



УДК 519.17

## О 5- и 6-листных деревьях, имеющих наибольшее количество паросочетаний

Н. А. Кузьмин, Д. С. Малышев

Паросочетанием графа называется любое множество его ребер, попарно не имеющих общих вершин. Важным параметром графов, находящим свое применение в математической химии, является индекс Хосойи, определяемый как количество их паросочетаний. Ранее рассматривались и были полностью решены задачи максимизации этого индекса для  $n$ -вершинных деревьев с двумя, тремя, четырьмя листьями при любом достаточно большом  $n$ . В этой работе полностью решается аналогичная задача для 5-листных деревьев при  $n \geq 20$  и для 6-листных деревьев при  $n \geq 26$ .

Библиография: 19 названий.

**Ключевые слова:** экстремальная комбинаторика,  $z$ -индекс, дерево, лист.

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm13940>

**1. Введение.** Химические соединения принято рассматривать 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 ряд аспектов химической структуры вещества. Например, значение *индекса Винера*, который определяется как сумма длин кратчайших путей между всеми парами вершин заданного графа, связано с точками кипения парафинов [1].

В данной работе, если явным образом не оговаривается противное, рассматриваются только *обыкновенные* графы, т.е. неориентированные, непомяченные графы без петель и кратных ребер. *Паросочетанием* графа называется произвольное множество попарно несмежных его ребер. *Индекс Хосойи*, называемый еще  *$z$ -индексом*, предложенный в работе [2] японским химиком Харуо Хосойей, определяется как количество его паросочетаний, включая и пустое. Для графа  $G$  значение этого индекса будем обозначать через  $z(G)$ .

Значения индекса Хосойи определяют некоторые физико-химические свойства соответствующих химических соединений, в частности, точки кипения алканов,

---

Работа выполнена в Санкт-Петербургском международном математическом институте имени Леонарда Эйлера при финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение № 075-15-2022-287).

энергию сопряженных  $\pi$ -электронных систем, см., например, обзоры [3]–[6]. 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 индекса.

По всей видимости, исторически первый результат о максимизации индекса Хосойи в классах графов был получен И. Гутманом в работе [7]. Именно там было показано, что среди ациклических полиэнов максимальное значение  $z$ -индекса имеет линейный изомер. В графовых терминах это можно переформулировать (и несколько обобщить) так: для любого  $n$  в классе  $n$ -вершинных *деревьев*, т.е. связных ациклических графов, единственным максимальным графом является  $n$ -путь. Путь на  $n$  вершинах называется  $n$ -*путем*, который обозначается через  $P_n$ .

Структура оптимального дерева мотивировала исследователей варьировать ассоциированные с ним ограниченные параметры (количество листьев, максимальную степень, наличие совершенного паросочетания и т.д.), выявлять соответствующие максимальные деревья и находить значение  $z$ -индекса на них. Значительный интерес также вызывают аналогичные постановки задач для недревесных случаев. Отметим некоторые работы [7]–[19] в этой области.

В той же работе [7] было доказано, что для любого  $n \geq 6$  в классе  $n$ -вершинных деревьев предмаксимальный граф единственен и получается соединением ребрами листа  $(n - 4)$ -пути с концевыми вершинами двух 2-путей. Вершина степени один графа называется *листом* или *висячей вершиной*. Данный граф имеет три листа и поэтому является максимальным элементом класса  $n$ -вершинных деревьев с тремя листьями. Случай  $n$ -вершинных деревьев с четырьмя листьями рассматривался в работе [12]. Оказалось, что для любого  $n \geq 11$  максимальное дерево не единственно. Первое получается соединением ребрами каждой висячей вершины  $(n - 8)$ -пути с двумя 2-путями. А второе получается присоединением ребрами 2-пути к первой и  $(n - 8)$ -пути ко второй центральным вершинам 6-пути.

Данная работа является продолжением работ [7] и [12]. А именно, в ней рассматривается и решается задача максимизации  $z$ -индекса в 5- и 6-листных  $n$ -вершинных деревьях. Оказалось, что для любого  $n \geq 20$  имеется ровно три максимальных 5-листных  $n$ -вершинных дерева и что для любого  $n \geq 26$  имеется ровно шесть максимальных 6-листных  $n$ -вершинных деревьев.

**2. Некоторые определения, обозначения и факты.** Граф  $H$  называется *подграфом* графа  $G$ , если  $H$  получается из  $G$  удалением вершин и ребер, где операция удаления вершины подразумевает удаление всех инцидентных ей ребер. Граф  $H$  называется *порожденным подграфом* графа  $G$ , если  $H$  получается из  $G$  только удалениями вершин.

Для графа  $G$  и его подмножества  $V' \subseteq V(G)$  через  $G \setminus V'$  обозначается результат удаления из  $G$  всех вершин подмножества  $V'$ . Степень вершины  $v$  графа  $G$  обозначается через  $\deg_G(v)$ .

Изоморфизм графов  $G_1$  и  $G_2$  обозначается через  $G_1 \cong G_2$ . Для любых графов  $G_1$  и  $G_2$  с непересекающимися множествами вершин выполнено  $z(G_1 + G_2) = z(G_1) \cdot z(G_2)$ , где  $G_1 + G_2$  – дизъюнктивное объединение  $G_1$  и  $G_2$ .

