T–79.161 Kombinatoriset algoritmit

Combinatorial:

1: of, relating to, or involving combinations

2: of or relating to the arrangement of, operation on, and selection of discrete mathematical elements belonging to finite sets or making up geometric configurations

Algorithm:

a procedure for solving a mathematical problem (as of finding the greatest common divisor) in a finite number of steps that frequently involves repetition of an operation; broadly : a step-by-step procedure for solving a problem or accomplishing some end especially by a computer

Kombinatorisia rakenteita

Lista: kokoelma alkioita tietyssä järjestyksessä, esim. $X = [0, 1, 3, 0]$

Joukko: kokoelma eri alkioita, joita ei ole järjestetty, esim. $X = \{1, 3, 4\}$. $|X|$ on X:n alkioiden lkm. Karteesinen tulo $X \times Y = \{[x, y] \,|\, x \in X \wedge y \in Y\}$.

Osajoukko: Joukko X on joukon Y osajoukko, jos kaikille $x \in X$ myös $x \in Y$. Jos $|X| = k$, X on Y:n k-osajoukko.

Graafi: $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, missä $\mathcal{V}$ on solmujen ja $\mathcal{E}$ kaarien joukko. Kukin kaari on kahden solmun joukko.

Esimerkki: Latinalainen neliö

Joukkojärjestelmä: $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$, missä $\mathcal{X}$ on perusjoukko ja $\mathcal{B}$ joukko $\mathcal{X}$:n osajoukkoja. (esim. $\mathcal{X}$:n ositus)

Latinalainen neliö: $n \times n$-taulukko, jonka joka rivissä ja sarakkeessa esiintyy kukin luvuista $\mathcal{Y} = \{1, \ldots, n\}$ tasan kerran, esim.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 4 & 3 \\ 3 & 4 & 1 & 2 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

joukkojärjestelmänä: $\mathcal{X} = \mathcal{Y} \times \{1, 2, 3\}$,
$\mathcal{B} = \{\{(y_1, 1), (y_2, 2), (A_{y_1 y_2}, 3)\} | y_1, y_2 \in \mathcal{Y}\}$

Transversaalisommitelma $TD(n)$: $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$, missä
$|\mathcal{X}| = 3n$; $\mathcal{X} = \mathcal{X}_1 \cup \mathcal{X}_2 \cup \mathcal{X}_3$; $|\mathcal{X}_i| = n$;
$|B \cap \mathcal{X}_i| = 1$ kaikilla $B \in \mathcal{B}$;
kaikilla $x \in \mathcal{X}_i$, $y \in \mathcal{X}_j$, $i \neq j$ on yksi $B \in \mathcal{B}$, jolle $\{x, y\} \subset B$.

Ongelmatyyppejä

- luettele tietynlaiset kombinatoriset rakenteet
  - luettele mahdolliset pokerikädet
- laske, montako tietynlaista rakennetta on
  - laske n bitin binäärisanat, joissa ei ole kahta peräkkäistä ykköstä
- etsi tietynlainen kombinatorinen rakenne
  - väritä graafin solmut 3 värillä siten, että naapurit väritetään eri väreillä

Hakuongelman variantteja

Selkäreppuongelma: Annetaan n esinettä, joiden painot ovat $w_1, \ldots w_n$ ja hyödyt $p_1, \ldots, p_n$. Reppuun voidaan pakata osajoukko $S \subseteq \{1, \ldots, n\}$, jos $\sum_{i \in S} w_i \leq M$, missä M on repun kapasiteetti. Tällöin saavutetaan hyöty $P(S) = \sum_{i \in S} p_i$.

1. Voidaanko reppuun pakata jokin esinevalikoima S, jolle $P(S) = P$?
   (NP-täydellinen päätösongelma!)

2. Konstruoi reppuun mahtuva esinevalikoima, jolle $P(S) = P$.

3. Mikä on suurin mahdollinen $P(S)$:n arvo?

4. Millä esinevalikoimalla saavutetaan suurin mahdollinen $P(S)$:n arvo?

Ratkaisustrategioita

Ahne algoritmi: rakennetaan ratkaisu valitsemalla joka askeleella "lyhytnäköisesti paras" vaihtoehto. Esim. selkäreppuongelmassa laitetaan reppuun tavaroita paino-hyöty-suhteen mukaisessa järjestyksessä kunnes reppu täyttyy.

Dynaaminen ohjelmointi: Joskus optimaalisen ratkaisun osat ovat vastaavan osaongelman optimaalisia ratkaisuja. Tällöin saattaa kannattaa ratkaista ensin osaongelmat ja yhdistellä niiden ratkaisut koko ongelman ratkaisuksi.

Hajoita ja hallitse: Pilkotaan ongelma osaongelmiksi, ratkaistaan ne ja yhdistetää ratkaisut koko ongelman ratkaisuksi.

Peräytymishaku: Käydään läpi koko kaikkien mahdollisten ratkaisujen vaihtoehtopuu.

Paikallinen haku: Koetetaan jotakin ratkaisua pienin askelin parantamalla löytää lopulta hyvä ratkaisu.

Tietorakenteita osajoukoille

Perusjoukon koko? Tarvittavat operaatiot? Alkion lisäys/poisto, jäsenyyden testaus, unioni, leikkaus, alkioiden lkm, alkioiden luetteleminen?

- (järjestetty) linkitetty lista alkioita
  - kun perusjoukko on suuri ja osajoukko pieni
- binääripuut
  - kun perusjoukko on suuri ja osajoukko pienehkö
- bittikarttaesitys
  - kun perusjoukko on pieni

  esim. $S = \{1, 3, 11, 16\} \subset \{0, \ldots, 16\}$ voidaan esittää bittijonona 0101000000100001, joka voidaan pilkkoa esim. 8 bitin sanoiksi taulukkoon:
  $A[0] = 01010000_2$, $A[1] = 00010000_2$,
  $A[2] = 10000000_2$

Tietorakenteita graafeille ja joukkojärjestelmille

1. Kaarien joukko

2. Insidenssimatriisi: matriisi, jonka rivit vastaavat solmuja ja sarakkeet kaaria; alkio on `1`, jos vastaava solmu on vastaavan kaaren päätepiste

3. Naapuruusmatriisi: matriisi, jonka rivit ja sarakkeet vastaavat solmuja; alkio on `1`, jos vastaavien solmujen välillä on kaari

4. Naapuriluettelo: Annetaan kunkin solmun naapurien joukko

`1.` ja 2. soveltuvat myös joukkojärjestelmille.

rank- ja unrank-funktiot

Järjestetään lottorivit. Monesko lottorivi 3, 8, 12, 14, 15, 32, 38 on? Mikä lottorivi on rivi numero 3937483?

Olkoon S joukko joitakin kombinatorisia rakenteita. Numeroidaan ne $0 \ldots |S| - 1$:

$$\begin{gathered}\text{rank} : \; S \mapsto \{0, \ldots, |S| - 1\} \\ \text{unrank} : \{0, \ldots, |S| - 1\} \mapsto S\end{gathered}$$

$$\text{rank}\,(s) = i \Leftrightarrow \text{unrank}\,(i) = s$$

- satunnainen $s = \text{unrank}\,(\text{random}\,(0 \ldots |S| - 1))$

- kokonaisluku on kompakti esitystapa

$$\text{successor}\,(s) = t \Leftrightarrow \text{rank}\,(t) = \text{rank}\,(s) + 1$$

$$\begin{gathered}\text{successor}\,(s) = \text{unrank}\,(\text{rank}\,(s) + 1), \\ \text{kun rank}\,(s) < |S| - 1\end{gathered}$$

Rakenteet voidaan käydä läpi successor-funktiolla $\text{unrank}\,(0)$:sta lähtien.

Listan leksikografinen järjestys

Määritellään listoille $l = [s_1, s_2, \ldots, s_n]$ ja $l' = \left[s'_1, s'_2, \ldots, s'_{n'}\right]$ järjestys: Jos toinen lista on toisen alku, lyhempi edeltää pidempää. Muutoin etsitään pienin i, jolla $s_i \neq s'_i$. Jos $s_i \prec s'_i$, niin $l \prec l'$, ja kääntäen.

Esim. Tarkastellaan kolmen kirjaimen muodostamia listoja, merk. ['A','B','C'] ='ABC'.

Olkoon $S = \{$'A','B','C',...,'Ö'$\}$. Määritellään järjestys tavalliseen tapaan: $A \prec B$, jne.

rank_S('A') = 0, rank_S('N') = 13; unrank_S (7) ='H'.

Nyt järjestys on 'AAA'$\prec$'AAB'$\prec$ ... $\prec$'ÖÖÄ'$\prec$'ÖÖÖ',
ja tässä erikoistapauksessa saadaan
$\mathrm{rank}([s_1 s_2 s_3]) = |S|^2 \,\mathrm{rank}(s_1) + |S| \,\mathrm{rank}(s_2) + \mathrm{rank}(s_3)$.
(vrt. lukujärjestelmä)

Osajoukkojen leksikografinen järjestys

Tutkitaan joukon $S = \{1, \ldots, n\}$ osajoukkoja.

Kun $T \subseteq S$, olkoon T:n karakteristinen vektori $\chi(T) = [x_{n-1}, \ldots, x_0]$, missä $x_i = 1$, jos $n - i \in T$, ja $x_i = 0$, jos $n - i \notin T$. (vrt. bittikarttaesitys!)

Järjestetään osajoukot karakterististen vektorien mukaisesti leksikografiseen järjestykseen:

T	$\chi(T)$	$\operatorname{rank}(T)$
$\emptyset$	$[0,0,0]$	0
$\{3\}$	$[0,0,1]$	1
$\{2\}$	$[0,1,0]$	2
$\{2,3\}$	$[0,1,1]$	3
$\{1\}$	$[1,0,0]$	4
$\{1,3\}$	$[1,0,1]$	5
$\{1,2\}$	$[1,1,0]$	6
$\{1,2,3\}$	$[1,1,1]$	7

$$\operatorname{rank}(T) = \sum_{i=0}^{n-1} x_i 2^i$$

Osajoukon rank- ja unrank-funktiot

SUBSETLEXRANK(n, T)

$r \leftarrow 0$

for $i \leftarrow 1$ to n

  if $i \in T$

    $r \leftarrow r + 2^{n-i}$

return r

Esim. rank $(\{1, 3, 4, 6\})$:

i	$i \in T$	2^{n-i}	r
1	true	128	128
2	false	64	128
3	true	32	160
4	true	16	176
5	false	8	176
6	true	4	180
7	false	2	180
8	false	1	180

SUBSETLEXUNRANK(n, r)

$T \leftarrow \emptyset$

for $i \leftarrow n$ downto 1

  if $r \bmod 2 = 1$

    $T \leftarrow T \cup \{i\}$

  $r \leftarrow \lfloor \frac{r}{2} \rfloor$

return T

Esim. unrank (180):

i	r	$\bmod 2$	T
8	180	0	$\emptyset$
7	90	0	$\emptyset$
6	45	1	{6}
5	22	0	{6}
4	11	1	{4,6}
3	5	1	{3,4,6}
2	2	0	{3,4,6}
1	1	1	{1,3,4,6}

Jos perusjoukko ei ole $\{1, \ldots, n\}$ (esim. $\{0, \ldots, n-1\}$), voi kannattaa kuvata perusjoukko $\{1, \ldots, n\}$:lle.

Minimimuutosjärjestys

Toisinaan toivottavaa: kaksi peräkkäistä rakennetta eroavat mahdollisimman vähän. Osajoukoille etäisyys voi olla

$$\operatorname{dist}(T_1, T_2) = |T_1 \Delta T_2|, \text{ missä}$$
$$T_1 \Delta T_2 = (T_1 \setminus T_2) \cup (T_2 \setminus T_1).$$

Esim. joukkojen $\operatorname{subsetlexunrank}(n, 3) = \{2, 3\}$ ja $\operatorname{subsetlexunrank}(n, 4) = \{1\}$, etäisyys on 3, kun $n = 3$.

Osajoukoilla on olemassa järjestys, jossa peräkkäisten joukkojen dist on aina 1. Sellaisen järjestyksen karakteristiset vektorit muodostavat Gray-koodin.

Gray-koodit

Gray-koodi on 2^n n-bittisen binäärisanan lista, jossa peräkkäisten sanojen Hamming-etäisyys on 1.

Eräs mukava Gray-koodiperhe:
$G_1 = [0, 1]$, $G_{n+1} = 0 \times G_n + 1 \times \text{reverse}\,(G_n)$

GRAYCODESUCCESSOR(n, T)
if $|T|$ is even
  return $T \Delta \{n\}$
else if $\max(T) > 1$
  return $T \Delta \{\max(\mathrm{T}) - 1\}$
else
  return undefined

Olkoon koodisanan rank-luvun binääriesitys $b_{n-1} \ldots b_0$ ja vastaavan koodisanan $a_{n-1} \ldots a_0$.

$a_j = \left(b_j + b_{j+1}\right) \bmod 2$ ja $b_j = \sum_{i=j}^{n-1} a_i \bmod 2$.

k alkion osajoukkojen leksikografinen järjestys

$S = \{1, \ldots, n\}$. Generoidaan kaikki $\binom{n}{k}$ osajoukkoa, joissa on k alkiota.

Esitetään $T \subseteq S$ listana: $\overrightarrow{T} = [t_1, \ldots t_k]$, $t_i < t_{i+1}$, ja järjestetään osajoukot näiden listojen leksikografiseen järjestykseen.

T	$\overrightarrow{T}$	$\mathrm{rank}\,(T)$
$\{1,2,3\}$	$[1,2,3]$	0
$\{1,2,4\}$	$[1,2,4]$	1
$\{1,2,5\}$	$[1,2,5]$	2
$\{1,3,4\}$	$[1,3,4]$	3
$\{1,3,5\}$	$[1,3,5]$	4
$\{1,4,5\}$	$[1,4,5]$	5
$\{2,3,4\}$	$[2,3,4]$	6
$\{2,3,5\}$	$[2,3,5]$	7
$\{2,4,5\}$	$[2,4,5]$	8
$\{3,4,5\}$	$[3,4,5]$	9

Seuraaja: kasvatetaan suurinta alkiota, jota voi kasvattaa, ja asetetaan sitä suuremmat alkiot minimiarvoihinsa.

$\mathrm{rank}\,(T) = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=t_{i-1}+1}^{t_i-1} \binom{n-j}{k-i}$

k alkion osajoukkojen co-lex-järjestys

$S = \{1, \ldots, n\}$. Generoidaan kaikki $\binom{n}{k}$ osajoukkoa, joissa on k alkiota.

Esitetään $T \subseteq S$ listana: $\overleftarrow{T} = [t_1, \ldots t_k]$, $t_i > t_{i+1}$, ja järjestetään osajoukot näiden listojen leksikografiseen järjestykseen.

T	$\overleftarrow{T}$	$\mathrm{rank}\,(T)$
$\{1,2,3\}$	$[3,2,1]$	0
$\{1,2,4\}$	$[4,2,1]$	1
$\{1,3,4\}$	$[4,3,1]$	2
$\{2,3,4\}$	$[4,3,2]$	3
$\{1,2,5\}$	$[5,2,1]$	4
$\{1,3,5\}$	$[5,3,1]$	5
$\{2,3,5\}$	$[5,3,2]$	6
$\{1,4,5\}$	$[5,4,1]$	7
$\{2,4,5\}$	$[5,4,2]$	8
$\{3,4,5\}$	$[5,4,3]$	9

Seuraaja: kasvatetaan pienintä alkiota, jota voi kasvattaa; minimoidaan sitä pienemmät alkiot.

$\mathrm{rank}\,(T) = \sum_{i=1}^{k} \binom{t_i - 1}{k+1-i}$

rank on riippumaton n:stä!

Lex- ja co-lex-järjestysten yhteys

Kuvataan $T \subseteq \{1, \ldots n\}$ joukoksi $T' = \{n + 1 - t | t \in T\}$. T:n lex-järjestys on T':n käänteinen colex-järjestys, ja kääntäen!

