

Mathematische Modelle für reaktionskinetische Phänomene

K. HECKMANN, W. VOLLMERHAUS

II. Physiologisches Institut der Universität des Saarlandes, Homburg (Saar)

J. KUTSCHERA und E. VOLLMERHAUS

Max-Planck-Institut für Ernährungsphysiologie, Dortmund

(Z. Naturforsch. **24 a**, 664—673 [1969]; eingegangen am 15. Dezember 1968)

The theoretical treatment of a number of stationary kinetic phenomena requires the solution of a system of linear equations. An algorithm is described which enables an algebraic solution to be found by means of a digital computer using probably a minimum length of calculation time. This algorithm is derived mainly from arguments based on the theory of graphs; its essential feature is the use of numerical operations on the indices of the coefficients of the equations. The algorithm is illustrated in terms of a special model of the diffusion of particles through narrow pores of a membrane.

I. Algorithmus zum algebraischen Lösen linearer Gleichungssysteme auf einem Digitalrechner

Bei der theoretischen Behandlung von zahlreichen kinetisch-stationären Phänomenen, wie stationären Reaktionen oder Diffusionsprozessen, hat man häufig ein lineares Gleichungssystem zu lösen. Um die beobachteten Phänomene angemessen beschreiben zu können, ist man oft gezwungen, Gleichungssysteme mit einer großen Zahl von Unbekannten und mit vielen von Null verschiedenen Koeffizienten zu diskutieren. Man überzeugt sich leicht, daß solche Systeme, sobald die Anzahl der Unbekannten größer wird als 4 oder 5, nur sehr mühsam zu lösen sind. Für spezielle Parameterwerte erhält man durch Einsatz eines Digitalrechners zwar sehr schnell die Lösung, aber solche einzelnen numerischen Lösungen sind für die Diskussion der qualitativen Eigenschaften der Lösung wenig geeignet. Dazu hat man vielmehr zu untersuchen, wie die Lösung sich bei Variation der Parameter ändert. Zu diesem Zweck benötigt man eine Darstellung der Lösung als Funktion der Parameter. Eine solche Darstellung liefert die Cramersche Regel, die die Lösung in der Form von Quotienten zweier Determinanten angibt. Diese Darstellung ist jedoch für die Diskussion qualitativer Eigenschaften kaum brauchbar.

Durch Entwickeln der Zähler- und Nennerdeterminanten erhält man Summen von Produkten der Koeffizienten des Gleichungssystems. Liegt dieses,

wie in vielen praktischen Fällen, in der Form (1) vor, so enthalten diese Summen viele Paare von Summanden, die sich wechselseitig zu Null ergänzen. Daher ist es für größere Gleichungssysteme mühsam, zunächst alle Summanden aufzuzählen und anschließend diejenigen zu bestimmen, die sich wegheben¹.

Eine direkte Beschreibung der übrigbleibenden Summanden erhält man mit einer graphentheoretischen Methode, die auf KIRCHHOFF² zurückgeht und später von BOTT und MAYBERRY³, KING und ALTMAN⁴ sowie HILL⁵ noch einmal unabhängig entwickelt wurde. Hierbei interpretiert man die übrigbleibenden Summanden als die Gewichte von maximal gerichteten Bäumen in dem Graphen, der dem Gleichungssystem zugeordnet ist. Diese Darstellung ist in manchen Fällen unmittelbar für die qualitative Diskussion brauchbar, ohne daß man die erwähnten Bäume aufzählen muß⁶. Für andere Fragestellungen, wie z. B. die Diskussion der Lösung bei Vorgabe von Relationen zwischen den Parametern oder für die Erzeugung von Lösungsscharen, die zu vorgegebenen Sätzen von Parametern gehören, ist es zweckmäßig, alle diese Bäume aufzustellen. Dies ist allerdings bei größeren Gleichungssystemen sehr mühsam, so daß sich zu diesem Zweck der Einsatz eines Digitalrechners empfiehlt. Voraussetzung hierfür ist jedoch, daß man einen effektiven Algorithmus benutzt, da anderenfalls für größere Gleichungssysteme unrealistische Rechenzeiten erforderlich wer-

¹ A. J. SILVESTRI u. J. C. ZAHNER, Chem. Eng. Sci. **22**, 465 [1967].

² G. KIRCHHOFF, Poggendorffs Ann. Physik und Chemie **LXXII**, Nr. 12, 495 [1847].

³ R. BOTT u. J. P. MAYBERRY, Matrices and Trees, Economic Activity Analysis, J. Wiley & Sons, New York 1954, p. 391.

⁴ E. L. KING u. C. ALTMAN, J. Phys. Chem. **60**, 1375 [1956].

⁵ T. L. HILL, J. Theor. Biol. **10**, 442 [1966].

⁶ K. HECKMANN, W. VOLLMERHAUS, J. KUTSCHERA u. E. VOLLMERHAUS, Z. Phys. Chem. Frankfurt, in Vorbereitung.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

den⁷⁻⁹. Ein derartiger Algorithmus wird im folgenden beschrieben.

Im zweiten Teil dieser Arbeit wird der Algorithmus an Hand eines Beispiels aus der Diffusionskinetik noch einmal anschaulich demonstriert. Aus dem Algorithmus wurde ein FORTRAN-Programm entwickelt, welches das lineare Gleichungssystem (1) löst¹⁰. Dieses FORTRAN-Programm kann – auf kinetische Phänomene angewendet – Wahrscheinlichkeiten von diskreten Zuständen stationärer Systeme berechnen (Konzentrationen der Partner einer chemischen Reaktion, relative Konformationsanteile von Molekülen, Wahrscheinlichkeiten der Besetzungszustände von Transportsystemen etc.). Aus den stationären Wahrscheinlichkeiten erhält man durch Multiplikation mit Geschwindigkeitskonstanten sofort auch einfache Flußgleichungen (z. B. zur Beschreibung chemischer Reaktionsgeschwindigkeiten).

In einer weiteren Arbeit¹¹, die einen ökonomischen Algorithmus für die algebraische Berechnung von komplizierteren stationären Flüssen, wie Diffusion durch Membranen, beschreibt, wird der hier diskutierte Algorithmus häufig als „Unterprogramm“ zitiert.

Definitionen

X sei eine Menge und I eine Zuordnung, die jedem Element von X mindestens ein Element von X zuordnet.

Def. 1:

Das Paar $G = (X, I)$ heißt Graph.

Die Elemente von X heißen die Punkte von G . Ein geordnetes Punktpaar $(x, x') = s$ heißt von x nach x' gerichtete Kante von G , wenn $x' \in I(x)$. x heißt dabei Anfangspunkt, x' Endpunkt von (x, x') ; dabei ist $x = x'$ zugelassen. Ist x ein Punkt von G , so ist also $I(x)$ die Menge aller Punkte von G , die Endpunkte einer von x ausgehenden gerichteten Kante von G sind.

$G = (X, I)$ heißt endlicher Graph, wenn X aus endlich vielen Elementen besteht.

G heißt symmetrischer Graph, wenn mit jeder gerichteten Kante (x, x') , die zu G gehört, auch die entgegengesetzt gerichtete Kante (x', x) zu G gehört.

Man erkennt, daß ein Graph G durch alle gerichteten Kanten eindeutig beschrieben ist.