Пусть  $G$  – граф, а  $e$  – некоторое его ребро. Равенство

$$z(G) = z_+(G, e) + z_-(G, e),$$

где  $z_+(G, e)$  и  $z_-(G, e)$  – количества паросочетаний  $G$ , содержащих и не содержащих  $e$  соответственно, будем называть *разложением  $z(G)$  по ребру  $e$* . Например, воспользовавшись этим разложением, нетрудно установить, что при любом  $i$  индекс Хосойи  $i$ -пути равен  $F_{i+1}$ , где

$$F_0 = 0, \quad F_1 = F_2 = 1, \quad F_i = F_{i-1} + F_{i-2}, \quad i \geq 3$$
 – последовательность чисел,

известная как последовательность Фибоначчи. Важным свойством чисел Фибоначчи, которое мы будем использовать в данной работе, является следующее тождество:

$$F_{n+m} = F_{n+1} \cdot F_m + F_n \cdot F_{m-1}, \quad n \geq 0, \quad m \geq 1.$$

Оно имеет простое комбинаторное обоснование. С одной стороны,  $z$ -индекс  $(n + m - 1)$ -пути равен  $F_{n+m}$ . С другой стороны, разложив его по  $n$ -му ребру данного пути, получаем  $F_{n+1} \cdot F_m + F_n \cdot F_{m-1}$ .

В работе [18] был предложен новый метод поиска графов из заданных классов, имеющих максимальное значение  $z$ -индекса, основанный на специальных локальных преобразованиях. Далее мы представим описание этого метода.

Пусть  $G$  – некоторый граф,  $A$  и  $B$  – некоторые непересекающиеся подмножества его вершин. Через  $z(G, A, B)$  обозначается количество паросочетаний графа  $G$ , покрывающих все вершины из  $A$  и не покрывающих ни одной вершины из  $B$ .

Пусть  $H$  – подграф графа  $G$ . 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  $((V(G) \setminus V(H)) \cup S, E(G) \setminus E(H))$ . Следующее утверждение является леммой 1 из работы [18].

ЛЕММА 1. *Справедливо равенство*

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

Предположим, что  $G_S$  состоит из двух компонент связности  $G_S^1$  и  $G_S^2$ . Положим  $S_1 = V(G_S^1) \cap S$ ,  $S_2 = V(G_S^2) \cap S$ . Тогда для любого  $S' \subseteq S$  справедливо

$$z(G_S, S', S \setminus S') = z(G_S^1, S_1 \cap S', S_1 \setminus S') \cdot z(G_S^2, S_2 \cap S', S_2 \setminus S'),$$

откуда получаем

$$z(G) = \sum_{S' \subseteq S} z(G_S^1, S_1 \cap S', S_1 \setminus S') \cdot z(G_S^2, S_2 \cap S', S_2 \setminus S') \cdot z(H \setminus S').$$

Пусть  $G^{(0)}$  – некоторый граф, а  $G^{(k)}$  – результат *операции  $k$ -подразбиения* некоторого его ребра. Данная операция состоит в удалении ребра  $ab$  из графа, добавления вершин  $c_1, \dots, c_k$ , а также добавления ребер  $ac_1, c_1c_2, \dots, c_{k-1}c_k, c_kb$ . Равенство  $z(G^{(k)}) = z(G^{(k-1)}) + z(G^{(k-2)})$ , верное при каждом  $k \geq 2$ , является следствием из леммы 1, см. работу [18].

Предположим, что графы  $G^1$  и  $G^2$  содержат подграфы  $H_1$  и  $H_2$ , соответственно, причем некоторое подмножество  $S \subseteq V(G^1) \cap V(G^2)$  одновременно является и

$H_1$ -отделяющим и  $H_2$ -отделяющим, а также  $G_S^1$  и  $G_S^2$  изоморфны. Тогда по лемме 1 выполнено

$$z(G^2) - z(G^1) = \sum_{S' \subseteq S} z(G_S^1, S', S \setminus S') \cdot \Delta(S'),$$

где  $\Delta(S') = z(H' \setminus S') - z(H \setminus S')$ . Если для любого подмножества  $S' \subseteq S$  справедливо  $\Delta(S') \geq 0$ , причем для некоторого  $\tilde{S}' \subseteq S$  выполнено

$$\Delta(\tilde{S}') > 0, \quad z(G_S^1, \tilde{S}', S \setminus \tilde{S}') \neq 0,$$

то  $z(G^2) > z(G^1)$ .

Это замечание оказывается полезным для доказательства того факта, что то или иное конкретное преобразование графов увеличивает  $z$ -индекс. В этой работе мы предлагаем несколько новых локальных преобразований, которые увеличивают индекс Хосойи, а также сохраняют количества вершин и листьев графа.

**3. Стяжки деревьев с 5 или 6 листьями.** *Псевдограф* (т.е. допускаются петли и кратные ребра)  $G'$  называется *стяжкой* обыкновенного графа  $G$ , если  $G$  получается подразбиениями ребер  $G'$  и  $G'$  содержит минимальное количество вершин. Ясно, что стяжка любого обыкновенного графа существует и единственна. Также понятно, что для каждого связного графа  $G$ , отличного от простого цикла, имеем

$$V(G') = \{v \in V(G) : \deg_G(v) \neq 2\}, \quad \forall v \in V(G') \quad [\deg_{G'}(v) = \deg_G(v)].$$

Нетрудно перебрать всевозможные стяжки деревьев с 5 или с 6 листьями. Они изображены на рис. 1 и 2.

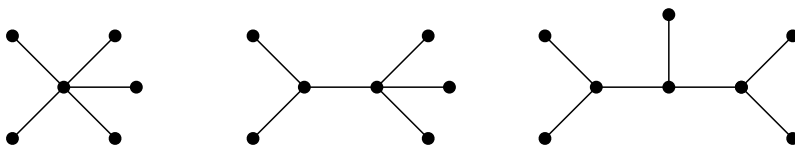


Рис. 1. Всевозможные стяжки деревьев с 5 листьями.

Тем самым, каждое дерево с 5 или с 6 листьями получается подразбиениями некоторых ребер деревьев, изображенных на рис. 1 и 2.

