

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	i
Abstract	vii
1 Orientierte Matroide	1
1.1 Punkt- und Vektorkonfigurationen	1
1.2 Analyse linearer Zusammenhänge	3
1.3 Orientierungen	12
1.4 Orientierte Matroide	22
1.5 Hypergeradenlisten	26
1.6 Isomorphieklassen von Chirotopen	33
2 G-Mengen	35
2.1 Transversale und Dimension	36
2.2 Homomorphismen	40
2.3 Blöcke, Blocktransversalen und Faktormengen	42
2.4 Der Homomorphiesatz	49
3 Permutationsgruppen	53
3.1 Stabilisator Ketten	53
3.2 Kurze Erzeugendensysteme, Labelled Branching	55
3.3 Eine Transversale von G/G'	60
4 Kanonisierung und Konstruktion diskreter Strukturen	69
4.1 Kanonisierung	70
4.2 Konstruktion	92

5 Implementierung	101
5.1 Vorarbeiten zur Implementierung	102
5.2 Generatoren für diskrete Strukturen	108
5.3 Lerneffekte	113
5.4 Das Programm <code>origen</code>	118
6 Zusammenfassung und Ausblick	121
Literaturverzeichnis	125
Index	131

Literaturverzeichnis

- [AF96] D. Avis and K. Fukuda, *Reverse search for enumeration*, Discrete Appl. Math. **6** (1996), 21–46.
- [BGdO00] J. Bokowski and A. Guedes de Oliveira, *On the generation of oriented matroids*, Discrete Comput. Geom. **24** (2000), 197–208.
- [BGH⁺95] C. Benecke, R. Grund, R. Hohberger, R. Laue, A. Kerber, and T. Wieland, *Molgen+, a generator of connectivity isomers and stereoisomers for molecular structure elucidation*, Anal. Chim. Acta **314** (1995), 141–147.
- [BGK⁺97] C. Benecke, T. Grüner, A. Kerber, R. Laue, and T. Wieland, *Molecular structure generation with molgen, new features and future developments*, Fresenius J. Anal. Chem. **358** (1997), 23–32.
- [BLP89] C. A. Brown, Finkelstein L., and P. W. Jr Purdom, *A new base change algorithm for permutation groups*, SIAM J. Comput **18** (1989), no. 5, 1037–1047.
- [BLVS⁺93] A. Björner, M. Las Vergnas, B. Sturmfels, N. White, and G. M. Ziegler, *Oriented matroids*, Cambridge University Press, Cambridge, 1993.
- [Bok92] J. Bokowski, *Oriented matroids*, Handbook of Convex Geometry (P. Gruber and J. M. Wills, eds.), Elsevier, Amsterdam, 1992.
- [CF91] G. Cooperman and Larry Finkelstein, *A strong generating test and short presentation for permutation groups*, J. Symb. Comp. **12** (1991), 475–497.
- [CH88] G. M. Crippen and T. F. Havel, *Distance geometry and molecular conformation*, Georg Thieme Verlag, Taunton, 1988.

