ПРИКЛАДНАЯ ТЕОРИЯ ГРАФОВ

УДК 519.111.6 DOI 10.17223/20710410/71/5

ПЕРЕЧИСЛЕНИЕ 2-ДЕРЕВЬЕВ С ОРИЕНТИРОВАННЫМИ ЯЧЕЙКАМИ

В. Р. Верденко*, В. А. Воронов*,**

*Адыгейский государственный университет, г. Майкоп, Россия
**Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Россия

E-mail: v-vor@yandex.ru

Рассматривается задача о перечислении 2-деревьев с ориентированными ячейками с точностью до изоморфизма. Под 2-деревом мы понимаем простой граф, полученный из K_3 последовательным добавлением вершин, соединенных с концами некоторого ребра. Будем говорить, что ячейки 2-дерева ориентированы, если в каждой ячейке (треугольнике) вершины независимо перенумерованы числами $1, 2, 3$. Ячейки частично ориентированы, если в каждой ячейке независимо отмечена одна вершина. При помощи теоремы Редфилда — Пойа и характеристики неподобия для корневых структур вычислены производящие функции для числа 2-деревьев с ориентированными и частично ориентированными ячейками.

Ключевые слова: *2-деревья, теория перечисления Пойа, производящие функции.*

ENUMERATION OF 2-TREES WITH DIRECTED CELLS

V. R. Verdenko*, V. A. Voronov*,**

*Adyghe State University, Maikop, Russia
**Moscow Institute of Physics and Tecnology, Dolgoprudnyy, Russia*

We consider the problem of enumerating 2-trees with oriented cells up to isomorphism. A 2-tree is a simple graph obtained from K_3 by the iterative addition of vertices connected to the ends of some edge. The cells of a 2-tree are oriented if in each cell (triangle) the vertices are independently labeled 1, 2, 3. The cells are partially oriented if one vertex is independently labeled in each cell. Using the Redfield — Polya theorem and dissymmetry lemma, we compute generating functions for the number of 2-trees with oriented and partially oriented cells.

Keywords: *2-trees, Polya counting, generating functions.*

Введение

Перечисление конечных множеств с заданной на них структурой с точностью до изоморфизма является одной из основных задач комбинаторики. Обычно в задачах данного типа требуется предъявить некий алгоритм вычисления последовательности

$\{q_n : n = 0, 1, 2, \dots\}$, где q_n — число неизоморфных структур, заданных на n-элементном множестве. Существуют весьма эффективные реализации переборных алгоритмов, позволяющих использовать параллельные вычисления для явного построения всех попарно неизоморфных структур. Наиболее известен комплекс утилит NAUTY AND TRACES, в течение нескольких десятилетий разрабатываемый Б. Маккеем [1].

Кроме непосредственного перебора всех структур для n элементов, существует ряд методов, позволяющих вычислять q_n намного быстрее. Некоторые задачи такого типа решаются при помощи леммы Бёрнсайда, основанной на ней теоремы Редфилда — Пойа и подходов, разработанных в 1950–70-е годы Ф. Харари, Э. Палмером, Р. Робинсоном и другими авторами. Обычно при этом выводятся соотношения для производящей функции, $\varphi(x) = \sum\limits_{k=0}^{\infty} q_k x^k$, при помощи которых удаётся последовательно вычислять её коэффициенты. При этом, в отличие от переборных алгоритмов, объём вычислений растет существенно медленнее, чем q_n.

Классическими являются задачи о перечислении непомеченных графов на n вершинах с точностью до изоморфизма, непомеченных деревьев, 2-деревьев. Соотношения, позволяющие вычислять производящие функции в этих случаях, приведены в монографии Ф. Харари и Э. Палмера [2]. В последние десятилетия данный подход был распространен на непомеченные 2-деревья с ориентированными рёбрами [3], 2-деревья с многоугольными ячейками [4], k-деревья [5], ориентированные гиперграфы [6], k-однородные гиперграфы [7].

Исторически первыми приложениями теории Пойа были задачи о перечислении химических соединений [8], которые продолжают изучаться и в настоящее время. Химические связи в молекуле не могут образовывать произвольное 2-дерево, поскольку валентности атомов ограничены. Тем не менее рассматриваемые в работе методы после адаптации под конкретную задачу могут быть применены для перечисления сложных молекул (например, соединений фуллеренов и нанотрубок, гетерофуллеренов, других полициклических соединений и их изотопных модификаций).

