Heuristische Untersuchungen zu einer berühmten mathematischen Vermutung mit DERIVE

Johann Wiesenbauer, Wien

1. Einleitung

Angesichts des breiten Raums, welchen berühmte ungelöste Probleme in populärwissenschaftlichen Büchern über Mathematik einnehmen, oder auch des Medienechos, welches z.B. die Ankündigung eines Beweises der sog. „Fermatschen Vermutung" im Frühsommer 1993 hervorgerufen hat, muß man sich die Frage stellen, ob das Interesse an derartigen Themen, welches hier beim Leser offenbar vorausgesetzt wird - und wohl auch besteht - , nicht auch für den Schulunterricht genutzt werden könnte.

Im folgenden wird versucht, anhand einer ausgewählter Problemstellung, nämlich des sogenannten „3x+1"-Problems, einige Anregungen in dieser Richtung zu geben. Wenn dabei auch hinsichtlich des gebotenen Materials in erster Linie an das Wahlpflichtfach Mathematik gedacht wurde, so könnten Teile oder allgemeine Bemerkungen daraus durchaus auch im regulären Mathematikunterricht Verwendung finden. So kann schon der bloße Hinweis auf offene Probleme in der Mathematik, an denen intensiv geforscht wird, dem oft anzutreffenden Vorurteil entgegenwirken, daß es sich bei der Mathematik um eine gewissermaßen „fertige" Wissenschaft handelt, in der kein Fortschritt mehr stattfindet. Darüberhinaus könnten vor allem einige der angestellten Betrachtungen aus der Wahrscheinlichkeitstheorie leicht in einfache Aufgaben aus diesem Gebiet umgemünzt werden, wobei diese dann jedenfalls interessanter und praxisnäher wären, als viele der herkömmlichen (etwa von der Art „In einer Urne befinden sich zwölf weiße und fünf schwarze Kugeln. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, daß ...?").

Alle im folgenden angestellten Betrachtungen stehen dabei unter dem generellen Motto „Learning by doing": Sowenig, wie man beispielsweise Klavierspielen durch bloßes Zuhören lernen kann, sowenig, behaupte ich, kann der ein mathematisches Problem in seinen Wesenszügen voll begreifen, welcher sich nie ernsthaft selbst daran versucht hat. Nach Maßgabe der Möglichkeiten, sollte daher jeder Schüler wenigstens gelegentlich in die Rolle des aktiven Forschers schlüpfen, um vielleicht so etwas von der Faszination zu erfahren, welche die Mathematik auf viele von uns ausübt. Das „3x+1"-Problem wurde nicht zuletzt unter dem Gesichtspunkt ausgewählt, daß es in dieser Hinsicht vorzüglich geeignet ist, den Schüler unter Verwendung eines Computers selbst „Entdeckungen" machen zu lassen. (Daß auch die Fermatsche Vermutung zu dieser Sorte von Problemen gehört, wird zwar von vielen Hobbymathematikern immer wieder angenommen, doch dürfte dies ein Irrglaube sein. Um ihn nicht weiter zu nähren, wird es im folgenden entgegen der ursprünglichen Absicht nicht behandelt.)

Stichwort Computer: Das an Österreichs Mittelschulen allgemein verfügbare Computeralgebrasystem DERIVE spielt in den folgenden Ausführungen eine wesentliche Rolle bei der Akkumulierung von Beispielmaterial und bei der Überprüfung von Hypothesen. Ich glaube hier den Beweis erbracht zu haben, daß man auch in DERIVE, wenn auch mit etwas mehr Aufwand, leistungsfähige Programme schreiben kann. „Highlight" in dieser Hinsicht ist sicher die sehr komplizierte näherungsweise Berechnung einer unendlichen Reihe im Zusammenhang mit dem „3x+1-"Problem, wo die Vorzüge von DERIVE voll zum tragen kommen. In Hinblick auf eventuell angegebene Rechenzeiten sei noch erwähnt, daß die nachstehend angegebenen Beispiele mit DERIVEXM in der Version 2.60 auf einem PC 486 DX2/66 mit 8 MB Ram gerechnet wurden (bei einer anderen Hard- oder Softwarekonfiguration sind gravierende Abweichungen möglich!).

