
MASTERARBEIT

Herr
Nikolai Giesbrecht

**Das Ising-Polynom -
Eigenschaften,
Berechnungsmöglichkeiten,
Komplexität**

2014

MASTERARBEIT

Das Ising-Polynom - Eigenschaften, Berechnungsmöglichkeiten, Komplexität

Autor:

Nikolai Giesbrecht

Studiengang:

Diskrete und Computerorientierte Mathematik

Seminargruppe:

ZD11

Erstprüfer:

Prof. Dr. Peter Tittmann

Zweitprüfer:

Prof. Dr. Klaus Dohmen

Mittweida, 2014

Bibliografische Angaben

Giesbrecht, Nikolai: Das Ising-Polynom - Eigenschaften, Berechnungsmöglichkeiten, Komplexität, 67 Seiten, 9 Abbildungen, 6 Tabellen, Hochschule Mittweida, University of Applied Sciences, Fakultät Mathematik/Naturwissenschaften/Informatik

Masterarbeit, 2014

Referat

Diese Arbeit beschäftigt sich mit dem Ising-Polynom, einem Graphenpolynom, das von einem physikalischen Modell abgeleitet ist. Es werden verschiedene Darstellungen des Polynoms, seine Beziehungen zu anderen Graphenpolynomen und in ihm enthaltene Grapheninvarianten vorgestellt. Weiter werden, insbesondere für spezielle Graphenklassen, Berechnungsmöglichkeiten beschrieben und der Rechenaufwand betrachtet.

I. Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	I
Abbildungs- und Tabellenverzeichnis	II
1 Einführung	1
1.1 Einleitung	1
1.2 Hilfsmittel	2
1.3 Einige Voraussetzungen	2
1.3.1 Graphentheorie	2
1.3.2 Kombinatorik	4
2 Das Ising-Polynom	5
2.1 Physikalischer Hintergrund	5
2.2 Definitionen	6
2.2.1 Definition über Zustände	6
2.2.2 Definition über Schnitte	7
3 Beziehungen zu anderen Graphenpolynomen	9
3.1 Einsetzen konkreter Variablenwerte	9
3.2 Bipartitionspolynom	10
3.3 Van der Waerden-Polynom	11
3.3.1 Van der Waerden-Polynom	11
3.3.2 Matching-Polynom	12
3.4 Potts-Modell	13
3.5 Trivariates Ising-Polynom	13
3.5.1 Trivariates Ising-Polynom	13
3.5.2 Unabhängigkeitspolynom	14
3.5.3 Cliquen-Polynom	14
3.6 Einordnung	15
4 Grapheninvarianten	17
4.1 Direkt im Ising-Polynom enthalten	17
4.2 Im Van der Waerden-Polynom enthalten	19
4.3 Zustandssumme	20
4.4 Unterscheidbarkeit	20
5 Berechnung	23
5.1 Vorbetrachtungen	23
5.2 Komplexität	23
5.3 Rekurrenzen	24
5.3.1 Graphenoperationen	24
5.3.2 Kantenoperationen	28
5.3.3 Knotenoperationen	31

5.4	Graphenklassen	33
5.4.1	Wege	33
5.4.2	Kreise	37
5.4.3	Bäume	39
5.4.3.1	Berechnung	39
5.4.3.2	Beispiel	40
5.4.4	Vollständige Graphen	43
5.4.5	Vollständige Bipartite Graphen	44
5.4.6	Fächer, Räder, Sterne	45
5.4.6.1	Fächer	45
5.4.6.2	Räder	45
5.4.6.3	Sterne	46
5.4.7	Graphen mit beschränkter Baumweite	47
5.4.7.1	Definitionen	47
5.4.7.2	Berechnung	48
5.4.7.3	Einige Aussagen zur Baumweite	52
5.4.7.4	Beispiel	53
5.4.8	Graphen mit beschränkter Wegweite	57
5.4.9	Cographen	58
6	Zusammenfassung	61
	Literaturverzeichnis	63

II. Abbildungs- und Tabellenverzeichnis

Abbildungen

3.1 Beziehungen zwischen Graphenpolynomen	15
4.1 Zwei nicht-isomorphe Graphen mit gleichem Ising-Polynom	21
5.1 Ein Baum	40
5.2 Ein Fächer F_3	45
5.3 Ein Rad W_4	45
5.4 Ein Stern S_4	46
5.5 Ein Graph	48
5.6 Eine Baumzerlegung eines Graphen	49
5.7 Eine feine Baumzerlegung eines Graphen	49

Tabellen

5.1 Ising-Polynome einiger kurzer Wege	37
5.2 Ising-Polynome einiger kleiner Kreise	38
5.3 Ising-Polynome einiger kleiner vollständiger Graphen	43
5.4 Einige Graphenklassen mit beschränkter Baumweite	53
5.5 Beispielrechnung für Graphen mit beschränkter Baumweite: Teil 1	54
5.6 Beispielrechnung für Graphen mit beschränkter Baumweite: Teil 2	55

1 Einführung

1.1 Einleitung

Mit Graphen können verschiedene Strukturen und Beziehungen, beispielsweise Moleküle, diverse Netzwerke oder Abläufe, modelliert werden. Graphenpolynome werden als Darstellung von erfolgten Zählungen bestimmter Eigenschaften oder Strukturen von Graphen verwendet. Implizit sind in den Polynomen meist auch weitere Eigenschaften des jeweiligen Graphen gespeichert, anhand derer Ähnlichkeiten oder Unterschiede zwischen Graphen aufgezeigt werden können. Für viele Graphenpolynome ist das Anzahlproblem, das Polynom zu berechnen, in der Komplexitätsklasse $\#P$ oder steht in einer Beziehung zu ihr. Deshalb sind Berechnungsmöglichkeiten gesucht und in manchen Fällen auch bekannt, die den Rechenaufwand zumindest für einige Strukturen oder Graphenklassen verringern.

In dieser Arbeit soll das Ising-Polynom, das von einem physikalischen Modell, dem Ising-Modell, abgeleitet ist, vorgestellt werden. Insbesondere soll untersucht werden, für welche Graphenklassen es sich schnell, in diesem Fall in polynomieller Zeit, berechnen lässt. Betrachtet wird das Polynom hauptsächlich aus Sicht der Graphentheorie, auch wenn dabei immer wieder der physikalische Hintergrund in Beschreibungen anklingt.

Im folgenden Unterkapitel werden einige Begriffe und Notationen kurz erläutert. Kapitel 2 dient der einführenden Vorstellung des Ising-Polynoms. Ausgehend vom Ising-Modell werden einige Darstellungen des Polynoms beschrieben. In Kapitel 3 werden Spezialisierungen des Ising-Polynoms und seine Beziehungen zu anderen Graphenpolynomen betrachtet. Das Ising-Polynom enthält Informationen über den zugrunde liegenden Graphen. In Kapitel 4 werden mehrere dieser Eigenschaften vorgestellt. Viel Raum nimmt das Kapitel 5 ein, in dem Berechnungsmöglichkeiten beschrieben werden. Nach der Betrachtung von Rekurrenzbeziehungen werden Algorithmen für spezielle Graphenklassen beschrieben und ihr Aufwand betrachtet. Im abschließenden Kapitel 6 werden die Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefasst und offene Probleme im Zusammenhang mit dem Ising-Polynom genannt.

1.2 Hilfsmittel

Diese Arbeit wurde mit \LaTeX erstellt. Dabei wurde eine \LaTeX -Vorlage genutzt, die von Prof. Dr. Klaus Dohmen für Hochschulmitglieder auf den -webseiten zur Verfügung steht.

Bei der Berechnung der Polynome wurde zur Unterstützung die Mathematik-Software Maple verwendet.

1.3 Einige Voraussetzungen

1.3.1 Graphentheorie

Dieses Kapitel wurde insbesondere aufgrund uneinheitlicher Begriffe und Notationen in der Graphentheorie geschrieben und sollte deshalb nicht als thematische Einführung verstanden werden. Zur Graphentheorie kann man sich beispielsweise in [15] oder [7] informieren.

Ein *Graph* - genauer: ein (*ungewichteter ungerichteter*) *schlichter Graph* - $G = (V, E)$ besteht aus einer Knotenmenge $V(G)$ und einer Kantenmenge $E(G) \subseteq \{\{u, v\} | u, v \in V, u \neq v\}$. Die Angabe des Graphen bei der Knoten- bzw. Kantenmenge ist optional. V und E werden auch allgemein als Bezeichnungen für Knoten- bzw. Kantenmengen verwendet. Die Betrachtungen in dieser Arbeit beschränken sich auf *endliche Graphen*, d. h. $|V| < \infty$.

Die *Anzahl der Komponenten von G* wird mit $k(G)$ bezeichnet.

Für einen Knoten $v \in V$ ist der *Grad* $\deg(v) = \#\{u | \{u, v\} \in E\}$, die Anzahl seiner Nachbarn. Die *Gradfolge* eines Graphen ist eine Folge der Grade seiner Knoten.

Sei $W \subseteq V$. Der *Schnitt* $\partial W = \{\{u, v\} \in E | u \in W, v \in V \setminus W\}$ ist die Menge aller Kanten, die genau einen Endknoten in W haben. Eine andere bekannte Schreibweise ist $[W, \overline{W}]$ (mit $\overline{W} = V \setminus W$).

Seien $u, v \in V$ und $d(u, v)$ ihr Abstand in G . Dann ist $D(G) = \max_{u, v \in V} d(u, v)$ der *Durchmesser* von G .

Haben alle Knoten eines Graphen H den Grad k , dann ist H ein *regulärer* bzw. *k-regulärer Graph*.

Sei $W \subseteq V$. Es wird zwischen *offener Nachbarschaft* $N(W) = \{v | \{u, v\} \in E, u \in W\} \setminus W$ und *geschlossener Nachbarschaft* $N[W] = N(W) \cup W$ von W unterschieden. Im Falle

eines einzelnen Knoten als Argument sind die Mengenklammern dabei optional. Der Graph, auf den man sich bezieht, kann als Index angegeben werden, z. B. $N_G(v)$ mit $v \in V(G)$.

Sei $W \subseteq V$ eine *unabhängige* Menge. Dann gilt $W \cap (\cup_{v \in W} N(v)) = \emptyset$.

Sei A die Adjazenzmatrix von G , bezeichne I die $|V| \times |V|$ Einheitsmatrix und \det die Determinante. Das *charakteristische Polynom* von G ist $\Phi = \det(xI - A)$.

Sei $G' = (V', E')$ ein Graph. G und G' sind *isomorph*, wenn es eine Bijektion $\phi : V \rightarrow V'$ gibt, sodass $\forall u, v \in V$ gilt $\{u, v\} \in E$ gdw. $\{\phi(u), \phi(v)\} \in E'$.

Sei $W \subseteq V$. Der *knoteninduzierte Untergraph* $G[W] = (W, F)$ des Graphen G besteht aus der Knotenmenge W und der Kantenmenge $F = \{\{u, v\} \in E \mid u, v \in W\}$. Nun sei $F \subseteq E$. Der *kanteninduzierte Untergraph* $G[F] = (W, F)$ des Graphen G besteht aus der Kantenmenge F und der Knotenmenge $W = \{v \in V \mid \{u, v\} \in F\}$. Der Graph $G\langle F \rangle = (V, F)$ wird als *aufspannender Untergraph* von G bezeichnet.

Als *Clique* bzw. *k-Clique* wird ein $(k - 1)$ -regulärer Untergraph mit k Knoten bezeichnet.

Sei $M \subseteq E$. Die Menge M heißt *Matching*, falls alle Knoten von $G[M]$ den Grad 1 haben.

Ein *Baum* T ist ein zusammenhängender kreisfreier Graph. Als *Weg* P_n wird ein Baum mit n Knoten, deren Grad maximal 2 ist, bezeichnet. Ein *Kreis* C_n ist ein zusammenhängender 2-regulärer Graph mit n Knoten. Der *vollständige Graph* K_n ist $n - 1$ regulär und hat n Knoten. Sei $|V(G)| = n$. Dann ist $\bar{G} = (V, E(K_n) \setminus E(G))$ der *Komplementärgraph* von G . Der *kantenlose Graph* \bar{K}_n hat n Knoten und keine Kanten. Ein *Nullgraph*, im Allgemeinen K_0 , hat keine Knoten.

Seien $G_1 = (V_1, E_1)$ und $G_2 = (V_2, E_2)$ Graphen. Die *Vereinigung* der beiden Graphen ist $G_1 \cup G_2 = (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2)$. Falls dabei gilt, dass $V_1 \cap V_2 = \emptyset$ und $E_1 \cap E_2 = \emptyset$ ist, dann ist es eine *disjunkte Vereinigung*. Als *Verbindung* der Graphen wird $G_1 + G_2 = (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2 \cup \{\{v_1, v_2\} \mid v_1 \in V_1, v_2 \in V_2\})$ bezeichnet.

Sei $G = (V, E)$ ein Graph. Weiter sei $e = \{u, v\} \notin E$ mit $u, v \in V, u \neq v$. Der Graph $G + e$ geht aus G durch das Einfügen der Kante e hervor. Nun sei $e \in E$. Der Graph $G - e$ geht aus G durch Entfernen der Kante e hervor. Mit G/e wird der Graph bezeichnet, der aus G durch Kontraktion der Kante e hervorgeht. Bei der *Extraktion* einer Kante werden sowohl die Kante als auch alle zu ihr inzidenten Knoten und die zu ihnen inzidenten Kanten entfernt. Wenn aus G die Kante e extrahiert wird, dann erhält man den Graphen $G \dagger e$.

Sei $G = (V, E)$ ein Graph. Zudem sei $v \notin V$. Wird G der Knoten v hinzugefügt, dann entsteht der Graph $G + v$. Jetzt sei $v \in V$. Der Graph $G - v$ geht aus G durch Entfernen des Knoten v und aller zu ihm inzidenten Kanten hervor. Sei nun weiter auch $u \in V$ mit $u \neq v$. Werden die Knoten u und v fusioniert, dann entsteht der Graph G_{uv} .

1.3.2 Kombinatorik

Für ein besseres Verständnis der Arbeit können grundlegende Kenntnisse der Kombinatorik und (gewöhnlicher) erzeugender Funktionen hilfreich sein. Diese und weitere Themen der Kombinatorik werden beispielsweise in [13] oder [1] behandelt.

Sei $\{f_n\}$ eine Folge. Die formale Potenzreihe $F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n$ heißt *gewöhnliche erzeugende Funktion* dieser Folge. Im weiteren Text sind mit erzeugenden Funktionen gewöhnliche erzeugende Funktionen gemeint.

Es wird das „Wahrheits-Symbol“ genutzt. Sei P eine Aussage. Dann ist

$$[P] = \begin{cases} 1 & \text{falls } P \text{ wahr,} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

2 Das Ising-Polynom

2.1 Physikalischer Hintergrund

Die Informationen der folgenden Abschnitte stammen von [18–22, 27].

Das Ising-Modell, ein Modell zur Untersuchung des Ferromagnetismus, wurde 1920 von Wilhelm Lenz (1888 - 1957) eingeführt. Bei ihm untersuchte Ernst Ising (1900 - 1998), nach dem das Ising-Modell benannt wurde, von 1922 bis 1924 das Modell in seiner Doktorarbeit. Durch weitere Untersuchungen wurde die Tauglichkeit des Modells bekannt und das Modell wurde dann auch anderweitig eingesetzt.

Das Ising-Modell beschreibt den Ferromagnetismus in Festkörpern oder, allgemeiner formuliert, magnetische Ordnungen bei tiefen Temperaturen. Im Heisenberg-Modell wird Ferromagnetismus durch den Hamiltonoperator \hat{H} , einem Energieausdruck, beschrieben:

$$\hat{H} = - \sum_{i,j} J_{ij} \vec{s}_i \vec{s}_j - \vec{H} \sum_i \vec{s}_i \quad (2.1)$$

J_{ij} Kopplungskonstante

\vec{s}_i Spin (Eigendrehimpuls) des Atoms/Teilchens am Platz i des Kristallgitters

\vec{H} (Externes) Magnetfeld

Die Spins bestimmen das magnetische Moment, die Stärke des magnetischen Dipols. Bei den Betrachtungen wird häufig angenommen, dass nur zwischen benachbarten Teilchen Wechselwirkungen bestehen.

Beim Ising-Modell haben die Spins jeweils genau eine (Vektor-)Komponente, die nur zwei Werte (± 1) bzw. Zustände annehmen kann. Damit beschränkt man die Betrachtungen auf eine Achse.

Für das Ising-Modell werden häufig Vereinfachungen vorgenommen. So werden externe Magnetfelder bei den Untersuchungen nicht berücksichtigt, d. h. die zweite Summe in (2.1) ist 0. Eine weitere Vereinfachung ist, die Kopplungskonstante für alle (betrachteten) Wechselwirkungen gleich zu setzen.

Das Ising-Modell kann auch als Spezialisierung des (physikalischen) Potts-Modells betrachtet werden, bei dem mehr als zwei Zustände möglich sind.

2.2 Definitionen

2.2.1 Definition über Zustände

Diese Beschreibung folgt größtenteils [2].

Die Definition orientiert sich an der physikalischen Vorlage. Sei $G = (V, E)$ ein Graph und ein *Zustand* $\hat{\sigma}$ von G eine Funktion $\hat{\sigma} : V \rightarrow \{-1, 1\}$. Der Wert von $\hat{\sigma}$ für einen Knoten v wird als *Magnetisierung* von v bezeichnet. Die *Energie* $\hat{E}n(\hat{\sigma}, e)$ einer Kante $e = \{u, v\} \in E$ sei $\hat{E}n(\hat{\sigma}, e) = \hat{\sigma}(u) \hat{\sigma}(v)$. Sei Ω die Menge aller Zustände von G .

Definition 2.1 ([2] Definition 2.1) Die *Energie* $\hat{E}n(\hat{\sigma})$ des Zustands $\hat{\sigma}$ ist die Summe der Energien aller Kanten von G :

$$\hat{E}n(\hat{\sigma}) = \sum_{e \in E} \hat{E}n(\hat{\sigma}, e). \quad (2.2)$$

Definition 2.2 ([2] Definition 2.2) Die *Magnetisierung* $\hat{M}(\hat{\sigma})$ eines Zustands $\hat{\sigma}$ ist die Summe der Magnetisierungen aller Knoten von G :

$$\hat{M}(\hat{\sigma}) = \sum_{v \in V} \hat{\sigma}(v). \quad (2.3)$$

Definition 2.3 ([2] Definition 2.3) Das *Ising-Polynom* eines Graphen $G = (V, E)$ ist

$$\hat{Z}(G; x, y) = \sum_{\sigma \in \Omega} x^{\hat{E}n(\hat{\sigma})} y^{\hat{M}(\hat{\sigma})} = \sum_{i, j} a_{i, j} x^i y^j \quad (2.4)$$

mit $i, j \in \mathbb{Z}$.

Die Koeffizienten $a_{i, j}$ geben jeweils die Anzahl der Zustände mit i Kanten mit positiver Energie und j positiv magnetisierten Knoten an. Somit ist das Ising-Polynom eine erzeugende Funktion für die Anzahl der Zustände von G mit gegebener Energie und Magnetisierung.

Für die gleich folgende Definition über Schnitte werden noch zwei Eigenschaften des Polynoms erwähnt.

Lemma 2.4 (Vgl. [2] Satz 4.1 1.) *Im Ising-Polynom ist der Grad des Polynoms in x gleich $|E|$ und der Grad des Polynoms in y gleich $|V|$.*

Beweis: Dies folgt aus den Definitionen der Energie $\hat{E}n(\hat{\sigma})$ und der Magnetisierung $\hat{M}(\hat{\sigma})$ beim Einsetzen der maximal möglichen Werte für die Magnetisierung jedes Knotens und der Energie jeder Kante. \square

Bemerkung 2.5 Das Ising-Polynom $\hat{Z}(G; x, y)$ kann negative Exponenten enthalten und

ist deshalb „nur“ ein Laurent-Polynom.

2.2.2 Definition über Schnitte

Um zu zeigen, dass die folgende Definition des Ising-Polynoms äquivalent zu der vorherigen ist, werden einige Erklärungen vorangestellt.

Als Anschauung wird die Knotenmenge eines Graphen $G = (V, E)$ anhand der Magnetisierung, positiv bzw. negativ, in zwei Blöcke partitioniert¹. Sei W die Menge der negativ magnetisierten Knoten. Damit wird mit jeder beliebigen Teilmenge W jeweils ein Zustand $\hat{\sigma}$ beschrieben. Weiter gibt ∂W die Menge der Kanten zwischen negativ und positiv magnetisierten Knoten an. Nun kann als Ausgangspunkt gewählt werden, dass alle Knoten positiv magnetisiert wären, und anhand der jeweiligen Teilmenge W die Exponenten von x und y entsprechend der geringeren Energie und Magnetisierung reduziert werden.

