match no. 21 pp. 93-113 1986

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

ZUR EXISTENZ UND KONSTRUKTION VON MIT DEM MATCHING POLYNOM ASSOZIIERTEN GEWICHTSMATRIZEN FÜR POLYZYKLISCHE GRAPHEN

Oskar E. Polansky und Ante Graovac**

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

(Received: September 1986)

Abstract

It is proved that for every simple graph a Hermitian weight matrix exists which generates the matching polynomial of the graph. The well-known relation (18) between the matching polynomials of particular subgraphs proved earlier by induction [12] is derived from that weight matrix by means of the Jacobi-theorem.

Es wird gezeigt, daß für jeden schlichten Graphen eine hermitische Gewichtsmatrix existiert, welche das Matching Polynom erzeugt. Die bekannte, bisher durch Induktion [12] bewiesene Beziehung (18) wird mit Hilfe des Jacobi-Theorems aus dieser Matrix hergeleitet.

---

* Parts I-III siehe [1] bis [3]

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

1. Einleitung

In den ersten Mitteilungen dieser Reihe [1-3] haben wir uns mit der Auffindung einer Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$ für bestimmte polyzyklische Graphen G befaßt, deren charakteristisches Polynom $\Phi(\underline{W}(G);x)$ mit dem Matching Polynom $\alpha(G;x)$ des Graphen übereinstimmt:

$$\alpha(G;x) = \Phi(\underline{W}(G);x) = \det[x\underline{I}-\underline{W}] = W, \tag{1}$$

so daß $\alpha(G;x)$ durch Entwicklung der Determinante W gemäß

$$W = \sum_{\{P\}} (-1)^p \hat{P}\, W_{11}W_{22}\dots W_{nn} \tag{2}$$

erhalten wird. Wie dort im Detail gezeigt ist, muß $\underline{W}(G)$ die folgenden Eigenschaften besitzen:

1. Bei der Entwicklung von W muß genau die Zahl der Terme, welche durch k unabhängige Transpositionen der Spaltenindices entstehen, abgezählt werden, da deren Anzahl, p(G,k), den Koeffizienten von x^{n-2k} in $\alpha(G;x)$ darstellt.
2. Für die den Kreisen $Z_t \varepsilon G$ entsprechenden Terme in der Entwicklung (2) von W müssen Gewichtsfunktionen resultieren, welche diese Beiträge zum Verschwinden bringen.

Diese Eigenschaften besitzt $\underline{W}(G)$ sicher dann, wenn a) für jedes von Null verschiedene Elemente von $\underline{W}(G)$ gilt

$$W_{rs}W_{sr} = 1 \tag{3}$$

und wenn b) für jeden Kreis $Z_t \varepsilon G$ eine Gewichtsfunktion $W(Z_t)$ vom Werte Null erzeugt wird:

$$W(Z_t) = 0 \tag{4}$$

Im Hinblick auf (3) setzen wir

$$W_{rs} = W_{sr}^* \tag{5}$$

fest; es ist somit $\underline{W}(G)$ eine hermitische Matrix.

Eine Matrix $\underline{W}(G)$, welche der Bedingung (4) genügt, liefert die sogenannte "triviale" Lösung [4] des Problems; läßt sich hingegen das Verschwinden der zyklischen Beiträge nur dadurch bewirken, daß für geeignete Kollektionen von Kreisen die an sich von Null verschiedenen Kreisgewichte in ihrer Summe Null ergeben, spricht man von einer "kollektiven" Lösung. Wie sich zeigen läßt, kann für einen allgemeinen, symmetrielosen Graph - wenn überhaupt - nur eine triviale Lösung erzielt werden. Da wir uns aber hier mit der Frage der Existenz und der Konstruktion von Gewichtsmatrizen $\underline{W}(G)$ für beliebige schlichte polyzyklische Graphen befassen, sind hier nur triviale Lösungen von Interesse. Wenn wir in der Folge von einer Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$ sprechen, meinen wir aus diesem Grunde eine solche, die (4) erfüllt.

2. Polyzyklische Graphen

Wir nennen den Graphen G dann polyzyklisch, wenn er keinen Knoten vom Grad $g=1$ und mindestens zwei Knoten vom Grad $g>2$ enthält und wenn jeder Kreis von G mit mindestens einem anderen Kreis von G mindestens eine Kante gemeinsam hat.

Die Knoten vom Grad $g>2$ nennen wir Verzweigungsknoten. Sie sind paarweise durch Wege verbunden. Wir sagen, zwei Verzweigungsknoten seien benachbart, wenn sie durch mindestens einen Weg verbunden sind, der - abgesehen von den Endknoten - nur Knoten vom Grad $g=2$ enthält; einen solchen Weg nennen wir "Nachbarschaftsweg".

