

# Puut

Aleksandr Pasharin

Verkko  $G$  on **renkaaton** jos sen viivajoukko  $V_G$  ei sisällä yhtäkään rengasta. Koska rengas on  $n$ -syklin ( $n \geq 3$ ) määrämä viivajoukko, verkko on renkaaton jos ja vain jos siinä ei ole yhtäkään  $n$ -sykliä,  $n \geq 3$ . Tästä syystä renkaattomasta verkosta käytetään myös nimitystä *asyklinen* (engl. acyclic).

**Puu** on yhtenäinen renkaaton verkko.

Jos verkko  $G$  on renkaaton, jokainen sen yhtenäinen komponentti on yhtenäinen ja renkaaton verkko, eli on puu. Tästä syystä rengatonta verkkoa sanotaan myös **metsäksi**. *Metsä on erillinen yhdiste puista.*

Yhdistämällä aikaisempia tuloksia (ja todistamalla tarvittaessa uusia) saadaan seuraava lista yhtäpitävistä tavoista määritellä puu:

- Verkko  $G$  on puu jos ja vain jos kaikilla  $x, y \in P_G$ ,  $x \neq y$  verkossa  $G$  on olemassa **yksikäsitteinen** yksinkertainen kulku pisteestä  $x$  pisteeseen  $y$  (Lause IV 1.8). Palautetaan mieleen, että verkko on yhtenäinen jos ja vain jos kaikilla  $x, y \in P_G$ ,  $x \neq y$  verkossa  $G$  on olemassa yksinkertainen kulku pisteestä  $x$  pisteeseen  $y$ . Näin ollen yhtenäinen verkko on puu jos ja vain jos tällainen kulku on yksikäsitteinen.
- Epätyhjä verkko  $G$  on puu jos ja vain jos se on yhtenäinen ja  $v_G \leq p_G - 1$ . Tällöin välttämättä  $v_G = p_G - 1$ . (Korollaari IV 1.10 ja Lause IV 1.3)
- Epätyhjä verkko  $G$  on puu jos ja vain jos se on renkaaton ja  $v_G \geq p_G - 1$ . Tällöin välttämättä  $v_G = p_G - 1$ . (Korollaari IV 1.10 ja Lause IV 1.3)
- Verkko  $G$ , jossa on vähintään kaksi pistettä, on puu jos ja vain jos se on yhtenäinen, mutta yhdenkin viivan poistaminen verkosta  $G$  tekee siitä epäyhtenäisen (Lause IV 1.9). Havainnollisesti - puu on "minimaalinen" yhtenäinen verkko.
- Verkko  $G$ , jossa on vähintään kaksi pistettä, on puu jos ja vain jos se on renkaaton, mutta yhdenkin uuden viivan lisäämisen jälkeen verkossa on rengas (Lause IV 1.9). Havainnollisesti - puu on "maksimaalinen" renkaaton verkko.

Tässä "viivan poistaminen" tarkoittaa verkon  $G - v$  muodostamista. Palautetaan mieleen, että kun verkossa  $G$  on olemassa viiva  $v = \overline{xy}$  verkko  $G - v$  on  $G$ :n aliverkko  $H$  jolle pätee  $P_H = P_G$  ja  $V_H = V_G \setminus \{v\}$ . Toisin sanoen verkossa  $G - v$  pidetään kaikki verkon  $G$  pisteet ja viivat, paitsi, että viiva  $v$  poistetaan, jolloin  $x$  ja  $y$  eivät ole enää naapureita verkossa  $G - v$ . Tämän konstruktion avulla voidaan muotoilla neljäs ehto ylläolevassa listassa seuraavasti:

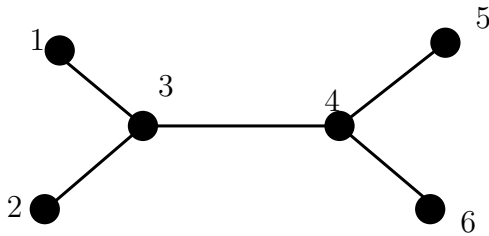
Verkko  $G$ , jossa on vähintään kaksi pistettä, on puu jos ja vain jos se on yhtenäinen, mutta kaikilla  $v \in V_G$  verkko  $G - v$  on epäyhtenäinen.

Vastaavasti oletetaan, että verkossa  $G$  pisteet  $x, y \in P_G, x \neq y$  eivät ole naapureita. Merkitään  $v = \overline{xy}$ . Huomaa, että  $v$  on tällöin komplementin  $\tilde{G}$  viiva. Verkko  $G + v$  määritellään verkkona  $H$  jolle pätee  $P_H = P_G$  ja  $V_H = V_G \cup \{v\}$ . Toisin sanoen verkossa  $G$  lisätään tasan yksi uusi viiva lisäämättä uusia pisteitä. Tämän konstruktion avulla voidaan muotoilla neljäs ehto yllä olevassa listassa seuraavasti:

Verkko  $G$ , jossa on vähintään kaksi pistettä, on puu jos ja vain jos se on renkaaton, mutta kaikilla  $v \in V_G$  verkko  $G + v$  sisältää ainakin yhden renkaan.

Itse asiassa, jos tämä ehto toteutuu, niin verkossa  $G + v$  on aina **tasan yksi** rengas, toisin sanoen yhden uuden viivan lisääminen johtaa täsmälleen yhden renkaan syntyyn.

**Esimerkki 1.** Havainnollisesta puun määritelmästä ja yllä mainittuja tuloksia esimerkillä. Tarkastellaan seuraavassa kuvassa esitettyä verkkoa  $G$ .

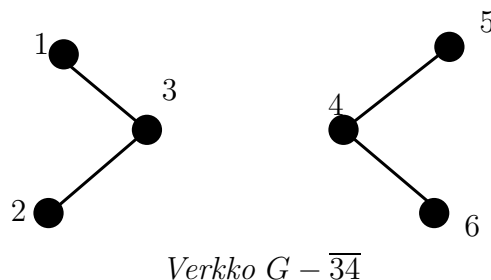
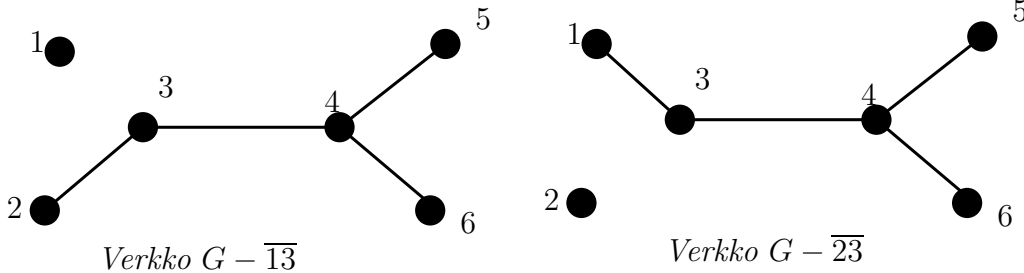


Verkko  $G$  on puu. Yksinkertaisin tapa osoittaa tämä väite todeksi on näyttää, että verkko  $G$  on yhtenäinen ja että sille pätee yhtälö  $v_G = p_G - 1$ . Yhtenäisyys on selvä. Suoraan laskemalla nähdään, että verkossa on 6 pistettä ja 5 viivaa. Näin ollen verkko on puu.

Tietysti "kuvasta näkee" yhtä hyvin, että verkko ei sisällä syklejä eli on renkaaton.

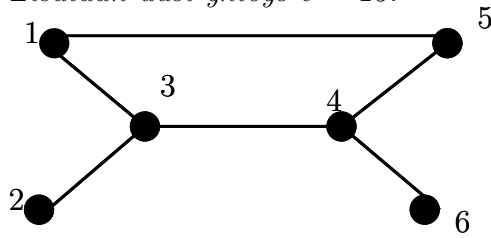
Yksikäsitteinen yksinkertainen kulku pisteestä 1 pisteeseen 2 on kulku  $(1, 3, 2)$ . Yksikäsitteinen yksinkertainen kulku pisteestä 2 pisteeseen 6 on kulku  $(2, 3, 4, 6)$ .

Seuraavassa kuvassa esitetään kolme esimerkkiä verkosta  $G - v$ :



Helposti nähdään, että jokainen näistä verkoista on selvästi epäyhtenäinen.

Lisätään uusi yhteys  $v = \overline{15}$ :



Verkko  $G + \overline{15}$

Verkossa  $G' = G + \overline{15}$  on sykli  $(1, 3, 4, 5, 1)$ . Sitä vastaava 4-rengas on verkon  $G'$  ainoa rengas.

Verkossa  $G'$  on olemassa kaksi erilaista yksinkertaista kulkua pisteestä 1 pisteeseen 6 - kulku  $(1, 3, 4, 6)$  ja  $(1, 5, 4, 6)$ . Verkko  $G'$  ei ole puu.

Lauseen II 2.3 mukaan jokaisessa verkossa  $G$  pätee yhtälö

$$(2) \quad \sum_{x \in P_G} d(x) = 2v_G.$$

Puun tapauksessa  $v_G = p_G - 1$ , mistä saadaan yhtälö

$$(3) \quad \sum_{x \in P_G} d(x) = 2p_G - 2.$$

**Esimerkki 4.** (HUOM, tämä on sama esimerkki kuin Junnilan monistessa sivuilla 93-94 esiintyvä "Tehtävä").

Lasketaan erään puun  $T$  3-asteisten pisteiden lukumäärä, kun tiedetään, että puussa on niiden lisäksi vain kuusi 1-asteista pistettä, yksi 2-asteinen ja yksi 4-asteinen piste.

