Kombinatorischer Beweis des Matrix-Tree-Theorems mittels Involutionsprinzip

Marc Wagner
mcwagner@stud.informatik.uni-erlangen.de
Ferienakademie, September 1999

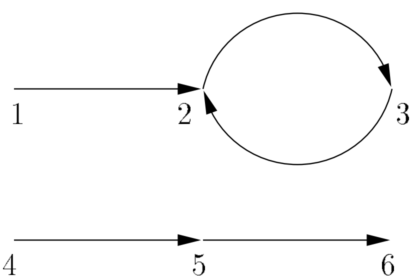
Kirchhoffs Matrix-Tree-Theorem liefert die Anzahl der Spanning Trees in einem zusammenhängenden Graphen mit Hilfe der Determinante einer speziellen Matrix. Im folgenden wird ein auf Involution basierender Beweis einer ähnlichen, etwas flexibleren Gleichung präsentiert.

1 Codierung von Funktionen

Sei f eine Funktion, die auf einer endlichen Menge A definiert ist, deren Bild aber durchaus ganz oder teilweise ausserhalb von A liegen kann. f wird eindeutig mittels

(1) $$w(f) \quad = \quad \prod_{i \in A} a_{i,f(i)}$$

codiert. Die $a_{i,j}$ sind dabei kommutierende Variablen.



Definitionsbereich von f:
$A = \{1, 2, 3, 4, 5\}$

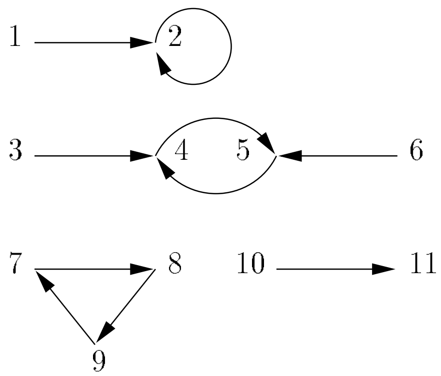
$f(1) = 2 \qquad f(2) = 3$
$f(3) = 2 \qquad f(4) = 5$
$f(5) = 6$

$\rightarrow w(f) = a_{1,2} a_{2,3} a_{3,2} a_{4,5} a_{5,6}$

Abbildung 1: Beispiel zur Codierung einer Funktion mittels w

A' enthalte genau die Elemente aus A für die gilt $f^k(a) = a$ für ein beliebiges $k > 0$, bildlich gesprochen die Elemente, die auf einem Zyklus liegen. Da es nicht zwangsläufig solche Elemente geben muss, kann A' durchaus leer sein. Man erkennt leicht, dass f auf der Menge A' eine Permutation σ_f induziert. $cyc(\sigma_f)$ sei die Anzahl der Zyklen von σ_f. f wird ebenfalls eindeutig codiert durch

$$\bar{w}(f) \quad = \quad (-1)^{cyc(\sigma_f)} w(f) \quad . \tag{2}$$



Definitionsbereich von f:
$A = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10\}$

$f(1) = 2$	$f(2) = 2$	$f(3) = 4$
$f(4) = 5$	$f(5) = 4$	$f(6) = 5$
$f(7) = 8$	$f(8) = 9$	$f(9) = 7$
$f(10) = 11$		

$\rightarrow \bar{w}(f) = (-1)^3 w(f) =$
$= -a_{1,2} a_{2,2} a_{3,4} a_{4,5} a_{5,4} a_{6,5} a_{7,8} a_{8,9} a_{9,7} a_{10,11}$

Abbildung 2: Beispiel zur Codierung einer Funktion mittels $\bar{w}$

2 Vorbemerkungen bezüglich Determinanten

Die Determinante $det(M)$ einer $n \times n$-Matrix $M = [m_{i,j}]$, $1 \leq i, j \leq n$, wird formal definiert durch

$$det(M) \quad = \quad \sum_{\sigma} sign(\sigma) m_{1,\sigma(1)} \ldots m_{n,\sigma(n)} \quad ,$$

wobei über alle Permutationen σ auf der Menge $\{1, \ldots, n\}$ summiert wird. Dabei ist

$$sign(\sigma) \quad = \quad (-1)^{n - cyc(\sigma)} \quad = \quad (-1)^{cyc_e(\sigma)} \quad . \tag{3}$$

$cyc_e(\sigma)$ ist die Anzahl der Zyklen gerader Länge von σ.

