Math-Net.Ru
Общероссийский математический портал

Н. А. Кузьмин, Д. С. Малышев, О деревьях диаметра 5 с максимальным количеством паросочетаний, *Матем. сб.*, 2023, том 214, номер 2, 143–154

DOI: https://doi.org/10.4213/sm9745

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
http://www.mathnet.ru/rus/agreement

Параметры загрузки:
IP: 82.208.121.38
28 января 2023 г., 14:59:06

Н. А. Кузьмин, Д. С. Малышев

О деревьях диаметра 5 с максимальным количеством паросочетаний

Паросочетанием в графе называется любое множество его попарно несмежных ребер. Количество паросочетаний, называемое также индексом Хосойи, является важным параметром графов, находящим свое применение в математической химии. Ранее была полностью решена задача максимизации индекса Хосойи в деревьях радиуса 2 (т.е. диаметра 4) заданного размера. В настоящей статье рассматривается и полностью решается задача максимизации этого индекса в деревьях диаметра 5 с заданным количеством вершин n. Оказалось, что при любом n экстремальное дерево является единственным.

Библиография: 6 названий.

Ключевые слова: экстремальная теория графов, паросочетание, дерево.

DOI: https://doi.org/10.4213/sm9745

§ 1. Введение

Химические соединения часто рассматриваются в форме *молекулярных* графов, где атомам соответствуют вершины графа, а связям между ними – ребра графа. При этом свойства химических соединений описываются в терминах *топологических индексов*, которые представляют собой некоторые инварианты графов относительно переобозначения вершин и которые позволяют аналитически исследовать некоторые аспекты химической структуры вещества.

В настоящей работе рассматриваются только *обыкновенные* графы, т.е. неориентированные, непомеченные графы без петель и кратных ребер. *Паросочетанием* графа называется произвольное множество попарно не смежных его ребер, в том числе и пустое. Топологический индекс Хосойи, предложенный в пионерской работе [1], для графа G определяется как количество его паросочетаний и обозначается через $z(G)$. Значения индекса Хосойи определяют некоторые физико-химические свойства соответствующих химических соединений, в частности, точки кипения алканов, энергию сопряженных π-электронных систем, см., например, обзоры [2]–[4]. Поскольку топологические индексы определяют ту или иную энергию химических соединений, то интересна задача по выявлению графов из заданных классов с экстремальным (минимальным или максимальным) значением того или иного топологического индекса. В статье

Статья подготовлена в результате проведения исследования в рамках Программы фундаментальных исследований Национального исследовательского университета "Высшая школа экономики" (НИУ ВШЭ).

© Н. А. Кузьмин, Д. С. Малышев, 2023

рассматриваются только *обыкновенные* графы, т.е. неориентированные, непомеченные графы без петель и кратных ребер. Напомним, что *эксцентриситетом* вершины графа называется максимальное из расстояний между ней и остальными вершинами. *Радиус* и *диаметр* графа – минимальный и максимальный из эксцентриситетов его вершин.

Понятно, что единственным n-вершинным деревом радиуса 1 будет только n-звезда, имеющая ровно n паросочетаний. Задача о поиске деревьев диаметра 3 фиксированного размера с максимальным значением индекса Хосойи также тривиальна. В работе [5] полностью описаны деревья радиуса 2 на n вершинах с наибольшим количеством паросочетаний. В настоящей работе рассматривается и решается задача максимизации индекса Хосойи в n-вершинных деревьях диаметра 5, которая, по сведениям авторов, является открытой. Любое n-вершинное дерево диаметра 5 с наибольшим количеством паросочетаний назовем *максимальным*. Оказалось, что при любом $n \geqslant 5$ данное дерево является единственным.

§ 2. Некоторые определения, обозначения и факты

Напомним, что *листом* графа называется произвольная его вершина степени 1. *Центральная вершина* графа – вершина с минимальным эксцентриситетом. Лист, смежный с центральной вершиной графа, будем называть *центральным листом*. *Центр графа* – множество его центральных вершин. Согласно известной теореме Жордана центр любого дерева состоит либо из одной вершины, либо из двух смежных вершин.

Количество паросочетаний (включая и пустое) в графе G будем обозначать через $z(G)$. Пусть $A, B \subseteq V(G)$ и $A \cap B = \varnothing$. Через $z(G, A, B)$ обозначается количество паросочетаний графа G, покрывающих все вершины из A и не покрывающих ни одной вершины из B.

Пусть G – некоторый граф, а H – его подграф. Любое подмножество $S \subseteq V(H)$ такое, что никакая вершина из $V(G) \setminus V(H)$ не смежна ни с какой вершиной из $V(H) \setminus S$, назовем *H-отделяющим*. Пусть S – некоторое H-отделяющее множество. Через G_S обозначим граф $((V(G) \setminus V(H)) \cup S, E(G) \setminus E(H))$. В работе [6] (см. [6; лемма 1]) было доказано следующее утверждение.

