DOI 10.15507/2079-6900.22.202002.177-187

УДК 519.17

О деревьях радиуса 2 с максимальным количеством паросочетаний

© **Н. А. Кузьмин**[1]

Аннотация. Паросочетанием в графе называется любое множество его попарно не смежных ребер. В настоящей статье рассматривается и решается задача максимизации количества паросочетаний в деревьях радиуса не более чем 2 с заданным количеством вершин. Было выявлено, что для любого $n \geq 56$, где $n = 3k + r$, $k \in \mathbb{N}, r \in \{0, 1, 2\}$, экстремальное дерево единственно; оно получается соединением вершины с центральными вершинами в b копиях 3-пути и с листовыми вершинами в a копиях 2-пути, где $b = k + \dfrac{r - 1 - 2a}{3}$, $(r, a) \in \{(0, 1), (1, 0), (2, 2)\}$. Для любого $6 \leq n \leq 55$ соответствующее экстремальное дерево тоже единственно (кроме $n = 8$, когда имеется два таких дерева) и устроено подобным образом, при $1 \leq n \leq 5$ единственным экстремальным деревом является путь на n вершинах. Для доказательства этих фактов были предложены некоторые преобразования графов, увеличивающие количество паросочетаний и сохраняющие число вершин. Автор надеется, что данные преобразования будут полезны для решения аналогичных задач в других классах графов.

Ключевые слова: экстремальная теория графов, паросочетание, дерево, максимальное дерево, молекулярные графы, обыкновенные графы

1. Введение

Химические соединения часто рассматриваются в форме т. н. *молекулярных графов*, где атомам соответствуют вершины графа, а связям между ними — ребра графа. При этом свойства химических соединений описываются в терминах т. н. *топологических индексов*, которые представляют собой некоторые инварианты графов относительно переобозначения вершин и позволяют аналитически исследовать некоторые аспекты химической структуры вещества. Например, значение *индекса Винера*, который определяется как сумма длин кратчайших путей между всеми парами вершин графа, связано с точками кипения алканов. В работах Хосойи был представлен другой топологический индекс — количество всех паросочетаний заданного графа, который сейчас известен как *Z-индекс*, или *индекс Хосойи*. В исследованиях ученого также было показано, что значение этого индекса связано с точками кипения и другими свойствами алканов. Третий пример — *индекс Меррифилда и Симмонса*, определяемый как количество независимых множеств графа, значения которого влияют на некоторые свойства углеводородов. Поскольку топологические индексы определяют «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 рассматриваются только *обыкновенные графы*, т. е. неориентированные, непомеченные графы без петель и кратных ребер. *Независимым множеством* в графе называется произвольное подмножество попарно несмежных его вершин. Независимое

[1]**Кузьмин Никита Александрович**, студент, ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (603155, Россия, г. Нижний Новгород, ул. Большая Печерская, д. 25/12), ORCID: https://orcid.org/0000-0002-8478-3502, nikita.kuz2000@gmail.com

множество графа называется *максимальным*, если оно максимально по включению, и *наибольшим*, если оно имеет максимальный размер.

В 1965 г. Дж. Мун и Л. Мозер в известной статье [1] отыскали наибольшее количество максимальных независимых множеств в классе всех n-вершинных графов. Кроме того, ими были найдены все соответствующие экстремальные графы. В 1993 г. Дж. Лю [2] получил достижимую верхнюю оценку количества максимальных независимых множеств для класса двудольных графов и описал все соответствующие экстремальные графы, которые оказались лесами специального вида. В этом же году М. Гуйтер и З. Тужа решили аналогичную задачу для класса графов без треугольников [3]. Работы, посвященные перечислению наибольших независимых множеств в графах, встречаются значительно реже. Обзор [4] содержит несколько других результатов подобного рода. Ряд работ [5–8] посвящен выявлению деревьев с экстремальными количествами просто независимых, максимальных и наибольших независимых множеств среди деревьев с заданными ограничениями.

