TEKNILLINEN KORKEAKOULU
T-79.300 Tietojenkäsittelyteorian lisensiaattikurssi
Kelpoisuusmaastot (kl 2002)

Satunnaismaastot

Satu Virtanen
satu@cs.hut.fi

1 Merkintöjä ja yleisiä määritelmiä

Kelpoisuusmaaston $\mathcal{F}$ ajatellaan yleensä muodostuvan *konfiguraatiojoukosta* X, jonkinlaisesta *naapuruusmitasta* χ, sekä kelpoisuusfunktiosta $f : X \to \mathbb{R}$. Usein tietojenkäsittelyongelmissa maaston pohjana on jokin graafi $G = (V, E)$, jolloin X koostuu graafiin liittyvistä konfiguraatioista (esim. syklit kauppamatkustajan ongelmassa) ja χ määritellään naapurusjoukkojen $N(x)$ avulla. Solmu v kuuluu solmun w naapurustoon $N(w)$ jos ja vain jos $(v, w) \in E$. Solmujen naapuruussuhteita esitetään luontevasti *naapurusmatriisilla* $\mathbf{A}$, jossa

$$\mathbf{A}_{xy} = \begin{cases} 1, & \text{jos } x \in N(y), \\ 0, & \text{muulloin;} \end{cases}$$

Suuntaamattomassa tapauksessa tämä on tietenkin symmetrinen, eli $x \in N(y)$ jos ja vain jos $y \in N(x)$. Graafin diagonaalinen *astelukumatriisi* $\mathbf{D}$ määritellään asettamalla $\mathbf{D}_{xx} = |N(x)|$. k-säännölliselle graafille (jossa kaikilla solmuilla on täsmälleen k naapuria) pätee tietenkin $\mathbf{D} = k\mathbf{I}$. Asteluku- ja naapurusmatriisin erotuksena määritellään graafin (diskreetti) *Laplace-operaattori* $\Delta = \mathbf{D} - \mathbf{A}$. Tällä on aina yhtenä ominaisarvona nolla ja tätä vastaavana ominaisvektorina $(1, 1, \ldots)$ [Sta95].

2 Satunnaismaastot

Satunnaismaasto on sellainen kelpoisuusmaasto, jonka määrittävät jollekin parametrijoukolle annetut satunnaiset arvot. Se määritellään äärellisen konfiguraatiojoukon X ja funktioperheen $\{f : X \to \mathbb{R}\}$ avulla seuraavasti [RS02]:

Määritelmä 1. Satunnainen W-maasto $\mathcal{F}$ yli X:n on satunnaisavaruus

$$\mathcal{F} = (\{f : X \to \mathbb{R} \mid f\text{:llä on ominaisuus } W\}, \mathcal{A}, \mu).$$

Tässä $\mathcal{A}$ on σ-algebra[1] ja $\mu : \mathcal{A} \to [0, 1]$ mitta. Matemaattisesti ajateltuna satunnaismaasto on siis jokin sopiva todennäköisyysavaruus. Jatkossa keskitytään tarkastelemaan satunnaismuuttujia

$$\forall x \in X \;:\; \mathrm{eval}_x : \Omega \to \mathbb{R}, \text{ jossa } \mathrm{eval}_x(f) = f(x).$$

Merkitään satunnaismuuttujan $\xi : \Omega \to \mathbb{R}$ odotusarvoa $\mathbb{E}[\xi]$ ja varianssia vastaavasti $\mathbb{V}[\xi]$. Käytetään seuraavaa lyhennysmerkintää $\mathbb{E}[\mathrm{eval}_x] \triangleq \mathbb{E}[f(x)]$ satunnaismaaston odotusarvolle x:ssä [RS02]. Määritellään edelleen kovarianssimatriisi $\mathbf{C}$ tuttuun tapaan:

$$\mathbf{C}_{xy} = \mathrm{Cov}[\mathrm{eval}_x, \mathrm{eval}_y] = \mathbb{E}[f(x)f(y)] - \mathbb{E}[f(x)]\mathbb{E}[f(y)].$$

Tämä on symmetrinen matriisi, eli $\mathbf{C} = \mathbf{C}^T$, ja lisäksi positiivisesti semidefiniitti ($u^\mathbf{T} \mathbf{C}\, u \geq 0$ ja ominaisarvot ≥ 0).

2.1 Fourier-kehitelmä

Määritellään kelpoisuusfunktion f *Fourier-kehitelmä* seuraavasti [Sta02b]:

$$f(x) = \sum_k a_k \varphi_k(x).$$

Tässä $\{\varphi_k\}$ on Δ:n ortonormaalien ominaisvektorien kanta. Kukin φ_k voidaan tavallaan tulkita X:n kelpoisuusfunktiona. Tässä φ_0 on vakio, sitä vastaava ominaisarvo nolla, ja $a_0 = (1/|X|) \sum_{x \in X} f(x) = \bar{f}$ eli kelpoisuusfunktion keskiarvo.