3 Beweis des Matrix-Tree-Theorems

Sei

$$D = [d_{k,l}] = \begin{pmatrix} \sum_j a_{1,j} & -a_{1,2} & \dots & -a_{1,n} \\ -a_{2,1} & \sum_j a_{2,j} & \dots & -a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -a_{n,1} & -a_{n,2} & \dots & \sum_j a_{n,j} \end{pmatrix} ,$$

wobei $\sum_j a_{i,j} = a_{i,1} + \ldots + a_{i,n}$. Laut Definition gilt für die Determinante von D

$$det(D) = \sum_{\sigma} sign(\sigma) d_{1,\sigma(1)} \ldots d_{n,\sigma(n)} .$$

Es wird über alle Permutationen σ auf der Menge $\underline{n} = \{1, \ldots, n\}$ summiert. Diese Gleichung lässt sich problemlos umformen zu

$$det(D) = \sum_{I \subseteq \underline{n}} \sum_{\sigma_I} sign(\sigma_I) \left(\prod_{i \in I} \sum_j a_{i,j} \right) \prod_{i \in \underline{n} \setminus I} (-a_{i,\sigma_I(i)}) ,$$

Die zweite Summe läuft über alle Permutationen σ_I auf der Menge $\{1, \ldots, n\}$ deren Fixpunkte gerade die Menge I bilden. Ein weiterer einfacher Schritt führt zu

$$det(D) = \sum_{I \subseteq \underline{n}} \left(\prod_{i \in I} \sum_j a_{i,j} \right) \sum_{\sigma_I} sign(\sigma_I) \prod_{i \in \underline{n} \setminus I} (-a_{i,\sigma_I(i)}) .$$

Sei nun τ gleich σ_I auf die Menge $\{1, \ldots, n\} \setminus I$ beschränkt. τ ist also eine Permutation ohne Fixpunkte (derangement) auf $\{1, \ldots, n\} \setminus I$. Aus Gleichung 3 folgt $sign(\sigma_I) = sign(\tau)$ und daraus

$$det(D) = \sum_{I \subseteq \underline{n}} \left(\prod_{i \in I} \sum_j a_{i,j} \right) \sum_{\tau} sign(\tau)(-1)^{n-|I|} \prod_{i \in \underline{n} \setminus I} a_{i,\tau(i)} .$$

Ein weiterer Umformungsschritt führt zu

$$(4) \qquad det(D) = \sum_{I \subseteq \underline{n}} \left(\sum \{ w(f);\ f : I \to \underline{n} \} \right) \left(\sum \{ \bar{w}(\tau);\ \tau \in \mathcal{D}_{\underline{n} \setminus I} \} \right) ,$$

wobei $\mathcal{D}_{\underline{n} \setminus I}$ die Menge aller Permutationen ohne Fixpunkte (derangements) auf der Menge $\{1, \ldots, n\} \setminus I$ ist.

Begründung

Dass die Beziehung

$$\left(\prod_{i\in I}\sum_{j} a_{i,j}\right) \quad = \quad \left(\sum\{w(f);\ f : I \to \underline{n}\right)$$

gilt sieht man sofort ein, wenn man Gleichung 1, die Definition von w, betrachtet. Etwas schwieriger ist es, zu zeigen, dass

$$\sum_{\tau} sign(\tau)(-1)^{n-|I|} \prod_{i\in\underline{n}\setminus I} a_{i,\tau(i)} \quad = \quad \left(\sum\{\bar{w}(\tau);\ \tau \in \mathcal{D}_{\underline{n}\setminus I}\}\right)$$

gilt. Es ist klar, dass es sich auf beiden Seiten um Summen handelt. Die Definition von $\bar{w}$, Gleichung 2, macht offensichtlich, dass die Glieder dieser Summen betragsmässig auf beiden Seiten gleich sind. Da gemäss Gleichung 3 $sign(\tau)(-1)^{n-|I|} = (-1)^{n-|I|-cyc(\tau)}(-1)^{n-|I|} = (-1)^{cyc(\tau)}$ gilt, folgt, dass auch die Vorzeichen der einzelnen Glieder übereinstimmen.

