

ZUR DIAGONALISIERUNG VON ADJAZENZMATRIZEN. ÜBERLEGUNGEN
ZUR GEWINNUNG VON STRUKTURINFORMATION.

H.W. WEIGEL, E.C. HASS, P.J. PLATH

Universität Bremen, Forschungsgruppe "Angewandte Katalyse"
Leobener Straße, NW 2
D-2800 Bremen 33

Bei der Beschreibung chemischer Systeme wird oft auf Konzeptionen zurückgegriffen, die dadurch gekennzeichnet sind, daß man Untereinheiten dieser Moleküle geschickt kombiniert. Dies trifft zu für die einfache Konzeption der funktionellen Gruppen, aber auch für kompliziertere Verfahren wie der Ansatz der 'conjugated circuits' in Aromaten (1), der 'molecules in molecules' in der Quantenchemie (2) und der charakteristischen Graphen zur Beschreibung struktureller Grundeinheiten von kondensierten Aromaten (3,4). Insbesondere läßt sich bei einer graphentheoretischen Behandlung solcher Systeme (5) die Frage stellen, wie das Spektrum eines Graphen - das Bild einer chemischen Verbindung - aus einfacheren Untereinheiten aufgebaut werden kann (6).

Bei den in der Quantenchemie verwendeten Rechenverfahren werden die zu berechnenden Moleküle häufig einer Symmetriebetrachtung unterworfen. Hierbei ergibt sich eine Klassifizierung der Eigenwerte über die irreduziblen Darstellungen von Punktgruppen, wobei deren Entartung die Entartung der Eigenwerte charakterisiert.

Im folgenden soll eine Klassifizierung versucht werden, indem die Adjazenzmatrix unter der Wirkung der Automorphismengruppe des zugehörigen Graphen soweit diagonalisiert wird, daß die resultierende Matrix nur ganzrationale Elemente enthält. Eine derartige Klassifizierung faßt jedoch gerade nicht entartete Eigenwerte zusammen. Die dabei resultierenden Blockmatrizen der Dimension ≥ 2 , die sich durch Anwendung der Adjazenzmatrix auf entsprechende Unterräume ergeben und die irreduzibel bezüglich der Automorphismengruppe sind, drücken die Komplexität bestimmter Substrukturen des Graphens des Moleküls hinsichtlich dieser Operationen aus.

Insbesondere sollten sich nach einer derartigen Vorgehensweise Graphen mit ganzrationalen Spektren klassifizieren lassen, deren Adjazenzmatrix einer Diagonalmatrix mit ganzrationalen Elementen ähnlich ist. Solche Graphen sind beispielsweise die bipartiten Graphen $K_{n,n}$ ($n \geq 2$), die vollständig multipartiten Graphen $K_{n,n,\dots,n}$ mit t (≥ 3) Elementen, aber auch der Petersensche Graph O_3 oder der Liniengraph $L(K_{n,n})$ (7). All diesen Graphen ist gemein, daß sie regulär sind, d.h. von jeder Ecke eines solchen Graphen gehen gleich viele Kanten aus.

1. Notationen

Sei $G = (V,E)$ ein zusammenhängender, endlicher Graph. Mehrfachkanten und Schlingen sind zugelassen.

Die Eckenmenge V trage eine Numerierung, so daß $V \approx \{1,\dots,n\}$. Die Automorphismengruppe $\Gamma = \Gamma(G)$ läßt sich dann als Permutationsgruppe auf $\{1,\dots,n\}$ und somit als Untergruppe der symmetrischen Gruppe S_n realisieren. Schließlich läßt sich Γ vermöge Permutationsmatrizen über \mathbb{R}^n treu darstellen.

Sei m die Anzahl aller Kanten von G , β_{ij} ($i \neq j$) die Anzahl der Kanten zwischen den Ecken i und j und β_{ii} die zweifache Anzahl der Schlingen der Ecke i . Ferner bezeichne $C_0(G)$ den von 0 -Simplizes als Basis aufgespannten Vektorraum. Dann läßt sich

die den Graphen definierende Adjazenzrelation $E = \{e_k\}$,
 $1 \leq k \leq m$, die als lineare Abbildung

$$A = A(G) \in \mathcal{L}(C_0(V))$$

mit
$$Av_i = \sum_j \beta_{ij} v_j$$

auffassen, der - relativ zur kanonischen Basis von $C_0(G)$ - die Adjazenzmatrix $A(G)$ entspricht.

