

1 母関数

数列 $\{a_i\}_{i=0}^{\infty}$ に対して、以下の形式的冪級数を考える.

$$\sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots .$$

これを数列 $\{a_i\}$ の母関数と呼ぶ. また、母関数 $a(x)$ の x^i の係数を $[x^i] a(x)$ と表すことにする. すなわち、

$$[x^i] \left(\sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i \right) = a_i.$$

1.1 形式的冪級数

形式的冪級数 $a(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i$ と $b(x) = \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^i$ に対して、和と積を以下のように定義する.

$$\begin{aligned} a(x) + b(x) &= \sum_{i=0}^{\infty} (a_i + b_i) x^i. \\ a(x) \times b(x) &= \sum_{i=0}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^i a_j \cdot b_{i-j} \right) x^i. \end{aligned}$$

また、 $a(x) \times c(x) = 1$ となるような $c(x)$ が存在するとき、それを $a(x)^{-1}$ や $1/a(x)$ と表記する. 主要な例として $(1-x)^{-1}$ は以下のように表される.

$$\begin{aligned} \frac{1}{1-x} &= \sum_{i=0}^{\infty} 1 \cdot x^i \\ &= 1 + x + x^2 + \cdots . \end{aligned}$$

実際、 $(1-x)$ との積を考えると以下ようになる：

$$\begin{aligned} (1-x) \times \left(\sum_{i=0}^{\infty} 1 \cdot x^i \right) &= 1 \cdot 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \left(1 \cdot 1 + (-1) \cdot 1 + \sum_{j=2}^i (0 \cdot 1) \right) x^i \\ &= 1. \end{aligned}$$

2 主要な母関数および操作

上で述べた事実から、 $(1-x)^{-1}$ は $a_i = 1$ なる数列の母関数となっていることに注意せよ.

2.1 指数型の数列

$a_i = i$ であるような数列の母関数を考える.

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i &= \sum_{i=0}^{\infty} i \cdot x^i \\ &= x + 2x^2 + 3x^3 + \cdots \\ &= x \cdot (1 + 2x + 3x^2 + \cdots) \\ &= x \cdot \frac{d}{dx} (x + x^2 + x^3 + \cdots) \\ &= x \cdot \frac{d}{dx} (1 - x)^{-1} \\ &= \frac{x}{(1 - x)^2}.\end{aligned}$$

同様の手続きを繰り返すことで, $a_i = i^k$ であるような数列の母関数も得ることができる.

2.2 二項係数

$a_i = {}_n C_i$ であるような数列の母関数を考える. 二項定理より以下のように表せる.

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i &= \sum_{i=0}^{\infty} {}_n C_i \cdot x^i \\ &= (1 + x)^n.\end{aligned}$$

実数 α に対しても以下のようにできる.

$$(1 + x)^\alpha = \sum_{i=0}^{\infty} {}_\alpha C_i \cdot x^i.$$

ただし,

$${}_\alpha C_i = \frac{\alpha^i}{i!} = \frac{\alpha(\alpha-1) \cdots (\alpha-(i-1))}{i(i-1) \cdots 1}.$$

たとえば, 次のようになる.

$$\begin{aligned}\sqrt{1+x} &= (1+x)^{1/2} \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} {}_{1/2} C_i \cdot x^i \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2}-1\right) \cdots \left(\frac{1}{2}-(i-1)\right)}{i!} \cdot x^i \\ &= 1 + \frac{1}{2} \cdot x + \sum_{i=2}^{\infty} \frac{1 \cdot 1 \cdot 3 \cdots (2i-3)}{2^i \cdot i!} \cdot (-1)^{i-1} \cdot x^i \\ &= 1 + \frac{1}{2} \cdot x + \sum_{i=2}^{\infty} \frac{(2i-3)!!}{2^i \cdot i!} \cdot (-1)^{i-1} \cdot x^i.\end{aligned}$$

$(2i-2)!! = 2^{i-1} \cdot (i-1)!$ であることから, さらに変形できる.

