

非同构简单无向图的计数方法

张兴元¹, 蔡 淮²

(1. 西南交通大学峨眉校区基础课部, 四川 峨眉 614202 2. 西南交通大学计算机与通信工程学院, 四川 成都 610054)

摘要 : 首先在正整数的所有无序划分构成的集合上定义了一个全序关系, 由此将所有无序划分的全体分成一些互不相交的子集, 从而得到生成所有无序划分的方法, 也就得到了 n 顶点的全体置换格式, 然后给出了由简单无向图的顶点的置换格式确定简单无向图边的置换格式的方法, 最后给出了 n 顶点非同构简单无向图的生成多项式并给出了部分计算结果。

关 键 词 : 无序划分; 全序关系; 简单图; 置换格式

中图分类号 : O157 **文献标识码** : A

所谓简单无向图, 是指过两个顶点没有超过一条边, 而且不存在圈的无向图。在文献[1]中给出了利用 Polya 母函数型计数定理求出 n 个顶点的非同构无向图的办法, 即对 n 个无标定的完全图的 $n(n-1)/2$ 条边, 使用两种颜色进行着色, 不同的着色方案数即为非同构无向图的总数。在利用 Polya 母函数型计数定理解决此问题时, 必须要解决两个方面的问题:

(1) 由顶点的置换全体确定的边的置换格式全体, 记 S_n 为 n 个顶点的全体置换组成的对称群, $S_n^{(2)}$ 为由顶点置换确定的 n 顶点无向图的边的置换组成的集合, A_n 为 $S_n^{(2)}$ 中全体置换格式构成的集合;

(2) A_n 中每一个元素对应的 $S_n^{(2)}$ 中的边置换数量。

对于这两个问题, 首先求出 S_n 中元素确定的所有置换格式的集合 R_n 以及每一个置换格式所对应的 S_n 中元素的数目, 然后建立起 R_n 中元素与 A_n 中元素的联系, 从而解决这两个问题, 最后给出了 $2 \leq n \leq 20$ 的非同构简单无向图数目的计算结果, 以及简单的分析。

1 S_n 中元素的置换格式的全体 R_n (即不同共轭类的全体)

根据文献[1]和[2], 对称群 S_n 中的置换可分解成置换格式

$$(1)^{\lambda_1} (2)^{\lambda_2} \dots (n)^{\lambda_n} \quad (1)$$

在 S_n 中具有相同置换格式的置换全体, 叫做与该格式对应的共轭类。 S_n 中的每一个置换可以按照它的置换格式归结到不同的共轭类。而且, 根据文献[1]和[2] (1) 式可以等价地描述成:

$$1 \cdot \lambda_1 + 2 \cdot \lambda_2 + \dots + k \cdot \lambda_k + \dots + n \cdot \lambda_n = n, \lambda_i \geq 0 \quad (2)$$

因此, 要求出 S_n 的所有共轭类, 即是求解方程 (2)。一旦求出 S_n 的所有共轭类, 根据文献[1], 对任意的 $(1)^{\lambda_1} (2)^{\lambda_2} \dots (n)^{\lambda_n}$, S_n 中与之对应的元素个数可由公式:

$$\frac{n!}{\lambda_1! \cdot \lambda_2! \cdot \dots \cdot \lambda_n! \cdot 1^{\lambda_1} \cdot 2^{\lambda_2} \cdot \dots \cdot n^{\lambda_n}}$$

求得。因此, 问题的关键是求解方程 (2), 下面就给出方程 (2) 的一种解法。

1.1 引理

为了求解方程 (2), 首先需要引进一个新的概念。

定义 : 对一个非零向量 $V = (v_1, v_2, \dots, v_n)$ 的每一个位置分量赋予一定的位权 (w_1, w_2, \dots, w_n) , 这样得到的向量 V 称为带权向量, 而将 $w = \sum_{i=1}^n w_i v_i$ 称为 V 的权重。

对于 S_n 的共轭类 $(1)^{\lambda_1}(2)^{\lambda_2}\dots(n)^{\lambda_n}$,定义一个向量 $\lambda=(\lambda_1,\lambda_2,\dots,\lambda_n)$ 与之对应 ,其中 $\lambda_k\geq 0$,分量 λ_k 具有权 k , λ 的权重为 n 。这样 ,方程 (2) 的全体解都可以用这样的向量来表示 ,其解的全体记为 :

$$R_n=\{\lambda=(\lambda_1,\lambda_2,\dots,\lambda_n)|\sum_{i=1}^nk\lambda_i=n\}$$

