Publ. I.R.M.A. Strasbourg, 1988, 361/S-19
Actes 19e Séminaire Lotharingien de Combinatoire, p.77-83

EXPERIMENTELLE MATHEMATIK

VON

ADALBERT KERBER†

Viele mathematische Strukturen, z.B. Graphen, besitzen — zu vorgegebenen Parametern (z.B. Punktezahl oder Punkte- und Kantenzahl) — nur endlich viele Ausprägungen. Bei ihrer Untersuchung kann man deshalb wie folgt vorgehen. Man verschafft sich, zu verschiedenen Parametersätzen, einen Vorrat an Beispielen und treibt an diesem Mustererkennung. Haben alle Beispiele eine gewisse Eigenschaft, d.h. erkennt man ein Muster, dann führt dies zu einer entsprechenden Hypothese, die man an zusätzlichen Beispielen noch nachprüft oder gleich zu beweisen versucht.

Bei diesem Verfahren kommt es natürlich auf die Auswahl der Beispielsätze an, sie sollte *systematisch* und vor allem *vorurteilsfrei* getroffen werden, damit gewährleistet ist, daß Spezialfälle nicht bevorzugt werden, die zu falschen Hypothesen verleiten können. Ich will deshalb einmal anhand von gewissen Strukturen eine solche Vorgehensweise beschreiben. Sie ist leicht auf viele weitere Fälle verallgemeinerbar.

Herr Wolff hat uns in seinen beiden Hauptvorträgen während dieser Tagung die Nützlichkeit der Begriffsanalyse demonstriert. Diese von der Darmstädter Arbeitsgruppe weit vorangetriebenen Untersuchungen von Begriffsbildungen aus den verschiedensten Wissenschaften gehen von der Definition des *Kontexts* und den zugehörigen Begriffsverbänden aus. Ich wähle deshalb dieses Beispiel um zu demonstrieren, wie man sich systematisch, vorurteilsfrei und schnell umfangreiches Spielmaterial an Kontexten verschaffen kann, das dann der Mustererkennung zu unterziehen ist, etwa mit Programmsystemen, die den zugehörenden Begriffsverband berechnen und auf Eigenschaften (etwa Vollständigkeit) untersuchen.

Die Methoden, die ich dazu verwende, lassen sich ganz leicht auf viele andere Fälle (z.B. Graphen, Schaltfunktionen, Turniere, Automaten etc.) übertragen, sie funktionieren immer dann, wenn die Strukturen zu vorgegebenem Paramtersatz als Bahnen von Gruppen definiert werden können.

†Lehrstuhl II für Mathematik, Universität Bayreuth, D-8580 Bayreuth, BRD

1. Kontexte

Ein Kontext (G, M, I) kann (vgl. die Vorträge von K.E. Wolff) mit einer $0,1$–Matrix $A = (a_{ik})$ aus $g := |G|$ Zeilen und $m := |M|$ Spalten identifiziert werden. Setzen wir $n := \{0, \ldots, n-1\}$, dann ist A ein Element der Menge

$$2^{g\times m} := \{A: g \times m \to 2\}.$$

Je zwei Kontexte sind aber nur dann wesentlich verschieden, wenn sie nicht durch Umnumerieren von G und M auseinander hervorgehen. Das ergibt

1.1 Folgerung: *Vollständige Systeme wesentlich verschiedener Kontexte mit g Gegenständen und m Merkmalen sind genau die Transversalen der Menge*

$$2^{g\times m}//S_g \times S_m$$

aller Bahnen des cartesischen Produkts $S_g \times S_m$ symmetrischer Gruppen S_g und S_m auf der Menge $2^{g\times m}$ aller $0,1$–Matrizen mit g Zeilen und Spalten unter der Operation

$$(S_g \times S_m) \times 2^{g\times m} \to 2^{g\times m}: ((\pi, \rho), (a_{ik})) \mapsto (a_{\pi^{-1}i, \rho^{-1}k}).$$

(Man kann dies natürlich noch verfeinern, indem man etwa Bahnen wegläßt, deren Elemente Nullzeilen oder paarweise gleiche Zeilen enthalten usw.)

