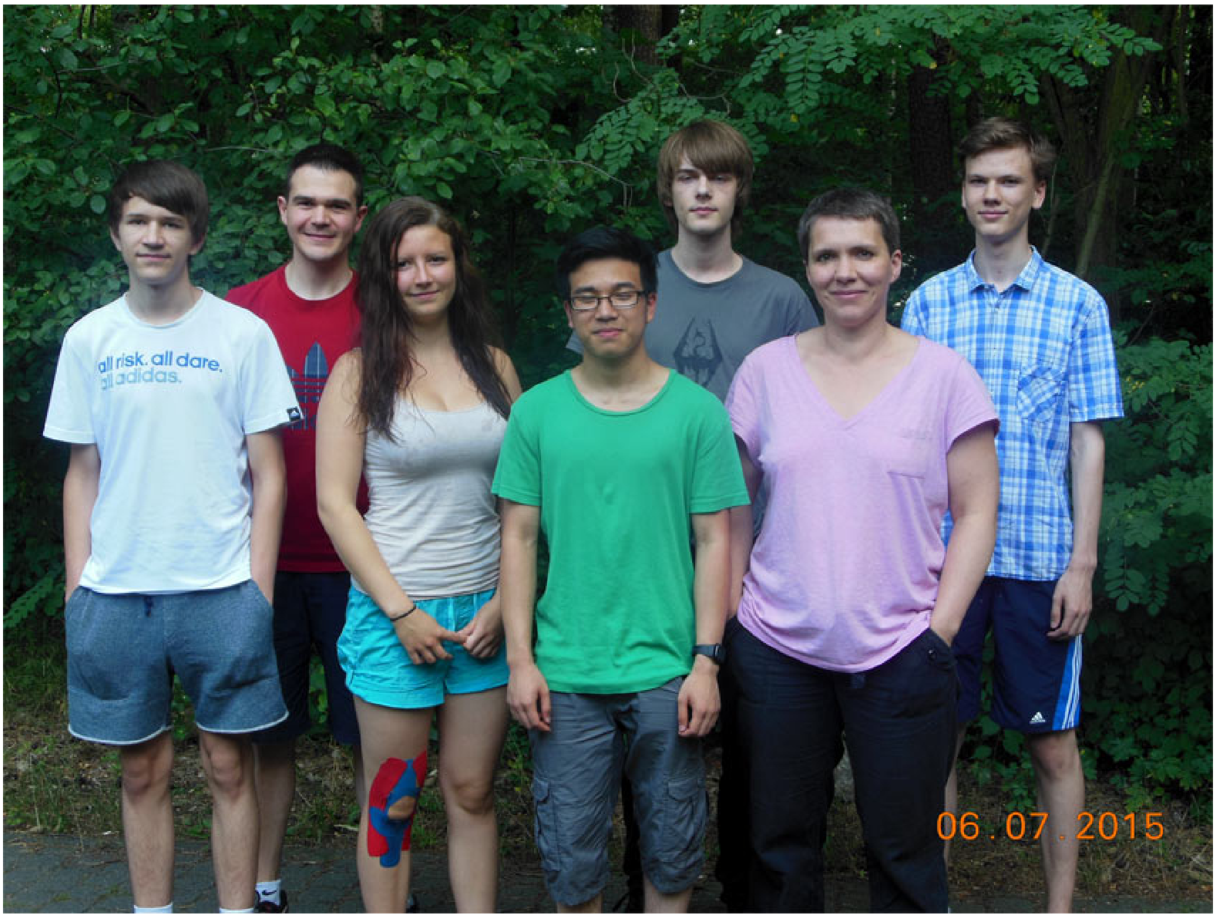
Abzählungen von Mustern – Der Satz von Pólya

Teilnehmer:

Jonathan Kaatz	Herder-Oberschule, Berlin
Mino Böckmann	Heinrich-Hertz-Oberschule, Berlin
Jakob Galley	Heinrich-Hertz-Oberschule, Berlin
Quoc Anh Nguyen	Andreas-Oberschule, Berlin
Sandy Braun	Immanuel-Kant-Oberschule, Berlin

Gruppenleiter:

André Henning	Humboldt-Universität zu Berlin
Andrea Hoffkamp	Humboldt-Universität zu Berlin