Es seien r und s benachbarte Verzweigungsknoten und P_{rs} ihr Nachbarschaftsweg. Die zu P_{rs} gehörenden Knoten vom Grad $g=2$ seien der Reihe nach mit $r+\kappa$, $\kappa=1,2,\ldots,s-r$, bezeichnet und es gelte $(r+\kappa)\mathrm{adj}(r+\kappa+1)$, sowie $r\ \mathrm{adj}(r+1)$. Die Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$ erzeugt für P_{rs} die Gewichte

$$\begin{aligned} W(P_{r\to s}) &= W_{r\ r+1}W_{r+1\ r+2}\cdots W_{s-2\ s-1}W_{s-1\ s}\ , \\ W(P_{r\leftarrow s}) &= W_{s\ s-1}W_{s-1\ s-2}\cdots W_{r+2\ r+1}W_{r+1\ r}\ . \end{aligned} \tag{6}$$

Infolge von (5) gilt

$$W(P_{r\to s}) = W(P_{r\leftarrow s})^{*}\ , \tag{7}$$

woraus wegen (3) weiter folgt

$$W(P_{r\to s})W(P_{r\leftarrow s}) = 1\ . \tag{8}$$

Gibt es zwischen benachbarten Verzweigungsknoten mehrere Nachbarschaftswege, so müssen diese durch ein Superscript, z.B.: P^1_{rs}, P^2_{rs}, usw. unterschieden werden.

Die Anzahl N der Nachbarschaftswege, welche G insgesamt enthält, ist durch den Knotengrad der Verzweigungsknoten bestimmt. Wenn $n(g)$ die Zahl der Knoten vom Grad g bezeichnet, so gilt

$$2N = \sum_{g>2} n(g). \tag{9}$$

Wir sagen, die Kreise eines polyzyklischen Graphen G seien anneliert, wenn alle Verzweigungsknoten von G dem längsten Kreis von G angehören; andernfalls bezeichenn wir sie als kondensiert.

Nach der oben gegebenen Erklärung des Begriffes "polyzyklischer Graph" sind Graphen, welche aus mehreren Kreisen bestehen, von denen zwei nur einen Knoten gemeinsam haben

("Spiro-Kreise"), von der Betrachtung ausgeschlossen. Wir haben dies mit Absicht getan. Bezüglich $\underline{W}(G)$ verhalten sich Spiro-Kreise wie isolierte Kreise und können wie diese behandelt werden [5-7].

Wie der Leser feststellen wird, sind die hier gegebenen Überlegungen auch auf polyzyklische Graphen mit Seitenketten direkt übertragbar; da aber die Darstellung der Verhältnisse für polyzyklische Graphen ohne Seitenketten einfacher ist, haben wir uns auf solche Graphen beschränkt.

3. Existenz von $\underline{W}(G)$ für beliebige polyzyklische Graphen G

Man kann die Frage nach der Existenz einer Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$ mit den in der Einleitung genannten Eigenschaften mit der Frage vereinen, ob eine solche Matrix auch explizit angeschrieben werden kann. In dieser Weise wurde diese Frage schon in [4] behandelt und verneint. Wir wollen hier die beiden Fragen getrennt halten. Selbstverständlich ist die explizite Angabe einer Matrix $\underline{W}(G)$ ein unanfechtbarer Beweis für ihre Existenz und sicher ein hinreichendes Existenzkriterium; wir stellen also hier in Frage, daß es auch ein notwendiges Kriterium ist.

Den Anstoß zu diesen Überlegungen haben die in [2] und [3] berichteten Ergebnisse gegeben, die aus diesem Grunde hier noch kurz referiert seien. In [2] haben wir einerseits gezeigt, daß für $\underline{W}(K_4)$ keine triviale Lösung erzielbar ist, wenn die Elemente von $\underline{W}(K_4)$ dem Körper der komplexen Zahlen entnommen werden; andererseits konnten wir zeigen, daß sich Familien von $\underline{W}(K_4)$ herleiten lassen, wenn die Matrixelemente dem erweiterten Zahlensystem der Quaternionen entnommen werden. In [3] geben wir - wieder mit Hilfe quaternionischer Gewichte - triviale Lösungen für einige, chemisch besonders interessante, polyzyklische Graphen an, für welche mit komplexen Gewichten nur kollektive Lösungen erzielt werden konnten [1,4,8].

Wir meinen aus diesen Ergebnissen den Schluß ziehen zu müssen, die explizite Angabe von $\underline{W}(G)$ hänge im wesentlichen von der Leistungsfähigkeit der uns zur Verfügung stehenden Ausdrucksmittel (d.h. der Flexibilität des Parametersatzes der Gewichte) ab und könne daher nicht ein notwendiges Kriterium für die Existenz von $\underline{W}(G)$ sein. Um die Frage der Existenz von $\underline{W}(G)$ für beliebige polyzyklische Graphen zu entscheiden, muß man sich unseres Erachtens daher auf andere Evidenzen stützen; in den beiden folgenden Abschnitten versuchen wir, solche allgemeinen Evidenzen herzuleiten.