Olkoon  $x$  3-asteisten pisteiden lukumäärä puussa  $T$ . Oletuksista seuraa, että  $p_T = x + 8$ . Yhtälö (3) muuttuu tarkasteltavan puun tapauksessa yhtälöksi

$$3x + 6 + 2 + 4 = 2(x + 8) - 2.$$

Tästä saadaan  $x = 2$ . Puussa on siis kaksi 3-asteista pistettä ja kaiken kaikkiaan pisteitä on puussa 10.

**Esimerkki 5.** Aineen molekyyli voidaan mallintaa verkolla, jonka pisteet edustavat molekyylin atomeja ja viivat vastaavat niin sanottuja kemiallisia sidoksia atomien välillä. Yleisesti ottaen tässä verkossa voi esiintyä rinnakkaisia yhteyksiä, eli kyseessä on multi-verkko. Tässä esimerkissä tarkasteltava verkko kuitenkin tiedetään olevan yksinkertainen verkko. Molekyyliä esittävä verkko on aina yhtenäinen, muutenhan molekyyli ei pysyisi kasassa eikä olisi molekyyli määritelmän mukaan.

Molekyyliä esittävän verkon pisteen aste vastaa yleensä pisteen alkuaineen valenssia eli hapetuslukua, joka voidaan olettaa olevan tunnettu vakio. Esimerkiksi vedyn  $H$  valenssi on yksi, hapen  $O$  valenssi on kaksi, hiilen  $C$  valenssi on neljä.

Osoitetaan, että näillä oletuksilla propanolin molekyyli  $C_3H_7OH$  on verkkona  $G$  eräs puu. Oletuksistamme seuraa, että  $G$  on yhtenäinen, joten riittää osoittaa, että  $v_G = p_G - 1$ .

Pisteitä on yhtä paljon kuin atomeja, joten  $p_G = 3 + 7 + 1 + 1 = 12$ . Viivojen lukumäärä saadaan selville yhtälön (2) avulla,

$$2v_G = 8 + 3 \cdot 4 + 2 = 22,$$

mistä  $v_G = 11 = 12 - 1 = p_G - 1$ . Tässä käytimme hyväksi sitä, että verkossa on 8 1-asteista pistettä (vastaavat vedyn atomeja H), 3 4-asteista (vastaavat hiilen atomeja C) ja yksi 2-asteinen (hapen atomi O).

Näin ollen propanolyn molekyyli on puu.

Seuraava luonnollinen kysymys on olisiko mahdollista selvittää propanolin molekyylin verkkostruktuuri käyttämällä ainoastaan kemiasta tunnettua informaatiota, eli tietoa verkon pisteiden asteista. Tätä varten meidän on kehitettävä uusia teoreettisia tuloksia. Ongelmaan palataan myöhemmin, esimerkissä 9.

Puun  $G$  piste  $x \in P_G$  on **lehti** jos  $d(x) = 1$ .

**Lause IV 1.2:** Jokaisella puulla, jolla on vähintään kaksi pistettä, on ainakin kaksi lehteä. Jos puulla on vähintään kolme pistettä, sillä on olemassa ainakin yksi piste, joka ei ole lehti.

Seuraavien tulosten avulla voidaan konstruoida pienempiä puita isommista ja päinvastoin:

**Lause IV 2.4:** Olkoon  $T$  puu, jossa on vähintään kolme pistettä ja olkoon  $A \subset P_T$  eräs sen pisteiden joukko, joka koostuu vain puun lehdistä. Tällöin joukon  $P_T \setminus A$  virittämä  $T$ :n aliverkko  $T'$  on puu. Lisäksi on olemassa kuvaus  $f: A \rightarrow P_T \setminus A$  siten, että

$$V_T = V_{T'} \cup \{\overline{af(a)} \mid a \in A\}.$$

Toisin sanoen, jos puusta poistetaan *joitakin* sen lehtiä ja kaikki niihin liittyvät viivat, jäljellä oleva verkko on edelleenkin puu. Kuvaus  $f: A \rightarrow P_T \setminus A$  on yksinkertaisesti kuvaus, joka liittyy jokaisen joukon  $A$  lehteen sen *ainoan naapurin* puussa  $T$ .

Käänteinen tulos:

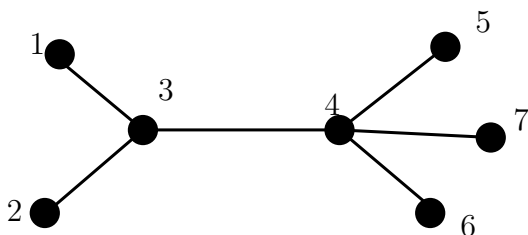
**Lemma IV 2.5:** Olkoon  $S$  epätyhjä puu, olkoon  $A$  sellainen joukko, että  $P_S \cap A = \emptyset$ . Olkoon  $f: A \rightarrow P_S$  kuvaus. Tällöin ehtojen  $P_G = P_S \cup A$  ja

$$V_G = V_S \cup \{\overline{af(a)} \mid a \in A\}$$

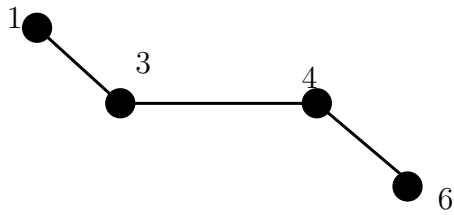
määräämä verkko  $G$  on puu ja jokainen  $A$ :n alkio on puun  $G$  lehti.

Tämä siis sanoo sen, että kun puuhun liitetään uusia lehtiä kuvauksen  $f$  välityksellä, näin saatu verkko on (isompi) puu. Kuvaus  $f$  yksinkertaisesti kertoo mikä on uuden lehden  $x$  ainoa naapuri uudessa puussa (se on  $f(x)$ ).

**Esimerkki 6.** Tarkastellaan seuraavaa puuta  $T$ :

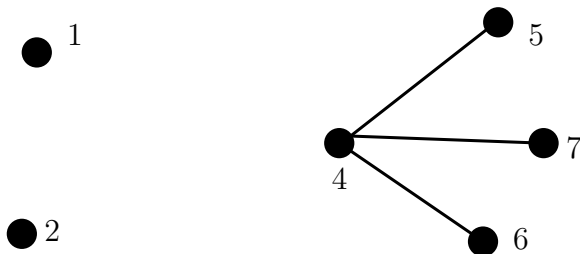


Olkoon  $A = \{2, 5, 7\}$ . Tällöin  $A$  koostuu puun lehdistä, joten Lauseen IV 2.4 mukaan  $A$ :n solmujen ja kaikkien niihin liittyvien viivojen poistaminen puusta  $T$  johtaa verkkoon, joka on puu. Helposti nähdään, että näin todellakin on:

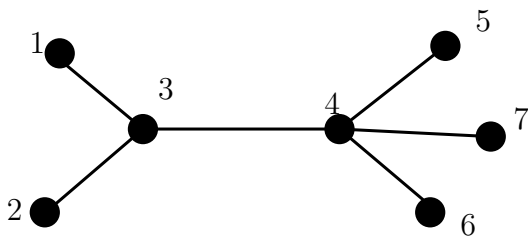


Lauseessa IV 2.4 määritelty kuvaus  $f: A \rightarrow P_T \setminus A$  on tässä tapauksessa määritelty seuraavasti -  $f(2) = 3$ ,  $f(5) = f(7) = 4$ .

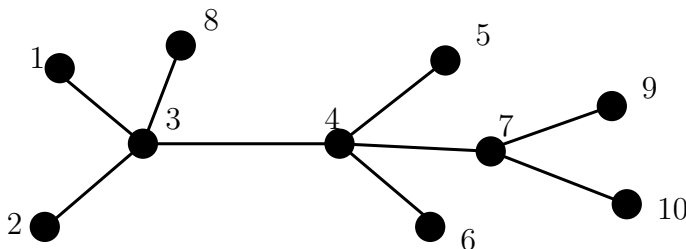
Sen sijaan esimerkiksi ei-lehden 3 poistaminen johtaa verkkoon, joka ei ole yhtenäinen, eli erityisesti ei ole puu:



**Esimerkki 7.** Olkoon  $T$  kuten edellisessä esimerkissä:



Lisätään puuhun  $T$  kolme uutta lehteä 8, 9, 10 Lemman IV 2.5 mukaisella konstruktioilla kuvauksen  $f: \{8, 9, 10\} \rightarrow T$ ,  $f(8) = 3$ ,  $f(9) = f(10) = 7$  välityksellä. Tällöin saadaan seuraava puu:



Edellisten tulosten avulla voidaan konstruoida puita ja karakterisoida niitä isomorfiaa vaille. Seuraavasta Lauseen IV 2.4 erikoistapauksesta on tällöin hyötyä:

**Lemma 1.** Olkoon  $T$  puu, jossa on ainakin kolme pistettä ja olkoon  $A$  sen kaikkien lehtien joukko. Olkoon  $S$  puu, joka saadaan poistamalla puusta  $T$  kaikki lehdet (Lauseen IV 2.4 mukaisesti). Olkoon  $B$  kaikkien puun  $S$  lehtien joukko. Olkoon  $f: P_T \rightarrow P_S$  kuvaus,

joka kuvaa  $a \in A$  sen ainoaksi naapuriksi puussa  $T$  (joka on tällöin myös puun  $S$  solmu). Tällöin  $B \subset \text{Im } f$ , eli jokainen puun  $S$  lehti on jonkun puun  $T$  lehden naapuri puussa  $T$ .

