

ON HERMITIAN MATRICES ASSOCIATED WITH THE MATCHING
POLYNOMIALS OF GRAPHS, PART II.*

KONSTRUKTION VON GEWICHTSMATRIZEN FÜR BELIEBIGE, MIT K_4
HOMÖOMORPHE TRIZYKLISCHE GRAPHEN, WELCHE DAS MATCHING POLYNOM
DES GRAPHEN ERZEUGEN.

Oskar E. Polansky und Ante Graovac**

Max-Planck-Institut für Strahlenchemie, D-4330 Mülheim a. d. Ruhr

(Received: September 1986)

ABSTRACT

By means of quaternionic edge weights for the K_4 a particular weight matrix $\underline{W}(K_4)$ is constructed. It may be adapted for any graph homeomorphic with K_4 and generates the matching polynomials of these graphs. It is shown that such a matrix $\underline{W}(K_4)$ cannot be explicitly given when complex edge weights are used.

(1) Aufgabenstellung

Zum Unterschied von dem charakteristischen Polynom $\Phi(G;x)$ eines Graphen G , welches über das Eigenwertproblem der Adjazenzmatrix $\underline{A}(G)$ definiert ist

$$\Phi(G;x) = \det [x\underline{I} - \underline{A}] \quad , \quad (1)$$

ist das Matching Polynom $\alpha(G;x)$ in kombinatorischer Weise wie folgt

* Teil I: siehe [1]

** Permanente Adresse: "Ruder Bosković" Institute, YU-41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

festgelegt:

$$\alpha(G; x) = \sum_{k=0}^{n/2} (-1)^k p(G, k) x^{n-2k} ; \quad (2)$$

darin stellt n die Zahl der Knoten von G dar und $p(G, k)$ gibt an, auf wieviele unterschiedliche Weisen k unabhängige Kanten aus dem Kantenvorrat von G gewählt werden können. Entsprechend ihrer Bedeutung sind die $p(G, k)$ natürliche Zahlen; $p(G, 0) = 1$.

Die beiden Polynome stehen bekanntlich in engem Zusammenhang: Entwickelt man zum Beispiel die Determinante $RS(1)$ (d.h.: rechte Seite von Gl. (1)) gemäß

$$D = \sum_{\{\hat{P}\}} (-1)^{\hat{P}} \hat{P} D_{11} D_{22} \dots D_{nn} \quad (3)$$

worin \hat{P} einen auf die Spaltenindizes wirkenden Permutationsoperator und p die Parität der betreffenden Permutation darstellen, so erhält man zwei Typen von Beiträgen zur $RS(3)$, nämlich solche, welche nur aus Transpositionen bestehen, also die Zyklenstruktur $[1]^{n-2\alpha} [2]^{\alpha}$ haben, und solche, an denen auch Zyklen mit Längen $\ell > 2$ beteiligt sind, z.B. $[1]^{n-2\alpha-\lambda} [2]^{\alpha} [\ell]^{\lambda}$. In den Sachs-Graphen $[2]$, welche die Permutationen der $RS(3)$ graphisch darstellen, sind die ersteren durch einen aus αK_2 bestehenden Teilgraph von G dargestellt, während der dem letztgenannten Beispiel entsprechende Sachs-Graph aus αK_2 und λC_{ℓ} besteht. Mit den Koeffizienten $p(G, k)$ des Matching Polynoms wird genau die Zahl der in $RS(3)$ auftretenden Permutationen der Zyklenstruktur $[1]^{n-2k} [2]^k$ abgezählt.

Zumeist werden diese Verhältnisse mit der Feststellung ausgedrückt, im Matching Polynom seien alle zyklischen Beiträge unterdrückt. Formal kann dem auf unterschiedliche Weise Rechnung getragen werden: Einmal, indem man - gewissermaßen von "außen her" -

dem vom Kreis $Z_a \in G$ herrührenden Beitrag $\phi(G-Z_a; x)$ zu $\phi(G; x)$ ein Gewicht, t_a , zuordnet, welches im Bedarfsfall Null gesetzt werden kann und damit den betreffenden Beitrag zum Verschwinde bringt; diese Möglichkeit ist im μ -Polynom, $\mu(G; x)$, realisiert [3]. Eine andere Möglichkeit ist, die cyclischen Beiträge zu $\phi(G; x)$ - gewissermaßen von "innen her" - zum Verschwinden zu bringen, indem man dem Graphen G eine Gewicht-Matrix, $\underline{W}(G)$, zuordnet, deren charakteristisches Polynom, $\phi(\underline{W}; x)$, mit dem Matching Polynom des Graphen, $\alpha(G; x)$, übereinstimmt:

$$\alpha(G; x) = \phi(\underline{W}(G); x) = \det [x\underline{I} - \underline{W}] = W(\underline{W}_{rs}) . \quad (4)$$

Diesem Gedankengang wurde erstmals in [4] und [5] nachgegangen; in der Folge konnten solche Matrizen für bestimmte weitere Graphen aufgefunden werden: in [6] werden einige solche Ergebnisse berichtet und ältere referiert; in [1] sind weitere Beispiele angegeben.

Welchen Anforderungen die Elemente \underline{W}_{rs} von \underline{W} erfüllen müssen, sieht man am besten, wenn man die Determinante W der RS(4) entwickelt:

$$W = \sum_{\{P\}} (-1)^P \hat{P} W_{11} W_{22} \dots W_{nn} . \quad (5)$$

Angenommen, G enthält einen Kreis Z mit der Länge ℓ , dem die Knoten r , $1 \leq r \leq \ell$, $r \text{ adj } r+1$, $\ell \text{ adj } 1$, angehören, dann enthält die RS(5) Terme, welche sich zu den beiden folgenden Ausdrücken zusammenfassen lassen:

$$(-1)^{\ell-1} W_{12} W_{23} \dots W_{\ell-1 \ell} W_{\ell 1} \phi(\underline{W}(G-Z); x) , \quad (6a)$$

$$(-1)^{\ell-1} W_{1\ell} W_{\ell \ell-1} \dots W_{32} W_{21} \phi(\underline{W}(G-Z); x) . \quad (6b)$$

Dabei entspricht (6a) dem Kreis Z , wenn dieser in der Richtung von 1 über 2 nach ℓ durchlaufen wird und (6b) dem Kreis Z mit umge-

kehrtem Richtungssinn. Im Interesse einer konzisen Notierung kürzen wir die in (6a) bzw. (6b) auftretenden Gewichtsfunktionen wie folgt ab:

$$W(Z \rightarrow) = W_{12} W_{23} \dots W_{\ell-1 \ell} W_{\ell 1} \quad , \quad (7a)$$

$$W(Z \leftarrow) = W_{1 \ell} W_{\ell \ell-1} \dots W_{32} W_{21} \quad . \quad (7b)$$

Da \underline{W} hermitisch ist, gilt für jeden Kreis

$$W(Z \rightarrow) = W(Z \leftarrow)^* \quad . \quad (8)$$

Die Matrix $\underline{W}(G)$ entspricht nur dann den an sie geknüpften Erwartungen, wenn man entweder für jeden Kreis $Z \in G$

$$W(Z \rightarrow) + W(Z \leftarrow) = 0 \quad (9)$$

erhält (sogenannte triviale Lösung) oder zumindest diejenigen Gewichtsfunktionen, welche gleiche Kofaktoren haben, z.B.

$$\Phi(\underline{W}(G-Z_1); x) = \Phi(\underline{W}(G-Z_2); x) = \dots \quad ,$$

in Summe Null ergeben (sogenannte kollektive Lösung). Im Hinblick auf (8) ist aber (9) nur dann erfüllt, wenn die Realteile von $W(Z \rightarrow)$ und $W(Z \leftarrow)$ gleich Null sind:

$$\operatorname{Re}\{W(Z \rightarrow)\} = \operatorname{Re}\{W(Z \leftarrow)\} = 0 \quad . \quad (10)$$

Die Matrix $\underline{W}(G)$ muß aber noch eine weitere Bedingung erfüllen, nämlich, die Entwicklung der Determinante W gemäß RS(5) muß die Koeffizienten $p(G,k)$ des Matching Polynoms korrekt reproduzieren, d.h. für jede in RS(5) auftretende, nur aus unabhängigen Transpositionen bestehende Permutation muß die Gewichtsfunktion den Wert 1 annehmen. Dies trifft auch für diejenigen Permutationen zu, welche nur aus einer einzigen Transposition, sagen wir der Vertau-

schung der Spaltenindices r und s , bestehen. Da das Gewicht dieser Vertauschung $W_{rs}W_{sr}$ beträgt, müssen alle von Null verschiedenen Elemente von $\underline{W}(G)$ der nachstehenden Bedingung genügen:

$$W_{rs}W_{sr} = 1 \quad . \quad (11)$$

Mit (9) und (11) sind diejenigen Bedingungen formuliert, welche notwendig und hinreichend sind, damit $\underline{W}(G)$ den Ansatz (4) erfüllt; umgekehrt kann man sagen, daß jede $n \times n$ Matrix, welche (9) und (11) erfüllt, auch (4) genügt.