In Bezug auf die oben erwähnte Flexibilität des Parametersatzes der Gewichte sei kurz angemerkt: sind die Elemente W_{rs} von $\underline{W}(G)$ komplexe Zahlen, dann hat man im Hinblick auf (3) je Element W_{rs} einen frei variierbaren reellen Parameter zur Verfügung; die Zahl der frei variierbaren reellen Parameter verdreifacht sich jedoch, wenn die Elemente W_{rs} durch Quaternionen dargestellt werden. Die Bedeutung dieses Unterschiedes wollen wir kurz am Beispiel des K_4 erläutern. Der K_4 enthält 6 Kanten; dem entsprechen 6 bzw. 18 frei variierbare reelle Parameter, je nachdem, ob man komplexe oder quaternionische Gewichte ansetzt. Da der K_4 7 Kreise enthält, müssen die Parameter 7 Kreisbedingungen vom Typ (4) angepaßt werden, damit $\underline{W}(G)$ eine triviale Lösung darstellt. Es ist einzusehen, daß dies mit den 6 frei variierbaren Parametern eines komplexen Gewichtssatzes nicht erzielbar ist.

In einem allgemeinen polyzyklischen Graph G kommt es weniger auf die den einzelnen Kanten zugeordneten Gewichte als auf die Gewichtsfunktionen $W(P_{r\to s})$ der Nachbarschaftswege an, was auch die in [3] benutzten Ansätze verdeutlichen. Nehmen wir an, G enthalte einen Kreis Z, der sich aus der geordneten Folge der Nachbarschaftswege $P_{r\to s}$, $P_{s\to t}$, $P_{t\to r}$ zusammensetze, was formal wie folgt ausgedrückt sei:

$$Z \to = P_{r\to s} \cup P_{s\to t} \cup P_{t\to r} \ . \tag{10}$$

Dann ergeben sich für Z die folgenden Gewichtsfunktionen

$$\begin{aligned} W(Z\to) &= W(P_{r\to s})\, W(P_{s\to t})\, W(P_{t\to r}) \quad , \\ W(Z\leftarrow) &= W(P_{t\to r})^{*} W(P_{s\to t})^{*} W(P_{r\to s})^{*} \quad , \end{aligned} \tag{11}$$

wobei von (7) Gebrauch gemacht wurde. Wie in [2] gezeigt ist, gilt für die Realteile dieser Gewichtsfunktionen

$$\mathrm{Re}\{W(Z\to)\} = \mathrm{Re}\{W(Z\leftarrow)\}. \tag{12}$$

so daß wir für jeden Kreis Z mit einer der in (11) angegebenen allgemeinen Gewichtsfunktionen auskommen, die dann mit W(Z) bezeichnet sei.

Wie mit (11) illustriert ist, kommt es in der Tat auf die Gewichtsfunktionen $W(P_{r \rightarrow s})$ an, wenn die Bedingung (4) für jeden Kreis von G formuliert wird. In (9) ist die Zahl der Nachbarschaftswege, die ein gegebener polyzyklischer Graph besitzt, angegeben. Bei Verwendung komplexer Gewichte stehen somit N, bei Verwendung quaternionischer Gewichte 3N frei variierbare Parameter zur Verfügung. Man könnte vermuten, eine triviale Lösung für $\underline{W}(G)$ ist immer dann erzielbar, wenn die Zahl der Kreise, von denen jeder eine Kreisbedingung (4) verursacht, geringer oder gleich der Zahl der variierbaren Parameter ist. Formal wird man sicher unter den genannten Umständen eine Lösung erzielen, es fragt sich nur, ob diese Lösung allen Parametern reelle Werte zuordnet und somit auch akzeptierbar ist. Jedenfalls darf man nicht erwarten, akzeptierbare Lösungen erzielen zu können, wenn die Zahl der Kreisbedingungen die Zahl der variierbaren Parameter übersteigt. Damit ist auch bei Verwendung quaternionischer Gewichte der Konstruktion explizit angebbarer Formen von $\underline{W}(G)$ eine gewisse Grenze gesetzt. Ein Beispiel für einen Graphen jenseits dieser Grenze könnte der K_5 sein: er besitzt 10 Kanten, so daß zwar 30 variierbare Parameter zur Verfügung stehen, die aber 37 Kreisbedingungen angepaßt sein müßten! Wir zweifeln aber nicht an der Möglichkeit, auch für den K_5 eine triviale Lösung zu erzielen, wenn noch allgemeinere Zahlen als Quaternionen für die Notierung der Elemente von $\underline{W}(K_5)$ zur Verfügung stünden und sich damit die Zahl der variierbaren Parameter merklich erhöhen würde.

4. Erste Evidenz für die Existenz von $\underline{\underline{W}}(G)$ für beliebige polyzyklische Graphen: "Effektive Gewichtsmatrizen"

Aus den zuletzt angestellten Überlegungen läßt sich das folgende Resümee ziehen: wenn die Gewichte, welche den Kanten von G (bzw. die Gewichtsfunktionen, welche den Nachbarschaftswegen von G) zugeordnet werden, nur eine ausreichende Anzahl variierbarer Parameter besitzen, d.h. die hierfür verwendeten Zahlen auf einer ausreichend großen Basis definiert sind, dann läßt sich immer eine triviale Lösung für $\underline{\underline{W}}(G)$ erzielen. In diesen Überlegungen ist bereits die Existenz von $\underline{\underline{W}}(G)$ an sich für beliebige polyzyklische Graphen vorausgesetzt.