Die Determinante von D lässt sich, ausgehend von Gleichung 4, auch schreiben als

$$(5) \qquad \begin{aligned} det(D) &= \\ &= \sum_{J\subseteq\underline{n}} \left(\sum\{w(g);\ g : J \to J\right) \left(\sum\{\bar{w}(h);\ h : \underline{n}\setminus J \to' \underline{n}\setminus J\}\right) \quad , \end{aligned}$$

wobei $\to'$ bedeutet, dass in der Summe nur Abbildungen berücksichtigt werden, die keine Fixpunkte besitzen.

Begründung

In Gleichung 4 haben die Glieder der Summe die Gestalt $w(f)\bar{w}(\tau)$, wobei f eine Abbildung von I auf $\{1,\ldots,n\}$ ist und τ eine Permutation ohne Fixpunkte auf $\{1,\ldots,n\}\setminus I$. Der linke Teil von Abbildung 5 zeigt dafür ein konkretes Beispiel. Um auf Gleichung 5 zu kommen wird einfach eine neue Teilung der Menge $\{1,\ldots,n\}$ vorgenommen. J enthält dabei die Elemente aus I, die auch bei mehrfacher Anwendung von f die Menge I nicht verlassen. Die Pfeile, die die Abbildungen repräsentieren bleiben jedoch unverändert erhalten, dass heisst g ist f auf J beschränkt und h ist die Kombination von f auf der Menge $I\setminus J$ und τ. Abbildung 5 veranschaulicht den Übergang an einem Beispiel. Die Glieder der Summe von Gleichung 5 haben die Gestalt $w(g)\bar{w}(h)$. Dass $w(f)\bar{w}(\tau) = w(g)\bar{w}(h)$ gilt ist leicht einzusehen, da sich wie bereits erwähnt, die Pfeile, die in w und $\bar{w}$ durch die $a_{i,j}$ codiert werden, nicht ändern, und auch die Anzahl der Zyklen in $\{1,\ldots,n\}\setminus I$ und $\{1,\ldots,n\}\setminus J$ gleich sind. Da sowohl in Gleichung 4 als auch in Gleichung 5 über alle möglichen Mengen (I beziehungsweise J) und über alle möglichen Abbildungen (f und τ beziehungsweise g und h) summiert wird, folgt die Gleichheit beider Summen und damit die Korrektheit des Umformungsschrittes.