T	T'	$\text{rank}_L(T)$	$\text{rank}_C(T')$
$\{1,2,3\}$	$\{5,4,3\}$	0	9
$\{1,2,4\}$	$\{5,4,2\}$	1	8
$\{1,2,5\}$	$\{5,4,1\}$	2	7
$\{1,3,4\}$	$\{5,3,2\}$	3	6
$\{1,3,5\}$	$\{5,3,1\}$	4	5
$\{1,4,5\}$	$\{5,2,1\}$	5	4
$\{2,3,4\}$	$\{4,3,2\}$	6	3
$\{2,3,5\}$	$\{4,3,1\}$	7	2
$\{2,4,5\}$	$\{4,2,1\}$	8	1
$\{3,4,5\}$	$\{3,2,1\}$	9	0

Tämän muunnoksen kautta on tehokkaampaa laskea lex-järjestyksen rank ja unrank.

Esimerkki k-osajoukon rank:sta

Järjestetään lottorivit leksikografiseen järjestykseen. Monesko lottorivi 3, 8, 12, 14, 15, 32, 38 on?

$$T = \{3, 8, 12, 14, 15, 32, 38\} \subseteq \{1, \ldots 39\}.$$
$$T' = \{37, 32, 28, 26, 25, 8, 2\}.$$

$$\begin{aligned} \mathrm{rank}_C\,(T') &= \binom{37-1}{7} + \binom{32-1}{6} + \binom{28-1}{5} \\ &+ \binom{26-1}{4} + \binom{25-1}{3} + \binom{8-1}{2} + \binom{2-1}{1} \\ &= 9179389 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{rank}_L\,(T) &= \binom{39}{7} - 1 - \mathrm{rank}_C\left(T'\right) \\ &= 6201549 \end{aligned}$$

Esimerkki k-osajoukon unrank:sta

Järjestetään lottorivit leksikografiseen järjestykseen. Mikä lottorivi on rivi numero 3937483?

$$3937482 = \operatorname{rank}_L(T) = \binom{39}{7} - 1 - \operatorname{rank}_C(T')$$

$$T' = \operatorname{unrank}_C\left(\binom{39}{7} - 1 - 3937482\right)$$

i	r	t_i s.t. $\binom{t_i-1}{i} \leq r < \binom{t_i}{i}$	$r - \binom{t_i-1}{i}$
7	11443454	38	1147982
6	1147982	33	40414
5	40414	24	6765
4	6765	22	780
3	780	18	100
2	100	15	9
1	9	10	0

$$T' = \{38, 33, 24, 22, 18, 15, 10\},$$
$$T = \{2, 7, 16, 18, 22, 25, 30\}$$

Permutaatiot

Permutaatio on tapa järjestää alkiot $\{1, \ldots, n\}$ eli bijektio joukolta $\{1, \ldots, n\}$ itselleen.

$$\pi : \{1, \ldots, n\} \mapsto \{1, \ldots, n\}$$

Esim.

x	1	2	3	4	5	6
$\pi(x)$	3	5	1	4	6	2

Permutaatio voidaan esittää listana:

$$[\pi(1), \pi(2), \ldots, \pi(n)]$$

Esim. $[3, 5, 1, 4, 6, 2]$.

Permutaatio voidaan esittää syklinotaatiossa, jossa suluissa aina edeltävä alkio kuvautuu seuraavalle ja viimeinen ensimmäiselle, esim.

$$\pi = (1\,3)\,(2\,5\,6)\,(4) = (1\,3)\,(2\,5\,6)$$

Permutaatioiden yhdistely ja parillisuus

Permutaatiot ovat funktioita ja niitä yhdistellään kuin funktioita. Yhdistely tapahtuu siksi oikealta vasemmalle.

$$(\pi_1\pi_2)(x) = (\pi_1 \circ \pi_2)(x) = \pi_1(\pi_2(x))$$

$$\begin{aligned}(1\,2)(2\,3) &= (1\,2\,3)\\ (2\,3)(1\,2) &= (1\,3\,2)\end{aligned}$$

Permutaatioiden parillisuus

Yksinkertaisin permutaatio on transpositio $(i\,j)$, missä $i \neq j$. Permutaatiot voidaan jakaa kahteen luokkaan.

Parilliset permutaatiot voidaan ilmaista vain parillisen määrän transpositioita tulona, esim.

$$(1\,2\,3) = (1\,2)(2\,3)$$

Parittomat permutaatiot voidaan ilmaista vain parittoman määrän transpositioita tulona, esim.

$$(1\,2\,3\,4) = (1\,2)(2\,3)(3\,4)$$

Aputulos

Jos listat $d = [d_1, \ldots, d_n]$, missä $0 \leq d_i < n_i$ järjestetään leksikografiseen järjestykseen,

$$\operatorname{rank}(d) = \sum_{i=1}^{n} d_i \prod_{j=i+1}^{n} n_j$$

unrank(r):
for $i = n$ downto 1:
    $d_i \leftarrow r \bmod n_i$
    $r \leftarrow \left\lfloor \frac{r}{n_i} \right\rfloor$

successor(d):
$i = n$
while $d_i = n_i - 1$
    $i \leftarrow i - 1$
$d_i \leftarrow d_i + 1$
for $j = i + 1$ to n
    $d_j = 0$

Permutaatioiden leksikografinen järjestys

Järjestetään permutaatiot listaesitystensä leksikografiseen järjestykseen. Esim.

$$[1,2,3]\,,[1,3,2]\,,[2,1,3]\,,[2,3,1]\,,[3,1,2]\,,[3,2,1]$$

Valittaessa listan i:nnettä alkiota on $n+1-i$ vaihtoehtoa. Merkitään d_i:llä, montako valittua pienempää vaihtoehtoa oli. Nyt $0 \le d_i < n_i = n+1-i$, ja

$$\operatorname{rank}(\pi) = \sum_{i=1}^{n-1} d_i\,(n-i)!$$

Esim. $\pi = [2,4,1,3] \Rightarrow d = [1,2,0,0]$ ja

$$\operatorname{rank}(\pi) = 1\cdot 3! + 2\cdot 2! + 0\cdot 1! = 10$$

Vastaavasti $\operatorname{unrank}(10)$ antaa ensin $d = [1,2,0,0]$, ja siitä saadaan $\pi = [2,4,1,3]$.

Seuraaja: Pyritään olemaan koskematta alkupään alkioihin; etsitään listan lopusta lyhin osalista, joka ei ole käänteisessä lex. järjestyksessä. Vaihdetaan osalistan ensimmäinen alkio seuraavan suuremman alkion kanssa, ja käännetään osalistan loppu kasvavaan järjestykseen. Esim. $[3,6,\underline{2,7,5,4,1}] \to [3,6,4,7,5,2,1] \to [3,6,4,1,2,5,7]$

Permutaatioiden minimimuutosjärjestys: Trotter–Johnson

Permutaatioiden minimimuutos on vierekkäisten alkioiden transpositio: $[\ldots, i, j, \ldots] \to [\ldots, j, i, \ldots]$.

Trotter–Johnson: lisätään alkioiden $\{1, \ldots, n-1\}$ minimimuutosjärjestykseen T^{n-1} alkio n seuraavasti. Kopioidaan kukin T^{n-1}:n alkio n-kertaisesti, ja lisätään sopiviin väleihin alkio n niin, että n:n paikat muodostavat siksak-kuvion.

$T^1 = [1]$, $T^2 = [[1, 2], [2, 1]]$,

$$T^3 = \begin{bmatrix} & 1 & & 2 & 3 \\ & 1 & 3 & 2 & \\ 3 & 1 & & 2 & \\ 3 & 2 & & 1 & \\ & 2 & 3 & 1 & \\ & 2 & & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

$$T^3 = \begin{bmatrix} [1,2,3] \\ [1,3,2] \\ [3,1,2] \\ [3,2,1] \\ [2,3,1] \\ [2,1,3] \end{bmatrix}$$

$$T^4 = \begin{bmatrix}
 & 1 & & 2 & & 3 & 4 \\
 & 1 & & 2 & 4 & 3 & \\
 & 1 & 4 & 2 & & 3 & \\
4 & 1 & & 2 & & 3 & \\
4 & 1 & & 3 & & 2 & \\
 & 1 & 4 & 3 & & 2 & \\
 & 1 & & 3 & 4 & 2 & \\
 & 1 & & 3 & & 2 & 4 \\
 & 3 & & 1 & & 2 & 4 \\
 & 3 & & 1 & 4 & 2 & \\
 & 3 & 4 & 1 & & 2 & \\
4 & 3 & & 1 & & 2 & \\
4 & 3 & & 2 & & 1 & \\
 & 3 & 4 & 2 & & 1 & \\
 & 3 & & 2 & 4 & 1 & \\
 & 3 & & 2 & & 1 & 4 \\
 & 2 & & 3 & & 1 & 4 \\
 & 2 & & 3 & 4 & 1 & \\
 & 2 & 4 & 3 & & 1 & \\
4 & 2 & & 3 & & 1 & \\
4 & 2 & & 1 & & 3 & \\
 & 2 & 4 & 1 & & 3 & \\
 & 2 & & 1 & 4 & 3 & \\
 & 2 & & 1 & & 3 & 4
\end{bmatrix}$$

Trotter–Johnson rank

TJRank(π, n):
$\pi' \leftarrow \pi$ ilman alkiota n
$r \leftarrow$ TJRank $(\pi', n-1)$
jos r parillinen:
    $r \leftarrow nr +$ alkioiden lkm n : n oik. puolella
muuten:
    $r \leftarrow nr +$ alkioiden lkm n : n vas. puolella
return r

Esim. TJRank$([3,4,2,1], 4)$:
    $r =$TJRank$([3,2,1], 3)$
        $r =$TJRank$([2,1], 2) = 1$
        r pariton; $r \leftarrow 3 \cdot 1 + 0 = 3$
    r pariton; $r \leftarrow 4 \cdot 3 + 1 = 13$

Trotter–Johnson unrank

TJUnrank(r, n):
$\pi' \leftarrow \mathrm{TJUnrank}\left(\left\lfloor \frac{r}{n} \right\rfloor, n-1\right)$
$r \leftarrow r \bmod n$
jos π' parillinen:
    $\pi \leftarrow \pi'$, johon lisätään n siten, että sen oik. puolelle jää r alkiota
muuten:
    $\pi \leftarrow \pi'$, johon lisätään n siten, että sen vas. puolelle jää r alkiota
return π

Esim. TJUnrank$(13, 4)$:
    TJUnrank$(3, 3)$:
        TJUnrank$(1, 2) = [2, 1]$
    1 pariton: lisätään alkio 3 s.e. sen vas. puolelle jää $3 \bmod 3 = 0$ alkiota: $[3, 2, 1]$
3 pariton: lisätään alkio 4 s.e. sen vas. puolelle jää $13 \bmod 4 = 1$ alkiota: $[3, 4, 2, 1]$

Trotter–Johnson successor

TJSuccessor(π, n):
$\pi' \leftarrow \pi$ ilman alkiota n
jos π' on parillinen ja n:ä voidaan siirtää vasempaan, tehdään niin
muuten jos π' on pariton ja n:ä voidaan siirtää oikealle, tehdään niin
muuten lasketaan TJSuccessor$(\pi', n-1)$ pitäen n:ä paikallaan

Esim. TJSuccessor$([4,3,1,2])$:

$\pi' = [3,1,2]$ on parillinen, mutta 4:ä ei voi siirtää vasempaan; lasketaan $[4]+$TJSuccessor$([3,1,2])$:

$\pi' = [1,2]$ on parillinen, mutta 3:a ei voi siirtää vasempaan; lasketaan $[3]+$TJSuccessor$([1,2])$:

$\pi' = [1]$ on parillinen, ja 2:a voidaan siirtää vasempaan: $[2,1]$

saadaan $[4]+[3]+[2,1] = [4,3,2,1]$

Myrvold & Ruskey: unrank

Sen sijaan, että valittaisiin jokin järjestys, jolle laskettaisiin sitten rank- ja unrank-funktioita, Myrvold ja Ruskey valitsivat nopean unrank-funktion ja kehittivät sitä vastaavan rank-funktion.

Perinteinen tapa luoda satunnainen permutaatio:

for $i = n$ downto 1
    swap($\pi(i), \pi(r_i)$)

missä $r_i = \mathrm{random}(1, \ldots i)$. Syntyy permutaatio

$$\pi = (n\ r_n)(n-1\ r_{n-1})\ldots(2\ r_2)(1\ r_1)$$

(tässä merkitään $(i\ i) = (i)$ yksinkertaisuuden vuoksi). Jokaisella permutaatiolla on yksikäsitteinen esitystapa tässä muodossa.

Unrank on yksinkertainen: päätellään rank:sta r_i:ien arvot ja konstruoidaan permutaatio ylläolevalla algoritmilla.

Myrvold & Ruskey: rank

Rank:n laskemiseksi pitää ensin päätellä r_i:t ja sitten laskea

$$\operatorname{rank}(\pi) = \sum_{i=1}^{n} (r_i - 1)(i-1)!$$

Koska π:n edellisen sivun esitysmuodossa alkiota n permutoidaan vain vasemmanpuoleisessa transpositiossa, $\pi(n) = r_n$. Näin π:stä voidaan helposti päätellä r_n. Sitten lasketaan $(n\ r_n)\,\pi$, jossa n kuvautuu itselleen ja oleellisesti jää käsiteltäväksi joukon $\{1, \ldots, n-1\}$ permutaatio, ja iteroidaan.

Järjestys ei ole kovin intuitiivinen:

0 : 2341	6 : 4123	12 : 3241	18 : 1423
1 : 4312	7 : 3124	13 : 3412	19 : 1324
2 : 2413	8 : 2431	14 : 4213	20 : 4231
3 : 2314	9 : 4132	15 : 3214	21 : 1432
4 : 3421	10 : 2143	16 : 4321	22 : 1243
5 : 3142	11 : 2134	17 : 1342	23 : 1234

Kokonaislukujen ositus

$P(m)$: monellako tavalla positiivinen kokonaisluku m voidaan esittää positiivisten kokonaislukujen summana $m = a_1 + \ldots + a_n$, kun summattavien järjestyksellä ei ole merkitystä? (tai vastaavasti $a_1 \geq \ldots \geq a_n$)

$P(5) = 7$: 5, 4+1, 3+2, 3+1+1, 2+2+1
2+1+1+1, 1+1+1+1+1

$P(1) = 1$, $P(2) = 2$, $P(3) = 3$, $P(4) = 5$,
$P(5) = 7$, $P(6) = 11$, $P(m) \sim \Theta\left(e^{\pi\sqrt{2m/3}}/m\right)$

Ositusten generointi

GenRecPartition(m, B, N)
  if $m = 0$
    output ($[a_1, \ldots, a_N]$)
  else
    for $i = 1$ to $\min(B, m)$:
      $a_{N+1} \leftarrow i$
      RecPartition($m - i, i, N + 1$)

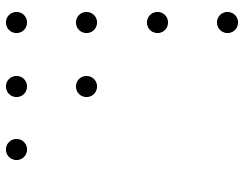
RecPartition($m, m, 0$)

Parametri m on ositettava kokonaisluku, parametri B on suurin kokonaisluku, joka voidaan laittaa seuraavaksi kiinnitettävään a_i:hin rikkomatta suuruusjärjestystä, ja N on jo kiinnitettyjen arvojen lkm.

Ferrers-Young-kaaviot

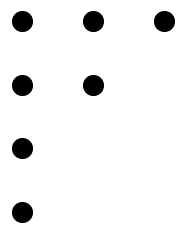
Osituksen Ferrers-Young-kaavio saadaan kirjoittamalla kutakin a_i:tä vastaava määrä pisteitä omalle rivilleen.

$$7 = 4 + 2 + 1 \Rightarrow D =$$



Kääntämällä rivit sarakkeiksi saadaan vastaava konjugaattikaavio ja konjugaattiositus:

$$D^* =$$



$$\Rightarrow 7 = 3 + 2 + 1 + 1$$

$P(m, n)$:
m:n osituksia, joissa on n osaa, on yhtä monta kuin m:n osituksia, joissa suurin osa on n.

Relaatio I

Selvästi $P(m,m) = P(m,1) = 1$, kun $m > 1$; määritellään $P(m,0) = 0$ ja $P(0,0) = 1$.

Teoreema 3.2: Kun $m \geq n > 0$,

$$P(m,n) = P(m-1,n-1) + P(m-n,n).$$

Tod. Merkitään $\mathcal{P}(m,n)$:llä m:n n-ositusten joukkoa. Jaetaan $\mathcal{P}(m,n)$ kahtia ja määritellään kuvaukset:

jos $a_n = 1$, $\Phi_1([a_1,\ldots,a_n]) = [a_1,\ldots,a_{n-1}]$;
jos $a_n > 1$, $\Phi_2([a_1,\ldots,a_n]) = [a_1-1,\ldots,a_n-1]$

Φ_1 ja Φ_2 ovat bijektioita $\mathcal{P}(m,n)$:n osilta joukoille $\mathcal{P}(m-1,n-1)$ ja $\mathcal{P}(m-n,n)$, joten joukkojen alkioiden lukumäärät ovat identtiset.