Tämä Fourier-kehitelmä voidaan edelleen hajottaa Δ:n monikertaisten ominaisarvojen yli, jolloin saadaan

$$f(x) = c + \sum_\lambda \beta_\lambda \tilde{\varphi}_\lambda(x).$$

Tässä $c = a_0$ on maaston keskiarvo, $\tilde{\varphi}_\lambda(x)$:t ovat ns. *alkeismaastot* eli normalisoidut ominaisvektorit, ja arvot $|\beta_\lambda|^2 = \sum |a_k|^2$ muodostavat f:n *amplitudispektrin* [KNR01]. Maaston (tai oikeastaan sen kustannusfunktion) sanotaan olevan alkeismaasto, kun $f(x) = c + \varphi(x)$, jossa c on vakio ja φ vastaa jotain Δ:n ominaisarvoa $\neq 0$ [HS98]. Kertauksena mainittakoon myös, että alkeismaastoilla jokaisella paikallisella maksimilla $x \in X$ pätee $f(x) \geq a_0$.

[1] σ-algebra F joukolle X on epätyhjä joukko X:n osajoukkoja, joille pätee

(i) $\emptyset \in F$,

(ii) jos $A \in F$ niin myös $X \setminus A \in F$

(iii) jos A_n on jono F:ssä, näiden yhdiste on myös F:ssä.

Myös muita ekvivalentteja määritelmiä voidaan kirjoittaa, tämä on osoitteesta `http://mathworld.wolfram.com/SigmaAlgebra.html`.

2.2 Amplitudispektri

Tietyn Δ:n ominaisavaruuden kontribuutiota maaston varianssiin voidaan arvioida *amplitudispektrillä* [Sta02a]

$$\mathcal{B}_\lambda = \sum_{k:\Delta\varphi_k=\lambda\varphi_k} |a_k|^2.$$

Koska $\sum_\lambda |\beta_\lambda|^2 = \sigma^2$, voidaan normalisoida: $B_\lambda = |\beta_\lambda|^2/\sigma^2$. Arvojen B_λ muodostamaa vektoria $\{B_\lambda\}$ kutsutaan maaston amplitudispektriksi. $\mathcal{B}_\lambda$ voidaan määritellä myös maastojen f ja f_λ varianssien suhteena

$$\mathcal{B}_\lambda = \frac{\langle \tilde{f}_\lambda, \tilde{f}_\lambda \rangle}{\langle \tilde{f}, \tilde{f} \rangle} = \frac{\sum_{k:\Delta\varphi_k=\lambda\varphi_k} |a_k|^2}{\sum_{k:\Delta\varphi_k\neq 0} |a_k|^2},$$

jossa $\tilde{f} = f(x) - \bar{f}$ on poikkeama keskiarvosta [RS02]. Kun vielä määritellään $\mathcal{B}(0) = 0$, saadaan $\mathcal{B}_\lambda \geq 0$. Normalisoidulle lausekkeelle pätee myös $\sum_\lambda B_\lambda = 1$ [HS98].

2.3 Karhunen-Loève -kehitelmä

Kun otetaan $\{f : X \to \mathbb{R}\}$ perusavaruudeksi Ω:lle, muodostavat $\mathbf{C}$:n ortogonaalit ominaisvektorit $\{\psi_k\}$ sille kannan. Tätä kantaa käyttäen voidaan kirjoittaa seuraava sarjakehitelmä, joka on ns. *pääkomponenttihajotelma* eli Karhunen-Loève -sarja [RS01]:

$$f(x) \doteq \sum_k b_k \psi_k(x) \text{ kun } x \in X.$$

Pääkomponenttihajotelman avulla voidaan jokainen satunnaismaasto esittää lineaarikombinaationa korreloimattomin satunnaiskertoimin [Sta02b]. Reidys ja Stadler [RS02] käyttävät seuraavaa klassista tulosta 1930-luvulta todetakseen, että $\sigma_k^2 = \mathbb{V}[b_k]$. $\mathbf{C}$:n ominaisarvot voidaan siis "palauttaa" kertoimista b_k ja päinvastoin. Lisäksi lauseesta seuraa, että maaston varianssille $\mathbb{V}[f(x)] = \sigma^2$ pätee $\sigma^2 = \operatorname{Tr}\mathbf{C} = \sum_k \sigma_k^2$.

Lause 1. Olkoon σ_k^2 $\mathbf{C}$:n se ominaisarvo, joka vastaa ominaisvektoria $\{\psi_k\}$. Tällöin Karhunen-Loève -sarjan kertoimet b_i ovat keskenään korreloimattomia satunnaismuuttujia, joille pätee $\operatorname{Cov}[b_k, b_j] = \sigma_k^2 \delta_{kj}$, kun $1 \leq k, l \leq |X|$.

