THE CHEMIST'S CABINET PUZZLE: A POLYNOMIAL APPROACH

JESÚS GAGO-VARGAS, MARIBEL HARTILLO HERMOSO,
AND JOSÉ MARÍA UCHA ENRÍQUEZ

Abstract. Realizamos un análisis del juego conocido por el herbolario. Se modeliza su solución mediante un sistema polinómico, y deducimos el número de soluciones a partir de herramientas de Álgebra Conmutativa.

1. Introducción

El herbolario es un rompecabezas bidimensional de 16 piezas. En 2005, la editorial RBA ([RBA]) lo publicó en una bonita versión de madera (figura 1), tal como lo diseñó su creador Jean-Claude Constantin ([Constantin]). El nombre procede del parecido con los botes donde se almacenaban las hierbas y otras sustancias en las farmacias. El objetivo es disponer las 16 piezas móviles en una caja, dispuestas en 4 filas y 4 columnas. Las piezas se diferencian entre sí por los salientes laterales y las bandas marrones horizontales. Sin embargo, es posible considerar el rompecabezas formado por las 16 piezas que se obtienen al tomar un cuadrado,

Date: July 2007.
1991 *Mathematics Subject Classification.* Primary XXAYY5; Secondary XXA55, XXD55.
Key words and phrases. Non-linear systems, Gröbner bases.
This work was completed with the support of FQM-333, BFM2001-3164.

