ИТОГИ НАУКИ И ТЕХНИКИ.
Современная математика и ее приложения.
Тематические обзоры.
Том 210 (2022). С. 49–54
DOI: 10.36535/0233-6723-2022-210-49-54

УДК 519.175.3

ПЕРЕЧИСЛЕНИЕ ПОМЕЧЕННЫХ КОЛЮЧИХ ГРАФОВ

© 2022 г. **В. А. ВОБЛЫЙ, Н. А. АРХИПОВА**

Аннотация. Колючим графом называется связный граф, который становится гладким после однократного удаления висячих вершин вместе с инцидентными им ребрами. Получена явная формула для числа помеченных колючих графов с заданными числами вершин и ребер, а также найдена соответствующая асимптотика для числа таких графов с большим числом вершин. Доказывается, что при равномерном распределении вероятностей почти все помеченные связные разреженные графы не являются колючими графами.

Ключевые слова: перечисление, помеченный граф, колючий граф, асимптотика, вероятность.

ENUMERATION OF LABELED THORN GRAPHS

© 2022 **V. A. VOBLYI, N. A. ARKHIPOVA**

Abstract. A thorn graph is a connected graph that becomes smooth after a single removal of end points together with their incident edges. An explicit formula is obtained for the number of labeled thorn graphs with given numbers of vertices and edges, and the corresponding asymptotics is found for the number of such graphs with a large number of vertices. It is proved that with a uniform probability distribution, almost all labeled connected sparse graphs are not thorn graphs.

Keywords and phrases: enumeration, labeled graph, thorn graph, asymptotics, probability.

AMS Subject Classification: 05C30

1. Введение. Рассматриваются неориентированные простые помеченные графы.

Определение 1 (см. [17]). *Гладкий* граф – это связный граф без висячих вершин.

Определение 2 (см. [15]). *Ядром* связного графа называется гладкий граф, полученный из исходного графа многократным удалением висячих вершин. Связный граф можно представить в виде ядра, к вершинам которого прикреплены деревья.

Определение 3. *Внутренняя* вершина графа — это вершина ядра графа. Внутренняя вершина графа принадлежит циклу графа или простой цепи между двумя циклами.

Определение 4 (см. [7]). *Колючим* графом называется связный граф, который становится гладким после однократного удаления висячих вершин вместе с инцидентными им ребрами.

Колючий граф можно также определить как граф, полученный прикреплением пучков висячих вершин к вершинам основного графа (см. [9]). Однако основной граф не всегда должен быть гладким. Рассматриваются не только колючие циклы, но и колючие деревья (см. [9]). Гусеница — это дерево, которое после однократного удаления висячих вершин становится простой цепью. Такие деревья перечислены Ф. Харари и А. Швенком в [13]. Деревья-гусеницы применяются в химии и физике (см. [12]). Отметим, что в [5] колючие графы называются графами-гусеницами.

В математической химии получены формулы для целого ряда топологических индексов колючих молекулярных графов (см. [9, 11, 14]).

При равномерном распределении вероятностей на множестве помеченных связных графов с n вершинами и $n+q$ ребрами в [5] была найдена вероятность появления колючего графа (графа-гусеницы) среди случайных связных разреженных графов. В [7] получена явная формула для числа помеченных колючих кактусов с n вершинами, из которых p невисячих.

В статье доказана явная формула для числа помеченных колючих графов n вершинами, из которых p внутренних, и $n+q$ ребрами. Кроме того, найдена асимптотика для числа колючих графов n вершинами и $n+q$ ребрами при фиксированном числе q и $n \to \infty$.

2. Перечисление графов. Рассматриваются неориентированные простые связные графы.

Обозначим через $V(p, p+q)$ число помеченных гладких графов с p вершинами и $p+q$ ребрами.