**4. Формулировка основного результата.** Пусть  $a_i, b_j, c_k$  – натуральные числа, причем выполнено

$$\sum_{i=1}^7 a_i - 1 = \sum_{j=1}^9 b_j - 2 = \sum_{k=1}^9 c_k - 2 = n.$$

Через  $T_5(a_1, \dots, a_7)$ ,  $T_6^1(b_1, \dots, b_9)$  и  $T_6^2(c_1, \dots, c_9)$  обозначим деревья, изображенные на рис. 3 и 4 соответственно.

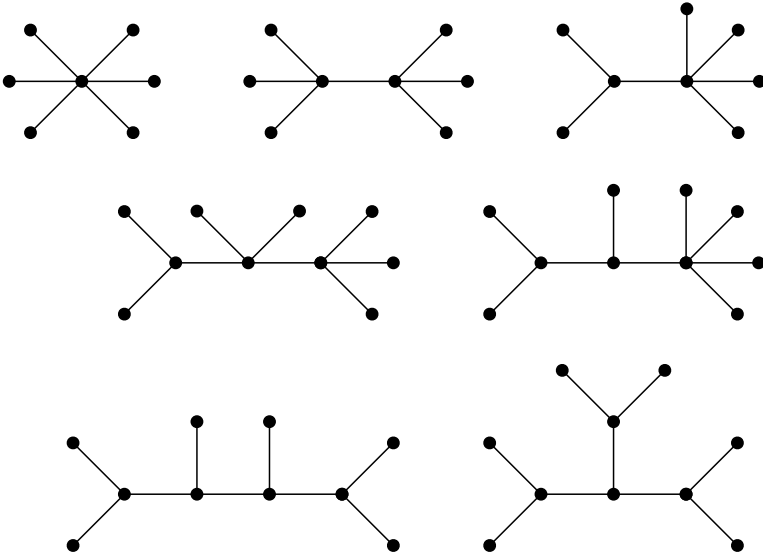


Рис. 2. Всевозможные стяжки деревьев с 6 листьями.

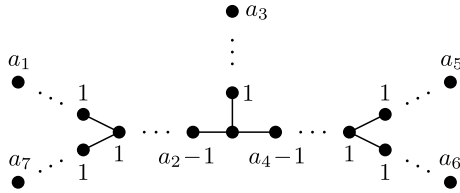


Рис. 3. Дерево  $T_5(a_1, \dots, a_7)$ .

Справедливо следующее утверждение, которое является основным в данной работе.

**ТЕОРЕМА 1.** Для любого  $n \geq 20$  множество максимальных 5-листных деревьев состоит из следующих трех деревьев:

$$T_5(n - 11, 2, \dots, 2), \quad T_5(2, n - 11, 2, \dots, 2), \quad T_5(2, 2, n - 11, 2, \dots, 2).$$

Для любого  $n \geq 26$  множество максимальных 6-листных деревьев образовано двумя деревьями  $T_6^1(n - 14, 2, \dots, 2)$  и  $T_6^1(2, n - 14, 2, \dots, 2)$ , а также следующими четырьмя деревьями:

$$\begin{aligned} T_6^2(n - 14, 2, \dots, 2), & \quad T_6^2(2, n - 14, 2, \dots, 2), \\ T_6^2(2, 2, n - 14, 2, \dots, 2), & \quad T_6^2(2, 2, 2, n - 14, 2, \dots, 2). \end{aligned}$$

**5. Преобразования графов, увеличивающие  $z$ -индекс.** Пусть  $k = p + q + 1 \geq 4$ , где  $p, q \geq 1$  – натуральные числа. Предположим, что графы  $G_1$  и  $G_2$  состоят из подграфа  $G_S$  и отделенного от него вершиной  $s_1$  порожденного подграфа  $P_k$  так, как показано на рис. 5. Преобразование I переводит  $G_1$  в  $G_2$ .

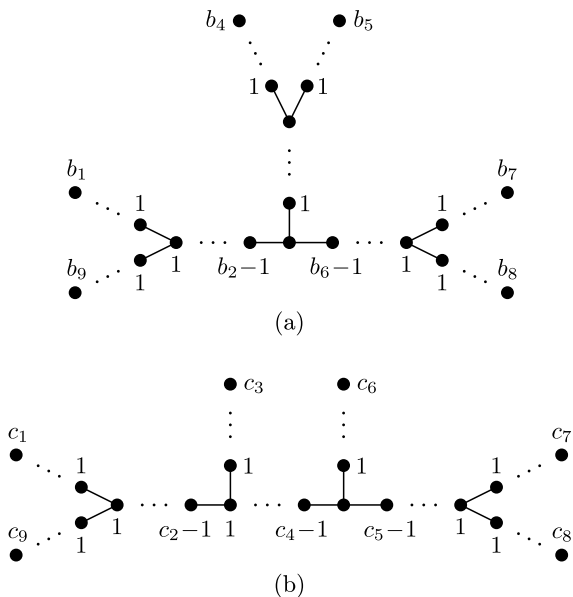


Рис. 4. Деревья  $T_6^1(b_1, \dots, b_9)$  и  $T_6^2(c_1, \dots, c_9)$ .

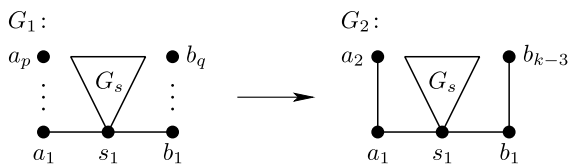


Рис. 5. Преобразование I.

Преобразование I было предложено в работе [12], где также было доказано следующее утверждение.

ЛЕММА 2. Если  $p \neq 2, q \neq 2$  и  $\deg_{G_S}(s_1) \neq 0$ , то  $z(G_2) > z(G_1)$ .

Пусть  $k = t + p + q \geq 7$ , где  $t \geq 3$  и  $p, q \geq 1$  – натуральные числа. Преобразование II переводит граф  $G_1$  в граф  $G_2$ , где графы  $G_1$  и  $G_2$  состоят из подграфов  $G'_S$  и  $G''_S$ , где  $V(G'_S) \cap V(G''_S) = \emptyset$ , и отделенного от них вершинами  $s_1$  и  $s_2$  порожденного подграфа  $P_k$  так, как показано на рис. 6.

