Johdatus verkkoteoriaan

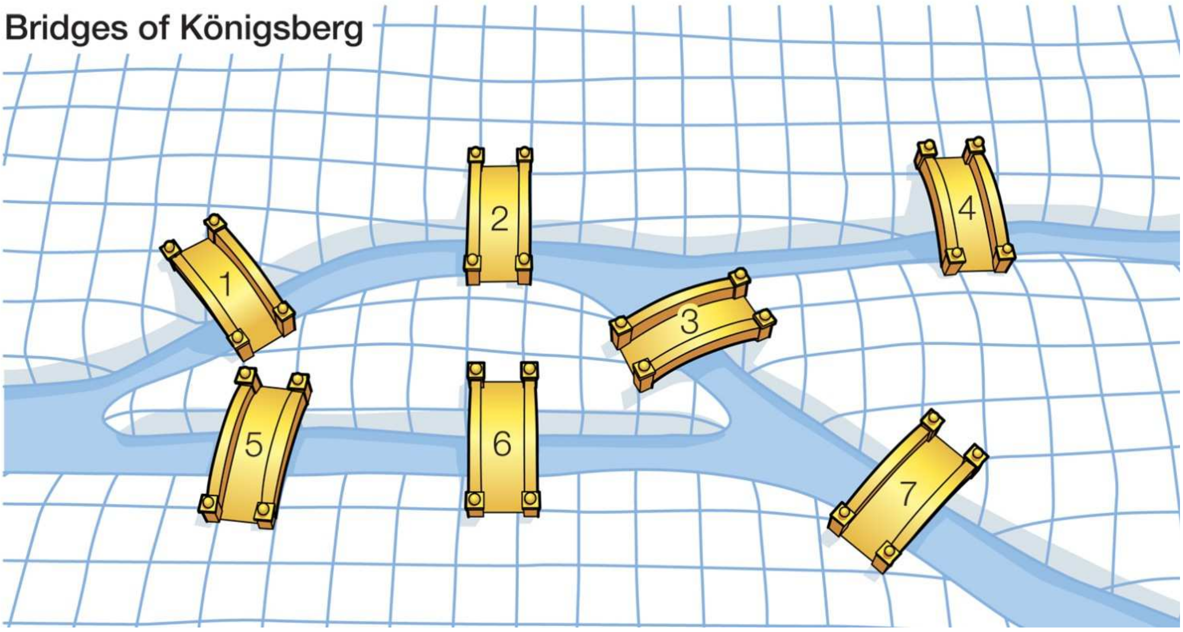
Aleksandr Pasharin

Tämän osion tarkoitus on toimia johdatuksena verkkoteorian historiaan, peruskäsitteisiin ja sovelluksiin. Kaikkiin tässä osiossa mainittuihin matemaattisiin käsitteisiin ja väitteisiin palataan kurssin aikana kunnolla uudestaan (tai ei palata lainkaan).

Königsbergin siltaongelma

Perinteisesti verkkoteorian katsotaan syntyneen kun kuuluisa sveitsiläinen matemaatikko Leonhardt Eulerin julkaisi vuonna 1736 niin sanotun **Königsbergin siltaongelman** ratkaisunsa.

Preussilaisen kaupungin Königsbergin (nykyään Kaliningrad, Venäjä) läpi kulkevan Pregolja-joen keskellä sijaitsee kaksi saarta, jotka 1700-luvulla oli yhdistetty toisiinsa ja mantereeseen seitsemällä sillalla seuraavan kuvan mukaisesti.

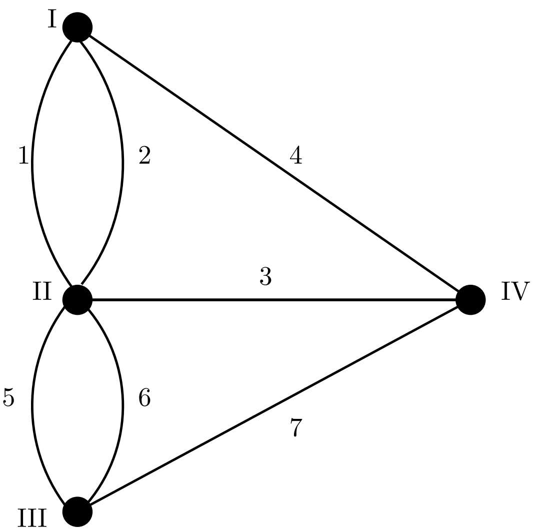


Kuvassa sillat on numeroitu $1, \ldots, 7$.

Tarinan mukaan kaupungin asukkaat yrittivät huvikseen keksiä sellaisen *kävelyreitin*, joka lähtisi heidän kotoaan, ylittäisi **jokaisen** sillan **täsmälleen kerran** ja palaisi lähtöpisteeseen. Lukuisista yrityksistä huolimatta kukaan ei kuitenkaan onnistunut sellaisen reitin löytämisessä. Tästä syystä asukkaat olivat vakuuttuneita siitä, ettei kyseistä reittiä voi olla olemassa. Kuitenkin ensimmäisenä vasta Euler todisti matemaattisen tarkasti, että ongelmalla ei ole ratkaisua. Euler löysi myös yksinkertaisen syyn tähän. Nimittäin, oletetaan, että haluttu reitti on olemassa. Tällöin, aina kun ylitetään silta ja joudutaan (mahdollisesti uudestaan) jollekin maa-alueelle, siitä täytyy poistua uutta siltaa pitkin, eli sellaista, joka ei vielä esiintynyt reitissä tähän mennessä. Toisin sanoen aina kun reitissä mennään jonkun maa-alueen kautta tulee käytettyä kaksi siltaa, jotka vievät tähän maa-alueeseen - yksi silta, jonka pitkiin alueelle tullaan, ja toinen, jonka pitkin alueelta poistetaan. Koska jokaisen sillan täytyy esiintyä reitissä tasan kerran, voidaan edellisestä päätellä, että jokaiseen maa-alueeseen vie *parillinen* määrä siltoja. Näin ei kuitenkaan ole - itse asiassa kuvan jokaiseen maa-alueeseen vie pariton määrä siltoja.