In der Kombinatorik gibt es nur wenige Formeln, die vollständig auf alle Fälle eines gegebenen Problems anwendbar sind. Pólyas Theorie zur Abzählung von Mustern ist eine eindrucksvolle Methode. Sie erlaubt es uns, die Anzahl verschiedener Muster, die durch eine bestimmte Anzahl von Farben oder anderer Charakteristika gekennzeichnet sind, zu bestimmen.
Am Beispiel der möglichen Derivate des Benzols haben wir im Rahmen unserer Gruppenarbeit den Weg von einem realen Problem, über dessen Mathematisierung und Lösung im Rahmen eines Modells bis hin zum Rückbezug auf das reale Problem nachvollzogen.
Wir haben unser Problem zunächst auf die Färbung einer Perlenkette reduziert, um so die beteiligten Symmetrien einfacher bestimmen zu können und auf diesem Wege eine allgemeine Lösung der Problemstellung zu erreichen. Mit Hilfe des Lemmas von Burnside aus der Gruppentheorie haben wir sogenannte Muster abgezählt. Als finales Resultat lieferte uns der Satz von Pólya nicht nur die Anzahl aller Muster, sondern auch die Anzahl der Muster mit einer bestimmten Farbverteilung.

Problemstellung

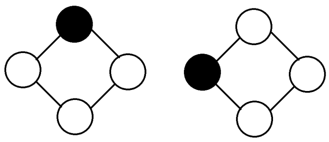
Wir betrachten im Folgenden das Beispiel einer Perlenkette mit vier Perlen, die wir mit zwei Farben einfärben. Die Menge der zu färbenden Objekte bezeichnen wir mit N, die der Farben mit R. Die jeweiligen Mächtigkeiten von N und R bezeichnen wir mit $|N| = n$ und $|R| = r$. Wir ordnen nun jedem Element aus N ein Element aus R zu und nennen diese Zuordnung eine Färbung.

Definition 1. Färbungen

Eine Färbung ist eine Abbildung $f : N \to R$. Die Menge aller Färbungen bezeichnen wir mit R^N, also $R^N = \{f \mid f : N \to R\}$.

Wie man leicht einsieht, ist die Anzahl der Färbungen gerade $|R^N| = r^n$.

Im Beispiel unserer Perlenkette mit $n = 4$ Perlen und $r = 2$ Farben gibt es also genau $2^4 = 16$ Färbungen. Manche dieser Färbungen sind für uns gleich: Zwei Färbungen f, f' sind äquivalent, wenn sie durch Drehung oder Spiegelung ineinander überführbar sind. In der Abbildung sind zwei äquivalente Färbungen zu sehen.



Theorie

Äquivalente Färbungen erkennt man also, indem man sie durch Symmetrien ineinander überführt. Diese Symmetrien bilden eine sogenannte Gruppe.

Definition 2. Gruppe

Eine *Gruppe* G ist eine Menge, auf der eine Operation $\circ$ definiert ist, d.h. jedem Paar $(g, h) \in G$ ist eindeutig ein $g \circ h \in G$ zugeordnet.
Dabei gilt:

1. $g \circ (h \circ k) = (g \circ h) \circ k$ für alle $g, h, k \in G$.
2. Es gibt ein $e \in G$ mit

(i) Ist $g \in G$, so ist $g \circ e = e \circ g = g$.

(ii) Ist $g \in G$, so gibt es ein $h \in G$ mit $g \circ h = h \circ g = e$.
(Schreibe $h = g^{-1}$.)

Definition 3. Permutationsgruppen

Permutationsgruppen S_n stellen einen Spezialfall von Gruppen dar, bei denen die Menge G aus allen möglichen Bijektionen (eineindeutigen Abbildungen) auf einer endlichen Menge X mit n Elementen besteht, also

$$S_n = \{g : X \to X \mid g \text{ bijektiv}\}, \text{ wobei } |X| = n.$$

Die Operation $\circ$ stellt bei den *Permutationsgruppen* die Hintereinanderausführung von zwei Abbildungen dar. Man schreibt für die Hintereinanderausführung zweier Permutationen $\pi_1, \pi_2 \in S_n : \pi_1 \circ \pi_2$ und liest „π_1 nach π_2“.

Beispiel einer Hintereinanderausführung für $\pi_1, \pi_2 \in S_4$:

$$\begin{aligned} \pi_1 &:= \left(\begin{smallmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 4 & 3 \end{smallmatrix}\right) \\ \pi_2 &:= \left(\begin{smallmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 & 4 \end{smallmatrix}\right) \\ \pi_3 = \pi_1 \circ \pi_2 &= \left(\begin{smallmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 2 & 1 & 3 \end{smallmatrix}\right) \end{aligned}$$

Bezeichnung. Zyklenschreibweise

Eine Permutation $\pi \in S_4$ mit $\pi = \left(\begin{smallmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 2 & 1 \end{smallmatrix}\right)$ kann gleichwertig in der sogenannten *Zyklenschreibweise* geschrieben werden:

$$\pi = (1324)$$

Diese Schreibweise erhält man nach folgender Vorgehensweise:

1. Ein Zyklus wird mit einer öffnenden Klammer und dem ersten noch nicht bearbeiteten Element begonnen.
2. Es folgt das Bild des letzten Elements, welches in den Zyklus eingetragen wurde.