В данной работе решаются две задачи о перечислении 2-деревьев с n ориентированными ячейками, т. е. 2-деревьев, в которых на каждом треугольнике (ячейке) независимо введена ориентация одного из двух типов (рис. 1). В сравнении с перечислением непомеченных 2-деревьев [2] без ориентации некоторые формулы упрощаются, некоторые — наоборот, становятся сложнее и требуют дополнительных рассуждений.

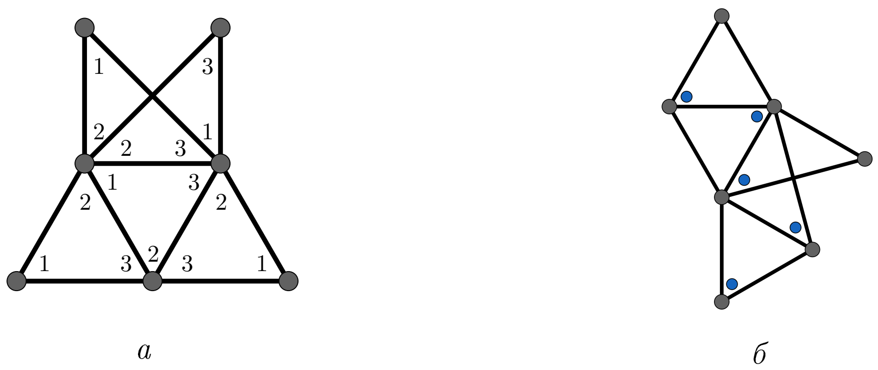

Рис. 1. 2-Дерево с ориентированными ячейками (a) и частично ориентированное 2-дерево ($б$)

Введём необходимые определения.

Определение 1. Треугольник K_3 и любой граф, который можно получить из K_3 при помощи операции добавления вершины, соединённой с концами некоторого ребра, будем называть 2-деревом.

На каждом шаге индуктивного построения добавляется одна вершина, два ребра и один треугольник. Будем называть треугольники ячейками.

Определение 2. Ячейка — это треугольник в 2-дереве.

Можно также рассматривать 2-дерево как 3-однородный гиперграф, в котором каждая ячейка является ребром гиперграфа. Фактически под ориентацией ячеек мы понимаем ориентацию рёбер соответствующего гиперграфа.

Определение 3. Будем говорить, что ячейки 2-дерева ориентированы, если в каждой ячейке вершины пронумерованы числами 1, 2, 3. В ячейках, имеющих общие вершины, нумерация выбирается независимо.

Определение 4. Частично ориентированное 2-дерево — это 2-дерево, в котором в каждой ячейке выделено по одной вершине.

Для краткости будем называть 2-деревья с ориентированными и частично ориентированными ячейками ориентированными и частично ориентированными 2-деревьями. В настоящей работе рассматривается только ориентация ячеек.

Определение 5. Торцевое ребро 2-дерева — это ребро, которое принадлежит только одной ячейке.

Определение 6. Ребро uv (частично) ориентированного 2-дерева G будем называть симметричным, если существует автоморфизм ψ графа G, для которого $\psi(u) = v$, $\psi(v) = u$.

Определение 7. Два подграфа H_1, H_2 графа G называются подобными, если существует такой автоморфизм ψ графа G, что $\psi(H_1) = H_2$. Говоря про неподобные подграфы (в частности, вершины, рёбра, ячейки), имеем в виду, что такого автоморфизма не существует.

Далее будем рассматривать неподобные вершины, рёбра, ячейки. Подобие задаёт отношение эквивалентности. Говоря, что в графе есть k неподобных объектов, будем подразумевать, что можно выделить максимум k попарно неподобных объектов такого вида, т. е. k — это число классов эквивалентности.

1. Теорема Редфилда — Пойа

Для полноты изложения приведём частный случай теоремы Редфилда — Пойа, которого достаточно для наших целей.

Определение 8. Пусть дана группа подстановок A. Цикловой индекс группы A — это многочлен от переменных $s_1, s_2, \ldots, s_n$:

$$Z(A) = Z(A; s_1, \ldots, s_n) = |A|^{-1} \sum_{\alpha \in A} \sum_{k=1}^{n} s_k^{j_k(\alpha)},$$

где $j_k(\alpha)$ означает количество циклов длины k в подстановке α.