Лемма 2.1. *Справедливо равенство*

$$z(G) = \sum_{S' \subseteq S} z(G_S, S', S \setminus S') z(H \setminus S').$$

Предположим, что некоторые графы G^1 и G^2 содержат подграфы H_1 и H_2, причем одновременно выполнены следующие два условия:

1) некоторое подмножество $S \subseteq V(G^1) \cap V(G^2)$ одновременно является и H_1-отделяющим и H_2-отделяющим;

2) подграфы G^1_S и G^2_S изоморфны.

Тем самым равенство $z(G^1_S, S', S \setminus S') = z(G^2_S, S', S \setminus S')$ имеет место при любом $S' \subseteq S$. Если для любого подмножества $S' \subseteq S$ справедливо $z(H_2 \setminus S') \geqslant z(H_1 \setminus S')$, причем для некоторого $\widetilde{S}' \subseteq S$ выполнено

$$z(H_2 \setminus \widetilde{S}') > z(H_1 \setminus \widetilde{S}'), \qquad z(G^1_S, \widetilde{S}', S \setminus \widetilde{S}') \neq 0,$$

то $z(G^2) > z(G^1)$, что следует из леммы 2.1. Это замечание оказывается полезным для доказательства того факта, что то или иное преобразование графов увеличивает индекс Хосойи. Оно и связанные с ним обозначения будут использоваться в настоящей работе.

§ 3. Формулировка основных результатов

Рассмотрим дерево диаметра 5, представленное на рис. 1. Уточним, что $l_i \in \{0, 1\}$, где $l_i = 1$ тогда и только тогда, когда соответствующий лист содержится в дереве. Через a_i и b_i обозначено количество соответствующих вхождений 2-путей и 3-путей в дерево.

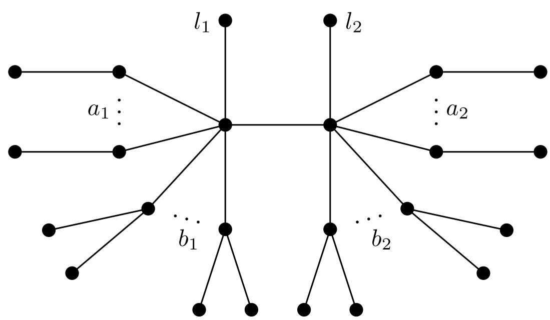

Рис. 1. Структура максимального дерева.

3.1. Описание максимальных деревьев при $n \geqslant 105$. При $n \geqslant 105$ верно следующее утверждение.

Теорема 3.1. *Пусть $n = 6k + (3l + m)$, где $l \in \{0, 1\}, m \in \{0, 1, 2\}$. Тогда, если $n \geqslant 105$, то максимальное n-вершинное дерево диаметра 5 единственно и имеет вид, представленный на рис. 1, где*

$$b_1 = k - 2 + m, \qquad b_2 = k + l,$$

$$a_2 = \begin{cases} 1, & r = 0, \\ 0, & r \neq 0, \end{cases} \qquad a_1 = \frac{6k + r - 2(a_2 + 1) - 3(b_1 + b_2)}{2}, \qquad l_1 = l_2 = 0.$$

3.2. Описание максимальных деревьев при $n \leqslant 104$. При $n \leqslant 5$ деревьев диаметра 5 не существует. С целью выявления максимальных деревьев при $6 \leqslant n \leqslant 104$ был проведен вычислительный эксперимент по поиску оптимальных целочисленных l_1, l_2, a_1, a_2, b_1 и b_2, показавший, что центральный лист в максимальном дереве может содержаться только при $6 \leqslant n \leqslant 13$, соответствующие значения параметров представлены в табл. 1.

При $14 \leqslant n \leqslant 104$ центральных листьев в дереве не содержится, т.е. $l_1 = l_2 = 0$. Соответствующие значения оптимальных параметров представлены в табл. 2.