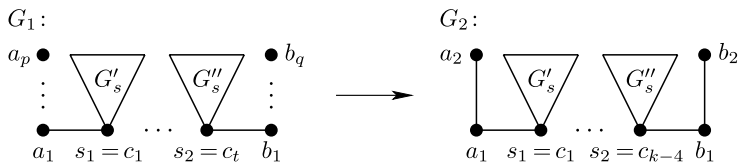


Рис. 6. Преобразование II.

ЛЕММА 3. Если  $(p, q) \neq (2, 2)$ ,  $\deg_{G'_S}(s_1) \neq 0$ ,  $\deg_{G''_S}(s_2) \neq 0$ , то  $z(G_2) > z(G_1)$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Нетрудно проверить, что  $\Delta(\emptyset) = 0$ ,

$$\begin{aligned} \Delta(\{s_1\}) &= F_3 \cdot F_{k-2} - F_{p+1} \cdot F_{k-p} = 2F_{k-2} - F_k + F_p \cdot F_{k-p-1} \\ &= F_p \cdot F_{k-p-1} - F_{k-3} = F_p \cdot F_{k-p-1} - (F_p \cdot F_{k-p-2} + F_{p-1} \cdot F_{k-p-3}) \\ &= (F_p - F_{p-1}) \cdot F_{k-p-3} \geq 0, \end{aligned}$$

$$\Delta(\{s_2\}) = F_3 \cdot F_{k-2} - F_{q+1} \cdot F_{k-q} = (F_q - F_{q-1}) \cdot F_{k-q-3} \geq 0,$$

$$\begin{aligned} \Delta(\{s_1, s_2\}) &= F_3 \cdot F_3 \cdot F_{k-5} - F_{q+1} \cdot F_{p+1} \cdot F_{t-1} = 4F_{k-5} - (F_{p+q+1} - F_p \cdot F_q) \cdot F_{t-1} \\ &= 4F_{k-4} - F_{k-1} + F_p \cdot F_q \cdot F_{t-1} + F_{p+q} \cdot F_{t-2} \\ &= -F_{k-7} + F_p \cdot F_q \cdot F_{t-1} + F_{p+q} \cdot F_{t-2} \\ &= F_{k-4} + F_{k-6} + F_p \cdot F_q \cdot F_{t-1} - F_{k-t-1} \cdot F_{t-3} \\ &= F_{k-4} + F_{k-6} + F_p \cdot F_q > 0 \quad (t = 3) \\ &\quad \vee 2F_{k-6} + F_p \cdot F_q \cdot F_{t-1} + F_{k-t-2} \cdot F_{t-4} > 0 \quad (t \geq 4). \end{aligned}$$

Если  $\Delta(\{s_1\}) = \Delta(\{s_2\}) = 0$ , то  $p = q = 2$ , что невозможно по условию леммы. Так как  $\deg_{G'_S}(s_1) \neq 0$ ,  $\deg_{G''_S}(s_2) \neq 0$ , то

$$z(G'_S, \{s_1\}, \emptyset) \neq 0, \quad z(G''_S, \{s_2\}, \emptyset) \neq 0.$$

Поэтому либо  $\Delta(\{s_1\}) > 0$ , либо  $\Delta(\{s_2\}) > 0$ , что по следствию из леммы 1 означает, что  $z(G_2) > z(G_1)$ . Лемма доказана.

Пусть  $k = p + q + 2 \geq 5$ , где  $p$  и  $q$  – натуральные числа. Преобразование III переводит граф  $G_1$  в граф  $G_2$ , где графы  $G_1$  и  $G_2$  состоят из подграфов  $G'_S$  и  $G''_S$ , где  $V(G'_S) \cap V(G''_S) = \emptyset$ , и отделенного от них вершинами  $s_1$  и  $s_2$  порожденного подграфа  $P_k$  так, как показано на рис. 7.

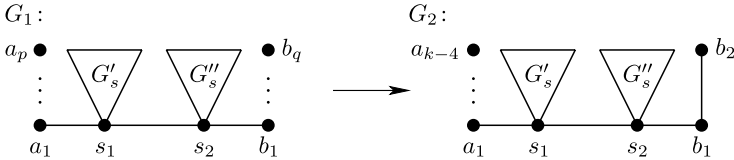


Рис. 7. Преобразование III.

Будем предполагать, что  $\deg_{G'_S}(s_1) \neq 0$ ,  $\deg_{G''_S}(s_2) \neq 0$ . Если

$$z(G'_S, \{s_1\}, \emptyset) \cdot z(G''_S, \emptyset, \{s_2\}) > z(G'_S, \emptyset, \{s_1\}) \cdot z(G''_S, \{s_2\}, \emptyset),$$

то включим в преобразование III еще и перестановку местами подграфов  $G'_S$  и  $G''_S$ . Поэтому далее будем считать, что

$$z(G'_S, \emptyset, \{s_1\}) \cdot z(G''_S, \{s_2\}, \emptyset) \geq z(G'_S, \{s_1\}, \emptyset) \cdot z(G''_S, \emptyset, \{s_2\}) > 0.$$