Def. 2:

Ein Graph $T = (Y, \Delta)$ heißt Teilgraph von $G = (X, I)$, wenn Y Teilmenge von X ist und wenn für jedes y aus Y die Menge $\Delta(y)$ Teilmenge von $I(y)$ ist.

Def. 3:

Ein geordnetes r -tupel (r : natürliche Zahl) $(s_1, s_2, \dots, s_r) = k$ von gerichteten Kanten eines Graphen G heißt Kette in G , wenn es ein $(r+1)$ -tupel (x_0, x_1, \dots, x_r) von Punkten von G gibt mit der Eigenschaft, daß für $q = 1, 2, \dots, r$ x_{q-1} und x_q Randpunkte (d. h. Anfangs- oder Endpunkte) von s_q sind. Zwei Ketten seien einander gleich, wenn sie durch Ersetzen gewisser Kanten durch die entgegengesetzt gerichteten Kanten ineinander übergeführt werden können. Wir nennen x_0 und x_r Randpunkte von k und sagen auch: x_0 und x_r sind durch k miteinander verbunden. Ist $x_0 = x_r$, so heißt k ein Zyklus.

Def. 4:

Ein geordnetes r -tupel (r : natürliche Zahl) $(s_1, s_2, \dots, s_r) = w$ von gerichteten Kanten von G heißt Weg in G , wenn für jedes q mit $1 \leq q \leq r-1$ der Endpunkt von s_q Anfangspunkt von s_{q+1} ist.

Anfangspunkt von s_1 bzw. Endpunkt von s_r nennen wir Anfangs- bzw. Endpunkt von w , oder auch einfach Randpunkt von w . Ist der Anfangspunkt von w zugleich Endpunkt von w , so heißt w gerichteter Zyklus.

Ein Weg ist also nichts anderes als eine fortlaufend gerichtete Kette.

Def. 5:

Ein Graph G heißt ein Baum, wenn es zu je zwei Punkten x und x' von G genau eine Kette in G gibt, die x mit x' verbindet.

Wir nennen einen Teilgraphen T eines Graphen G einen maximalen Baum von G , wenn T ein Baum ist und alle Punkte von G enthält. Wir nennen einen Baum T von G zum Punkt x von G gerichtet, wenn es zu jedem von x verschiedenen Punkt von T aus einen Weg mit dem Endpunkt x gibt.

⁷ R. O. HURST, FEBS, 5th Meeting, Prag 1968.

⁸ K. HECKMANN u. J. KUTSCHERA, Pflügers Arch. ges. Physiol. **297**, S.R. 26 [1967].

⁹ D. R. RHOADS u. M. PRING, J. Theor. Biol. **20**, 297 [1968].

¹⁰ J. KUTSCHERA, E. VOLLMERHAUS, K. HECKMANN u. W. VOLLMERHAUS, Studia Biophysica, Symposium über Biophysik zellulärer Systeme, 10.–12. Okt. 1968 in Jena.

¹¹ K. HECKMANN, J. KUTSCHERA u. W. VOLLMERHAUS, Z. Naturforsch., in Vorbereitung.

Wir bezeichnen einen zum Punkt x von G gerichteten maximalen Baum von G mit $T(\rightarrow x)$.

G sei ein Graph und g eine Abbildung, die jeder gerichteten Kante s von G eine reelle Zahl $g(s)$ zuordnet.

Def. 6:

Das Paar (G, g) heißt gewichteter Graph.

(G, g) sei ein gewichteter endlicher Graph mit $S = \{s_1, s_2, \dots, s_r\}$ als Menge der gerichteten Kanten.

Def. 7:

Die Zahl $g((G, g)) = \prod_{e=1}^r g(s_e)$ heißt das Gewicht von (G, g) .

$A = (a_{ik})$ (wobei i der Spaltenindex und k der Zeilenindex ist) sei eine n -reihige quadratische Matrix reeller Zahlen, $(G, g) = (X, T, g)$ sei ein gewichteter Graph mit genau m Punkten.

Def. 8:

A und (G, g) heißen zueinander assoziiert, wenn

1. $m = n$ ist,
2. für jedes Zahlenpaar (i, k) $a_{ik} = g((x_i, x_k))$, falls $x_k \in T(x_i)$, und $a_{ik} = 0$, falls $x_k \notin T(x_i)$ ist.

Offenbar gibt es zu jedem endlichen gewichteten Graphen (G, g) , dessen Punktmenge irgendwie mit den Zahlen $1, 2, \dots, n$ durchnummeriert ist, genau eine assoziierte Matrix $A((G, g))$. Weiter sieht man, daß sich umgekehrt zwei gewichtete Graphen (G_1, g_1) und (G_2, g_2) , die derselben Matrix assoziiert sind, höchstens durch Kanten mit Gewicht Null unterscheiden.

Beschreibung des Algorithmus

$D(A)$ sei die zu $A = (a_{ik})$ ($i, k = 1, 2, \dots, n$) gehörige Diagonalmatrix, d. h. $d_{ii} = \sum_{v=1}^n a_{iv}$ für $i = 1, 2, \dots, n$, $d_{ik} = 0$ für $i \neq k$. Dann ist die Summe aller Zeilen der Matrix $(A - D(A))$ die Nullzeile, also $\text{Rg}(A - D(A)) < n$. Wir setzen voraus, daß $\text{Rg}(A - D(A)) = n - 1$ ist. Das homogene lineare Gleichungssystem

$$(A - D(A))Z = 0 \quad (1a)$$

besitzt eine nichttriviale Lösung.

KIRCHHOFF², KING und ALTMAN⁴ und HILL⁵ haben gezeigt, daß

$$Z_i' = \sum_{T(\rightarrow x_i)} g(T(\rightarrow x_i)); \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2)$$

eine solche Lösung ist. In Gl. (2) wird in einem zur Matrix A assoziierten Graphen G über alle maximalen nach x_i gerichteten und durch die Gewichtsfunktion g von G gewichteten Bäume summiert. Dieses Ergebnis ist übrigens eine unmittelbare Folgerung aus einem Resultat von BOTT und MAYBERRY³.

Ist $\sum_{i=1}^n Z_i' \neq 0$, so ist

$$Z_i = N Z_i' / \sum_{i=1}^n Z_i' \quad (3)$$

die Lösung des Gleichungssystems (1a) mit der zusätzlichen Normierungsbedingung

$$\sum_{i=1}^n Z_i = N. \quad (1b)$$

In kinetischen Systemen haben die Gewichte der Kanten von G die Bedeutung von Geschwindigkeitskonstanten, sind also nicht negativ. Daher ist die Summe der Z_i' größer als Null, so daß die Voraussetzungen für die Lösbarkeit erfüllt sind.