Nehmen wir an, G sei ein polyzyklischer Graph, der mehr Kreise enthalte als frei variierbare Parameter durch den Satz seiner Gewichte zur Verfügung gestellt werden. Sicher kann in diesem Fall eine triviale Lösung für $\underline{\underline{W}}(G)$ nicht explizit dargestellt werden. Wir nehmen aber an, daß auch für diesen polyzyklischen Graphen an sich eine Matrix $\underline{\underline{W}}(G)$ mit den in der Einleitung genannten Eigenschaften existiere. Eine solche, nur infolge der beschränkten Flexibilität der uns zur Verfügung stehenden Zahlen nicht explizit angebbare Matrix $\underline{\underline{W}}(G)$ wollen wir eine "effektive Gewichtsmatrix" nennen.

Die Elemente einer solchen Matrix müßten die Bedingungen (3) und (5) erfüllen, womit auch gesichert wäre, daß die Matrix den Bedingungen (7) und (8) genügt. Setzt man voraus, daß der Bedingung (5) genügt wird, dann stellt (3) nur die Forderung dar, die Norm der für W_{rs} gewählten Zahl sei 1; da es in jedem, beliebig erweiterten Zahlensystem möglich sein muß, von einer beliebigen Zahl dieses Systems genau dasjenige Vielfache zu nehmen, das der Norm 1 entspricht, können der Erfüllung von (3) keine Schwierigkeiten im Wege stehen, vorausgesetzt, die Bedingung (5) ist erfüllt und es ist zu jeder beliebigen Zahl deren konjugierte Zahl definiert. Solche Eigenschaften muß ein erweitertes Zahlensystem haben, damit es für die explizite Notierung von $\underline{W}(G)$ geeignet ist. Für die (implizite) Formulierung einer effektiven Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$ genügt es aber vorauszusetzen, daß die Bedingungen (3) und (5) erfüllt sind.

Damit lassen sich zuerst die Gewichtsfunktionen der Nachbarschaftswege, wie in (6) angegeben, mit den Nebenbedingungen (7) und (8) und dann die Gewichtsfunktionen der einzelnen Kreise gemäß (10) und (11) definieren. Die Bedingung (4), welche von $\underline{W}(G)$ für jeden Kreis $Z_t \varepsilon G$ erfüllt werden muß, wird durch $\mathrm{Re}\{W(Z_t\rightarrow)\}=0$ implizit ausgedrückt.

Es kann also jedem beliebigen polyzyklischen Graphen G eine hermitische effektive Gewichtsmatrix zugeordnet werden, welche durch die Angabe der Kreisbedingungen vom Typ (4) für alle Kreise von G hinreichend erklärt ist. Ist z.B. der in (10) angegebene Kreis Z der Kreis $Z_t \varepsilon G$, so lautet die Kreisbedingung (4) für ihn wie folgt:

$$\mathrm{Re}\{W(Z_t\rightarrow)\} = \mathrm{Re}\{W(P_{r\rightarrow s})\ W(P_{s\rightarrow t})\ W(P_{t\rightarrow r})\} = 0 \quad . \tag{13}$$

Wie man sich leicht überzeugen kann, erfüllt eine derartig erklärte effektive Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$ die Bedingung (1), auf welche es letzten Endes ankommt.

Die Gesamtheit der Kreisbedingungen (13) bildet ein homogenes Gleichungssystem, das umso sicherer widerspruchsfrei zu lösen ist, je mehr Freiheitsgrade es enthält. All das hier Gesagte würde ausreichen, um auf die Existenz einer Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$ für jeden beliebigen polyzyklischen Graphen G zu schließen, wenn nicht noch die Einschränkung wäre, daß eine Lösung des durch die Kreisbedingungen (13) erzeugten Gleichungssystems nur dann akzeptierbar ist, wenn sie für alle involvierten Parameter reelle Werte liefert. Da wir nicht mit Sicherheit darauf schließen können, daß für jeden polyzyklischen Graphen mindestens eine akzeptierbare Lösung des durch (13) erzeugten Gleichungssystems erhalten wird, dürfen wir das hier Gesagte nicht als einen schlüssigen Beweis für die Existenz von $\underline{W}(G)$ für jeden polyzyklischen Graphen G werten; es ist aber eine beachtenswerte Evidenz für die mögliche Existenz von $\underline{W}(G)$, die dieser Möglichkeit darüber hinaus eine hohe Wahrscheinlichkeit zuschreibt.