In den Mitteilungen dieser Reihe befassen wir uns mit dem Auffinden derartiger Matrizen \underline{W} , vorzugsweise für polyzyklische Graphen. In der vorliegenden Mitteilung berichten wir über die Auffindung einer ganzen Familie solcher Matrizen \underline{W} für den vollständigen Graph K_4 . Da diese Matrizen $\underline{W}(K_4)$ die Bedingung (9) für jeden Kreis erfüllen, können sie mit Hilfe der weiter unten beschriebenen Prozedur auf jeden beliebigen, mit K_4 homöomorphen Graph übertragen werden. Wir lösen hier zugleich die Aufgabe, für einen periodisierten trizyklischen Graph G eine Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$ so zu konstruieren, daß sie (4) genügt. Damit wird es möglich, die Eigenwerte der Matching Polynome $\alpha(G)$ dieser Graphen in vorteilhafter Weise als Eigenwerte der Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$ zu berechnen; einige hierfür nützliche Hinweise finden sich in [7].

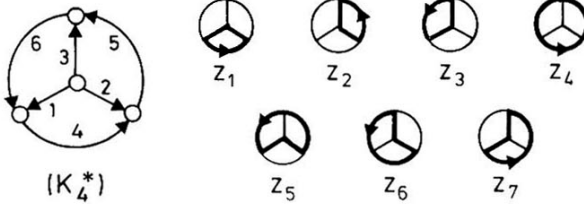
Allerdings konnten diese Ergebnisse nicht mit Hilfe der üblicherweise benutzten komplexen Bogengewichte wie z.B. $\exp(i\theta_{rs})$ erzielt werden, sondern wir mußten die Bogengewichte dem erweiterten Zahlensystem der Quaternionen entnehmen. Im nächsten Abschnitt zeigen wir, daß dies tatsächlich nötig ist, indem wir beweisen, daß keine triviale Lösung der Aufgabe für den K_4 im Bereich des Kör-

pers der komplexen Zahlen möglich ist. Nach einer kurzen Rekapitulation der Eigenschaften der Quaternionen im darauffolgenden Abschnitt geben wir die Herleitung unserer Ergebnisse mit den für eine eventuelle Nachrechnung nötigen Details; wir meinen, diese Details geben zu sollen, weil unseres Wissens Quaternionen in der Graphentheorie bisher noch nie angewendet worden sind und sie auch nur in wenigen anderen Gebieten der mathematischen Chemie, und dort nur sehr spärliche Verwendung finden. Außerdem ist die von uns hierbei benützte Methodik allgemein anwendbar.

Die hier berichteten Ergebnisse werfen ein neues Licht auf die allgemeine Frage, ob für jeden schlichten Graphen G eine Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$ existiert, welche (4) genügt; wir gehen aber auf diese Frage an anderer Stelle [8] ein.

(2) Gewichtsmatrizen $\underline{W}(K_4)$ mit komplexen Bogengewichten

Die zu dieser Thematik erzielten positiven Ergebnisse sind in [1] dargestellt. Wir zeigen hier lediglich, daß unter Benutzung komplexer Bogengewichte keine Matrix $\underline{W}(K_4)$ konstruiert werden kann, welche (9) für jeden der 7 Kreise von K_4 befriedigt. Zu diesem Zweck ersetzen wir den K_4 in der in [1] erörterten Weise durch den Digraph K_4^* , wählen für jede Kante von K_4 einen Bogen im K_4^* , bezeichnen diese Bögen mit den Nummern $r = 1, 2, \dots, 6$ und ordnen ihnen schließlich die komplexen Bogengewichte $\exp(i\theta_r)$ zu. Die Bezeichnung der Bögen und ihr Richtungssinn ist nachstehend schematisch dargestellt; gleichzeitig geben wir die Bezeichnungsweisen der Kreise bzw. Semikreise $Z_t \in K_4^*$, $t = 1, 2, \dots, 7$ und deren Richtungssinn in schematischer Form an.



Aus den Bogengewichten ergeben sich die Gewichte der Kreise Z_t wie folgt:

$$W(Z_t \rightarrow) = \exp(i\Omega_t) , \quad \Omega_t = \sum_{r \in Z_t} \theta_r , \quad (12)$$

wobei bei der Bildung von Ω_t die relativen Richtungen des Bogens $r \in Z_t$ und des Kreises zu beachten sind. So erhält man z.B. für den Semi-Kreis $Z_1 \in K_4^*$ die Gewichtsfunktion

$$W(Z_1 \rightarrow) = \exp(i\theta_1) \exp(i\theta_4) \exp(-i\theta_2) = \exp(i\Omega_1) ;$$

das Argument für $W(Z_1 \rightarrow)$ beträgt also

$$\Omega_1 = \theta_1 - \theta_2 + \theta_4 .$$

In Tabelle 1 sind die Argumente der Gewichtsfunktionen aller Kreise $Z_t \in K_4$ angegeben. Wie zu erwarten, sind sie linear abhängig; so findet man unter anderem:

$$\Omega_1 + \Omega_2 + \Omega_3 - \Omega_4 = 0 ,$$

$$\Omega_5 + \Omega_6 + \Omega_7 - 2 \Omega_4 = 0 .$$

Tabelle 1: Argumente der Kreisgewichte

$$W(Z_\lambda \rightarrow) = \exp(i\Omega_\lambda) , \quad \Omega_\lambda = \sum \theta_r , \quad r \in Z_\lambda .$$

	θ_1	θ_2	θ_3	θ_4	θ_5	θ_6	$[\pi/2]$
Ω_1	1	-1		1			2a+1
Ω_2		1	-1		1		2b+1
Ω_3	-1		1			1	2c+1
Ω_4				1	1	1	2d+1
Ω_5	-1	1			1	1	2e+1
Ω_6		-1	1	1		1	2f+1
Ω_7	1		-1	1	1		2g+1

Wenn die Gewichtsfunktion eines jeden Kreises gemäß (9) Null sein soll, muß im Hinblick auf (10) für jeden Kreis Z_t gelten

$$\operatorname{Re}\{W(Z_t \rightarrow)\} = \cos \Omega_t = 0 , \quad (13a)$$

d.h. alle Argumente Ω_t müssen ungerade Vielfache von $\pi/2$ sein:

$$\Omega_t = (2 m_t + 1) \frac{\pi}{2} . \quad (13b)$$

Dies ist in der rechten Spalte von Tabelle 1 eingetragen, wobei a,b,...,g ganze Zahlen sind.

Nun zeigt aber Tabelle 1, daß alle Argumente, welche Kreisen der Länge 4 zugeordnet sind, als Summe von zwei Argumenten dargestellt werden können, welche Kreisen der Länge 3 zugeordnet sind, nämlich:

$$\begin{aligned}\Omega_5 &= \Omega_2 + \Omega_3 = \Omega_4 - \Omega_1 \quad , \\ \Omega_6 &= \Omega_3 + \Omega_1 = \Omega_4 - \Omega_2 \quad , \\ \Omega_7 &= \Omega_1 + \Omega_2 = \Omega_4 - \Omega_3 \quad .\end{aligned}\tag{14}$$

Wählt man die Ω_r , $r = 1, 2, \dots, 6$ so, daß für alle 3-gliedrigen Kreise (13a) und (13b) erfüllt sind, so erhält man für Ω_4 , Ω_5 und Ω_6 ganzzahlige Vielfache von π ; im Widerspruch zu (13a) betragen dann die Realteile der Gewichte der 4-gliedrigen Kreise ± 1 . Dieser Widerspruch tritt immer wieder auf, gleichgültig, welchen Ω_t 's man den Wert $\pi/2$ zuteilt. Damit ist gezeigt, daß für den K_4 keine Gewichtsmatrix $\underline{W}(K_4)$ gefunden werden kann, deren Elemente komplexe Zahlen sind und bei deren Entwicklung gemäß (5) jeder Kreis für sich ein Gewicht von Null erhält.