Relaatioita II

Teoreema 3.3:

$$P(m,n) = \sum_{i=1}^{n} P(m-n,i)$$

Tod: Jaetaan $\mathcal{P}(m,n)$ osiin $\mathcal{P}(m,n)_i$, joista kuhunkin kuuluvat partitiot, joilla $a_i > 1$, mutta $a_{i+1} = 1$.

Kullekin $1 \leq i \leq n$ määritellään bijektio

$$\Phi_i : \mathcal{P}(m,n)_i \mapsto \mathcal{P}(m-n,i)$$

seuraavasti:

$$\Phi_i([a_1, \ldots, a_n]) = [a_1 - 1, \ldots a_i - 1]$$

Rank-funktio $\mathcal{P}(m, n)$:lle

Järjestetään ositukset $[a_1, \ldots, a_n]$ käänteisen standardimuodon $[a_n, \ldots, a_1]$ mukaiseen leksikografiseen järjestykseen. Esim. $\mathcal{P}(10, 4)$:

std. muoto	käänt. std. muoto
$[7,1,1,1]$	$[1,1,1,7]$
$[6,2,1,1]$	$[1,1,2,6]$
$[5,3,1,1]$	$[1,1,3,5]$
$[4,4,1,1]$	$[1,1,4,4]$
$[5,2,2,1]$	$[1,2,2,5]$
$[4,3,2,1]$	$[1,2,3,4]$
$[3,3,3,1]$	$[1,3,3,3]$
$[4,2,2,2]$	$[2,2,2,4]$
$[3,3,2,2]$	$[2,2,3,3]$

Ositukset, joissa $a_n = 1$, tulevat tässä järjestyksessä ennen niitä, joissa $a_n > 1$. Saadaan

$$\begin{aligned}&\text{rank}\,([a_1, \ldots, a_n])\\ &= \begin{cases} \text{rank}([a_1, \ldots, a_{n-1}]) & \text{jos } a_n = 1 \\ \text{rank}([a_1 - 1, \ldots, a_n - 1]) + P(m-1, n-1) & \text{jos } a_n > 1 \end{cases}\end{aligned}$$

Seuraajafunktio $\mathcal{P}(m, n)$:ssä

Partitio $[a_1, \ldots, a_n]$ on viimeinen, kun $a_1 \leq a_n + 1$. Tällöin m on jaettu mahdollisimman tasan n:llä.

Valitussa järjestyksessä koetetaan pitää viimeiset alkiot mahdollisimman muuttumattomina.

Seuraajafunktio:

1. etsitään listan ensimmäinen osalista, joka ei ole tasan jaettu, ts. pienin i, jolle $a_1 > a_i + 1$.

2. Kasvatetaan a_i:tä yhdellä ja asetetaan $a_2, \ldots, a_{i-1}$ minimiarvoonsa ($= a_i$)

3. Täsmätään summa asettamalla $a_1 = m - \sum_{i=2}^{n} a_i$.

Esim.:
$[5, 5, 4, 2, 1]$:lle $i = 4$. Asetetaan $a_4 = a_4 + 1 = 3$, $a_3 = 3$, $a_2 = 3$ ja $a_1 = 17 - 3 - 3 - 3 - 1 = 7$; saadaan $[7, 3, 3, 3, 1]$.

Nimetyt puut

Graafi $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ on puu, kun se on kytketty ja syklitön. Solmun v asteluku on niiden kaarien määrä, joissa solmu esiintyy. Olkoon $\mathcal{V} = \{1, 2, \ldots, n\}$. Tällöin on n^{n-2} eri puuta, joiden solmujoukko on $\mathcal{V}$.

Olkoon $\mathcal{T}_n$ niiden puiden joukko, joiden solmujoukko on $\mathcal{V}$. Prüferin vastaavuus:

$$\text{Prüfer} : \mathcal{T}_n \mapsto \mathcal{V}^{n-2}$$

$$\text{Prüfer}^{-1} : \mathcal{V}^{n-2} \mapsto \mathcal{T}_n$$

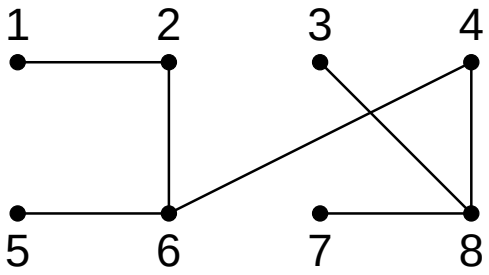
Prüfer

PRÜFER($n, \mathcal{E}$):
for $i = 1$ to $n - 2$:
olkoon v korkeanumeroisin solmu, jonka asteluku=1
etsitään kaari $\{v, v'\} \in \mathcal{E}$ ja asetetaan $L_i \leftarrow v'$
poistetaan graafista kaari $\{v, v'\}$

Kukin solmu v esiintyy listassa L $\deg(v) - 1$ kertaa. Graafiin jää kaari $\{1, v\}$, missä v:n asteluku on 1 algoritmin ajamisen jälkeen.

INVPRÜFER(n, L):
lasketaan listasta L solmujen asteluvut
lisätään listan jatkoksi ykkönen: $L_{n-1} \leftarrow 1$
for $i = 1$ to $n - 1$:
olkoon v korkeanumeroisin solmu, jonka asteluku=1
lisätään graafiin kaari $\{v, L_i\}$
vähennetään v:n ja L_i:n astelukua yhdellä

Prüfer-esimerkki



Solmujen asteluvut	L_i	Kaari
[1,2,1,2,1,3,1,3]	8	{7,8}
[1,2,1,2,1,3,0,2]	6	{5,6}
[1,2,1,2,0,2,0,2]	8	{3,8}
[1,2,0,2,0,2,0,1]	4	{4,8}
[1,2,0,1,0,2,0,0]	6	{4,6}
[1,2,0,0,0,1,0,0]	2	{2,6}
[1,1,0,0,0,0,0,0]		

Listaesityksestä saadaan helposti rank- ja unrank-funktiot tulkitsemalla lista n-kantaisena lukuna.

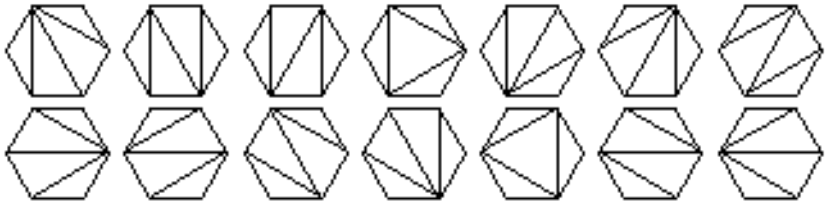
Catalan-luvut

$$C_n = \frac{1}{n+1}\binom{2n}{n}$$

Catalan-luvut esiintyvät monessa yhteydessä:

- monellako eri tavalla matriisitulolauseke voidaan suluttaa niin, että aina kaksi tekijää kerrotaan kerrallaan: $((M_1\,(M_2M_3))\,(M_4M_5))$

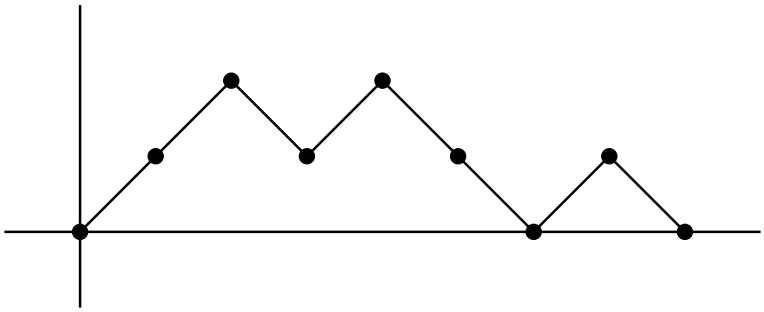
- monellako eri tavalla konveksi $n+2$-kulmio voidaan kolmioida:



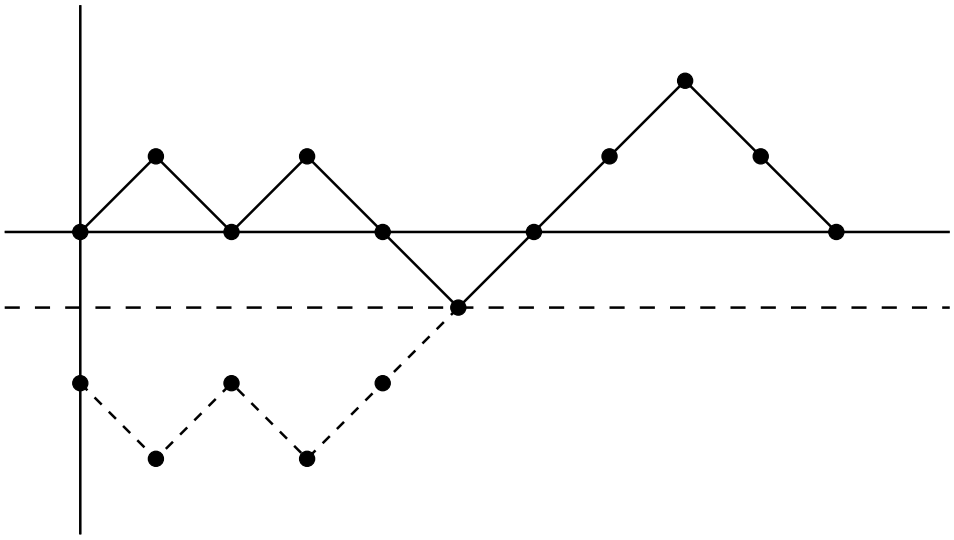
- montako sellaista $2n$ bitin jonoa on, joissa on n ykköstä ja n nollaa, ja joissa minkään kohdan vasemmalla puolella ei ole enemmän ykkösiä kuin nollia: 000111, 001011, 001101, 010011, 010101

Catalan-luvuista

Em. kaltaiset binääriluvut voidaan esittää vuoristona, joka ei laske 0-tason alle. Esim. $a = 00101101$ vastaa vuoristoa



Peilataan ne vuoristot, jotka laskevat 0-tason alle, akselin $y = -1$ yli alusta siihen asti, jossa ne ensimmäisen kerran laskevat 0-tason alle. Saadaan bijektio 0-tason alle laskevien ja $(-2, 0)$:sta $(2n, 0)$:aan kulkevien vuoristojen välille.



$$C_n = \binom{2n}{n} - \binom{2n}{n+2} = \left(1 - \frac{n}{n+1}\right)\binom{2n}{n} = \frac{1}{n+1}\binom{2n}{n}$$

Catalan rank ja unrank

Lasketaan, monellako tavalla vuoriston voi saattaa loppuun kustakin kohdasta, esim. tapaus C_5:

5						1					
4					5		1				
3				14		4		1			
2			28		9		3		1		
1		42		14		5		2		1	
0	42		14		5		2		1		1
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10

rank: seurataan vuoristoa; kun se menee oikealle alas, lisätään rank:iin luku, joka olisi ollut oikealla ylhäällä.

unrank: jos rank $\geq$ oikealla ylhäällä oleva luku, mennään oikealle alas ja vähennetään oikealla ylhäällä ollut luku rank:sta; muuten mennään oikealle ylös

Esim. rank $(0010110101) = 22$

Peräytymishaku

- yleinen menetelmä kombinatorisen haku-, optimointi-, generointi- tai enumerointiongelman ratkaisemiseen.

- rekursiivinen: ratkaisu rakennetaan kasvattamalla osaratkaisuja

- täydellinen haku: koko ratkaisuavaruus käydään läpi

- karsinta säästää tarkastelemasta epäoleellisia hakuavaruuden osia

Peräytymishakuesimerkki

Selkäreppuongelma: Annetaan n esinettä, joiden painot ovat $w_1, \ldots w_n$ ja hyödyt $p_1, \ldots, p_n$. Repun kapasiteetti on M. Maksimoidaan $P(x) = \sum p_i x_i$ rajoitusehdoilla $x_i \in \{0, 1\}$ ja $\sum w_i x_i \leq M$.

Konstruoidaan rekursiivisesti lista $[x_1, \ldots, x_n]$. Alla l on jo kiinnitettyjen x_i-muuttujien lukumäärä; rekursio käynnistetään kutsulla KNAPSACK1(0).

```
KNAPSACK1(l):
if l = n:
    if Σ w_i x_i ≤ M:
        CurP ← Σ p_i x_i
        if CurP > OptP:
            OptP ← CurP
            OptX ← [x_0, ... x_{n-1}] else
    x_l = 1
    KNAPSACK1(l + 1)
    x_l = 0
    KNAPSACK1(l + 1)
```

Peräytymishaku yleisesti

Monen kombinatorisen ongelman ratkaisut voidaan esittää listana $X = [x_0, \ldots, x_{n-1}]$, missä $x_i \in P_i$, missä P_i on äärellinen x_i:n mahdollisten arvojen joukko. Peräytymishaku konstruoi joukon $P_0 \times P_1 \times \ldots \times P_{n-1}$ kaikki alkiot. Haun aikana konstruoitavan listan pituus vastaa hakusolmun syvyyttä hakupuussa.

Osittainen ratkaisu $[x_0, \ldots, x_{l-1}]$ voi rajoittaa hakua; joskus voidaan päätellä, etteivät jotkin $x_l \in P_l$ voi johtaa käypiin ratkaisuihin. Tällöin voidaan karsia hakupuuta ja rajoittaa haku vaihtoehtojoukkoon $C_l \subseteq P_l$.

BACKTRACK(l):
jos $[x_0, \ldots, x_{l-1}]$ on
    käypä ratkaisu:
        käsittele se
laske C_l
kullekin $x \in C_l$:
    $x_l \leftarrow x$
    BACKTRACK($l + 1$)

KNAPSACK2(l):
if $l = n$:
    if $CurP > OptP$:
        $OptP \leftarrow CurP$
        $OptX \leftarrow [x_0, \ldots x_{n-1}]$
if $l = n$:
    $C_l \leftarrow \emptyset$
else if $\sum_{i=0}^{l-1} w_i x_i + w_l \leq M$:
    $C_l \leftarrow \{0, 1\}$
else:
    $C_l \leftarrow \{0\}$
for $x \in C_l$:
    $x_{l+1} \leftarrow x$
    KNAPSACK2($l + 1$)

Klikkien generointi

Klikki on graafin $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ solmujoukon $\mathcal{V}$ sellainen osajoukko $S \subseteq \mathcal{V}$, että kaikkien S:n solmuparien $x, y \in S$, $x \neq y$ välillä on kaari: $\{x, y\} \in \mathcal{E}$.

Maksimaalinen klikki on klikki, joka ei ole suuremman klikin osajoukko.

Määritellään peräytymishaku:
$[x_0, \ldots, x_{l-1}]$ vastaa klikkiä $S_l = \{x_0, \ldots, x_{l-1}\}$

$$\begin{aligned} C_l &= \{v \in \mathcal{V} \setminus S_{l-1} : \{v, x\} \in \mathcal{E} \text{ kaikilla } x \in S_{l-1}\} \\ &= \{v \in C_{l-1} \setminus \{x_{l-1}\} : \{v, x_{l-1}\} \in \mathcal{E}\} \end{aligned}$$

Ongelma: algoritmi generoi kaikki k solmun klikit $k!$ kertaa, kerran kussakin järjestyksessä! Ratkaisu: määritellään solmuille järjestys $v_0 < \ldots < v_{n-1}$ ja valitaan

$$C_l = \{v \in C_{l-1} : \{v, x_{l-1}\} \in \mathcal{E} \wedge v > x_{l-1}\}$$

Klikkien generointi II

Esilasketaan aluksi kullekin solmulle v apujoukot $N_v = \{u \in \mathcal{V} : \{u, v\} \in E\}$ ja $G_v = \{u \in \mathcal{V} : u > v\}$. N_v on solmun v naapurien joukko ja G_v on solmua v suurempien solmujen joukko.