2. Anzahlen von Kontexten

Aus 1.1 ergeben sich mit Hilfe der konstanten und der gewichteten Form des Lemmas von Cauchy-Frobenius (vgl. etwa [1],[2]) die folgenden Anzahlsätze:

2.1 Folgerungen: *Die Gesamtzahl wesentlich verschiedener Kontexte mit g Gegenständen und m Merkmalen ist*

$$|2^{g\times m}//S_g \times S_m| = \frac{1}{g!m!} \sum_{(\pi,\rho)\in S_g\times S_m} 2^{z(\pi,\rho)},$$

wenn $z(\pi, \rho)$ die Anzahl der Zyklen von (π, ρ) auf $g \times m$ bezeichnet.
Die Anzahl wesentlich verschiedener dieser Kontexte vom Gewicht k (:=Anzahl der Einsen) ist der Koeffizient von x^k im Polynom

$$\frac{1}{g!m!} \sum_{(\pi,\rho)} \prod_{i=1}^{g\cdot m} (1 + x^i)^{a_i(\pi,\rho)},$$

wenn $(a_i(\pi,\rho)$ *die Anzahl der* $i-$*Zyklen von* $(\pi,\rho))$ *bezeichnet.*

(Es gibt natürlich sowohl für $z(\pi,\rho)$, als auch für $a_i(\pi,\rho)$ explizite Formeln!) Hier sind einige, von D. Moser berechnete, Anzahlen von Kontexten:

Berechnete Anzahlen verschiedener Kontexte

$g\backslash m$	1	2	3	4	5	6
1	2	3	4	5	6	7
2	3	7	13	22	34	50
3	4	13	36	87	190	386
4	5	22	87	317	1053	3250
5	6	34	190	1053	5624	28576
6	7	50	386	3250	28576	251610
7	8	70	734	9343	136758	2141733
8	9	95	1324	25207	613894	17256831

Kennt man den Untergruppenverband von $S_g \times S_m$ gut genug, d.h. sind g und m hinreichend klein, dann kann man diese Anzahlbestimmungen mit Hilfe von Burnsides Lemma verfeinern und erhält die Anzahl wesentlich verschiedener Kontexte, deren Stabilisatoren zu einer vorgegebenen Untergruppe U von $S_g \times S_m$ konjugiert sind. Schließlich kann man dabei auch noch das Gewicht k vorgeben.

3. Die Konstruktion von Kontexten

Für die redundanzfreie Konstruktion eines vollständigen Systems wesentlich verschiedener Kontexte mit g Gegenständen und m Merkmalen kann man folgende Tatsache benutzen, die sich ebenfalls aus 1.1 ergibt:

3.1 Folgerung: *Zu* $A = (a_{ik}) \in 2^{g\times m}$ *ergibt die Abbildung*

$$S_{g\times m} \longrightarrow 2^{g\times m}: (\pi,\rho) \mapsto (a_{\pi^{-1}i,\rho^{-1}k})$$

eine Bijektion zwischen der Menge

$$S_M \oplus S_{g\times m\setminus M}\backslash S_{g\times m}/S_g \times S_m$$

der Doppelnebenklassen von $S_M \oplus S_{g\times m\setminus M}$ *und* $S_g \times S_m$ *in* $S_{g\times m}$ *und der Menge der Bahnen von* $S_g \times S_m$ *vom Gewicht* k*, wenn*

$$M := \{(i,j) \mid a_{ij} = 1\}$$

und $k := |M|$. *Aus einer Transversale dieser Doppelnebenklassenmenge erhält man also die im wesentlichen verschiedenen Kontexte vom Gewicht* k.

Bei der Ausführung dieser Methode dient die in 2.1 angegebene Anzahl solcher Kontexte als nützliche *stopping rule.* Hier sind einige Anzahlen tatsächlich (allerdings mit anderen Methoden) von D. Moser konstruierter Kontexte:

Konstruierte Kontexte

	1	2	3	4	5	6	7
1	2	3	4	5	6	7	8
2		7	13	22	34	50	70
3			36	87	190	386	
4				317	1053		

Kontexte ohne Null–Zeilen oder –Spalten

	1	2	3	4	5	6	7
1	1	1	1	1	1	1	1
2		3	5	8	11	15	19
3			17	42	91	180	
4				179	633		

Beispiel für $|G| = 2$, $|M| = 3$:

111 011 001 011
111 111 111 011

011 111 110 110
101 000 100 001

110 100 100 100
000 100 010 000

000
000

4. Gleichverteilte Zufallserzeugung von Kontexten

Die im voraufgegangenen Paragraphen geschilderte redundanzfreie Konstruktion von vollständigen Listen wesentlich verschiedener Kontexte zu einem vorgegebenen Tripel (g, m, k) von Parametern ist nur sehr eingeschränkt verwendbar. Deshalb wird man zur Untersuchung größerer Beispielsätze auf die Redundanzfreiheit verzichten müssen zugunsten von Machbarkeit und Geschwindigkeit.