Damit bestätigen und ergänzen wir die diesbezüglichen Angaben von [6]. Zum Unterschied von [6] wollen wir aber daraus nicht schließen, daß eine solche Matrix für K_4 nicht existiere; im Gegenteil meinen wir, daß der aus (14) folgende Widerspruch eine Folge der geringen Flexibilität der komplexen Bogengewichte ist. Jede, wegen (11) auf 1 normierte komplexe Zahl, $a + bi = \exp(i\theta)$, $a^2 + b^2 = 1$, stellt ja nur einen variierbaren Parameter, θ , zur Verfügung; die 6 komplexen Gewichte der Bögen des (K_4^*) ergeben also 6 Parameter. Mit diesen 6 Parametern muß die Bedingung (9) aber für die 7 Kreise des K_4 erfüllt werden. Es ist daher nicht verwunderlich, daß dies nicht widerspruchsfrei gelingt.

Die Richtigkeit unserer Vermutung, für die Lösung unserer Aufgabe reiche die Flexibilität komplexer Bogengewichte nicht aus, läßt sich einfach durch die Verwendung quaternionischer Bogengewichte überprüfen; sie sollten eine wesentlich größere Flexibilität haben,

da jedes wegen (11) auf 1 normierte Quaternion 3 variierbare Parameter, die quaternionischen Gewichte der 6 Bögen des K_4 also insgesamt 18 variierbare Parameter zur Verfügung stellen, womit die Bedingung (9) für jeden der 7 Kreise $Z_t \in K_4$ erfüllbar sein sollte. Wie wir im übernächsten Abschnitt zeigen, läßt sich diese Erwartung in der Tat realisieren.

(3) Quaternionen

Die letzten sechs Jahre seines Lebens hat Sir William Rowan Hamilton (*4.8.1805, Dublin; †2.9.1865, Dunsink) der Entwicklung der "Elements of Quaternions" [9] gewidmet; mit den Quaternionen hat er den Körper der komplexen Zahlen erweitert.

Quaternionen sind Zahlen, die auf der Basis $\{1, \underline{i}, \underline{j}, \underline{k}\}$ definiert sind. Darin sind \underline{i} , \underline{j} und \underline{k} orthogonale Vektoren der Länge $\sqrt{-1}$ und unterliegen daher den folgenden Relationen:

$$\underline{i}^2 = -1 \quad , \quad \underline{j}^2 = -1 \quad , \quad \underline{k}^2 = -1 \quad ; \quad (15)$$

$$\underline{i}\underline{j} = -\underline{j}\underline{i} = \underline{k} \quad , \quad \underline{j}\underline{k} = -\underline{k}\underline{j} = \underline{i} \quad , \quad \underline{k}\underline{i} = -\underline{i}\underline{k} = \underline{j} \quad ; \quad (16)$$

$$\underline{i}\underline{j}\underline{k} = \underline{j}\underline{k}\underline{i} = \underline{k}\underline{i}\underline{j} = -1 \quad ; \quad (17)$$

$$\underline{k}\underline{j}\underline{i} = \underline{j}\underline{i}\underline{k} = \underline{i}\underline{k}\underline{j} = +1 \quad . \quad (18)$$

Eine beliebige Quaternion Q und die zu ihr konjugierte Quaternion Q* werden wie folgt notiert:

$$\begin{aligned} Q &= S + A\underline{i} + B\underline{j} + C\underline{k} \quad , \\ Q^* &= S - A\underline{i} - B\underline{j} - C\underline{k} \quad , \end{aligned} \quad (19)$$

worin S, A, B und C reelle Zahlen sind. Die Größe S nennt man den Skalarteil der Quaternion und $(A\underline{i} + B\underline{j} + C\underline{k})$ ihren Vektorteil. Da dieser stets imaginär ist, ist der Skalarteil einer Quaternion zugleich ihr Realteil.

Quaternionen können auch alternativ wie folgt notiert werden

$$Q = S + R\underline{V} \quad , \quad Q^* = S - R\underline{V} \quad , \quad (20)$$

worin \underline{V} einen auf der Teilbasis $\{\underline{i}, \underline{j}, \underline{k}\}$ definierten Vektor darstellt:

$$\underline{V} = A'\underline{i} + B'\underline{j} + C'\underline{k} \quad . \quad (20a)$$

Diese Notierung macht die Aufteilung der Quaternion in skalaren und vektoriellen Teil besonders deutlich. Wenn

$$A = RA' \quad , \quad B = RB' \quad , \quad C = RC' \quad (20b)$$

gilt, sind die in (19) und (20) angegebenen Quaternionen identisch.

Quaternionen unterliegen den Gesetzen der assoziativen und kommutativen Addition; so gilt

$$Q_1 + Q_2 + Q_3 = (Q_1 + Q_2) + Q_3 = Q_1 + (Q_2 + Q_3) \quad ; \quad Q_1 + Q_2 = Q_2 + Q_1 \quad .$$

Bei der Multiplikation befolgen sie das Gesetz der Assoziativität, kommutieren mit Skalaren, S , kommutieren aber in der Regel nicht miteinander:

$$Q_1 Q_2 Q_3 = (Q_1 Q_2) Q_3 = Q_1 (Q_2 Q_3) \quad ; \quad SQ = QS \quad ; \quad Q_1 Q_2 \neq Q_2 Q_1 \quad .$$

Ihre nicht-kommutativen Eigenschaften bei der Multiplikation gehen auf die in (16) gegebenen Eigenschaften der Basisvektoren zurück.

Eine Ausnahme von der Regel ist nur bei Quaternionen gegeben, die denselben Vektor \underline{V} enthalten. Es sei $Q_1 = S_1 + R_1\underline{V}$ und $Q_2 = S_2 + R_2\underline{V}$, dann erhält man

$$\begin{aligned} Q_1 Q_2 &= [S_1 + R_1 \underline{V}][S_2 + R_2 \underline{V}] = \\ &= S_1 S_2 + (S_1 R_2 + R_1 S_2) \underline{V} + R_1 R_2 \underline{V}^2 ; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Q_2 Q_1 &= [S_2 + R_2 \underline{V}][S_1 + R_1 \underline{V}] = \\ &= S_2 S_1 + (S_2 R_1 + R_2 S_1) \underline{V} + R_2 R_1 \underline{V}^2 . \end{aligned}$$

Wie der Vergleich der beiden Ausdrücke zeigt, gilt in diesem Falle tatsächlich $Q_1 Q_2 = Q_2 Q_1$.

Da konjugierte Quaternionen, Q und Q^* denselben Vektor \underline{V} enthalten, kommutieren sie.

Für das Produkt eines Paares konjugierter Quaternionen erhält man:

$$Q Q^* = Q^* Q = |Q|^2 = S^2 + A^2 + B^2 + C^2 .$$

Quaternionen, für welche die Norm $|Q|^2 = 1$ beträgt, heißen normiert. Wir notieren normierte Quaternionen durch Klein-Buchstaben wie folgt:

$$q = \sigma + \alpha \underline{i} + \beta \underline{j} + \gamma \underline{k} = \sigma + \rho \underline{v} , \quad (21)$$

$$\sigma^2 + \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1 ; \quad \sigma^2 + \rho^2 = 1 .$$

Darin stellt \underline{v} einen normierten Vektor dar:

$$\underline{v} = a \underline{i} + b \underline{j} + c \underline{k} , \quad a^2 + b^2 + c^2 = 1 , \quad (21a)$$

und die beiden in (21) gegebenen alternativen Notierungen sind durch

$$\alpha = \rho a , \quad \beta = \rho b , \quad \gamma = \rho c \quad (21b)$$

miteinander verbunden.

Für das Produkt zweier normierter Quaternionen erhält man:

$$\begin{aligned} q_1 q_2 &= [\sigma_1 + \alpha_1 \underline{i} + \beta_1 \underline{j} + \gamma_1 \underline{k}] [\sigma_2 + \alpha_2 \underline{i} + \beta_2 \underline{j} + \gamma_2 \underline{k}] = \\ &= (\sigma_1 \sigma_2 - \alpha_1 \alpha_2 - \beta_1 \beta_2 - \gamma_1 \gamma_2) + \underline{i} (\sigma_1 \alpha_2 + \alpha_1 \sigma_2 + \beta_1 \gamma_2 - \gamma_1 \beta_2) + \\ &+ \underline{j} (\sigma_1 \beta_2 + \beta_1 \sigma_2 + \gamma_1 \alpha_2 - \alpha_1 \gamma_2) + \underline{k} (\sigma_1 \gamma_2 + \gamma_1 \sigma_2 + \alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2) . \end{aligned}$$

Vertauscht man die Indices 1 und 2, erhält man aus LS(22) $q_2 q_1$; auf der RS(22) vertauschen in den Koeffizienten der Vektoren \underline{i} , \underline{j} und \underline{k} jeweils die beiden letzten Terme ihre Vorzeichen, der Rest der Terme und darunter der Skalarteil des Produktes bleibt ungeändert. Es sind daher die Realteile von $q_1 q_2$ und von $q_2 q_1$ einander gleich:

$$\operatorname{Re}(q_1 q_2) = \operatorname{Re}(q_2 q_1) = \sigma_1 \sigma_2 - \alpha_1 \alpha_2 - \beta_1 \beta_2 - \gamma_1 \gamma_2 . \quad (23a)$$