Haun aikana X on lista solmuja, jotka muodostavat klikin; N on X:n solmujen yhteisten naapurien joukko; ja C on yhteisten naapurien joukko, jotka ovat viimeksi X:ään lisättyä solmua suurempia.

AllCliques(X, N, C):
output X
if $N = \emptyset$:
    X on maksimaalinen
for $v \in C$:
    AllCliques$(X + [v], N \cap N_v, C \cap N_v \cap G_v)$

AllCliques$([], \mathcal{V}, \mathcal{V})$

Hakupuun koon arviointi

Jos hakupuun joka kohdassa $|C_i| = c_i$, puun koko on $|T| = 1 + c_0 + c_0c_1 + c_0c_1c_2 + \ldots + c_0c_1 \ldots c_{n-1}$. Yleensä näin ei ole. Kutsutaan hakupuun solmuja nimillä $[x_0, \ldots x_{l-1}]$ sen mukaan, mitä valintoja tekemällä niihin päästään. Puun kokoa voidaan arvioida valitsemalla joka askeleella satunnainen vaihtoehto, ja laskemalla saadulta polulta P

$$N = \sum_{X \in P} \frac{1}{S(X)},$$

missä

$$S(X) = \begin{cases} 1 & \text{kun } l = 0 \\ \frac{S(p(X))}{|C_{l-1}(p(X))|} & \text{kun } l > 0, \end{cases}$$

missä $p([x_0, \ldots x_{l-1}]) = [x_0, \ldots, x_{l-2}]$ (solmun isä).

Väite: $E(N) = |T|$.

Todistus: merkitään polun P todennäköisyyttä $\mathsf{P}(P)$:llä ja todennäköisyyttä, että solmu X on satunnaisesti valitulla polulla $\mathsf{P}(X)$:llä.

$$E(N) = \sum_P \sum_{X \in P} \frac{\mathsf{P}(P)}{S(X)} = \sum_{X \in T} \sum_{P : X \in P} \frac{\mathsf{P}(P)}{S(X)}$$

$$= \sum_{X \in T} \frac{\mathsf{P}(X)}{S(X)} = \sum_{X \in T} 1 = |T|.$$

Täsmällinen peitto (Exact Cover)

Kun annetaan joukko R ja joukko S sen osajoukkoja, voidaanko valita osajoukkojen osajoukko, joka osittaa R:n?

$R = \{0, \ldots, n-1\}$. $S = \{S_0, \ldots, S_{m-1}\}$, missä $S_i \subseteq R$ kaikilla i. Onko olemassa $S' \subseteq S$, jolle $\bigcup_{X \in S'} X = S$ ja $S_i \cap S_j = \emptyset$, kun $S_i,\ S_j \in S'$?

Graafin $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, missä $\mathcal{V} = \{0, \ldots, m-1\}$ ja $\mathcal{E} = \big\{\{i, j\} : S_i \cap S_j = \emptyset\big\}$, klikit vastaavat ongelman osittaisratkaisuja. Voitaisiin suoraan soveltaa AllCliques-algoritmia ja tarkastaa, onko jokin löydetyistä maksimaalisista klikeistä ratkaisu.

Täsmällinen peitto II

AllCliques-algoritmissa valitaan solmuille järjestys. Valitaan osajoukoille laskeva leksikografinen järjestys. Merkitään H_i:llä niiden osajoukkojen joukkoa, joiden pienin alkio on i. H_i:n joukot edeltävät H_{i+1}:n joukkoja.

AllCliques-algoritmissa C_l muodostuu solmuista, jotka ovat järjestyksessä listassa jo olevien jälkeen ja kaikkien listassa olevien solmujen naapureita. (tässä: eivät sisällä yhteisiä alkioita ko. osajoukkojen kanssa)

Parannus: jos r on pienin alkio, jota listassa olevat joukot eivät peitä, suppeampi valintajoukko $C'_l = C_l \cap H_r$ riittää – muuten ei alkiota r saada peitettyä!

Rajoitusfunktiot

Optimointitehtävässä hakupuuta voidaan karsia arvioimalla, miten hyviä ratkaisuja jostakin haarasta voi löytyä.

Olkoon $\text{profit}(X)$ ratkaisun X hyöty. Olkoon $P(X)$ suurin hyöty, joka voidaan saavuttaa osittaisratkaisun X jälkeläisissä. Olkoon $B(X)$ helposti laskettava funktio, jolla arvioidaan $P(X)$:ää s.e. $B(X) \geq P(X)$.

Jos paras aiemmin löydetty ratkaisu on X', käsitellään osittaisratkaisua X, ja $\text{profit}(X') > B(X)$, voidaan haara karsia, sillä $\text{profit}(X') > B(X) \geq P(X)$, eikä X:n jälkeläisten joukossa voi olla X':a parempaa ratkaisua.

```
BOUNDING(X):
jos X on käypä ratkaisu:
    P ← profit(X)
        if P > OptP :
            OptP ← P
            OptX ← X
laske C_l
B ← B(X)
kullekin x ∈ C_l:
    if B ≤ OptP: # jos karsitaan myös yhtäsuuruudella, testin on
        return       # oltava tässä, koska OptP voi muuttua
    BOUNDING(X + [x])
```

Rationaaliselkäreppu

Eräs tapa muodostaa rajoitusfunktio on höllentää joitakin alkuperäisen tehtävän rajoituksista siten, että ratkaiseminen helpottuu.

Selkäreppuongelma: Annetaan n esinettä, joiden painot ovat $w_1, \ldots w_n$ ja hyödyt $p_1, \ldots, p_n$. Repun kapasiteetti on M. Maksimoidaan $P(x) = \sum p_i x_i$ rajoitusehdoilla $x_i \in \{0, 1\}$ ja $\sum w_i x_i \leq M$.

Rationaaliselkäreppuongelma: kuten edellä, mutta vaaditaan $x_i \in \{0, 1\}$:n sijaan, että $0 \leq x_i \leq 1$.

Kokonaislukuarvoisilla p_i, w_i, M muuttujat x_i tulevat olemaan rationaalisia. Ahne algoritmi antaa optimin:

RKNAP$(p_1, \ldots, p_n, w_1, \ldots, w_n, M)$
järjestä esineet s.e. $p_1/w_1 \geq p_2/w_2 \geq \ldots \geq p_n/w_n$
for $i = 1$ to n:
$x_i \leftarrow \min\left(1, \frac{M - \sum_{j=1}^{i-1} w_i x_i}{w_i}\right)$
return $\sum p_i x_i$

Selkäreppu

Seuraava algoritmi olettaa, että $\frac{p_1}{w_1} \geq \ldots \geq \frac{p_n}{w_n}$.

KNAPSACK3$(l, CurW)$:
if $l = n$:
    if $\sum p_i x_i > OptP$:
        $OptP \leftarrow \sum p_i x_i$
        $OptX \leftarrow X$

if $l = n$:
    $C_l \leftarrow \emptyset$
else if $CurW + w_{l+1} \leq M$:
    $C_l \leftarrow \{0, 1\}$
else:
    $C_l \leftarrow \{0\}$

$B \leftarrow \sum_{i=1}^{l} p_i x_i +$ RKNAP$(p_{l+1}, \ldots, p_n, w_{l+1}, \ldots w_n, M - CurW)$

for $x \in C_l$:
    if $B \leq OptP$
        return
    $x_{l+1} \leftarrow x$
    KNAPSACK3$(l + 1, CurW + w_{l+1} x_{l+1})$

Kirjan testeissä tietynlaisilla satunnaisilla ongelmilla tämä karsinta pienensi hakupuuta dramaattisesti (parhaimmillaan muttei epätyypillisesti 18953093→180).

Kauppamatkustajan ongelma

Annetaan $\mathsf{K}_n = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, n solmun täydellinen graafi, ja kustannusfunktio $\mathrm{cost} : \mathcal{E} \mapsto \mathbb{Z}^+$. Etsi Hamiltonin kierros X, jolle $\mathrm{cost}(X) = \sum_{e \in E(X)} \mathrm{cost}(e)$ on pienin. (Hamiltonin kierros on polku, joka käy kaikissa solmuissa ja palaa lähtöpisteeseensä.)

Hamiltonin kierros voidaan esittää solmujen permutaationa, ja kierros voidaan valita alkamaan solmusta 0. Kierros 2 5 1 0 3 4 6 2 voidaan siten esittää listana $[0, 3, 4, 6, 2, 5, 1]$ tai $[0, 1, 5, 2, 6, 4, 3]$.

```
TSP1(l):
if l = n:
    C ← cost(X)
    if C < OptC:
        OptC ← C
        OptX ← X

if l = 0:
    C_l ← {0}
else if l = 1:
    C_l ← {1, ... n − 1}
else
    C_l ← C_{l−1} \ {x_{l−1}}

for each x ∈ C_l:
    x_l ← x
    TSP1(l + 1)
```

Rajoitusfunktioita kauppamatkustajalle

cost-funktio voidaan esittää matriisina M, jossa m_{ij} on kaaren $(i, j)^*$ kustannus.

$$\mathsf{M} = \begin{bmatrix} \infty & 3 & 5 & 8 \\ 3 & \infty & 2 & 7 \\ 5 & 2 & \infty & 6 \\ 8 & 7 & 6 & \infty \end{bmatrix}$$

MINEDGEBOUND: Lasketaan kunkin sarakkeen (rivin) pienimmät arvot yhteen; pitäähän jokaiseen solmuun tulla jostakin (jokaisesta mennä jonnekin).

REDUCEBOUND: Jos jonkin rivin (sarakkeen) kaikista alkioista vähennetään k, kierroksen pituus pienenee k:lla. Siis: olkoon c sarakkeiden pienimpien alkioiden summa. Vähennetään kunkin sarakkeen kaikista alkioista pienin alkio. Lasketaan saadusta matriisista vastaavasti riveittäin r. Näin joka riville ja sarakkeeseen tulee ainakin yksi 0. Alaraja: $c + r$

*suunnattu(!)

Rajoituksia kauppamatkustajalle II

Osittaisratkaisua $X = [x_0, \ldots, x_{l-1}]$ vastaava alaraja saadaan seuraavasti: käsitellään X:ä kuin se olisi yksi solmu, josta solmuun y siirtyminen aiheuttaa kustannuksen $\mathrm{cost}((x_{l-1}, y))$ ja johon siirtyminen solmusta aiheuttaa kustannuksen $\mathrm{cost}((y, x_0))$.

Korvataan alkuperäisen matriisin rivi x_0 rivillä x_{l-1} ja asetetaan $m_{x_0 x_0} = \infty$. Poistetaan kustannusmatriisista rivit ja sarakkeet $x_1, \ldots, x_{l-1}$.

$$\mathrm{M} = \begin{bmatrix} \infty & 3 & 5 & 8 \\ 3 & \infty & 2 & 7 \\ 5 & 2 & \infty & 6 \\ 8 & 7 & 6 & \infty \end{bmatrix}$$

Näin ongelma on saatu redusoitua $n - l + 1$ solmun suunnatuksi kauppamatkustajan ongelmaksi, johon voidaan soveltaa edellisiä alarajoja.

Rajoituksia maksimiklikkiongelmalle

ALLCLIQUES-proseduurissa C_l oli niiden solmujen joukko, jotka ovat osittaisratkaisun yhteisiä naapureita, ja tulevat järjestyksessä osittaisratkaisun solmujen jälkeen.

Rajoitus: $B(X) = |X| + |C_l|$

Rajoja graafinväritysongelmasta: Jos graafin solmut voidaan värittää k värillä ilman, että yhdenkään kaaren päätepisteet ovat samanvärisiä, sen suurin klikki on kooltaan korkeintaan k (klikin kaikki solmut ovat naapureita ja siten erivärisiä).

Rajoitus: väritetään solmujen C_l indusoima graafi. Jos tämä onnistuu k värillä, $B(X) = |X| + k$.

Graafinväritysongelma on laskennallisesti hankala. Raja voidaan hakea ahneella algoritmilla: väritetään kukin solmu vuorollaan mahdollisimman pieninumeroisella värillä. Tai voidaan värittää graafin solmut aluksi, ja tarkastella kustakin C_l:stä, monenko värisiä solmuja se sisältää.

Haaraudu ja rajoita (branch and bound)

Aiemmin vaihtoehdot $x \in C_l$ on käyty läpi mielivaltaisessa järjestyksessä. Parempi voi olla laskea kullekin x:lle $B(X + [x])$ ja tarkastella ensin lupaavimpia vaihtoehtoja. Näin saatetaan löytää hyviä ratkaisuja karsimaan hakua.

BRANCHANDBOUND(X):
jos X on käypä ratkaisu:
    $P \leftarrow \text{profit}(X)$
        if $P > OptP$:
            $OptP \leftarrow P$
            $OptX \leftarrow X$

laske C_l

$vaihtoehdot \leftarrow$ [ ]
kullekin $x \in C_l$:
    laske $B_x \leftarrow B(X + [x])$
    $vaihtoehdot \leftarrow vaihtoehdot +$ [(x, B_x)]
järjestä $vaihtoehdot$ B_x:n laskevaan järjestykseen

kullekin $(x, B_x) \in vaihtoehdot$:
    if $B_x \leq OptP$:
        return
    BRANCHANDBOUND($X + [x]$)

Dynaaminen ohjelmointi maksimiklikkiongelmassa

Etsitään graafin $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, missä $\mathcal{V} = \{1, \ldots, n\}$. Esilasketaan $N_v = \{u \in \mathcal{V} : \{u, v\} \in E\}$ ja $G_v = \{u \in \mathcal{V} : u \geq v\}$. Merkitään c_v:llä suurimman G_v:hen sisältyvän klikin S kokoa. Dynaaminen ohjelmointi:

for $i = n$ downto 1:
    $found \leftarrow$false
    MaxClique$([i], G_i \cap N_i)$
    $c_i \leftarrow OptP$

$c_{i-1} \in \{c_i, c_i + 1\}$, ja $c_{i-1} = c_i + 1$ vain silloin, kun G_{i-1} sisältää $c_i + 1$ solmun klikin, johon kuuluu solmu $i - 1$

MaxClique(X, N):
if $|X| > OptP$:
    $OptP \leftarrow |X|$
    $OptX \leftarrow X$
    $found \leftarrow$true
return

if $|X| + |N| \leq OptP$
    return

for $x \in N$:
    if $|X| + c_x \leq OptP$:
        return
    MaxClique$(X + [x], N \cap N_x)$
    if $found$:
        return

Heuristiset menetelmät

heuristic: involving or serving as an aid to — problem-solving by experimental and especially trial-and-error methods; also : of or relating to exploratory problem-solving techniques that utilize self-educating techniques (as the evaluation of feedback) to improve performance

- kun ratkaisuavaruus on liian suuri peräytymishaulle

- etsivät hyviä ratkaisuja yrityksen ja erehdyksen kautta tekemällä muutoksia aiempiin ratkaisuihin

- sopivat optimointiongelmiin (jos hyvä ratkaisu riittää) ja hakuongelmiin, mutta eivät yleensä enumerointi- tai generointiongelmiin

Optimointiongelma

$$\max P(x)$$
$$g_j(x) \leq 0,\ j = 1 \ldots m$$
$$x \in X$$
$$X \text{ äärellinen}$$

$P(x)$ on kohdefunktio, ja $g_j(x) \leq 0$:t ovat rajoitusehtoja. Mikä tahansa $x \in X$ on ratkaisu. Jos lisäksi $g_j(x) \leq 0$, x on käypä ratkaisu. Jos $P(x) \geq P(x')$ kaikilla $x' \in X$, $g_j(x') \leq 0$, ratkaisu x on optimaalinen.

Sakkofunktiomenetelmällä saadaan epäkäyvistä ratkaisuista käypiä:

$$\max P(x) - \mu \textstyle\sum_j \Phi\left(g_j(x)\right)$$
$$x \in X$$
$$X \text{ äärellinen,}$$

missä $\Phi(y) = 0$, kun $y \leq 0$, ja $\Phi(y) > 0$, kun $y > 0$. Voidaan valita riittävän suuri μ:n arvo heti aluksi tai kasvattaa μ:tä vähitellen.

Yleinen heuristinen menetelmä

Heuristisissa menetelmissä keskeinen käsite on naapuristo. Ratkaisun x naapuristo on $N(x) \subseteq X$. Heuristiikka $h_N(x)$ palauttaa jonkin käyvän ratkaisun x:n naapuristosta tai $Fail$.

