

DIE ENTWICKLUNG DES μ -POLYNOMS EINES SCHLICHTEN GRAPHEN, ENTSPRECHEND SEINER ZERLEGUNG AN EINEM KNOTEN

Oskar E. Polansky

Max-Planck-Institut für Strahlenchemie

D-4330 Mülheim a.d. Ruhr

(Received: September 1984)

In equ. (8) an expansion of the characteristic and/or the acyclic polynomial of a simple graph G is given in terms of the polynomials of its subgraphs, which correspond to the decomposition of the graph G at its vertex u .

Die charakteristischen und azyklischen Polynome schlichter Graphen spielen eine große Rolle in der Theorie ihrer Eigenwerte und folglich auch in jenen Gebieten, in denen diese von Bedeutung sind. Das am besten bekannte Beispiel ist die Hückel-Theorie und ihre Anwendungen [1]; als weitere Beispiele seien angeführt: die Topologischen Resonanzenergien [2,3], welche aus den Eigenwerten

dieser Polynome berechnet und zu Aussagen über die relative Stabilität organischer Verbindungen benutzt werden, sowie die Topologischen Effekte an Molekülorbitalen [4-12], bei welchen Schlüsse bezüglich der Größenbeziehung zwischen den charakteristischen Polynomen zweier verschiedener Molekulargraphen gezogen werden. Gerade bei den letztgenannten Anwendungen ist es erforderlich, das Polynom eines schlichten Graphen in Terme von Polynomen bestimmter Partialgraphen zu entwickeln.

Es seien G ein schlichter Graph, $\Phi(G, x)$ sein charakteristisches und $\alpha(G, y)$ sein azyklisches ("matching") Polynom in den kontinuierlichen reellen Variablen x bzw. y (auf deren explizite Angabe wird in der Folge zugunsten einer kürzeren Notierung verzichtet). Es wurde gezeigt [13], daß diese beiden Polynome mit Hilfe eines diskriminierenden Parameters t zu einem einzigen Polynom, dem sogenannten μ -Polynom des Graphen G , $\mu(G, t; x)$, zusammengefaßt werden können, in welchem die zyklischen Beiträge mit entsprechenden Potenzen von t multipliziert sind. Dementsprechend nimmt der Parameter t für azyklische Polynome den Wert $t = 0$, für charakteristische Polynome aber den Wert $t = 1$ an, sodaß gilt:

$$\alpha(G) = \mu(G, t=0),$$

$$\Phi(G) = \mu(G, t=1).$$

Wegen der allgemeineren Gültigkeit beziehen wir die vorliegende Betrachtung auf das μ -Polynom eines gegebenen Graphen G .

Wie bereits oben erwähnt, besteht gelegentlich das Bedürfnis, das Polynom eines gegebenen Graphen G durch diejenigen

Polynome auszudrücken, welche bestimmten Subgraphen von G entsprechen. Üblicherweise bedient man sich hierbei der Zerlegung von G an einer Kante $e = \{a,b\} \in G$, wobei man erhält [14]:

$$\mu(G) = \mu(G-e) - \mu(G-a-b) - 2t \sum_{\{Z_e\}} \mu(G-Z_e). \quad (1)$$

Darin sind $(G-e)$, $(G-a-b)$ und $(G-Z_e)$ diejenigen Graphen, welche aus G entstehen, wenn die Kante e bzw. die Knoten a und b (zusammen mit allen incidenten Kanten) bzw. die zum Kreis Z_e gehörenden Knoten (wiederum zusammen mit den incidenten Kanten) entfernt werden; dabei steht Z_e für einen beliebigen Kreis von G , zu welchem die Kante e gehört; die in Gl. (1) angezeigte Summierung ist über der Menge dieser Kreise auszuführen. Um die Kanten zu entfernen, welche eine zerlegende Kantenmenge (cut set [15]) bilden, muß Gl. (1) wiederholt, und zwar auf jede einzelne dieser Kanten angewandt werden, d.h. man zerlegt G an den Kanten eines cut sets. Dies führt im Falle, daß die zu der zerlegenden Kantenmenge gehörenden Kanten keinen Endpunkt gemeinsam haben, zu einem Ausdruck [16], welcher zwar aus zahlreichen Gliedern besteht, von kombinatorischen Gesichtspunkten her aber vollkommen durchsichtig ist.