2. Das „3x+1"-Problem - Problemstellung und Beispiele

Die vielen verschiedenen Bezeichnungen unter denen das „3x+1"-Problem in der Literatur kursiert, wie z.B. Collatz-, Hasse-, Syracuse-, Kakutani- oder Ulam-Problem, weisen schon darauf, daß seine wahren Ursprünge im Dunkeln liegen. Am ehestens kann vielleicht noch L. Collatz als sein Erfinder angesehen werden, welcher schon in den frühen 30-er Jahren eine ähnliche Folge wie die, welche dem „3x+1"-Problem zugrunde liegt, studiert hat. Erstmals erwähnt in der Literatur wurde es in den frühen 50-er Jahren und verbreitete sich danach rasch. S.Kakutani schreibt dazu (siehe [2]): „For about a month everybody at Yale worked on it, with no result. A similar phenomenon happened when I mentioned it at the University of Chicago. A joke was made that this problem was part of a conspiracy to slow down mathematical research in the U.S." Welches Problem wäre somit geeigneter, Appetit auf Mathematik zu wecken?

Da es trotzdem, wie eine Kurzumfrage unter meinen Kollegen ergab, nicht als allgemein bekannt vorausgesetzt werden darf, hier zunächst einmal die Problemstellung. Man geht dazu aus von einer auf der Menge N der natürlichen Zahlen durch

$$f(x) := \begin{cases} \dfrac{x}{2}, & \text{falls } x \equiv 0 \bmod 2 \\ \dfrac{3x+1}{2}, & \text{falls } x \equiv 1 \bmod 2 \end{cases}$$

definierten Funktion f. Man kann dann zu einem beliebigen Startwert $x_0 \in N$ die Folge

$$x_0, f(x_0), f(f(x_0)), f(f(f(x_0))), \ldots \qquad (*)$$

betrachten, welche sich z.B. für $x_0 = 7$ ergibt zu

$$7,11,17,26,13,20,10,5,8,4,2,1,2,1,2,1,\ldots$$

In diesem Beispiel kommt 1 als Folgenglied vor, worauf sich dann nur mehr die Zahlen 2 und 1 abwechseln, d.h. diese bilden einen Zyklus der Länge 2. Die „$3x+1$"-Vermutung behauptet nun, daß dieses Verhalten „typisch" ist, d.h. jede so gebildete Folge „endet" unabhängig vom Startwert $x_0 \in N$ in diesem Zyklus. Beim „$3x+1$"-Problem geht es demnach darum, dies zu beweisen oder zu widerlegen.

Man beachte, daß diese Vermutung auf zwei grundsätzlich verschiedene Arten falsch sein kann:

1. Es gibt einen Startwert, sodaß die zugehörige Folge unbeschränkt wächst.
2. Es gibt einen Startwert, für den die zugehörige Folge in einem nichttri-

vialen, d.h. 1 nicht enthaltenden Zyklus, endet.

Unter der Voraussetzung, daß der zweite Fall zutrifft, wäre dann rein theoretisch die Möglichkeit gegeben, daß ein Schüler z.B. unter Verwendung der nachfolgend angegebenen DERIVE-Programme durch einen „Glückstreffer" hinsichtlich der Auswahl des Startwerts diese berühmte Vermutung widerlegt, was das in der Einleitung Gesagte - betreffend die Möglichkeit bei diesem Problem echte „Entdeckungen" zu machen - eindrucksvoll unterstreicht.

Für die Behandlung des „3x+1"-Problems erweist es sich als zweckmäßig, einige Kenngrößen für die Folge (*) einzuführen. Gibt es zu $x_0 > 1$ ein $k \in N_0$, sodaß $f^k(x_0) = 1$ bzw. $f^k(x_0) < x_0$, so sei $s_1(x_0)$ bzw. $s_2(x_0)$ das kleinste derartige k, ansonsten setzen wir $s_1(x_0)=\infty$ bzw. $s_2(x_0)=\infty$. Außerdem sei $s_1(1) = s_2(1) = 0$. Wir werden diese Zahlen im Rahmen dieser Arbeit als 1. bzw. 2. Schrittanzahl bezeichnen. (In der englischen Literatur sind dafür die Fachausdrücke total stopping time bzw. stopping time gebräuchlich.) Die „3x+1"-Vermutung läßt sich dann offenbar auch so ausdrücken, daß $s_1(x_0)$ stets endlich ist. Es ist nun für das folgende sehr wichtig und mit Hilfe eines einfachen Induktionsarguments auch leicht einzusehen, daß sie ebenso äquivalent ist zur Endlichkeit von $s_2(x_0)$ für beliebige Startwerte x_0.