GENERICHEURISTICSEARCH:
$x \leftarrow$ jokin käypä $x \in X$
$BestX \leftarrow x$
while not $lopetusehto$:
    $y \leftarrow h_N(x)$
    if $y \neq Fail$
        $x \leftarrow y$
        if $P(x) > P(BestX)$
            $BestX \leftarrow X$
return $BestX$

Mahdollisia heuristiikkoja

1. etsi käypä $y \in N(x) \setminus \{x\}$, jolle $P(y)$ on suurin; palauta y tai $Fail$, jos ainoatakaan käypää ratkaisua ei ole

2. etsi käypä $y \in N(x)$, jolle $P(y)$ on suurin; jos $P(y) > P(x)$, palauta y, muuten $Fail$

3. etsi jokin käypä $y \in N(x)$

4. etsi jokin käypä $y \in N(x)$; jos $P(y) > P(x)$, palauta y, muuten $Fail$

Tasainen graafin ositus

Annettu: $2n$ solmun täydellinen graafi $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ ja kustannusfunktio $\mathrm{cost} : \mathcal{E} \mapsto \mathbb{Z}^+ \cup \{0\}$.

$$\min C\{\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1\} = \sum_{v_0 \in \mathcal{V}_0, v_1 \in \mathcal{V}_1} \mathrm{cost}(\{v_0, v_1\})$$

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}_0 \cup \mathcal{V}_1, |\mathcal{V}_0| = |\mathcal{V}_1| = n$$

Esimerkkiratkaisu: Ratkaisuavaruus X olkoon $\mathcal{V}$:n ositusten $[\mathcal{V}_0, \mathcal{V}_1]$, joille $|\mathcal{V}_0| = |\mathcal{V}_1| = n$. Osituksen x naapuristoksi $N(x)$ valitaan niiden ositusten joukko, jotka saadaan x:stä siirtämällä kummastakin joukosta yksi alkio toiseen. Heuristiikka $h_N(x)$ voisi olla steepest ascent: etsi paras naapuri y; jos kohdefunktio paranee, palauta y, muuten $Fail$.

Naapuristoheuristiikat

Maksimoitaessa kullakin iteraatiolla

Steepest ascent: Valitaan x:n käypä naapuri, jolla kohdefunktion arvo on suurin, kunnes ei enää löydy naapuria, johon siirryttäessä kohdefunktio kasvaisi

Hill-climbing: Valitaan jokin x:n käypä naapuri, jolla kohdefunktion arvo kasvaa, kunnes sellaista ei enää löydy

Molemmat näistä pysähtyvät ensimmäiseen paikalliseen optimiin. Paikallinen optimi on ratkaisu x, jolle pätee, että $P(x) > P(y)$ kaikilla käyvillä $y \in N(x)$.

Lokaaleja optimeja voidaan jossakin määrin vähentää laajentamalla naapuristoa, mutta se harvoin poistaa ongelman; lisäksi naapuriston kasvaessa $h_N(x)$:n laskenta tulee työläämmäksi.

Naapuristoheuristiikat II

Great deluge: Valitaan joka iteraatiolla käypä naapuri $y \in N(x)$, jolle $P(y) \geq W$, missä W on vedenpinnan taso. Kasvatetaan W:tä aika ajoin, kunnes käypiä naapureita ei ole.

Record-to-record travel: Valitaan joka iteraatiolla käypä naapuri $y \in N(x)$, jolle $P(y) \geq P(BestX) - D$, missä D on vakio.

Simuloitu jäähdytys

Simuloitu jäähdytys perustuu analogiaan metallin jäähtymisestä.

$h_N(x)$: Valitaan satunnainen $y \in N(x)$. Olkoon $\Delta P = P(y) - P(x)$. Jos $\Delta P \geq 0$, palautetaan y. Jos $\Delta P < 0$, palautetaan y todennäköisyydellä $e^{\Delta P/T}$, missä T on systeemin senhetkinen lämpötila; muuten $Fail$.

Aluksi T on suhteellisen suuri, joten ratkaisua huonontavia siirtoja hyväksytään usein. Haun mittaan lämpötilaa lasketaan, jolloin huonontavia siirtoja hyväksytään yhä harvemmin.

Yksinkertaisimmillaan voidaan joka iteraatiolla asettaa $T \leftarrow \alpha T$, missä $\alpha < 1$, mutta $a \approx 1$.

Tabu-haku

Heuristiikka, jossa valitaan x:n käypä naapuri, jolla kohdefunktion arvo on suurin, siirtyy kyllä pois paikallisesta optimista, mutta palaa usein heti takaisin. Siksi tabu-haku:

$h_N(x)$: Valitaan x:n käypä naapuri, jolla kohdefunktion arvo on suurin, kuitenkin perumatta mitään viimeisen l iteraation aikana tehtyä muutosta.

$\text{change}(x, y)$ kuvaa muutosta, joka tehdään siirryttäessä x:stä sen naapuriin y:hyn.

TABUSEARCH
$TabuList \leftarrow []$
valitse käypä $x \in X$
while not $lopetusehto$:
    $T = \{y : y \in N(x), \text{change}(x, y) \in TabuList\}$
    $N \leftarrow N(x) \setminus T$
    etsi käypä $y \in N$ jolle $P(y)$ on suurin
    $x \leftarrow y$
    lisää $TabuList$:iin $\text{change}(y, x)$
    poista $TabuList$:stä kaikki paitsi l uusinta alkiota
    if $P(X) > BestP$
        $BestP \leftarrow P(X)$
        $BestX \leftarrow X$

Ryhmä

Joukko-operaatiopari $(G, *)$ on ryhmä, jos

1. Binäärinen operaatio $*$ on suljettu: $g_1 * g_2 \in G$ kaikilla $g_1, g_2 \in G$, ts. $* : G \times G \mapsto G$

2. Ryhmässä on yksikköalkio $\mathbf{I}$, jolla $g*\mathbf{I} = g = \mathbf{I}*g$ kaikilla $g \in G$

3. Jokaisella $g \in G$ on käänteisalkio $g^{-1} \in G$, jolle $g^{-1} * g = \mathbf{I} = g * g^{-1}$

4. Binäärioperaatio $*$ on liitännäinen: $(g_1*g_2)*g_3 = g_1*(g_2*g_3)$ kaikilla $g_1, g_2, g_3 \in G$

Esimerkkejä:
kokonaisluvut modulo n ja yhteenlasku
$m \times m$-matriisit, joiden determinantti $\neq 0$
kolmiulotteisen kappaleen rotaatiot

Kun operaatio on ilmeinen, puhutaan ryhmästä G.

Kertotaulu

Äärellinen ryhmä voidaan esittää tauluna:

$*$	$\mathbf{I}$	a	b	c	d	e	f	g
$\mathbf{I}$	$\mathbf{I}$	a	b	c	d	e	f	g
a	a	b	c	$\mathbf{I}$	e	f	g	d
b	b	c	$\mathbf{I}$	a	f	g	d	e
c	c	$\mathbf{I}$	a	b	g	d	e	f
d	d	g	f	e	$\mathbf{I}$	c	b	a
e	e	d	g	f	a	$\mathbf{I}$	c	b
f	f	e	d	g	b	a	$\mathbf{I}$	c
g	g	f	e	d	c	b	a	$\mathbf{I}$

Kun `1.` riviin ja sarakkeeseen laitetaan $\mathbf{I}$, kertotaulu on redusoitu latinalainen neliö, jossa pätee liitännäisyys $M\left[M\left[g_i, g_j\right], g_k\right] = M\left[g_i, M\left[g_j, g_k\right]\right]$.

Ryhmän aliryhmä:
H on G:n aliryhmä, jos H on ryhmä ja $H \subseteq G$.
Esim. edellisessä taulussa $\{\mathbf{I}, a, b, c\}$.

Aliryhmistä

Äärellisen ryhmän kertaluku $|G|$ on joukon alkioiden lkm.

Jos H on ryhmän G epätyhjä osajoukko, H on G:n aliryhmä, joss H on suljettu (G:n operaatiolla):

Tod. Jos $H = \{\mathbf{I}\}$, tilanne on selvä. Oletetaan, että $h_1 h_2 \in H$ kaikilla $h_1, h_2 \in H$. Valitaan jokin $h \in H$. Kaikilla $n \in \mathbb{Z}^+$ pätee: $h^n = hh \ldots h \in H$. Koska H on äärellinen, täytyy olla jotkin $m < n$ s.e. $h^m = h^n$. Nyt $h^n h^{n-m} = h^m h^{n-m} = h^n$, ja $h^{n-m} = \mathbf{I} \in H$ sekä $h^{-1} = h^{n-m-1} \in H$.

Sivuluokat

Kun $g \in G$ ja $H \subseteq G$, merkitään $gH = \{gh : h \in H\}$.
Kun $A, B \subseteq G$, merkitään $AB = \{ab : a \in A, b \in B\}$.

Olkoon H äärellisen ryhmän G aliryhmä. gH on vasen sivuluokka (left coset), johon $g \in G$ kuuluu.

Lagrange: jos H on G:n aliryhmä, G voidaan esittää pistevieraiden vasempien sivuluokkien unionina:

$$G = g_1 H \cup g_2 H \cup \ldots \cup g_n H,$$

missä $g_i \in G$, ja $g_i H \cap g_j H = \emptyset$, kun $i \neq j$.

Tod. $|gH| = |H|$ kaikilla $g \in G$, sillä $f(x) = gx$ on bijektio $H \mapsto gH$. Jos $g_1 H \cap g_2 H \neq \emptyset$, missä $g_1, g_2 \in G$, täytyy olla olemassa $h_1, h_2 \in H$, joilla $g_1 h_1 = g_2 h_2$ ja $g_1 = g_2 h_2 h_1^{-1}$. Nyt mille tahansa $h \in H$ saadaan $g_1 h = g_2 \left(h_2 h_1^{-1} h\right) \in g_2 H$, ja $g_1 H \subseteq g_2 H$. Koska $|g_1 H| = |g_2 H| = |H|$, $g_1 H = g_2 H$. Lisäksi jokainen $g \in G$ kuuluu sivuluokkaan gH; sivuluokat siis osittavat G:n, ja $|G|$ on jaollinen $|H|$:lla.

Transversaalit

Kun G esitetään pistevieraiden vasempien sivuluokkien unionina

$$G = g_1H \cup g_2H \cup \ldots \cup g_nH,$$

joukko $T = \{g_1, \ldots, g_n\}$ on H:n vasen transversaali. Se voidaan muodostaa valitsemalla $n = \frac{|G|}{|H|}$ sivuluokan edustajaa $g_i \in G$ siten, että mikään valittu g_i ei kuulu mihinkään aiempaan sivuluokkaan.

$*$	$\mathbf{I}$	a	b	c	d	e	f	g
$\mathbf{I}$	$\mathbf{I}$	a	b	c	d	e	f	g
a	a	b	c	$\mathbf{I}$	e	f	g	d
b	b	c	$\mathbf{I}$	a	f	g	d	e
c	c	$\mathbf{I}$	a	b	g	d	e	f
d	d	g	f	e	$\mathbf{I}$	c	b	a
e	e	d	g	f	a	$\mathbf{I}$	c	b
f	f	e	d	g	b	a	$\mathbf{I}$	c
g	g	f	e	d	c	b	a	$\mathbf{I}$

Aliryhmällä $H = \{\mathbf{I}, a, b, c\}$ on sivuluokat $\{\mathbf{I}, a, b, c\}$ ja $\{d, e, f, g\}$. Transversaali saadaan valitsemalla kustakin sivuluokasta yksi alkio; esim. $T = \{\mathbf{I}, d\}$ tai $T = \{b, f\}$. $TH = \mathbf{I}\{\mathbf{I}, a, b, c\} \cup d\{\mathbf{I}, a, b, c\} = \{\mathbf{I}, a, b, c\} \cup \{d, e, f, g\} = G$.

Permutaatioryhmät

Tarkastellaan jonkin perusjoukon $\mathcal{X}$ permutaatioita.

Permutaatiot (bijektiot $\pi : \mathcal{X} \mapsto \mathcal{X}$) muodostavat ryhmän, kun operaatioksi valitaan funktioiden yhdistely $(\pi_1 \pi_2)(x) = (\pi_1 \circ \pi_2)(x) = \pi_1(\pi_2(x))$, sillä

1. Kahden permutaation yhdiste on permutaatio
2. on olemassa identiteettialkio ($\mathbf{I}(x) = x$)
3. permutaatioilla on käänteispermutaatio
4. funktioiden yhdistely on liitännäistä

Olkoon $\mathcal{X}$ epätyhjä joukko ja $\mathsf{Sym}(\mathcal{X})$ sen permutaatioiden joukko. $\mathsf{Sym}(\mathcal{X})$ operaationa funktioiden yhdistäminen on $\mathcal{X}$:n symmetrinen ryhmä. Jos $|\mathcal{X}| = n$, niin $\mathsf{Sym}\{X\}$:ssä on $n!$ alkiota.

Permutaatioryhmät ovat symmetrisen ryhmän aliryhmiä.
Esim. Kun $\mathcal{X} = \{0, 1, 2, 3, 4\}$, permutaatiot
$\{\mathbf{I}, (0,1,2)(3,4), (0,2,1), (3,4), (0,1,2), (0,2,1)(3,4)\}$
muodostavat permutaatioryhmän.

Graafin automorfismit

Merkitään $\alpha(\{u, v\}) = \{\alpha(u), \alpha(v)\}$

Graafin $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ automorfismi α on sellainen $\mathcal{V}$:n permutaatio, että $\alpha(\{u, v\}) \in \mathcal{E}$ kaikille graafin kaarille $\{u, v\} \in \mathcal{E}$.

Automorfismit muodostavat ryhmän $\mathsf{Aut}(G)$:

$\mathsf{Aut}(G)$ on epätyhjä, sillä selvästi $\mathbf{I} \in \mathsf{Aut}(G)$

Jos $\alpha, \beta \in \mathsf{Aut}(G)$, niin $\alpha\beta \in \mathsf{Aut}(G)$: oletetaan, että $\{u, v\} \in \mathcal{E}$. $\beta(\{u, v\}) \in \mathcal{E}$, ja $(\alpha\beta)(\{u, v\}) = \alpha(\beta(\{u, v\})) \in \mathcal{E}$, joten $\mathsf{Aut}(G)$ on suljettu.

$\mathsf{Aut}(G)$ on $\mathsf{Sym}(\mathcal{V})$:n epätyhjä osajoukko, joka on suljettu samalla operaatiolla, joten $\mathsf{Aut}(G)$ on $\mathsf{Sym}(\mathcal{V})$:n aliryhmä ja siis ryhmä.

Generaattorit

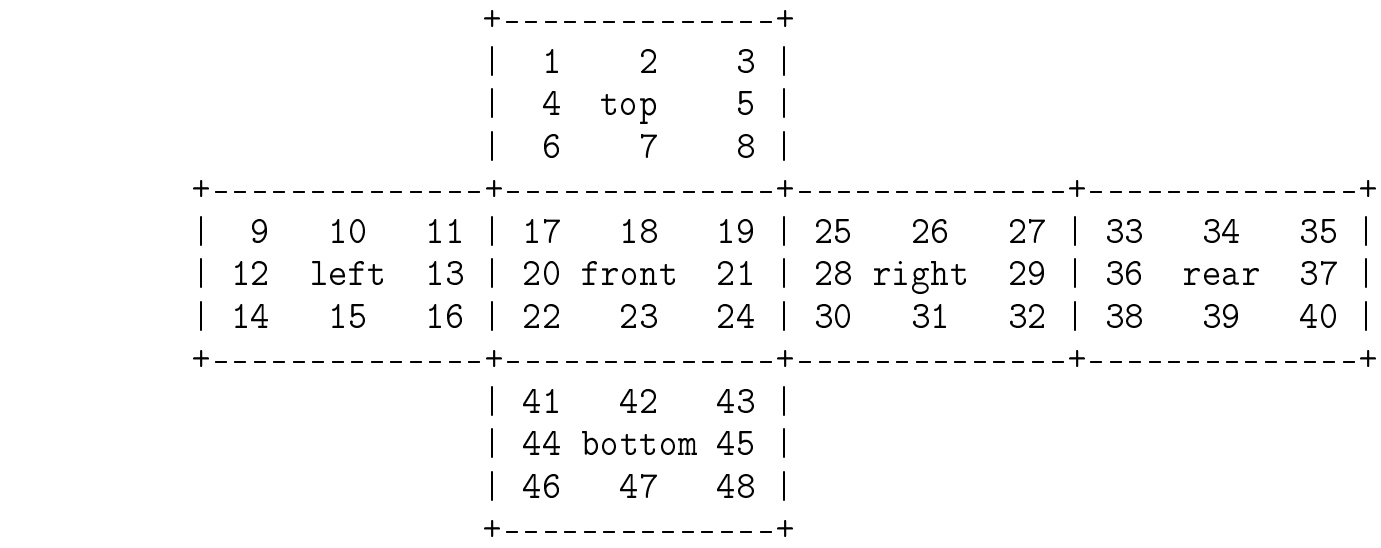
Alkiot $\alpha_1, \ldots, \alpha_r$ generoivat ryhmän G, jos kaikki alkiot $g \in G$ voidaan esittää alkioiden $\alpha_1, \ldots, \alpha_r$ äärellisenä tulona

$$g = \alpha_{i_1}\alpha_{i_2}\ldots\alpha_{i_m},$$

missä $1 \leq i_j \leq r$ kaikilla j. Alkiot $\alpha_1, \ldots, \alpha_r$ ovat ryhmän G generaattorit, ja merkitään $G = \langle \alpha_1, \ldots, \alpha_r \rangle$.