Verkon ja suhteikon käsitteet

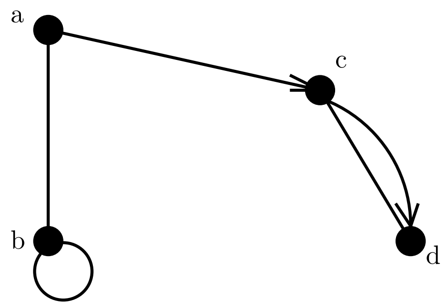
Miettiessään Könisbergin siltaongelmaa Euler tajusi, että ongelman ratkaisun kannalta oleellista oli ainoastaan informaatio siitä, miten maa-alueet yhdistyvät toisiinsa siltojen välityksellä. Korvaamalla maa-alueet pisteillä ja sillat pisteiden välisillä viivoilla, Euler esitti ongelman matemaattista **verkkoa** koskevana tehtävänä. Tällä tavalla hän päätyi *verkko-esitykseen* Königsbergin siltaongelmasta:



Kuva1

Tässä maa-alueet on merkitty latinalaisilla numeroilla, numeroja II ja III vastaavat saaret.

Näin syntyi abstraktin verkon käsite. **Verkko**, yleisemmin **suhteikko**, on systeemi, joka koostuu (äärellisestä) joukosta pisteitä ja ”yhteyksistä” joidenkin pisteparien välillä. Tämä yhteys voi olla kaksisuuntainen (”pisteestä a pääsee pisteeseen b ja takaisin”) tai ainoastaan yksisuuntainen (”pisteestä a pääsee pisteeseen b, mutta pisteestä b ei pääse pisteeseen a”). Kaksisuuntaisia yhteyksiä ilmaistaan piirroksissa perinteisesti **viivoina**, kun taas yhdensuuntaisia **nuolina**. Myös ”**silmukat**” eli yhteydet pisteestä itseensä ovat sallittuja. Lisäksi saman pisteparin välillä voi olla periaatteessa kaksi erilaista yhteyttä tai enemmänkin. Juuri näin itse asiassa käy edellä konstruoidussa verkossa, joka liittyy Königsbergin siltaongelmaan. Nimittäin maa-alueiden (I) ja (II) välillä on kaksi siltaa, samoin maa-alueiden (II) ja (III) välillä. Suhteikkoa, joissa tällaisia **rinnakkaisia yhteyksiä** ei sallita, eli kahden pisteen välillä on korkeintaan yksi viiva, sanotaan **yksinkertaiseksi**.



Kuva2

Esimerkiksi Kuvan 2 suhteikossa pisteiden a ja b välillä on kaksisuuntainen yhteys kun taas pisteiden a ja c välillä vain yksisuuntainen - pisteestä a pääsee pisteeseen c, mutta pisteestä c ei pääse takaisin pisteeseen a. Pisteiden c ja d välillä on kaksi yhteyttä, joista toinen on kaksisuuntainen ja toinen on yksisuuntainen. Tästä syystä Kuvan 2 suhteikko ei ole yksinkertainen. Pisteseen b liittyy silmukka.

Tällä kurssilla käsitellään systeemattisesti ainoastaan yksinkertaisia suhteikkoja. Pääpaino on (kuten kurssin nimestäkin voi päätellä) **verkkojen** teoriassa. Verkoksi sanotaan sellaista yksinkertaista suhteikkoa, jossa ei ole silmukkoita ja joissa kaikki yhteydet ovat kaksisuuntaisia. *Yleisempiä suhteikkoja, jotka eivät ole välttämättä yksinkertaisia tai verkkoja, esiintyy kuitenkin runsaasti verkkoteorian sovelluksissa*, joten mainitsemme niitäkin silloin tällöin.

Eulerin siltaongelman tarkastelu edelsi myös modernin *topologian* syntyä. Nimittäin, vaikka alunperin Königsbergin siltaongelma on muotoiltu erääseen tasoalueeseen (kaupungin kartta) liittyväksi **geometriseksi** ongelmaksi, Euler oivalsi, että ratkaisun kannalta ainoastaan maa-alueiden ja siltojen välisellä *yhteyssuhteella* on merkitystä. Sen sijaan sellaisilla geometrisilla ominaisuuksilla kuin maa-alueiden koolla ja muodolla, siltojen pituuksilla, maa-alueiden välisillä etäisyyksillä, objektin välisillä kulmilla jne. ei ole ongelman kannalta mitään merkitystä. Samantapainen lähestymistapa löytyy myös nykyaikaisen topologian takaa, jossa geometristen objektien jäykällä struktuurilla ei ole niin suurta merkitystä. Vaikka verkkoteoria luetaan perinteisesti **diskreetin** matematiikan piiriin kun taas topologia on **jatkuvaa**, ei-diskrettiä matematiikkaa, näiden alojen välillä on olemassa vahva yhteys ja verkkoteoreettisia menetelmiä sovelletaan mm. algebrallisessa topologiassa (ja päinvastoin).

Sovelluksia

Verkkoteorian avulla voidaan mallintaa ja tutkia sellaisia tilanteita, joissa oleellista on jokin objektien välinen "yhteys". Annetaan muutama luonnollinen esimerkki verkkoteorian sovelluksesta.