Паросочетанием в графе называется любое множество попарно несмежных его ребер, в т. ч. и пустое. Паросочетание называется *совершенным*, если оно покрывает все вершины графа. *Наибольшим паросочетанием* называется паросочетание с максимально возможным количеством ребер. Через F_n обозначим n-ое число Фибоначчи, где $F_0 = F_1 = 1$ и $F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$ при $n \geq 2$. В 1977 г. И. Гутман в работе [9] доказал, что среди деревьев с n вершинами наибольшее количество паросочетаний имеет простой путь P_n, а также что в таком пути их ровно F_n. В работе [10] было показано, что максимальное количество паросочетаний среди унициклических графов с n вершинами имеет цикл на n вершинах и что у него ровно $F_{n-2} + F_n$ паросочетаний. В работе [11] были найдены все n-вершинные ациклические графы, не содержащие совершенных паросочетаний, с максимальным количеством паросочетаний. В статье [12] было найдено максимальное количество паросочетаний в классе графов с n вершинами и $n+1$ ребром, которое оказалось равным $2F_{n-4} + F_{n-2} + F_n$. Кроме того, в данной работе были описаны все соответствующие экстремальные графы (такой граф оказался единственным). В статье [13] найдены все n-вершинные деревья с максимальным количеством наибольших паросочетаний.

Напомним, что *эксцентриситетом вершины графа* называется максимальное из расстояний между ней и остальными вершинами. *Радиус графа* — минимальный из эксцентриситетов его вершин. *Центральная вершина графа* — вершина с эксцентриситетом, равным радиусу. *Центр графа* — множество его центральных вершин. Понятно, что единственным n-вершинным деревом радиуса 1 будет только звезда S_{n-1}, имеющая ровно n паросочетаний. В данной работе рассматривается задача максимизации количества паросочетаний в n-вершинных деревьях радиуса ≤ 2, которая, по сведениям автора этой работы, является открытой. Любое n-вершинное дерево радиуса ≤ 2 с наибольшим количеством паросочетаний назовем *максимальным*. Можно предполагать, что $n \geq 6$, т. к. при $1 \leq n \leq 5$ единственным максимальным деревом будет P_n. В данной работе доказывается, что для любого $n \geq 56$, где $n = 3k + r$ и $k \in \mathbb{N}, r \in \{0, 1, 2\}$, максимальное дерево единственно и получается соединением вершины с центральными вершинами в b копиях P_3 и с листовыми вершинами в a копиях P_2, где $b = k + \dfrac{r - 1 - 2a}{3}$ и $(r, a) \in \{(0, 1), (1, 0), (2, 2)\}$. Оказалось, что для любого $6 \leq n \leq 55$ соответствующее максимальное дерево тоже единственно (кроме $n = 8$, когда имеется два таких дерева) и устроено похожим образом.

2. Некоторые определения и обозначения

Листом графа называется произвольная его вершина степени один. *Предлистом графа* называется его вершина, смежная с листом. Два листа, смежные с общим предлистом, называются *листьями-дубликатами*. Ребро графа называется *перешейком*, если его удаление увеличивает количество его компонент связности.

Количество паросочетаний в графе G будем обозначать через $m(G)$. Напомним, что $m(G) \geq 1$, т. к. пустое множество — тоже паросочетание. Количество паросочетаний в графе G, покрывающих (и, соответственно, не покрывающих) вершину v, обозначим через $m_+(G, v)$ (и, соответственно, через $m_-(G, v)$).

3. Вспомогательные результаты

3.1. Некоторое преобразование графов и его свойства

Предположим, что связный граф H состоит из подграфов A_1 и A_2, причем $V(A_1) \cap \cap V(A_2) = \emptyset$, перешейка a_1a_2, где $a_1 \in A_1, a_2 \in A_2$, и листа v, смежного с a_2 (см. Рис. 3.1). В графе H выполним удаление листа v, а затем подразбиение ребра a_1a_2, результат данных преобразований обозначим через H^*.

