НОВОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ПОЛНОМ ОПИСАНИИ $(n, n+2)$-ГРАФОВ С МАКСИМАЛЬНЫМ ЗНАЧЕНИЕМ ИНДЕКСА ХОСОЙИ

Кузьмин Никита Александрович

НИУ ВШЭ – Нижний Новгород,
Лаборатория алгоритмов и технологий анализа сетевых структур

Определение

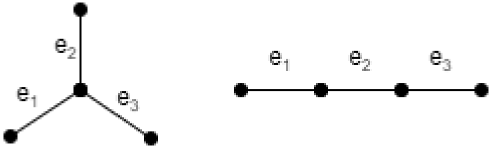
Паросочетанием графа называется любое множество попарно не смежных его ребер.

Замечание

Пустое множество рёбер является паросочетанием.

Определение

Индекс Хосойи графа G определяется как количество его паросочетаний и обозначается через $z(G)$.



Графы S_3 и P_3 соответственно.

Паросочетания в S_3: $\emptyset, \{e_1\}, \{e_2\}, \{e_3\}$.
Парасочетания в P_3: $\emptyset, \{e_1\}, \{e_2\}, \{e_3\}, \{e_1, e_3\}$.

$$z(S_3) = 4, z(P_4) = 5$$

Определение

Обыкновенный связный граф с n вершинами и $n+k$ ребрами называется $(n, n+k)$-*графом*.

Например, дерево есть $(n, n-1)$-граф.

Определение

Максимальным $(n, n+k)$-*графом* будем называть граф, имеющий наибольший индекс Хосойи среди всех $(n, n+k)$-графов.

Индекс Хосойи был введён в работе
Hosoya H. Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons. Bulletin of the Chemical Society of Japan. 1971. Vol. 44. P. 2332–2339.
В ней так же было показано, что его значения связаны с некоторыми физико-химическими свойствами (в частности, с точками кипения) алканов. Поскольку индекс Хосойи определяет некоторые "энергии"химических соединений, то интересна задача по выявлению графов с максимальным значением индекса Хосойи среди графов заданного размера.

Теорема(Gutman, 1977)

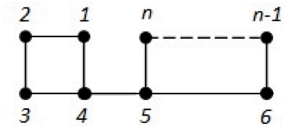
Единственным максимальным $(n, n-1)$-графом является P_n.

Теорема(Ou, 2009)

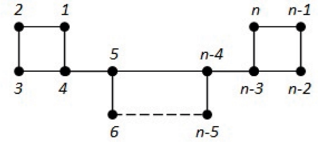
Единственным максимальным (n, n)-графом является C_n.

Теорема(Liu, Zhuang, Liang, 2015)

Единственными максимальными $(n, n+1)$ и $(n, n+2)$-графами являются графы изображённые на рисунках ниже.



Максимальный $(n, n+1)$-граф.

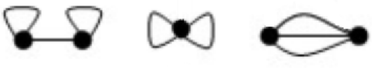


Максимальный $(n, n+2)$-граф.

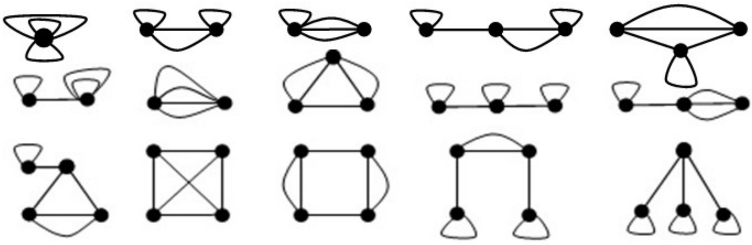
Для поиска максимальных $(n, n+k)$-графов без висячих вершин удобно использовать стяжки.

Определение

Псевдограф G' называется *стяжкой* обыкновенного графа G, если G получается подразбиениями ребер G' и G' содержит минимальное количество вершин.



Всевозможные стяжки $(n, n+1)$-графов без висячих вершин.



Всевозможные стяжки $(n, n+2)$-графов без висячих вершин.

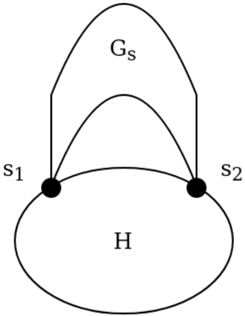
Не трудно доказать, что для любого $k \geq 0$ каждый максимальный $(n, n+k)$-граф не содержит вершин степени 1.

Пусть G — некоторый граф, а H — его порожденный подграф.