2. Zusammenhang zwischen $\Gamma(G)$ und $A(G)$

Ein Zusammenhang zwischen der Automorphismengruppe und der Adjazenzmatrix eines Graphen ergibt sich aus folgendem Sachverhalt:

(I) Eine Permutationsmatrix P stellt dann und nur dann einen Automorphismus von G dar, wenn P mit der Adjazenzmatrix $A(G)$ kommutiert, d.h.

$$P A = A P. \quad (1)$$

Diese Beziehung wurde zunächst als Basis zur Entwicklung von Algorithmen zur Konstruktion von Graphen, deren Automorphismengruppe eine gegebene transitive Gruppe als Untergruppe enthält (8), bzw. zur Konstruktion der Automorphismengruppe eines Graphen (9) verwendet.

3. Einfache Eigenwerte eines Graphen

Gleichung (1) läßt sich aber auch zur Auffindung von Eigenschaften der Automorphismengruppe und damit von Graphen heranziehen, die sich im Spektrum des Graphen widerspiegeln (10). Es läßt sich nämlich aus (I) folgern:

(II) Jeder Eigenraum $R(\lambda)$ zum Eigenwert λ wird unter allen Permutationsmatrizen P in sich transformiert, die Automorphismen von G darstellen.

Insbesondere zeigen Petersdorf und Sachs für transitive Automorphismen:

- (III) Sei G ecken-transitiv, d.h. Γ wirke transitiv auf V , dann ist G regulär von einem gewissen Grad r . Ist $\#V$ ungerade, gibt es nur einen einfachen Eigenwert $\lambda = r$. Falls $\#V$ gerade, ist jeder einfache Eigenwert λ einer der ganzen Zahlen $2q - r$ ($0 \leq q \leq r$).

Macht man für $\#V$ gerade die Einschränkung, daß G symmetrisch ist (d.h. es gibt für alle Ecken r, s, u, v von G mit r und s bzw. u und v adjazent einen Automorphismus h in $\Gamma(G)$, so daß $h(r) = u$ und $h(s) = v$), so ergibt sich:

- (IV) Sei G ein symmetrischer Graph mit Regularitätsgrad r und einfacher Eigenwert von G . Dann ist $\lambda = \pm r$.

Aus der Voraussetzung, daß der Graph G ecken-transitiv ist, folgt, daß alle Komponenten eines Eigenvektors \underline{x} zum einfachen Eigenwert λ denselben Absolutbetrag haben:

$$|x_1| = |x_2| = \dots = |x_n|.$$

Insbesondere ist $\underline{x}_1 = (1, 1, \dots, 1)^T$ ein Eigenvektor zu $\lambda = r$. Für den Fall, daß $\lambda \neq r$ ist, muß für die Komponenten des entsprechenden Eigenvektors \underline{x}_2 gelten:

$$\sum x_i = 0.$$

Der Eigenwert $\lambda = -r$ tritt dann und nur dann auf, wenn G bipartit ist (11).

Somit lassen sich die einfachen Eigenwerte durch die Wirkung der Adjazenzmatrix auf die entsprechenden Eigenvektoren abspalten. Dabei ist λ stets ganzzahlig und gibt für symmetrische Graphen den Regularitätsgrad an.

4. Entartete Eigenwerte eines Graphen

Bei der Abspaltung der entarteten Eigenwerte ist es im Allgemeinen nicht möglich, die Ganzrationalität der Wirkung der Adjazenzmatrix beizubehalten. Im folgenden sollen deshalb nur solche Unterräume abgespalten werden, auf denen A ganzrational wirkt.

Zunächst werden nur ecken-transitive Graphen betrachtet.

Definition:

- (V) Ein Unterraum $U \subseteq C_0(G)$ heißt adjazenzinvariant, falls $A U \subseteq U$.

Da aber A mit P kommutiert, muß gelten:

- (VI) Sei U ein adjazenzinvarianter Unterraum und P stelle einen Automorphismus von G dar, dann ist $P U$ adjazenzinvariant:

$$P A U = A P U \subseteq P U .$$

Entsprechend:

- (VII) Jeder Eigenraum $R(\kappa)$ eines Eigenwertes κ von P ist adjazenzinvariant.

Mit $\underline{x} \in R(\kappa)$ gilt:

$$P A \underline{x} = A P \underline{x} = A \kappa \underline{x} = \kappa A \underline{x}$$

und somit ist $A \underline{x} \in R(\kappa)$ und $A R(\kappa) \subseteq R(\kappa)$.

Zunächst sollen solche Automorphismen von G betrachtet werden, die einer Transposition $T(v_1) = v_j$ entsprechen. Dann ist P äquivalent zu

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \oplus I_{n-2} .$$

Da T die Ordnung 2 hat, folgt:

$$\underline{x} = P^2 \underline{x} = \kappa^2 \underline{x} .$$

Somit gilt für die Eigenwerte κ_k , $1 \leq k \leq n$, von P: $|\kappa| = 1$. Die Dimension des Eigenraumes $R(\kappa_+)$ zum Eigenwert $\kappa = 1$ ist $n-1$, entsprechend ist dann der Eigenraum $R(\kappa_-)$ zum Eigenwert

$\kappa = -1$ eindimensional. $R(\kappa_+)$ und $R(\kappa_-)$ sind zueinander orthogonal. Jeder Transposition T läßt sich eine paarweise disjunkte Zerlegung $V = \dot{\cup} V_i$ zuordnen, die aus T -invarianten Teilen von V besteht: $T(V_i) \subseteq V_i$. Einen solchen zwei-elementigen, T -invarianten Teil von V bezeichnen wir als Transitivitätsgebiet von T bzw. als Komplement der Fixpunkte von T aus V .