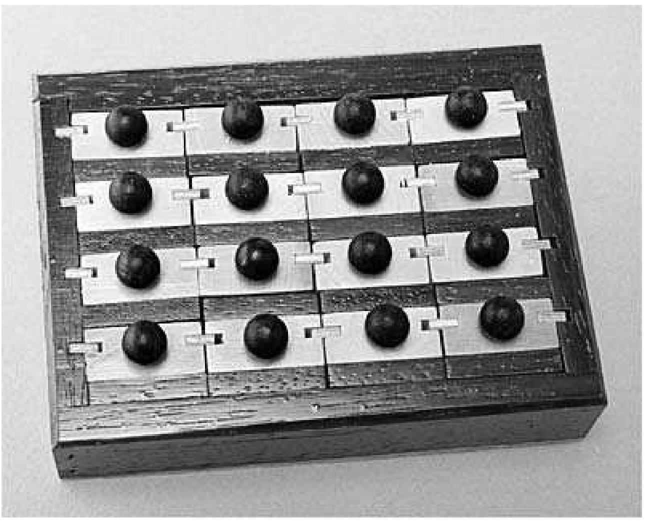

Figure 1. Modelo en madera

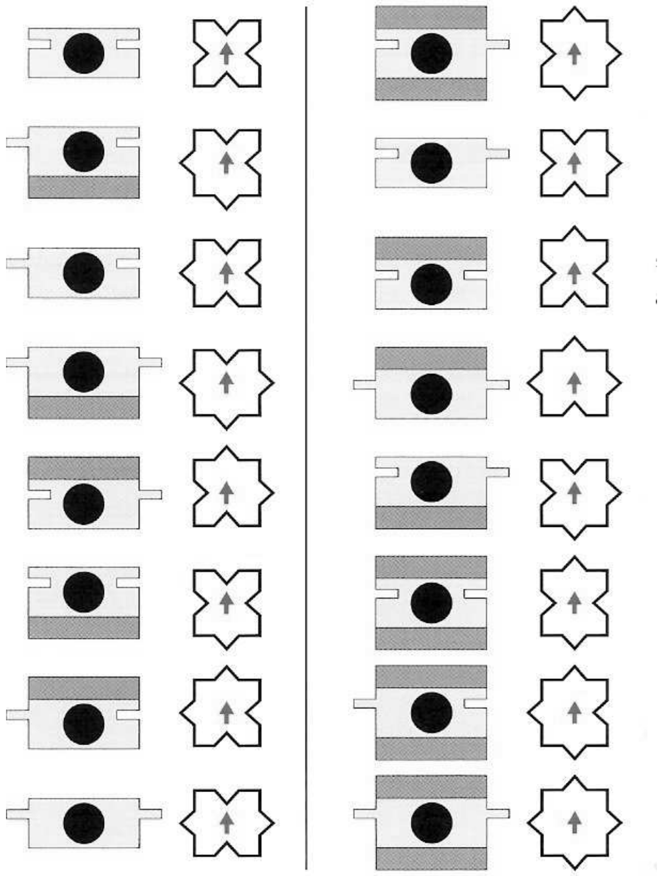

FIGURE 2. Relaciones entre piezas

y escoger en cada lado un entrante o un saliente (figura 2). El marco presenta también salientes y muescas, y una barra horizontal en la parte superior. La disposición de ambos elementos resulta clave para determinar el número posible de soluciones. Desde el punto de vista de la representación, exigimos que las piezas de la fila superior tengan entrantes arriba, y las piezas de la fila inferior salientes abajo. Un ejemplo de solución aparece en la figura (3). Este juego ha sido analizado en [CFF-61, CFF-62], en donde aparecen los resultados de Jacques Haubrich sobre el número de soluciones del rompecabezas. Nuestro propósito es calcular dicho número a partir de un modelo del problema como sistema de ecuaciones polinómico. El ideal que definen dichas ecuaciones es cero dimensional y radical, por lo que el número de soluciones del problema viene dado por la dimensión como $\mathbb{C}$-espacio vectorial

$$\dim_{\mathbb{C}} \mathbb{C}[x_1, \ldots, x_n]/I,$$

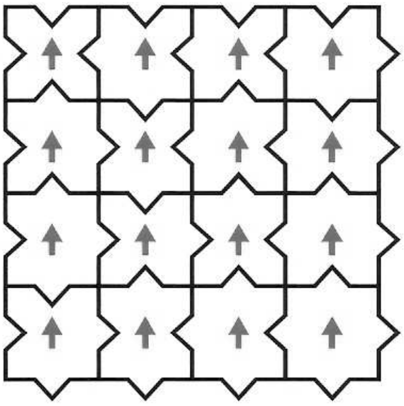

FIGURE 3. Solución inicial

donde n es el número de variables que usaremos en el modelo. Este número es posible calcularlo mediante bases de Gröbner.

2. Modelo

Consideremos una pieza del rompecabezas. Viene definida por los entrantes/salientes en los lados del cuadrado. Identificamos entonces cada pieza por un conjunto de 4 variables $x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}$, donde cada una de ellas puede tomar los valores $0, 1$.

$$\begin{array}{ccc} & x_i & \\ x_{i+1} & & x_{i+2} \\ & x_{i+3} & \end{array}$$

Por ejemplo, el 0 indica que es un entrante, y el 1 que es un saliente. Como son 16 piezas, obtenemos 64 variables. El modelo visual del problema queda como sigue.

$$\begin{array}{ccccccccccccccc}
 & x_1 & & & & x_5 & & & & x_9 & & & & x_{13} & \\
x_2 & & x_3 & - & x_6 & & x_7 & - & x_{10} & & x_{11} & - & x_{14} & & x_{15} \\
 & x_4 & & & & x_8 & & & & x_{12} & & & & x_{16} & \\
 & | & & & & | & & & & | & & & & | & \\
 & x_{17} & & & & x_{21} & & & & x_{25} & & & & x_{29} & \\
x_{18} & & x_{19} & - & x_{22} & & x_{23} & - & x_{26} & & x_{27} & - & x_{30} & & x_{31} \\
 & x_{20} & & & & x_{24} & & & & x_{28} & & & & x_{32} & \\
 & | & & & & | & & & & | & & & & | & \\
 & x_{33} & & & & x_{37} & & & & x_{41} & & & & x_{45} & \\
x_{34} & & x_{35} & - & x_{38} & & x_{39} & - & x_{42} & & x_{43} & - & x_{46} & & x_{47} \\
 & x_{36} & & & & x_{40} & & & & x_{44} & & & & x_{48} & \\
 & | & & & & | & & & & | & & & & | & \\
 & x_{49} & & & & x_{53} & & & & x_{57} & & & & x_{61} & \\
x_{50} & & x_{51} & - & x_{54} & & x_{55} & - & x_{58} & & x_{59} & - & x_{62} & & x_{63} \\
 & x_{52} & & & & x_{56} & & & & x_{60} & & & & x_{64} &
\end{array}$$

Las condiciones de frontera se imponen sobre las variables

$$x_1, x_5, x_9, x_{13}, x_2, x_{15}, x_{18}, x_{31}, x_{34}, x_{47}, x_{50}, x_{63}, x_{52}, x_{56}, x_{60}, x_{64}.$$