Im folgenden wird ein Algorithmus, der alle $T(\rightarrow x_i)$ liefert und sich in der Praxis bewährt hat, am Beispiel der Erzeugung aller $T(\rightarrow x_1)$ beschrieben. Ist ein lösbares Gleichungssystem der Form (1) gegeben, so muß zunächst ein zur Matrix A assoziierter gewichteter Graph (G, g) angegeben werden. x_1, x_2, \dots, x_n seien die n Punkte von G . Für $1 \leq i, k \leq n$ sei (x_i, x_k) genau dann eine Kante von G , wenn a_{ik} von Null verschieden ist. Die Gewichtsfunktion definieren wir durch $g((x_i, x_k)) = a_{ik}$. Sodann sei daran erinnert, daß nach elementaren graphentheoretischen Sätzen jeder maximale Baum in G genau $n - 1$ Kanten hat. Wegen Definition 5 enthält jedes $T(\rightarrow x_1)$ zu jedem Punkt x_v ($2 \leq v \leq n$) von G genau eine Kante mit dem Anfangspunkt x_v . Schreiben wir im folgenden für die Kante (x_i, x_k) zur Abkürzung einfach (i, k) bzw. $(i, e(i))$, so ist jedes $T(\rightarrow x_1)$ durch ein $(n - 1)$ -tupel von Kanten folgender Art definiert:

$$T = \{(2, e(2)), (3, e(3)), \dots, (n, e(n))\}, \quad (4)$$

wobei für $2 \leq v \leq n$ $e(v)$ die Nummer des Endpunktes einer Kante mit dem Anfangspunkt v ist.

Wir bezeichnen mit $M(1)$ die Menge aller Teilgraphen T von G , die sich auf diese Weise beschreiben lassen. Wie wir eben gesehen haben, ist jedes $T(\rightarrow x_1)$ Element von $M(1)$. Andererseits braucht nicht jedes T ein Baum zu sein, da eine Kombination von $(n - 1)$ Kanten von G , wie (4) sie darstellt, verschiedene Ketten enthalten kann, die die

selben Punkte miteinander verbinden. Wir werden dafür im zweiten Teil dieser Arbeit Beispiele angeben. Um $M(1)$ im Rechner rationell aufzuzählen und die $T(\rightarrow x_1)$ aus $M(1)$ auszusortieren, benutzen wir ein gekoppeltes Aufzähl- und Testverfahren der Elemente T von $M(1)$ mit folgenden Eigenschaften:

1. Auf ein T aus $M(1)$, das kein Baum ist, folgen bei dem Aufzählverfahren im allgemeinen mehrere Graphen T , die ebenfalls keine Bäume sind und für deren Anzahl man unmittelbar eine untere Schranke erhält.

2. Für den Test eines T läßt sich im allgemeinen ein großer Teil des Ergebnisses des Tests für das vorangegangene Element T benutzen.

Wir brauchen also dann die meisten derjenigen Elemente von $M(1)$, die keine Bäume sind, gar nicht erst zu erzeugen und zu testen.

Zum Aufzählen von $M(1)$ werden die Kanten von G so in n Spalten angeordnet, daß für $1 \leq \nu \leq n$ in der ν -ten Spalte alle Kanten von G mit dem Anfangspunkt x_ν stehen, und zwar nach der Größe der Nummern ihrer Endpunkte geordnet. Ist also etwa r_ν die Anzahl der Kanten mit dem Anfangspunkt x_ν und gilt für die Endpunkte $e(\nu, q_\nu)$, $1 \leq q_\nu \leq r_\nu$, die Beziehung $e(\nu, 1) < e(\nu, 2) < \dots < e(\nu, r_\nu)$, dann sieht die ν -te Spalte wie folgt aus:

$$\begin{pmatrix} \nu, e(\nu, 1) \\ \nu, e(\nu, 2) \\ \vdots \\ \nu, e(\nu, r_\nu) \end{pmatrix}.$$

$M(1)$ besteht dann aus allen Kombinationen von $n-1$ Kanten von G , die aus jeder Spalte mit Ausnahme der ersten genau ein Element enthalten. Wir erzeugen diese Kombinationen in lexikographischer Reihenfolge und testen bereits während der Erzeugung eines Elementes

$$T = \{(2, e(2, q_2)), \dots, (n, e(n, q_n))\}$$

aus $M(1)$, ob T ein Baum ist oder nicht. Für diesen Test ordnen wir T eine n -reihige, $(n-1)$ -spaltige Matrix $C(T)$ zu, deren Elemente nicht negative ganze Zahlen sind. Die Zeilen dieser Matrix sind den Punkten von G ihrer Numerierung entsprechend zugeordnet. Für $1 \leq \nu \leq n-1$ soll die ν -te Spalte von $C(T)$ angeben, welche Punkte von T durch die ersten ν Kanten miteinander verbindbar sind, und zwar soll genau dann in den beiden Zeilen, die zwei Punkten von T entsprechen, dieselbe natürliche Zahl stehen,

wenn es unter den ersten ν Kanten von T eine Kette gibt, die diese Punkte miteinander verbindet.

Die Elemente $c_{i, \nu}(T)$ der Matrix $C(T)$ sind Kennzahlen, die wir den Punkten x_i ($1 \leq i \leq n$) von G bezüglich der ersten ν Kanten nach Def. 9 zuordnen:

Def. 9:

Für $\nu=1$ ordnen wir den Randpunkten x_2 und $x_{e(2, q_2)}$ der ersten Kante die kleinere der Zahlen 2 und $e(2, q_2)$ als gemeinsame Kennzahl zu, alle anderen Punkte erhalten die Kennzahl Null.

Für $\nu \geq 2$ unterscheiden wir 3 Fälle:

1. Für $\nu-1$ haben beide Randpunkte $x_{\nu+1}$ und $x_{e(\nu+1, q_{\nu+1})}$ der ν -ten Kante von T die Kennzahl Null, d. h. keiner dieser Punkte ist durch die ersten $\nu-1$ Kanten von T mit einem Punkt von G verbindbar. Wir ordnen dann in der ν -ten Spalte von $C(T)$ beiden Punkten die kleinere ihrer Nummern $\nu+1$ und $e(\nu+1, q_{\nu+1})$ als Kennzahl zu, alle anderen Punkte behalten ihre Kennzahl aus der $(\nu-1)$ -ten Spalte.

2. Genau einer der Randpunkte der ν -ten Kante von T hat in der $(\nu-1)$ -ten Spalte von $C(T)$ eine positive Kennzahl, d. h. dieser Randpunkt ist durch die ersten $\nu-1$ Kanten schon mit gewissen Punkten von G verbindbar, der andere Randpunkt noch nicht. Dann ordnen wir in der ν -ten Spalte von $C(T)$ die positive Kennzahl des einen Randpunktes auch dem anderen zu, während die übrigen Kennzahlen dieselben bleiben wie in der $(\nu-1)$ -ten Spalte.

3. Beide Punkte $x_{\nu+1}$ und $x_{e(\nu+1, q_{\nu+1})}$ haben für $(\nu-1)$ schon positive Kennzahlen, d. h. jeder der Randpunkte der ν -ten Kante ist durch die ersten $(\nu-1)$ Kanten von T schon mit gewissen Punkten aus G verbindbar. Dann ordnen wir in der ν -ten Spalte jedem Punkt, dessen Kennzahl in der $(\nu-1)$ -ten Spalte mit einer der Kennzahlen $c_{\nu+1, \nu-1}(T)$ und $c_{e(\nu+1, q_{\nu+1}), \nu-1}(T)$ dieser Randpunkte übereinstimmt, das Minimum dieser beiden Zahlen als Kennzahl zu, die übrigen Punkte behalten dieselben Kennzahlen wie in der $(\nu-1)$ -ten Spalte.

Damit ist die Matrix $C(T)$ definiert, und man beweist leicht den

Satz 1: Für $1 \leq \nu \leq n-1$ und $1 \leq i, k \leq n$ steht in der i -ten und k -ten Zeile der ν -ten Spalte von $C(T)$ genau dann dieselbe natürliche Zahl, wenn die Punkte x_i und x_k durch eine Kette aus den ersten ν Kanten von T miteinander verbindbar sind.

