Kotitehtävä 3

Öljy koostuu suurelta osalta hiilivetymolekyyleistä. Hiilivetymolekyylit koostuvat hiili- ja vetyatomeista. Kuhunkin hiiliatomiin liittyy 4 ja kuhunkin vetyatomiin 1 sidos. Kahden hiiliatomin välillä voi olla myös kaksois- tai kolmoissidos, jolloin atomien muiden sidosten määrä on vastaavasti pienempi. Öljyn hiilivetyjen pituus vaihtelee suuresti; esimerkiksi bensiini sisältää lähinnä hiilivetyjä, joissa on 5–10 hiiliatomia[1].

Hiilivetymolekyylin hiiliatomien muodostama rakenne voidaan esittää yhtenäisenä multiverkkona, jonka solmut ovat hiiliatomeja ja jonka kaaret vastaavat hiiliatomien välisiä sidoksia. Multiverkko on verkko, jossa saman kaaren toistuminen sallitaan. Hiilivetyjä mallinnettaessa minkään solmun asteluku ei saa ylittää neljää, ja kaksois- ja kolmoissidokset voidaan mallintaa laittamalla kahden solmun välille enintään kolme kaarta. Tämä malli ei selvästikään ota huomioon esimerkiksi kolmiulotteisen geometrian rajoituksia.

Olkoon $d(v)$ solmun v asteluku. Kun $G = (V, E)$ kuvaa ylläesitettyyn tapaan hiilivetymolekyyliä, jossa on $|V|$ hiiliatomia, molekyylissä on $\sum_{v \in V} (4 - d(v)) = 4|V| - 2|E|$ vetyatomia. Kaksi hiilivetyä ovat isomeerejä, jos sekä hiili- että vetyatomien lukumäärä on sama.

Tehtävä: Pidetään kahta hiilivetyä isomorfisina, jos niitä vastaavat multiverkot ovat isomorfiset. Laadi tietokoneohjelma ja generoi sillä mahdollisimman suurelle n ei-isomorfiset hiilivedyt, joissa on enintään n hiiliatomia. Ryhmittele ei-isomorfiset hiilivedyt isomerialuokkiin ja ilmoita, montako hiilivetyä kuhunkin isomerialuokkaan kuuluu. Ilmoita lisäksi kustakin isomerialuokasta, kuinka moni luokan hiilivety on syklitön. Palautuksia arvioitaessa arvioidaan pikemminkin menetelmien tehokkuutta kuin saavutettuja tuloksia; yletöntä laskentaresurssien käyttöä ei pidetä meriittinä. Noin 1 h CPU-aikaa on riittävä suuruusluokka.

Vihje: ongelman ratkaisussa tarvittaneen keino laskea verkon kanoninen muoto. Riippuen käytetystä verkon kanonisen muodon laskevasta algoritmista voi olla mahdollista alustaa laskenta osituksella, joka rajoittaa kanonisen muodon hakua siten, että osituksen kunkin luokan solmuja voi kuvata vain saman luokan toisille solmuille. Tässä ongelmassa on kyse multiverkosta; multiverkko on mahdollista koodata verkoksi lisäämällä sopivia apusolmuja ja määräämällä sopiva alkuositus. Brendan McKayn `nauty`[2] on C-kielinen aliohjelmakirjasto, jota voi halutessaan käyttää verkon kanonisen muodon tai automorfismiryhmän laskemiseen.

---

[1] http://www.lloydminsterheavyoil.com/refining.htm
[2] http://cs.anu.edu.au/~bdm/nauty/

Palautus: Palautukset sähköpostitse assistentille (Emilia Oikarinen, `Emilia.Oikarinen@hut.fi`) viimeistään torstaina 17.4. esimerkiksi hyvälaatuisena PostScriptinä. Vastauksessa tulee olla kunkin isomerialuokan koko, kuvaus käytetyistä menetelmistä, ohjelmien lähdekoodi sekä yhteenveto tarvitusta laskenta-ajasta esim. n:n mukaan eroteltuna.