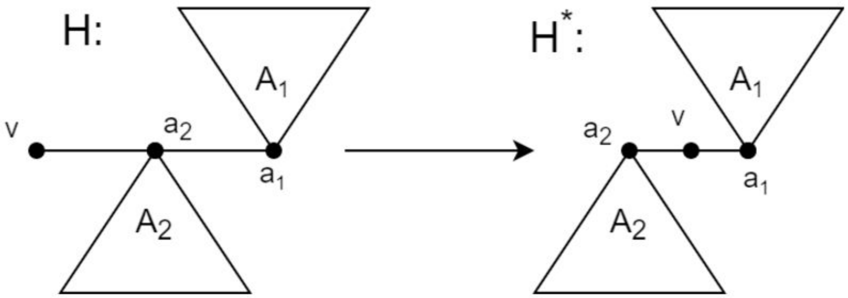

Рис. 3.1. Преобразование графа H

Лемма 3.1 *Если $V(A_2) \neq \{a_2\}$, то $m(H) < m(H^*)$.*

Доказательство. Понятно, что количество паросочетаний графа H, содержащих ребро a_1a_2, равно $m_-(A_1, a_1) \cdot m_-(A_2, a_2)$. Вместе с тем, количество паросочетаний графа H, не содержащих данного ребра, равно $m(A_1) \cdot (m_-(A_2, a_2) + m(A_2))$. Таким образом, справедливо равенство:

$$m(H) = m_-(A_1, a_1) \cdot m_-(A_2, a_2) + m(A_1) \cdot (m_-(A_2, a_2) + m(A_2)).$$

Количество паросочетаний графа H^*, содержащих ребро a_1v, равно $m_-(A_1, a_1) \cdot \cdot m(A_2)$. Количество паросочетаний графа H^*, не содержащих данного ребра, равно $m(A_1) \cdot (m_-(A_2, a_2) + m(A_2))$. Таким образом, справедливо равенство:

$$m(H^*) = m_-(A_1, a_1) \cdot m(A_2) + m(A_1) \cdot (m_-(A_2, a_2) + m(A_2)).$$

Значит, $m(H^*) - m(H) = m_-(A_1, a_1) \cdot m_+(A_2, a_2)$. Напомним, что пустое множество ребер считается паросочетанием. Поэтому $m_-(A_1, a_1) > 0$. Поскольку H связен и $V(A_2) \neq \{a_2\}$, то $m_+(A_2, a_2) > 0$. Значит, $m(H^*) > m(H)$.
Доказательство завершено.

3.2. Центр максимальных деревьев и смежные с ним поддеревья

Напомним, что по теореме Жордана центр любого дерева состоит либо из одной вершины, либо из двух смежных вершин.

Лемма 3.2 *Центр каждого максимального дерева состоит из одной вершины.*

Доказательство. Пусть T — максимальное дерево, имеющее две центральные вершины a_1 и a_2. Применим к нему преобразование, описанное в разделе 3.1, и получим дерево T^* с тем же количеством вершин. Ясно, что радиус T^* равен 2. По Лемме 3.1 имеем, что $m(T) < m(T^*)$. Следовательно, T не является максимальным. Таким образом, утверждение данной Леммы справедливо.
Доказательство завершено.

Лемма 3.3 *В любом максимальном дереве центральная вершина смежна не более чем с одним листом.*

Доказательство. Пусть T — максимальное дерево, центральная вершина которого a_2 смежна более чем с одним листом. Предположим, что a_2 смежна с $q \geq 2$ листьями, причем $q-1$ из них вместе с a_2 образуют $V(A_2)$, а оставшийся будет вершиной v. Отсоединим листья, смежные с a_2 и принадлежащие A_2, а затем присоединим их к листу v. Получим дерево T^* радиуса 2. Тогда из Леммы 3.1 следует, что $m(T) < m(T^*)$.
Доказательство завершено.