$$\begin{aligned}
 \sqrt{1+x} &= 1 + \frac{1}{2} \cdot x + \sum_{i=2}^{\infty} \frac{(2i-3)!!}{2^i \cdot i!} \cdot (-1)^{i-1} \cdot \frac{(2i-2)!!}{2^{i-1} \cdot (i-1)!} \cdot x^i \\
 &= 1 + \frac{1}{2} \cdot x + \sum_{i=2}^{\infty} \frac{(-1)^{i-1} \cdot (2i-2)!}{2^{2i-1} \cdot i! \cdot (i-1)!} \cdot x^i \\
 &= 1 + \frac{1}{2} \cdot x + \sum_{i=2}^{\infty} \frac{(-1)^{i-1}}{2^{2i-1} \cdot i} \cdot 2^{i-2} C_{i-1} \cdot x^i \\
 &= 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^{i-1}}{2^{2i-1} \cdot i} \cdot 2^{i-2} C_{i-1} \cdot x^i.
 \end{aligned}$$

2.3 項のシフト

母関数 $b(x)$ で表される数列 $\{b_i\}_{i=0}^{\infty}$ に対して, 次のように定義される数列 a_i を考える.

$$a_i = \begin{cases} 0, & \text{if } i < k; \\ b_{i-k}, & \text{if } i \geq k. \end{cases}$$

これに対する母関数は以下ようになる.

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i &= \sum_{i=0}^{k-1} 0 \cdot x^i + \sum_{i=k}^{\infty} b_{i-k} x^i \\
 &= \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^{i+k} \\
 &= x^k \cdot \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^i \\
 &= x^k \cdot b(x).
 \end{aligned}$$

2.4 項のシフトの和

母関数 $b(x)$ で表される数列 b_i の項をシフトさせたものたちの和で表される母関数 $a(x)$ を考える.

$$\begin{aligned}
 a(x) &= x^j \cdot b(x) + x^{j+1} \cdot b(x) + \dots + x^{j+k-1} \cdot b(x) \\
 &= (x^j + x^{j+1} + \dots + x^{j+k-1}) \cdot b(x) \\
 &= ((x^j + x^{j+1} + \dots) - (x^{j+k} + x^{j+k+1} + \dots)) \cdot b(x) \\
 &= \left(\frac{x^j}{1-x} - \frac{x^{j+k}}{1-x} \right) \cdot b(x) \\
 &= x^j \cdot \frac{1-x^k}{1-x} \cdot b(x).
 \end{aligned}$$

ところで, この母関数 $a(x)$ に対応する数列 a_i は以下のようにになっている.

$$a_i = b_{i-(j+k-1)} + \dots + b_{i-j}.$$

これは何かの役に立ちそうな形をしているように見える^{*1}.

3 使い道

母関数の主な使い道の一つとして、数列の一般項を求めるというのがある。母関数 $a(x)$ を操作して閉じた式^{*2}を求め、その x^i の係数を見ることで a_i が求められる。よくある例として、Fibonacci 数列および Catalan 数の一般項を母関数を使って求めてみる。

3.1 Fibonacci 数列

Fibonacci 数列 a_i は、以下のように定義される数列である。

$$a_i = \begin{cases} 0, & \text{if } i = 0; \\ 1, & \text{if } i = 1; \\ a_{i-2} + a_{i-1}, & \text{if } i > 1. \end{cases}$$

母関数 $a(x)$ は以下のように表される。

$$\begin{aligned} a(x) &= 0 + 1 \cdot x + \sum_{i=2}^{\infty} a_i x^i \\ &= x + \sum_{i=2}^{\infty} (a_{i-2} + a_{i-1}) x^i \\ &= x + \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^{i+2} + \sum_{i=1}^{\infty} a_i x^{i+1} \\ &= x + x^2 \cdot a(x) + x \cdot (a(x) - a_0 x). \end{aligned}$$

ここで、 $a_0 = 0$ であるから、以下のようにできる。

$$a(x) = \frac{x}{1 - x - x^2}.$$

これを部分分数分解してみる。

$$\begin{aligned} a(x) &= \frac{p}{1 - qx} + \frac{r}{1 - sx} \\ &= p \cdot \frac{1}{1 - qx} + r \cdot \frac{1}{1 - sx} \\ &= p \cdot \sum_{i=0}^{\infty} q^i x^i + r \cdot \sum_{i=0}^{\infty} s^i x^i \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} (p \cdot q^i + r \cdot s^i) \cdot x^i. \end{aligned}$$

