

蒟蒻的烷烃计数不完整题解

前置知识

生成函数

形式

给定数列 $A = \{a_1, a_2, \cdots\}$

记

$$F(x) = \sum_{i=0}^{+\infty} a_i x^i$$

为数列 A 的生成函数

记

$$[i]F(x) = a_i$$

注:

系数 a_i 一般代表权重(或所求的值、代价、也可指方案总数),指数可认为是递推公式(dp)动态规划的下标。

生成函数的意义可理解为 $dp_i = a_i$

性质

若 $G(x), F_1(x), F_2(x)$ 均为生成函数

令

$$G(x) = F_1(x) \cdot F_2(x)$$

则

$$[i]G(x) = \sum_{j=0}^i [j]F_1(x) \cdot [i-j]F_2(x)$$

注:

此表达式含义为

G_i 的贡献(也就是系数)来自于 F_1, F_2 中所有“加和为 i 的”权重(贡献)的乘积。

理解1:

$F_1(x) \cdot F_2(x)$,即两个多项式相乘, 将会把两个多项式的每一项都一次相乘。

$F_1(x)$ 的第 i 项 $a_i x^i$ 和 $F_2(x)$ 的第 j 项 $a_j x^j$ 的乘积将会对 $G(x)$ 的第 $i + j$ 项(因为 $x^i x^j = x^{i+j}$)产生 $a_i a_j$ 的贡献

即 $G(x)$ 第 $i + j$ 项的系数将增加 $a_i a_j$

理解2:

动态规划

设 g, f_1, f_2 为 $G(x), F_1(x), F_2(x)$ 递推数组

即 $g_i = [i]G(x), f_{1i} = [i]F_1(x), f_{2i} = [i]F_2(x)$

状态转移方程为 $g_i = \sum_{j=0}^i f_{1i} \cdot f_{2i-j}$

是不是所有满足“下标相加,价值相乘”的动规都可以用生成函数做呢?

[参考文章链接](#)

群论

[特别感谢的引用文章](#)

意义

解决**同构或对称的计数问题**

例

一个 n 个点的环, 用 n 种颜色去染。求有多少种本质不同的染色方案。

两种染色方案相同当且仅当通过旋转(不包括翻转)后, 每个点的颜色都相同。

以下定义均为**例**情况下

定义

朴素染色置换

即不考虑旋转情况的染色方案。本问题中共 $N = n^n$ 种朴素染色方案

如无特别说明，此后中的染色方案都指朴素染色方案

可以建立一个正整数到染色方案的一一映射，即可以用一个1到 N 的正整数表示一种染色方案

置换

n 元集合 A 到它自身的一个一一映射，称为 A 上的一个 n 元置换或 n 阶置换,简记为

$$g = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ i_1 & i_2 & \cdots & i_n \end{pmatrix}$$

也可写作

$$g = (i_1 \ i_2 \ \cdots \ i_n)$$

其中 i_1, i_2, \cdots, i_n 为1到 n 的排列

意思是，把第 i_1 点换到第1号位置，第 i_2 个点换到2号位置,.....,第 i_n 个点换到 n 号位置。

一般也将 $g(k)$ 看作某染色方案 k 经过 g 置换后得到的另一种染色方案

置换群

我们把对应同一种染色方案的置换称为同种染色置换。全部同种染色置换构成一个集合 $G = \{g_1, g_2, \dots, g_n\}$

定义 G 上的二元运算 $*$

$$\forall g_i, g_j \in G, g_i * g_j$$

表示先按 g_i 置换，再按 g_j 置换,多数情况等价于 $g_i(g_j(\cdot))$

若 $(G, *)$ 构成一个群

根据群的定义， G 满足一下四条性质

(群本身就是这么定义的)

- 封闭性

$$\forall g_i, g_j \in G, g_i * g_j \in G$$

置换 g_i, g_j 经过 $*$ 操作后,结果仍是置换

- **结合律**

$$\forall g_i, g_j, g_k \in G, (g_i * g_j) * g_k = g_i * (g_j * g_k)$$

注

但是其不满足交换律:

$$\begin{aligned}(2, 3, 1) * (2, 1, 3) &= (3, 2, 1) \\ (2, 1, 3) * (2, 3, 1) &= (1, 3, 2)\end{aligned}$$