Теорема 1. *Пусть $T_p(n, n+q)$ — число помеченных колючих графов с n вершинами, из которых p внутренних, и $n+q$ ребрами. Тогда при $n \geqslant p+1$ и $q \geqslant 0$ верна формула*

$$T_p(n, n+q) = \binom{n}{p} p^{n-p} V(p, p+q). \tag{1}$$

Доказательство. Пусть $C_p(n, n+q, k)$ — число помеченных связных графов с n вершинами, $n+q$ ребрами, причем k вершин висячих, а p внутренних. В [3] получена формула

$$C_p(n, n+q, k) = \frac{n!}{k!(p-1)!} S_p(n-p-1, n-p-k) V(p, p+q),$$

где $S_p(n, k)$ — нецентральные числа Стирлинга 2-го рода (см. [8]). Так как у колючих графов все невисячие вершины являются внутренними, то имеем $k = n-p$ и, следовательно, получим

$$T_p(n, n+q) = \frac{n!}{k!(p-1)!} S_p(n-p-1, 0) V(p, p+q).$$

Учитывая соотношение $S_p(n, 0) = p^n$ [8], получим утверждение теоремы. □

После суммирования по числу невисячих вершин из теоремы 1 вытекает следующее утверждение.

Следствие 1. *Число $T(n, n+q)$ помеченных колючих графов с n вершинами и $n+q$ ребрами равно*

$$T(n, n+q) = \sum_{p=3}^{n-1} T_p(n, n+q) = \sum_{p=3}^{n-1} \binom{n}{p} p^{n-p} V(p, p+q). \tag{2}$$

Следствие 2. *Пусть $TU_p(n)$, $TB_p(n)$ и $TT_p(n)$ — числа помеченных унициклических, бициклических и трициклических колючих графов с n вершинами, из которых p невисячих. Тогда при $p \geqslant 3$ и $n \geqslant p+1$ верны формулы*

$$\begin{gathered} TU_p(n) = \frac{n!}{2(n-p)!} p^{n-p-1}, \quad TB_p(n) = \frac{(p-3)(5p-8)}{48} \frac{n!}{(n-p)!} p^{n-p}, \\ TT_p(n) = \frac{(p-3)(p^4 - 3p^3 - 6p^2 - 42p + 86)}{1152} \frac{n!}{(n-p)!} p^{n-p}. \end{gathered} \tag{3}$$

Доказательство. Подставляя в формулу (1) выражения для чисел помеченных гладких унициклических, бициклических и трициклических графов с p вершинами из работы Э. Райта [17]

$$V(p, p) = \frac{1}{2}(p-1)!, \quad V(p, p+1) = \frac{(p-3)(5p-8)}{48} p!,$$
$$V(p, p+2) = \frac{(p-3)(p^4 - 3p^3 - 6p^2 - 42p + 86)}{1152},$$

получим выражения для $TU_p(n)$, $TB_p(n)$ и $TT_p(n)$.

Отметим, что в [17] для $V(p, p+2)$ приведено выражение

$$V(p, p+2) = \frac{p!}{48} \left(15\binom{n+1}{5} - 5\binom{n}{4} - 2\binom{n-1}{3} - 5\binom{n-2}{2} - \binom{n-3}{1} \right).$$

Представляя биномиальные коэффициенты в виде многочленов от p, после приведения подобных членов, получим сокращенную формулу для $V(p,p+2)$. $\square$

Следствие 3. *Пусть $TU(n)$, $TB(n)$ и $TT(n)$ — числа помеченных унициклических, бициклических и трициклических колючих графов с n вершинами. Тогда при $p \geqslant 3$ и $n \geqslant p+1$ верны формулы*

$$TU(n) = \frac{n!}{2}\sum_{p=3}^{n-1}\frac{p^{n-p-1}}{(n-p)!}, \quad TB(n) = \frac{n!}{48}\sum_{p=4}^{n-1}(p-3)(5p-8)\frac{p^{n-p}}{(n-p)!},$$

$$TT_p(n) = \frac{n!}{1152}\sum_{p=5}^{n-1}(p-3)(p^4-3p^3-6p^2-42p+86)\frac{p^{n-p}}{(n-p)!}.$$