Definition 2.6 (Vgl. [2] Definition 2.6) Das *Ising-Polynom* eines Graphen $G = (V, E)$ ist

$$\hat{Z}(G; x, y) = x^{|E|} y^{|V|} \sum_{W \subseteq V} x^{-2|\partial W|} y^{-2|W|} = \sum_{i,j} a_{i,j} x^i y^j \tag{2.5}$$

mit $i, j \in \mathbb{Z}$.

Sei $G = (V, E)$ ein Graph und Ω die Menge aller Zustände von G . Mit einigen Änderungen kann man anstelle des Laurent-Polynoms ein Polynom erhalten. Bezogen auf die vorherige Definition über Zustände wären dies folgende:

Laurent-Polynom	Polynom	Bemerkung
$\hat{\sigma} : V \rightarrow \{-1, 1\}$	$\sigma : V \rightarrow \{0, 1\}$	$e = \{u, v\} \in E$
$\hat{E}n(\hat{\sigma}, e) = \hat{\sigma}(u) \hat{\sigma}(v)$	$En(\sigma, e) = [\sigma(u) = \sigma(v)]$	
$\hat{E}n(\hat{\sigma}) = \sum_{e \in E} \hat{E}n(\hat{\sigma}, e)$	$En(\sigma) = \sum_{e \in E} En(\sigma, e)$	
$\hat{M}(\hat{\sigma}) = \sum_{v \in V} \hat{\sigma}(v)$	$M(\sigma) = \sum_{v \in V} \sigma(v)$	
$\hat{Z}(G; x, y) = \sum_{\hat{\sigma} \in \Omega} x^{\hat{E}n(\hat{\sigma})} y^{\hat{M}(\hat{\sigma})}$	$Z(G; x, y) = \sum_{\sigma \in \Omega} x^{En(\sigma)} y^{M(\sigma)}$	

D. h. nur die Knoten mit positiver Magnetisierung und die Kanten mit positiver Energie werden gezählt bzw. nur Knoten eines Partitionsblocks und die Kanten, die nicht im Schnitt sind, werden in jedem Zustand gezählt. Die unterschiedlichen Zählweisen der selben Mengen werden in den folgenden zwei Definitionen verdeutlicht:

¹ Abweichend von der üblichen Definition einer Mengenpartition können Blöcke hierbei leer sein.

Definition 2.7 ([10] Definition 5) Das *Ising-Polynom* eines Graphen $G = (V, E)$ ist

$$Z(G; x, y) = \sum_{W \subseteq V} x^{|E(G[W])| + |E(G[\overline{W}])|} y^{|W|} = \sum_{i, j} a_{i, j} x^i y^j. \quad (2.6)$$

Definition 2.8 ([8] Definition 2) Das *Ising-Polynom* eines Graphen $G = (V, E)$ ist

$$Z(G; x, y) = x^{|E|} y^{|V|} \sum_{W \subseteq V} x^{-|\partial W|} y^{-|W|} = \sum_{i, j} a_{i, j} x^i y^j. \quad (2.7)$$

Bei beiden Varianten sind $i, j \in \mathbb{N}_0$.

Bemerkung 2.9 (Vgl. [8] Bemerkung 3) Die Definitionen des Ising-Polynoms 2.7 und 2.8 sind nicht äquivalent zu den Definitionen des Polynoms in Definition 2.3 und Definition 2.6. Es gelten folgende Umrechnungsregeln:

$$\begin{aligned} \hat{Z}(G; x, y) &= x^{-|E|} y^{-|V|} Z(G; x^2, y^2), \\ Z(G; x, y) &= x^{\frac{1}{2}|E|} y^{\frac{1}{2}|V|} \hat{Z}(G; x^{\frac{1}{2}}, y^{\frac{1}{2}}). \end{aligned}$$

Die Unterscheidung der Blöcke bei der Kantenzählung, die in Definition 2.7 angedeutet wird, wird in dem selben Artikel bei dem *trivariaten Ising-Polynom* (s. Kapitel 3.5) durchgeführt.

Bemerkung 2.10 In dieser Arbeit werde ich die Betrachtungen im Allgemeinen nur auf das Ising-Polynom $Z(G; x, y)$ laut Definition 2.7 bzw. 2.8 beziehen.

3 Beziehungen zu anderen Graphenpolynomen

3.1 Einsetzen konkreter Variablenwerte

Das Einsetzen von konkreten Werten für Variablen von Graphenpolynomen kann andere interessante Polynome oder einige Eigenschaften der Graphen als Ergebnis haben. Für das Ising-Polynom $Z(G; x, y)$ werden hier drei Fälle für einen Graphen $G = (V, E)$ betrachtet.

Fall 1: $x = 1; y = 1$

$$Z(G; 1, 1) = 1^{|E|} 1^{|V|} \sum_{W \subseteq V} 1^{-|\partial W|} 1^{-|W|} = \sum_{W \subseteq V} 1 = 2^{|V|}$$

Falls für x und y jeweils der Wert 1 eingesetzt wird, wird die Anzahl der Teilmengen der Knotenmenge gezählt. Die Anzahl ist gleich der Summe der Koeffizienten des Ising-Polynoms des Graphen G , da mit dem Einsetzen von 1 für beide Variablen auch die Anzahl der Summanden des Polynoms gezählt wird.

Mit $|V| = 0$ erhält man aus der obigen Gleichung mit den eingesetzten Variablenwerten auch das Ising-Polynom für den Nullgraphen K_0 ,

$$Z(K_0; x, y) = 1. \quad (3.1)$$

Fall 2: $x = 1$

$$\begin{aligned} Z(G; 1, y) &= 1^{|E|} y^{|V|} \sum_{W \subseteq V} 1^{-|\partial W|} y^{-|W|} = y^{|V|} \sum_{W \subseteq V} y^{-|W|} \\ &= y^{|V|} \sum_{j=0}^{|V|} \binom{|V|}{j} y^{-j} = \sum_{j=0}^{|V|} \binom{|V|}{j} y^j \end{aligned}$$

Mit der Konkretisierung $x = 1$ erhält man eine erzeugende Funktion für die Anzahl der Teilmengen der Knotenmenge mit gegebener Mächtigkeit. Dies ist gleichzeitig das Ising-Polynom für den kantenlosen Graphen $\overline{K_n}$,

$$Z(\overline{K_n}; x, y) = \sum_{j=0}^{|V|} \binom{|V|}{j} y^j = (1 + y)^{|V|}. \quad (3.2)$$

Fall 3: $y = 1$

$$Z(G; x, 1) = x^{|E|} 1^{|V|} \sum_{W \subseteq V} x^{-|\partial W|} 1^{-|W|} = x^{|E|} \sum_{W \subseteq V} x^{-|\partial W|} = \sum_{W \subseteq V} x^{|\partial W|} \quad (3.3)$$

Der Fall $y = 1$ führt zu einer erzeugenden Funktion für die zweifache Anzahl der Schnitte eines Graphen mit gegebener Mächtigkeit der im Schnitt enthaltenen Kantenmenge. Es kommt zur doppelten Zählung, da für eine beliebigen Schnitt ∂W gilt $\partial W = \partial \bar{W}$ und somit auch $|\partial W| = |\partial \bar{W}|$. Diese Gleichheit zeigt sich anhand folgender Symmetrien für die Koeffizienten:

$$a_{i,j} = a_{i,|V|-j} \quad \text{für } Z(G; x, y) \quad (3.4)$$

$$a_{i,j} = a_{i,-j} \quad \text{für } \hat{Z}(G; x, y) \quad (3.5)$$

Mithilfe dieses Polynoms kann aus dem Ising-Polynom das *Schnitt-Polynom* bestimmt werden.

Definition 3.1 (Vgl. [8] S. 22) Das *Schnitt-Polynom* eines Graphen $G = (V, E)$ ist

$$C(G; x) = \frac{1}{2^{k(G)}} \sum_{W \subseteq V} x^{|\partial W|}. \quad (3.6)$$

Sei G ein Graph. Die Anzahl seiner Komponenten ist aus dem Ising-Polynom ermittelbar (s. Kapitel 4.1). Zudem gilt

$$Z(G; x, 1) = \sum_{W \subseteq V} x^{|\partial W|} = \frac{2^{k(G)}}{2^{k(G)}} \sum_{W \subseteq V} x^{|\partial W|} = 2^{k(G)} C(G; x) \quad (3.7)$$

bzw.

$$C(G; x) = \frac{1}{2^{k(G)}} \sum_{W \subseteq V} x^{|\partial W|} = \frac{1}{2^{k(G)}} Z(G; x, 1). \quad (3.8)$$

Folgerung 3.2 Das *Schnitt-Polynom* eines Graphen kann anhand des Ising-Polynoms des Graphen bestimmt werden.

3.2 Bipartitionspolynom

Definition 3.3 ([8] Definition 1) Das *Bipartitionspolynom* eines Graphen $G = (V, E)$ ist

$$B(G; x, y, z) = \sum_{W \subseteq V} x^{|W|} \sum_{F \subseteq \partial W} y^{|N_{(V,F)}(W)|} z^{|F|}. \quad (3.9)$$

Satz 3.4 ([8] Satz 8) *Das Bipartitionspolynom eines Graphen $G = (V, E)$ kann wie folgt dargestellt werden:*

$$B(G; x, y, z) = \sum_{W \subseteq V} x^{|W|} \prod_{v \in N_G(W)} [y[(1+z)^{|N_G(v) \cap W|} - 1] + 1]. \quad (3.10)$$

Aus dem Bipartitionspolynom kann das Ising-Polynom berechnet werden:

Satz 3.5 ([8] Satz 23) *Das Ising-Polynom eines Graphen $G = (V, E)$ berechnet sich aus dem Bipartitionspolynom wie folgt:*

$$Z(G; x, y) = x^{|E|} y^{|V|} B(G; \frac{1}{y}, 1, \frac{1}{x} - 1). \quad (3.11)$$

Beweis: ([8]) Mithilfe von Satz 3.4 ergibt sich

$$\begin{aligned} B(G; \frac{1}{y}, 1, \frac{1}{x} - 1) &= \sum_{W \subseteq V} \left(\frac{1}{y}\right)^{|W|} \prod_{v \in N_G(W)} [1[(1 + (\frac{1}{x} - 1))^{|N_G(v) \cap W|} - 1] + 1] \\ &= \sum_{W \subseteq V} y^{-|W|} \prod_{v \in N_G(W)} x^{-|N_G(v) \cap W|} \\ &= \sum_{W \subseteq V} x^{-|W|} y^{-|W|}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Mit den Vorfaktoren aus (3.11) folgt die Behauptung. \square

Verschiedene Repräsentationen des Bipartitionspolynoms aus [8] können somit auf das Ising-Polynom eines Graphen $G = (V, E)$ übertragen werden:

$$Z(G; x, y) = x^{|E|} y^{|V|} \sum_{W \subseteq V} y^{-|W|} \sum_{F \subseteq \partial W} (x^{-1} - 1)^{|F|} \quad (3.13)$$

$$Z(G; x, y) = x^{|E|} y^{|V|} \sum_{W \subseteq V} y^{-|W|} \prod_{v \in N_G(W)} x^{-|N_G(v) \cap W|} \quad (3.14)$$

$$Z(G; x, y) = x^{|E|} y^{|V|} \sum_{W \subseteq V} y^{-|W|} \prod_{v \in V \setminus W} x^{-|N_G(v) \cap W|} \quad (3.15)$$

3.3 Van der Waerden-Polynom

3.3.1 Van der Waerden-Polynom

Definition 3.6 ([2] Definition 2.7) *Das van der Waerden-Polynom eines Graphen G ist*

$$W(G; t, u) = \sum_{i, j} b_{i, j} u^i t^j, \quad (3.16)$$

wobei $b_{i,j}$ die Anzahl der Untergraphen von G mit i Kanten und j Knoten mit ungeradem Grad ist.

Definition 3.7 ([2] Definition 2.8) Eine T -Verbindung (T,A) in einem Graphen $G = (V,E)$ besteht aus einer Knotenmenge $T \subseteq V$ und einer Kantenmenge $A \subseteq E$, so dass alle Knoten in T inzident sind zu einer ungeraden Anzahl an Kanten in A und alle übrigen Knoten des Graphen inzident sind zu einer geraden Anzahl an Kanten in A .

Mithilfe von T -Verbindungen können Umrechnungen, die nicht trivial sind, zwischen T -Verbindungen und Schnitten, und damit zwischen dem van der Waerden-Polynom und dem Ising-Polynom durchgeführt werden.

Satz 3.8 ([2] Satz 2.9) Sei $G = (V,E)$ ein Graph, $c_{i,j} = \#\{\partial W \mid \partial W \subseteq E, |W| = i, |\partial W| = j\}$, die Anzahl der Schnitte mit i Knoten auf der einen Seite des Schnittes und j Kanten im Schnitt, und $d_{i,j} = \#\{(T,A) \mid (T,A) \text{ ist eine } T\text{-Verbindung}, |T| = i, |A| = j\}$, die Anzahl der T -Verbindungen mit i Knoten ungeraden Grades und j Kanten. Dann gilt

$$\sum_{i,j} d_{i,j} x^i y^j = 2^{-|V|} \sum_{i,j} c_{i,j} (1-x)^i (1+x)^{|V|-i} (1-y)^j (1+y)^{|E|-j}. \quad (3.17)$$

Satz 3.9 ([2] Korollar 2.10) Mit der Notation im Satz 3.8 gilt

$$\sum_{i,j} c_{i,j} x^i y^j = 2^{-|E|} \sum_{i,j} d_{i,j} (1-x)^i (1+x)^{|V|-i} (1-y)^j (1+y)^{|E|-j}. \quad (3.18)$$

Seien $c_{i,j}$ und $d_{i,j}$ wie in (3.17) bzw. (3.18), $a_{i,j}$ der Koeffizient des Ising-Polynoms (Def. 2.8) und $b_{i,j}$ der Koeffizient des van der Waerden-Polynoms (Def. 3.6). Dann gilt:

$$d_{i,j} = b_{j,i}, \quad (3.19)$$

$$c_{i,j} = a_{|E|-j, |V|-i}. \quad (3.20)$$

Folgerung 3.10 Das Ising-Polynom kann anhand des van der Waerden-Polynoms und das van der Waerden-Polynom kann anhand des Ising-Polynoms bestimmt werden.

3.3.2 Matching-Polynom

Definition 3.11 (Vgl. [16] Definition A.18) Das *Matching-Polynom* eines Graphen $G = (V,E)$ ist

$$M(G;x,y) = \sum_{A \subseteq E} [A \text{ ist ein Matching}] x^{|V|-2|A|} y^{|A|}. \quad (3.21)$$

Satz 3.12 ([2] Satz 4.2) Sei G ein Graph. Das *Matching-Polynom* von G kann aus dem van der Waerden-Polynom $W(G;t,u)$ hergeleitet werden.

Beweis: (Vgl. [2]) Ein Matching in G mit k Kanten ist ein Untergraph mit $2k$ Knoten, alle mit ungeradem Grad, und k Kanten. Die Anzahl solcher Untergraphen kann man anhand der Koeffizienten von $t^k u^{2k}$ ablesen. \square

3.4 Potts-Modell

Definition 3.13 ([16] Definition A.21) Das *Potts-Modell* eines Graphen $G = (V, E)$ ist

$$Z(G; x, y) = \sum_{A \subseteq E} x^{k(G(A))} y^{|A|}. \quad (3.22)$$

Die Anzahl der Komponenten eines Graphen und auch ihre Knotenanzahl ist aus dem Ising-Polynom ermittelbar (s. Kapitel 4.1). Beim Ising-Polynom werden zwar Kanten in knoteninduzierten Untergraphen gezählt, dabei wird für eine beliebige Knotenteilmenge $W \subseteq V(G)$ eines Graphen G jedoch nicht unterschieden, ob die Kanten in $E(G[W])$ oder $E(G[\overline{W}])$ enthalten sind (s. Def. 2.7). Deshalb können dabei im Allgemeinen nicht die Anzahl der durch die Kanten induzierten Komponenten bestimmt werden. Somit kann erstmal keine Beziehung zwischen dem Ising-Polynom und dem Graphenpolynom Potts-Modell festgestellt werden. Die Beziehung zum physikalischen Potts-Modell wird im Zusammenhang mit der Zustandssumme in Kapitel 4.3 noch kurz erwähnt.

3.5 Trivariates Ising-Polynom

3.5.1 Trivariates Ising-Polynom

Definition 3.14 ([10] Definition 4) Das *trivariate Ising-Polynom* eines Graphen $G = (V, E)$ ist

$$Z(G; x, y, z) = \sum_{W \subseteq V} x^{|E(G[W])|} y^{|W|} z^{|E(G[\overline{W}])|}. \quad (3.23)$$

Folgerung 3.15 (Vgl. [10] Definition 5) Das (*bivariate*) *Ising-Polynom* $Z(G; x, y)$ eines Graphen G kann aus seinem *trivariaten Ising-Polynom* $Z(G; x, y, z)$ berechnet werden.

Beweis: Da beim trivariaten Ising-Polynom noch zusätzlich unterschieden wird, in welcher der jeweils zwei Blöcke einer Partition die gezählten Kanten sind, setzt man $z = x$ und erhält:

$$Z(G; x, y, x) = \sum_{W \subseteq V} x^{|E(G[W])| + |E(G[\overline{W}])|} y^{|W|} = Z(G; x, y). \quad (3.24)$$

\square

3.5.2 Unabhängigkeitspolynom

Definition 3.16 ([16] Definition A.17) Das *Unabhängigkeitspolynom* eines Graphen $G = (V, E)$ ist

$$I(G; x) = \sum_{W \subseteq V} [W \text{ ist eine unabhängige Menge}] x^{|W|}. \quad (3.25)$$

Satz 3.17 Aus dem trivariaten Ising-Polynom $Z(G; x, y, z)$ eines Graphen G kann das Unabhängigkeitspolynom $I(G; t)$ ermittelt werden.

Beweis: Sei $W \subseteq V$. Die Knotenmenge W ist genau dann unabhängig, wenn alle Knoten in W paarweise nicht adjazent sind, also $|E(G[W])| = 0$.

Das Polynom $Z(G; x, y, 1)$ ist eine erzeugende Funktion für die Anzahl der Knotenteilmengen mit gegebener Mächtigkeit der Teilmenge und der Kantenmenge des knoteninduzierten Untergraphens. Die Monome des Polynoms, bei denen der Exponent von x gleich 0 ist, bilden dann (mit $y = t$) das Unabhängigkeitspolynom. \square

3.5.3 Cliques-Polynom

Definition 3.18 ([16] Definition A.8) Das Cliques-Polynom eines Graphen $G = (V, E)$ ist

$$Cl(G; x) = \sum_{i=0}^{|V|} c_i(G) x^i. \quad (3.26)$$

wobei $c_i(G)$ die Anzahl der vollständigen Untergraphen von G mit genau i Knoten ist.

Satz 3.19 Aus dem trivariaten Ising-Polynom $Z(G; x, y, z)$ eines Graphen G kann das Cliquespolynom ermittelt werden.

Beweis: Sei $W \subseteq V$. Der Untergraph $G[W]$ ist genau dann eine Clique, wenn alle Knoten im Untergraph paarweise adjazent sind und somit $|E(G[W])| = |W|(|W| - 1)$ ist.

Das Polynom $Z(G; x, y, 1)$ ist eine erzeugende Funktion für die Anzahl der Knotenteilmengen mit gegebener Mächtigkeit der Teilmenge und der Kantenmenge des knoteninduzierten Untergraphens. Die Anzahl von k -Cliques können anhand des Koeffizienten des Monoms der Form $x^{k(k-1)} y^k$ abgelesen werden und damit kann dann das Cliquespolynom bestimmt werden. \square

3.6 Einordnung

In der folgenden Abbildung wird eine grobe Einordnung des Ising-Polynoms in die Beziehungen zwischen Graphenpolynomen angegeben. Die meisten der angezeigten Beziehungen wurden in den vorangehenden Unterkapiteln beschrieben².

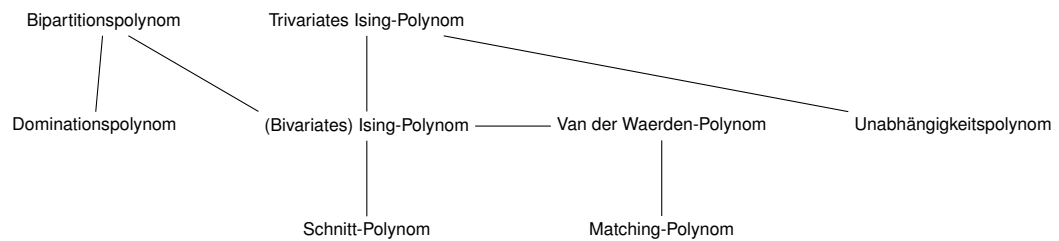


Abbildung 3.1: Beziehungen zwischen Graphenpolynomen

² Das *Dominationspolynom* kann aus dem *Bipartitionspolynom* berechnet werden. [8]

4 Grapheninvarianten

Sei $G = (V, E)$ ein Graph mit n Knoten und m Kanten.

