

ZUR WEGEMATRIX SCHLICHTER GRAPHEN

Oskar E. Polansky und Ivan Gutman

Institut für Strahlenchemie im Max-Planck-Institut für
Kohlenforschung,
Stiftstr. 34-36, 4330 Mülheim a. d. Ruhr, BRD
und
Naturwissenschaftliche Fakultät Kragujevac, Jugoslawien

(received: May 23, 1979)

Für schlichte Graphen, welche keine Kreise der Länge $1 \leq m$ enthalten, werden die Wegematrizen $\underline{W}^{(\lambda)}$, $\lambda = 1, 2, \dots, m + 1$, angegeben. Das Element $W_{rs}^{(\lambda)}$ zählt die unabhängigen Wege der Länge λ zwischen den Knoten r und s ab.

Die Existenz von Kreisen der Länge $(m + 1)$ im betrachteten Graphen macht die Formulierung von $\underline{W}^{(m + 2)}$ derzeit unmöglich.

Bekanntlich wird als Weg eine nicht geschlossene Kantenfolge bezeichnet, in welcher kein Knoten zwei- oder mehrmals durchlaufen wird. Durch diese Einschränkung unterscheiden sich Wege von Verbindungen, in welchen jeder Knoten der Kantenfolge beliebig oft durchlaufen werden darf. Die Länge l eines Weges ist der Zahl der Kanten gleich, welche die Kantenfolge bilden. Jede Verbindung der Länge 1 ist zugleich ein Weg der Länge 1.

Während die Zahl der Verbindungen der Länge 1 zwischen den Zentren r und s durch die Elemente $(\underline{A}^1)_{rs}$ der 1-ten Potenz der Adjazenzmatrix $\underline{A}$ gegeben sind, fehlen derzeit entsprechende Ausdrücke für die Zahl der Wege. Als Wegematrix $\underline{W}^{(\lambda)}$ sei diejenige Matrix bezeichnet, deren Nicht-Diagonal-Elemente $W_{rs}^{(\lambda)}$ die Zahl der unabhängigen Wege der Länge λ zwischen den Zentren r und s , die Diagonalelemente $W_{rr}^{(\lambda)}$ die Zahl der geschlossenen Kantenfolgen der Länge λ angeben, welche dem Knoten r entspringen und in ihm enden. Da jedem Kreis zwei Drehsinne, z. B.

$$\{r, s, \dots, t, r\} \text{ bzw. } \{r, t, \dots, s, r\}$$

zugeordnet werden können sind die Elemente $W_{rr}^{(\lambda)}$ ($\lambda \geq 3$) geradzahlig.

Enthält der betrachtete Graph γ_λ Kreise der Länge λ , so erhält man für die Spur der Wegematrix

$$\text{Spur } \underline{W}^{(\lambda)} = 2 \lambda \gamma_\lambda \quad (1)$$

enthält er jedoch keinen derartigen Kreis sind alle

$$W_{rr}^{(\lambda)} = 0.$$

Da alle Verbindungen der Länge 1 zugleich Wege dieser Länge sind, gilt

$$\underline{W}^{(1)} = \underline{A} \quad (2)$$

Die Verbindungen der Länge 2 werden durch die Elemente von $\underline{\underline{A}}^2$ abgezählt. Alle Verbindungen der Länge 2, welche von einem Knoten r über einen weiteren Knoten g zu einem dritten Knoten s führen sind Wege; sie werden in $(\underline{\underline{A}}^2)_{rs}$ ($r \neq s$) abgezählt. Im Gegensatz hierzu sind alle Verbindungen der Länge 2, welche von einem Knoten r zu diesem wieder zurückführen, weder Wege noch Kreise. Da diese Verbindungen durch die Diagonalelemente $(\underline{\underline{A}}^2)_{rr} = g_r$ abgezählt werden, welche die diagonale Valenzmatrix $\underline{\underline{G}}$ bilden, stellt sich $\underline{\underline{W}}^{(2)}$ wie folgt dar:

$$\underline{\underline{W}}^{(2)} = \underline{\underline{A}}^2 - \underline{\underline{G}} \quad (3)$$