5. Zweite Evidenz für die Existenz von $\underline{W}(G)$ für beliebige polyzyklische Graphen: Jacobi-Beziehung für Matching Polynome

Es sei Δ eine Determinante vom Grad n. Mit $\Delta_{r|t}$ und $\Delta_{rs|tu}$ seien jene Unterdeterminanten von Δ bezeichnet, welche durch das Streichen der Zeile r und der Spalte t bzw. das Streichen der Zeilen r und s und der Spalten t und u erhalten werden. Durch das Jacobi-Theorem [9] werden verschiedene Beziehungen zwischen Unterdeterminanten von Δ hergestellt; die uns hier interessierende lautet wie folgt:

$$\Delta_{r|r}\Delta_{s|s} - \Delta\Delta_{rs|rs} = \Delta_{r|s}\Delta_{s|r} \ . \tag{14}$$

Wenn Δ eine hermitische Determinante ist, dann gilt

$$\Delta_{r|s} = \Delta^{+}_{s|r} \ ; \tag{15a}$$

falls Δ symmetrisch ist, gilt

$$\Delta_{r|s} = \Delta_{s|r} \ ; \tag{15b}$$

$\Delta_{r|s}$ selbst ist aber nicht hermitisch (symmetrisch). Identifiziert man Δ mit der Determinante

$$\det[x\underline{I} - \underline{A}] = \Phi(G;x) \ , \tag{16}$$

welche das charakteristische Polynom $\Phi(G;x)$ des Graphen erzeugt, so hat man die folgenden Identitäten:

$$\Delta = \Phi(G;x)$$

$$\Delta_{r|r} = \Phi(G-r;x)$$

$$\Delta_{s|s} = \Phi(G-s;x)$$

$$\Delta_{rs|rs} = \Phi(G-r-s;x)$$

$$\Delta_{r|s} = \Delta_{s|r} = \sum_{\{P_{rs}\}} \Phi(G-P_{rs};x)$$

und (14) nimmt in diesem Falle die folgende wohlbekannte Form an [10,11]:

$$\Phi(G-r;x)\Phi(G-s;x)-\Phi(G;x)\Phi(G-r-s;x)=[\sum_{\{P_{rs}\}} \Phi(G-P_{rs};x)]^2 \tag{17}$$

Eine ähnliche Beziehung besteht für die Matching Polynome, nämlich:

$$\alpha(G-r;x)\alpha(G-s;x)-\alpha(G;x)\alpha(G-r-s;x)= \sum_{\{P_{rs}\}} [\alpha(G-P_{rs};x)]^2, \tag{18}$$

welche durch vollständige Induktion bewiesen wurde [12]. Die linken Seiten von (17) und (18) entsprechen einander vollkommen; die rechten Seiten von (17) und (18) unterscheiden sich insofern, als sie im Falle der charakteristischen Polynome, (17), durch das Quadrat einer Summe von Polynomen, im Falle der Matching Polynome durch eine Summe der Quadrate von Polynomen dargestellt ist.

Wir werden nun zeigen, daß (18) aus (14) folgt, wenn Δ mit der in (1) definierten Determinante identifiziert wird, wobei es nicht von Belang ist, ob die Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$ in expliziter Form angegeben werden kann oder nur als effektive Gewichtsmatrix vorliegt.

Zuerst müssen wir zeigen, daß das Matching Polynom $\alpha(G-r;x)$ durch die entsprechende Unterdeterminante $\Delta_{r|r}$ dargestellt wird, wenn wir $\Delta=W$ setzen. Zu diesem Zwecke lesen wir (1) von rechts nach links und formulieren für die ersten Schritte in Analogie zu (1):

$$\Delta_{r|r} = W_{r|r} = \det[x\underline{I}_{r|r} - \underline{W}_{r|r}] \,, \tag{19a}$$

wobei $\underline{I}_{r|r}$ und $\underline{W}_{r|r}$ diejenigen Matrizen der Ordnung n-1 darstellen, die aus $\underline{I}$ bzw. $\underline{W}$ durch Streichen der Zeile r und Spalte r erhalten werden. Die in (19a) angegebenen Schritte entsprechen der Bedeutung von $\Delta_{r|r}$ und der Definition von W in (1). Wir müssen also nur zeigen, daß die auf der rechten Seite von (19a) stehende Determinante das Matching Polynom $\alpha(G-r;x)$ produziert. Dies ist sicher der Fall, wenn $\underline{W}_{r|r}(G)$ eine Gewichtsmatrix für den Graph G-r darstellt, also wenn gilt

$$\underline{W}_{r|r}(G) = \underline{W}(G-r) \,. \tag{19b}$$

Da die Elemente von $\underline{W}(G)$ die Bedingungen (3) und (5) erfüllen, trifft dies auch für die Matrix $\underline{W}_{r|r}(G)$ zu. Es ist also nur zu prüfen, ob $\underline{W}_{r|r}(G)$ für alle in G-r enthaltenen Kreise die Bedingung (4) erfüllt. Ohne Verlust an Allgemeinheit dürfen wir annehmen, der aus G entfernte Knoten r gehöre zu dem Nachbarschaftsweg $P_{uv}\varepsilon G$; es kann r einer der Endknoten oder einer der inneren Knoten (vom Grad g=2) dieses Weges sein. Einfachheitshalber nehmen wir vorerst an, r sei ein innerer Knoten von P_{uv}. Durch seine Entfernung aus G werden $P_{uv}\varepsilon G$ und auch alle Kreise von G, welche P_{uv} enthalten, unterbrochen. Es enthält daher G-r alle jene Kreise von G, welche nicht P_{uv} enthalten und nur diese. Da $\underline{W}(G)$ die Bedingung (4) für diese Kreise erfüllt, und da die mit diesen Kreisen korrespondierenden Elemente durch die Entfernung von r nicht berührt werden, muß $\underline{W}_{r|r}(G)$ Bedingung (4) für alle in G-r vorhandenen Kreise erfüllen. Wir stellen damit die Gültigkeit von (19b) fest und können daher schreiben