4.1 Direkt im Ising-Polynom enthalten

Knoten- und Kantenanzahl

Aus dem Ising-Polynom eines Graphen lässt sich für einen Graphen die Knotenanzahl, der Grad des Polynoms in y , und die Kantenanzahl, der Grad des Polynoms in x , ablesen. Mit $|\mathcal{W}| = \{\}$ erhält man aus (2.7) dann $x^{|E|} y^{|V|}$. (Vgl. Lemma 2.4)

Anzahl der Komponenten und ihre Knotenanzahl

Ermittelbar sind auch die Anzahl der Komponenten und ihre Knotenanzahl. Sei $p(y) = [x^{|E|}] Z(G; x, y)$. Es werden also nur Partitionen betrachtet, bei denen der Schnitt eine leere Menge ist. Der Graph G habe die Komponenten G_1, \dots, G_t und sei $|V(G_i)| = n_i$ mit $n_i \leq n_{i+1}$. Mithilfe von Satz 5.4 ergibt sich $p(y) = \prod_{i=1}^t (y^{n_i} + 1)$. Der größte Exponent von y ist dabei n , der zweitgrößte ist $n - n_1$, womit eine kleinste Komponente bezüglich der Knotenanzahl registriert wäre. Mit wiederholter Division durch $(y^{n_i} + 1)$ bis $p(y) = 1$ ist, erhält man so alle n_i und kann folglich die angegebenen Eigenschaften bestimmen. (Vgl. [2] Satz 4.1)

Gradfolge

Eine weitere im Polynom enthaltene Eigenschaft ist die Gradfolge. Seien, bis auf einen Knoten v , alle Knoten im Block mit den positiv magnetisierten Knoten enthalten, d. h. der Exponent von y ist $(n - 1)$. Im betrachteten Schnitt liegen alle $d(v)$ Kanten von v . Der Exponent von x lautet somit $y - d(v)$ und enthält dadurch den Grad des Knotens. Der zugehörige Koeffizient gibt die Anzahl der Knoten mit dem entsprechenden Knotengrad an. Die Berücksichtigung aller Summanden deren Exponent von y gleich $(n - 1)$ ist, führt zur Gradfolge. (Vgl. [2] Satz 4.1)

Erkennung bipartiter Graphen

Der Graph ist genau dann bipartit, wenn die Mächtigkeit des größten Schnittes gleich m ist. Denn in dem Fall gäbe es keine Kanten zwischen den Knoten innerhalb der zwei Blöcke der Partition. Für das Polynom (2.7) wäre dann $|\partial \mathcal{W}| = m$ und der Exponent von x gleich 0. (Vgl. [2] Satz 4.1)

Mächtigkeit des größten Schnittes

Sei $s = \max_{W \subseteq V} |\partial W|$, also die Mächtigkeit des größten Schnittes von G . Der kleinste Exponent von x ist dann $m - s$, da er im Polynom (2.7) jeweils um die Mächtigkeit der Schnitte reduziert wird. (Vgl. [2] Satz 4.1)

Kanten-Zusammenhang

Nun sei $k = \min_{W \subseteq V} |\partial W|$, die Mächtigkeit des kleinsten Schnittes von G . Folglich ist der zweitgrößte Exponent von x dann $m - k$. Falls G zusammenhängend ist, dann ist G k -zusammenhängend und k ist in dieser Hinsicht minimal. (Vgl. [2] Satz 4.1)

Isoperimetrische Zahl

Definition 4.1 ([11, 17]) Die *isoperimetrische Zahl*³ von G ist

$$i(G) := \min_{\substack{W \subseteq V(G) \\ 0 < |W| \leq \frac{n}{2}}} \frac{|\partial W|}{|W|} \quad (4.1)$$

Mit der Definition 2.8 können die Mächtigkeit einer beliebigen Knotenteilmenge W von G und die Mächtigkeit des Schnittes ∂W anhand der Exponenten von x und y bestimmt werden, denn es gilt jeweils $x^{m-|\partial W|} y^{n-|W|}$. Aus diesen Daten kann dann die isoperimetrische Zahl berechnet werden.

Schnittpolynom

Das Schnitt-Polynom eines Graphen kann aus seinem Ising-Polynom berechnet werden. (Fol. 3.2)

Zusätzlich für reguläre Graphen: Cliques-Polynom, Unabhängigkeitspolynom

Satz 4.2 (Vgl. [2] Satz 4.3) Sei G ein r -regulärer Graph. Dann können aus dem Ising-Polynom $Z(G; x, y)$ das Cliques-Polynom und das Unabhängigkeitspolynom von G bestimmt werden.

Beweis: (Vgl. [2]) Sei W eine unabhängige Menge in G mit $|W| = k$. Dann ist W im komplementären Graphen \overline{G} die Knotenmenge einer k -Clique. Die Umkehrung gilt ebenfalls. Das Ising-Polynom von \overline{G} ist laut Satz 5.11 aus dem Ising-Polynom von G berechenbar.

³ In [17] werden folgende mögliche (englische) Bezeichnungen genannt: „Cheeger constant“, „Cheeger number“, „isoperimetric number“

Somit genügt es zu zeigen, dass das Unabhängigkeitspolynom eines regulären Graphen anhand seines Ising-Polynoms bestimmt werden kann, da das Cliquenpolynom dann anhand des Ising-Polynoms seines Komplementärgraphen, der auch regulär ist, ermittelt werden kann.

Sei nun G ein r -regulärer Graph mit n Knoten und m Kanten. Weiter sei $W \subseteq V(G)$ mit $|W| = k$ die Menge der negativ magnetisierten Knoten. Die Energie des zugehörigen Zustands beträgt $m - rk + a$, wobei $a = |E(G[W])|$ ist. Falls W eine unabhängige Menge ist, dann ist die Energie folglich gleich $n - rk$, und nur dann hat der Zustand gleichzeitig diesen Energiewert und eine Magnetisierung von $n - k$. Die Koeffizienten von $x^{m-rk} y^{n-k}$ geben die Anzahl der unabhängigen Mengen der Mächtigkeit k an. Mit diesen Informationen kann das Unabhängigkeitspolynom gebildet werden. \square

4.2 Im Van der Waerden-Polynom enthalten

Matching-Polynom

Das Matching-Polynom kann aus dem van der Waerden-Polynom hergeleitet werden. (Satz 3.12)

Länge des kürzesten Kreises

Aus dem van der Waerden-Polynom kann auch die Länge des kürzesten Kreises von G hergeleitet werden. ([2] Satz 4.2)

Zusätzlich für Bäume: Erkennung von Bäumen, Durchmesser, charakteristisches Polynom

Für Bäume können sogar noch mehr Eigenschaften entdeckt werden:

Satz 4.3 ([2] Lemma 4.4) *Gegeben sei das Ising-Polynom eines Baumes T . Dann kann folgendes ermittelt werden:*

1. T ist ein Baum.
2. Der Durchmesser von T .
3. Das charakteristische Polynom von T .

4.3 Zustandssumme

Die *Zustandssumme*⁴ wird zur Beschreibung von physikalischen Systemen im thermodynamischen Gleichgewicht genutzt. Sei Ω die Menge der Zustände des beobachteten physikalischen Systems. Die (mikrokanonische) Zustandssumme Z_u ist:

$$Z_u = \sum_{\mu \in \Omega} e^{-\frac{En(\mu)}{k_B T}} = \sum_{\mu \in \Omega} e^{-\beta En(\mu)} \quad (4.2)$$

$En(\mu)$	Energie des Systems im Zustand μ
k_B	Boltzmann-Konstante
T	Temperatur des Systems

Falls sich das System in einem thermodynamischen Gleichgewicht befindet, dann ist die Wahrscheinlichkeit, dass das System im Zustand μ ist:

$$p_\mu = \frac{e^{-\beta En(\mu)}}{Z_u}. \quad (4.3)$$

Die Zustandssumme kann beispielsweise für Modellierungen von Systemen als Potts- oder Ising-Modell verwendet werden. Das Ising-Polynom eines Graphen G ist eine erzeugende Funktion für die Anzahl der Zustände von G mit gegebener Energie und Magnetisierung. So können bei gegebener Temperatur die Zustandssumme und die Wahrscheinlichkeiten für die Zustände von G mithilfe seines Ising-Polynoms berechnet werden. Es genügt dafür das in Gleichung (3.3) betrachtete spezielle Polynom $Z(G; x, 1)$, da die Magnetisierung nicht berücksichtigt werden braucht.

Diese Informationen wurden mithilfe von [9, 21, 23, 24, 28] zusammengestellt.

4.4 Unterscheidbarkeit

Seien $G_1 = (V_1, E_1)$ und $G_2 = (V_2, E_2)$ isomorphe Graphen, zudem $W_1 \subseteq V_1$, $W_2 \subseteq V_2$ und $\Phi : V_1 \rightarrow V_2$ die zugehörige Bijektion zwischen den Graphen. Aufgrund der Struktur-erhaltung der Isomorphie gelten $|W_1| = |\Phi(W_1)|$ und $|\partial W_1| = |\partial \Phi(W_1)|$. Mit der Bijektion der Abbildung folgt:

Folgerung 4.4 *Die Ising-Polynome isomorpher Graphen sind gleich.*

Die Umkehrung gilt nicht. So sind beispielsweise die beiden Graphen in der Abbil-

⁴ Deutsch: „Zustandssumme“; englisch: „Partition function“

Abbildung 4.1 nicht isomorph und haben das gleiche Ising-Polynom, nämlich:

$$\begin{aligned}
 &x^8 + x^4 y + 2x^5 y + 2x^6 y + 2x^7 y \\
 &+ x^2 y^2 + 5x^3 y^2 + 7x^4 y^2 + 6x^5 y^2 + x^6 y^2 + x^7 y^2 \\
 &+ xy^3 + 6x^2 y^3 + 12x^3 y^3 + 11x^4 y^3 + 3x^5 y^3 + 2x^6 y^3 \\
 &+ xy^4 + 6x^2 y^4 + 12x^3 y^4 + 11x^4 y^4 + 3x^5 y^4 + 2x^6 y^4 \\
 &+ x^2 y^5 + 5x^3 y^5 + 7x^4 y^5 + 6x^5 y^5 + x^6 y^5 + x^7 y^5 \\
 &+ x^4 y^6 + 2x^5 y^6 + 2x^6 y^6 + 2x^7 y^6 + x^8 y^7
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

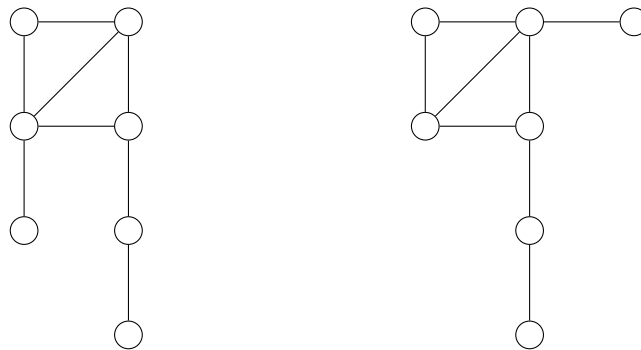


Abbildung 4.1: Zwei nicht-isomorphe Graphen mit gleichem Ising-Polynom

Folgerung 4.5 ([2]) *Das Ising-Polynom ist keine komplette Grapheninvariante.*

Die kleinsten Graphen, deren Ising-Polynome, abgesehen von zu ihnen isomorphen Graphen, nicht einmalig sind⁵, haben sieben Knoten. Bei Bäumen beträgt die Mindestanzahl dafür elf. ([2])

⁵ In [2] werden die Begriffe „isomagnetic“ bzw. „magnetically unique“ verwendet. (Diese beziehen sich dort auf das gesamte Polynom und nicht nur auf die zweite Variable bzw. die Magnetisierung.)

5 Berechnung

5.1 Vorbetrachtungen

Sei $G = (V, E)$ ein Graph mit $|V| = n > 0$ und $|E| = m$. Der Nullgraph wird bei den weiteren Betrachtungen und Berechnungen im Allgemeinen nicht berücksichtigt. Für die Kantenanzahl gilt $m \leq \frac{n(n-1)}{2} \leq n^2$. Mithilfe von Lemma 2.4 lässt sich die maximale Anzahl der Monome des Ising-Polynoms $Z(G; x, y)$ auf $(n+1)(m+1) \leq n^3 + n^2 + n + 1$ bestimmen. Im Allgemeinen wird das Ising-Polynom aus 2^n Summanden, entsprechend der Anzahl der Knotenteilmengen von G , berechnet (vgl. Def. 2.7 bzw. 2.8).

Mit der Berechnung des Ising-Polynoms ist verallgemeinert die Ermittlung seiner Monome gemeint. Für die Vorhaltung des Ising-Polynoms wird somit Speicherplatz für die Monome benötigt. Damit beträgt der Speicherplatzbedarf für ein Polynom $O(n^3)$. Bei einigen Berechnungen kann der Speicherplatzbedarf mit verschiedenen Rechenoperationen und -reihenfolgen und mit Überschreiben von zwischenzeitlich nicht benötigtem Speicherplatz minimiert werden. Dies wird bei der Angabe des Speicherplatzbedarfs nicht mit letzter Konsequenz berücksichtigt werden. Die Datenstruktur sollte möglichst so gewählt werden, dass der Schreib- bzw. Lesezugriff in $O(1)$ machbar ist. Dies wird bei den betrachteten Berechnungen vorausgesetzt. Neben dem Speicherbedarf von $O(n^3)$ je Polynom ist eventueller Speicherbedarf für die jeweiligen Graphen zu berücksichtigen. Das Polynom ist, entsprechend der Anzahl der Summanden bei der Berechnung, in $O(2^n)$ berechenbar. Dabei werden für die 2^n Knotenteilmengen von V , abhängig von der verwendeten Berechnungsformel (s. z. B. Def. 2.7, 2.8), die Anzahl bestimmter Knoten und die Anzahl bestimmter Kanten gezählt.

5.2 Komplexität

Definition 5.1 ([25]) Ein Problem ist in der Klasse $\#P$, wenn eine nichtdeterministische Turingmaschine existiert, die polynomiell zeitbeschränkt ist und für jede Instanz I des Problems genau so viele akzeptierende Berechnungspfade hat, wie es Lösungen zu der Instanz I gibt.

Satz 5.2 (Vgl. [10] Proposition 8) *Die Berechnung des Ising-Polynoms $Z(G; x, y)$ eines Graphen G ist $\#P$ -schwer.*

In den nächsten Unterkapiteln werden deshalb Untersuchungen angestellt, wie beispielsweise die Ising-Polynome für spezielle Graphenklassen in polynomieller Zeit berechnet werden können.

Im folgenden Satz werden einige Spezialisierungen des Ising-Polynoms erwähnt, die in polynomieller Zeit berechenbar sind. Eine davon, $\gamma = 1$, kam bereits in einem anderen Zusammenhang vor (s. Kapitel 3.1 Fall 2).

Satz 5.3 (Vgl. [10] Theorem 1) *Sei G ein Graph. Für alle $(\gamma, \delta) \in \mathbb{Q}^2$ gilt:*

- Falls $\gamma \in \{-1, 0, 1\}$ oder $\delta = 0$, dann ist $Z(G; \gamma, \delta)$ in polynomieller Zeit berechenbar.
- Ansonsten ist die Berechnung von $Z(G; \gamma, \delta)$ #P – schwer.

5.3 Rekurrenzen

5.3.1 Graphenoperationen

Satz 5.4 ([2] Satz 3.1) *Es bestehe ein Graph G aus den Komponenten G_1 und G_2 . Das Ising-Polynom von G ist das Produkt der Ising-Polynome der Komponenten:*

$$Z(G; x, y) = Z(G_1; x, y) Z(G_2; x, y). \quad (5.1)$$

Beweis: Die Zustände der Komponenten sind unabhängig voneinander. Somit wird jeder Zustand der einen Komponente mit allen Zuständen der anderen kombiniert. \square

Die Beweisargumentation lässt eine Erweiterung des Satzes für mehrere Komponenten zu. Der Satz kann auch für disjunkte Vereinigungen von Graphen verwendet werden.

Bei der Multiplikation in (5.1) müssen alle Monome des Ising-Polynomes von G_1 mit allen von dem des G_2 multipliziert werden. Dies ist ein Rechenaufwand von $O(|V(G)|^6)$ bzw. $O(|V(G_1)|^3 |V(G_2)|^3)$. Dabei wird Speicherplatz für die drei Ising-Polynome benötigt ($O(|V(G)|^3)$).

Folgerung 5.5 *Sei $G = (V, E)$ ein Graph, der aus den Komponenten $G_1 = (V_1, E_1)$ und $G_2 = (V_2, E_2)$ besteht, und seien deren Ising-Polynome bekannt. Das Ising-Polynom von G lässt sich in $O(|V|^6)$ (bzw. $O(|V(G_1)|^3 |V(G_2)|^3)$) berechnen.*

Satz 5.6 *Sei ein Graph $G = (V, E)$ die Verbindung der Graphen $G_1 = (V_1, E_1)$ und $G_2 = (V_2, E_2)$. Das Ising-Polynom des Graphen $G = G_1 + G_2$ ist*

$$Z(G; x, y) = x^{|E_1|+|E_2|+|V_1||V_2|} y^{|V_1|+|V_2|} \sum_{\substack{W_1 \subseteq V_1(G_1[E_1]) \\ W_2 \subseteq V_2(G_2[E_2])}} x^{-(|\partial W_1|+|\partial W_2|+|W_1||V_2 \setminus W_2|+|W_2||V_1 \setminus W_1|)} y^{-(|W_1|+|W_2|)} \quad (5.2)$$

Beweis: Die Partitionen der zu verbindenden Graphen können zunächst unabhängig

voneinander betrachtet werden. Aufgrund der Verbindung müssen die jeweils $|W_1||V_2 \setminus W_2| + |W_2||V_1 \setminus W_1|$ zusätzlich im Schnitt enthaltenen Kanten hinzugezählt werden. \square

Alternativ können die Exponenten der Variablen der zu verbindenden Graphen als Laufindizes der Summe gewählt werden und dabei die Koeffizienten der Graphenpolynome Verwendung finden. Für die entsprechende Rekurrenzformel des Laurent-Polynoms genügt dann die Kenntnis der jeweiligen Koeffizienten und Indizes.

Satz 5.7 1. Sei ein Graph G eine Verbindung der Graphen $G_1 = (V_1, E_1)$ und $G_2 = (V_2, E_2)$ mit

$$Z(G_1; x, y) = \sum_{i,j} a_{i,j}^1 x^i y^j,$$

$$Z(G_2; x, y) = \sum_{i,j} a_{i,j}^2 x^i y^j.$$

Dann gilt

$$Z(G; x, y) = \sum_{i,j,k,l} a_{i,j}^1 a_{k,l}^2 x^{i+k+jl+(|V_1|-j)(|V_2|-l)} y^{j+l}. \quad (5.3)$$

2. ([2] Satz 3.2) Sei ein Graph G eine Verbindung der Graphen G_1 und G_2 mit

$$\hat{Z}(G_1; x, y) = \sum_{i,j} a_{i,j}^1 x^i y^j,$$

$$\hat{Z}(G_2; x, y) = \sum_{i,j} a_{i,j}^2 x^i y^j.$$

Dann gilt

$$\hat{Z}(G; x, y) = \sum_{i,j,k,l} a_{i,j}^1 a_{k,l}^2 x^{i+k+jl} y^{j+l}. \quad (5.4)$$

Wie im vorigen Satz zu sehen ist, werden für die Berechnung des Ising-Polynoms von G die Monome von $Z(G_1; x, y)$ mit denen von $Z(G_2; x, y)$ auf bestimmte Weise kombiniert. Bei jeder dieser Kombinationen wird eine konstante Anzahl an Berechnungen durchgeführt. Auch hier wird Speicherplatz für drei Polynome gebraucht ($O(|V(G)|^3)$).

Folgerung 5.8 Seien $G_1 = (V_1, E_1)$ und $G_2 = (V_2, E_2)$ Graphen und seien ihre Ising-Polynome bekannt. Das Ising-Polynom des Graphen $G = G_1 + G_2 = (V, E)$ ist in $O(|V|^6)$ (bzw. $O(|V_1|^3 |V_2|^3)$) berechenbar.