- **单位元**

$$\exists e \in G, \forall g \in G, e * g = g$$

注

单位元满足交换律 $e * g = g * e = e$

- **逆元**

$$\forall g \in G, \exists g^{-1} \in G, g * g^{-1} = g^{-1} * g = e$$

注

单位元的逆元显然就是自身,有时也会有其他元素的逆元是其自身

不动点集

对于任意染色方案 k, G 中一定存在一些元素满足 $g(k) = k$

设所有满足 $g(k) = k$ 的同种染色置换构成 k 的不动点集, 用 Z_k 表示

可以证明 $(Z_k, *)$ 构成一个群

- 结合律显然 绝对不是因为我懒得证了
- 单位元

$$\begin{aligned}\therefore \exists e &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix}, e(k) = k \\ &\therefore e \in Z_k \\ \therefore \exists e &\in Z_k, \forall g \in Z_k, e * g = g\end{aligned}$$

- 封闭性

$$\forall g_o, g_p, g_q \in Z_k$$

$$g_o * g_p(k) = g_o(g_p(k)) = g_o(k) = k = g_q(k) \in Z_k$$

(我自己证的, 可能有问题)

- 逆元显然 绝对不是因为我根本不会证

等价类

对将 G 中的所有元素分别作用于 k , 得到 k 的等价类, 用符号 E_k 表示

$E_k = \{g_1(k), g_2(k), \dots, g_s(k)\}$ 包含全部本质上和 k 相同的朴素染色方案

特别注意, $g_1(k), g_2(k), \dots, g_s(k)$ 中存在一些相同的数, 应当剔除重复的结果, 得到 E_k

设 $E = \{k_1, k_2, \dots, k_m\}$, 显然有 $E = E_{k_1} = E_{k_2} = \dots = E_{k_m}$

我们最终要计算有多少种本质不同的染色方案, 其实就是要计算一共有多少个不同的等价类。

结论

结论1

十分神奇

$$\forall i \in, |G| = |E_k| \cdot |Z_k|$$

证明过程见群论引用链接 绝对不是因为我懒得打字子

这个结论证明了, 对一个等价类 $E = \{k_1, k_2, \dots, k_m\}$, 有 $\sum_{i=1}^m |Z_{k_i}| = |G|$

Burnside引理

在此令 $[p]$ 表示命题 p 的正误

$$[p] = \begin{cases} 1, p \text{ 为真} \\ 0, p \text{ 为假} \end{cases}$$

构造一个函数

$$\forall g \in G, x \in \{1, 2, \dots, N\}, f(g, x) = [g(x) = x]$$

这是一个典型的用于计数的函数

设

$$h(g_i) = \sum_{k=1}^N f(g_i, k)$$

即满足 $g_i(k) = k$ 的染色方案个数。那么最终答案

$$ans = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s h(g_i)$$

其中 $s = |G|$

即

每种置换下产生不动点数量的平均数

记笔记,要考!

正片开始

好啦,我们终于可以开始思考最开始的问题了

先来看一个简单版

烷基计数

[LOJ #6185 烷基计数 传送门](#)

[LOJ #6185 烷基计数 加强版 加强版 Pro-Max 传送门](#)

[引用题解](#)

题意分析

(首先你要知道这是求烷基而不是烷烃)

将烷基简化为键线式

读完后你就会发现,其实就是

求"儿子数不超过3的有根树"个数

注

1. 儿子数不超过3

以烷基和外界相连的第一个碳为根节点

每个节点度数不超过4(简单理解为,每个碳最多有4个键)

每个节点的子树数量不超过3(简单理解为,每个节点都要和父亲节点相邻,根节点也不例外,所以要减掉一条边 $4 - 1 = 3$)

2. 有根树

因为根节点有一条特殊的"用来与外界连接"的边

所以**根节点是特殊的**

(可以理解为根节点的碳被同位素标记了)

所以即使以不同的节点作为根节点

(注意这里是将其看作根节点建树,而不是真的将其作为跟腱点)

得到了拓扑形状相同的树,也应**算作不同**

到此为止,化学部分全部结束

题解

令数列 a 中 a_i 表示有 i 个碳的同分异构体数量

直接上生成函数

$$F(x) = \sum a_i x^i$$

当两棵树同构的时候,意味着

1. 两棵树的节点数相同

设每棵树的节点数均为 n

则每棵树的同分异构体数量为

$$[n]F(x)$$

如果忘了生成函数的自行面壁

2. 两棵树的拓扑结构完全形同

若将两棵树看作一个**整体**

则整体"同分异构体"的数量和"其中每一棵树"**完全相同**

但是,整体的节点数量却翻倍

所以整体的生成函数 $F'(x)$

也就是以 $\left[\begin{array}{c} \text{不同节点数量(当然是偶数)构成的整体} \\ \text{的} \\ \text{同分异构体数量} \end{array} \right]$

