communications in mathematical
match
and in computer chemistry

32 (1995), 237 - 249

Beschreibung eines Programms zur Berechnung des charakteristischen Polynoms und der Eigenvektoren eines Graphen

Peter E. John und Wilfried Rausch
Technische Universität Ilmenau
Institut für Mathematik
Postfach 327
98684 Ilmenau

1 Definitionen und Bezeichnungen

Es sei $G = (V, E)$ ein Graph mit der Knotenpunktmenge $V = V(G)$ und der Kantenmenge $E = E(G)$. Mit $n = n(G) = |V|$ $(m = m(G) = |E|)$ werde die Anzahl der Knotenpunkte (Kanten) von G bezeichnet. $A = A(G)$ sei eine 0 - 1 - Adjazenzmatrix von G und $I = I(G)$ die $n \times n-$ Einheitsmatrix. Das charakteristische Polynom

$$P_A(\lambda) = det(\lambda I - A) \tag{1}$$

wird als das **charakteristische Polynom** $P_G(\lambda)$ von G bezeichnet.
λ_0 heiße **Eigenwert** von G genau dann, wenn

$$P_G(\lambda_0) = 0 \tag{2}$$

ist.
Ein Vektor $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}(\lambda_0)$ heiße ein **zu λ_0 gehörender Eigenvektor** von G, falls

$$(\lambda_0 \cdot I - A) \cdot \mathbf{x}_0 = \mathbf{0} \tag{3}$$

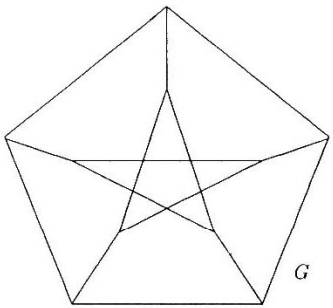
gilt, wobei $\mathbf{0} = \mathbf{0}(G)$ einen n-dimensionalen Nullvektor darstellt.
Eigenvektor $\mathbf{x}_0$ heiße **normiert**, falls

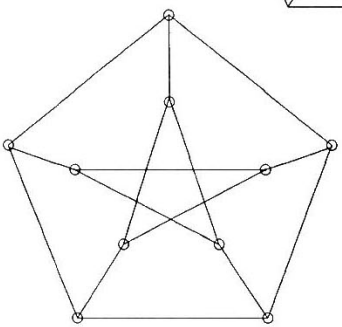
$$| \mathbf{x}_0 | = 1. \tag{4}$$

Graph G heiße **trivialer Graph**, falls $n = n(G) = 1$ und $m = m(G) = 0$ sind. Wir setzen voraus, daß G zusammenhängend und schlicht (ohne Schlingen und Mehrfachkanten) ist.

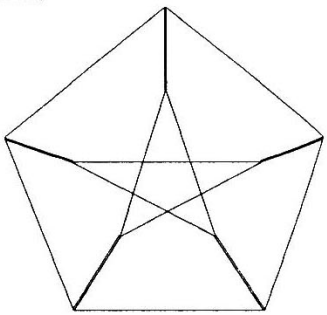
2 Wegesysteme

Ein **Wegesystem** (WS) von G ist eine Menge paarweise (knoten-)disjunkter Wege. Ein **vollständiges Wegesystem** (VWS) von G ist ein WS , welches alle Knotenpunkte von G überdeckt (Abb. 1).