Da die Spalten von $C(T)$ den Kanten von T der Reihe nach zugeordnet sind, stimmen die Testmatrizen $C(T_\mu)$ und $C(T_{\mu'})$ zweier Kantenkombinationen T_μ und $T_{\mu'}$ aus $M(1)$, die die ersten ν Kanten ($2 \leq \nu \leq n-1$) gemeinsam haben, mindestens in den ersten ν Spalten überein. Nach dem Aufzählalgorithmus der Elemente von $M(1)$ stehen die Kantenkombinationen, die in den ersten ν Kanten übereinstimmen, alle hintereinander, so daß man zur Konstruktion der zugehörigen Testmatrizen $C(T_\mu)$ jeweils nur die letzten $n-\nu-1$ Spalten neu zu bestimmen braucht, nachdem man die erste der Matrizen $C(T_\mu)$ konstruiert hat.

Wenn wir für $2 \leq \nu \leq n-1$ die ν -te Spalte von $C(T)$ aus der $(\nu-1)$ -ten Spalte bilden, können genau zwei Fälle auftreten:

A) Die ν -te Spalte ist von der $(\nu-1)$ -ten verschieden.

B) Die ν -te Spalte ist gleich der $(\nu-1)$ -ten.

Der Fall B) tritt genau dann ein, wenn im Fall 3 der Definition von $C(T)$ die beiden Kennzahlen der Randpunkte der ν -ten Kante in der $(\nu-1)$ -ten Spalte gleich sind. Das bedeutet nach Satz 1, daß diese Punkte schon durch die ersten $(\nu-1)$ Kanten verbindbar sind; sie werden durch die ν -te Kante auf anderem Weg noch einmal verbunden, also ist T kein Baum. Man erkennt, daß auch umgekehrt, wenn T kein Baum ist, bei der Aufstellung von $C(T)$ mindestens einmal Fall B) eintritt. Demnach gilt:

Satz 2: T ist genau dann ein Baum, wenn in $C(T)$ je zwei aufeinander folgende Spalten verschieden sind.

Dieser Satz liefert uns das Kriterium, nach dem wir im Computer entscheiden, ob T ein Baum ist oder nicht. Wenn wir ein T_μ erzeugen, bilden wir für $2 \leq \nu \leq n-1$ bei Hinzunahme einer ν -ten Kante $(\nu+1, e(\nu+1, q_{\nu+1}))$ zu einer Kombination von $\nu-1$ Kanten sofort die ν -te Spalte von $C(T_\mu)$ und vergleichen dort die Zahlen in der $(\nu+1)$ -ten und $e(\nu+1, q_{\nu+1})$ -ten Zeile mit den Zahlen in den gleichen Zeilen der $(\nu-1)$ -ten Spalte. Stimmen die Zahlen in beiden Spalten überein, so ersetzen wir so gleich die Kante $(\nu+1, e(\nu+1, q_{\nu+1}))$ durch die Kante $(\nu+1, e(\nu+1, q_{\nu+1}+1))$. Denn ist ν die kleinste Zahl, für die in $C(T_\mu)$ die $(\nu-1)$ -te und ν -te Spalte einander gleich sind, dann ist $2 \leq \nu \leq n-1$, und T_μ ist sicher kein Baum. Ist $\nu \neq n-1$, so

sind alle durch Änderung der auf die ν -te Kante folgenden Kanten von T_μ entstehenden Elemente von $M(1)$, die ja nach dem Aufzählverfahren auf T_μ folgen, sicher auch keine Bäume, weil ihre Testmatrizen ja in den ersten ν Spalten mit $C(T)$ übereinstimmen. Wir brauchen diese Elemente von $M(1)$ also gar nicht erst zu erzeugen und zu testen.

Um die $T(\rightarrow x_i)$ für $i \neq 1$ zu gewinnen, erzeugt man das dazugehörige $M(i)$, indem man Kombinationen der Kanten aus allen Spalten mit Ausnahme der i -ten Spalte aufzählt und testet.

Ist in der Matrix A $a_{ik} = 0$ genau dann, wenn $a_{ki} = 0$, so ist der Graph G , den wir zufolge S. 666 zu A assoziieren, symmetrisch. Dann erhält man aus einem $T(\rightarrow x_1)$ für jedes i , $i \neq 1$, ein $T(\rightarrow x_i)$ nach folgender Überlegung:

Nach Definition 5 gibt es in $T(\rightarrow x_1)$ genau einen Weg w_{i1} von x_i nach x_1 . Diesen Weg findet man, indem man die Kanten $(i, e(i))$, $(e(i), e(e(i)))$ usw. bis zur Kante mit Endpunkt x_1 in dieser Reihenfolge aneinanderhängt (Definition 4). Da G symmetrisch ist, enthält G mit jeder Kante auch die entgegengesetzt gerichtete Kante; ersetzt man nun jede Kante in w_{i1} durch die entgegengesetzt gerichtete, so geht w_{i1} über in einen Weg w_{1i} ; ersetzt man schließlich in $T(\rightarrow x_1)$ w_{i1} durch w_{1i} , so geht $T(\rightarrow x_1)$ über in $T(\rightarrow x_i)$. Man erhält auf diese Weise für jedes i , $i \neq 1$, jedes $T(\rightarrow x_i)$ genau einmal aus einem der $T(\rightarrow x_1)$ und braucht infolgedessen nur Elemente aus $M(1)$ unmittelbar zu erzeugen und zu testen. Dieses Verfahren läßt sich im Prinzip immer anwenden; denn durch Einführen von Kanten mit Gewicht Null kann man einer beliebigen Matrix A einen symmetrischen Graphen assoziieren. Sicher gibt es – wenn die Matrix A relativ wenige Elemente $a_{ik} \neq 0$ mit $a_{ki} = 0$ enthält – Fälle, in denen dieses Verfahren schneller zum Ziel führt, als wenn wir für jedes i $\{T(\rightarrow x_i)\}$ aus $M(i)$ aussortieren.

Mit der Aufzählung aller $T(\rightarrow x_i)$ aus $M(i)$ oder Umorientieren der $T(\rightarrow x_1)$ zu $T(\rightarrow x_i)$ ($i = 2, 3, \dots, n$), anschließender Wichtung der $T(\rightarrow x_i)$ nach Definition 7 und Aufsummieren der $g(T(\rightarrow x_i))$ ist nach Gl. (2) Z_i' bestimmt und das lineare Gleichungssystem $(A - D(A))Z = 0$ gelöst. Aus dem beschriebenen Algorithmus wurde ein FORTRAN-Programm entwickelt, das nach Eingabe der Matrix A die Lösungen Z_i' entsprechend Gl. (2) ausdrückt¹⁰.

II. Anschauliche Beschreibung des Algorithmus an Hand eines Modelles für die Diffusion durch enge Poren

Im ersten Teil dieser Arbeit wurde ein Algorithmus zur Gewinnung der algebraischen Lösung des linearen Gleichungssystems

$$(A - D(A))Z = 0, \quad (1a)$$

$$\sum_{i=1}^n Z_i = N \quad (1b)$$

beschrieben.