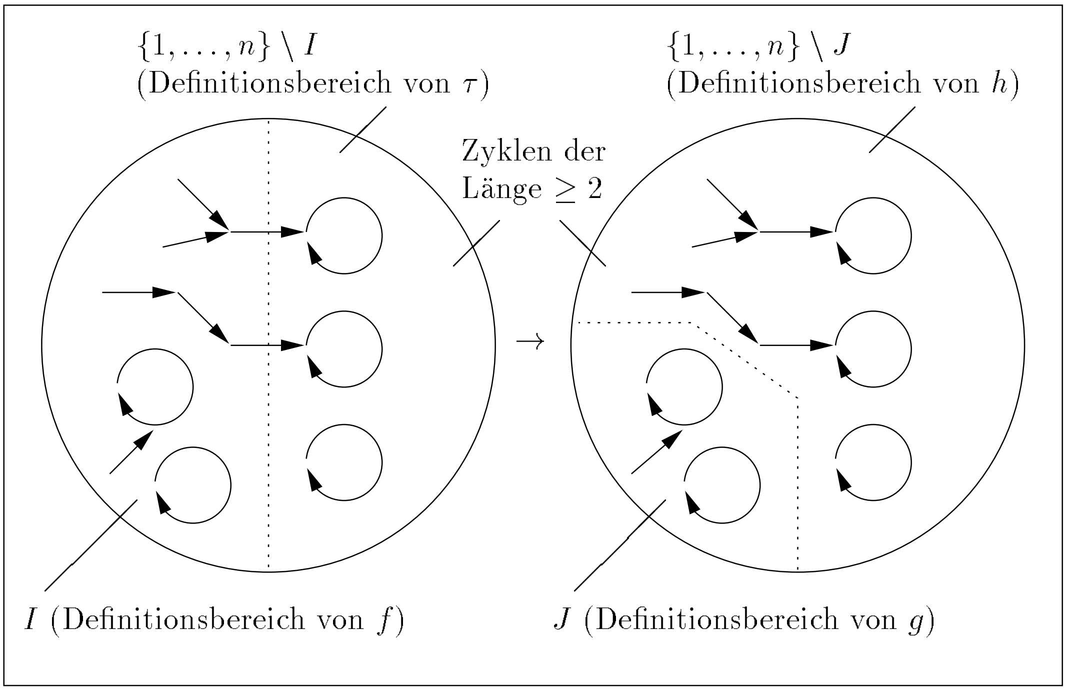


Abbildung 3: Übergang von Gleichung 4 zu Gleichung 5

Es wird nun für feste Funktionen g und h untersucht, wie viele weitere zulässige Abbildungen g' und h' es gibt, die auf $\{1,\ldots,n\}$ die gleiche Wirkung haben, bildlich gesprochen bei denen die Pfeile unverändert erhalten bleiben.

1. Fall: Weder g noch h enthält Zyklen der Länge ≥ 2
Es folgt sofort dass $\{1,\ldots,n\} \setminus J$, der Definitionsbereich von h, leer sein muss. Wäre $\{1,\ldots,n\} \setminus J$ nämlich nicht leer, müssten in h einerseits Zyklen vorhanden sein, da der Bildbereich von h Teilmenge von $\{1,\ldots,n\} \setminus J$ ist und $\{1,\ldots,n\} \setminus J$ sicher endlich ist. Andererseits können laut Bedingung von Fall 1 Zyklen nur die Länge 1 haben. Diese werden aber wiederum durch die Einschränkung aus Gleichung 5 ausgeschlossen. Da also $J = \{1,\ldots,n\}$ gilt, folgt, dass es kein von g und h verschiedenes Paar g' und h' geben kann, dass auf $\{1,\ldots,n\}$ die gleiche Wirkung hat. g und h werden durch $a_{1,g(1)} \ldots a_{n,g(n)}$ repräsentiert. g ist offensichtlich ein Planted Forest, dessen Wurzeln durch Zyklen der Länge 1 markiert werden.