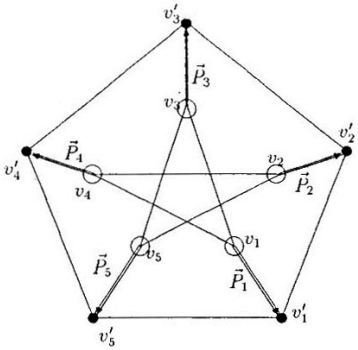




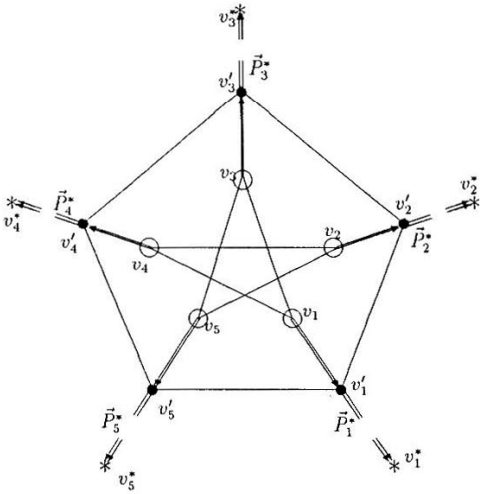
1.1 $\mathbf{G}_0 = G(\mathbf{P}_0)$



1.2 $\mathbf{G} = G(\mathbf{P})$



1.3 $\vec{\mathbf{G}} = G(\vec{\mathbf{P}})$



1.4 $\vec{\mathbf{G}}^* = G(\vec{\mathbf{P}}^*)$

Abb.1

Unter dem **trivialen Wegesystem** (TWS) von G verstehen wir dasjenige VWS, dessen Wege triviale Graphen sind (Abb. 1.1).
Es sei $\mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}(G)$ die Menge aller VWSe von G und $\mathbf{P} = \mathbf{P}(G) \in \mathbf{\Pi}$ ein VWS mit

$p = |\mathbf{P}|$ Wegen P_j, $j = 1, 2, ..., p$.
Offensichtlich gilt: $1 \leq p \leq n$. Werden die Kanten von $\mathbf{P}$ in G fett gezeichnet, so erhalten wir eine Figur, welche wir mit $\mathbf{G} = G(\mathbf{P})$ bezeichnen wollen (Abb. 1.2). Weg $P_j \in \mathbf{P}$ habe die (nicht notwendig verschiedenen) Endknotenpunkte $v_j, v_{j'}$; deshalb schreiben wir auch $P_j =: P(v_j, v_{j'})$. Zunächst orientieren wir alle Kanten des Weges P_j von v_j zu $v_{j'}$, wodurch P_j in $\vec{P}_j = \vec{P}(v_j, v_{j'})$, $\mathbf{P}$ in $\vec{\mathbf{P}}$ und $\mathbf{G}$ in $\vec{\mathbf{G}} = G(\vec{\mathbf{P}})$ übergehen (Abb. 1.3).
An Endknotenpunkt $v_{j'}$ von $\vec{P}_j$ fügen wir eine zusätzliche gerichtete Kante $\vec{e}_j^* = (\overrightarrow{v_{j'}, v_j^*})$ mit hängendem Endknotenpunkt v_j^* an. Dadurch gehen $\vec{P}_j$, $\vec{\mathbf{P}}$ und $\vec{\mathbf{G}}$ in $\vec{P}_j^* = \vec{P}(v_j, v_j^*)$, $\vec{\mathbf{P}}^*$ bzw. $\vec{\mathbf{G}}^* = G(\vec{\mathbf{P}}^*)$ über (Abb. 1.4).
Die Knotenpunkte v_j, $v_{j'}$ und v_j^* werden als **Quelle**, **Vorsenke** bzw. **Senke** von $\vec{\mathbf{G}}^*$ bezeichnet. Alle Knotenpunkte von $\vec{\mathbf{G}}^*$, welche keine Quellen bzw. Senken sind (also auch die Vorsenken), werden fortlaufend mit $v_{p+1}, v_{p+2}, ..., v_n$ benannt. Für Knotenpunkt $v \in V(\vec{P}_j^*)$ gebe $\tau(v)$ die Anzahl der orientierten Kanten von $\vec{P}_j^*$ an, die zwischen v_j und v angetroffen werden. Offensichtlich ist $\tau(v) = 0$ genau dann, wenn v Quelle von $\vec{\mathbf{G}}^*$ ist.
Ist $v \in V(\vec{P}_j^*)$ nicht Quelle, so gibt es genau einen Knotenpunkt $\tilde{v} \in V(\vec{P}_j^*)$ mit $\tau(v) = 1 + \tau(\tilde{v})$. Es sei $\tilde{N}(v) := N(\tilde{v}) - \{v\}$ die Menge aller Nachbarknotenpunkte von $\tilde{v}$, welche von v verschieden sind. Ob ein VWS $\mathbf{P} \in \mathbf{\Pi}$ für unseren (noch zu beschreibenden) Algorithmus A geeignet ist oder nicht, kann mittels des folgenden Algorithmus M (Markierung) überprüft werden. Es sei $V = V(\vec{\mathbf{G}}) = V(G)$. Die jeweils aktuelle Menge der (z. B. mit "o") markierten Knotenpunkte von $\vec{\mathbf{G}}$ werde mit $V^o = V^o(\vec{\mathbf{G}})$ bezeichnet und es sei $\overline{V}^o = \overline{V}^o(\vec{\mathbf{G}}) := V - V^o$ die jeweils aktuelle Menge der nicht markierten Knotenpunkte von $\vec{\mathbf{G}}$.