2.4 Entropia

Satunnaismaaston $\Omega = (\{f : X \to \mathbb{R} \mid f\text{:llä on omin. } W\}, \mathcal{A}, \mu)$ *entropia* S saadaan lausekkeesta

$$S = -\int \ln \mu(f)\, d\mu(f).$$

Entropialle voidaan johtaa (ks. [Sta02b]) seuraava tulos sijoittamalla mitan μ paikalle normaalijakauman lauseke:

Lause 2. Olkoon $\mathcal{F}$ satunnaismaasto, jolle $\mathbf{C}$ on positiivisesti definiitti ja $\mathbf{C}$:n ominaisarvoille pätee $\sigma_k^2 > 0$. Tällöin $\mathcal{F}$:n entropialle pätee

$$S \leq S_{\mathbf{C}} = \frac{1}{2}|X| \ln \frac{2\pi e}{|X|} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_k \ln \frac{\lambda_k |X|}{\sigma^2}}_{\Delta S_{\mathbf{C}}}$$

Tässä $S_{\mathbf{C}}$ on normaalijakauman entropia kovarianssimatriisilla $\mathbf{C}$. Se saavuttaa maksimiarvonsa tietylle varianssille σ^2 jos ja vain jos $\lambda_k = \sigma^2/|X|$. Tällöin lauseen 2 summatermin arvoksi saadaan $\ln 1 = 0$. Satunnaismaaston entropian määrittely on siis järkevää antaa komponenteittain: $S = S_{\sigma^2} + \Delta S_{\mathbf{C}} + \Delta S_{ng}$, jossa

(i) $\Delta S_{ng} = S - S_{\mathbf{C}}$ on häviö jonka aiheuttaa normaalijakaumasta poikkeaminen,

(ii) S_{σ^2} on suurin mahdollinen entropia tietylle varianssille σ^2, ja

(iii) $\Delta S_{\mathbf{C}}$ määrää $\mathbf{C}$:n spektristä aiheutuvan häviön (kun graafin kaaret korreloivat, ei $\mathbf{C}$ ole diagonaalimatriisi eli $\Delta S_{\mathbf{C}} < 0$).

3 Satunnaismaastojen säännollisyysominaisuuksia

Satunnaismaastot ovat usein tietyllä tapaa hyvin säännöllisiä. Reidys ja Stadler [RS02] määrittelevät lukuisia säännöllisyysominaisuuksia, joista ensimmäinen ja heikoin on *pseudo-isotropia*:

Määritelmä 2. Satunnaismaasto $\mathcal{F}$ on pseudo-isotrooppinen, jos seuraavat ehdot kaikille $x \in X$ täyttävät vakiot a_0, v ja w ovat olemassa:

(i) $\mathbb{E}[f(x)] = a_0$

(ii) $\mathbb{V}[f(x)] = v^2$

(iii) $\dfrac{1}{|X|}\sum_{y\in X} \mathbf{C}_{xy} = w$

Tässä a_0 on jälleen keskiarvokelpoisuus ja vakiota w kutsutaan $\mathcal{F}$:n keskimääräiseksi korrelaatioksi [SH99].

Maastojen säännöllisyyden pseudo-isotropiaa syvemmässä tarkastelussa on tarpeen tarkastella maastoa komponenteittain. Monet tärkeät satunnaismaastot voidaankin kirjoittaa satunnaiskertoimisten komponenttien summana, kuten alkeismaastojen lineaaarikombinaationa. Summaesityksessä merkitään kertoimia yleensä c_j:llä ja komponentteja eli maastojen "piirteitä" ϑ_j:llä.

Määritelmä 3. [RS01] Olkoot c_j riippumattomia reaaliarvoisia satunnaismuuttujia $(j = 1, \dots, n)$ sopivan todennäköisyysavaruuden $\Omega_j = (\mathbb{R}, \mathcal{A}_j, \mu_j)$ yli. Olkoon $\Theta = \{\vartheta_j : X \to \mathbb{R} \mid j = 1, \dots, n\}$ funktioperhe. *Additiivinen satunnaismaasto* on todennäköisyysavaruus $(\Omega_X, \oplus_j \mathcal{A}_j, \oplus_j \mu_j)$, jossa

$$\Omega_X = \left\{ f : X \to \mathbb{R} \mid f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j \vartheta_j(x) \right\}.$$

Additiivinen satunnaismaasto lyhennetään yleensä *arl* (engl. additive random landscape). Sitä merkitään myös, kenties hieman intuitiivisemmin, $\mathcal{F}(X, \Theta, (c_i))$. On huomattava, että jokainen maasto Ω, jonka mitta μ noudattaa normaalijakaumaa, on additiivinen lauseen 1 ja normaalijakauman ominaisuuksien perusteella [RS01].