Dieser Schritt wird wiederholt, bis das Bild des letzten eingetragenen Elements dem ersten Element entspricht.

3. Der Zyklus wird mit einer schließenden Klammer beendet und falls noch nicht alle Elemente in den Zyklen untergebracht wurden, geht es wieder mit Schritt 1 weiter.

Definition 4. Typ einer Permutation

Der *Typ* t einer Permutation $\pi \in S_n$ ergibt sich aus der Zyklenschreibweise.

Wir schreiben $t(\pi) = z_1^{b_1(\pi)} z_2^{b_2(\pi)} \cdots z_n^{b_n(\pi)}$, wobei $b_i(\pi)$ die Anzahl der Zyklen mit der Länge i angibt und $z_1, \dots, z_n$ beliebige Variablen sind.

Unsere Beispielpermutation $\pi = \left(\begin{smallmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 2 & 1 \end{smallmatrix}\right) = (1324)$ ist daher vom Typ

$$t(\pi) = z_1^0\, z_2^0\, z_3^0\, z_4^1.$$

Definition 5. Gruppenwirkung

Ist G eine Gruppe und X eine endliche Menge, so sagen wir, dass G (als Permutationsgruppe) auf X wirkt, falls es eine Abbildung $\tau : G \to S_X$ gibt mit $\tau(g) = \tau_g$ ist eine Permutation von X und

$$\tau(g \circ h) = \tau(g) \circ \tau(h) \text{ für alle } g, h \in G.$$

Definition 6. Stabilisator und Fixpunktmenge

Sei X eine endliche Menge und G eine Gruppe, die mittels τ auf X wirkt, d.h.: $\tau : G \to S_X$ mit $g \mapsto \tau_g$. Wir definieren zwei Begriffe:

Stabilisator G_x von $x \in X$ ist die Menge aller $g \in G$, für die gilt, dass x von τ_g auf sich selbst abgebildet wird:

$$G_x := \{g \in G \mid \tau_g(x) = x\}.$$

Fixpunktmenge X_g von $g \in G$ ist die Menge aller $x \in X$, für die gilt, dass x von τ_g auf sich selbst abgebildet wird:

$$X_g := \{x \in X \mid \tau_g(x) = x\}.$$

Durch doppeltes Abzählen der Menge $\{(x, g) \mid \tau_g(x) = x\}$ erhalten wir die Gleichung

$$\sum_{x \in X} |G_x| = \sum_{g \in G} |X_g|.$$

Definition 7. Muster

Mit unseren nun eingeführten Bezeichnungen ist das Muster M, welches das Element $x \in X$ enthält, die Menge

$$M = [x] = \{\tau_g(x) \mid g \in G\}.$$

Anders ausgedrückt ist ein Muster eine Äquivalenzklasse bezüglich der Äquivalenzrelation $\sim$ mit $y \sim x :\Leftrightarrow y = \tau_g(x)$ für ein $g \in G$.

Das Lemma von Burnside – Frobenius

Das Lemma von Burnside-Frobenius lässt uns die Anzahl der Muster (also der Äquivalenzklassen $[x]$) mittels der Fixpunktmengen bestimmen. Es ist die Grundlage für den Satz von Pólya.

Lemma 1. *Burnside – Frobenius*

Sei X eine endliche Menge und G eine endliche Gruppe, die auf X wirkt. Dann gilt für die Menge aller Muster $\mathcal{M}^* = \{[x] \mid x \in X\}$:

$$|\mathcal{M}^*| = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} |\, X_g|.$$

Beweis: Es ist $[x] = \{\tau_g(x) \mid g \in G\}$. Nun gilt

$$\begin{aligned}
\tau_g(x) = \tau_h(x) \quad & \underset{\substack{\text{von links} \\ \tau_g^{-1} = \tau_{g^{-1}}}}{\Leftrightarrow} \quad x = \tau_{g^{-1}} \circ \tau_h(x) \\
& \underset{\text{Homomorphismus}}{\Leftrightarrow} \quad x = \tau_{g^{-1} \circ h}(x) \\
& \Leftrightarrow \quad g^{-1} \circ h \in G_x \\
& \underset{g \circ}{\Leftrightarrow} \quad h = g \circ a \text{ für ein } a \in G_x.
\end{aligned}$$

