G$  和图  $G'$

证明: 从图  $G$  变换为图  $G'$  时, 只有顶点  $u$  和  $w$  的度发生了变化, 而其余顶点的度保持不变。即  $d_{G'}(w) = d_G(w) + d_G(u) - 1$ ,  $d_{G'}(u) = 1$ , 而对于其它顶点  $x \in V(G) \setminus \{w, u\}$ , 有  $d_{G'}(x) = d_G(x)$ 。

当  $v \neq w$  时, 我们有:

$$\begin{aligned} \sigma(G') - \sigma(G) &= \sum_{x \in N_G(w)} \left[ (d_{G'}(w) - d_{G'}(x))^2 - (d_G(w) - d_G(x))^2 \right] \\ &\quad + \sum_{i=1}^k \left[ (d_{G'}(w) - 1)^2 - (d_G(u) - 1)^2 \right] + (d_{G'}(v) - 1)^2 - (d_G(v) - d_G(u))^2 \\ &= \sum_{x \in N_G(w)} \left[ (d_G(w) + d_G(u) - 1 - d_G(x))^2 - (d_G(w) - d_G(x))^2 \right] \\ &\quad + \sum_{i=1}^k \left[ (d_G(w) + d_G(u) - 2)^2 - (d_G(u) - 1)^2 \right] + (d_G(v) - 1)^2 - (d_G(v) - d_G(u))^2 \\ &\geq \sum_{i=1}^k \left[ (d_G(w) + d_G(u) - 2)^2 - (d_G(u) - 1)^2 \right] + (d_G(v) - 1)^2 - (d_G(v) - d_G(u))^2 \\ &= (d_G(u) - 1) \left[ (d_G(w) - 1)^2 + 2(d_G(w) - 1)(d_G(u) - 1) \right] + 2d_G(v)d_G(u) - 2d_G(v) - d_G^2(u) + 1 \\ &> (d_G(u) - 1) \left[ (d_G(w) - 1)^2 + 2(d_G(w) - 1)(d_G(u) - 1) \right] - d_G^2(u) + 1 \\ &= (2d_G(w) - 3)(d_G(u) - 1)^2 + \left[ (d_G(w) - 1)^2 - 2 \right] (d_G(u) - 1). \end{aligned}$$

由于  $d_G(w) \geq d_G(u) \geq 2$ ，我们可以得到不等式  $\sigma(G') - \sigma(G) > (d_G(u) - 1)^2 - (d_G(u) - 1) \geq 0$ 。当  $v = w$  时，此结论可以类似地证明。故引理 2.1 成立。

由引理 2.1 我们可得到以下推论：

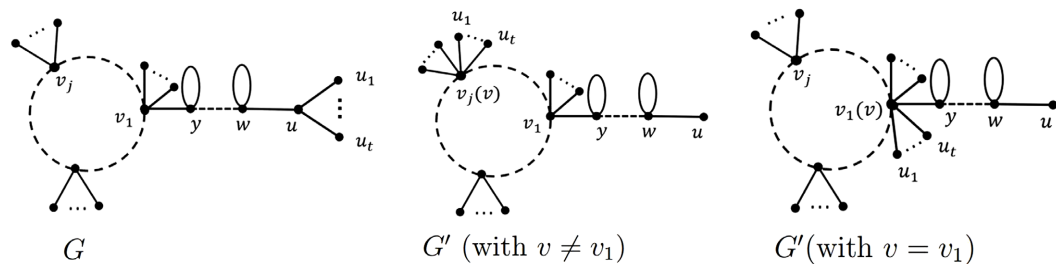
**推论 2.1 [2]** 设  $T$  是一个不同构于  $S_n$  和  $P_n$  的  $n$  阶树，则有：

$$2 = \sigma(P_n) < \sigma(T) < \sigma(S_n) = (n-1)(n-2)^2.$$

**引理 2.2** 设  $G = C_r(T_1, T_2, \dots, T_r)$  是一个  $n$  阶单圈图，其中圈  $C_r = v_1 v_2 \dots v_r v_1$ 。假设  $T_1$  是不同构于以  $v_1$  为中心的星图，设  $T_1$  中与  $v_1$  相邻且度数大于等于 2 的顶点为  $y$ 。对于  $i = 2, \dots, r$ ， $T_i$  均为以  $v_i$  为中心的星图。我们设  $v$  为顶点  $v_1, v_2, \dots, v_r$  中度数最大的顶点， $u_1$  为  $T_1$  中距离  $v_1$  最远的悬挂点，其邻接顶点为  $u$ 。若  $u$  的邻域为  $N_G(u) = \{u_1, u_2, \dots, u_t, w\}$ ，其中  $u_1, \dots, u_t$  是悬挂点，且  $d_G(w) \geq 2$ ，则令