In gewissen Fällen ist es wünschenswert, das Polynom von G so zu entwickeln, daß diese Entwicklung einer Zerlegung von G an einem Knoten entspricht. Auch in diesem Falle sind die Kanten eines zerlegenden Kantensatzes durch wiederholte Anwendung von Gl. (1) zu entfernen. Die dabei entstehende Situation unterscheidet sich von der vorgenannten [16] insofern, als hier alle zu dem cut set gehörenden Kanten einen Endknoten gemeinsam haben, nämlich

jenen Knoten, an welchem G zerlegt wird. Das Ergebnis unterscheidet sich von dem in [16] erzielten durch eine vergleichsweise geringe Zahl von Gliedern in der Entwicklung.

Es sei G ein schlichter Graph und u derjenige Knoten von G , an welchem G zerlegt werden soll. Die dem Knoten u benachbarten Knoten seien mit v_j , $1 \leq j \leq g$, bezeichnet; g stellt den Grad des Knotens u dar. Der zu entfernende cut set wird von den mit u incidenten Kanten $e_j = \{u, v_j\}$, $1 \leq j \leq g$, gebildet.

Die Entfernung der Kante e_1 führt gemäß Gl. (1) zu dem folgenden Ausdruck:

$$\mu(G) = \mu(G-e_1) - \mu(G-u-v_1) - 2t \sum_{\{Z_1\}} \mu(G-Z_1). \quad (2)$$

Mit Z_1 ist einer jener Kreise notiert, welcher die Kante e_1 enthält. Jeder dieser Kreise stellt einen geschlossenen Weg dar, welcher im Knoten u beginnt, diesen über die Kante e_1 verläßt und schließlich wieder, über eine andere Kante des cut sets (e_j , $j > 1$) zum Knoten u zurückführt. Benutzt man den Index dieser Kante (j) um die der zu $\{Z_1\}$ gehörenden Kreise zu ordnen, so läßt sich diese Menge einfach in disjunkte Teilmengen $\{Z_{1j}\}$ zerlegen, wobei Z_{1j} einen Kreis bezeichnet, welcher die Kanten e_1 und e_j enthält:

$$\{Z_1\} = \bigcup_{j=2}^g \{Z_{1j}\}. \quad (3)$$

Die in den beiden letzten Termen von Gl. (2) erscheinenden Graphen, $(G-u-v_1)$ und $(G-Z_1)$, sind bereits am Knoten u zerlegt,

d.h. sie enthalten keine Kante des cut sets; sie bedürfen daher auch keiner weiteren Behandlung. Der Graph $(G-e_1)$ hingegen enthält noch alle Kanten e_j bis auf e_1 , welche noch zu entfernen sind.

Die Entfernung der Kante e_2 aus $(G-e_1)$ im nächsten Schritt führt zu

$$\begin{aligned} \mu(G) = \mu(G-e_1-e_2) - \mu(G-e_1-u-v_2) - 2t \int \mu(G-e_1-Z_2) \\ - \mu(G-u-v_1) - 2t \int \mu(G-Z_1) \end{aligned} \quad (2a)$$

Da mit einem Knoten auch alle mit ihm incidenten Kanten entfernt werden, enthält ein durch die Entfernung des Knoten u erzeugter Subgraph keine der mit u incidenten Kanten e_j ; es gilt daher die folgende Identität:

$$(G-e_1-u-v_2) = (G-u-v_2). \quad (4)$$

Die Menge der Kreise $\{Z_2\}$, über welche die in Gl. (2a) angezeigte Summierung von $\mu(G-e_1-Z_2)$ auszuführen ist, kann in einer zu Gl. (3) analogen Weise in disjunkte Teilmengen zerlegt werden, wobei zu berücksichtigen ist, daß die Kante e_1 nicht für die Rückkehr zum Knoten u zur Verfügung steht:

$$\{Z_2\} = \bigcup_{j=3}^g \{Z_{2j}\}. \quad (3a)$$

Von den in Gl. (2a) erscheinenden Graphen ist nur $(G-e_1-e_2)$ weiter zu zerlegen. Führt man diese Zerlegung schrittweise in der gleichen Weise wie oben aus, so erhält man nach der Entfernung der Kante e_k , $k < g$, als typisches