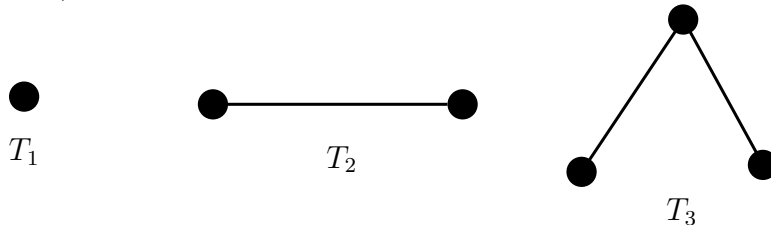
*Todistus.* Oletetaan, että puun  $S$  jokin lehti  $a$  ei ole minkään  $T$ :n lehden naapuri  $T$ :ssä. Koska  $S$  on joukon  $P_S = P_T \setminus A$  virittämä  $T$ :n aliverkko, tämä tarkoittaa sitä, että kaikki viivat jotka liittyvät  $a$ :han  $T$ :ssä ovat myös  $S$ :n viivoja. Koska  $d_S(a) = 1$ , tästä seuraa, että  $a$ :n aste  $T$ :ssä  $d_T(a)$  on myös yksi, eli  $a$  on lehti  $T$ :ssä. Toisin sanoen  $a \in A$ , mutta tämä on mahdotonta, sillä  $A \cap P_S = \emptyset$ .  $\square$

**Esimerkki 8.** Klassifioidaan isomorfiaa vaille kaikki puut  $T$ , joille  $p_T \leq 5$ .

Tapaus  $p_T = 1$  on selvä - verkko on tällöin triviaali yhden pisteen verkko  $T_1$ , joka on selvästi puu.

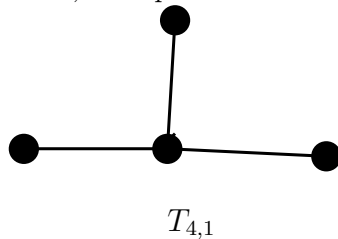
Tapaus  $p_T = 2$  on myös helppo - ainoa yhtenäinen kahden pisteen verkko  $T_2$  on verkko, joka koostuu kahdesta pisteestä ja viivasta niiden välillä. Tällainen verkko  $T_2$  on selvästi puu.

Olkoon  $G$  kolmen pisteen puu, tällöin siinä on kaksi viivaa. Näillä kahdella viivalla on välttämättä yhteinen päätepiste (jos viivat olisivat erillisiä, verkossa olisi ainakin neljä pistettä), joten  $G \approx T_3$ , missä  $T_3$  kuten kuvassa alla.  $T_3$  on selvästi puu.

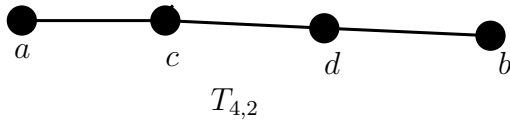


Seuraavassa tapauksessa  $p_T = 4$  tarvitsemme jo teoreettisia tuloksia. Lauseesta IV 1.4 seuraa, että neljän pisteen puussa on kaksi tai kolme lehteä.

Tapaus 1: Oletetaan, että lehtiä on kolme. Tällöin puussa on jäljellä tasan yksi lehti  $x$ . Jokainen lehti on yhteydessä tasan yhteen pisteeseen puussa, mutta tämä piste ei voi olla myös lehti, kun puussa on enemmän kuin kaksi pistettä (miksi?). Näin ollen tarkasteltavan verkon tapauksessa jokaisen lehden on pakko olla pisteen  $x$  naapuri. Tästä saadaan, että puu on tällöin seuraavannäköinen:



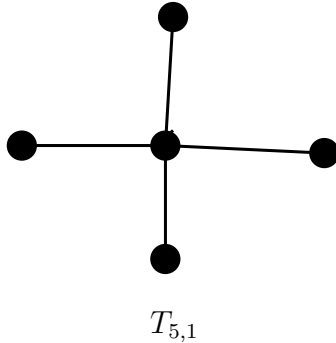
Tapaus 2: Oletetaan, että lehtiä on kaksi ja merkitään lehtien joukkoa  $A$ :llä,  $A = \{a, b\}$ . Olkoon  $S$  puu, joka saadaan kun kaikki lehdet poistetaan ja merkitään  $P_S = \{c, d\}$ . Lauseen IV 2.4 mukaan  $S$  on kahden pisteen puu, joten edellisen nojalla  $S \approx T_2$ . Lemman (1) mukaan on olemassa kuvaus  $f: A \rightarrow P_S$ , joka kuvaa jokaisen  $T$ :n lehden  $a, b$  ainoalle naapurilleen, lisäksi tälle kuvaukselle pätee  $B \subset \text{Im } f$ , missä  $B$  on puun  $S$  lehtien joukko. Mutta nyt  $B = \{c, d\} = P_S$ , sillä kahden pisteen puussa molemmat alkioit ovat lehtiä. Voidaan olettaa, että  $f(a) = c$ ,  $f(b) = d$ . Lisämällä kahden pisteen puuhun  $T_2$  uudet lehdet  $a, b$  tämän kuvauksen välityksellä saadaan seuraavan näköinen puu  $T_{4,2}$ :



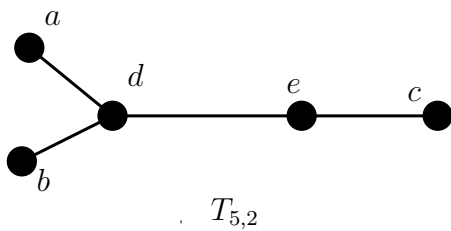
Erityisesti isomorfiaa vaille on olemassa tasan kaksi erilaista neljän pisteen puuta.

Seuraavaksi tarkastellaan tapausta  $p_T = 5$ .

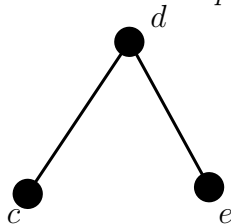
Viiden pisteen puussa voi olla kaksi, kolme tai neljä lehteä. Jos lehtiä on neljä, samalla tavalla kuten yllä neljän pisteen puun tapauksessa, voidaan päätellä, että jokaisen lehden täytyy olla ainoan ei-lehden naapuri, jolloin puu näyttää tältä:



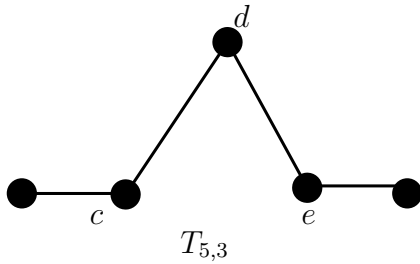
Seuraavaksi oletetaan, että viiden pisteen puussa  $T$  on kolme lehteä  $a, b, c$ , merkitään niiden joukkoa  $A$ :llä. Tällöin poistamalla niitä verkosta, saadaan kahden pisteen puu  $S$ , merkitään  $P_S = \{d, e\}$ . Lemman 1 nojalla on olemassa kuvaus  $f: A \rightarrow P_S = \{d, e\}$ , jonka kuva sisältää kaikki puun  $S$  lehdet. Mutta kumpikin pisteistä  $d, e$  on puun  $S$  lehti, joten  $f: A \rightarrow P_S$  on surjektio kolmen pisteen joukosta kahden pisteen joukkoon. Tällöin sen täytyy kuvata kaksi lähtöjoukon alkioita samalle maalijoukon alkioille ja viimeinen lähtöjoukon alkio - toiselle maalijoukon alkioille. Koska puu  $S \approx T_2$  on täysin symmetrinen, voidaan olettaa, että  $d$  on se alkio, jonka alkukuva  $f^{-1}(d)$  koostuu kahdesta alkioista, voidaan olettaa niiden olevan  $a$  ja  $b$ . Toisin sanoen  $f(a) = f(b) = d$  ja  $f(c) = e$ . Lisäämällä lehdet  $a, b, c$  kahden alkion puuhun  $T_2$  kuvauksen  $f$  välityksellä, saadaan seuraava puu:



Jäljellä on tapaus, jossa viiden pisteen puulla  $T$  on kaksi lehteä, joiden joukkoa merkitään  $A = \{a, b\}$ . Poistamalla ne saadaan kolmen alkion puu  $S$ . Tiedetään, että tällainen puu on oleellisesti puu  $T_3$ , merkitään sen alkioita  $c, d, e$  kuten seuraavassa kuvassa:



Olkoon  $f: A \rightarrow P_S$ , kuvaus, joka liittää liittää  $T$ :n lehdet niiden naapureihin. Tämän kuvauksen kuva  $\text{Im } f$  sisältää molemmat  $S$ :n lehdet  $c, e$ . Koska  $A$ :ssä on tasan kaksi alkioita, ei ole muita vaihtoehtoja kuin liittää kumpaankin lehteen  $c, e$  yksi uusi lehti. Saadaan seuraava puu:

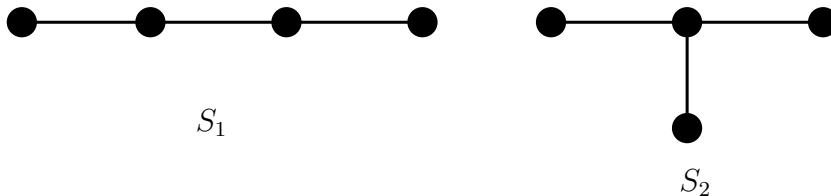


Isomorfiaa vaille on siis olemassa kolme erilaista viiden pisteen puuta.

