19869 BESOGNET--LOSTIA Marius

Une méthode de dénombrement et de génération de graphes non-isomorphes

Avec l'essor de l'informatique, de nombreuses problématiques peuvent être résolues numériquement grâce à leur modélisation par des graphes, l'étude mathématique de ceux-ci présente alors un intérêt dans leur compréhension. De plus, n'étudier que des représentants de familles de graphes aux propriétés équivalentes, plutôt que les familles entières, permet l'optimisation informatique.

Le théorème de dénombrement de Pólya offre un outil puissant pour dénombrer des ensembles en considérant comme doublons les éléments qui peuvent être transformés l'un en l'autre par des actions de groupes agissant sur l'ensemble tout en conservant leur structure. Les transformations de graphes sont ainsi au cœur de l'étude.

Positionnement thématique (ÉTAPE 1) :

- *MATHEMATIQUES (Algèbre)*
- *INFORMATIQUE (Informatique pratique)*
- *MATHEMATIQUES (Géométrie)*

Mots-clés (ÉTAPE 1) :

Mots-clés (en français)	**Mots-clés (en anglais)**
Théorème de dénombrement de Pólya	*Pólya's theory of counting*
Combinatoire	*Combinatorics*
Théorie des groupes	*Group theory*
Graphes	*Graphs*
Méthode de construction par chemin canonique	*Canonical construction path method*

Bibliographie commentée

En 1937, George Pólya publie **[1]** dans lequel il expose son théorème de dénombrement, permettant d'énumérer les orbites d'un groupe agissant sur un ensemble, qui généralise le lemme de Burnside. Bien que ce même théorème ait été démontré indépendamment dix ans plus tôt par Redfield dans **[2]**, Pólya démontre la puissance de cet outil en en donnant dans son article (**[1]**) de très nombreux exemples d'applications présentant des hauts degrés de symétrie où le théorème s'avère très efficace.

Nous nous intéresserons ici au cas qui se prête tout à fait au théorème de Pólya de l'énumération de graphes non-isomorphes, c'est à dire de graphes dont les sommets sont indiscernables les uns des autres (ou indiscernables au sein d'une même classe d'isomorphisme pour le cas où les sommets seraient coloriés par exemple), et où seule la structure des arrêtes est importante.

Pour m'aider à appréhender ces notions, je m'appuie sur le cours **[3]** (chapitres 3 à 5) détaillant les concepts d'actions de groupes et de groupes de symétries, utiles à l'application du théorème, et sur **[4]** (chapitre Pólya's theory of counting) pour sa preuve (étant plus abordable et offrant des exercices absents dans **[1]**)

Les applications relatives au dénombrement de familles de graphes possédant certaines propriétés de symétrie que nous étudierons, rejoindront en partie **[5]**, qui en donne plusieurs exemples, notamment pour énumérer des réseaux de neurones, lesquels sont un cas particulier de graphes très symétriques. Mais l'application la plus inattendue du théorème, qui revient en fait au problème des graphes et déjà présente dans l'article de Pólya (**[1]**), est le dénombrement des isomères en chimie, résumé dans **[6]**. En assimilant les structures des molécules à des graphes respectant certaines contraintes, Pólya nous permet de répondre à la question : Combien y a-t-il d'isomères pour un formule chimique donnée ?

Néanmoins, cette méthode de dénombrement ne donne que le cardinal des classes d'isomorphismes de nos ensembles, et n'est en aucun cas constructive. C'est pourquoi nous nous appuierons sur une méthode numérique pour avoir une liste exhaustive des familles de graphes que l'on étudiera (pour des petits cardinaux au moins). Cette méthode est employée pour la première fois dans **[8]** pour exhiber les graphes cubiques à n sommets, puis décrite plus généralement dans **[7]**, où elle est nommée : *Méthode de construction par chemin canonique.* L'idée de cette construction est, en partant d'un ensemble de représentants de chaque classes d'isomorphismes dans un cas simple, d'obtenir par hérédité les cas suivants selon une méthode dite *canonique*, qui construira des représentants de chaque classe du cas suivant, sans donner deux représentant de la même classe.

Problématique retenue

Il s'agit d'étudier une méthode systématique pour dénombrer des classes d'équivalence de familles de graphes, pour certaines propriétés de symétrie, puis d'implémenter un programme en génère chaque représentant.

Objectifs du TIPE du candidat

Je me propose :

1) De présenter le théorème de dénombrement de Pólya, ainsi que d'en comprendre la preuve, la portée, et les notion de théorie des groupes nécessaires à son application (via **[3]** notamment).

2) D'en proposer une application en théorie des graphes, par le dénombrement de familles de graphes.

3) D'implémenter un algorithme permettant de construire ces familles pour un exemple concret.

Références bibliographiques (ÉTAPE 1)

[1] GEORGE PÓLYA : Combinatorial Enumeration of Groups, Graphs, and Chemical Compounds *: Acta Mathematica, 1937 ; Springer 1987 pour la traduction par R.C. Reads*

[2] REDFIELD, J. HOWARD : The Theory of Group-Reduced Distributions *: 1927 American Journal of Mathematics, DOI : 10.2307/2370675*

[3] GAËTAN CHENEVIER : Cours d'Algèbre I à l'ENS *: URL : http://gaetan.chenevier.perso.math.cnrs.fr/ALG1/Algebre_ENS_Chenevier.pdf*

[4] J. HARRIS, J.HIRST, M.MOSSINGHOFF : Combinatorics and graph theory *: Springer, DOI : https://doi.org/10.1007/978-0-387-79711-3_2*

[5] ANTHONY RICHARD : Application du théorème de Pólya pour l'énumération d'une famille de graphes *: URL : https://corpus.ulaval.ca/server/api/core/bitstreams/3ff49b4e-3a3a-4297-82e5-ff0bee1af85c/content*

[6] D. BABIĆ , D.J. KLEIN, J. VON KNOP & N. TRINAJSTIĆ : Combinatorial Enumeration in Chemistry *: URL : https://citeseerx.ist.psu.edu/document?repid=rep1&type=pdf&doi=23c87484ba64df4ea6a803be6d4e49016f59b3d8*

[7] BRENDAN D. MCKAY : Isomorph-free exhaustive generation *: URL : https://users.cecs.anu.edu.au/~bdm/papers/orderly.pdf*

[8] BRENDAN D. MCKAY, GORDON F. ROYIE : Constructing the cubic graphs on up to 20 vertices *: URL : https://users.cecs.anu.edu.au/~bdm/papers/Gobstoppers.pdf*