El marco superior de la caja nos dice que

$$x_1 = 0, x_5 = 0, x_9 = 0, x_{13} = 0,$$

y el marco inferior

$$x_{52} = 1, x_{56} = 1, x_{60} = 1, x_{64} = 1.$$

En los laterales izquierdo y derecho, definidos por las variables $x_2, x_{18}, x_{34}, x_{50}$ y $x_{15}, x_{31}, x_{47}, x_{63}$ respectivamente, tendremos que colocar cuatro ceros y cuatro unos. Sea L_1 el subconjunto de cuatro valores de $\{2, 18, 34, 50, 15, 31, 47, 63\}$ donde tendremos un entrante, y L_2 el conjunto complementario, donde colocaremos un saliente. Entonces

$$x_{i_1} = 1, i_1 \in L_1, x_{i_2} = 0, i_2 \in L_2.$$

La primera condición que se aplica a todas las variables es que valen cero o uno. Esto se expresa con las relaciones $F(x_i) = x_i(x_i - 1) = 0, i = 1, \ldots, 64$.

Cuáles son las relaciones entre las piezas? En primer lugar, si dos piezas están conectadas, en una de ellas tiene que haber un entrante y en la otra un saliente. Por ejemplo, consideremos la relación entre x_3 y x_6. La condición, desde el punto de vista de la lógica proposicional es

$$x_3 = 0 \Leftrightarrow x_6 = 1.$$

Entonces, con el dato de que cada una de ellas es cero o uno, lo podemos expresar con la condición polinómica $x_3 + x_6 - 1 = 0$. Por claridad en la notación, sea $H(i, j) = x_i + x_j - 1$. Las relaciones de encaje entre las piezas se definen por el carácter nulo de los polinomios

$$\begin{aligned} H(3,6), H(7,10), H(11,14), \\ H(4,17), H(8,21), H(12,25), H(16,29), \\ H(19,22), H(23,26), H(27,30), \\ H(20,33), H(24,37), H(28,41), H(32,45), \\ H(35,38), H(39,42), H(43,46), \\ H(36,49), H(40,53), H(44,57), H(48,61), \\ H(51,54), H(55,58), H(59,62). \end{aligned}$$

Llamemos S al conjunto de pares (i, j) dado por los encajes anteriores.

Por otro lado, debemos indicar que todas las piezas son diferentes. Por ejemplo, consideremos las piezas definidas por las variables x_1, x_2, x_3, x_4 y x_5, x_6, x_7, x_8. La condición, en principio, queda como

$$x_1 \neq x_5 \text{ or } x_2 \neq x_6 \text{ or } x_3 \neq x_7 \text{ or } x_4 \neq x_8. \tag{1}$$

Como antes, la condición $x_1 \neq x_5$ se puede reducir a que $H(1, 5) = x_1 + x_5 - 1 = 0$. Entonces la condición 1 da lugar a $H(1, 5)H(2, 6)H(3, 7)H(4, 8) = 0$. Si llamamos

$$G(i, j) = H(i, j)H(i + 1, j + 1)H(i + 2, j + 2)H(i + 3, j + 3),$$

las condiciones de piezas distintas son definidas por el carácter nulo de los $\frac{15(15+1)}{2} =$ 120 polinomios

$$G(1, 5), G(1, 9), G(1, 13), G(1, 17), \ldots, G(1, 61), G(5, 9), \ldots, G(53, 61), G(57, 61).$$

Sea D el conjunto de pares (i,j) dado por las relaciones entre piezas. En resumen, el sistema polinómico que define las soluciones del problema es

$$\begin{cases} F(x_i) = 0, & i = 1, \dots, 64, \\ H(i,j) = 0, & (i,j) \in S, \\ G(i,j) = 0, & (i,j) \in D, \\ x_i = 0, & i = 1, 5, 9, 13, \\ x_j = 1, & j = 52, 56, 60, 64, \\ x_{i_1} = 0, & i_1 \in L_1, \\ x_{i_2} = 1, & i_2 \in L_2 \end{cases} \tag{2}$$