Im zweiten Teil der Arbeit soll dieser Algorithmus an einem anschaulichen Beispiel noch einmal erläutert werden. Hierzu eignen sich allgemein Modelle für physikalische Systeme, die in verschiedenen diskreten Zuständen auftreten können und in denen die stationären Wahrscheinlichkeiten dieser Zustände Lösung eines Gleichungssystems der Form (1) sind.

Als spezielles Beispiel wählen wir ein Modell für die stationäre Diffusion einer Teilchensorte durch eine poröse Membran, in dem der Fluß als Linearkombination der Wahrscheinlichkeiten für die Besetzungszustände der Poren dargestellt wird.

Beschreibung des Modells

Die Poren der Membran bestehen aus drei hintereinander liegenden Plätzen, die voneinander und von den Außenräumen durch Energiebarrieren getrennt sind. Auf jedem Platz kann höchstens ein Teilchen sitzen. Um von einem Reservoir ins andere zu gelangen, muß ein Teilchen alle Barrieren einer Pore der Membran passieren. Wir nehmen der Einfachheit halber an, daß Übergänge durch die Trennwände zwischen verschiedenen Poren nicht möglich sind.

Jede Pore kann in genau 8 verschiedenen Besetzungszuständen auftreten, die wir durch Angabe der leeren Plätze (O) und der besetzten Plätze (X) beschreiben:

(OOO), (XOO), (OXO), (OOX), (XXO), (XOX), (OXX), (XXX).

Wir numerieren die Zustände in dieser Reihenfolge durch und bezeichnen im folgenden einen Zustand auch einfach mit seiner Nummer, also etwa den Zustand (OOX) durch das Symbol (4).

Verschiedene Zustände einer Pore können durch Sprünge von Teilchen über Barrieren ineinander übergehen. Diese Sprünge werden durch Geschwin-

digkeitskonstanten charakterisiert, die entweder reine Materialkonstanten sind oder (für die Randbarrieren) von den Teilchenkonzentrationen in den Reservoiren abhängen können. Wir setzen diese Geschwindigkeitskonstanten als bekannt voraus und beschreiben sie durch die beiden Zustände, die sich durch den entsprechenden Teilchensprung ineinander umwandeln oder deren Nummern, indem wir zuerst den verschwindenden, dann den entstehenden Zustand angeben; z. B. bezeichnen wir die Größe, die den Übergang des Zustandes (OXO) in den Zustand (XXO) beschreibt, durch $\langle (OXO), (XXO) \rangle$ bzw. $\langle 3, 5 \rangle$.

Die möglichen Besetzungszustände einer Pore besitzen gewisse Wahrscheinlichkeiten $P(OOO)$, $P(XOO)$, ..., $P(XXX)$. Im stationären Zustand des aus der Membran und aus den beiden Reservoiren gebildeten Systems erfüllen diese Wahrscheinlichkeiten das Gleichungssystem

$$\frac{dP(i)}{dt} = 0 \quad (i = 1, \dots, 8) \quad (5a)$$

$$\sum_{i=1}^8 P(i) = 1. \quad (5b)$$

Der Einfachheit halber nehmen wir an, daß zwei Zustände nur durch den Sprung eines Teilchens über eine Barriere unmittelbar ineinander übergehen können. Dann erhalten wir für die zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeit z. B. des Besetzungszustandes (1):

$$\begin{aligned} \frac{dP(1)}{dt} = & - [\langle 1, 2 \rangle + \langle 1, 4 \rangle] \cdot P(1) \\ & + \langle 2, 1 \rangle \cdot P(2) + \langle 4, 1 \rangle \cdot P(4). \end{aligned}$$

Mit den entsprechenden Gleichungen für die übrigen Zustände erhält man dann aus dem Gleichungssystem (5a) ein homogenes lineares Gleichungssystem der Form (1a) mit der Normierungsbedingung (5b). Addieren wir zu jedem Diagonalelement der Koeffizientenmatrix dieses homogenen Systems die übrigen Elemente derselben Spalte, so erhalten wir die Matrix A :

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \langle 2, 1 \rangle & 0 & \langle 4, 1 \rangle & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 1, 2 \rangle & 0 & \langle 3, 2 \rangle & 0 & 0 & \langle 6, 2 \rangle & 0 & 0 \\ 0 & \langle 2, 3 \rangle & 0 & \langle 4, 3 \rangle & \langle 5, 3 \rangle & 0 & \langle 7, 3 \rangle & 0 \\ \langle 1, 4 \rangle & 0 & \langle 3, 4 \rangle & 0 & 0 & \langle 6, 4 \rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle 3, 5 \rangle & 0 & 0 & \langle 6, 5 \rangle & 0 & \langle 8, 5 \rangle \\ 0 & \langle 2, 6 \rangle & 0 & \langle 4, 6 \rangle & \langle 5, 6 \rangle & 0 & \langle 7, 6 \rangle & 0 \\ 0 & 0 & \langle 3, 7 \rangle & 0 & 0 & \langle 6, 7 \rangle & 0 & \langle 8, 7 \rangle \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \langle 5, 8 \rangle & 0 & \langle 7, 8 \rangle & 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

Der Index i eines Elementes $a_{ik} = \langle i, k \rangle$ ($1 \leq i, k \leq 8$) von A ist der Spaltenindex, k der Zeilenindex.

Der Matrix assoziieren wir gemäß Definition 8 (Teil I dieser Arbeit) den gerichteten und gewichteten Graphen G (Abb. 1). Jeder Punkt¹² i des Graphen entspricht dem Porenbesetzungszustand (i) , die gerichtete Kante (i, k) dem Übergang vom Zustand (i) in den Zustand (k) , das Gewicht $\langle i, k \rangle$ der Kante (i, k) ist die dazu gehörende Geschwindigkeitskonstante.

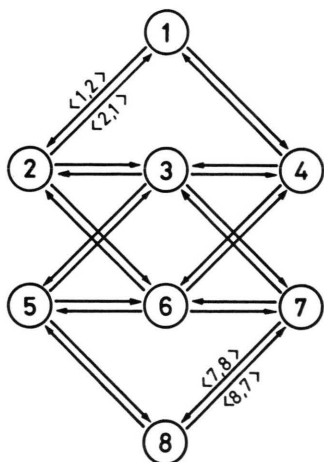


Abb. 1. Zur Matrix A assoziierter, gewichteter und gerichteter Graph G . Die Gewichte $\langle i, k \rangle$ der Kanten (i, k) sind nur zwischen den Punkten ① und ② sowie ⑦ und ⑧ eingezeichnet.

Um das Gleichungssystem nach der Methode von KIRCHHOFF², KING und ALTMAN⁴ und HILL⁵ zu lösen, muß man zu jedem Punkt von G alle auf ihn gerichteten maximalen Bäume in G konstruieren. Ist $\{T_l(\rightarrow i) \mid 1 \leq l \leq L\}$ die Menge aller auf den Punkt i gerichteten maximalen Bäume in G , dann ist die Lösung unseres homogenen Gleichungssystems:

$$P'(i) = \sum_{l=1}^L g(T_l(\rightarrow i)) \quad (i=1, \dots, 8) \quad (7)$$

und mit Gl. (5 b) erhält man für die gesuchten Wahrscheinlichkeiten:

$$P(i) = P'(i) / \sum_{i=1}^8 P'(i) \quad (8)$$

Es geht also bei der Berechnung der $P(i)$ im wesentlichen um die Bestimmung der $P'(i)$.