Samalla tavalla voidaan jatkaa ja klassifioida seuraavaksi kuuden pisteen puuta, seitsemän pisteen puuta jne. Mitä enemmän tiedetään pienimpikokoisista puista, sitä helpompi on tutkia isompikokoisia.

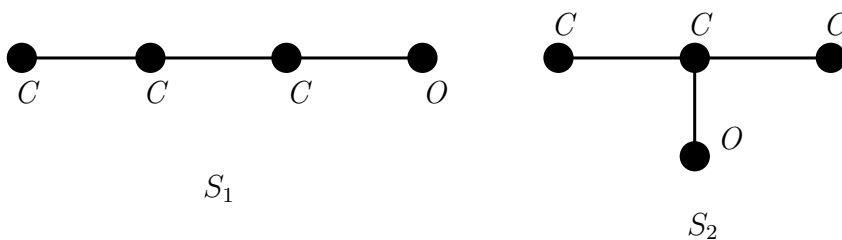
**Esimerkki 9.** Palataan esimerkkeihin, joissa käsitellään propanolin  $C_3H_7OH$  molekyylin rakennetta verkkoteorian näkökulmasta. Yritetään konstruoida tämän aineen molekyyliä vastaava verkko. Oletukset ovat seuraavia - verkossa on 12 pistettä, joista kolme (vastaavat hiiltä  $C$ ) ovat 4-asteista, yksi (vastaa happea  $O$ ) on 2-asteinen ja kahdeksan (vastaavat vetyä  $H$ ) ovat 1-asteisia. Lisäksi kemiillisestä teoriasta tiedetään, että yhden  $O$ -atomin naapureista on oltava  $H$ -atomi (tästä syystä kemiallisessa kaavassa yksi  $H$  esiintyy  $O$ :n kanssa muodossa  $OH$ ).

Olemme osoittaneet esimerkissä 5 yllä, että kyseinen verkko on puu  $T$ . Oletuksista seuraa, että tässä puussa on 12 pistettä, joista 8 ovat lehteä. Poistamalla nämä lehdet saadaan neljän pisteen puu  $S$ . Edellisen esimerkin mukaan isomorfiaa vaille on olemassa kaksi erilaista neljän pisteen puuta:



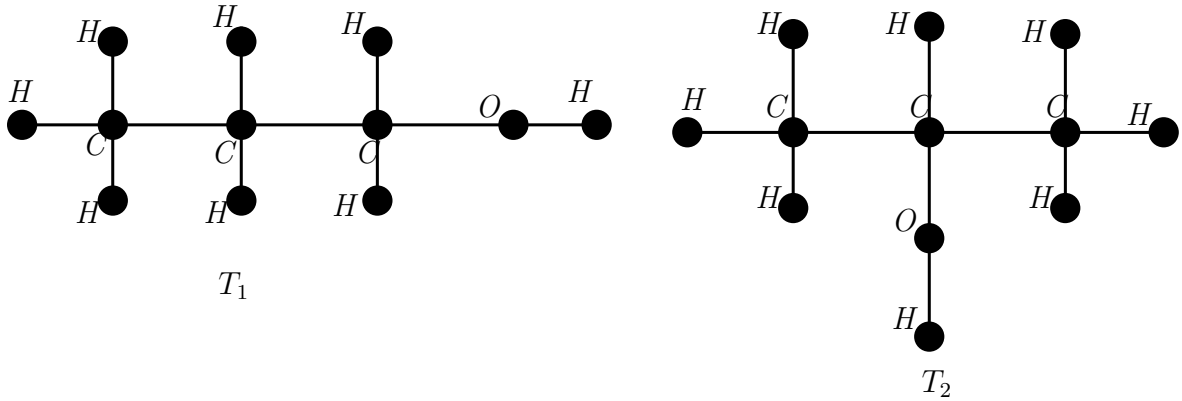
Kummassakin näistä puista happea vastaava solmu on välttämättä lehti. Nimittäin, olemme olettaneet, että toisen  $O$ -atomin kahdesta naapurista verkossa  $T$  on oltava  $H$ -atomi, eli lehti. Kun kaikki lehdet (eli  $H$ -atomit) poistetaan,  $O$ -atomista tulee 1-asteinen, eli lehti puussa  $S$ .

Näin ollen, kun pisteitä vastaavia atomia merkitään kuvaan, saadaan kaksi seuraavaa mahdollisuutta verkolle  $S$ :



Nyt pitää vain lisätä kumpaankin malliin takaisin kahdeksan lehteä, niin, että jokaisesta  $C$ -atomista tulee tasan 4-asteinen ja  $O$ -atomista tulee 2-asteinen. Helposti nähdään, että kummankin mallin kohdalla tämä voidaan tehdä tasan yhdellä tavalla:



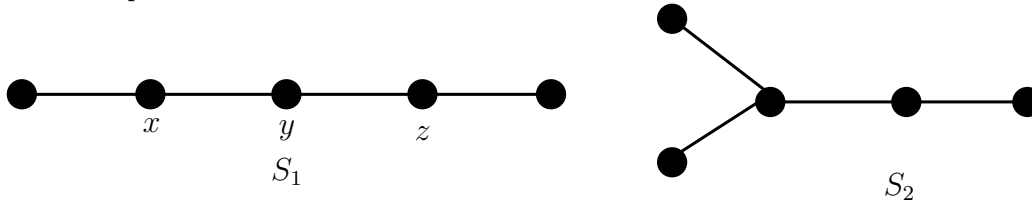


Verkko  $T_1$  esittää propanolin muotoa, jota kutsutaan 1-propanoliksi. Verkko  $T_2$  esittää propanolin toista isomeeri-muotoa, jota kutsutaan 2-propanoliksi.

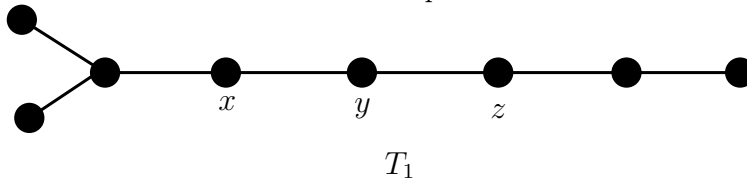
**Huomaus:** Jos lisäoletuksesta ”O:n toinen naapuri on H-atomi” luovutaan, mahdollisia verkkoja on enemmän. Tällöin kuitenkin kyse ei olisi enää propanolin molekyylistä kemian näkökulmasta.

**Esimerkki 10.** Klassifoidaan isomorfiavaikkeitä kaikki puut  $T$ , joissa on 8 pistettä, joista tasan kolme ovat lehtiä.

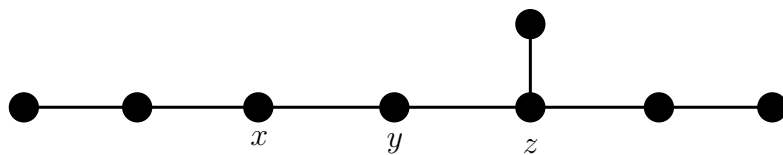
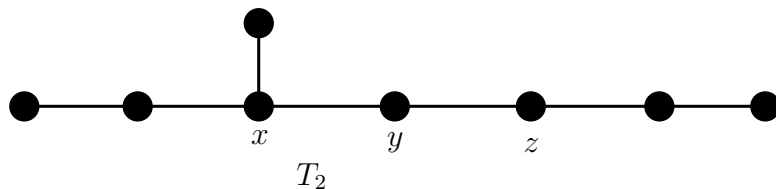
Olkoon  $T$  sellainen puu. Merkitään sen lehtien joukkoa  $A$ :llä,  $A = \{a, b, c\}$ . Kun puusta  $T$  poistetaan kaikki sen lehdet, jäljellä on viiden pisteen puu  $S$ . Merkitään tämän puun lehtien joukkoa  $B$ :llä. Lisäksi on olemassa kuvaus  $f: A \rightarrow P_S$ , jolle pätee  $B \subset \text{Im } f$ . Koska  $|A| = 3$ ,  $f$ :n kuva-joukossa voi olla korkeintaan kolme alkioa, joten  $B$ :ssäkin on korkeintaan kolme alkioa. Toisin sanoen viiden pisteen puulla  $S$  on joko kaksi tai kolme lehteä. Esimerkin 8 nojalla tiedämme, että isomorfiavaikkeitä  $S$  on yksi kahdesta seuraavasta puusta:



Vaihtoehto 1:  $S = S_1$ . Tällöin  $|B| = 2$  ja on olemassa kaksi mahdollisuutta:  $B = \text{Im } f$  tai  $|\text{Im } f| = 3$ . Ensimmäisessä tapauksessa kaksi  $A$ :n alkioita liitetään  $S_1$ :n yhteen lehteen ja kolmas  $A$ :n alkio liitetään  $S_1$ :n toiseen lehteen. Koska  $S_1$ :n molemmat lehdet ovat symmetrisessä asemassa, ei ole merkitystä kumpaankin liitetään yksi alkio ja kumpaankin liitetään kaksi. Saadaan seuraava puu:

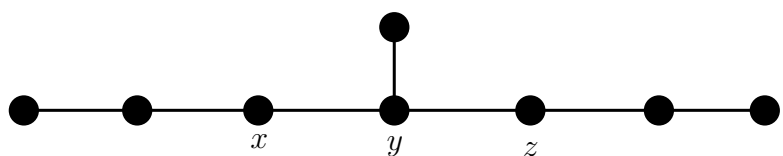


Toinen mahdollisuus on  $B \subsetneq \text{Im } f$ . Tällöin kumpaankin  $B$ :n pisteeseen liitetään tasan yksi  $A$ :n alkio ja kolmas jäljellä oleva  $A$ :n alkio on liitettävää johonkin  $S_1$ :n pisteeseen, joka ei ole lehti, eli yhteen pisteistä  $x, y, z$  (kts. kuva alla). Tapaukset jossa  $x \in \text{Im } f$  tai  $z \in \text{Im } f$  ovat selvästi täysin symmetrisiä ja antavat isomorfiavaikkeitä saman puun:



Tämä verkko on isomorfinen  $T_2$ :n kanssa.