$G' = G - \{uu_i : 1 \leq i \leq t\} + \{vu_j : 1 \leq j \leq t\}$ ，如图 2 所示。如果顶点  $u$  满足

$$d_G(u) = \max \{d_G(x) \mid x \in V(T_1) \setminus \{v_1\}\}, \text{ 那么 } \sigma(G') > \sigma(G).$$



**Figure 2.** The graphs of  $G$  and  $G'$  in Lemma 2.2

**图 2.** 引理 2.2 中图  $G$  和图  $G'$

**证明：**为了研究  $\text{Sigma}$  的极值问题，我们在点边变换的过程中选择距离最远的悬挂点进行变换，确保变换后能够通过增加度数差，从而有效地增大  $\text{Sigma}$  指数。如果选择其他顶点进行变换，存在导致  $\text{Sigma}$  指数减小的情况。因此，从图  $G$  变换为图  $G'$  时，只有顶点  $u$  和  $v$  的度发生了变化，而其余顶点的度保持不变。即  $d_{G'}(v) = d_G(v) + d_G(u) - 1$ ， $d_{G'}(u) = 1$ ，而对于其它顶点  $x \in V(G) \setminus \{v, u\}$ ， $d_{G'}(x) = d_G(x)$ 。

若  $v \neq v_1$ ，则我们有：

$$\begin{aligned} \sigma(G') - \sigma(G) &= \sum_{x \in N_G(v)} \left[ (d_{G'}(v) - d_{G'}(x))^2 - (d_G(v) - d_G(x))^2 \right] \\ &\quad + \sum_{i=1}^t \left[ (d_{G'}(v) - 1)^2 - (d_G(u) - 1)^2 \right] + (d_{G'}(w) - d_{G'}(u))^2 - (d_G(w) - d_G(u))^2 \\ &> \sum_{i=1}^t \left[ (d_G(v) + d_G(u) - 1 - 1)^2 - (d_G(u) - 1)^2 \right] + (d_G(w) - 1)^2 - (d_G(w) - d_G(u))^2 \\ &= (d_G(u) - 1) \left[ (d_G(v) - 1)^2 + 2(d_G(u) - 1)(d_G(v) - 1) \right] - 2d_G(w) + 1 - d_G^2(u) + 2d_G(w)d_G(u) \\ &> (d_G(u) - 1) \left[ (d_G(v) - 1)^2 + 2(d_G(u) - 1)(d_G(v) - 1) \right] - d_G^2(u) + 1 \\ &= (2d_G(v) - 3)(d_G(u) - 1)^2 + \left[ (d_G(v) - 1)^2 - 2 \right] (d_G(u) - 1). \end{aligned}$$

因为  $d_G(v) \geq 3$  且  $d_G(u) \geq 2$ ，所以  $\sigma(G') - \sigma(G) > 0$ 。

若  $v = v_1$  且顶点  $u$  和顶点  $v$  不相邻，则我们有：

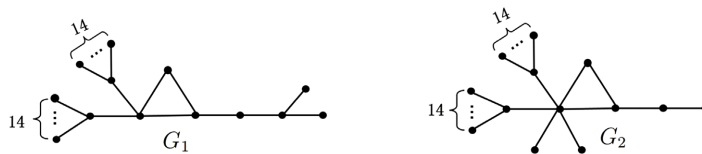
$$\begin{aligned}
 \sigma(G') - \sigma(G) &= \sum_{x \in N_G(v) \setminus \{y\}} \left[ (d_{G'}(v) - d_{G'}(x))^2 - (d_G(v) - d_G(x))^2 \right] + \sum_{i=1}^t \left[ (d_{G'}(v) - 1)^2 - (d_G(u) - 1)^2 \right] \\
 &\quad + (d_{G'}(v) - d_{G'}(y))^2 - (d_G(v) - d_G(y))^2 + (d_{G'}(w) - d_{G'}(u))^2 - (d_G(w) - d_G(u))^2 \\
 &> \sum_{i=1}^t \left[ (d_G(v) + d_G(u) - 1 - 1)^2 - (d_G(u) - 1)^2 \right] \\
 &\quad + (d_G(v) + d_G(u) - 1 - d_G(y))^2 - (d_G(v) - d_G(y))^2 + (d_G(w) - 1)^2 - (d_G(w) - d_G(u))^2 \\
 &= (d_G(u) - 1) \left[ (d_G(v) - 1)^2 + 2(d_G(u) - 1)(d_G(v) - 1) \right] \\
 &\quad - 2d_G(w) + 1 - d_G^2(u) + 2d_G(w)d_G(u) + (d_G(u) - 1)^2 + 2(d_G(u) - 1)(d_G(v) - d_G(y)) \\
 &> (2d_G(v) - 1)(d_G(u) - 1)^2 + (d_G^2(v) + 1 - 2d_G(y))(d_G(u) - 1) - d_G^2(u) + 1 \\
 &\geq (2 \times 3 - 1)(d_G(u) - 1)^2 + (3^2 + 1 - 2d_G(u))(d_G(u) - 1) - d_G^2(u) + 1 \\
 &= 2(d_G(u) + 2)(d_G(u) - 1) \\
 &> 0.
 \end{aligned}$$