Рассмотрим дерево T (см. Рис. 3.2), которое определяется следующим образом. Дерево T состоит из поддерева A радиуса ≤ 2, корнем которого является вершина c, причем c смежна с вершиной c' и c' смежна с $q \geq 3$ листьями-дубликатами.

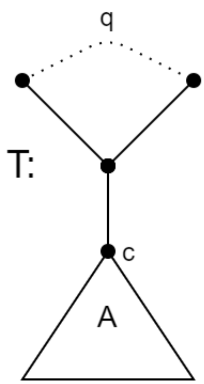

Рис. 3.2. Дерево T

Несложно проверить, что

$$m(T) = (q+1) \cdot m_+(A, c) + (q+2) \cdot m_-(A, c).$$

Случай четного q

Дерево T содержит набор из q листьев-дубликатов. Удалим $q-2$ листа-дубликата из этого набора. И прикрепим $\frac{q}{2}-1$ путей P_3 к вершине c. Полученное дерево обозначим через T_1^* (см. Рис. 3.3). Очевидно, что радиус T_1^* равен 2 и дерево T_1^* имеет столько же вершин, что и T.

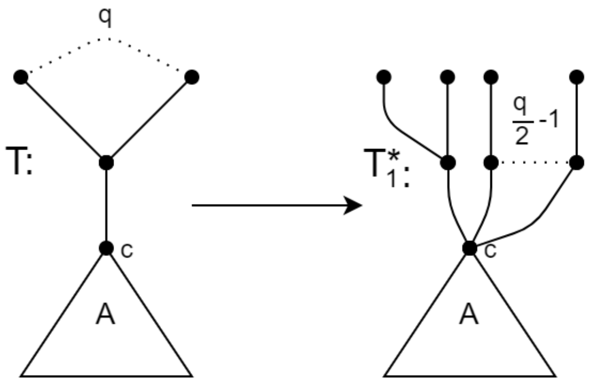

Рис. 3.3. Преобразование дерева T в случае чётного q

Лемма 3.4 *Для каждого четного $q \geq 4$ верно, что $m(T_1^*) > m(T)$.*

Доказательство. Количество паросочетаний дерева T_1^*, не покрывающих вершину c, равно $3 \cdot 2^{\frac{q}{2}-1} \cdot m_-(A, c)$. Количество его паросочетаний, покрывающих данную вершину, равно

$$3 \cdot 2^{\frac{q}{2}-1} \cdot m_+(A, c) + (3 \cdot (\frac{q}{2} - 1) \cdot 2^{\frac{q}{2}-2} + 2^{\frac{q}{2}-1}) \cdot m_-(A, c).$$

Таким образом, получим соотношение:

$$m(T_1^*) = 3 \cdot 2^{\frac{q}{2}-1} \cdot m_+(A, c) + (3 \cdot (\frac{q}{2} - 1) \cdot 2^{\frac{q}{2}-2} + 4 \cdot 2^{\frac{q}{2}-1}) \cdot m_-(A, c).$$

Нетрудно проверить, что коэффициенты при $m_-(A, c)$ и $m_+(A, c)$ в соотношении для $m(T_1^*)$ больше, чем в соотношении для $m(T)$ уже при $q \geq 4$. При этом $m_-(A, c) > 0$. Значит, $m(T_1^*) > m(T)$.
Доказательство завершено.

Случай нечетного q

Из дерева T удалим $q - 1$ лист из набора q листьев-дубликатов. Затем прикрепим $\dfrac{q-1}{2}$ путей P_3 к вершине c. Полученное дерево обозначим через T_2^* (см. Рис. 3.4). Очевидно, что радиус T_2^* равен 2 и дерево T_2^* имеет столько же вершин, что и T.