Es gilt:

(VIII) Seien T_1, \dots, T_m Transpositionen aus S_n und $R(\kappa_{\pm}^i)$, ($1 \leq i \leq m$), der jeweilige Eigenraum des jeweiligen einfachen Eigenwertes $\kappa_{\pm}^i = -1$ von T_i . Dann gilt: Die Eigenräume $R(\kappa_{\pm}^i)$ sind paarweise orthogonal genau dann, wenn die Transitivitätsgebiete von T_i paarweise disjunkt sind.

Beweis:

Sei $i, j \in \{1, \dots, m\}$; $j \neq i$. $\underline{x}_i = (x_1^i, \dots, x_n^i)^T$ mit $x_k^i \in \{0, 1, -1\}$ erzeuge den Eigenraum $R(\kappa_{\pm}^i)$; entsprechend erzeuge \underline{x}_j den Eigenraum $R(\kappa_{\pm}^j)$. Es gilt $R(\kappa_{\pm}^i) \perp R(\kappa_{\pm}^j)$ genau dann, wenn:

$$\sum_{k=1}^n x_k^i x_k^j = 0.$$

Das ist genau dann der Fall, wenn die Transitivitätsgebiete von T_i und T_j disjunkt sind. -

Für Automorphismen von G , die einem Produkt $Q = T_1 T_2 \dots T_m$ paarweise disjunkter Transpositionen entsprechen, ist P äquivalent zu

$$\bigoplus_{i=1}^m T_i \oplus I, \quad \dim(I) = n - 2m.$$

Da die paarweise disjunkten Transpositionen kommutieren, gilt:

$$Q^2 = I$$

und somit nehmen die Eigenwerte κ_k von P wiederum den Absolutwert $|\kappa_k| = 1$ an. Für den Eigenraum $R(\kappa_{\pm})$ des Eigenwertes $\kappa_{\pm} = -1$ von P gilt nun:

$$R(\kappa_{\pm}) = \bigoplus_{i=1}^m R(\kappa_{\pm}^i).$$

Daraus folgt, daß dieser Eigenraum die Dimension m hat. Die Eigenvektoren $\underline{x}_i \in R(\kappa^i)$ spannen zusammen einen m - dimensionalen Unterraum auf, auf den $A(G)$ ganzrational wirkt.

Die Anzahl dieser m - dimensionalen adjazenzinvarianten Unterräume hängt im Allgemeinen von der Struktur von G ab. Sei l_j die Länge des kürzesten Weges zwischen den Ecken v_i und v_j eines Kreises C_n und werde jede Ecke in C_n mit allen Ecken im Abstand l_j verbunden, so läßt sich folgende Familie von ecken-transitiven Graphen G mit der Automorphismengruppe $\Gamma(G)$ isomorph der Diedergruppe D_n definieren:

$$D_n^{l_1, \dots, l_k} = D_n^{l_j}$$

mit $l_j \in \{1, \dots, n/2-1\}$, $1 \leq k \leq n/2-1$.

Dann erhält man zwei adjazenzinvariante Unterräume mit gleicher Dimension $m = \sup (n-1)/2$. In bestimmten Fällen entspricht diese der Anzahl der entarteten Eigenwerte.

5. Disjunkte Zerlegung der Eckenmenge und ihre Adjazenzrelationen

Enthalte $\Gamma(G)$ isomorph D_n eines ecken-transitiven Graphen eine Permutation Q , die sich als Produkt paarweise disjunkter Transpositionen darstellen läßt. Sei $F_Q = \{v \in V \mid Q(v) = v\}$ die Menge der Fixpunkte der Permutation Q .

Betrachte den induzierten Untergraphen $H = (\tilde{V}, \tilde{E})$ von G , der nach Elimination aller Fixpunkte einschließlich der dort inzidierenden Kanten entsteht. Dann induziert die Einschränkung Q von Q auf \tilde{V} eine disjunkte Zerlegung $\tilde{V} = \bigcup_{i=1}^m \tilde{W}_i$ vermöge der disjunkten Transitivitätsgebiete \tilde{W}_i von \tilde{T}_i . Auf diesen Transitivitätsgebieten läßt sich nun ein in den betrachteten Fällen symmetrischer Operator in Matrixform $\bar{A} = (a_{ij})$ definieren, der die Verknüpfungseigenschaften der Ecken der Transitivitätsgebiete angibt. Dabei ist zwischen Graphen gera-

der Eckenzahl mit Permutationen mit 2 Fixpunkten und solchen Graphen zu unterscheiden, deren Permutationen einen Fixpunkt enthalten.

