

Technische Universität Ilmenau
Institut für Mathematik



Preprint No. M 17/07

Spoke Graphs - Speichengraphen

Peter E. John und Wilfried Rausch

August 2017

URN: urn:nbn:de:gbv:ilm1-2017200387

Impressum:

Hrsg.: Leiter des Instituts für Mathematik
Weimarer Straße 25
98693 Ilmenau

Tel.: +49 3677 69-3621

Fax: +49 3677 69-3270

<http://www.tu-ilmenau.de/math/>

ilmedia

Spoke Graphs - Speichengraphen

Peter E. John und Wilfried Rausch

Institut für Mathematik der Technischen Universität Ilmenau

Schlagworte: Petersen-Graph (allgemein), kubische Graphen, Nomenklatur, charakteristisches Polynom und Eigenwerte, Gerüste, Linearfaktoren, Hamiltonkreise, Packungsdichte

1. Einführung

Im Jahr 1891 erschien von dem Dänischen Mathematiker Julius Petersen (1839 - 1910) eine Arbeit mit dem Titel "Die Theorie der regulären Graphen"⁽¹⁾, in welcher die Faktorisierung regulärer Graphen untersucht wurde. Hier sind erstmals grundlegende Ergebnisse der Graphentheorie und der nach Petersen benannte Graph $Pe = Pe(5, 2)$ (s. Abb. 1) publiziert, der in vielen Veröffentlichungen als signifikantes Beispiel verwendet wird. In $Pe(5, 2)$ steht die „5“ für den aus den u-Knotenpunkten gebildeten u-Kreis und die „2“ bringt zum Ausdruck, dass der aus den v-Knotenpunkten gebildete v-Kreis jeweils einen v-Knoten überspringt.

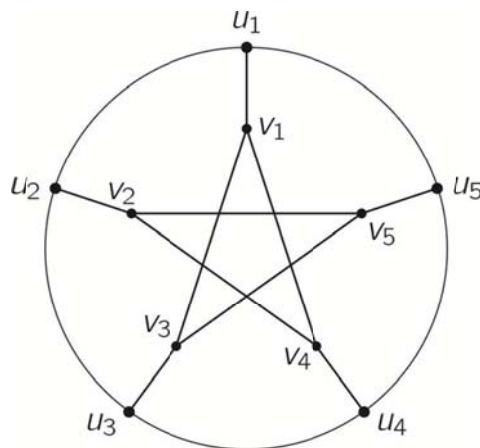


Abb. 1: Der Petersen-Graph $Pe = Pe(5, 2)$

Verändert man die Anzahl der Knotenpunkte der u- und v-Kreise in gleicher Weise, so ergeben sich die *verallgemeinerten Petersen Graphen* (s. u.). Diese wurden zuerst von H. S. M. Coxeter⁽²⁾ und K. Bannai⁽³⁾ beschrieben.

Es sei $G = (V, E)$ ein Graph mit der Knotenpunktmenge $V = V(G)$ und der Kantenmenge $E = E(G)$. Die Anzahlen der Knotenpunkte und Kanten von G werde mit $n = n(G)$ bzw. $m = m(G)$ bezeichnet. Die Menge aller endlichen (zusammenhängenden) Graphen sei \mathbf{G} .

Zwei Graphen $G, G' \in \mathbf{G}$ heißen *isomorph* (kurz: $G \cong G'$), wenn es eine Bijektion $\alpha': V(G) \leftrightarrow V(G')$ gibt mit $(u, v) \in E(G)$ genau dann, wenn $(\alpha'(u), \alpha'(v)) \in E(G')$ für alle $u, v \in V(G)$ ist. Können in einem Graphen G die Knotenpunkte derart schwarz und weiß gefärbt werden, dass Nachbarknotenpunkte unterschiedliche Farbe haben, so werde G *paarer (bipartiter) Graph* genannt.

Graph G heißt *kubisch (3-regulär)*, falls jeder seiner Knotenpunkte mit genau drei Kanten von G inzidiert, wobei Mehrfachkanten zugelassen sind.

Die Menge \mathbf{G}^3 bezeichne alle kubischen Graphen.

Der verallgemeinerte Petersen Graph $Pe(c, k) \in \mathbf{G}^3$ ($c = 3, 4, 5, \dots; 1 \leq k \leq c - 1$) hat die Knotenpunktmenge $V(Pe(c, k)) = \{u_i, v_i; i = 1, 2, \dots, c\}$ und die Kantenmenge $E(Pe(c, k)) = \{(u_i, u_{i+1}), (u_i, v_i), (v_i, v_{i+k}); i = 1, 2, \dots, c, k = 1, 2, \dots, c - 1$ und der Index wird (mod c) reduziert} (in Abb. 1 sind $c = 5$ und $k = 2$). Offensichtlich sind die beiden Graphen $Pe(c, k)$ und $Pe(c, c - k)$ isomorph, also $Pe(c, k) \cong Pe(c, c - k)$. Ist $k = c/2$, so findet man im Graphen $Pe(c = 2k, k)$ genau k Doppelkanten (siehe M. E. Watkins⁽⁴⁾; mitunter auch als „Zweiecke“ bezeichnet), somit gehören diese ebenfalls zur Menge \mathbf{G}^3 .

Es sei $g = ggT(c, k)$ der *größte gemeinsame Teiler* von c und k . Zwei Graphen $Pe(c, k')$ und $Pe(c, k'')$ sind isomorph, falls $ggT(c, k') = ggT(c, k'')$ und $k'k'' \equiv 1 \pmod{c}$ sind. Die beiden Graphen $Pe(10, 2)$ und $Pe(10, 6)$ sind somit nicht isomorph, da $ggT(10, 2) = ggT(10, 6) = 2$, aber $k'k'' = 12 \equiv 2 \pmod{10}$ ist.

Eine interessante Erweiterung stellen die seit 1988 aus dem Foster Census⁽⁵⁾ bekannten *I-Graphen* dar. Der *I-Graph* $I(c, j, k)$, $1 \leq j, k < c$ und $j, k \neq c/2$, hat die Knotenpunktmenge $V(I(c, j, k)) = \{u_i, v_i; i = 1, 2, \dots, c\}$ und die Kantenmenge $E(I(c, j, k)) = \{(u_i, u_{i+j}), (u_i, v_i), (v_i, v_{i+k}); i = 1, 2, \dots, c$, wobei der Index (mod c) reduziert wird}. Somit ist jeder verallgemeinerte Petersen Graph auch ein *I-Graph*, denn es ist $Pe(c, k) = I(c, 1, k)$. Offensichtlich ist $I(c, j, k) \cong I(c, c-j, k) \cong I(c, j, c-k)$.

In dieser Arbeit wird eine (nicht zu enge) Klasse von Graphen betrachtet, für die wesentliche Parameter (Spektrum, Anzahl von Gerüsten, Linearfaktoren, Hamiltonkreise, Packungsdichte) teils explizit berechnet werden können.

2. Konstruktion eines Speichengraphen

Vorbemerkung

Zunächst betrachte man einen oben beschriebenen verallgemeinerten Petersen Graphen $Pe(c, k)$. Jede u - v -Kante (u_i, v_i) mit ihren Endknotenpunkten u_i, v_i werde als *Speiche* (kurz: Sp_i) von $Pe(c, k)$ bezeichnet. Der u -Kreis C_u hat die Kantenmenge $E(C_u) = \{(u_i, u_{i+1}); i = 1, 2, \dots, c$, Index mod $c\}$. Ist $g = ggT(c, k) = 1$, so gibt es genau einen v -Kreis mit der Kantenmenge $E(C_v) = \{(v_i, v_{i+k}); i = 1, 2, \dots, c$, Index mod $c\}$ und im Falle $g > 1$, bilden die Kanten genau g paarweise disjunkte Kreise der Länge c/g , die zur Menge \mathbf{C}_v zusammengefasst werden. Man kann also den Graphen $Pe(c, k)$ so konstruieren, dass zunächst die c Speichen Sp_i ($i = 1, 2, \dots, c$) mit den Endknotenpunkten u_i, v_i vorgegeben werden, die alle Kopien des Graphen K_2 mit $V(K_2) = \{u, v\}$ und $E(K_2) = \{(u, v)\}$ sind. Die Speichen werden zunächst durch den Kreis C_u verbunden und anschließend, je nach g , wird der Kreis C_v bzw. die Menge \mathbf{C}_v der g Kreise gebildet. Die Kreise C_u, C_v bzw. die Kreise von \mathbf{C}_v werden als *periphere Kreise* von $Pe(c, k)$ bezeichnet.

Ganz analog kann ein Speichengraph konstruiert werden.

Es sei $Sp \in \mathbf{G}$ ein Graph mit $v = v(Sp) > 1$ Knotenpunkten, von denen $h = h(Sp) > 1$ die Valenz 1 (hängende Knotenpunkte von Sp) und $(v - h)$ Knotenpunkte die Valenz 3 haben.

Offensichtlich ist v gerade. Graph Sp werde als *Speiche* bezeichnet.

Es ist zweckmäßig, eine Speiche Sp folgendermaßen zu sehen. In einer Ebene E befinde sich ein geometrischer Kreis K . Unter den möglichen Einbettungen von Sp in E wählen wir eine solche aus, bei der die hängenden Knotenpunkte außerhalb und die dreivalenten Knotenpunkte von Sp innerhalb von K liegen (Ausnahmen sind in Abb. 4.3 gegeben).

Beispiele für Speichen mit $h = 3$ sind in Abb. 2.1 zu finden.

Auf die rechnerischen Ergebnisse hat diese Einschränkung keinen Einfluß.

Die Menge aller Speichen mit h hängenden Knotenpunkten sei $\mathbf{Sp}(h) \subset \mathbf{G}$. Die hängenden Knotenpunkte einer Speiche Sp werden mit $j = 1, 2, \dots, h$ in beliebiger Anordnung nummeriert. Ihnen sind Zahlen $k_j, j = 1, 2, \dots, h$, so zugeordnet, dass $1 \leq k_j < c$ ist (s. u.). Der größte gemeinsame Teiler von k_j mit c werde mit $g_j = \text{ggT}(c, k_j)$ bezeichnet, und es sei $g_0 = \text{ggT}(g_1, g_2, \dots, g_h)$.

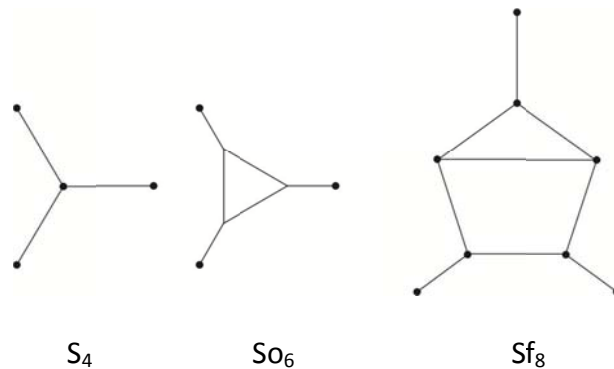


Abb. 2.1 Speichen mit $h = 3$

Die hängenden (eivalenten) Knotenpunkte von $Sp \in \mathbf{Sp}(h)$ werden, unter Beachtung der g_j -Werte, von $j = 1$ bis $j = h'$ ($g_j = 1$) bzw. von $j = h' + 1$ bis $j = h$ ($g_j > 1$) und die dreivalenten von $j = h + 1$ bis $j = v$ nummeriert.

Nun wähle man c Kopien Sp_i der Speiche Sp mit den Knotenpunkten $1_i, 2_i, \dots, h_i, (h+1)_i, \dots, v_i$ ($i = 1, 2, \dots, c$), und verbinde die Sp_i durch folgende (zusätzliche) Kanten: $(1_i, 1_{i+k_1}), (2_i, 2_{i+k_2}), \dots, (h_i, h_{i+k_h})$, wobei die Indizes der Knotenpunkte (mod c) zu nehmen sind.