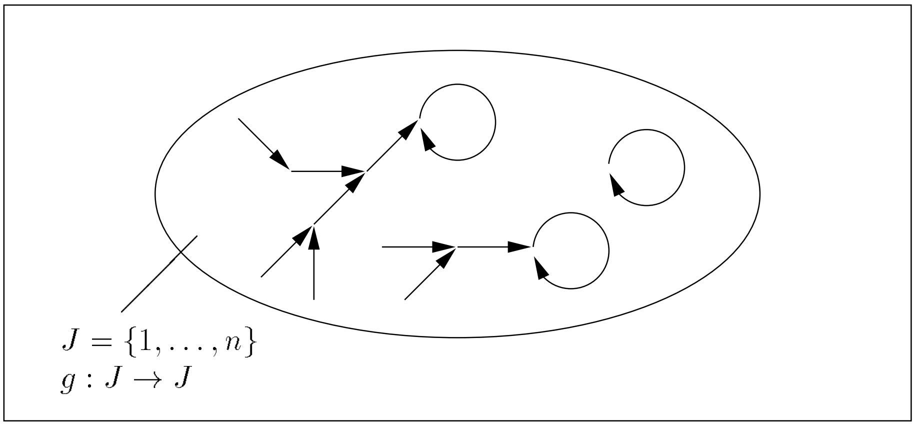


Abbildung 4: Beispiel zu Fall 1

2. Fall: Es gibt mindestens einen Zyklus der Länge ≥ 2 in g oder h
Die gewählten g und h werden in der Summe von Gleichung 5 durch $w(g)\bar{w}(h)$ repräsentiert. Wie bereits in Fall 1 gezeigt, befinden sich zusammenhängende Komponenten der Abbildungen die mit einem Zyklus der Länge 1 enden sicher in J und sind damit Bestandteil von g. Alle anderen Komponenten enden mit einem Zyklus der Länge ≥ 2. Sei x die Anzahl dieser Komponenten, $x \geq 1$. Ordnet man diese x Komponenten in irgendeiner anderen Weise J und $\{1, \ldots, n\} \setminus J$ zu, so erhält man ein anderes zulässiges g' und h', die in der Summe von Gleichung 5 durch $w(g')\bar{w}(h')$ repräsentiert