Die Verbindung eines Graphen G mit dem vollständigen Graphen K_1 kann als Spezialfall aufgefasst werden:

Lemma 5.9 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und sein Ising-Polynom gleich

$$Z(G; x, y) = \sum_{i,j} a_{i,j} x^i y^j = \sum_{i,j} m_{i,j}^G \quad (5.5)$$

mit

$$m_{i,j}^G = a_{i,j} x^i y^j. \quad (5.6)$$

Das Ising-Polynom der Verbindung aus G mit dem vollständigen Graphen K_1 ist dann

$$Z(G + K_1; x, y) = \sum_{i,j} (x^j y + x^{|V|-j}) m_{i,j}^G. \quad (5.7)$$

Der Rechenaufwand beträgt folglich $O(|V(G)|^3)$ und es genügt Speicherplatz für zwei Polynome.

Folgerung 5.10 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und sein Ising-Polynom bekannt. Dann ist das Ising-Polynom der Verbindung $G + K_1$ in $O(|V|^3)$ berechenbar.

Satz 5.11 (Vgl. [2] Satz 3.4) Sei G ein Graph mit n Knoten. Das Ising-Polynom des Komplementärgraphen \bar{G} von G ist

$$Z(\bar{G}; x, y) = \sum_{i,j} a_{i,j}^G x^i y^j \binom{n}{2}^{-j(n-j)-i}. \quad (5.8)$$

Dabei ist $a_{i,j}^G$ der jeweilige Koeffizient von G .

Beweis: (Vgl. [2] Satz 3.4) Der Graph G und sein Komplementärgraph haben dieselbe Knotenmenge und somit gibt es Zustände mit gleicher Magnetisierung. Der vollständige Graph K_n hat im Falle einer Magnetisierung von j dann $j(n-j)$ Kanten im Schnitt und der Exponent von x ist dann gleich $\binom{n}{2} - j(n-j)$. Wenn der Graph G bei einer Magnetisierung von j dann i Kanten im Schnitt hat, dann sind beim Komplementärgraphen \bar{G} bei gleicher Magnetisierung i Kanten weniger im Schnitt enthalten als im gleichen Fall beim vollständigen Graphen, denn die Vereinigung der beiden Graphen ergibt den vollständigen Graphen, und der Exponent von x lautet dann entsprechend $\binom{n}{2} - j(n-j) - i$. \square

In (5.8) wird für jedes Monom des Graphen G eine konstante Anzahl von Berechnungen durchgeführt. Es wird Speicherplatz für zwei Polynome benötigt ($O(n^3)$).

Folgerung 5.12 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und sein Ising-Polynom bekannt. Das Ising-Polynom des Komplementärgraphen \bar{G} lässt sich in $O(|V|^3)$ berechnen.

Sei G ein Graph und H ein Untergraph von G . Seien weiter G_1, \dots, G_k Komponenten

von $G \setminus H$ und sei $G'_i = G[V(G_i) \cup V(H)]$ der aus der Vereinigung der Knotenmengen von G_i und H induzierte Untergraph. Wenn σ ein Zustand von H ist, dann sei (σ, H) ein *Teilzustand*⁶ von G . Weiter bezeichne $\sigma|_H$ die Beschränkung des Zustands auf H . [2]

Definition 5.13 ([2] Definition 3.5) Mit den obigen Bezeichnungen gilt:

$$Z(G; x, y, (\sigma', H)) = \sum_{\sigma \in \Omega, \sigma|_H = \sigma'} x^{E(\sigma)} y^{M(\sigma)} \quad (5.9)$$

Dies führt zu einer Rekurrenzbeziehung über Teilzustände:

Satz 5.14 ([2]) *Mit den obigen Bezeichnungen gilt:*

$$Z(G; x, y) = \sum_{\sigma' \in \Omega(H)} \frac{\prod_{i=1}^k Z(G'_i; x, y, (\sigma', H))}{Z(H; x, y, (\sigma', H))^{k-1}} \quad (5.10)$$

Für konkrete Beschreibungen der Teilzustände kann anstelle von (5.9) die folgende Schreibweise verwendet werden:

Definition 5.15 ([10] Definition 6) Seien $G = (V, E)$ ein Graph und $B, C \subseteq V$ mit $B \cap C = \emptyset$. Dann ist

$$Z(G; B, C; x, y) = \sum_{B \subseteq W \subseteq V \setminus C} x^{|E(G[W])| + |E(G[\overline{W}])|} y^{|W|} \quad (5.11)$$

das *Ising-Polynom des Teilzustandes* (B, C) von G bzw. das *Ising-Polynom von G in Abhängigkeit von $H = B \cup C$* .

Für das trivariate Ising-Polynom wird entsprechend definiert:

Definition 5.16 Seien $G = (V, E)$ ein Graph und $B, C \subseteq V$ mit $B \cap C = \emptyset$. Dann ist

$$Z(G; B, C; x, y, z) = \sum_{B \subseteq W \subseteq V \setminus C} x^{|E(G[W])|} y^{|W|} z^{|E(G[\overline{W}])|} \quad (5.12)$$

das *trivariate Ising-Polynom des Teilzustandes* (B, C) von G bzw. das *trivariate Ising-Polynom von G in Abhängigkeit von $H = B \cup C$* .

Dabei ist B jeweils die Menge der positiv und C jeweils die Menge der negativ magnetisierten Knoten.

Analog zu Satz 5.14 gilt dann:

⁶ In [2]: „Partial state“ (engl.)

Satz 5.17 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und $H \subseteq V$. Mit den obigen Bezeichnungen gilt:

$$Z(G; x, y) = \sum_{\substack{B, C \subseteq H \\ B \cup C = H \\ B \cap C = \emptyset}} \frac{\prod_{i=1}^k Z(G'_i; B, C; x, y)}{Z(H; B, C; x, y)} \quad (5.13)$$

Aus der Rekurrenzgleichung kann man für $|H| = 1$ folgern:

Lemma 5.18 (Vgl. [2]) Sei $G = (V, E)$ ein Graph und $v \in V$. Mit den obigen Bezeichnungen gilt:

$$Z(G; x, y) = y^{-(k-1)} \prod_{i=1}^k Z(G_i; \{v\}, \emptyset; x, y) + \prod_{i=1}^k Z(G; \emptyset, \{v\}; x, y). \quad (5.14)$$

Bemerkung 5.19 Wie weiter oben erwähnt ist, lassen sich die beiden Ising-Polynome $Z(G; x, y)$ und $\hat{Z}(G; x, y)$ über Zustände definieren. Die Unterschiede sind für die Herleitung der Rekurrenzbeziehung (5.10) ohne Belang, so dass dort anstelle des Polynoms das Laurent-Polynom verwendet werden könnte.

Bemerkung 5.20 Die Rekurrenzbeziehungen für Ising-Polynome von Graphen lassen sich - unter Beibehaltung der Teilzustände - im Allgemeinen auf Ising-Polynome der Teilzustände von Graphen übertragen. Denn es greifen die gleichen kombinatorischen Argumente.⁷

Bei der Berechnung des Ising-Polynoms eines beliebigen Graphen $G = (V, E)$ kann die Rekurrenzbeziehung über Teilzustände benutzt werden, um einen Graphen (vollständig) in Untergraphen zu unterteilen, deren Ising-Polynome möglichst schnell berechenbar sind. Dies kann insbesondere dann hilfreich sein, wenn diese Untergraphen paarweise wenige Knoten gemeinsam haben. Unter Nutzung von Bemerkung 5.20 können in diesem Kapitel beschriebenen Berechnungen, für Rekurrenzen und spezielle Graphenklassen, angepasst werden, sodass Ising-Polynome von Teilzuständen berechnet werden. Dies kann dann für die Berechnung der Ising-Polynome der Untergraphen benutzt werden.

5.3.2 Kantenoperationen

Folgerung 5.21 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und $e = \{u, v\} \in E$. Dann ist das Ising-Polynom des Graphen $G - e$

$$\begin{aligned} Z(G - e; x, y) = & x^{-1} (Z(G; \{u, v\}, \emptyset; x, y) + Z(G; \emptyset, \{u, v\}; x, y)) \\ & + Z(G; \{u\}, \{v\}; x, y) + Z(G; \{v\}, \{u\}; x, y). \end{aligned} \quad (5.15)$$

⁷ Beachte auch: $Z(G; x, y) = Z(G; \emptyset, \emptyset; x, y)$

Beweis:

$$\begin{aligned}
Z(G - e; x, y) &= Z(G - e; \{u, v\}, \emptyset; x, y) + Z(G - e; \emptyset, \{u, v\}; x, y) \\
&\quad + Z(G - e; \{u\}, \{v\}; x, y) + Z(G - e; \{v\}, \{u\}; x, y) \\
&= x^{-1} (Z(G; \{u, v\}, \emptyset; x, y) + Z(G; \emptyset, \{u, v\}; x, y)) \\
&\quad + Z(G; \{u\}, \{v\}; x, y) + Z(G; \{v\}, \{u\}; x, y).
\end{aligned}$$

□

Folgerung 5.22 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und $e = \{u, v\} \notin E$. Dann ist das Ising-Polynom des Graphen $G + e$

$$\begin{aligned}
Z(G + e; x, y) &= x (Z(G; \{u, v\}, \emptyset; x, y) + Z(G; \emptyset, \{u, v\}; x, y)) \\
&\quad + Z(G; \{u\}, \{v\}; x, y) + Z(G; \{v\}, \{u\}; x, y). \tag{5.16}
\end{aligned}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
Z(G + e; x, y) &= Z(G + e; \{u, v\}, \emptyset; x, y) + Z(G + e; \emptyset, \{u, v\}; x, y) \\
&\quad + Z(G + e; \{u\}, \{v\}; x, y) + Z(G + e; \{v\}, \{u\}; x, y) \\
&= x (Z(G; \{u, v\}, \emptyset; x, y) + Z(G; \emptyset, \{u, v\}; x, y)) \\
&\quad + Z(G; \{u\}, \{v\}; x, y) + Z(G; \{v\}, \{u\}; x, y).
\end{aligned}$$

□

Folgerung 5.23 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und $e = \{u, v\} \notin E$. Dann ist das trivariate Ising-Polynom des Graphen $G + e$

$$\begin{aligned}
Z(G + e; x, y, z) &= xZ(G; \{u, v\}, \emptyset; x, y, z) + zZ(G; \emptyset, \{u, v\}; x, y, z) \\
&\quad + Z(G; \{u\}, \{v\}; x, y, z) + Z(G; \{v\}, \{u\}; x, y, z). \tag{5.17}
\end{aligned}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
Z(G + e; x, y, z) &= Z(G + e; \{u, v\}, \emptyset; x, y, z) + Z(G + e; \emptyset, \{u, v\}; x, y, z) \\
&\quad + Z(G + e; \{u\}, \{v\}; x, y, z) + Z(G + e; \{v\}, \{u\}; x, y, z) \\
&= xZ(G; \{u, v\}, \emptyset; x, y, z) + yZ(G; \emptyset, \{u, v\}; x, y, z) \\
&\quad + Z(G; \{u\}, \{v\}; x, y, z) + Z(G; \{v\}, \{u\}; x, y, z).
\end{aligned}$$

□

Folgerung 5.24 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und $e = \{u, v\} \in E$. Dann ist Ising-Polynom

des Graphen G/e

$$\begin{aligned}
Z(G/e; x, y) &= x^{|E|-1-|N_G(u) \cap N_G(v)|} y^{|V|-1} \\
&\quad \left(\sum_{\{u,v\} \subseteq W \subseteq V} x^{-|\partial W|+|N_G(u) \cap N_G(v) \cap \bar{W}|} y^{-|W|+1} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{W \subseteq V \setminus \{u,v\}} x^{-|\partial W|+|N_G(u) \cap N_G(v) \cap W|} y^{-|W|} \right). \tag{5.18}
\end{aligned}$$

Beweis: Sei w der aus der Kontraktion der Kante e hervorgegangene Knoten. Es sind die Teilzustände $(\{w\}, \emptyset)$ und $(\emptyset, \{w\})$ zu betrachten.

$$Z(G/e; \emptyset, \{w\}; x, y) = x^{|E|-1-|N_G(u) \cap N_G(v)|} y^{|V|-1} \sum_{\{u,v\} \subseteq W \subseteq V} x^{-|\partial W|+|N_G(u) \cap N_G(v) \cap \bar{W}|} y^{-|W|+1} \tag{5.19}$$

Es ist $|E(G/e)| = |E(G)| - 1 - |N_G(u) \cap N_G(v)|$, da die Kante e kontrahiert wird und frühere gemeinsame Kanten von u und v nur noch durch eine Kante mit w verbunden sind.

Zudem ist $|V(G/e)| = |V(G)| - 1$, da die Kante e kontrahiert wird und somit ein Knoten weniger vorhanden bleibt.

In der Summe werden u und v gezählt, obwohl sie durch die Kontraktion in einen Knoten aufgehen, und somit muss der Exponent von y um 1 inkrementiert werden. Zudem werden Kanten zu gemeinsamen Nachbarknoten von u und v in \bar{W} gezählt. Aufgrund der Kontraktion zu dem Knoten w ist es in den Fällen eine doppelte Zählung und deshalb wird der Exponent von x um die Anzahl der angegebenen Nachbarn, $N_G(u) \cap N_G(v) \cap \bar{W}$, erhöht.

$$Z(G/e; \{w\}, \emptyset; x, y) = x^{|E|-1-|N_G(u) \cap N_G(v)|} y^{|V|-1} \sum_{\{u,v\} \subseteq W \subseteq V} x^{-|\partial W|+|N_G(u) \cap N_G(v) \cap W|} y^{-|W|+1} \tag{5.20}$$

Die Begründung der Vorfaktoren ist gleich zu der obigen Beschreibung beim anderen betrachteten Teilzustand.

In der Summe werden Kanten zu gemeinsame Nachbarknoten von u und v in W gezählt, obwohl die Nachbarknoten aufgrund der Kontraktion nur mit jeweils einer Kante mit w verbunden sind. Deshalb wird der Exponent von x um die Anzahl dieser Knoten, $N_G(u) \cap N_G(v) \cap W$, erhöht. \square

Folgerung 5.25 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und $e = \{u, v\} \in E$. Dann ist das Ising-

Polynom des Graphen $G \dagger e$

$$Z(G \dagger e; x, y) = x^{|E| - |N(u)| - |N(v)| + 1} y^{|V| - 2} \sum_{W \subseteq V \setminus \{u, v\}} x^{-|\partial W| + |N(u) \cap W| + |N(v) \cap W|} y^{-|W|}. \quad (5.21)$$

Beweis: Durch die Extraktion der Kante e sind die Knoten u und v samt allen zu ihnen inzidenten Kanten im Vergleich zum Graphen G nicht im Graphen $G \dagger e$ enthalten.

Entsprechend sind $|E(G \dagger e)| = |E(G)| - |N(u)| - |N(v)|$ und $|V(G \dagger e)| = |V(G)| - 2$.

In der Summe wird der Exponent von x dann noch um die Anzahl der zuviel gezählten Kanten, denen zwischen den Knoten u bzw. v und ihren Nachbarn in W , inkrementiert. \square

5.3.3 Knotenoperationen

Folgerung 5.26 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und $v \notin V$. Dann ist das Ising-Polynom des Graphen $G + v$

$$Z(G + v; x, y) = (y + 1) Z(G; x, y). \quad (5.22)$$

Die vorherige Folgerung kann als Spezialfall der weiter oben erwähnten disjunkten Vereinigung betrachtet werden. Der Rechenaufwand beträgt hierbei $O(|V(G)|^3)$ und der Speicherplatzbedarf $O(|V(G)|^3)$.

Folgerung 5.27 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und $v \notin V$. Dann ist das trivariate Ising-Polynom des Graphen $G + v$

$$Z(G + v; x, y, z) = (y + 1) Z(G; x, y, z). \quad (5.23)$$

Der Beweis ist ähnlich zum gleichen Fall beim bivariaten Ising-Polynom.

Folgerung 5.28 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und $v \in V$. Dann ist das Ising-Polynom des Graphen $G - v$

$$Z(G - v; x, y) = x^{|E| - |N_G(v)|} y^{|V| - 1} \sum_{W \subseteq V \setminus \{v\}} x^{-|\partial W| + |N(v) \cap W|} y^{-|W|}. \quad (5.24)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} |E(G - v)| &= |E(G)| - |N_G(v)| \\ |V(G - v)| &= |V(G)| - |\{v\}| = |V(G)| - 1 \end{aligned}$$

Sei $W \subseteq V(G)$ und $v \notin W$. In ∂W sind dann auch eventuelle Kanten zwischen v und $N(v) \cap W$ enthalten. Diese sind im Graphen $G - v$ nicht enthalten und deshalb muss ihre Anzahl hinzugezählt werden. Da $v \notin V(G - v)$, braucht der Fall $v \in W$ nicht weiter betrachtet zu werden. Mit diesen Angaben kann die Behauptung aus der Definition des Ising-Polynoms gefolgert werden. \square

Folgerung 5.29 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und $\{u, v\} \subseteq V$. Dann ist das Ising-Polynom des Graphen G_{uv}

$$\begin{aligned}
 Z(G_{uv}; x, y) = & x^{|E| - |N_G(u) \cap N_G(v)| - |\{v\} \subseteq N_G(u)|} y^{|V| - 1} \\
 & \left(\sum_{\{u, v\} \subseteq W \subseteq V} x^{-|\partial W| + |N_G(u) \cap N_G(v) \cap \bar{W}|} y^{-|W| + 1} \right. \\
 & \left. + \sum_{W \subseteq V \setminus \{u, v\}} x^{-|\partial W| + |N_G(u) \cap N_G(v) \cap W|} y^{-|W|} \right). \quad (5.25)
 \end{aligned}$$

Beweisidee: Der Beweis kann analog zum Beweis zur Folgerung 5.24 geführt werden. Zu unterscheiden ist dabei, dass die Knoten u und v hier nicht adjazent sein müssen. Dies hat zur Folge, dass bei den Vorfaktoren der Exponent von y anstatt um 1 vermindert zu werden, dies davon abhängig gemacht wird, ob die Knoten in G adjazent sind. \square

5.4 Graphenklassen

5.4.1 Wege

Seien $P_i = (V_i, E_i)$ Wege und $v_1, v_i \in V_i$ Endknoten der Wege für $i \in \mathbb{N}$. Das Ising-Polynom eines Weges P_n hat aufgrund seiner Struktur maximal „nur“ $(|V_n| + 1)(|E_n| + 1) = (n + 1)n = n^2 + n$ Monome⁸.

Der Weg P_1 hat einen Knoten. Für die Berechnung des Ising-Polynoms von P_1 müssen zwei Partitionen berücksichtigt werden. Der Knoten ist entweder positiv magnetisiert, d. h. $\sigma(v_1) = 1$ und somit $Z(P_1; \{v_1\}, \emptyset; x, y) = y$, oder negativ magnetisiert, also $\sigma(v_1) = 0$ und $Z(P_1; \emptyset, \{v_1\}; x, y) = 1$. Es gilt

$$Z(P_1; x, y) = Z(P_1; \{v_1\}, \emptyset; x, y) + Z(P_1; \emptyset, \{v_1\}; x, y) = y + 1.$$

Wenn zu P_1 ein Knoten v_2 und eine Kante $\{v_1, v_2\}$ hinzugefügt wird, erhält man einen Weg P_2 . Auch v_2 ist negativ oder positiv magnetisiert, sodass vier Fälle zu berücksichtigen sind. Dabei ist auch die Energie der Kante, die von der Magnetisierung der Knoten abhängt, für das Ising-Polynom zu berücksichtigen.

Seien v_1 und v_2 positiv magnetisiert. Dann hat die Kante $\{v_1, v_2\}$ die Energie 1. Die (Zählung dieser) Erhöhung der Werte von Magnetisierung und Energie um jeweils 1, lässt sich durch Multiplikation von $Z(P_1; \{v_1\}, \emptyset; x, y)$ mit $x^1 y^1$ realisieren:

$$Z(P_2; \{v_1, v_2\}, \emptyset; x, y) = xyZ(P_1; \{v_1\}, \emptyset; x, y). \quad (5.26)$$

Wenn v_1 positiv und v_2 negativ magnetisiert ist, dann ist der Energiewert 0 und die Magnetisierung erhöht sich im Vergleich zu $Z(P_1; \{v_1\}, \emptyset; x, y)$ nicht:

$$Z(P_2; \{v_1\}, \{v_2\}; x, y) = Z(P_1; \{v_1\}, \emptyset; x, y). \quad (5.27)$$

Nun sei v_1 negativ magnetisiert. Wenn v_2 positiv magnetisiert ist, dann wird - ausgehend von der Situation im P_1 - der Wert der Magnetisierung um 1 inkrementiert:

$$Z(P_2; \{v_2\}, \{v_1\}; x, y) = yZ(P_1; \emptyset, \{v_1\}; x, y). \quad (5.28)$$

Wenn v_2 hingegen negativ magnetisiert ist, dann ist stattdessen nur der Energiewert um 1 größer:

$$Z(P_2; \emptyset, \{v_1, v_2\}; x, y) = xZ(P_1; \emptyset, \{v_1\}; x, y). \quad (5.29)$$

⁸ Dies wirkt sich auf den Rechen- und den Speicheraufwand aus.