Таблица 1. Значения параметров, соответствующие максимальным деревьям при $6 \leqslant n \leqslant 13$

n	l_1	l_2	a_1	a_2	b_1	b_2	n	l_1	l_2	a_1	a_2	b_1	b_2
6	0	0	1	1	0	0	10	0	0	2	2	0	0
7	1	0	1	1	0	0	11	1	0	1	3	0	0
8	0	0	2	1	0	0	12	0	0	3	2	0	0
9	1	0	1	2	0	0	13	1	0	2	3	0	0

Таблица 2. Значения параметров, соответствующие максимальным деревьям при $14 \leqslant n \leqslant 104$

n	a_1	a_2	b_1	b_2	n	a_1	a_2	b_1	b_2	n	a_1	a_2	b_1	b_2
14	3	3	0	0	45	10	10	1	0	76	12	1	0	16
15	3	2	0	1	46	11	11	0	0	77	11	1	1	16
16	4	3	0	0	47	11	10	0	1	78	11	0	1	17
17	3	3	1	0	48	12	11	0	0	79	12	1	0	17
18	4	4	0	0	49	11	11	1	0	80	12	0	0	18
19	4	3	0	1	50	12	12	0	0	81	11	0	1	18
20	5	4	0	0	51	12	11	0	1	82	9	1	4	16
21	4	4	1	0	52	11	11	1	1	83	9	0	4	17
22	5	5	0	0	53	11	10	1	2	84	11	0	2	18
23	5	4	0	1	54	12	11	0	2	85	10	0	3	18
24	6	5	0	0	55	12	10	0	3	86	9	0	4	18
25	5	5	1	0	56	12	9	0	4	87	7	1	7	16
26	6	6	0	0	57	11	9	1	4	88	7	0	7	17
27	6	5	0	1	58	11	8	1	5	89	9	0	5	18
28	7	6	0	0	59	12	9	0	5	90	8	0	6	18
29	6	6	1	0	60	12	8	0	6	91	7	0	7	18
30	7	7	0	0	61	12	7	0	7	92	5	1	10	16
31	7	6	0	1	62	11	7	1	7	93	5	0	10	17
32	8	7	0	0	63	11	6	1	8	94	7	0	8	18
33	7	7	1	0	64	12	7	0	8	95	6	0	9	18
34	8	8	0	0	65	12	6	0	9	96	5	0	10	18
35	8	7	0	1	66	12	5	0	10	97	3	1	13	16
36	9	8	0	0	67	11	5	1	10	98	3	0	13	17
37	8	8	1	0	68	11	4	1	11	99	5	0	11	18
38	9	9	0	0	69	12	5	0	11	100	4	0	12	18
39	9	8	0	1	70	12	4	0	12	101	3	0	13	18

Таблица 2 (продолжение)

40	10	9	0	0	71	12	3	0	13	102	1	1	16	16
41	9	9	1	0	72	11	3	1	13	103	1	0	16	17
42	10	10	0	0	73	11	2	1	14	104	3	0	14	18
43	10	9	0	1	74	12	3	0	14	105	2	0	15	18
44	11	10	0	0	75	12	2	0	15	106	1	0	16	18

§ 4. Некоторые известные преобразования графов, увеличивающие индекс Хосойи

В работе [5] были предложены следующие преобразования графов и доказаны (см. [5; леммы 3.1, 3.4 и 3.5]) соответствующие утверждения.

Пусть граф G_1 состоит из подграфов G'_S и G''_S и отделенного от них вершинами s_1 и s_2 порожденного 3-пути $H_1 = (v, s_2, s_1)$, а граф G_2 состоит из подграфов G'_S и G''_S и отделенного от них вершинами s_1 и s_2 порожденного 3-пути $H_2 = (s_2, v, s_1)$ так, как показано на рис. 2.

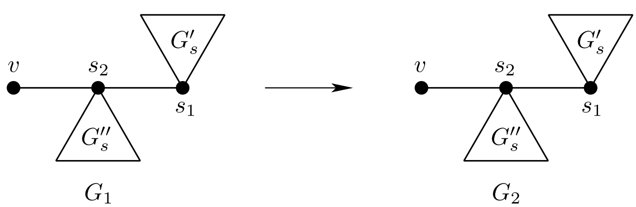

Рис. 2. Преобразование 1.

Лемма 4.1. *Если* $V(G''_S) \neq \{s_2\}$, *то* $z(G_2) > z(G_1)$.

Пусть граф G_1 состоит из подграфа G_S и отделенной от него вершиной s_1 звезды H_1 с $q+1$ листьями (рис. 3).

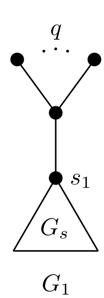

Рис. 3. Граф G_1.

В случае четного q граф G_2 состоит из подграфа G_S и отделенного от него вершиной s_1 подграфа H_2 так, как показано на рис. 4.

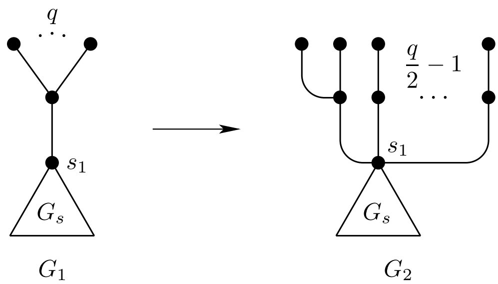

Рис. 4. Преобразование 2.