3. Bases de Gröbner

Para calcular el número de soluciones del sistema 2 necesitamos unos conceptos de Álgebra Computacional. Vamos a denotar los monomios en $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ por $x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n}$, para $\alpha \in \mathbb{Z}_+^n$. El grado de x^α es $|\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i$. Dado un polinomio no nulo $f(x) = \sum_\alpha f_\alpha x^\alpha$, sus términos son las expresiones $f_\alpha x^\alpha$ con $f_\alpha \neq 0$, y su grado $\deg(f)$ es el máximo de los grados de los términos de f. Un orden monomial $' <'$ es un orden total en el conjunto de monomios que es un buen orden y satisface la condición

$$x^\alpha < x^\beta \Rightarrow x^{\alpha+\gamma} < x^{\beta+\gamma}.$$

Ejemplos de órdenes monomiales son el orden lexicográfico $' <'_{lex}$, donde $x^\alpha <_{lex} x^\beta$ si $\alpha < \beta$ para un orden lexicográfico en $\mathbb{Z}_+^n$, o el orden lexicográfico graduado $' <'_{grlex}$, donde $x^\alpha <_{grlex} x^\beta$ si $|\alpha| < |\beta|$, o $|\alpha| = |\beta|$ y $x^\alpha <_{lex} x^\beta$. Fijemos un orden monomial en $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$. Dado un polinomio no nulo $f(x) = \sum_\alpha f_\alpha x^\alpha$, su término líder $\mathrm{LT}(f)$ es $f_\alpha x^\alpha$, donde x^α es el monomio máximo con respecto al orden dado, con $f_\alpha \neq 0$. Sea I un ideal en $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$. Un subconjunto finito $G \subset I$ es una base de Gröbner de I si el término líder de cualquier polinomio de I es divisible por el término líder de algún polinomio de G. Se conoce que una base de Gröbner siempre existe. Un monomio x^α se denomina monomio estándar si no es divisible por el término líder de algún polinomio en I, o de forma equivalente, si x^α no es divisible por el término líder de un polinomio en la base de Gröbner.

Una vez fijado un orden monomial, se puede aplicar el algoritmo de división. Sean $h_1, \dots, h_m$ y f polinomios no nulos. Si dividimos f por los polinomios $h_1, \dots, h_m$, obtenemos polinomios $u_1, \dots, u_m$ y r que satisfacen $f = \sum_{j=1}^m u_j h_j + r$, ningún término de r es divisible por $\mathrm{LT}(h_j), j = 1, \dots, m$ si $r \neq 0$, y $\mathrm{LT}(f) \geq \mathrm{LT}(u_j h_j)$ si $u_j \neq 0$. Cuando los polinomios $h_1, \dots, h_m$ forman una base de Gröbner de I, el resto r está unívocamente determinado y es una combinación lineal del conjunto $\mathcal{B}$ de los monomios estándar; esto es

$$r(x) = \sum_{x^\beta \in \mathcal{B}} r_\beta x^\beta,$$

donde $r_\beta \in \mathbb{C}$. Además, $f \in I$ si y solamente si $r = 0$. Por tanto, $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]/I$ y $\mathbb{C}^{|\mathcal{B}|}$ son isomorfos como espacios vectoriales. Dado un ideal I, definimos $V(I)$ como el conjunto de ceros complejos, es decir

$$V(I) = \{a \in \mathbb{C}^n \mid h(a) = 0, \text{ para todo } h \in I\}.$$

Como todo ideal en $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ está finitamente generado, son los ceros comunes al conjunto de generadores. $V(I)$ es una variedad algebraica, y el problema planteado

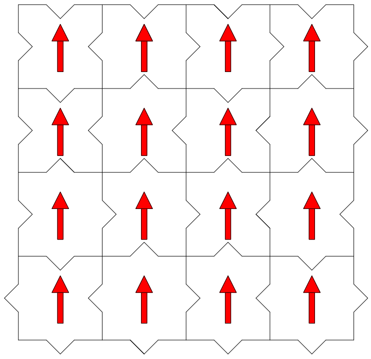

FIGURE 4. Configuración de ejemplo

en la sección anterior sobre el número de soluciones del problema es equivalente a preguntar cuántos puntos tiene dicha variedad. La respuesta la da el siguiente teorema.