ЛЕММА 4. Если  $p \notin \{1, 2\}$ ,  $q \neq 2$ , то  $z(G') > z(G)$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Очевидно, что  $\Delta(\emptyset) = 0$ ,

$$\begin{aligned} \Delta(\{s_1\}) &= 3F_{p+q-1} - F_{p+1} \cdot F_{q+2} = 3F_{p+q-1} - F_{p+q+2} + F_p \cdot F_{q+1} \\ &= F_p \cdot F_{q+1} - 2F_{p+q-2} \\ &= -F_{p-3} \quad (q = 1) \vee F_p \cdot F_{q+1} - 2(F_p \cdot F_{q-1} + F_{p-1} \cdot F_{q-2}) \\ &= -F_{p-3} \cdot F_{q-2} \quad (q \geq 3), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta(\{s_2\}) &= 2F_{p+q} - F_{p+2} \cdot F_{q+1} = 2(F_p \cdot F_{q+1} + F_{p-1} \cdot F_q) - F_{p+2} \cdot F_{q+1} \\ &= F_{p-1} \cdot (F_q - F_{q-1}), \end{aligned}$$

$$\Delta(\{s_1, s_2\}) = 2F_{(p-1)+q} - F_{p+1}F_{q+1} = F_{p-2} > 0 \quad (q = 1) \vee F_{p-2} \cdot F_{q-2} > 0 \quad (q \geq 3).$$

Заметим, что

$$\Delta(\{s_1\}) + \Delta(\{s_2\}) = F_{p-2} > 0 \quad (q = 1) \vee F_{p-2} \cdot F_{q-2} > 0 \quad (q \geq 3).$$

Тогда из леммы 1 следует, что

$$z(G_2) - z(G_1) \geq F_{p-2} \cdot F_{q-2} \cdot z(G'_S, \{s_1\}, \emptyset) \cdot z(G''_S, \emptyset, \{s_2\}) > 0.$$

Лемма доказана.

Пусть  $q, p, d, t \geq 1$  – натуральные числа и граф  $G_1$  состоит из подграфов  $G'_S, G''_S, G'''_S$  и отделенного от них вершинами  $s_1, s_2$  и  $s_3$  подграфа  $H$  так, как показано на рис. 8. Преобразование IV переводит граф  $G_1$  в граф  $G_2$ , удаляя ребро  $b_1s_3$  и добавляя ребро  $b_1a_1$  (см. рис. 8). При этом подграф  $H$  переходит в подграф  $H'$ . Будем предполагать, что  $q \geq 2$ , если  $\deg_{G'_S}(s_1) \neq 0$ .

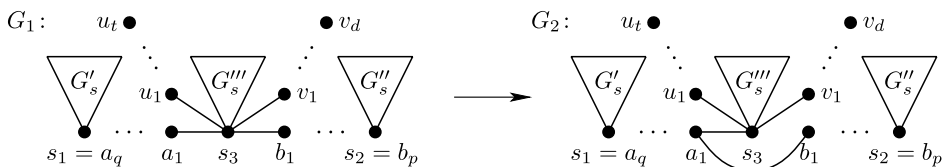


Рис. 8. Преобразование IV.

ЛЕММА 5. *Выполнено неравенство  $z(G_2) \geq z(G_1)$ , причем равенство достигается тогда и только тогда, когда  $q = t = d = 2, G'_S \cong G'''_S \cong P_1$ .*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Выполнив разложение  $z$ -индексов подграфов  $H$  и  $H'$  по ребру  $s_3a_1$ , получим что

$$\begin{aligned} z(H) &= F_{q+1} \cdot (F_{p+d+t+2} - F_p \cdot F_d \cdot F_t) + F_q \cdot F_{p+1} \cdot F_{d+1} \cdot F_{t+1}, \\ z(H') &= F_{q+p+1} \cdot F_{d+t+2} + F_q \cdot F_{p+1} \cdot F_{d+1} \cdot F_{t+1}. \end{aligned}$$

Поэтому

$$\Delta(\emptyset) = F_p \cdot F_q \cdot (F_{t+d} + F_t \cdot F_d) - F_p \cdot F_{q-1} \cdot (F_{t+d} + F_{t-1} \cdot F_{d-1}) \geq 0.$$



Откуда очевидно следует

$$\begin{aligned} \Delta(\{s_1\}) &= F_p \cdot F_{q-1} \cdot (F_{t+d} + F_t \cdot F_d) - F_p \cdot F_{q-2} \cdot (F_{t+d} + F_{t-1} \cdot F_{d-1}) \geq 0, \\ \Delta(\{s_2\}) &= F_{p-1} \cdot F_q \cdot (F_{t+d} + F_t \cdot F_d) - F_{p-1} \cdot F_{q-1} \cdot (F_{t+d} + F_{t-1} \cdot F_{d-1}) \geq 0, \\ \Delta(\{s_1, s_2\}) &= F_{p-1} \cdot F_{q-1} \cdot (F_{t+d} + F_t \cdot F_d) - F_{p-1} \cdot F_{q-2} \cdot (F_{t+d} + F_{t-1} \cdot F_{d-1}) \geq 0. \end{aligned}$$

Несложно проверить, что

$$\Delta(\emptyset) = 0 \iff q = t = d = 2, \quad \Delta(\{s_1\})|_{q=t=d=2} = 4F_p, \quad \Delta(\{s_2\})|_{q=t=d=2} = 0.$$

Имеем

$$\Delta(\{s_3\}) = F_{p+q+1} \cdot F_{t+1} \cdot F_{d+1} - F_{p+1} \cdot F_{q+1} \cdot F_{t+1} \cdot F_{d+1}.$$

Откуда получим

$$\begin{aligned} \Delta(\{s_3\}) &= F_p \cdot F_q \cdot F_{t+1} \cdot F_{d+1} > 0, & \Delta(\{s_1, s_3\}) &= F_p \cdot F_{q-1} \cdot F_{t+1} \cdot F_{d+1} > 0, \\ \Delta(\{s_2, s_3\}) &= F_{p-1} \cdot F_q \cdot F_{t+1} \cdot F_{d+1} \geq 0, \\ \Delta(\{s_1, s_2, s_3\}) &= F_{p-1} \cdot F_{q-1} \cdot F_{t+1} \cdot F_{d+1} \geq 0. \end{aligned}$$

Из наших рассуждений и леммы 1 следует справедливость данной леммы. Лемма доказана.