- [DDH82] A. Dreiding, A. Dress, and H. Haegi, *Classification of mobile molecules by category theory*, Studies in Phys. and Theor. Chem. **8** (1982), 341–352.
- [DK70] A. Dress and M. Küchler, *Vorlesungsskript: Zur Darstellungstheorie endlicher Gruppen I*, Universität Bielefeld, 1970.
- [DW80] A. Dreiding and K. Wirth, *The multiplex. a classification of finite ordered point sets in oriented d-dimensional space*, MATCH — Commun. Math. Comput. Chem. **8** (1980), 341–352.
- [Far78a] I. A. Faradzhev, *Constructive enumeration of combinatorial objects*, Problèmes Combinatoires et Théorie des Graphes **260** (1978), 131–135, Colloq. Internat. CNRS, University of Orsay, Orsay 1976.
- [Far78b] _____, *Generation of nonisomorphic graphs with a given degree sequence*, Algorithmic Studies in Combinatorics, pp. 11–19, NAUKA, Moskau, 1978, In Russisch.
- [Fin01] L. Finschi, *A graph theoretical approach for reconstruction and generation of oriented matroids*, Ph.D. thesis, ETH Zürich, 2001.
- [Ger04] M. Gerdts, *SQP V1.1 – Ein Fortran77-Programmpaket zur Lösung von nichtlinearen, restringierten Optimierungsproblemen*, Universität Bayreuth, Bayreuth, 2004.
- [Gin93] M. L. Ginsberg, *Dynamic backtracking*, J. Art. Int. Res. **1** (1993), 25–46.
- [GKL96] R. Grund, A. Kerber, and R. Laue, *Construction of discrete structures, especially isomers.*, Discrete Appl. Math **67** (1996), 115–126.
- [GKL⁺00] R. Gugisch, A. Kerber, R. Laue, M. Meringer, and J. Weidinger, *Molgen-comb, a software package for combinatorial chemistry*, MATCH — Commun. Math. Comput. Chem. **41** (2000), 189–203.
- [Gru95] R. Grund, *Konstruktion molekularer Graphen mit gegebenen Hybridisierungen und überlappungsfreien Fragmenten*, Bayreuther Mathematische Schriften **49** (1995), 1–113.
- [Grü95] T. Grüner, *Ein neuer Ansatz zur rekursiven Erzeugung von schlichten Graphen*, Master's thesis, Universität Bayreuth, 1995.

- [HEO05] D. F. Holt, B. Eick, and E. A. O'Brien, *Handbook of computational group theory*, Discrete Mathematics and its Applications, Chapman & Hall/Crc, 2005.
- [Jer86] M. Jerrum, *A compact representation for permutation groups*, J. Algorithms **7** (1986), 60–78.
- [Kas] P. Kaski, *Isomorph-free exhaustive generation of designs with prescribed groups of automorphisms*, SIAM Journal on Discrete Mathematics, (to appear).
- [Ker99] A. Kerber, *Applied finite group actions*, 2. ed., Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1999.
- [Knu79] D. E. Knuth, *Lexicographic permutations with restrictions*, Discrete Appl. Math **1** (1979), 117–125.
- [KTZ90] M. H. Klin, S. S. Tratch, and N. S. Zefirov, *2d-configurations and clique-cyclic orientations of the graphs $l(k_p)$* , reports in mol. theory (1990), 149–163.
- [KÖTZ] P. Kaski, P. R. J. Östergård, S. Topalova, and R. Zlatarski, *Steiner triple systems of order 19 and 21 with subsystems of order 7*, Discrete Mathematics, (to appear).
- [Lan92] E. Lang, *Datenstrukturen und Algorithmen für Permutationsgruppen*, Diplomarbeit, Universität Bayreuth, 1992.
- [Lau93] R. Laue, *Construction of combinatorial objects — a tutorial*, Bayreuther Mathematische Schriften **43** (1993), 53–96.
- [McK81] B. D. McKay, *Practical graph isomorphism*, Congressus Numerantium **30** (1981), 45–87.
- [McK90] ———, *nauty user's guide (version 1.5)*, Tech. report, Computer Science Department, Australian National University, 1990.
- [McK98] ———, *Isomorph-free exhaustive generation*, J. Algorithms **26** (1998), 306–324.
- [NCSD79] J. G. Nourse, R. E. Carhart, D. H. Smith, and C. Djerassi, *Exhaustive generation of stereoisomers for structure elucidation*, J. Am. Chem. Soc. **101** (1979), 1216–1223.

