

2022 年臺灣國際科學展覽會 優勝作品專輯

作品編號 010009

參展科別 數學

作品名稱 **Combinatorial Properties of Non-isomorphic
Caterpillars**

得獎獎項

就讀學校 臺北市立第一女子高級中學

指導教師 楊宗穎

作者姓名 游雁婷

關鍵詞 Caterpillar、Isomorphic、Pascal's triangle

作者簡介



我是游雁婷，目前就讀北一女中二年級。因緣際會下進入了數學研究的領域，在選定主題後開始我的研究旅程，雖然過程中不免遭受幾番挫折，但幸好有專研老師的協助，使我可以完成這個作品並與大家分享。

從中獲得的不僅數學的背景知識，更多是研究的經驗累積和不放棄的精神，希望未來可以保持這種熱情，繼續探索廣大的數學世界。

摘要

一個連通圖其結構中若沒有包含任何的圈，則將此圖稱為樹狀圖（**tree**）。若樹狀圖 T 的頂點 v 滿足 $d(v)=1$ ，則 v 即為 T 的『葉子點（**leaf**）』。將一個樹狀圖中以一筆不間斷經過最多頂點的路徑，稱為『主幹』，若此樹狀圖滿足所有的 **leaf** 皆與主幹上的點相連，則特別將此樹狀圖稱為『毛毛蟲圖（**caterpillar**）』。本文的研究是對於有 n 個頂點， k 個 **leaf** 的毛毛蟲圖，在不同構的情況下，探討各類毛毛蟲圖的結構變化、對偶關係，在數量上建立遞迴關係、探討組合意義以及相關的應用。

Abstract

A graph with no cycle is acyclic. A *tree* is a connected acyclic graph. A *leaf* is a vertex of degree one in a tree. The path which consists of the most vertices in a tree is called *spine*. If the spine of the tree is incident to every edge, the graph is called *caterpillar*. We try to explore the conversion rules and the duality relation of graph structures. And our research includes combinatorial properties, recurrence relations in quantity, and related applications for non-isomorphic caterpillars with n vertices and k leaves.

壹、前言

一、研究動機

在數學的世界裡，圖形的結構可以是個複雜難解的領域，但在生活上遇到需要分類分析的各個問題，利用特定圖形簡化問題是個不錯的解決方案。在專題研究課時，老師介紹圖論中樹狀圖的架構，以及它的常見用途是對資料做分類，我發現它依據分類情形不同而出現各種不同的結構，於是我開始思索是不是可以用一個特定的方法計算出固定頂點數量的所有不同構圖形總數，但是，若想知道全部種類的樹狀圖數量，要考慮到各個分支如何連接，有些樹狀圖是只有一層分岔，而有些是分岔以外還有下一層分岔，光是想歸類不同形式的圖形就已經是個大工程，龐大的資料量實在是超出我的能力範圍，於是我們開始嘗試簡化樹狀圖架構，專研於擁有較簡單結構且方便研究的毛毛蟲圖。

不久，在化學課時化學老師提到了有機化合物的同分異構物，乍看之下有些化合物的結構和毛毛蟲圖有幾分相似，每當遇到需要找出同分異構物數量的題目時，若可以用簡單的算式計算各個種類的不同構毛毛蟲圖數量，就等同於解決一大半的問題，這便引起了我的研究興趣。在老師的指引下，我閱讀了『*The number of caterpillars*』一文〔參考文獻5〕，內容提及固定頂點數量的毛毛蟲圖總數算式以及說明推論公式的方法，但除了了解固定頂點數的不同構毛毛蟲圖總數以外，我想更進一步研究毛毛蟲圖的各個特殊關係，於是我將『葉子點 (*leaf*)』的概念加入變數之一，探討不同頂點數及不同 *leaf* 數量會對各項毛毛蟲圖造成甚麼影響。在列舉毛毛蟲圖後，我發現每一次變數改變，似乎每一項圖形總數之間都有著特殊的遞迴關係，所以我試著再進一步探索圖形與圖形之間變化及歸納圖形來源，希望可以找出每一項不同構毛毛蟲圖的總數變化以及圖形間的特殊關係。

二、研究目的

將有 n 個頂點， k 個 *leaf* 的所有不同構毛毛蟲圖集合記為 $F(n, k)$ ，集合內元素總數量記為 $f(n, k)$ 。令 $F(n, k)$ 集合內具有線對稱結構圖形所組成的集合為 $S(n, k)$ ，其元素總數量記為 $s(n, k)$ 。將 n 個點的自我對偶毛毛蟲圖所形成的集合記為 D_n ，並將數量記為 d_n 。以下為我的研究目的：

1. 當 $n \geq 3$ 且 $2 \leq k \leq n-1$ ，討論 $F(n, k)$ 及 $F(n, n-k+1)$ 的圖形對應與數量關係；
2. 當 $n \geq 5$ 時，探討 $F(n, k)$ 與 $F(n-1, k-1)$ 、 $F(n-1, k)$ 兩者之間的圖形變化關係，進一步建立 $f(n, k)$ 的遞迴關係；

- 當 $n \geq 5$ 時，探討 $S(n, k)$ 與 $S(n-1, k-1)$ 、 $S(n-1, k)$ 兩者之間的圖形變化關係，並從中建立 $s(n, k)$ 的遞迴關係；
- 刻劃 $f(n, k)$ 、 $s(n, k)$ 與 d_n 的數量。

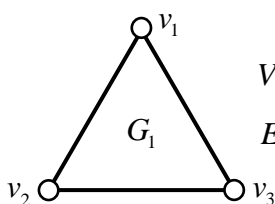
貳、研究方法或過程

一、基本概念、名詞解釋與先備知識

關於圖論的基本知識以及圖形的研究問題，想觀察出特定圖形的某種規律及現象並不容易，圖論的範圍十分廣大，涵蓋的各式圖形也是數不勝數，當圖形趨於複雜時，除了點與邊的基本概念以外，每個人對於圖形結構相關的名詞定義難免會有出入〔參考文獻 2, 4, 6〕，在研究過程中，為了方便闡述我的研究內容，我定義了許多的名詞，以便清楚地表達出我觀察到的圖形規律，我先將會用到的圖形概念及名詞定義依序在下方加以解釋。

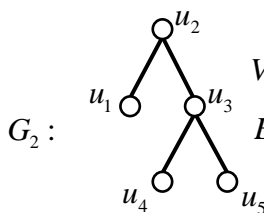
圖的概念

給定若干個點，為了呈現點與點之間的相關性，如果兩點之間有關係，則用一條邊將此兩點相連，則可得一個圖 G ，其中頂點的集合以 $V(G)$ 表示，邊的集合以 $E(G)$ 表示，其集合的元素數量分別記為 $|V(G)|$ 與 $|E(G)|$ 。若兩點 $u, v \in V(G)$ ，則將 u 與 v 所決定的邊記為 $uv \in E(G)$ 。如下圖所示，圖 G_1 的點集合為 $V(G_1) = \{v_1, v_2, v_3\}$ ，邊集合為 $E(G_1) = \{v_1v_2, v_2v_3, v_3v_1\}$ ，其中 $|V(G_1)| = 3$ 且 $|E(G_1)| = 3$ ；圖 G_2 的點集合為 $V(G_2) = \{u_1, u_2, u_3, u_4, u_5\}$ ，邊集合為 $E(G_2) = \{u_1u_2, u_2u_3, u_3u_4, u_3u_5\}$ ，其中 $|V(G_2)| = 5$ 且 $|E(G_2)| = 4$ 。



$$V(G_1) = \{v_1, v_2, v_3\}$$

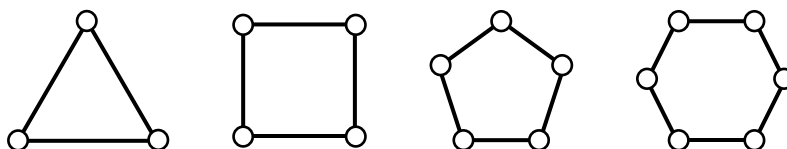
$$E(G_1) = \{v_1v_2, v_2v_3, v_3v_1\}$$



$$V(G_2) = \{u_1, u_2, u_3, u_4, u_5\}$$

$$E(G_2) = \{u_1u_2, u_2u_3, u_3u_4, u_3u_5\}$$

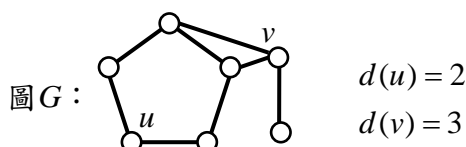
若圖 G 所有的頂點與邊恰好形成一個環狀圖形，則我們將此類型的圖稱為『圈 (cycle)』。上述的圖 G_1 即為一個圈，但圖 G_2 並不是一個圈。下列圖形即為長度是 3, 4, 5, 6 的圈。



給定圖 G ，若 $u \in V(G)$ 且 u 與自己有邊相連，意即 $uu \in E(G)$ ，則稱此邊為『迴圈 (loop)』；若 $u, v \in V(G)$ 且 u, v 兩點之間有兩條邊以上，則稱 u, v 之間有『重邊 (multiple edges)』。若圖 G 的結構中沒有迴圈且沒有重邊，則稱 G 為『簡單圖 (simple graph)』。以下我討論的所有圖形皆為連通的簡單圖。

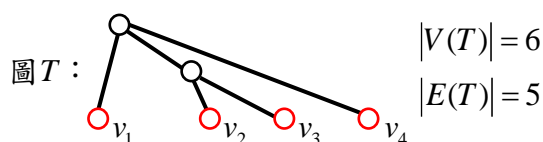
點的度數

對於一般的圖 G ，考慮頂點 $v \in V(G)$ ，若 v 連出去的邊恰有 k 條，則稱頂點 v 的『度數 (degree)』為 k ，以符號記為『 $d(v) = k$ 』。以下圖 G 為例， $d(u) = 2$ 與 $d(v) = 3$ 。



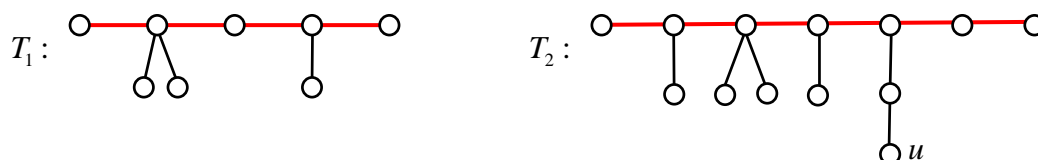
樹狀圖

一個連通圖的結構中若沒有包含任何的圈，則將此圖稱為『樹狀圖 (tree)』。令 T 為一個樹狀圖，不難得知頂點集合 $V(T)$ 與邊集合 $E(T)$ ，必滿足數量關係 $|V(T)| = |E(T)| + 1$ 。令 $v \in V(T)$ ，若 v 僅與一條邊相連，則稱此點 v 為樹狀圖 T 的一個『葉子點 (leaf)』。換句話說，若樹狀圖 T 的頂點 v 滿足 $d(v) = 1$ ，則 v 即為 T 的 leaf，反之亦然。如下圖所示，以樹狀圖 T 為例， $|V(T)| = 6$ 且 $|E(T)| = 5$ ，以紅色標示的頂點 v_1, v_2, v_3, v_4 皆為 leaf，共有 4 個 leaf。

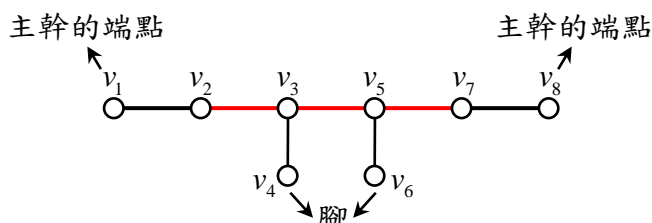


毛毛蟲圖

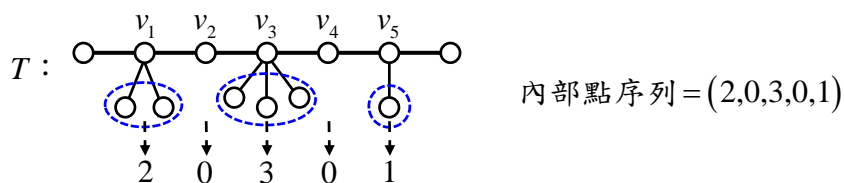
一個樹狀圖中以一筆不間斷經過最多頂點的路徑，稱為『主幹 (spine)』，若此樹狀圖滿足所有的 leaf 皆與主幹上的點相連，則特別將此樹狀圖稱為『毛毛蟲圖 (caterpillar)』。為了方便我們觀察圖形，之後的毛毛蟲圖我都會將主幹畫為一條筆直的路徑，把其他點分布於主幹下方。以下圖為例，紅色路徑為主幹，其中 T_1 為 8 個點且 5 個 leaf 的毛毛蟲圖；然而在 T_2 中，因為頂點 u 為 leaf，但是 u 沒有跟主幹上的點相連，因此 T_2 不為毛毛蟲圖。



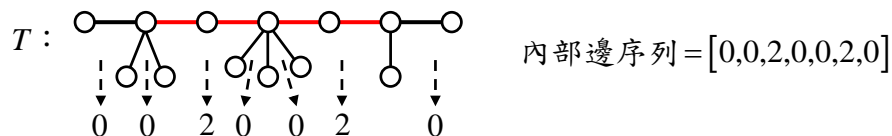
在一個毛毛蟲圖中，位於主幹上兩端的頂點稱之為『主幹的端點』；若頂點位於主幹上且不為主幹的端點，我們將其稱為『內部點』；內部點之間所連的邊稱作『內部邊』，不難得知內部邊的兩端頂點皆非 leaf；由於主幹上的兩端點必為 leaf，特別的我將非主幹上的 leaf 皆稱為『腳』。如下圖所示， $\{v_1, v_8\}$ 為主幹的端點， $\{v_2, v_3, v_5, v_7\}$ 為內部點，以紅色標示的邊皆為內部邊，意即 $\{v_2v_3, v_3v_5, v_5v_7\}$ 為內部邊的集合， $\{v_4, v_6\}$ 為腳形成的集合。



因為內部點 v 必與主幹上的兩點相連，所以我們將內部點 v 的度數 $d(v)$ 減 2，其數量 $d(v)-2$ 就表示有多少個腳和該內部點 v 相連。將各個內部點連接的腳數量依據由左至右的順序紀錄，作為內部點的特殊序列，我將其稱作『內部點序列』，並將此序列的左右兩側用小括號表示。如下圖 T 所示， $d(v_1)-2=2$ 、 $d(v_2)-2=0$ 、 $d(v_3)-2=3$ 、 $d(v_4)-2=0$ 、 $d(v_5)-2=1$ ，因此 T 的內部點序列為 $(2,0,3,0,1)$ 。不難得知，內部點序列中各項總和即為腳的總量。



我們針對主幹上每一個被腳分隔出來的區段，計算在此區段內的內部邊總數，將每一個數字由左至右紀錄形成一個序列，我將其稱作『內部邊序列』，並將此序列的左右兩側用中括號表示。如下圖 T 所示，紅色標示的邊為內部邊，圖 T 的內部邊序列為 $[0,0,2,0,0,2,0]$ 。不難得知，內部邊序列中各項總和即為內部邊的總量。



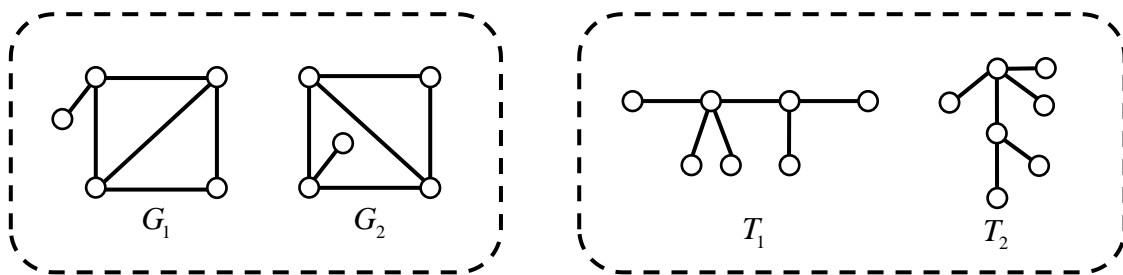
對於一個毛毛蟲圖，內部點序列與內部邊序列扮演的角色就像是毛毛蟲圖的身份代碼，不論是給定內部點序列或是內部邊序列，我們都可唯一決定毛毛蟲圖的結構。對於 n 個點與 k 個 leaf 的毛毛蟲圖，因為主幹上恰有 $n-k$ 個內部點，故內部點序列恰有 $n-k$ 項；因為恰有 $k-2$ 個腳，而 $k-2$ 個腳在主幹上分隔出 $k-1$ 個區段，故內部邊序列恰有 $k-1$ 項。

n 個點 k 個 leaf 的毛毛蟲圖	腳數量	內部點數量	內部點序列	內部邊數量	內部邊序列
	$k-2$ 個	$n-k$ 個	$n-k$ 項	$n-k-1$ 個	$k-1$ 項

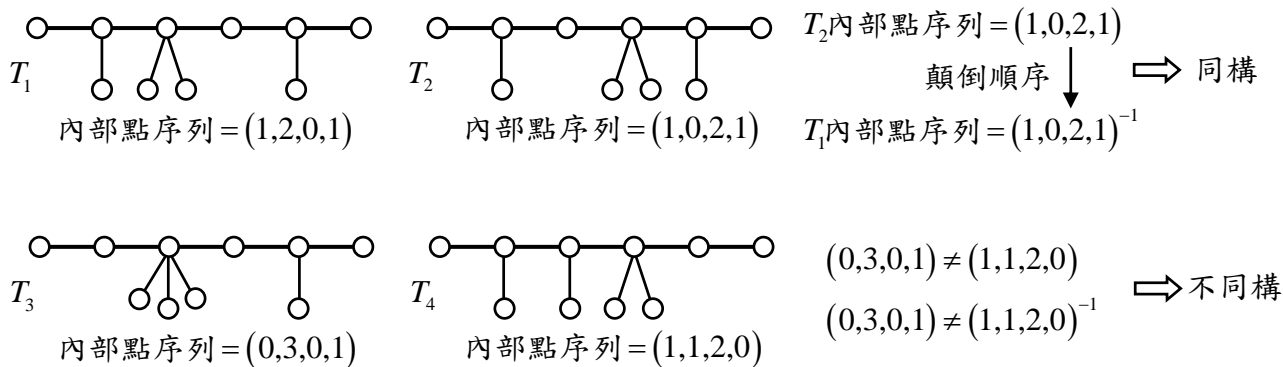
若將一個毛毛蟲圖的主幹左右順序對調，則連帶相對應的內部點序列及內部邊序列也會有不同的表示方法，如下方說明。令 (a_1, a_2, \dots, a_p) 為毛毛蟲圖 T 的內部點序列，若將 T 的主幹左右順序對調，則可得內部點序列為 $(a_p, a_{p-1}, \dots, a_1)$ 並記為 $\llbracket (a_p, a_{p-1}, \dots, a_1) = (a_1, a_2, \dots, a_p)^{-1} \rrbracket$ 。同理，對於內部邊序列 $[b_q, b_{q-1}, \dots, b_1] = [b_1, b_2, \dots, b_q]^{-1}$ 。特別的，當毛毛蟲圖為左右對稱的圖形時，則內部點序列與內部邊序列皆恰好只有一個情形，且兩種序列亦呈現左右對稱。