Ganz interessant, wenn auch nicht so bedeutsam wie die bisher eingeführten Kenngrößen, ist ferner der sog. Expansionsfaktor der Folge (*). Er gibt an, um wieviele Male das Maximum der Folge größer ist als der Startwert x_0 (natürlich nur, falls dieses Maximum existiert, ansonsten hätte man wieder ∞ als Wert zu nehmen). Er mißt also gewissermaßen die „Höhe" der Folge (*), ähnlich wie $s_1(x_0)$ ihre „Breite".

Die Berechnung dieser Folge und ihrer Kenngrößen mit Hilfe von DERIVE könnte nun etwa so aussehen (dellast(v) bzw. addx(v) sind dabei einfache Hilfsfunktionen, deren Bedeutung sich unmittelbar aus der Bezeichnung ergibt):

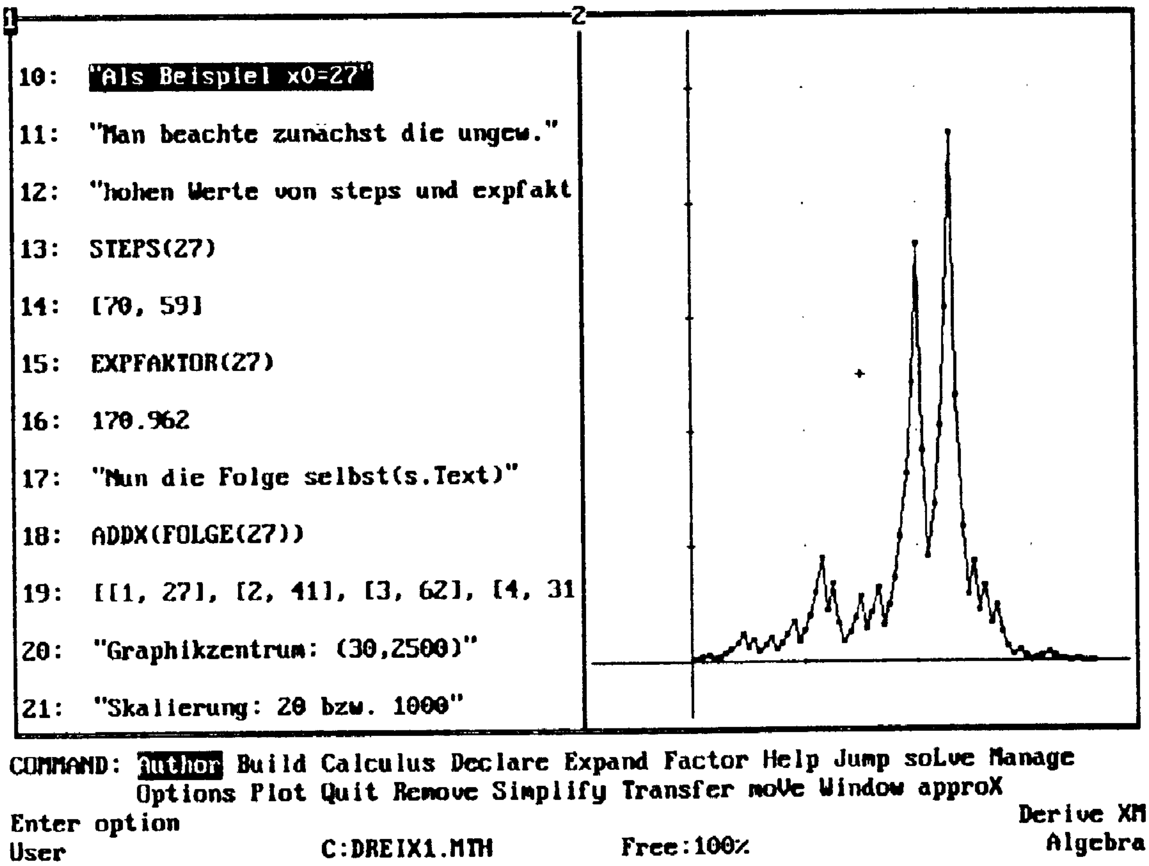
- f(x):= if(mod(x,2)=0, x/2, (3x+1)/2)
- dellast(v):= vector(element(v,k),k,dimension(v)-1)
- folge(n):=dellast(iterates(if(x=1,x,f(x)),x,n))
- addx(v):= vector([k,element(v,k)],k,dimension(v))
- steps1(n):= element(iterate(if(element(x,1)=1, x,
  [f(element(x,1)), element(x,2)+1]), x, [n,0]), 2)
- steps2(n):= element(iterate(if(element(x,1)<n, x,
  [f(element(x,1)), element(x,2)+1]), x, [n,0]), 2)
- steps(n):= [steps1(n), steps2(n)]
- expfaktor(n):=max(folge(n))/n