- [Nil03] J. N. Nilsson, *Artificial intelligence, a new synthesis*, Morgan Kaufmann Publishers, Inc., San Francisco, 2003.
- [Nou79] J. G. Nourse, *The configuration symmetry group and its application to stereoisomer generation, specification, and enumeration*, J. Am. Chem. Soc. **101** (1979), 1210–1215.
- [NSCD80] J. G. Nourse, D. H. Smith, R. E. Carhart, and C. Djerassi, *Computer-assisted elucidation of molecular structure with stereochemistry*, J. Am. Chem. Soc. **102** (1980), 6289–6295.
- [Rea78] R. C. Read, *Everyone a winner*, Annals of Discrete Mathematics **2** (1978), 107–120.
- [RG96] J. Richter-Gebert, *Two interesting oriented matroids*, Documenta Mathematica **1** (1996), 137–148.
- [Sch93] B. Schmalz, *Verwendung von Untergruppenleitern zur Bestimmung von Doppelnebenklassen*, Bayreuther Math. Schr. **31** (1993), 109–143.
- [Sim71] C. C. Sims, *Computation with permutation groups*, Proceedings of the Second Symposium on Symbolic and Algebraic Manipulation (New York) (S. R. Petrick, ed.), 1971, pp. 23–28.
- [TZ87] S. S. Tratch and N. S. Zefirov, *Combinatorial models and algorithms in chemistry. the ladder of combinatorial objects and its application to the formalization of structural problems of organic chemistry*, Principles of Symmetry and Systemology in Chemistry (N.F. Stepanov, ed.), Moscow, Moscow State University Publ., 1987, (in Russian), pp. 54–86.
- [TZ96] ———, *Algebraic chirality criteria and their application to chirality classification in rigid molecular systems*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. **36** (1996), 448–464.
- [Wan] M. Wang, *Canonical forms of discrete objects for databases and internet data exchange*, Ph.D. thesis, University of Bayreuth, (to appear).
- [Wie64] H. Wielandt, *Finite permutation groups*, Academic Press, New York, 1964.

- [Wie94] T. Wieland, *Erzeugung, Abzählung und Konstruktion von Stereoisomeren*, MATCH — Commun. Math. Comput. Chem. **31** (1994), 153–203.
- [Wil85] S. Gill Williamson, *Combinatorics for computer science*, Computer Science Press, Rockville, 1985.
- [WKL96] T. Wieland, A. Kerber, and R. Laue, *Principles of the generation of constitutional and configurational isomers.*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. **36** (1996), 413–419.
- [Zie96] G. M. Ziegler, *Oriented matroids today*, Electronic J. of Comb. **Dynamic Survey 4** (1996), 1–39.
- [Zla91] L. A. Zlatina, *Mathematical models of generation of stereoisomers and building space models of molecules*, Ph.D. thesis, All-Union Research Institute of Organic Synthesis, 1991.

Index

- $G\langle A \rangle$, Erzeugnis von A in einer G -Menge, 36
 $\mathcal{A}(M)$, Raum der Abhängigkeiten zur Koordinatenmatrix M , 5
 $A \circ B$, Komposition orientierter Mengen, 16
 $A \uplus B$, konforme Vereinigung orientierter Mengen, 16
 $A \sqsubseteq M$, orientierte Teilmenge, 15
 $\text{binlog}_k(x)$, binomialer Logarithmus, 103
 \mathcal{C} , die Menge der Kreise eines orientierten Matroids, 19
 \mathcal{C}^* , die Menge der Kokreise eines orientierten Matroids, 19
 $G(A)$, Erzeugnis von A in einer G -Menge, 36
 $G/U = \{gU \mid g \in G\}$, die Linksnebenklassen von U in G , 54
 ${}_G X$, Gruppenoperation, 36
 G_x , Stabilisator, 38
 $G_{(x_0, \dots, x_{k-1})}$, punktweise Stabilisator, 53
 G_A , Mengestabilisator, 43
 $\mathcal{H}(M)$, Raum der Hyperebenen zur Koordinatenmatrix M , 5
 $\ker_C(f)$, Kern eines G -Homomorphismus, 50
 $\text{Min}(V)$, minimale Vektoren in V , 7
 $n := \{0, \dots, n-1\}$, Indexmenge, 3
 $\binom{\mathbb{N}}{k}$, die Menge aller streng monoton steigenden k -Tupel, 104
 $\mathcal{OP}(M)$, orientierte Potenzmenge, 16
 $OT(v)$, orientierte Trägermenge, 17
 $S(A, B)$ separierende Menge zu zwei orientierten Mengen, 16
 $U \setminus G = \{Ug \mid g \in G\}$, die Rechtsnebenklassen von U in G , 54
 \mathcal{V} , die Menge der Vektoren eines orientierten Matroids, 18
 \mathcal{V}^* , die Menge der Kovektoren eines orientierten Matroids, 18
 $\text{vol}(M)$, die Volumenfunktion zu einer Koordinatenmatrix M , 3
 X/B , G -Faktormenge, 48
 X_{inj}^k , die Menge der injektiven k -Tupel aus X , 53
 χ , Chirotop, 22
 χ_M , das Chirotop zur Koordinatenmatrix M , 12