- Kuten Köniseberin siltaongelmassa, "pisteet" edustavat maantieteellisiä objekteja, esim. kaupungit, asemat, rakennukset, huoneet, risteytykset, saaret jne. Yhteydet niiden välillä ovat olemassa olevat tieyhteydet, sillat, ovet, lentoyhteydet jne. eli olemassa olevat fyysiset tavat päästä objektista toiseen. Tällaiset yhteydet ovat yleisesti ottaen kaksisuuntaisia, mutta vaikkapa yksisuuntainen katu antaa esimerkin yksisuuntaisesta nuolesta vastaavassa suhteikossa.

- Sähköverkot, (matka)puhelinverkot, internet-liikenneyhteydet jne...
- Atomien väliset kemialliset sidokset muodostavat verkon, joka kuvaa molekyylin kemiallista rakennetta. Tämän verkon analyysi taas paljastaa aineen ominaisuuksia. Itse asiassa juuri tämä sovellus oli aikoinaan (1800-luvulla) yksi tärkeimmistä motivaatioista verkkoteorian syntyyn ja kehitykseen.
- Sukulaissuhteet "b on a:n lapsi" muodostavat sukupuu-tyyppisen verkon esimerkiksi ihmisten joukossa. Tässä suhteikoissa kaikki yhteydet ovat selvästi yksisuuntaisia. Biologisen evoluution tutkimuksissa samaa ajatusta sovelletaan muodostamalla ja tutkimalla verkkoja, joiden pisteet edustavat lajia ja nuoli (a, b) tarkoittaa, että laji b polveutuu lajista a.
- Tarkastellaan erästä projektia, joka koostuu tietystä välivaiheista, esim. rakennushanketta. Konstruoidaan suhteikko, jonka pisteet vastaavat ajankohtia, joiden välissä välivaiheita suoritetaan ja nuolet vastaavat itse välivaiheita. Verkkoteorian avulla voidaan tällöin laatia projektille optimaalinen suoritussuunnitelma (kts. Critical path method).

Formalisointi

On olemassa erilaisia tapoja mallintaa suhteikon pisteiden välisen yhteyden käsitettä joukko-opillisesti eli formaalin matematiikan kielellä. Yksinkertaisin tapa koodata yhteys pisteestä b pisteeseen a on esittää se yksinkertaisesti **järjestettynä parina** (a, b) . Tällöin suhteikon struktuuri tulee olemaan eräs **relaatio** suhteikon pisteiden joukossa V eli formaalisti *karteesisen tulon* $V \times V$ eräs osajoukko. Yhteyden (a, b) **alkupiste** on b ja **loppupiste** on a.

Tällä kurssilla käytämme systemaattisesti juuri tätä tapaa määritellä suhteikko ja verkko.

Koska verkossa kaikki yhteydet ovat kaksisuuntaisia, verkkoa kuvaava relaatio tulee olemaan *symmetrinen*. Tämä tarkoittaa täsmälleen sitä, että aina kun järjestetty pari (a, b) on relaatiossa, myös järjestetty pari (b, a) on relaatiossa. Toisin sanoen parin (a, b) komponenttien a, b järjestyksellä ei tällöin ole väliä ja molempia pisteitä a, b sanotaan tällöin yhteyden **päätepisteiksi**. Tästä syystä toinen suosittu tapa mallintaa verkkoja, joka esiintyy usein alan kirjallisuudessa, on käyttää **järjestämättömiä pareja** järjestettyjen sijaan. Järjestämätön pari $< a, b >$ ei ole mitään muuta kuin 2-alkioinen osajoukko $\{a, b\}$ (1-alkioinen, jos $a = b$). Pisteiden joukon V alkioiden muodostamien järjestämättömien parien joukkoa merkitään symbolilla $V^{(2)}$. Emme kuitenkaan käytä tällä kurssilla tätä lähestymistapaa ja se on mainittu tässä vain siitä syystä, että siihen voi helposti törmätä muissa verkkoteoriaa käsittelevissä materiaaleissa.

Ei-yksinkertaisia suhteikkoja, eli sellaisia, joissa pisteiden a, b välillä voi olla enemmän kuin yksi yhteys, ei voi mallintaa samalla tavalla järjestettyjen tai järjestämättömien parien avulla - onhan olemassa vain yksi järjestetty pari (a, b), jonka ensimmäinen komponentti on a ja toinen komponentti on b. Yksi tapa määritellä tällaisia suhteikkoja on antaa viivojen (yhteyksien) joukko erikseen ja *liittää* (kuvauksen avulla) jokaiseen viivaan sen loppupisteiden muodostama pari (järjestetty tai järjestämätön, riippuen kontekstista). Esimerkiksi yllä kuvassa 1 esitetty, Königsebergin siltaongelmaan liittyvä verkko (kuva 1), voidaan mallita systeeminä (V, E, ϕ), missä $V = \{I, II, III, IV\}$ on pisteiden ("maa-alueiden") joukko, $E = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\}$ on yhteyksien ("siltojen") joukko ja $\phi\colon E \to V^{(2)}$ on kuvaus, joka määritellään seuraavasti:

$$\phi(1) = \phi(2) = \{I, II\}, \phi(3) = \{I, IV\}, \phi(4) = \{II, IV\},$$

$$\phi(5) = \phi(6) = \{II, III\}, \phi(7) = \{III, IV\}.$$

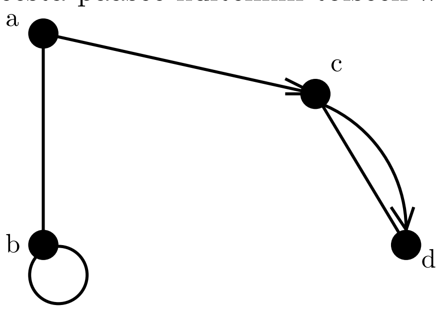
Kuvaus ϕ siis yksinkertaisesti kertoo jokaisen sillan kohdalla, mitä maa-alueita se yhdistää.