(IX) Sei $v_i, v_j \in F_Q$.

Im Falle $\#F_Q = 2$ seien U_1 und U_2 die Eckenmengen der Komponenten des maximalen Teilgraphen $C_n - v_i - v_j$ mit $d(v_i, v_j) = n/2$ eines Hamiltonkreises in D_n^{1j}

Im Falle $\#F_Q = 1$ seien U_1 und U_2 die Eckenmengen zweier disjunkter Wege der Länge $(n-1)/2$, die durch Zerlegung des maximalen Teilgraphen $C_n - v_i$ eines Hamiltonkreises in D_n^{1j} erhalten werden.

Seien r_i, s_i und r_j, s_j die Ecken des i -ten bzw. j -ten Transitivitätsgebietes \tilde{W}_i bzw. \tilde{W}_j , $1 \leq i, j \leq m$, so daß $r_i, r_j \in U_1$ und $s_i, s_j \in U_2$.

Dann gilt für die Elemente a_{ij} des Operators \bar{A} :

$$a_{ij} \begin{cases} -\beta r_i s_i, & \text{falls } i = j \\ \beta r_i r_j - \beta r_i s_j, & \text{falls } i \neq j. \end{cases}$$

Die Gesamtheit dieser Operatoren in Matrizenform entspricht genau der Blockdiagonalform, die man durch eine Ähnlichkeitstransformation der Adjazenzmatrix erhält.

6. Produkte von ecken-transitiven Graphen

Die bisherigen Betrachtungen lassen sich auf solche Graphen G' ausdehnen, die durch binäre Operationen auf ecken-transitiven Graphen gebildet werden. Das Spektrum eines durch binäre Operationen gebildeten Graphen läßt sich häufig aus den Spektren der an dieser Operation beteiligten Graphen zusammensetzen (12 - 14). Dies soll am Beispiel der kommutativen Operation $G_1 \times G_2$ (direktes Produkt) dargestellt werden.

(X) G_1 habe n_{G_1} Eigenwerte λ_i , $1 \leq i \leq n_{G_1}$ und G_2 habe n_{G_2} Eigenwerte μ_j , $1 \leq j \leq n_{G_2}$. Dann hat das direkte Produkt folgende Eigenwerte:

$$v_{ij} = \lambda_i + \mu_j.$$

Auf analoge Weise ist es möglich, die entsprechenden, in (IX) definierten Operatoren der Ausgangsgraphen zu Operatoren des zusammengesetzten Graphen zu verknüpfen.

Seien G_1 und G_2 zwei ecken-transitive Graphen - mit den Eckenmengen $V(G_1)$ und $V(G_2)$ -, deren Automorphismengruppe isomorph entweder der symmetrischen Gruppe S_n oder der Diedergruppe D_n sind.

Erzeugen die hier zu betrachtenden Operationen einen Graphen, dessen Eckenmenge das kartesische Produkt $V(G_1) \times V(G_2)$ ist, so ist dieser ebenfalls ecken-transitiv. Somit läßt sich gemäß (III) wiederum der einfache Eigenwert $\lambda = r$ abspalten.

(XI) Seien r_{G_1} und r_{G_2} die Regularitätsgrade der Graphen G_1 und G_2 und besitze G_2 n_{G_2} Ecken. Dann gilt (15):

$$r = \begin{cases} r_{G_2} + r_{G_1}, & \text{falls } G_1 \times G_2 \\ r_{G_2} + n_{G_2} r_{G_1}, & \text{falls } G_1 [G_2]. \end{cases}$$

Die Anzahl der adjazenzinvarianten Unterräume bezüglich eines eckentransitiven Graphen G betrage

$$k(G) = \begin{cases} n & \text{für } \Gamma(G) \cong S_n \\ 4 & \text{für } \Gamma(G) \cong D_n \quad \text{und } n \text{ gerade} \\ 3 & \text{für } \Gamma(G) \cong D_n \quad \text{und } n \text{ ungerade} \end{cases}$$

(XII) Seien $U_i(G_1)$ und $U_j(G_2)$, $1 \leq i, j \leq k$, adjazenzinvariante Unterräume bezüglich der Graphen G_1 und G_2 . Dann gilt:

$$U_{ij}(G') = U_i(G_1) \otimes U_j(G_2)$$

ist adjazenzinvarianter Unterraum bezüglich G' .