Определение

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 результат удаления из G всех элементов множества $V(H) \setminus S$.



Пусть $A, B \subseteq V(G)$ и $A \cap B = \emptyset$. Через $z(G, A, B)$ обозначается количество паросочетаний графа G, покрывающих все вершины из A и не покрывающих ни одной вершины из B.

Лемма(о разложении индекса Хосойи)

Справедливо равенство

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

О вершинах степени 1

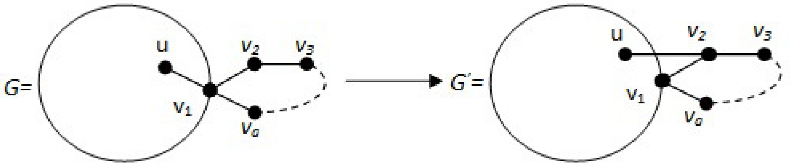
Преобразование 1. $deg_G(v) \geq 3$

Доказательство: $S = \{u, v\}$, $H_1 = (u, v = v_a, v_{a-1}, \ldots v_2, v_1)$, $H_2 = (v = v_a, v_{a-1} \ldots, v_2, v_1, u)$. Очевидно, что $z(H_1 \setminus v) < z(H_2 \setminus v)$. $\square$

Следствие

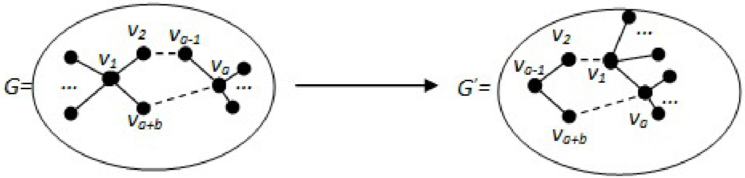
Если $k \geq 0$, то максимальный $(n, n+k)$-граф не содержит вершин степени 1.

Преобразование крайнего цикла



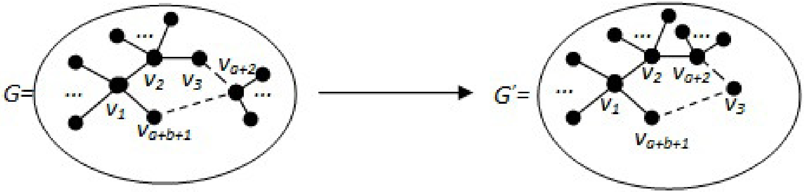
Преобразование 2.$deg_G(v_1) \geq 4$

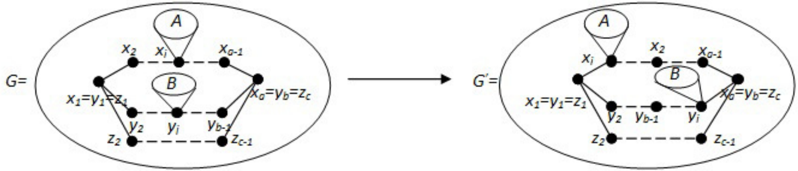
Доказательство: $S = \{u, v_1\}$, H_1и H_2 порождаются вершинами $u, v_1, \ldots, v_a$. Очевидно, что $z(H_1 \setminus v_1) < z(H_2 \setminus v_1)$. □



Преобразование 3.

Доказательство: $S = \{v_1, v_a\}$, H_1и H_2 порождённые вершинами $v_1, \ldots, v_{a+b}$ циклы. Очевидно, что $z(H_1 \setminus \{v_1, v_a\}) < z(H_2 \setminus \{v_1, v_a\})$. $\square$


G=
v2
v3
va+2
v1
va+b+1
G'=
v2
va+2
v1
v3
va+b+1


G=
A
x2
xi
xa-1
B
x1=y1=z1
xa=yb=zc
y2
yi
yb-1
z2
zc-1
G'=
A
x2
xi
xa-1
B
x1=y1=z1
xa=yb=zc
y2
yb-1
yi
z2
zc-1

Список литературы

[1] Hosoya H. Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons. Bulletin of the Chemical Society of Japan. 1971. Vol. 44. P. 2332–2339.
[2] Liu Y., Zhuang W., Liang Z., largest Hosoya index and smallest Merrifield-Simmons index in tricyclic graphs.Communications in mathematical and in computer chemistry. 2015. Vol. 73. P. 195-224.
[3] Кузьмин Н. А., Малышев Д. С. Полное описание $(n, n+2)$-графов с максимальным значением индекса Хосойи. Математические Заметки. 2022. (Принято к опубликованию).

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!