Määritelmä 4. Additiivinen satunnaismaasto on *uniformi*, jos ja vain jos kaikki seuraavista ehdoista täyttyvät:

(i) satunnaismuuttujat c_i ovat riippumattomia ja noudattavat samaa jakaumaa — merkitään i.i.d. (engl. independent and identically distributed)

(ii) seuraavat ehdot $\forall i$ täyttävät vakiot $a, b \in \mathbb{R}$ ovat olemassa:

$$\sum_{x \in X} \vartheta_i(x) = |X|\, a \quad \text{ja} \quad \sum_{x \in X} \vartheta_i^2(x) = |X|\, b.$$

Ehdot ovat semanttisesti "samat" kuin pseudo-isotropian odotusarvon ja varianssin vakioisuusehdot sovellettuna kullekin piirrefunktiolle erikseen.

Tätä määritelmää voidaan edelleen tiukentaa tarkastelemalla "kelpoisuuden" jakautumista piirteiden yli kullekin konfiguraatiolle, kun uniformisuudessa tarkastellaan vain konfiguraatioita kunkin piirteen yli erikseen [RS02]:

Määritelmä 5. Uniformi additiivinen satunnaismaasto on *tiukasti uniformi*, jos sellaiset vakiot $d, e \in \mathbb{R}$ ovat olemassa, joille mille tahansa konfiguraatiolle $x \in X$, seuraavat ehdot pätevät:

$$\sum_{i} \vartheta_i(x) = d \quad \text{ja} \quad \sum_{i} \vartheta_i^2(x) = e.$$

Tiukasti uniformi satunnaismaasto on aina myös pseudo-isotrooppinen, mutta myös pelkästään uniformi maasto voi tiettyjen ehtojen täyttyessä olla pseudo-isotrooppinen. Nämä ehdot määritellään seuraavassa lauseessa [RS02]:

Lause 3. Uniformi satunnaismaasto $\mathcal{F}$ on pseudo-isotrooppinen, jos ja vain jos $\mathcal{F}$ on tiukasti uniformi tai kaikki seuraavista ehdoista täyttyvät:

(i) $\displaystyle\sum_{x\in X} \vartheta_i(x) = 0,$

(ii) $\mathbb{E}[c_i] = 0$ ja

(iii) on olemassa vakio $e \in \mathbb{R}$ siten, että $\forall x \in X : \displaystyle\sum_i \vartheta_i^2(x) = e$

Tässä e on määritelty samoin kuin tiukan uniformisuuden tapauksessa; ehto siis "joustaa" vakion d olemassaolosta. Lisäksi vaaditaan, että uniformisuusvakio a ja satunnaiskertoimien odotusarvo ovat saavat arvon nolla (maasto on siis tavallaan normeerattu, sillä kelpoisuuden keskiarvo sekä kertoimien odotusarvot ovat molemmat nolla).

Tarkastellaan seuraavassa muutamien Reidysin ja Stadlerin [RS01] valitsemien esimerkkimaastojen ilmaisemista additiivisina satunnaismaastoina sekä näiden säännöllisyysominaisuuksia.

3.1 Ising-spinmaastot

Ising-spinmaasto ajatellaan tässä koostuvaksi n spinistä x_i, joista kukin on joko tilassa 1 tai -1, eli $x_i = \pm 1$. Määritellään *vuorovaikutusjoukot* $I \in \mathcal{I}$; usein nämä ovat pareja eli $\forall I \in \mathcal{I} : |I| = 2$, mutta yleisesti niiden voidaan ajatella olevan minkä kokoisia tahansa ($1 \le |I| \le n$). Vuorovaikutusenergioiden oletetaan olevan muotoa $c_I \prod_{i\in I} x_i$, jossa c_I:t ovat i.i.d. ja $\mathbb{E}[c_I] = 0$. Määritellään piirrefunktio kullekin vuorovaikutusjoukolle erikseen kertomalla ko. joukon spinien arvot keskenään: $\vartheta_I(x) = \prod_{i\in I} x_i$.

Selvästi pätee, että $\vartheta_I(x) = \pm 1$ kaikille konfiguraatioille x. On ilmeistä, että pätee myös $\vartheta_I^2(x) = 1$, sillä $1^2 = (-1)^2 = 1$. Vertaamalla näitä määritelmiä uniformisuusmääritelmään havaitaan, että on löydetty vakio $b = 1/|X| = 1/2^n$ jokaiselle vuorovaikutusjoukolle I. Jos löydetään vielä vakio a, voidaan maasto todeta uniformiksi; a:lle saadaan arvoksi nolla (kyseessä tavallaan pariteettilasku):

$$\sum_{x\in X} \underbrace{\prod_{j\in I} x_j}_{\vartheta_I(x)} = \underbrace{\prod_{i\in I} \Big(\sum_{x_i=\pm 1} x_i \Big)}_{=0} \prod_{i\notin I} \Big(\sum_{x_i=\pm 1} 1 \Big) = 0.$$

Yleisesti ottaen tämän kaltaiset spinlasimaastot (c_I:t ovat i.i.d.) ovat uniformeja, mutta eivät tiukasti uniformeja. Siihen vaadittavaa vakiota d ei ole aina mahdollista löytää.

