0.1 Stromy

Definice 0.1.1. Graf, který neobsahuje kružnice, nazýváme **les** (angl. *forest*). Souvislý les nazýváme **strom** (angl. *tree*).

Poznámka. Každý les je bipartitní graf.

Pozorování 0.1.2. *Graf $G = (V, E)$ je strom právě tehdy, když pro každé $u, v \in V, u \neq v$ existuje právě jedna cesta z u do v.*

Důkaz. $\boxed{\Rightarrow:}$

G je strom $\Rightarrow$ G je souvislý $\Rightarrow$ pro každé dva různé vrcholy u, v existuje cesta z u do v. Dále postupujme sporem: nechť existují 2 různé cesty z u do v. Potom najdeme první vrchol ve směru od u, kde se obě cesty rozdělí, a dále najdeme první vrchol, kde se opět spojí. Úseky obou cest mezi nalezenými vrcholy tvoří zřejmě kružnici, což je spor.

$\boxed{\Leftarrow:}$

Mezi každými dvěma vrcholy vede právě 1 cesta $\Rightarrow$ G je souvislý. Nyní opět sporem: nechť v G existuje kružnice. Vezmeme-li libovolné dva vrcholy z této kružnice, je zřejmé, že mezi nimi existují dvě různé cesty. □

Věta 0.1.3. *Nechť $G = (V, E)$ je souvislý, $n = \#V$. Potom G je strom, právě když $\#E = n - 1$.*

Důkaz. Při důkazech obou směrů ekvivalence postupujme indukcí podle n:

$\boxed{\Rightarrow:}$

Nechť G je strom.

Pro $n = 1$ máme zřejmě $E = \emptyset$, takže $\#E = 0 = 1 - 1$.

Indukční krok: Nechť G je strom na n vrcholech, $e = \{u, v\} \in E$ jeho libovolná hrana. Sestrojíme graf $\tilde{G} = (V, E \backslash e)$. Potom $\tilde{G}$ je les, neboť určitě není souvislý: mezi každými dvěma vrcholy existovala totiž jediná cesta, tudíž i mezi u a v existovala cesta jen po hraně e. Počet komponent grafu $\tilde{G}$ je 2, kdyby to bylo více, nemohli bychom vrácením jedné hrany e získat souvislý graf. Tyto komponenty jsou tedy stromy, nechť mají počty vrcholů k a $n - k$. Potom mají počty hran $k - 1$ a $n - k - 1$, a po přidání hrany e do $\tilde{G}$ získáme zpět graf G, jenž má počet hran $(k - 1) + (n - k - 1) + 1 = n - 1$.

$\boxed{\Leftarrow:}$

Nechť $\#E = n - 1$. Platí $\sum_{i \in V} d(i) = 2\#E = 2(n - 1)$, a G je souvislý, tudíž $d(i) \geq 1$ pro každý $i \in V$. Proto existuje vrchol i takový, že $d(i) = 1$. Sestrojíme graf $\tilde{G} = (V \backslash i, E \backslash \{i, x\})$, kde x je vrchol, do nějž vede jediná hrana z i. Potom je $\tilde{G}$ stále souvislý (žádná cesta mezi dvěma vrcholy u, v $(u \neq i, v \neq i)$ samozřejmě nevedla přes i), a tudíž z indukčního předpokladu je to strom, jenž má $n - 1$ vrcholů a $n - 2$ hran. Přidáme-li zpětně vrchol i a hranu $\{i, x\}$ do $\tilde{G}$, kružnici nevytvoříme, a tedy vznikne strom na n vrcholech s $n - 1$ hranami. □

Věta 0.1.4. *Nechť $n \geq 2$. Potom existuje n^{n-2} stromů na n vrcholech.*

Než tuto větu dokážeme, vyslovíme a dokážeme následující lemma:

Lemma 0.1.5. *Nechť $(d_1, ..., d_n)$ jsou přirozená čísla taková, že $\sum d_i = 2(n - 1)$. Potom existuje*

$$N_{(d_1,...,d_n)} = \frac{(n-2)!}{(d_1 - 1)!(d_2 - 1)! \cdots (d_n - 1)!}$$

stromů na n vrcholech $\{1, ..., n\}$ takových, že $\forall i \in \hat{n}$ je $d(i) = d_i$.

Důkaz. Podmínka $\sum d_i = 2(n-1)$ je nutná pro to, aby $(d_1, ..., d_n)$ bylo skóre stromu. Dále důkaz vedeme indukcí podle n:

Pro $n = 2$ je $d_1 = d_2 = 1$ a vztah platí zřejmě.