若  $v = v_1$  且顶点  $u$  和顶点  $v$  相邻, 则我们有:

$$\begin{aligned}
 \sigma(G') - \sigma(G) &= \sum_{x \in N_G(v) \setminus \{u\}} \left[ (d_{G'}(v) - d_{G'}(x))^2 - (d_G(v) - d_G(x))^2 \right] \\
 &\quad + \sum_{i=1}^t \left[ (d_{G'}(v) - 1)^2 - (d_G(u) - 1)^2 \right] + (d_{G'}(v) - d_{G'}(u))^2 - (d_G(v) - d_G(u))^2 \\
 &> \sum_{i=1}^t \left[ (d_G(v) + d_G(u) - 2)^2 - (d_G(u) - 1)^2 \right] + (d_G(v) + d_G(u) - 2)^2 - (d_G(v) - d_G(u))^2 \\
 &= (d_G(u) - 1) \left[ (d_G(v) - 1)^2 + 2(d_G(u) - 1)(d_G(v) - 1) \right] + 4[(d_G(u) - 1)(d_G(v) - 1)] \\
 &> 0.
 \end{aligned}$$

综上所述, 引理 2.2 证毕。

**标注 2.1** 设  $G = C_r(T_1, T_2, \dots, T_r)$  是一个  $n$  阶单圈图。如果  $T_1, T_2, \dots, T_r$  中至少存在两个树不是星图, 则引理 2.2 的结论不一定成立。例如图 3 所示的图  $G_1$  和  $G_2$ , 其中  $G_1$  通过引理 2.2 得到  $G_2$ 。然而, 通过计算表明:  $\sigma(G_2) - \sigma(G_1) = -18$ 。



**Figure 3.** The graphs of  $G_1$  and  $G_2$  in Remark 2.1  
**图 3.** 标注 2.1 中图  $G_1$  和图  $G_2$

由引理 2.1 和 2.2 可得到如下结果:

**推论 2.2** 设  $G = C_r(T_1, T_2, \dots, T_r)$  是一个  $n$  阶单圈图, 则有  $\sigma(G) \leq \sigma(S_{n,r}(t_1, t_2, \dots, t_r))$ , 等号成立当且仅当  $G \cong S_{n,r}(t_1, t_2, \dots, t_r)$ 。

**引理 2.3** 假设  $t_1 = \max\{t_1, t_2, t_3, \dots, t_r\}$ , 那么  $\sigma(S_{n,r}(t_1, t_2, \dots, t_r)) \leq \sigma(S_{n,r})$ , 等号成立当且仅当  $t_1 = n - r$  且  $t_2 = \dots = t_r = 0$ 。

证明: 记  $G = S_{n,r}(t_1, t_2, \dots, t_r)$ 。若  $t_2 \geq 1$ , 则令  $G_1 = S_{n,r}(t_1 + t_2, 0, \dots, t_{r-1}, t_r)$ 。通过计算有:

$$\begin{aligned}
 \sigma(G_1) - \sigma(G) &= (t_1 + t_2)(t_1 + t_2 + 1)^2 + (t_1 + t_2)^2 + (t_1 + t_2 - t_r)^2 + t_3^2 \\
 &\quad - t_1(t_1 + 1)^2 - t_2(t_2 + 1)^2 - (t_1 - t_2)^2 - (t_1 - t_r)^2 - (t_2 - t_3)^2 \\
 &> (t_1 + t_2)(t_1 + t_2 + 1)^2 - t_1(t_1 + 1)^2 - t_2(t_2 + 1)^2 + t_3^2 - (t_2 - t_3)^2 \\
 &= t_1[t_2^2 + 2t_2(t_1 + 1)] + t_2[t_1^2 + 2t_1(t_2 + 1)] - t_2^2 + 2t_2t_3 \\
 &> 0.
 \end{aligned}$$