Algorithmus M

(M.1) Markiere jede Quelle von $\vec{G}$: setze
$V^o := \{v_1, v_2, ..., v_p\}$.

(M.2) Es gibt keinen Knotenpunkt $v' \in \overline{V}^o$ mit der Eigenschaft $\tilde{N}(v') \subseteq V^o$: Das gewählte VWS ist nicht zulässig.

(M.3) Es gibt einen Knotenpunkt $v' \in \overline{V}^o$ mit $\tilde{N}(v') \subseteq V^o$. Setze $V^o := V^o \cup \{v'\}$ und $\overline{V}^o := \overline{V}^o - \{v'\}$.

(M.4) Ist $V^o = V$, so ist das VWS $\mathbf{P} = \mathbf{P}(G)$ **zulässiges Wegesystem** (ZWS) von G.

Ein Algorithmus zur Konstruktion eines ZWS eines Graphen G wird in einer folgenden Arbeit publiziert.
$\hat{\mathbf{\Pi}} = \hat{\mathbf{\Pi}}(G)$ sei die Menge aller zulässigen Wegesysteme von G. Offensichtlich gelten:

(a) $\hat{\mathbf{\Pi}}(G) \subseteq \mathbf{\Pi}(G)$.

(b) Das TWS $\mathbf{P}_o = \mathbf{P}_o(G)$ ist stets ZWS von G.

(c) Falls $G = T$ ein Baum ist, so ist $\hat{\mathbf{\Pi}}(T) = \mathbf{\Pi}(T)$.

Beispiel: Für die in Abb. 2 gegebenen Wegesysteme gilt:

$\vec{\mathbf{P}}_1 \notin \hat{\mathbf{\Pi}}(G)$ und $\vec{\mathbf{P}}_2 \in \hat{\mathbf{\Pi}}(G)$.

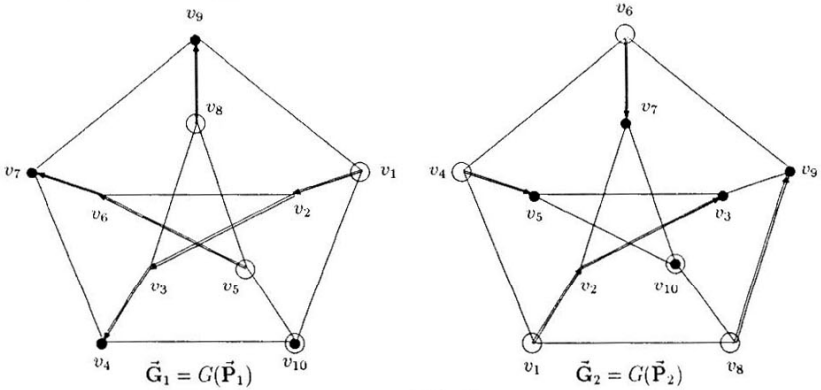


Abb. 2

3 Algorithmus zur Polynom- und Eigenvektorberechnung

Gegeben seien der (schlichte, zusammenhängende) Graph G und ein ZWS $\mathbf{P} \in \hat{\mathbf{\Pi}}(G)$. Entsprechend 2. konstruieren wir die Figuren $\mathbf{G}$, $\vec{\mathbf{G}}$ und $\vec{\mathbf{G}}^*$.