Доказательство. Формулы для $TU(n)$, $TB(n)$ и $TT(n)$ получаются из формул (3) суммированием по p от 3 до $n-1$, от 4 до $n-1$ и от 5 до $n-1$ соответственно. $\square$

3. Асимптотика и вероятность. Обозначим через d_q константы Райта (коэффициенты Степанова—Райта), определяемые с помощью рекуррентного соотношения (см. [6, 18])

$$d_1 = d_2 = \frac{5}{36}, \quad d_{q+1} = d_q + \sum_{s=1}^{q-1}\frac{d_s d_{q-s}}{(q+1)\binom{q}{s}} \text{ при } q \geqslant 2.$$

В [4] доказано, что $d_q \to d = 1/(2\pi)$ при $q \to \infty$.

Теорема 2. *Для числа $T(n,n+q)$ помеченных помеченных колючих графов с n вершинами и $n+q$ ребрами при фиксированном $q \geqslant 0$ и $n \to \infty$ верна асимптотическая формула*

$$T(n,n+q) \sim \frac{3\,(3/2)^q\,q!d_q}{(b+1)^{3q}(3q)!}n^{3q-1}b^{-n}n!, \tag{4}$$

где $b \approx 0{,}5671$ — корень уравнения $ze^z = 1$, $d_0 = 1/6$.

Доказательство. Введем производящие функции

$$W_q(z) = \sum_{n=3}^{\infty}T(n,n+q)\frac{z^n}{n!}, \quad V_q(z) = \sum_{n=3}^{\infty}V(n,n+q)\frac{z^n}{n!}. \tag{5}$$

Подставим выражение для $T(n,n+q)$ из формулы (2) в производящую функцию и изменим порядок суммирования:

$$W_q(z) = \sum_{n=3}^{\infty}\sum_{p=3}^{n-1}T(n,n+q)\frac{z^n}{n!} = \sum_{p=3}^{\infty}\sum_{n=p+1}^{\infty}\binom{n}{p}p^{n-p}V(p,p+q)\frac{z^n}{n!}.$$

Сделаем замену $k = n-p$ индекса суммирования во внутренней сумме:

$$W_q(z) = \sum_{p=3}^{\infty}\frac{V(p,p+q)}{p!}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{p^k z^{k+p}}{k!} = \sum_{p=3}^{\infty}\frac{V(p,p+q)}{p!}z^p(e^{pz}-1).$$

Э. Райт (см. [16]) при $q \geqslant 1$ получил соотношение

$$V_q(z) = \sum_{n=3}^{\infty}V(n,n+q)\frac{z^n}{n!} = \sum_{s=-3q}^{2}c_{q,s}(1-z)^s, \quad \text{где} \quad b_q = c_{q,-3q} = \left(\frac{3}{2}\right)^q(q-1)!d_q.$$

Таким образом, при $q \geqslant 1$ имеем

$$W_q(z) = V_q(ze^z) - V_q(z) = \sum_{s=-3q}^{2}c_{q,s}\big[(1-ze^z)^s - (1-z)^s\big]. \tag{6}$$

Введем функцию $\phi(z) = 1 - ze^z$; пусть b — корень уравнения $\phi(z) = 0$. С помощью Maple найдем $b \approx 0{,}5671$, $b = W(1)$, где $W(z)$ — главное действительное значение многозначной функции Ламберта (см. [10]). Так как $\phi'(z) = -(z+1)e^z$ и $\phi'(b) = -(b+1)/b \neq 0$, то число b является простым нулем функции $\phi(z)$.

Разлагая аналитическую функцию $\phi(z)$ в окрестности точки $z = b$ в ряд Тейлора, найдем

$$\phi(z) = \phi(b) + \phi'(b)(z-b) + \frac{1}{2}\phi''(b)(z-b)^2 + \cdots = (b+1)\left(1 - \frac{z}{b}\right)\psi(z), \tag{7}$$

где $\psi(z)$ — аналитическая функция и $\psi(b) = 1$.