Indukční krok $n - 1 \to n$: Ze stejného důvodu jako v minulém důkazu existuje k tak, že $d_k = 1$. Bez újmy na obecnosti („BÚNO“) předpokládejme, že $d_n = 1$ a mějme tedy graf se skóre $(d_1, ..., d_{n-1}, 1)$. Ubereme-li nyní n-tý vrchol, z něhož jediná hrana vedla do vrcholu i (kde nutně $d_i \geq 2$), získáme graf na $n-1$ vrcholech se skóre $(d_1, ..., d_i - 1, ..., d_{n-1})$. Ke každému stromu na n vrcholech se skóre $(d_1, ..., d_{n-1}, 1)$ tedy existuje $i \geq 2$ tak, že se tento strom skládá ze stromu na $n-1$ vrcholech se skóre $(d_1, ..., d_i - 1, ..., d_{n-1})$, z vrcholu n a z hrany $\{i, n\}$. Počet stromů na $n-1$ vcholech s uvedeným skóre ale umíme spočítat dle indukčního předpokladu. Proto platí:

$$N_{(d_1,...,d_n)} = \sum_{\substack{i=1 \\ d_i \geq 2}}^{n-1} N_{(d_1,...,d_i-1,...,d_{n-1})} = \sum_{\substack{i=1 \\ d_i \geq 2}}^{n-1} \frac{(n-3)!}{(d_1-1)! \cdots (d_i-2)! \cdots (d_n-1)!} =$$

...rozšíříme $(d_i - 1)$ a díky tomu můžeme sčítat již přes všechna i...

$$= \sum_{i=1}^{n-1} \frac{(d_i-1)(n-3)!}{(d_1-1)! \cdots (d_i-1)! \cdots (d_n-1)!} = \frac{(n-3)! \overbrace{\sum_{i=1}^{n-1}(d_i-1)}^{((\sum_1^n d_i)-1)-(n-1)=2(n-1)-1-(n-1)=n-2}}{\underbrace{0!}_{(d_n-1)!} \prod_{k=1}^{n-1}(d_k-1)!} =$$

$$= \frac{(n-2)!}{\prod_{k=1}^{n}(d_k-1)!}$$

$\square$

Nyní můžeme provést důkaz věty 0.1.4:

Důkaz. Označme si

$$(\forall i \in \hat{n})\,(\alpha_i = d_i - 1)\,.$$

Počet stromů na n vrcholech je roven

$$N = \sum_{\substack{(\forall i \in \hat{n})(d_i \geq 1) \\ \sum d_i = 2(n-1)}} N_{(d_1,...,d_n)} = \sum_{\substack{(\forall i \in \hat{n})(d_i \geq 1) \\ \sum d_i = 2(n-1)}} \frac{(n-2)!}{\prod_{k=1}^{n}(d_k-1)!} =$$

$$= \sum_{\substack{(\forall i \in \hat{n})(\alpha_i \geq 0) \\ \sum \alpha_i = n-2}} \frac{(n-2)!}{\prod_{k=1}^{n}\alpha_k!} = n^{n-2}.$$

$\square$

Poznámka. Poslední rovnost je aplikací zobecněné binomické věty, tzv. „k-nomické věty“, kterou lze celkem snadno dokázat indukcí použitím „standardní“ binomické věty. Jedná se o vztah

$$\sum_{\substack{(\forall i \in \hat{k})(\alpha_i \geq 0) \\ \sum \alpha_i = n}} \frac{n!}{\prod_{j=1}^{n}\alpha_j!} x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \cdots x_k^{\alpha_k} = \sum_{\substack{(\forall i \in \hat{k})(\alpha_i \geq 0) \\ \sum \alpha_i = n}} \binom{n}{\alpha_1}\binom{n-\alpha_1}{\alpha_1} \cdots \binom{n - \sum_1^{k-1}\alpha_j}{\alpha_1} x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \cdots x_k^{\alpha_k} =$$

$$= (x_1 + x_2 + ... + x_k)^n.$$

Příklad. Molekuly acyklických uhlovodíků si lze představit jako stromy, kde vrcholy představují atomy uhlíku (C) a vodíku (H). Hrany pak představují vazby mezi nimi. Jak známo, uhlík je čtyřvazný a vodík je jednovazný. Naskýtá se otázka, jak na základě této znalosti vyjádřit sumární vzorec uhlovodíků ve tvaru

$$\mathrm{C}_a\mathrm{H}_b.$$

Využijeme vztahu

$$\sum d_i = 2\#E = 2(n-1)$$

který je pro náš případ možno přepsat do podoby

$$4a + 1b = 2(a + b - 1).$$

Z toho dostaneme, že $b = 2a + 2$, takže sumární vzorce acyklických uhlovodíků mají tvar

$$\mathrm{C}_n\mathrm{H}_{2n+2}.$$