Algorithmus A:

Jedem Knotenpunkt v von $\vec{G}^*$ ordnen wir einen Vektor $\mathbf{d}(v, \lambda) = (d_1(v, \lambda), d_2(v, \lambda), ..., d_p(v, \lambda))$ mittels folgender Regeln zu.

(i) Falls $v = v_i$, $i = 1, 2, ..., p$, so setze
$\mathbf{d}(v_i, \lambda) = (\delta_{i1}, \delta_{i2}, ..., \delta_{ip})$,

wobei

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & falls \quad i = j \\ 0 & sonst, \end{cases} \qquad j = 1, 2, ..., p.$$

(ii) Falls v keine Quelle ist, so gilt

$$\mathbf{d}(v, \lambda) = \lambda \cdot \mathbf{d}(\dot{v}, \lambda) - \sum_{v' \in \dot{N}(v)} \mathbf{d}(v', \lambda).$$

Mit (i), (ii) kann, da $\mathbf{P} \in \hat{\mathbf{\Pi}}(G)$, jedem Knotenpunkt v von $\vec{G}^*$ genau ein Vektor $\mathbf{d}(v, \lambda)$ zugeordnet werden. Wir bilden die $n \times p$-Matrix

$$D(\vec{\mathbf{G}}, \lambda) = (\mathbf{d}^T(v_1, \lambda), \mathbf{d}^T(v_2, \lambda), ..., \mathbf{d}^T(v_n, \lambda))^T$$

und die $p \times p$-Matrix

$$D^*(\vec{\mathbf{G}}, \lambda) = (\mathbf{d}^T(v_1^*, \lambda), \mathbf{d}^T(v_2^*, \lambda), ..., \mathbf{d}^T(v_p^*, \lambda))^T$$

Es gelten:

<u>Satz 1:</u>

(5) $$P_G(\lambda) = det D^*(\vec{\mathbf{G}}, \lambda).$$

<u>Satz 2:</u> Es sei λ^o Eigenwert von G und es sei $\mathbf{y}^o$ eine nichttriviale Lösung der Gleichung

(6.1) $$D^*(\vec{\mathbf{G}}, \lambda^o) \cdot \mathbf{y}^o = \mathbf{0},$$

wobei $\mathbf{0}$ ein p-dimensionaler Nullvektor ist, dann ist

(6.2) $$\mathbf{x}^o = D(\vec{\mathbf{G}}, \lambda) \cdot \mathbf{y}^o$$

ein zu λ^o gehörender Eigenvektor von G und alle Eigenvektoren von G können auf diese Weise ermittelt werden.

Beide Sätze sind Modifikationen von Sätzen aus [1].

Beispiel: Für $\vec{G}^*$ aus Abb. 1 finden wir:

$v \backslash$	$d_1(v,\lambda)$	$d_2(v,\lambda)$	$d_3(v,\lambda)$	$d_4(v,\lambda)$	$d_5(v,\lambda)$	
v_1	1	0	0	0	0	$D(\vec{G},\lambda)$
v_2	0	1	0	0	0	
v_3	0	0	1	0	0	
v_4	0	0	0	1	0	
v_5	0	0	0	0	1	
v_1'	λ	0	-1	-1	0	
v_2'	0	λ	0	-1	-1	
v_3'	-1	0	λ	0	-1	
v_4'	-1	-1	0	λ	0	
v_5'	0	-1	-1	0	λ	
v_1^*	λ^2-1	$-\lambda+1$	$-\lambda+1$	$-\lambda+1$	$-\lambda+1$	$D^*(\vec{G},\lambda)$
v_2^*	$-\lambda+1$	λ^2-1	$-\lambda+1$	$-\lambda+1$	$-\lambda+1$	
v_3^*	$-\lambda+1$	$-\lambda+1$	λ^2-1	$-\lambda+1$	$-\lambda+1$	
v_4^*	$-\lambda+1$	$-\lambda+1$	$-\lambda+1$	λ^2-1	$-\lambda+1$	
v_5^*	$-\lambda+1$	$-\lambda+1$	$-\lambda+1$	$-\lambda+1$	λ^2-1	

$$P_G(\lambda) = det D^*(\vec{G},\lambda) = \lambda^{10} - 15\lambda^8 + 75\lambda^6 - 24\lambda^5 - 165\lambda^4 + 120\lambda^3 + 120\lambda^2 - 160\lambda + 48$$