为系数 a 的生成函数

原谅我使用了矩阵格式

这个生成函数 $F'(x)$ 和"拓扑结构相同的那两棵树"的生成函数 $F(x)$ 应满足

$$\forall i, [2i]F'(x) = [i]F(x)$$

即

$$F'(x) = F(x^2)$$

别急,慢慢解释

因为生成函数的每一个 $a_i x^i$ 表示

"使用了 i 个碳的烷基,一共有 a_i 种不同的同分异构体"

而"整体"使用了两倍的节点,和单个烷基达到的效果("效果"指的就是"同分异构体数量",也就是我们要求的東西)相同

即 i 翻倍而 a_i 不变

可以理解为将 x 的指数向后"推"一倍,刚好 x^2 可以达到这个效果

而对于两颗不同构的树

1. 他们整体的生成函数应该满足

$$F'(x) = F_1(x) \cdot F_2(x)$$

因为当两棵树的节点数分别为 a, b 时

他们会对"整体"生成函数的 x^{a+b} 产生贡献

因为两棵树异构,即 $a \neq b$,所以而贡献恰好为两棵树此时"同素异形体"数量的乘积

可理解为,两棵树的每一个同素异形体的组合,都在整体上会产生新的可能

来看看我们要求的"烷基计数"

将目光盯在根节点上,听我描述

他有3个儿子并且他有3个儿子并且他有3个儿子并且他有3个儿子并且他有3个儿子并且他有3个儿子并且他有3个儿子.....

你肯定会问

如果有一颗子树节点数是0,啥都没有,那他的儿子数不久比3小吗?

我们就把这个儿子看成一颗空树~

题目要求不同构,考虑用*Burnside*来计数

考虑同构的总方案数为**每种置换下的不动点个数的平均值**

前面学的是不是用上了?

现在我们将所求转化为 **"每种置换下的不动点个数"**

仍然盯着根节点,考虑他三个儿子(1, 2, 3)的置换

1. 对于置换

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

因为这种置换本质上没有改变树的拓扑结构

任何拓扑结构在这种置换下永远都是不动点

所以,不动点的个数就是所有拓扑结构的可能总数

也就是3个子树所有可能所有组合 $F(x) \cdot F(x) \cdot F(x) = F(x)^3$

2. 对于置换

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

同理,有两个树是同构的,不动点的个数是 $3F(x) \cdot F(x^2)$

要 $\times 3$ 是因为有3种置换

3. 对于置换

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

同理,三个子树是同构的,方案数是 $2 \cdot F(x^3)$

现在**每种置换下的不动点个数**求出来了

算一下平均数,也就是总方案数

$$\frac{A^3(x) + 3A(x)A(x^2) + 2A(x^3)}{1 + 3 + 2} = \frac{A^3(x) + 3A(x)A(x^2) + 2A(x^3)}{6}$$

这就是不考虑根节点,只考虑根节点以下的节点时的生成函数

当考虑根节点时, 总体节点数 $+1$, 所有 x 的指数需要后移一位

并且当 $i = 0$ 时, 没有节点, 但确实要算是有一种可能(我们可以认为, 当 $a_0 = 0$ 时, 这个烷基就是一个氢, 他的唯一——一个电子与外界形成共价键), 所以 $a_0 = 1$

可列出方程

$$A(x) = 1 + x \frac{A^3(x) + 3A(x)A(x^2) + 2A(x^3)}{6}$$

我们要求的就是 $A(x)$

利用牛顿迭代法 绝对不是因为我懒得写道前置知识里

求

$$F(A(x)) = 1 - A(x) + x \frac{A^3(x) + 3A(x)A(x^2) + 2A(x^3)}{6}$$

的 0 点

然后套牛顿迭代法的板子就行了

注

原文中有

发现牛顿迭代求出前 $x^{\frac{n}{2}}$ 的系数的时候, $x, A(x^2), A(x^3)$ 是已知的,

将它们看成常数

$$\text{那么 } F'(A(x)) = x \frac{3 \cdot A^2(x) + 3 \cdot A(x^2)}{6} - 1$$

并未看懂

毕竟我也没学过牛顿迭代法

再看一道铺垫题

没错现在还不能开始做烷烃计数

烯烃计数

[洛谷 P6597 烯烃计数](#)

[洛谷题解](#)

误·正片开始

题意分析

烯烃,指的是单烯烃

想象一下,把烯烃的那个双键都断掉,这样你就得到了两个"烷基"

等一下,再仔细想想,这两个烷基好像有点不一样,因为他们的根节点只能有两个儿子(因为4个化学键,有连个被烯烃的双键占用了)

但这也没有关系,我们可以将这个"烷基"转化为

“根节点度数最多为2,其他节点度数最多为3的有根树”计数问题

由因为我们已经求出了烷基计数的生成函数(也就是断开双键后,形成的两颗子树的子树)

