MSC 05A18

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЧИСЛА ДРЕВЕСНЫХ ГРАФОВ НАД КОНЕЧНЫМ МНОЖЕСТВОМ ВЕРШИН

Ю.П. Вирченко, Л.П. Остапенко

Белгородский государственный университет,
ул. Студенческая, 14, 308007, г. Белгород, e-mail: virch@bsu.edu.ru

Аннотация. Изучается комбинаторная задача о числе N_n топологически различных древесных связных графов над произвольным конечным множеством из n занумерованных вершин. Вычисляется производящая функция F значений функции N_n, $n \in \mathbb{N}$.

Ключевые слова: разложения конечного множества, производящая функция, алгебра симметричных функций, древесные графы.

1. Постановка задачи. Неориентированный конечный *простой* граф (т.е. граф с одним типом вершин и ребер и не имеющий петель и кратных ребер) представляется парой $\langle V, \Phi \rangle$, в которой V – конечное множество, элементы которого называются *вершинами* и $\Phi \subset V^{(2)}$, где $V^{(2)}$ – множество всех пар элементов из V. Элементы множества Φ называются *ребрами* графа (см., например, [1]).

Множество Φ порождает бинарное отношение *смежности* на V. Оно порождает бинарное отношение *связности* на V. А именно, пара $\{x, y\} \subset V$ определяется как связная, если существует последовательность $\langle x, x_1, x_2, ..., x_{n-1}, y \rangle$ вершин из V такая, что $\{x_j, x_{j+1}\} \in \Phi$, $j = 0, 1, ..., n-1$, $x_0 = x$, $x_n = y$. Эта последовательность называется *путем* на графе $\langle V, \Phi \rangle$. Если множество всех возможных путей на этом графе дополнить тривиальными путями $\langle x, x \rangle$, $x \in V$, то таким образом определенное отношение связности становится *рефлексивным*. Тогда, очевидно, что оно является отношением *эквивалентности*. Следовательно, отношение связности, согласно основному свойству отношений эквивалентности, разбивает множество V на непересекающиеся подмножества связных между собой вершин. Каждое такое связное множество V', вместе со всеми ребрами, которые образованы парами $\{x', y'\}$ вершин из V' такими, что $\{x', y'\} \in \Phi$ составляет отдельный граф. Он называется *связной компонентой* исходного графа.

Граф $\langle V, \Phi \rangle$ называется *связным*, если у него, при указанном разбиении, имеется только одно подмножество эквивалентности, то есть он состоит из одной связной компоненты.

Путь $\langle x, x_1, x_2, ..., x_{n-1}, y \rangle$ на графе, в составе которого имеется не менее трех различных вершин и такой, что $x = y$ называется *циклом*. Если на графе $\langle V, \Phi \rangle$ отсутствуют циклы, то такие графы называются *древесными*.

Поставим комбинаторную задачу об определении числа N_n всех возможных различных связных древесных графов, которые можно построить на заданном множестве V, $|V| = n$ вершин. При этом графы считаются топологически различными, если имеется такая биекция множества V с самим собой, которая порождает биекцию с самим собой множества ребер Ф. Такое определение топологической эквивалентности графов предполагает, что все вершины из V суть различные элементы и их перестановка может изменить топологический тип графа. Поставленная задача возникает при построении разложений специального вида в статистической механике решеточных систем [2]. Поясним, что понимается под числом N_n, вычислением его в простейших случаях.

Пример: Определим несколько первых значений числа N_n. Начиная с $n = 4$ перебор всех возможных связных деревьев становится очень рутинным.

1. При $n = 1$, $V = \{1\}$ имеется только один граф $\langle\{1\}, \varnothing\rangle$, состоящий из единственной вершины 1. Он же, по определению, является связным и древесным, то есть $N_1 = 1$.

2. При $n = 2$, $V = \{1, 2\}$ имеется только один связный граф $\langle\{1, 2\}, \Phi = \{1, 2\}\varnothing\rangle$, который, из-за наличия только двух вершин, не содержит циклов. Следовательно, он является древесным, то есть $N_2 = 1$.

3. При $n = 3$, $V_2 = \{1, 2, 3\}$ имеется три связных графа без циклов, соответственно, со следующими множествами смежности: $\Phi = \{\{1, 2\}, \{2, 3\}\}$, $\Phi = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}\}$, $\Phi = \{\{1, 3\}, \{2, 3\}\}$. Все они различны в смысле данного выше определения топологической эквивалентности. Следовательно, $N_3 = 3$.