Um die eingangs geforderte *Vorurteilsfreiheit* bei der Konstruktion von Beispielsätzen zu gewährleisten, muß jedoch auf *Gleichverteilung* der konstruierten Kontexte auf die Bahnen (vgl. 1.1) von $S_g \times S_m$ bestanden werden. Tatsächlich gibt es einen überdies sehr schnellen Algorithmus, der das alles leistet und auch für relativ große g und m noch durchführbar ist. Er wurde 1983 von Dixon und Wilf veröffentlicht ([3]) und auf die ganz ähnliche Situation der gleichverteilten Zufallserzeugung von Graphen angewandt. (Eine in Bayreuth von Th. Gutgesell geschriebene ([4]) menuegesteuerte Version hat sich bereits sehr gut bewährt und wird zur Zeit hier und auch in Erlangen ausgebaut.)

Wenden wir diese Methode auf Kontexte an, so ergibt sich folgender Algorithmus mit Hilfe von 1.1:

4.1 Folgerung: *Zu vorgegebenen g und m wähle man*

i) ein Paar (a, b) von Zykeltypen $a \vdash g, b \vdash m$ mit folgender Wahrscheinlichkeit aus:

$$p(a, b) := \frac{|C^a||C^b||Fix(a, b)|}{g!m!|2^{g\times m}//S_g \times S_m|},$$

dabei bezeichne $|Fix(a,b)|$ die Anzahl von Fixpunkten irgendeines Paares $(\pi,\rho) \in S_g \times S_m, \pi$ von Zykeltyp a, ρ vom Zykeltyp b, $|C^a|$ und $|C^b|$ seien die Ordnungen der Konjugiertenklassen dieser Zykeltypen.

ii) Zu irgendeinem solchen Paar (π,ρ) konstruiere man gleichverteilt und zufallserzeugt einen Fixpunkt (durch gleichverteiltes und zufälliges Belegen der von (π,ρ) auf $g \times m$ induzierten Zyklen mit 0 oder 1).

Dieser Fixpunkt ist ein Kontext, der über die Bahnen von $S_g \times S_m$ gleichverteilt ist, d.h. die Wahrscheinlichkeit, daß er einer gewissen Bahn angehört, ist für jede Bahn dieselbe.

Damit ist ein schnelles Verfahren zur vorurteilsfreien Erzeugung großer Beispielsätze gegeben. Man kann es leicht zu einer gleichverteilten Zufallserzeugung von Graphen mit vorgegebener Kanten– und Punkteanzahl verschärfen, diese ist allerdings erheblich langsamer.

Man kann den Algorithmus auch zur gleichverteilten Erzeugung von Kontexten vorgegebenen Gewichts verwenden. Schließlich kann man mit ihm auch vollständige Listen paarweise verschiedener Kontexte erstellen. Dazu benötigt man einen Isomorphietest und Invarianten. In Bayreuth wurden auf analoge Weise vollständige Listen von Graphen erstellt mit $p \leq 10$ Punkten erstellt. Die Anzahlergebnisse aus dem zweiten Paragraphen dienen erneut als stopping rule.

5. Experimentelle Mathematik

Die gleichverteilt zufallserzeugten Strukturen, z.B. Graphen oder Kontexte, läßt man weiter untersuchen mit Hilfe von Programmen, die beispielsweise zu einem Graphen seine Eckengradfolge und sein charakteristisches Polynom, zu einem Kontext seinen Begriffsverband und einige von dessen Eigenschaften berechnen.

Dabei stellt man beispielsweise fest, daß die Eckengradfolge nur für $p \leq 4$ eine vollständige Invariante der Graphen mit p Punkten ist, das Paar aus Eckengradfolge und charakteristischem Polynom nur für $p \leq 7$, die sogenannte Morgantafel mindestens bis $p = 10$ (letztere Invariante ist wohl vollständig, sie wird von den *Chemical abstracts* zur Codierung molekularer Graphen benutzt).

Diese Verfahrensweise eignet sich also gut zum *Experimentieren*, zumal sie schnell ist. Für $p = 4$ erhält man pro Stunde mit unserer HP 9000, Typ 500, ca. 500000 Graphen, für $p = 10$ immerhin noch ca. 100000 Graphen.

Eine Aufgabenstellung für die Entwicklung künstlicher Intelligenz im Rahmen mathematischer Forschung besteht nun darin, für vorgegebenes Beispielmaterial geeignete Funktionen zu entwickeln, deren Werte neue, bisher noch *nicht* entdeckte Eigenschaften ergeben.

[1] A. Kerber/K.-J. Thürlings: Symmetrieklassen von Funktionen und ihre Abzählungstheorie (Teil I: Die Grundprobleme). Bayreuther Math. Schriften **12** (1983), 235 S.

[2] A. Kerber: Algebraic Combinatorics: The Use of Finite Group Actions. (in Vorbereitung)

[3] J. D. Dixon/H. S. Wilf: The Random Selection of Unlabeled Graphs. J. of Algorithms 4 (1983), 205–231.

[4] Th. Gutgesell: Die gleichverteilte Zufallserzeugung von Graphen. Diplomarbeit, Bayreuth 1986.