

Перечисление неизоморфных тривиальных ациклических графов по транзитивному замыканию

В.В. Тензина

МГУ им. М.В. Ломоносова, Механико-математический факультет

3 декабря 2025

Определение

Ориентированный граф без ориентированных циклов называется **ациклическим**.

Определение

Аutomорфизм графа — это отображение множества вершин графа в себя, сохраняющее рёбра. Назовём ориентированный граф **тривиальным**, если не существует нетождественных автоморфизмов.

В данной работе описывается метод подсчёта числа неизоморфных тривиальных ациклических графов без кратных рёбер с заданным числом вершин n .

Бинарное отношение на множестве X — любое подмножество множества $X^2 = X \times X$.

В дальнейшем считаем, что X конечно. $X = \{x_1, \dots, x_n\}$ для некоторого натурального числа n .

Каждому ориентированному графу G с конечным числом вершин n можно сопоставить бинарное отношение R на конечном множестве из n элементов.

*Каждому простому графу, то есть графу без кратных ребёр и петель, сопоставим **матрицу смежности** следующим образом: из i в j есть ребро тогда и только тогда, когда пара $(i, j) \in R$; матрица (a_{ij}) состоит из n строк и n столбцов, а элемент матрицы $a_{ij} = 1$ тогда и только тогда, когда $(i, j) \in R$, иначе $a_{ij} = 0$.*

Определение

Два отношения $R_1 \subseteq X \times X$ и $R_2 \subseteq Y \times Y$ называются **изоморфными**, если существует биективное отображение $f : X \mapsto Y$ такое, что $(x, y) \in R_1 \Leftrightarrow (f(x), f(y)) \in R_2$.

Определение

Если $R_1 = R_2 = R$, то f называется **автоморфизмом**.

Если $R \subseteq X \times X$ и отображение $f : X \mapsto X$ таково, что $(x, y) \in R \Rightarrow (f(x), f(y)) \in R$, то f — **эндоморфизм**.

$Aut(R)$ — группа автоморфизмов отношения R . Если $|Aut(R)| = 1$, то такая группа называется тривиальной.

Определение

Если бинарное отношение антирефлексивно, транзитивно и антисимметрично, то оно называется **строгим порядком**.

Если отношение R является строгим порядком, то соответствующий граф не имеет петель, любые две различные вершины i, j соединены не более чем одним ребром; если есть рёбра из i в j и из j в k , то есть ребро из i в k , а для элементов матрицы $A = (a_{ij})$ выполняется: 1) на главной диагонали нули, 2) $a_{ij} + a_{ji} \leq 1$, 3) $a_{ij} = 1 \ \& \ a_{jk} = 1 \Rightarrow a_{ik} = 1$.

Можно перечислять все отношения заданного вида, а можно с точностью до изоморфизма, то есть учитывая только одного представителя из заданного класса изоморфизма.

Перечисление всех отношений заданного вида или с точностью до изоморфизма хорошо известная задача (см. [1]). Например, этому посвящено много различных таблиц Слоэна (см. [2]).

Например, A001035 - число помеченных строгих порядков, A000112 - число неизоморфных строгих порядков.

Перебор неизоморфных ациклических графов

Пусть Γ — ациклический граф, тогда, воспользовавшись топологической сортировкой, можно переупорядочить вершины графа так, чтобы булева матрица этого графа $(a)_{ij}$ ($i, j \in \{1, \dots, n\}$) стала верхнетреугольной. При этом на диагонали этой матрицы стоят нули. Каждому такому графу Γ сопоставляется двоичное число

$a_{n-1,n}a_{n-2,n}a_{n-2,n-1}a_{n-3,n}a_{n-3,n-1}a_{n-3,n-2} \dots a_{1,n}a_{1,n-1} \dots a_{1,2}$.
Это код данной матрицы. Перебирая все возможные отношения, изоморфные заданному R , с верхнетреугольными матрицами, находится максимальный по значению код. Такой код называется *максикодом*, а соответствующие матрицы *максикодными*.

