Секция «Дискретная математика и математическая кибернетика»

Описание деревьев радиуса 2 с наибольшим количеством паросочетаний

Научный руководитель – Малышев Дмитрий Сергеевич

Кузьмин Никита Александрович
Студент (бакалавр)
Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» - Нижний Новгород, Факультет информатики, математики и компьютерных наук, Нижний Новгород, Россия
E-mail: nikita.kuz2000@gmail.com

Химические соединения часто рассматриваются в форме так называемых *молекулярных графов*, где атомам соответствуют вершины графа, а связям между ними — ребра графа. При этом свойства химических соединений описываются в терминах так называемых *топологических индексов*, которые представляют собой некоторые инварианты графов относительно переобозначения вершин и которые позволяют аналитически исследовать некоторые аспекты химической структуры вещества. 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 работах [1, 2, 3] рассматривались $(n, n+k)$*-графы*, т.е. связные n-вершинные графы с $n+k$ ребрами при небольших k и в них при $k \in \{-1, 0, 1\}$ были полностью описаны все $(n, n+k)$-графы с максимальным значением *индекса Хоссойи*, т.е. количества паросочетаний. Рассмотрение случая $k = -1$ в работе [1] было напрямую мотивировано поиском соединения с максимальным значением π-энергии электронов среди полиенов. Так, в классе деревьев (т.е. $(n, n-1)$-графов) максимальным оказался n-путь, в классе унициклических графов (т.е. (n, n)-графов) — n-цикл. В классе $(n, n+1)$-графов такой граф так же единственен и представляет собой результат отождествления ребра $n-2$-цикла с ребром 4-цикла.

Основной результат доклада состоит в том, что в классе деревьев радиуса 2 с n вершинами при $n \geq 56$, где $n = 3k + r$, $r \in \{0, 1, 2\}$ максимальное дерево единственно. Оно получается соединением вершины с центральными вершинами в b копиях 3-пути и с листовыми вершинами в a копиях 2-пути, где параметры a и b связаны соотношением $b = k + \frac{r-1-2a}{3}$, причем $(r, a) \in \{(0, 1), (1, 0), (2, 2)\}$. Более того, для любого $6 \leq n \leq 55$ соответствующее экстремальное дерево тоже единственно (кроме $n = 8$, когда имеется два таких дерева) и устроено подобным образом, а при $1 \leq n \leq 5$ единственным экстремальным деревом является n-путь.

Источники и литература

1) Gutman I. Acyclic systems with extremal Huckel π-electron energy // Theoretical Chemistry Accounts. 2009. Vol. 45, № 2. P. 79–87.
2) Ou J. On extremal unicyclic molecular graphs with maximal Hosoya index // The Fibonacci Quarterly. 2009. Vol. 157, № 2. P. 391–397.
3) Deng H. The largest Hosoya index of $(n, n+1)$-graphs // Computers and Mathematics with Applications. 2008. Vol. 56, № 10. P. 2499–2506.