圖形的同構

若兩個圖 H 與 K 彼此之間有相同數量的點與邊，且點與邊的結構完全相同，則將此兩個圖形稱為『同構 (isomorphic)』，以符號記為 $\llbracket H \cong K \rrbracket$ 。以下圖為例，圖 G_1 與 G_2 為同構，記為 $G_1 \cong G_2$ ；毛毛蟲圖 T_1 與 T_2 也為同構，記為 $T_1 \cong T_2$ 。



我好奇的是對於兩個毛毛蟲圖，該如何有效率的判斷他們是否為同構？透過內部點序列的概念，若兩圖形 T_1 與 T_2 的內部點序列完全相同，或者是 T_1 的內部點序列完全顛倒順序後即為 T_2 的內部點序列，則稱兩毛毛蟲圖 T_1 與 T_2 為同構。反之，則稱為不同構。如下圖所示，圖 T_1 、 T_2 為同構；圖 T_3 、 T_4 則為不同構。



對於兩個內部點序列 (a_1, a_2, \dots, a_p) 與 (b_1, b_2, \dots, b_q) ，若 $\begin{cases} (a_1, a_2, \dots, a_p) \neq (b_1, b_2, \dots, b_q) \\ (a_1, a_2, \dots, a_p) \neq (b_1, b_2, \dots, b_q)^{-1} \end{cases}$ ，則

稱此兩序列為『不同構』。不難得知，不同構的內部點序列，所對應的毛毛蟲圖亦為不同構。同樣的我們也能利用內部邊序列來判斷圖形是否同構，對於兩個內部邊序列，若不論是否改變序列的左右順序，皆為不同的序列時，則亦稱此兩序列為不同構。

排列組合基本概念

在排列組合中， n 個相異物取出 k 個物品的組合數記為 C_k^n ，其中 $C_k^n = \frac{n!}{k!(n-k)!}$ 。對於重複組合，若從號碼 $1, 2, \dots, n$ 號選取 k 個數字，並允許數字可以重複選取，則所有可能情形可用數學式表達為 n 元一次方程式 $x_1 + x_2 + \dots + x_n = k$ 的所有『非負整數解』，其非負整數解的個數可視為 k 顆相同的球與 $n-1$ 條相同的直線進行排列，將個數記為 $H_k^n = C_k^{n+k-1} = \frac{(n+k-1)!}{k!(n-1)!}$ 。在後續我們分析毛毛蟲圖的數量時，將會運用到重複組合的概念。

二、毛毛蟲圖的歸納與探討

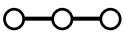
我們著重在毛毛蟲圖的頂點數與 leaf 數量之不同構圖形的探討，想要了解當頂點數 n 及 leaf 數量 k 有所改變時，對於各類型的不同構毛毛蟲圖總數有何影響。我的研究從大量的探究實作為基礎，由觀察做起，我先從數量較少的頂點數開始列舉，希望能進一步從中刻劃規律。

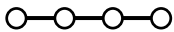
舉例觀察

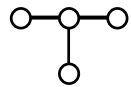
令毛毛蟲圖有 n 個點，其中 $n \geq 3$ ，leaf 最少為 2，最多為 $n-1$ 。令毛毛蟲圖的 leaf 數量為 k ，可知 leaf 的數量範圍為 $2 \leq k \leq n-1$ 。當固定毛毛蟲圖的點數為 n ，leaf 數量為 k 時，我想要列出每個不同構毛毛蟲圖的結構，將不同構毛毛蟲圖所形成的集合記為『 $F(n, k)$ 』，並將此集合的元素數量記為『 $f(n, k)$ 』，也就是說 $f(n, k)$ 等於 n 個點與 k 個 leaf 所能形成的不同構毛毛蟲圖總數量，特別的，當 $n=2$ 時， $f(2, 2)=1$ ；當 $k \notin \{2, 3, \dots, n-1\}$ ，則規定 $f(n, k)=0$ 。如下列圖形所示，條列出 $n=2, 3, 4, 5, 6, 7$ 的各種情形，而 $n=8, 9, 10$ 因數量繁多僅以數字表示成果，畫圖時我將腳盡量集中在左側，使其比較容易看出是否有繪製到重覆的圖形。

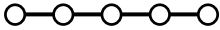
$$f(2, 2) = 1$$

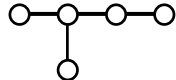
$n=2$ ○—○

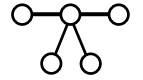
$$n=3 \quad f(3,2)=1$$


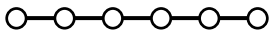
$$n=4 \quad f(4,2)=1$$


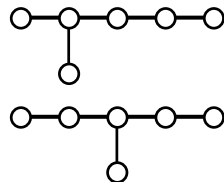
$$f(4,3)=1$$


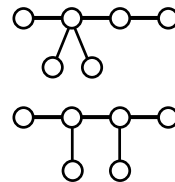
$$n=5 \quad f(5,2)=1$$


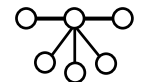
$$f(5,3)=1$$


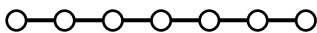
$$f(5,4)=1$$


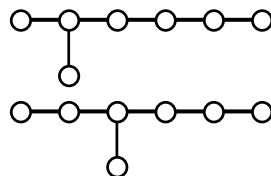
$$n=6 \quad f(6,2)=1$$


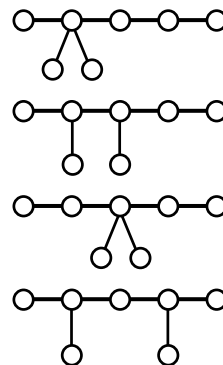
$$f(6,3)=2$$


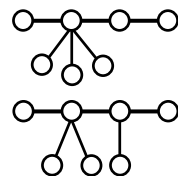
$$f(6,4)=2$$


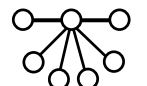
$$f(6,5)=1$$


$$n=7 \quad f(7,2)=1$$


$$f(7,3)=2$$


$$f(7,4)=4$$


$$f(7,5)=2$$


$$f(7,6)=1$$


$$n=8 \quad f(8,2)=1 \quad f(8,3)=3 \quad f(8,4)=6 \quad f(8,5)=6 \quad f(8,6)=3 \quad f(8,7)=1$$

$$n=9 \quad f(9,2)=1 \quad f(9,3)=3 \quad f(9,4)=9 \quad f(9,5)=10 \quad f(9,6)=9 \quad f(9,7)=3 \quad f(9,8)=1$$

$$n=10 \quad \text{數列 } \langle f(10,k) \rangle_{k=2}^9 = \langle 1, 4, 12, 19, 19, 12, 4, 1 \rangle$$

由上方舉例可知，隨著 n 變大 $f(n,k)$ 的值也隨之增加，當我繪製到 $f(12,5)=66$ 時，至此數量已為兩位數，似乎想知道各個 $f(n,k)$ 的數量不是透過窮舉法就可以解決，我試著找出可以歸納 $f(n,k)$ 總數的方法，也嘗試用遞迴關係解決後方數量漸增的問題。

統整與歸納

我們發現當點數每增加1時，其 leaf 數量的範圍也會增加1。例如，若頂點數為 $n \geq 3$ 時，

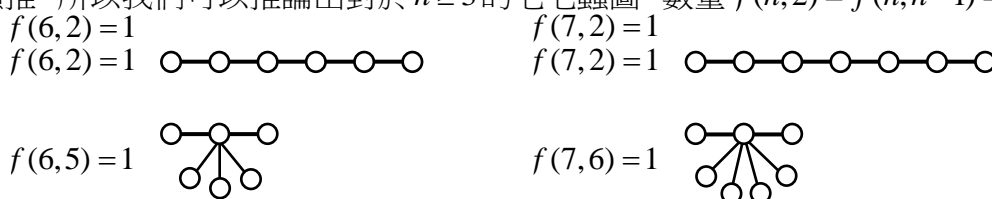
則 leaf 的數量介於 2 到 $n-1$ ，共 $n-2$ 個可能性；若頂點數為 $n+1$ 時，則 leaf 的數量就介於 2 到 n ，共 $n-1$ 個可能性。上述的關係似乎與巴斯卡三角形有相似之處，因此我將 $f(n,k)$ 排成類巴斯卡三角形，將 $f(2,2)$ 到 $f(9,8)$ 的值排列成下方形式，以符號及數字分開表示方便觀察。



透過將 $f(n,k)$ 排列成類巴斯卡三角形後，以下為我所觀察到的特殊現象，條列在下方：

- (1) 每一列的最左邊與最右邊的值皆恆為 1。意即對任意 $n \geq 3$ ， $f(n,2) = f(n,n-1) = 1$ ；
- (2) 每一列的數值皆為左右對稱。意即 $n \geq 3$ ， $2 \leq k \leq n-1$ ， $f(n,k) = f(n,n-k+1)$ 恆成立；
- (3) 考慮 $n \geq 5$ ，當 n 與 k 其中一個不是奇數時， $f(n,k)$ 的值皆等於上方相鄰兩項的總和。
意即 $f(n,k) = f(n-1,k-1) + f(n-1,k)$ ，在上方圖形以藍色標示的數字皆屬於此類；
- (4) 考慮 $n \geq 5$ ，當 n 與 k 兩者皆為奇數時， $f(n,k)$ 的值皆小於上方相鄰兩項的總和。
意即 $f(n,k) < f(n-1,k-1) + f(n-1,k)$ ，在上方圖形以紅色標示的數字皆屬於此類。

對於一般 $F(n,k)$ 中的圖形，不難得知圖形腳的總數為 $k-2$ ，內部點數量為 $n-k$ 。針對上述第 (1) 點的觀察，當 $k=2$ 時，因為腳數量為 0，也就是說， n 個頂點皆是主幹上的點，即為筆直的路徑圖 (*path*)，所以不會有第二種不同構的毛毛蟲圖出現，故 $f(n,2) = 1$ ，如下圖 $f(6,2)$ 及 $f(7,2)$ 為例；當 $k=n-1$ 時，因為內部點數量為 $n-(n-1)=1$ ，可確定主幹的頂點數量必為 3，然而腳可連接的點只有內部點，其中腳皆連接在正中間的內部點上，即為星狀圖 (*star*)，所以只會有一種形式的毛毛蟲圖出現，故 $f(n,n-1) = 1$ ，如下圖 $f(6,5)$ 及 $f(7,6)$ 為例。依此類推，所以我們可以推論出對於 $n \geq 3$ 的毛毛蟲圖，數量 $f(n,2) = f(n,n-1) = 1$ 恆成立。



$F(n,k)$ 與 $F(n,n-k+1)$ 的對偶關係

基於上述第(2)點觀察：每一列的數值皆呈現左右對稱，我們試著找出兩數值及其毛毛蟲圖之間的關聯性，下方條列出 $F(n,k)$ 和 $F(n,n-k+1)$ 兩圖形集合之間的對應方法及步驟，令 $G \in F(n,k)$ ，以下步驟將說明如何將 G 轉換成另一個毛毛蟲圖 G' ：

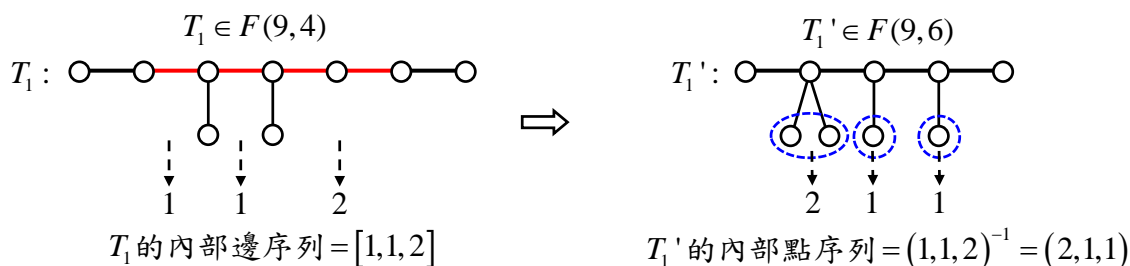
步驟 1：令 G 屬於 $F(n,k)$ ，可知其中包含 n 個頂點、 k 個 leaf、 $k-2$ 個腳、主幹上被腳分隔為 $k-1$ 個區段、內部點數量為 $n-k$ 個，內部邊數量為 $n-k-1$ 個。將圖 G 主幹上每一個被腳分隔的區段內所包含的內部邊數量由左至右紀錄，也就是該圖形的內部邊序列，令 G 的內部邊序列為 $[a_1, a_2, \dots, a_{k-1}]$ 。

步驟 2：將 G 的內部邊序列 $[a_1, a_2, \dots, a_{k-1}]$ 轉換成內部點序列 $(a_1, a_2, \dots, a_{k-1})^{-1}$ ，令此內部點序列 $(a_1, a_2, \dots, a_{k-1})^{-1} = (a_{k-1}, a_{k-2}, \dots, a_1)$ 所唯一決定的圖為 G' 。

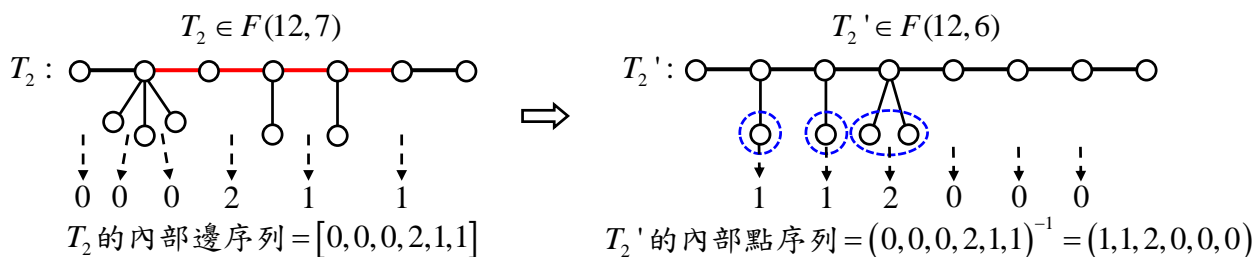
在步驟 2 中，內部點序列有無顛倒順序對於 G' 而言，差別只是有無左右翻轉，本身的結構不變，但是經過多次觀察後發現，顛倒順序可以盡量將腳集中在圖的左半邊，和原本我的繪圖習慣較相似，因此選擇轉換時顛倒序列，以便我們之後統整。

例如：

(1) 將 T_1 轉換成 T_1'



(2) 將 T_2 轉換成 T_2'



對於毛毛蟲圖 G ，令 G 的內部邊序列為 $[a_1, a_2, \dots, a_p]$ ，考慮以 $(a_1, a_2, \dots, a_p)^{-1}$ 作為內部點序列唯一決定的毛毛蟲圖 G' ，則我們稱 G' 為 G 的『對偶圖』。根據對偶圖的概念，我們有以下定理：

Theorem 1： $F(n, k)$ 與 $F(n, n-k+1)$ 的對偶關係

對於自然數 $n \geq 3$ ， $2 \leq k \leq n-1$ ，下列敘述恆成立：

- (1) 若 $G \in F(n, k)$ ，則 G 的對偶圖 $G' \in F(n, n-k+1)$ ；
- (2) $f(n, k) = f(n, n-k+1)$ 。

【證明】：

(1) 令 $G \in F(n, k)$ ，可知毛毛蟲圖 G 有 n 個頂點、 k 個 leaf、 $k-2$ 個腳、主幹上被腳分隔為 $k-1$ 個區段、內部點數量為 $n-k$ 個，內部邊數量為 $n-k-1$ 個。因為 G 的內部邊序列恰有 $k-1$ 項，令 G 的內部邊序列為 $[a_1, a_2, \dots, a_{k-1}]$ ，可知內部邊的總數為 $\sum_{i=1}^{k-1} a_i = n-k-1$ 。考慮 G 的對偶圖 G' ，則 G' 的內部點序列即為 $(a_1, a_2, \dots, a_{k-1})^{-1} = (a_{k-1}, a_{k-2}, \dots, a_1)$ 。因為 G' 的內部點序列共有 $k-1$ 項，所以 G' 的主幹上恰有 $(k-1)+2 = k+1$ 個點。因為內部點序列各項總和 $\sum_{i=1}^{k-1} a_i$ 即為腳的數量，所以 G' 共有 $n-k-1$ 個腳。然而主幹上的點數量與腳數量總和即為點的總數，由此可知 $|V(G')| = (k+1) + (n-k-1) = n$ ，故 G' 為具有 n 個點與 $n-k+1$ 個 leaf 的毛毛蟲圖，意即 $G' \in F(n, n-k+1)$ 。

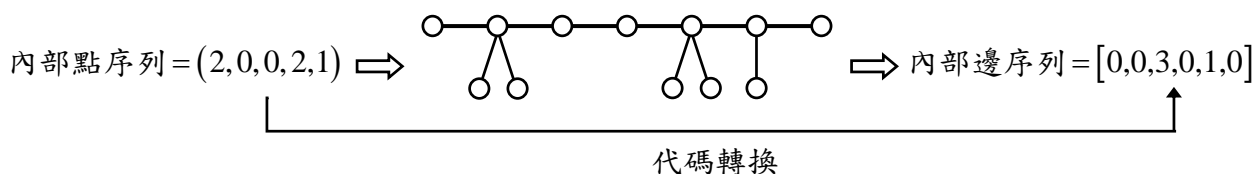
(2) 令 $G_1, G_2 \in F(n, k)$ 且 G_1 與 G_2 為不同構，所以 G_1 與 G_2 的內部邊序列亦不同構，將其轉換成內部點序列後亦不同構，因此 G_1' 與 G_2' 必為不同構的毛毛蟲圖。根據結論 (1)，可得 $f(n, k) \leq f(n, n-k+1)$ 。同理可知 $f(n, n-k+1) \leq f(n, k)$ 。故 $f(n, k) = f(n, n-k+1)$ 。 ■