Die Wirkung der Adjazenzmatrix $A(G')$ auf die entsprechenden adjazenzinvarianten Unterräume $U_{ij}(G')$ liefert eine ganzrationale diagonalisierte Matrix. $A(G')$ wird dabei durch die entsprechenden binären Operationen auf $A(G_1)$ und $A(G_2)$ gebildet (16,17).

Enthalte Γ eines wie oben definierten Graphen G' eine Permutation Q' mit der Fixpunktmenge F'_Q und gelte $Q'^2 = I'$. Betrachte wiederum den induzierten Untergraphen $H' = (\hat{V}', \hat{E}')$ von G' , der wie unter 5. beschrieben entsteht. Dann induziert die Einschränkung \hat{Q}' von Q' auf \hat{V}' eine disjunkte Zerlegung $\hat{V}' = \bigcup_{i=1}^m \hat{W}'_i$ vermöge der disjunkten Transitivitätsgebiete \hat{W}'_i von $T_r(G_1)T_s(G_2)$, wobei $T_r(G_1)$ bzw. $T_s(G_2)$ bestimmte, den Eckenmengen $V(G_1)$ bzw. $V(G_2)$ zugeordnete Transpositionen sind mit $1 \leq r \leq \sup(n_{G_1}-1)/2$ und $1 \leq s \leq \sup(n_{G_2}-1)/2$.

Der auf den Transitivitätsgebieten \hat{W}'_i analog zu \bar{A} zu definierende Operator \bar{C}_{ij} kann jetzt auch positive Diagonalelemente enthalten, da \hat{W}'_i aus mehr als 2 Elementen besteht.

(XIII) Es sei $G' = G_1 \times G_2$.

$\bar{A}_i = (a_{\mu_i \nu_i})_{p_i p_i}$ seien die auf den Transitivitätsgebieten \hat{W}_i des Graphen G_1 definierten Operatoren mit $1 \leq i \leq k(G_1)$, $1 \leq \mu_i, \nu_i \leq p_i$ und

$$p_i = \begin{cases} 1 & \text{für } k(G_1) = n_{G_1} \\ \sup\left(\frac{n_{G_1}-1}{2}\right) & \text{für } k(G_1) = 3,4 \end{cases}$$

und $\bar{B}_j = (b_{\sigma_j \tau_j})_{q_j q_j}$ die auf den Transitivitätsgebieten

\bar{W}_j des Graphen G_2 definierten Operatoren mit
 $1 \leq j \leq k(G_2)$, $1 \leq \sigma_j, \tau_j \leq q_j$ und

$$q_j = \begin{cases} 1 & \text{für } k(G_2) = n_{G_2} \\ \sup\left(\frac{n_{G_2}-1}{2}\right) & \text{für } k(G_2) = 3, 4. \end{cases}$$

Dann sind die Operatoren \bar{C}_{ij} des zusammengesetzten Graphen G' in die Teilmatrizen $C_{\mu_i \nu_i}$ partitioniert, für die gilt:

a) $C_{\mu_i \nu_i} = (b_{\sigma_j \tau_j}) + (d_{\gamma \delta})$, falls $\mu_i = \nu_i$
 mit $d_{\gamma \delta} = \begin{cases} a_{\mu_i \nu_i} & \text{für alle } \gamma = \delta \\ 0 & \text{für alle } \gamma \neq \delta \end{cases}$
 $1 \leq \gamma, \delta \leq q_j$

b) $C_{\mu_i \nu_i} = (d_{\gamma \delta})$, falls $\mu_i \neq \nu_i$

mit

$$d_{\gamma \delta} = \begin{cases} a_{\mu_i \nu_i} & \text{für alle } \gamma = \delta \\ 0 & \text{für alle } \gamma \neq \delta \end{cases}$$

Zu entsprechenden Ergebnissen kommt man auch für andere kommutative Operationen, wie z.B. der Konjunktion (18).

Für eine nichtkommutative Operation, wie sie die Komposition darstellt, folgt das Spektrum des resultierenden Graphen nicht unmittelbar aus der Verknüpfung der Spektren der Ausgangsgraphen. Es lassen sich aber wiederum die in (IX) definierten Operatoren einer Komposition herleiten.

(XIV) Es sei $G' = G_1 [G_2]$.

$$\bar{A}_i = (a_{\mu_i \nu_i})_{p_i p_i} \quad \text{und} \quad \bar{B}_j = (b_{\sigma_j \tau_j})_{q_j q_j}$$

seien wie in (XIII) definiert.

Ferner sei $\lambda_{G_2} = r_{G_2}$ einfacher Eigenwert des Graphen G_2 .