Esimerkki: Rubikin kuutio

> Ideal Toy Company stated on the package of the original Rubik cube that there were more than three billion possible states the cube could attain. It's analogous to MacDonald's proudly announcing that they've sold more than 120 hamburgers. (J. A. Paulos, Innumeracy)



Ryhmä on seuraavien generaattorien generoima:

```
gap> cube := Group(
( 1, 3, 8, 6)( 2, 5, 7, 4)( 9,33,25,17)(10,34,26,18)(11,35,27,19),
( 9,11,16,14)(10,13,15,12)( 1,17,41,40)( 4,20,44,37)( 6,22,46,35),
(17,19,24,22)(18,21,23,20)( 6,25,43,16)( 7,28,42,13)( 8,30,41,11),
(25,27,32,30)(26,29,31,28)( 3,38,43,19)( 5,36,45,21)( 8,33,48,24),
(33,35,40,38)(34,37,39,36)( 3, 9,46,32)( 2,12,47,29)( 1,14,48,27),
(41,43,48,46)(42,45,47,44)(14,22,30,38)(15,23,31,39)(16,24,32,40)
);;

gap> Size( cube );
43252003274489856000
```

Ryhmien isomorfismi

Tarkastellaan ryhmiä

$$G' = \left\{ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \right\}$$

operaationa matriisien kertolasku, ja

$$G'' = \left\{ \begin{array}{cccc} \mathbf{I}, & (0,1,2,3), & (0,1)(2,3), & (0,2), \\ (0,2)(1,3), & (0,3,2,1), & (0,3)(1,2), & (1,3) \end{array} \right\}$$

Molemmat vastaavat neliön automorfismiryhmää; G':lle neliö on esim. joukko $\left\{ \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} : |x_i| \leq d \right\} \subset \mathbb{R}^2$ ja G'':lle esim. graafi $(\mathcal{V}, \mathcal{E})$, missä $\mathcal{V} = \{0,1,2,3\}$ ja $E = \{\{0,1\},\{1,2\},\{2,3\},\{3,0\}\}$.

Kummankin ryhmän alkioita voidaan tarkastella funktioina, jotka kuvaavat joukon itselleen; $\mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}^2$ tai $\mathcal{V} \mapsto \mathcal{V}$.

Ryhmien rakenne on täsmälleen sama!

Ryhmien isomorfismi

Voidaan haluta erottaa ryhmän rakenne siitä, millaisia vaikutuksia sen alkioilla on johonkin joukkoon.

Tällöin ryhmä voidaan esittää luettelemalla sen generaattorit ja generaattorien väliset suhteet. Sekä G' että G'' voidaan esittää muodossa

$$\langle r, s \rangle : r^4 = s^2 = (rs)^2 = e$$

Ryhmä on $G = \left\{e, r, r^2, r^3, s, rs, r^2s, sr\right\}$; muut generaattorien tulot voidaan sieventää joksikin näistä.

Homomorfismi ryhmältä G ryhmälle H on kuvaus G:ltä H:lle, joka säilyttää ryhmän rakenteen: $\phi : G \mapsto H$, $\phi(xy) = \phi(x)\,\phi(y)$. Bijektiivinen homomorfismi on ryhmien isomorfismi. Esimerkissä eräät isomorfismit saadaan määrittelemällä

$\phi'(e) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$, $\phi(r) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$, $\phi(s) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ jne.

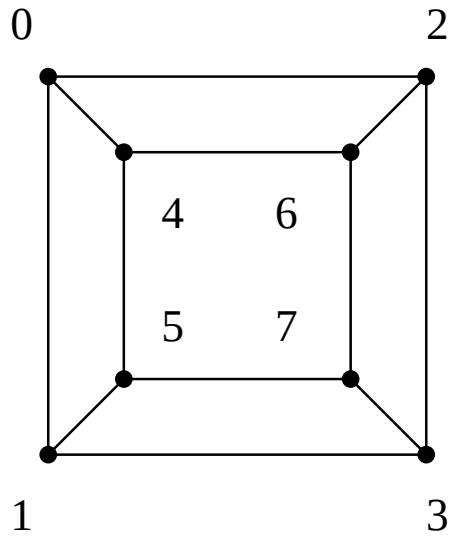
$\phi''(e) = \mathbf{I}$, $\phi''(r) = (0,1,2,3)$, $\phi''(s) = (0,1)\,(2,3)$ jne.

Permutaatioryhmän tietokone-esitykset

Permutaatioryhmän esityksellä olisi hyvä olla seuraavat ominaisuudet:

1. Voidaan tarkistaa, kuuluuko jokin g ryhmään G
2. Voidaan luetella ryhmän alkiot
3. On tilavaatimuksiltaan kohtuullinen

Esim. kuutiograafi:



Aut $(G) = \langle \alpha, \beta \rangle$, missä $\alpha = (0,1,3,7,6,4)\,(2,5)$ ja $\beta = (0,1,3,2)\,(4,5,7,6)$.

$|G| = 48$.

Permutaatioryhmän tietokone-esitykset

Voitaisiin tallettaa ryhmän permutaatiot esim. leksikografisessa järjestyksessä.

1. Selviää binäärisellä haulla, kuuluuko g G:hen
2. Alkiot voidaan luetella helposti
3. Tilaa tarvitaan paljon; Sym (n):llä ryhmässä on $n!$ permutaatiota

Voitaisiin tallettaa vain ryhmän generaattorit.

3. Tallennustilaa tarvitaan vähän, mutta
1. & 2. Joudutaan tekemään breadth-first-haku kaikkien alkioiden generoimiseksi, ja saadaan duplikaatteja; esimerkissä $\alpha\alpha\alpha\alpha\alpha\beta\beta\beta = \alpha\beta\alpha\alpha$.

SIMPLEGEN(Γ):
$G \leftarrow \emptyset$
$N \leftarrow \{\mathbf{I}\}$
while $N \neq \emptyset$:
  $G \leftarrow G \cup N$
  $N \leftarrow N\Gamma \setminus G$

missä Γ on ryhmän generaattorien joukko ja $N\Gamma$ on $\{ng : n \in N, g \in \Gamma\}$.

Schreier-Sims

Olkoon G permutaatioryhmä joukossa $\mathcal{X} = \{0, \ldots, n-1\}$. Merkitään

$$\begin{aligned} G_0 &= \{g \in G : g(0) = 0\} \\ G_1 &= \{g \in G_0 : g(1) = 1\} \\ G_2 &= \{g \in G_1 : g(2) = 2\} \\ &\vdots \\ G_{n-1} &= \{g \in G : g(n-1) = n-1\} = \{\mathbf{I}\} \end{aligned}$$

G_i ovat aliryhmiä, ja $G \supseteq G_0 \supseteq \ldots \supseteq G_{n-1} = \{\mathbf{I}\}$.

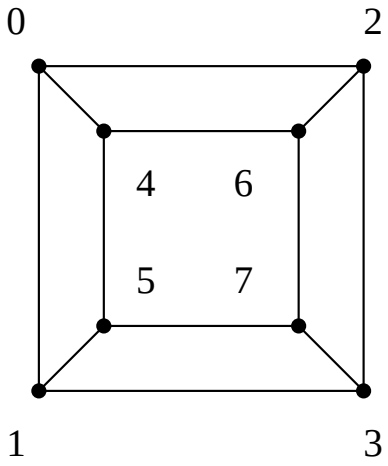
Alkion 0 rata G:ssä on
$\mathsf{orb}(0) = \{g(0) : g \in G\} = \left\{x_{0,1}, x_{0,2}, \ldots, x_{0,n_0}\right\}$.

Muodostetaan $\mathcal{U}_0$ valitsemalla kutakin $1 \leq i \leq n_0$ kohti yksi permutaatio $h_{0,i}$, jolle $h_{0,i}(0) = x_{0,i}$.

$\mathcal{U}_0$ on G_0:n vasen transversaali ($G = U_0 G_0$): Jokainen $g \in G$ kuvaa 0:n jollekin $x_{0,i}$:lle. $g = h_{0,i}\left(h_{0,i}^{-1} g\right)$, ja $h_{0,i}^{-1} g \in G_0$. Siten $g \in h_{0,i} G_0$. $\mathcal{U}$:ssa ei ole kahta saman sivuluokan edustajaa: kunkin sivuluokan $h_{0,i} G_0$ alkiot kuvaavat 0:n eri $x_{0,i}$:lle.

Samoin $\mathsf{orb}(i) = \{g(i) : g \in G_{i-1}\} = \left\{x_{i,1}, \ldots, x_{i,n_i}\right\}$ ja $\mathcal{U}_i = \left\{h_{i,1}, \ldots, h_{i,n_i}\right\}$. Rekursiolla saadaan G:n Schreier-Sims-esitys $G = \mathcal{U}_0 \mathcal{U}_1 \ldots \mathcal{U}_{n-1}$.

Schreier-Sims-esimerkki



Kuutiograafille voidaan valita esim.

$$\mathcal{U}_0 = \left\{ \begin{array}{l} (0)\,(1)\,(2)\,(3)\,(4)\,(5)\,(6)\,(7)\,, \\ (0,1,3,7,6,4)\,(2,5)\,, \\ (0,2,6,4)\,(1,3,7,5)\,, \\ (0,3,6)\,(1,7,4)\,(2)\,(5)\,, \\ (0,4,6,7,3,1)\,(2,5)\,, \\ (0,5,3,6)\,(1,7,2,4)\,, \\ (0,6,3)\,(1,4,7)\,(2)\,(5)\,, \\ (0,7)\,(1,6)\,(2,5)\,(3,4) \end{array} \right\}$$

$$\mathcal{U}_1 = \left\{ \begin{array}{l} (0)\,(1)\,(2)\,(3)\,(4)\,(5)\,(6)\,(7)\,, \\ (0)\,(1,2)\,(3)\,(4)\,(5,6)\,(7)\,, \\ (0)\,(1,4,2)\,(3,5,6)\,(7) \end{array} \right\}$$

$$\mathcal{U}_2 = \left\{ \begin{array}{l} (0)\,(1)\,(2)\,(3)\,(4)\,(5)\,(6)\,(7)\,, \\ (0)\,(1)\,(2,4)\,(3,5)\,(6)\,(7) \end{array} \right\}$$

ja $\mathcal{U}_3, \ldots, \mathcal{U}_7 = \{(0)\,(1)\,(2)\,(3)\,(4)\,(5)\,(6)\,(7)\}$.

Schreier-Sims

Kun tunnetaan G:n Schreier-Sims-esitys $\mathcal{U}_0\mathcal{U}_1 \ldots \mathcal{U}_{n-1}$, kaikki elementit on helppo käydä läpi rekursiivisesti: lasketaan kaikki $g = u_0u_1 \ldots u_{n-1}$, missä $u_i \in \mathcal{U}_i$.

Tarkistaminen, onko $g \in G$ tapahtuu seuraavasti. Yritetään kirjoittaa $g \in G$ voidaan kirjoittaa muodossa $u_0u_1 \ldots u_{n-1}$. Ensin $g(0)$:sta päätellään, mikä $u_0 \in \mathcal{U}_0$ on valittava (se, jolle $u_0(0) = g(0)$). Tämän jälkeen ongelma redusoituu tarkistamiseen, onko $u_0^{-1}g \in G_0$, ts. yritetään kirjoittaa $u_0^{-1}g$ muotoon $u_1 \ldots u_n$, jne.

TEST$(n, g, G = [\mathcal{U}_0, \ldots, \mathcal{U}_{n-1}])$:
for $i \leftarrow 0$ to $n-1$:
    jos löytyy $h \in \mathcal{U}_i$, jolle $h(i) = g(i)$:
        $g \leftarrow h^{-1}g$
    muuten:
        return i
return n

Schreier-Sims-esityksen laskeminen

Seuraavassa enter-funktio tarkastaa, kuuluuko g Schreier-Sims-muodossa esitetyyn ryhmään G, ja jollei kuulu, lisää generaattoreihin g:n. (Kirjan toimivuustodistuksessa on jotakin vikaa.)

ENTER$(n, g, G = [\mathcal{U}_0, \mathcal{U}_1, \ldots, \mathcal{U}_{n-1}])$:
$i \leftarrow$TEST$(n, g, G = [\mathcal{U}_0, \mathcal{U}_1, \ldots, \mathcal{U}_{n-1}])$
if $i = n$
    return
$\mathcal{U}_i \leftarrow \mathcal{U}_i \cup \{g\}$
for $j =$ 0 to i:
    for $h \in \mathcal{U}_j$:
    ENTER(n, gh, G)

MAIN
for $i \leftarrow$ 0 to $n - 1$:
    $\mathcal{U}_i \leftarrow \{\mathbf{I}\}$
for $\alpha \in \Gamma$:
    ENTER$(n, \alpha, G = [\mathcal{U}_0, \ldots, \mathcal{U}_{n-1}])$
return G

Schreier-Sims-kannanvaihdos

Edellä Schreier-Simsissä kiinnitettiin alkiot järjestyksessä $0, \ldots, n-1$. Voidaan toki kiinnittää alkiot mielivaltaisessa järjestyksessä. Valitaan alkioiden $\{0, \ldots, n-1\}$ permutaatio β, ja

$$G_0 = \{g \in G : g(\beta(0)) = \beta(0)\},$$

ja

$$G_i = \{g \in G_{i-1} : g(\beta(i)) = \beta(i)\}.$$

Kaikki operaatiot tehdään aivan vastaavasti kuin aiemmin.

Uutena operaationa on kannanvaihto: muunna kannassa β esitetty ryhmä kantaan β'. Tämä tehdään lisäämällä kannan β permutaatiot enter-proseduurilla kannan β' mukaiseen Schreier-Sims-esitykseen.

Osajoukon radat

G olkoon $\mathcal{X}$:n permutaatioryhmä ja $S \subseteq \mathcal{X}$. S:n kuva g:llä on $g(S) = \{g(s) : s \in S\}$. G siis permutoi myös $\mathcal{X}$:n osajoukkoja.

S:n rata on $G(S) = \{g(S) : g \in G\}$. Jos joukkojärjestelmällä on epätriviaali automorfismiryhmä, sen blokkien joukko on unioni osajoukkojen radoista.

S:n stabiloija G:ssä on $G_S = \{g \in G : g(S) = S\}$. G_S on G:n aliryhmä.

Lemma: $|G| = |G(S)| \cdot |G_S|$.

Tod: G_S:n sivuluokat osittavat G:n; jokainen $g \in G$ kuuluu sivuluokkaan gG_S. Jos $g_1(S) = g_2(S)$, niin $g_2^{-1} g_1(S) = \mathbf{I}(S) = S$, ja $g_2^{-1} g_1 \in G_S$. Nyt $g_2 G_S = g_2 \left(g_2^{-1} g_1 G_S\right) = g_1 G_S$, joten g_1 ja g_2 kuuluvat samaan sivuluokkaan. Jos g_1 ja g_2 kuuluvat eri sivuluokkiin, niin $g_1(S) \neq g_2(S)$. Sivuluokkia on $|G| / |G_S|$, ja jokainen kuvaa S:n eri joukolle, joten $|G(S)| = |G| / |G_S|$.