Лемма 4.2. *Для каждого четного* $q \geqslant 4$ *верно, что* $z(G_2) > z(G_1)$.

В случае нечетного q граф G_2 состоит из подграфа G_S и отделенного от него вершиной s_1 подграфа H_2 так, как показано на рис. 5.

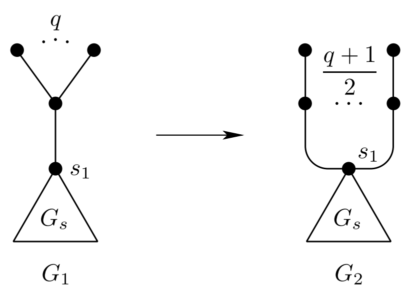

Рис. 5. Преобразование 3.

Лемма 4.3. *Для любого нечетного* $q \geqslant 3$ *верно, что* $z(G_2) > z(G_1)$.

§ 5. Некоторые новые преобразования графов, увеличивающие индекс Хосойи

Пусть граф G_1 состоит из подграфа G_s и отделенного от него вершинами s_1 и s_2 порожденного 4-пути H_1, а граф G_2 состоит из подграфа G_s и отделенного от него вершинами s_1 и s_2 порожденного 4-пути H_2 так, как показано на рис. 6.

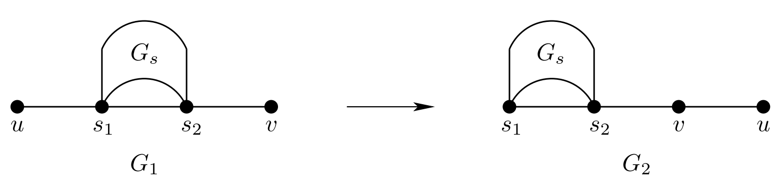

Рис. 6. Преобразование 4.

Лемма 5.1. *Если* $\deg_{G_s}(s_1) \neq 0$, *то* $z(G_2) > z(G_1)$.

Доказательство. Несложно проверить, что

$$z(H_1) = z(H_2) = 5, \qquad z(H_1 \setminus s_2) = z(H_1 \setminus s_1) = z(H_2 \setminus s_2) = 2,$$
$$z(H_2 \setminus s_1) = 3, \qquad z(H_1 \setminus \{s_1, s_2\}) = 1, \qquad z(H_2 \setminus \{s_1, s_2\}) = 2.$$

Тогда по лемме 2.1 выполнено

$$z(G_2) - z(G_1) = z(G_S, \{s_1\}, \{s_2\}) + z(G_S, \{s_1, s_2\}, \varnothing) > 0.$$

Лемма доказана.

Пусть граф G_1 состоит из подграфа G_s и отделенной от него вершиной s_1 вилки H_1, а граф G_2 состоит из подграфа G_s и отделенной от него вершиной s_1 вилки H_2 так, как показано на рис. 7.

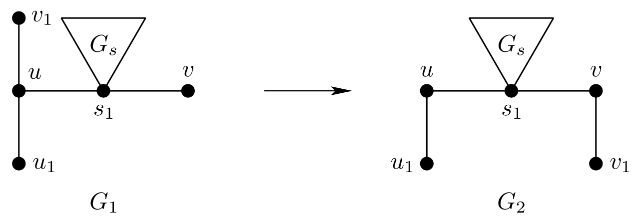

Рис. 7. Преобразование 5.

Лемма 5.2. *Верно, что* $z(G_2) > z(G_1)$.

Доказательство. Несложно проверить, что

$$z(H_1) = 7, \qquad z(H_2) = 8, \qquad z(H_1 \setminus s_1) = 3, \qquad z(H_2 \setminus s_1) = 4.$$

Тогда по лемме 2.1 выполнено

$$z(G_2) - z(G_1) = z(G_S, \varnothing, \{s_1\}) + z(G_S, \{s_1\}, \varnothing) > 0.$$

Лемма доказана.

Пусть граф G_1 состоит из подграфа G_s и отделенного от него вершинами s_1 и s_2 подграфа H_1, а граф G_2 состоит из подграфа G_s и отделенного от него вершинами s_1 и s_2 подграфа H_2 так, как показано на рис. 8.

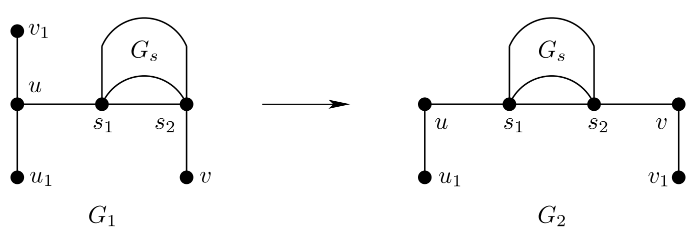

Рис. 8. Преобразование 6.