由上述定理可知，若將 $f(n, k)$ 排成類帕斯卡三角形的樣子，對於每一列的數值，皆會呈現左右對稱的現象。透過對偶圖的概念，就可以得知其中圖形對應的關係。接下來我將介紹毛毛蟲圖的代碼轉換原則，進一步說明對偶圖的可逆關係。

內部點序列的代碼轉換

對於一個毛毛蟲圖，不論是透過內部點序列或是內部邊序列，皆可作為此毛毛蟲圖的身份代碼，都能唯一決定毛毛蟲圖。若給定內部點序列，我們可將毛毛蟲圖的結構畫出來，再

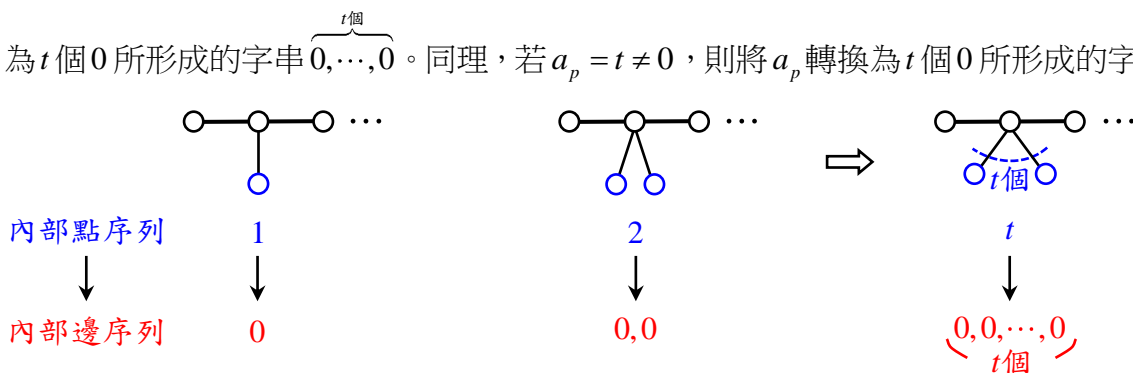
從圖形的結構決定出內部邊序列。以下圖為例，可知內部點序列與內部邊序列必然有密切的關連性，因此接下來我將探討，如何將內部點序列視為字串，直接轉換為內部邊序列的原則。



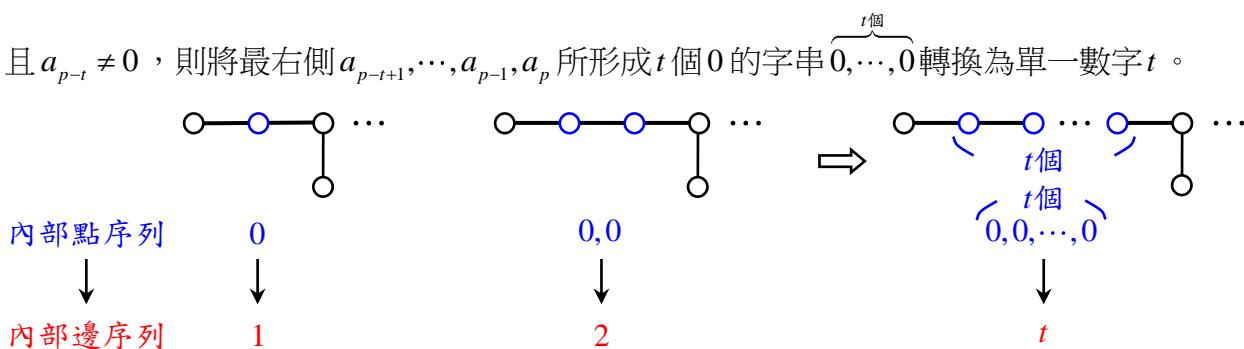
給定毛毛蟲圖，令 (a_1, a_2, \dots, a_p) 為其內部點序列，首先我觀察兩側的代碼轉換規則：

【觀察兩側的代碼轉換】

若 $a_1 = t \neq 0$ ，因為 t 隻腳所分隔的區段中，共有 t 個區段皆不包含內部邊，所以將 a_1 轉換為 t 個 0 所形成的字串 $\overbrace{0, \dots, 0}^{t \text{ 個}}$ 。同理，若 $a_p = t \neq 0$ ，則將 a_p 轉換為 t 個 0 所形成的字串 $\overbrace{0, \dots, 0}^{t \text{ 個}}$ 。

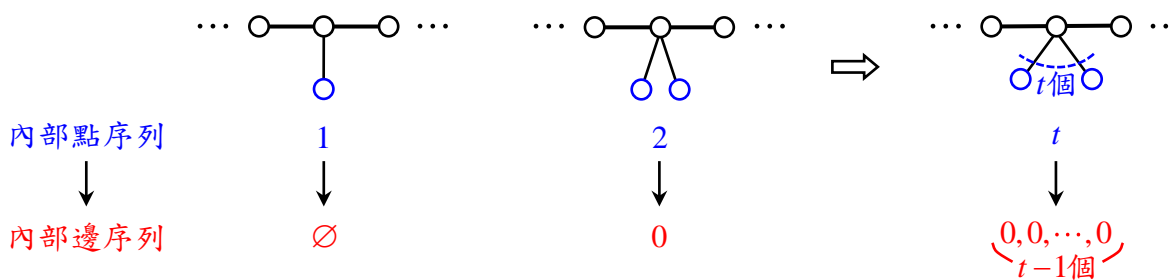


若 $a_1 = a_2 = \dots = a_t = 0$ 且 $a_{t+1} \neq 0$ ，因為此範圍中主幹上的邊恰包含 t 個內部邊，所以將最左側 a_1, a_2, \dots, a_t 所形成 t 個 0 的字串 $\overbrace{0, \dots, 0}^{t \text{ 個}}$ 轉換為單一數字 t 。同理，若 $a_{p-t+1} = \dots = a_{p-1} = a_p = 0$ 且 $a_{p-t} \neq 0$ ，則將最右側 $a_{p-t+1}, \dots, a_{p-1}, a_p$ 所形成 t 個 0 的字串 $\overbrace{0, \dots, 0}^{t \text{ 個}}$ 轉換為單一數字 t 。



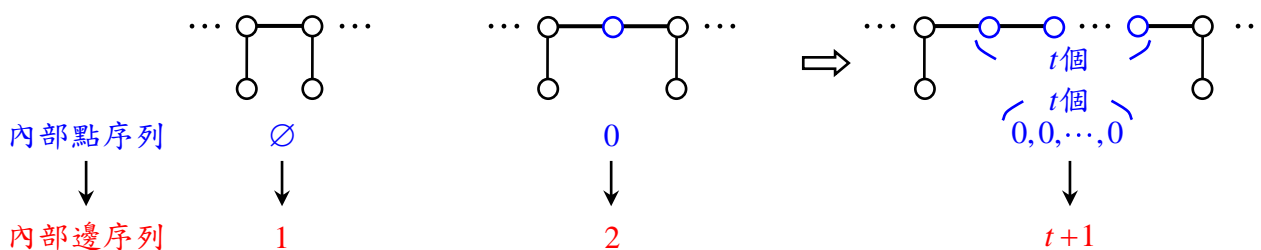
【觀察非兩側的代碼轉換】

考慮 $2 \leq i \leq p-1$ ，若 $a_i = t \neq 0$ ，因為 t 隻腳所分隔的區段中，共有 $t-1$ 個區段皆不包含內部邊，所以將 a_i 轉換為 $t-1$ 個 0 所形成的字串 $\overbrace{0, \dots, 0}^{t-1 \text{ 個}}$ 。



若 $a_i \neq 0$ ， $a_{i+1} = a_{i+2} = \dots = a_{i+t} = 0$ 且 $a_{i+t+1} \neq 0$ ，因為此範圍中主幹上的邊恰包含 $t+1$ 個內

部邊，所以將 $a_{i+1}, a_{i+2}, \dots, a_{i+t}$ 所形成 t 個 0 的字串 $\overbrace{0, \dots, 0}^{t \text{ 個}}$ 轉換為單一數字 $t+1$ 。特別的當 $t=0$ 時，若 $a_i \neq 0$ 且 $a_{i+1} \neq 0$ ，則直接新增單一數字 1。



綜合上述討論，我將內部點序列 (a_1, a_2, \dots, a_p) 由左至右代碼轉換的四條原則說明如下：

內部點序列代碼轉換的原則

若毛毛蟲圖 G 的內部點序列為 (a_1, a_2, \dots, a_p) ，經過下列規則進行代碼轉換後，即可得 G 的內部邊序列。

Rule-1：若 $a_1 = t \neq 0$ ，則將 a_1 轉換為 t 個 0 所形成的字串 $\overbrace{0, \dots, 0}^{t \text{ 個}}$ ；

若 $a_p = t \neq 0$ ，則將 a_p 轉換為 t 個 0 所形成的字串 $\overbrace{0, \dots, 0}^{t \text{ 個}}$ 。

Rule-2：若 $a_1 = a_2 = \dots = a_i = 0$ 且 $a_{i+1} \neq 0$ ，則將 a_1, a_2, \dots, a_i 形成的字串 $\overbrace{0, \dots, 0}^{i \text{ 個}}$ 轉換為數字 t ；

若 $a_{p-t+1} = \dots = a_{p-1} = a_p = 0$ 且 $a_{p-t} \neq 0$ ，則將最右側 $a_{p-t+1}, \dots, a_{p-1}, a_p$ 所形成的字串

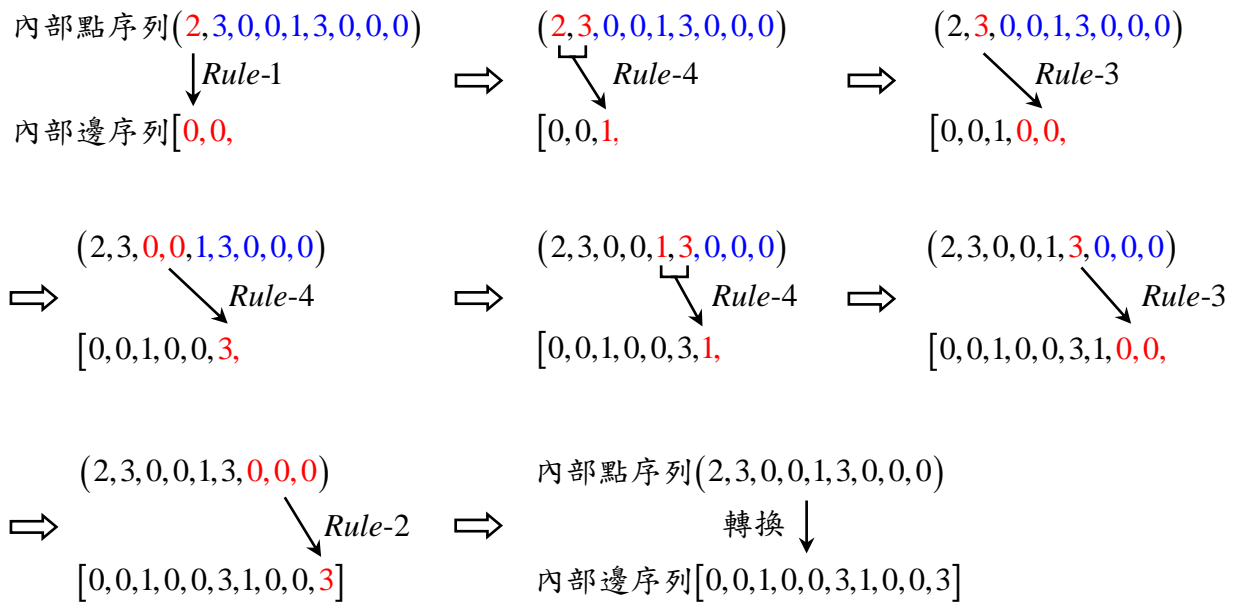
$\overbrace{0, \dots, 0}^{t \text{ 個}}$ 轉換為數字 t 。

Rule-3：考慮 $2 \leq i \leq p-1$ ，若 $a_i = t \neq 0$ ，則將 a_i 轉換為 $t-1$ 個 0 所形成的字串 $\overbrace{0, \dots, 0}^{t-1 \text{ 個}}$ 。

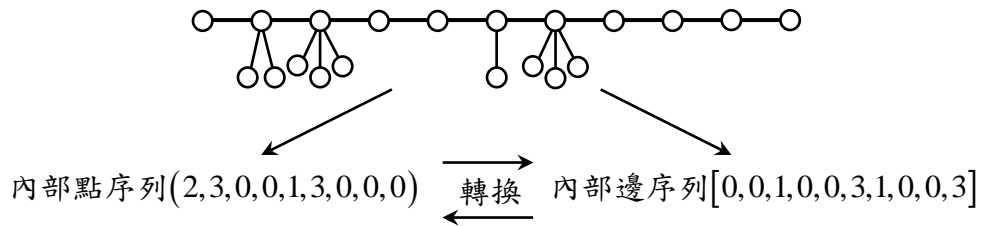
Rule-4：若 $a_i \neq 0$ ， $a_{i+1} = a_{i+2} = \dots = a_{i+t} = 0$ 且 $a_{i+t+1} \neq 0$ ，則將 $a_{i+1}, a_{i+2}, \dots, a_{i+t}$ 所形成的字串

$\overbrace{0, \dots, 0}^{t \text{ 個}}$ 轉換為數字 $t+1$ 。

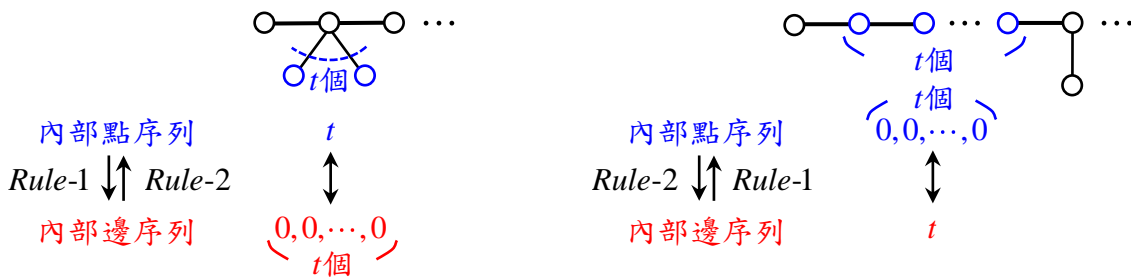
例如：考慮內部點序列(2,3,0,0,1,3,0,0,0)，經過代碼轉換即可得[0,0,1,0,0,3,1,0,0,3]為內部邊序列，兩者都代表同一個毛毛蟲圖。下方為代碼轉換的流程圖。



事實上，如果將內部邊序列透過上述四條代碼轉換原則，亦可轉換為該圖的內部點序列。



上述內部點序列轉換為內部邊序列的四條原則中，可以看出對於左右兩端的代碼，Rule-1與Rule-2是為互逆對應；而對於內部的代碼，Rule-3與Rule-4亦是互逆對應。這表示，這四條代碼轉換的原則是可逆的，換句話說，這四條原則不僅可以將內部點序列轉換為內部邊序列，亦可將內部邊序列轉換還原為內部點序列，兩者之間猶如反函數的關係。



(無論點序列或邊序列，Rule-1 & Rule-2 互相對應)



根據上述代碼轉換的四條原則，可知同一個毛毛蟲圖的內部點序列與內部邊序列可以透過代碼轉換互相對應，因此我們有以下引理：

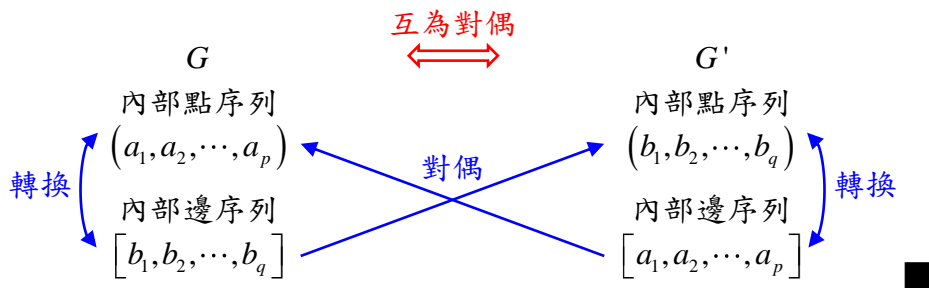
Lemma 1：代碼轉換原則的可逆性
 考慮序列 $\langle a_1, a_2, \dots, a_p \rangle$ 與 $\langle b_1, b_2, \dots, b_q \rangle$ 。若 $\langle a_1, a_2, \dots, a_p \rangle$ 經過代碼轉換後可得 $\langle b_1, b_2, \dots, b_q \rangle$ ，則 $\langle b_1, b_2, \dots, b_q \rangle$ 經過代碼轉換後亦可得 $\langle a_1, a_2, \dots, a_p \rangle$ 。

利用 Lemma 1，可知內部點序列與內部邊序列是可以互相轉換的，進一步則有以下定理：

Theorem 2：互為對偶關係
 若 G' 為毛毛蟲圖 G 的對偶圖，則 G 必為 G' 的對偶圖。意即， $(G')' = G$ 。

【證明】：

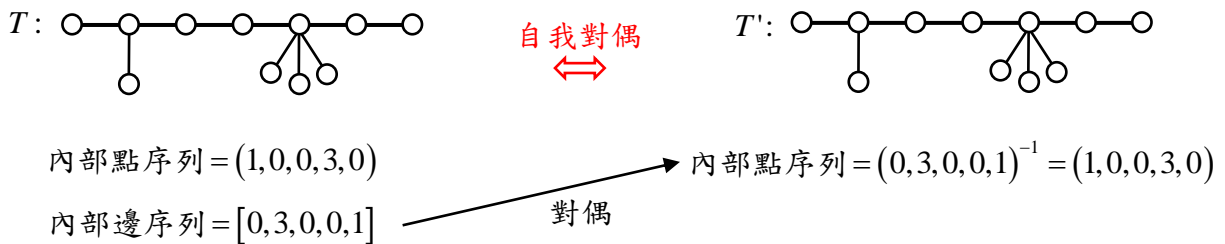
令 G 的內部點序列為 (a_1, a_2, \dots, a_p) 且經過代碼轉換後可得內部邊序列為 $[b_1, b_2, \dots, b_q]$ 。根據 Lemma 1 的結論可知 $[b_1, b_2, \dots, b_q]$ 經過代碼轉換後亦可得 (a_1, a_2, \dots, a_p) 。已知 G' 為 G 的對偶圖，所以 (b_1, b_2, \dots, b_q) 為 G' 的內部點序列，因此序列 (b_1, b_2, \dots, b_q) 經過代碼轉換後可得 G' 的內部邊序列為 $[a_1, a_2, \dots, a_p]$ 。因為 (a_1, a_2, \dots, a_p) 為 G 的內部點序列，由此可知， G 即為 G' 的對偶圖。換句話說，若 G' 為 G 的對偶圖，則 G' 的對偶圖 $(G')'$ 即為 G 。



