Лекция 11. Перечисление графов

Сколько всего есть графов с n вершинами? Частичный ответ на этот вопрос дает следующее рассуждение. Матрица смежности такого графа — это симметричная $n \times n$-матрица, элементы которой нули и единицы, а на главной диагонали стоят нули. Выше главной диагонали находятся $n(n-1)/2$ элементов матрицы. Другими словами, имеется $2^{n(n-1)/2}$ способов заполнить верхнюю часть матрицы, а симметрия позволяет каждое такое заполнение продолжить на всю матрицу. Каждой из $n!$ нумераций вершин графа отвечает своя матрица. Если бы изменение нумерации изменяло бы матрицу смежности, то у нас было бы $2^{n(n-1)/2}/n!$ попарно неизоморфных графов. Однако, как мы знаем, различные нумерации могут давать одну и ту же матрицу смежности. Поэтому имеет место неравенство:

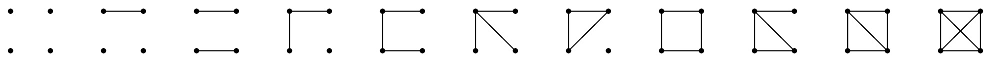
$$\text{число попарно неизоморфных графов с } n \text{ вершинами } > 2^{n(n-1)/2}/n!.$$

Это число очень велико. Например, при $n = 30$ число в правой части $\approx 3.34 \times 10^{98}$.

При малых n ошибка оценки

$$\approx \frac{2^{n(n-1)/2}}{n!}$$

особенно велика. Если, например, $n = 4$, то число в правой части равно $2^6/24 < 3$. Но количество попарно неизоморфных графов с четырьмя вершинами равно 11 (из них связных — 6):



Решение задачи о перечислении графов использует теорему Пойя.

Мы будем перечислять графы с n вершинами. Мы считаем, что задана некоторая нумерация множества вершин V, т.е. $V = \{1, 2, \dots, n\}$. Множество X, с которым мы будем работать — это множество функций, область определения которых — это множество пар вершин (т.е. пар чисел) $V^2 = \{(i, j) : 1 \leqslant i < j \leqslant n\}$, а область значений — это множество из двух элементов $\{0, 1\}$. Такая функция полностью описывает граф: если $f((i, j)) = 0$, то i-я и j-я вершины *не* соединены ребром, а если $f((i, j)) = 1$ — то соединены. Иначе это можно описать так: рассмотрим полный граф K_n, т.е. граф с n вершинами, где каждая пара вершин соединена ребром. Раскрасим множество ребер графа K_n в два цвета — черный и белый. Теперь удалим белые ребра.

Группа перестановок действует на множестве V (перенумерация вершин). Но она действует и на множестве V^2 следующим образом. Перестановку s мы рассматриваем как отображение множества $\{1, 2, \dots, n\}$ в себя. Так перестановка $s = 2, 4, 1, 3$ — это отображение $s : \{1, 2, 3, 4\} \to \{1, 2, 3, 4\}$: $s(1) = 2$, $s(2) = 4$, $s(3) = 1$, $s(4) = 3$. Перестановка s действует на множестве V^2 так: s переводит пару (i, j) в пару $(s(i), s(j))$, если $s(i) < s(j)$, и в пару $(s(j), s(i))$ в противном случае. В терминах теоремы Пойя множество V^2 — это множество M, а множество X — это множество раскрасок элементов V^2 в два цвета — черный и белый. Выбор раскраски задает граф, а перенумерация вершин дает другую раскраску V^2, но изоморфный граф.

Пример. Пусть $n = 4$. Перестановка $s = 2, 4, 1, 3$ действует на V^2 так:

$$s((1,2)) = (2,4),\ s((1,3)) = (1,2),\ s((1,4)) = (2,3),\ s((2,3)) = (1,4)\, s((2,4)) = (3,4)),\ s((3,4)) = (1,3).$$

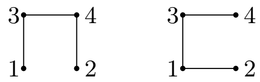
Если

$$f((1,2)) = 0,\ f((1,3)) = 1,\ f((1,4)) = 0,\ f((2,3)) = 0,\ f((2,4)) = 1,\ f((3,4)) = 1,$$

то

$$g((1,2)) = 1,\ g((1,3)) = 1,\ g((1,4)) = 0,\ g((2,3)) = 0,\ g((2,4)) = 0,\ g((3,4)) = 1,$$

где $g = s(f)$. Функции f и g задают следующие графы



Разумеется эти графы изоморфны.

Число графов — это число орбит действия группы S_n на множестве раскраскок множества V^2 в два цвета. Чтобы найти число орбит нам нужно вычислить цикловый индекс действия S_n на V^2.

Пример. $n = 3$. Рассмотрим действие группы S_3 на $V^2 = \{(1,2), (1,3), (2,3)\} = \{e_1, e_2, e_3\}$. Имеем

- $s = e$. Действие s: $(e_1)(e_2))(e_2)$.
- $s = (1,2)(3)$. Действие s: $(e_1)(e_2, e_3)$.
- $s = (1,3)(2)$. Действие s: $(e_1, e_3)(e_2)$.
- $s = (1)(2,3)$. Действие s: $(e_1, e_2)(e_3)$.
- $s = (1,2,3)$. Действие s: (e_1, e_3, e_2).
- $s = (1,3,2)$. Действие s: (e_1, e_2, e_3).