よって、 $a_i = p \cdot q^i + r \cdot s^i$ である。部分分数分解の係数比較から p, q, r, s を求め、一般項が得られる。

^{*1} 見えない？ もらう DP で長さ k の区間の和を得る形に似ている。

^{*2} \sum や \dots などを含まない形の式。

3.2 Catalan 数

Catalan 数 a_i は、以下のように定義される数列である.

$$a_i = \begin{cases} 1, & \text{if } i = 0; \\ \sum_{j=0}^{i-1} a_j \cdot a_{i-1-j}, & \text{if } i > 0. \end{cases}$$

母関数 $a(x)$ は定義から以下のように表される.

$$\begin{aligned} a(x) &= a_0 + \sum_{i=1}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^{i-1} a_j \cdot a_{i-1-j} \right) x^i \\ &= a_0 + \sum_{i=0}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^i a_j \cdot a_{i-j} \right) x^{i+1}. \end{aligned}$$

一方, 積の定義から次の表示が得られる.

$$a(x)^2 = \sum_{i=0}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^i a_j \cdot a_{i-j} \right) x^i.$$

これらを比べることで, 以下の等式を得る.

$$a(x) = a_0 + x \cdot a(x)^2.$$

$a_0 = 1$ と二次方程式の解の公式などを用いて,

$$a(x) = \frac{1 \pm \sqrt{1-4x}}{2x}.$$

複号の $+$ を採用した場合, $\lim_{x \rightarrow +0} a(x) = \infty$ より, $a_0 = 1$ であることと矛盾する^{*3}. $-$ の方を採用し, 以下を得る.

$$a(x) = \frac{1 - \sqrt{1-4x}}{2x}.$$

$a(x)$ の x^i の係数を求めるために, $1 - \sqrt{1-4x}$ を展開し, $2x$ で割ることを考える^{*4}.

$$\begin{aligned} 1 - \sqrt{1-4x} &= 1 - \left(1 + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^{i-1}}{2^{2i-1} \cdot i} \cdot 2^{i-2} C_{i-1} \cdot (-4x)^i \right) \\ &= - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^{i-1}}{2^{2i-1} \cdot i} \cdot 2^{i-2} C_{i-1} \cdot (-1)^i \cdot 4^i \cdot x^i \\ &= - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^{2i-1}}{i} \cdot 2^{i-2} C_{i-1} \cdot 2 \cdot x^i \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \frac{2^{i-2} C_{i-1}}{i} \cdot 2 \cdot x^i. \end{aligned}$$

^{*3} 形式的冪級数に対してこの手の操作が許されているのかよくわからない.

^{*4} $1 - \sqrt{1-4x}$ の x^{i+1} の係数を求め, 2 で割ると考えてもよい.

これより,

$$\begin{aligned}\frac{1 - \sqrt{1 - 4x}}{2x} &= \sum_{i=1}^{\infty} \frac{2i-2}{i} C_{i-1} \cdot x^{i-1} \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{2i}{i+1} C_i \cdot x^i.\end{aligned}$$

よって, $a_i = \frac{2i}{i+1} C_i$ を得る.

4 競プロへの応用

上では, 漸化式で表される数列を母関数を用いて求めた. ここでは, 競プロの問題を解くための応用例として, 以下の二つを挙げる. なお, 母関数から冪級数展開をして係数を得る操作が必要となる. それに際して次の等式を覚えておくとよい.

$$\frac{1}{(1-x)^{n+1}} = \sum_{i=0}^{\infty} \binom{n+i}{n} x^i.$$

4.1 和を得る操作の高速化

たとえば, 以下のような和を求めたくなったとする.

$$\sum_{i=0}^{n-1} c_i \cdot \left(\sum_{j=0}^i a_j \cdot b_{i-j} \right).$$

ここで, 数列 a_j, b_j の母関数 $a(x), b(x)$ は得られるとする^{*5}. 内側の和は畳み込みの形をしているので, 次のようにして求められる.

$$\sum_{i=0}^{n-1} c_i \cdot \left([x^i] (a(x) \times b(x)) \right).$$

よって, $a(x) \times b(x)$ の各係数たちが求められるとよい. まず, $a(x)$ および $b(x)$ の閉じた式を求める. そうすると $a(x) \times b(x)$ の閉じた式を計算できるので, それを冪級数展開して係数を調べる^{*6}.