Esimerkkinä toimikoon tapaus, jossa on vain kaksi spiniä x_1 ja x_2 sekä yksi piirrefunktio $\vartheta_{12}(x) = x_1 x_2$. Mahdollisia konfiguraatioita on neljä:

x_1	x_2	ϑ_{12}
$+$	$+$	1
$+$	$-$	-1
$-$	$+$	-1
$-$	$-$	1

Saadaan siis $\vartheta_I^2(x) = 1$ kaikille x eli vakio $e = 1$, mutta vakiota d ei ole olemassa. Ising-spinmaastot ovat kuitenkin pseudo-isotrooppisia, mutta eivät tiukan uniformiteetin kautta, vaan lauseen 3 jälkimmäisen vaihtoehdon kautta.

3.2 NK-maastot

Ajatellaan genomin koostuvan n binäärisestä lokuksesta ℓ_i. Kunkin lokuksen kelpoisuusarvo riippuu sen omasta tilasta sekä K:n siihen *epistaattisesti* yhdistetyn lokuksen tilasta. Konfiguraatio $x \in X$ vastaa siis n-bittistä vektoria, jolloin $|X| = 2^n$. Konfiguraatiot voidaan hahmottaa n-kuution nurkkapisteinä, jolloin konfiguraationaapurustot määrittyvät kuution särmien mukaisesti.

Lokuksen ℓ_i *riippuvuusjoukko* D_i määritellään $K+1$-alkioisena joukkona, johon lokus ℓ_i itse kuuluu. Muut K lokusta arvotaan satunnaisesti. Tämä on ns. satunnaismalli — muitakin vaihtoehtoja NK-maastoille siis on. Mahdollisia riippuvuusjoukkoja on $\binom{n-1}{K}$ kappaletta. Kunkin lokuksen riippuvuusjoukko on tietylle maastolle kiinnitetty, joten erilaisia NK-maastoja samoilla parametreilla n ja K on lukuisia.

Koska yksittäinen riippuvuusjoukko D_{ℓ_i} määrittelee ne $K+1$ alkiota, joiden tilasta ollaan lokuksen ℓ_i kannalta kiinnostuneita, on sen kulloinenkin tila ajateltavissa $(K+1)$-bittisenä vektorina. Merkitään ℓ_i:lle määritellyn riippuvuusjoukon D_{ℓ_i} mahdollisten tilavektorien joukkoa S_i:llä. Mahdollisia riippuvuusjoukon tiloja $s \in S_i$ on selvästi $2^{(K+1)} = |S_i|$ kappaletta.

Määritellään piirrefunktio kullekin lokuksen ℓ_i ja sen mahdollisen naapurustotilan' $s \in S_i$ muodostamalle parille seuraavasti:

$$\vartheta'_{(\ell_i,s)}(x) = \begin{cases} 1, & \text{jos } s \text{ ja } x \text{ määräävät saman tilan kaikille } D_{\ell_i}\text{:n lokuksille,} \\ 0, & \text{jos } s \text{ ja } x \text{ määräävät ristiriitaisen tilan jollekin } D_{\ell_i}\text{:n lokukselle.} \end{cases}$$

Jotta päästäisiin samanlaiseen määritelmään kustannusfunktiolle kuin NK-maastoille yleensä käytetään, lisätään kerroin $1/n$:

$$\vartheta(x) = \frac{1}{n} \cdot \vartheta'(x).$$

Piirrefunktio saa siis arvon $1/n$, kun konfiguraatio x ja riippuvuusjoukon tila s ovat keskenään konsistentit. On huomattava, että s määrää vain $K+1$ lokuksen tilaan, muut saavat olla kummassa tilassa tahansa. (Reidys ja Stadler [RS01] ovat esittäneet tämän piirrefunktion formaalimmin, joskin vaikealukuisesti.)