Um diese Funktionen möglichst einfach und überschaubar zu halten, sind wir dabei von der Richtigkeit der „3x+1"-Vermutung ausgegangen. (Falls dies nicht zutrifft, kommt es für einige der obigen Funktionen für gewisse Startwerte zu keinem Programmstop!) Wendet man sie z.B. auf den Startwert 27 an, so erhält man als zugehörige Folge

27,41,62,31,47,71,107,161,242,121,182,91,137,206,103,155,233,350,175,263,

395,593,890,445,668,334,167,251,377,566,283,425,638,319,479,719,1079, 1619,2429,3644,1822,911,1367,2051,3077,4616,2308,1154,577,866,433,650, 325,488,244,122,61,92,46,23,35,53,80,40,20,10,5,8,4,2,1,...

welche in Verbindung mit untenstehender Graphik einen ersten Eindruck vom bizarren und unvorhersehbaren Verhalten dieser Folgen gibt.



Allerdings ist 27 auch eine „Rekordzahl" in dem Sinn, daß keine Zahl vorher ähnlich große Werte für die Kenngrößen aufweist. (Die nächsten Zahlen dieser Art sind übrigens 255, 447, 639, 703, 1819 usw., siehe [3].) Welche Werte für die Schrittanzahlen wären für den Startwert 27 eigentlich zu erwarten gewesen? Mit dieser Frage wollen wir uns jetzt ganz allgemein beschäftigen.

3. Eine heuristische Berechnung der Erwartungswerte für die zwei Schrittanzahlen des „3x+1"-Problems

Wir ersetzen dazu die Folge (*) durch eine Folge $x_0, x_1, x_2, \ldots$, von rationalen Zahlen, welche rekursiv nach folgendem Zufallsgesetz erzeugt wird: Ist x_i schon definiert, so erhält man daraus x_{i+1}, indem man würfelt und setzt

$$x_{i+1} := \begin{cases} x_i / 2, & \text{falls Augenzahl gerade} \\ 3x_i / 2, & \text{falls Augenzahl ungerade} \end{cases} \qquad (**)$$

In ganz analoger Weise wie für die Folge (*) können wir auch für diese so erzeugte Folge die 1. und 2. Schrittanzahl erklären als die minimale Schrittanzahl, für welche die 1 bzw. die Startzahl unterschritten werden. Unter rein statistischen Gesichtspunkten sollten die modifizierte Folgen (**) ein recht ähnliches Verhalten zeigen, wie die ursprünglichen. Es erscheint daher auch die Annahme als nicht zu gewagt, daß die Erwartungswerte für deren Schrittanzahlen mit den entsprechenden Erwartungswerten für die Schrittanzahlen des „3x+1"-Problems übereinstimmen. Probieren wir's doch einfach aus!

Zur Berechnung des Erwartungswertes der 1.Schrittanzahl der Folge (**) erweist es sich als zweckmäßig, zu der Folge $y_i := {}_2\log x_i$, $i = 0,1,2,\ldots$, überzugehen, welche also gegeben ist durch $y_0 := {}_2\log x_0$ und

$$y_{i+1} := \begin{cases} y_i - 1, & \text{falls Augenzahl gerade} \\ y_i + {}_2\log(3/2), & \text{falls Augenzahl ungerade} \end{cases}$$