Пример максикодной матрицы

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Лемма

Пусть для некоторого натурального n двоичный код

$a_{n-1,n}a_{n-2,n}a_{n-2,n-1}a_{n-3,n}a_{n-3,n-1}a_{n-3,n-2} \dots a_{1,n}a_{1,n-1} \dots a_{1,2}$
является максикодом для некоторого строгого порядка на
множестве из n элементов. Тогда

$a_{n-1,n}a_{n-2,n}a_{n-2,n-1}a_{n-3,n}a_{n-3,n-1}a_{n-3,n-2} \dots a_{2,n}a_{2,n-1} \dots a_{2,3}$
(вычёркиваем младшие разряды в количестве $n - 1$) будет
максикодом для некоторого строгого порядка на множестве из
 $n - 1$ элементов. Обратно: если к максикоду некоторого
строгого порядка на множестве из n элементов приписать
справа n нулей, то получится максикод для некоторого строгого
порядка на множестве из $n + 1$ элементов.

Зная все максикоды для числа вершин n можно построить все
максикоды для числа вершин $n + 1$.

Общий способ перечисления неизоморфных ациклических графов

Для перечисления всех неизоморфных ациклических графов можно поступить как в алгоритме из [3]. Для этого на каждом шаге для заданного n создаётся файл со списком максикодов и размером группы автоморфизмов на основе файла для $n - 1$.

Каждому автоморфизму соответствует некоторая топологическая сортировка, и поэтому все потенциальные автоморфизмы надо искать только среди них.

Ациклические графы

Для каждого натурального n введём следующие обозначения. Пусть S — число всех ациклических графов с заданным числом вершин с помеченными вершинами, N — число всех неизоморфных ациклических графов, а A — число тривиальных неизоморфных графов.

Таблица: Ациклические графы

	S	N	A	$\frac{S}{n!N} \cdot \frac{S}{n!A}$	$\frac{A}{N}$
3	25	6	3	0,9645	0,5
4	543	31	17	0,9713	0,5484
5	29281	302	201	0,9809	0,6656
6	3781503	5984	4657	0,9898	0,7782
7	1138779265	243668	210381	0,9959	0,8634
8	783702329343	20286025	18651181	0,9985	0,9194

Строгие порядки

	S	N	A	$\frac{S}{n!N} \cdot \frac{S}{n!A}$	$\frac{A}{N}$
3	19	5	2	1,0028	0,4
4	219	16	5	1,0408	0,3125
5	4231	63	19	1,0386	0,3019
6	130023	318	102	1,0054	0,3208
7	6129859	2045	730	0,9909	0,357
8	431723379	16999	6857	0,9836	0,4033
9	44511042511	183231	83654	0,9816	0,4565
10	6611065248783	2567284	1315378	0,9829	0,5123
11	1396281677105899	46749427	26554439	0,9856	0,568

Программное обеспечение на языке C++ для перечисления неизоморфных строгих порядков или ациклических графов

- ▶ На каждом шаге для заданного n создаётся файл со списком максикодов и размером группы автоморфизмов на основе файла для $n - 1$.
- ▶ Возможность распараллеливания.
- ▶ При проверке кандидата на то, что он является максикодом, необходимо перечислить все топологические сортировки, сохраняющие соответствующий строгий порядок нижнего уровня, при этом про половину кандидатов заведомо известно, что они не подходят.
- ▶ Если нижний максикод соответствовал отношению с тривиальной группой автоморфизмов, то для некоторых кандидатов сразу очевидно, что им соответствует максикод также с тривиальной группой автоморфизмов.
- ▶ Каждому автоморфизму соответствует некоторая топологическая сортировка, и поэтому все потенциальные автоморфизмы надо искать только среди них.
- ▶ По каждому такому файлу вычисляется некоторая статистика.

Результат работы программы перечисления неизоморфных строгих порядков для $n = 11$

total maxicodes: 46749427

trivial maxicodes: 26554439

connected maxicodes: 43944974

connected trivial maxicodes: 25229911

connected trivial maxicodes without non-trivial endomorphisms: 1

connected non-trivial maxicodes without non-trivial endomorphisms: 0

for height = 1 count of connected = 51196

for height = 2 count of connected = 6306559

for height = 3 count of connected = 21530890

for height = 4 count of connected = 12791620

for height = 5 count of connected = 2879831

for height = 6 count of connected = 355113

for height = 7 count of connected = 28187

for height = 8 count of connected = 1523

for height = 9 count of connected = 54

for height = 10 count of connected = 1

Результат работы программы перечисления неизоморфных ациклических графов для $n = 7$

total maxicodes: 243668

connected maxicodes: 205696

connected trivial maxicodes without non-trivial endomorphisms: 0

connected non-trivial maxicodes without non-trivial endomorphisms: 77005

for height = 2 count of connected = 32

for height = 3 count of connected = 2608

for height = 4 count of connected = 24336

for height = 5 count of connected = 68128

for height = 6 count of connected = 77824

for height = 7 count of connected = 32768

Другой подход для перечисления неизоморфных ациклических графов

Каждому ациклическому графу сопоставим его транзитивное замыкание, то есть если из одной вершины существует путь в другую, то соединим эти вершины напрямую ориентированным ребром.