Theorem 3.1. [CLO, Thm. 2.2.10] *Sea I un ideal en $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$, y $V = V(I)$ el conjunto de ceros definido por I. Entonces la variedad algebraica V es finita si y solamente si el espacio vectorial $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]/I$ tiene dimensión finita N. Además, $|V| \leq N$, y la igualdad se da si y solamente si el ideal I es radical.*

4. Número de soluciones

Consideremos el I ideal definido por los polinomios del sistema 2. El ideal I es 0-dimensional, a causa de los polinomios $F(x_i)$. Además, por la proposición [CLO, Prop. 2.7], el ideal I es radical. Por tanto, el número de soluciones del sistema es igual a la dimensión del $\mathbb{C}$-espacio vectorial

$$\mathbb{C}[x_1, \dots, x_{64}]/I.$$

Y cómo calculamos este número? Necesitamos para ello conseguir una base de Gröbner G del ideal I respecto a cualquier orden monomial definido en $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_{64}]$. Estos cálculos los hemos realizado con SINGULAR [GPS05], y el comando `vdim`, que nos da precisamente la dimensión del espacio vectorial (o bien, el número de monomios estándar). Los cálculos, además, se pueden realizar en un cuerpo de característica 2, pues las soluciones son cero o uno. Este método acelera los cálculos en gran medida. Hemos calculado todas las configuraciones posibles con respecto a las condiciones de los laterales. Hay 17 configuraciones esencialmente distintas por simetría. Codificamos los laterales con 1 para un entrante y 0 para un saliente, y las disponemos en columnas paralelas. Por ejemplo, la dada por la figura 4 se codifica como

$$\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{array}$$

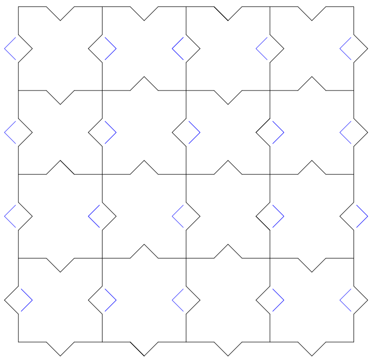

FIGURE 5. Configuración dual

Una simetría especular de eje vertical, paralelo a los laterales, nos da la configuración

$$\begin{matrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{matrix}$$

Una simetría especular de eje horizontal, paralelo a los lados superiores, produce

$$\begin{matrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{matrix}$$

La combinación de las dos simetrías anteriores nos dan la simetría central, que es

$$\begin{matrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{matrix}$$

Pero hay otras configuraciones asociadas. Si se intercambian entrantes y salientes como en la figura 5, marcadas en azul, se obtiene una solución para la configuración

$$\begin{matrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{matrix}$$

que llamaremos configuración complementaria. A esta nueva configuración hay que aplicar los movimientos anteriores, con lo que el conjunto de configuraciones relacionadas será

$$\begin{matrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{matrix} \quad \begin{matrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{matrix} \quad \begin{matrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{matrix} \quad \begin{matrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{matrix} \quad \begin{matrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{matrix} \quad \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{matrix} \quad \begin{matrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{matrix} \quad \begin{matrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{matrix}$$

Si denominamos σ_1 a la simetría especular de eje vertical, σ_2 a la simetría especular de eje horizontal, y τ a la operación de obtener el complemento, lo que estamos haciendo es calcular el espacio cociente de todas las configuraciones posibles con el grupo G generado por σ_1, σ_2, τ. Los generadores son de orden 2, por lo que G es isomorfo a $C_2 \times C_2 \times C_2$, y tiene 8 elementos:

$$G = \{1, \sigma_1, \sigma_2, \tau, \sigma_1\sigma_2, \sigma_1\tau, \sigma_2\tau, \sigma_1\sigma_2\tau\}.$$

El resultado final de los cálculos aparece en la tabla.

Configuración	Soluciones	Configuración	Soluciones
0 1 0 1 0 1 0 1	652	0 1 0 1 0 1 1 0	548
0 1 0 1 0 0 1 1	364	0 1 0 0 0 1 1 1	338
0 0 0 1 0 1 1 1	212	0 1 0 1 1 1 0 0	364
0 1 0 0 1 1 0 1	504	0 1 0 1 1 0 1 0	740
0 1 0 0 1 1 1 0	524	0 1 0 0 1 0 1 1	308
0 0 0 1 1 0 1 1	284	0 0 0 0 1 1 1 1	232
0 1 1 0 0 1 1 0	1052	0 1 1 0 0 0 1 1	360
0 1 1 0 0 1 1 0	352	0 0 1 1 1 1 0 0	160
0 1 1 0 1 0 0 1	476		