Ei-yksinkertaisessa suhteikossa kahden pisteen välisten yhteyksien lukumäärä voi olla mielivaltainen äärellinen luku (myös nolla, tällöin yhteyksiä ei ole). Myös silmukkojen lukumäärä ei ole rajoitettu. Näin ollen, vielä yksi tapa formalisoida yleinen suhteikko olisi antaa sen struktuuri kuvauksena $\psi\colon V \times V \to \mathbb{N}$, joka liittää jokaisen järjestettyyn pariin (a, b) pisteiden b ja a välisten yhteyksien lukumäärän luonnollisena lukuna.

Perinteisesti suhteikossa sallitaan ainoastaan **äärellinen** määrä pisteitä ja niiden välisiä yhteyksiä. On tutkittu ja sovellettu myös äärettömiä suhteikkoja, mutta tällä kurssilla pysytään äärellisten suhteikkojen teoriassa.

Eulerin kulut

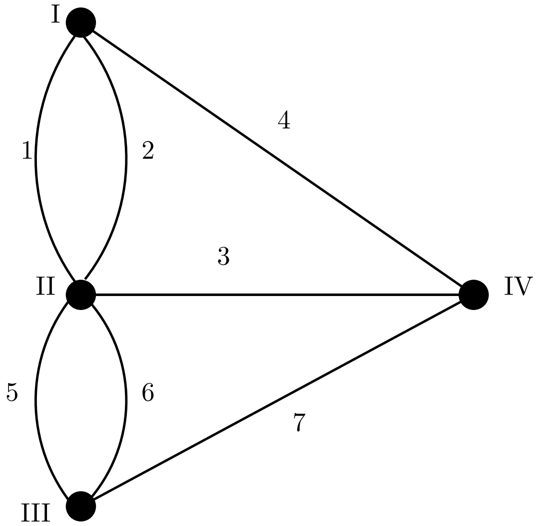
Suhteikon struktuuri kertoo, miten pisteestä toiseen pääsee "suoraan". Jos kahden pisteen välillä ei ole suoraa yhteyttä, eli viivaa tai ainakin nuolta, on mahdollista, että toisesta pisteestä pääsee kuitenkin toiseen *muiden pisteiden kautta.* Esimerkiksi suhteikossa



ei ole suoraa yhteyttä pisteiden b ja c välillä, kuitenkin pisteestä b pääsee pisteeseen c pisteen a kautta - eli ensin kuljetetaan yhteys $b - a$ ja sitten yhteys $a - c$. Koska yhteys $a - c$ on yksisuuntainen, toiseen suuntaan eli pisteestä c pisteeseen b ei suhteikossa enää pääse mitenkään.

Formaalisti **kulku** suhteikossa voidaan määritellä suhteikon yhteyksien *jonona* $(e_1, e_2, \ldots, e_n)$. Tällöin vaaditaan, että jokaisella $i = 1, \ldots, n-1$ yhteyden e_i loppupiste on yhteyden e_{i+1} alkupiste. Jokaisella $i = 1, \ldots, n$ merkitään nuolen e_i alkupistettä x_{i-1}:llä ja loppupistettä x_i:llä. Pisteet $(x_0, \ldots, x_n)$ muodostavat kulun **pistejonon**. Tällaisessa jonossa peräkkäisten pisteiden $x_{i-1} - x_i$ välillä on olemassa suhteikossa suora yhteys. Voidaan ajatella, että x_0 on **kulun alkupiste** ja x_n on **kulun loppupiste**. Kulku $(e_1, e_2, \ldots, e_n)$ ilmaisee siis erään tavan päästä suhteikossa pisteestä x_0 pisteeseen x_n suhteikon nuolia pitkin.

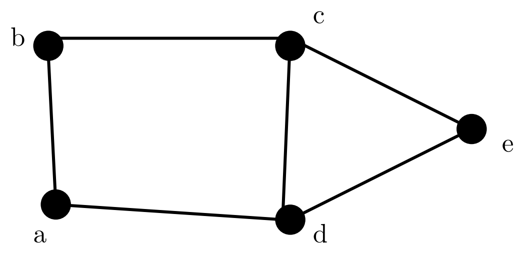
Esimerkiksi Königsbergin siltaverkossa jono $(1, 5)$ on kulku pisteestä I pisteeseen III. Jono $(2, 5)$ on myös kulku pisteestä I pisteeseen III, ja vaikka siinä mennään samojen pisteiden kautta $(I - II - III)$, se on erilainen kulku, sillä siinä käytetään eri yhteyksiä.



Kun suhteikko on yksinkertainen, kulku voidaan yhtä hyvin määritellä sen pistejonona $(x_0, x_1, \ldots, x_n)$, tällöin suhteikossa on jokaisella $i = 1, \ldots, n$ yhteys (x_{i-1}, x_i). Koska yksinkertaisessa suhteikossa yhteyden alku-ja loppupiste määräävät yhteyden yksikäsitteisesti, tällöin myös kulun yhteydet ovat yksiselitteisesti määrättyjä. Ei-yksinkertaisessa suhteikossa tämä ei päde, kuten nähtiin yllä - pistejono (I, II, III) voidaan Königsbergin siltaverkossa kulkea yhteyksinä $(1, 5)$ tai $(2, 5)$ tai yhtä hyvin myös vaikkapa $(2, 6)$.
Koska tällä kurssilla ollaan kuitenkin lähinnä kiinnostuneita vain yksinkertaisista suhteikoista, kulku määritellään myöhemmin yksinkertaisille suhteikoille (h- Junnila, ”Verkot”, Luku I, osa 4) nimenomaan pisteiden, ei nuolten, jonona. On kuitenkin pidettävä mielessä, että tämä määritelmä toimii vain yksinkertaisille suhteikoille.