Лемма 5.3. *Верно, что* $z(G_2) > z(G_1)$.

Доказательство. Нетрудно проверить, что

$$z(H_1) = 11, \quad z(H_2) = 13, \quad z(H_1 \setminus s_1) = z(H_2 \setminus s_1) = 6, \quad z(H_1 \setminus s_2) = 4,$$
$$z(H_2 \setminus s_2) = 6, \quad z(H_1 \setminus \{s_1, s_2\}) = 3, \quad z(H_2 \setminus \{s_1, s_2\}) = 4.$$

Тогда по лемме 2.1 выполнено

$$z(G_2) - z(G_1) = 2z(G_S, \varnothing, \{s_1, s_2\}) + 2z(G_S, \{s_2\}, \{s_1\}) + z(G_S, \{s_1, s_2\}, \varnothing) > 0.$$

Лемма доказана.

§ 6. О свойствах максимальных деревьев диаметра 5

6.1. Структура максимальных деревьев диаметра 5 и некоторые ее свойства. Из лемм 4.1–4.3 следует, что каждое максимальное дерево диаметра 5 имеет вид, представленный на рис. 1. Индекс Хосойи такого дерева обозначим через $f(l_1, l_2, a_1, a_2, b_1, b_2)$. Очевидно, что если в данном дереве имеется n вершин, то

$$2a_1 + 2a_2 + 3b_1 + 3b_2 = n - l_1 - l_2 - 2. \tag{6.1}$$

Лемма 6.1. *В любом максимальном дереве выполнены следующие свойства.*

1. *Если дерево содержит центральный лист, то он единственный и* $b_1 = b_2 = 0$.

2. *Если* n *– четное, то дерево не содержит центральных листьев.*

Доказательство. Из леммы 5.1 следует, что в любом максимальном дереве либо $l_1 = 0$, либо $l_2 = 0$. Если в нем есть центральные листья, то можно считать, что $l_1 = 1$. Из лемм 5.2 и 5.3 следует, что $b_1 = b_2 = 0$. Подставив эти значения в равенство (6.1), получим, что $2a_1 + 2a_2 = n - 3$, что невозможно в случае четного n. Лемма доказана.

6.2. Случай наличия центрального листа. Предположим, что $l_1 = 1$. Тогда по лемме 6.1 имеем, что $l_2 = 0, b_1 = b_2 = 0$ и n является нечетным. Пусть $n = 4k + r$, где $r \in \{1, 3\}$, $g(a_1, a_2) = f(1, 0, a_1, a_2, 0, 0)$. Тогда задача поиска максимальных деревьев, содержащих центральный лист (если таковые существуют), сводится к нахождению максимума функции g при ограничении

$$2a_1 + 2a_2 = n - 3. \tag{6.2}$$

Нетрудно проверить, что верно следующее равенство:

$$g(a_1, a_2) = 2^{a_1 + a_2 - 2}(12 + 2a_1 + 4a_2 + a_1 a_2).$$

Подставив $a_1 = (n-3)/2 - a_2$ в функцию g, получим

$$g(a_2) = 2^{(n-3)/2-2}\left(-a_2^2 + \left(2 + \frac{n-3}{2}\right)a_2 + (n+9)\right).$$

Очевидно, что максимум этой функции находится в точке $a_2 = 1 + (n-3)/4$. Прямой подстановкой этого значения в функцию доказывается следующее утверждение.

Лемма 6.2. *Если выполняется* (6.2), *то*

$$g(a_1, a_2) \leqslant 2^{(n-15)/2}(n^2 + 18n + 145).$$

6.3. Случай отсутствия центрального листа. Пусть $g(a_1, a_2, b_1, b_2) = f(0, 0, a_1, a_2, b_1, b_2)$. Тогда задача поиска максимальных деревьев, не содержащих центральных листьев (если таковые существуют), сводится к нахождению максимума функции g при ограничении

$$2a_1 + 2a_2 + 3b_1 + 3b_2 = n - 2.$$

Не уменьшая общности можем считать, что $a_1 \geqslant a_2$, поэтому далее в этом пункте всегда будем предполагать, что это неравенство выполняется. Нетрудно проверить, что верно следующее равенство:

$$g(a_1, a_2, b_1, b_2) = 2^{a_1+a_2-2}3^{b_1+b_2-2}\big((3a_1 + 2b_1 + 6)(3a_2 + 2b_2 + 6) + 36\big).$$