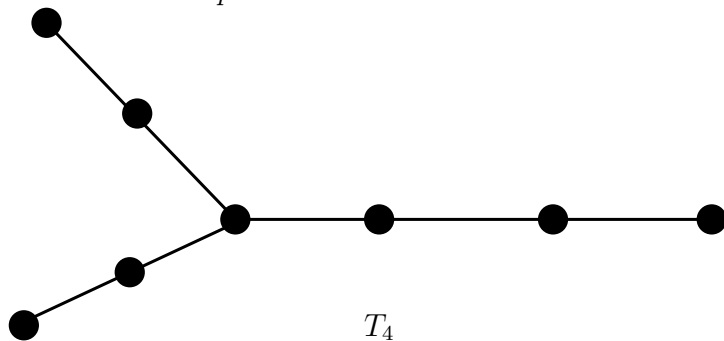
Sen sijaan tapaus  $y \in \text{Im } f$  on eri tapaus, joka johtaa seuraavaan puuhun:



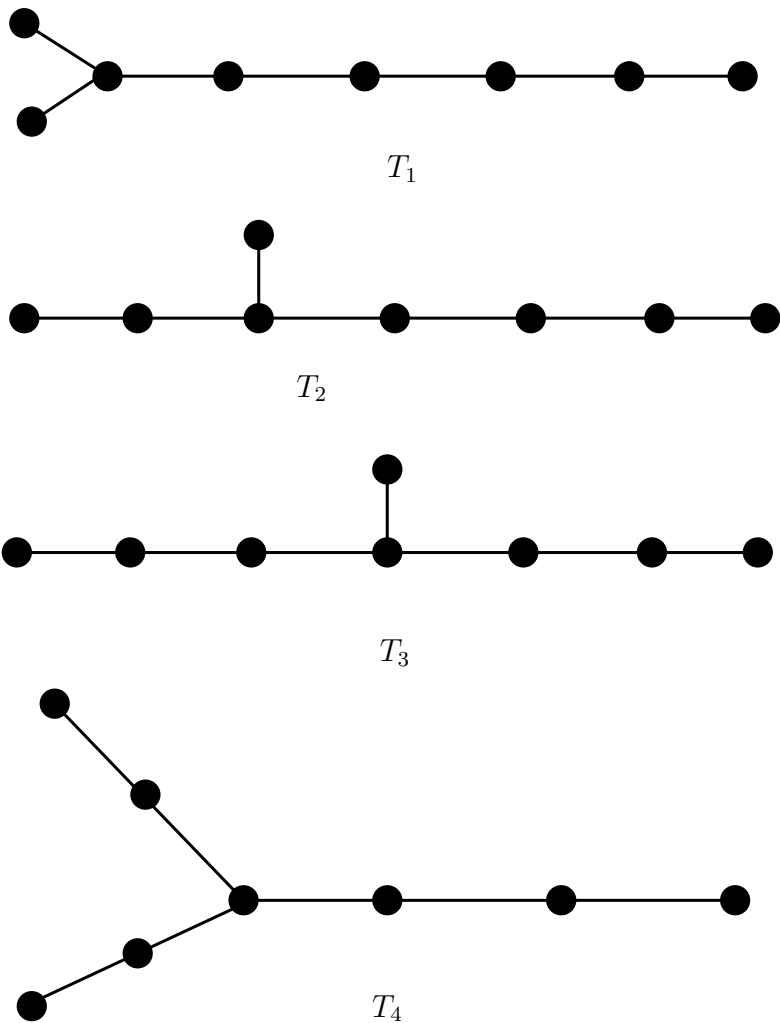
$T_3$

Ei ole vaikeata verifioida, että verkot  $T_2$  ja  $T_3$  eivät ole tosiaankaan isomorfisia (tarkista!).

Vaihtoehto 2:  $S = S_2$ . Tällöin  $|B| = 3$  ja, koska  $|A| = 3$  myös, ainoa mahdollisuus on se, että  $f$  on bijektio. Toisin sanoen jokaiseen  $S_2$ :n lehteen liitetään tasan yksi uusi lehti. Saadaan seuraava puu:



Olemme valmiit. Isomorfiaa vaille on siis olemassa tasan neljä erilaista 8 pisteen puuta, joilla on kolme lehteä. Seuraavassa kuvassa esitetään ne kaikki:



*Tosin emme tarkistaneet, että kaikki löydetyt mallit todellakin ovat ei-isomorfisia keskenään. Tämän verifointi jätetään lukijalle.*

## Virittävät puut

Olkoon  $G$  verkko. Sen aliverkko  $H$  on verkon  $G$  **virittävä puu** jos  $H$  on puu ja  $P_H = P_G$ . Koska jokainen puu on yhtenäinen, on selvä, että virittävä puu voi olla ainoastaan yhtenäisellä verkolla. Kääntäen jokaisella yhtenäisellä puulla on (ainakin yksi) virittävä puu (Lause IV 2.3).

Virittävä puu voidaan ajatella olevan tapa valita yhtenäisestä verkosta  $G$  ”minimaalinen määrä yhteyksiä”, jotka riittävät tekemään verkosta yhtenäisen. Tästä syystä virittävän puun määrittäminen on tärkeitä käytännön tilanteissa, joissa periaatteessa on käytettävissä paljon erilaisia yhteyksiä, mutta niistä riittää valita vain mahdollisimman pieni joukko, jolla pärjää. Tällainen valinta saattaa esimerkiksi minimoida tilanteeseen liittyviä kustannuksia. Painotettujen verkkojen teoriassa (jota emme käsittele) on tärkeitä osata etsiä viritettävistä puista *mahdollisimman edullisen*, eli sellaisen jonka kokonaispaino on mahdollisimman pieni. Tämän ongelman ratkaisemiseksi on kehitetty tehokkaita ja tarkkoja algoritmeja.

On olemassa erilaisia menetelmiä, joiden avulla voidaan käytännössä konstruoida an-

netun yhtenäisen verkon  $G$  virittävä puu.

**Menetelmä 1:** Jos  $G$  on valmiiksi puu, se on itsensä virittävä puu ja ollaan valmiit. Muuten  $G$ :ssä on pakko olla rengas  $R$ . Poistetaan  $G$ :stä jokin tämän renkaan viiva  $v \in R$ . Lauseen III 1.1 nojalla näin saatu verkko  $G_1 = G - v$  on edelleenkin yhtenäinen ja siinä on vähemmän viivoja kuin  $G$ :ssä. Jos  $G_1$  ei ole puu, jatketaan samalla tavalla poistamalla siitä jonkun sen renkaan viiva. Loppujen lopuksi, kun viivojen määrä saavuttaa arvon  $p_G - 1$ , jäljellä on virittävä puu.

Painotetun verkon tapauksessa tällä menetelmällä saavutetaan painoltaan pienin virittävä puu, jos jokaisessa vaiheessa valitaan poistettava viiva  $v$  sillä tavalla, että sen paino on suurin mahdollinen (niistä viivoista, jotka kuuluvat johonkin renkaaseen).

**Menetelmä 2:** Edellisessä menetelmässä lähdetään koko verkosta ja "tuhotaan" sen renkaita yksi viiva kerralla. Verkko pysyy yhtenäisenä virittävänä verkkona jokaisessa vaiheessa. Tässä seuraavassa menetelmässä edetään toiseen suuntaan - aloitetaan mahdollisimman pienestä *asyklisestä ja yhtenäisestä* aliverkosta ja laajennetaan se yksi piste kerrallaan, kunnes kaikki pisteet ovat aliverkossa. Konstruoitu verkko pysyy algoritmin jokaisessa vaiheessa yhtenäisenä ja asyklisenä eli puuna.

Tarkempi kuvaus menetelmästä on seuraava. Aloitetaan mistä tahansa verkon pisteestä  $x \in P_G$  ja asetetaan ensimmäisessä välivaiheessa  $H = G_1$ :ksi triviaali yhden pisteen aliverkko. Sitten lisätään siihen jokin  $x$ :n seuraaja  $y$  ja niitä yhdistävä viiva  $v = \overline{xy}$  eli konstruoidaan verkko  $G_1 + v$ . Näin saatu verkko on selvästi yhtenäinen ja asyklinen eli on puu. Näin jatketaan. Algoritmin jokaisessa välivaiheessa lisätään edellisessä välivaiheessa alipuuhun  $H$  jokin (tasan yksi!) uusi viiva muotoa  $v = \overline{xy}$ , missä  $x \in P_H$ ,  $y \notin P_H$ . Ei ole vaikeata osoittaa, että tällöin  $H + v$  pysyy puuna. Näin lisätään uusia pisteitä ja viivoja kunnes pätee  $P_H = P_G$ . Tässä vaiheessa  $H$  on virittävä puu.