Arvotaan kullekin lokuksen ja riippuvuusjoukon mahdollisen tilan parille (ℓ_i, s) satunnainen reaaliluku c (i.i.d.) ja kirjoitetaan näiden avulla arl-esitys kelpoisuusfunktiolle:

$$f(x) = \sum_{\substack{1 \le i \le n, \\ 1 \le j \le |S_i|}} c_{(i,j)} \cdot \vartheta_{\ell_i, s_j}(x).$$

Yritetään laskea tälle uniformisuusvakiot a ja b:

$$\begin{aligned} \sum_{x \in X} \vartheta_{\ell_i, s}(x) &= \vartheta \\ &= \frac{1}{n} \sum_{x \in X} \vartheta'_{\ell_i, s}(x) \\ &= \frac{1}{n} \cdot 2^{n-(K+1)} = \text{vakio.} \end{aligned}$$

Tässä siis lasketaan summa yli kaikkien konfiguraatioiden tietylle lokukselle ℓ_i ja tietylle riippuvuusjoukon tilalle $s \in S_i$. Kerroin $1/n$ tulee ϑ:n määritelmästä ja tekijä $2^{n-(K+1)}$ perustuu siihen, että s sitoo vain $(K+1)$ lokusta, joten $n-(K+1)$:n lokuksen tila voidaan valita vapaasti. Näin syntyy siis $2^{n-(K+1)}$ mahdollisuutta "täsmäävälle" konfiguraatiolle.

Tuloksessa on tekijänä $|X| = 2^n$, kuten vaadittu uniformisuusehtoissa. Koska koko tulos on vakio, on selvästi olemassa sopiva kerroinvakio a. Kun lisäksi pätee $\vartheta^2_{\ell_i, s}(x) = (1/n) \cdot \vartheta_{\ell_i, s}(x)$, saadaan myös vakio b määriteltyä, joten kuvatun kaltaiset NK-mallit ovat uniformeja. Ne voidaan näyttää myös tiukasti uniformeiksi eli löydetään myös vakiot $d = 1$ ja $e = 1/n$:

$$\sum_i \underbrace{\sum_{s \in S_i} \vartheta_{\ell_i, s}(x)}_{1/n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} 1 = 1.$$

3.3 GBP-maastot

Otetaan kaikki parillisen kokoisen joukon $[n]$ järjestetyt puolitukset $[A, B]$ konfiguraatiojoukoksi X. Kullekin $x \in X$ pätee siis $A \subseteq [n]$, $B \subseteq [n]$, $A \cap B = \emptyset$ ja $|A| = |B|$. Erilaisia puolituksia on selvästi $\binom{n}{n/2} = |X|$ kappaletta. Määritellään seuraavanlainen piirrefunktioiden perhe:

$$\forall i \neq j; \;\; \vartheta_{ij}(x) = \begin{cases} 1, & \text{jos solmut } i \text{ ja } j \text{ eri puolilla jakoa,} \\ 0, & \text{muulloin,} \end{cases}$$

sekä reaaliarvoisten satunnaismuuttujien d_{ij} (i.i.d.) perhe, joilla $d_{ji} = d_{ij}$ kun $i \neq j$. Nyt voidaan määritellä kelpoisuusfunktiolle arl-esitys seuraavasti:

$$f(x) = \sum_{i \neq j} d_{ij} \vartheta_{ij}(x).$$

Tutkitaan tämän uniformisuus eli koitetaan löytää vakiot a ja b. Tarvitaan seuraavat havainnot pohjaksi laskelmalle:

(i) $\vartheta_{ij}(x)$ saa arvon 1 vain kun i ja j ovat eri puolilla jakoa, ja

(ii) jos i ja j on kiinnitetty eri puolille, loput solmut voidaan jakaa $\binom{n-2}{(n-2)/2}$ tavalla kelvolliseksi puolitukseksi.

Ryhmitellään kohdassa (ii) todettu binomikerroin muotoon $|X|\,a$:

$$\begin{aligned}\binom{n-2}{(n-2)/2} &= \frac{(n-2)!}{((n-2)/2)!^2} = \frac{1}{n\cdot(n-1)}\cdot\frac{n!}{((n-2)/2)!^2}\\ &= \frac{1}{n\cdot(n-1)}\cdot\frac{n!}{(n/2-1)!^2} = \frac{(n/2)^2}{n\cdot(n-1)}\cdot\frac{n!}{(n/2)!^2}\\ &= \frac{n^2}{4}\cdot\frac{1}{n\cdot(n-1)} = \underbrace{\frac{1}{4}\cdot\frac{n}{n-1}}_{\text{vakio } a}\underbrace{\binom{n}{n/2}}_{|X|}.\end{aligned}$$

Kun lisäksi $\vartheta_{ij}(x) = \vartheta_{ij}^2(x)$ eli $b = a$, on tällainen GBP-maasto uniformi. Se on helposti havaittavissa myös tiukasti uniformiksi:

$$\sum_{i\neq j}\vartheta_{ij}(x) = \underbrace{\sum_{i\in A}\sum_{j\in B}1}_{(n/2)^2} + \underbrace{\sum_{i\in B}\sum_{j\in A}1}_{(n/2)^2} = \frac{n^2}{2}$$

3.4 TSP-maastot

Kauppamatkustajan ongelmassa konfiguraatiojoukko X koostuu luonnollisesti mahdollisista n kaupunkia kiertävistä reiteistä. Kukin reitti vastaa jotain $[n]$:n permutaatiota, jolloin konfiguraatiojoukko X on ekvivalentti symmetrisen ryhmän S_n kanssa, joten $|X| = |S_n| = n!$.