D.h. zwei Elemente $\tau_g(x)$, $\tau_h(x) \in [x]$ sind genau dann gleich, wenn g und h sich nur um ein Element a aus G_x unterscheiden. Anders ausgedrückt ergeben zu jedem $g \in G$ genau $|G_x|$ Gruppenelemente h, nämlich $h = g \circ a$ für $a \in G_x$, dasselbe Element $\tau_g(x) \in [x]$.
Damit gilt

$$|[x]| = \frac{|G|}{|G_x|} \quad \text{für alle } x \in X.$$

Insbesondere erhalten wir für $y \in [x]$, d.h. $[x] = [y]$, $|G_x| = |G_y|$ und somit:

$$|G| = |[x]| \cdot |G_y| = \sum_{y \in [x]} |G_y|.$$

Summation über die Muster ergibt mit $\sum_{x \in X} |G_x| = \sum_{g \in G} |X_g|$:

$$\begin{aligned} |\mathcal{M}^*| \cdot |G| &= \sum_{\text{Muster}[x]} \sum_{y \in [x]} |G_y| \\ &= \sum_{y \in X} |G_y| \\ &= \sum_{g \in G} |X_g| \quad \text{und wir sind fertig.} \end{aligned}$$

□

Wir sind damit in der Lage die Anzahl der Muster $\mathcal{M}^*$ zu bestimmen, indem wir die Fixpunktmengen X_g bestimmen. Die Mächtigkeit der Fixpunktmenge X_g lässt sich leicht mit Hilfe der Zyklenzerlegung von τ_g bestimmen. Deswegen wird weiter unten der sogenannte *Zyklenindikator* definiert. Mit Hilfe dieses Begriffes und des Lemmas von Burnside-Frobenius sind wir in der Lage unser Abzählproblem zu lösen.

Da wir nicht nur die Anzahl der Muster insgesamt, sondern auch die Anzahl der Muster mit einer bestimmten Farbkombination bestimmen wollen, ordnen wir den Mustern Gewichte zu.

Definition 8. Gewicht einer Färbung

Ist $f : N \to R$ eine Färbung, so ordnen wir jeder Farbe $j \in R$ eine Variable x_j zu. Das *Gewicht einer Färbung* ist definiert durch:

$$w(f) := \prod_{i \in N} x_{f(i)}.$$

Es ist leicht einzusehen, dass je zwei Färbungen, die zum selben Muster gehören, dasselbe Gewicht haben. Deswegen können wir das Gewicht eines Musters definieren als das Gewicht einer Färbung, die in diesem Muster enthalten ist. D.h. für ein Muster M ist

$$w(M) = w(f) \text{ für alle } f \in M.$$

Definition 9. Enumerator

Unser Ziel ist es den sogenannten *Enumerator* zu bestimmen. Dieser ist definiert als die Summe der Gewichte aller Muster $M \in \mathcal{M}^*$, also

$$w(R^N; G) := \sum_{M \in \mathcal{M}^*} w(M).$$

Betrachten wir unser Ausgangsbeispiel der Perlenkette mit $n = 4$ Perlen und den Farben $R = \{\text{schwarz}, \text{weiß}\}$. Als Variablen wählen wir x_s für schwarz und x_w für weiß. Dann ergibt sich als Enumerator

$$w(R^N; G) = x_w^4 + x_w^3 x_s + 2x_w^2 x_s^2 + x_w x_s^3 + x_s^4.$$

Wenn wir $x_w = x_s = 1$ setzen, erhalten wir für die Anzahl der Muster den Wert 6. Am Koeffizienten des Summanden $x_w^2 x_s^2$ erkennt man, dass es zwei Muster mit genau zwei weißen und genau zwei schwarzen Perlen gibt.

Für den *Satz von Pólya* ist ein weiterer Begriff notwendig.

Definition 10. Zyklenindikator

Wir definieren den *Zyklenindikator* Z durch:

$$Z(G, z_1 \cdots z_n) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} z_1^{b_1(\tau_g)} \cdot \ldots \cdot z_n^{b_n(\tau_g)}.$$

Dabei ist G eine Gruppe, die mittels τ als Permutationsgruppe auf einer Menge von n Objekten wirkt, wobei $\tau(g) = \tau_g$ ist.

Der Satz von Pólya sagt uns nun, wie wir den Enumerator mit Hilfe des Zyklenindikators berechnen können.