Nun können die Ising-Polynome der Teilzustände summiert werden. Zunächst wird nach der Magnetisierung von v_2 unterschieden:

$$\begin{aligned} Z(P_2; \{v_2\}, \emptyset; x, y) &= Z(P_2; \{v_1, v_2\}, \emptyset; x, y) + Z(P_2; \{v_2\}, \{v_1\}; x, y) \\ &= xyZ(P_1; \{v_1\}, \emptyset; x, y) + yZ(P_1; \emptyset, \{v_1\}; x, y), \end{aligned} \quad (5.30)$$

$$\begin{aligned} Z(P_2; \emptyset, \{v_2\}; x, y) &= Z(P_2; \{v_1\}, \{v_2\}; x, y) + Z(P_2; \emptyset, \{v_1, v_2\}; x, y) \\ &= Z(P_1; \{v_1\}, \emptyset; x, y) + xZ(P_1; \emptyset, \{v_1\}; x, y). \end{aligned} \quad (5.31)$$

Aus diesen beiden Polynomen kann das Ising-Polynom des P_2 berechnet werden:

$$\begin{aligned} Z(P_2; x, y) &= Z(P_2; \{v_2\}, \emptyset; x, y) + Z(P_2; \emptyset, \{v_2\}; x, y) \\ &= (xy + 1)Z(P_1; \{v_1\}, \emptyset; x, y) + (y + x)Z(P_1; \emptyset, \{v_1\}; x, y). \end{aligned} \quad (5.32)$$

Das Ising-Polynom des P_2 kann also aus den Ising-Polynomen der Teilzustände des P_1 berechnet werden.

Bei der Erweiterung des Weges P_2 um den Knoten v_3 und der Kante $\{v_2, v_3\}$ auf den P_3 verdoppelt sich die Anzahl der möglichen Zustände des Graphen. Da der Knoten v_3 nur zu v_2 adjazent ist, genügt es die Ising-Polynome der Teilzustände des P_2 , bei denen nur nach der Magnetisierung von v_2 unterschieden wird, als Ausgangspunkt zu wählen. Dort ist die Magnetisierung von v_1 samt der Auswirkung auf die Energie der Kante $\{v_1, v_2\}$ schon berücksichtigt.

Es sind die gleichen vier Fälle, die oben für die Knoten v_1 und v_2 bei der Erweiterung des P_1 auf den P_2 aufgeführt sind, für die Knoten v_2 und v_3 zu betrachten, denn die Erweiterungen sind gleich. Es wird jeweils an einen Endknoten eines Weges ein weiterer Knoten samt Kante angefügt. Folglich sind auch die Berechnungen der Ising-Polynome der Teilzustände des P_3 in Abhängigkeit (der Magnetisierung) von v_2 und v_3 ähnlich. Es müssen nur die Bezeichnungen der Knoten in den Gleichungen (5.26) bis (5.29) entsprechend eingesetzt werden. Daraus können dann die Ising-Polynome der Teilzustände in Abhängigkeit (der Magnetisierung) von v_3 und des P_3 berechnet werden.

Weitere Verlängerungen wären gleichartig, sodass für die vier jeweiligen Teilzustände gilt:

Lemma 5.30 *Für einen Weg P_n mit $n > 1$ und den obigen Bezeichnungen ist*

$$Z(P_n; \{v_n\}, \emptyset; x, y) = xyZ(P_{n-1}; \{v_{n-1}\}, \emptyset; x, y) + yZ(P_{n-1}; \emptyset, \{v_{n-1}\}; x, y), \quad (5.33)$$

$$Z(P_n; \emptyset, \{v_n\}; x, y) = Z(P_{n-1}; \{v_{n-1}\}, \emptyset; x, y) + xZ(P_{n-1}; \emptyset, \{v_{n-1}\}; x, y), \quad (5.34)$$

Die Startwerte sind:

$$Z(P_1; \{v_1\}, \emptyset; x, y) = y, \quad (5.35)$$

$$Z(P_1; \emptyset, \{v_1\}; x, y) = 1. \quad (5.36)$$

Mit diesen Informationen können die Ising-Polynome von Wegen berechnet werden:

Folgerung 5.31 Das Ising-Polynom eines Weges P_n mit $n > 1$, den obigen Bezeichnungen und Rekurrenzbeziehungen ist

$$Z(P_n; x, y) = Z(P_n; \{v_n\}, \emptyset; x, y) + Z(P_n; \emptyset, \{v_n\}; x, y) \quad (5.37)$$

$$= (xy + 1)Z(P_{n-1}; \{v_{n-1}\}, \emptyset; x, y) + (y + x)Z(P_{n-1}; \emptyset, \{v_{n-1}\}; x, y). \quad (5.38)$$

Mit der Nutzung der Folgerungen 5.26 und 5.22 kann analog für allgemeine Fälle formuliert werden:

Satz 5.32 Sei $G = (V, E)$ ein Graph mit $u \in V$ und $v \notin V$. Das Ising-Polynom des Graphen $G + v + \{u, v\}$ ist

$$Z(G + v + \{u, v\}; x, y) = (xy + 1)Z(G; \{u\}, \emptyset; x, y) + (y + x)Z(P_1; \emptyset, \{u\}; x, y). \quad (5.39)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} Z(G + v + \{u, v\}; x, y) &= Z(G + v + \{u, v\}; \{u, v\}, \emptyset; x, y) \\ &\quad + Z(G + v + \{u, v\}; \emptyset, \{u, v\}; x, y) \\ &\quad + Z(G + v + \{u, v\}; \{u\}, \{v\}; x, y) \\ &\quad + Z(G + v + \{u, v\}; \{v\}, \{u\}; x, y) \\ &= x(Z(G + v; \{u, v\}, \emptyset; x, y) + Z(G + v; \emptyset, \{u, v\}; x, y)) \\ &\quad + Z(G + v; \{u\}, \{v\}; x, y) + Z(G + v; \{v\}, \{u\}; x, y) \\ &= xyZ(G; \{u\}, \emptyset; x, y) + xZ(G; \emptyset, \{u\}; x, y) \\ &\quad + Z(G; \{u\}, \emptyset; x, y) + yZ(G; \emptyset, \{u\}; x, y) \\ &= (xy + 1)Z(G; \{u\}, \emptyset; x, y) + (y + x)Z(G; \emptyset, \{u\}; x, y). \end{aligned} \quad (5.40)$$

□

Ausgehend von den angegebenen Startwerten kann man mithilfe der obigen Rekurrenzformel das Ising-Polynom eines Weges iterativ berechnen. In jedem der $n - 1$ Iterationsschritte werden zwei Polynome jeweils mit zwei verschiedenen Produkten multipliziert (vgl. (5.38)). Mit anschließender Summation können sie zu zwei Polynomen zusammengefasst werden (vgl. (5.37)). Beim Erreichen der letzten Iterationsstufe werden diese addiert, um das gewünschte Ergebnis zu erhalten. Aufgrund der Möglichkeit nicht mehr

benötigten Speicherplatz zu überschreiben, genügt Speicherplatz für drei Polynome ($O(n^2)$ für einen P_n).

Folgerung 5.33 *Das Ising-Polynom eines Weges P_n ist in $O(n^3)$ berechenbar.*

Wer auf Ising-Polynome von Teilständen verzichten will, kann die folgende Rekurrenzformel nutzen:

Satz 5.34 (Vgl. [8] Korollar 19) *Das Ising-Polynom eines Weges P_n mit $n > 2$ ist*

$$Z(P_n; x, y) = (xy + x)Z(P_{n-1}; x, y) + (y - x^2y)Z(P_{n-2}; x, y). \quad (5.41)$$

Die Startwerte sind:

$$Z(P_1; x, y) = y + 1, \quad (5.42)$$

$$Z(P_2; x, y) = xy^2 + 2y + x. \quad (5.43)$$

Beweis: Es werden die obigen Bezeichnungen verwendet.

$$(xy + x)Z(P_{n-1}; x, y) + (y - x^2y)Z(P_{n-2}; x, y) \quad (5.44)$$

$$= (xy + x)Z(P_{n-1}; x, y) + (y + xy - xy - x^2y)Z(P_{n-2}; x, y) \quad (5.45)$$

$$\begin{aligned} &= xyZ(P_{n-1}; \{v_{n-1}\}, \emptyset; x, y) + xyZ(P_{n-1}; \emptyset, \{v_{n-1}\}; x, y) \\ &\quad + xZ(P_{n-1}; \{v_{n-1}\}, \emptyset; x, y) + xZ(P_{n-1}; \emptyset, \{v_{n-1}\}; x, y) \\ &\quad + yZ(P_{n-2}; \{v_{n-2}\}, \emptyset; x, y) + yZ(P_{n-2}; \emptyset, \{v_{n-2}\}; x, y) \\ &\quad + xyZ(P_{n-2}; \{v_{n-2}\}, \emptyset; x, y) + xyZ(P_{n-2}; \emptyset, \{v_{n-2}\}; x, y) \\ &\quad - xyZ(P_{n-2}; \{v_{n-2}\}, \emptyset; x, y) - xyZ(P_{n-2}; \emptyset, \{v_{n-2}\}; x, y) \\ &\quad - x^2yZ(P_{n-2}; \{v_{n-2}\}, \emptyset; x, y) - x^2yZ(P_{n-2}; \emptyset, \{v_{n-2}\}; x, y) \end{aligned} \quad (5.46)$$

$$\begin{aligned} &= xyZ(P_{n-1}; \{v_{n-1}\}, \emptyset; x, y) + [xyZ(P_{n-1}; \emptyset, \{v_{n-1}\}; x, y) \\ &\quad - (xyZ(P_{n-2}; \{v_{n-2}\}, \emptyset; x, y) + x^2yZ(P_{n-2}; \emptyset, \{v_{n-2}\}; x, y))] \\ &\quad + xZ(P_{n-1}; \emptyset, \{v_{n-1}\}; x, y) + [xZ(P_{n-1}; \{v_{n-1}\}, \emptyset; x, y) \\ &\quad - (x^2yZ(P_{n-2}; \{v_{n-2}\}, \emptyset; x, y) + xyZ(P_{n-2}; \emptyset, \{v_{n-2}\}; x, y))] \\ &\quad + (yZ(P_{n-2}; \emptyset, \{v_{n-2}\}; x, y) + xyZ(P_{n-2}; \{v_{n-2}\}, \emptyset; x, y)) \\ &\quad + (yZ(P_{n-2}; \{v_{n-2}\}, \emptyset; x, y) + xyZ(P_{n-2}; \emptyset, \{v_{n-2}\}; x, y)) \end{aligned} \quad (5.47)$$

$$\begin{aligned} &= xyZ(P_{n-1}; \{v_{n-1}\}, \emptyset; x, y) + xZ(P_{n-1}; \emptyset, \{v_{n-1}\}; x, y) \\ &\quad + Z(P_{n-1}; \{v_{n-1}\}, \emptyset; x, y) + yZ(P_{n-1}; \emptyset, \{v_{n-1}\}; x, y) \end{aligned} \quad (5.48)$$

$$\begin{aligned} &= (xyZ(P_{n-1}; \{v_{n-1}\}, \emptyset; x, y) + yZ(P_{n-1}; \emptyset, \{v_{n-1}\}; x, y)) \\ &\quad + (Z(P_{n-1}; \{v_{n-1}\}, \emptyset; x, y) + xZ(P_{n-1}; \emptyset, \{v_{n-1}\}; x, y)) \end{aligned} \quad (5.49)$$

$$= Z(P_n; \{v_n\}, \emptyset; x, y) + Z(P_n; \emptyset, \{v_n\}; x, y) \quad (5.50)$$

$$= Z(P_n; x, y) \quad (5.51)$$

□

Auch diese Rekurrenzformel kann ähnlich wie oben für einen Algorithmus mit einem Rechenaufwand von $O(n^3)$ genutzt werden.

Tabelle 5.1: Ising-Polynome einiger kurzer Wege

Weg	Ising-Polynom
P_1	$1 + y$
P_2	$x + 2y + xy^2$
P_3	$x^2 + y + 2xy + y^2 + 2xy + x^2y^3$
P_4	$x^3 + 2xy + 2x^2y + 2y^2 + 2xy^2 + 2x^2y^2 + 2xy^3 + 2x^2y^3 + x^3y^4$

Bemerkung 5.35 Die Berechnung des Ising-Polynoms eines Weges kann als Zählung von Bitfolgen oder Wegen im Gitter modelliert werden.

5.4.2 Kreise

Seien $C_i = (V_i, E_i)$ Kreise mit $V_i = \{v_1, \dots, v_i\}$ und $E_i = \{\{v_1, v_2\}, \dots, \{v_{i-1}, v_i\}, \{v_i, v_1\}\}$ für $i \in \mathbb{N}$. Zudem seien $P_j = (W_j, F_j)$ Wege mit den Endknoten $w_1, w_j \in W_j$ für $j \in \mathbb{N}$. Das Ising-Polynom eines Kreises C_n hat nicht mehr als $(|V_n| + 1)(|E_n| + 1) = (n + 1)^2 = n^2 + 2n + 1$ Monome.

Es ist $P_n + \{v_n, v_1\} \cong C_n$ für $n > 2$. Berechnungsmöglichkeiten für Wege werden in Kapitel 5.4.1 vorgestellt und eine Rekurrenzgleichung für das Hinzufügen einer Kante wird in Folgerung 5.22 genannt. Allerdings werden (bei der letzteren Gleichung) die Ising-Polynome aller möglichen Teilstände der zu der Kante inzidenten Knoten des Graphen benötigt. Dies lässt sich mithilfe der Bemerkung 5.20 realisieren. Für die Berechnung der Ising-Polynome des $C_1 \cong P_1 \cong K_1$ und des $C_2 \cong P_2$ wird auf das Kapitel über Wege (s. o.) verwiesen.

Analog zu Lemma 5.30 erhält man:

Lemma 5.36 Für einen Weg P_n mit $n > 2$ und den obigen Bezeichnungen ist

$$Z(P_n; \{v_1, v_n\}, \emptyset; x, y) = xyZ(P_{n-1}; \{v_1, v_{n-1}\}, \emptyset; x, y) + yZ(P_{n-1}; \{v_1\}, \{v_{n-1}\}; x, y), \tag{5.52}$$

$$Z(P_n; \{v_1\}, \{v_n\}; x, y) = Z(P_{n-1}; \{v_1, v_{n-1}\}, \emptyset; x, y) + xZ(P_{n-1}; \{v_1\}, \{v_{n-1}\}; x, y), \tag{5.53}$$

$$Z(P_n; \{v_n\}, \{v_1\}; x, y) = xyZ(P_{n-1}; \{v_{n-1}\}, \{v_1\}; x, y) + yZ(P_{n-1}; \emptyset, \{v_1, v_{n-1}\}; x, y), \tag{5.54}$$

$$Z(P_n; \emptyset, \{v_1, v_n\}; x, y) = Z(P_{n-1}; \{v_{n-1}\}, \{v_1\}; x, y) + xZ(P_{n-1}; \emptyset, \{v_1, v_{n-1}\}; x, y). \tag{5.55}$$

Die Startwerte sind:

$$Z(P_2; \{v_1, v_2\}, \emptyset; x, y) = xy^2, \quad (5.56)$$

$$Z(P_2; \{v_1\}, \{v_2\}; x, y) = y, \quad (5.57)$$

$$Z(P_2; \{v_2\}, \{v_1\}; x, y) = y, \quad (5.58)$$

$$Z(P_2; \emptyset, \{v_1, v_2\}; x, y) = x. \quad (5.59)$$

Mit Folgerung 5.22 gilt dann:

Satz 5.37 Das Ising-Polynom eines Kreises C_n mit $n > 2$, den obigen Bezeichnungen und Rekurrenzbeziehungen ist

$$Z(C_n; x, y) = x(Z(P_n; \{v_1, v_n\}, \emptyset; x, y) + Z(P_n; \emptyset, \{v_1, v_n\}; x, y)) \quad (5.60)$$

$$+ Z(P_n; \{v_1\}, \{v_n\}; x, y) + Z(P_n; \{v_n\}, \{v_1\}; x, y). \quad (5.61)$$

Wie auch bei Wegen, kann man ausgehend von den obigen Startwerten mithilfe der Rekurrenzgleichungen das Ising-Polynom eines Kreises iterativ berechnen. In jedem der $n - 2$ Iterationsschritte werden vier Polynome mit mehreren Produkten multipliziert und die Ergebnisse passend in vier (bzw. drei⁹) Summen für die weiteren Rechnungen festgehalten. Am Ende der Berechnungen werden die Ising-Polynome der Wege in Abhängigkeit von den Endknoten entsprechend multipliziert und dann addiert, um das Ising-Polynom eines Kreises zu erhalten. In jeder Iterationsstufe müssen drei Polynome vorgehalten werden. Für Zwischenspeicherungen wird Speicherplatz für ein weiteres Polynom benötigt.

Folgerung 5.38 Das Ising-Polynom eines Kreises C_n ist in $O(n^3)$ berechenbar.

Tabelle 5.2: Ising-Polynome einiger kleiner Kreise

Kreis	Ising-Polynom
C_1	$1 + y$
C_2	$x + 2y + xy^2$
C_3	$x^3 + 3xy + 3xy^2 + x^3y^3$
C_4	$x^4 + 4x^2y + 2y^2 + 4x^2y^2 + 4x^2y^3 + x^4y^4$

⁹ $Z(P_n; \{v_1\}, \{v_n\}; x, y) = Z(P_n; \{v_n\}, \{v_1\}; x, y)$

5.4.3 Bäume

5.4.3.1 Berechnung

Sei $T = (V, E)$ ein Baum mit $|V| = n$. Das Ising-Polynom des Baumes T hat maximal $(|V| + 1)(|E| + 1) = (n + 1)n = n^2 + n$ Monome.

Sei v ein Knoten eines Baumes mit $\deg(v) > 2$. In dieser Arbeit wird v dann auch *Verzweigungsknoten* genannt.

Zur Berechnung des Ising-Polynoms von T kann die Rekurrenzbeziehung über Teilstände (Satz 5.14, Lemma 5.18) genutzt werden.

Falls der Baum T ein Weg ist, dann kann sein Ising-Polynom, wie in Kapitel 5.4.1 vorgestellt, berechnet werden. Ansonsten wird ein Verzweigungsknoten $w \in V$ gewählt. Seien $G_1 = (V_1, E_1), \dots, G_k = (V_k, E_k)$ die Komponenten des Graphen $T - w$. Nun berechnet man die Ising-Polynome für die Bäume $T_1 = T[V_1 \cup w], \dots, T_k = T[V_k \cup w]$ in Abhängigkeit von w . Anschließend berechnet man daraus mit Lemma 5.18 das Ising-Polynom von T . Es werden allerdings schrittweise jeweils immer nur zwei Ising-Polynome verrechnet.

Das Verfahren für die Berechnung des Ising-Polynoms des Baumes T wird mit einigen Anpassungen rekursiv auf die Bäume T_1, \dots, T_k angewandt. So wird in den Unterbäumen jeweils der Verzweigungsknoten für weitere Unterteilungen gewählt, der den geringsten Abstand zum höhern Verzweigungsknoten (im Sinne der Rekursion/Unterteilung) hat. Zudem startet man die eigentlichen Berechnungen in den Blättern und arbeitet sich in Richtung des jeweiligen Verzweigungsknoten vor, führt die Verrechnungen dort durch und geht weiter in Richtung des nächsten Verzweigungsknoten, sodass die Wege zwischen zwei Verzweigungsknoten nicht im unteren verrechnet werden.

Bei den Berechnungen wird T in maximal n Unterbäume geteilt, da die Anzahl seiner Knoten gleich n ist. Jeder der Unterbäume wird wiederum in weniger als n Unterbäume geteilt. Somit müssen an jedem Verzweigungsknoten weniger als $2n$ Polynome verrechnet werden. Bei der Verrechnung werden zwei Mal jeweils maximal $n - 1$ mal Polynome miteinander multipliziert und deren Ergebnis eventuell dividiert (je Verzweigungsknoten: $O(n^5)$). Ising-Polynome von Wegen sind in $O(n^3)$ berechenbar (s. Fol. 5.33). Es wird Speicherplatz für jeweils zwei Ising-Polynome eines jeden Unterbaumes benötigt. Zudem wird Platz für ein weiteres Polynom für die Zwischenspeicherung gebraucht. Weiter müssen auch die Verzweigungsknoten notiert werden und der Baum vorgehalten werden. Ohne Berücksichtigung der Speicherung des Baumes beträgt der Speicheraufwand $O(n^3)$.

Folgerung 5.39 Sei $T = (V, E)$ ein Baum. Das Ising-Polynom des Baumes T ist in $O(|V|^6)$ berechenbar.