Behauptung: Unter der Voraussetzung, daß die Taille des Graphen $(m + 1)$ sei, d.h. daß der betrachtete Graphs keine Kreise der Länge m oder kleiner enthält, gilt

$$\underline{\underline{W}}^{(l+1)} = \underline{\underline{A}} \underline{\underline{W}}^{(l)} - (\underline{\underline{G}} - \underline{\underline{I}}) \underline{\underline{W}}^{(l-1)} \quad (4)$$

$$2 \leq l \leq m$$

worin $\underline{\underline{I}}$ die Einheitsmatrix darstellt.

Beweis: Vorerst sei (4) umgeschrieben zu

$$\underline{\underline{A}} \underline{\underline{W}}^{(l)} = \underline{\underline{W}}^{(l+1)} + (\underline{\underline{G}} - \underline{\underline{I}}) \underline{\underline{W}}^{(l-1)} \quad (5)$$

Die linke Seite von (5)

$$(\underline{\underline{A}} \underline{\underline{W}}^{(l)})_{rt} = \sum_s A_{rs} W_{st}^{(l)} \quad (6)$$

beschreibt das Anfügen einer Kante $\{r, s\}$ an den Weg $w_{st}^{(1)} = \{s, \dots, t\}$. Bezüglich des Knoten r sind zwei Fälle möglich: r kann zu dem Knotensatz des Weges $w_{st}^{(1)}$ gehören oder nicht. Der letztere Fall sei zuerst betrachtet.

Fall 1: Der Knoten r gehört nicht zum Knotensatz des Weges $w_{st}^{(1)}$

$$r \notin w_{st}^{(1)} \quad (7)$$

Die Vereinigung

$$\{r, s\} \cup w_{st}^{(1)} = \{r, s, \dots, t\} = w_{rt}^{(1+1)} \quad (8)$$

stellt einen Weg der Länge $(1 + 1)$ zwischen den Knoten r und t dar. Definitionsgemäß sind diese Wege in $w_{rt}^{(1+1)} \geq 0$ abgezählt.

Fall 2: Der Knoten r gehört zum Knotensatz des Weges $w_{st}^{(1)}$

$$r \in w_{st}^{(1)} \quad (9)$$

Dies kann nur erfüllt werden durch

$$(a) \quad r = t$$

oder

$$(b) \quad w_{st}^{(1)} = \{s, r, \dots, t\}$$

Abgesehen vom Endknoten t und dem dem Anfangsknoten s benachbarten Knoten kann kein Knoten des Weges $w_{st}^{(1)}$ mit dem Knoten r identisch sein, da eine solche Identität die Existenz eines Kreises der Länge $\lambda \leq 1 \leq m$ voraussetzen würde, Kreise dieser Länge aber voraussetzungsgemäß im betrachteten Graphen nicht existieren.

Zu (a) $r = t$: Die Vereinigung

$$\{t, s\} \cup w_{st}^{(1)} = \{t, s, \dots, t\} \quad (10)$$

ergibt einen Kreis der Länge $(l + 1)$. Das in (6) angeschriebene Element geht dann über in

$$(\underline{A} \underline{W})_{tt}^{(1)} = \sum_s A_{ts} W_{st}^{(1)} = W_{tt}^{(l+1)}; \quad (11)$$

für $l < m$ sind alle $w_{tt}^{(l+1)} = 0$.

Die Zahl der Kreise der Länge $(m + 1)$ kann mit Hilfe von (1) ermittelt werden.