**6. Доказательство теоремы 1.** Для доказательства теоремы 1 нам понадобится следующее утверждение.

**ЛЕММА 6.** *Для любого  $n \geq 20$  среди  $n$ -вершинных деревьев вида  $T_5(a_1, \dots, a_7)$  наибольшее значение индекса Хосойи достигается при значениях параметров*

$$\exists i^* \in \{1, 2, 3\} \quad a_{i^*} = n - 11, \quad \forall i \neq i^* \quad a_i = 2.$$

*Для любого  $n \geq 26$  наибольшие значения индекса Хосойи среди  $n$ -вершинных деревьев вида  $T_6^1(b_1, \dots, b_9)$  и  $T_6^2(c_1, \dots, c_9)$  одинаковы и достигаются при значениях параметров*

$$\begin{aligned} \exists j^* \in \{1, 2\}, \quad \exists k^* \in \{1, 2, 3, 4\} \quad b_{j^*} = c_{k^*} = n - 14, \\ \forall j \neq j^*, \quad \forall k \neq k^* \quad b_j = c_k = 2. \end{aligned}$$

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.** Рассмотрим деревья вида  $T_5(a_1, \dots, a_7)$ . Из соображений симметрии можно считать, что

$$a_1 \geq a_7, \quad a_2 \geq a_4, \quad a_5 \geq a_6.$$

Из леммы 2 следует, что  $a_6, a_7 \in \{1, 2\}$ . Из лемм 3 и 4 следует, что одновременно выполнены следующие утверждения:

$$\begin{aligned} a_2 \geq 3, \quad (a_1, a_3) \neq (2, 2) &\implies a_1 + a_2 + a_3 \leq 6, \\ a_2 \geq 3, \quad (a_3, a_7) \neq (2, 2) &\implies a_2 + a_3 + a_7 \leq 6, \\ a_4 \geq 3, \quad (a_3, a_5) \neq (2, 2) &\implies a_3 + a_4 + a_5 \leq 6, \\ a_4 \geq 3, \quad (a_3, a_6) \neq (2, 2) &\implies a_3 + a_4 + a_6 \leq 6, \\ a_2 = 2 &\implies a_3 = 1, \quad \max(a_1, a_7) \leq 2 \vee a_3 = 2 \vee a_3 \geq 3, \quad a_1 = a_7 = 2, \\ a_4 = 2 &\implies a_3 = 1, \quad \max(a_5, a_6) \leq 2 \vee a_3 = 2 \vee a_3 \geq 3, \quad a_5 = a_6 = 2. \end{aligned}$$

Ясно, что при  $a_3 \geq 3$  выполнено

$$a_1 = a_2 = a_4 = a_5 = a_6 = a_7 = 2.$$

Также ясно, что при  $n \geq 15$  имеем  $a_3 = 2$ . Для  $n = 20$  и  $n = 21$  были проведены вычислительные эксперименты, показавшие следующие результаты.

Таблица 1. Результаты вычислительных экспериментов для 5-листных деревьев вида  $T_5(a_1, \dots, a_7)$ .

$a_3$	$a_1$	$a_7$	$a_2$	$a_4$	$a_5$	$a_6$	z-индекс	
							$n = 20$	$n = 21$
$n - 11$	2	2	2	2	2	2	9216	14912
2	$n - 9$	2	2	2	1	1	8438	13653
2	$n - 10$	2	2	2	2	1	8943	14470
2	$n - 11$	2	2	2	2	2	9216	14912
2	$n - 12$	2	2	2	3	2	9112	14743
2	$n - 13$	2	2	2	4	2	9151	14808
2	$n - 14$	2	2	2	5	2	9138	14782
2	$n - 15$	2	2	2	6	2	9138	14795
2	1	1	3	2	$n - 10$	2	8210	13284
2	2	1	3	2	$n - 11$	2	8763	14179
2	2	2	3	2	$n - 12$	2	9120	14756
2	2	2	4	2	$n - 13$	2	9156	14816
2	2	2	5	2	$n - 14$	2	9144	14792
2	2	2	6	2	$n - 15$	2	9144	14804
2	2	2	7	2	$n - 16$	2	9156	14792
2	2	2	8	2	$n - 17$	2	9120	14816
2	2	2	9	2	$n - 18$	2	9216	14756
2	2	2	10	2	2	1	8964	—
2	2	2	10	2	2	2	—	14912
2	2	2	11	2	1	1	8472	—
2	2	2	$n - 10$	3	1	1	8168	13216
2	2	2	$n - 11$	3	2	1	8724	14116
2	2	2	$n - 12$	3	2	2	9088	14704
2	2	2	$n - 13$	4	2	2	9136	14784
2	2	2	$n - 14$	5	2	2	9120	14752
2	2	2	$n - 15$	6	2	2	9120	14768

Для  $n = 20$  и  $n = 21$  утверждение первого пункта настоящей леммы выполняется. Это является базой индукции. Пусть  $n \geq 22$ ; тогда для любого набора  $(a_1, \dots, a_7)$

существует такое  $i^*$ , что  $a_{i^*} \geq 4$ . По следствию из леммы 1 выполнено

$$z(T_5(a_1, \dots, a_{i^*}, \dots, a_7)) = z(T_5(a_1, \dots, a_{i^*} - 1, \dots, a_7)) + z(T_5(a_1, \dots, a_{i^*} - 2, \dots, a_7)),$$

откуда следует индукционный переход.