Kulku on **suljettu kulku** tai **kierros**, jos sen alkupiste on sama kuin sen loppupiste. Esimerkiksi Königsbergin siltaverkossa kulut $(1, 5, 6, 2)$ tai $(1, 6, 7, 3)$ ovat kierroksia, sillä molemmat alkavat ja loppuvat samassa pisteessä I.

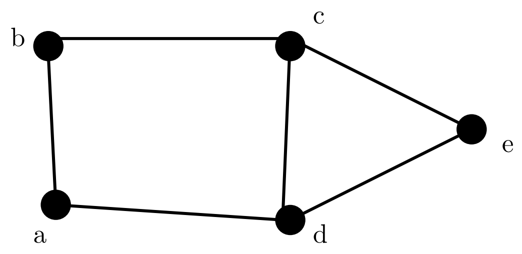
Kulussa $(e_1, e_2, \ldots, e_n)$ sekä yhteydet, että pisteet $(x_0, x_1, \ldots, x_n)$, joiden läpi kuljetaan, voivat toistua, määritelmässä mikään ei kiellä sitä. Esimerkiksi tarkastellaan seuraavaa yksinkertaista verkkoa:



Koska verkko on yksinkertainen, sen kulut voidaan antaa pistejonoina. Kulussa (a, b, c, d, e, c, b) yhteys $b - c$ toistuu kaksi kertaa. Kulussa (c, b, a, d, e, c, d) mikään viiva ei toistu, mutta pisteessä c käydään kaksi kertaa, samoin d:ssä. Tässä kulussa itse asiassa esiintyy verkon *jokainen* viiva täsmälleen kerran. Tämä on esimerkki *Eulerin kulusta.*

Eulerin kulku on sellainen kulku verkossa, joka sisältää verkon **jokaisen** viivan **täsmälleen kerran**. Pannaan erityisesti merkille, että pisteiden toisto on Eulerin kulussa sallittu. Esimerkiksi yllä löydettiin verkon Eulerin kulku (c, b, a, d, e, c, d), joka käy kaksi kertaa samaa pisteessä. Eulerin kierros on Eulerin kulku, joka on kierros, eli sellainen Eulerin kulku joka alkaa ja loppuu samaan pisteeseen.

Königsbergin siltaongelmassa siis kysytään löytyykö Königsbergin siltaverkosta Eulerin kierros. Yllä todettiin, että jos verkossa on olemassa Eulerin kierros, jokaisesta pisteestä lähtee **parillinen** määrä viivoja. Tätä pisteeseen liittyvien viivojen lukumäärä sanotaan pisteen **asteeksi**. Edellä mainitun *välttämättömän* ehdon avulla voidaan osoittaa, että verkosta **ei löydy** Eulerin kierrosta - riittää löytää verkosta piste, jonka aste on pariton. Esimerkiksi verkossa



ei voi olla Eulerin kierrosta - pisteiden c ja d aste on kolme. Kuitenkin tästä verkosta löytyy Eulerin kulku, esimerkiksi yllä jo mainittu kulku (c, b, a, d, e, c, d). Löytyykö Könisbergin siltaverkosta Eulerin kulku? Toisin sanoen, jos tingitään siitä vaatimuksesta, että reitin on palattava alkupisteeseen, onko mahdollista kulkea kaikki Königsbergin sillat täsmälleen kerran?

Eulerin kulkuja ja kierroksia tutkitaan kurssilla myöhemmin. Osoittautuu, että (H.Junnila, ”Verkot”, Lauseet III.3.5 ja III.3.6)

- *yhtenäisestä verkosta löytyy Eulerin kierros jos ja vain jos sen jokaisen pisteen aste on parillinen,*

- *yhtenäisestä verkosta löytyy Eulerin kulku, mutta ei Eulerin kierrosta, jos ja vain jos täsmälleen kahden sen pisteen aste on pariton.*

Tässä verkon yhtenäisyys tarkoittaa sitä, että jokaisesta verkon pisteestä pääsee jokaiseen toiseen pisteeseen jotakin kulkua pitkin. Koska Königsbergin siltaverkossa on neljä pistettä, joiden kaikkien aste on pariton, yllä mainituista tuloksista seuraa, että siinä ei ole edes Eulerin kulkua.

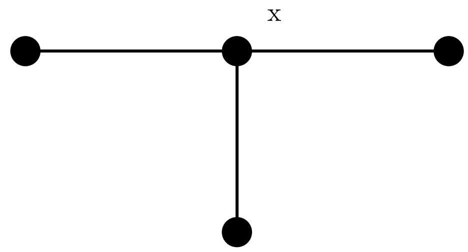
Hamiltonin kulut

Eulerin tutkimassa ongelmassa verkosta etsitään kulku, joka sisältäisi verkon jokaisen viivan täsmälleen kerran. Tällaisessa kulussa voidaan (ja yleensä joudutaankin) vierailla samassa pisteessä monta kertaa.

1800-luvun puolivälissä irlantilainen matemaatikko W.R. Hamilton asetti kysymyksen, joka näennäisesti muistuttaa Eulerin tutkimaa Könisbergin siltaongelmaa - onko annetussa suhteikossa sellaista kulkua, joka kävisi verkon *jokaisessa pisteessä* **täsmälleen kerran**. Tällaista kulkua sanotaan **Hamiltonin kuluksi**. Hamiltonin kierros on Hamiltonin kulku joka palaa alkupisteeseensä.