- abhängig
 - Blöcke, 46
 - in G -Mengen, 36
- Abhängigkeiten, Raum der, 5
- affine Koordinatenmatrix, 2, 11, 21
- Äquivalenzrelation, 48
- azyklisches Chirotop, 23

- Backtrack-Algorithmus, 110
- Bahn, 37
- Basis einer G -Menge, 54
- Basis eines Chirotops, 14
- binomialer Logarithmus, 103
- Block, 43, 49
- Blocktransversale, 46, 50

- Cauchy-Frobenius, Satz von, 37
- Cayley-Action-Graph (CAG), 38
- Chirotop, 12, 22
- constraint propagation, 102

- $\text{diff}(x, x')$, der unterscheidender Index bei der lexikographischen Ordnung, 110
- Dimension einer G -Menge, 37
- diskrete Strukturen, 108
- Dualität, 6

- Eindeutige Darstellung, 39
- Eindeutige Fortsetzung, 40
- Epimorphismus, 40
- erzeugende Blockmenge, 46
- Erzeugendensystem
 - starkes \sim einer Permutationsgruppe, 54
- Erzeugnis in einer G -Menge, 36

- Faktormenge, 48

- G -Äquivalenzrelation, 48

- G -Homomorphismus, 40, 49
- G -Menge, 36
- Generator, 108, **112**
- GP, 14, 22
- Grassmann-Plücker-Relation, 14, 22
- Gruppenoperation, 36
 - treu, 54

- (H, i, j) -semikanonisch, 77
- Homomorphiesatz, 50
- Homomorphismus, 40, 49
- Hyperebenen, Raum der, 5
- Hypergerade, 26

- Imprimitivitätsbereich, *siehe* Block
- Isomorphie orientierter Matroide, 33
- Isomorphismus, 40
- iterative deepening, 86, 87
- Iterator, 108

- kanonisierende Abbildung, 39
- Kern, 50
- Kokreise, 19
- Komposition orientierter Mengen, 16
- konforme orientierte Mengen, 16
- Koordinatenmatrix, 2
- Kovektoren, 18
- Kreise, 19

- Labelled Branching, 55, 57
- $\text{learn}(x)$, *siehe* Lerneffekt, optimaler Lerneffekt, 117
 - erkannter, 117
 - optimaler, 117
- lexikographische Ordnung, 110

- Mengenstabilisator, 43
- minimaler Vektor, 7
- Monomorphismus, 40

- Negation eines Chirotops, 33
- operiert, *siehe* Gruppenoperation
- Ordnung
 - lexikographisch, 110
- ordnungstreue Erzeugung, 62, 92, 117
- orientierte Menge, 15
- orientierte Potenzmenge, 16
- orientierte Trägermenge, 17
- Orientierungsfunktion, 12
- origen, Programm, 118

- parallel, 24
- punktweise Stabilisator, 53

- realisierbares Chirotop, 22
- Reorientierungen orientierter Matroide, 33

- Schleife, 24
- schlicht, 24
- semikanonisch, 77
- separierende Menge, 16
- Stabilisator, 38
 - Mengen-, 43
 - punktweise, 53
- Stabilisatorindex, 56
- Stabilisator-kette, 54
- starkes Erzeugendensystem einer Permutationsgruppe, 54

- topologische Anordnung, 61
- Trägermenge, 6
 - orientierte, 17
- transitiv, 37
- Transversale, 36
 - Block-, 46
- dovar System kanonischer \sim , 70
- Transversalenindex, 56

- treue Gruppenoperation, 54
- Typ, 56

- Umnummerierung eines orientierten Matroids, 33
- unabhängig
 - Blöcke, 46
 - in G -Mengen, 36
- unterscheidender Index, 110

- Vektoren, 18
- Verfeinerer, 78
- Volumenfunktion vol_M , 3