Рассмотрим деревья вида  $T_6^2(c_1, \dots, c_9)$ . Из соображений симметрии можно считать, что

$$c_1 \geq c_9, \quad c_7 \geq c_8, \quad c_2 \geq c_5.$$

Из леммы 2 следует, что  $c_8, c_9 \in \{1, 2\}$ . Из лемм 3 и 4 следует, что одновременно выполнены следующие утверждения:

$$\begin{aligned} c_2 \geq 3, \quad (c_1, c_3) \neq (2, 2) &\implies c_1 + c_2 + c_3 \leq 6, \\ c_2 \geq 3, \quad (c_3, c_9) \neq (2, 2) &\implies c_2 + c_3 + c_9 \leq 6, \\ c_4 \geq 3, \quad (c_3, c_6) \neq (2, 2) &\implies c_3 + c_4 + c_6 \leq 6, \\ c_5 \geq 3, \quad (c_6, c_7) \neq (2, 2) &\implies c_5 + c_6 + c_7 \leq 6, \\ c_5 \geq 3, \quad (c_6, c_8) \neq (2, 2) &\implies c_5 + c_6 + c_8 \leq 6, \\ c_2 = 2 &\implies c_3 = 1, \quad \max(c_1, c_9) \leq 2 \vee c_3 = 2 \vee c_3 \geq 3, \quad c_1 = c_9 = 2, \\ c_4 = 2 &\implies \{c_3, c_6\} \in \{\{1, 1\}, \{1, 2\}, \{2, 2\}\}, \\ c_5 = 2 &\implies c_6 = 1, \quad \max(c_7, c_8) \leq 2 \vee c_6 = 2 \vee c_6 \geq 3, \quad c_7 = c_8 = 2. \end{aligned}$$

Ясно, что при  $n \geq 19$  выполнено  $c_3, c_6 \in \{1, 2\}$ , причем  $(c_3, c_6) \neq (1, 1)$ . С учетом этих ограничений для  $n = 26$  и  $n = 27$  были проведены вычислительные эксперименты, показавшие, что данное утверждение выполняется. Мы не приводим таблицы результатов ввиду их громоздкости.

Теперь рассмотрим деревья вида  $T_6^2(b_1, \dots, b_9)$ . Ввиду симметрии можно считать, что

$$b_1 \geq b_9, \quad b_4 \geq b_5, \quad b_7 \geq b_8, \quad b_2 \geq b_3 \geq b_6.$$

По лемме 2 можно считать, что  $b_5, b_8, b_9 \in \{1, 2\}$ . С учетом этих ограничений для  $n = 26$  и  $n = 27$  были проведены вычислительные эксперименты, показавшие, что данное утверждение выполняется. Мы не приводим таблицы результатов ввиду их громоздкости.

Пусть  $n \geq 28$ . Тогда для любых наборов  $(b_1, \dots, b_9)$  и  $(c_1, \dots, c_9)$  существуют такие  $j^*, k^*$ , что  $b_{j^*}, c_{k^*} \geq 4$ . Лемма доказана.

Вернемся к доказательству теоремы 1. Рассмотрим стяжки, изображенные на рис. 1, и предположим, что  $n \geq 20$ . В случае первой стяжки к соответствующему дереву всегда можно применить преобразование IV. После настройки параметров преобразованиями I, II и III, преобразование IV всегда можно применить к дереву со второй стяжкой и оно увеличивает  $z$ -индекс. Третья стяжка является стяжкой дерева  $T_5(a_1, \dots, a_7)$ , оптимальные параметры которого найдены в лемме 6. Тем самым, доказан первый пункт теоремы 1.

Рассмотрим стяжки, изображенные на рис. 2. Предположим, что  $n \geq 26$ . Стяжки, изображенные в первой строке, не могут быть стяжками никакого максимального 6-листного дерева, так как после настройки параметров преобразованиями I, II и III к ним всегда можно применить преобразование IV, увеличивающее  $z$ -индекс.

В случае первой стяжки из второй строки либо преобразование IV нельзя применить (только если вершина степени 4 смежна с обеими вершинами степени 3), либо оно увеличивает  $z$ -индекс. Рассмотрим вторую стяжку из второй строки. К соответствующему дереву нельзя применить преобразование IV только если его вершина степени 4 одновременно смежна с тремя листьями и с вершиной степени 3. Если же возможно применить преобразование IV и оно не является увеличивающим, то достигается равенство  $z$ -индекса с первым графом из третьей строки, причем по лемме 6 такой граф имеет не оптимальные параметры.

Из наших рассуждений и преобразований I–III следует, что каждое максимальное 6-листное дерево имеет вид либо деревьев  $T_6^1(b_1, \dots, b_9)$  и  $T_6^2(c_1, \dots, c_9)$  с параметрами из леммы 6, либо деревьев  $A, B, C, D, E$ , см. рис. 9, причем подразбиваться могут только отмеченные ребра.

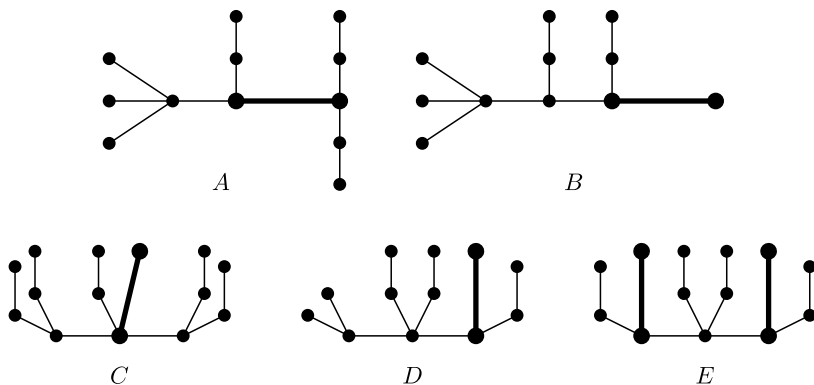


Рис. 9. Деревья типов A–E.