Например, для цикловых индексов симметрической группы по определению имеем $Z(S_1) = s_1$, $Z(S_2) = \dfrac{1}{2}(s_1^2 + s_2)$. Далее $Z(S_n)$ можно вычислять с помощью рекуррентной формулы

$$Z(S_n) = n^{-1} \sum_{k=1}^{n} s_k Z(S_{n-k}).$$

Следуя [2], будем использовать такое обозначение: если $f(x)$ — производящая функция, то $Z(A; f(x))$ — результат подстановки $f(x^k)$ вместо s_k в $Z(A)$, $k = 1, 2, \ldots, n$. Для краткости будем писать $Z(A_1 - A_2; f(x))$ вместо $Z(A_1; f(x)) - Z(A_2; f(x))$.

Приведём также следующий классический результат, который применяется при перечислении деревьев, 2-деревьев и т. д., чтобы учитывать автоморфизмы, переставляющие несколько поддеревьев, присоединённых к корневой вершине или корневому ребру:

Лемма 1 [2]. Для произвольной производящей функции $f(\cdot)$ справедливо соотношение
$$\sum_{n=0}^{\infty} Z(S_n; f(x)) = \exp\left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{f(x^k)}{k}\right). \tag{1}$$

Как обычно, полагаем, что элементарная функция от производящей функции вычисляется путём подстановки в ряд Маклорена, а равенство между полученными формальными рядами означает равенство всех коэффициентов при одинаковых степенях [9].

Теперь перейдём к частному случаю теоремы Редфилда — Пойа и сформулируем его для вершинных раскрасок графа. Введём следующие обозначения:

— P — конечное или счётное множество цветов;
— каждый цвет $p \in P$ имеет неотрицательную целую стоимость $w(p)$;
— задана $f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots$ — производящая функция для числа цветов стоимости k, то есть a_k означает количество цветов стоимости k;
— G — некоторый граф на n вершинах;
— $A = \mathrm{Aut}(G) \subseteq S_n$ — группа автоморфизмов G, действующая на множестве вершин;
— стоимость раскраски графа равна сумме стоимостей цветов вершин;
— b_k — число классов эквивалентности раскрасок графа G стоимости k.

Теорема 1 [2, 8]. Производящая функция $B(x)$ для числа раскрасок графа G стоимости k может быть вычислена по формуле
$$B(x) = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \ldots = Z(A; f(x)).$$

Выделим особый случай раскраски n-элементного множества, когда цвета должны быть попарно различны.

Утверждение 1 [2]. Пусть $C(x)$ — производящая функция для числа раскрасок вершин графа K_n стоимости k попарно различными цветами при тех же предположениях, что и в теореме 1. Тогда
$$C(x) = Z(A_n - S_n; f(x)).$$

Эффективным приёмом, который потребуется в дальнейшем, является переход от структур с выделенным корнем к структурам без корня, основанный на некотором линейном соотношении между числом классов эквивалентности (неподобных корневых структур) в графе. Это соотношение называют характеристикой неподобия, а соответствующее утверждение — леммой о неподобии (“dissymmetry lemma”, “dissymmetry theorem”). Предположим, что $H_1, H_2, \ldots, H_m$ — структуры (вершины, рёбра, ячейки), которые могут присутствовать в классе графов $\mathcal{G}$. Обозначим $\#(H_i, G)$ число неподобных структур H_i в графе G. Пусть $\varphi_i(x)$ — производящая функция для графов с выделенной корневой структурой H_i.

Лемма 2 [2]. Если при фиксированных коэффициентах $\alpha_1, \ldots, \alpha_m$ для любого графа $G \in \mathcal{G}$ выполнено
$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i \cdot \#(H_i, G) = 1,$$
то производящая функция $\varphi(x)$ для числа графов на n вершинах из $\mathcal{G}$ удовлетворяет соотношению
$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i \varphi_i(x) = \varphi(x).$$

Далее эта техника применяется к 2-деревьям с ориентированными ячейками.

2. Случай ориентированных ячеек

Докажем соотношения, позволяющие вычислять производящую функцию в случае ориентированных ячеек, который оказывается несколько проще, чем случай частично ориентированных ячеек. При этом формулы, связывающие производящие функции корневых структур, заметно упрощаются в сравнении с неориентированным случаем, приведённым в [2].