Oletetaan kaupunkien väliset etäisyydet d_{kl} satunnaisiksi ja määritellään reitin τ pituus summaamalla sen “varrella” olevat etäisyydet: $\sum_i d_{\tau(i),\tau(i-1)}$. Tämän perusteella voidaan kirjoittaa arl-esitys kelpoisuusfunktiolle reitin suhteen ottamalla käyttöön piirrefunktioperhe, joka valitsee reitiltä kaaren kerrallaan käyttäen Kroneckerin deltafunktiota:

$$f(\tau) = \sum_{\substack{k,l\\k\neq l}} d_{kl}\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\delta_{k,\tau(i)}\delta_{l,\tau(i-1)}}_{\vartheta_{kl}(\tau)}.$$

Tässä on huomattava, ettei siis “kiertoa” permutaation viimeisestä alkiosta ensimmäiseen oteta huomioon laskuissa, eli jos k on positiossa n ja l positiossa

1, ei ko. vierekkyyttä lasketa. Artikkelissaan Reidys ja Stadler [RS01] määrittelevät reitit tosin suljetuiksi poluiksi, mutta annetuissa uniformisuustuloksissa näin ei oleteta, vaan "viimeinen kaari" jää pois. Tulokset voisi tietenkin johtaa myös suljetun polun tapaukselle. Tässä seuraan artikkelissa annettuja tuloksia.

Tutkitaan tällekin uniformisuus eli etsitään vakiot a ja b:

$$\sum_{\tau \in S_n} \underbrace{\sum_{i=1}^{n} \delta_{\tau(i),k} \delta_{\tau(i-1),l}}_{\vartheta_{kl}(\tau)} = \sum_{\tau \in S_n} \delta_{\tau(\tau^{-1}(k)-1),l} = |S_n|/n = (n-1)!$$

Saadaan siis $a = 1/n$, koska tapoja valita sellainen permutaatio, jossa tietyt kaksi alkiota k ja l ovat peräkkäin on $(n-1)!$ kpl.

Koska jälleen pätee $\vartheta_{kl}(\tau) = \vartheta_{kl}^2(\tau)$, saadaan $b = a$. Maasto on siis uniformi. Tiukka uniformisuus saadaan myös näytettyä ($d = e$):

$$\sum_{k \neq l} \vartheta_{kl}(\tau) = \sum_{k} \sum_{l \neq k} \underbrace{\sum_{i=1}^{n} \delta_{\tau(i),k}\, \delta_{\tau(i-1),l}}_{\vartheta_{kl}(\tau)} = \sum_{k} \sum_{l \neq k} \delta_{\tau(\tau^{-1}(k)-1),l} = n-1.$$

Näin siksi, että kullakin reitillä on $n-1$ "väliä" kuljettavana.

Jos halutaan käsitellä symmetristä TSP-ongelmaa, eli etäisyyksille pätee $d_{kl} = d_{lk}$, muutetaan piirrefunktion määritelmää seuraavasti:

$$\vartheta_{kl}(\tau) = \sum_{i=1}^{n} (\delta_{k,\tau(i)} \delta_{l,\tau(i-1)} + \delta_{l,\tau(i)} \delta_{k,\tau(i-1)}), \;\; 1 \leq k < l \leq n.$$

Laskut onnistuvat edelleen eli myös symmetrinen tapaus tuottaa tiukasti uniformin maaston.

3.5 Isotropia

Uniformisuus ja pseudo-isotropia ovat melko heikkoja ominaisuuksia, jonka vuoksi on määritelty lisäksi *isotropia*, joka on tavallaan analogia stokastisen prosessin *vakaudelle* (engl. stationarity) ja edelleen $*$-isotropia [RS02].

Määritelmä 6. Satunnaismaasto on *isotrooppinen* $X \times X$:n ositukselle $\mathcal{R}$, jos seuraavat ehdot täyttävät vakiot $a_0, v \in \mathbb{R}$ sekä funktio $c : \mathcal{R} \to \mathbb{R}$ ovat olemassa:

(i) $\forall x \in X : \mathbb{E}[f(x)] = a_0$ ja $\mathbb{V}[f(x)] = v^2$

(ii) $\forall (x, y) \in \mu : \mathbf{C}_{xy} = c(\mu)$, $\mu \in \mathcal{R}$.

Odotusarvoon ja varianssiin kohdistuva rajoitus on täsmälleen sama kuin pseudo-isotropian määritelmässä, eli käytännössä ehto (ii) on tiukennus vastaavaan pseudo-isotropian ehtoon $(1/|X|)\sum_{y\in X}\mathbf{C}_{xy}=w$. Nyt vaaditaan tällaisen keskiarvoisuuden sijaan, että kovarianssimatriisin alkioilla on vakioarvo kussakin osituksen $\mathcal{R}$ luokassa μ.