この形であれば高速 Fourier 変換などでも求められそうだけど, $[x^i](a(x) \times b(x))$ が $O(1)$ で求められる状況なら, これの方が \log 一つぶんお得そう.

^{*5} 上の章で述べた指数型だったり二項係数だったり, あるいはそれらを組み合わせるなどしてがんばる.

^{*6} この辺はプログラムではなく紙での計算になりそう. あるいはその手のソフトウェアを使った方が楽かも.

4.2 DP 高速化

$j \geq 0$ に対して以下のように定義される DP を考える.

$$\begin{aligned} dp[0][j] &= 1, \\ dp[i][j] &= \sum_{k=s}^t dp[i-1][j-k]. \end{aligned}$$

なお, $j < 0$ のとき $dp[*][j] = 0$ とする. これについて, $dp[n][m]$ を求めたい.

自明な高速化として, 累積和を用いる方法で $O(nm)$ は達成できるが, 以下では母関数を用いて $O(n)$ で求める方法を紹介する. まず, 以下のように母関数を定義する.

$$a_i(x) = \sum_{j=0}^{\infty} dp[i][j] \cdot x^j.$$

すなわち, $dp[i]$ が一つの母関数に対応する. 目標は, $[x^m] a_n(x)$ を求めることである. いま, 初期条件から以下が成り立つ^{*7}.

$$\begin{aligned} a_0(x) &= \sum_{j=0}^{\infty} dp[0][j] \cdot x^j \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} 1 \cdot x^j \\ &= \frac{1}{1-x}. \end{aligned}$$

さらに, 遷移の条件から以下が成り立つ. 項をシフトしたものを足す形になっていることに注意されたい.

$$\begin{aligned} a_i(x) &= \sum_{j=0}^{\infty} \left(\sum_{k=s}^t dp[i-1][j-k] \right) x^j \\ &= \sum_{k=s}^t \left(\sum_{j=0}^{\infty} dp[i-1][j-k] \cdot x^j \right) \\ &= \sum_{k=s}^t \left(x^k \cdot a_{i-1}(x) \right) \\ &= \left(x^s + x^{s+1} + \dots + x^t \right) \cdot a_{i-1}(x) \\ &= x^s \cdot \frac{1 - x^{t-s+1}}{1-x} \cdot a_{i-1}(x). \end{aligned}$$

^{*7} m 項目以降には関心がないので, 計算しやすい関数を適宜選んでよさそう?

よって、次のようにできる。

$$\begin{aligned}
a_n(x) &= \left(x^s \cdot \frac{1-x^{t-s+1}}{1-x} \right)^n \cdot a_0(x) \\
&= x^{sn} \cdot \frac{(1-x^{t-s+1})^n}{(1-x)^n} \cdot \frac{1}{1-x} \\
&= x^{sn} \cdot \frac{(1-x^{t-s+1})^n}{(1-x)^{n+1}} \\
&= \frac{x^{sn}}{(1-x)^{n+1}} \cdot (1-x^{t-s+1})^n \\
&= \frac{x^{sn}}{(1-x)^{n+1}} \cdot \sum_{k=0}^n (-1)^k \cdot {}_n C_k \cdot x^{k(t-s+1)}.
\end{aligned}$$

求めたいのはこの x^m の係数であり、

$$\frac{a_n(x)}{x^{sn}} = \frac{1}{(1-x)^{n+1}} \cdot \sum_{k=0}^n (-1)^k \cdot {}_n C_k \cdot x^{k(t-s+1)}.$$

の x^{m-sn} の係数を求めればよい。右辺の \sum 中の $x^{k(t-s+1)}$ の係数と、 $1/(1-x)^{n+1}$ を展開したときの $x^{m-sn-k(t-s+1)}$ の係数との積の合計がそれに相当する。上で述べたように、 $1/(1-x)^{n+1}$ の x^i の係数は ${}_{n+i} C_i = {}_{n+i} C_n$ であったから、求める値は結局次のようにできる。

$$\sum_{\substack{0 \leq k \leq n \\ 0 \leq f(k)}} (-1)^k \cdot {}_n C_k \cdot {}_{n+f(k)} C_n.$$

ここで、 $f(k) = m - sn - k(t-s+1)$ である。これは、適当に前処理を行うことで $O(n+m)$ で求められる。