Zwischenresultat den folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned} \mu(G) = & \mu(G - \bigcup_{\kappa=1}^k e_{\kappa}) - \sum_{\kappa=1}^k \mu(G - u - v_{\kappa}) - \\ & - 2t \sum_{\kappa=1}^k \sum_{\{Z_{\kappa}\}} \mu(G - Z_{\kappa}) \end{aligned} \quad (2b)$$

worin $\{Z_{\kappa}\}$ analog zu den Gln. (3) und (3a) wie folgt definiert ist:

$$\{Z_{\kappa}\} = \bigcup_{j=\kappa+1}^g \{Z_{\kappa j}\}. \quad (3b)$$

Läßt man k den Wert $k = g-1$ erreichen, so erhält man aus Gl. (2b) schließlich:

$$\begin{aligned} \mu(G) = & \mu(G - \bigcup_{\kappa=1}^{g-1} e_{\kappa}) - \sum_{\kappa=1}^{g-1} \mu(G - u - v_{\kappa}) - \\ & - 2t \sum_{\kappa=1}^{g-1} \sum_{\{Z_{\kappa}\}} \mu(G - Z_{\kappa}). \end{aligned} \quad (2c)$$

Um die angestrebte Entwicklung abzuschliessen, muß noch die letzte der ursprünglich mit dem Knoten u incidenten Kanten entfernt werden. Es ist dies die Kante e_g . Sie ist in $(G - \bigcup_{\kappa} e_{\kappa})$ die einzige Verbindung des Knoten u mit dem Rest des Graphen. In diesem Graphen ist also e_g eine Brückenkante und u ein Endknoten, und es gibt in diesem Graphen keinen Kreis, welcher die Kante e_g enthielte, d.h. $\{Z_g\}$ ist notwendigerweise eine leere Menge. Die Anwendung von Gl. (1) auf $\mu(G - \bigcup_{\kappa} e_{\kappa})$ ergibt somit

$$\mu(G - \bigcup_{\kappa=1}^{g-1} e_{\kappa}) = \mu(G - \bigcup_{\kappa=1}^g e_{\kappa}) - \mu(G - u - v_g). \quad (5)$$

Bevor dieser Ausdruck in Gl. (2c) eingesetzt wird, sei sein erster Term sowie der letzte Term von Gl. (2c) näher betrachtet.

Der Graph $(G - \bigcup_{\kappa=1}^g e_{\kappa})$ ist nicht-zusammenhängend; er ist in mindestens zwei Komponenten zerfallen, von denen die eine nur aus dem Knoten u besteht, während die andere durch $(G-u)$ gegeben ist. Dementsprechend zerfällt auch das μ -Polynom dieses Graphen in mindestens zwei Faktoren, nämlich

$$\mu(G - \bigcup_{\kappa=1}^g e_{\kappa}) = x\mu(G-u), \quad (6)$$

worin bereits $\mu(u) = x$ berücksichtigt ist.

Die in Gl. (2c) angezeigte Doppelsumme entspricht einer Summierung über alle Kreise der Vereinigung der Menge $\{Z_{\kappa}\}$, für welche man setzen kann:

$$\{Z_u\} = \bigcup_{\kappa=1}^{g-1} \{Z_{\kappa}\}. \quad (7)$$

Wie aus den Gln. (3), (3a) und (3c) folgt, enthält die Menge $\{Z_u\}$ alle in G existierenden Kreise, welche durch den Knoten u gehen.

Trägt man Gl. (5) unter Berücksichtigung von Gl. (6) in Gl. (2c) ein und benutzt die Notierung von Gl. (7), so erhält man als Resultat der am Knoten u ausgeführten Zerlegung des Graphen G den folgenden Ausdruck:

$$\mu(G) = x\mu(G-u) - \sum_{j=1}^g \mu(G-u-v_j) + 2t \sum_{\{Z_u\}} \mu(G-Z_u). \quad (8)$$

Vergleicht man Gl. (8) mit dem in [16] erzielten Ergebnis, so

fällt vor allem auf, daß Gl. (8) nur drei verschiedene Typen von Polynomen enthält, unabhängig davon, welche Mächtigkeit der cut set $\{e_j\}$ besitzt, während in [16] die Zahl der unterschiedlichen Typen von Termen etwas stärker als linear mit der Mächtigkeit des cut sets ansteigt. Dieser Unterschied ist eine unmittelbare Folge davon, daß der Knoten u für jede Kante e_j des cut sets ein Endpunkt ist: er kann daher nur entweder zusammen mit dem anderen Endpunkt v_j einer einzigen Kante des cut sets oder zusammen mit den Knoten eines durch ihn gehenden Kreises Z_u entfernt werden.