Satz 1. *Satz von Pólya*

Seien N und R Mengen, $|N| = n, |R| = r$, G eine endliche Gruppe, die auf N wirkt und x_j $(j \in R)$ Variablen. Dann gilt für den Enumerator:

$$w(R^N; G) = \sum_{M \in \mathcal{M}^*} w(M) = Z(G; \sum_{j \in R} x_j, \sum_{j \in R} x_j^2, \ldots, \sum_{j \in R} x_j^n).$$

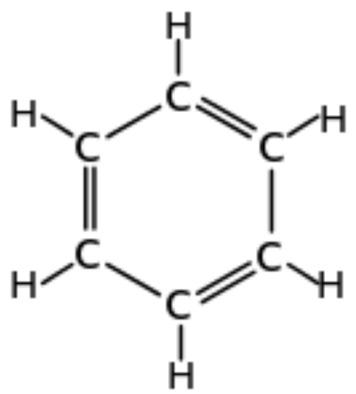
(Ohne Beweis)

Folgerungen

1. Mit $x_j = 1$ für alle $j \in R$ erhalten wir die Anzahl der Muster, d.h. $|\mathcal{M}^*| = Z(G; r, r, \dots, r)$.
2. Ist $R = \{\text{schwarz, weiß}\}$ und setzen wir $x_s = 1$ und $x_w = x$, dann gilt $w(R^N; G) = Z(G; 1+x, 1+x^2, \dots, 1+x^n) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k$.
   Der Koeffizient a_k entspricht dann genau der Anzahl der Muster, in denen genau k-mal weiß vorkommt.

Beispiel 1. Derivate des Benzols

Wir wollen die Anzahl verschiedener Derivate des Benzols, welche durch Substitution der H-Atome durch die Halogene Chlor (Cl) und Brom (Br) entstehen können, bestimmen. In der Abbildung ist die Strukturformel eines Benzolrings zu sehen.



Die Menge N ist die Menge der sechs C-Atome. Die „Farben“ sind $R = \{H, Br, Cl\}$. Die Gruppe, die auf der Menge der „Färbungen“ wirkt, besteht aus der Identität, fünf Drehungen und sechs Spiegelungen mit Achsen durch je zwei C-Atome bzw. zwischen zwei C-Atomen.

Der Zyklenindikator ist in diesem Fall

$$Z(G; z_1, \dots, z_6) = \frac{1}{12}(z_1^6 + 4z_2^3 + 2z_3^2 + 2z_6 + 3z_1^2 z_2^2).$$

Beispielsweise erhält man den Beitrag $3z_1^2 z_2^2$ durch folgende Überlegung: Es gibt drei Spiegelungen, deren Achsen durch zwei gegenüberliegende C-Atome verlaufen. Die Zyklendarstellung der dazugehörigen Permutationen bestehen aus je zwei Einerzyklen (die C-Atome, die auf der Spiegelachse liegen, bleiben fest) und je zwei Zweierzyklen (je zwei C-Atome tauschen ihre Plätze).

Die Anzahl der verschiedenen Isomere ist dementsprechend:

$$Z(G; 3, 3, 3, 3, 3, 3) = 92.$$

Setzen wir als Gewichte $x_H = 1, x_{Cl} = c, x_{Br} = b$, so ergibt sich ein Polynom, welches man mit Hilfe eines CAS ausmultiplizieren kann:

$$\begin{aligned}
& Z(G; 1 + b + c, 1 + b^2 + c^2, \ldots, 1 + b^6 + c^6) \\
= & \sum_{c+b\leq 6} a_{cb} x^c y^b \\
= & b^6 + b^5c + b^5 + 3b^4c^2 + 3b^4c + 3b^4 \\
& +3b^3c^3 + 6b^3c^2 + 6b^3c + 3b^3 + 3b^2c^4 + 6b^2c^3 + 11b^2c^2 + 6b^2c + 3b^2 \\
& +bc^5 + 3bc^4 + 6bc^3 + 6bc^2 + 3bc + b + c^6 + c^5 + 3c^4 + 3c^3 + 3c^2 + c + 1.
\end{aligned}$$

Die Anzahl der Muster bzw. Derivate mit genau c Chlor-Atomen und b Brom-Atomen entspricht dann genau dem Koeffizienten a_{cb}. Zum Beispiel gibt es genau 11 verschiedene Derivate des Benzols, die genau 2 Brom-, 2 Chlor- und 2 H-Atome enthalten. Ob diese dann auch tatsächlich realisierbar sind, bleibt den Chemikern als Problem überlassen.