Gl. (22) gibt im Detail Auskunft, warum $q_1 q_2 \neq q_2 q_1$ ist; so erhält man aus (22) für den Kommutator der beiden Quaternionen den folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned} [q_1, q_2] &= q_1 q_2 - q_2 q_1 = \\ &= 2\{\underline{i}(\beta_1 \gamma_2 - \gamma_1 \beta_2) + \underline{j}(\gamma_1 \alpha_2 - \alpha_1 \gamma_2) + \underline{k}(\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2)\} . \end{aligned} \quad (23b)$$

Sind die vektoriellen Anteile von q_1 und q_2 Vielfache desselben Vektors \underline{v} , $q_1 = \sigma_1 + \rho_1 \underline{v}$ und $q_2 = \sigma_2 + \rho_2 \underline{v}$, so wird wegen (21b) die RS(23b) identisch Null, womit neuerlich belegt wird, daß Quaternionen, welche mit Hilfe desselben Vektors konstruiert sind, kommutieren.

Im allgemeinen aber kommutieren Quaternionen nicht; daher unterliegen ihre Exponentialfunktionen auch nicht dem Additionstheorem:

$$e^{q_1} e^{q_2} \neq e^{q_1 + q_2} . \quad (24)$$

Wir zeigen nun, daß die Produkte normierter Quaternionen eine normierte Quaternion ergeben. Es sei

$$q_R = q_1 q_2 \cdots q_{\ell-1} q_\ell \quad .$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} q_R q_R^* &= (q_1 q_2 \cdots q_{\ell-1} q_\ell) (q_1 q_2 \cdots q_{\ell-1} q_\ell)^* = \\ &= q_1 q_2 \cdots q_{\ell-1} \underbrace{q_\ell q_\ell^*}_{=1} q_{\ell-1}^* \cdots q_2^* q_1^* = \\ &= q_1 q_2 \cdots \underbrace{q_{\ell-1} q_{\ell-1}^*}_{=1} \cdots q_2^* q_1^* = \cdots = \\ &= q_1 q_2 q_2^* q_1^* = q_1 q_1^* = 1 \quad . \end{aligned} \quad \square$$

Nachstehend geben wir die Realteile für ein aus 3 bzw. 4 Quaternionen gebildetes Produkt an:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(q_1 q_2 q_3) &= \\ &= \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 - \rho_{12} \sigma_3 - \begin{vmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{vmatrix} ; \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(q_1 q_2 q_3 q_4) &= \\ &= \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \\ &- \rho_{12} \sigma_3 \sigma_4 - \begin{vmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{vmatrix} \cdot \sigma_4 - \begin{vmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_4 \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_4 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_4 \end{vmatrix} \cdot \sigma_3 - \\ &- \rho_{13} \sigma_2 \sigma_4 - \begin{vmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{vmatrix} \cdot \sigma_4 - \begin{vmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_4 \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_4 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_4 \end{vmatrix} \cdot \sigma_3 - \\ &- \rho_{14} \sigma_2 \sigma_3 - \begin{vmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{vmatrix} \cdot \sigma_4 - \begin{vmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_4 \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_4 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_4 \end{vmatrix} \cdot \sigma_3 - \\ &- \rho_{23} \sigma_4 \sigma_1 \\ &- \rho_{24} \sigma_3 \sigma_1 - \begin{vmatrix} \alpha_1 & \alpha_3 & \alpha_4 \\ \beta_1 & \beta_3 & \beta_4 \\ \gamma_1 & \gamma_3 & \gamma_4 \end{vmatrix} \cdot \sigma_2 - \begin{vmatrix} \alpha_2 & \alpha_3 & \alpha_4 \\ \beta_2 & \beta_3 & \beta_4 \\ \gamma_2 & \gamma_3 & \gamma_4 \end{vmatrix} \cdot \sigma_1 - \\ &- \rho_{34} \sigma_1 \sigma_2 - \begin{vmatrix} \alpha_1 & \alpha_3 & \alpha_4 \\ \beta_1 & \beta_3 & \beta_4 \\ \gamma_1 & \gamma_3 & \gamma_4 \end{vmatrix} \cdot \sigma_2 - \begin{vmatrix} \alpha_2 & \alpha_3 & \alpha_4 \\ \beta_2 & \beta_3 & \beta_4 \\ \gamma_2 & \gamma_3 & \gamma_4 \end{vmatrix} \cdot \sigma_1 - \\ &- \rho_{12} \rho_{34} + \rho_{13} \rho_{24} - \rho_{23} \rho_{14} ; \end{aligned} \quad (26)$$

darin steht $\rho_{\kappa\lambda}$ für

$$\rho_{\kappa\lambda} = \alpha_{\kappa}\alpha_{\lambda} + \beta_{\kappa}\beta_{\lambda} + \gamma_{\kappa}\gamma_{\lambda} \quad .$$

Wie (25) zeigt, sind die ersten vier Terme von (25) invariant bezüglich aller Vertauschungen der Reihenfolge der Quaternionen, der letzte Term, $\det(\alpha_1\beta_2\gamma_3)$, ist jedoch nur bezüglich der zyklischen Vertauschungen invariant; bei azyklischen Vertauschungen ändert die Determinante ihr Vorzeichen. Man erhält daher:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(q_1q_2q_3) &= \operatorname{Re}(q_2q_3q_1) = \operatorname{Re}(q_3q_1q_2) \neq \operatorname{Re}(q_3q_2q_1) = \\ &= \operatorname{Re}(q_2q_1q_3) = \operatorname{Re}(q_1q_3q_2) \quad . \end{aligned} \quad (27)$$

Dies steht nicht im Widerspruch zu

$$\operatorname{Re}(q_1q_2q_3) = \operatorname{Re}(q_3^*q_2^*q_1^*) \quad , \quad (27a)$$

denn bei der Anwendung von (25) auf $q_3^*q_2^*q_1^*$ ändert sowohl die Determinante als auch alle ihre Elemente das Vorzeichen; man kann daher $(-1)^3$ aus der Determinante herausheben und hat somit das Resultat

$$\begin{aligned} - [-\det((-\alpha_1)(-\beta_2)(-\gamma_3))] &= - [(-1)^3 \det(\alpha_1\beta_2\gamma_3)] = \\ &= - \det(\alpha_1\beta_2\gamma_3) \quad , \end{aligned}$$

womit (27a) bewiesen ist.

In ähnlicher Weise kann man aus (26) die Invarianz des Realteiles von $q_1q_2q_3q_4$ bei zyklischer Vertauschung der Quaternionen herleiten, so daß gilt:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(q_1q_2q_3q_4) &= \operatorname{Re}(q_2q_3q_4q_1) = \operatorname{Re}(q_3q_4q_1q_2) = \\ &= \operatorname{Re}(q_4q_1q_2q_3) \quad . \end{aligned} \quad (28)$$

Selbstverständlich gilt auch hier

$$\operatorname{Re}(q_4^* q_3^* q_2^* q_1^*) = \operatorname{Re}(q_1 q_2 q_3 q_4) \quad . \quad (28a)$$

Die Gln. (27) und (28) sind für die von uns geplanten Anwendungen von gewisser Bedeutung: Einmal läßt sich mit ihrer Hilfe durch die Methode der vollständigen Induktion herleiten, daß der Realteil eines aus beliebig vielen Quaternionen gebildeten Produkts durch die zyklische Vertauschung der Faktoren nicht geändert wird. Zum anderen zeigen sie, daß bei der Berechnung der Gewichtsfunktion eines Kreises, $q_1 q_2 q_3 \dots$, die Wahl des ersten Bogens dieses Kreises für den Realteil der Gewichtsfunktion ohne Belang ist.