Beschreibung des Algorithmus zur Gewinnung der $P'(i)$

Wir ersetzen in Gl. (6) jedes Matricelement $\langle i, k \rangle$ durch die zugehörige Kante (i, k) , schreiben die Kanten einer Spalte unmittelbar untereinander und

erhalten so das Spaltenschema:

$$R = \begin{array}{cccccccc} (1, 2) & (2, 1) & (3, 2) & (4, 1) & (5, 3) & (6, 2) & (7, 3) & (8, 5) \\ (1, 4) & (2, 3) & (3, 4) & (4, 3) & (5, 6) & (6, 4) & (7, 6) & (8, 7) \\ & (2, 6) & (3, 5) & (4, 6) & (5, 8) & (6, 5) & (7, 8) & \\ & & (3, 7) & & & (6, 7) & & \end{array}$$

Jeder maximale auf den Punkt i gerichtete Baum in G enthält aus jeder Spalte von R mit Ausnahme der i -ten genau eine Kante, da alle Kanten eines Baumes verschiedene Anfangspunkte haben und da, wenn der Baum auf den Punkt i gerichtet ist, keine Kante den Punkt i als Anfangspunkt haben kann.

Als Beispiel für das Aufsuchen aller maximalen auf einen Punkt i gerichteten Bäume setzen wir $i = 3$, streichen die dritte Spalte von R und erhalten:

$$R(3) = \begin{array}{cccccccc} (1, 2) & (2, 1) & (4, 1) & (5, 3) & (6, 2) & (7, 3) & (8, 5) \\ (1, 4) & (2, 3) & (4, 3) & (5, 6) & (6, 4) & (7, 6) & (8, 7) \\ & (2, 6) & (4, 6) & (5, 8) & (6, 5) & (7, 8) & \\ & & & & (6, 7) & & \end{array}$$

Nun wird die Menge $M(3)$ aller 7-kantigen Teilgraphen von G , die aus jeder Spalte von $R(3)$ genau eine Kante enthalten, in lexikographischer Reihenfolge aufgezählt; $M(3)$ enthält alle $T(\rightarrow 3)$:

$$\begin{array}{ll} T_1(3) & = (1, 2), (2, 1), (4, 1), (5, 3), (6, 2), (7, 3), (8, 5) \\ T_2(3) & = (1, 2), (2, 1), (4, 1), (5, 3), (6, 2), (7, 3), (8, 7) \\ T_3(3) & = (1, 2), (2, 1), (4, 1), (5, 3), (6, 2), (7, 6), (8, 5) \\ & \vdots \\ T_{216}(3) & = (1, 2), (2, 1), (4, 6), (5, 8), (6, 7), (7, 8), (8, 7) \\ T_{217}(3) & = (1, 2), (2, 3), (4, 1), (5, 3), (6, 2), (7, 3), (8, 5) \\ & \vdots \\ T_{221}(3) & = (1, 2), (2, 3), (4, 1), (5, 3), (6, 2), (7, 8), (8, 5) \\ & \vdots \\ T_{1025}(3) & = (1, 4), (2, 3), (4, 6), (5, 3), (6, 5), (7, 8), (8, 5) \\ & \vdots \\ T_{1296}(3) & = (1, 4), (2, 6), (4, 6), (5, 8), (6, 7), (7, 8), (8, 7) \end{array}$$

Die lexikographische Aufzählung der $T(3)$ läßt sich anschaulich dadurch beschreiben, daß wir dem Schema $R(3)$ einen mechanischen Zähler aus 7 Rollen auf einer gemeinsamen Achse zuordnen:

Auf der v -ten Rolle sind die Elemente der v -ten Spalte von $R(3)$ zyklisch angeordnet. Ein Fenster parallel zur Achse des Zählwerkes zeigt dann eine Kombination von je einer Kante aus jeder Spalte von $R(3)$ an, so daß z. B. in der Anfangsstellung des Zählers die erste Zeile von $R(3)$ erscheint. Steht nach einer ganzen Umdrehung der v -ten Rolle ($2 \leq v \leq 7$) deren erstes Element wieder im Fen-

¹² Die Punkte i sind in den Graphen Abb. 1–5 durch Kreise gekennzeichnet, ① \triangleq Punkt 1 usw.

ster, so wird gleichzeitig die $(\nu - 1)$ -te Rolle eine Position weiter geschaltet.

Wir wollen nun anschaulich die Bedeutung der in Definition 9 (Teil I dieser Arbeit) formal eingeführten Testmatrizen $C(T(i))$ erläutern. Es sei noch einmal wiederholt, daß diese Testmatrizen uns zu entscheiden erlauben, ob ein Element $T(i)$ aus $M(i)$ ein Baum $T(\rightarrow i)$ ist oder nicht. Wir ordnen zunächst allen n Punkten von G (in unserem Beispiel ist $n = 8$), die ja alle als Randpunkte von Kanten in jedem $T(i)$ vorkommen, die Zahl Null als Kennzahl zu. Jetzt zeichnen wir zwischen diesen n Punkten nacheinander die Kanten von $T(i)$ in der Reihenfolge von links nach rechts als Verbindungen ihrer Randpunkte ein und ordnen nach jedem ν -ten Schritt ($1 \leq \nu \leq n - 1$) jeweils allen Punkten, die durch einen Weg in dem aus den ersten ν Kanten von $T(i)$ bestehenden Graphen $G_\nu(T(i))$ miteinander verbindbar sind — d. h. allen Punkten einer Zusammenhangskomponente von $G_\nu(T(i))$ —, dieselbe natürliche Zahl, und zwar eine ihrer Nummern, als Kennzahl zu. Diese Kennzahlen sind die Elemente von $C(T(i))$, die in der ν -ten Spalte in den zu den jeweiligen Punkten gehörenden Zeilen stehen.

Die Anzahl der verschiedenen positiven Kennzahlen in der ν -ten Spalte ist dann die Anzahl der Zusammenhangskomponenten von $G_\nu(T(i))$. Da $G_7(T(i)) = T(i)$ ist, ist $T(i)$ genau dann zusammenhängend, wenn alle Elemente der letzten Spalte von $C(T(i))$ einander gleich sind. Da $T(i)$ $n - 1$ Kanten und n Punkte hat, ist $T(i)$ genau dann nicht zusammenhängend, wenn $T(i)$ mindestens einen Zyklus enthält, also kein Baum ist. Wir sehen aber schon an der ν -ten Spalte von $C(T(i))$, ob durch die ν -te Kante von $T(i)$ in $G_\nu(T(i))$ ein Zyklus geschlossen wird; dann erhält nämlich kein Punkt eine neue Kennzahl, und die ν -te und $(\nu - 1)$ -te Spalte von $C(T(i))$ sind einander gleich. Wir können dann den Test dieses $T(i)$ abbrechen und brauchen als nächstes erst wieder das erste Element $T'(i)$ aus $M(i)$ zu erzeugen und zu testen, das den Teilgraphen $G_\nu(T(i))$ nicht enthält. $T'(i)$ ist also das erste auf $T(i)$ folgende Element von $M(i)$, das sich in der ν -ten Kante von $T(i)$ unterscheidet. Alle Elemente von $M(i)$, die in der lexikographischen Aufzählung zwischen $T(i)$ und $T'(i)$ stehen, können wir daher nach dem Test von $T(i)$ sofort übergehen. Nach diesem Kriterium werden durch unser FORTRAN-Programm¹⁰ alle maximalen Bäume $T(\rightarrow i)$ aufgezählt.