Теорема 2. Пусть q — количество неподобных рёбер в ориентированном 2-дереве G; s — количество неподобных ячеек в G. Тогда справедливо равенство (характеристика неподобия для ориентированных 2-деревьев)
$$q - 2s = 1. \tag{2}$$

Доказательство. Проведем индукцию по числу ячеек. В случае одной ориентированной ячейки имеем верное равенство $3 - 2 = 1$.

Пусть дано ориентированное 2-дерево G, имеющее $k > 1$ ячеек. Согласно определению 2-дерева, среди них найдётся «висячая» ячейка uvw, которая имеет с остальными одно общее ребро. По предположению индукции равенство (2) имеет место после удаления uvw. Обозначим через G' граф, полученный после удаления этой ячейки.

Отметим, что при введённой в ячейке ориентации все три ребра uv, vw, uw попарно не подобны. Рассмотрим два случая:

1) Если рассматриваемая ячейка не подобна ячейкам G', то при её добавлении увеличивается на 1 число классов эквивалентности ячеек и на 2 — число классов рёбер, так как одно из рёбер uv, vw, uw принадлежало графу G'.

2) Если uvw подобна какой-либо ячейке G', то её ребра подобны соответствующим рёбрам ячеек из её класса эквивалентности, и при добавлении uvw число классов рёбер не увеличивается.

Таким образом, в обоих случаях равенство (2) сохраняется после добавления ячейки uvw. ■

Обозначим:

— $t_{\triangle,1}(x)$ — производящая функция ориентированных 2-деревьев с заданным числом ячеек;
— $q(x)$ — производящая функция ориентированных 2-деревьев с выделенным корневым ребром;
— $s(x)$ — производящая функция ориентированных 2-деревьев с корневой ячейкой.

Используя лемму 2, из равенства (2) получаем
$$q(x) - 2s(x) = t_{\triangle,1}(x).$$

Определение 9. Ориентированное 2-дерево G с корневым ребром uv будем называть симметричным, если существует автоморфизм G (сохраняющий ориентацию ячеек), который переводит u в v, а v в u. Если такого автоморфизма не существует, будем называть G несимметричным.

Введём следующие обозначения для производящих функций ориентированных 2-деревьев с различными корневыми структурами:

— $N_1(x)$ — если корнем является торцевое ребро uv и граф несимметричен;
— $M(x)$ — если корнем является произвольное ребро (не обязательно торцевое) и граф симметричен;
— $N(x)$ — если корнем является произвольное ребро и граф несимметричен.

Отметим, что 2-дерево с торцевым ребром не может быть симметричным с учётом ориентации. Покажем, что эти функции связаны соотношениями, которые позволяют последовательно вычислять их коэффициенты.

Утверждение 2. Производящая функция несимметричных ориентированных 2-деревьев с корнем в торцевом ребре удовлетворяет соотношению

$$N_1(x) = 3x(1 + M(x) + 2N(x))^2. \tag{3}$$

Доказательство. Построим 2-дерево, начиная с одной ориентированной ячейки (множитель x). В ней можно выделить корень (торцевое ребро) тремя способами (множитель 3).

К двум другим рёбрам можно ничего не присоединять (слагаемое 1), можно присоединить симметричный граф (слагаемое $M(x)$) или несимметричный двумя способами (слагаемое $2N(x)$).

Поскольку исходная ячейка является ориентированной, учитывать перестановки присоединённых графов не требуется, т. е. полученный множитель $(1+M(x)+2N(x))^2$ перечисляет все способы присоединения подграфов к ячейке. ■

Утверждение 3. Для производящей функции симметричных ориентированных 2-деревьев с корневым (не обязательно торцевым) ребром справедливо равенство

$$M(x) = \sum_{n=1}^{\infty} Z(S_n; N_1(x^2)). \tag{4}$$

Доказательство. Заметим, что в ориентированном 2-дереве ребро может быть симметричным только в том случае, если к нему присоединены пары «зеркальных» подграфов, так как при автоморфизме, меняющем местами концы ребра, ориентированная ячейка не может перейти в себя.

Пусть uv — симметричное корневое ребро. Будем присоединять к нему пары одинаковых подграфов, перечисляемых функцией $N_1(x)$. При этом число ячеек удваивается, т. е. пары «зеркальных» копий перечисляются функцией $N_1(x^2)$. Таких пар возьмём n для каждого $n = 1, 2, \ldots$ Так как не имеет значения, в каком порядке их присоединять, то следует учесть действие симметрической группы S_n.