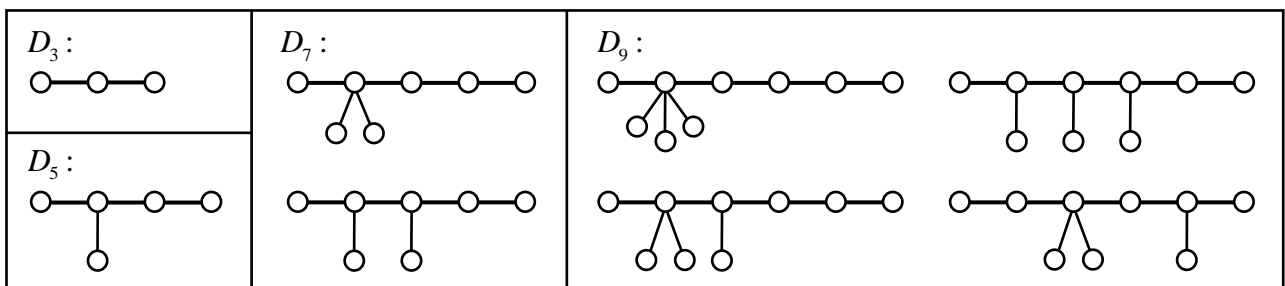
自我對偶的數量刻劃

我們知道若 G 與 G' 互為對偶圖，則兩者的內部點序列與內部邊序列有相互對應關係，意即 G 的內部點序列可對應為 G' 的內部邊序列，而 G 的內部邊序列可對應為 G' 的內部點序列。根據 Theorem 1 可知， $F(n,k)$ 與 $F(n,n-k+1)$ 的圖形具備對偶關係，若考慮 $k = n - k + 1$ ，則 $k = \frac{n+1}{2}$ ，這表示當 n 為奇數且 $k = \frac{n+1}{2}$ 時， $F(n,k) = F(n,n-k+1)$ 。換句話說當 n 為奇數且 $k = \frac{n+1}{2}$ 時， $F(n,k)$ 中的對偶圖亦屬於 $F(n,k)$ ，然而我好奇的是，是否存在毛毛蟲圖 $G \in F(n,k)$ ，滿足 G 的對偶圖就是自己本身？意即 $G' = G$ 。若毛毛蟲圖 G 的對偶圖 $G' = G$ ，則稱 G 為『自我對偶』。可知一個自我對偶的毛毛蟲圖，若其內部點序列為 (a_1, a_2, \dots, a_p) ，則經過代碼轉換的原則後所得的內部邊序列即為 $[a_p, a_{p-1}, \dots, a_1]$ 。

考慮下方的毛毛蟲圖 T ，其中 T 的內部點序列為 $(1,0,0,3,0)$ ，其內部邊序列為 $[0,3,0,0,1]$ ，則可知其對偶圖 T' 的內部點序列亦為 $(1,0,0,3,0)$ ，這表示 $T' = T$ 。



根據 Theorem 1 的結論 (1) 可知，若 $F(n,k)$ 中有自我對偶毛毛蟲圖，則 n 必為奇數且 $k = \frac{n+1}{2}$ ，因此 n 個點的自我對偶毛毛蟲圖必屬於 $F(n, \frac{n+1}{2})$ ，將 n 個點的自我對偶毛毛蟲圖所形成的集合記為『 D_n 』，並將數量記為『 d_n 』。欲討論自我對偶毛毛蟲圖，我先觀察 $F(3,2)$ 、 $F(5,3)$ 、 $F(7,4)$ 與 $F(9,5)$ 中自我對偶的圖形，如下圖所示，可得 $d_3 = 1$ 、 $d_5 = 1$ 、 $d_7 = 2$ 與 $d_9 = 4$ 。



對於 n 個點的自我對偶毛毛蟲圖，其內部點序列我們有以下引理：

Lemma 2：自我對偶的序列特性

令 $G \in D_n$ 且 G 的內部點序列為 (a_1, a_2, \dots, a_p) ，其中 $p = \frac{n-1}{2}$ ，則有以下特性：

- (1) a_1 與 a_p 恰有一個為零；
- (2) 內部點序列 $(a_1 + 1, a_2, \dots, a_p, 0)$ 與 $(0, a_1, a_2, \dots, a_p + 1)$ 所決定的毛毛蟲圖皆屬於 D_{n+2} 。

【證明】：

因為 $G \in D_n$ 且內部點序列為 (a_1, a_2, \dots, a_p) ，所以 G 的內部邊序列為 $[a_p, a_{p-1}, \dots, a_1]$ 。

- (1) 當 a_1 與 a_p 不全為零時，不失一般性，假設 $a_1 = t \neq 0$ 。根據內部點序列轉換代碼的原則，

Rule-1 將 a_1 轉換為 t 個 0 所形成的字串 $\overbrace{0, \dots, 0}^{t \text{ 個}}$ ，可知在內部邊序列中 $a_p = a_{p-1} = \dots = a_{p-t+1} = 0$ ，因此 a_p 必為零。

當 $a_1 = 0$ 時，假設 $a_1 = a_2 = \dots = a_t = 0$ 且 $a_{t+1} \neq 0$ ，其中 $t \neq 0$ 。根據內部點序列轉換代碼的

原則，*Rule-2* 將 a_1, a_2, \dots, a_t 形成的字串 $\overbrace{0, \dots, 0}^{t \text{ 個}}$ 轉換為數字 t ，可知在內部邊序列中 $a_p = t$ ，因此 a_p 必不為零。

- (2) 根據結論 (1)，不失一般性，假設 $a_1 \neq 0$ 且 $a_p = 0$ 。令 $A_1 = (a_1 + 1, a_2, \dots, a_p, 0)$ 所決定的毛毛蟲圖為 G_1 ，因為此序列的項數比原序列多了一項，這表示 G_1 主幹上的點比 G 主幹上的點多了 1；因為此序列的元素總和比原序列元素總和多了 1，這表示 G_1 的 leaf 比 G 的 leaf 多了 1。由此可知 G_1 比 G 多了 2 個點且多了 1 個 leaf。因為 $G \in F(n, \frac{n+1}{2})$ ，所以

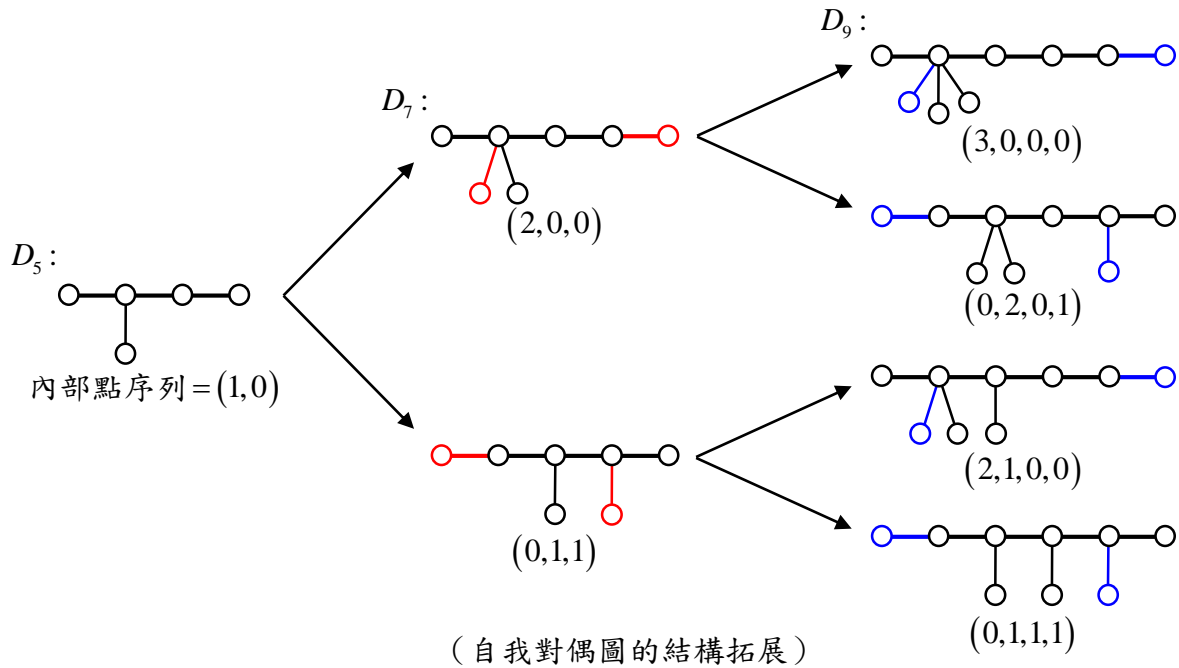
$G_1 \in F(n+2, \frac{n+3}{2})$ 。假設 $a_1 = t \neq 0$ ，根據內部點序列轉換代碼的原則，*Rule-1* 將 a_1 轉換

為 t 個 0 所形成的字串 $\overbrace{0, \dots, 0}^{t \text{ 個}}$ ，可知 $a_p = a_{p-1} = \dots = a_{p-t+1} = 0$ 。對於序列 A_1 ，*Rule-1* 將 $a_1 + 1$

轉換為 $t+1$ 個 0 所形成的字串 $\overbrace{0, \dots, 0, 0}^{t+1 \text{ 個}}$ 。又因為序列 A_1 最後的 $t+1$ 項皆為 0，*Rule-2* 將

最後的 $t+1$ 項所形成的字串 $\overbrace{0, \dots, 0, 0}^{t+1 \text{ 個}}$ 轉換為 $t+1$ 即為 $a_1 + 1$ 。由此可知 G_1 的內部邊序列即為 $[0, a_p, a_{p-1}, \dots, a_1 + 1]$ ，故 G_1 為自我對偶的毛毛蟲圖，意即 $G_1 \in D_{n+2}$ 。令

$A_2 = (0, a_1, a_2, \dots, a_p + 1)$ 所決定的毛毛蟲圖為 G_2 。根據內部點序列轉換代碼的原則，同理可知， $G_2 \in F(n+2, \frac{n+3}{2})$ 且 $G_2 \in D_{n+2}$ 。■



Theorem 3：自我對偶的數量刻劃

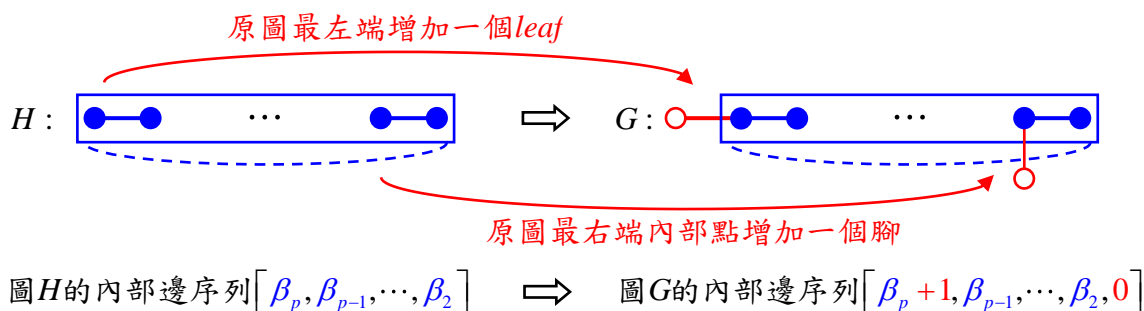
令 $n \geq 5$ 為奇數， n 個點的自我對偶毛毛蟲圖數量為 $d_n = 2^{\frac{n-5}{2}}$ 。

【證明】：

根據 Lemma 2 的結論 (2) 可知，對任意 $T \in D_n$ ， T 的內部點序列可以延伸出兩個不同的內部點序列，其對應的圖形皆屬於 D_{n+2} 。由此可知，對任意奇數 $n \geq 5$ ，其數量關係式滿足 $2d_n \leq d_{n+2}$ 。

考慮一個自我對偶圖 $G \in D_{n+2}$ ，其內部點序列為 $(a_1, a_2, a_3, \dots, a_p)$ 且內部邊序列為 $[a_p, a_{p-1}, \dots, a_2, a_1]$ ，根據 Lemma 2 的結論 (1) 可知，內部點序列的首項與末項恰有一個為零，不失一般性，假設 $a_1 = 0$ 且 $a_p \neq 0$ ，可知內部點序列為 $(0, a_2, a_3, \dots, a_p)$ ，將此序列的首項刪除且末項減去1之後，所得的新序列為 $(a_2, a_3, \dots, a_p - 1)$ 且對應的圖形為 H ，不難得知， $H \in F(n, \frac{n+1}{2})$ 。已知 H 的內部點序列為 $(\alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_p) = (a_2, a_3, \dots, a_p - 1)$ ，令 H 的內部邊序列為 $[\beta_p, \beta_{p-1}, \dots, \beta_2]$ ，因為 H 是刪除圖 G 的左端點與最右邊的腳所得的圖形，所以 G 的內部

邊序列可由 H 的內部邊序列反推，因此可得 G 的內部邊序列為 $[a_p, a_{p-1}, \dots, a_2, a_1] = [\beta_p + 1, \beta_{p-1}, \dots, \beta_2, 0]$ 。欲說明 $H \in D_n$ ，則必須驗證對任意 $2 \leq i \leq p$ ， $\alpha_i = \beta_i$ 。



因為 $(\alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_p) = (a_2, a_3, \dots, a_p - 1)$ ，所以 $\alpha_i = \begin{cases} a_i & , \text{當 } 2 \leq i \leq p-1 \\ a_p - 1 & , \text{當 } i = p \end{cases}$ ；因為

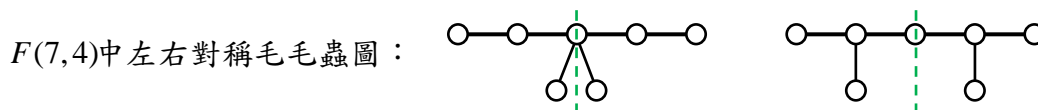
$[a_p, a_{p-1}, \dots, a_2, a_1] = [\beta_p + 1, \beta_{p-1}, \dots, \beta_2, 0]$ ，所以 $\beta_i = \begin{cases} a_i & , \text{當 } 2 \leq i \leq p-1 \\ a_p - 1 & , \text{當 } i = p \end{cases}$ 。由此可知對任意

$2 \leq i \leq p$ ， $\alpha_i = \beta_i$ 恆成立，故對任意 $G \in D_{n+2}$ ，皆存在一個圖 $H \in D_n$ 與之對應，透過此種圖形轉換方法我們可以確定，每一個自我對偶圖必定可找到該圖的來源。所以可推得 d_{n+2} 不會大於 $2d_n$ ，因此 $2d_n = d_{n+2}$ 。

考慮數列 $\langle d_5, d_7, d_9, \dots \rangle$ ，因為每一次圖形皆以一對應二的方式等倍數增加，所以自我對偶圖的數量 $\langle d_5, d_7, d_9, \dots \rangle$ 為首項 $d_5 = 1$ 且公比為 2 的等比數列，故可得一般項 $d_n = 2^{\frac{n-5}{2}}$ 。■

對稱毛毛蟲圖的刻劃 $s(n, k)$

在繪製毛毛蟲圖的過程中，我們發現在特定 n 個點及 k 個 leaf 時會有線對稱結構的圖形產生，將其作為 $F(n, k)$ 中的特例，並將這種具有左右對稱毛毛蟲圖的所成的集合記為『 $S(n, k)$ 』，總數量記為『 $s(n, k)$ 』。 $S(n, k)$ 中的圖形可以透過內部點序列確認，只要符合內部點序列 $(a_1, a_2, \dots, a_{n-k}) = (a_1, a_2, \dots, a_{n-k})^{-1}$ 即為擁有左右對稱的結構。以在前方呈現過的 $F(n, k)$ 列舉為例，可知 $s(7, 3) = 0$ 、 $s(7, 4) = 2$ 。特別的，若 $k \notin \{2, 3, \dots, n-1\}$ ，則規定 $s(n, k) = 0$ 。



接著我們發現 $s(n, k)$ 的數量似乎和 n 與 k 的奇偶性有關，因此我們將 $s(n, k)$ 依 n 與 k 的奇偶性分成四大類討論，試著用重複組合的概念去刻劃 $s(n, k)$ 的公式，則有以下定理：

Theorem 4：對稱毛毛蟲圖的數量 $s(n, k)$

考慮 n 個點， k 個 leaf 的毛毛蟲圖，令結構具有左右對稱的毛毛蟲圖數量為 $s(n, k)$ ，則

$$s(n, k) = \begin{cases} C_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-4}{2}}, & \text{當 } n \text{ 為偶數, } k \text{ 為偶數} \\ C_{\frac{k-3}{2}}^{\frac{n-4}{2}}, & \text{當 } n \text{ 為偶數, } k \text{ 為奇數} \end{cases}, \quad s(n, k) = \begin{cases} C_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-3}{2}}, & \text{當 } n \text{ 為奇數, } k \text{ 為偶數} \\ 0, & \text{當 } n \text{ 為奇數, } k \text{ 為奇數} \end{cases}.$$