Der so konstruierte Graph heiße *Speichengraph* (kurz: SpG) und werde mit $G = G(Sp; c, \mathbf{k}) \in \mathbf{G}^3$ bezeichnet, wobei $Sp \in \mathbf{Sp}(h), c > 1$ und $\mathbf{k} = [k_1, k_2, \dots, k_h]$ sind. In Abb. 2.2 ist der Speichengraph $Pf = G(Sp = S_4, 7, [1, 3, 2])$ dargestellt.

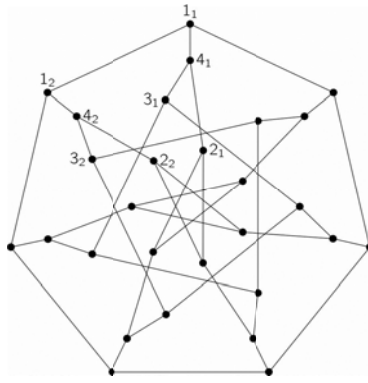


Abb. 2.2 Der SpG Pf = G(Sp = S₄, c = 7, k = [1, 3, 2])

Es ist leicht zu sehen, dass folgende Isomorphie-Beziehung für Speichengraphen gilt:

$$G = G(\text{Sp}; c, [k_1, k_2, \dots, k_h]) \cong G(\text{Sp}; c, [c - k_1, k_2, \dots, k_h]) \cong \dots \cong G(\text{Sp}; c, [k_1, k_2, \dots, c - k_h])$$

Für $j = 1, 2, \dots, h'$ ist $g_j = 1$ und es gibt einen Kreis C_j mit der Knotenpunktmenge $V(C_j) = \{j_i, i = 1, 2, \dots, c\}$ und der Kantenmenge $E(C_j) = \{(j_i, j_{i+k_j}), \text{Index (mod } c)\}$. Ist $g_j > 1$ (für $h' < j \leq h$), so gibt es genau g_j Kreise der Länge c/g_j , die hier zur Menge C_j zusammengefasst werden.

Graph G hat die Knotenpunktmenge $V(G) = [\bigcup_{i=1}^{i=c} V(\text{Sp}_i)] = \{j_i; j = 1, 2, \dots, v; i = 1, 2, \dots, c\}$ und seine Kantenmenge ist $E(G) = [\bigcup_{i=1}^{i=c} E(\text{Sp}_i)] \cup [\bigcup_{j=1}^{j=h'} E(C_j)] \cup [\bigcup_{j=h'+1}^{j=h} E(C_j)]$. Im Falle $h' = h$ ist $[\bigcup_{j=h'+1}^{j=h} E(C_j)]$ die leere Menge.

Es sind $n = n(G) = cv$, $m = m(G) = 3n/2$ und die zyklomatische (zyklotomische) Zahl $z = z(G)$ von G ist $z = m - n + 1 = n/2 + 1 = cv/2 + 1..$

Hier werden zusammenhängende Speichengraphen G betrachtet, also $g_0 = 1$.

G ist paarer Graph genau dann, wenn die Speiche Sp paarer Graph, c gerade und alle k_j ungerade sind.

Der gut bekannte Petersen-Graph $Pe(5, 2) \in \mathbf{G}^3$ ergibt sich aus $Sp = K_{2,}$, $c = 5$ und $k = [1, 2]$ (s. Abb.1).

Bemerkung 2.1:

Fügt man in eine Kante einer Speiche $Sp \in \mathbf{Sp}(h)$ einen zusätzlichen Knotenpunkt ein und verbindet diesen mittels zusätzlicher Kante mit einem weiteren zusätzlichen Knotenpunkt, so entsteht eine weitere Speiche $Sp' \in \mathbf{Sp}(h + 1)$. Analog kann auch mit einem kubischen Graphen $G \in \mathbf{G}^3$ verfahren werden. Außerdem kann auch in zwei Kanten einer Speiche $Sp \in \mathbf{Sp}(h)$ je ein Knotenpunkt eingefügt und diese beiden Knotenpunkte durch eine zusätzliche Kante verbunden werden. Das Resultat ist eine Speiche $Sp'' \in \mathbf{Sp}(h)$.

Bemerkung 2.2:

Mit der Konstruktion von Speichengraph G verbinde man die vereinfachte Vorstellung, dass G eine reifenähnliche Gestalt $\mathfrak{R} = \mathfrak{R}(G)$ einnimmt, wobei sich die hängenden Knotenpunkte j_i ($i = 1, 2, \dots, c$; $j = 1, 2, \dots, h$) von Speiche Sp_i auf der Oberfläche und die dreivalenten Knotenpunkte von Sp_i im Inneren von \mathfrak{R} befinden. Die Knotenpunkte j_i von G werden deshalb als *periphere Knotenpunkte* bezeichnet. Diese Struktur ist (in praktischer Hinsicht) besonders dann sinnvoll, wenn $c \gg 2$, Speiche Sp ein planarer Graph ist und alle $k_j = 1$ sind; dabei stützen die c Speichen den Reifen \mathfrak{R} .

Bemerkung 2.3:

Geben sei Graph $G = G(Sp; c, \mathbf{k})$ mit $c = g_0 c_0$.

Ist $g_0 = 1$, so ist der resultierende Graph G zusammenhängend.

Ist $g_0 > 1$, so ergeben sich für Graph G genau g_0 Kopien des Graphen $G_0 = G(Sp; c_0, \mathbf{k}_0)$, wobei $\mathbf{k}_0 = \mathbf{k}/g_0 = [k_1/g_0, k_2/g_0, \dots, k_h/g_0]$ ist.

3. Nomenklatur

Es sei $a > 2$ eine natürliche Zahl. Die Menge $\mathbf{R} = \mathbf{R}(a)$ enthalte alle primen Restklassen bezüglich a . Die Elemente von \mathbf{R} bilden mit der multiplikativen Verknüpfung „ \cdot “ eine abelsche Gruppe $\mathbf{G} = \mathbf{G}(a) = (\mathbf{R}, \cdot)$. Die Ordnung (die Anzahl der Elemente) von \mathbf{G} gibt die famose Euler-Funktion $\varphi(a)$ an; sie hat folgende Eigenschaften:

- Ist $a = p^b$ Primzahlpotenz, so ergibt sich $\varphi(a) = \varphi(p^b) = p^b - p^{b-1} = p^b(1 - 1/p)$,

- Die Funktion φ ist distributiv. Ist $\text{ggT}(a', a'') = 1$, so gilt $\varphi(a' \cdot a'') = \varphi(a') \cdot \varphi(a'')$.

Offensichtlich ist $\varphi(a)$ für jedes $a > 2$ gerade. Deshalb setzen wir $\varphi^*(a) = \frac{1}{2} \varphi(a)$.

Mit $\mathbf{R} = \{r_q = r_q(a), q = 1, 2, \dots, \varphi(a)\}$ sei $\mathbf{R}^* = \{r_q = r_q(a), q = 1, 2, \dots, \varphi^*(a), r_q < a/2\}$.

Gegeben ist der Speichengraph $G = G(Sp; c, \mathbf{k}) \in \mathbf{G}^3$, $Sp \in \mathbf{Sp}(h)$.

Neben \mathbf{k} gibt es (möglicherweise) weitere, von der Speiche Sp unabhängige $\mathbf{k}^{(q)} = [k_j^{(q)}; j = 1, 2, \dots, h; 1 \leq q \leq \varphi^*(c)]$ derart, dass jeder der Graphen $G^{(q)} = G(Sp; c, \mathbf{k}^{(q)})$ zu G isomorph ist, wobei $G^{(1)} = G$ gesetzt werde. Diese lassen sich folgendermaßen finden. Ordnet man die in $\mathbf{k} = \mathbf{k}^{(1)}$ gegebenen h Zahlen k_1, k_2, \dots, k_h als erste Zeile einer Matrix $\mathbf{K} = (k_{qj})$, also $k_1 = k_{1j}$, so können für $1 < q \leq \varphi^*(c)$ die weiteren Elemente k_{qj} von \mathbf{K} mit Hilfe der Kongruenz $k_{qj} \equiv r_q \cdot k_j \pmod{c}$, $j = 1, 2, \dots, h$ und $q = 2, 3, \dots, \varphi^*(c)$ gefunden werden. Aus den k_{qj} -Werten ergeben sich die gesuchten $k_j^{(q)}$ einfach zu: $k_j^{(q)} = k_{qj}$, falls $k_{qj} < c/2$ und $k_j^{(q)} = c - k_{qj}$ sonst. Die $k_j^{(q)}$ -Werte können zur reduzierten Matrix $\mathbf{K}^{\text{red}} = (k_{qj}^{\text{red}} = k_j^{(q)})$ zusammengefasst werden. Somit sind die zu $G = G(Sp; c, \mathbf{k})$ isomorphen Speichengraphen $G^{(q)} = G(Sp; c, \mathbf{k}^{(q)})$ $q = 1, 2, \dots, \varphi^*(c)$ gefunden.

Der SpG $G = G(Sp; c, \mathbf{k})$ mit $\mathbf{k} = [1 \leq k_1, k_2, k_3, \dots, k_h]$ werde *uniformer SpG* (kurz: *USpG*) genannt, falls $h' = h$ ist, also alle $g_j = 1$ sind.

Ein USpG heie *einfacher SpG* (kurz: *ESpG*), falls fr alle $j = 1, 2, \dots, h$ die $k_j = 1$ sind. Hier wird kurz $\mathbf{k} = \mathbf{1}$ gesetzt, also $G = G(\text{Sp}; c, \mathbf{1})$.

Graph $G = G(\text{Sp}; c, \mathbf{k})$ heie *zirkulanter SpG* (kurz: *ZSpG*), falls fr $h = \varphi^*(c)$ die Matrix \mathbf{K}^{red} (eventuell durch Zeilenvertauschung) eine zirkulante Matrix⁽⁶⁾ ist.

Die hier gegebene Klassifizierung der Speichengraphen ist unabhngig von der jeweiligen Speiche $\text{Sp} \in \mathbf{Sp}(h)$.

Beispiel 3.1: $c = 18, \mathbf{k} = [5, 7, 3, 4, 6]$: $\varphi(18) = \varphi(2 \cdot 3^2) = (2 - 1)(3^2 - 3) = 6$ und $\varphi^*(18) = 3$. Hier sind $h' = 2, h = 5$: $\mathbf{R} = \{1, 5, 7, 11, 13, 17\}$, $\mathbf{R}^* = \{1, 5, 7\}$ und somit fr jeden Speichengraph mit der Speiche $\text{Sp} \in \mathbf{Sp}(5)$ sind

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 5 & 7 & 3 & 4 & 6 \\ 7 & 17 & 15 & 2 & 6 \\ 17 & 13 & 3 & 10 & 6 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{K}^{\text{red}} = \begin{pmatrix} 5 & 7 & 3 & 4 & 6 \\ 7 & 1 & 3 & 2 & 6 \\ 1 & 5 & 3 & 8 & 6 \end{pmatrix}.$$

Die zu SpG $G = G^{(1)} = G(\text{Sp}, 18, [5, 7, 3, 4, 6])$ isomorphen SpG sind $G^{(2)} = G(\text{Sp}, 18, [7, 1, 3, 2, 6])$ und $G^{(3)} = G(\text{Sp}, 18, [1, 5, 3, 8, 6])$.

Beispiel 3.2: $c = 7, \mathbf{k} = [1, 3, 2]$: $\varphi(7) = 7 - 1 = 6$, $\varphi^*(7) = 3$ und $\mathbf{R}^* = \{1, 2, 3\}$.

Fr jeden Speichengraph mit Speiche $\text{Sp} \in \mathbf{Sp}(3)$ sind fr $c = 7$

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 2 & 6 & 4 \\ 3 & 2 & 6 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{K}^{\text{red}} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 2 & 1 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Somit handelt es sich bei dem Graphen $G = G(\text{Sp}, 7, [1, 3, 2])$ um einen USpG der zugleich ZSpG ist. Die zu $G = G^{(1)} = G(\text{Sp}, 7, [1, 3, 2])$ isomorphen Speichengraphen sind $G^{(2)} = G(\text{Sp}, 7, [2, 1, 3])$ und $G^{(3)} = G(\text{Sp}, 7, [3, 2, 1])$.