4. При $n = 4$, $V = \{1, 2, 3, 4\}$. Имеется 16 различных древесных графов, соответствующие множества смежности которых мы распределим на две группы:

$\Phi = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}\{1, 4\}\}$, $\Phi = \{\{1, 2\}, \{2, 3\}, \{2, 4\}\}$, $\Phi = \{\{1, 3\}, \{2, 3\}, \{3, 4\}\}$, $\Phi = \{\{1, 4\}, \{2, 4\}, \{3, 4\}\}$;

$\Phi = \{\{1, 2\}, \{2, 3\}, \{3, 4\}\}$, $\Phi = \{\{1, 3\}, \{2, 3\}, \{2, 4\}\}$, $\Phi = \{\{2, 3\}, \{1, 3\}, \{1, 4\}\}$, $\Phi = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{3, 4\}\}$, $\Phi = \{\{1, 3\}, \{1, 2\}, \{2, 4\}\}$, $\Phi = \{\{2, 3\}, \{1, 2\}, \{1, 4\}\}$;

$\Phi = \{\{1, 4\}, \{2, 4\}, \{2, 3\}\}$, $\Phi = \{\{1, 4\}, \{3, 4\}, \{2, 3\}\}$, $\Phi = \{\{2, 4\}, \{1, 4\}, \{1, 3\}\}$, $\Phi = \{\{2, 4\}, \{3, 4\}, \{2, 3\}\}$, $\Phi = \{\{3, 4\}, \{1, 4\}, \{1, 2\}\}$, $\Phi = \{\{3, 4\}, \{2, 4\}, \{1, 2\}\}$.

Следовательно, $N_4 = 16$.

В настоящей работе мы дадим решение поставленной задаче определения функции N_n в смысле вычисления ее производящей функции [3]

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} N_{n+1}\,, \qquad (1)$$

которая предполагается определенной в достаточно малой окрестности точки 0 в комплексной плоскости z. При изложении мы используем некоторые определения и обозначения нашей предыдущей работы [4].

2. Рекуррентная формула. Пусть $I_n = \{1, 2, ..., n\}$ – стандартное n-элементное множество. Разложением множества I_n называется неупорядоченный набор непустых множеств ω_j, $j = 1 \div s$, которые называются *компонентами* этого разложения и которые составляют дизъюнктивное разложение множества I_n,

$$\bigcup_{l=1}^{s} \omega_l = I_n\,, \quad \omega_j \cap \omega_k \neq \varnothing\,, \quad j \neq k\,, \quad j, k = 1 \div s\,,$$

где s – мощность разложения.

Пусть $\mathcal{P}_n$ – класс всех разложений Ω множества $I_n = \{1, 2, ..., n\}$.

Теорема 1. *Справедлива следующая рекуррентная формула*

$$N_{n+1} = \sum_{\Omega \in \mathcal{P}_n} \prod_{\omega \in \Omega} |\omega| N_{|\omega|} . \qquad (2)$$

□ Для каждого древесного графа $\mathfrak{G} = \langle V, \Phi \rangle$ над множеством вершин $V = I_{n+1}$ выполним следующее построение. Сопоставим графу $\mathfrak{G}$ совокупность связных графов $\mathfrak{G}_j$, $j = 1, ..., s$, получающихся из $\mathfrak{G}$ удалением из него вершины $(n+1)$ вместе со всеми ребрами, в состав которых входит эта вершина. Иными словами, строится следующий граф $\langle V \setminus \{n+1\}, \Phi \setminus \{x \in V \setminus \{n+1\} : \{n+1, x\} \in \Phi\} \rangle$. Затем в этом графе выделяются связные компоненты. Именно эти связные компоненты представляют совокупность графов $\mathfrak{G}_j$, $j = 1, ..., s$. Каждая из этих связных компонент является древесным графом, так как если в какой-то из них имелся цикл, то этот цикл присутствовал бы и в исходном графе. Каждая из них образована некоторым подмножеством вершин $\omega_j \subset I_n$ и множеством ребер Φ_j.

Отметим вершины $x_j \in \omega_j$, $j = 1 \div s$ такие, что ребро $\{x_j, n+1\}$ содержится в Φ, но которые удаляются вместе с удалением вершины $(n+1)$.