5.4.3.2 Beispiel

Es wird eine (verkürzte) Beispielrechnung anhand dem in der Abb. 5.1 dargestellten Baum, im folgenden T genannt, durchgeführt.

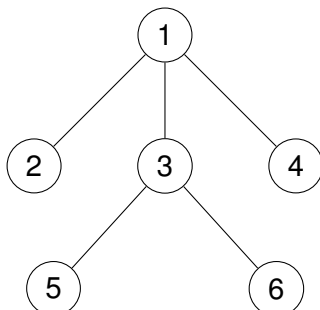


Abbildung 5.1: Ein Baum

1. Unterteilung in Unterbäume

Der Baum ist kein Weg und wird deshalb in Unterbäume unterteilt. Dies erfolgt anhand des Verzweigungsknoten 1. Nun sind drei Unterbäume zu betrachten:

- $T_1 = T[\{1, 2\}]$
- $T_2 = T[\{1, 3, 5, 6\}]$
- $T_3 = T[\{1, 4\}]$

2. Berechnung von $Z(T_1; x, y)$ in Abhängigkeit vom Knoten 1

Der Baum T_1 ist ein Weg. Die Berechnung der Ising-Polynome für Wege in Abhängigkeit von Knoten wurde in vorherigen Unterkapiteln behandelt. Die Ising-Polynome der vier möglichen Zustände sind:

$$Z(T_1; \{1, 2\}, \emptyset; x, y) = xy^2 \quad (5.62)$$

$$Z(T_1; \{2\}, \{1\}; x, y) = y \quad (5.63)$$

$$Z(T_1; \{1\}, \{2\}; x, y) = y \quad (5.64)$$

$$Z(T_1; \emptyset, \{1, 2\}; x, y) = x \quad (5.65)$$

Diese werden in Abhängigkeit vom Knoten 1 zusammengefasst:

$$Z(T_1; \{1\}; \emptyset; x, y) = Z(T_1; \{1, 2\}, \emptyset; x, y) + Z(T_1; \{1\}, \{2\}; x, y) = xy^2 + y \quad (5.66)$$

$$Z(T_1; \emptyset; \{1\}; x, y) = Z(T_1; \{2\}, \{1\}; x, y) + Z(T_1; \emptyset, \{1, 2\}; x, y) = y + x \quad (5.67)$$

3. Unterteilung von T_2 in Unterbäume

Der Baum T_2 ist kein Weg und wird deshalb anhand des Knoten 3, dem (einzigen) Verzweigungsknoten mit dem kleinsten Abstand zum Verzweigungsknoten 1, in Unterbäume aufgeteilt:

- $T_4 = T[\{3, 5\}]$
- $T_5 = T[\{3, 6\}]$

3.1. Berechnung von $Z(T_4; x, y)$ in Abhängigkeit vom Knoten 3

Der Baum T_4 ist, wie auch der Baum T_1 , isomorph zu einem Weg P_2 . Die Ising-Polynome sind analog:

$$Z(T_4; \{3\}, \emptyset; x, y) = xy^2 + y \quad (5.68)$$

$$Z(T_4; \emptyset, \{3\}; x, y) = y + x \quad (5.69)$$

3.2. Berechnung von $Z(T_5; x, y)$ in Abhängigkeit vom Knoten 3

Der Baum T_5 ist ebenfalls isomorph zu einem Weg P_2 . Es ergibt sich:

$$Z(T_5; \{3\}, \emptyset; x, y) = xy^2 + y \quad (5.70)$$

$$Z(T_5; \emptyset, \{3\}; x, y) = y + x \quad (5.71)$$

3.3. Zusammenfassen der Ising-Polynome der Unterbäume von Knoten 3

Anhand der Rekurrenzformel über Teilzustände können die Ising-Polynome zusammengefasst werden:

$$\begin{aligned} Z(T_4 \cup T_5; \{3\}, \emptyset; x, y) &= y^{-1} Z(T_4; \{3\}, \emptyset; x, y) Z(T_5; \{3\}, \emptyset; x, y) \\ &= y^{-1} (xy^2 + y)^2 = x^2 y^3 + 2xy^2 + y \end{aligned} \quad (5.72)$$

$$\begin{aligned} Z(T_4 \cup T_5; \emptyset, \{3\}; x, y) &= Z(T_4; \emptyset, \{3\}; x, y) Z(T_5; \emptyset, \{3\}; x, y) \\ &= (x + y)^2 = y^2 + 2xy + x^2 \end{aligned} \quad (5.73)$$

3.4 Berechnung von $Z(T_2; x, y)$ in Abhängigkeit vom Knoten 1

Es ist $T_2 = T_4 \cup T_5 + \{1\} + \{1, 3\}$. Eine derartige Rekurrenzbeziehung wurde betrachtet (s. Satz 5.32), und es ergibt sich im einzelnen:

$$Z(T_2; \{1, 3\}, \emptyset; x, y) = xy Z(T_4 \cup T_5; \{3\}, \emptyset; x, y) = x^3 y^4 + 2x^2 y^3 + xy^2 \quad (5.74)$$

$$Z(T_2; \{1\}, \{3\}; x, y) = y Z(T_4 \cup T_5; \emptyset, \{3\}; x, y) = y^3 + 2xy^2 + x^2 y \quad (5.75)$$

$$Z(T_2; \{3\}, \{1\}; x, y) = Z(T_4 \cup T_5; \{3\}, \emptyset; x, y) = x^2 y^3 + 2xy^2 + y \quad (5.76)$$

$$Z(T_2; \emptyset, \{1, 3\}; x, y) = x Z(T_4 \cup T_5; \emptyset, \{3\}; x, y) = xy^2 + 2x^2 y + x^3 \quad (5.77)$$

Und zusammengefasst erhält man:

$$\begin{aligned} Z(T_2; \{1\}, \emptyset; x, y) &= Z(T_2; \{1, 3\}, \emptyset; x, y) + Z(T_2; \{1\}, \{3\}; x, y) \\ &= x^3 y^4 + 2x^2 y^3 + 3xy^2 + y^3 + x^2 y \end{aligned} \quad (5.78)$$

$$\begin{aligned} Z(T_2; \emptyset, \{1\}; x, y) &= Z(T_2; \{3\}, \{1\}; x, y) + Z(T_2; \emptyset, \{1, 3\}; x, y) \\ &= x^2 y^3 + 3xy^2 + 2x^2 y + y + x^3 \end{aligned} \quad (5.79)$$

4. Zusammenfassen der Ising-Polynome der Unterbäume T_1 und T_2

Die Verrechnung erfolgt anhand der Rekurrenzformel über Teilzustände:

$$\begin{aligned} Z(T_1 \cup T_2; \{1\}, \emptyset; x, y) &= y^{-1} Z(T_1; \{1\}; \emptyset; x, y) Z(T_2; \{1\}, \emptyset; x, y) \\ &= y^{-1} (y + xy^2) (x^3 y^4 + 2x^2 y^3 + 3xy^2 + y^3 + x^2 y) \\ &= x^4 y^5 + 3x^3 y^4 + xy^4 + 5x^2 y^3 + y^3 + x^3 y^2 + 3xy^2 + x^2 y \end{aligned} \quad (5.80)$$

$$\begin{aligned} Z(T_1 \cup T_2; \emptyset, \{1\}; x, y) &= Z(T_1; \emptyset; \{1\}; x, y) Z(T_2; \emptyset, \{1\}; x, y) \\ &= (x + y) (x^2 y^3 + 3xy^2 + 2x^2 y + y + x^3) \\ &= x^2 y^4 + x^3 y^3 + 3xy^3 + 5x^2 y^2 + y^2 + 3x^3 y + xy + x^4 \end{aligned} \quad (5.81)$$

5. Berechnung von $Z(T_3; x, y)$ in Abhängigkeit vom Knoten 1

Der Baum ist ebenfalls ein zu dem Weg P_2 isomorpher Graph. Damit folgt:

$$Z(T_3; \{1\}, \emptyset; x, y) = xy^2 + y \quad (5.82)$$

$$Z(T_3; \emptyset, \{1\}; x, y) = y + x \quad (5.83)$$

6. Zusammenfassen der Ising-Polynome von $T_1 \cup T_2$ mit dem Unterbaum T_3

Nun wird der letzte Teilbaum mit den anderen Teilbäumen verrechnet. Genutzt wird wieder die Rekurrenzformel über Teilzustände:

$$\begin{aligned} Z((T_1 \cup T_2) \cup T_3; \{1\}, \emptyset; x, y) &= y^{-1} Z(T_1 \cup T_2; \{1\}, \emptyset; x, y) Z(T_3; \{1\}, \emptyset; x, y) \\ &= y^{-1} (x^4 y^5 + 3x^3 y^4 + xy^4 + 5x^2 y^3 + y^3 \\ &\quad + x^3 y^2 + 3xy^2 + x^2 y) (xy^2 + y) \end{aligned} \quad (5.84)$$

$$\begin{aligned} &= x^5 y^6 + 4x^4 y^5 + x^2 y^5 + 8x^3 y^4 + 2xy^4 \\ &\quad + x^4 y^3 + 8x^2 y^3 + y^3 + 2x^3 y^2 + 3xy^2 + x^2 y \end{aligned} \quad (5.85)$$

$$\begin{aligned} Z((T_1 \cup T_2) \cup T_3; \emptyset, \{1\}; x, y) &= Z(T_1 \cup T_2; \emptyset, \{1\}; x, y) Z(T_3; \emptyset, \{1\}; x, y) \\ &= (x^2 y^4 + x^3 y^3 + 3xy^3 + 5x^2 y^2 + y^2 \\ &\quad + 3x^3 y + xy + x^4) (y + x) \\ &= x^2 y^5 + 2x^3 y^4 + 3xy^4 + x^4 y^3 + 8x^2 y^3 + y^3 \\ &\quad + 8x^3 y^2 + 2xy^2 + 4x^4 y + x^2 y + x^5 \end{aligned} \quad (5.86)$$

7. Berechnung von $Z(T; x, y)$

Laut der Rekurrenzformel über Teilzustände können nun die beiden Ising-Polynome von T in Abhängigkeit von dem Knoten 1 addiert werden, um das Ising-Polynom des Baumes zu erhalten:

$$\begin{aligned} Z(T; x, y) &= Z(T; \{1\}, \emptyset; x, y) + Z(T; \emptyset, \{1\}; x, y) \\ &= Z((T_1 \cup T_2) \cup T_3; \{1\}, \emptyset; x, y) + Z((T_1 \cup T_2) \cup T_3; \emptyset, \{1\}; x, y) \\ &= x^5 y^6 + 4x^4 y^5 + 2x^2 y^5 + 10x^3 y^4 + 5xy^4 + 2x^4 y^3 + 10x^2 y^3 + 2y^3 \\ &\quad + 10x^3 y^2 + 5xy^2 + 4x^4 y + 2x^2 y + x^5 \end{aligned} \tag{5.87}$$

5.4.4 Vollständige Graphen

Satz 5.40 *Das Ising-Polynom des vollständigen Graphen K_n für $n > 1$ ist*

$$Z(K_n; x, y) = \sum_{j=0}^n \binom{n}{j} x^{\binom{n}{2}-j(n-j)} y^j. \tag{5.88}$$

Beweis: Das Polynom wird unter Verwendung des Satzes 5.11 aus dem Ising-Polynom des kantenlosen Graphen (3.2), seinem komplementären Graphen, berechnet. \square

Für den vollständigen Graphen K_n werden $n + 1$ Summanden berechnet. Der Wert $\binom{n}{2}$ aus dem Exponenten von x kann ein Mal berechnet werden und zwischengespeichert werden. Die Binomialkoeffizienten können rekursiv berechnet werden, sodass der Aufwand hierfür jeweils $O(1)$ beträgt. Die weiteren Berechnungen werden für jede Summe neu durchgeführt. Neben dem Speicherplatz für das Polynom, sollte noch Platz für die Konstante $\binom{n}{2}$ und dem jeweils aktuellen Binomialkoeffizienten verfügbar sein. Der Speicheraufwand beträgt somit $O(n^3)$.

Folgerung 5.41 *Das Ising-Polynom des vollständigen Graphen K_n ist in $O(n)$ berechenbar.*

Tabelle 5.3: Ising-Polynome einiger kleiner vollständiger Graphen

Vollständiger Graph	Ising-Polynom
K_1	$1 + y$
K_2	$x + 2y + xy^2$
K_3	$x^3 + 3xy + 3xy^2 + x^3 y^3$
K_4	$x^6 + 4x^3 y + 6x^2 y^2 + 4x^3 y^3 + x^6 y^4$
K_5	$x^{10} + 5x^6 y + 10x^4 y^2 + 10x^4 y^3 + 5x^6 y^4 + x^{10} y^5$

5.4.5 Vollständige Bipartite Graphen

Satz 5.42 Das Ising-Polynom des vollständigen bipartiten Graphen $K_{s,t}$ ist

$$Z(K_{s,t}; x, y) = \sum_{i,j} a_{i,j}^{\overline{K_{s,t}}} x^{\binom{s+t}{2} - j(n-j) - i} y^j \quad (5.89)$$

mit

$$Z(\overline{K_{s,t}}; x, y) = Z(K_s; x, y) Z(K_t; xy) = \sum_{i,j} a_{i,j}^{\overline{K_{s,t}}} x^i y^j. \quad (5.90)$$

Beweis: Der komplementäre Graph $\overline{K_{s,t}}$ von $K_{s,t}$ ist die disjunkte Vereinigung der vollständigen Graphen K_s und K_t . Zur Berechnung der Ising-Polynome der vollständigen Graphen kann Satz 5.40, zu dem des $\overline{K_{s,t}}$ Satz 5.4 (Graph mit mehreren Komponenten), und dann Satz 5.11 für das des $K_{s,t}$ (Komplementärgraph) verwendet werden. \square

Satz 5.43 Das Ising-Polynom des vollständigen bipartiten Graphen $K_{s,t} = (V, E)$ ist

$$Z(K_{s,t}; x, y) = x^{|E|} y^{|V|} \sum_{j=0}^s \sum_{k=0}^t \binom{s}{j} \binom{t}{k} x^{-[j(t-k)+k(s-j)]} y^{-(j+k)}. \quad (5.91)$$

Beweis 1: Dies ergibt sich aus dem zugehörigen Bipartitionspolynom ([8] Satz 17) mit der Umrechnung laut Satz 3.5. \square

Beweis 2: Der Graph gleicht der Verbindung der kantenlosen Graphen $\overline{K_s}$ und $\overline{K_t}$, und kann so nach Satz 5.7 aus den Ising-Polynomen der beiden kantenlosen Graphen (s. (3.2)) berechnet werden. \square

Ausgehend vom vorigen Satz wird festgestellt, dass $s \cdot t$ Summanden berechnet werden und dabei jeweils eine konstante Anzahl an Berechnungen durchgeführt wird. Die Berechnung der Binomialkoeffizienten kann, wie schon im Zusammenhang mit vollständigen Graphen erwähnt, rekursiv durchgeführt werden. Es wird Speicherplatz für drei Polynome und zwei Binomialkoeffizienten benötigt ($O((st)^3)$).

Folgerung 5.44 Das Ising-Polynom des vollständigen bipartiten Graphen $K_{s,t} = (V, E)$ ist in $O(s \cdot t)$ bzw. $O(|V|^2)$ berechenbar.

Bemerkung 5.45 Der komplementäre Graph eines vollständigen multipartiten Graphen ist die disjunkte Vereinigung vollständiger Graphen. Ausgehend von der Beweisargumentation im Beweis 2 zum vorangehenden Satz kann die angegebene Berechnung für vollständige multipartite Graphen erweitert werden.

5.4.6 Fächer, Räder, Sterne

5.4.6.1 Fächer

Definition 5.46 Ein Fächer F_n ist eine Verbindung des Weges P_n mit dem vollständigen Graphen K_1 :

$$F_n = P_n + K_1. \quad (5.92)$$

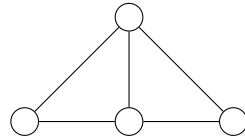


Abbildung 5.2: Ein Fächer F_3

Das Ising-Polynom eines Weges P_n ist laut Folgerung 5.33 in $O(n^3)$ und das einer Verbindung mit einem K_1 ist laut Folgerung 5.10 in $O(|V|^3)$ berechenbar. Der Speicheraufwand ist entsprechend $O(n^3)$. Es wird Speicherplatz für zwei Polynome benötigt.

Folgerung 5.47 Das Ising-Polynom eines Fächers F_n ist in $O(n^3)$ berechenbar.

5.4.6.2 Räder

Definition 5.48 Ein Rad W_n ist eine Verbindung des Kreises C_n mit dem vollständigen Graphen K_1 :

$$W_n = C_n + K_1. \quad (5.93)$$

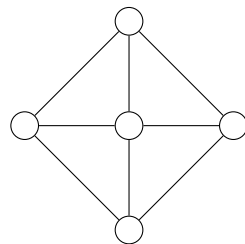


Abbildung 5.3: Ein Rad W_4

Die Berechnung des Ising-Polynoms eines Kreises C_n ist in $O(n^3)$ möglich (s. Fol. 5.38). Die Bestimmung von Rechenaufwand und Speicherplatz erfolgt sonst analog wie bei den Fächern, da eine gleiche Operation, die Verbindung mit einem K_1 , durchgeführt wird.

Folgerung 5.49 Das Ising-Polynom eines Rades W_n ist in $O(n^3)$ berechenbar.

5.4.6.3 Sterne

Definition 5.50 Ein Stern S_n ist eine Verbindung des kantenlosen Graphen $\overline{K_n}$ mit dem vollständigen Graphen K_1 :

$$S_n = \overline{K_n} + K_1. \quad (5.94)$$

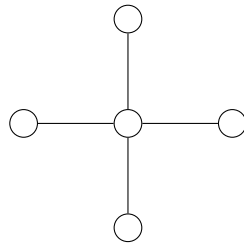


Abbildung 5.4: Ein Stern S_4

Das Ising-Polynom des kantenlosen Graphen $\overline{K_n}$ (s. Gleichung (3.2)) ist in $O(n)$ berechenbar und die Verbindung, analog wie bei Fächern und Rädern, in $O(n^3)$. Allerdings ist ein Stern ein spezieller vollständiger bipartiter Graph und deshalb gilt:

Lemma 5.51 Das Ising-Polynom eines Sterns $S_n = (V, E)$ ist

$$Z(S_n; x, y) = x^{|E|} y^{|V|} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (x^{-k} y^{-k} + x^{-(n-k)} y^{-(1+k)}). \quad (5.95)$$

Beweis: Man erhält die Formel aus Satz 5.43 für einen vollständigen bipartiten Graphen $K_{1,n}$ nach wenigen Umformungen. □

Für jeden der $n + 1$ Summanden wird eine konstante Anzahl an Rechenschritten durchgeführt. Es wird Speicherplatz für ein Polynom benötigt.

Folgerung 5.52 Das Ising-Polynom eines Sterns S_n ist in $O(n)$ berechenbar.

Die Berechnungsformel für das Ising-Polynom kann auch ohne Summenzeichen angegeben werden:

Satz 5.53 (Vgl. [10] Proposition 20) Das Ising-Polynom eines Sterns S_n ist

$$Z(S_n; x, y) = y(xy + 1)^n + (y + x)^n. \quad (5.96)$$

Beweis 1: Die Behauptung folgt aus dem obigen Lemma:

$$\begin{aligned}
Z(S_n; x, y) &= x^{|E|} y^{|V|} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \left(x^{-k} y^{-k} + x^{-(n-k)} y^{-(1+k)} \right) \\
&= x^{|E|} y^{|V|} \left(\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^{-k} y^{-k} + \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^{-(n-k)} y^{-(1+k)} \right) \\
&= y \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^{n-k} y^{n-k} + \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^k y^{n-k} \\
&= y(xy + 1)^n + (y + x)^n.
\end{aligned}$$

□

Beweis 2: (Vgl. [10]) Sei $S_n = \overline{K_n} + K_1$ mit $u \in V(K_1)$ und $v_1, \dots, v_n \in V(\overline{K_n})$.