Wie in (21) angegeben, ist $q = \sigma + \rho \underline{v}$ durch die Bedingung $\sigma^2 + \rho^2 = 1$ normalisiert. Die Parameter σ und ρ lassen sich daher als

$$\sigma = \cos \vartheta \quad , \quad \rho = \sin \vartheta$$

identifizieren, so daß man auch schreiben kann

$$q = \sigma + \rho \underline{v} = \cos \vartheta + \underline{v} \sin \vartheta \quad . \quad (29)$$

Diese Form ist besonders bequem, wenn die Produkte von Quaternionen, die denselben Vektor \underline{v} enthalten, angegeben werden sollen. So gilt für das Produkt $q_1 q_2$

$$\begin{aligned} q_1 &= \cos \vartheta_1 + \underline{v} \sin \vartheta_1 \quad , \\ q_2 &= \cos \vartheta_2 + \underline{v} \sin \vartheta_2 \quad , \end{aligned} \quad (30a)$$

$$q_1 q_2 = \cos (\vartheta_1 + \vartheta_2) + \underline{v} \sin (\vartheta_1 + \vartheta_2) \quad .$$

Damit ergeben sich für die Potenzen von $q = \cos \vartheta + \underline{v} \sin \vartheta$ für ganzzahlige n die folgenden Ausdrücke:

$$q^n = [\cos \vartheta + \underline{v} \sin \vartheta]^n = \cos n\vartheta + \underline{v} \cdot \sin n\vartheta \quad , \quad (30b)$$

$$q^{1/n} = [\cos \vartheta + \underline{v} \sin \vartheta]^{1/n} = \cos (\vartheta/n) + \underline{v} \cdot \sin (\vartheta/n) \quad . \quad (30c)$$

Die letzte Gleichung (30c) ist für unsere Zwecke dann von Bedeutung, wenn die für einen gegebenen Graphen erzielten Ergebnisse auf einen mit ihm homöomorphen Graphen übertragen werden sollen.

Weitere Einzelheiten über Quaternionen können dem eingangs zitierten, über tausend Seiten starken Werk [9] entnommen werden. Knappere Darstellungen finden sich in [10] und [11].

(4) Herleitung von $\underline{W}(K_4^*)$

Wir benutzen hier dieselbe Bezeichnung der Bögen und Kreise des K_4 , wie sie oben im Abschnitt 2 schematisch dargestellt sind. Jedem Bogen r , $1 \leq r \leq 6$, teilen wir ein quaternionisches Bogengewicht zu, nämlich

$$q_r = \sigma_r + \alpha_r \underline{i} + \beta_r \underline{j} + \gamma_r \underline{k} \quad (31)$$

d.h. das Element von $\underline{W}(K_4^*)$, welches dem Bogen r entspricht, ist durch (31) gegeben. Mit $q_r q_r^* = 1$ ist die Erfüllung von (11) gesichert.

Wir wünschen die Bogengewichte so zu wählen, daß für jeden Kreis $Z_t \in K_4$ die Gewichtsfunktion Null wird. Im Hinblick auf (9) und (10) müssen wir daher fordern, daß die Realteile der Gewichtsfunktionen für alle $t = 1, 2, \dots$ der folgenden Bedingung genügen

$$\operatorname{Re} \{W(Z_t \rightarrow)\} = 0 \quad (32)$$

Die Gewichtsfunktionen der 3-gliedrigen Kreise ($t = 1, 2, 3, 4$) sind durch bestimmte Produkte von je drei Quaternionen, die der 4-gliedrigen Kreise ($t = 5, 6, 7$) durch solche von je vier Quater-

nionen gegeben, deren Realteile in (25) bzw. (26) notiert sind. Man könnte also mit Hilfe dieser Ausdrücke die Bedingung (32) für die 7 Kreise des K_4 formulieren und für das erhaltene Gleichungssystem eine numerische Lösung suchen. Da im Hinblick auf die Normierung von q_r jedes Quaternion 3 variierbare Parameter α_r , β_r und γ_r besitzt (σ_r ergibt sich ja zu $\sigma_r = (1 - \alpha_r^2 - \beta_r^2 - \gamma_r^2)^{1/2}$ und ist daher durch die anderen Parameter festgelegt), also insgesamt 18 frei variierbare Parameter 7 Kreisbedingungen vom Typ (32) gegenüberstehen, ist ein derartiges Verfahren nicht ohne Vorgabe bestimmter Parameterwerte ausführbar. Wir haben es daher vorgezogen, von Anfang an einige Bogengewichte frei zu wählen und die anderen Gewichte den gewählten schrittweise anzupassen.

Bei der Wahl bestimmter Bogengewichte scheint einige Vorsicht geboten zu sein. Jedenfalls hatten uns einige Ansätze zu widersprüchlichen Ergebnissen geführt; in anderen Ansätzen erhielten wir zwar eine formale Lösung, doch waren nicht alle zu bestimmten Parameter reell, so daß diese "Lösungen" nicht akzeptiert werden konnten. Eine relativ einfache akzeptierbare Lösung erhielten wir mit dem folgenden Ansatz:

$$\begin{aligned} q_1 &= \underline{i} \quad , \\ q_2 &= s + \kappa(\underline{a}\underline{i} + \underline{b}\underline{j} + \underline{c}\underline{k}) \quad , \\ q_3 &= t + \lambda(\underline{a}\underline{i} + \underline{b}\underline{j} + \underline{c}\underline{k}) \quad , \\ q_4 &= \sigma + \alpha\underline{i} + \beta\underline{j} + \gamma\underline{k} \quad , \\ q_5 &= \underline{k} \quad , \\ q_6 &= \tau + \xi\underline{i} + \eta\underline{j} + \zeta\underline{k} \quad . \end{aligned} \tag{33}$$

In diesem Ansatz sind folgende willkürliche Festsetzungen enthalten:

Einmal sind für die unabhängigen Bögen 1 und 5 bestimmte Quaternionen bequemlichkeitshalber in der denkbar einfachsten Form angesetzt. Für die Quaternionen q_2 und q_3 ist derselbe Vektor $\underline{v} = a\underline{i} + b\underline{j} + c\underline{k}$ benutzt; sie können sich nur im Vorzeichen des vektoriellen Teiles und im Verhältnis von Skalar- und Vektorteil, s/κ bzw. t/λ , unterscheiden. Die Parameter der Quaternionen q_4 und q_6 hingegen sind vollkommen frei variierbar.

Mit dem Ansatz (33) sind ferner die folgenden Normalisierungsbedingungen gegeben:

$$a^2 + b^2 + c^2 = 1 \quad , \quad (34a)$$

$$s^2 + \kappa^2 = 1 \quad , \quad (34b)$$

$$t^2 + \lambda^2 = 1 \quad (34c)$$

$$\sigma^2 + \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1 \quad (34d)$$

$$\tau^2 + \xi^2 + \eta^2 + \zeta^2 = 1 \quad , \quad (34e)$$

wobei sich (34a) auf q_2 und q_3 , (34b) auf q_2 , (34c) auf q_3 , (34d) auf q_4 und (34e) auf q_6 beziehen .

Da die Quaternionen q_2 und q_3 denselben Vektor $\underline{v} = a\underline{i} + b\underline{j} + c\underline{k}$ enthalten, kommutieren sie. So erhält man u.a. $q_2 q_3^* = q_3^* q_2$ und dafür explicit:

$$\begin{aligned} q_2 q_3^* &= [s + \kappa(a\underline{i} + b\underline{j} + c\underline{k})][t - \lambda(a\underline{i} + b\underline{j} + c\underline{k})] = \\ &= (st + \kappa\lambda) - (s\lambda - t\kappa)(a\underline{i} + b\underline{j} + c\underline{k}) = q_3^* q_2 \quad . \end{aligned} \quad (35)$$

Mit diesem Hilfsergebnis läßt sich die Gewichtsfunktion des Semikreises Z_2 leicht angeben, nämlich

$$W(Z_2 \rightarrow) = q_3^* q_2 q_5 = \\ = [(s\lambda - t\kappa)c] - \underline{i}(s\lambda - t\kappa)b + \underline{j}(s\lambda - t\kappa)a + (st + \kappa\lambda)\underline{k} .$$

Der Realteil dieser Gewichtsfunktion ist daher

$$\operatorname{Re}(q_3^* q_2 q_5) = (s\lambda - t\kappa)c = 0 \quad (36)$$

Um (36) zu erfüllen, könnte man entweder $(s\lambda - t\kappa) = 0$ oder $c = 0$ wählen. Die erste Möglichkeit, nämlich $(s\lambda - t\kappa) = 0$, führt wegen (34b) und (34c) zu $\kappa^2 = \lambda^2$; das würde bedeuten, daß q_2 und q_3 entweder gleich ($\kappa = \lambda$) oder konjugiert ($\kappa = -\lambda$) sind. Da jede dieser Konsequenzen die Flexibilität unseres Gewichtssatzes (33) stark einschränken könnte, haben wir uns entschlossen, (36) durch

$$c = 0 \quad (37)$$

zu befriedigen. Damit werden die ursprünglichen Ansätze für q_2 und q_3 geändert zu

$$q_2 = s + \kappa(\underline{a}_i + b\underline{j}) \quad , \\ q_3 = t + \lambda(\underline{a}_i + b\underline{j}) \quad , \quad (38) \\ a^2 + b^2 = 1 \quad ;$$

gleichzeitig ist aber die Kreisbedingung für Z_2 erfüllt.