Через  $T_n$  переобозначим дерево  $T_6^1(n - 14, 2, \dots, 2)$ . Для каждого  $X \in \{A, B, C, D, T\}$  через  $X_n$  обозначим граф типа  $X$  с  $n$  вершинами, если такой граф существует. Для любого  $n \geq 26$  выполнено

$$z(X_{n+2}) = z(X_{n+1}) + z(X_n),$$

что является следствием леммы 1. Можно проверить, что

$$\begin{aligned} z(A_{26}) &= 121016, & z(A_{27}) &= 195808, & z(B_{26}) &= 120262, & z(B_{27}) &= 194588, \\ z(C_{26}) &= 150464, & z(C_{27}) &= 243456, & z(D_{26}) &= 140756, & z(D_{27}) &= 227748, \\ z(T_{26}) &= 156160, & z(T_{27}) &= 252672. \end{aligned}$$

Поэтому выполнено

$$\text{Arg max}_{n \geq 26} \{z(A_n), z(B_n), z(C_n), z(D_n), z(T_n)\} = \{T_n\}.$$

Пусть  $p \geq q$  – неотрицательные целые числа, причем  $p + q = n - 13$ . Через  $E_{n,p}$  обозначим дерево типа  $E$ , получающееся  $p$ - и  $q$ -подразбиениями соответствующих ребер. Тогда для  $n \geq 26$  выполнено

$$z(E_{n+2,p+2}) = z(E_{n+1,p+1}) + z(E_{n,p}).$$

Можно убедиться, что для любого  $p$  выполнено

$$z(E_{26,p}) \leq 151888 < z(T_{26}) = 156160, \quad z(E_{27,p+1}) \leq 245760 < z(T_{27}) = 252672.$$

Поэтому  $z(E_{n,p}) < z(T_n)$  для любых  $n \geq 26$  и  $n - 13 \geq p \geq 0$ . Теорема доказана.

**7. Заключение.** В данной работе рассматриваются и при всех достаточно больших  $n$  решаются задачи поиска всех 5- и 6-листных деревьев с  $n$  вершинами, имеющими максимальное количество паросочетаний среди графов с такими параметрами. Ранее были известны полные ответы к данной задаче для 2-, 3- и 4-листных деревьев с любым достаточно большим количеством вершин. Получение полного описания максимальных  $k$ -листных  $n$ -вершинных деревьев при  $k \geq 7$  является интересной открытой задачей. Это возможная тема для будущих исследований.

#### СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] H. Wiener, "Structural determination of paraffin boiling points", *J. Amer. Chem. Soc.*, **1**:69 (1947), 17–20.
- [2] H. Hosoya, "Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbon", *Bull. Chem. Soc. Japan*, **44**:9 (1971), 2332–2339.
- [3] H. Hosoya, "The topological index  $Z$  before and after 1971", *Int. Elect. J. Molecular Design*, **34**:15 (2003), 428–442.
- [4] H. Hosoya, "Important mathematical structures of the topological index  $Z$  for tree graphs", *J. Chem. Inf. Model.*, **47**:3 (2007), 744–750.
- [5] H. Hosoya, "Mathematical meaning and importance of the topological index  $Z$ ", *Croatica Chem. Acta*, **80**:2 (2007), 239–249.
- [6] H. Hosoya, "The most private features of the topological index", *MATI*, **1** (2019), 25–33.
- [7] I. Gutman, "Acyclic systems with extremal Hückel  $\pi$ -electron energy", *Theor. Chim. Acta*, **45** (1977), 79–87.
- [8] Y. Liu, W. Zhuang, Z. Liang, "Largest Hosoya index and smallest Merrifield–Simmons index in tricyclic graphs", *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **73**:1 (2015), 195–224.
- [9] J. Ou, "On acyclic molecular graphs with maximal Hosoya index, energy, and short diameter", *J. Math. Chem.*, **43**:1 (2008), 221–233.
- [10] J. Ou, "On extremal unicyclic molecular graphs with maximal Hosoya index", *Discrete Appl. Math.*, **157**:2 (2009), 391–397.
- [11] B. Sahin, "On Hosoya index and Merrifield–Simmons index of trees with given domination number", *Numer. Methods Partial Differential Equations*, **38**:4 (2020), 904–915.
- [12] S. Wagner, "Extremal trees with respect to Hosoya index and Merrifield–Simmons index", *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **57**:1 (2007), 221–233.
- [13] L. Xu, "The second largest Hosoya index of unicyclic graphs", *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **62**:3 (2007), 621–628.
- [14] K. Xu, "The Hosoya indices and Merrifield–Simmons indices of graphs with connectivity at most  $k$ ", *Appl. Math. Lett.*, **25**:3 (2012), 476–480.
- [15] K. Xu, I. Gutman, "The greatest Hosoya index of bicyclic graphs with given maximum degree", *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **66**:3 (2011), 795–824.
- [16] W. Yan, L. Ye, "On the maximal energy and the Hosoya index of a type of trees with many pendant vertices", *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **53**:2 (2005), 449–459.
- [17] Н. А. Кузьмин, "О деревьях радиуса 2 с максимальным количеством паросочетаний", *Журнал СВМО*, **22**:2 (2020), 177–187.

- [18] 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.
- [19] Н. А. Кузьмин, Д. С. Малышев, “О деревьях диаметра 5 с максимальным количеством паросочетаний”, *Матем. сб.*, **214**:2 (2023), 143–154.

**Н. А. Кузьмин**

Национальный исследовательский университет –  
Высшая школа экономики  
в Нижнем Новгороде;  
Санкт-Петербургский государственный университет  
*E-mail*: [nikita.kuz2000@gmail.com](mailto:nikita.kuz2000@gmail.com)

Поступило

08.06.2023

Принято к публикации

15.09.2023

**Д. С. Малышев**

Национальный исследовательский университет –  
Высшая школа экономики  
в Нижнем Новгороде  
*E-mail*: [dsmalyshev@rambler.ru](mailto:dsmalyshev@rambler.ru)