Als Beispiel für dieses Testverfahren sollen die Matrizen $C(T(3))$ einiger $T(3)$ aus $M(3)$ aufgestellt und diskutiert werden.

Zunächst betrachten wir $T_1(3)$:

$$T_1(3) = \{(1, 2), (2, 1), (4, 1), (5, 3), (6, 2), (7, 3), (8, 5)\}$$

An Hand der in Abb. 2 dargestellten $G_\nu(T_1(3))$ wird gezeigt, wie wir die Testmatrix $C(T_1(3))$ konstruieren.

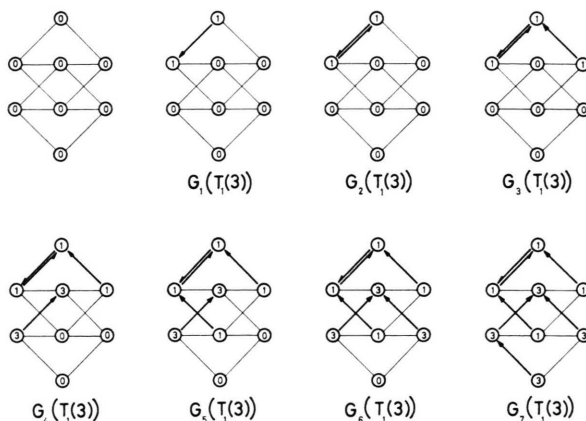


Abb. 2. Schrittweise Konstruktion von $T_1(3)$ über die Teilgraphen $G_\nu(T_1(3))$, ($1 \leq \nu \leq 7$).

$$C(T_1(3)) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 3 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 3 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Die erste Kante von $T_1(3)$ ist $(1, 2)$; $G_1(T_1(3))$ besteht also genau aus dieser Kante, ihre Randpunkte ① und ③ erhalten nach Definition 9 (Teil I dieser Arbeit) die Kennzahl 1, also steht in der ersten und zweiten Zeile der ersten Spalte von $C(T_1(3))$ die Zahl 1, die anderen Elemente der ersten Spalte sind Null. $G_2(T_1(3))$ besteht aus den ersten beiden Kanten $(1, 2)$ und $(2, 1)$ von $T_1(3)$, ist also ein Zyklus der Kantenzahl oder Länge 2; die beiden ersten Spalten von $C(T_1(3))$ sind gleich, $T_1(3)$ kann kein Baum sein, und wir könnten den Test hier abbrechen. Wir wollen aber, um das Konstruktionsverfahren für die $C(T(i))$ verständlicher zu machen, $C(T_1(3))$ vollständig konstruieren. Die dritte Kante $(4, 1)$ von $T_1(3)$ verbindet in $G_3(T_1(3))$ den Punkt ④ mit dem Punkt ①, der in $G_2(T_1(3))$ schon die Kennzahl 1 hat, also erhält auch ④ die Kennzahl 1; in der ersten, zweiten und vierten Zeile der dritten Spalte von $C(T_1(3))$ steht demnach eine 1, in den übrigen Zeilen eine Null. Die vierte Kante

$(5, 3)$ verbindet zwei Punkte, die nicht in $G_3(T_1(3))$ enthalten sind. $G_4(T_1(3))$ hat also zwei Zusammenhangskomponenten, deren Punkte die Kennzahl 1 bzw. 3 haben. Alle weiteren Kanten vergrößern nur noch diese Zusammenhangskomponenten, ohne sie miteinander zu verbinden, daher stehen in der letzten Spalte von $C(T_1(3))$ die beiden Kennzahlen 1 und 3.

Das nächste Element von $M(3)$, das den Zyklus $((1, 2), (2, 1))$ nicht enthält, das also ein Baum sein könnte, ist – wie man dem Spaltenschema $R(3)$ entnehmen kann – $T_{217}(3)$. Wir können uns also Erzeugung und Test der 215 Teilgraphen $T_2(3)$ bis $T_{216}(3)$ ersparen.

Es ist

$T_{217}(3) = \{(1, 2), (2, 3), (4, 1), (5, 3), (6, 2), (7, 3), (8, 5)\}$, und man ersieht aus Abb. 3 leicht, wie man die Testmatrix $C(T_{217}(3))$ erhält.

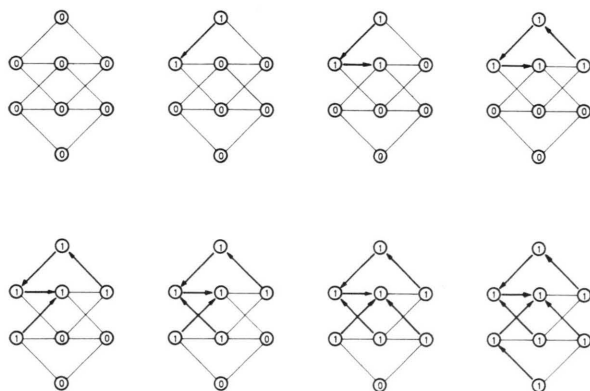


Abb. 3. Schrittweise Konstruktion von $T_{217}(3)$ über die Teilgraphen G_v ($T_{217}(3)$), $(1 \leq v \leq 7)$.

$$C(T_{217}(3)) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Die Spalten von $C(T_{217}(3))$ sind alle verschieden, die letzte Spalte enthält nur die Kennzahl 1; $T_{217}(3)$ ist also ein Baum, was die graphische Darstellung unmittelbar bestätigt.

Als letztes ausführliches Beispiel wollen wir $C(T_{1025}(3))$ aufstellen (s. Abb. 4).

$T_{1025}(3) = \{(1, 4), (2, 3), (4, 6), (5, 3), (6, 5), (7, 8), (8, 5)\}$

$$C(T_{1025}(3)) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

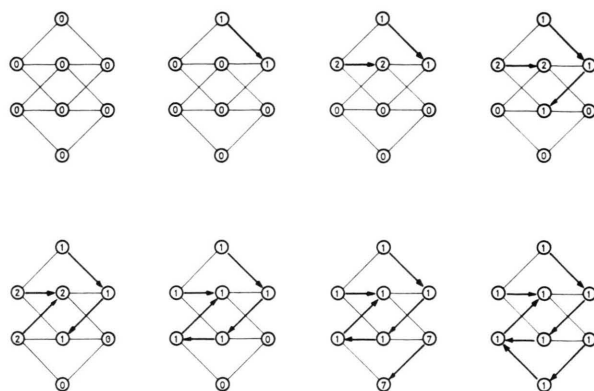


Abb. 4. Schrittweise Konstruktion von $T_{1025}(3)$ über die Teilgraphen G_v ($T_{1025}(3)$), $(1 \leq v \leq 7)$.

$G_1(T_{1025}(3))$ besteht aus $(1, 4)$: Kennziffer 1 in 1. und 4. Zeile der 1. Spalte der Testmatrix.

$G_2(T_{1025}(3))$: zwei Zusammenhangskomponenten $(1, 4)$ und $(2, 3)$: Kennziffer 2 in 2. und 3. Zeile der 2. Spalte, übrige Elemente aus 1. Spalte übernehmen.

$G_3(T_{1025}(3))$: ⑥ mit erster Zusammenhangskomponente verbunden, also Kennziffer 1 in 6. Zeile der 3. Spalte, übrige Elemente aus 2. Spalte übernehmen.