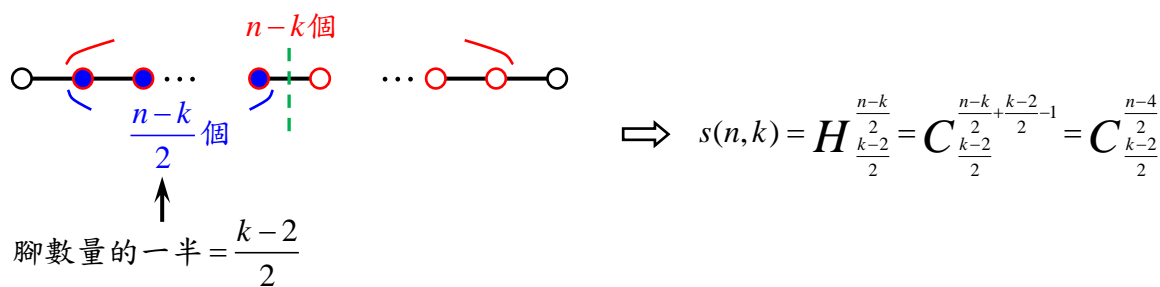
【證明】：

令 T 為 n 個點與 k 個 leaf 且結構為左右對稱的毛毛蟲圖，所以我們只要知道在主幹中以對稱軸切割出的其中一個半邊，腳在內部點上的分布狀態，即可得知 T 的整體圖形結構。以下證明過程皆以 T 在主幹上的對稱軸之左半邊為主，考慮其中內部點與腳的不同連接情形，利用內部點數量的一半及腳數量的一半做分配，配合 n 與 k 的奇偶性，以重複組合概念計算，再轉換為組合數的方式呈現，即可得到每個 $s(n, k)$ 數量公式。

(1) 當 n 為偶數， k 為偶數時。內部點數量的一半為 $\frac{n-k}{2}$ 個，腳數量的一半為 $\frac{k-2}{2}$ 個。因

為 $\frac{n-k}{2}$ 及 $\frac{k-2}{2}$ 皆為正整數，用重複組合的概念計算 $\frac{k-2}{2}$ 個腳分配給 $\frac{n-k}{2}$ 個內部點可

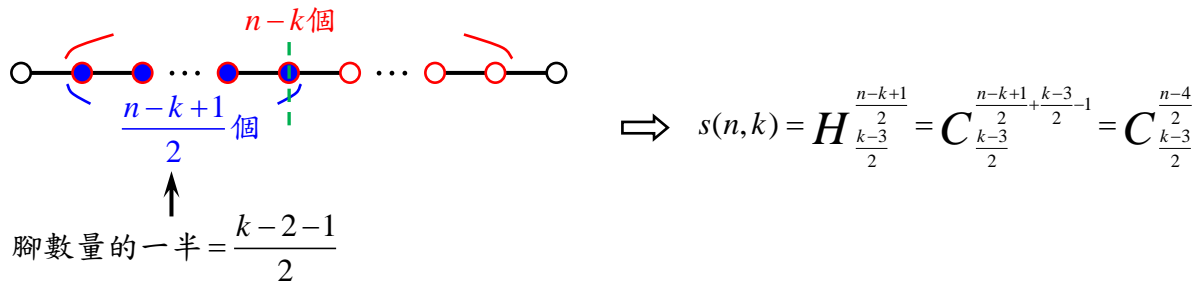
能的情形，共有 $H_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-k}{2}}$ 個，可知 $s(n, k) = H_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-k}{2}} = C_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-4}{2}}$ 。



(2) 當 n 為偶數， k 為奇數時。因為內部點數量 $n-k$ 為奇數，所以對稱軸必通過主幹上正中央的內部點。因為腳的數量 $k-2$ 為奇數，所以正中央的內部點所連結的腳數也必為奇數，故先固定1個腳在正中央的內部點，將剩餘的 $k-3$ 個腳左右對稱分配在主幹上，由

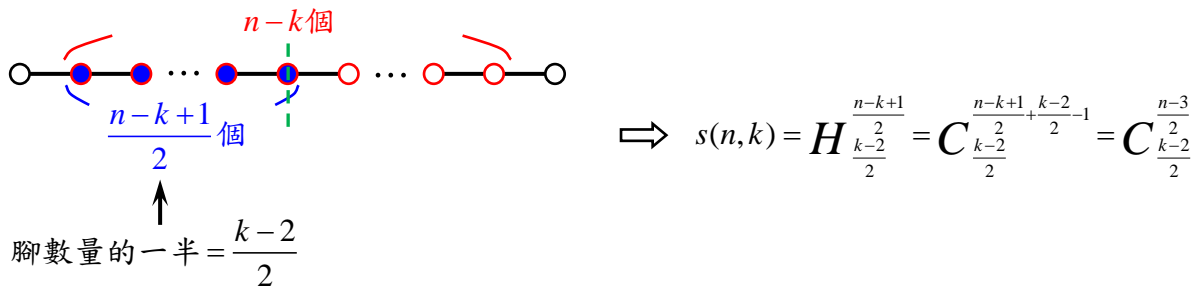
此可知，將 $\frac{k-3}{2}$ 個腳分配給左半部 $\frac{n-k+1}{2}$ 個內部點的所有可能分布情形，即為左右對

稱的圖形總數，同樣透過重複組合的概念可知 $s(n, k) = H_{\frac{k-3}{2}}^{\frac{n-k+1}{2}} = C_{\frac{k-3}{2}}^{\frac{n-4}{2}}$ 。

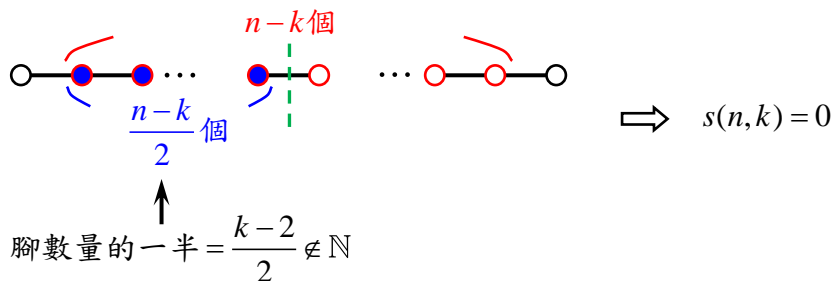


(3) 當 n 為奇數， k 為偶數。因為內部點數量 $n-k$ 為奇數，所以對稱軸必通過主幹上正中央的內部點。因為腳的數量 $k-2$ 為偶數，所以正中央的內部點所連結的腳數也必為偶數，故將 $k-2$ 個腳左右對稱分配在主幹上，由此可知，將 $\frac{k-2}{2}$ 個腳分配給左半部 $\frac{n-k+1}{2}$ 個內部點的所有可能分布情形，即為左右對稱的圖形總數，同樣地，透過重複組合的概念

可知 $s(n, k) = H_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-k+1}{2}} = C_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-3}{2}}$ 。



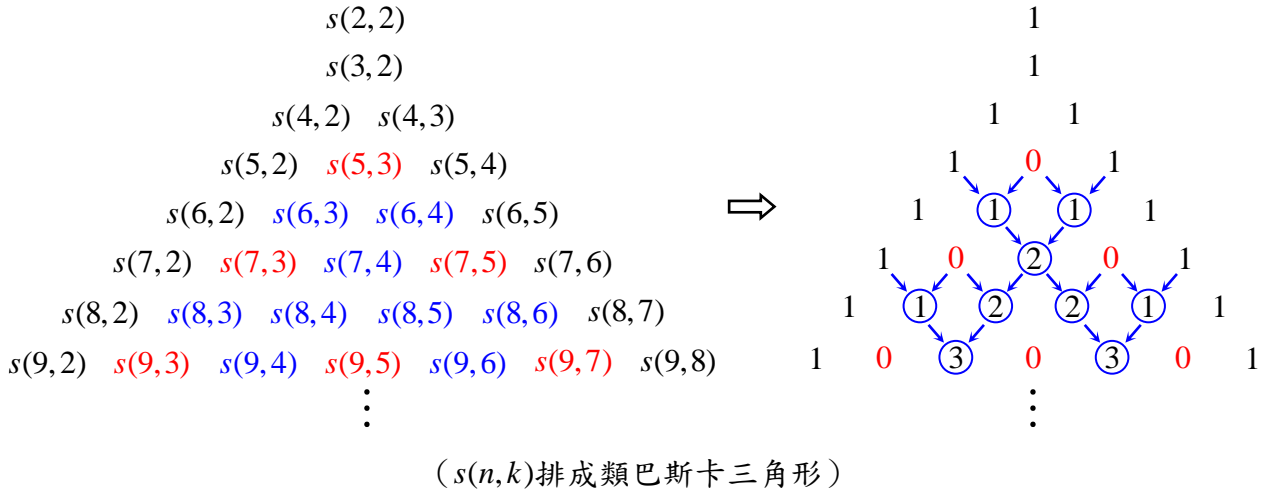
(4) 當 n 為奇數， k 為奇數。因為內部點數量 $n-k$ 為偶數，所以內部點數量的一半為 $\frac{n-k}{2}$ 個。因為腳的數量 $k-2$ 為奇數，且主幹中恰好沒有在對稱軸上的內部點，所以 $k-2$ 個腳無法左右對稱分配在主幹上，所以當 n 為奇數， k 為奇數時，這樣的毛毛蟲圖不存在，也就是 $s(n, k) = 0$ 。



對稱毛毛蟲圖的組合意義

對於 n 個點， k 個 leaf 且為左右對稱的毛毛蟲圖，在刻劃出 $s(n, k)$ 的值之後，我們發現他們的關係似乎跟巴斯卡定理也有相似之處，因此我們將 $s(n, k)$ 的值排成類巴斯卡三角形，將

$s(2,2)$ 到 $s(9,8)$ 的值排列於下方形式，以符號及數字分開表示方便觀察。



透過將 $s(n,k)$ 排列成類帕斯卡三角形後，觀察特殊現象，故有以下定理：

Theorem 5 : $s(n,k)$ 的組合性質

考慮 n 個點， k 個 leaf 的毛毛蟲圖，令結構具有左右對稱的毛毛蟲圖數量為 $s(n,k)$ ，則：

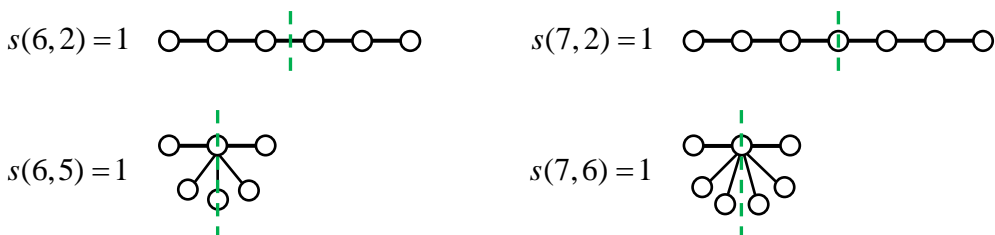
- (1) 每一列的最左邊與最右邊的值皆恆為 1。意即對任意 $n \geq 3$ ， $s(n,2) = s(n,n-1) = 1$ ；
- (2) 每一列的數值皆為左右對稱。意即 $n \geq 3$ ， $2 \leq k \leq n-1$ ， $s(n,k) = s(n,n-k+1)$ 恆成立；
- (3) 考慮 $n \geq 5$ ，當 n 與 k 其中一個不是奇數時， $s(n,k)$ 的值皆等於上方相鄰兩項的總和。
意即 $s(n,k) = s(n-1,k-1) + s(n-1,k)$ ，在上方圖形以藍色標示的數字皆屬於此類；

- (4) 考慮 $n \geq 5$ ，當 n 與 k 兩者皆為奇數時， $s(n,k)$ 的值皆為零。

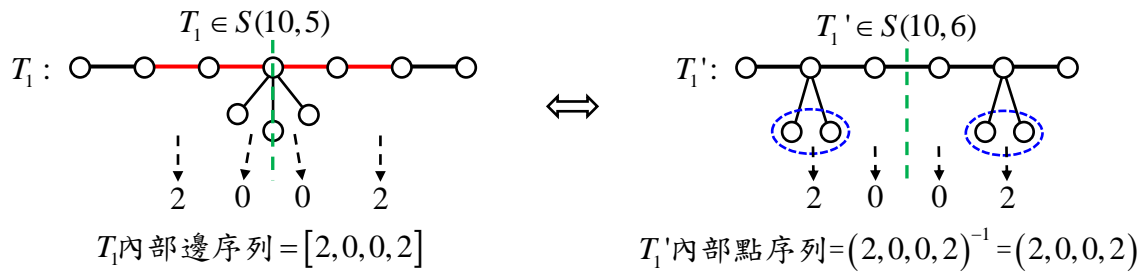
意即 $s(n,k) = 0$ ，在上方圖形以紅色標示的數字皆屬於此類。

【證明】：

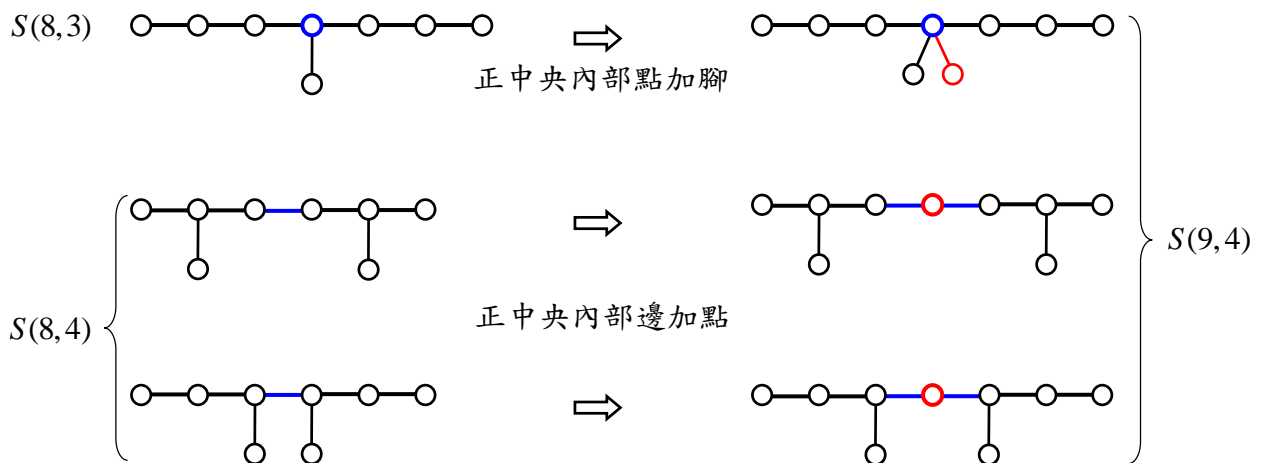
(1) 針對第一點，當 $k = 2$ 時，腳數量為 0，其中 n 個頂點皆是主幹上的頂點，呈一直線排列，可知此種圖形必為對稱且不會有第二種不同構的毛毛蟲圖出現，故 $s(n,2) = 1$ ；當 $k = n-1$ 時，因為內部點數量為 $n - (n-1) = 1$ ，且腳只可以連接在內部點上，所以此種圖形的腳皆連接在正中央的內部點上，可知此種毛毛蟲圖必為對稱且只有一種結構，故 $s(n,n-1) = 1$ 。所以我們可以推論出對於 $n \geq 3$ 的毛毛蟲圖，數量 $s(n,2) = s(n,n-1) = 1$ 恆成立。下圖以 $s(6,2)$ 、 $s(7,2)$ 、 $s(6,5)$ 、 $s(7,6)$ 為例，綠色虛線為該圖的對稱軸。



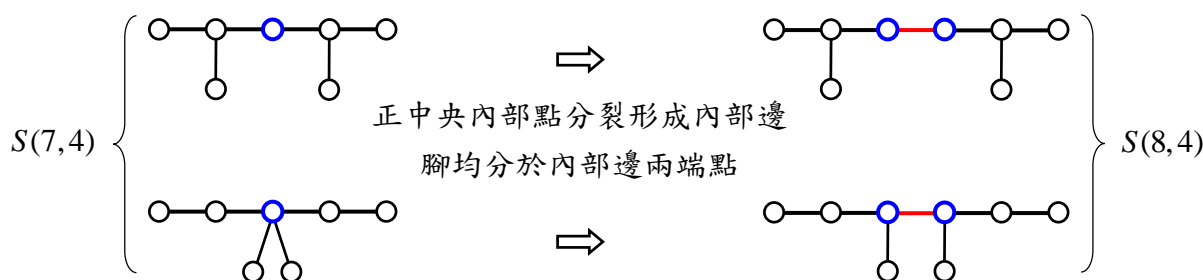
(2) 針對第二點，利用在前方提及的 $F(n,k)$ 及 $F(n,n-k+1)$ 對偶圖關係，因為 $S(n,k)$ 為線對稱圖形的集合，可知其內部邊序列必皆為左右對稱，將其轉換為對偶圖的內部點序列後依然左右對稱，所以 $S(n,k)$ 的對偶圖必屬於 $S(n,n-k+1)$ 且 $s(n,k) = s(n,n-k+1)$ 恆成立。以下圖為例，呈現 $S(10,5)$ 及 $S(10,6)$ 中的對偶圖轉換。



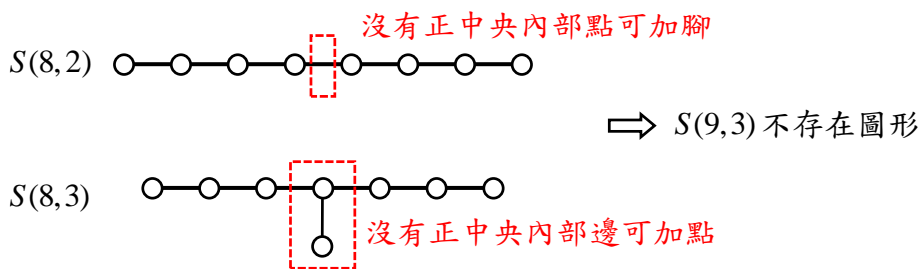
(3) 針對第三點，當 n 與 k 其中一個不是奇數時，我們發現除了 $s(n,k)$ 的值之間有特殊關係式 $s(n,k) = s(n-1,k-1) + s(n-1,k)$ 之外，毛毛蟲圖本身的結構變化似乎也有跡可循。令毛毛蟲圖屬於 $S(n,k)$ 且 n 與 k 其中一個為偶數，另一個為奇數，將 $S(n,k)$ 集合內的各個不同構圖形視為來自於 $S(n-1,k-1)$ 或 $S(n-1,k)$ 的圖形結構多增加一個頂點而形成，可以依據增加頂點的位置判斷出圖形來源。對於來自 $S(n-1,k-1)$ 的圖形而言，不難得知，增加的一個頂點必須是 $S(n,k)$ 的其中一個 leaf，為了保持圖形的對稱性，該增加的頂點只能連接在正中央的內部點上，也就是說，來自 $S(n-1,k-1)$ 的圖形，在正中央的內部點加上一個腳即可變成 $S(n,k)$ 圖形；對於來自 $S(n-1,k)$ 的圖形而言，不難得知，增加的頂點不可以是 $S(n,k)$ 的其中一個 leaf，必須是 $S(n,k)$ 的內部點，為了維持圖形的對稱性，該頂點只能加在主幹上的正中央內部邊上，也就是說，來自 $S(n-1,k)$ 的圖形，在主幹的正中央加上一個內部點即可變成 $S(n,k)$ 圖形。以下圖為例，表示 $s(8,3) + s(8,4) = s(9,4)$ 。