$$\alpha(G-r;x) = \det[x\underline{I}_{r|r}-\underline{W}_{r|r}(G)] = W_{r|r} = \Delta_{r|r} \; . \tag{20}$$

Wenn r mit einem der Endknoten von $P_{uv}\varepsilon G$ identisch ist, sagen wir r=u, so können in G-r nur diejenigen Kreise von G enthalten sein, zu denen der Knoten r=u nicht gehört; dadurch wird die Zahl der in G-r enthaltenen Kreise verringert, aber die Gültigkeit der Aussagen (19b) und (20) wird davon nicht berührt. Auf ähnlichen Wegen erhält man analoge Aussagen für die anderen Determinanten der linken Seite von (14). Identifiziert man also auf der Grundlage von (1) die Determinante Δ in (14) mit dem Matching Polynom $\alpha(G;x)$ des Graphen G, so haben wir die folgenden Identitäten:

$$\begin{aligned} \Delta &= \alpha(G;x) \; , \\ \Delta_{r|r} &= \alpha(G-r;x) \; , \\ \Delta_{s|s} &= \alpha(G-s;x) \; , \\ \Delta_{rs|rs} &= \alpha(G-r-s;x) \; . \end{aligned} \tag{21}$$

Damit sind die linken Seiten von (14) und (18) identisch gleich.

Für die Unterdeterminanten der rechten Seite von (14) dürfen wir ohne Verlust an Allgemeinheit annehmen r<s. Wendet man das in (2) gegebene Entwicklungstheorem auf $\Delta_{r|s}$ und $\Delta_{s|r}$ an, erhält man [10]:

$$\begin{aligned} \Delta_{r|s} &= \sum_{\{P_{rs}\}} [W(P^{\lambda}_{r\leftarrow s})\cdot\Delta_{r\kappa_1\kappa_2\ldots s|r\kappa_1\kappa_2\ldots s}] , \\ \Delta_{s|r} &= \sum_{\{P_{rs}\}} [W(P^{\lambda}_{r\rightarrow s})\cdot\Delta_{r\kappa_1\kappa_2\ldots s|r\kappa_1\kappa_2\ldots s}] . \end{aligned} \tag{22}$$

Darin stellen κ_1, κ_2,... die Knoten dar, die zu dem in dem betreffenden Term betrachteten Weg P^{λ}_{rs} gehören und durch $\lambda=1,2,\ldots,p$ sind die verschiedenen Wege, welche r und s in G verbinden, unterschieden; die Menge dieser Wege, über welche die Summierung läuft, ist also in voller Ausführlichkeit wie folgt zu notieren:

$$\{P_{rs}\} = \{P^{\lambda}_{rs} | P^{\lambda}_{rs} \varepsilon G,\ \lambda=1,2,\ldots,p\} .$$

Die in der rechten Seite von (22) auftretenden Unterdeterminanten sind hermitisch und können aus den im Zusammenhang mit $\Delta_{r|r}$ erörterten Gründen mit $\alpha(G-P^{\lambda}_{rs};x)$ identifiziert werden. Man darf daher anstelle von (22) auch wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} \Delta_{r|s} &= \sum_{\{P_{rs}\}} [W(P^{\lambda}_{r\leftarrow s})\ \alpha(G-P^{\lambda}_{rs};x)] , \\ \Delta_{s|r} &= \sum_{\{P_{rs}\}} [W(P^{\lambda}_{r\rightarrow s})\ \alpha(G-P^{\lambda}_{rs};x)] . \end{aligned} \tag{23}$$

Die Ausdrücke für $\Delta_{r|s}$ und $\Delta_{s|r}$ unterscheiden sich also nur in den

Gewichtsfunktionen, mit denen die Matching Polynome multipliziert sind; mit (7) und (8) sind die Beziehungen zwischen diesen Gewichtsfunktionen angegeben.