同理可得, 若  $t_r \geq 1$ , 则  $\sigma(S_{n,r}(t_1 + t_r, t_2, \dots, t_{r-1}, 0)) > \sigma(G)$ 。

现设存在整数  $k$  ( $3 \leq k \leq r-1$ ) 满足  $t_k \geq 1$ , 令  $G_2 = S_{n,r}(t_1 + t_k, t_2, \dots, t_{k-1}, 0, t_{k+1}, \dots, t_r)$ , 则有

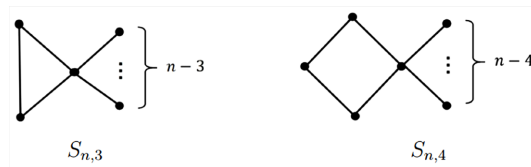
$$\begin{aligned}
 \sigma(G_2) - \sigma(G) &= (t_1 + t_k)(t_1 + t_k + 1)^2 + (t_1 + t_k - t_2)^2 + (t_1 + t_k - t_r)^2 + t_{k-1}^2 + t_{k+1}^2 \\
 &\quad - t_1(t_1 + 1)^2 - t_k(t_k + 1)^2 - (t_1 - t_2)^2 - (t_1 - t_r)^2 - (t_{k-1} - t_k)^2 - (t_{k+1} - t_k)^2 \\
 &> (t_1 + t_k)(t_1 + t_k + 1)^2 - t_1(t_1 + 1)^2 - t_k(t_k + 1)^2 + t_{k-1}^2 - (t_{k-1} - t_k)^2 + t_{k+1}^2 - (t_{k+1} - t_k)^2 \\
 &> t_1[t_k^2 + 2t_k(t_1 + 1)] + t_k[t_1^2 + 2t_1(t_k + 1)] - 2t_k^2 \\
 &> 0.
 \end{aligned}$$

因此,  $\sigma(S_{n,r}(t_1, t_2, \dots, t_r)) \leq \sigma(S_{n,r})$ , 等号成立当且仅当  $t_1 = n-r$  且  $t_2 = \dots = t_r = 0$ 。

注意到, 函数  $f(r) = \sigma(S_{n,r}) = (n-r)(n-r+1)^2 + 2(n-r)^2$  在区间  $r \in [3, n-1]$  上单调递减, 因此有:

**推论 2.3**  $\sigma(S_{n,n-1}) < \sigma(S_{n,n-2}) < \dots < \sigma(S_{n,4}) < \sigma(S_{n,3})$ 。

$S_{n,3}$ 、 $S_{n,4}$  如图 4 所示。



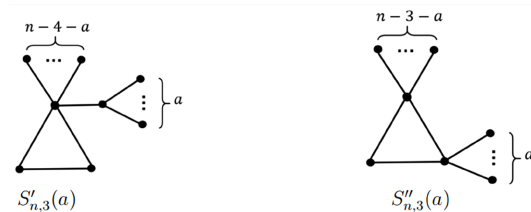
**Figure 4.** The graphs of  $S_{n,3}$  and  $S_{n,4}$

**图 4.** 图  $S_{n,3}$  和图  $S_{n,4}$

用  $U_{n,r}$  表示所有圈长度为  $r$  的  $n$  阶单圈图集合, 其中  $3 \leq r \leq n$ 。用  $U_n$  表示所有  $n$  阶单圈图的集合。结合引理 2.1、引理 2.2 和引理 2.3, 我们可以得到如下的定理:

**定理 2.1** [4] 在  $U_n$  中,  $S_{n,3}$  是具有最大 Sigma 指数的唯一图。

设  $n \geq 5$ , 连接圈  $C_3$  的一个顶点和星图  $S_{a+1}$  的中心点, 并在  $C_3$  的这个顶点上连接  $n-4-a$  个悬挂顶点得到的图记为  $S'_{n,3}(a)$ 。在圈  $C_3$  的一个顶点上连接  $a$  个悬挂顶点, 再在它的另一个顶点上连接  $n-3-a$  个悬挂顶点所得到的图记为  $S''_{n,3}(a)$ , 如图 5 所示。