Abschließend seien die durch die Gln. (1) und (8) beschriebenen Entwicklungen miteinander verglichen und zwar für den Fall, daß sie auf charakteristische Polynome angewandt werden. Diese sind bekanntlich durch die Säkulardeterminante des Graphen wie folgt definiert:

$$\Phi(G) = \det |xI_n - \underline{A}(G)|, \quad (9)$$

worin sind: $\underline{A}(G)$ die Adjazenzmatrix des Graphen G , I_n die Einheitsmatrix der Ordnung n und n die Zahl der Knoten von G ; jede Entwicklung von $\Phi(G)$ kann daher als eine Entwicklung der mit Gl. (9) gegebenen Determinante verstanden werden.

Von diesem Gesichtspunkt aus ist die mit Gl. (1) beschriebene Entwicklung leicht als eine Laplace-Entwicklung der Determinante (9) zu identifizieren, wobei die dem Knoten a entsprechende Zeile (Kolonnen) zu dem einen, die dem Knoten b entsprechende Zeile (Kolonnen) zu dem anderen Block von Zeilen (Kolonnen) gehört, aus welchen die in der Laplace-Entwicklung

vorkommenden Minoren gebildet werden. Im Gegensatz hierzu entspricht Gl. (8) der Entwicklung der Determinante (9) nach den Elementen derjenigen Zeile (Kolonne), welche mit dem Knoten u korrespondiert.

In der Literatur findet man im Theorem 2 von [17] ein sehr spezielles Beispiel für die hier behandelte Entwicklung der Polynome gemäß Gl. (8).

Frau R. Wolf und Frau U. Heiligenstadt danke ich für deren Hilfe bei der Erstellung des Manuskripts.

Literatur:

- [1] Siehe z.B.: A. Graovac, I. Gutman, N. Trinajstić,
"Topological Approach to the Chemistry of Conjugated
Molecules", Lecture Notes in Chemistry, vol. 4,
Springer-Verlag, Berlin, 1977
- [2] I. Gutman, M. Milun, N. Trinajstić, *Match* 1, 171 (1975); *J.
Amer. Chem. Soc.* 99, 1692 (1977)
- [3] J. Aihara, *J. Amer. Chem. Soc.* 98, 2750 (1976)
- [4] O.E. Polansky, M. Zander, *J. Mol. Struct.* 84, 361 (1982)
- [5] O.E. Polansky, M. Zander, I. Motoc, *Z. Naturforsch.* 38a, 196
(1983)
- [6] W. Fabian, I. Motoc, O.E. Polansky, *Z. Naturforsch.* 38a, 916
(1983)
- [7] A. Graovac, I. Gutman, O.E. Polansky, *Mh. Chem.* 115, 1 (1984)
- [8] I. Motoc, J.N. Silverman, O.E. Polansky, *Phys. Rev. A*, 28,
3673 (1983)
- [9] I. Motoc, J.N. Silverman, O.E. Polansky, *Chem. Phys. Lett.*
103, 285 (1984)
- [10] O.E. Polansky, *J. Mol. Struct.* 113, 281 (1984)
- [11] A. Graovac, O.E. Polansky, *Croat. Chem. Acta*, im Druck
- [12] I. Motoc, J.N. Silverman, O.E. Polansky, G. Olbrich, *Theoret.
Chim. Acta*, im Druck
- [13] I. Gutman, O.E. Polansky, *Theoret. Chim. Acta* 60, 203 (1981)
- [14] Siehe Gl. (19) in 13

- [15] H.N.V. Temperley, "Graph Theory and Applications" Ellis Horwood, Chichester, 1981
- [16] O.E. Polansky, A. Graovac, Match 13, 151 (1982)
- [17] A.J. Schwenk in "New Directions in the Theory of Graphs" (Ed.: F. Harary), Academic Press, New York and London, 1973, Seite 281.