Dann lassen sich die Operatoren \bar{C}_{ij} des zusammengesetzten Graphen G' wie folgt bestimmen:

$$\bar{C}_{ij} = (b_{\sigma_j \tau_j})_{q_j q_j} \quad \text{falls} \quad (b_{\sigma_j \tau_j})_{q_j q_j} = \lambda_{G_2}$$

und

$$\bar{C}_{ij} = \lambda_{G_2} (E)_{p_i p_i} + n_{G_2} (\bar{A}_i)_{p_i p_i},$$

$$\text{falls} \quad (b_{\sigma_j \tau_j})_{q_j q_j} = \lambda_{G_2}.$$

(E = Einheitsmatrix)

7. Summe von eckentransitiven Graphen

Bei der Vereinigung bzw. Verbindung (19) zweier ecken-transitiver Graphen G_1 und G_2 ist der resultierende Graph G' in der Regel nicht mehr ecken-transitiv, d.h. die Automorphismengruppe (G') enthält i. allg. zwei Bahnen. In jeder solchen Bahn haben alle Ecken $V \in V(G')$ die gleiche Valenz.

(XV) ^{*)} Enthalte $\Gamma(G')$ t Bahnen.

Seien $\underline{x}_\tau = (x_{\tau_1}, \dots, x_{\tau_i}, \dots, x_{\tau_t})$, $1 \leq i, \tau \leq t$, Vektoren mit h_i gleichen Komponenten

$$x_{\tau_i} = \begin{cases} 1 & \text{für } \tau = i \\ 0 & \text{für } \tau \neq i; \end{cases}$$

^{*)} Diese Aussage besitzt für beliebige nicht ecken-transitive Graphen Gültigkeit.

wobei k_i die Anzahl der Ecken der i -ten Bahn ist. Die Gesamtheit aller Vektoren \underline{x}_t spannt einen t -dimensionalen, adjazenzinvarianten Unterraum auf.

Dann wirkt die Adjazenzmatrix $A(G')$ wiederum ganzrational auf diesen Unterraum, so daß sich ein weiterer Operator $\bar{C} = (c_{ij})$ definieren läßt mit

$$c_{ii} = r_i; \quad 1 \leq i \leq t,$$

wobei r_i der Regularitätsgrad der i -ten Bahn ist;

$$c_{ij} = \#\{v_l \mid (v_k, v_l) \in E; v_k \in V_i, v_l \in V_j\},$$

wobei V_i, V_j Eckenmengen der i -ten bzw. j -ten Bahn sind.

Die restlichen Operatoren bezüglich G' sind genau die Operatoren $\bar{A}(G_1)$ und $\bar{A}(G_2)$ der G' erzeugenden Graphen. Diese wurden bereits in Abschnitt 5 definiert.

8. Anwendungsbeispiele

a) Der Graph $G' = K_1 + 3 C_6$ in Abb. 1 stellt den dynamischen Graphen des Tri - Benzol - Komplexes dar (20).

Es gilt:

$$G' = G_1 + (G_2 \times G_3),$$

wobei $G_1 = K_1, G_2 = \bar{K}_3$ und $G_3 = C_6$ ist.

Analog lassen sich die Automorphismengruppen der Teilgraphen verknüpfen:

$$\Gamma(G') = \Gamma(G_1) + \Gamma(G_2) \quad [\Gamma(G_3)] ,$$

wobei $\Gamma(G_1) = S_1, \Gamma(G_2) = S_3$ und $\Gamma(G_3) = D_6$ ist.

Nach (IV) ist $\underline{x}_1 = (1 \ 1 \ 1)^T$ ein Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda = r = 0$ von G_2 . Darüberhinaus enthält die Automorphismengruppe von G_2 stets zwei unabhängige Automorphismen Q_1 und Q_2 ,

z.B. mit $T_1 = (1\ 2)$ und $T_2 = (2\ 3)$. Mit den resultierenden Permutationsmatrizen lassen sich die auf 1 normierten Eigenvektoren zum Eigenwert $\kappa = -1$ bestimmen (vgl. Abschnitt 4):

$$\underline{x}_2 = (1\ -1\ 0)^T$$

$$\underline{x}_3 = (0\ 1\ -1)^T.$$

Jeder der Vektoren \underline{x}_1 bis \underline{x}_3 spannt einen eindimensionalen adjazenzinvarianten Unterraum auf.