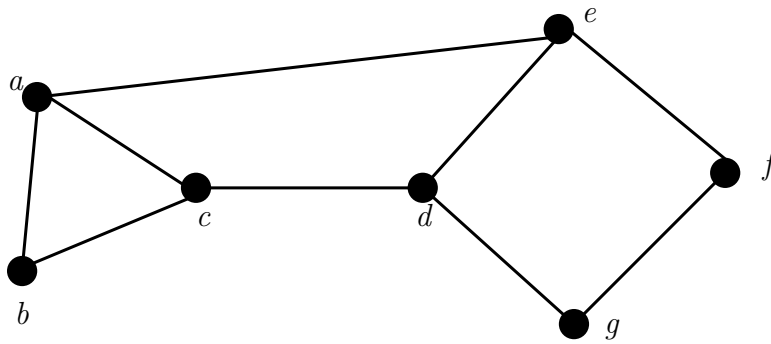
Painotetun verkon tapauksessa tällä menetelmällä saavutetaan painoltaan pienin virittävä puu, jos jokaisessa vaiheessa valitaan lisättävä viiva  $\overline{xy}$  sillä tavalla, että sen paino on pienin mahdollinen.

**Menetelmä 3:** Tätä menetelmä kutsutaan "ahneeksi" (engl. greedy), sillä se kuuluu niin sanottuihin ahneisiin algoritmeihin. Algoritmi on *ahne* jos se on konstruoitu sillä tavalla, että se yrittää maksimoida voittoaan jokaisessa välivaiheessa sokeasti välittämättä siitä, että sen valinnat saattavat myöhemmin kostautua. Toimivassa ahneessa algoritmilla tällainen "lyhytkatseinen ja itsekäs" strategia osoittautuu lopuksi kannattavaksi, tästä nimitys "ahne" tulee.

Tässä menetelmässä aloitetaan aliverkon konstruktio jostakin viivasta. Sen jälkeen lisätään konstruoitavaan aliverkkoon toinen, mielivaltainen viiva. Sen jälkeen lisätään kolmas, joka saa olla taas mielivaltainen paitsi, että se ei saa muodostaa rengasta aikaisemmin valittujen kanssa. Näin jatketaan - jokaisessa vaiheessa lisätään mikä vaan viiva, kunhan sen lisääminen ei tuota aliverkkoon mitään syklejä. Ainoa vaatimus on siis, että aliverkko pysyy jokaisessa vaiheessa asyklisenä, sen ei tarvitse edes olla yhtenäinen. Kun aliverkossa on kaikki verkon pisteet, virittävä puu on valmis. Algoritmin pätevyyden perustelu sivutetaan.

Erityisesti käyttökelpoinen ahne algoritmi on painotetuille verkoille. Tällöin jokaisessa vaiheessa lisätään mahdollisimman edullisin eli painoltaan pienin viiva. Näin saadaan lopuksi painoltaan pienin virittävä puu.

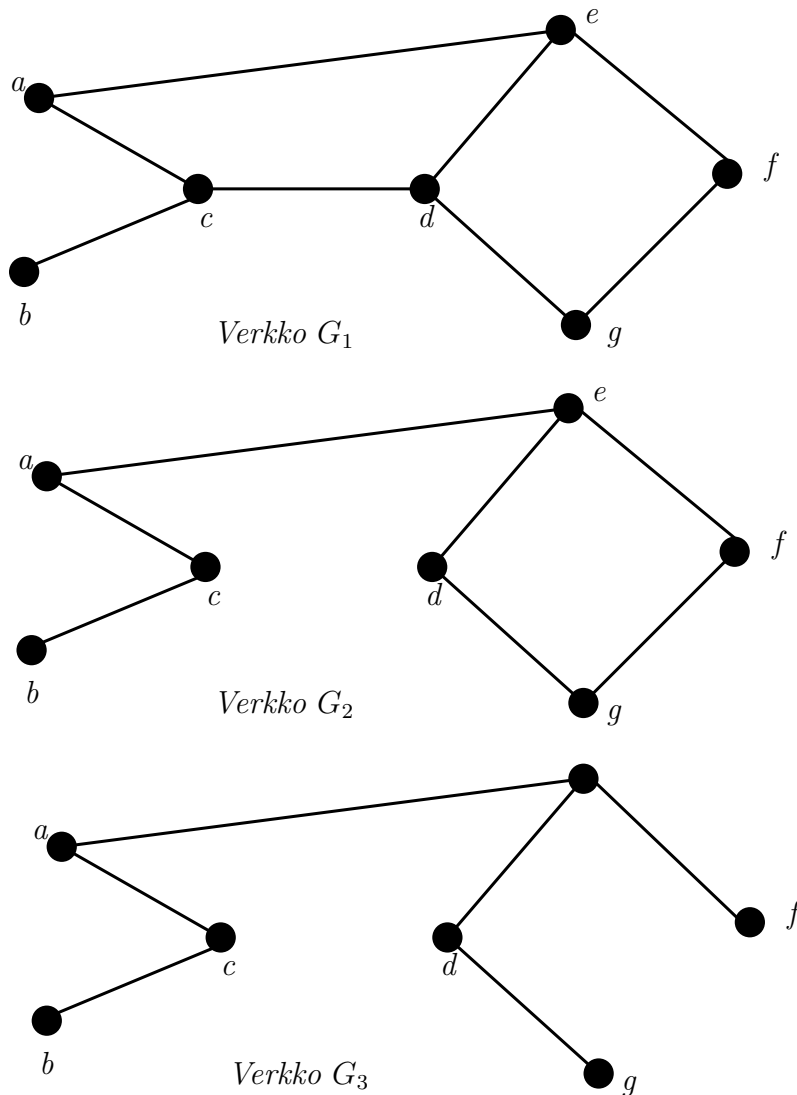
**Esimerkki 11.** Etsitään virittävä puu seuraavalle yhtenäiselle verkolle  $G$ :



**Menetelmä 1:** Verkossa on 7 pistettä ja 9 viivaa. Poistetaan yksi viiva kerralla, kunnes viivoja on 6. Jokaisessa vaiheessa poistetaan sellainen viiva, joka on jonkun tämän vaiheen verkon renkaan puu. Algoritmi joudutaan käymään läpi  $9 - 6 = 3$  kertaa.

Alussa verkon jokainen viiva on jonkun renkaan viiva, joten poistetaan mikä vaan viiva, esimerkiksi viiva  $v_1 = \overline{ab}$ . Sen jälkeen uudessa verkossa  $G_1 = G - v_1$  viiva  $\overline{bc}$  ei enää ole minkään renkaan viiva, joten sitä ei voi poistaa, kaikki muut viivat taas esiintyvät edelleenkin jossakin verkon  $G - v_1$  syklissä, poistetaan seuraavaksi verkosta  $G'$  vaikkapa viiva  $v_2 = \overline{cd}$ . Uudessa verkossa  $G_2 = G_1 - v_2$  viivat  $\overline{ac}$  ja  $\overline{ae}$  ovat siltoja, niitä ei voi poistaa. Poistetaan seuraavaksi vaikkapa viiva  $v_3 = \overline{fg}$ . Näin saatu verkko  $G_3 = G_2 - v_3$  on jo puu. Virittävä puu on konstruoitu.

Ratkaisun välivaiheet:



Kuten konstruktioista huomaa, jokaisessa vaiheessa oli paljon valintoja. Virittävä puu ei yleensä ole missään nimessä yksikäsitteinen.

Konstruoidaan vielä toinen esimerkki verkon  $G$  virittävästä puusta käyttämällä **menetelmää 2**. Olkoon  $A_1 = \{a\}$  ja  $G_1$  joukon  $A_1$  virittämä (triviaali) aliverkko (aloituspisteen valinnalla ei ole merkitystä).