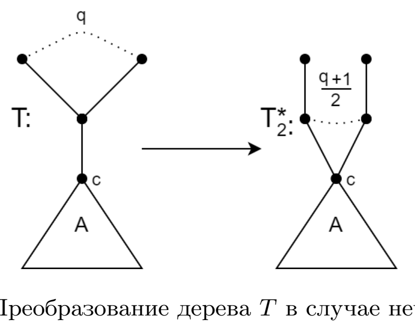

Рис. 3.4. Преобразование дерева T в случае нечётного q

Л е м м а 3.5 *Для любого нечетного $q \geq 3$ верно, что $m(T_2^*) > m(T)$.*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Количество паросочетаний дерева T_2^*, не покрывающих вершины c, равно $2^{\frac{q+1}{2}} \cdot m_-(A, c)$. Количество его паросочетаний, покрывающих эту вершину, равно

$$2^{\frac{q+1}{2}} \cdot m_+(A, c) + \frac{q+1}{2} \cdot 2^{\frac{q-1}{2}} \cdot m_-(A, c).$$

Получим соотношение

$$m(T_2^*) = 2^{\frac{q+1}{2}} \cdot m_+(A, c) + (\frac{q+1}{2} \cdot 2^{\frac{q-1}{2}} + 2^{\frac{q+1}{2}}) \cdot m_-(A, c).$$

Нетрудно проверить, что коэффициенты при $m_-(A, c)$ и $m_+(A, c)$ в соотношении для $m(T_2^*)$ больше, чем в соотношении для $m(T)$ уже при $q \geq 3$. При этом $m_-(A, c) > 0$. Значит, $m(T_2^*) > m(T)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о з а в е р ш е н о.

Из Лемм 3.2–3.5 заключаем, что каждое максимальное дерево имеет имеет вид I или II, представленные на Рис. 3.5. Далее будем обозначать это дерево через T^*.

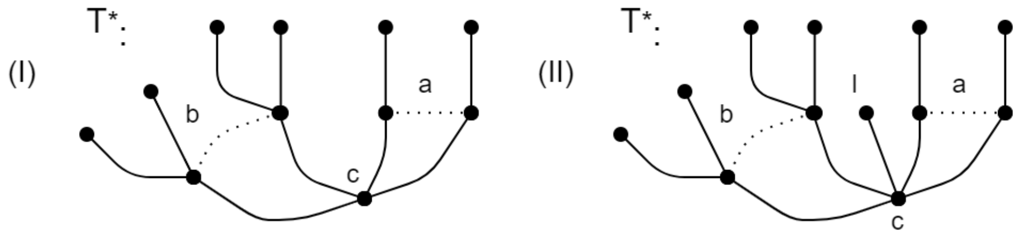

Рис. 3.5. Максимальное дерево радиуса 2

3.3. Об отсутствии листа, смежного с центральной вершиной

Предположим, что T^* содержит лист l (см. Рис. 3.5(II)).

Случай $a \neq 0$

Удалим l и добавим его в качестве листового соседа к вершине степени 2 одного из a путей P_3 в n-вершинном дереве T^*. Полученное дерево обозначим через T_1^{**}. Очевидно, что радиусы деревьев T^* и T_1^{**} равны 2 и имеют одинаковое количество вершин.

Л е м м а 3.6 *Если $n \geq 12$, то $m(T_1^{**}) > m(T^*)$.*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Несложно посчитать, что количество паросочетаний в дереве T^*, не покрывающих вершины c, ровно $2^a \cdot 3^b$ штук. В случае, когда вершину c покрывает ребро lc, их также $2^a \cdot 3^b$. В случае же, когда вершину c покрывают остальные смежные с ней ребра, то количество паросочетаний равно $a \cdot 2^{a-1} \cdot 3^b + b \cdot 2^a \cdot 3^{b-1}$. Таким образом, справедливо равенство:

$$m(T^*) = 2^{a+1} \cdot 3^b + a \cdot 2^{a-1} \cdot 3^b + b \cdot 2^a \cdot 3^{b-1} = 2^{a-1} \cdot 3^{b-1} \cdot (12 + 3a + 2b).$$

Аналогичным способом получим соотношение:

$$m(T_1^{**}) = 2^{a-1} \cdot 3^{b+1} + (a-1) \cdot 2^{a-2} \cdot 3^{b+1} + (b+1) \cdot 2^{a-1} \cdot 3^b = 2^{a-2} \cdot 3^b \cdot (6 + 3(a-1) + 2(b+1)),$$

$$m(T_1^{**}) - m(T^*) = 2^{a-2} \cdot 3^{b-1} \cdot (3a + 2b - 9).$$

Очевидно, что $3a + 2b = n - 2$, поэтому $3a + 2b - 9 = n - 11$. Из этого следует, что $m(T_1^{**}) - m(T^*) > 0$ при $n \geq 12$.
Доказательство завершено.