Wir können dies nun in einfacher Weise als „Random walk" eines Teilchens auf der reellen Zahlengeraden deuten, welches zur Zeit t=0 bei ${}_2\log x_0$ „startet" und zu den diskreten Zeitpunkten t=1,2,3,... mit der gleichen Wahrscheinlichkeit entweder um 1 nach links oder um ${}_2\log(3/2) \approx 0.585$ nach rechts rückt. Da es daher bei jedem Schritt im Mittel um $(1 - {}_2\log(3/2))/2 \approx 0.208$ nach links rückt, ergibt sich der gesuchte Erwartunswert für die 1.Schrittanzahl in einfachster Weise als Lösung der linearen Gleichung

$$\frac{1 - {}_2\log(3/2)}{2} x = {}_2\log x_0$$

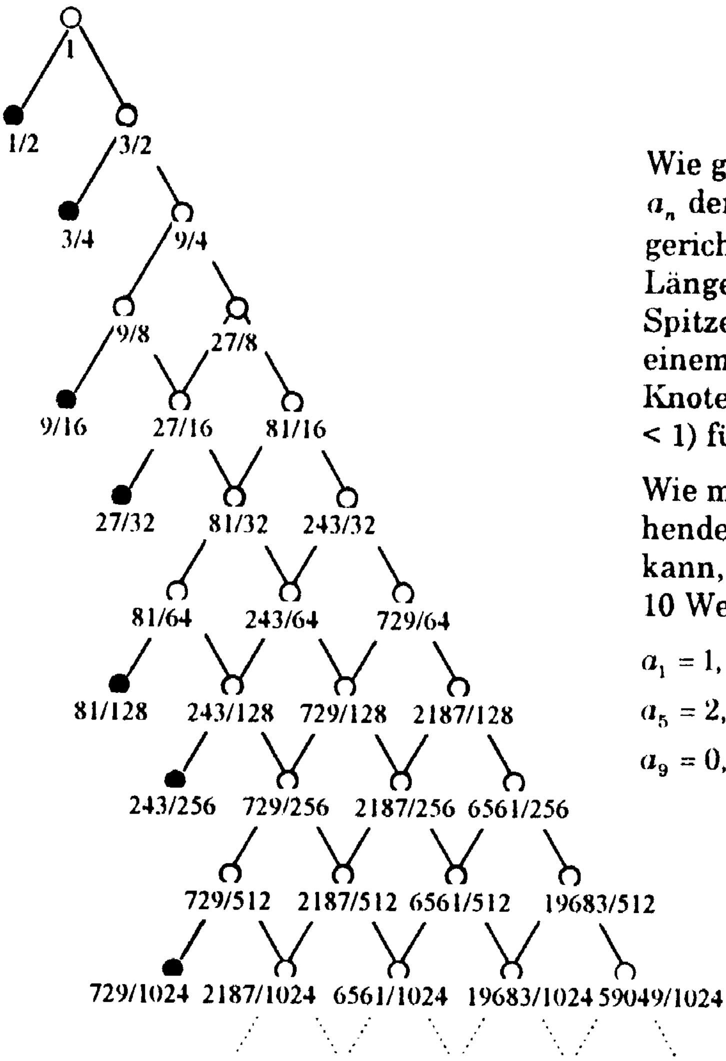
zu

$$\frac{2}{1 - {}_2\log(3/2)} \, {}_2\log x_0 \approx 16{,}008 \, {}_{10}\log x_0.$$

Speziell für $x_0 = 27$ sollte er daher ≈ 23 betragen (der tatsächliche Wert für die 1.Schrittanzahl, nämlich 70, weicht also erwartungsgemäß stark nach oben ab) und für große Startwerte gilt die einfache Faustregel, daß er etwa gleich ist ihrer 16-fachen Stellenanzahl. Wie gut dies mit der Realität übereinstimmt, zeigt der nachfolgende DERIVE-Bildschirm:

```
22: "Uberprufung des Erwartungswertes fur 1.Schrittanzahl"

23: "Er beträgt ca. 1601 für 100-stellige Zufallszahlen"

                              100
24: VECTOR(STEPS1(RANDOM(10    )), k, 10)

25: [1319, 1487, 1959, 1640, 1567, 1445, 1903, 1651, 1513, 1636]

26: "81.3 sec"

27: AVERAGE [1319, 1487, 1959, 1640, 1567, 1445, 1903, 1651, 1513, 1636]

28: 1612

COMMAND: Author Build Calculus Declare Expand Factor Help Jump soLve Manage
         Options Plot Quit Remove Simplify Transfer moVe Window approX
Enter option                                                    Derive XM
User          .        C:DREIX1.MTH          Free:100% Ins       Algebra
```