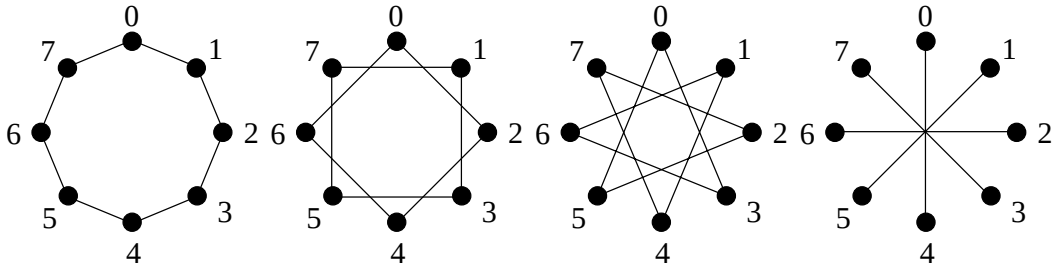
Esimerkki: Ramseyn luku

Ramseyn luku $R(k,l)$ on pienin kokonaisluku n, jolla kaikki n solmun graafit sisältävät k solmun klikin tai l solmun riippumattoman joukon. Osoitetaan, että $R(3,4) > 8$ etsimällä 8 solmun graafi, jossa ei ole 3 solmun klikkiä eikä 4 solmun riippumatonta joukkoa.

Rajoitetaan hakuavaruutta arvaamalla, että voimme löytää ehdot täyttävän graafin $G = (\mathcal{V} = \{0, 1, \ldots, 7\}, \mathcal{E})$, jonka automorfismiryhmä on syklinen:
$\mathrm{Aut}(G) = \langle(0,1,2,3,4,5,6,7)\rangle$.
Tällöin $\mathcal{E}$ on unioni $\mathcal{V}$:n 2-osajoukkojen ratoja.

$\mathcal{V}$:n 2-osajoukkojen radat ovat

$O_1 = \{\{0,1\},\{1,2\},\{2,3\},\{3,4\},\{4,5\},\{5,6\},\{6,7\},\{0,7\}\}$
$O_2 = \{\{0,2\},\{1,3\},\{2,4\},\{3,5\},\{4,6\},\{5,7\},\{0,6\},\{1,7\}\}$
$O_3 = \{\{0,3\},\{1,4\},\{2,5\},\{3,6\},\{4,7\},\{0,5\},\{1,6\},\{2,7\}\}$
$O_4 = \{\{0,4\},\{1,5\},\{2,6\},\{3,7\}\}$.



Kokeilemalla huomataan, että $\mathcal{E} = O_3 \cup O_4$ ja $\mathcal{E} = O_1 \cup O_4$ täyttävät ehdot.

Ryhmän vaikutus (action)

Ryhmän G vaikutus joukkoon $\mathcal{X}$ on funktio $\alpha : G \times \mathcal{X} \mapsto \mathcal{X}$, merkitään $\alpha : (g, x) \mapsto gx$, jolle pätee:

1. $\mathbf{I}x = x$ kaikille $x \in \mathcal{X}$
2. $g(hx) = (gh)x$ kaikilla $g, h \in G$ ja $x \in \mathcal{X}$.

Huomaa, että jos $gx_1 = gx_2$, niin
$g^{-1}(gx_1) = \left(g^{-1}g\right)x_1 = \mathbf{I}x_1 = x_1$
$= g^{-1}(gx_2) = \left(g^{-1}g\right)x_2 = \mathbf{I}x_2 = x_2$; itse asiassa kukin g määrittää joukon $\mathcal{X}$ permutaation: on olemassa ryhmähomomorfismi $\widetilde{\alpha}$ G:ltä $\mathsf{Sym}(\mathcal{X})$:lle:
$\widetilde{\alpha}(g) : x \mapsto gx = \alpha(g, x)$.

Näin alkion x rata on $\mathsf{orb}(x) = \{gx : g \in G\} \subset \mathcal{X}$ ja alkion x stabiloija on $G_x = \{g \in G : gx = x\} \subseteq G$.

Edelleen $|\mathsf{orb}(x)| = |G| / |G_x|$.

Burnsiden lemma

(Frobenius, 1887) Jos äärellinen ryhmä G vaikuttaa äärelliseen joukkoon X, ja N on ratojen lukumäärä, niin

$$N = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} F(g),$$

missä $F(g)$ on niiden $x \in \mathcal{X}$ lukumäärä, joille $gx = x$.

Tod: yo. summassa kukin $x \in \mathcal{X}$ lasketaan $|G_x|$ kertaa (G_x:n määritelmän mukaan). Jos x ja y ovat samalla radalla, niin $|G_x| = |G_y|$, joten radan kaikki $|G|/|G_x|$ alkiota lasketaan $|G_x|$ kertaa, yhteensä siis $|G|$ kertaa. Joka radasta summaan tulee $|G|$, jolla jakamalla saadaan ratojen määrä.

Burnsiden lemma

Tarkastellaan k-osajoukkoja, joihin permutaatioryhmä vaikuttaa luonnollisella tavalla ja lasketaan, montako k-osajoukkoa g kiinnittää:
$F(g) = |\{S \subseteq \mathcal{X}\} : |S| = k \text{ ja } g(S) = S|$.

Ensin lasketaan g:n syklien pituusjakauma ja merkitään

$$\text{type}(g) = [t_1, \ldots, t_n],$$

missä t_i on i-pituisten syklien lukumäärä. Jos $g(S) = S$, niin S on unioni joidenkin g:n syklien alkioista.

Jos S:ssä on c_i sykliä, joissa on i solmua, niin on oltava $c_i \leq t_i$, ja $k = \sum_i ic_i$. Annetuille c_i:n arvoille sellaisia joukkoja on $\prod_i \binom{t_i}{c_i}$.

Lasketaan rekursiolla kaikki mahdolliset c_i-yhdistelmät:

```
CHIG(n, k, i, t):
if i = 1: χ ← 0
if i = n + 1:
    if k = 0:
        χ ← χ + ∏_i (t_i choose c_i)
    return
C_i ← {0, ..., min(t_i, ⌊k/i⌋)}
for x ∈ C_i:
    c_i ← x
    CHIG(n, k − ic_i, i + 1, t)
return χ
```

Burnsiden lemma – esimerkki

Montako oleellisesti erilaista viisiraitaista lippua on, kun kukin raita on joko sininen, valkoinen tai punainen? Lippuja ei pidetä oleellisesti erilaisina, jos toinen saadaan toisesta peilaamalla.

Lippuja voidaan tarkastella listoina $[c_1, c_2, \ldots, c_n]$, missä kukin $c_i \in C$. Vaihtoehtoja on siis $|C|^n$. Ryhmä koostuu kahdesta permutaatiosta, identiteetistä ja peilauksesta τ, joka vaikuttaa lippuun s.e. $\tau\,[c_1, \ldots, c_n] = [c_n, \ldots, c_1]$. Lasketaan kummallekin permutaatiolle π, kuinka monta lippua se kiinnittää. $F(\mathbf{I}) = |C|^n$ ja $F(\tau) = |C|^{\lceil n/2 \rceil}$ ja lippujen määrä on $N = \frac{1}{2}\left(|C|^n + |C|^{\lceil n/2 \rceil}\right)$ eli tässä esimerkissä $\frac{1}{2}(243 + 27) = 135$.

Rataedustajien etsintä

Kun tunnetaan $k+1$-osajoukkon ratojen lukumäärä N_{k+1}, voidaan etsiä yksi joukko kultakin radalta. Jos $\mathcal{R}$ on joukko k-osajoukkojen rataedustajia,

$$\mathcal{S} = \{A \cup \{x\} : A \in \mathcal{R}, x \in X \setminus A\}$$

sisältää edustajan kultakin $k+1$-osajoukkojen radalta; joiltakin useampiakin. Samojen ratojen edustajia pitää poistaa, kunnes jäljellä on edustaja kultakin radalta.

Yksinkertainen idea:

kaikille $g \in G$:
    kaikille $A \in \mathcal{S}$ laskevassa leks. järjestyksessä:
        jos $\mathsf{rank}\,(g\,(A)) < \mathsf{rank}\,(A)$:
            $\mathcal{S} \leftarrow \mathcal{S} \cup \{g\,(A)\} \setminus \{A\}$
            jos $|\mathcal{S}| = N_{k+1}$:
                return

Radan minimiedustaja

Kun ryhmä G permutoi $\mathcal{X}$:ä ja $A \subseteq \mathcal{X}$, jollakin radan $G(\mathcal{X})$ osajoukoista on leksikografisessa järjestyksessä pienin rank. Etsitään leksikografisessa järjestyksessä ensimmäinen joukko $S = \{s_0, \ldots, s_{k-1}\}$, jolla on olemassa $h \in G$ siten, että $h(S) = A$.

Algoritmi-idea: Kiinnitetään yksi s_i-a_i-pari kerrallaan siten, että kun on kiinnitetty $s_0, \ldots s_{l-1}$ ja vastaavat $a_0, \ldots, a_{l-1}$, on myös olemassa permutaatio $h \in G$, jolla $h(s_i) = a_i$, kun $0 \leq i \leq l-1$.

Valitaan s_l:ksi mahdollisimman pieni alkio $(> s_{l-1})$, jolle on olemassa permutaatio $g \in G$, jolle $g(s_i) = s_i$, kun $0 \leq i \leq l-1$, ja $g(s_l) \in h^{-1}(A)$. Seuraavalle iteraatiolle otetaan $h \leftarrow hg$.

Kun tarkastellaan, voidaanko s_l :ksi valita jokin x, käytetään Schreier-Simsiä ja kantaa, jossa $\beta(i) = s_i$, kun $i < l$, ja $\beta(l) = x$. Silloin h voidaan esittää muodossa $u_0 \ldots u_{l-1}$. Tarpeellinen permutaatio g on olemassa, jos on olemassa $g \in \mathcal{U}_l$, jolla $g(x) \in h^{-1}(A)$.

Rataedustajien etsintä

$\mathcal{R}$ on k-osajoukkojen rataedustajien joukko. Lasketaan

$$\mathcal{S} = \{A \cup \{x\} : A \in \mathcal{R}, x \in X \setminus A\},$$

korvataan jokainen S:n joukko ratansa minimiedustajalla ja poistetaan duplikaatit.

Optimointi: kun $A \cup \{x\}$ on tarkistettu, ei tarvitse tarkistaa enää osajoukkoja $G(A \cup \{x\})$. Erityisesti kun g:n Schreier-Sims-kannalle $\{\beta(0), \ldots, \beta(k-1)\} = A$ ja $\beta(k) = x$, ei tarvitse tarkastella osajoukkoja muotoa $A \cup \{c\}$, missä $c \in \mathcal{U}_k(x)$.

Orderly algorithm

Jos $A \cup \{x\}$, missä $x > \max\{y : y \in A\}$, on ratansa minimiedustaja, myös A on ratansa minimiedustaja; jos olisi olemassa jokin $g \in G$, jolle $g(A) < A$, niin myös $g(A \cup \{x\}) = g(A) \cup g(x) < A \cup \{x\}$.

$n+1$-osajoukon minimiedustajat saadaan n-osajoukon minimiedustajista seuraavasti:

$$\mathcal{S} = \left\{ A \cup \{x\} : \begin{array}{l} A \in \mathcal{R}, x > \max\{y : y \in A\}, \\ A \cup \{x\} \text{ on ratansa minimiedustaja} \end{array} \right\}$$

$A' = A \cup \{x\}$ on ratansa minimiedustaja, jos $g(A') \geq A'$ kaikilla $g \in G$.

Sivuluokat, transversaalit ja radat

Olkoon G joukon $\mathcal{X}$ permutaatioryhmä ja $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$ joukkojärjestelmä. Kun $g \in G$, merkitään

$$g(\mathcal{B}) = \{g(S) : S \in \mathcal{B}\}.$$

Nyt $\mathcal{B}$:n stabiloija on aliryhmä

$$H = \{g \in G : g(\mathcal{B}) = \mathcal{B}\} \subseteq G.$$

On siis olemassa H:n vasen transversaali $T = \{g_1, \ldots, g_r\}$.

Teoreema: $\mathcal{B}$:n radassa on $r = |G| / |H|$ alkiota, ja $G(\mathcal{B}) = T(\mathcal{B}) = \{g_1(\mathcal{B}), \ldots, g_r(\mathcal{B})\}$.

Todistus: Selvästi $T(\mathcal{B}) \subseteq G(\mathcal{B})$. $G(\mathcal{B}) \subseteq T(\mathcal{B})$, sillä jokainen $g \in G$ voidaan esittää muodossa $g_i h$, missä $g_i \in T$ ja $h \in H$; $g(\mathcal{B}) = g_i h(\mathcal{B}) = g_i(\mathcal{B})$. Siis $T(\mathcal{B}) = G(\mathcal{B})$.

T:ssä on $r = |G| / |H|$ alkiota – sivuluokat ositttavat ryhmän. Jokaisesta $g_i \in T$:stä saadaan eri $g_i(\mathcal{B})$: Jos on i, j, joilla $g_i(\mathcal{B}) = g_j(\mathcal{B})$, niin $g_j^{-1} g_i(\mathcal{B}) = g_j^{-1} g_j(\mathcal{B}) = \mathcal{B}$, ja $g_j^{-1} g_i \in H$. Nyt g_i ja g_j kuuluvat samaan sivuluokkaan, sillä $g_j H = g_j \left(g_j^{-1} g_i H\right) = g_i H$, ja on oltava $i = j$; transversaaliinhan otetaan vain yksi edustaja kustakin sivuluokasta.

Transversaalin laskeminen

Laskemalla $G_{\mathcal{B}} \subseteq G$:n transversaali T ja sitten $T\,(\mathcal{B})$ saadaan $\mathcal{B}$:n rata $G\,(\mathcal{B})$.

Alla lasketaan transversaali melko naiivisti tarkistamalla kullekin ryhmän alkiolle, onko jokin saman sivuluokan alkio jo transversaalissa. Ellei, lisätään alkio transversaaliin.

TRANSVERSAL(H, G):
$r \leftarrow |G| \,/\, |H|$
$T \leftarrow \emptyset$
for $g \in G$:
    for $t \in T$:
        if $t^{-1}g \in H$:
            goto skip
    $T \leftarrow T \cup \{g\}$
    if $|T| \geq m$:
        return T
    skip:

k-permutaatioiden radat

σ on $\mathcal{X}$:n k-monikko, jos $\sigma = [x_1, \ldots, x_k]$, missä $x_i \in \mathcal{X}$. Jos $x_i \neq x_j$, kun $i \neq j$, σ on $\mathcal{X}$:n k-permutaatio. $\mathcal{X}$:n k-permutaatioiden joukko on $\Pi_k(\mathcal{X})$.

Vastaavasti kuin osajoukoille permutaatioryhmän luonnollinen vaikutus on,

$$g(\sigma) = [g(x_1), \ldots, g(x_k)]$$

ja

$$G(\sigma) = \{g(\sigma) : g \in G\}.$$

Burnsiden lemman tapaan

$$\vec{N}_k = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \vec{\chi}_k(g),$$

missä

$$\vec{\chi}_k = |\{\sigma \in \Pi_k(\mathcal{X}) : g(\sigma) = \sigma\}|$$

Symmetristen objektien generointi

Jos kombinatorista objektia etsittäessä hakuavaruus on liian suuri, voidaan rajoittaa hakuavaruutta rajoittamalla tarkastelu objekteihin, joilla on (vähintään) tietty automorfismiryhmä.

Esimerkki: $\mathcal{X} = \{0, \ldots, 24\}$ ja $G = \langle (0, 1, \ldots, 24) \rangle$. Kun $\mathcal{B}$ on joukkojen $\{0, 8, 13\}$, $\{0, 2, 3\}$, $\{0, 4, 11\}$ ja $\{0, 6, 15\}$ ratojen unioni, $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$ on $\mathrm{STS}(25)$. (Steinerin kolmikkojärjestelmä, jossa $|\mathcal{X}| = 25$; jokainen $\mathcal{X}$:n pari esiintyy tasan yhdessä $\mathcal{B}$:n osajoukossa).

Voitaisiin tietysti myös luetella kaikki sata 3-osajoukkoa.

Ratainsidenssimatriisit

Kun G on $\mathcal{X}$:n permutaatioryhmä, Δ on jokin t-osajoukkojen rata ja Γ jokin k-osajoukkojen rata, $\left|\left\{K \in \Gamma_j\right\} : K \supset T_0\right|$ ei riipu valitusta $T_0 \in \Delta$:stä.