$\lambda^0 = 1$ ist fünffacher Eigenwert von G.
Die Koordinaten eines zu λ^0 gehörenden Eigenvektors sind in Abb. 3 an den Knotenpunkten von G angetragen und die Koordinaten der vier weiteren Eigenvektoren sind in Tab. 1 zusammengestellt.

Tab. 1: ($\alpha = \frac{\sqrt{3}}{6} \approx 0,2887$, $\beta = \frac{1}{6} \approx 0,1667$, $\gamma = \frac{\sqrt{2}}{6} \approx 0,2357$)

	2.*Eigenv.*	3.*Eigenv.*	4.*Eigenv.*	5.*Eigenv.*
v_1	α	0	2β	γ
v_2	2α	$-\alpha$	β	$-\gamma$
v_3	0	-2α	-2β	$-\gamma$
v_4	0	0	-4β	γ
v_5	0	0	0	3γ
v_1'	$-\alpha$	α	β	$-\gamma$
v_2'	α	α	β	$-\gamma$
v_3'	-2α	$-\alpha$	β	$-\gamma$
v_4'	0	2α	-2β	$-\gamma$
v_5'	$-\alpha$	0	2β	γ

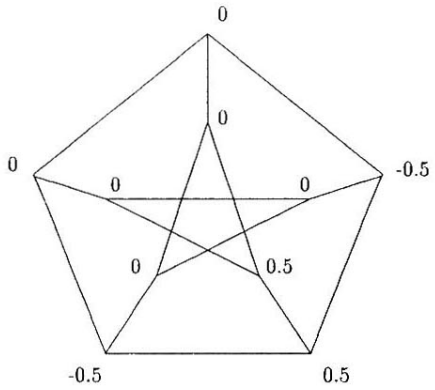


Abb. 3

4 Programmbeschreibung

4.1 Einführung

Das Programmsystem realisiert den in 3. beschriebenen Algorithmus zur Polynom- und Eigenvektorberechnung. Es besteht aus den folgenden Programmteilen:

- Grapheneingabe und Überprüfung des gewählten VWSs auf Eignung für Algorithmus A mittels Algorithmus M
- Berechnung des char. Polynoms $P_G(\lambda)$ nach Algorithmus A
- Berechnung aller Nullstellen (Eigenwerte) des char. Polynoms $P_G(\lambda)$
- Berechnung aller Eigenvektoren der Adjazenzmatrix $A = A(G)$
- Berechnung der Bindungsordnungen nach Coulson (Pauling, falls $P_G(0) \neq 0$)
- Ausgabe aller Eingabedaten und Ergebnisse auf dem Monitor

  und

- Druck aller Eingabedaten und Ergebnisse.

4.2 Eingabe des Graphen mit Hilfe des vollständigen Wegesystems

Weg P_j habe $n_j = n(P_j) \geq 1$ Knotenpunkte, wobei $\sum_{j=1}^{p} n_j = n$ ist. Die Knotenpunkte des Weges P_j werden, bei der Quelle beginnend, wie folgt numeriert ($1 \leq j \leq p$):
Setze $h_0 = 0$,
Nr. (Quelle (P_j)) $= h_{j-1} + 1$,
und
Nr. (Vorsenke (P_j)) $= h_j = n_1 + n_2 + ... + n_j$ (also $h_p = n$).
Der Weg P_j wird durch die Angabe von h_j, wie folgt in den Rechner gegeben:

Nach der Ausschrift

Eingabe des Wege-Systems
Eingabe der Wege: (Abbruch der Eingabe: 0 eingeben)

werden der Reihe nach die Knotenpunktnummern $h_1, h_2...$ der Endpunkte der Wege $P_1, P_2, ..., P_P$ eingegeben, wobei die Nr. der Quelle (Pj) automatisch erscheint.

$$
\begin{array}{lcccl}
 & & Quelle & - & Vorsenke \\
Weg\ P_1 & : & 1 & - & h_1 \\
Weg\ P_2 & : & h_1 + 1 & - & h_2 \\
Weg\ P_3 & : & h_2 + 1 & - & h_3 \\
\vdots & & \vdots & & \vdots \\
Weg\ P_j & : & h_{j-1} + 1 & - & h_j = h_{j-1} + n_j \qquad j \geq 1 \\
. & & . & & . \\
. & & . & & .
\end{array}
$$

Die Eingabe des VWSs wird beendet nach Eingabe einer 0 für die Vorsenke von P_{p+1} oder eines $< CR >$.
Damit sind alle Wegekanten eindeutig bestimmt.
Die Sproßkanten müssen zusätzlich eingegeben werden. Anhand dreier Beispiele soll die gesamte Eingabe erläutert werden:

1. Beispiel: Graph **G** (Abb. 1.3)

Eingabe des Wegesystems	Eingabe der Sproßkanten :
$Weg\ P_1 : 1 - 2$	$1 \rightarrow 5, 7$
$Weg\ P_2 : 3 - 4$	$3 \rightarrow 7, 9$
$Weg\ P_3 : 5 - 6$	$5 \rightarrow 9$
$Weg\ P_4 : 7 - 8$	$2 \rightarrow 4, 10$
$Weg\ P_5 : 9 - 10$	$6 \rightarrow 4, 8$
	$8 \rightarrow 10$

2. Beispiel: Graph $\mathbf{G}_1$ (Abb. 2)

Eingabe des Wegesystems	Eingabe der Sproßkanten :
$Weg\ P_1 : 1-4$	$1 \rightarrow 9, 10$
$Weg\ P_2 : 5-7$	$2 \rightarrow 6$
$Weg\ P_3 : 8-9$	$3 \rightarrow 8$
$Weg\ P_4 : 10-10$	$4 \rightarrow 7, 10$
	$5 \rightarrow 10, 8$
	$7 \rightarrow 9$

Nach Eingabe des Graphen erfolgt die Ausschrift.
Das eingegebene Wege-System ist nicht zulässig.
Für folgende Knotenpunkte können die Vektoren nicht berechnet werden:
2, 3, 4, 7, 9
Abbruch!

und es erfolgt ein Abbruch des Programms.

3. Beispiel: Graph $\mathbf{G}_2$ (Abb. 2)

Eingabe der Wege:	Eingabe der Sproßkanten :
$Weg\ P_1 : 1-3$	$1 \rightarrow 4, 8$
$Weg\ P_2 : 4-5$	$2 \rightarrow 7$
$Weg\ P_3 : 6-7$	$3 \rightarrow 5, 9$
$Weg\ P_4 : 8-9$	$4 \rightarrow 6$
$Weg\ P_5 : 10-10$	$5 \rightarrow 10$
	$6 \rightarrow 9$
	$7 \rightarrow 10$
	$8 \rightarrow 10$

4.3 Berechnung des charakteristischen Polynoms $P_G(\lambda)$ nach Algorithmus A

Ist das eingegebene Wegesystem zulässig, erfolgt die Berechnung des charakteristischen Polynoms $P_G(\lambda)$. Dabei ist zu bemerken, daß alle berechneten Koeffizienten des charakteristischen Polynoms ganzzahlig und exakt sind. Die in Satz 1 gegebene Determinante wird nach dem Verfahren von Faddejew [3] berechnet.