После подстановки выражения для $\phi(z)$ в (4) получим

$$W_q(z) = b_q(b+1)^{-3q}\left(1 - \frac{z}{b}\right)^{-3q}(\psi(z))^{-3q} + h(z);$$

функция $h(z)$ имеет в точке $z = b$ полюс порядка $3q - 1$, а в точке $z = 1$ — полюс порядка $3q$. Так как $b < 1$, то точка $z = b$ будет ближайшей особой точкой функции $W_q(z)$ к началу координат. Следовательно, степенной ряд для $W_q(z)$ имеет радиус сходимости b, причем на границе круга сходимости существует единственная особая точка, являющаяся полюсом порядка $3q$.

В силу теоремы Дарбу (см. [2]), если функция $A(z)$ аналитична в круге $|z| < b$ и имеет на границе круга сходимости единственную алгебраическую особенность $z = b$, причем верно разложение

$$A(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n = \left(1 - \frac{z}{b}\right)^{-\omega} g(z) + h(z),$$

где вес особенности в точке $z = b$ меньше, чем ω, то при $n \to \infty$ верна асимптотика

$$a_n \sim \frac{g(b)}{\Gamma(\omega)} n^{\omega-1} b^{-n}.$$

В нашем случае имеем

$$\omega = 3q, \quad g(b) = b_q(b+1)^{-3q}\psi^{-3q}(b) = \left(\frac{3}{2}\right)^q (q-1)!\, d_q(b+1)^{-3q}.$$

Следовательно, получим при $q \geqslant 1$ и $n \to \infty$

$$T(n, n+q) \sim \frac{(3/2)^q(q-1)! d_q}{(b+1)^{3q}\, b^n\, \Gamma(3q)} n^{3q-1} n!.$$

После умножения числителя и знаменателя дроби на $3q$, учитывая тождество $q(q-1)! = q!$ для факториала, тождество $z\Gamma(z) = \Gamma(z+1)$ для гамма-функции и выражая $\Gamma(z)$ через факториал, найдем формулу (4) при $q \geqslant 1$.

Рассмотрим теперь случай $q = 0$:

$$W_0(z) = \sum_{p=3}^{\infty} \frac{1}{2p} z^p(e^{pz} - 1) = -\frac{1}{2}\ln(1 - ze^z) + \frac{1}{2}\ln(1 - z) - \frac{z^2e^{2z}}{4} - \frac{ze^z}{2} - \frac{ze^z}{2} + \frac{z^2}{4} + \frac{z}{2}.$$

Дифференцируя по z, будем иметь

$$W_0'(z) = \frac{(1+z)e^z}{2(1 - ze^z)} - \frac{1}{2(1-z)} - \frac{z}{2}(1+z)e^{2z} - \frac{1}{2}(1+z)e^z + \frac{1}{2}(1+z).$$

Подставляя сюда из (5) выражение для $1 - ze^z$, получим

$$W_0'(z) = \sum_{n=2}^{\infty} TU(n+1)\frac{z^n}{n!} = \frac{(1+z)e^z}{2(1+b)\psi(z)}\left(1 - \frac{z}{b}\right)^{-1} + h_1(z),$$

где функция $h_1(z)$ аналитична в круге $|z| < b$. Из этого разложения видно, что функция $W_0'(z)$ имеет на границе круга сходимости $|z| < b$ единственную алгебраическую особенность — полюс первого порядка $z = b$. Опять применяя теорему Дарбу, найдем

$$TU(n+1) \sim \frac{1}{2b} b^{-n} n!.$$

После замены n на $n-1$ получим, что при $n \to \infty$

$$TU(n) \sim \frac{1}{2n} b^{-n} n!,$$

что совпадает с формулой (4) при $q=0$. □

Зададим на множестве помеченных связных графов с n вершинами и $n+q$ ребрами равномерное распределение вероятностей.