Таким образом, $Z(G) = (a_1^3 + 3a_1a_2 + 2a_3)/6$. Пусть переменная x отвечает белому цвету, а y — черному. Тогда

$$C(x,y) = \frac{(x+y)^3 + 3(x+y)(x^2+y^2) + 2(x^3+y^3)}{6} = x^3 + x^2y + xy^2 + y^3.$$

Это означает, что у нас есть четыре графа с тремя вершинами: один граф без ребер, один с одним ребром, один с двумя ребрами и один с тремя ребрами.

Пример. $n = 4$. Рассмотрим действие группы S_4 на $V^2 = \{(1,2),(1,3),(1,4),(2,3),(2,4),(3,4)\}$.

- Единичная перестановка e все шесть элементов множества V^2 оставляет на месте. Соответствующий одночлен — a_1^6.
- 2-цикл, например $(1,2)(3)(4)$, действует так: $(1,2)$ и $(3,4)$ неподвижны; $(1,3) \to (2,3) \to (1,3)$; $(1,4) \to (2,4) \to (1,4)$. Соответствующий одночлен — $a_1^2a_2^2$. Так как в S_4 шесть 2-циклов, то они дают в цикловый индекс вклад $6a_1^2a_2^2$.
- 3-цикл, например $(1,2,3)(4)$, действует так: $(1,2) \to (2,3) \to (1,3) \to (1,2)$; $(1,4) \to (2,4) \to (3,4) \to (1,4)$. Соответствующий одночлен — a_3^2. Так как в S_4 восемь 2-циклов, то они дают в цикловый индекс вклад $8a_3^2$.
- 4-цикл, например $(1,2,3,4)$, действует так: $(1,2) \to (2,3) \to (3,4) \to (1,4) \to (1,2)$; $(1,3) \to (2,4) \to (1,3)$. Соответствующий одночлен — a_2a_4. Так как в S_4 шесть 4-циклов, то они дают в цикловый индекс вклад $6a_2a_4$.
- 2,2-цикл, например $(1,2)(3,4)$, действует так: $(1,2)$ и $(3,4)$ неподвижны; $(1,3) \to (2,4) \to (1,3)$; $(1,4) \to (2,3) \to (1,4)$. Соответствующий одночлен — $a_1^2a_2^2$. Так как в S_4 три 2,2-цикла, то они дают в цикловый индекс вклад $3a_1^2a_2^2$.

Таким образом

$$Z(G) = \frac{a_1^6 + 9a_1^2a_2^2 + 8a_3^2 + 6a_2a_4}{24}.$$

Подставляя c_i вместо a_i, получаем

$$C(x,y) = x^6 + x^5y + 2x^4y^2 + 3x^3y^3 + 2x^2y^4 + xy^5 + y^6,$$

что полностью согласуется с нашим списком графов на четырех вершинах.

Перечисление связных графов

Две задачи — перечисление графов и перечисление связных графов взаимосвязаны. Любой граф является объединением своих *компонент связности.* Компонента связности графа $G = (V,E)$, определенная вершиной $v \in V$, — это совокупность всех вершин (и инцидентным им ребер из E), которые соединены путями с вершиной v. Каждая компонента связности является связным графом. Например, у графа ниже три компоненты связности.

Обозначим через g_n число графов с n вершинами, а через c_n — число связных графов с n вершинами. Если $G = (V,E)$ несвязен, то он есть объединение связных графов $G_i = (V_i, E_i)$, $i = 1,\ldots,k$, причем $|V| = |V_1| + \ldots + |V_k|$, $|E| = |E_1| + \ldots + |E_k|$.

Таким образом, зная числа c_i, мы можем найти число g_n: нужно перебрать всевозможные разбиения числа n: разбиению $n = k_1 + \ldots + k_s$, $k_1 \geqslant k_2 \geqslant \ldots \geqslant k_s$, отвечает разбиение графа G с n вершинами в объединение s компонент связности $G_1,\ldots,G_s$, где связный граф G_i имеет k_i вершин.

Пример. Пусть $n = 4$. Мы знаем, что $c_1 = 1$, $c_2 = 1$, $c_3 = 2$, $c_4 = 6$. Имеется 5 разбиений числа 4: 4, $3+1$, $2+2$, $2+1+1$, $1+1+1+1$.

- Первое разбиение отвечает случаю связного графа — таких графов 6.
- Второе разбиение отвечает случаю двух компонент связности — с тремя вершинами и с одной вершиной. Таких графов 2.
- Третье разбиение отвечает случаю двух компонент связности — с двумя вершинами каждая. Такой граф один.
- Четвертое разбиение отвечает случаю трех компонент связности — одна с двумя вершинами и две с одной вершиной. Такой графов один.
- Пятое разбиение отвечает случаю четырех компонент связности — с одной вершиной каждая. Такой граф один.