Jos $T_0, T_0' \in \Delta$, on olemassa $g \in G$, jolla $g(T_0) = T_0'$. Jos $T_0 \subseteq K \in \Gamma$, niin $T_0' \subseteq g(K)$.

Ratainsidenssimatriisi: kun G on $\mathcal{X}$:n permutaatioryhmä ja $0 \leq t \leq k \leq |\mathcal{X}|$, ratainsidenssimatriisi A_{tk} on $N_t \times N_k$-matriisi, jossa rivi i vastaa t-osajoukkojen rataa Δ_i, sarake j vastaa k-osajoukkojen rataa Γ_k, ja $a_{ij} = \left|\left\{K \in \Gamma_j\right\} : K \supset T_0\right|$, missä $T_0 \in \Delta_i$.

Ratainsidenssimatriisiesimerkki

Olkoon $\mathcal{X} = \{0, \ldots, 4\}$ ja $G = \langle (0,1,2,3,4) \rangle$.
2-osajoukkojen radat ovat

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \{\{0,1\},\{1,2\},\{2,3\},\{3,4\},\{4,0\}\} \text{ ja} \\ \Delta_2 &= \{\{0,2\},\{1,3\},\{2,4\},\{3,0\},\{4,1\}\}. \end{aligned}$$

3-osajoukkojen radat ovat

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &= \{\{0,1,2\},\{1,2,3\},\{2,3,4\},\{3,4,0\},\{4,0,1\}\} \text{ ja} \\ \Gamma_2 &= \{\{0,1,3\},\{1,2,4\},\{2,3,0\},\{3,4,1\},\{4,0,2\}\}. \end{aligned}$$

Ratainsidenssimatriisi $A_{23} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$. Esimerkiksi a_{22} voidaan laskea valitsemalla $T_0 = \{0,2\} \in \Delta_2$ ja toteamalla, että T_0 sisältyy Γ_2:n joukoista kahteen ($\{2,3,0\}$ ja $\{4,0,2\}$).

Ratainsidenssimatriisin laskeminen

Seuraava algoritmi laskee ratainsidenssimatriisin naiivisti. R ja S ovat t- ja k-osajoukkojen ($t \leq k$) rataedustajien joukot.

```
for g ∈ G:
    for T ∈ R:
        for K ∈ S:
            if T ⊆ g(K):
                A[T, K] ← A[T, K] + 1
for K ∈ R:
    stab ← 0
    for g ∈ G:
        if g(K) = K:
            stab ← stab + 1
    for T ∈ R:
        A[T, K] ← A[T, K] / stab
```

Isomorfismit

Graafit $\mathcal{G}_1 = (\mathcal{V}_1, \mathcal{E}_1)$ ja $\mathcal{G}_2 = (\mathcal{V}_2, \mathcal{E}_2)$ ovat isomorfiset, jos on olemassa bijektio $f : \mathcal{V}_1 \mapsto \mathcal{V}_2$, jolla

$$\{f(x), f(y)\} \in \mathcal{E}_2, \text{ joss } \{x, y\} \in \mathcal{E}_1.$$

Tällöin f on $\mathcal{G}_1$:n ja $\mathcal{G}_2$:n välinen isomorfismi.

Isomorfismi graafilta itselleen on automorfismi.

Invariantit

Funktio Φ on graafin invariantti, jos sen arvo ei riipu solmujen järjestyksestä graafin esityksessä. Esim. kun $\mathcal{V} = \{v_1, \ldots, v_n\}$,

$$[\deg(v_1), \ldots, \deg(v_n)]$$

ei ole invariantti, mutta monijoukko

$$\{\deg(v_1), \ldots, \deg(v_n)\}$$

on; astelistasta saadaan siis invariantti järjestämällä se kasvavaan järjestykseen.

Järjestetty ositus

Jotkin invariantit voidaan esittää kätevästi järjestettynä osituksena. Joukon $\mathcal{V}$ järjestetty ositus B on lista

$$B = [B[0], \ldots, B[k-1]].$$

B:n koko on k.

Esim. valitaan $B[i] = \{v \in \mathcal{V} : \deg_{\mathcal{G}}(v) = i\}$, ja $\Phi(\mathcal{G}) = [|B[0]|, |B[1]|, \ldots, |B[n-1]|]$ on invariantti.

Ositus on diskreetti, jos kussakin $B[i]$:ssä on yksi alkio.

Invariantin indusoiva funktio

Olkoon $\mathcal{F}$ on perhe graafeja, joiden solmujoukko on $\mathcal{V}$, ja D funktio, jonka määrittelyjoukko on $\mathcal{F} \times \mathcal{V}$ ja kuvajoukolle on määritelty jokin järjestys. Nyt D:n indusoimassa osituksessa

$$B[i] = \{v \in \mathcal{V} : D(\mathcal{G}, v) = i\}.$$

Jos funktio $\Phi_D(\mathcal{G}) = [|B[i_1]|, |B[i_2]|, \ldots, |B[i_n]|]$, missä $i_i \prec i_2 \prec \ldots \prec i_n$, on invariantti, niin D on invariantin indusoiva funktio.

Esimerkkejä: $D(G, v)$:
1. solmun v asteluku
2. v:n sisältävien kolmioiden lukumäärä
3. $\mathcal{G} \setminus v$:n vierusmatriisin determinantti

Jos $\Phi_D(\mathcal{G}_1) \neq \Phi_D(\mathcal{G}_2)$, niin $\mathcal{G}_1$ ja $\mathcal{G}_2$ eivät ole isomorfiset.

Useita invariantin indusoivia funktioita voidaan yhdistää: Otetaan lista $\mathcal{I} = [D_1, \ldots, D_n]$ invariantin indusoivia funktioita ja määritellään
$D'_i(G, v) = [D_1(\mathcal{G}, v), \ldots, D_i(\mathcal{G}, v)]$.

Jos jollakin i:n arvolla $\Phi_{D'_i}(\mathcal{G}_1) \neq \Phi_{D'_i}(\mathcal{G}_2)$, niin $\mathcal{G}_1$ ja $\mathcal{G}_2$ eivät ole isomorfiset.

Sertifikaatti

Kahdella ei-isomorfisella graafiIla saattaa olla sama invariantti. Graafiperheelle $\mathcal{F}$ sertifikaatti c on funktio, jolla $c(\mathcal{G}_1) = c(G_2)$ jos ja vain jos $\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2 \in \mathcal{F}$ ovat isomorfiset.

Sertifikaatti on myös invariantti.

Sertifikaatti puille

1. Nimetään kaikki solmut 01:llä.
2. Niin kauan kuin on vähintään 2 solmua, aseta $T \leftarrow$ ei-lehtisolmut ja tee jokaiselle $x \in T$:

    poista x:n nimestä alusta 0 ja lopusta 1

    muodosta joukko Y x:n ja sen naapurilehtisolmujen nimistä

    liitä Y:n alkiot yhteen leksikografisessa järjestyksessä, lisää 0 alkuun ja 1 loppuun, ja kirjoita tulos x:n nimeksi

    poista graafista x:n naapurina olevat lehtisolmut
3. Jos jäljellä on 1 solmu, sen nimi on sertifikaatti
4. Jos jäljellä on kaksi solmua, sertifikaatti on niiden nimet leksikografisessa järjestyksessä yhdistettynä

Sertifikaatti graafeille

Permutoitaessa graafin $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ solmuja permutaatiolla $\pi \in \mathsf{Sym}(\mathcal{V})$ saadaan insidenssimatriisi

$$A_\pi(\mathcal{G})[u, v] = \begin{cases} 1, \text{ jos } \{\pi(u), \pi(v)\} \in \mathcal{E} \\ 0 \text{ muuten} \end{cases}$$

$\mathsf{Num}_\pi(\mathcal{G})$ saadaan lukemalla $A_\pi(\mathcal{G})$:n diagonaalin alapuoliset alkiot binäärilukuna:

$a_{21}\, a_{31} a_{32}\, a_{41} \ldots a_{43}\, a_{51} \ldots a_{54} \ldots a_{n1} \ldots a_{n\,n-1}$

Yksinkertainen sertifikaatti:

$$\min \{\mathsf{Num}_\pi(G) : \pi \in \mathsf{Sym}(V)\}$$

tulee etsineeksi samalla suurimman riippumattoman joukon, mikä on päätösongelmana $\mathbf{NP}$-täydellinen ongelma.

Rajoitutaan pienempään joukkoon permutaatioita:

$$\min \{\mathsf{Num}_\pi(G) : \pi \in \Pi_\mathcal{G}\},$$

missä $\Pi_\mathcal{G}$ riippuu graafin $\Pi_\mathcal{G}$ rakenteesta.

Sertifikaatti graafeille / osituksen parannus

Olkoon annettu (invariantteihin perustuva) järjestetty ositus $B = [B_0, \ldots, B_{k-1}]$. Rajoitutaan permutaatioihin π, jotka säilyttävät osituksen mukaisen järjestyksen: Jos $u \in B_i$ ja $v \in B_j$, niin $\pi(u) < \pi(v)$.

Merkitään $D_T(\mathcal{G}, v) = \left|v' : \{v, v'\} \in \mathcal{E}, v' \in T\right|$. Funktio ilmaisee, montako naapuria v:llä on T:ssä.

Ositusta parannetaan iteratiivisesti: jos on solmut $u, v \in \mathcal{B}_i$ ja jokin $T = B_j$ siten, että $D_T(\mathcal{G}, u) \neq D_T(\mathcal{G}, v)$, jaetaan B_i pienemmiksi osiksi D_T:n indusoimalla tavalla. Kun $D_{B_j}(\mathcal{G}, u) = D_{B_j}(\mathcal{G}, v)$ kaikilla i, j ja $u, v \in B_i$, osituksta B sanotaan tasasuhtaiseksi.

PARANNA(A):
$B \leftarrow A$
olkoon S lista B:n alkioita
while $S \neq \emptyset$:
    poista S:stä sen ensimmäinen joukko T
    jokaiselle $B[i] \in B$ (järjestyksessä):
        jokaiselle h: $L[h] \leftarrow \{v \in B[i] : D_T(\mathcal{G}, v) = h\}$
        jos on useampia kuin yksi epätyhjä $L[h]$:
            korvaa $B[i]$ joukoilla $L[h_1] \ldots L[h_n]$ (järjestyksessä)
            lisää joukot $L[h]$ listan S jatkoksi (järjestyksessä)

Sertifikaatti graafeille

Lasketaan graafin $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ sertifikaatti hienontamalla ositus diskreetiksi (kussakin osassa 1 alkio) vaikka väkisin.

CERT$(B, \mathcal{G})$:
paranna(B)
jos B diskreetti:
    laske B:stä π; return Num$_\pi$ $(\mathcal{G})$
muuten:
    etsi pienin i, jolle $|B_i| > 1$
    $best \leftarrow \infty$
    kullekin $x \in B_i$:
        korvaa B_i joukoilla $\{x\}, B_i \setminus \{x\}$
        $t \leftarrow$ paranna $(B, \mathcal{G})$
        jos $t < best$: $best \leftarrow t$
    return $best$

Aloitetaan osituksesta $B = \{B_0\}$, missä $B_0 = \mathcal{V}$. Parannetaan ositusta, kunnes se on tasasuhtainen.

Symmetrioiden hyväksikäyttö

Jos kahdessa haun haarassa saadaan sama $\mathsf{Num}_{\pi}(\mathcal{G}) = \mathsf{Num}_{\mu}(\mathcal{G})$, niin $\pi(\mathcal{G}) = \mu(\mathcal{G})$, ja $\pi^{-1}\mu(\mathcal{G}) = \mathcal{G}$, joten $\pi^{-1}\mu$ on $\mathcal{G}$:n automorfismi.

Löytyneet automorfismit voidaan kerätä ryhmäksi ja esittää Schreier-Sims-muodossa.

Kun haussa on edetty pisteeseen, jossa B_i on ensimmäinen joukko, jolla $|B_i| > 1$, valitaan ensin jokin $x \in B_i$ ja tutkitaan haara kuten edellä. Tämän jälkeen tehdään kannanvaihto tunnetuille automorfismeille niin, että β_k on B_k:n sisältämä alkio, kun $k < i$, ja $\beta_i = x$. Nyt $\mathcal{U}_i(x)$ on x:n rata tunnetuilla automorfismeilla; muita radan alkioita kuin x ei tarvitse automorfismin perusteella tarkastella.

Tietenkin, jos automorfismiryhmä tunnetaan (edes osaksi) ennalta, voidaan se syöttää valmiiksi.

Joukkojärjestelmien isomorfisuus

Joukkojärjestelmien $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$ isomorfisuutta voidaan tarkastella graafi-isomorfismina seuraavasti:

Esitetään joukkojärjestelmä graafina $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, missä $\mathcal{V} = \mathcal{X} \cup \mathcal{B}$, ja $\mathcal{E} = \{\{x, B\} : x \in \mathcal{X}, B \in \mathcal{B}, x \in B\}$. Tämän jälkeen pitää vain pitää huolta siitä, että $\mathcal{X}$-solmut ja $\mathcal{B}$-solmut eivät mene sekaisin; voidaan alustaa sertifikaatin laskenta solmujen osituksesta $\{\mathcal{X}, \mathcal{B}\}$.

Kolikko-ongelma

Toisten löytämä: 273 (GA)

SA (253) naapuristohaulla valitaan satunnaiselle w_j kohdefunktion maksimoiva arvo väliltä $w_j - 20 \ldots w_j + 20$

SA (252): arvotaan satunnaiselle w_j:lle uusi arvo, joka ei riko suuruusjärjestystä; alkuarvoarvonnassa $w_{j+1} = \mathrm{rand}\left(0 \ldots 3w_j\right)$, mikä kasvaa nopeasti – kohdefunktiossa sakotetaan nimellisarvoja, jotka ovat $> 2L$

SA (223): arvotaan jollekin w_j:lle uusi arvo $0 \ldots \frac{2}{3}L$ / Tabu (222): kokeillaan kaikille w_j:lle muutos ± 1, tabuehtona talletetaan viimeaikaisia ratkaisuja / Arvonta (222)

SA (261): arvotaan jollekin w_j:lle uusi arvo väliltä $0 \ldots 2w_j$

SA-hybridi (235): arvotaan yksittäinen suuruusjärjestyksen säilyttävä muutos TAI etsitään paras naapuri

SA (160): naapuristoon kuuluvat ne ratkaisut, jotka saadaan valitsemalla j ja kasvattamalla yhdellä kaikkia w_k, missä $k \geq j$ - etsitään paras naapuri ja sovelletaan SA:ta

Tabu (223): naapuristo: yhtä nimellisarvoa muutetaan ± 6; valikoimasta poistettua arvoa ei lisätä muutamaan kierrokseen

SA (221): arvotaan yhteen nimellisarvoon uusi arvo välille $1 \ldots 300$; ei talleteta parasta löytynyttä vaan palautetaan se, mihin jäätiin(?!?)

SA (153): yhtä rahaa ± 1, hyvin hidas toteutus

SA (194): yhtä rahaa ± 1

SA (226): naapuristossa a) nimellisarvovalikoiman colex-predecessor b) colex-successor c) vaihdetaan SUURIN ja PIENIN arvo satunnaiseen väliltä $1 \ldots 150$

Huomioita

Ratkaisuavaruus:
mille välille nimellisarvot pitäisi rajoittaa? Ehdotettu mielivaltaisia maksimiarvoja ja $1 \ldots \frac{2}{3}L$; joissakin toteutuksissa on rajoitettu nimellisarvojen muutosta, mikä ajanee samaa asiaa hieman toisin.

Naapuristo:
* ± 1-naapuristo vaikuttaa kovin suppealta – yhden arvon korvaaminen jollakin muulla tai suuremman muutoksen salliminen vaikuttaa hyvältä
* ei liene perusteltua vaatia, että listan pitäisi pysyä järjestyksessä – kyseessähän on oleellisesti joukko
* lienee eduksi, että naapuristo on vahvasti kytketty, ts. mistä tahansa ratkaisusta periaatteessa voidaan päästä mihin tahansa ratkaisuun jotakin reittiä

Heuristiikat:
* puhtaassa SA:ssa ei tehdä muuta naapuristohakua kuin että arvotaan naapuri

Alkuarvot voisivat olla satunnaisesti arvottuja!