若毛毛蟲圖屬於 $S(n, k)$ 且 n 與 k 皆為偶數，將 $S(n, k)$ 集合內的各個不同構圖形視為來自於 $S(n-1, k-1)$ 或 $S(n-1, k)$ 的圖形結構多增加一個頂點而形成。對於來自 $S(n-1, k-1)$ 的圖形而言，由 Theorem 4 可知當圖形的頂點數與 leaf 數量皆為奇數時，集合內對稱圖形數量為 0，因此 $S(n, k)$ 的圖形來源必為 $S(n-1, k)$ ；對於來自 $S(n-1, k)$ 的圖形而言，可知增加的頂點必為 $S(n, k)$ 的內部點，為了維持圖形的對稱性，將正中央內部點分裂形成兩個內部點，同時也形成一條內部邊， $S(n, k)$ 的對稱軸會通過該條新增的內部邊；若 $S(n-1, k)$ 的正中央內部點有腳連接，因為圖形結構對稱，所以 $S(n-1, k)$ 正中央內部點所連接的腳數量必為偶數，為了保持圖形對稱性，必須將 $S(n-1, k)$ 中連接於正中央內部點的所有腳，平均分配於 $S(n, k)$ 正中央內部邊的兩端點，使兩端點所連接的腳數量皆為 $S(n-1, k)$ 圖形中分布於正中央內部點之腳數量的一半。以下圖為例，表示 $s(7, 3) + s(7, 4) = s(8, 4)$ 。



(4) 針對第四點，當 n 與 k 兩者皆為奇數時， $s(n, k) = 0$ ，除了直接以排列組合得知，若想利用如同上述第三點圖形之間的變化關係也可以發現。令毛毛蟲圖屬於 $S(n, k)$ 且 n 與 k 皆為奇數，若將 $S(n, k)$ 集合內的一部份圖形視為來自於 $S(n-1, k-1)$ 各圖形在正中央的內部點加一個腳，但是 $n-1$ 及 $k-1$ 皆為偶數，不難得知其內部點數量為偶數，不會有正中央的內部點，所以此種圖形不存在；同樣地，若將 $S(n, k)$ 視為來自於 $S(n-1, k)$ 各圖形在主幹正中央內部邊加上一個頂點形成，但是 $n-1$ 為偶數且 k 為奇數，不難得知其內部點數量為奇數，內部邊數量為偶數，因此不會有正中央的內部邊可以加點，此種變換方法也不可行，所以我們可以得知 $s(n, k) = 0$ 。以下圖為例。



Theorem 5 的結論 (3) 與 (4) 從圖形對應的觀點，說明了 $s(n, k)$ 的值具有遞迴關係

$$s(n, k) = \begin{cases} s(n-1, k-1) + s(n-1, k) & , \text{當 } n, k \text{ 不全為奇數} \\ 0 & , \text{當 } n, k \text{ 全為奇數} \end{cases} \text{ , 其中初始狀態為 } s(3, 2) = 1 \text{ 。 然而利用}$$

Theorem 4，透過 $s(n, k)$ 的組合數公式，也可以說明 $s(n, k)$ 存在遞迴關係。例如當 n 為奇數， k

為偶數時，可知 $s(n, k) = C_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-3}{2}}$ 、 $s(n-1, k-1) = C_{\frac{k-4}{2}}^{\frac{n-5}{2}}$ 且 $s(n-1, k) = C_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-5}{2}}$ 。考慮 $s(n-1, k-1)$ 與

$s(n-1, k)$ 的和，根據巴斯卡定理可知 $C_{\frac{k-4}{2}}^{\frac{n-5}{2}} + C_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-5}{2}} = C_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-3}{2}}$ ，故 $s(n-1, k-1) + s(n-1, k) = s(n, k)$ 成

立。當 n 與 k 為其他奇偶性的情形時，同理可說明遞迴關係式的成立。

三、不同構毛毛蟲圖數量的探討

考慮 n 個點， k 個 leaf 的毛毛蟲圖， $F(n, k)$ 為不同構的圖形所形成的集合，對於不同的參數 n 與 k ，隨著 n 與 k 的數值增加， $F(n, k)$ 的數量也隨之增加，所以我們想用較為具體的組合數刻劃出 $f(n, k)$ 的值，並從中思考圖形結構與數值之間的相關變化，探討組合性質。

$f(n, k)$ 的數量刻劃

以 $f(10, 5)$ 為例，可知 $F(10, 5)$ 集合內各圖形的內部點數量皆為 5 個，腳數量為 3 個，若內部點序列為 $(a_1, a_2, a_3, a_4, a_5)$ ，則 $a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5 = 3$ 。我們可以利用重複組合計算五元一次方程式 $a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5 = 3$ 的所有非負整數解的個數為 $H_3^5 = C_3^7 = 35$ ，該組合數代表著 3 個腳在內部點序列的所有可能分布情形，但因為 $F(10, 5)$ 集合中每一個不對稱圖形的內部點序列共有兩種表示法，如： $(2, 0, 1, 0, 0)$ 及 $(0, 0, 1, 0, 2)$ 為同構，決定同一個毛毛蟲圖（如下圖為例），因此計算非負整數解的個數時，同一個不對稱圖形將會被重複計算為兩次；對於 $F(10, 5)$ 集合內的對稱圖形，因為對稱圖形的內部點序列及其倒序後完全相同，因此計算非負整數解的個數時，同一個對稱圖形恰計算到一次。由於上述關係，可知重複組合數 $H_3^5 = C_3^7 = 35$ 中包含著『 $s(10, 5) = 3$ 個對稱圖形被計算一次』及『 $\frac{35-3}{2} = 16$ 個不對稱圖形皆被計算到兩次』，所以我們將該重複組合數加上 $s(10, 5)$ 形成兩次對稱圖形及兩次不對稱圖形後同除以二，即可得

$$f(10, 5) = \frac{H_3^5 + s(10, 5)}{2} = \frac{35 + 3}{2} = 19 \text{ 。}$$



利用上述相同的分析方法，對於一般的 $n \geq 5$ 與 k ，我將 $f(n, k)$ 的值刻劃如下：

Theorem 6： $f(n, k)$ 的刻劃

考慮 $n \geq 5$ 個點， k 個 leaf 的毛毛蟲圖，則 $f(n, k) = \frac{1}{2} (C_{k-2}^{n-3} + s(n, k))$ 。

【證明】：

令 $T \in F(n, k)$ ，其中 $n \geq 5$ ，可知內部點數量為 $n - k$ 個，腳數量為 $k - 2$ 個，假設其內部點序列為 $(a_1, a_2, \dots, a_{n-k})$ ，已知毛毛蟲圖的內部點序列各項加總即為腳數量，所以 $F(n, k)$ 集合內圖形皆符合 $a_1 + a_2 + \dots + a_{n-k} = k - 2$ ，又以重複組合計算 $a_1 + a_2 + \dots + a_{n-k} = k - 2$ 的所有非負整數解的個數為 $H_{k-2}^{n-k} = C_{k-2}^{n-3}$ ，該組合數 $H_{k-2}^{n-k} = C_{k-2}^{n-3}$ 代表所有以 n 個點、 k 個 leaf 構成之毛毛蟲圖的內部點序列總數量。根據圖形的對稱與否，考慮圖 T 的兩種可能結構，若 T 為不對稱圖形， T 的內部點序列總共有兩種表示方法 $(a_1, a_2, \dots, a_{n-k})$ 及 $(a_{n-k}, \dots, a_2, a_1)$ ，這兩個序列皆會被計算於重複組合數中，所以在該組合數 C_{k-2}^{n-3} 中同一個不對稱圖形將被重複計算到兩次；然而若圖 T 為對稱圖形，可知其內部點序列及其倒序後為相同序列，所以同一個對稱圖形只會被計算到一次，可知 C_{k-2}^{n-3} 的值為兩次重覆計算的不對稱圖形加上一個對稱圖形的總數量。因此將 C_{k-2}^{n-3} 再加上 $s(n, k)$ 後該數值即為計算兩次對稱圖形及兩次不對稱圖形，再將其除以二，可形成一次對稱圖形加上一個不對稱圖形的數量，即可得 $F(n, k)$ 集合內所有不同構圖形總數

$$f(n, k) = \frac{1}{2} (C_{k-2}^{n-3} + s(n, k)) \quad \blacksquare$$

Theorem 7： $f(n, k)$ 的遞迴關係

考慮 $n \geq 5$ 個點， k 個 leaf 的毛毛蟲圖：

- (1) 當 n 與 k 其中一個不是奇數時，則 $f(n, k) = f(n-1, k-1) + f(n-1, k)$ ；
- (2) 當 n 與 k 兩者皆為奇數時，則 $f(n, k) = f(n-1, k-1) + f(n-1, k) - s(n-1, k-1)$ 。

【證明】：

(1) 考慮 n 與 k 其中一個不是奇數時，由 Theorem 6 可知 $f(n, k) = \frac{1}{2} (C_{k-2}^{n-3} + s(n, k))$ ，可推論

$f(n-1, k-1) = \frac{1}{2}(C_{k-3}^{n-4} + s(n-1, k-1))$ 且 $f(n-1, k) = \frac{1}{2}(C_{k-2}^{n-4} + s(n-1, k))$ 。利用 Theorem 5 的結論 (3) 可知 $s(n-1, k-1) + s(n-1, k) = s(n, k)$ ，根據巴斯卡定理可知 $C_{k-3}^{n-4} + C_{k-2}^{n-4} = C_{k-2}^{n-3}$ 。考慮 $f(n-1, k-1)$ 與 $f(n-1, k)$ 的總和，可推得 $f(n-1, k-1) + f(n-1, k) = \frac{1}{2}(C_{k-3}^{n-4} + s(n-1, k-1)) + \frac{1}{2}(C_{k-2}^{n-4} + s(n-1, k)) = \frac{1}{2}(C_{k-2}^{n-3} + s(n, k)) = f(n, k)$ 。可知當 n 與 k 其中一個不是奇數時， $f(n, k) = f(n-1, k-1) + f(n-1, k)$ 恆成立。

(2) 考慮 n 與 k 兩者皆為奇數時，由 Theorem 6 可知 $f(n, k) = \frac{1}{2}(C_{k-2}^{n-3} + s(n, k))$ ，可推論

$f(n-1, k-1) = \frac{1}{2}(C_{k-3}^{n-4} + s(n-1, k-1))$ 且 $f(n-1, k) = \frac{1}{2}(C_{k-2}^{n-4} + s(n-1, k))$ 。但由 Theorem 5

的結論 (4) 得知當 n 與 k 兩者皆為奇數時 $s(n, k) = 0$ ，所以 $f(n, k) = \frac{1}{2}(C_{k-2}^{n-3})$ 。根據巴

斯卡定理，可知 $f(n-1, k-1) + f(n-1, k) = \frac{1}{2}(C_{k-2}^{n-3} + s(n-1, k-1) + s(n-1, k))$ 。利用

Theorem 4 可知 $s(n-1, k-1) = s(n-1, k) = C_{\frac{k-3}{2}}^{\frac{n-5}{2}}$ ，由此可得當 n 與 k 兩者皆為奇數時，

$f(n, k) = f(n-1, k-1) + f(n-1, k) - s(n-1, k-1)$ 。■

結合 Theorem 4 及 Theorem 6，我們已知 $s(n, k)$ 及 $f(n, k)$ 的組合數量，接著對於 n 個點所形成的所有不同構毛毛蟲圖，我們可以計算 $\{f(n, k) : k = 2, 3, \dots, n-1\}$ 的加總情形，因此有以下推論：

Corollary

n 個點的不同構毛毛蟲圖數量為 $2^{n-4} + 2^{\lfloor \frac{n-4}{2} \rfloor}$ 。

【證明】：

根據 Theorem 6 可知 n 個點、 k 個 leaf 的不同構毛毛蟲圖總數為 $f(n, k) = \frac{1}{2}(C_{k-2}^{n-3} + s(n, k))$ ，而

Theorem 4 可知 $s(n, k) = \begin{cases} C_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-4}{2}}, & \text{當 } n \text{ 為偶數，} k \text{ 為偶數} \\ C_{\frac{k-3}{2}}^{\frac{n-4}{2}}, & \text{當 } n \text{ 為偶數，} k \text{ 為奇數} \end{cases}$ ， $s(n, k) = \begin{cases} C_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-3}{2}}, & \text{當 } n \text{ 為奇數，} k \text{ 為偶數} \\ 0, & \text{當 } n \text{ 為奇數，} k \text{ 為奇數} \end{cases}$ 。

以下計算 $\{f(n, k) : k = 2, 3, \dots, n-1\}$ 的總和。

$$\begin{aligned}
 \text{考慮 } \sum_{k=2}^{n-1} f(n, k) &= f(n, 2) + f(n, 3) + f(n, 4) + \dots + f(n, n-1) \\
 &= \frac{1}{2} \left(C_0^{n-3} + s(n, 2) \right) + \frac{1}{2} \left(C_1^{n-3} + s(n, 3) \right) + \frac{1}{2} \left(C_2^{n-3} + s(n, 4) \right) + \dots + \frac{1}{2} \left(C_{n-3}^{n-3} + s(n, n-1) \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left(C_0^{n-3} + C_1^{n-3} + C_2^{n-3} + \dots + C_{n-3}^{n-3} \right) + \frac{1}{2} \left(s(n, 2) + s(n, 3) + s(n, 4) + \dots + s(n, n-1) \right) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-3} C_i^{n-3} + \frac{1}{2} \left(s(n, 2) + s(n, 3) + s(n, 4) + \dots + s(n, n-1) \right) \\
 &= \frac{1}{2} \times 2^{n-3} + \frac{1}{2} \left(s(n, 2) + s(n, 3) + s(n, 4) + \dots + s(n, n-1) \right) \quad (\text{根據二項式定理}) \\
 &= 2^{n-4} + \frac{1}{2} \left(s(n, 2) + s(n, 3) + s(n, 4) + \dots + s(n, n-1) \right)
 \end{aligned}$$

接下來依照 n 的奇偶性整合 $(s(n, 2) + s(n, 3) + s(n, 4) + \dots + s(n, n-1))$ 的值。

當 n 是偶數時，

$$\begin{aligned}
 \sum_{k=2}^{n-1} f(n, k) &= 2^{n-4} + \frac{1}{2} \left(s(n, 2) + s(n, 3) + s(n, 4) + \dots + s(n, n-1) \right) \\
 &= 2^{n-4} + \frac{1}{2} \left(C_0^{\frac{n-4}{2}} + C_0^{\frac{n-4}{2}} + C_1^{\frac{n-4}{2}} + C_1^{\frac{n-4}{2}} + \dots + C_{\frac{n-4}{2}}^{\frac{n-4}{2}} + C_{\frac{n-4}{2}}^{\frac{n-4}{2}} \right) \\
 &= 2^{n-4} + \frac{1}{2} \left(2 \sum_{i=0}^{\frac{n-4}{2}} C_i^{\frac{n-4}{2}} \right) = 2^{n-4} + \sum_{i=0}^{\frac{n-4}{2}} C_i^{\frac{n-4}{2}} = 2^{n-4} + 2^{\frac{n-4}{2}}
 \end{aligned}$$

當 n 是奇數時，

$$\begin{aligned}
 \sum_{k=2}^{n-1} f(n, k) &= 2^{n-4} + \frac{1}{2} \left(s(n, 2) + s(n, 3) + s(n, 4) + \dots + s(n, n-1) \right) \\
 &= 2^{n-4} + \frac{1}{2} \left(C_0^{\frac{n-3}{2}} + 0 + C_1^{\frac{n-3}{2}} + 0 + C_2^{\frac{n-3}{2}} + 0 + \dots + 0 + C_{\frac{n-3}{2}}^{\frac{n-3}{2}} \right) \\
 &= 2^{n-4} + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{\frac{n-3}{2}} C_i^{\frac{n-3}{2}} = 2^{n-4} + \frac{1}{2} \times 2^{\frac{n-3}{2}} = 2^{n-4} + 2^{\frac{n-5}{2}}
 \end{aligned}$$

由上述證明可知，不論 n 為奇數或是偶數，我們皆可以將 $\{f(n, k) : k = 2, 3, \dots, n-1\}$ 的加總數值

利用高斯符號將兩式概括，即可記為 $2^{n-4} + 2^{\lfloor \frac{n-4}{2} \rfloor}$ ，也就是說，由 n 個點所構成的不同構毛毛

蟲圖總數量為 $2^{n-4} + 2^{\lfloor \frac{n-4}{2} \rfloor}$ 。■

由上述推論可知，若給定 n 個頂點，利用 $2^{n-4} + 2^{\lfloor \frac{n-4}{2} \rfloor}$ 即可計算出所有不同構毛毛蟲圖的總數量，此推論與 *The number of caterpillars* 文章中的結論相同〔參考文獻 5〕，有趣的地方在於論文中作者先觀察毛毛蟲圖中點與點之間的連接方式，運用一種特殊標號的方法再搭配排列組合的計數原理求出該值；而在我的研究中，對於相同頂點數的不同構的毛毛蟲圖，我是先以 leaf 的數量將其分類，在求出 $f(n,k)$ 各項的組合數後，再將各項加總，依然可以得到相同的結論。

$F(n,k)$ 的圖形結構對應關係

在 Theorem 6 中我已經刻劃了 $f(n,k)$ 的組合數計算方法，並於 Theorem 7 利用數量說明 $f(n,k)$ 具有遞迴關係，於是我開始思索這樣的遞迴關係是否能在毛毛蟲圖的結構上找出圖形對應的模式，能夠建立 $F(n-1,k-1)$ 、 $F(n-1,k)$ 與 $F(n,k)$ 不僅限於數量上的相關性，還能更進一步刻劃集合中圖形結構的變化過程。