Setzt man (23) in die rechte Seite von (14) ein so erhält man

$$\Delta_{r|s}\Delta_{s|r}=\{\Sigma[W(P^{\lambda}_{r\leftarrow s})\alpha(G-P^{\lambda}_{rs};x)]\}\{\Sigma[W(P^{\mu}_{r\to s})\alpha(G-P^{\mu}_{rs};x)]\}$$

$$= \sum_{\substack{\lambda \\ (\lambda=\mu)}} \{W(P^{\lambda}_{r\leftarrow s})W(P^{\lambda}_{r\to s})[\alpha(G-P^{\lambda}_{rs};x)]^2\} + \tag{24}$$

$$+ \sum_{\lambda<\mu}\Sigma\{[W(P^{\lambda}_{r\leftarrow s})W(P^{\mu}_{r\to s}) + W(P^{\mu}_{r\leftarrow s})W(P^{\lambda}_{r\to s})] \cdot \alpha(G-P^{\lambda}_{rs};x)\ \alpha(G-P^{\mu}_{rs};x)\}\ .$$

Das Produkt der Gewichtsfunktionen in der ersten Summe ist gemäß (8) für jeden Weg P^{λ}_{rs} gleich 1; für diese Summe kann daher einfach geschrieben werden:

$$\sum_{\{P_{rs}\}} [\alpha(G-P^{\lambda}_{rs},x)]^2\ .$$

Die beiden Produkte von Gewichtsfunktionen, welche in der Doppelsumme auftreten, stellen die Gewichte eines Kreises $Z^{\lambda\mu}\varepsilon G$ dar, der aus zwei verschiedenen Wegen, P^{λ}_{rs} und P^{μ}_{rs}, gebildet wird:

$$Z^{\lambda\mu}{}_{\leftarrow} = P^{\lambda}_{r\leftarrow s}\ \cup\ P^{\mu}_{r\to s}\ .$$

In Analogie zu (10) und (11) gilt daher

$$W(Z^{\lambda\mu}\leftarrow) = W(P^{\lambda}_{r\leftarrow s})W(P^{\mu}_{r\rightarrow s}) ,$$

$$W(Z^{\lambda\mu}\rightarrow) = [W(Z^{\lambda\mu}\leftarrow)]^* = W(P^{\mu}_{r\leftarrow s})W(P^{\lambda}_{r\rightarrow s}) .$$

Nun besitzt $\underline{W}(G)$ aber, wie in (4) angegeben, die Eigenschaft, für die Gewichtsfunktionen aller zu G gehörenden Kreise den Wert Null zu produzieren; es ist daher die Gewichtsfunktion eines jeden Terms der Doppelsumme Null, so daß diese identisch zu Null verschwindet. Wir erhalten also schließlich für die rechte Seite von (14) den Ausdruck

$$\Delta_{r|s}\Delta_{s|r} = \sum_{\{P_{rs}\}} [\alpha(G-P_{rs})]^2 . \qquad (25)$$

Es stimmen also auch die rechten Seiten von (14) und (18) überein.

Damit ist gezeigt, daß die für jeden Graph, also auch für jeden polyzyklischen Graphen, gültige Beziehung (18) mit Hilfe des Jacobi-Theorems aus der in (1) definierten Determinante herleitbar ist.

Hieraus kann man mit Sicherheit den Schluß ziehen, daß für jeden Graph - und somit auch für jeden polyzyklischen Graphen G - eine Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$ mit den in der Einleitung beschriebenen Eigenschaften existiert, deren charakteristisches Polynom mit dem Matching Polynom des Graphen übereinstimmt.

Es sei angemerkt, daß für eine Gewichtsmatrix $\underline{W}(G)$, welche keine triviale Lösung ist und daher nicht für jeden Kreis eine Gewichtsfunktion vom Werte Null liefert, der Ausdruck (18) nicht durch die Anwendung des Jacobi-Theorems auf die Determinante

$$\tilde{W} = \det[x\underline{I} - \tilde{\underline{W}}(G)] = \tilde{\Delta}$$

erhalten werden kann. Nehmen wir an, daß $\underline{W}(G)$ für die Kreise Z_1, $Z_2 \varepsilon G$ von Null verschiedene Gewichtsfunktionen liefert, die sich gegenseitig kompensieren:

$$W(Z_1) + W(Z_2) = 0 \ .$$

Wenn beide Knoten r und s, für welche (18) formuliert sei, einem dieser Kreise angehören, $r,s\varepsilon Z_1,\varepsilon G$, gelten die in (21) angegebenen Identitäten nicht mehr, da alle dort angegebenen Unterdeterminanten vom Kreis Z_2 herrührende Beiträge enthalten, welche nicht durch die Beiträge des Kreises Z_1 kompensiert werden können, da Z_1 durch die Entfernung von r und/oder s zerstört ist. In diesem Falle verschwindet auch die in (24) auftretende Doppelsumme nicht identisch zu Null.

Dieser Hinweis zeigt, daß die "triviale" Lösung $\underline{W}(G)$ gegenüber den "kollektiven" Lösungen $\tilde{\underline{W}}(G)$ als "natürliche" Lösung ausgezeichnet ist: die folgende Beziehung

$$\alpha(G;x) = \det[x\underline{I} - \underline{W}(G)]$$

darf als Identität gewertet werden, während die Beziehung

$$\alpha(G;x) = \det[x\underline{I} - \tilde{\underline{W}}(G)]$$

eine gewöhnliche Gleichung ist. Es ist daher wohl angemessen, $\underline{W}(G)$ nicht als "triviale" sondern als a l l g e m e i n e Lösung zu bezeichnen.