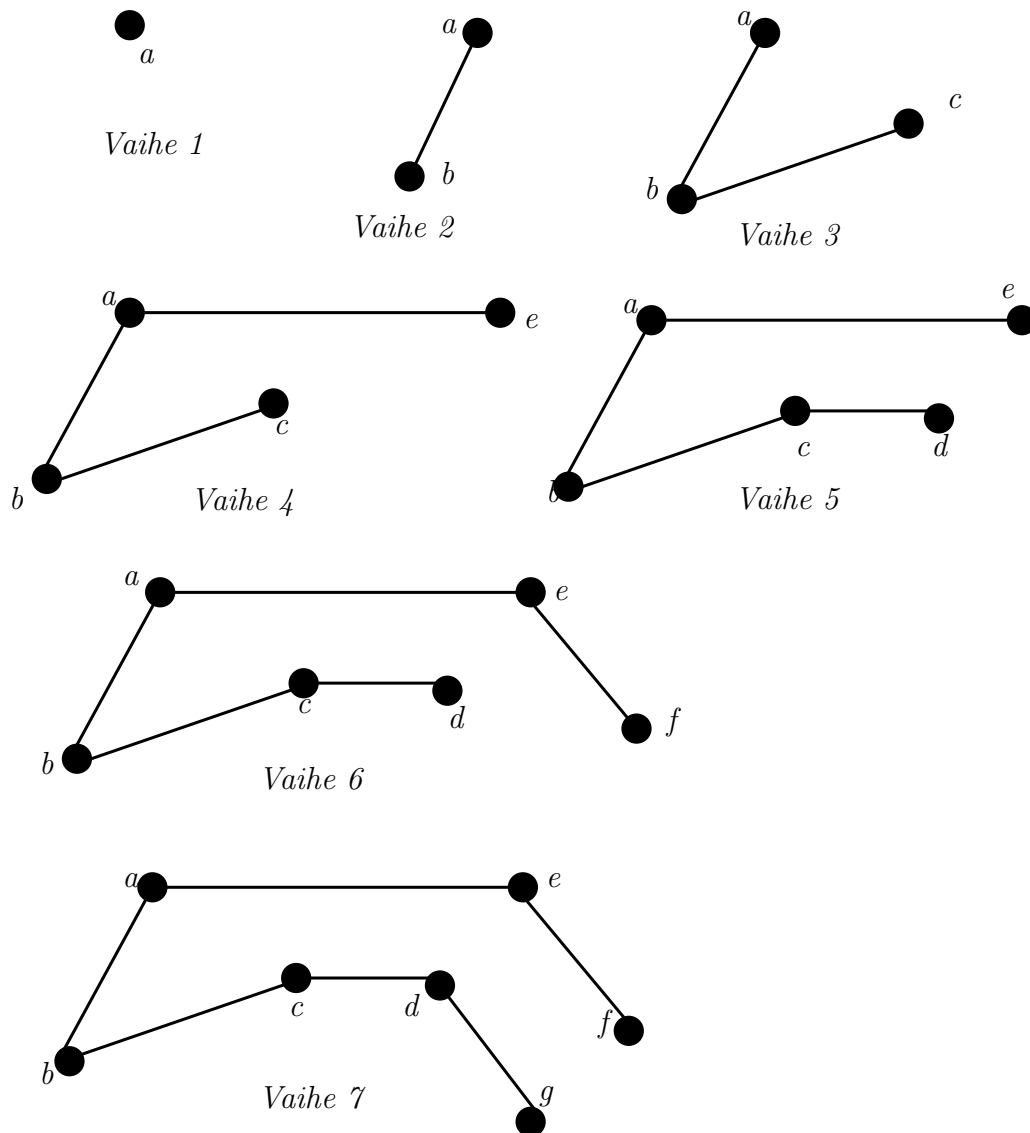
Seuraavaksi lisätään verkkoon  $G_1$  jokin  $a$ :n seuraaja ja siihen vievä viiva. Lisätää vaikkapa solmu  $b$  ja viiva  $\overline{ab}$ , jolloin seuraavassa vaiheessa saadaan aliverkko  $G_2$ , joka on kahden pisteen  $a, b$  virittämä aliverkko.

Sen jälkeen lisätään jokin uusi piste, joka on yhteydessä  $a$ :han tai  $b$ :hen, esimerkiksi  $c$  ja viiva  $\overline{bc}$  (toinen valinta olisi esimerkiksi viiva  $\overline{ac}$ , tämä valinta johtaisi toiseen virittävään puuhun).

Seuraavaksi lisätään vaikkapa viiva  $\overline{ae}$  ja solmu  $e$ , sen jälkeen viiva  $\overline{cd}$  ja solmu  $d$ , sen jälkeen viivat  $\overline{ef}$  ja sen jälkeen  $\overline{dg}$ . Nyt kaikki pisteet ovat mukana ja ollaan valmiit.

Periaate on jokaisessa välivaiheessa sama - jos edellisessä vaiheessa konstruoitu asyklinen verkko  $H = G_i$  ei ole vielä virittävä puu, otetaan jokin viiva, jonka toinen päätepiste on joukossa  $P_H$  ja toinen ei ole, ja lisätään se (ja sen toinen päätepiste) verkkoon  $H$ .

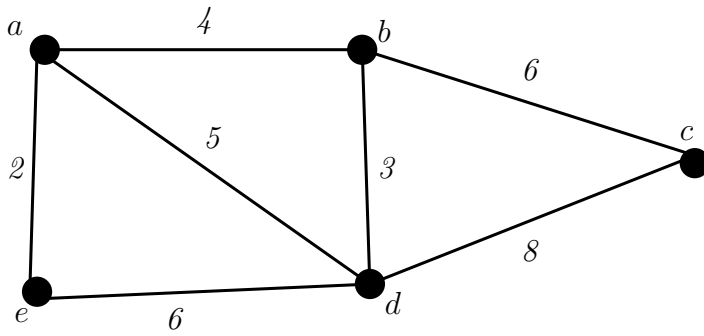
Ratkaisun välivaiheet:



**Esimerkki 12.** Vaikka emme varsinaisesti muuten käsittele kursilla painotettuja verkkoja, käydään läpi esimerkin kautta minimaalisen virittävän puun konstruktiota painotetulle verkolle.

Palautetaan mieleen, että painotettu verkko on systeemi  $(G, \phi)$ , missä  $G$  on verkko ja  $\phi: V_G \rightarrow \mathbb{R}$  on kuvaus, joka liittää jokaiseen verkon  $G$  viivan sen painon. Painotetun verkon  $G$  minimaalinen virittävä puu on sellainen sen virittävä puu, jonka kokonaispaino (eli sen viivojen painojen summa) on mahdollisimman pieni.

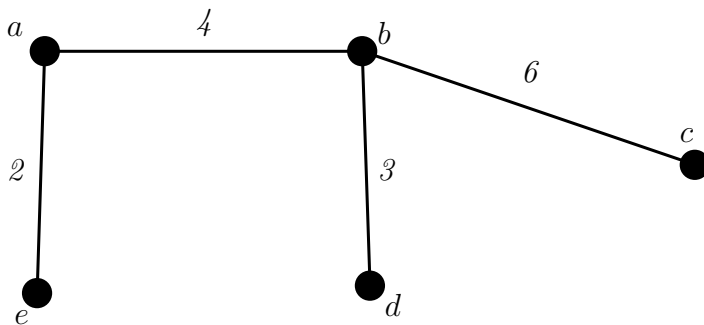
Etsitään yllä mainituilla algoritmeilla minimaalinen virittävä puu seuraavasta painotetusta verkosta:



Viivojen painot on merkitty kuvassa.

Kokeillaan ensin **ahnetta algoritmia** eli menetelmän 3 mukaista konstruktiota. Aloitetaan valitsemalla painoltaan pienin viiva, joka on viiva  $\overline{ae}$  (paino 2). Sen jälkeen lisätään seuraavaksi pienin eli viiva  $\overline{bd}$  (paino 3), seuraavaksi  $\overline{ab}$  (paino 4). Seuraavaksi pienin painoltaan viiva olisi viiva  $\overline{ad}$  (paino 5), mutta tässä vaiheessa sitä ei voi lisätä konstruoitavaan puuhun, sillä se muodostaisi syklin jo aiemmin valittujen viivojen  $\overline{ab}$  ja  $\overline{bd}$  kanssa. Samasta syystä emme voi valita tässä vaiheessa viivaa  $\overline{ed}$  (se muodostaisi syklin  $(a, b, d, e, a)$  aikaisemmin valittujen viivojen kanssa). Näin ollen ohitetaan nämä ja valitaan seuraavaksi viiva  $\overline{bc}$  (paino 6). Ollaan valmiit, sillä valitut viivat muodostavat jo tässä vaiheessa virittävän puun.

Saadaan siis seuraava minimaalinen virittävä puu, jonka paino on  $2 + 3 + 4 + 6 = 15$ .



Seuraavaksi etsitään samasta verkosta minimaalinen virittävä puu **menetelmällä 1**. Poistetaan jokaisessa välivaiheessa jonkun renkaan viiva, valitsemalla kaikista vaihtoehdoista painavin. Aluksi kaikki viivat ovat jossakin renkaassa ja niistä painavin on  $\overline{cd}$  (paino 8). Poistetaan se. Huomaa, että sen jälkeen viiva  $\overline{bc}$  ei ole enää missään renkaassa, joten sitä ei oteta huomioon. Muista viivoista painavin on viiva  $\overline{ed}$  (paino 6). Sen jälkeen poistetaan viiva  $\overline{ad}$  (paino 5). Tässä vaiheessa puu on valmis. Saadaan sama puu kuin olemme saanneet edellä menetelmällä 3. Painotettujen verkkojen kohdalla minimaalinen virittävä puu on usein yksikäsitteinen (mutta ei aina).

Lopuksi katsotaan vielä, miten minimaalisen virittävän puun konstruktio menisi **menetelmällä 2**. Aloitetaan mistä tahansa pisteestä, esimerkiksi pisteestä  $b$ . Kaikista siitä lähtevistä viivoista viiva  $\overline{bd}$  on painoltaan pienin, joten lisätään se ja piste  $d$  puuhun. Konstruoitettavan puun pistejoukko on tässä vaiheessa  $P_H = \{b, d\}$ . Tarkastellaan kaikki viivat joukosta  $P_H$  ja valitaan niistä painoltaan pieni. Se on viiva  $\overline{ab}$  (paino 4), joten lisätään se ja sen päätepiste  $a$ , jolloin joukosta  $P_H$  tulee  $\{a, b, d\}$ . Jatketaan samalla tavalla. Seuraavaksi lisätään  $\overline{ae}$ . Tässä vaiheessa ainoa jäljellä oleva piste on  $c$  ja pienin viiva joka vie siihen on  $\overline{bc}$ . Kun se lisätään puuhun, ollaan valmiit. Saadaan taas sama puu kuin edellä.



Verkolla on yleensä paljon erilaisia viritettäviä puita.