4.4 Berechnung der Nullstellen des charakteristischen Polynoms $P_G(\lambda)$ (Eigenwerte von G)

$P_G(\lambda)$ hat ganzzahlige Koeffizienten. Es bezeichne $r = r(G)$ die Maximalvalenz von G.
Zunächst wird (falls vorhanden) der Eigenwert $\lambda = 0$ (Vielfachheit m) abgespalten:

$$P_G(\lambda) = \lambda^m \cdot Q_G(\lambda).$$

(A) Ist wenigstens ein Exponent von λ (in $Q_G(\lambda)$) ungerade, so werden die verbleibenden Nullstellen im Intervall $[-r, r]$ gesucht.

(B) Ist $Q_G(\lambda) = R_G(\lambda^2)$, so liegen alle Nullstellen des Polynoms $R_G(\mu)$ im Intervall $[0, r^2]$. Es sei angemerkt, daß $R_G(\mu)$ genau $\frac{n-m}{2}$ Nullstellen hat.

Die aktuelle Funktion werde mit $f_G(\nu)$ und das dazugehörige Intervall für deren Nullstellen mit $[x, y]$ bezeichnet.

(i) Suche alle ganzzahligen Wurzeln (mit ihren Vielfachheiten) - falls vorhanden - von $f_G(\nu)$ im Intervall $[x, y]$:

$$f_G(\nu) = l_G(\nu) \cdot g_G(\nu),$$

wobei $l_G(\nu)$ das Produkt aller Linearfaktoren darstellt.

Hat $g_G(\nu)$ den Grad 0, so sind wir fertig.

(ii) Ist der Grad von $g_G(\nu)$ größer 1, so werden zunächst alle quadratischen Faktoren (mit ihren Vielfachheiten) - falls sie existieren - $\nu^2 - t\nu + s$, t und s ganz, ermittelt. Dabei gelten $2x \leq t \leq 2y$ und $max\{x \cdot (t-x), y \cdot (t-y)\} \leq s \leq \left(\frac{t}{2}\right)^2$. Sei $q_G(\nu)$ das Produkt aller quadratischen Faktoren von $g_G(\nu)$, also

$$g_G(\nu) = q_G(\nu) \cdot h_G(\nu).$$

Hat $h_G(\nu)$ den Grad 0, so sind wir fertig.

(iii) Falls der Grad des Polynoms $h_G(\nu)$ größer als 2 ist, dann werden mittels modifiziertem Newton-Verfahren die restlichen Nullstellen im Intervall $[x, y]$ berechnet.

(iv) Im Falle (A) sind alle Nullstellen mit ihren Vielfachheiten bestimmt.
Im Falle (B) gilt: Ist ν^* eine unter (i) bis (iii) gefundene Wurzel von $R_G(\nu)$, so sind $\lambda^*_{1,2} = \pm\sqrt{\nu^*}$ Wurzeln von $P_G(\lambda)$, womit sämtliche Wurzeln von $P_G(\lambda)$ bekannt sind.
Die Genauigkeit der berechneten Nullstellen beträgt 10^{-20}.

4.5 Berechnung aller Eigenvektoren der Adjazenzmatrix $A = A(G)$

Die Berechnung der Eigenvektoren zum Eigenwert λ^0 erfolgt nach Satz 2.

Gleichung (6.1) stellt ein lineares homogenes Gleichungssystem dar.
Wenn

$$\mathbf{y}^0 = (y_1, y_2, ..., y_p)'$$

und

$$D^*(\vec{\mathbf{G}}, \lambda^0) = (\mathbf{d}_1^0, \mathbf{d}_2^0, ..., \mathbf{d}_p^0)$$

sind, wobei für $i = 1, 2, ..., p$ $\mathbf{d}_i^0$ ein p-dimensionaler Spaltenvektor ist, dann läßt sich Gleichung (6.1) schreiben als

$$y_1\mathbf{d}_1^0 + y_2\mathbf{d}_2^0 + ...y_p\mathbf{d}_p^0 = \mathbf{0}.$$

Dies ist eine Linearkombination der Vektoren $\mathbf{d}_1^0, \mathbf{d}_2^0, ..., \mathbf{d}_p^0$. Wendet man auf diese Vektoren das Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren an, dann erhält man die transformierten Vektoren