werden. Sicher gilt $|w(g)\bar{w}(h)| = |w(g')\bar{w}(h')|$, die Vorzeichen werden jedoch von der Anzahl der Zyklen von h beziehungsweise h' bestimmt. Es gibt insgesamt 2^x verschiedene Möglichkeiten die x Komponenten J und $\{1, \ldots, n\} \setminus J$ zuzuordnen, wobei genau 2^{x-1} mal h eine gerade beziehungsweise ungerade Anzahl von Zyklen erhält. Das ist der Punkt, an dem eine vorzeichenumkehrende Involution ins Spiel kommt. Da gerade die Parität der Anzahl der Zyklen von h das Vorzeichen des entsprechenden Summengliedes bestimmt, folgt dass sich diese 2^x Glieder gegenseitig eliminieren, mathematisch ausgedrückt $(2^{x-1}w(g)w(h)) + (-2^{x-1}w(g)w(h)) = 0$.

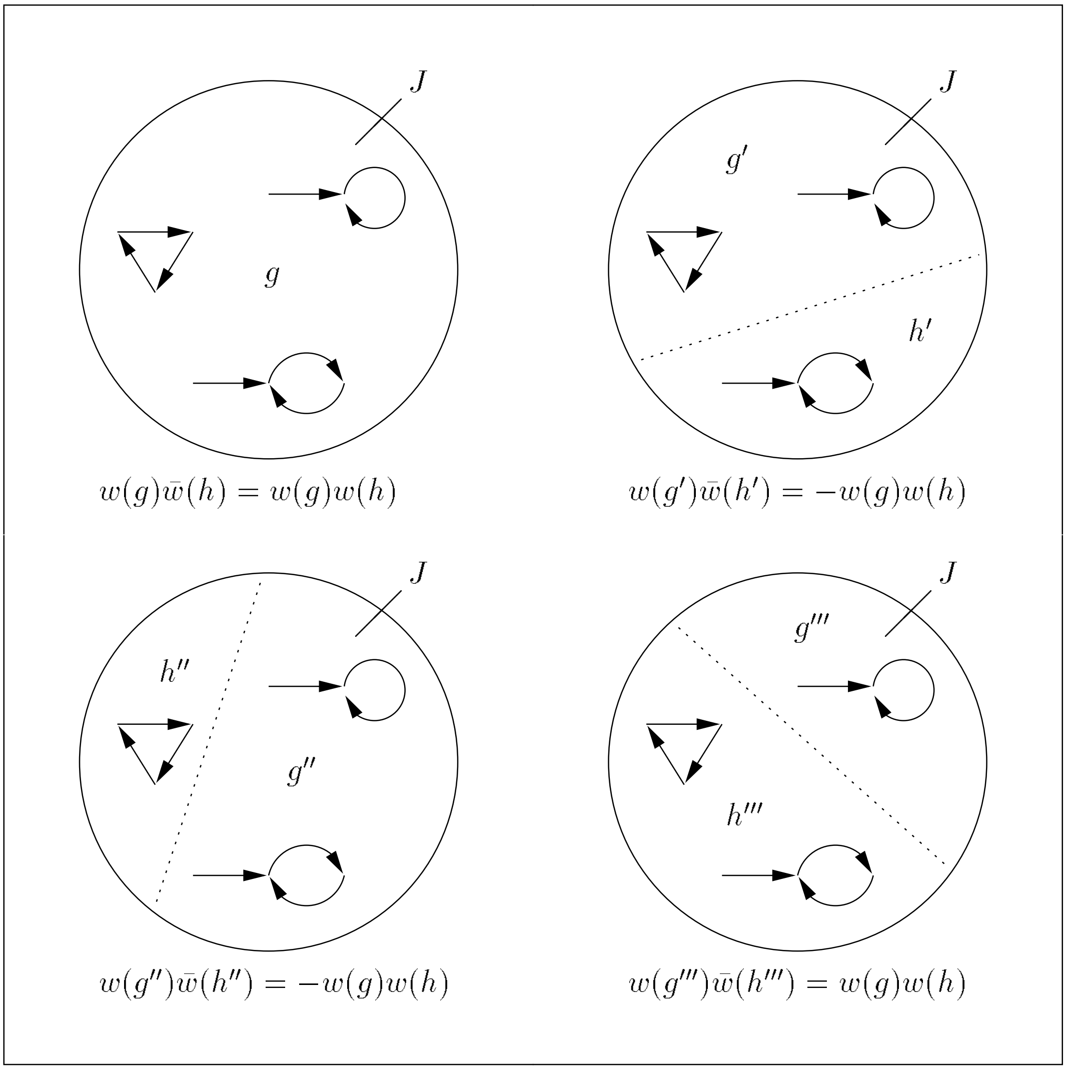
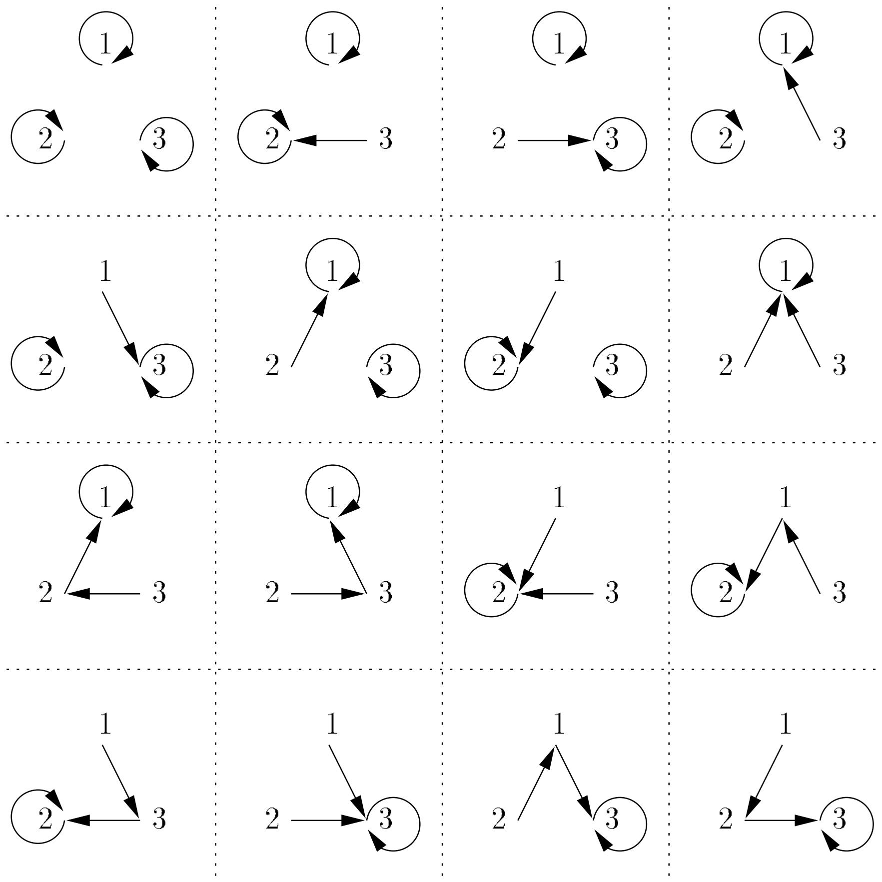