In ähnlicher Weise erhält man die Gewichtsfunktionen für die verbleibenden sechs Kreise von K_4 . Nachstehend geben wir die Realteile dieser Gewichtsfunktionen an:

$$Z_1: \operatorname{Re}(q_4 q_2^* q_1) = \sigma\kappa a - \alpha s - \gamma\kappa b = 0 \quad ; \quad (39)$$

$$Z_3: \operatorname{Re}(q_3 q_6 q_1^*) = \tau\lambda a + \xi t + \zeta\lambda b = 0 \quad ; \quad (40)$$

$$Z_4: \operatorname{Re}(q_6 q_4 q_5) = -[\tau\gamma + \xi\beta - \eta\alpha + \zeta\sigma] = 0 \quad ; \quad (41)$$

$$Z_5: \operatorname{Re}(q_5 q_6 q_1^* q_2) = \tau\kappa b - \eta s - \zeta\kappa a = 0 \quad ; \quad (42)$$

$$\begin{aligned}
 z_6: \operatorname{Re}(q_6 q_4 q_2 q_3^*) &= \\
 &= \tau[(st + \kappa\lambda)\sigma + (s\lambda - t\kappa)(\alpha a + \beta b)] + \\
 &+ \xi[-(st + \kappa\lambda)\alpha + (s\lambda - t\kappa)(\sigma a - \gamma b)] + \quad (43) \\
 &+ \eta[-(st + \kappa\lambda)\beta + (s\lambda - t\kappa)(\gamma a + \sigma b)] + \\
 &+ \zeta[-(st + \kappa\lambda)\gamma - (s\lambda - t\kappa)(\beta a - \alpha b)] = 0 \quad ;
 \end{aligned}$$

$$z_7: \operatorname{Re}(q_3^* q_1 q_4 q_5) = -(\lambda a \gamma + t \beta + \lambda b \sigma) = 0 \quad . \quad (44)$$

Die Kreisbedingungen (40) - (43) bilden ein lineares homogenes Gleichungssystem in τ , ξ , η und ζ , dessen Bearbeitung wir vorerst zurückstellen. Die Kreisbedingungen (39) und (44) stellen gewisse Nebenbedingungen zu dem homogenen Gleichungssystem dar und sind offenbar von starkem Einfluß auf die Koeffizienten von τ , ξ , η und ζ in (40) - (43); wir wenden uns aus diesem Grund zuerst der Bearbeitung von (39) und (44) zu.

Gewinnt man aus (39) einen Ausdruck für b und setzt diesen in (44) ein, so erhält man für a wie folgt:

$$a = \frac{\alpha \sigma (s/\kappa) - \beta \gamma (t/\lambda)}{\sigma^2 + \gamma^2} \quad .$$

Um diesen Ausdruck zu vereinfachen, wählen wir

$$\alpha = \beta \quad , \quad (45)$$

wodurch q_4 zu

$$q_4 = \sigma + \alpha \underline{i} + \alpha \underline{j} + \gamma \underline{k} \quad , \quad \sigma^2 + 2\alpha^2 + \gamma^2 = 1 \quad (46)$$

und a zu

$$a = \alpha \frac{(s/\kappa)\sigma - (t/\lambda)\gamma}{\sigma^2 + \gamma^2} \quad (47)$$

geändert werden. Mit diesem Ausdruck für a erhält man aus (39) nun für b wie folgt:

$$b = -\alpha \frac{(t/\lambda)\sigma + (s/\kappa)\gamma}{\sigma^2 + \gamma^2} \quad (48)$$

Mit diesen Festlegungen (47) und (48) für a und b sind zugleich die Kreisbedingungen (39) und (44) befriedigt; es ist also nur mehr das durch (40) bis (43) gegebene homogene Gleichungssystem zu lösen.

Bevor wir uns aber dieser Aufgabe widmen, bearbeiten wir (47) und (48) weiter. Die Parameter a und b sind ja nicht voneinander unabhängig, sondern - wie in (38) angemerkt - durch die Normalisierungsbedingung $a^2 + b^2 = 1$ verbunden. Setzt man (47) und (48) in diese Bedingung ein, wodurch zugleich a und b eliminiert werden, erhält man nach ein wenig Algebra die Beziehung

$$\alpha^2 [\lambda^2 s^2 + \kappa^2 t^2] = \kappa^2 \lambda^2 (\sigma^2 + \gamma^2) \quad (49)$$

Trägt man in (49) die nachstehenden, aus den in (34b - c) und (46) angegebenen Normalisierungsbedingungen für q_2 , q_3 und q_4 gewonnenen Ausdrücke ein, nämlich

$$\begin{aligned} \sigma^2 + \gamma^2 &= 1 - 2\alpha^2 \quad , \\ s^2 &= 1 - \kappa^2 \quad , \\ t^2 &= 1 - \lambda^2 \quad , \end{aligned} \quad (50)$$

so ergibt sich nach ein wenig Algebra für α^2 der folgende Ausdruck:

$$\alpha^2 = \frac{\kappa^2 \lambda^2}{\kappa^2 + \lambda^2} \quad (51)$$

Mit (47) und (48) lassen sich ferner von den in (43) vorkommenden Faktoren die beiden folgenden vereinfachen, nämlich

$$\begin{aligned} \sigma a - \gamma b &= \alpha(s/\kappa) \quad , \\ \gamma a + \sigma b &= -\alpha(t/\lambda) \quad . \end{aligned} \quad (52)$$

Bei Berücksichtigung von (45) - (52) nehmen die Kreisbedingungen (40) - (43) die folgende Form an:

$$\tau \lambda a + \xi t + \zeta \lambda b = 0 \quad , \quad (40')$$

$$\tau \gamma + \xi \alpha - \eta \alpha + \zeta \sigma = 0 \quad , \quad (41')$$

$$-\tau \kappa b + \eta s + \zeta \kappa a = 0 \quad , \quad (42')$$

$$\begin{aligned} & \tau [(st + \kappa \lambda) \sigma + (s\lambda - t\kappa) \alpha (a+b)] + \\ & + \xi [-(st + \kappa \lambda) \alpha + (s\lambda - t\kappa) \alpha (s/\kappa)] + \\ & + \eta [-(st + \kappa \lambda) \alpha - (s\lambda - t\kappa) \alpha (t/\lambda)] + \\ & + \zeta [-(st + \kappa \lambda) \gamma - (s\lambda - t\kappa) \alpha (a-b)] = 0 \quad . \end{aligned} \quad (43')$$

Wie bereits bemerkt, bilden diese vier Gleichungen ein homogenes Gleichungssystem in τ , ξ , η und ζ . Bekanntlich hat ein solches System neben der trivialen Lösung $\tau = \xi = \eta = \zeta = 0$ dann und nur dann auch eine nicht-triviale Lösung, wenn die aus den Koeffizienten der Gleichungen gebildete Determinante D identisch Null ist:

$$D = 0 \quad . \quad (53)$$

Wir wählen (41') als erste Zeile und (43') als zweite Zeile von D. Um (43') übersichtlich notieren zu können, führen wir die folgenden Abkürzungen ein:

$$\begin{aligned} \chi &= s/\kappa \\ \psi &= t/\lambda \end{aligned} \quad (54)$$

$$E = (st + \kappa \lambda) = \kappa \lambda (\chi \psi + 1) \quad ,$$

$$F = (s\lambda - t\kappa) = \kappa \lambda (\chi - \psi) \quad .$$

Als dritte und vierte Zeile von D wählen wir (40') und (42'), nachdem wir (40') durch λ und (42') durch κ dividiert haben. Auf diesem

Wege erhalten wir für D die folgende Form:

$$D = \begin{vmatrix} \gamma & \alpha & -\alpha & \sigma \\ \sigma E + \alpha F(a+b) & -\alpha E + \alpha F\chi & -\alpha E - \alpha F\psi & -\gamma E - \alpha F(a-b) \\ a & \psi & 0 & b \\ -b & 0 & \chi & a \end{vmatrix} . \quad (55)$$

Entwickelt man D in Termen von E und F und macht man so oft wie möglich von $a^2 + b^2 = 1$, sowie von (50), (52) und (54) Gebrauch, so erhält man schließlich

$$D = \alpha^2(\chi^2 + \psi^2 + 2)[F(\chi - \psi) - E] - E\chi\psi = 0 . \quad (56)$$