Rajoittamalla osituksen $\mathcal{R}$ ominaisuuksia voidaan vetää yhteys isotropian ja pseudo-isotropian välille. Määritellään ensin, että $X\times X$:n ositus $\mathcal{R}$ on *homogeeninen*, jos diagonaali $\{(x,x)\mid x\in X\}$ muodostaa siinä oman luokkansa. Lisäksi sanotaan, että $X\times X$:n ositus $\mathcal{R}$ on *säännöllinen luokkien asteen suhteen*, jos $|\{y\in X\mid (x,y)\in\chi\}|$ ei riipu alkion $x\in X$ valinnasta millekään luokalle $\chi\in\mathcal{R}$.

Lause 4. Jos $\mathcal{F}$ on isotrooppinen homogeenisen ja luokkien asteen suhteen säännöllisen $X\times X$:n osituksen suhteen, se on myös pseudo-isotrooppinen.

Vielä kolmaskin isotropiamuoto on määritelty (tosin tämä yhtyy isotropian kanssa ns. assosiaatioskeemoille):

Määritelmä 7. Olkoon $\mathbf{A}$ suuntaamattoman graafin naapurusmatriisi. Satunnaismaasto on *$*$-isotrooppinen* $\mathbf{A}$:n suhteen jos $\mathbb{E}[f(x)]=a_0$ ja $\mathbf{C}\in\langle\mathbf{A}\rangle$.

Tämä tarkoittaa siis, että kovarianssimatriisi on oltava ilmaistavissa naapurusmatriisin polynomina. Additiivisille satunnaismaastolle $*$-isotropia määritellään sen Fourier-kehitelmän avulla:

Lause 5. Additiivinen satunnaismaasto on $*$-isotrooppinen jos ja vain jos sen Fourier-kertoimille a_i ($\mathbf{A}$:n ominaisarvojen ortonormaalikannan suhteen) pätee:

(i) $\mathbb{E}[a_k]=0$ kun $k\neq 0$

(ii) $\mathrm{Cov}[a_k,a_j]=\delta_{kj}\mathbb{V}[a_k]$

(iii) $\mathbb{V}[a_k]=\mathbb{V}[a_j]$ jos φ_j ja φ_k ovat samassa ominaisavaruudessa

Vaaditaan siis, etteivät Fourier-kertoimet korreloi keskenään ja että samaan $\mathbf{A}$:n ominaisavaruuteen kuuluvilla kertoimilla on sama keskiarvo ja varianssi. $*$-isotrooppisten satunnaismaastojen Fourier- ja Karhunen-Loève-esitykset yhtyvät. Tätä säännöllisyysominaisuutta kuvaa myös se, että satunnaismaaston entropia saavuttaa maksimiarvon jos ja vain jos ko. maasto noudattaa normaalijakaumaa ja on $*$-isotrooppinen.

Esimerkkejä $*$-isotrooppisista maastoista ovat GBP- ja TSP-maastot [Sta02b]. Monet Ising-spinmaastot ja NK-variantit eivät puolestaan ole $*$-isotrooppisia [RS02].

Viitteet

[HS98] Wim Hordijk and Peter F. Stadler. Amplitude spectra of fitness landscapes. *Journal of Complex Systems*, 1:39–66, 1998.

[KNR01] L. Kallel, B. Naudts, and C.R. Reeves. Properties of fitness functions and search landscapes. In *Theoretical Aspects of Evolutionary Computing*, Natural Computing Series, pages 175–206. Springer-Verlag, 2001.

[RS01] C. Reidys and P. Stadler. Neutrality in fitness landscapes. *Applied Mathematics and Computation*, 117:321–350, 2001.

[RS02] Christian M. Reidys and Peter F. Stadler. Combinatorial landscapes. *SIAM Review*, 2002. To appear.

[SH99] Peter F. Stadler and Robert Happel. Random field models for fitness landscapes. *Journal of Mathematical Biology*, 38:435–478, 1999.

[Sta95] Peter F. Stadler. Towards a theory of landscapes. In R. Lopéz-Peña, R. Capovilla, R. García-Pelayo, H. Waelbroeck, and F. Zertuche, editors, *Complex Systems and Binary Networks*, volume 461 of *Lecture Notes in Physics*, pages 77–163, Berlin, New York, 1995. Springer Verlag.

[Sta02a] Peter F. Stadler. Fitness landscapes. In Michael Lässig and Angelo Valleriani, editors, *Biological Evolution and Statistical Physics*, pages 187–207, Berlin, 2002. Springer-Verlag. In press.

[Sta02b] Peter F. Stadler. Spectral landscape theory. In J. P. Crutchfield and P. Schuster, editors, *Evolutionary Dynamics—Exploring the Interplay of Selection, Neutrality, Accident, and Function.* Oxford University Press, 2002. In press.