Abbildung 5: Beispiel zu Fall 2

Man erkennt also, dass in der Summe nur diejenigen Kombinationen g und h überleben, die keine Zyklen der Länge ≥ 2 besitzen, mit anderen Worten diejenigen, die einen Planted Forest beschreiben. Umgekehrt gibt es für jeden Planted Forest genau eine Kombination g und h, durch die dieser codiert werden kann. Das spektakuläre Ergebnis lautet also

$$det(D) \quad = \quad \sum\{w(f);\ f \text{ ist ein Planted Forest auf } \{1,\ldots,n\}\} \quad ,$$

eine dem Matrix-Tree-Thorem von Kirchhoff ähnliche Aussage, die jedoch etwas flexibler ist, da die Variablen $a_{i,j}$ je nach Bedarf belegt werden können.



$$det \begin{pmatrix} a_{1,1}+a_{1,2}+a_{1,3} & -a_{1,2} & -a_{1,3} \\ -a_{2,1} & a_{2,1}+a_{2,2}+a_{2,3} & -a_{2,3} \\ -a_{3,1} & -a_{3,2} & a_{3,1}+a_{3,2}+a_{3,3} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{aligned} &= a_{1,1}a_{2,2}a_{3,3} + a_{1,1}a_{2,2}a_{3,2} + a_{1,1}a_{2,3}a_{3,3} + a_{1,1}a_{2,2}a_{3,1} + \\ &+ a_{1,3}a_{2,2}a_{3,3} + a_{1,1}a_{2,1}a_{3,3} + a_{1,2}a_{2,2}a_{3,3} + a_{1,1}a_{2,1}a_{3,1} + \\ &+ a_{1,1}a_{2,1}a_{3,2} + a_{1,1}a_{2,3}a_{3,1} + a_{1,2}a_{2,2}a_{3,2} + a_{1,2}a_{2,2}a_{3,1} + \\ &+ a_{1,3}a_{2,2}a_{3,2} + a_{1,3}a_{2,3}a_{3,3} + a_{1,3}a_{2,1}a_{3,3} + a_{1,2}a_{2,3}a_{3,3} \end{aligned}$$

Abbildung 6: Alle Planted Forests auf $\{1, 2, 3\}$

4 Ein Beispiel für eine spezielle Belegung der Variablen

Eine relativ einfache aber dennoch vorteilhafte Art und Weise die Variablen der Matrix D zu belegen ist $a_{i,i} = x$ und $a_{i,j} = 1$ für $i \neq j$ zu setzen. Das liefert

$$det(D) = \sum_{k=1}^{n} f_{n,k} x^k \quad , \tag{6}$$

wobei $f_{n,k}$ die Anzahl der Planted Forests auf n Knoten, bestehend aus k Bäumen ist. Für diese spezielle Belegung der Variablen lässt sich $det(D)$ auch explizit ermitteln.

$$\begin{aligned}
det(D) &= det \begin{pmatrix} x+n-1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & x+n-1 & \dots & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & \dots & x+n-1 \end{pmatrix} = \\
&= det \begin{pmatrix} x+n & 0 & \dots & -1 \\ 0 & x+n & \dots & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -(x+n) & -(x+n) & \dots & x+n-1 \end{pmatrix} = \\
&= det \begin{pmatrix} x+n & 0 & \dots & 0 \\ 0 & x+n & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -(x+n) & -(x+n) & \dots & x \end{pmatrix} = (x+n)^{n-1} x
\end{aligned}$$

Dieses Ergebnis in Gleichung 6 eingesetzt ergibt

$$\sum_{k=1}^{n} f_{n,k} x^k = (x+n)^{n-1} x \quad , \tag{7}$$

eine einfache Formel zum Ermitteln der $f_{n,k}$. Für den konkreten Fall $n = 3$ zum Beispiel erhält man

$$\sum_{k=1}^{3} f_{3,k} x^k = (x+3)^2 x = x^3 + 6x^2 + 9x \quad ,$$

mit anderen Worten $f_{3,1} = 9$, $f_{3,2} = 6$ und $f_{3,3} = 1$. Die Korrektheit dieser Ergebnisse wird von Abbildung 8 bestätigt.

5 Ein weiterer Beweis von Cayleys Formel

Von Gleichung 7 ausgehend ist es nicht mehr schwer, Cayleys Formel herzuleiten. Für $f_{n,1}$, die Anzahl der Planted Trees auf n Knoten, gilt

$$f_{n,1} = [x^1]\left((x+n)^{n-1}x\right) = n^{n-1} \quad . \tag{8}$$

Cayleys Formel trifft jedoch eine Aussage bezüglich der Anzahl der Labeled Trees auf n Knoten, die im folgenden mit t_n bezeichnet wird. Zu jedem Labeled Tree gibt es n verschiedene Möglichkeiten eine Wurzel auszuwählen. Also folgt

$$f_{n,1} = nt_n \quad .$$

Dividiert man durch n und setzt das Ergebnis von Gleichung 8 ein, erhält man

$$t_n = n^{n-2} \quad ,$$

Cayleys Formel.

6 Literaturempfehlung

Die hier präsentierte Verallgemeinerung des Matrix-Tree-Theorems entstammt einem Manuskript von Professor Volker Strehl, Lehrstuhl für künstliche Intelligenz, Universität Erlangen-Nürnberg.