Следствие 4. *Пусть $P_q(n)$ — вероятность того, что помеченный связный граф с n вершинами и $n+q$ ребрами является колючим графом. Тогда при фиксированном $q \geqslant 0$ и $n \to \infty$ верна асимптотика*

$$P_q(n) \sim \frac{\sqrt{\pi}(b+1)^{-3q}}{2^{3q/2-1}\Gamma\left(\frac{3q+1}{2}\right)} n^{3q/2}(be)^{-n}. \tag{8}$$

Доказательство. Обозначим через $C(n, n+q)$ число помеченных связных графов с n вершинами и $n+q$ ребрами. Э. Райт нашел следующую асимптотику при $n \to \infty$ и $0 \leqslant q = o(n^{1/3})$ (см. [18]):

$$C(n, n+q) \sim f_q n^{n+(3q-1)/2}, \quad f_0 = \sqrt{\frac{\pi}{8}}, \quad f_q = \frac{\sqrt{\pi} 3^q (q-1)! d_q}{2^{(5q-1)/2}\Gamma\left(\frac{3}{2}q\right)} \text{ при } q \geqslant 1,$$

где d_q — константы Райта (коэффициенты Степанова—Райта).

С помощью асимптотики (2) и формулы Стирлинга для факториала имеем при $q \geqslant 1$

$$P_q(n) = \frac{T(n, n+q)}{C(n, n+q)} \sim \frac{2^{3q/2+1}\Gamma\left(\frac{3}{2}q+1\right) n^{3q/2}}{\Gamma(3q+1)(b+1)^{3q}(be)^n}.$$

Применяя формулу удвоения для гамма-функции (см. [1, с. 19])

$$\Gamma(2z) = \pi^{-1/2} 2^{2z-1}\Gamma(z)\Gamma\left(z+\frac{1}{2}\right) \text{ при } z = \frac{3q+1}{2},$$

получим требуемое утверждение при $q \geqslant 1$.

Для $q=0$ с помощью формулы Стирлинга для факториала найдем

$$P_0(n) = \frac{T(n,n)}{C(n,n)} \sim \frac{\frac{1}{2n} n! b^{-n}}{f_0 n^{n-1/2}} = \frac{\frac{1}{2n}\sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n b^{-n}}{\sqrt{\frac{\pi}{8}} n^{n-1/2}} = \frac{2}{(be)^n},$$

что совпадает с формулой (8) при $q=0$. □

Так как $be > 1$, то $P_q(n) = o(1)$ при $n \to \infty$. Таким образом, при фиксированном $q \geqslant 0$ почти все помеченные связные графы с n вершинами и $n+q$ ребрами не являются колючими графами.

Известно, что в множестве помеченных связных графов с n вершинами почти все графы являются гладкими (см. [4]). Однако в множестве помеченных связных разреженных графов с n вершинами и $n+q$ ребрами другая картина. Э. Райт (см. [16]) нашел следующую асимптотику для числа $V(n, n+q)$ помеченных гладких графов с p вершинами и $p+q$ ребрами при $1 \leqslant q = O(n^{1/2})$ и $n \to \infty$:

$$V(n, n+q) \sim d_q(3/2)^q \frac{(q-1)!(n+3q-1)!}{(3q-1)!},$$

где d_q — константы Райта (коэффициенты Степанова—Райта).

Следовательно, доля гладких графов среди связных графов с n вершинами и $n+q$ ребрами при фиксированном $q \geqslant 1$ и $n \to \infty$ равна

$$\frac{V(n, n+q)}{C(n, n+q)} \sim \frac{d_q(3/2)^q(q-1)! n^{3q-1} n!}{f_q(3q-1)! n^{n+(3q-1)/2}} \sim \frac{d_q(3/2)^q(q-1)!}{f_q(3q-1)!} n^{(3q-1)/2} e^{-n} = o(1)\ ,$$

т.е. почти все связные графы с n вершинами и $n+q$ ребрами являются негладкими графами.