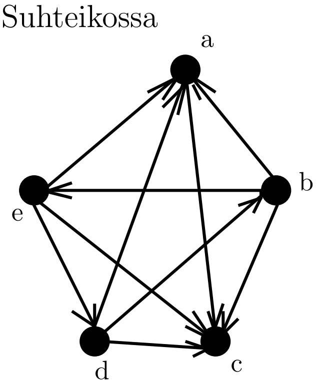
Hamiltonin kulku voidaan ajatella antaa mahdollisimman ”tehokkaan” tavan käydä läpi suhteikon kaikki objektit - siinä mielessä, että missään objektissa ei tarvitse käydä turhaan kaksi kertaa. Siksi monissa sovelluksissa on tärkeätä tietää, löytyykö suhteikosta Hamiltonin kierrosta tai edes kulkua.

Esimerkiksi verkosta



ei löydy Hamiltonin kulkua, sillä jokaisen kulun, joka käy verkon kaikissa pisteissä on selvästi pakko käydä ”keskipisteessä” x ainakin kaksi kertaa.

Suhteikossa



on Hamiltonin kulku (esim. (b, e, d, a, c)), voidaan osoittaa, että siinä ei ole Hamiltonin kierrosta.

Kuten edellä mainittiin, Eulerin kulun tai kierroksen olemassaolo verkossa on hyvin helppo karakterisoida täydellisesti verkon pisteiden asteiden avulla. Ehkä hieman yllättäen, Hamiltonin kulun tai kierroksen olemassaololle ei vielä tänäkään päivänä löydetty yhtä yksinkertaista luonnehdintaa. Hamiltonin kulun olemassaolo on osoittautunut vaikeaksi ongelmaksi.

Kauppamatkustajan ongelma ja painotetut suhteikot

Pelkät verkon tai suhteikon käsitteet eivät aina riitä. Nimittäin sovelluksissa suhteikon pisteiden väliset yhteydet usein ilmaisevat mahdollisuuden "päästä" objektista toiseen ja tosielämässä tällaisen yhteyden hyväksikäyttöön liittyy usein väistämättä myös joitakin **kustannuksia**.

Kuvitellaan kauppamatkustaja, joka haluaa lähteä myyntireissulle. Hänellä on tiedossa lista kaupungeista, joissa hän haluaa vierailla. Hän tietää mitä tieyhteyksiä kaupunkien välillä on olemassa. Kauppias haluaa tehdä *mahdollisimman tehokkaan/edullisen* kiertoreissun, jossa hän vierailee jokaisessa kaupungissa ja palaa takaisin. Periaatteessa kyse on siis siitä, että kaupunkien ja niiden välisten tieyhteyksien muodostamassa verkossa halutaan löytää Hamiltonin kierros joka lähtee ja palaa kauppamatkustajan kotikaupunkiin. Kuitenkin pelkkä mielivaltainen Hamiltonin kierros ei enää välttämättä riittää hyväksi ratkaisuksi, koska jokaiseen kaupunkien väliseen matkaan liittyy matkakuluja. Olisi paljon järkevämpää osata löytää **mahdollisimman edullinen** reitti.

Painotettu suhteikko on suhteikko, jossa jokaiseen yhteyteen on liitetty reaaliluku, sen "paino". Liittämällä jokaiseen kaupunkien väliseen yhteyteen siihen liittyviä matkakuluja saadaan kauppamatkustajan suhteikosta painotettu suhteikko. Painotetussa suhteikossa voidaan puhua pisteiden välisen kulun **painosta** ja etsiä esim. painolta pienin/suurin kulku.

Näin ollen matemaattisesti kauppamatkustajan ongelma voidaan muotoilla seuraavasti. Olkoon V painotettu suhteikko. Etsitään suhteikosta painoltaan pienin Hamiltonin kierros, jos sellainen ylipäätän löytyy. Yleisemmin - jos suhteikossa ei edes ole Hamiltonin kierrosta, etsitään sellainen kierros, joka kävisi suhteikon jokaisessa pisteessä ja joka olisi mahdollisimman lyhyt.

Teoriassa yksi tapa ratkaista kauppamatkustajan ongelma annetussa suhteikossa on yksinkertaisesti käydä läpi kaikki mahdolliset reitit ja valita niistä lyhin. Onhan mikä tahansa suhteikko äärellinen, joten myös mahdollisten reittien lukumäärä on äärellinen. Kuitenkin, kun verkko on suhteellisen iso, mahdollisia reittejä on "liian paljon", joten jopa tietokone ei pysty käymään läpi kaikkia mahdollisia vaihtoehtoja järkevässä ajassa.

Monissa käytännön sovelluksissa riittää, että kauppamatkustajan ongelmalle löydetään vain "tarpeeksi hyvä" ratkaisu, eli sellainen reitti, jonka paino pysyy hyväksyttävissä rajoissa. Tämä ongelma on yksinkertaisempi kuin alkuperäinen kauppamatkustajan ongelma, mutta sekin on osoittautunut hyvin vaikeaksi. Sen ratkaisemiseen on kehitetty erilaisia menetelmiä ja algoritmeja, mutta parhaatkin niistä tuottavat hyvän ratkaisun vain suurimmassa osassa tapauksista.

Edellisessä kappaleessa mainittu heikompi versio kauppamatkustajan ongelmasta ("etsitään reitti, jonka paino ei ole suurempi kuin ennalta sovittu vakio") on klassinen esimerkki niin sanotusta NP-ongelmasta, josta ei vielä tiedetä kuuluko se myös luokkaan P. NP-ongelmalla tarkoitetaan sellaista ongelmaa, jonka *ratkaisuehdokas* voidaan *tarkistaa* polynomiajassa (eli suhteellisen "tehokkaasti"). P-ongelma on taas sellainen, jolle on olemassa polynomiajassa toimiva algoritmi. On helppoa tarkistaa, onko annettu reitti heikon kauppamatkustajaongelman ratkaisu - lasketaan vain sen pituus. Tämä hoituu polynomiajassa suhteikon pisteiden lukumäärän suhteen. Ongelmalle ei kuitenkaan löydetty ratkaisualgoritmia, joka tuottaisi sille ratkaisun polynomiajassa.