Для всей совокупности множеств $\{\omega_j ; j = 1 \div s\}$ и связанных с ними ребер $\{\Phi_j ; j = 1 \div s\}$ выполняется

$$\bigcup_{j=1}^{s} \omega_j = I_n \, , \ \omega_k \cap \omega_l = \varnothing \, ; \quad \bigcup_{j=1}^{s} \Phi_j = \Phi \setminus \{\{x_j, n+1\}; j = 1 \div s\} \, , \ \Phi_k \cap \Phi_l = \varnothing \text{ при } k \neq l \, .$$

Таким образом, каждому графу $\mathfrak{G}$ на основе описанной конструкции, сопоставляется, сначала, разложение $\Omega \in \mathcal{P}_n$, затем, на основе этого разложения, множество отмеченных вершин $\{x_j \in \omega_j : \omega_j \in \Omega, j = 1 \div s\}$ и набор древесных графов $G_j = \langle \omega_j, \Phi_j \rangle$, $j = 1 \div s$. Они характеризуют граф $\mathfrak{G}$, то есть при фиксации указанных математических объектов однозначно восстанавливается граф $\mathfrak{G}$. Это достигается присоединением к вершинам I_n вершины $(n+1)$ и ребер $\{x_j, n+1\}$, $j = 1 \div s$ к совокупности ребер $\bigcup\limits_{j=1}^{s} \Phi_j$.

В связи с доказанной характеризацией каждого из деревьев на множестве вершин $V = I_{n+1}$, распределим все деревья над V по классам, занумерованным разложениями $\Omega \in \mathcal{P}_n$ так, что каждому древесному графу из фиксированного класса $\mathfrak{P}(\Omega)$, $\Omega \in \mathcal{P}_n$ соответствует одно и то же разложение Ω. Тогда

$$N_{n+1} = \sum_{\Omega \in \mathcal{P}_n} |\mathfrak{P}(\Omega)| . \qquad (3)$$

Найдем число элементов в каждом классе $\mathfrak{P}(\Omega)$, $\Omega \in \mathcal{P}_n$. Для этого заметим, что для фиксированного $\Omega = \{\omega_j ; j = 1 \div s\}$ каждая из вершин x_j и каждый древесный граф $\mathfrak{G}_j$ над множеством вершин ω_j, $j = 1 \div s$ могут быть выбраны независимо от всех остальных вершин x_k из множеств ω_k и всех графов $\mathfrak{G}_k$ над этими множествами, $k \in I_s \setminus \{j\}$. Следовательно, в силу *принципа умножения* (см., например, [3]), $|\mathfrak{P}(\Omega)| = \prod_{\omega\in\Omega} S(\omega)$, где $S(\omega)$ – число способов выбора отмеченной вершины x в ω и, одновременно, выбора древесного графа над множеством вершин ω. Так как каждый из этих объектов может быть выбран независимо от другого, то, в силу принципа умножения, $S(\omega)$ равно произведению числа вершин в ω на число древесных графов, которые можно построить на множестве ω, $S(\omega) = |\omega| N_{|\omega|}$. Тогда из (3) следует

$$|\mathfrak{P}(\Omega)| = \prod_{\omega\in\Omega} |\omega| N_{|\omega|}\,. \quad \blacksquare$$

3. Производящая функция. Вычислим теперь производящую функцию (1). Вычисление функции $F(z)$ будет выполнено на основе специальной алгебраической техники, используемой в статистической механике (см., например, [2]), возникновение которой было связано с преобразованиями статистических сумм [5]. Для этого заметим, что последовательность $\Psi = \langle nN_n; n \in \mathbb{N}_+\rangle$ можно рассматривать как элемент идеала $\mathbb{A}_0$ коммутативной алгебры $\mathbb{A}$ последовательностей $\langle \varphi_m; m \in \mathbb{N}_+\rangle$ симметричных функций φ_m, определенных и измеримых на $[0,1]^m$ со значениями в $\mathbb{R}$, $\varphi_m(X_m) \equiv \varphi_m(x_1, x_2, ..., x_m)$, $X_m = \langle x_1, x_2, ..., x_m\rangle$. При $m = 0$ элементы этих последовательностей полагаются константами. Линейные операции в этой алгебре определяются естественным образом как линейные операции с последовательностями. Произведение $*$ в этой алгебре определяется для каждой пары последовательностей $\Upsilon = \langle \upsilon_m; m \in \mathbb{N}_+\rangle$ и $\Psi = \langle \psi_m; m \in \mathbb{N}_+\rangle$ на основе формулы (см. [2])

$$(\Upsilon * \Psi)_n(X(I_n)) = \sum_{\omega\subset I_n} \upsilon_{|\omega|}(X(\omega))\psi_{|I_n\setminus\omega|}(X(I_n\setminus\omega))\,,$$

в которой использованы следующие обозначения: $X(\omega) = \langle x_{i_1}, x_{i_2}, ..., x_{i_s}\rangle$ для каждого $\omega = \{i_1, i_2, ..., i_s\} \subset I_n$ и $|\omega| = s$ – число элементов в ω.