Лемма 6.3. *Если* $b_1 \geqslant b_2$, *то*

$$g(a_1, a_2, b_2, b_1) \geqslant g(a_1, a_2, b_1, b_2).$$

Доказательство. Нетрудно проверить, что

$$\frac{g(a_1, a_2, b_2, b_1) - g(a_1, a_2, b_1, b_2)}{2^{a_1+a_2-2}3^{b_1+b_2-2}} = 6(a_1b_1 + a_2b_2 - a_1b_2 - a_2b_1).$$

В силу того, что $a_1 \geqslant a_2$ и $b_1 \geqslant b_2$, получаем

$$a_1b_1 + a_2b_2 - a_1b_2 - a_2b_1 = (a_1 - a_2)(b_1 - b_2) \geqslant 0.$$

Откуда следует, что $g(a_1, a_2, b_2, b_1) - g(a_1, a_2, b_1, b_2) \geqslant 0$. Лемма доказана.

Далее будем считать, что $b_2 \geqslant b_1$. Также введем обозначения $c_1 = a_1 - a_2$, $c_2 = b_2 - b_1$.

Лемма 6.4. *Выполнены следующие утверждения.*
1. *Если* $c_1 > (2/3)c_2 + 1$, *то* $g(a_1 - 1, a_2 + 1, b_1, b_2) > g(a_1, a_2, b_1, b_2)$.
2. *Если* $c_1 < (2/3)c_2 - 1$, *то* $g(a_1 + 1, a_2 - 1, b_1, b_2) > g(a_1, a_2, b_1, b_2)$.
3. *Если* $c_1 > (2/3)(c_2 + 1)$, *то* $g(a_1, a_2, b_1 - 1, b_2 + 1) > g(a_1, a_2, b_1, b_2)$.
4. *Если* $c_1 < (2/3)(c_2 - 1)$, *то* $g(a_1, a_2, b_1 + 1, b_2 - 1) > g(a_1, a_2, b_1, b_2)$.

Доказательство. Нетрудно проверить, что

$$\frac{g(a_1 - 1, a_2 + 1, b_1, b_2) - g(a_1, a_2, b_1, b_2)}{2^{a_1+a_2-2}3^{b_1+b_2-2}} = 3(3(a_1 - a_2 - 1) - 2(b_2 - b_1)).$$

Очевидно, что $3(a_1 - a_2 - 1) - 2(b_2 - b_1) = 3(c_1 - 1) - 2c_2 > 0$. Пункты 2–4 доказываются аналогично. Лемма доказана.

Пусть $x_k = (a_1 - k, a_2 + k, b_1, b_2)$, $c_1(x_k) = (a_1 - k) - (a_2 + k)$. Очевидно, что $c_1(x_{k-1}) - 2 = c_1(x_k)$. Тогда если для x_0 верно, что $c_1(x_0) > \frac{2}{3}c_2 + 1$, то по п. 1 леммы 6.4 существует такое k, что $\frac{2}{3}c_2 - 1 \leqslant c_1(x_k) \leqslant \frac{2}{3}c_2 + 1$ и $g(x_k) > g(x_0)$. В то же время пусть $y_k = (a_1 + k, a_2 - k, b_1, b_2)$, $c_1(y_k) = (a_1 + k) - (a_2 - k)$. Очевидно, что $c_1(y_{k-1}) + 2 = c_1(y_k)$. Тогда если для y_0 верно, что $c_1(y_0) < \frac{2}{3}c_2 - 1$, то по п. 2 леммы 6.4 существует такое k, что $\frac{2}{3}c_2 - 1 \leqslant c_1(y_k) \leqslant \frac{2}{3}c_2 + 1$ и $g(y_k) > g(y_0)$.

Тем самым доказано, что для любого набора параметров $x = (a_1, a_2, b_1, b_2)$ такого, что $c_1 \notin [\frac{2}{3}c_2 - 1, \frac{2}{3}c_2 + 1]$, существует набор $x' = (a'_1, a'_2, b'_1, b'_2)$ такой, что $c'_1 \in [\frac{2}{3}c'_2 - 1, \frac{2}{3}c'_2 + 1]$ и $g(x') > g(x)$. То есть для любого оптимального набора параметров (a_1, a_2, b_1, b_2) выполняется неравенство

$$\frac{2}{3}\,c_2 - 1 \leqslant c_1 \leqslant \frac{2}{3}\,c_2 + 1. \tag{6.3}$$

Аналогично, используя п. 3, 4 леммы 6.4, можно доказать, что для любого такого набора будет также выполняться неравенство

$$\frac{2}{3}(c_2 - 1) \leqslant c_1 \leqslant \frac{2}{3}(c_2 + 1). \tag{6.4}$$

Очевидно, что из (6.4) следует (6.3). По определению c_1 и c_2 неравенство (6.4) эквивалентно неравенству