**Figure 5.** The graphs of  $S'_{n,3}(a)$  and  $S''_{n,3}(a)$

**图 5.** 图  $S'_{n,3}(a)$  和图  $S''_{n,3}(a)$

通过计算推导可以得到以下公式:

$$\begin{aligned}\sigma(S'_{n,3}(a)) &= (3n-2)a^2 + (-3n^2+8n)a + n^3 - 5n^2 + 4n + 6, \\ \sigma(S''_{n,3}(a)) &= (3n+1)a^2 + (-3n^2+8n+3)a + n^3 - 5n^2 + 4n + 6.\end{aligned}$$

令函数  $f_1(a) = \sigma(S'_{n,3}(a))$ , 其中  $1 \leq a \leq n-4$ , 函数  $f_2(a) = \sigma(S''_{n,3}(a))$ , 其中  $1 \leq a \leq \left\lfloor \frac{n-3}{2} \right\rfloor$ .

当  $n \geq 6$  时, 我们对  $f_1(a)$  求导得到:  $f'_1(a) = 2(3n-2)a - 3n^2 + 8n$ ,  $1 \leq a < \frac{3n^2-8n}{2(3n-2)}$  时  $f'_1(a) < 0$ ,

$$\frac{3n^2-8n}{2(3n-2)} < a \leq n-4 \text{ 时 } f'_1(a) > 0.$$

同样地, 我们对  $f_2(a)$  求导可得:  $f'_2(a) = 2(3n+1)\left(a - \frac{n-3}{2}\right)$ , 当  $1 \leq a \leq \left\lfloor \frac{n-3}{2} \right\rfloor$  时  $f'_2(a) \leq 0$ .

综上, 我们可以得到函数  $f_1(a)$  和  $f_2(a)$  的最大值:

$$\begin{aligned}f_1(a) &\leq \max\{f_1(1), f_1(n-4)\} \\ &= \max\{n^3 - 8n^2 + 15n + 4, n^3 - 11n^2 + 36n - 26\} \\ &= n^3 - 8n^2 + 15n + 4 \\ f_2(a) &\leq f_2(1) = n^3 - 8n^2 + 15n + 10.\end{aligned}$$

**引理 2.4** 设  $G \cong C_3(T_1, T_2, T_3)$  是一个  $n$  阶单圈图且  $G \not\cong S_{n,3}$ , 则  $\sigma(G) \leq n^3 - 8n^2 + 15n + 10$ , 等号成立当且仅当  $G \cong S''_{n,3}(1)$ .

证明: 不失一般性设  $t_1 \geq t_2 \geq t_3$ . 若  $t_2 \geq 1$ , 则由引理 2.1、2.2 和 2.3 可以得到

$$\sigma(C_3(T_1, T_2, T_3)) \leq \sigma(S_n(t_1, t_2, t_3)) \leq \sigma(S_n(t_1 + t_3, t_2, 0)) = \sigma(S''_{n,3}(t_2)).$$

若  $t_2 = 0$  且  $G \not\cong S_{n,3}$ , 则  $T_3 \not\cong S_{t_3+1}$ . 由引理 2.1 和引理 2.2 可知  $\sigma(C_3(T_1, T_2, T_3)) \leq \sigma(S'_{n,3}(a))$ , 其中  $a \in [1, n-4]$ .

又由前面的推导可得:  $\sigma(S''_{n,3}(t_2)) \leq \sigma(S''_{n,3}(1))$ , 且  $\sigma(S'_{n,3}(a)) \leq \sigma(S'_{n,3}(1)) < \sigma(S''_{n,3}(1))$ . 注意到第一个等号成立当且仅当  $t_2 = 1$ .

**定理 2.2** 设  $n \geq 6$ , 在  $\mathbf{U}_n$  中,

- (i)  $S''_{6,3}(1)$  是  $\mathbf{U}_6$  中具有第二大 Sigma 指数的唯一图, 其 Sigma 指数为 28;
- (ii)  $S''_{7,3}(1)$  和  $S_{7,4}$  是  $\mathbf{U}_7$  中具有第二大 Sigma 指数的图, 其 Sigma 指数为 66;
- (iii) 若  $n \geq 8$ , 则  $S_{n,4}$  是  $\mathbf{U}_n$  中具有第二大 Sigma 指数的唯一图, 其 Sigma 指数为  $n^3 - 8n^2 + 17n - 4$ .