Bevor wir (54) für E und F in (56) einsetzen, versuchen wir den Faktor $\alpha^2(\chi^2 + \psi^2 + 2)$ zu berechnen. Aus $s^2 + \kappa^2 = 1$ und $\chi = s/\kappa$ folgt

$$\kappa^2 = \frac{1}{\chi^2 + 1} ; \quad (57a)$$

in analoger Weise erhält man

$$\lambda^2 = \frac{1}{\psi^2 + 1} \quad (57b)$$

aus $t^2 + \lambda^2 = 1$ und $\psi = t/\lambda$. Trägt man diese beiden Ausdrücke in (51) ein, erhält man schließlich

$$\alpha^2(\chi^2 + \psi^2 + 2) = 1 , \quad (57c)$$

wodurch (56) vereinfacht wird zu

$$D = F(\chi - \psi) - E(\chi\psi + 1) = 0 . \quad (58)$$

Setzt man nun RS(54) für E und F in (58) ein und dividiert die so erhaltene Gleichung durch $\kappa\lambda$, so erreicht man endlich den Ausdruck

$$D = (\chi - \psi)^2 - (\chi\psi + 1)^2 = 0 , \quad (59)$$

der die notwendige und hinreichende Bedingung für eine nicht-triviale Lösung für τ , ξ , η und ζ angibt. Aus (59) ergeben sich zwei Lösungen für χ und ψ , nämlich

$$\chi - \psi = \pm(\chi\psi + 1)$$

woraus für χ_1 und χ_2 in expliciter Form folgt:

$$\chi_1 = + \frac{1 + \psi}{1 - \psi} \quad , \quad \chi_2 = - \frac{1 - \psi}{1 + \psi} \quad . \quad (60)$$

Die beiden Lösungen für χ stehen in den Relationen

$$\begin{aligned} \chi_1 \cdot \chi_2 &= -1 \quad , \\ \chi_1(-\psi) &= -\chi_2(\psi) \quad . \end{aligned}$$

In einem ψ/χ -Diagramm (siehe Abbildung 1) stellen χ_1 und χ_2 je eine gleichseitige Hyperbel dar, deren Assymptoten mit der ψ - und der χ -Achse parallel sind und sich für χ_1 im Punkt $\psi=1, \chi=-1$ und für χ_2 im Punkt $\psi=-1, \chi=1$ schneiden (sie sind in Abb. 1 nicht dargestellt). Jedes Wertepaar von ψ und χ , das einem Punkt dieser Hyperbeln entspricht, stellt eine Lösung der Aufgabe $D = 0$ dar; wir haben somit mit (59) eine ganze Familie von Lösungen erhalten. Aus der unendlichen Vielfalt der Lösungen wählen wir diejenige, für die neben (59) noch

$$\psi = -\chi \quad (61)$$

gilt. Setzen wir (61) in (59) ein, erhalten wir

$$\chi^4 - 6\chi^2 + 1 = 0 \quad (62)$$

als Bestimmungsgleichung für χ , und die Wurzeln

$$\begin{aligned} \chi_{1,2} &= -\psi_{1,2} = \pm(\sqrt{2} + 1) \quad , \\ \chi_{3,4} &= -\psi_{3,4} = \pm(\sqrt{2} - 1) \quad . \end{aligned} \quad (63)$$

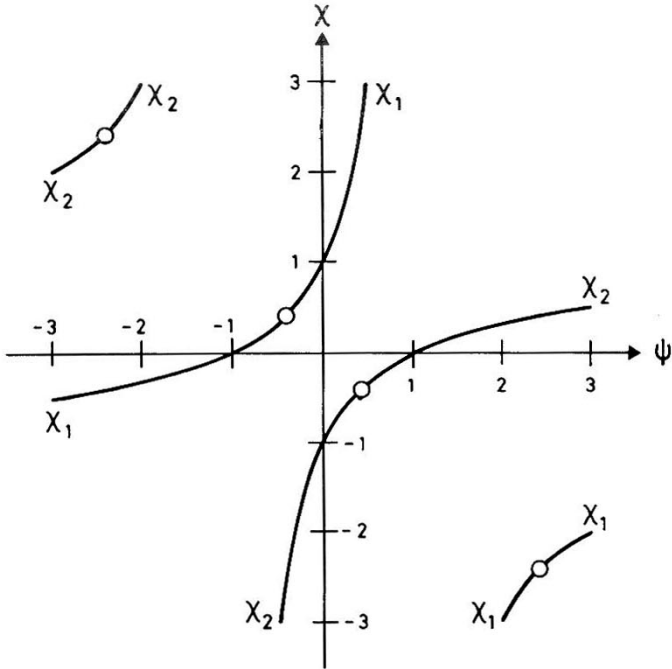


Abbildung 1: Graphische Darstellung von Gleichung (60)

Alle in (62) angegebenen Lösungen sind reell und daher akzeptierbar. Sie sind in Abb. 1 durch kleine Kreise gekennzeichnet.

Um τ , ξ , η und ζ ausrechnen zu können, müssen zunächst die Elemente der Determinante (55) unter Berücksichtigung von (61) reformuliert werden. Aus (57c) und (61) folgt

$$\alpha^2 = \frac{1}{2(\chi^2 + 1)}$$

womit sich weiter ergibt:

$$\sigma^2 + \gamma^2 = 1 - 2\alpha^2 = \frac{\chi^2}{\chi^2 + 1}$$

Da an das Verhältnis σ/γ keine Anforderung gestellt ist, können σ und γ innerhalb des durch die letzte Gleichung gesteckten Rahmens beliebig gewählt werden. Aus der unendlichen Vielfalt der Möglichkeiten wählen wir die einfachste, nämlich $\sigma = \gamma$. Somit erhalten wir die Parameter von q_4 wie folgt:

$$\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2(\chi^2+1)}} \quad , \quad \sigma = \gamma = \frac{\chi}{\sqrt{2(\chi^2+1)}} \quad (64)$$

Wenn wir diese Werte in die erste Zeile von (55) einsetzen, werden wir $\sigma = \gamma = \chi\alpha$ benutzen und dann die Zeile mit α durchkürzen.

Nachdem σ , α und γ durch (64) festgelegt sind, lassen sich bei Berücksichtigung von (61) a und b als Funktionen von χ ausdrücken. Aus (47) und (48) erhält man

$$a = 1 \quad , \quad b = 0 \quad ; \quad (65)$$

damit ist der Vektorteil von q_2 und q_3 auf $\underline{v} = \underline{1}$ festgelegt.

Wie (57a) und (57b) zeigen, werden mit (61) die Parameter κ und λ in die Beziehung

$$\kappa = \underline{+\lambda}$$

gesetzt. Von den beiden Möglichkeiten wählen wir

$$\kappa = \lambda = \frac{1}{\sqrt{\chi^2+1}} \quad (66)$$

Damit ergeben sich aus RS(54)

$$E = -\frac{\chi^2-1}{\chi^2+1} \quad , \quad F = \frac{2\chi}{\chi^2+1} \quad . \quad (67)$$

Setzt man (64) - (67) in die Determinante (55) ein und multipliziert die erste Zeile - wie bereits erwähnt - mit $1/\alpha = \sqrt{2(\chi^2+1)}$ und die zweite Zeile mit $(\chi^2+1)\sqrt{2(\chi^2+1)}$, so erhält man die nachstehende Form:

$$D = \begin{vmatrix} \chi & 1 & -1 & \chi \\ -\chi^3 + 3\chi & 3\chi^2 - 1 & 3\chi^2 - 1 & \chi^3 - 3\chi \\ 1 & -\chi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \chi & 1 \end{vmatrix} \quad (68)$$

Aus den ersten und den beiden letzten Zeilen von (68) erhält man die relativen Werte der Parameter von q_6 wie folgt:

$$\xi = \frac{\tau}{\chi} \quad , \quad \eta = \frac{\tau}{\chi} \quad , \quad \zeta = -\tau \quad . \quad (69)$$

Mit diesem Ergebnis führt die zweite Zeile von (68) zu

$$-\frac{2\tau}{\chi} [\chi^4 - 6\chi^2 + 1] = 0 \quad ,$$

was mit (62) übereinstimmt. Aus (69) und (34e) ergeben sich schließlich die folgenden absoluten Werte für die Parameter von q_6 :

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{1}{\sqrt{2(\chi^2+1)}} \quad , \\ \xi &= \frac{1}{\sqrt{2(\chi^2+1)}} \quad , \\ \eta &= \frac{1}{\sqrt{2(\chi^2+1)}} \quad , \\ \zeta &= -\frac{1}{\sqrt{2(\chi^2+1)}} \quad . \end{aligned} \quad (70)$$

Wir haben somit die Elemente für eine Gewichtsmatrix $\underline{W}(K_4)$ des vollständigen Graphen K_4 ,

$$\underline{W}(K_4) = \begin{bmatrix} 0 & q_1 & q_2 & q_3 \\ q_1^* & 0 & q_4 & q_6^* \\ q_2^* & q_4^* & 0 & q_5 \\ q_3^* & q_6 & q_5^* & 0 \end{bmatrix} \quad (71)$$

gefunden, welche die gewünschten Eigenschaften hat:

1. das charakteristische Polynom der Matrix, $\phi(\underline{W}(K_4);x)$ und das Matching Polynom $\alpha(K_4;x)$ sind wie in (4) gefordert, identisch;
2. sie produziert für jeden Kreis $Z_t \in K_4$ eine Gewichtsfunktion vom Werte Null.