Kauppamatkustajan ongelmalla on näin ollen yhteys miljoonan dollarin ongelmaan "onko $P = NP$?", joka on yksi kuuluisimmista matematiikan ja tietojenkäsittelytieteen avoimista ongelmista tällä hetkellä.

Artikkeli aiheesta Tiede-lehdessä:
Kauppamatkustaja etsii lyhinta reittia

Muita tunnettuja ongelmia painotettujen verkkojen teoriassa ovat kahden pisteen väliseen lyhimmän reitin laskeminen tai niin sanotun "minimaalisen virittävän puun" määrittäminen. Näiden ratkaisemiseen on kehitetty suhteellisen tehokkaita ja tarkkoja algoritmeja (esim. Dijkstran algoritmi).

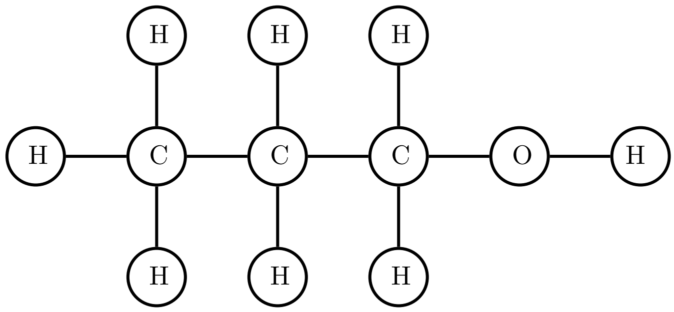
Tällä kurssilla emme käsittele painotettuja verkkoja (on mahdollista, että niihin palataan lyhyesti kurssin lopussa, jos aikataulut sallivat).

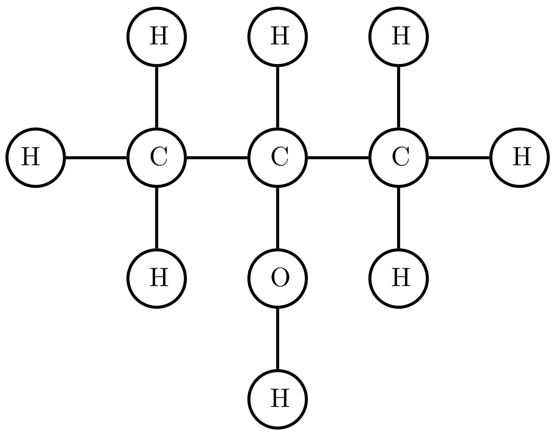
Sovelluksia kemiassa

1800-luvun loppupuolella kemiallisia **isomeerejä** tutkinut skottilainen kemisti A. Crum Brown oivalsi, että molekyyli voidaan esittää matemaattisesti *verkkona*, jonka pisteet vastaavat molekyylin **atomeja** ja viivat vastaavat atomien välisiä **kemiallisia sidoksia**. Pisteen eli atomin *aste* tällaisessa verkossa on tunnetu vakio, nimittäin atomin edustavan alkuaineen **valenssi**, joka on tiedossa (todellisuudessa asia on paljon monimutkaisempi eikä valenssi olekaan välttämättä vakio, mutta jätetään yksityiskohdat kemisteille).

Esimerkin vuoksi tarkastellaan **propanolin** molekyyliä C_3H_7OH. Tiedetään, että hiilen C valenssi on 4, hapen O valenssi on 2 ja vedyn H valenssi on 1. Näin ollen molekyylin rakennetta virittävä verkko on sellainen verkko jossa on $3+7+1+1=12$ pistettä, joista kolmen (C) aste on neljä, kahdeksannen (H) aste on yksi ja yhden (O) aste on kaksi. Kemiallisesta teoriasta tiedetään, että yhden O-atomin naapureista on oltava H-atomi (tästä syystä kemiaalisessa kaavassa yksi H esiintyy O:n kanssa muodossa OH). Lisäksi kyseisen verkon on oltava yhtenäinen, koska molekyyli pysyy yhtenäisenä määritelmän mukaan. Näin ollen, molekyylin rakenne selviää, jos pystymme klassifioimaan kaikki yllä mainitut ehdot tpteuttavat verkot. Erityisesti kiinnostavaksi nousee kysymys siitä, onko tällaisia verkkoja enemmän kuin yksi.

Voidaan osoittaa (tällä kurssilla opitaan miten), että on olemassa tasan kaksi rakenteeltaan erilaista verkkoa, jotka toteuttavat kaikki ehdot, joiden propanolin verkon on toteuttavaa:





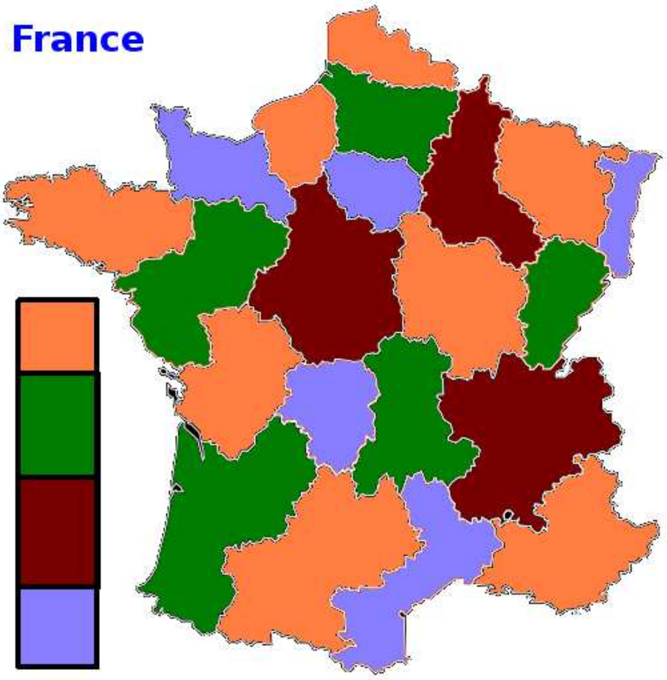
Mitä lause ”rakenteeltaan erilaiset verkot ”tarkoittaa? Täsmällisesti se tarkoittaa sitä, että verkot eivät ole **isomorfisia** keskenään. Isomorfisilla (eli verkkoteorian kannalta ”samanlaisilla”) verkoilla on samanlaiset verkkoteoreettiset ominaisuudet. Tässä tapauksessa verkot ovat erilaisia esimerkiksi seuraavasta syystä - molemmasta verkosta löytyy tasan yksi piste (O), jonka aste on kaksi ja sillä on tasan yksi naapuripiste (C), jonka aste on 4. Kuitenkin tällä pisteellä on toisessa verkossa kaksi H-naapuria, toisessa taas vain yksi.