Единицей алгебры $\mathbb{A}$ является последовательность $\langle 1, 0, 0, ...\rangle$. При этом максимальный идеал $\mathbb{A}_0$ этой алгебры состоит из последовательностей Υ функций с $\upsilon_0 = 0$. Для элементов Υ из $\mathbb{A}_0$ имеет место формула (см., например, [2],[4])

$$\Big(\exp_* \Upsilon\Big)_n (X(I_n)) = \Big[1 + \Upsilon + \frac{1}{2!}\Upsilon_*^2 + \frac{1}{3!}\Upsilon_*^3 + ...\Big]_n (X(I_n)) = $$
$$= \sum_{\Omega\in\mathcal{P}_n}\prod_{\omega\in\Omega} \upsilon_{|\omega|}(X(\omega))\,, \qquad (4)$$

где суммирование производится по всем разложениям множества I_n.

Рассмотрим линейную форму $L(z;\cdot)$ на алгебре $\mathbb{A}$, зависящую от параметра $z \in \mathbb{C}$. Для каждого элемента Υ алгебры $\mathbb{A}$ значение $L(z;\Upsilon)$ этой формы определяется формулой

$$L(z;\Upsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int\limits_{[0,1]^n} \upsilon_n(X_n)dX_n\,, \qquad (5)$$

где $dX_n = dx_1 dx_2 ... dx_n$ – мера Лебега на $[0,1]^n$. Значения формы заведомо конечны в том случае, когда последовательность функций Υ равномерно ограничена.

Форма L мультипликативна, то есть для каждой пары элементов $\langle \Upsilon, \Psi \rangle$ с равномерно ограниченными элементами имеет место равенство (см., например, [4])

$$L(z; \Upsilon * \Psi) = L(z; \Phi) L(z; \Psi) . \tag{6}$$

Следствием линейности и мультипликативности формы $L(z; \cdot)$ является формула

$$L\big(z; \exp_* \Upsilon\big) = \exp\big(L(z; \Upsilon)\big) , \tag{7}$$

имеющая место для любого элемента $\Upsilon \in \mathbb{A}_0$.

Теорема 2. *Производящая функция (1) является аналитической функцией, определяемой в достаточно малой окрестности нуля на вещественной оси z наименьшим решением уравнения*

$$F(z) = \exp\big(zF(z)\big) . \tag{8}$$

□ Определим последовательность функций $S = \langle S(I_n); n \in \mathbb{N}_+ \rangle$, которая находится в $\mathbb{A}_0$. Согласно формуле (2),

$$N_{n+1} = \int\limits_{[0,1]^n} \Big(\exp_* S\Big)_n (X_n) dX_n .$$

Тогда определение производящей функции (1) может быть представлено в виде

$$F(z) = L\big(z; \exp_* S\big) .$$

Воспользовавшись (8), запишем это равенство в виде

$$F(z) = \exp L\big(z; S\big) .$$

Наконец, преобразуем форму, стоящую в экспоненте,

$$L\big(z; S\big) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int\limits_{[0,1]^n} S(X_n) dX_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{(n-1)!} N_n = zF(z) . \quad \blacksquare$$

Замечание. Уравнение определяет аналитическую функцию в круге с радиусом e^{-1}. В самом деле, ввиду выпуклости функции e^{zF} относительно F, ее график имеет два пересечения с графиком линейной функцией от F, если $z > 0$ и достаточно мало. Он имеет одно пересечение при $z < 0$. Следовательно, уравнение (8) относительно (8) имеет два решения при вещественных положительных и достаточно близких к нулю z. В этом случае мы выбираем, в качестве значения неявно заданной функции $F(z)$, наименьший корень уравнения. Именно он, по непрерывности, переходит в единственный корень уравнения (8) при $z < 0$. Исчезновение же корней уравнения (8) при $z > 0$ происходит в той точке z_*, в которой происходит бифуркация исчезновения пересечений линейной по F функции с функцией e^{zF}. Для этого необходимо и достаточно, чтобы в этой точке, кроме равенства $F = e^{z_* F}$, имело место равенство производных по F, $z_* e^{z_* F} = 1$. Из этой системы двух уравнений находим $z_* F = 1$, то есть такое положение достигается в точке $F = e$ при $z_* = e^{-1}$. Следовательно, радиус сходимости степенного по z ряда для функции $F(z)$ равен e^{-1}.