Sei nun u positiv magnetisiert. Jedes $v_i, i = 1, \dots, n$, dass positiv magnetisiert ist, erhöht die Magnetisierung um 1 und in dem Fall indirekt auch die Energie um 1, da dann die Kante $\{u, v_i\}$ einen Energiewert von 1 hat. Falls ein beliebiges v_i negativ magnetisiert ist, ändert sich dadurch nichts an der Magnetisierung und das gleiche gilt auch für die Energie, da die Kante $\{u, v_i\}$ dann im Schnitt liegt. Diese beiden Möglichkeiten bestehen für jede der n Blätter des Sterns, und somit folgt:

$$Z(S_n; \{u\}, \emptyset; x, y) = y(xy + 1)^n. \quad (5.97)$$

Wenn u negativ magnetisiert ist, dann wird durch ein positiv magnetisiertes v_i die Magnetisierung um 1 erhöht. Und im Falle eines negativ magnetisierten v_i liegt die Kante $\{u, v_i\}$ im Block mit den negativ magnetisierten Knoten und hat somit den Energiewert 1. Damit folgt:

$$Z(S_n; \emptyset, \{u\}; x, y) = (y + x)^n. \quad (5.98)$$

Die Berücksichtigung beider Möglichkeiten für die Magnetisierung von u ergibt mit der Addition der Ising-Polynome der Teilstände die Behauptung. □

5.4.7 Graphen mit beschränkter Baumweite

5.4.7.1 Definitionen

Definition 5.54 ([14]) Seien $G = (V, E)$ ein Graph, $T = (W, F)$ ein Baum und $\phi : W \rightarrow 2^V$ eine Abbildung, die jedem Knoten von T eine Knotenteilmenge von G zuweist, mit folgenden Eigenschaften:

- $\forall v \in V : \exists w \in W : v \in \phi(w)$,

- $\forall \{u, v\} \in E : \exists w \in W : \{u, v\} \subseteq \phi(w)$,
- Für alle $x, y, z \in W$: Falls z in T auf dem Weg zwischen den Knoten x und y liegt, dann gilt: $\phi(x) \cap \phi(y) \subseteq \phi(z)$.

Das Paar (T, ϕ) heißt dann *Baumzerlegung* von G .

Definition 5.55 ([14]) Die *Weite der Baumzerlegung* (T, ϕ) eines Graphen G mit $T = (W, F)$ ist

$$\max_{w \in W} |\phi(w)| - 1.$$

Definition 5.56 ([14]) Die *Baumweite* $tw(G)$ eines Graphen G ist die minimale Weite aller Baumzerlegungen von G .

Für die Berechnung des Ising-Polynoms eines Graphen wird eine besondere Baumzerlegung betrachtet:

Definition 5.57 (Vgl. [14]) Sei $G = (V, E)$ ein Graph und (T, ϕ) mit $T = (W, F)$ eine Baumzerlegung von G . Die Baumzerlegung wird (in dieser Arbeit) *fein* genannt, falls gilt:

- Für alle Blätter $w \in W$ ist $\phi(w) = \emptyset$,
- $\forall \{x, y\} \in F : |\phi(x) \setminus \phi(y)| + |\phi(y) \setminus \phi(x)| = 1$.

Beispielhaft sind in den Abbildungen 5.5 bis 5.7 ein Graph, eine Baumzerlegung und eine feine Baumzerlegung des Graphen dargestellt.

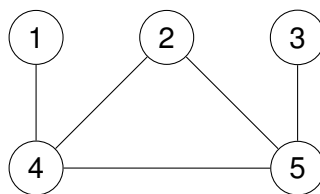


Abbildung 5.5: Ein Graph, ...

5.4.7.2 Berechnung

Sei nun $G = (V, E)$ ein Graph und (T, ϕ) mit $T = (W, F)$ und der Weite k eine feine Baumzerlegung von G . Weiter sei $|W| = n$.

Die Berechnung des Ising-Polynoms von G anhand der Baumzerlegung ist von der Struktur her ähnlich zu der Berechnung des Ising-Polynoms eines Baumes. Zunächst wird der Baum T anhand seiner Verzweigungsknoten in Unterbäume geteilt. Falls T ein Weg ist, dann entfällt diese Unterteilung bzw. dann übernimmt ein Blatt für die Berechnung die Funktion eines Verzweigungsknotens. Man startet von den Blättern von

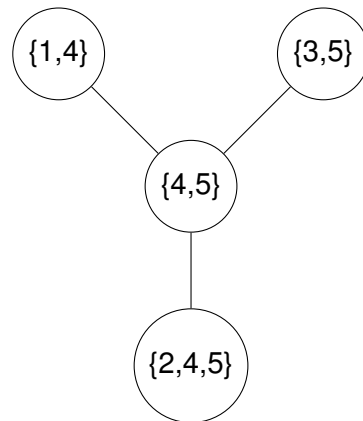


Abbildung 5.6: ... eine Baumzerlegung des Graphen, ...

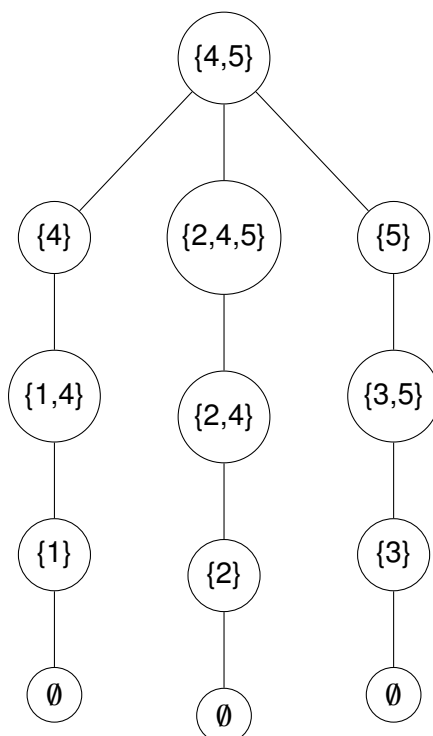


Abbildung 5.7: ... und eine feine Baumzerlegung des Graphen.

T und arbeitet sich in Richtung des jeweiligen Verzweigungsknoten vor. Es werden jeweils die Ising-Polynome der Unterbäume in Abhängigkeit entsprechender Knoten bis zu den Verzweigungsknoten berechnet und dort passend zusammengefasst. Die einzelnen Schritte werden im folgenden erläutert.

Für jeden Knoten $w \in W$ werden nun Ising-Polynome in Abhängigkeit aller möglichen Zustände von $\phi(w)$ betrachtet. Dabei geht man jeweils von den Ising-Polynomen samt der bereits betrachteten Zustandsmenge des jeweils vorhergehenden Knoten aus. Die Startwerte für die Blätter sind das Ising-Polynom des Nullgraphen in Abhängigkeit von der leeren Menge \emptyset (d. h. $Z(K_0; \emptyset, \emptyset) = 1$).

Ein jeder Zustand von $\phi(w)$ kann dabei als Teilzustand (B, C) mit $B \cup C = \phi(w)$ und $B \cap C = \emptyset$ dargestellt werden. Jedem Zustand (B, C) von $\phi(w)$ ist ein davon abhängiges Ising-Polynom zugeordnet, sodass der Zustand eine Art Index¹⁰ ist. Für jeden Knoten werden damit Index-Wert-Paare betrachtet, wobei die Menge der Indizes die beobachtete Zustandsmenge bildet.

Sei Z die Menge der Vorgängerknoten von w . Die Baumzerlegung ist fein, sodass entweder ein Knoten $v \in \phi(w)$ enthalten ist mit $v \notin \phi(Z)$ oder für jeden Knoten $z \in Z$ ein $v \in \phi(z)$ vorhanden ist, für den jeweils gilt: $v \notin \phi(w)$. Bezogen auf die beobachteten Paare heißt dies, dass die Indizes, die möglichen Zustände, geändert oder zusammengefasst werden, und dies kann Auswirkungen auf ihre Werte, die Ising-Polynome, haben. Im ersten Fall ($v \notin \phi(Z)$) muss das Hinzufügen des Knotens $v \in V$, der bisher für das Ising-Polynom nicht berücksichtigt wurde, betrachtet werden (Knoten hinzufügen). Zudem sind danach auch eventuelle zu v inzidente Kanten, die zu weiteren Knoten von $\phi(w)$ inzident sind, zu verarbeiten (Kante verarbeiten). Diese Operationen erfolgen entsprechend der in Folgerungen 5.26 und 5.22 angegebenen Rekurrenzbeziehungen. Im zweiten Fall ($v \in \phi(w)$) muss das Ising-Polynom nicht mehr in Abhängigkeit vom Knoten $v \in V$ betrachtet werden, da v nicht zu noch nicht berücksichtigten Knoten aus V adjazent ist. Somit kann v aus der beobachteten Zustandsmenge entfernt werden (Knoten entfernen). Damit ergeben sich drei verschiedene mögliche Operationen für jeden Knoten $w \in W$:

Knoten hinzufügen ($+v$):

Es sind die zwei möglichen Zustände von v , positiv und negativ, zu berücksichtigen. Jeder beobachtete Zustand von $\phi(z)$ wird für w um den Knoten v , einmal mit positiver und einmal mit negativer Magnetisierung, erweitert. Im ersten Fall müssen die zugehörigen Ising-Polynome mit y multipliziert werden, da sich die Magnetisierung um 1 erhöht. Und im anderen Fall ändern sich die zugehörigen Ising-Polynome nicht, da sich die Magnetisierung nicht ändert. Somit verdoppelt sich die Anzahl der zu beobachteten Zustände. Alle eventuellen Kanten, die in G zwischen Knoten aus $\phi(z)$ und v vorhanden sind,

¹⁰ Da $B \cap C = \phi(w) = \phi(w) \cap V(G)$ ist und (B, C) hier nur verkürzt einen Teilzustand von einem Teil von G darstellt, kann von diesem Index nicht eindeutig auf den zugehörigen Wert geschlossen werden.

müssen anschließend noch verarbeitet werden.

Kante verarbeiten ($+\{u, v\}$):

Falls in G eine Kante zwischen einem beliebigen Knoten $u \in \phi(z)$ und dem hinzugefügten Knoten v existiert, dann ist die Auswirkung auf die Energiewerte zu berücksichtigen. Für die Zustände, in denen u und v gleichnamig magnetisiert sind, ist die Energie der Kante $\{u, v\}$ gleich 1. Diese Erhöhung der Energie wird durch die Multiplikation der zugehörigen Ising-Polynome mit x realisiert. Für die anderen Zustände ändert sich nichts, da der Energiewert unverändert bleibt.

Knoten entfernen ($-v$):

Wenn beobachtete Zustände nach dem Entfernen von v aus der beobachteten Zustandsmenge gleich sind, können sie jeweils zu einem Zustand zusammengefasst werden, da nicht mehr nach der Magnetisierung von v unterschieden werden muss. Ihre Ising-Polynome werden dabei addiert.

Sei nun $w \in W$ ein Verzweigungsknoten. Sind Ising-Polynome von seinen Unterbäumen in Abhängigkeit der beobachteten Zustandsmenge von w bekannt, dann werden gleiche Zustände anhand der Rekurrenzgleichung über Teilzustände (s. Satz 5.14) jeweils zu einem Zustand zusammengefasst. Es werden jeweils immer nur zwei Ising-Polynome verrechnet, um schrittweise den Zähler der Gleichung (5.10) für den jeweiligen Teilzustand zu bestimmen. Anschließend wird der entsprechende Nenner, das Ising-Polynom des Teilzustandes, berechnet. Für letzteres können zugehörige Knoten und Kanten einzeln betrachtet werden und dabei die positiv magnetisierten Knoten und Kanten mit positiver Energie gezählt werden. Danach wird die Polynomdivision durchgeführt.

Auch die Betrachtung des Rechenaufwandes ist teilweise ähnlich zu der beim Baum. Der Baum T wird in maximal n Unterbäume unterteilt.

Für jeden Knoten können die Operationen Knoten verarbeiten, Kante verarbeiten oder Knoten entfernen auftreten. Falls ein Knoten zu verarbeiten ist, verdoppelt sich die Anzahl der zu beobachteten Zustände auf maximal 2^{k+1} und es müssen entsprechend viele Ising-Polynome samt beobachteter Zustandsmenge aktualisiert, in diesem Fall kopiert oder multipliziert werden (je Knoten des Baumes: $O(n^3 2^{k+1})$). Falls Kanten zu verarbeiten sind, sind je Kante die Hälfte der betroffenen Ising-Polynome zu multiplizieren (je Knoten des Baumes: $O(n^4 2^{k+1})$). Bei der Entfernung eines Knoten werden bis zu 2^k Additionen von Ising-Polynomen durchgeführt (je Knoten des Baumes: $O(n^3 2^k)$). Zudem werden Paare mit der gleichen beobachteten Zustandsmenge gesucht (je Knoten des Baumes: $O(k 2^{2k+1})$).

An jedem Verzweigungsknoten werden nach den üblichen Operationen für jeden Knoten noch maximal 2^{k+2} mal jeweils maximal n Ising-Polynome miteinander verrechnet und für jede Verrechnung bis zu $n - 1$ mal zwei Polynome miteinander multipliziert (je

Verzweigungsknoten: $O(n^7 2^{k+2})$). Zudem muss das Ising-Polynom des beobachteten Teilzustandes berechnet werden ($O(n^3)$). Anschließend wird noch eine Polynomdivision durchgeführt ($O(n^6)$). Vor den Verrechnungen werden jeweils die zugehörigen Paare mit den gleichen Zusandsmengen gesucht (je Verzweigungsknoten: $O(k 2^{2k+2})$).

Für jeden Knoten von T müssen bis zu n mal 2^{k+1} Ising-Polynome samt zugehörigem Teilzustand zwischenzeitlich gespeichert werden (je Knoten: $O(n^4 2^{k+1})$). Auch die Verzweigungsknoten ($O(n)$), die Baumzerlegung und der Graph G müssen vorgehalten werden. Ohne Berücksichtigung der Baumzerlegung und des Graphen beträgt der Speicheraufwand $O(n^5 2^{k+1})$.

Folgerung 5.58 Sei $G = (V, E)$ ein Graph und (T, ϕ) mit $T = (W, F)$ und $|W| = n$ eine gegebene feine Baumzerlegung von G mit der Weite k . Dann ist das Ising-Polynom von G in $O(n^8 2^{2k+2})$ berechenbar.

Der Rechenaufwand für die Suche kann stark von den verwendeten Datenstrukturen, der Sortierung der Index-Wert-Paare und den Suchverfahren abhängen. Dies sollte berücksichtigt werden, wenn die Baumweite nicht viel kleiner ist als die Anzahl der Knoten des Graphen. Denn dann könnte es unter Umständen besser (schneller) sein, alle Zustände des Graphen einzeln zu betrachten und so einen naiven Berechnungsansatz zu wählen. Ohne Berücksichtigung des Aufwandes für die Suche beträgt der Rechenaufwand aber noch $O(n^8 2^{k+2})$.

Wenn eine Baumzerlegung eines Graphen vorliegt, die nicht fein ist, dann kann eine feine Baumzerlegung des Graphen schnell ermittelt werden:

Lemma 5.59 (Vgl. [4] Lemma 3) Seien $G = (V, E)$ ein Graph, $|V| = n$ und (T, ϕ) eine Baumzerlegung von G mit Weite k . Dann kann in $O(n)$ eine feine Baumzerlegung von G ermittelt werden, die $O(n)$ Knoten und ebenfalls die Weite k hat.

5.4.7.3 Einige Aussagen zur Baumweite

Der Rechenaufwand wächst exponentiell in der Weite der Baumzerlegung, die deshalb möglichst klein gewählt werden sollte. Die Baumweite ist jedoch keine triviale Größe, was an den folgenden Aussagen zu sehen ist:

Satz 5.60 ([12]) Das Problem, die Baumweite eines Graphen zu bestimmen, ist NP-vollständig.

Lemma 5.61 ([3]) Für jedes feste $k \in \mathbb{N}$ kann eine Baumzerlegung mit Weite k für einen Graphen G in polynomieller Zeit ermittelt werden, falls sie denn existiert.

In der Tabelle 5.4 sind einige Graphenklassen mit beschränkter Baumweite gelistet. Die

Struktur der Tabelle stammt aus dem Bericht [6], der von derartigen Graphenklassen handelt.

Tabelle 5.4: Einige Graphenklassen mit beschränkter Baumweite

Graphenklasse	Obere Schranke für die Baumweite	Referenz
Bäume, Wälder	1	[6]
Außerplanare Graphen	2	[5, 6]
Halingraphen	3	[5, 6]
Chordale Graphen mit Cliquengröße von maximal k	$k - 1$	[6, 12]
Intervallgraphen mit Cliquengröße von maximal k	$k - 1$	[6]
$n \times n$ Gittergraph	n	[26]

5.4.7.4 Beispiel

Sei G der in Abbildung 5.5 (Seite 48) dargestellte Graph, T der in Abbildung 5.7 (Seite 49) dargestellte Baum und (T, ϕ) eine feine Baumzerlegung von G . Zur Vereinfachung wird bei den Bezeichnungen jeweils die Knotenmenge $\phi(w)$ für $w \in V(T)$ verwendet. Im folgenden wird eine (verkürzte) Beispielrechnung für die Ermittlung des Ising-Polynoms von G dokumentiert.

1. Unterteilung in Unterbäume

Der Baum T hat einen Verzweigungsknoten, $\{4, 5\}$ und wird in drei Unterbäume geteilt:

- $T_1 = T[\{\{4, 5\}, \{4\}, \{1, 4\}, \{1\}, \emptyset\}]$
- $T_2 = T[\{\{4, 5\}, \{2, 4, 5\}, \{2, 4\}, \{2\}, \emptyset\}]$
- $T_3 = T[\{\{4, 5\}, \{5\}, \{3, 5\}, \{3\}, \emptyset\}]$

Ausgehend von der Abbildung der feinen Baumzerlegung bezeichnet T_1 den linken, T_2 den mittleren und T_3 den rechten Unterbaum von T .

Zudem seien entsprechend der Baumzerlegung:

- $G_1 = G[\{1, 4, 5\}]$
- $G_2 = G[\{2, 4, 5\}]$
- $G_3 = G[\{3, 4, 5\}]$

2. Verarbeitung von T_1

Die Verarbeitung von T_1 entspricht der Berechnung von $Z(G_1; x, y)$ in Abhängigkeit von den Knoten 4 und 5.

Die Berechnung wird in der folgenden Tabelle dokumentiert. In der linken Spalte wird die jeweilige Knoten- oder Kantenoperation angegeben. Die nächsten beiden Spalten

geben die Menge der positiv bzw. negativ magnetisierten Knoten des beobachteten Teilzustands, einen Index, wieder. In der letzten Spalte wird das entsprechende jeweils aktuelle - bezogen auf die Operationen - Ising-Polynom, der zum Index gehörende Wert, angegeben. Um zu verdeutlichen, wann ein Knoten aus T (abgesehen von den speziellen Operationen für Verzweigungsknoten) verarbeitet ist, werden an den entsprechenden Stellen in der Tabelle zwei horizontale Linien zur Trennung verwendet.

Tabelle 5.5: Verarbeitung des linken Teilbaumes

Operation	Positiv	Negativ	Ising-Polynom
Start	\emptyset	\emptyset	1
+{1}	\emptyset	{1}	1
	{1}	\emptyset	y
+{4}	\emptyset	{1,4}	1
	{4}	{1}	y
	{1}	{4}	y
	{1,4}	\emptyset	y ²
+{1,4}	\emptyset	{1,4}	x
	{4}	{1}	y
	{1}	{4}	y
	{1,4}	\emptyset	xy ²
-{1}	\emptyset	{4}	x + y
	{4}	\emptyset	y + xy ²
+{5}	\emptyset	{4,5}	x + y
	{5}	{4}	xy + y ²
	{4}	{5}	y + xy ²
	{4,5}	\emptyset	y ² + xy ³
+{4,5}	\emptyset	{4,5}	x ² + xy
	{5}	{4}	xy + y ²
	{4}	{5}	y + xy ²
	{4,5}	\emptyset	xy ² + x ² y ³

Bezogen auf den Graphen G_1 gilt also:

$$Z(G_1; \emptyset, \{4, 5\}; x, y) = x^2 + xy \quad (5.99)$$

$$Z(G_1; \{5\}, \{4\}; x, y) = xy + y^2 \quad (5.100)$$

$$Z(G_1; \{4\}, \{5\}; x, y) = y + xy^2 \quad (5.101)$$

$$Z(G_1; \{4, 5\}, \emptyset; x, y) = xy^2 + x^2y^3 \quad (5.102)$$

3. Verarbeitung von T_2

Die Verarbeitung entspricht der Berechnung von $Z(G_2; x, y)$ in Abhängigkeit von den

Knoten 4 und 5.

Die Berechnung ist in der folgenden Tabelle dokumentiert. Die Spaltenbezeichnungen sind die gleichen wie unter 2.