$G_4(T_{1025}(3))$: ⑤ mit zweiter Zusammenhangskomponente verbunden, also Kennziffer 2 in 5. Zeile der 4. Spalte, übrige Elemente wie in der 3. Spalte.

$G_5(T_{1025}(3))$: Die beiden Zusammenhangskomponenten von G_4 wurden durch $(5, 6)$ miteinander verbunden, alle Punkte von G_5 erhalten die Kennziffer 1 in der 5. Spalte der Testmatrix.

$G_6(T_{1025}(3))$: Neue Zusammenhangskomponente $(7, 8)$ mit Kennziffer 7.

$G_7(T_{1025}(3))$: Die letzte Kante $(8, 5)$ verbindet die beiden Zusammenhangskomponenten von G_6 ($T_{1025}(3)$), alle Punkte erhalten die Kennzahl 1. T_{1025} ist ein Baum.

Es sei noch erwähnt, daß im Testgraphen $G(T(i))$ nicht nur Zyklen der Länge 2, wie am Beispiel $G(T_1(3))$ gezeigt, sondern auch längere Zyklen auftreten können. So überzeugt man sich schnell davon, daß $G_5(T_{443}(3))$ mit

$T_{443}(3) = \{(1, 2), (2, 6), (4, 1), (5, 3), (6, 4), (7, 8), (8, 5)\}$ einen Zyklus der Länge 4 enthält.

Auf diese Weise zählen wir alle maximalen auf den Punkt ③ gerichteten Bäume $T(\rightarrow 3)$ von G auf.

Damit erhält man $P'(3)$:

$$\begin{aligned} P'(3) = & \langle 1, 2 \rangle \cdot \langle 2, 3 \rangle \cdot \langle 4, 1 \rangle \cdot \langle 5, 3 \rangle \cdot \langle 6, 2 \rangle \cdot \langle 7, 3 \rangle \cdot \langle 8, 5 \rangle \\ & + \langle 1, 2 \rangle \cdot \langle 2, 3 \rangle \cdot \langle 4, 1 \rangle \cdot \langle 5, 3 \rangle \cdot \langle 6, 2 \rangle \cdot \langle 7, 3 \rangle \cdot \langle 8, 7 \rangle \\ & + \langle 1, 2 \rangle \cdot \langle 2, 3 \rangle \cdot \langle 4, 1 \rangle \cdot \langle 5, 3 \rangle \cdot \langle 6, 2 \rangle \cdot \langle 7, 6 \rangle \cdot \langle 8, 5 \rangle \\ & + \langle 1, 2 \rangle \cdot \langle 2, 3 \rangle \cdot \langle 4, 1 \rangle \cdot \langle 5, 3 \rangle \cdot \langle 6, 2 \rangle \cdot \langle 7, 6 \rangle \cdot \langle 8, 7 \rangle \\ & + \langle 1, 2 \rangle \cdot \langle 2, 3 \rangle \cdot \langle 4, 1 \rangle \cdot \langle 5, 3 \rangle \cdot \langle 6, 2 \rangle \cdot \langle 7, 8 \rangle \cdot \langle 8, 5 \rangle \\ & + \langle 1, 2 \rangle \cdot \langle 2, 3 \rangle \cdot \langle 4, 1 \rangle \cdot \langle 5, 3 \rangle \cdot \langle 6, 4 \rangle \cdot \langle 7, 3 \rangle \cdot \langle 8, 5 \rangle \\ & + \cdot \\ & \cdot \\ & + \langle 1, 4 \rangle \cdot \langle 2, 6 \rangle \cdot \langle 4, 6 \rangle \cdot \langle 5, 8 \rangle \cdot \langle 6, 7 \rangle \cdot \langle 7, 3 \rangle \cdot \langle 8, 5 \rangle \end{aligned}$$

Die restlichen sieben $P'(i)$, $i \neq 3$, des als Beispiel gewählten Systems lassen sich im Prinzip auf analoge Weise aufzählen. Liegen alle $P'(i)$ vor, so hat man sofort auch

$$P(i) = P'(i) \Big/ \sum_{i=1}^8 P'(i).$$

Im ersten Teil der Arbeit war schließlich gezeigt worden, wie sich bei einem symmetrischen Graphen jeder Baum $T(\rightarrow k)$ durch Umorientieren von Kanten genau einmal aus einem Baum $T(\rightarrow i)$ ($1 \leq i$, $k \leq n$ bei n Punkten im Graphen) gewinnen läßt und wie man auf diese Weise jedes $P'(k)$ aus einem $P'(i)$ ($i \neq k$) erzeugen kann. Auch dieses Vorgehen sei an Hand unseres Beispiels noch einmal erläutert. Gegeben sei der Baum

$$T_{221}(3) = \{ (1, 2), (2, 3), (4, 1), (5, 3), (6, 2), (7, 8), (8, 5) \}.$$

Hieraus soll ein Baum $T_\mu(4)$ durch Umorientieren von Kanten konstruiert werden. Nach Definition 5 (Teil I dieser Arbeit) gibt es in $T_{221}(3)$ genau einen Weg $w_{4,3}$ von ④ nach ③:

$$w_{4,3} = \{ (4, 1), (1, 2), (2, 3) \}.$$

Durch Umkehren jeder einzelnen Kante aus $w_{4,3}$ wird daraus ein Weg $w_{3,4}$ von ③ nach ④:

$$w_{3,4} = \{ (1, 4), (2, 1), (3, 2) \}.$$

Ersetzt man in $T_{221}(3)$ den Weg $w_{4,3}$ durch den Weg $w_{3,4}$, so bekommt man einen Baum

$$T_\mu(4) = \{ (2, 1), (3, 2), (1, 4), (5, 3), (6, 2), (7, 8), (8, 5) \}.$$

Nach Umstellen der ersten drei Kanten zählt man in einem zu $R(3)$ analogen Schema $R(4)$ mit fehlender vierter Spalte leicht ab, daß dieser Baum in der lexikographischen Numerierung der Elemente von $M(4)$ die Nummer $\mu = 869$ hat.

$$T_{869}(4) = \{ (1, 4), (2, 1), (3, 2), (5, 3), (6, 2), (7, 8), (8, 5) \}.$$

Diese Umorientierung zeigt Abb. 5.

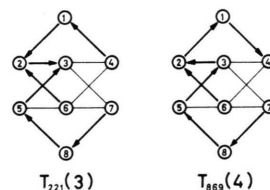


Abb. 5. Umwandlung von $T_{221}(3)$ in $T_{869}(4)$ durch Umkehr des Weges $w_{4,3}$ in den Weg $w_{3,4}$.

Beim Aufzählen der $T(4) \in M(4)$ mit Hilfe eines Schemas $R(4)$ würde man feststellen, daß $M(4)$ eine größere Anzahl von Elementen enthält als $M(3)$, nämlich 1728 an Stelle von 1296, obwohl beide Mengen, $M(3)$ und $M(4)$, dieselbe Anzahl von Bäumen liefern. Möchte man daher alle $T(\rightarrow k)$ durch Umorientieren von Wegen aus den $T(\rightarrow i)$, $i \neq k$, gewinnen, so ist es zweckmäßig, i so zu wählen, daß im Schema $R(i)$ eine Spalte mit möglichst vielen Elementen ausgelassen wird.