5. Variaciones del problema

No es difícil considerar dos variaciones de este rompecabezas. En primer lugar, tomemos un cuadrado, y consideremos tres posibilidades en cada lado: entrante, saliente y plano. Hay $4^3 = 64$ posibilidades, por lo que el problema consiste en formar un cuadrado de orden 8×8 con esas piezas, dada una configuración del marco exterior. El modelo es similar al anterior. Cada pieza viene definida por 4 variables, y cada una de ellas puede tomar los valores 0 (entrante), 1 (plano), y 2 (saliente). El encaje de las piezas queda determinado por una expresión de la forma $x_i + x_j - 2 = 0$. La otra condición es que las piezas sean distintas, que se expresa a través de una ecuación de la forma

$$(x_i - x_j - 1)(x_i - x_j - 2)(x_{i+1} - x_{j+1} - 1)(x_{i+1} - x_{j+1} - 2)$$
$$(x_{i+2} - x_{j+2} - 1)(x_{i+2} - x_{j+2} - 2)(x_{i+3} - x_{j+3} - 1)(x_{i+3} - x_{j+3} - 2) = 0.$$

La complejidad crece, pues ahora tenemos $4 \times 64 = 256$ variables, pero el modelo es fácil.

La otra extensión es pasar a un rompecabezas en tres dimensiones. Consideremos un cubo, y sobre cada una de las seis caras tomamos tres posibilidades, como en la variación anterior: pirámide entrante, pirámide saliente, lado plano. Hay $6^3 = 216$ piezas, y se trata de formar un cubo de orden $6 \times 6 \times 6$, de nuevo con una configuración dada por el marco exterior. Cada pieza se define por seis variables (una por cada cara), por lo que el sistema polinómico está definido sobre $6^4 = 1296$ variables. Esto ya es un reto computacional, aunque se trate de un ideal ideal radical, cero dimensional, y que los cálculos se pueden hacer en característica 3.

6. Conclusiones

Este rompecabezas es una buena excusa desde el punto de vista pedagógico para presentar modelos no lineales de problemas, así como ciertos conceptos clave de Álgebra Conmutativa. No existen muchas introducciones a estos temas avanzados desde planteamientos sencillos como este problema, tal como ya habíamos planteado en [GHMU]. Es más, ciertas cuestiones de optimización no lineal usan estas técnicas [LLMO], por lo que estos modelos van más allá de una simple curiosidad.

References

CLO. D. Cox, J. Little, D. O'Shea. *Using Algebraic Geometry*, volume 185 of *Graduate Texts in Mathematics*. Springer-Verlag, New York, 1998.

RBA. Varios. *Juegos de Ingenio*, fasc. 1. RBA Editores, Barcelona, 2006.

Constantin. J.C. Constantin. J810-Apothekeschrank. `http://www.constantin-jean-clau.de/`. [Online; accessed 7-July-2007].

GHMU. J. Gago-Vargas, I. Hartillo-Hermoso, J. Martín-Morales, J.M. Ucha-Enríquez. Sudokus and Gröbner bases: not only a divertimento, in 'Computer Algebra in Scientific Computing (9th International Workshop, CASC 2006, Chisinau, Moldova)', Ganzha, Victor G.; Mayr, Ernst W.; Vorozhtsov, Evgenii V. (Eds.) Lecture Notes in Computer Science, vol. 4194, pp. 155-165, 2006.

CFF-61. D. Gebhardt. The Chemist Cabinet Puzzle. *CFF Newsletter*, 61, 2003.

CFF-62. D. Gebhardt. Analysis of the Chemist Cabinet Puzzle. *CFF Newsletter*, 62, 2003.

GPS05. G.-M. Greuel, G. Pfister, and H. Schönemann. Singular 3.0. A Computer Algebra System for Polynomial Computations. Centre for Computer Algebra, University of Kaiserslautern (2005). `http://www.singular.uni-kl.de`.

LLMO. J.A. de Loera, J. Lee, S. Margulies, S. Onn. Expressing Combinatorial Optimization Problems by Systems of Polynomial Equations and the Nullstellensatz. arXiv:0706.0578v1, 5 June 2007.

Dpto. de Álgebra, Univ. de Sevilla, Apdo. 1160, 41080 Sevilla
E-mail address: gago@us.es

Dpto. de Matemáticas, Univ. de Cádiz
E-mail address: mihartillo@uca.es

Dpto. de Álgebra, Univ. de Sevilla, Apdo. 1160, 41080 Sevilla
E-mail address: ucha@us.es