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_1 &= \mathbf{d}_1^0 \\ &\vdots \\ \mathbf{d}_k &= \mathbf{d}_k^0 - \sum_{i=1, \mathbf{d}_i \neq 0}^{k-1} \frac{(\mathbf{d}_k^0, \mathbf{d}_i)}{(\mathbf{d}_i, \mathbf{d}_i)} \mathbf{d}_i; \qquad k > 1 \\ &\vdots \end{aligned}$$

wobei $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ für das skalare Produkt der Vektoren $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ stehe.
Da λ^0 ein Eigenwert mit der Vielfachheit m ist, erhält man bei diesem Orthogonalisierungsprozeß genau m Nullvektoren $\mathbf{d}_{i1} = \mathbf{0}$, $\mathbf{d}_{i2} = \mathbf{0}, ..., \mathbf{d}_{im} = \mathbf{0}$.
Ist $\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$ $(k = i_1, i_2, ..., i_m)$, dann gilt

$$\mathbf{0} = \mathbf{d}_k^0 - \sum_{i=1, \mathbf{d}_i \neq 0}^{k-1} \frac{(\mathbf{d}_k^0, \mathbf{d}_i)}{(\mathbf{d}_i, \mathbf{d}_i)} \mathbf{d}_i.$$

Damit erhält man für $\mathbf{d}_k^0$ eine Linearkombination der Vektoren $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, ..., \mathbf{d}_{k-1}$ und somit auch eine Linearkombination der Vektoren $\mathbf{d}_1^0, \mathbf{d}_2^0, ..., \mathbf{d}_{k-1}^0$. Diese Linearkombination ist damit eine Lösung des homogenen Gleichungssystems (6.1). Auf diese Weise werden alle m unabhängigen Lösungen des homogenen Gleichungssystems (6.1) ermittelt und damit nach (6.2) alle m unabhängigen Eigenvektoren.

4.6 Berechnung der Bindungsordnungen nach Coulson und Pauling

Nachdem alle Eigenwerte λ_k und Eigenvektoren $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}(\lambda_k) = (x_k(1), x_k(2), ..., x_k(n))'$, $k = 1, 2, ..., n$, berechnet worden sind, werden die Bindungsordnungen nach Coulson und Pauling (falls $P_G(0) \neq 0$) bestimmt.

Coulson:

$$B_C(i, j) = \sum_{k=1}^{n} g(\lambda_k)\ x_k(i)\ x_k(j)$$

mit

$$g(\lambda) = \begin{cases} 2; & \lambda > 0 \\ 1; & \lambda = 0 \\ 0, & \lambda < 0 \end{cases}$$

Pauling:

$$B_P(i,j) = \sum_{k=1}^{n} f(\lambda_k) \cdot \frac{x_k(i)\, x_k(j)}{\lambda_k} \quad .$$

mit

$$f(\lambda) = \begin{cases} 2; & \lambda > 0 \\ 0; & \lambda < 0 \end{cases} ,$$

wobei die Knotenpunkte i, j benachbart sind ($1 \leq i < j \leq n$).

5 Abschließende Bemerkung

Es sei angemerkt, daß der Algorithmus A, in leicht modifizierter Form, auch auf knoten- und kantengewichtete Graphen übertragbar ist. Man vergleiche etwa mit [2]. Im allgemeinen ist dann jedoch kein ganzzahliges Polynom zu erwarten, woraus sich neue numerische Probleme ergeben.

Für die finanzielle Unterstützung danken die Autoren der DFG (Jo 231/1-3).

Literatur

[1] Al-Khnaifes, Kh. and H. Sachs: Graphs, linear equations, determinants, and the number of perfect matchings. In: Contemporary Methods in Graph Theory (Ed.: R. Bodendieck), BI Wissenschaftsverlag, Mannheim/Wien/ Zürich, 1990, 47-71.

[2] John, P.E.: Calculating the characteristic polynomial and the eigenvectors of a weighted hexagonal system (benzenoid hydrocarbon with heteroatoms), Match (Mülheim), 30 (1994), 153-169.

[3] Gantmacher, F.R.: Matrizentheorie, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1986, S. 119 ff.