Случай $a = 0$

В T^* удалим лист, отличный от l, и прикрепим его к l в качестве листового соседа. Полученное дерево обозначим через T_2^{**}.

Лемма 3.7 *Для любого n справедливо неравенство $m(T_2^{**}) > m(T^*)$.*
Доказательство. Справедливы следующие соотношения:

$$m(T^*) = 2 \cdot 3^b + b \cdot 3^{b-1}, m(T_2^{**}) = 2^3 \cdot 3^{b-1} + 4 \cdot (b-1) \cdot 3^{b-2}.$$

Очевидно, что $m(T_2^{**}) - m(T^*) = (b+2) \cdot 3^{b-2} > 0$. Значит, $m(T_2^{**}) > m(T^*)$.
Доказательство завершено.

Из Лемм 3.6–3.7 имеется очевидное следствие:

Следствие 3.1 *В любом максимальном дереве с 12 и более вершинами не содержится листьев, смежных с центральной вершиной.*

3.4. Настройка параметров a и b

Итак, каждое максимальное дерево имеет вид, представленный на Рис. 3.5(I). Данное n-вершинное дерево будем обозначать через $T^*_{a,b}$. Считаем, что $n \geq 12$. Несложно проверить, что верны следующие равенства:

$$m(T^*_{a,b}) = 2^a \cdot 3^b + a \cdot 2^{a-1} \cdot 3^b + b \cdot 2^a \cdot 3^{b-1} = 2^{a-1} \cdot 3^{b-1} \cdot (6 + 3a + 2b), 2a + 3b = n - 1.$$

Пусть $f(a, b) = m(T^*_{a,b})$. Тогда поиск максимальных деревьев сводится к нахождению глобального максимума функции f при соответствующих ограничениях. Имеем, что $b = \dfrac{n-1-2a}{3}$, и подставим это выражение в f (предполагая, что $a \in \mathbb{R}$):

$$f(a) = 2^{a-1} \cdot 3^{\frac{n-4-2a}{3}} \cdot \frac{2n + 5a + 16}{3},$$

$$f_a^{'} = 2^{a-1} \cdot 3^{\frac{n-4-2a}{3}} \cdot ((\ln 2 - \frac{2}{3}\ln 3) \cdot \frac{2n + 5a + 16}{3} + \frac{5}{3}),$$

$$f_a^{'} = 0 \Leftrightarrow a = \frac{3}{2\ln 3 - 3\ln 2} - \frac{16}{5} - \frac{2}{5}n.$$

Пусть $a^*(n) = \dfrac{3}{\ln\frac{9}{8}} - \dfrac{16}{5} - \dfrac{2}{5}n$. Функция f возрастает на $(-\infty, a^*(n))$ и убывает на $(a^*(n), +\infty)$. Нетрудно видеть, что $a^*(n) < 0$ уже при $n \geq 56$.

4. Полное описание максимальных деревьев

Из рассуждений раздела 3.4 и целочисленности a и b следует, что справедлива следующая теорема.