為了清楚說明圖形的變化方式，對於非對稱的毛毛蟲圖，我提出了『重端點』的概念，依照毛毛蟲圖內部點數量的奇偶性，重端點的概念共有兩種類型，其定義如下：

重端點的定義

考慮毛毛蟲圖 $G \in F(n,k)$ ，令主幹上的內部點依序為 v_1, v_2, \dots, v_{n-k} ，重端點有以下兩種類型：

Type-1：當內部點數量 $n-k$ 為偶數，令 $v_i v_{i+1} \in E(G)$ 為主幹上正中央的内部邊。

已知對任意 $j \in \{0, 1, \dots, t-1\}$ ， $d(v_{i-j}) = d(v_{i+1+j})$ 且 $d(v_{i-t}) \neq d(v_{i+1+t})$ 。

若 $d(v_{i-t}) > d(v_{i+1+t})$ ，則將 v_i 稱為 G 的重端點；

若 $d(v_{i-t}) < d(v_{i+1+t})$ ，則將 v_{i+1} 稱為 G 的重端點。

Type-2：當內部點數量 $n-k$ 為奇數，令 $v_i \in V(G)$ 為主幹上正中央的内部點。

已知對任意 $j \in \{1, 2, \dots, t-1\}$ ， $d(v_{i-j}) = d(v_{i+j})$ 且 $d(v_{i-t}) \neq d(v_{i+t})$ 。

若 $d(v_{i-t}) > d(v_{i+t})$ ，則在内部邊 $v_{i-1}v_i$ 中間新增一個頂點 u ，將 u 稱為 G 的重端點；

若 $d(v_{i-t}) < d(v_{i+t})$ ，則在内部邊 $v_i v_{i+1}$ 中間新增一個頂點 u ，將 u 稱為 G 的重端點。

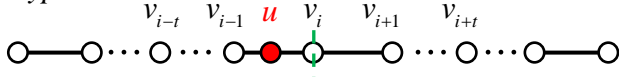
Type-1



若 $d(v_{i-j}) = d(v_{i+1+j})$ ， $j = 0$ 至 $t-1$

且 $d(v_{i-t}) > d(v_{i+1+t}) \Leftrightarrow v_i$ 為重端點

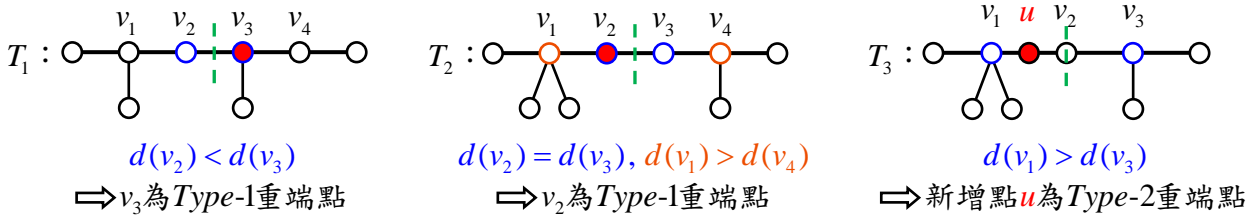
Type-2



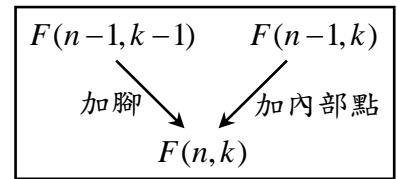
若 $d(v_{i-j}) = d(v_{i+j})$ ， $j = 1$ 至 $t-1$

且 $d(v_{i-t}) > d(v_{i+t}) \Leftrightarrow$ 新增點 u 為重端點

下方以圖形為例，主幹的對稱軸以綠色虛線表示。 T_1 主幹上的點 v_3 為 *Type-1* 重端點； T_2 主幹上的點 v_2 為 *Type-1* 重端點； T_3 主幹上新增的點 u 為 *Type-2* 重端點。



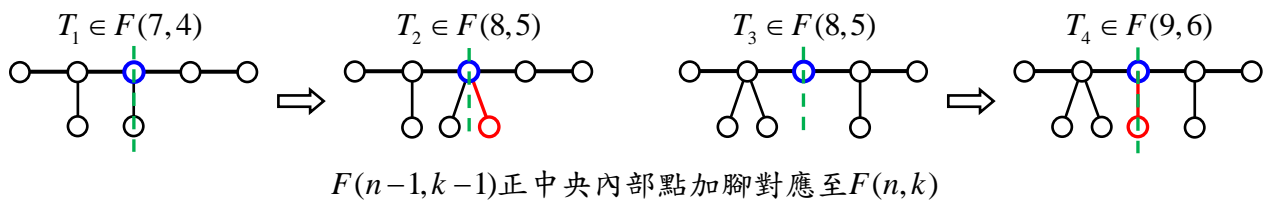
對於有 n 個點、 k 個 leaf 的毛毛蟲圖，該圖形結構可能是來自於『集合 $F(n-1, k-1)$ 中的圖再新增一個腳』所得到；也可能是來自於『集合 $F(n-1, k)$ 中的圖再新增一個內部點』所形成。



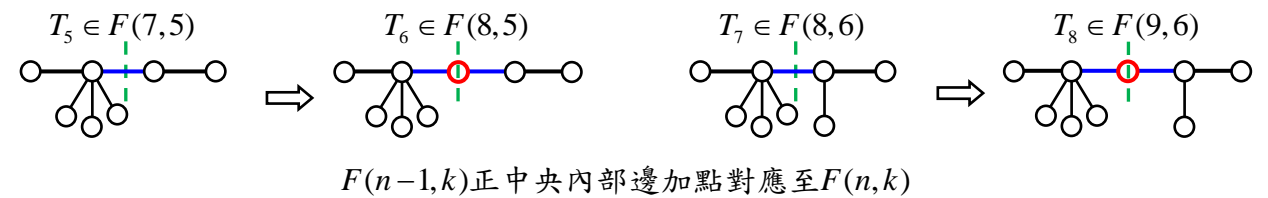
接下來我將根據 n 與 k 的奇偶性，區分為三個類別說明圖形結構是如何變化。

【當 n 與 k 為相異奇偶性】

(1) 若圖 $G \in F(n-1, k-1)$ ，則 G 主幹上有正中央的內部點，在 G 的正中央內部點新增一隻腳，所得的圖形 $G_1 \in F(n, k)$ 。如下圖 T_1 變換至 T_2 ； T_3 變換至 T_4 。

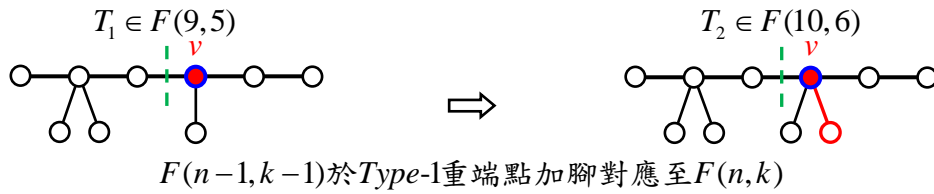


(2) 若圖 $G \in F(n-1, k)$ ，則 G 主幹上有正中央的內部邊，在 G 的正中央內部邊新增一個頂點，所得的圖形 $G_1 \in F(n, k)$ 。如下圖 T_5 變換至 T_6 ； T_7 變換至 T_8 。

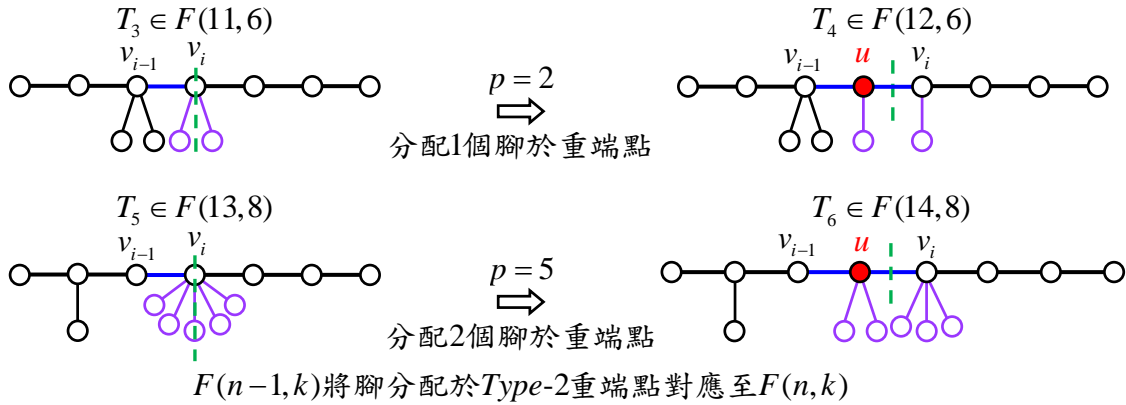


【當 n 與 k 皆為偶數】

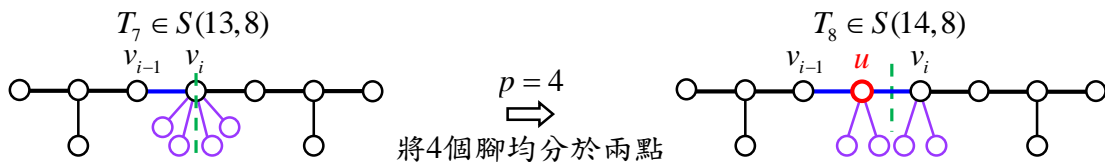
(1) 若圖 $G \in F(n-1, k-1)$ ，則 G 主幹上有正中央的內部邊。因為 $S(n-1, k-1) = \emptyset$ ，所以 G 必為不對稱圖形。因為 G 的內部點數量等於 $n-k$ 為偶數，可知 G 有 *Type-1* 的重端點 v ，則在重端點 v 上新增一個腳，所得的圖形 $G_1 \in F(n, k)$ 。如下圖 T_1 變換至 T_2 。



(2) 若圖 $G \in F(n-1, k) \setminus S(n-1, k)$ 為不對稱圖形，則 G 主幹上有正中央的內部點 v_i 。因為 G 的內部點數量等於 $n-k-1$ 為奇數，可知 G 有 Type-2 的重端點 u ，則在 G 的主幹上新增 Type-2 重端點 u ，可得圖形 G_1 。新增重端點後雖然已使圖 G_1 有 n 個點、 k 個 leaf，但是依據正中央內部點所連接的腳數量，進一步還需做出相應的調整。若 G 正中央內部點 v_i 所連接的腳數量為 p ，則在 G_1 中將 $\lfloor \frac{p}{2} \rfloor$ 個腳由點 v_i 轉移至重端點 u ，所得的圖形 $G_2 \in F(n, k)$ 。如下圖 T_3 變換至 T_4 ； T_5 變換至 T_6 。



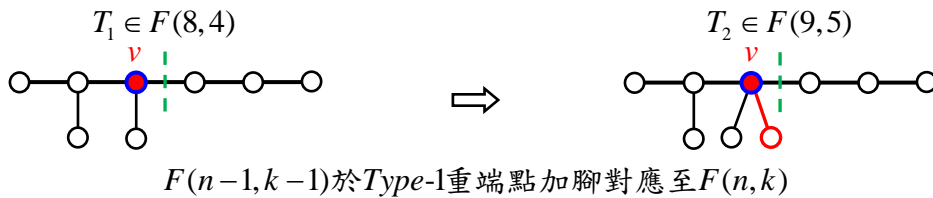
(3) 特別的，當圖 $G \in S(n-1, k)$ 為對稱圖形時，則 G 主幹上有正中央的內部點 v_i ，因為圖 G 為對稱圖形，由正中央向左右兩側對應之內部點皆具有相同點度數，所以沒有重端點，對此需特別建立一種對應規則。在圖 G 對稱軸左側的內部邊上 $v_{i-1}v_i$ 新增一點 u ，可得圖形 G_1 ，若圖 G 正中央內部點 v_i 所連接的腳有 p 個，則將 G_1 中 $\lfloor \frac{p}{2} \rfloor$ 個腳由點 v_i 轉移至新增的內部點 u ，令所得的圖形為 G_2 。因為圖 G 為對稱圖形且腳數量為偶數個，所以正中央內部點連接的腳數量 p 必為偶數，不難得知，在圖 G_1 中由 v_i 轉移至點 u 的腳數量必恰好為 $\frac{p}{2}$ 個，因此所得的圖 G_2 必為對稱結構，屬於 $S(n, k)$ 。如下圖 T_7 變換至 T_8 。



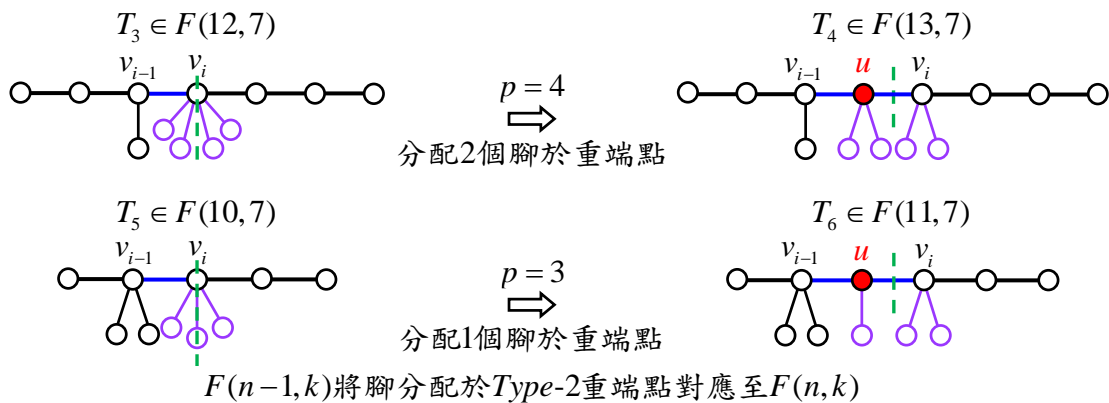
【當 n 與 k 皆為奇數】

此類型情況較為複雜，必須視毛毛蟲圖是否為對稱圖形，再進一步區分圖形變換的方式。

- (1) 若圖 $G \in F(n-1, k-1) \setminus S(n-1, k-1)$ 為不對稱圖形，則 G 主幹上有正中央的內部邊。因為 G 的內部點數量等於 $n-k$ 為偶數，可知 G 有 *Type-1* 的重端點 v ，則在重端點 v 上新增一隻腳，所得的圖形 $G_1 \in F(n, k)$ 。如下圖 T_1 至 T_2 之對應。



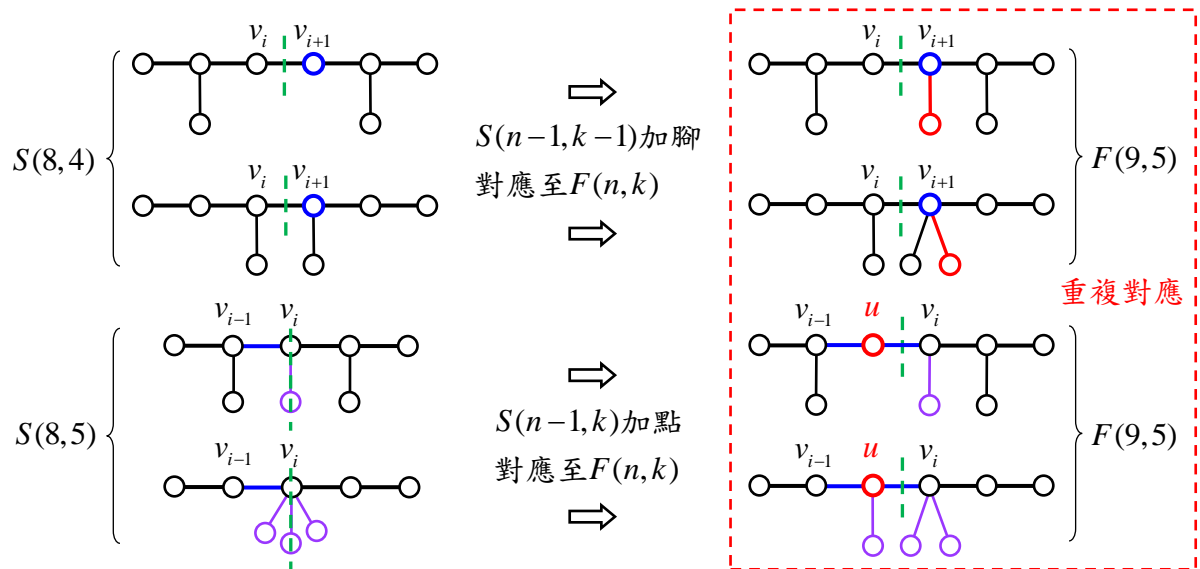
- (2) 若圖 $G \in F(n-1, k) \setminus S(n-1, k)$ 為不對稱圖形，則 G 主幹上有正中央的內部點 v_i 。因為 G 的內部點數量等於 $n-k-1$ 為奇數，可知 G 有 *Type-2* 的重端點 u ，則在 G 的主幹上新增 *Type-2* 重端點 u ，可得圖形 G_1 。進一步對於點 v_i 上的腳還需做出相應的調整，若 G 正中央內部點 v_i 所連接的腳數量為 p ，則在 G_1 中將 $\lfloor \frac{p}{2} \rfloor$ 個腳由點 v_i 轉移至重端點 u ，所得的圖形 $G_2 \in F(n, k)$ 。如下圖 T_3 變換至 T_4 ； T_5 變換至 T_6 。



- (3) 特別的，當圖 $G \in S(n-1, k-1) \cup S(n-1, k)$ 為對稱圖形時，不論主幹上的正中央是內部邊或是內部點，由正中央向左右兩側對應的內部點皆具有相同的點度數，所以這樣的對稱圖 G 沒有重端點。當 n 與 k 皆為奇數時，因為 $S(n, k) = \emptyset$ ，所以這種對稱毛毛蟲圖 G ，將會被對應至 $F(n, k)$ 中的不對稱圖形，我為這類對稱圖形建立另一種對應方式。

- ① 若 $G \in S(n-1, k-1)$ 的對稱圖形，則 G 主幹上有正中央的內部邊 $v_i v_{i+1}$ 。在 v_{i+1} 上新增一個腳，即可得圖形 $G_1 \in F(n, k)$ ；