Пример: С целью проверки правильности полученного уравнения для производящей функции, вычислим значения N_n при $n = 1, 2, 3, 4$, исходя из уравнения для производящей функции $F(z)$.

Положим $F(z) = \exp R(z)$, $R(z) = zF(z)$. Тогда при $n \in \mathbb{N}$ имеем

$$R^{(n)} = zF^{(n)} + nF^{(n-1)}\,. \tag{9}$$

Определим функции $G_n(z)$ равенством $F^{(n)}(z) = e^{R(z)} G_n(z)$. Из этого определения следует рекуррентное соотношение

$$G_{n+1}(z) = G_n(z) R'(z) + G'_n(z)\,, \tag{10}$$

справедливое при $n \in \mathbb{N}$, при котором $G_1(z) = zF'(z) + F(z)$. Равенство (9) при $n = 2, 3, \ldots$ запишем в виде

$$R^{(n)}(z) = zG_n(z) + nG_{n-1}(z)\,. \tag{11}$$

Вычислим теперь N_n при $n = 1, 2, 3, 4$, исходя из неявно заданной уравнением (8) производящей функции, $N_n = F^{(n-1)}(0)$. Из (9) следует, что $R'(0) = 1$, а из (11) – $R^{(n)}(0) = G_{n-1}(0)$. Тогда $N_1 = F(0) = 1$, $N_2 = F'(0) = R'(0) = 1$.

Для вычисления значений N_3, N_4 нужно вычислить $G_2(0)$, $G_3(0)$ на основе рекурренции (10). Для этого нужно вычислить значения производных $G'_1(0)$, $G'_2(0)$. Они получаются из реккурентного соотношения

$$G'_{n+1}(z) = G''_n(z) + G'_n(z) R'(z) + G_n(z) R''(z)\,, \quad n \in \mathbb{N} \tag{12}$$

и отдельно

$$G'_1(z) = zF''(z) + 2F'(z)\,.$$

Отсюда следует при $n = 1$, что $G'_2(0) = G''_1(0) + G'_1(0)R'(0) + G_1(0)R''(0)$. Так как $G'_1(0) = 2F'(0) = 2$ и из (11) следует $R''(0) = 2G_1(0) = 2F(0) = 2$, то $G_2(0) = G_1(0) + G'_1(0) = 3$ и, следовательно, $N_3 = 3$.

Далее, из вычисленных значений также следует, что $G'_2(0) = G''_1(0) + 4$, и, так как $G''_1(z) = zF'''(z) + 3F''(z)$, то $G''_1(0) = 3F''(0) = 3G_2(0) = 9$. Поэтому $G'_2(0) = 13$ и, следовательно, из (11) следует $N_4 = G_3(0) = G_2(0) + G'_2(0) = 16$. Полученные значения совпадают со значениями, вычисленными во вводной части статьи посредством непосредственного перебора возможных древесных графов.

Литература

1. Оре О. Теория графов / М.: Наука, 1980. – 336 с.

2. Рюэль Д. Статистическая механика. Строгие результаты / М.: Мир, 1971. – 368 с.
3. Холл М. Комбинаторный анализ / М.: Иностр.лит., 1963. – 98 с.
4. Вирченко Ю.П., Остапенко Л.П. Определение числа разложений конечного множества // Belgorod State University Scientific Bulletin. Mathematics & Physics. – №5(202); 38 – C.84-88.
5. Майер Дж., Геннерт-Майер М. Статистическая механика / М.: Мир, 1980. –546 с.

EVALUATION OF TOPOLOGICAL TYPES NUMBER OF TREE GRAPHS WITH FINITE VERTEX SET

Yu.P. Virchenko, L.P. Ostapenko

Belgorod State University,
Studencheskaja St., 14, Belgorod, 308007, Russia, e-mail: virch@bsu.edu.ru

Abstract. Combinatorial problem about the number N_n of topologically different tree connected graphs with arbitrary finite set of n numbered vertexes is studied. It is calculated the generation function F of values N_n, $n \in \mathbb{N}$.

Key words: partition of finite set, generation function, algebra of symmetric functions, tree graphs.