Отметим, что суммирование здесь ведётся с $n = 1$, поскольку K_2 без присоединённых подграфов по определению не является 2-деревом. ■

Утверждение 4. Производящая функция ориентированных 2-деревьев с несимметричным корневым (не обязательно торцевым) ребром может быть найдена из уравнения

$$M(x) + 2N(x) = \sum_{n=1}^{\infty} Z(S_n; 2N_1(x)). \tag{5}$$

Доказательство. Покажем, что правая и левая части равны, так как обе описывают ориентированные 2-деревья с корневым ребром uv и *помеченными независимо от ориентации ячеек вершинами* u и v. Здесь мы считаем различными несимметричные изоморфные графы G_1, G_2, для которых изоморфизм переводит u в v', а v в u', причём uv — корневое ребро в G_1, $u'v'$ — корневое ребро в G_2. В определении $N(x)$ и $N_1(x)$ выше мы считали такие графы одинаковыми.

В самом деле, чтобы получить правую часть уравнения, будем действовать аналогично доказательству формулы (4), но присоединять надо не две «зеркальные» копии подграфа, а один несимметричный подграф одним из двух способов.

Чтобы получить левую часть, выделим из присоединённых несимметричных подграфов «зеркальные» пары (если они есть) и составим из них максимальный подграф с тем же корневым ребром (но симметричным). Такие подграфы перечисляются функцией $M(x)$. Остальные присоединённые подграфы образуют подграф с несимметричным корневым ребром и перечисляются функцией $2N(x)$, поскольку мы полагаем, что вершины u, v помечены. Для каждого графа, полученного присоединением к uv нескольких подграфов, это разложение на симметричную и несимметричную составляющие определяется однозначно. ■

С помощью соотношения (1) преобразуем формулы (4), (5) следующим образом:

$$1 + M(x) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{N_1(x^{2n})}{n}\right); \tag{6}$$

$$1 + M(x) + 2N(x) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2N_1(x^{n})}{n}\right). \tag{7}$$

Теперь при помощи формул (3), (6), (7) найдём коэффициенты рядов $M_1(x)$, $N_1(x)$, $M(x)$, $N(x)$. Младшие коэффициенты вычислим вручную. Далее, за счёт домножения на x в формуле $N_1(x)$, зная свободный коэффициент у $M(x)$ и $N(x)$, можно найти коэффициент при x в $N_1(x)$, затем коэффициент при x в $M(x)$ и $N(x)$, затем коэффициент при x^2 в $N_1(x)$ и т. д. После необходимых вычислений получим

$$\begin{aligned} N_1(x) &= 3x + 36x^2 + 666x^3 + 14268x^4 + 3336231x^5 + \ldots, \\ M(x) &= 3x^2 + 42x^4 + 784x^6 + 17163x^8 + 409386x^{10} \ldots, \\ N(x) &= 3x + 45x^2 + 910x^3 + 20376x^4 + 493803x^5 + \ldots \end{aligned}$$

Найдём производящую функцию для ориентированных 2-деревьев с корневым ребром:

$$q(x) = M(x) + N(x) = 3x + 48x^2 + 910x^3 + 20418x^4 + 493803x^5 + \ldots$$

Утверждение 5. Производящая функция для ориентированных 2-деревьев с корневой ячейкой удовлетворяет соотношению

$$s(x) = x(1 + M(x) + 2N(x))^3.$$

Доказательство. Возьмём ориентированную корневую ячейку (множитель x) и к трём её рёбрам присоединим подграфы, перечисляемые множителем $1 + M(x) + 2N(x)$. Поскольку корневая ячейка ориентирована, учитывать перестановки подграфов не требуется. ■

Подставляя найденные выше ряды, получаем

$$s(x) = x + 18x^2 + 387x^3 + 9024x^4 + 223893x^5 + \ldots$$

Теперь с помощью соотношения (2) можно найти производящую функцию для ориентированных 2-деревьев:

$$t_{\triangle,1}(x) = q(x) - 2s(x) = x + 12x^2 + 136x^3 + 2370x^4 + 46017x^5 + \dots$$

Вычисление данных производящих функций реализовано в python. Код размещён на Github [10].