$$3a_2 + 2b_2 - 2 \leqslant 3a_1 + 2b_1 \leqslant 3a_2 + 2b_2 + 2.$$

Лемма 6.5. *Если функция g достигает максимума в точке (a_1, a_2, b_1, b_2), то выполняется*

$$|3a_1 + 2b_1 - (3a_2 + 2b_2)| \leqslant 2. \tag{6.5}$$

Лемма 6.6. *Если $n \geqslant c$, то*

$$a_1 + 3a_2 + 2b_1 + 2b_2 \geqslant \frac{2}{3}(c - 2).$$

Доказательство. Очевидно, что

$$3a_1 + 3a_2 + 2b_1 + 2b_2 = \frac{3}{2}(2a_1 + 2a_2) + \frac{2}{3}(3b_1 + 3b_2).$$

Поскольку $n - 2 = 2a_1 + 2a_2 + 3b_1 + 3b_2$, получаем, что

$$\frac{3}{2}(2a_1 + 2a_2) + \frac{2}{3}(3b_1 + 3b_2) \geqslant \frac{2}{3}(n - 2) \geqslant \frac{2}{3}(c - 2).$$

Лемма доказана.

Лемма 6.7. *Если $n \geqslant 122$, $a_1 \geqslant 2$, $a_2 \geqslant 1$ и выполняется (6.5), то*

$$g(a_1 - 2, a_2 - 1, b_1 + 1, b_2 + 1) > g(a_1, a_2, b_1, b_2).$$

Доказательство. Нетрудно проверить, что

$$\frac{g(a_1 - 2, a_2 - 1, b_1 + 1, b_2 + 1) - g(a_1, a_2, b_1, b_2)}{2^{a_1 + a_2 - 5}\, 3^{b_1 + b_2 - 2}} = (3a_1 + 2b_1 - 3)(3a_2 + 2b_2 - 30) - 252.$$

По лемме 6.6 имеем $(3a_1 + 2b_1) + (3a_2 + 2b_2) \geqslant 80$. Тогда из неравенства (6.5) следует, что $(3a_1 + 2b_1) \geqslant 39$, $(3a_2 + 2b_2) \geqslant 38$. Таким образом, верно неравенство $(3a_1 + 2b_1 - 3)(3a_2 + 2b_2 - 30) \geqslant 280$. Лемма доказана.

Лемма 6.8. *Если $n \geqslant 137$, $a_1 \geqslant 3$ и выполняется (6.5), то*

$$g(a_1 - 3, 0, b_1 + 1, b_2 + 1) > g(a_1, 0, b_1, b_2).$$

Доказательство. Нетрудно проверить, что

$$\frac{g(a_1 - 3, 0, b_1 + 1, b_2 + 1) - g(a_1, 0, b_1, b_2)}{2^{a_1 - 5}\, 3^{b_1 + b_2 - 2}} = (3a_1 + 2b_1 - 57)(2b_2 + 24) + 1044.$$

По лемме 6.6 имеем $(3a_1 + 2b_1) + 2b_2 \geqslant 90$. Тогда из неравенства (6.5) следует, что $(3a_1 + 2b_1 - 57) \geqslant -14$. Тогда $(3a_1 + 2b_1 - 57)(2b_2 + 24) \geqslant -994$. Лемма доказана.

§ 7. Доказательство теоремы 3.1

Предположим, что максимальное дерево не содержит центральных листьев и $a_1 \geqslant a_2$. Тогда из лемм 6.7 и 6.8 следует, что $(a_1, a_2) \in \{(0,0), (1,0), (1,1), (2,0)\}$ и поэтому $c_1 \in \{0,1,2\}$. Из неравенства (6.5) получаем, что если $c_1 = 0$, то $c_2 \in \{0,1\}$, если $c_1 = 1$, то $c_2 \in \{1,2\}$, если $c_1 = 2$, то $c_2 \in \{2,3,4\}$. Пусть $n = 6k + r$, где $r \in \{0,1,2,3,4,5\}$, тогда $2a_1 + 2a_2 + 3b_1 + 3b_2 = 6k + r - 2$.

Если $r = 0$, то в силу целочисленности параметров b_1 и b_2 либо $a_1 = a_2 = 1$, тогда $b_1 = b_2 = k - 1$, либо $a_1 = 2$, $a_2 = 0$, тогда по лемме 6.3 либо $b_1 = k - 2$, $b_2 = k$, либо $b_1 = k - 3$, $b_2 = k + 1$. Несложно проверить, что

$$g(2,0,k-2,k) = g(2,0,k-3,k+1) = 3^{2k-4}\big((2k+8)(2k+6)+36\big),$$
$$g(1,1,k-2,k) = 3^{2k-4}((2k+7)^2+36).$$

Очевидно, что

$$g(1,1,k-2,k) > g(2,0,k-2,k) = g(2,0,k-3,k+1).$$

Если $r = 1$, то в силу целочисленности параметров b_1 и b_2 получим, что $a_1 = 1$, $a_2 = 0$, тогда по лемме 6.3 $b_1 = k - 1$, $b_2 = k$.