Теорема 4.1 *При любом $n \geq 56$, где $n = 3k + r$ и $k \in \mathbb{N}, r \in \{0, 1, 2\}$, максимальное дерево единственно и имеет вид дерева $T_{a,b}$, представленного на Рис. 3.5, где $b = k + \dfrac{r - 1 - 2a}{3}$ и $(r, a) \in \{(0, 1), (1, 0), (2, 2)\}$.*

С целью выявления максимальных деревьев при $12 \leq n \leq 55$ был проведен вычислительный эксперимент по поиску оптимальных целочисленных a и b, показавший следующие результаты (см. Таблицу 4.1):

Таблица 4.1. Значения параметров a, b и n, соответствующие максимальным деревьям

n	a	b	n	a	b	n	a	b	n	a	b
12	4	1	23	11	0	34	9	5	45	4	12
13	6	0	24	10	1	35	8	6	46	3	13
14	5	1	25	12	0	36	7	7	47	2	14
15	7	0	26	11	1	37	6	8	48	4	13
16	6	1	27	10	2	38	8	7	49	3	14
17	8	0	28	12	1	39	7	8	50	2	15
18	7	1	29	11	2	40	6	9	51	1	16
19	9	0	30	10	3	41	5	10	52	0	17
20	8	1	31	9	4	42	4	11	53	2	16
21	10	0	32	8	5	43	6	10	54	1	17
22	9	1	33	10	4	44	5	11	55	0	18

Напомним, что в случае $n \leq 5$ единственным максимальным деревом будет P_n. По Леммам 3.2–3.5 случай $6 \leq n \leq 11$ отличается от случая $n \geq 12$ возможным наличием листа, смежного с центральной вершиной. С целью поиска всех максимальных деревьев при $6 \leq n \leq 11$ был проведен вычислительный эксперимент, результаты которого представлены в Таблице 4.2. Параметр l в таблице отвечает за наличие листа, смежного с центральной вершиной, т. е. если $l = 1$, то такой лист существует, а если $l = 0$, то такого листа в дереве нет.

Таблица 4.2. Описание оставшихся максимальных деревьев

n	a	b	l	n	a	b	l	n	a	b	l
6	2	0	1	8	3	0	1	11	5	0	0
7	3	0	0	9	4	0	0				
8	2	1	0	10	3	1	0				

Список литературы

1. Moon J., Moser L. On cliques in graphs // Israel Journal of Mathematics. 1965. Vol. 3, No 1. pp. 23-28

2. Liu J. Maximal independent sets in bipartite graphs // Journal of Graph Theory. 1993. Vol. 17, No 1. pp. 495-507

3. Hujter M., Tuza Z. The number of maximal independent sets in triangle-free graphs // SIAM Journal of Discrete Mathematics. 1993. Vol. 6, No 2. pp. 284-288

4. Jou M.J., Chang G. The number of maximum independent sets in graphs // Taiwanese Journal of Mathematics. 2000. Vol. 4, No 4. pp. 685-695

5. Sagan B.E. A note on independent sets in trees // SIAM Journal of Discrete Mathematics. 1988. Vol. 1, No 1. pp. 105-108

6. Heuberger C., Wagner S. Maximizing the number of independent subsets over trees with bounded degree // Journal of Graph Theory. 2008. Vol. 58, No 1. pp. 49-68.

7. Талецкий Д. С., Малышев Д. С. О деревьях ограниченной степени с максимальным количеством наибольших независимых множеств // Дискретный анализ и исследование операций. 2018. Т. 25, № 2. С. 101–123.

8. Талецкий Д. С., Малышев Д. С. Деревья без листьев-дубликатов с наименьшим количеством максимальных независимых множеств // Дискретная математика. 2018. Т. 30, No 4. С. 115–133.

9. Gutman I. Acyclic systems with extremal Huckel π-electron energy // Theoretical Chemistry Accounts. 1977. Vol. 45, No 2. pp. 79-87

10. Ou J. On extremal unicyclic molecular graphs with maximal Hosoya index // Discrete Applied Mathematics. 2009. Vol. 157, No 2. pp. 391-397

11. Ou J. Maximal Hosoya index and extremal acyclic molecular graphs without perfect matching // Applied Mathematics Letters. 2006. Vol. 19, No 7. pp. 652-656

12. Deng H. The largest Hosoya index of (n, n+1)-graphs // Computers & Mathematics with Applications. 2008. Vol. 56, No 10. pp. 2499-2506