Следовательно, $g_4 = 11$.

На языке производящих рядов эту конструкцию можно описать так. Количество графов с n вершинами равно коэффициенту при t^n в произведении рядов

$$(1 + c_{1,1}t + c_{1,2}t^2 + c_{1,3}t^3 + \ldots) \times (1 + c_{2,1}t^2 + c_{2,2}t^4 + \ldots) \times (1 + c_{3,1}t^3 + c_{3,2}t^6 + \ldots) \times \ldots$$

Здесь коэффициент $c_{i,j}$ равен числу графов, состоящих из j связных компонент, причем каждая компонента имеет i вершин. То-есть $c_{i,j}$ — это количество способов выбрать j связных графов из c_i, причем в выборке могут быть и одинаковые графы. Но формула для выборов с повторениями обсуждалась на первой лекции. Таким образом,

$$c_{i,j} = C_{c_i+j-1}^{j-1},$$

и i-й сомножитель в произведении есть

$$1 + c_i t^i + \frac{1}{2}\, c_i(c_i+1)t^{2i} + \frac{1}{6}\,(c_i+2)(c_i+1)c_i t^{3i} + \ldots = (1-t^i)^{-c_i}.$$

Следовательно,

$$1 + g_1 t + g_2 t^2 + g_3 t^3 + \ldots = \prod_{i=1}^{\infty}(1-t^i)^{-c_i}.$$

Перейдем к логарифмам:

$$\ln(1 + g_1 t + g_2 t^2 + \ldots) = \sum_{i=1}^{\infty}(-c_i)\ln(1-t^i).$$

Разложим каждый логарифм в ряд и приведем подобные. Легко видеть, что в разложении $\ln(1-t^i)$ в степенной ряд слагаемое t^n появляется лишь в том случае, когда i — делитель n. Тогда соответствующий коэффициент равен ic_i/n. Следовательно,

$$\ln(1 + g_1 t + g_2 t^2 + \ldots) = \sum_{i=1}^{\infty}\frac{a_i}{i}\, t^i,$$

где

$$a_n = \sum_{d|n} d c_d.$$

Здесь сумма берется по всем делителям числа n. Таким образом,

$$1 + g_1 t + g_2 t^2 + \ldots = \exp(a_1 t + \frac{a_2}{2}\, t^2 + \frac{a_3}{3}\, t^3 + \ldots).$$

Правило перехода от a_i g_i достаточно простое. Действительно, продифференцируем это равенство. Имеем

$$\begin{aligned} g_1 + 2g_2 t + 3g_3 t^2 + \ldots &= \exp(a_1 t + \frac{a_2}{2}\, t^2 + \frac{a_3}{3}\, t^3 + \ldots) \times (a_1 + a_2 t + a_3 t^2 + \ldots) = \\ &= (1 + g_1 t + g_2 t^2 + g_3 t^3 + \ldots) \times (a_1 + a_2 t + a_3 t^2 + \ldots). \end{aligned}$$

Теперь сравниваем коэффициенты при t^{n-1}:

$$n g_n = a_n + \sum_{i=1}^{n-1} g_i a_{n-i}.$$

Так как $g_1 = a_1$, то мы получили рекуррентную формулу для вычисления чисел g_n.

Пример. Так как $c_1 = 1$, $c_2 = 1$, $c_3 = 2$, $c_4 = 6$, то $a_1 = 1$, $a_2 = 3$, $a_3 = 7$, $a_4 = 27$. И далее $g_2 = (3+1\times 1)/2 = 2$, $g_3 = (7 + 2\times 1 + 1\times 3)/3 = 4$, $g_4 = (27 + 7\times 1 + 3\times 2 + 1\times 4)/4 = 11$.

Обратно. Связь между числами g_n и a_n дает возможность перейти от g_i к a_i:

$$a_n = n g_n - \sum_{k=1}^{n-1} a_k g_{n-k}.$$

Переход от a_i к c_i требует знания теории чисел. Приведем окончательную формулу:

$$c_n = \frac{1}{n}\sum_{d|n}\mu(\frac{n}{d})a_d.$$

Здесь $\mu(n)$ — это функция Мёбиуса:

$$\mu(n) = \begin{cases} 0, & \text{если } n \text{ делится на квадрат простого числа} \\ 1, & \text{если } n = 1 \\ (-1)^k, & \text{если } n = p_1\cdot\ldots\cdot p_k \end{cases}$$

Действительно,

$$c_2 = \frac{1}{2}\,(\mu(2)\cdot a_1 + \mu(1)\cdot a_2) = \frac{1}{2}\,(-1+2) = 1$$

$$c_3 = \frac{1}{3}\,(\mu(3)\cdot a_1 + \mu(1)\cdot a_3) = \frac{1}{3}\,(-1+7) = 2$$

$$c_4 = \frac{1}{4}\,(\mu(4)\cdot a_1 + \mu(2)\cdot a_2 + \mu(1)\cdot a_4) = \frac{1}{4}\,(-3+27) = 6$$