证明: 若  $G \in \mathbf{U}_{n,3} \setminus \{S_{n,3}\}$ , 由引理 2.4 可得  $\sigma(G) \leq \sigma(S''_{n,3}(1)) = n^3 - 8n^2 + 15n + 10$ , 等号成立当且仅当  $G \cong S''_{n,3}(1)$ .

若  $G \in \bigcup_{r=4}^n \mathbf{U}_{n,r}$ , 则由推论 2.2 和推论 2.3 可得  $\sigma(G) \leq \sigma(S_{n,4}) = n^3 - 8n^2 + 17n - 4$ , 等号成立当且仅当  $G \cong S_{n,4}$ .

综上, 通过直接计算比较  $\sigma(S_{n,4})$  和  $\sigma(S''_{n,3}(1))$  可得单圈图第二大 Sigma 指数.  $n=6$  时  $\sigma(S''_{6,3}(1)) = 28 > 26 = \sigma(S_{6,4})$ ,  $n=7$  时  $\sigma(S''_{7,3}(1)) = \sigma(S_{7,4}) = 66$ ,  $n \geq 8$  时  $\sigma(S_{n,4}) > \sigma(S''_{n,3}(1))$ . 因此定理 2.2 成立。

## 参考文献

- [1] Abdo, H. and Dimitrov, D. (2014) The Total Irregularity of Graphs under Graph Operations. *Miskolc Mathematical Notes*, **15**, 3-17. <https://doi.org/10.18514/mmn.2014.593>
- [2] Criado, R., Flores, J., García del Amo, A. and Romance, M. (2013) Centralities of a Network and Its Line Graph: An Analytical Comparison by Means of Their Irregularity. *International Journal of Computer Mathematics*, **91**, 304-314. <https://doi.org/10.1080/00207160.2013.793316>
- [3] Estrada, E. (2010) Randic Index, Irregularity and Complex Biomolecular Networks. *Acta Chimica Slovenica*, **57**, 597-603.
- [4] Gutman, I., Hansen, P. and Mélot, H. (2005) Variable Neighborhood Search for Extremal Graphs. Comparison of Irregularity Indices for Chemical Trees. *Journal of Chemical Information and Modeling*, **45**, 222-230. <https://doi.org/10.1021/ci0342775>
- [5] Reti, T., Sharafadini, R., Dregelyi-Kiss, A. and Haghbin, H. (2018) Graph Irregularity Indices used as Molecular Descriptors in QSPR Studies. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **79**, 509-524.
- [6] Safaei, F., Tabrizchi, S., Hadian Rasanan, A.H. and Zare, M. (2019) An Energy-Based Heterogeneity Measure for Quantifying Structural Irregularity in Complex Networks. *Journal of Computational Science*, **36**, Article 101011. <https://doi.org/10.1016/j.jocs.2019.06.008>
- [7] Albertson, M.O. (1997) The Irregularity of a Graph. *ARS Combinatoria*, **46**, 219-225.
- [8] Bell, F.K. (1992) A Note on the Irregularity of Graphs. *Linear Algebra and its Applications*, **161**, 45-54. [https://doi.org/10.1016/0024-3795\(92\)90004-t](https://doi.org/10.1016/0024-3795(92)90004-t)
- [9] Gutman, I., Togan, M., Yurttas, A., Cevik, A.S. and Cangul, I.N. (2018) Inverse Problem for Sigma Index. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **79**, 491-508.
- [10] Abdo, H., Dimitrov, D. and Gutman, I. (2018) Graphs with Maximal  $\sigma$  Irregularity. *Discrete Applied Mathematics*, **250**, 57-64. <https://doi.org/10.1016/j.dam.2018.05.013>
- [11] Réti, T. (2019) On Some Properties of Graph Irregularity Indices with a Particular Regard to the  $\Sigma$ -Index. *Applied Mathematics and Computation*, **344**, 107-115. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2018.10.010>
- [12] Ali, A., Albalahi, A.M., Alanazi, A.M., Bhatti, A.A. and Hamza, A.E. (2023) On the Maximum Sigma Index of k-Cyclic Graphs. *Discrete Applied Mathematics*, **325**, 58-62. <https://doi.org/10.1016/j.dam.2022.10.009>
- [13] Kovijanić Vukićević, Ž., Popivoda, G., Vujošević, S., Škrekovski, R. and Dimitrov, D. (2023) The  $\Sigma$ -Irregularity of Chemical Trees. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **91**, 267-282. <https://doi.org/10.46793/match.91-1.267k>