Zu (b) $w_{st}^{(1)} = \{s, r, \dots, t\}$: Die Vereinigung

$$\{r, s\} \cup w_{st}^{(1)} = \{r, s, r, \dots, t\} = v_{rt}^{(l+1)} \quad (12)$$

ist eine Verbindung der Länge $(l + 1)$, aber kein Weg. Es stellt sich nun die Frage, wieviele Verbindungen dieses Typs im Element (6) mitgezählt sein mögen. Zur Ermittlung dieser Zahl kann man sich die Verbindung $v_{rt}^{(l+1)}$ durch Vereinigung der Verbindung $v_{rr}^{(2)} = \{r, s, r\}$ mit dem Weg $w_{rt}^{(l-1)} = \{r, \dots, t\}$ der Länge $(l - 1)$ entstanden denken:

$$v_{rt}^{(l+1)} = \{r, s, r, \dots, t\} = \{r, s, r\} \cup \{r, \dots, t\}; \quad (13)$$

Dabei ist es wichtig festzuhalten, daß s nicht zum Knotensatz des Weges $w_{rt}^{(l-1)}$ gehören kann, da dieser aus $w_{st}^{(1)}$ durch die

Entfernung von s entstanden ist, der Knoten s aber definitions-
gemäß nur einmal in $w_{st}^{(1)}$ vorkommen kann. Aus einem bestimmten
Weg $w_{rt}^{(1-1)}$ lassen sich

$$\sum_s \{r, s, r\} = g_r - 1 \quad (14)$$

$$s \notin \{r, \dots, t\}$$

derartige Verbindungen konstruieren. Wenn es im betrachteten
Graphen insgesamt $w_{rt}^{(1-1)}$ Wege $\{r, \dots, t\}$ gibt, ist die
Zahl der Verbindungen vom Typ (13) gegeben durch

$$(g_r - 1) w_{rt}^{(1-1)} = [(\underline{G} - \underline{I}) \underline{W}^{(1-1)}]_{rt}. \quad (15)$$

Es ist somit gezeigt, daß die beiden Seiten von (5) ein-
ander gleich sind, womit der behauptete Ausdruck (4) bewiesen ist.

Diskussion

1.) Für alle $1 \leq m$ stellt (4) eine zweistufige, aufbauende
Rekursionsbeziehung dar, deren Startgrößen mit (2) und (3)
gegeben sind. Sie ermöglicht die Berechnung der Wegematrizen
 $\underline{W}^{(\lambda)}$ für $3 \leq \lambda \leq (m+1)$. Damit kann die Taille eines Graphen
ermittelt werden.

2.) Für $1 > m$ ist (4) nicht anwendbar. Wenn der Graph Kreise
der Länge $(m+1)$ enthält, so gibt es unter den Wegen der
Länge $(m+1)$ in diesem Graphen auch solche, welche die ersten
 m Kanten mit einem dieser Kreise gemeinsam haben, während die

letzte Kante des Weges nicht zu diesem Kreis gehört. In $[\underline{A} \ \underline{W}^{(m+1)}]_{rt}$ werden dann neben den oben beschriebenen Wegen und Kreisen der Länge $(m+2)$ und den (13) analogen Verbindungen auch noch Kantenteilgraphen mitgezählt, welche aus einem Kreis der Länge $(m+1)$ und einem über eine Kante mit diesem Kreis zusammenhängenden Knoten bestehen. Es kann derzeit kein allgemein benutzbarer Weg zur Berechnung der Anzahl dieser Kantenteilgraphen angegeben werden. Für eine solche Berechnung ist eine detaillierte Betrachtung der Knotensätze der Wege und Kreise gleicher Länge vonnöten.

3.) Für die acyclischen Graphen (Bäume) ist (4) ohne Einschränkung anwendbar.

4.) Falls der betrachtete Graph aus mehreren Komponenten besteht, kann die Wegematrix in entsprechender Blockform erhalten werden.

5.) Trotz der oben diskutierten Beschränkungen kann (4) bei der Diskussion verschiedener Eigenschaften schlichter Graphen von Nutzen sein. Über die Benutzung von (4) zur Identifizierung eines zusammenhängenden schlichten Graphen als "Polyhexes" bzw. "Hexominoes", d.h. als C-Graph eines kondensierten benzenoiden Kohlenwasserstoffes, wird gesondert berichtet [1].

[1] O. E. Polansky und I. Gutman, nachfolgende Arbeit.