Entsprechend können für G_3 mit $\Gamma(G_3) \cong D_6$ zwei Eigenvektoren zu den Eigenwerten $\lambda_1 = r$ und $\lambda_2 = -r$ angegeben werden:

$$\underline{x}_1 = (1\ 1\ 1\ 1\ 1\ 1)^T$$

$$\underline{x}_2 = (1\ -1\ 1\ -1\ 1\ -1)^T.$$

Die aus den beiden Automorphismen $Q_1 = (2\ 6)(3\ 5)$ und $Q_2 = (1\ 3)(4\ 6)$ resultierenden Permutationsmatrizen P_1 und P_2 ermöglichen wiederum die auf 1 normierten Eigenvektoren der Permutationsmatrizen zum Eigenwert $\kappa = -1$ zu bestimmen:

$$\underline{x}_3 = (0\ 1\ 0\ 0\ 0\ -1)^T$$

$$\underline{x}_4 = (0\ 0\ 1\ 0\ -1\ 0)^T$$

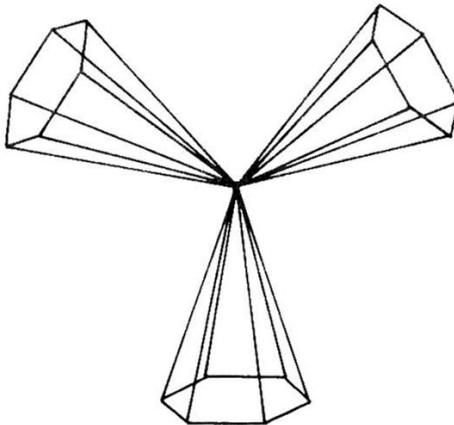


Abbildung 1: Graph $G' = K_1 + 3C_6$

$$\underline{x}_5 = (-1 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0)^T$$

$$\underline{x}_6 = (0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ -1)^T.$$

Die Vektoren \underline{x}_3 und \underline{x}_4 bzw. \underline{x}_5 und \underline{x}_6 spannen jeweils einen adjazenzinvarianten Unterraum auf, auf dem $A(G_3)$ ganzrational wirkt.

Die Einschränkungen $\tilde{Q}_1 = (26)(35)$ und $\tilde{Q}_2 = (13)(46)$ induzieren disjunkte Zerlegungen von $V(G_3)$ vermöge der Transitivitätsgebiete $\tilde{W}_1 = \{2,6\}$ und $\tilde{W}_2 = \{3,5\}$, bzw. $\tilde{W}_3 = \{1,3\}$ und $\tilde{W}_4 = \{4,6\}$. Beiden Zerlegungen entspricht der induzierte Untergraph in Abb. 2. Damit folgt gemäß (IX) für die Operatoren bezüglich den entsprechenden Transitivitätsgebieten:

$$\bar{A}_1 = \bar{A}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

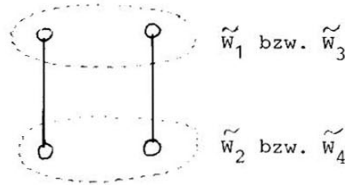


Abbildung 2: induzierter Untergraph H von G_3

Durch binäre Operationen auf den adjazenzinvarianten Unterräumen (vgl. (XI)) werden die Vektoren bezüglich G' erzeugt, die ihrerseits Unterräume aufspannen, auf denen $A(G')$ ganzrational wirkt. Da G' vermöge einer Verbindung von G_1 mit $G_2 \times G_3$ realisiert wird, wobei G_1 und $G_2 \times G_3$ unterschiedlichen Regularitätsgrad besitzen, ist G' nicht mehr ecken-transitiv. $\Gamma(G')$ enthält somit 2 Bahnen. Auf diesen Bahnen läßt sich folgender Operator definieren (vgl. (XV)):

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 18 & 2 \end{pmatrix},$$

wobei die Diagonalelemente gleich dem Regularitätsgrad von G_1 bzw. $G_2 \times G_3$ sind.

Darüberhinaus lassen sich für G' nur solche Operatoren angeben, die denen des Teilgraphen G_3 entsprechen.

b) Der Graph $G' = K_2 \times C_8$ (Abb. 3) besitzt die Automorphismengruppe $\Gamma(G') \cong S_2 \times D_8$.

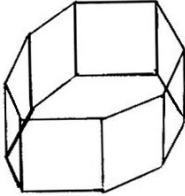


Abbildung 3: Graph G'

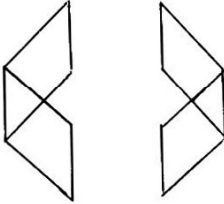


Abbildung 4: Untergraph H

Die von den entsprechenden Einschränkungen induzierten disjunkten Zerlegungen der Eckenmenge von G' führen wiederum auf zwei induzierte Untergraphen H_1 und H_2 gleicher Struktur (Abb. 4).