An geeigneten Stellen soll zum Vergleich mit dem Petersen Graphen $\text{Pe} = G(K_2, 5, [1, 2])$ jeweils eine Bemerkung zum hier interessant erscheinenden SpG $\text{Pf} = G(S_4, 7, [1, 3, 2])$ erfolgen. Die Speiche $\text{Sp} = S_4$ ist der Stern mit vier Knotenpunkten (Abb. 2.1).

4. Charakteristisches Polynom und Eigenwerte

Graph $G = G(\text{Sp}; c, \mathbf{k})$, $\text{Sp} \in \mathbf{Sp}(h)$ und $1 \leq k_j < c$, habe die $n \times n$ Adjazenzmatrix $\mathbf{A}(G) = (a_{ij'})$, $j' = 1, 2, \dots, n$. Die *Eigenwerte von G* sind die Eigenwerte von $\mathbf{A}(G)$. Das *charakteristische Polynom von G* (also von $\mathbf{A}(G)$) ist $p_G(\lambda) = \det(\lambda \mathbf{I}_n - \mathbf{A}(G))$; \mathbf{I}_n bezeichne die n -reihige Einheitsmatrix.

Die Berechnung aller Eigenwerte von $G = G(Sp; c, \mathbf{k})$ kann für $\mathbf{k} = \mathbf{1}$ unter Ausnutzung der Graphenstruktur recht einfach nach Heilbronner⁽⁷⁾ und Davidson⁽⁸⁾ erfolgen. Lovasz⁽⁹⁾ publizierte eine Methode zur Berechnung der Spektren von Graphen mit transitiver Gruppe. John und Sachs⁽¹⁰⁾ geben für $\mathbf{k} \neq \mathbf{1}$ eine Methode an, welche die Eigenwerte eines symmetrischen Graphen G mit nicht-trivialer Automorphismengruppe zu berechnen gestattet. Allgemein sei auf das Standardwerk „Spectra of Graphs“ von Cvetkovic', Doob und Sachs⁽¹¹⁾ verwiesen.

Zur weiteren Erklärung wird als Speiche der Graph S_4 aus Abb. 2.1 herangezogen. Für die Berechnung des charakteristischen Polynoms von Graph $G = G(S_4; c, \mathbf{k})$ wird nach ⁽¹⁰⁾ zunächst eine geeignete Permutation $P = P(G)$ der Knotenpunkte von G benötigt. Die Knotenpunktmenge $V(G) = [\bigcup_{i=1}^{i=c} V(Sp_i)]$ von G mit $V(Sp_i) = \{j_i, j = 1, 2, \dots, v, i = 1, 2, \dots, c\}$ wird in folgende Permutation $P = P(G) = (Z_1 Z_2 \dots Z_v)$ mit den Zyklen $Z_j = (j_1, j_2, \dots, j_c)$ und $j = 1, 2, \dots, v$ zerlegt. Mit dieser Nummerierung der Knotenpunkte von G kann $\mathbf{A}(G) = (\mathbf{A}_{l,l'})$, $l, l' = 1, 2, \dots, c$ als blockzirkulante Matrix⁽⁵⁾ mit den Blöcken $\mathbf{A}_{l,l'}$ dargestellt werden. Hierbei sind $l, l' = i$ zu setzen. Somit können nach ⁽¹⁰⁾ zur Berechnung von $p_G(\lambda)$ von G genau c Graphen $L_i = L(Sp_i)$, $i = 1, 2, \dots, c$, folgendermaßen gefunden werden: man füge an jeden hängenden Knotenpunkt j ($j = 1, 2, \dots, h$) von Speiche $Sp = Sp_i$ eine Schlinge s_{ji} an, welche das Gewicht $d_{ji} = d(s_{ji}) = 2\cos(2ik_j \pi / c)$ hat. Dieser Graph werde mit $L_i = L(Sp_i)$ bezeichnet (Abb. 4.1).

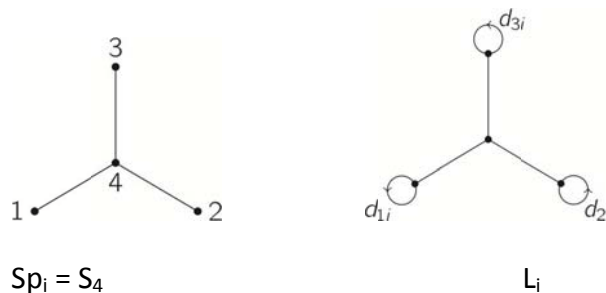


Abb. 4.1: Die Graphen Sp_i und L_i

Satz 4.1⁽¹⁰⁾:

Es sei $\mathbf{A} = \mathbf{A}(Sp)$ die Adjazenzmatrix von $Sp = Sp_i$, $\mathbf{D}_i = (d_{j,j'}(i))$, mit $j, j' = 1, 2, \dots, v = v(Sp)$, eine von $P = P(G)$ abhängige Matrix mit den Diagonalelementen $d_{j,j}(i) = d_{ji} = 2\cos(2ik_j \pi / c)$ für $j = 1, 2, \dots, h$ und ansonsten ist $d_{j,j'}(i) = 0$. Graph $L_i = L(Sp_i)$ hat die Adjazenzmatrix $\mathbf{A}_i = \mathbf{A}(L_i) = \mathbf{A}(Sp) + \mathbf{D}_i$ und somit das charakteristische Polynom ist $p_{L_i}(\lambda) = \det(\lambda \mathbf{I}_v - \mathbf{A}_i)$.

Das charakteristische Polynom $p_G(\lambda)$ von $G = G(Sp; c, \mathbf{k})$ hat die $i = 1, 2, \dots, c$ Faktoren $p_{L_i}(\lambda)$ vom Grad v , also ist

$$p_G(\lambda) = \left[\prod_{i=1}^{i=c} p_{L_i}(\lambda) \right]. \tag{4.1}$$

Folgerung 4.1:

Wegen $\cos(2ik_j \pi / c) = \cos(2[c - i]k_j \pi / c)$, $i = 1, 2, \dots, c$, $j = 1, 2, \dots, h$, ist $p_{L_i}(\lambda) = p_{L_{(c-i)}}(\lambda)$. Deshalb kann Gleichung (1) reduziert werden, wobei $p_{L_c}(\lambda) = p_L(\lambda)$ gesetzt wird:

c ungerade:
$$p_G(\lambda) = p_L(\lambda) \left[\prod_{l=1}^{(c-1)/2} p_{L_l}(\lambda) \right]^2, \quad (4.2.1)$$

und

c gerade:
$$p_G(\lambda) = p_L(\lambda) p_{L_{c/2}}(\lambda) \left[\prod_{l=1}^{(c-2)/2} p_{L_l}(\lambda) \right]^2. \quad (4.2.2)$$

Mit den c Polynomen $p_{L_l}(\lambda)$ können die Eigenwerte von $G = G(\text{Sp}; c, k)$ berechnet werden.

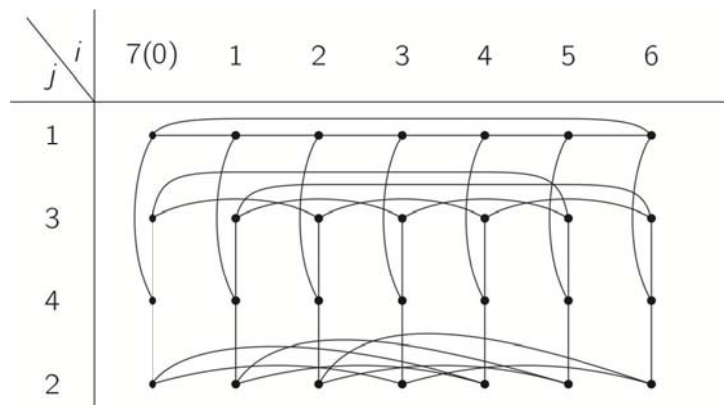


Abb. 4.2: Graph Pf gemäß Permutation $P = P(G)$

Beispiel 4.1:

Gegeben sei der in Abb. 2.2 dargestellte Speichengraph $Pf = G(\text{Sp} = S_4; c = 7, \mathbf{k} = [1, 3, 2])$. Als Permutation wird $P = P(G) = (Z_1 Z_2 Z_3 Z_4)$ mit den Zyklen $Z_j = (j_1, j_2, \dots, j_7)$, $j = 1, 2, 3, 4$ gewählt und Graph Pf entsprechend angeordnet (siehe Abb. 4.2). Somit resultieren nach ⁽¹⁰⁾ für $i = 1, 2, \dots, 7$ die Graphen L_i (Abb. 4.1) für die jeweils das Polynom $p_{L_i}(\lambda)$ mit Hilfe der Matrix $\mathbf{A}_i = \mathbf{A}(L_i)$ berechnet werden kann. Es ist

$$\mathbf{A}_i = \mathbf{A}(S_4) + \mathbf{D}_i = \begin{pmatrix} d_{1i} & 0 & 0 & 1 \\ 0 & d_{2i} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & d_{3i} & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{mit } d_{ji} = d(S_{ji}) = 2\cos(2ik_j \pi / c). \quad (4.2)$$

Wegen Satz 4.1 ergeben sich für $i = 1, 2, \dots, 7$ die Faktoren $p_{L_i}(\lambda)$ von Graph Pf allgemein zu
$$p_{L_i}(\lambda) = \lambda^4 - (d_{1i} + d_{2i} + d_{3i}) \lambda^3 + (d_{1i}d_{2i} + d_{2i}d_{3i} + d_{3i}d_{1i} - 3) \lambda^2 - (d_{1i}d_{2i}d_{3i} - 2(d_{1i} + d_{2i} + d_{3i})) \lambda - (d_{1i}d_{2i} + d_{2i}d_{3i} + d_{3i}d_{1i}). \quad (4.3)$$

Mit $\mathbf{k} = [1, 3, 2]$ sind $d_{1i} = 2\cos(2i \pi / 7)$, $d_{2i} = 2\cos(6i \pi / 7)$, $d_{3i} = 2\cos(4i \pi / 7)$ und für die sieben Faktorpolynome $p_{L_i}(\lambda)$, $i = 1, 2, \dots, 7$, des Graphen Pf ergeben sich

für $i = 7$

$$p_L(\lambda) = p_{L_7}(\lambda) = \lambda^4 - 6 \lambda^3 + 9 \lambda^2 + 4 \lambda - 12 = (\lambda - 3)(\lambda - 2)^2(\lambda + 1)$$

und für $i = 1, 2, 3$ ist

$$p_{L_1}(\lambda) = p_{L_2}(\lambda) = p_{L_3}(\lambda) = \lambda^4 + \lambda^3 - 5 \lambda^2 - 3 \lambda + 2 = (\lambda - 2)(\lambda + 1)(\lambda^2 + 2 \lambda - 1),$$

woraus z. B. mit Folgerung (4.1) die übrigen Faktorpolynome bekannt sind:

$$p_{L_4}(\lambda) = p_{L_5}(\lambda) = p_{L_6}(\lambda) = p_{L_1}(\lambda).$$

Somit ist das charakteristische Polynom $p_{Pf}(\lambda)$ von Speichengraph Pf nach Gleichung (4.1) bzw. Gleichung (4.2.1) gegeben zu

$$p_{Pf}(\lambda) = (\lambda - 3)(\lambda - 2)^8(\lambda + 1)^7(\lambda^2 + 2\lambda - 1)^6.$$

Graph Pf = $G(S_4; c = 7, \mathbf{k} = [1, 3, 2])$ hat die Eigenwerte $3, 2^{(8)}, 0.414^{(6)}, -1^{(7)}, -2.414^{(6)}$. Die Hochzahlen in Klammern geben die Vielfachheit des jeweiligen Eigenwertes an.

Bemerkung 4.1:

Ist der Graph L_i symmetrisch, so kann im Allgemeinen jedes Polynom $p_{L_i}(\lambda)$ auf einfache Weise in weitere Faktoren zerlegt werden.