Näin ollen propanoli voi esiintyä vain korkeintaan kahdessa eri muodossa. Osoittautuu, että molemmat versiot propanolista myös todellisuudessa esiintyvät luonnossa. Tällaisia molekyylejä, joilla on sama kemiallinen kaava, mutta erilaiset rakenteet sanotaan **isomeereiksi**. Propanolilla on siis kaksi erilaista isomeeriä. Nämä eivät ole kemiallisilta ominaisuuksiltaan samoja.

Verkkoteorian avulla voidaan siis karakterisoida ja klassifioida aineen erilaisia isomeerejä.

Kartan väritysongelma

Tarkastellaan jonkun tasoalueen karttaa. Perinteisesti vieraita maa-alueita, joilla on yhteinen raja, väritetään (selvästä syystä) eri väreillä. Tällöin joudutaan käyttämään ainakin muutamaa eri värejä. Mikä on pienin mahdollinen määrä eri väriä, jotka riittävät värittämän minkä tahansa mahdollisen kartan?



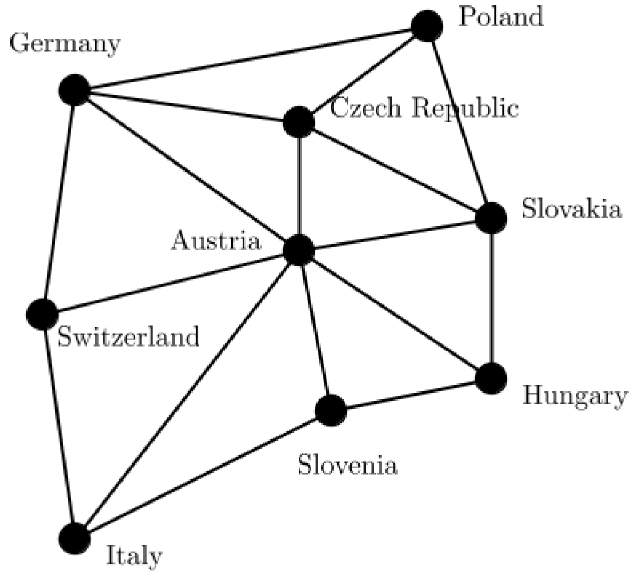
Kuvassa on kartta Ranskan alueista (régions). Kartan värittämiseksi riittää neljä väriä ja voidaan osoittaa, että kolme väriä ei olisi riittänyt. Jo 1800-luvulla huomattiin, että neljä väriä aina näyttävät riittävän värittämään minkä tahansa kartan - ainakin kukaan ei pystynyt keksimään sellaista karttaa, jolle tämä ei olisi totta. Näin syntyi kuuluisa "neliväriongelman konjektuuri", jonka mukaan neljä väriä riittävät värittämän minkä tahansa tasokartan. Tämä väite pysyi hypoteesina vuoteen 1976 asti, jolloin K.Appel ja W.Haken vihdoinkin osoittivat sen oikeaksi.

Vaikka kartta ei ole verkko, väritysongelma voidaan kuitenkin helposti muotoilla verkkoteoreettisena ongelmana. Nimittäin konstruoidaan verkko, jonka pisteet vastaavat kartan maita. Kahden pisteen välillä on viiva jos kyseisillä mailla on kartalla yhteinen raja. Näin muodostettu verkko on tällöin niin sanottu **tasoverkko**, eli sellainen verkko, joka voidaan piirtää tasossa, niin, että erilaiset viivat eivät leikkaa toisiaan (kaikilla verkoilla ei ole tätä ominaisuutta).

Verkkojen kielellä kartan väritysongelma voidaan muotoilla seuraavaksi ekvivalentiksi väitteeksi:

Olkoon G tasoverkko. Tällöin sen pisteet voidaan värittää korkeintaan neljällä eri värillä niin, että viereiset pisteet (eli sellaiset joiden välillä on verkossa viiva) eivät koskaan ole samanvärisiä.

Esimerkki. Kuvassa alla on esitetty erään Euroopan osan kartta ja sen esitys tasoverkkona.



Harjoitustehtäväksi jaetaan tämän kartan värittäminen (korkeintaan) neljällä eri värillä.

Kaikki verkot eivät ole tasoverkkoja. Suurinta osaa verkoista ei voi piirtää tasossa niin, että mitkään kaksi viivaa eivät leikkaa toisiaan (paitsi mahdollisesti päätepisteissä). Vaikka tasoverkot voidaan nelivärilauseen mukaan värittää neljällä värillä, kaikilla verkoilla ei ole tätä ominaisuutta. Itse asiassa jokaisella luonnollisella luvulla n on olemassa verkko, jota ei voida värittää n:llä eri värillä.