3. Случай частично ориентированных ячеек

Вывод соотношений для частично ориентированных 2-деревьев во многом повторяет предыдущий случай, поэтому часть пояснений опущена.

Начнем с характеристики неподобия.

Теорема 3. Если для одного частично ориентированного 2-дерева q — количество неподобных ребер, s_0 — количество неподобных ячеек, у которых все три ребра неподобны, s_1 — количество неподобных ячеек, у которых два ребра подобны друг другу, то

$$q - 2s_0 - s_1 = 1. \tag{8}$$

Доказательство. Проведём индукцию по числу ячеек k, начиная с одной частично ориентированной ячейки. При $k = 1$ имеем $s_0 = 0$, $s_1 = 1$, и равенство (8) верно.

В 2-дереве G с $k+1$ ячейкой найдётся «висячая» ячейка uvw, присоединённая по ребру vw. Пусть для графа $G' = G \setminus u$, в котором эта ячейка удалена, формула (8) выполнена. Докажем, что она выполнена и для G.

Если ячейка uvw подобна какой-либо ячейке G', то все её рёбра принадлежат классам эквивалентности из G', а значит, при добавлении этой ячейки числа q, s_0, s_1 не изменяются.

Если новая ячейка не подобна ячейкам G', то возникает ещё два случая:

1) Частичная ориентация uvw выбрана таким образом, что отмечена одна из вершин v, w. Тогда рёбра uv, vw, uw неподобны друг другу, а значит, q увеличивается на 2, s_0 на 1, s_1 не изменяется.

2) Отмечена вершина u, рёбра uv, uw подобны. Тогда q увеличивается на 1, s_0 не изменяется, s_1 увеличивается на 1.

В обоих случаях формула (8) справедлива для G. ■

Перечислим обозначения для производящих функций корневых структур на частично ориентированных 2-деревьях:

— $s_0(x)$ — корнем является ячейка с попарно неподобными рёбрами;
— $s_1(x)$ — корнем является ячейка с двумя подобными рёбрами;
— $q(x)$ — корнем является произвольное ребро;
— $N_1(x)$ — корнем является торцевое ребро, граф несимметричен;
— $M_1(x)$ — корнем является торцевое ребро, граф симметричен;
— $N(x)$ — корнем является произвольное ребро, граф несимметричен;
— $M(x)$ — корнем является произвольное ребро, граф симметричен.

Пусть $t_{\triangle,2}(x)$ — производящая функция частично ориентированных 2-деревьев. Согласно лемме 2, из (8) получаем соотношение для производящих функций:

$$q(x) - 2s_0(x) - s_1(x) = t_{\triangle,2}(x). \tag{9}$$

Найдём соотношения, которые связывают производящие функции для корневых структур.

Утверждение 6. Для случая торцевого ребра и симметричного графа имеем

$$M_1(x) = x(1 + M(x^2) + 2N(x^2)).$$

Доказательство. Построим граф, начиная с одной ячейки с отмеченной вершиной, содержащей корневое ребро (множитель x).

Корнем обязано быть ребро напротив отмеченной вершины, так как граф симметричен. К другим двум рёбрам исходной ячейки можно ничего не присоединять (слагаемое 1), присоединить два одинаковых симметричных графа (слагаемое $M(x^2)$) или присоединить два одинаковых несимметричных графа одним из двух способов (слагаемое $2N(x^2)$). ■

Утверждение 7. Для случая торцевого ребра и несимметричного графа имеем

$$N_1(x) = 3xZ\left(A_2 - S_2, 1 + M(x) + 2N(x)\right) + x(1 + M(x^2) + 2N(x^2)).$$

Доказательство. Возьмём ячейку с выделенным торцевым ребром uv без какой-либо ориентации (множитель x). Отдельно разберём два случая, соответствующие первому и второму слагаемому. В первом случае несимметричность обеспечивают присоединённые графы, во втором — ориентация исходной ячейки:

1) К другим двум рёбрам присоединим различные подграфы, перечисляемые функцией $1 + M(x) + 2N(x)$. Подстановка в цикловой индекс $Z(A_2 - S_2) = (s_1^2 - s_2)/2$ позволяет перечислить только те случаи, когда присоединённые графы различны. Затем мы тремя способами можем выделить вершину в исходной ячейке (множитель 3).