定义 : R_n 上的一个二元关系“ \leq ”如下 :对任意的 $\lambda,\mu\in R_n$, $\lambda\leq\mu$ 当且仅当下列 3 种情况之一成立 :

(1) $\lambda=\mu$ (2) $\lambda_n<\mu_n$ (3) $\lambda_n=\mu_n$,且存在 $k>0$,使得当 $j=1,2,\dots,k-1$ 时 $\lambda_{n-j}=\mu_{n-j}$,但是 $\lambda_{n-k}<\mu_{n-k}$

定理 : $\langle R_n,\leq\rangle$ 是一个偏序集 ,并且是一个全序集。

证明 :对任意的 $\lambda,\mu,v\in R_n$,

- (1) 若 $\lambda=\lambda$,则 $\lambda\leq\lambda$,即满足自反性 ;
- (2) 若 $\lambda\leq\mu$ 且 $\mu\leq\lambda$,根据定义 ,有 $\lambda=\mu$,即满足反对称性 ;
- (3) 若 $\lambda\leq\mu$ 且 $\mu\leq v$,

如果 $\lambda=\mu$ 或者 $\mu=v$,则 $\lambda\leq v$;
如果 $\lambda_n<\mu_n$ 或者 $\mu_n<v_n$,则 $\lambda_n<v_n$,即 $\lambda\leq v$;

如果存在 k_1 ,使 $\lambda_n=\mu_n$,且当 $j=1,2,\dots,k_1-1$ 时 $\lambda_{n-j}=\mu_{n-j}$,但 $\lambda_{n-k_1}<\mu_{n-k_1}$,存在 k_2 ,使 $\mu_n=v_n$,且当 $j=1,2,\dots,k_2-1$ 时 $\mu_{n-j}=v_{n-j}$,但 $\mu_{n-k_2}<v_{n-k_2}$,取 $k=\min\{k_1,k_2\}$,则 $\lambda_n=\mu_n=v_n$,且当 $j=1,2,\dots,k-1$ 时 $\lambda_{n-j}=\mu_{n-j}=v_{n-j}$,但是 $\lambda_{n-k}<v_{n-k}$,所以 $\lambda\leq v$ 。

- (4) 所以 $\langle R_n,\leq\rangle$ 是一个偏序集。
- (5) 对于 R_n 中的任意两个元素 λ,μ ,若 $\lambda\neq\mu$,则一定有 $\lambda\leq\mu$ 或者 $\mu\leq\lambda$;
- (6) 同时 R_n 为一个有限集合 ,所以 $\langle R_n,\leq\rangle$ 是一个全序集。

定理 : $\langle R_n,\leq\rangle$ 中的最小元为 $(n,0,\dots,0)$,记为 λ_0 ; $\langle R_n,\leq\rangle$ 中的最大元为 $(0,0,\dots,1)$,记为 λ_{\max} 。

记 $R_n(m)=\{\lambda=(\lambda_1,\lambda_2,\dots,\lambda_m,0,\dots,0)|\lambda\in R_n \text{ 且 } \lambda_m\geq 1\}$,则 $R_n(1)=\{\lambda_0\}$, $R_n(n)=\{\lambda_{\max}\}$ 。

定理 : $\{R_n(1),R_n(2),\dots,R_n(n)\}$ 构成 R_n 的一个划分。

1.2 算法的基本思想

根据前面的定理 ,如果分别求出了 $R_n(1),R_n(2),\dots,R_n(n)$,然后将其合并 ,得到 R_n 。为了求出 $R_n(j)$,可以使用递归的思想从 $R_n(1)$ 逐步变化得到。下面以 $n=8,j=4$ 为例说明。 $R_8(1)=\{(8,0,0,\dots,0)\}$,首先 ,得到 $R_8(4)$ 中的最小元素 $r_1=(4,0,0,1,0,0,0,0)$;接下来 ,将 r_1 中的第一个分量的权和 $4(8-4\times 1=4)$ 依次逐步往位权较低的第 2 位、第 3 位和第 4 位分配 ;如此反复进行 ,直到分配到位权最低的位。其产生过程可用图 1 表示。