Сравним еще рост класса колючих графов с ростом класса гладких графов при фиксированном $q \geqslant 1$ и $n \to \infty$:

$$\frac{T(n, n+q)}{V(n, n+q)} \sim \frac{3d_q(3/2)^q q!(3q-1)! n^{3q-1} b^{-n} n!}{d_q(3/2)^q(q-1)! n^{(3q-1)/2} n!} = (3q)! n^{(3q-1)/2}\left(\frac{1}{b}\right)^n.$$

Так как $1/b > 1$, то имеем экспоненциальный рост класса колючих графов по сравнению с классом гладких графов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. Т. 1. — М.: Наука, 1965.
2. *Бендер Э. А.* Асимптотические методы в теории перечислений// в кн.: Перечислительные методы комбинаторного анализа. — М.: Мир, 1979. — С. 266–310.
3. *Воблый В. А.* Асимптотическое перечисление помеченных связных разреженных графов с заданным числом висячих вершин// Дискр. анал. — 1985. — № 42. — С. 3–14.
4. *Воблый В. А.* Асимптотическое перечисление графов некоторых типов/ Дисс. на соиск. уч. степ. канд. физ.-мат. наук — ВЦ АН СССР, 1985.
5. *Воблый В. А.* О вероятности появления графа-гусеницы среди случайных разреженных графов// Тез. докл. II Всесоюз. конф. «Вероятностные методы в дискретной математике» (Петрозаводск). — Петрозаводск, 1988. — С. 25–26.
6. *Воблый В. А.* О коэффициентах Райта и Степанова—Райта// Мат. заметки. — 1987. — *42*, № 6. — С. 854–862.
7. *Воблый В. А., Мелешко А. К.* Перечисление помеченных колючих кактусов// Мат. XXIX Междунар. конф. КРОМШ-2018 (Симферополь, 17–29 сентября 2018 г.). — Симферополь: Полипринт, 2018. — С. 137–138.
8. *Медведев Ю. И., Ивченко Г. И.* Асимптотическое представление конечных разностей от степенной функции в произвольной точке// Теор. вер. примен. — 1965. — *10*, № 1. — С. 151–156.
9. *Bonchev D., Klein D. J.* On the Wiener number of thorn trees, stars, rings, and rods// Croat. Chem. Acta. — 2002. — *75*, № 2. — P. 613–620.
10. *Corless R. M., Gonnet G. H., Hare D. E., Jeffrey D. J., Knuth D. E.* On the Lambert W-function// Adv. Comput. Math. — 1996. — *5*, № 1. — P. 329–359.
11. *De N.* Application of corona product graphs in computing topological indexes of some special chemical graphs// in: Handbook of Research on Applied Cybernetics and System Science. — IGI Global, 2017. — P. 82–101.
12. *El-Basil S.* Applications of caterpillar trees in chemistry and physics// J. Math. Chem. — 1987. — *1*. — P. 153–174.
13. *Harary F., Schwenk A. J.* The number of caterpillars// Discr. Math. — 1973. — *6*. — P. 359–365.
14. *Gutman I.* Distance of thorny graphs// Publ. Inst. Math. Nouv. Ser. — 1998. — *63 (77)*. — P. 31–36.
15. *Pittel B., Wormald N. C.* Counting connected graphs inside-out// J. Combin. Theory. Ser. B. — 2005. — *93*, № 2. — P. 127–172.
16. *Wright E. M.* Enumeration of smooth labelled graphs// Proc. Roy. Soc. Edinburgh. — 1982. — *A91*, № 3/4. — P. 205–212.
17. *Wright E. M.* The number of connected sparsely edged graphs. II// J. Graph Theory. — 1978. — *2*, № 4. — P. 299–305.
18. *Wright E. M.* The number of connected sparsely edged graphs. III// J. Graph Theory. — 1980. — *4*, № 4. — P. 393–407.

Воблый Виталий Антониевич
Всероссийский институт научной и технической информации
Российской академии наук, Москва
E-mail: `vitvobl@yandex.ru`

Архипова Наталия Александровна
Всероссийский институт научной и технической информации
Российской академии наук, Москва
E-mail: `nataar1956@mail.ru`