Mit den Operatoren (vgl. (IX)) $\bar{A}_1(G_1) = (1)$ und $\bar{A}_2(G_1) = (-1)$ des Teilgraphen $G_1 = K_2$, sowie $\bar{B}_1(G_2) = (2)$, $\bar{B}_2(G_2) = (-2)$ und

$$\bar{B}_3(G_2) = \bar{B}_4(G_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

des Teilgraphen $G_2 = C_8$ lauten nach (XIII) die Operatoren des gesamten Graphen G' in Matrixform:

$$\bar{C}_{11} = 3$$

$$\bar{C}_{21} = 1$$

$$\bar{C}_{12} = -1$$

$$\bar{C}_{22} = -3$$

$$\bar{C}_{13} = \bar{C}_{14} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\bar{C}_{23} = \bar{C}_{24} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Da G' eckentransitiv ist, gibt es einen einfachen Eigenwert, für den gilt: $\lambda_{\max} = r = 3$.

c) Unter Anwendung von (XIV) lassen sich analog die Operatoren des Krantzproduktes $G'' = K_2[C_8]$ mit den bekannten Operatoren der Teilgraphen K_2 und C_8 angeben:

$$\begin{array}{ll} \bar{C}_{11} = 2 \cdot 8 = 10 & \bar{C}_{21} = 2 \cdot 8(-1) = -6 \\ \bar{C}_{12} = \bar{B}_2(C_8) & \bar{C}_{22} = \bar{B}_2(C_8) \\ \bar{C}_{13} = \bar{C}_{14} = \bar{B}_3(C_8) & \bar{C}_{23} = \bar{C}_{24} = \bar{B}_4(C_8). \end{array}$$

Diese Beispiele zeigen, daß die Strukturinformation der Teilgraphen in den zusammengesetzten Graphen weitgehend wieder zu finden ist.

Darüberhinaus stellt sich im Zusammenhang mit den hinsichtlich der Automorphismengruppe irreduziblen Blockmatrizen die Frage, ob man diese als "m²-komponentige Eigenwerte" bezüglich dieser Transformationsoperation auffassen kann, die ein Bild für die Komplexität bestimmter Substrukturen des Graphens des Moleküls sind. Möglicherweise kennzeichnen solche Größen gerade das chemische Verhalten solcher Verbindungen.

In dieser Arbeit ist jedoch zunächst auf eine chemische Interpretation der hier vorgestellten Klassifizierung der Eigenwerte verzichtet worden.

- (1) M. Randić, A Graph Theoretical Approach to Conjugation and Resonance Energies of Hydrocarbons. *Tetrahedron* 33, 1905 (1977)
- (2)
- (3) O.E. Polansky, D.H. Rouvray, Graph-Theoretical Treatment of Aromatic Hydrocarbons I: The Formal Graph-Theoretical Description. *MATCH* 2, 63 (1976).
- (4) O.E. Polansky, D.H. Rouvray, Graph-Theoretical Treatment of Aromatic Hydrocarbons II: The Analysis of All-Benzenoid Systems. *MATCH* 2, 91 (1976).

- (5) A.T. Balaban, Chemical Applications of Graph Theory. Academic Press, New York (1976).
- (6) I. Gutman, pers. Mitteilung.
- (7) A.J. Hoffman, Eigenvalues of Graphs. Studies in Graph Theory (D.R. Fulkerson, ed.), Math. Ass. of America, 12, 225 (1975).
- (8) C.-Y. Chao, On Groups and Graphs. Trans. Amer. Math. Soc. 118, 488 (1965).
- (9) A. Mowshowitz, The Group of a Graph Whose Adjacency Matrix Has All Distinct Eigenvalues. Proof Techniques in Graph Theory (f. Harary, ed.), Academic Press, New York, 109 (1969).
- (10) M. Petersdorf, H. Sachs, Spektrum und Automorphismengruppe eines Graphen. Combinatorial Theory and its Applications, Bd. III, Amsterdam, 891 (1970).
- (11) N. Biggs, Finite Groups of Automorphisms. London Math. Soc. Lect. Note Series 6, Cambridge University Press, 78 (1971).
- (12) A.J. Schwenk, The Spectrum of a Graph. Doctoral Dissertation, University of Michigan (1973)
- (13) D.M. Cvetković, Graphs and their Spectra. Univ. Beograd, Publ. Elektrotehn. Fak., Ser. Mat.Fiz. No. 354-No. 356, 1-50 (1971).
- (14) R. Šokarovski, A Generalized Direct Product of Graphs. Publ.Inst. Math. (Beograd) 22 (36), 267 (1977).
- (15) F. Harary, Graphentheorie. R. Oldenbourg Verlag, München, 32 (1974).
- (16) G. Sabidussi, Graph Multiplication. Math. Z. 72, 446 (1960).
- (17) F. Harary, On the Group of the Composition of Two Graphs. Duke Math.J. 26, 29 (1959).
- (18) F. Harary, G. Wilcox, Boolean Operations on Graphs. Math. Scand. 20, 41 (1967).

- (19) A.A. Zykov, On Some Properties of Linear Complexes. Amer. Math. Soc. Translation N. 79 (1952).
- (20) E.C. Hass, P.J. Plath, Graphentheoretische Behandlung des beschränkten Selbstwechselwirkungsproblems, dargestellt an pericyclischen Sechszentrenreaktionen. MATCH 1, 141 (1975).