Einen *Sonnengraph* So_{2h} erhält man, indem an jeden Knotenpunkt des Kreises C_h mit einem weiteren Knotenpunkt durch eine Kante verbunden wird. Wählt man z. B. als Speicher den Graphen $Sp = So_{10} \in \mathbf{Sp}(5)$, siehe Abb. 4.3, $c > 1$ und $\mathbf{k} = \mathbf{1}$, so ergibt sich der Graph $Go_3 = G(So_{10}, 3, \mathbf{1})$, wobei für diesen $L_{a,b}$ aus dem K_2 mit je einer Schlinge an jedem Knotenpunkt vom Gewicht $d(a) = 2\cos(2a\pi/c)$ bzw. $d(b) = 2\cos(2b\pi/5)$, $a = 0, 1, \dots, c-1 = 2$ und $b = 0, 1, \dots, h-1 = 4$, gebildet wird (Abb. 4.3). Die Adjazenzmatrix von $L_{a,b}$ ist

$$\mathbf{A}(L_{a,b}) = \mathbf{A}(K_2) + \mathbf{D}_{a,b} = \begin{pmatrix} d(a) & 1 \\ 1 & d(b) \end{pmatrix}.$$

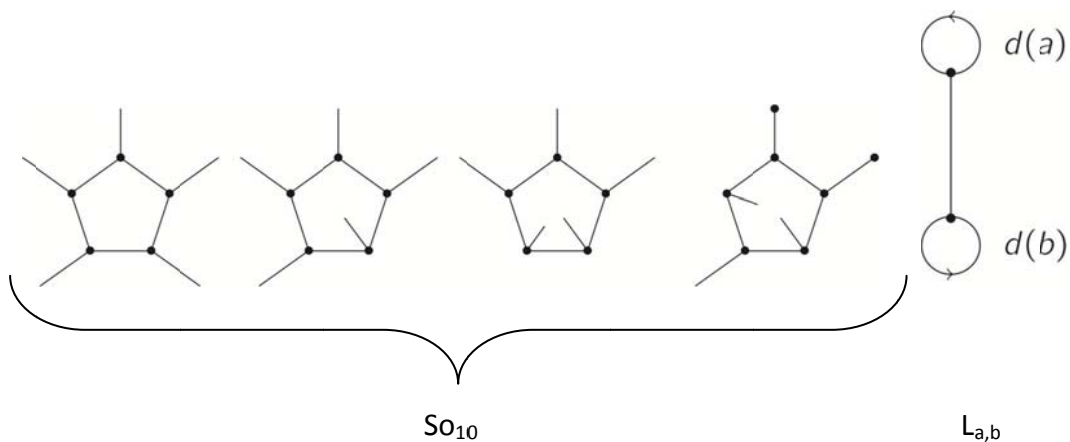


Abb. 4.3: Speicher So_{10} , drei Ausnahmen von So_{10} und der Graph $L_{a,b}$

Somit ergibt sich für $L_{a,b}$ zunächst das Polynom

$$p_{L_i}(\lambda) = \lambda^2 - 2(\cos(2a\pi/3) + \cos(2b\pi/5))\lambda + 4\cos(2a\pi/3)\cos(2b\pi/5) - 1.$$

Für $c = 3$, $a = 0, 1, 2$ und $b = 0, 1, \dots, 4$ erhält man die Zerlegung des Polynoms $p_{Go_3}(\lambda)$ von Graph Go_3 in die 15 Faktoren $p_{L_{a,b}}(\lambda)$:

$$p_{L_{0,0}}(\lambda) = \lambda^2 - 4\lambda + 3 = (\lambda - 1)(\lambda - 3),$$

$$p_{L_{0,1}}(\lambda) = p_{L_{0,4}}(\lambda) = \lambda^2 - \frac{1}{2}(3 + \sqrt{5})\lambda - (2 - \sqrt{5}),$$

$$p_{L_{0,2}}(\lambda) = p_{L_{0,3}}(\lambda) = \lambda^2 - \frac{1}{2}(3 - \sqrt{5})\lambda - (2 + \sqrt{5}),$$

$$p_{L_{1,0}}(\lambda) = p_{Sp_{2,0}}(\lambda) = \lambda^2 - \lambda - 3,$$

$$p_{L1,1}(\lambda) = p_{L1,4}(\lambda) = p_{L2,1}(\lambda) = p_{L2,4}(\lambda) = \lambda^2 + \frac{1}{2}(3 - \sqrt{5})\lambda - \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}) \text{ und}$$

$$p_{L1,2}(\lambda) = p_{L1,3}(\lambda) = p_{L2,2}(\lambda) = p_{L2,3}(\lambda) = \lambda^2 + \frac{1}{2}(3 + \sqrt{5})\lambda - \frac{1}{2}(1 - \sqrt{5}).$$

Somit ist

$$p_{G03}(\lambda) = (\lambda - 1)(\lambda - 3)(\lambda^2 - 3\lambda - 3)^2(\lambda^4 - 3\lambda^3 - 3\lambda^2 + 11\lambda - 1)^2(\lambda^4 - 3\lambda^3 - 4\lambda - 1)^4.$$

Einfache Überlegungen ergeben den folgenden

Satz 4.2:

Es seien $G_{0p} = G(So_{2q}, p, \mathbf{1})$ und $G_{0q} = G(So_{2p}, q, \mathbf{1})$ zwei Speichengraphen mit den Speichen So_{2q}, So_{2p} und $p, q > 1$ natürliche Zahlen. Die zwei Graphen G_{0p} und G_{0q} sind isomorph, kurz $G_{0p} = G(So_{2q}, p, \mathbf{1}) \cong G(So_{2p}, q, \mathbf{1}) = G_{0q}$. (4.3)

Man beachte, dass im Graphen $L_{a,b}$ die Knotengewichte $d(a)$ und $d(b)$ vertauscht werden können. Andererseits sind die hängenden Kanten der p Speichen So_{2q} von G_{0p} mit den hängenden Kanten der q Speichen So_{2p} von G_{0q} identisch. ☺

Bemerkung 4.2:

Es sei G ein Graph mit der Knotenpunktmenge $V = V(G) = \{1, 2, \dots, n\}$, der Kantenmenge $E = E(G)$ und der Adjazenzmatrix $\mathbf{A} = \mathbf{A}(G)$. G' sei ein weiterer Graph mit $n' > n$ Knotenpunkten, die folgendermaßen markiert werden: Für alle $k, l \in V$ erhalte jeder Knotenpunkt von G' mit Marke k genau einen Nachbarknotenpunkt der Marke l . Das bedeutet, dass die Markierung von G einen lokal homöomorphen Homomorphismus von G' auf G darstellt. Sei $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n)$ ein Eigenvektor von G , der zum Eigenwert λ gehört. Die k -te Komponente ($k \in V$) von Vektor \mathbf{u} ist u_k . Deshalb wird jedem von G' mit k markierten Knotenpunkt im Vektor $\mathbf{u}' = (u'_1, u'_2, \dots, u'_n)$ ebenfalls der Wert u_k zugeordnet. Der so gefundene Vektor \mathbf{u}' ist ein Eigenvektor von G' zum Eigenwert λ . Somit ist Graph G ein *Divisor* von Graph G' , also kurz $G | G'$ bzw. $p_G(\lambda) | p_{G'}(\lambda)$.

Satz 5.1.1:

Für $G = G(Sp; c, \mathbf{k})$ und $G' = G(Sp; c', \mathbf{k})$, $Sp \in \mathbf{Sp}(h)$ und $h > 1$ sei $c > 1$ ein Teiler von c' , also $c' = rc, r \geq 1$.

Dann ist $p_{G'}(\lambda) = p_G(\lambda)q_{c',c}(\lambda)$.

Hierbei hat das Quotientenpolynom $q_{c',c}(\lambda)$ den Grad $v(r-1)c$.

Beweis:

Die Graphen G und G' haben die Knotenpunktmenge $V = V(G) = \{j_i, j = 1, 2, \dots, v; i = 1, 2, \dots, c\}$ bzw. $V' = V(G') = \{j_{i'}, j = 1, 2, \dots, v; i' = 1, 2, \dots, c'\}$. Eine geeignete Zuordnung der Knotenpunkte von G' zu den Knotenpunkten von G ist folgende: Knotenpunkt $j_{i'}$ von G' werde der Knotenpunkt j_i von G zugeordnet, falls $i' \equiv i, \text{ mod } c$ ist.

Man betrachte nur die peripheren Knotenpunkte von G bzw. von G' , also $j = 1, 2, \dots, h$.

In G ist Knotenpunkt j_i mit den beiden Knotenpunkten j_{i-kj} und j_{i+kj} verbunden, wobei die Indizes mod c zu nehmen sind. Analog verhält es sich bei Graph G' . Hier ist $j_{i'}$ mit $j_{i'-kj}$ und $j_{i'+kj}$ verbunden und die Indizes werden mod c' genommen.

Sind $1 \leq x_j \leq k_j$, $1 \leq j \leq h$ und $1 \leq s \leq r$, so werden in G' die Kanten $(j_{sc-kj+xj}, j_{sc-xj})$ durch die Kanten $(j_{sc-kj+xj}, j_{(s-1)c+xj})$ ersetzt. Das Ergebnis sind r Kopien des Speichengraphen G . ☺

5. Der ESpG $G_c = G(S_4; c, 1)$

In Abb. 5.1 sind der Speichengraph $Sp = S_4$ (siehe Abb. 2.1) und der Graph $G_4 = (S_4, 4, 1)$ dargestellt.

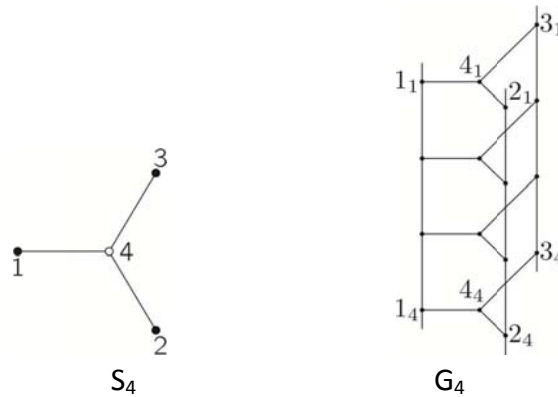


Abb. 5.1 Die Graphen S_4, G_4

Für den Graphen $G_c = G(S_4; c, 1)$, $c > 1$, gibt es folgende einfache Symmetrieelemente: Bezüglich des Speichengraphen S_4 sind es insgesamt 6, und zwar die Identität und jeweils drei Drehungen δ_3 (um $2\pi/3$) und drei Spiegelungen σ_3 . Für den Graphen G_c ergeben sich, von den peripheren Kreisen aus betrachtet, genau c Drehungen $\delta_{c'}$ (um $2\pi/c$) und für c ungerade (gerade) ebenso (doppelt so-) viele Spiegelungen $\sigma_{c'}$ ($\sigma_{c''}$). Durch Kombination von diesen Symmetrieelemente können alle weiteren Symmetrien von Graph G_c gefunden werden.

An dieser Stelle sollen einige Eigenschaften von G_c untersucht werden (siehe G_4 in Abb. 5.1).

5.1 Charakteristisches Polynom und ausgewählte Eigenwerte

Für jeden paaren Graphen G gilt: Ist λ * Eigenwert von G , so auch $-\lambda$ *.

Da Speiche S_4 bipartit ist, wird Graph G_c genau dann paarer Graph sein, falls c gerade ist.

Aus Gleichung (4.2) und $k = 1$ folgen für $p_{G_c}(\lambda)$ in Abhängigkeit von d_i die c Faktoren $p_{Li}(\lambda)$, $i = 1, 2, \dots, c$, zu

$$p_{Li}(\lambda) = \lambda^4 - 3d_i \lambda^3 + 3(d_i^2 - 1) \lambda^2 - (d_i^3 - 6d_i) \lambda - 3d_i^2 = (\lambda - d_i)^2 (\lambda^2 - d_i \lambda - 3), \quad (5.1)$$

wobei $d_i = 2\cos(2i\pi/c)$ gesetzt wird.

Gleichung (5.1) gestattet es, spezielle Eigenwerte mit ihren Vielfachheiten für geeignete i -Werte durch Einsetzen von $i = 0, c/6, c/4, c/3, c/2, 2c/3, 3c/4, 5c/6$ sofort zu ermitteln (Tabelle 1).