Если $r = 2$, то в силу целочисленности параметров b_1 и b_2 получим, что $a_1 = a_2 = 0$, тогда $b_1 = b_2 = k$. Если $r = 3$, то в силу целочисленности параметров b_1 и b_2 либо $a_1 = a_2 = 1$, тогда $b_1 = b_2 = k - 1$, либо $a_1 = 2$, $a_2 = 0$, тогда по лемме 6.3 выполнено $b_1 = k - 2$, $b_2 = k + 1$. Несложно проверить, что

$$g(2,0,k-2,k+1) = 3^{2k-4}((2k+8)^2+36),$$
$$g(1,1,k-2,k) = 3^{2k-4}\big((2k+7)(2k+9)+36\big).$$

Откуда следует, что

$$g(2,0,k-2,k+1) > g(1,1,k-2,k).$$

Если $r = 4$, то в силу целочисленности параметров b_1 и b_2 получим, что $a_1 = 1$, $a_2 = 0$, тогда по лемме 6.3 имеем $b_1 = k - 1$, $b_2 = k + 1$.

Если $r = 5$, то в силу целочисленности параметров b_1 и b_2 получим, что $a_1 = a_2 = 0$, тогда по лемме 6.3 имеем $b_1 = k$, $b_2 = k + 1$.

Из леммы 6.1 и доказанного выше следует результат теоремы для $r \in \{0,2,4\}$. В случае $r \in \{1,3,5\}$ по лемме 6.1 максимальное дерево может содержать единственный центральный лист, поэтому сравним соответствующие максимальные значения функций g. Напомним, что по лемме 6.2 выполнено

$$g(a_1,a_2) \leqslant 2^{(n-15)/2}(n^2+18n+145).$$

Если $r = 1$, то по доказанному выше максимальное значение функции g

$$g(1,0,k-1,k) = \frac{1}{2}\,3^{(n-16)/3}(n^2+37n+664).$$

Если $r = 3$, то по доказанному выше максимальное значение функции g

$$g(2,0,k-2,k) = 3^{(n-21)/3}(n^2+36n+621).$$

Если $r = 5$, то по доказанному выше максимальное значение функции g

$$g(0,0,k,k+1) = \frac{1}{4}\,3^{(n-14)/3}(n^2+32n+521).$$

Нетрудно проверить, что уже при $n \geqslant 127$

$$g_l(a_1,a_2) < g(1,0,k-1,k), g(2,0,k-2,k), g(0,0,k,k+1).$$

Тем самым теорема доказана для $n \geqslant 137$. Проведя компьютерные вычисления, несложно убедится, что данная теорема выполняется уже при $n \geqslant 105$. Теорема доказана.

Список литературы

[1] H. Hosoya, “Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons”, *Bull. Chem. Soc. Japan*, **44**:9 (1971), 2332–2339.

[2] H. Hosoya, “The topological index Z before and after 1971”, *Internet Electron. J. Mol. Des.*, **1**:9 (2002), 428–442.

[3] H. Hosoya, “Important mathematical structures of the topological index Z for tree graphs”, *J. Chem. Inf. Model.*, **47**:3 (2007), 744–750.

[4] H. Hosoya, “Mathematical meaning and importance of the topological index Z”, *Croat. Chem. Acta*, **80**:2 (2007), 239–249.

[5] Н. А. Кузьмин, “О деревьях радиуса 2 с максимальным количеством паросочетаний”, *Журнал СВМО*, **22**:2 (2020), 177–187.

[6] Н. А. Кузьмин, Д. С. Малышев, “Новое доказательство результата о полном описании $(n,n+2)$-графов с максимальным значением индекса Хосойи”, *Матем. заметки*, **111**:2 (2022), 258–276; англ. пер.: N. A. Kuz’min, D. S. Malyshev, “A new proof of a result concerning a complete description of $(n,n+2)$-graphs with maximum value of the Hosoya index”, *Math. Notes*, **111**:2 (2022), 258–272.

Никита Александрович Кузьмин
(Nikita A. Kuz’min)
Национальный исследовательский университет
“Высшая школа экономики”, г. Нижний Новгород
E-mail: nikita.kuz2000@gmail.com

Поступила в редакцию
05.03.2022

Дмитрий Сергеевич Малышев
(Dmitriy S. Malyshev)
Национальный исследовательский университет
“Высшая школа экономики”, г. Нижний Новгород
E-mail: dsmalyshev@rambler.ru