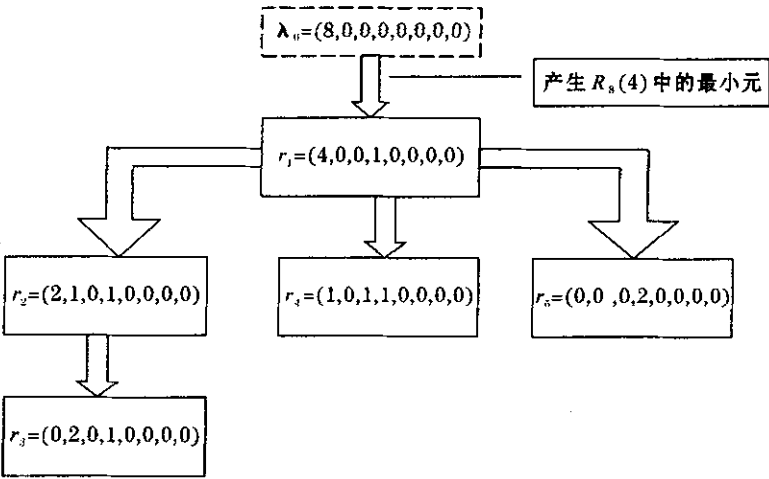


图 1 产生 $R_8(4)$ 的过程

1.3 算法描述

算法 1 由数据 (1) 求解 $R_n(j)$ 的递归算法。

- (1) $R_n(1)$ 中的元素为 $\lambda_0 = (n, 0, \dots, 0)$;
- (2) $R_n(j)$ 中的最小元素为 $v = (n-j, 0, \dots, 1, 0, \dots, 0)$, $s = j$;
- (3) 对所有 $i = 2, 3, \dots, s$,
 - ① 产生 $R_n(j)$ 中新的 u , 即令 $u = v$, $u_1 = u_1 - i$, $u_i = u_i + 1$;
 - ② 计算带权和 $\text{sum} = \sum_{k=1}^{i-1} k \cdot u[k]$;
 - ③ 如果 $\text{sum} < 1$, 转步骤3;
 - ④ 如果 $\text{sum} < i$, 则 $\min = \text{sum}$, 否则 $\min = i$;
 - ⑤ 令 $v = u$, $s = \min$, 转步骤3。

算法2: 求 R_n 的算法。

- (1) 确定 R_n 的最小元素 $\lambda_0 = (n, 0, \dots, 0)$;
- (2) 对所有 $j = 2, 3, \dots, n$, 调用算法1。

2 $S_n^{(2)}$ 中的置换格式(共轭类)

对于由 R_n 中的元素确定 $S_n^{(2)}$ 中的元素, 可以采用下面的方法:

设 $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \in R_n$, μ 为由 λ 确定的 $S_n^{(2)}$ 中部分元素对应的置换格式, 则 μ 可以由下面的方法确定:

(1) 若两个顶点来自同一轮换, 设轮换的长度为 Len , 则当 Len 为偶数时, 边的置换格式中有长度为 Len 的轮换个数为 $\text{Len}/2 - 1$, 长度为 $\text{Len}/2$ 的轮换个数为 1; 当 Len 为奇数时, 边的置换格式中有长度为 Len 的轮换个数为 $(\text{Len} - 1)/2$;

(2) 若两个顶点来自具有相同长度的不同轮换, 设轮换的长度为 Len , 则边的置换中长度为 Len 的轮换个数为 $\text{Len} * C_{\lambda_i}^2$;

(3) 若两个顶点来自具有不同长度的不同轮换, 设其长度分别为 Len1 和 Len2 , 则由它们所确定的边的置换中长度为 $\text{LCM}(\text{Len1}, \text{Len2})$ 的轮换个数为 $\text{Len1} * \text{Len2} / \text{LCM}(\text{Len1}, \text{Len2})$, 其中 $\text{LCM}(\text{Len1}, \text{Len2})$ 为 Len1 和 Len2 的最小公倍数。