В таком случае все неизоморфные ациклические графы разбиваются на классы таким образом, что все графы принадлежат одному классу тогда и только тогда, когда они имеют одинаковое транзитивное замыкание.

Итак, для нахождения числа всех неизоморфных нетривиальных ациклических графов достаточно уметь перебирать все неизоморфные ациклические графы, у которых их транзитивное замыкание совпадает с заданным строгим порядком, при этом, считая, что задача перебора всех строгих порядков уже решена.

Теорема

Пусть Γ — ациклический граф, а $\hat{\Gamma}$ — его транзитивное замыкание. Тогда $Ostov(\Gamma) = Ostov(\hat{\Gamma})$.

Следствие

Все ациклические графы, имеющие заданное транзитивное замыкание, содержат остов этого замыкания.

Теорема

Пусть Γ — ациклический граф, а $\hat{\Gamma}$ — его транзитивное замыкание. Тогда $\text{Aut}(\hat{\Gamma}) = \text{Aut}(\text{Ostov}(\Gamma))$ и $\text{Aut}(\Gamma) \subseteq \text{Aut}(\hat{\Gamma})$.

Следствие

Если транзитивное замыкание ациклического графа тривиально, то и сам граф тривиален.

Теорема

Пусть группа G действует на множестве вершин графа Γ . Тогда граф Γ тривиален тогда и только тогда, когда для любого элемента $g \in G$ простого порядка $g\Gamma \neq \Gamma$.

Алгоритм перебора всех тривиальных ациклических графов с n вершинами по уже вычисленным неизоморфным порядкам

1. Перебираем для заданного n все максикоды строгих порядков с n вершинами.
2. Для каждого максикода Γ вычисляем $Ostov(\Gamma)$.
3. Находим группу автоморфизмов $Aut(\Gamma)$ при помощи перечисления всех топологических сортировок для графа Γ . При этом сохраняем в памяти только элементы этой группы (перестановки) простого порядка, скажем, подмножество F . Параллельно находим множество V_r всех вершин графа $Ostov(\Gamma)$, которые остаются на месте при любом автоморфизме из $Aut(\Gamma)$. По V_r строим множество рёбер E_r , которые остаются на месте при любом автоморфизме из $Aut(\Gamma)$.
4. Перебираем все возможные комбинации из рёбер $E(\Gamma) \setminus Ostov(\Gamma) \setminus E_r$. Каждая такая комбинация образует некий граф H . Отбираем только те, для которых $\forall f \in F$ не является автоморфизмом. Считаем количество полученных H , скажем, S . Пусть P — некоторый набор рёбер из $E_r \setminus \Gamma$. Каждый тривиальный граф, чьё замыкание совпадает с Γ , имеет вид $H \cup Ostov(\Gamma) \cup P$. Поэтому число тривиальных ациклических графов, чьё транзитивное замыкание совпадает с Γ , равно $2^{|E_r|} \cdot S$.

Можно вести подсчёт только для связных максикодов (транзитивных замыканий), а потом по полученным данным восстановить число всех тривиальных ациклических графов.

Литература

-  Харари Ф., Палмер Э. Перечисление графов //Москва : Мир, 1977. 324 с.
-  Sloane N. J. A. The on-line encyclopedia of integer sequences. 2021. <http://oeis.org>.
-  Тензина В. В. Вычисление некоторых характеристик всех неизоморфных строгих порядков на конечном множестве. //Проблемы теоретической кибернетики : материалы XX Международной научной конференции (Москва, 5-8 декабря 2024), издательство ООО "МАКС Пресс"(Москва), тезисы, 2025, с. 134-137.
-  Кнут Дональд. Э. Искусство программирования. Том 4А. Комбинаторные алгоритмы. Часть 1. //Пер. с англ. : М. : И. Д. Вильямс, 2013.