2) Множитель $1 + M(x^2) + 2N(x^2)$ означает, что к ячейке присоединены два одинаковых подграфа. В этом случае ориентация ячейки, нарушающая симметрию, единственна с точностью до автоморфизма. ■

Утверждение 8. В случаях произвольного (не обязательного торцевого) симметричного или несимметричного корневого ребра справедливы соотношения

$$M(x) = \sum_{n=1}^{\infty} Z(S_n; M_1(x) + N_1(x^2)); \tag{10}$$

$$M(x) + 2N(x) = \sum_{n=1}^{\infty} Z(S_n; M_1(x) + 2N_1(x)). \tag{11}$$

Доказательство. Ряды для $M(x)$ и $M(x) + 2N(x)$ получены аналогично формулам (4) и (5). Отличие только в том, что в случае частично ориентированных 2-деревьев существуют симметричные подграфы с корнем в торцевом ребре, поэтому в функции, которая подставляется в цикловой индекс, есть слагаемое $M_1(x)$. ■

Преобразуем формулы (10) и (11) с помощью соотношения (1):

$$1 + M(x) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{M_1(x^n) + N_1(x^{2n})}{n}\right);$$

$$1 + M(x) + 2N(x) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{M_1(x^n) + 2N_1(x^n)}{n}\right).$$

Так как ряды для $M_1(x)$ и $N_1(x)$ содержат домножение на x, а ряды $M(x)$ и $M(x)+2N(x)$ — нет, то мы можем последовательно найти все их коэффициенты. Затем вычислим ряд $q(x) = M(x) + N(x)$:

$$N_1(x) = x + 9x^2 + 84x^3 + 921x^4 + 10914x^5 + \ldots,$$

$$M_1(x) = x + 3x^3 + 24x^5 + 235x^7 + 2649x^9 \ldots,$$
$$N(x) = x + 11x^2 + 115x^3 + 1317x^4 + 16077x^5 + \ldots,$$
$$M(x) = x + 2x^2 + 5x^3 + 15x^4 + 42x^5 + \ldots,$$
$$q(x) = 2x + 13x^2 + 120x^3 + 1332x^4 + 16119x^5 + \ldots$$

Перейдём к производящим функциям для графов с корневыми ячейками.

Утверждение 9. В случае корневой ячейки с двумя подобными рёбрами производящая функция имеет вид $s_1(x) = M_1(x)(1 + M(x))$.

Доказательство. Возьмём графы, перечисляемые $M_1(x)$, и объявим, что ячейка, которая раньше содержала корневое ребро uv, теперь является корневой. К ребру uv можно ничего не присоединять (слагаемое 1) или присоединить симметричный граф (слагаемое $M(x)$). ■

Утверждение 10. В случае корневой ячейки с тремя неподобными ребрами имеет место равенство

$$s_0(x) = xZ(A_2 - S_2; 1 + M(x) + 2N(x))(1 + M(x) + 2N(x)) + xN(x)(1 + M(x^2) + 2N(x^2)).$$

Доказательство. Пусть дана корневая ячейка uvw с выделенной вершиной u (множитель x). Неподобие рёбер uv, uw может быть обусловлено либо тем, что к ним присоединены различные подграфы, либо тем, что к ребру vw присоединён несимметричный подграф. Убедимся, что в этих двух случаях возникнут именно такие слагаемые, как в приведённой формуле:

1) К рёбрам uv, uw присоединим различные графы, перечисляемые $1 + M(x) + 2N(x)$. Подстановка в цикловой индекс $Z(A_2 - S_2)$ обеспечивает, что присоединяемые графы различны. К ребру vw присоединим произвольный граф с корневым ребром (возможно, пустой). Соответствующий множитель равен $1 + M(x) + 2N(x)$.

2) К ребру vw присоединён несимметричный подграф (множитель $N(x)$), к рёбрам uv, uw присоединены одинаковые подграфы (множитель $1 + M(x^2) + 2N(x^2)$). ■

Вычислим s_0 и s_1:

$$s_0(x) = 4x^2 + 47x^3 + 578x^4 + 7254x^5 + \ldots,$$
$$s_1(x) = x + x^2 + 5x^3 + 8x^4 + 45x^5 + \ldots$$

Подставив их в формулу (9), найдём производящую функцию для частично ориентированных 2-деревьев:

$$t_{\triangle,2}(x) = q(x) - 2s_0(x) - s_1(x) = x + 4x^2 + 21x^3 + 168x^4 + 1566x^5 + \ldots$$

Код, вычисляющий данные коэффициенты, также размещён на Github [10].