6. Zusammenfassung und Schlußbemerkungen

1. Aus der Tatsache, daß (18) mit Hilfe des Jacobi-Theorems aus der in (1) definierten, das Matching Polynom $\alpha(G;x)$ erzeugenden Determinante W für jeden Graphen hergeleitet werden kann, wird der Schluß gezogen, daß die der Determinante W zugrunde liegende Matrix $\underline{W}(G)$ für jeden schlichten Graphen und somit auch für jeden polyzyklischen Graphen existiert.

2. Die Tatsache, daß $\underline{W}(G)$ nicht für alle Graphen in expliziter Form angegeben werden kann, wird als eine Folge der Beschränktheit der für die explizite Formulierung von $\underline{W}(G)$ zur Verfügung stehenden Zahlen gesehen; wie in Abschnitt 4 gezeigt ist, müßten einige der heute nicht explizit angebbaren $\underline{W}(G)$ in einem ausreichend erweiterten Zahlensystem explizit formulierbar sein.

3. Eine offene, hier auch nicht berührte Frage ist, wie die Tatsache zu verstehen sei, daß einem gegebenen Graphen G ganze Familien von $\underline{W}(G)$ zugeordnet werden können, die alle die geforderten, in der Einleitung beschriebenen Eigenschaften besitzen, wie wir es im Falle des K_4 gefunden haben [2]. Man könnte vermuten, daß zwei Gewichtsmatrizen, welche derselben Familie angehören, durch unitäre Transformation ineinander umgewandelt werden können. Wie man aber bei der Lektüre von [2] erkennt, müßten - mindestens für den K_4 - mehrere sehr unterschiedliche Familien von $\underline{W}(G)$ herleitbar sein. Obgleich uns alle diese Fragen als interessant erscheinen, konnten wir bisher keine näher untersuchen.

4. Die Eigenwerte des Matching Polynoms $\alpha(G;x)$ werden als Bezugssystem für die Berechnung der Topologischen Resonanz-Energie (TRE) benutzt [13]. In diesem Zusammenhang wird die Matrix $\underline{W}(G)$ mit $\underline{A}(G)$ verglichen, welche bekanntlich mit der Matrixrepräsentation des Hückel-Hamilton-Operators $\hat{H}$ isomorph ist [14]. Wir sind uns nicht sicher, ob solche Vergleiche zulässig sind. Sicherlich könnte zwar $\underline{W}(G)$ die Matrixrepräsentation eines hermitischen Operators $\hat{W}$ sein, aber man kann zur Zeit nicht einmal vermuten, welche Bedeutung $\hat{W}$ haben müßte und auf welche, den Knoten von G zuordenbaren Basisfunktionen dieser Operator einwirkt.

7. Danksagung

Einer von uns (A.G.) dankt der Max-Planck-Gesellschaft für die Finanzierung eines Gastaufenthalts am Max-Planck-Institut in Mülheim (Ruhr). Ferner danken wir Frau U. Becker und Herrn Dr. F. Mark für die ausführliche und fruchtbare Diskussion des abgehandelten Gegenstandes, sowie Frau I. Heuer und Frau G. Brodde für ihre Bemühungen bei der Anfertigung einer reproduzierbaren Form des Manuskripts.

8. Literatur

[1] A. Graovac, O.E. Polansky, Part I, Match, dieses Heft.

[2] O.E. Polansky, A. Graovac, Part II, Match, dieses Heft.

[3] A. Graovac, O.E. Polansky, Part III, Match, dieses Heft, voranstehende Arbeit.

[4] I. Gutman, A. Graovac, B. Mohar, Match 13, 129 (1982).

[5] J. Aihara, Bull. Chem. Soc. Japan 52, 1529 (1979).

[6] L.J. Schaad, B.A. Hess, J.B. Nation, N. Trinajstić, I. Gutman, Croat. Chem. Acta 52, 233 (1979).

[7] A. Graovac, D. Kasum, N. Trinajstić, Croat. Chem. Acta 54, 91 (1981).

[8] A. Graovac, Chem. Phys. Letters 82, 248 (1981).

[9] L. Mirsky, An Introduction to Linear Algebra, Dover Publications, New York, 1982, (Erstdruck: Clarendon Press, Oxford 1955).

[10] C.A. Coulson, H.C. Longuet-Higgins, Proc. Roy. Soc. A 191, 39 (1947).

[11] I. Gutman, Z. Naturforsch. 36a, 1112 (1981).

[12] O.J. Heilmann, E.H. Lieb, Commun. Math. Phys. 25, 190 (1972).

[13] I. Gutman, M. Milun, N. Trinajstić, Match 1, 171 (1975); J. Amer. Chem. Soc. 99, 1692 (1977); J. Aihara, J. Amer. Chem. Soc. 98, 2750 (1976).

[14] K. Ruedenberg, J. Chem. Phys. 22, 1878 (1954).