Tabelle 1 ($i = 0$ entspricht $i = c$)

$i =$	0	$c/2$	$c/4, 3c/4$	$c/3, 2c/3$	$c/6, 5c/6$
$\lambda_{1,2} =$	2	-2	0	-1	1
$\lambda_{3,4} =$	3, -1	1, -3	$\pm \sqrt{3}$	$1/2(-1 \pm \sqrt{13})$	$1/2(1 \pm \sqrt{13})$

Eine mitunter nützliche Operation ist das *switchen* eines Graphen G bezüglich einer Teilmenge W der Knotenpunktmenge $V(G)$ von G , welche G in einen kantengewichteten Graphen G^W überführt. Während alle Kanten von G in seine Adjazenzmatrix $\mathbf{A} = \mathbf{A}(G)$ mit dem Gewicht 1 eingehen, ergibt sich $\mathbf{A}^W = \mathbf{A}(G^W)$, indem alle den Knotenpunkten aus W zugeordneten Zeilen und Spalten von \mathbf{A} mit (-1) multipliziert werden. Gibt es W so, dass alle Kanten von G^W das Gewicht (-1) haben, so ist $\mathbf{A}^W = -\mathbf{A}$ und somit $p_G(\lambda) = \det(\lambda \mathbf{I}_n - \mathbf{A}) = (-1)^n \det(-\lambda \mathbf{I}_n + \mathbf{A}) = (-1)^n \det(-\lambda \mathbf{I}_n - \mathbf{A}^W) = (-1)^n p_{G^W}(-\lambda)$.

Satz 5.1.2:

Ist $c = 2c'$, c' ungerade, so gilt $p_{G_c}(\lambda) = p_{G_{c'}}(\lambda) p_{G_{c'}}(-\lambda)$. (5.2)

Beweis von Satz 5.1.2:

Zunächst wählen wir in G_c einen Schnitt $S = \{(j_1, j_c), (j_{c'}, j_{c'+1}), j = 1, 2, 3\}$, löschen diese sechs Kanten und erhalten zwei identische Graphen $G_{c'}$, in denen sich die entsprechenden Knotenpunkte jeweils im Index um c' unterscheiden. In jedem werden drei neue gewichtete Kanten eingefügt, und zwar mit $(+1)$ gewichtete Kanten $(j_1, j_{c'})$, was den Graph $G_{c'}$ ergibt, und weiterhin drei mit (-1) gewichteten Kanten $(j_{c'+1}, j_c)$, wodurch der Graph $G_{c''}$ folgt. Auf den Graphen $G_{c''}$ werde nun die switching-Operation angewandt. Dazu wähle man die mit der Knotenpunktmenge $W = \{4_{c'+1}, 4_{c'+3}, \dots, 4_c\} \cup \{j_{c'+2}, j_{c'+4}, \dots, j_{c-1}; j = 1, 2, 3\}$ von G_c korrespondierende Menge von $G_{c''}$ aus. Ist $c' \equiv c - 1 \pmod{2}$, also c' ungerade, so sind alle mit $(+1)$ gewichteten Kanten von $G_{c''}$ erfasst und wir haben den Graphen $G_{c''}^W = G_{c''}$. Die Graphen $G_{c'}$ und $G_{c''}$ unterscheiden sich nur durch ihre Kantengewichte $(+1)$ bzw. (-1) . Somit ist $p_{G_{c'}}(\lambda) = p_{G_{c''}}(-\lambda)$ und demzufolge $p_{G_c}(\lambda) = p_{G_{c'}}(\lambda) p_{G_{c''}}(\lambda) = p_{G_{c'}}(\lambda) p_{G_{c'}}(-\lambda)$. ☺

Es sei angemerkt, dass im Falle c' gerade eine alle mit (-1) gewichteten Kanten überdeckende Knotenpunktmenge in $G_{c''}$ nicht existieren kann.

5.2 Determinante der Adjazenzmatrix

Mit $p_{G_c}(\lambda) = \left[\prod_{i=1}^{i=c} p_{Li}(\lambda) \right]$ ergibt sich $a(G_c) = \left| \det(\mathbf{A}(G_c)) \right| = \left| p_{G_c}(0) \right| = \left| \prod_{i=1}^{i=c} p_{Li}(0) \right|$.

Weiter ist mit Gleichung (5.1) $|p_{Li}(0)| = 3d_i^2 = 12 \cos^2(2i\pi/c)$ und damit

$$a(G_c) = 3^c \left\{ \prod_{i=1}^{i=c} [2 \cos(2i\pi/c)]^2 \right\}.$$

(5.3)

Aus den beiden Produktformeln (I. M. Ryshik und I. S. Gradstein⁽¹²⁾, Seite 34)

$$q \text{ gerade: } 2^{q-1} \left[\prod_{l=0}^{l=q-1} \cos(x + 2l\pi/q) \right] = (-1)^{q/2} - \cos(qx), \text{ und}$$

$$q \text{ ungerade: } 2^{q-1} \left[\prod_{l=0}^{l=q-1} \cos(x + 2l\pi/q) \right] = \cos(qx)$$

erhält man für $x = 0$ und $l \geq 0$

$$\text{für } q = 4k: \quad \prod_{i=1}^{i=q} (2 \cos(2i\pi/q)) = 0,$$

$$\text{für } q = 2k + 1: \quad \prod_{i=1}^{i=q} (2 \cos(2i\pi/q)) = 2 \text{ und}$$

$$\text{für } q = 4k + 2: \quad \prod_{i=1}^{i=q} (2 \cos(2i\pi/q)) = -4.$$

Somit ergibt sich der

Satz 5.2.1:

Der Wert $a(G_c) = |\det(\mathbf{A}(G_c))|$ ist

$$\text{für } c \equiv 0, \text{ mod } 4: \quad a(G_c) = 0,$$

$$\text{für } c \equiv 1, \text{ mod } 2: \quad a(G_c) = 2^2 3^c \text{ und} \quad (5.4)$$

$$\text{für } c \equiv 2, \text{ mod } 4: \quad a(G_c) = 2^4 3^c.$$



5.3 Anzahl der Gerüste

Ein *Gerüst* $T = T(G)$ eines Graphen G ist ein *Baum* (ein kreisloser zusammenhängender Graph), für den $V(T) = V(G)$ und $E(T) \subseteq E(G)$ sind. Mit $t = t(G)$ werde die Anzahl aller Gerüste von Graph G bezeichnet.

Satz 5.3.1 (Hutschenreuther^(11, Seite 39)): Graph G sei r -regulär, habe n Knotenpunkte und die Eigenwerte $\mu_0 = r > \mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_{n-1}$.

$$\text{Dann ist } t(G) = (1/n) \left[\prod_{i=1}^{n-1} (r - \mu_i) \right] = (1/n) p_G'(r) \text{ und } p_G'(\lambda) = d/d\lambda (p_G(\lambda)). \quad (5.5)$$

Das Spektrum bzw. das charakteristische Polynom des $\text{Sp}G$ $G_c = G(\text{Sp}; c, \mathbf{1})$ ist nach der oben beschriebenen Methode bekannt, sodass mit $r = 3$ die Gerüstzahl $t(G_c)$ von G_c mit Gleichung (5.5) berechnet werden kann.

Graph $G_c = G(S_4; c, \mathbf{1})$ hat für $i = 1, 2, \dots, c$ die Eigenwerte (Gleichung 5.1)

$$\lambda_{1,2}(i) = d_i = 2\cos(2i\pi/c) \text{ und}$$

$$\lambda_{3,4}(i) = d_i/2 \pm (d_i^2/4 + 3)^{1/2} = \cos(2i\pi/c) \pm (\cos^2(2i\pi/c) + 3)^{1/2}.$$

Für $i = c$ ergeben sich $\lambda_{1,2}(c) = 2$, $\lambda_3(c) = 3$ (geht in Gleichung (5.5) nicht ein) sowie $\lambda_4(c) = -1$, womit der Faktor $(3 - 2)^2(3 - (-1)) = 4$ in $t(G_c)$ zu berücksichtigen ist.

Weiter sind für $1 \leq i < c$:

$$(3 - \lambda_1(i))(3 - \lambda_2(i)) = (3 - 2\cos(2i\pi/c))^2 \text{ und}$$

$$(3 - \lambda_3(i))(3 - \lambda_4(i)) =$$

$$= (3 - \cos(2i\pi/c) - (\cos^2(2i\pi/c) + 3)^{1/2})(3 - \cos(2i\pi/c) + (\cos^2(2i\pi/c) + 3)^{1/2}) =$$

$$= 6(1 - \cos(2i\pi/c)).$$

Mit Gleichung (5.5) erhält man nun für die Anzahl der Gerüste von G_c nach einfacher Umformung:

$$t(G_c) = 6^{c-1}/c \left[\prod_{i=1}^{c-1} (3 - 2\cos(2i\pi/c))^2 (1 - \cos(2i\pi/c)) \right].$$

Sei $f(i) = (3 - 2\cos(2i\pi/c))^2 (1 - \cos(2i\pi/c))$. Da die Kosinusfunktion gerade ist, kann das Produkt über i in Abhängigkeit von c weiter reduziert werden und es ergibt sich der

Satz5.3.2:

Mit den gegebenen Bezeichnungen gelten für G_c

$$t(G_c) = 6^{c-1}/c \left[\prod_{i=1}^u f(i) \right]^2 \quad \text{für } c = 2u + 1 \text{ und}$$

$$t(G_c) = 2^1 5^2 6^{c-1}/c \left[\prod_{i=1}^{u-1} f(i) \right]^2 \quad \text{für } c = 2u > 2. \quad \text{☺} \quad (5.6)$$

Für kleine c sind in Tabelle 2 die mit MAPLE⁽¹³⁾ berechneten Werte für $t(G_c)$ und die Quotienten $q(G_c) = \ln(t(G_c)) / n(G_c)$ angegeben.

Tabelle 2:

c	2	3	4	5	6	7	...	150
$t(G_c)$	150	6912	218700	5929605	149299200	3609254943	...	–
$q(G_c)$	0.62633	0.73675	0.76847	0.77977	0.78423	0.78596	...	0.76239

5.4 Anzahl der Linearfaktoren

Ein *Matching* eines (beliebigen) Graphen $G \in \mathbf{G}$ ist eine Menge knotendisjunkter Kanten von G . Matching M heie *maximum*, falls es die grtmgliche Kantenanzahl von G besitzt. Ein Matching, welches alle Knotenpunkte von G berdeckt, ist ein *Linearfaktor* (*1-Faktor*, *perfektes Matching*, kurz: LF).

e sei eine Kante von G . Die Anzahl der LF-en von G werde mit $lf = lf(G)$ und die Anzahl der LF-en die die Kante e von G enthalten oder nicht enthalten werde mit $r(e) = r(e, G)$ bzw. $b(e) = b(e, G)$ bezeichnet. Sind alle LF-en von G gleichwahrscheinlich, so gibt $p(e) = p(e, G) = r(e)/lf(G)$ die Wahrscheinlichkeit an, Kante e in einem LF von G zu finden.

Ist $lf(G) > 0$ und haben die drei Kanten e' , e'' und e''' von G einen Endknotenpunkt gemeinsam, so ist $p(e') + p(e'') + p(e''') = 1$.

Beobachtung: Der Graph $G_{c>1} = G(S_4; c, 1)$ hat einen Linearfaktor.

Beweis:

Ist $c > 1$ und gerade, so wähle man z. B. die Kanten $(1_i, 4_i)$, $i = 1, \dots, c$, als Kanten eines Linearfaktors. Die beiden peripheren Kreise C_2 und C_3 haben gerade Länge.