必须注意, 对于 n 为偶数时, R_n 中的不同元素可能对应着 $S_n^{(2)}$ 中同一个共轭类, 此时, $S_n^{(2)}$ 中的共轭类所对应的元素个数为 R_n 中元素的个数之和。

根据上面的方法, S_n 中具有相同置换格式的元素确定的 $S_n^{(2)}$ 中的元素也有相同的置换格式。

3 非同构图的计数方法

根据前面的结论, 可以利用 Polyá 定理构造出 n 个顶点的非同构的简单无向图的生成多项式

$$P(x, y) = \frac{1}{n!} \sum_{\lambda \in R_n} C_\lambda P_\mu(x, y) \quad (3)$$

其中 $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n(n-1)/2})$ 为由 λ 确定的 $S_n^{(2)}$ 中的共轭类, R_n 为 S_n 的全体共轭类组成的集合, $C_\lambda = \frac{n!}{\lambda_1! \cdot \lambda_2! \cdot \dots \cdot \lambda_n! \cdot 1^{\lambda_1} \cdot 2^{\lambda_2} \cdot \dots \cdot n^{\lambda_n}}$, $P_\mu(x, y) = (x + y)^{\mu_1} (x^2 + y^2)^{\mu_2} \dots (x^k + y^k)^{\mu_k} \dots (x^{\frac{n(n-1)}{2}} + y^{\frac{n(n-1)}{2}})^{\mu_{\frac{n(n-1)}{2}}}$

在(3)式中, 按照 x 的降幂或者 y 的降幂对多项式的项进行重排, 将 x 视作有边, $y = 1$, 就可以得到 n 个顶点非同构的简单无向图的构成多项式, x 的幂即为该图的边数, 该项的系数即为有这么多条边的非同构图的数量。

4 部分计算结果

利用上述方法, 经过编程计算得到顶点数为 n ($1 \leq n \leq 20$) 时不同构的简单无向图的数量(在(3)式中令 $x = y$

= 1 即可),见表 1。

表 1 不同构的简单无向图的数量($1 \leq n \leq 20$)

| 顶点数 | 不同构的简单图的数量 | 顶点数 | 不同构的简单图的数量 |
|-----|------------|-----|---|
| 1 | 1 | 11 | 1018997864 |
| 2 | 2 | 12 | 165091172592 |
| 3 | 4 | 13 | 50502031367952 |
| 4 | 11 | 14 | 29054155657235488 |
| 5 | 34 | 15 | 31426485969804308768 |
| 6 | 156 | 16 | 64001015704527557894928 |
| 7 | 1044 | 17 | 245935864153532932683719776 |
| 8 | 12346 | 18 | 1787577725145611700547878190848 |
| 9 | 274668 | 19 | 24637809253125004524383007491432768 |
| 10 | 12005168 | 20 | 645490122795799841856164638490742749440 |

5 分析

利用这种方法能够从理论上 有规律地解决 n 个顶点的非同构的简单无向图的数量及其分布规律问题 ,尤其是当 $n < 10$ 的时候 ,更是如此。

参考文献：

[1] 卢开澄 .组合数学(第二版 [M].北京：清华大学出版社 ,2001 .
[2] 柯召 ,魏万迪 .组合论(上册 [M].北京：科学出版社 ,1984 .
[3] 严蔚敏 ,吴伟民 .数据结构 :C 语言版[M].北京：清华大学出版社 ,1997 .
[4] 左孝凌 .离散数学[M].上海：科学技术出版社 ,1982 .

A numbering scheme of non-isomorph graph

ZHANG Xing-yuan¹ , CAI Huai²

(Dept. of Basic Courses , Emei Branch , SWJTU , Emei 614202 , China ; 2. School of Computer & Comm. Engineering , SWJTU , Chengdu 610031 , China)

Abstract : A total order “ \leq ” is defined in a set $\mathfrak{S}(n)$, which is the collection of all non-order partitions of the natural numbers N . According to this order a partition of $\mathfrak{S}(n)$ and an algorithm of the recursion are obtained . All permutation formats of N -vertices of the simple undirected graph are gained . The relation between the permutation formats of vertices and those of edges is given . The formula used to compute the total number and the particular distribution of the non-isomorph graph of the simple undirected graph is also given . The generation polynomial of the non-isomorph graph and some computation results are presented .

Key words : non-order partition ; total order ; simple graph ; permutation format