Заключение

Приведённые формулы и программная реализация могут быть адаптированы к другим задачам о k-деревьях и гиперграфах, но при этом могут потребоваться более изощрённые комбинаторные рассуждения.

Укажем классы графов, для которых на данный момент не найдены методы перечисления с точностью до изоморфизма, основанные на теории Пойа: графы, свободные от заданного подграфа, в частности графы без треугольников; (p, q)-разреженные графы на n вершинах (т. е. графы, в которых индуцированный подграф на m вершинах содержит не более $pm - q$ рёбер); частично ориентированные k-однородные гиперграфы.

Если некоторая задача о перечислении известного класса графов (например, графов без треугольников) в действительности не может быть решена при помощи метода итеративного вычисления производящих функций, то доказательство неразрешимости, вероятно, также представляет значительный интерес, но этот вопрос находится далеко за рамками настоящей работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. *McKay B. D. and Piperno A.* Practical graph isomorphism. II // J. Symbolic Comput. 2014. V. 60. P. 94–112.
2. *Харари Ф., Палмер Э.* Перечисление графов. М.: Мир. 1977. 328 с.
3. *Fowler T., Gessel I. M., Labelle G., and Leroux P.* The specification of 2-trees // Adv. Appl. Math. 2002. V. 28. No. 2. P. 145–168.
4. *Labelle G., Lamathe C., and Leroux P.* Labelled and unlabelled enumeration of k-gonal 2-trees // J. Combinat. Theory. Ser. A. 2004. V. 106. No. 2. P. 193–219.
5. *Gainer-Dewar A. and Gessel I. M.* Counting unlabeled k-trees // J. Combinat. Theory. Ser. A. 2014. V. 126. P. 177–193.
6. *Qian J.* Enumeration of unlabeled directed hypergraphs // Electronic J. Combinatorics. 2013. V. 20. Iss. 1. Article no. P46.
7. *Qian J.* Enumeration of unlabeled uniform hypergraphs // Discrete Math. 2014. V. 326. P. 66–74.
8. *Pólya G. and Read R. C. H.* Combinatorial Enumeration of Groups, Graphs, and Chemical Compounds. Berlin; Heidelberg: Springer, 1987.
9. *Ландо С. К.* Лекции о производящих функциях. М.: МЦМНО, 2007. 144 с.
10. `https://github.com/VVerdenko/oriented-2-trees` — Вычисление производящих функций для 3-ориентированных и частично 3-ориентированных 2-деревьев. 2025.

REFERENCES

1. *McKay B. D. and Piperno A.* Practical graph isomorphism, II. J. Symbolic Comput., 2014, vol. 60, pp. 94–112.
2. *Harary F. and Palmer E. M.* Graphical Enumeration. N.Y.: Academic Press, 1973. 272 p.
3. *Fowler T., Gessel I. M., Labelle G., and Leroux P.* The specification of 2-trees. Adv. Appl. Math., 2002, vol. 28, no. 2, pp. 145–168.
4. *Labelle G., Lamathe C., and Leroux P.* Labelled and unlabelled enumeration of k-gonal 2-trees. J. Combinat. Theory, Ser. A, 2004, vol. 106, no. 2, pp. 193–219.
5. *Gainer-Dewar A. and Gessel I. M.* Counting unlabeled k-trees. J. Combinat. Theory, Ser. A, 2014, vol. 126, pp. 177–193.
6. *Qian J.* Enumeration of unlabeled directed hypergraphs. Electronic J. Combinatorics, 2013, vol. 20, iss. 1, article no. P46.
7. *Qian J.* Enumeration of unlabeled uniform hypergraphs. Discrete Math., 2014, vol. 326, pp. 66–74.
8. *Pólya G. and Read R. C. H.* Combinatorial Enumeration of Groups, Graphs, and Chemical Compounds. Berlin; Heidelberg, Springer, 1987.
9. *Lando S. K.* Lectures on Generating Functions. Providence, AMS, 2003.
10. `https://github.com/VVerdenko/oriented-2-trees` — Computation of generating functions for 3-oriented and partially 3-oriented 2-trees. 2025.