**Lause IV 2.6:** Täydellisellä verkolla  $K_n$  on tasan  $n^{n-2}$  virittävää puuta.

**Huomautus:** Tulos ei tarkoita sitä, että isomorfiaa vaille olisi  $n^{n-2}$  erilaista  $n$  pisteen puuta, sillä verkolla  $K_n$  voi olla erilaisia, mutta keskenään isomorfisia virittäviä puita.

**Lisätieto:** Yleisesti virittävien puiden lukumäärä voidaan laskea matriisiesitysten avulla. Nimittäin olkoon  $G$  verkko. Laitetaan sen solmut johonkin järjestykseen  $P_G = \{v_1, \dots, v_n\}$  ja muodostetaan verkon yhteysmatriisi  $A$  tämän järjestyksen suhteen. Olkoon  $D$  diagonaalimatriisi, jolle pätee  $d_{ii} = d(v_i)$  ja olkoon  $E = D - A$ . Tällöin verkon  $G$  virittävien puiden lukumäärä on sama kuin matriisin  $E$  mikä tahansa niin sanottu *kotekijä*. Tämä on esimerkki matriisiesitysten sovelluksesta verkkoteoriassa.

Virittävien puiden avulla voidaan tutkia verkon renkaita ja renkaistoja.

**Lemma IV 2.7:** Olkoon  $T$  jokin (yhtenäisen) verkon  $G$  virittävä puu ja olkoon  $v \in V_G \setminus V_T$ . Tällöin on olemassa sellainen verkon  $G$  rengas  $R$  jolle pätee  $R \setminus V_T = \{v\}$ . Lisäksi tällainen rengas on itse asiassa yksikäsitteinen (Lemma IV 2.8).

**Lemma IV 2.8:** Olkoon  $T$  jokin (yhtenäisen) verkon  $G$  virittävä puu ja olkoot  $Q, Q'$  sellaisia verkon  $G$  renkaistoja, joille pätee  $Q \setminus V_T = Q' \setminus V_T$ . Tällöin  $Q = Q'$ .

**Lause IV 2.9:** Olkoon  $T$  jokin (yhtenäisen) verkon  $G$  virittävä puu ja olkoon  $V \subset V_G \setminus V_T$ . Tällöin on olemassa yksikäsitteinen verkon  $G$  renkaisto  $Q$  jolle pätee  $Q \setminus V_T = V$ . Huomaa, että Lemma IV 2.7 on Lauseen IV 2.9 erikoistapaus, jossa  $V$  on yksiö.

Olkoon  $T$  verkon  $G$  virittävä puu. Jokaisella  $v \in V_G \setminus V_T$  symbolilla  $R(v; T)$  merkitään sitä verkon  $G$  rengasta jolle pätee

$$R(v; T) \setminus V_T = \{v\}.$$

Lemmojen IV 2.7 ja IV 2.8 mukaan tällainen rengas on olemassa ja yksikäsitteinen. Kutsumme renkaita  $R(v; T)$ ,  $v \in V_G \setminus V_T$ , verkon  $G$  **perusrenkaiksi** virittävän puun  $T$  suhteen. Huomaa, että perusrenkaat riippuvat virittävän puun valinnasta.

Osoittautuu, että perusrenkaat ”virittävät” verkon renkaistoryhmän  $(\mathbf{R}(G), \Delta)$  seuraavassa mielessä:

(muistutus:  $\mathbf{R}(G)$  on kaikkien  $G$ :n renkaistojen muodostama joukko, jossa on määritelty operaatio  $\Delta$  - joukkojen symmetrinen erotus).

**Korollari IV 2.10:** Olkoon  $T$  jokin (yhtenäisen) verkon  $G$  virittävä puu ja olkoon  $Q \in \mathbf{R}(G)$  jokin sen renkaisto. Tällöin on olemassa  $v_1, \dots, v_n \in V_G \setminus V_T$  siten, että

$$Q = R(v_1; T) \Delta R(v_2; T) \Delta \dots \Delta R(v_n, T).$$

Tämäntyyppinen esitys  $Q$ :lle on lisäksi *yksikäsitteinen* alkioden  $v_1, \dots, v_n$  järjestystä vaille.

**Huomautus:** Olemme määritelleet symmetrisen erotuksen kahdelle joukolle,

$$A \triangle B = A \setminus B \cup B \setminus A.$$

Kolmelle tai useammalle joukolle symmetrinen erotus määritellään induktiivisesti,

$$A \triangle B \triangle C = (A \triangle B) \triangle C,$$

ja yleisesti

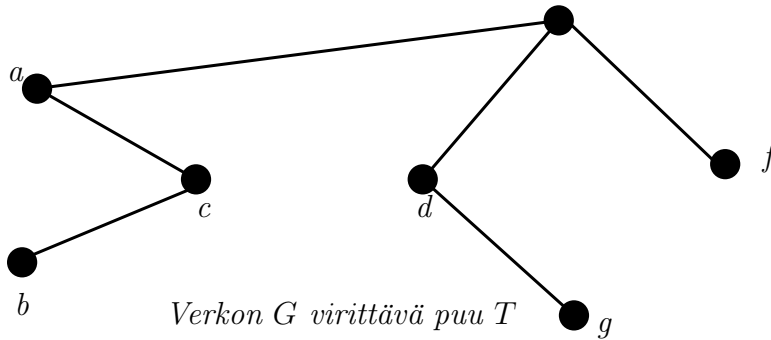
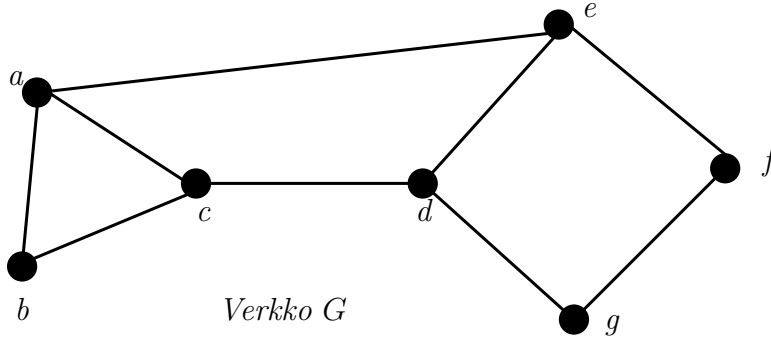
$$A_1 \triangle A_2 \triangle \dots \triangle A_n = (A_1 \triangle A_2 \triangle \dots \triangle A_{n-1}) \triangle A_n.$$

Voidaan osoittaa (Junnila, Lemma I 1.14), että joukko  $A_1 \triangle A_2 \triangle \dots \triangle A_n$  koostuu täsmälleen niistä alkioista  $x$ , jotka kuuluvat tasan **parittoman moneen** joukoista  $A_1, A_2, \dots, A_n$ .

**Korollaari IV 2.11:** Yhtenäiselle joukolle  $G$  on voimassa

$$|\mathbf{R}(G)| = 2^{v_G - p_G + 1}.$$

**Esimerkki 13.** *Esimerkissä 11 olemme tarkastelleet erästä verkkoa  $G$  ja määritelleet sille erään virittävän puun  $T$ :*



Verkon viivoista tasan kolme eivät kuulu puuhun  $T$ , nimittäin viivat  $v_1 = \overline{ab}$ ,  $v_2 = \overline{cd}$ ,  $v_3 = \overline{fg}$ . Ei ole vaikeata päätellä suoraan kuvasta, että näiden viivojen perusrenkaat puun  $T$  suhteen ovat

$$\begin{aligned} R(v_1, T) &= \{\overline{ab}, \overline{ac}, \overline{bc}\}, \\ R(v_2, T) &= \{\overline{ac}, \overline{cd}, \overline{de}, \overline{ae}\}, \\ R(v_3, T) &= \{\overline{ed}, \overline{dg}, \overline{gf}, \overline{fe}\}. \end{aligned}$$

Korollaarin IV 2.10 mukaan kaikki  $G$ :n renkaiston saadaan näiden kaikkina mahdollisina symmetrisinä erotuksina (mukaan lukien tyhjä tapaus). Näin ollen verkon  $G$  renkaistot ovat

$$\emptyset,$$

$$\begin{aligned}
R(v_1, T) &= \{\overline{ab}, \overline{ac}, \overline{bc}\}, \\
R(v_2, T) &= \{\overline{ac}, \overline{cd}, \overline{de}, \overline{ae}\}, \\
R(v_3, T) &= \{\overline{ed}, \overline{dg}, \overline{gf}, \overline{fe}\}, \\
R(v_1, T) \triangle R(v_2, T) &= \{\overline{ab}, \overline{bc}, \overline{cd}, \overline{de}, \overline{ae}\}, \\
R(v_1, T) \triangle R(v_3, T) &= \{\overline{ab}, \overline{ac}, \overline{bc}, \overline{ed}, \overline{dg}, \overline{gf}, \overline{fe}\}, \\
R(v_2, T) \triangle R(v_3, T) &= \{\overline{ac}, \overline{cd}, \overline{dg}, \overline{gf}, \overline{fe}, \overline{ae}\}, \\
R(v_1, T) \triangle R(v_2, T) \triangle R(v_3, T) &= \{\overline{ab}, \overline{bc}, \overline{cd}, \overline{dg}, \overline{gf}, \overline{fe}, \overline{ea}\}.
\end{aligned}$$

Renkaistoja on  $8 = 2^{9-7+1}$ , kuten pitääkin olla (Korollari IV 2.11).