Die Elemente von $\underline{W}(K_4)$ sind der Übersicht halber nachfolgend zusammengestellt:

$$\begin{aligned} q_1 &= \underline{i} \quad , \\ q_2 &= \chi^R \sqrt{2} + \underline{i}^R \sqrt{2} \quad , \\ q_3 &= \chi^R \sqrt{2} - \underline{i}^R \sqrt{2} \quad , \\ q_4 &= \chi^R + \underline{i}^R + \underline{j}^R + \underline{k}\chi^R \quad , \\ q_5 &= \underline{k} \quad , \\ q_6 &= \chi^R + \underline{i}^R + \underline{j}^R - \underline{k}\chi^R \quad ; \\ R &= [2(\chi^2 + 1)]^{-1/2} \end{aligned} \quad (72)$$

$$\chi_{1,2} = \pm (\sqrt{2} + 1) \quad , \quad \chi_{3,4} = \pm (\sqrt{2} - 1) \quad .$$

Wie bereits früher bemerkt, ist die durch (71) und (72) definierte Matrix durch die Festlegung $\psi = -\chi$ in (61) aus einer ganzen Familie

von $\underline{W}(K_4)$ ausgewählt (siehe Abb. 1), von denen jede die oben genannten Eigenschaften besitzt.

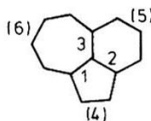
Da $\underline{W}(K_4)$ für jeden Kreis $Z_t \in K_4$ die Gewichtsfunktion $W(Z_t \rightarrow) = 0$ produziert, können ihre Gewichte in sinngemäßer Weise auf jeden tricyclischen Graph G übertragen werden, der mit K_4 homöomorph ist. Ein solcher Graph wird dadurch erhalten, daß die Kanten von K_4 durch eine gewisse Anzahl von Knoten geteilt werden. Es sei die Kante r durch n_r Knoten geteilt; dadurch entstehen aus der Kante r genau $n_r + 1$ Kanten. Im Digraph K_4^* zerfällt somit der Bogen r in eine Folge von $n_r + 1$ Bögen, deren Richtung durch die Richtung des ursprünglichen Bogens r festgelegt sei. Teilt man jedem dieser Bögen das Gewicht

$$(q_r)^{1/(n_r+1)}$$

zu, welches mit Hilfe von (30c) ermittelt werden kann, so erhält man q_r als Gewichtsfunktion für die durch die Teilung der Kante r entstandene Bogensequenz. Verföhrt man bei allen Bögen r , $1 \leq r \leq 6$, in gleicher Weise, so resultiert schließlich eine Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$, welche für jeden Kreis $Z_t \in G$ die Gewichtsfunktion Null liefert und somit, unabhängig von der Länge der Kreise $Z_t \in G$, bei ihrer Entwicklung gemäß (4) und (5) das Matching Polynom des tricyclischen Graphen G erzeugt:

$$(G; x) = \phi(\underline{W}(G); x) .$$

Für den nachstehenden Graph des peri-Benzoazulen-Radikals erhält man so für die peripheren Kanten des 5-, 6- und 7-Ringes



die Gewichte:

$$q_4^{1/3} = \cos \theta_4' + R_4(\underline{i} + \underline{j} + \chi \underline{k}) \sin \theta_4' , \\ \cos 3\theta_4' = \chi R \quad , \quad R = (\chi^2 + 2)^{-1/2} ;$$

$$q_5^{1/4} = \cos \frac{\pi}{8} + \underline{k} \sin \frac{\pi}{8} ;$$

$$q_6^{1/5} = \cos \theta_6' + R_6(\underline{i} + \underline{j} - \chi \underline{k}) \sin \theta_6' , \\ \cos 5\theta_6' = \chi R \quad ; \quad R = (\chi^2 + 2)^{-1/2} .$$

Mit diesem Beispiel ist die Übertragung der in (72) angegebenen Resultate auf einen mit K_4 homöomorphen Graph illustriert. Wie in [1] gezeigt wurde, läßt die Verwendung komplexer Bogengewichte nur eine kollektive Lösung für $\underline{W}(K_4)$ zu. Diese Resultate können nur auf mit K_4 homöomorphe Graphen übertragen werden, deren Symmetrie entweder mit der des K_4 übereinstimmt oder auf $E_1 \times S_3[E_{a+d+1}]$ reduziert ist, wobei a und d die in [1] angegebene Bedeutung haben (bezüglich der Notierung der Automorphismengruppe siehe [12]). Im Gegensatz hierzu ist die mit quaternionischen Bogengewichten erzielte Lösung für $\underline{W}(K_4)$ auf beliebige trizyklische, mit K_4 homöomorphe Graphen übertragbar.

Natürlich sind auch der Methode, Gewichtsmatrizen mit quaternionischen Elementen und den in (9) und (11) beschriebenen Eigenschaften zu konstruieren, gewisse Grenzen gesetzt. So wird eine ähnliche "triviale" Lösung für den K_5 wahrscheinlich nicht erzielbar sein, da der K_5 10 Kanten und insgesamt 37 Kreise besitzt; bei quaternionischen Gewichten würden also 30 variierbare Parameter zur Verfügung stehen, mit denen aber 37 Kreisbedingungen vom Typ (9) nicht erfüllbar sein dürften.

(5) Zusammenfassung

1. Mit dieser Arbeit wurden unseres Wissens erstmalig Quaternionen bei der Behandlung eines graphentheoretischen Problems verwendet.

2. Mit Hilfe quaternionischer Kantengewichte konnte eine Gewichtsmatrix für den K_4 erhalten werden, welche das Matching Polynom $\alpha(K_4; x)$ als charakteristisches Polynom $\phi(\underline{W}(K_4); x)$ produziert und für jeden Kreis $Z_t \in K_4$ eine mit Null identische Gewichtsfunktion liefert.

3. Infolge der letztgenannten Eigenschaft läßt sich für jeden trizyklischen Graph G , der mit K_4 homöomorph ist, aus $\underline{W}(K_4)$ eine Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$ gewinnen, welche dieselben allgemeinen Eigenschaften wie $\underline{W}(K_4)$ besitzt.

4. Durch diese Ergebnisse wird ein neues Licht auf die Frage geworfen, ob derartige Gewichtsmatrizen für jeden beliebigen schlichten Graph existieren, auf welche wir an anderer Stelle [8] eingehen.

(6) Danksagung

Einer von uns (A.G.) dankt der Max-Planck-Gesellschaft für die Finanzierung eines Gastaufenthaltes am Max-Planck-Institut für Strahlenchemie in Mülheim a. d. Ruhr.

(7) Literatur

- [1] A. Graovac, O.E. Polansky, MATCH, dieses Heft, voranstehende Arbeit.
- [2] H. Sachs, Publ. Math. (Debrecen) 11, 119 (1963).
- [3] I. Gutman, O.E. Polansky, Theoret. Chim. Acta 60, 203 (1981).
- [4] J. Aihara, Bull. Chem. Soc. Japan 52, 1529 (1979).
- [5] L.J. Schaad, B.A. Hess, J.B. Nation, N. Trinajstić, I. Gutman, Croat. Chem. Acta 52, 233 (1979).
- [6] I. Gutman, A. Graovac, B. Mohar, MATCH 13, 129 (1982) und dort zitierte Literatur.
- [7] A. Graovac, O.E. Polansky, Teil III dieser Reihe, MATCH, dieses Heft, anschließende Arbeit.
- [8] O.E. Polansky, A. Graovac, Teil IV dieser Reihe, MATCH, dieses Heft, zweitnächste Arbeit.
- [9] W.R. Hamilton, Elements of Quaternions (Ed. C.J. Joly), 2 Bände, Chelsea Publ., New York 1899, 1901. Nachdruck: 1969.
- [10] R. Gilmore, Lie Groups, Lie Algebras and Some of Their Applications, Wiley, New York 1974.
- [11] S.L. Altmann, Rotations, Quaternions, and Double Groups, Clarendon Press, Oxford 1986.
- [12] I. Gutman, O.E. Polansky, Mathematical Concepts in Organic Chemistry, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg 1986, Kapitel 9.