Ist $c = 3$, wähle man die Kanten $(1_1, 4_1)$, $(2_2, 4_2)$ und $(3_3, 4_3)$ als Kanten eines Linearfaktors. Von jedem peripheren Kreis verbleibt noch genau eine Kante für einen Linearfaktor von G_3 (Abb. 5.2 links). Ist $c > 3$ und ungerade, so kann mittels Einfügen eines Teiles von G_2 mit LF (Abb. 5.2 rechts) in G_c gezeigt werden, dass auch G_c , $c > 3$ und ungerade, wenigstens einen Linearfaktor hat. ☺

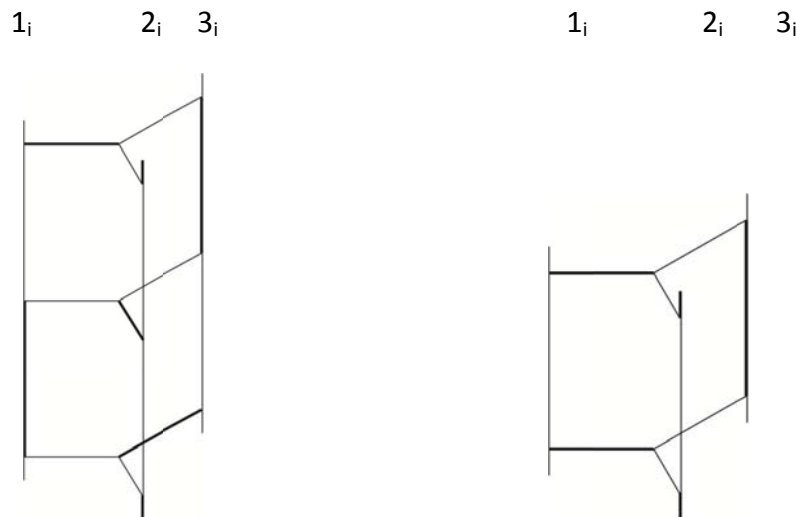


Abb. 5.2 Die Graphen G_2 und G_3 mit einem Linearfaktor

Satz 5.4.1:

Die Wahrscheinlichkeit, eine beliebige Kante e in einem Linearfaktor von G_c anzutreffen, hat den Wert $p(e) = 1/3$.

Beweis von Satz 5.4.1:

G_c kann durch Drehung um δ_3 bzw. δ_c'/δ_c'' mit sich zur Deckung gebracht werden. Wegen δ_3 haben jeweils alle drei Kanten einer Speiche von G_c den gleichen Wert $1/3$. Da durch δ_3 und δ_c'/δ_c'' die peripheren Kreise C_j ($j = 1, 2, 3$) von G jeweils auf sich selbst abgebildet werden, müssen deren Kanten ebenfalls den Wert $1/3$ haben. ☺

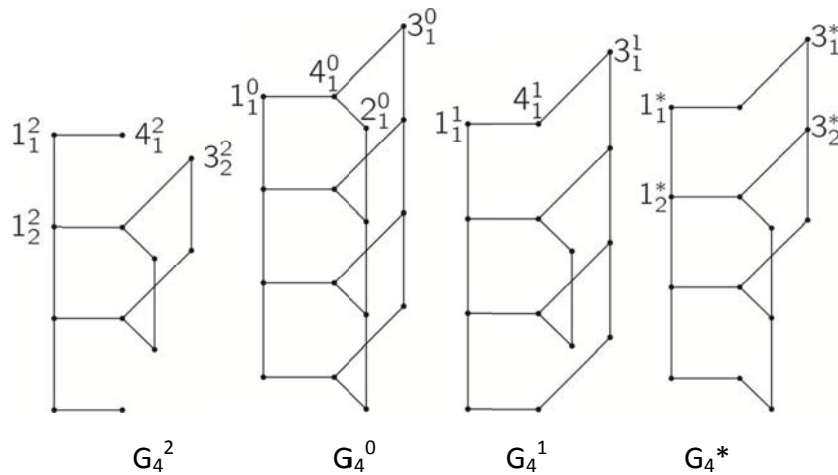


Abb. 5.3: Die Graphen G_4^0 , G_4^1 , G_4^2 und G_4^*

Es seien $G = (V, E) \in \mathbf{G}$ ein Graph mit der Knotenpunktmenge $V = V(G)$, der Kantenmenge $E = E(G)$, und es seien $x, y \in V(G)$ sowie $e = (x, y) \in E(G)$. Werden in G Knotenpunkt x und alle mit ihm inzidierenden Kanten bzw. Kante $e = (x, y)$ gelöscht, so erhält man den Graphen $G - x$ bzw. $G - (x, y)$.

Man wähle $E^0 = E^0(G_c) = \{(1_1, 1_c), (2_1, 2_c), (3_1, 3_c)\}$ und einen Linearfaktor $LF = LF(G_c)$ von $G_c = G(S_4, c > 1, \mathbf{1})$. Für $k = 0, 1, 2$ sei $LF^k = LF^k(G_c)$ ein Linearfaktor, welcher genau k Kanten von E^0 enthält. Man beachte, dass der Fall $k = 3$ nicht eintreten kann. Löscht man in G_c die k Kanten mit ihren Endknotenpunkten und außerdem die verbleibenden $(3 - k)$ Kanten von E^0 , so erhält man den Graphen G_c^k (In Abb. 5.3 für den SpG G_4 dargestellt).

Es sind $G_c^0 = G_c - E^0 = G_c - (1_1, 1_c) - (2_1, 2_c) - (3_1, 3_c)$, $G_c^1 \cong G_c - 1_1 - 1_c - (2_1, 2_c) - (3_1, 3_c) \cong G_c - (1_1, 1_c) - 2_1 - 2_c - (3_1, 3_c) \cong G_c^0 - 1_1^0 - 1_c^0 \cong \dots$, und $G_c^2 \cong G_c - 1_1 - 1_c - 2_1 - 2_c - (3_1, 3_c) \cong G_c - 1_1 - 1_c - (2_1, 2_c) - 3_1 - 3_c \cong G_c^0 - 2_1 - 2_c - 3_1 - 3_c \cong \dots$.

Jeder Knotenpunkt j_i von G_c der nicht in G_c^k gelöscht wurde, wird mit j_i^k bezeichnet ($j = 1, 2, 3, 4$ und $i = 1, 2, \dots, c$).

Der folgende Satz gibt die Anzahl $lf(G_c)$ der Linearfaktoren von G_c an:

Satz 5.4.1:

Für $c > 1$ ist

$$lf(G_c) = 2lf(G_c^0) + lf(G_c^1) = 2a3^{c/2} + 2^c + 2(-1)^c, \tag{5.6}$$

wobei $a = 0$ (c ungerade) oder $a = 1$ (c gerade) gesetzt wird.

Beweis von Satz 5.4.1:

1) $k = 0$: Es ist $G_c^0 = G_c - E^0$. Außerdem findet man leicht, dass $lf(G_2^0) = 3$ und $lf(G_3^0) = 0$ sind.

LF^0 sei ein Linearfaktor von $G_{c>3}^0$, der die Kante $(1_c^0, 4_c^0)$ und somit auch die Kanten $(2_{c-1}^0, 2_c^0)$, $(3_{c-1}^0, 3_c^0)$ und $(1_{c-1}^0, 4_{c-1}^0)$ enthält. Nach dem Löschen dieser Kanten mit ihren Endknotenpunkten bleibt der Graph G_{c-2}^0 übrig. Somit ergibt sich $lf(G_c^0) = 3lf(G_{c-2}^0)$.

Mit den gegebenen Anfangswerten für $c = 2$ und $c = 3$ ist $lf(G_c^0) = 3^{c/2}$ für gerades c und $lf(G_c^0) = 0$ für ungerades c .

2) $k=2$: Es sind $\text{lf}(G_2^2) = 3$ (für alle drei Möglichkeiten!), $\text{lf}(G_3^2) = 0$ und für $G_{c>3}^2 \cong G_c^0 - 2_1^0 - 2_c^0 - 3_1^0 - 3_c^0$, ergibt sich somit $\text{lf}(G_c^2) = 3\text{lf}(G_{c-2}^0) = \text{lf}(G_c^0)$.

3) $k=1$: Mit $G_c^1 \cong G_c^0 - 2_1 - 2_c$ seien Kante $(1_c^1, 4_c^1)$ und somit $(3_{c-1}^1, 3_c^1)$ im LF^1 von G_c^1 enthalten. Somit ist der resultierende Graph $G_c^1 - 1_c^1 - 4_c^1 - 3_{c-1}^1 - 3_c^1 \cong G_{c-1}^*$.

In G_{c-1}^* löschen wir die Knotenpunkte 1_{c-1}^* , 4_{c-1}^* , 2_{c-1}^* und 2_{c-2}^* , womit ein Graph isomorph zu G_{c-2}^1 erhalten wird. Werden andererseits in G_{c-1}^* die Knotenpunkte 2_{c-1}^* , 4_{c-1}^* , 1_{c-1}^* , 1_{c-2}^* gelöscht, so hat man einen Graphen isomorph zu G_{c-2}^* .

Also sind für $c > 3$: $\text{lf}(G_c^1) = 2\text{lf}(G_{c-1}^*)$, $\text{lf}(G_{c-1}^*) = \text{lf}(G_{c-2}^*) + \text{lf}(G_{c-2}^1)$ und somit $\text{lf}(G_c^1) = \text{lf}(G_{c-1}^1) + 2\text{lf}(G_{c-2}^1)$.

Mit $\text{lf}(G_2^1) = \text{lf}(G_3^1) = 3 \cdot 2 = 6$ erhält man schließlich für $c > 1$: $\text{lf}(G_c^1) = 2^c + 2(-1)^c$.

Aus 1), 2) und 3) folgt unmittelbar Satz 5.4.2. ☺

In Tabelle 2 sind für $c = 2, 3, \dots, 12$ die Anzahlen der Linearfaktoren von G_c^k , $k = 0, 1$ und G_c zusammengestellt:

Tabelle 2

c	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$k=0$	3	0	9	0	27	0	81	0	243	0	729
$k=1$	6	6	18	30	66	126	258	510	1026	2046	4098
$\text{lf}(G_c)$	12	6	36	30	120	126	420	510	1512	2046	5556

Bemerkung 5.4.1:

Von $\text{Sp} = S_4$ können zwei Folgen von Speichengraphen abgeleitet werden (s. Abb. 5.4): $B = [B^r; r = 1, 2, \dots]$ und $Q = [Q^r; r = 1, 2, \dots]$ mit $B^1 = Q^1 = S_4$.

Für deren Glieder gelten: $h(B^r) = 3r$, $v(B^r) = 3 \cdot 2^r - 2$ bzw. $h(Q^r) = 3$, $v(Q^r) = 6r - 2$. Beide Graphen sind bipartit und planar, B^r ist ein Baum und Q^r hat für $r > 1$ drei Vierkreise und $3(r - 2)$ Sechskreise.

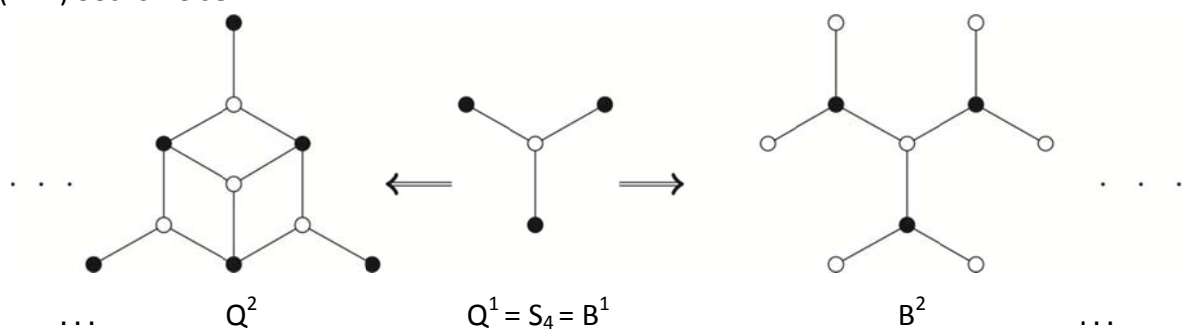


Abb. 5.4: Die ersten zwei Glieder der Folgen Q und B

Für die Speichengraphen $GB_c^r = G(B^r, c, \mathbf{1})$ und $GQ_c^r = G(Q^r, c, \mathbf{1})$ gilt ebenfalls, daß jede Kante e von GB^r bzw. GQ^r den Wert $p(e) = 1/3$ hat (s. Satz 5.4.1). Weiterhin kann man sich überlegen, dass für $r > 1$ und $c > 2$ $\text{lf}(GQ_c^r) = 3^{(r-1)c} \text{lf}(G_c)$ ist. Denn im Speichengraph GQ_c^r muß bei einem Linearfaktor LF von GQ_c^r jeweils genau eine „hängende“ Kante von jeder Speiche im Graphen GQ_c^r zu LF gehören.