只考虑"根节点度数最多为2"的这两颗树,他们的生成函数可以模仿烷基计数写出

$$\begin{aligned} &\text{令 } F(x) \text{ 表示烷基的生成函数} \\ &G(x) \text{ 表示断开双键后, 形成每棵子树的生成函数} \\ &G(x) = x \frac{F^2(x) + F(x^2)}{2} \end{aligned}$$

忘了生成函数怎么写的回去面壁

与烷基计数不同的是, $G(x)$ 的0次项,即 $[0]G(x)$ 等于0,而不是1,这是因为当这颗子树的节点数量为0时,无法形成烯烃的双键(废话,没有碳原子怎么成键),所以当碳原子数为0时

$$[0]G(x) = 0$$

然后再用牛顿迭代法进行计算虽然我不会

不错,我们已经解决了烯烃计数的一半

接下来就要处理两个子树叠加的情况了

$$\begin{aligned} &\text{令 } G(x) \text{ 表示断开双键后, 形成每棵子树的生成函数} \\ &P(x) \text{ 表示烯烃的生成函数} \\ &P(x) = \frac{G^2(x) + G(x^2)}{2} \end{aligned}$$

没错,这两个生成函数基本一致

只不过少了个 x ,这是因为烯烃直接将两个子树拼接在一起,不会用到额外的节点,所以不需要将系数平移

没看懂的从烷基计数开始

继续牛顿迭代

寄

然后可以快快乐乐地开始写**烷烃计数**啦!

烷烃计数

洛谷 P6598 烷烃计数

洛谷题解

参考链接

真·正片开始

题意分析

这道题不同于烷基计数的地方在于,这颗树没有任何一个节点是特别的(可以认为,没有任何一个节点被同位素标记),所有节点是等价的

综上所述,本问题可转化为求:

n 个节点的无标号无根树(每个节点的度数 ≤ 4)的不同构树个数

对于无根树,我们采用这棵树的重心作为根节点,可以将题目转化为

“根节点度数 ≤ 4 ,根节点子树均为‘烷基’”的树上计数问题

类比烯烃计数由**烷基计数**的生成函数 $F(x)$ 写出我们所求树的生成函数

令 $F(x)$ 表示烷基的生成函数

$L(x)$ 表示烷烃的生成函数

$$L(x) = x \frac{F^4(x) + 6F^2(x)F(x^2) + 8F(x)F(x^3) + 3F^2(x^2) + 6F(x^4)}{24}$$

注

这里你大概可以理解为什么要使烷基计数的 $[0]F(x) = 0$ 了

因为我们会将空烷基(即一个氢)作为一个可以存在的子树

你以为这就结束了? 不不不~

别忘了,我们使用了树的重心作为根节点,可是有的树有两个重心啊!

我们需要去重

为什么去重?

当有两个重心时

如果这两个重心等价，则分别以他们作为根节点，形成的树是完全形同的，我们只会计算一次

可如果这两个重心不等价，则分别以他们作为根节点，会形成完全不同的树，被我们计算两次，需要去掉其中一次

但是两个重心且不等价的生成函数很难求出，所以采用容斥原理，即

$$\begin{aligned} & \text{当有两个重心时} \\ \text{不等价情况} &= \text{有两个重心的总体情况} - \text{两个重心等价的情况} \end{aligned}$$

由此推导可知

$$\begin{aligned} & \text{令 } Q(x) \text{ 表示最终所求：烷烃计数的生成函数} \\ & N(x) \text{ 表示有两个重心时，烷烃的生成函数} \\ & M(x) \text{ 表示有两个重心且等价时，烷烃的生成函数} \\ & G(x) = L(x) - N(x) + M(x) \end{aligned}$$

仔细观察发现，不得了啊！

因为树的两个重心一定相邻，所以其连边是一条特殊边，计算方法和烯烃计数简直一摸一样，即将两个无标号有根树(烷基)拼接在一起

得到

$$N(x) = \frac{(F(x) - 1)^2 + [F(x^2) - 1]}{2}$$

减1也是因为零个碳原子无法成键

$M(x)$ 就更好求了，这里不多赘述

看不懂的自觉面壁

有

$$M(x) = F(x^2)$$

那么！答案！就是！

$$\begin{aligned}
 G(x) &= L(x) - N(x) + M(x) \\
 &= x \frac{F^4(x) + 6F^2(x)F(x^2) + 8F(x)F(x^3) + 3F^2(x^2) + 6F(x^4)}{24} \\
 &\quad - \frac{(F(x) - 1)^2 + [F(x^2) - 1]}{2} \\
 &\quad + F(x^2)
 \end{aligned}$$

~~再牛顿.....算子~~

写完啦！