- ② 若 $G \in S(n-1, k)$ 的對稱圖形，則 G 主幹上有正中央的內部點 v_i 。在對稱軸左側的內部邊 $v_{i-1}v_i$ 上新增一個內部點 u ，即可得圖形 G_1 。若 G 正中央內部點 v_i 所連接的腳數量為 p ，則在 G_1 中將 $\lfloor \frac{p}{2} \rfloor$ 個腳由點 v_i 轉移至新增的內部點 u ，所得圖形 $G_2 \in F(n, k)$ 。透過上述①與②的對應方式，可發現 $S(n-1, k-1)$ 與 $S(n-1, k)$ 將會變換成同構的毛毛蟲圖。

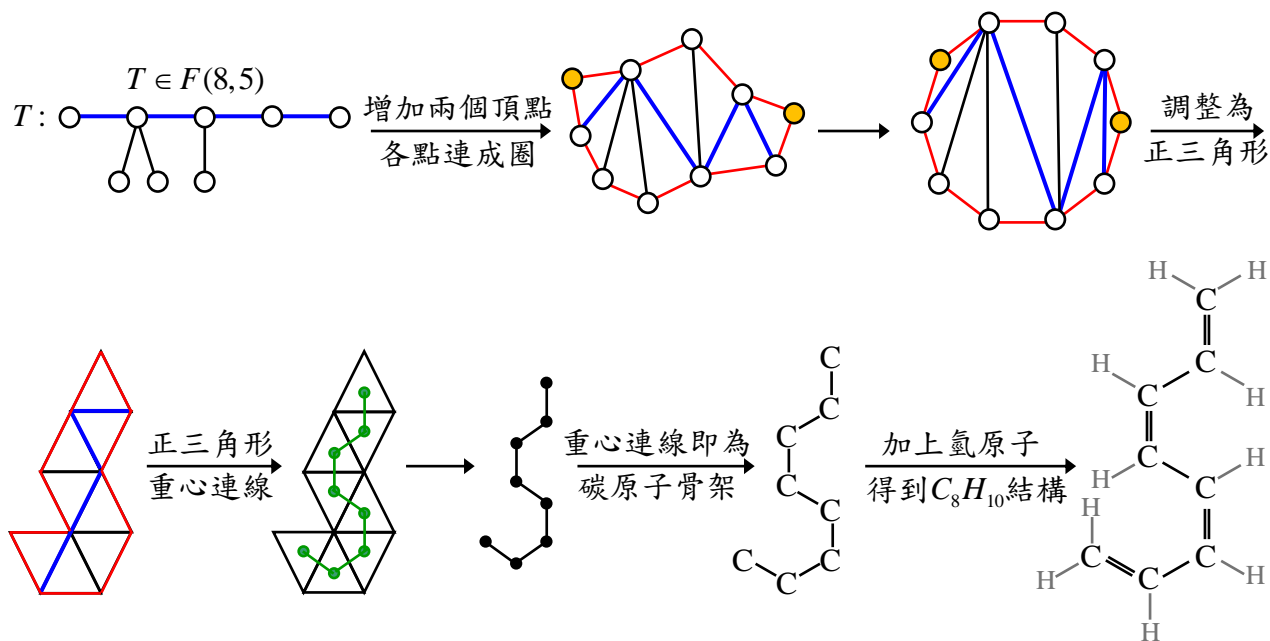


由上述說明可知，當 n 與 k 其中一個不為奇數時， $F(n-1, k-1)$ 與 $F(n-1, k)$ 中的圖形，經過對應規則後即可變換至 $F(n, k)$ 中的各個不同構圖形，所以在數量上滿足 $f(n, k) = f(n-1, k-1) + f(n-1, k)$ ，這個結果也同時呼應著 Theorem 7 的結論 (1)；此外，當 n 與 k 皆為奇數時，除了 $F(n-1, k-1)$ 與 $F(n-1, k)$ 中不對稱圖形將變換至 $F(n, k)$ 中的部分圖形外，對於 $S(n-1, k-1)$ 與 $S(n-1, k)$ 中的圖形，經過對應規則後將會變換至 $F(n, k)$ 的同構圖形，這即呼應著 Theorem 7 的結論 (2)，在數量上滿足的關係式為 $f(n, k) = f(n-1, k-1) + f(n-1, k) - s(n-1, k-1)$ 。因為 n 與 k 皆為奇數時，對稱圖形在結構上的變化會有重複對應的現象，所以在計算數值 $f(n, k)$ 時需要扣掉同構的圖形。上述的圖形對應關係，不僅可確認 $f(n, k)$ 在數量上的遞迴關係，更可由圖形結構上的變化瞭解 $F(n, k)$ 的對應過程。

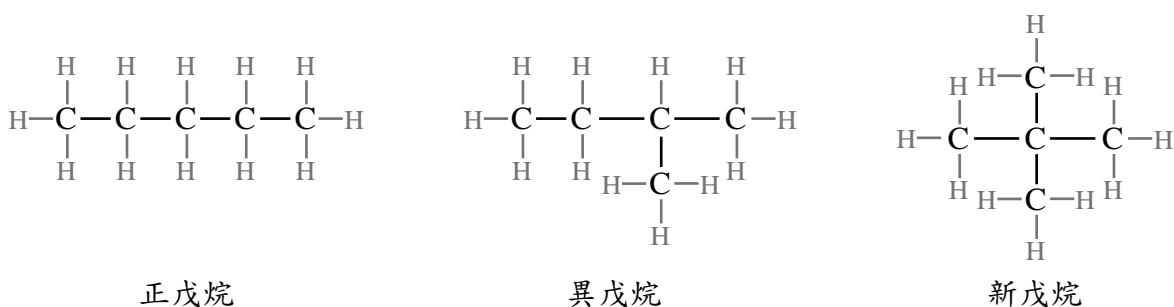
四、不同構 Caterpillar 的應用

從上述各點我們可知毛毛蟲圖的特殊關係式，除了不同構圖形的組合數值及結構變化之外，我們亦想了解 Caterpillar 在其他領域的應用。

若給定一個毛毛蟲圖 $T \in F(n, k)$ ，將毛毛蟲圖主幹上的頂點及該點連接的所有腳上下交錯排列，在兩個端點與內部點連線外側分別加上一個頂點，再將所有頂點以一個圈連線，即可得到正 $(n+2)$ 邊形的其中一種三角剖分；然而將此三角剖分圖內部各個三角形轉換為正三角形，且不改變其原本的相互連接關係，各個正三角形的重心形成一個骨架，即可決定有機化合物中由 n 個碳所組成的其中一種碳氫化合物 C_nH_{n+2} ，下方以 $F(8,5)$ 集中的一種結構轉換為例。



經過舉例觀察，我們發現由毛毛蟲圖延伸出的三角剖分轉換為碳原子骨架後，其碳原子骨架也是一種樹狀圖，且此種樹狀圖的 leaf 皆為 2，也就是說該類型的圖形可以用一筆畫不間斷連接到所有頂點；對於化學結構而言，相同碳原子數量所組成的碳氫化合物中各個同分異構物，支鏈越少者，分子間接觸面積越多，其分散力增大，沸點較高，以戊烷為例，其同分異構物的沸點比較：正戊烷 > 異戊烷 > 新戊烷，分子結構如下圖所示；毛毛蟲圖對應之碳鏈結構即有分支少的特徵，因此我推測對於擁有相同碳數量且有相似鍵結方式的碳氫化合物分子中，可與毛毛蟲圖經過上述關係對應之分子相較其他分子沸點高。



在化學的世界而言，要組成碳氫化合物分子還需考量到單鍵、雙鍵、共振等鍵結影響，若想得知其中奧妙還須結合有機化合物的相關知識，或許所有的毛毛蟲圖在化學領域中代表著某個特定類別的構造，雖然目前還在摸索階段，但相信我們在這些圖形對應至化合物的過程，可以從中在數學與化學兩個科學領域之間建構出一座橋梁。

參、研究結果與討論

一、研究結果

將有 n 個頂點， k 個 leaf 的所有不同構毛毛蟲圖集合記為 $F(n, k)$ ，集合內元素總數量記為 $f(n, k)$ 。令 $F(n, k)$ 集合內具有線對稱結構圖形所成的集合為 $S(n, k)$ ，其元素總數量記為 $s(n, k)$ 。將 n 個點的自我對偶毛毛蟲圖所形成的集合記為 D_n ，並將數量記為 d_n 。以下為我在這次研究中的發現：

1. 當 $n \geq 3$ ， $f(n, 2) = f(n, n-1) = 1$ ；
2. 當 $n \geq 3$ 且 $2 \leq k \leq n-1$ ， $F(n, k)$ 及 $F(n, n-k+1)$ 有對偶關係且 $f(n, k) = f(n, n-k+1)$ ；
3. 當 $n \geq 5$ 且 n 與 k 其中一個不是奇數時， $f(n, k) = f(n-1, k-1) + f(n-1, k)$ ；
當 $n \geq 5$ 且 n 與 k 兩者皆為奇數時， $f(n, k) = f(n-1, k-1) + f(n-1, k) - s(n-1, k-1)$ ；

4. 考慮 $n \geq 5$ 個點， k 個 leaf 的不同構毛毛蟲圖數量為 $f(n, k) = \frac{1}{2} \left(C_{k-2}^{n-3} + s(n, k) \right)$ ；

$$5. \quad s(n, k) \text{ 配合奇偶性計算出各組合數：} \quad s(n, k) = \begin{cases} C_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-4}{2}}, & \text{當 } n \text{ 為偶數，} k \text{ 為偶數} \\ C_{\frac{k-3}{2}}^{\frac{n-4}{2}}, & \text{當 } n \text{ 為偶數，} k \text{ 為奇數} \\ C_{\frac{k-2}{2}}^{\frac{n-3}{2}}, & \text{當 } n \text{ 為奇數，} k \text{ 為偶數} \\ 0, & \text{當 } n \text{ 為奇數，} k \text{ 為奇數} \end{cases} ;$$

6. 當 $n \geq 5$ 且 n 與 k 其中一個不是奇數時， $s(n, k) = s(n-1, k-1) + s(n-1, k)$ ；
當 $n \geq 5$ 且 n 與 k 皆為奇數時， $s(n, k) = 0$ ；

$$7. \quad n \text{ 個點的不同構毛毛蟲圖數量為 } \sum_{k=2}^{n-1} f(n, k) = 2^{n-4} + 2^{\lfloor \frac{n-4}{2} \rfloor} ;$$

8. 令 $n \geq 5$ 為奇數， n 個點的自我對偶毛毛蟲圖數量為 $d_n = 2^{\frac{n-5}{2}}$ ；

9. 建立 $F(n-1, k-1)$ 、 $F(n-1, k)$ 與 $F(n, k)$ 之間的圖形結構對應關係。

二、討論

一開始在繪製圖形的過程中，常會遇到難以辨認同構或非同構的問題，因此在研究中我們將圖形轉換為代碼紀錄，也就是以內部點序列及內部邊序列表示該圖形，然而代碼不只運用於同構判斷，後方闡述的對偶關係也跳脫出圖形本身並加入代碼轉換，表達出某圖的內部邊序列即為其對偶圖的內部點序列，而利用圖形結構直接轉換加上代碼輔助，我們發現了自我對偶圖的毛毛蟲圖數量為 $d_n = 2^{\frac{n-5}{2}}$ 的特殊等比關係。

在研究有 n 個頂點， k 個 leaf 的不同構毛毛蟲圖時，首先以小數量的 n 與 k 開始列舉觀察，我們發現 n 每增加一， $f(n, k)$ 就多一項，此特質和巴斯卡三角形有相似之處，每一列的組合數都增加一項，而我們將 $f(n, k)$ 排列為類巴斯卡三角形後，依據巴斯卡三角形的特性，聯想到各個 $f(n, k)$ 可能代表著某組合數，因此對於 $f(n, k)$ 的數值而言，我們納入重複組合的觀念，利用每個 $F(n, k)$ 各集合內圖形的內部點數量總和即為腳數量的特性，求出內部點序列各項相加等於腳數量的所有非負整數解總數量，再考量到計算出的組合數內代表著兩次不對稱圖形加上一次對稱圖形的各個可能性，為了求出 $f(n, k)$ 的值，我們須將該組合數加上一次對稱圖形數量再同除以二，即可找出 $F(n, k)$ 集合內所有不同構圖形的總數，因此我們必須先找出 $s(n, k)$ 的值為何，以對稱毛毛蟲圖 $s(n, k)$ 的數量而言，我們利用圖形結構的對稱性，把圖形拆成一半先行討論，考量到 n 與 k 的奇偶性將內部點數量及腳數量的做出不同變化，算出重複組合數再轉換為一般常見的組合數。有了 $s(n, k)$ 的值之後，我們即可得到 $f(n, k)$ 的確切數值，再配合巴斯卡定理及遞迴關係式，從中找出 $f(n, k)$ 的各個特殊關係。然而 $s(n, k)$ 與 $f(n, k)$ 特性相似，我們也利用巴斯卡定理及圖形結構上的變化過程，歸納出各個關係式。

在數值上我們已經確立了 $f(n, k)$ 的遞迴關係，因此我們試著去找出在圖形結構之間是否存在一個對應關係，使得 $F(n-1, k-1)$ 及 $F(n-1, k)$ 的圖形可以一一變換至 $F(n, k)$ ，起初在觀察兩兩集合的相關性時，因為圖形加點或加腳的位置可能性繁多，所以一直無法找出能使兩圖形能相互對應的規則，但我們從對稱圖形的結構變化啟發靈感，試著對主幹的正中央內部點或內部邊嘗試不同的對應方式，最後歸納出圖形的一一對應規則，甚至發現在 n 與 k 皆為奇數時，兩集合 $S(n-1, k-1)$ 與 $S(n-1, k)$ 中的對稱圖形會對應到 $F(n, k)$ 的同構圖形，這也應證了當初對 $f(n, k)$ 於類巴斯卡三角形的兩點歸納，有些地方為上方兩數直接相加，但有些還需要扣除某個數值，從圖形對應的觀點來看，各集合中的圖形來源都有跡可循，不僅在數量上有密切的組合關係，亦可得知兩關係式在圖形結構上所代表的意涵。

肆、結論與應用

一、結論

利用排列組合及巴斯卡定理，使我們在尋找 n 個點， k 個 leaf 所組成的不同構毛毛蟲圖總數量時，不用再以窮舉法列出所有圖形結構才可求出該項的總數值。在研究中，我們不僅考量到圖形間的結構變化，對於各項 $f(n, k)$ ，將各數值排列為類巴斯卡三角形的狀態，並從中觀察兩兩數值之間的關係，進而運用重複組合的概念找出 $f(n, k)$ 在組合數中的真實意義，再透過巴斯卡定理證明出 $f(n, k)$ 的遞迴關係式，以 $f(10, 5)$ 為例，我們可利用兩種方法計算，透過遞迴關係式及類巴斯卡三角形向下擴展，可得 $f(10, 5) = f(9, 4) + f(9, 5) = 9 + 10 = 19$ ；或是利

用組合數可直接計算出 $f(10, 5) = \frac{1}{2} \left(C_{5-2}^{10-3} + C_{\frac{5-3}{2}}^{\frac{10-4}{2}} \right) = \frac{35+3}{2} = 19$ 。同時，在繪製各個圖形的過程

中，我們也發現了特殊形式的對稱毛毛蟲圖，不但須了解 n 與 k 的奇偶性對於各種圖形構造產生甚麼影響，還須依此特性在證明數量時做出適當轉換，才可得到對稱圖形的精確數值。但因為 $f(n, k)$ 有著遞迴關係式，我們想要在利用巴斯卡定理所得知的數值關係之外，更進一步了解圖形之間是如何變化，因而在對稱毛毛蟲圖的組合性質中，對於組合數的遞迴關係及圖形結構變化皆做出解釋。在圖形的對應中，必須考量『 n 與 k 的奇偶性』以及『圖形的對稱性與否』，建立起八種圖形類別的對應，才能精確的探討出圖形之間的結構關連性。

圖論的世界十分廣闊，我研究的只是其中一小部分，但對於我而言，此研究的意義非凡，即使現在對於此議題中可延伸的區域依舊充滿著許多未知數，相信隨著數學的發展及科技的進步，我們可以在圖形的領域中慢慢探索且更加了解之。

二、應用

利用毛毛蟲圖延伸為三角剖分圖再轉換為有機化合物的結構，原本需要用窮舉法列出所有圖形才可得到同分異構物總數目，將其轉變為利用毛毛蟲圖總數量的關係式即可得知部分數量，解決了問題的一大部分，而往後想利用毛毛蟲圖進行分類分析及資源分配也成為我們日後研究的方向，將數學問題與其他領域連結，不僅可探討該圖形在數學上代表的意義之外，面對看似難解的生活議題，也可以變得簡單許多。

三、未來展望

對於不同構毛毛蟲圖，我們從組合數及圖形對偶中發現上述各個關係式，但某些圖形的對應關係及毛毛蟲圖對於各領域的應用尚未明朗，我們將可延伸的應用問題條列於下方：

1. 若毛毛蟲圖的主幹為一個圈，則能否找出所有不同構圖形的數量關係？
2. 延伸毛毛蟲圖形結構，若允許毛毛蟲圖的其中一個腳或所有腳至主幹上內部點距離 ≤ 2 ，則能否找到 n 個頂點， k 個 leaf 的所有不同構圖形數量關係？
3. 能否在化學領域中找出碳氫化合物之同分異構物與不同構圖形總數量的關聯性？

伍、參考文獻

1. 普通高級中學數學，第一、二、三、四冊，南一出版社。
2. 張鎮華，蔡牧村（2020），圖論及其演算法，臺大出版中心。
3. V. A. Uspenskii（袁向東譯）（1997），帕斯卡三角形，九章出版社。
4. G. Chartrand, L. Lesniak and P. Zhang, *Graphs and Digraphs*, 6th edition, CRC Press (2016).
5. F. Haray and A. J. Schwenk, *The number of caterpillars*, *Discrete Math.* 6, (1973), 359-365.
6. Douglas B. West, *Introduction to Graph Theory*, 2nd edition, Pearson Education Taiwan (2008).

【評語】 010009

Caterpillars 圖是圖論上一個常見的圖類。其計數已經在 1973 年由 Harary 等人完成。本作品作者以自己的方式重新得到了這個結果，其間展現了觀察與探索的能力，是值得可取的。可惜因為主要結果是已知的，從而大大減弱了本文的精彩，是可惜之處。此外作者利用初等的方式計數固然可行，但或許利用更好的工具（如 Polya 定理等）處理此類圖形的計數會更方便，且事半功倍。