5.5 Hamiltonkreise

Ein Graph $G \in \mathbf{G}$ heie *hamiltonsch*, falls es einen Kreis $C = C(G)$ in G derart gibt, dass $n(C) = n(G)$ ist, d. h., dass Kreis C alle Knotenpunkte von G berdeckt. Ein solcher Kreis heit *Hamiltonkreis* und wir setzen $C = HK$. Die *Anzahl der Hamiltonkreise* von G werde mit $hk(G)$ bezeichnet. Ein *Hamiltonweg* HW von G ist ein Weg, der alle Knotenpunkte von G berdeckt.

Satz 5.5.1: Fr $c > 2$ hat der Graph G_c wenigstens einen Hamiltonkreis.

Beweis:

Wir nehmen an, dass G_c einen Hamiltonkreis $HK = HK_c = HK(G_c)$ habe. Mit der oben fr den Speichengraphen $Sp = S_4$ angegebenen Knotenpunktnumerierung gibt es (bis auf Rotation) vier mgliche Anordnungen von HK bezglich einer Speiche $Sp_i = S_4$ von G_c (Abb. 5.5: a1, a2, b1, b2). Geht HK durch einen peripheren Knotenpunkt nur nach oben bzw. nur nach unten hindurch, so wird diese Situation mit „+“ bzw. mit „-“ und im dritten Falle (von oben nach unten) mit „±“ bezeichnet (Abb. 5.5). Offensichtlich folgt auf einen „-“ bzw. „±“-Durchgang ein „+“- oder „±“-Durchgang bzw. auf einen „+“- folgt ein „-“-Durchgang jeweils auf der darunter befindlichen Speiche. Die restlichen zu HK gehrenden Kanten der betrachteten Speichen $Sp = S_4$ ergeben sich zwangslufig. Mit Hilfe einer Matrix HK von c Zeilen und drei Spalten kann auf diese Art ein HK leicht veranschaulicht werden:

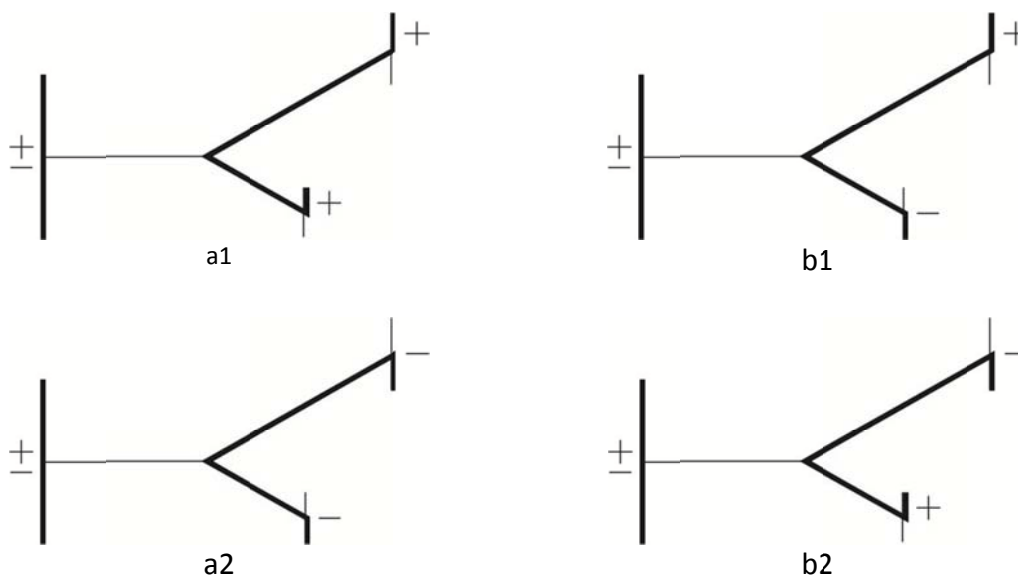


Abb. 5.5: Mgliche Anordnungen eines Hamiltonkreises in einer Speiche von G_c

Bei der hier gegebenen Speiche S_4 ist klar, dass ein „±“ in jeder Zeile von Matrix HK genau einmal auftritt.

Die Graphen G_3 , G_4 und G_6 haben jeweils einen solchen Hamiltonkreis HK_c ($c = 3, 4, 6$):

$$\mathbf{HK}_3 = \begin{pmatrix} \pm & - & + \\ + & \pm & - \\ - & + & \pm \end{pmatrix}, \mathbf{HK}_4 = \begin{pmatrix} \pm & - & - \\ + & \pm & + \\ - & \pm & - \\ \pm & + & + \end{pmatrix} \text{ bzw. } \mathbf{HK}_6 = \begin{pmatrix} \pm & - & - \\ + & + & \pm \\ - & - & \pm \\ + & \pm & + \\ - & \pm & - \\ \pm & + & + \end{pmatrix}.$$

Ist $c > 4$, so können geeignete „Einsätze“ $\mathbf{ES}_{u/g}$ in Matrixform (siehe unten) für ungerades bzw. gerades c angegeben werden, womit der Satz für $c > 2$ bewiesen ist.

☺

$$\mathbf{ES}_u = \begin{pmatrix} \pm & - & + \\ \pm & + & - \end{pmatrix} \text{ und } \mathbf{ES}_g = \begin{pmatrix} \pm & - & - \\ + & \pm & + \\ - & \pm & - \\ \pm & + & + \end{pmatrix}$$

Für $c = 2$ gibt es offensichtlich keinen \mathbf{HK}_2 .

Es könnte sich um den kleinsten bipartiten (planaren) kubischen Graph mit Doppelkanten handeln, der keinen HK besitzt?

Mit einem MAPLE-Programm⁽¹³⁾ zur Ermittlung der Anzahl der Hamiltonkreise eines beliebigen Graphen $G \in \mathbf{G}$ wurden die $hk(G_c)$ -Werte für $c = 3, 4, \dots, 12$ berechnet (Tabelle 3).

Tabelle 3:

c	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$hk(G_c)$	0	6	12	30	12	126	36	510	60	2046	132

Ein Vergleich von $hk(G_c)$ mit $lf(G_c)$ führt zu folgender

Vermutung 5.5.1:

Ist $b \geq 1$ und

$c = 2b$, so ist $hk(G_c) = 4[2^{c/2-1} - (-1)^{c/2-1}] = 4[2^{b-1} - (-1)^{b-1}]$, und für

$c = 2b + 1$ ist $hk(G_c) = lf(G_c)$.

Bemerkung 5.5.1:

Da Graph $G_{c>2}$ hamiltonsch und $n(G_c)$ gerade sind, folgt sofort, daß $G_{c>2}$ auch wenigstens zwei Linearfaktoren hat.

Bemerkung 5.5.2: Mit den in Abb. 2.1 gegebenen Speichen $So_6, Sf_8 \in \mathbf{Sp}(3)$ sind $Go_c = G(So_6, c, \mathbf{1})$ und $Gf_c = G(Sf_8, c, \mathbf{1})$, $c > 2$, zwei weitere Speichengraphen. Man kann sich leicht davon überzeugen, dass $hk(Go_c) = hk(Gf_c) = hk(G_c)$ ist.

Bemerkung 5.5.3:

Gegeben sind die Speichen Q^r und Q^{r+1} (Abb. 5.4), $r \geq 1$, mit den hängenden Kanten e_1, e_2 ,

e_3 bzw. f_1, f_2, f_3 (Abb. 5.5.2). Der Speichengraph $GQ_c^r = G(Q^r, c, \mathbf{1})$, $c > 2$ habe den Hamiltonkreis HK^r , der die Kanten e_2, e_3 von Q^r enthält. Wird von Speiche Q^r von GQ_c^r zu Speiche Q^{r+1} von GQ_c^{r+1} übergegangen, so soll der HK^r entsprechende Hamiltonkreis HK^{r+1} ebenfalls die beiden Kanten e_2, e_3 enthalten. Das ist aber auf genau zwei Weisen möglich: Entweder sind die Kanten $f_1, e_2, e_3, f_3 \in E(HK^{r+1})$ oder $f_1, e_3, e_2, f_2 \in E(HK^{r+1})$. Somit ergibt sich für jede Speiche der Faktor 2 und es ist $hk(GQ_c^{r+1}) = 2^c hk(GQ_c^r)$. ☺

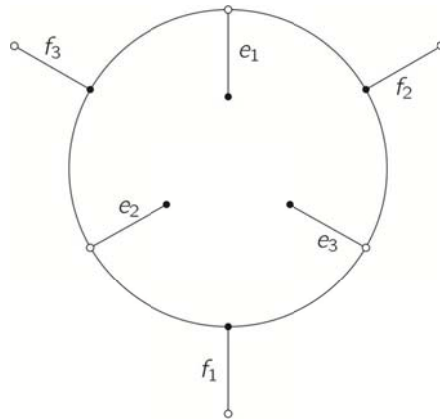


Abb. 5.5.2 Speiche Q^{r+1}

5.6 Packungsdichte (covering density)

Die Packungsdichte $\delta(G)$ eines Graphen G mit n Knotenpunkten ist $\delta(G) = \beta(G)/n$, wobei $\beta(G)$ die minimale Anzahl von Knotenpunkten ist, welche alle Kanten repräsentieren (überdecken). Der Graph $G_c = G(S_4; c, \mathbf{1})$ mit $c > 1$ hat $n = vc = 4c$ Knotenpunkte.

Somit sind

für c gerade: $\beta(G_c) = 2c$ und $\delta(G_c) = \frac{1}{2}$ und

für c ungerade: $\beta(G_c) = 4\lceil(c-1)/2\rceil + 3 = 2c + 1$ und $\delta(G_c) = \frac{1}{2} + (4c)^{-1}$. (5.7)

6. Die Graphen $Pe = G(K_2, 5, [1,2])$ und $Pf = G(S_4, 7, [1,2,3])$

Der Petersen Graph $Pe = G(K_2, 5, [1, 2])$ (Abb. 1) hat keinen Hamiltonkreis. Ebenso hat auch der Speichengraph $Pf = G(S_4, 7, [1, 2, 3])$ (Abb. 2.2) nach MAPLE-Rechnung keinen Hamiltonkreis, also $hk(Pe) = hk(Pf) = 0$. Deshalb sollen weitere Eigenschaften beider Graphen hier zusammengestellt werden.

Es sind:

i) $p_{Pe}(\lambda) = (\lambda - 3)(\lambda - 1)^5(\lambda + 2)^4$ und $p_{Pf}(\lambda) = (\lambda - 3)(\lambda + 1)^7(\lambda - 2)^8(\lambda^2 + 2\lambda - 1)^6$,

ii) $t(Pe) = 2^5 5^4 = 20000$ und $t(Pf) = 4^7 1^8 14^6 = 123363917824$; somit sind $q(Pe) = 0.990349$ sowie $q(Pf) = 0.912086$, also sehr unterschiedlich.

iii) In den beiden Graphen hat jede Kante $e \in E(Pe)$ von Pe bzw. $f \in E(Pf)$ von Pf die Pauling'sche Bindungsordnung $p(e) = p(f) = 1/3$. Weiter sind $lf(Pe) = 6$ und $lf(Pf) = 84$.

iv) Für Speiche $Sp' \in \mathbf{Sp}(3)$ haben die Graphen $Pf' = G(Sp', 7, [1, 2, 3])$ keinen HK, also $hk(Pf') = 0$.