Was nun bie Berechnung des Erwartungswertes für die 2.Schrittanzahl betrifft, so können wir für unsere probalististische Folge (**) offenbar o.B.d.A. davon ausgehen, daß ihr Startwert 1 beträgt. Insbesondere ist also dieser Erwartungswert vom Startwert unabhängig, d.h. eine Konstante. Zu ihrer Berechnung betrachten wir den nachfolgenden Baum, der in übersichtlicher Weise die möglichen Anfänge der Folgen (**) bis zum erstmaligen Unterschreiten der 1 bzw. bis zum 10.Glied widergibt:



Wie groß ist die Anzahl a_n der stets nach unten gerichteten Wege der Länge n, welche von der Spitze des Baumes zu einem der schwarzen Knoten (mit einem Faktor < 1) führen?

Wie man aus nebenstehendem Graphen ablesen kann, gilt für die ersten 10 Werte der Folge a_n:

$a_1 = 1, a_2 = 1, a_3 = 0, a_4 = 1,$
$a_5 = 2, a_6 = 0, a_7 = 3, a_8 = 7,$
$a_9 = 0, a_{10} = 12.$

Wer die oben angegebenen a_k wirklich nachgerechnet hat, wird sicher zustimmen, daß ihre Berechnung eine recht mühselige Angelegenheit ist. Andererseits ist der gesuchte Erwartungswert aber offenbar gerade die Summe der Reihe

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{k a_k}{2^k}$$

welche leider nur sehr langsam konvergiert. (Wer hätte übrigens nach den oben angegebenen ersten 10 Werten der a_k ihnen zugetraut, daß sie sich lange „erfolgreich“ gegen die scheinbare „Übermacht“ der 2-er Potenzen im Nenner „behaupten“ können?) Was liegt also näher als DERIVE zur Berechnung der a_k

einzusetzen? Leichter gesagt, als getan! Wer weder Tod noch Teufel fürchtet, wenn ums Programmieren in DERIVE geht, möge nun zum Computer eilen und sich selbst daran versuchen. Für die anderen nachfolgend eine Funktion $g(n)$, welche eine Liste der ersten n Folgenglieder $a_1, a_2, \ldots, a_n$ berechnet:

```
g(n):= element(iterate(if(element(element(x,1),1)<2,
       [vector(element(element(x,1),k)3/2, k, dimension(element(x,1))),
       append(vector(element(element(x,2),k)+element(element(x,2),k+1), k, 1,
       dimension(element(x,2))-1), [element(element(x,2),
       dimension(element(x,2)))]), append(element(x,3),
       [element(element(x,2),1)])], [append(vector(element(element(x,1),k)/2, k,
       dimension(element(x,1))), [element(element(x,1), dimension(element(x,1)))
       3/2]), append([element(element(x,2), 1)], vector(element(element(x,2),k)+
       element(element(x,2), k+1), k, dimension(element(x,2))-1), [element(
       element(x,2), dimension(element(x,2)))]), append(element(x,3), [0])]), x,
       [[1], [1], [ ]], n), 3)
```

Durch Aufsummierung der ersten 400 Glieder ergibt sich somit der gesuchte Erwartungswert zu 3,49265...

```
1:   "Zur Berechnung des Erwartungswertes fur die 2.Schrittanzahl"

2:   G(n) := ELEMENT[ITERATE[IF[ELEMENT(ELEMENT(x, 1), 1) < 2, [VECTOR[ELEMENT(
                                                                      ---------

3:   G(400)

4:   [1, 1, 0, 1, 2, 0, 3, 7, 0, 12, 0, 30, 85, 0, 173, 476, 0, 961, 0, 2652, 80

5:   "806.4 sec"

6:   a := [1, 1, 0, 1, 2, 0, 3, 7, 0, 12, 0, 30, 85, 0, 173, 476, 0, 961, 0, 265
```

$$7:\quad H(n) := \sum_{k=1}^{n} \frac{k\ \mathrm{ELEMENT}(a,\ k)}{2^k}$$

```
8:   "Nachstehend die Werte h(10),h(20),h(30),....,h(400)"

9:   "Man beachte die langsame Konvergenz dieser Reihe:"

10:  VECTOR(VECTOR(H(50 i + 10 j), j, 1, 5), i, 0, 7)
```

11:

2.0625	2.597251	2.940079	3.150975	3.263718
3.339705	3.39613	3.425284	3.446809	3.463181
3.471866	3.478508	3.483437	3.486145	3.488172
3.489478	3.490524	3.491148	3.491602	3.491961
3.492156	3.49231	3.492424	3.492489	3.492539
3.492576	3.492598	3.492614	3.492624	3.492633
3.492638	3.492642	3.492645	3.492647	3.492648
3.492649	3.49265	3.49265	3.492651	3.492651

Auch hier wollen wir wieder mit Hilfe von DERIVE überprüfen, wie gut dieser heuristisch gefundene Erwartungswert mit der „Realität" übereinstimmt:

```
29:  "Uberprufung des Erwartungswertes fur 2.Schrittanzahl:"

30:  "fur den sich heuristisch 3,49265... ergibt."

31:  "Zunachst eine Liste mit den 2.Schrittanzahlen"

32:  "für 200 hundertstellige Zufallszahlen:"

                                        100
33:  VECTOR(VECTOR(STEPSZ(RANDOM(10      )), i, 20), j, 10)

        ┌  1  1 12  1  1  2  2  1  5  2  7  2  1  1  1  1  5  1  1  1 ┐
        │ 12  2  8  2  1  1  5  1  2  1  5  2  1  2  1  1  2  1  5  2 │
        │  2  1  1  1  1  1  2  1  1  1  7  1  1  1  1  1  2  1  1  1 │
        │  2  2  1  4  2  1  1  1  4  1  2  4  2  2 15  1  1  1  5  7 │
        │  2  1 12  2  1  2  5  8  1  2  5  1  2  1  1  1  1  1 20  1 │
34:     │  2  1  4  2  5  4  4  1  1  2  1  2 16  2  1  1  1 12  1  4 │
        │  7  2  1  1 50  4  2  2 13  1  1  1  2  1  2  1  1 12  1  1 │
        │  1  2  1  1  1  2  1  1  2  1  4 12 26  2  1  1  2  1  1  1 │
        │  1  1  2  1  2  1  1  1  1  1  1  1 78  5  1  2  4 12  2  1 │
        └  1  2  2  2 23  2 32 21  4  2  1  1  5  5  8  1 13  2  8  1 ┘

35:  "Als Mittelwert ergibt sich 3.78."

36:  "Und nun noch eine Serie mit 10000 Versuchen"

                                      100
37:  AVERAGE(VECTOR(STEPSZ(RANDOM(10      )), k, 10000))

38:  3.5046

39:  "196.5 sec"

COMMAND: Author Build Calculus Declare Expand Factor Help Jump soLve Manage
         Options Plot Quit Remove Simplify Transfer moVe Window approX
Enter option                                                   Derive XM
User                  C:DREIX1.MTH          Free:100% Ins        Algebra
```

Wieder zeigt es sich, daß die Folgen (*) im ursprünglichen „3x+1"-Problem sich statistisch genau so verhalten, wie man dies von den Zufallsfolgen (**) erwarten würde! Lagarias schreibt dazu in [2]: „We face this dilemma: On the one hand, to the extent that the problem has structure, we can analyze it - yet it is precisely this structure that seems to prevent us from proving that it behaves „randomly". On the other hand, to the extent that the problem is structureless and „random", we have nothing to analyze and consequently cannot prove rigorously prove anything." Vielleicht hat auch Erdös recht, der zum „3x+1"-Problem meinte: „Mathematics is not yet ready for such problems."

Wenn das „3x+1"-Problem aber so „widerspenstig" ist, warum soll man sich damit überhaupt abgeben? Lagarias gibt darauf in [2] die Antwort: „ No problem is so intractable that something interesting cannot be said about it." Eben dies - auch in Hinblick auf die Schule (s. dazu auch [1]) - hoffe ich, getan zu haben.

Literatur

[1] Glaser H./Weigand H.G., Das ULAM-Problem - Computergestützte Entdeckungen, DdM 2, 1989(114-134)

[2] Lagarias J.C., The 3x+1 problem and its generalizations, The Amer. Math. Monthly 92(1), 1985(3-23)

[3] Leavens G.T., 3x+1 search programs, Computers Math. Applic. Vol.24, No.11, 1992(79-99)

Johann Wiesenbauer
Institut f. Algebra und Diskrete Math.
Techn. Universität Wien
Wiedner Hauptstraße 8-10
A-1040 Wien
(E-mail: jwiesenb@email.tuwien.ac.at)