13. Heuberger C., Wagner S. The number of maximum matchings in a tree // Discrete Mathematics. 2011. Vol. 311, No 21. pp. 2512-2542

Поступила 15.03.2020

MSC2020 05C35

On radius 2 trees with the maximum number of matchings

© **N. A. Kuzmin**[1]

Abstract. A matching in a graph is any set of its pairwise non-adjacent edges. In this paper, we consider and solve the maximization problem of the matchings number in radius ≤ 2 trees of a given number of vertices. For any $n \geq 56$, where $n = 3k + r$ and $k \in \mathbb{N}, r \in \{0, 1, 2\}$, an extremal tree is unique and it is a join of a vertex with the central vertices in b copies of P_3 and with leaf vertices in a copies of P_2, where $b = k + \dfrac{r - 1 - 2a}{3}$ and $(r, a) \in \{(0, 1), (1, 0), (2, 2)\}$. For any $6 \leq n \leq 55$, a corresponding extremal tree is also unique (except $n = 8$, where there are two such trees) and it has a similar structure. For any $1 \leq n \leq 5$, a unique extremal tree is the path on n vertices. To prove these facts, we propose some graph transformations, increasing the matchings number and keeping the vertices number. The author hopes that these transformations will be useful for solving similar problems in other classes of graphs.

Key Words: extremal graph theory, matching, tree, maximum tree, molecular graphs, ordinary graphs

References

1. J. Moon, L. Moser, "On cliques in graphs", *Israel Journal of Mathematics*, **3**:1 (1965), 23–28.

2. J. Liu, "Maximal independent sets in bipartite graphs", *Journal of Graph Theory*, **17**:1 (1993), 495–507.

3. M. Hujter, Z. Tuza, "The number of maximal independent sets in triangle-free graphs", *SIAM Journal of Discrete Mathematics*, **6**:2 (1993), 284–288.

4. M. J. Jou, G. Chang, "The number of maximum independent sets in graphs", *Taiwanese Journal of Mathematics*, **4**:4 (2000), 685–695.

5. B. E. Sagan, "A note on independent sets in trees", *SIAM Journal of Discrete Mathematics*, **1** (1988), 105–108.

6. C. Heuberger, S. Wagner, "Maximizing the number of independent subsets over trees with bounded degree", *Journal of Graph Theory*, **58**:1 (2008), 49–68.

7. D. S. Taletskii, D. S. Malyshev, "[On trees of bounded degree with maximal number of greatest independent sets]", *Diskretnyy analiz i issledovaniye operatsiy*, **25**:2 (2018), 101–123.

8. D. S. Taletskii, D. S. Malyshev, "[Trees without duplicated leaves with a minimum number of greatest independent sets]", *Diskretnaya matematika*, **30**:4 (2018), 115–133.

9. I. Gutman, "Acyclic systems with extremal Huckel π-electron energy", *Theoretical Chemistry Accounts*, **45**:2 (1977), 79–87.

[1]**Nikita A. Kuzmin**, student, National Research University Higher School of Economics (25/12 Bolshaya Pecherskaya St., Nizhny Novgorod 603155, Russia), ORCID: https://orcid.org/0000-0002-8478-3502, nikita.kuz2000@gmail.com

10. J. Ou, "On extremal unicyclic molecular graphs with maximal Hosoya index", *Discrete Applied Mathematics*, **157**:2 (2009), 391–397.

11. J. Ou, "Maximal Hosoya index and extremal acyclic molecular graphs without perfect matching", *Applied Mathematics Letters*, **19**:7 (2006), 652–656.

12. H. Deng, "The largest Hosoya index of $(n, n+1)$-graphs", *Computers and Mathematics with Applications*, **56**:10 (2008), 2499–2506.

13. C. Heuberger, S. Wagner, "The number of maximum matchings in a tree", *Discrete Mathematics*, **311**:21 (2011), 2512–2542.

Submitted 15.03.2020