7. Chemischer Bezug ?

Es ist nicht auszuschließen, dass gewisse ESPG-s auch für die Chemie von Interesse sein könnten. Nehmen wir an, dass die HMO-Theorie von Hückel⁽¹⁴⁻¹⁷⁾ auf 3-D-Moleküle anwendbar sei, so sollten z.B. die beiden paaren Graphen $GB_c^2 = G(B^2, c, \mathbf{k} = \mathbf{1})$ und $GQ_c^2 = G(Q^2, c, \mathbf{k} = \mathbf{1})$ mit je $10c$ Knotenpunkten für geeignete c -Werte interessant sein. Setzt man z. B. $c = 6$, so ergeben sich folgende positiven Eigenwerte:

für GB^2 : $3^{(1)}, 2^{(8)}, 1^{(11)}, 2.732^{(2)}, 0.732^{(2)}, 2.514^{(2)}, 2.086^{(2)}, 0.572^{(2)}$, und

für GQ^2 : $3^{(1)}, 2.8223^{(2)}, 2.727^{(2)}, 2.7093^{(1)}, 2.4812^{(2)}, 1.9032^{(1)}, 1.8019^{(4)}, 1.247^{(4)}, 1.2233^{(2)}, 1.1701^{(2)}, 0.6889^{(2)}, 0.445^{(4)}, 0.3186^{(2)}, 0.1939^{(1)}$.

Damit erhält man für die mit GB^2 bzw. GQ^2 korrespondierenden hypothetischen Moleküle mit jeweils 60 Kohlenstoffatomen eine π -Elektronenenergie von 94,544 bzw. 89.2896 $|\beta|$ -Einheiten, was einer Resonanzenergie per Elektron (kurz: RepE) von 0.5757 $|\beta|$ - bzw. 0.4882 $|\beta|$ -Einheiten entspricht. Dass der zweite Wert wesentlich kleiner als der erste ist resultiert aus den Vierkreisen in Q^2 . Der Graph $G_{c=15}$ hat ebenfalls 60 Knotenpunkte und seine Eigenwerte sind: $3, 2.8718^{(2)}, 2.5259^{(2)}, 2.0684^{(2)}, 2^{(2)}, 1.8271^{(4)}, 1.6307^{(2)}, 1.3383^{(4)}, 1.3028^{(2)}, 1.1027^{(2)}, 1.0110^{(2)}, 0.6180^{(4)}, -0.2091^{(4)}, -1^{(5)}, -1.0447^{(2)}, -1.1877^{(2)}, -1.4504^{(2)}, -1.6180^{(4)}, -1.8400^{(2)}, -1.9563^{(4)}, -2.3028^{(2)}, -2.7207^{(2)}, -2.9673^{(2)}$. Das mit $G_{c=15}$ korrespondierende hypothetische Molekül hat somit eine π -Elektronenenergie von 94.3202 $|\beta|$ -Einheiten, was einer RepE von 0.572 $|\beta|$ -Einheiten entspricht. Für das gut bekannte ikosaedrische C_{60} -Fulleren beträgt die RepE 0.5527 $|\beta|$ -Einheiten während für Graphit (ebenfalls im Hückel-Modell) ein Wert von 0.5761 $|\beta|$ -Einheiten per C-Atom bekannt ist⁽¹⁸⁾. Offensichtlich wird bei dem angegebenen hypothetischen C_{60} -Molekül, welches mit GB_c^2 korrespondiert, die geometrische Struktur zu einer größeren Destabilisierung beitragen, während das dem Speichengraphen $G_{c=15}$ entsprechende C_{60} -Molekül bei ebenfalls sterischer Behinderung (c wesentlich größer) eine gewisse Stabilität aufweisen sollte.

Man kann für chemisch relevante Fragestellungen den Knotenpunkten und/oder den Kanten einer Speiche und den Randkanten eines Speichengraphen Gewichte zuordnen, sodass bezüglich der (spektralen) Eigenschaften weitere Resultate zu erwarten sind.

8. Abschließende Bemerkungen

8.1) Werden neben Mehrfachkanten auch Schlingen zugelassen, so kann $c \geq 1$ gesetzt werden. Sei s eine Schlinge, die sich am Knotenpunkt $i \in V(G)$ von Graph G befindet. Der Beitrag von s zur Valenz von i und zum Eintrag a_{ii} in der Adjazenzmatrix $\mathbf{A} = \mathbf{A}(G) = (a_{ij})$ von G ist 2. Dann können in $G(\text{Sp}; c, \mathbf{k})$ ein oder mehrere $k_j = c$ sein.

Der Speichengraph $G(\text{Sp}, c = 1, \mathbf{k}) = L$ mit $\text{Sp} \in \mathbf{Sp}(h)$ heiße *trivialer SpG* (kurz: *TSpG*). Der TSpG $L \in \mathbf{G}^3$ ergibt sich aus $\text{Sp} \in \mathbf{Sp}(h)$, indem man an jeden der h hängenden

Knotenpunkte von Sp eine Schlinge anfügt (s. o.). Das Polynom $p_L(\lambda)$ ist stets Teiler des Polynoms von Graph $G(Sp, c > 1, \mathbf{k})$.

8.2) Einen $r \geq 3$ regulären Speichengraphen (kurz: r -SpG) kann man folgendermaßen erhalten: Man wähle eine Speiche $Sp \in \mathbf{G}$ mit h Knotenpunkten der Valenz $(r - 2)$ und $(v - h)$ Knotenpunkten der Valenz r . Hierzu kann auch als Speiche ein $(r - 2)$ -regulärer Graph gewählt werden, sodass $h = v$ ist. Die weitere Vorgehensweise für einen r -SpG ist ganz analog zur oben beschriebenen Konstruktion eines kubischen SpG. In Abb. 6 sind für $r = 4$ und 5 Beispiele für mögliche Speichen zu finden.

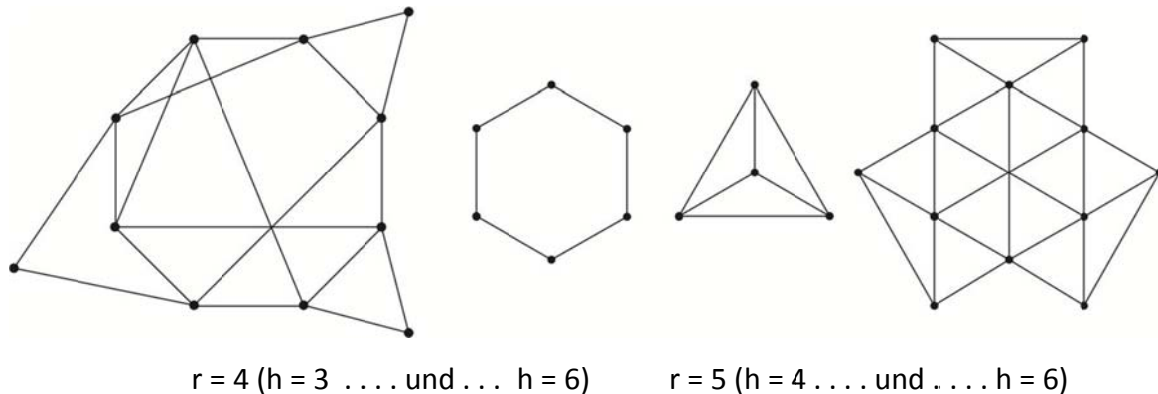


Abb. 6: Je zwei mögliche Speichen für einen 4- bzw. 5-regulären SpG

Wählt man z.B. das in Abb. 6 gegebene Sechseck als Speiche für einen $r = 4$ -regulären Speichengraphen $G^T = G(C_6, 4, \mathbf{1})$ mit $c = 4$ und $\mathbf{k} = \mathbf{1}$, so ergeben sich die Eigenwerte zu $\lambda_{l,k} = 2(\cos(2k\pi/6) + \cos(2l\pi/4))$, wobei k und l die Werte $l = 0, 1, \dots, 5$ und $k = 0, 1, 2, 3$ durchlaufen. Das charakteristische Polynom von G^T ergibt sich hier unmittelbar zu $p_{G^T} = \lambda^2(\lambda \pm 1)^6(\lambda \pm 2)^2(\lambda \pm 3)^2(\lambda \pm 4)$.

Wählt man z.B. als „Speiche“ den Graphen, der aus genau einem Knotenpunkt w besteht, so ergibt sich als „Speichengraph“ ein Kreis $C_c = G(w) = G(Sp = w, c > 1, \mathbf{k} = [1])$ der Länge c .

8.3) In einer 2007 erschienenen Arbeit von Sarazin, Paccolo und Previatali⁽¹⁹⁾ werden superverallgemeinerte Petersen Graphen (kurz: SGPG) $P(m, n; k_1, k_2, \dots, k_m)$, $m > 1$, $n > 2$ und $1 \leq k_j \leq m$, hinsichtlich ihrer algebraischen Struktur untersucht. Ist kein $k_j = n/2$, so können diese Graphen mit der hier eingeführten Nomenklatur auch als $G(C_m, n, [k_1, k_2, \dots, k_m])$ bezeichnet werden. Als Beispiele seien der Graph $G(C_3, 5, [1, 1, 2]) = P(3, 5; 1, 1, 2)$ und der Graph $G^T = G(C_6, 4, \mathbf{1}) = P(6, 4; 1, 1, 1)$ gegeben.

Unser Dank gilt Frau Barbara Hamann (TU Ilmenau) für die sorgfältige Anfertigung der Abbildungen.

9. Literatur

- (1) Petersen, J.: Die Theorie der regulären Graphen, Acta Math. **15** (1891), 193 - 220.
- (2) Coxeter, H. S. M.: Self-dual configurations and regular graphs, Bull. Amer. Math. Soc. **56** (1950), 413 - 455.

- (3) Bannai, K.: Hamiltonian cycles in generalized Petersen graphs, *J. Combin. Theory, Ser. B*, **24** (1978), 181 – 188.
- (4) Watkins, M. E.: A Theorem on Tait Colorings with an Application to the Generalized Petersen Graphs, *J. Combin. Theory*, **6** (1969), 152 – 164.
- (5) Bouwer, I. Z., W.W. Chernoff, B. Monson und Z. Star: *The Foster Census*, Charles Babbage Research Centre 1988
- (6) Davis, P. J.: *Circulant Matrices*, John Wiley & Sons, New York – Chichester – Brisbane – Toronto, 1979.
- (7) Heilbronner, E.: 116. Molecular Orbitals in homologen Reihen mehrkerniger aromatischer Kohlenwasserstoffe: I. Die Eigenwerte von LCAO-MO's in homologen Reihen, *Helv. Chim. Acta*, **37** (1954), 921 – 935.
- (8) Davidson, R. A.: Spectral analysis of graphs by cyclic automorphism subgroups, *Theoret. Chim. Acta (Berl.)*, **58** (1981), 193 – 231.
- (9) Lovasz', L.: Spectra of graphs with transitive groups, *Periodica Mathematica Hungarica*, Vol. 6 (2), 1975, 191 - 195
- (10) John, P. E. and H. Sachs: *Symmetric Graphs – Spectra and Eigenvectors*, Preprint No. 12-01, TU Ilmenau, Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften.
- (11) Cvetkovic', D. M., M. Doob and H. Sachs: *Spectra of Graphs*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1980/81; Academic Press, New York 1980; J.A. Barth Verlag, Heidelberg- Leipzig 1995, S. 128
- (12) Ryshik, I. M. und I. S. Gradstein: *Summen-, Produkt- und Integraltafeln, Tables of Series, Products, and Integrals*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1957, S. 34 (Formel 1.393)
- (13) Dieses Programm kann auf Wunsch angefordert werden (peter.john@tu-ilmenau.de)
- (14) Hückel, E.: Quantentheoretische Beiträge zum Benzolproblem, Teil 1, *Z. Physik*, **70** (1931), 204 – 287;
- (15) Hückel, E.: Quantentheoretische Beiträge zum Benzolproblem, Teil 2, *Z. Physik*, **72** (1931), 310 – 337
- (16) Hückel, E.: Quantentheoretische Beiträge zum Benzolproblem, Teil 3, *Z. Physik*, **76** (1932), 628 – 64
- (17) Hückel, E.: Quantentheoretische Beiträge zum Benzolproblem, Teil 4, *Z. Physik*: **83** (1933), 632 – 668
- (18) Fowler, P.W. and D. E. Manolopoulos: *An Atlas of Fullerenes*, Clarendon Press, Oxford, 1995, p. 45
- (19) Sarazin, M. L., W. Paccolo und A. Previtali: Generalizing the generalized Petersen graphs, *Discrete Mathematics*, **307** (2007), 534 – 543