Tabelle 5.6: Verarbeitung des mittleren Teilbaumes

Operation	Positiv	Negativ	Ising-Polynom
Start	\emptyset	\emptyset	1
+{2}	\emptyset	{2}	1
	{2}	\emptyset	y
+{4}	\emptyset	{4,2}	1
	{4}	{2}	y
	{2}	{4}	y
	{4,2}	\emptyset	y ²
+{2,4}	\emptyset	{2,4}	x
	{4}	{2}	y
	{2}	{4}	y
	{2,4}	\emptyset	xy ²
+{5}	\emptyset	{2,4,5}	x
	{5}	{2,4}	xy
	{4}	{2,5}	y
	{4,5}	{2}	y ²
	{2}	{4,5}	y
	{2,5}	{4}	y ²
	{2,4}	{5}	xy ²
	{2,4,5}	\emptyset	xy ³
+{2,5}	\emptyset	{2,4,5}	x ²
	{5}	{2,4}	xy
	{4}	{2,5}	xy
	{4,5}	{2}	y ²
	{2}	{4,5}	y
	{2,5}	{4}	xy ²
	{2,4}	{5}	xy ²
	{2,4,5}	\emptyset	x ² y ³
+{4,5}	\emptyset	{2,4,5}	x ³
	{5}	{2,4}	xy
	{4}	{2,5}	xy
	{4,5}	{2}	xy ²
	{2}	{4,5}	xy
	{2,5}	{4}	xy ²
	{2,4}	{5}	xy ²
	{2,4,5}	\emptyset	x ³ y ³

Tabelle 5.6: Verarbeitung des mittleren Teilbaumes: Fortsetzung

Operation	Positiv	Negativ	Ising-Polynom
-{2}	\emptyset	{4, 5}	$x^3 + xy$
	{5}	{4}	$xy + xy^2$
	{4}	{5}	$xy + xy^2$
	{4, 5}	\emptyset	$xy^2 + x^3y^3$

4. Zusammenfassen der Ising-Polynome der Unterbäume T_1 und T_2

Mit der Zusammenfassung wird das Ising-Polynom $Z(G_1 \cup G_2; x, y)$ in Abhängigkeit von den Knoten 4 und 5 berechnet.

Die Zusammenfassung erfolgt anhand der Rekurrenzbeziehung über Teilzustände. Dafür werden die Ising-Polynome der Teilzustände benötigt. Der Untergraph $G[\{4, 5\}]$ ist isomorph zu einem Weg P_2 . Dessen Ising-Polynome sind in Lemma 5.36 (als Startwerte) angegeben.

$$\begin{aligned} Z(G_1 \cup G_2; \emptyset; \{4, 5\}; x, y) &= \frac{Z(G_1; \emptyset; \{4, 5\}; x, y) Z(G_2; \emptyset; \{4, 5\}; x, y)}{Z(G[\{4, 5\}]; \emptyset; \{4, 5\}; x, y)} \\ &= \frac{(x^2 + xy)(x^3 + xy)}{x} = x^4 + x^2y + x^3y + xy^2 \end{aligned} \quad (5.103)$$

$$\begin{aligned} Z(G_1 \cup G_2; \{5\}, \{4\}; x, y) &= \frac{Z(G_1; \{5\}, \{4\}; x, y) Z(G_2; \{5\}, \{4\}; x, y)}{Z(G[\{4, 5\}]; \{5\}, \{4\}; x, y)} \\ &= \frac{(xy + y^2)(xy + xy^2)}{y} = x^2y + x^2y^2 + xy^2 + xy^3 \end{aligned} \quad (5.104)$$

$$\begin{aligned} Z(G_1 \cup G_2; \{4\}, \{5\}; x, y) &= \frac{Z(G_1; \{4\}, \{5\}; x, y) Z(G_2; \{4\}, \{5\}; x, y)}{Z(G[\{4, 5\}]; \{4\}, \{5\}; x, y)} \\ &= \frac{(y + xy^2)(xy + xy^2)}{y} = xy + xy^2 + x^2y^2 + x^2y^3 \end{aligned} \quad (5.105)$$

$$\begin{aligned} Z(G_1 \cup G_2; \{4, 5\}, \emptyset; x, y) &= \frac{Z(G_1; \{4, 5\}, \emptyset; x, y) Z(G_2; \{4, 5\}, \emptyset; x, y)}{Z(G[\{4, 5\}]; \{4, 5\}, \emptyset; x, y)} \\ &= \frac{(xy^2 + x^2y^3)(xy^2 + x^3y^3)}{xy^2} = xy^2 + x^2y^3 + x^3y^3 + x^4y^4 \end{aligned} \quad (5.106)$$

5. Verarbeitung von T_3

Die Verarbeitung entspricht der Berechnung von $Z(G_3; x, y)$ in Abhängigkeit von den Knoten 4 und 5.

Die Untergraphen G_1 und G_3 sind isomorph zueinander und sind in gleicher Weise in der

Baumzerlegung enthalten. Somit gilt für Knotenmengen $B, C \subseteq \{4, 5\}$ mit $B \cap C = \emptyset$:

$$Z(G_3; B, C; x, y) = Z(G_1; B, C; x, y) \quad (5.107)$$

6. Zusammenfassen der Ising-Polynome der Unterbäume $T_1 \cup T_2$ und T_3

Die Zusammenfassung entspricht der Berechnung des Ising-Polynoms $Z(G; x, y)$ in Abhängigkeit von den Knoten 4 und 5.

Es wird wieder die Rekurrenzbeziehung über Teilzustände verwendet, um zunächst die Ising-Polynome von G in Abhängigkeit von den Knoten 4 und 5 zu berechnen:

$$\begin{aligned} Z(G; \emptyset; \{4, 5\}; x, y) &= \frac{Z(G_1 \cup G_2; \emptyset; \{4, 5\}; x, y) Z(G_3; \emptyset; \{4, 5\}; x, y)}{Z(G[\{4, 5\}]; \emptyset; \{4, 5\}; x, y)} \\ &= x^5 + x^3 y + 2x^4 y + 2x^2 y^2 + x^3 y^2 + x y^3 \end{aligned} \quad (5.108)$$

$$\begin{aligned} Z(G; \{5\}, \{4\}; x, y) &= \frac{Z(G_1 \cup G_2; \{5\}, \{4\}; x, y) Z(G_3; \{5\}, \{4\}; x, y)}{Z(G[\{4, 5\}]; \{5\}, \{4\}; x, y)} \\ &= x^3 y + 2x^2 y^2 + x^3 y^2 + x y^3 + 2x^2 y^3 + x y^4 \end{aligned} \quad (5.109)$$

$$\begin{aligned} Z(G; \{4\}, \{5\}; x, y) &= \frac{Z(G_1 \cup G_2; \{4\}, \{5\}; x, y) Z(G_3; \{4\}, \{5\}; x, y)}{Z(G[\{4, 5\}]; \{4\}, \{5\}; x, y)} \\ &= x y + x y^2 + 2x^2 y^2 + 2x^2 y^3 + x^3 y^3 + x^3 y^4 \end{aligned} \quad (5.110)$$

$$\begin{aligned} Z(G; \{4, 5\}, \emptyset; x, y) &= \frac{Z(G_1 \cup G_2; \{4, 5\}, \emptyset; x, y) Z(G_3; \{4, 5\}, \emptyset; x, y)}{Z(G[\{4, 5\}]; \{4, 5\}, \emptyset; x, y)} \\ &= x y^2 + 2x^2 y^3 + x^3 y^3 + x^3 y^4 + 2x^4 y^4 + x^5 y^5 \end{aligned} \quad (5.111)$$

Da nun alle Unterbäume verarbeitet sind, werden die Ising-Polynome, entsprechend der Rekurrenzbeziehung über Teilzustände, addiert, um das Ising-Polynom von G zu erhalten:

$$\begin{aligned} Z(G; x, y) &= Z(G; \emptyset; \{4, 5\}; x, y) + Z(G; \{5\}, \{4\}; x, y) \\ &\quad + Z(G; \{4\}, \{5\}; x, y) + Z(G; \{4, 5\}, \emptyset; x, y) \\ &= x^5 + x y + 2x^3 y + 2x^4 y + 2x y^2 + 6x^2 y^2 + 2x^3 y^2 \\ &\quad + 2x y^3 + 6x^2 y^3 + 2x^3 y^3 + x y^4 + 2x^3 y^4 + 2x^4 y^4 + x^5 y^5 \end{aligned} \quad (5.112)$$

5.4.8 Graphen mit beschränkter Wegweite

Definition 5.62 ([14]) Eine *Wegzerlegung* eines Graphen G ist eine Baumzerlegung von G , sodass diese eine Weg ist.

Definition 5.63 ([14]) Sei $G = (V, E)$ ein Graph. Eine *Wegzerlegung* von G ist eine Folge (X_1, \dots, X_k) von Teilmengen von V , so dass

- $\bigcup_{i=1}^k X_i = V,$
- $\forall \{u, v\} \in E : \exists X_i : \{u, v\} \subseteq X_i,$
- $i < j < k \Rightarrow X_i \cap X_k \subseteq X_j.$

Definition 5.64 ([14]) Die *Wegweite*¹¹ $pw(G)$ eines Graphen G ist die minimale Weite aller Wegzerlegungen von G .

Definition 5.65 (Vgl. [14]) Sei $G = (V, E)$ ein Graph und (X_1, \dots, X_k) eine Wegzerlegung von G . Die Wegzerlegung wird (in dieser Arbeit) *fein* genannt, falls gilt:

- $X_1 = X_k = \emptyset,$
- $|X_i \setminus X_{i+1}| + |X_{i+1} \setminus X_i| = 1$ für $i = 1, \dots, k-1.$

Eine Wegzerlegung enthält, betrachtet als Baumzerlegung, keinen Verzweigungsknoten. Der Rechenaufwand beträgt entsprechend $O(n^4 2^{2k+1})$. Der Speicheraufwand ist dann hier $O(n^3 2^{k+1})$.

Folgerung 5.66 Sei $G = (V, E)$ mit $|V| = n$ ein Graph und (X_1, \dots, X_l) eine gegebene feine Wegzerlegung von G mit Weite k . Dann ist das Ising-Polynom von G in $O(n^4 2^{2k+1})$ berechenbar.

5.4.9 Cographen

Definition 5.67 ([14]) Ein Cograph ist rekursiv definiert durch:

- Ein einzelner Knoten ist ein Cograph.
- Falls G und H Cographen sind, dann ist deren
 - disjunkte Vereinigung ein Cograph,
 - Verbindung ein Cograph.

Für die Berechnung des Ising-Polynoms eines Cographen kann der K_1 mit $Z(K_1; x, y) = y + 1$ als Ausgangssituation gewählt werden. Wenn die Ising-Polynome der verwendeten Graphen bekannt sind, ist das Ising-Polynom der disjunkten Vereinigung der Graphen in polynomieller Zeit (vgl. Fol. 5.5) berechenbar. Gleiches gilt für eine Verbindung der Graphen (s. Fol. 5.8). Wenn ein entsprechender rekursiver Aufbau eines Cographen $G = (V, E)$ bekannt ist, dann ist sein Ising-Polynom in $O(|V|^7)$ berechenbar. Aufgrund der möglichen Operationen wird Speicherplatz für drei Polynome benötigt ($O(|V|^3)$). Zudem muss der rekursive Aufbau vorgehalten werden.

¹¹ Alternative Bezeichnung: Pfadweite

Folgerung 5.68 *Ist der rekursive Aufbau im obigen Sinne eines Cographen $G = (V, E)$ bekannt, dann ist sein Ising-Polynom in $O(|V|^7)$ berechenbar.*

6 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde die Herleitung des Ising-Polynoms, noch als Laurent-Polynom, vom Ising-Modell beschrieben. Ausgehend davon wurde einige weitere Darstellungen des (bivariaten) Ising-Polynoms, auch als Polynom, und eine Definition des trivariaten Ising-Polynoms vorgestellt.

Bei der Betrachtung von Spezialisierungen des Ising-Polynoms wurde festgestellt, dass damit beispielsweise die Summe der Koeffizienten des Polynoms oder das Schnitt-Polynom des zugehörigen Graphen ermittelt werden können. Anhand des Schnitt-, des Bipartitions-, des van der Waerden- und des trivariaten Ising-Polynoms konnte das (bivariate) Ising-Polynom in Beziehungen von Graphenpolynomen eingeordnet werden.

Weiter wurde von Grapheninvarianten berichtet, die direkt oder indirekt im Ising-Polynom enthalten sind. Das Ising-Polynom ist keine vollständige Grapheninvariante, genügt aber für die Unterscheidung von (nicht-isomorphen) Graphen mit weniger als sieben Knoten. Außerdem kann für physikalische Systeme das Ising-Polynom für die Berechnung der Zustandssumme verwendet werden.

Die allgemeinen Rekurrenzbeziehungen des Ising-Polynoms, bezogen auf Rekurrenzbeziehungen von Graphen, bildeten eine wichtige Grundlage für die Berechnung des Ising-Polynoms für spezielle Graphenklassen in polynomieller Zeit (in Bezug auf die Anzahl der Knoten). Bei den meisten Graphenklassen wurde dabei auf das Hinzufügen einer Kante oder Knoten Bezug genommen. So konnten beispielsweise Berechnungsmöglichkeiten für Wege und Kreise gezeigt werden. Mithilfe von Graphenoperationen wie einer disjunkten Vereinigung von Graphen oder einer Verbindung von Graphen können dann auch Ising-Polynome für Fächer, Räder oder Cographen berechnet werden. Eine Rekurrenzbeziehung über Teilzustände ermöglicht (zusammen mit anderen Rekurrenzbeziehungen) die Berechnung der Ising-Polynome von Bäumen und auch Graphen mit beschränkter Baum- bzw. Wegweite. Bei letzteren ist der Rechenaufwand, bezogen auf die Anzahl der Knoten, polynomiell, jedoch exponentiell in Bezug auf die Baum- bzw. Wegweite. Unter Verwendung kombinatorischer Argumente können auch Ising-Polynome von kantenlosen, vollständigen, vollständig bipartiten Graphen und von Sternen berechnet werden. Für die letzteren Graphenklassen ist das Ising-Polynom, mit Ausnahme der vollständig bipartiten Graphen, sogar mit linearem Zeitaufwand berechenbar.

Für weitere Untersuchungen oder Forschungen gibt es mehrere Ansatzmöglichkeiten. Bei der großen Anzahl könnte untersucht werden, ob das Ising-Polynom noch zu weiteren Graphenpolynomen in Beziehung steht und ob oder welche weitere Grapheninvarianten im Ising-Polynom enthalten sind. Dies könnte auch für das trivariate Ising-

Polynom durchgeführt werden.

Bei den Berechnungen könnte man für weitere spezielle Graphenklassen untersuchen, ob oder wie sie sich mit polynomiellen Zeitaufwand berechnen lassen. Die Ergebnisse lassen vermuten, dass die Graphen Strukturen aufweisen müssen, die mithilfe kombinatorischer Argumentation oder aufgrund spezieller Rekurrenzen eine entsprechend schnelle Berechnung ermöglichen. Vielleicht könnte das trivariate Ising-Polynom bei der Suche nach weiteren Graphenklassen behilflich sein. Ein anderer möglicher Ansatz ist, Berechnungsmöglichkeiten des van der Waerden-Polynoms für (weitere) spezielle Graphenklassen zu untersuchen.

Auch - aber nicht nur - bei den Berechnungen könnte bei weiteren Betrachtungen zum Ising-Polynom ein Schwerpunkt auf den Bezug, Bedarf und Nutzen in der Physik gelegt werden.

Da zumindest viele Graphenpolynome auf negative Exponenten verzichten, würde ich dies auch beim Ising-Polynom bevorzugen. Bei Bedarf wäre eine Umrechnung in das entsprechende Laurent-Polynom in polynomieller Zeit möglich. Das trivariate Ising-Polynom könnte, auch weil es mehr Informationen enthält, weitere Untersuchungen wert sein. Da einige Rekurrenzbeziehungen ähnlich sind und der Rechenaufwand vermutlich häufig nicht viel größer ist, ist es vielleicht sogar sinnvoll, sich bei eventuellen weiteren Untersuchungen im Allgemeinen eher auf das trivariate als auf das bivariate Ising-Polynom zu konzentrieren.

Literaturverzeichnis

- [1] Aigner, Martin. A Course in Enumeration. Graduate Texts in Mathematics, Band 238. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007
- [2] Andr n, Daniel; Markstr m, Klas. The bivariate Ising polynomial of a graph. Discrete Applied Mathematics 157 (2009). 2515 - 2524
- [3] Arnborg, Stefan; Lagergren, Jens; Seese, Detlef. Easy problems for tree-decomposable graphs. Journal of Algorithms 12 (1991). 308 - 340
- [4] Betzler, Nadja; Niedermeier, Rolf; Uhlmann, Johannes. Tree decompositions of graphs: Saving memory in dynamic programming. Discrete Optimization 3 (2006). 220 - 229
- [5] Bodlaender, Hans L. Planar graphs with bounded treewidth. University of Utrecht. Report RUU-CS-88-14 (1988)
- [6] Bodlaender, H. L. Classes of graphs with bounded tree-width. Utrecht University. Report RUU-CS-86-22 (1986)
- [7] Bollob s, B la. Modern Graph Theory. Graduate Texts in Mathematics, Band 184. New York: Springer-Verlag New York, 1998
- [8] Dod, Markus; Kotek, Tomer; Preen, James; Tittmann, Peter. Bipartition Polynomials, the Ising Model, and Domination in Graphs. Arbeitspapier. Stand: 04.07.2013
- [9] Jahns, Katrin. Monte-Carlo-Simulationen an Fe₃₀-Schichtsystemen. Bachelorarbeit. Universit t Osnabr ck. URL: <<http://obelix.physik.uni-bielefeld.de/~schnack/examina/bachelor-jahns.pdf>>. Zitat vom: 17.12.2013
- [10] Kotek, Tomer. Complexity of Ising Polynomials. Combinatorics, Probability and Computing 21 (2012). 743 - 772
- [11] Mohar, Bojan. Isoperimetric numbers of graphs. Journal of Combinatorial Theory B 47 (1989). 274 - 291
- [12] Mutzel, Petra. Baumzerlegung von Graphen. Universit t Dortmund. URL: <http://ls11-www.cs.uni-dortmund.de/people/kandyba/graphenalgo/Baumzerlegung_6p.pdf>. Zitat vom: 12.12.2013

- [13] Tittmann, Peter. Einführung in die Kombinatorik. 1. Auflage. Heidelberg, Berlin: Spektrum Akademischer Verlag, 2000
- [14] Tittmann, Peter. Graphen und Algorithmen. Vorlesungsmitschriften zum Modul „Graphen und Algorithmen“. WS 2012/2013
- [15] Tittmann, Peter. Graphentheorie; Eine anwendungsorientierte Einführung. Mathematik-Studienhilfen. Leipzig: Fachbuchverlag Leipzig, 2003
- [16] Trinks, Martin. Graph Polynomials and Their Representations. Doktorarbeit. Mittweida, 2012
- [17] Wikipedia. Cheeger constant (graph theory). Wikipedia. URL: <https://en.wikipedia.org/wiki/Cheeger_constant_%28graph_theory%29>. Zitat vom: 16.01.2014
- [18] Wikipedia. Ernst Ising. Wikipedia. URL: <http://de.wikipedia.org/wiki/Ernst_Ising>. Zitat vom: 11.06.2013
- [19] Wikipedia. Heisenberg-Modell (Quantenmechanik). Wikipedia. URL: <<http://de.wikipedia.org/wiki/Heisenberg-Modell>>. Zitat vom: 03.07.2013
- [20] Wikipedia. Ising model. Wikipedia. URL: <http://en.wikipedia.org/wiki/Ising_model>. Zitat vom: 03.07.2013
- [21] Wikipedia. Ising-Modell. Wikipedia. URL: <<http://de.wikipedia.org/wiki/Ising-Modell>>. Zitat vom: 11.06.2013
- [22] Wikipedia. Magnetisches Moment. Wikipedia. URL: <http://de.wikipedia.org/wiki/Magnetisches_Moment>. Zitat vom: 11.06.2013
- [23] Wikipedia. Partition function (statistical mechanics). Wikipedia. URL: <http://en.wikipedia.org/wiki/Partition_function_%28statistical_mechanics%29>. Zitat vom: 17.12.2013
- [24] Wikipedia. Potts modell. Wikipedia. URL: <http://en.wikipedia.org/wiki/Potts_model>. Zitat vom: 17.12.2013
- [25] Wikipedia. Shar-P. Wikipedia. URL: <<http://de.wikipedia.org/wiki/Sharp-P>>. Zitat vom: 28.11.2013
- [26] Wikipedia. Treewidth. Wikipedia. URL: <<http://en.wikipedia.org/wiki/Treewidth>>. Zitat vom: 10.01.2014

-
- [27] Wikipedia. Wilhelm Lenz (Physiker). Wikipedia. URL: <http://de.wikipedia.org/wiki/Wilhelm_Lenz_%28Physiker%29>. Zitat vom: 09.07.2013
- [28] Wikipedia. Zustandssumme. Wikipedia. URL: <<http://de.wikipedia.org/wiki/Zustandssumme>>. Zitat vom: 17.12.2013

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich meine Arbeit selbstständig verfasst, keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt und die Arbeit noch nicht anderweitig für Prüfungszwecke vorgelegt habe.

Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus Quellen entnommen wurden, sind als solche kenntlich gemacht.

Mittweida, 27. Januar 2014