SJÄLVSTÄNDIGA ARBETEN I MATEMATIK

MATEMATISKA INSTITUTIONEN, STOCKHOLMS UNIVERSITET

En Introduktion till Pólyas Enumerationssats

av

Susanne Perneby

2010 - No 9

MATEMATISKA INSTITUTIONEN, STOCKHOLMS UNIVERSITET, 106 91 STOCKHOLM

En Introduktion till Pólyas Enumerationssats

Susanne Perneby

Självständigt arbete i matematik 15 högskolepoäng, grundnivå

Handledare: Boris Shapiro

2010

Sammanfattning

G. Pólya publicerade 1937 en kombinatorisk teori om hur man kan bestämma antalet isomerer av kemiska föreningar med ett givet antal atomer. Denna sats har dock många fler användningsområden och ger stora möjligheter för generaliseringar och vidareutvecklningar i många olika riktningar. Detta arbete ger en kort introduktion till Pólyas enumerationssats och tar upp två exempel på tillämpningsområden. Vi applicerar Pólyas sats på problem så som att bestämma antalet partitioner av ett heltal samt bestämma antalet möjliga färgläggningar av en 3-dimensionell kubs sidor. Vi visar även hur Pólyas sats kan användas på kemiska föreningar.

Tack

Jag vill tacka min handledare Boris Shapiro för all den hjälp och stöd jag har fått under arbetet med att färdigställa denna uppsats. Jag vill även tacka mina vänner Ragnhild Ljunggren och Linda Rottbers för deras hjälp med att korrekturläsa texten.

Innehållsförteckning

1 Introduktion

George Pólya var en ungersk matematiker som föddes 1887 i Budapest. Pólya blev bland annat känd för sin artikel *Kombinatorisch Anzhalbestimmungen für Gruppen, Graphen und Chemische Verbindungen*, vilken publicerades 1937 i tidsskriften *Acta Mathematica*. I artikeln lägger Pólya fram en teori för hur man bland annat kan bestämma antalet isomerer av organiska föreningar (Isomeri är ett begrepp för att olika föreningar kan ha samma molekylform. Dessa skiljer sig då i strukturen och i hur atomerna är ordnade i rymden). Denna kända sats kom att kallas *Pólyas enumerationssats* och kan tillämpas på många fler områden än just bara för kemiska föreningar.

Dock var Pólya inte ensam om denna upptäckt. 1927 publicerade en annan matematiker vid namn John Howard Redfield samma teori, men denna publikation blev inte uppmärksammad utan det skedde först tio år senare när Pólya klev in i den kombinatoriska världen. Satsen kallas därför ibland *Redfield-Pólyas enumerationssats*. Både Pólya och Redfield kom fram till sina resultat genom att generaliserade *Burnsides lemma*, en sats som William Burnside formulerade redan 1911.

Detta arbete tillägnar en kort beskrivning av Pólyas populära och användbara kombinatoriska teori. Först formuleras några viktiga begrepp som följs av Burnsides lemma. Avsnittet med Pólyas teori åtföljs av ett avsnitt med två exempel på tillämpningar. Arbetet avslutas sedan med en sektion om kemiska föreningar och hur Pólyas enumerationssats appliceras på dessa.

1.1 Grupper

Vi ska börja med att definiera vad grupper och fixmängder är för att sedan förklara och definiera ekvivalensklasser, genererande funktioner och grafer lite mer utförligt.

Definition 1.1 *Om G är en icke-tom mängd och $\circ$ är en binär operation på G, $(G, \circ)$ kallas då en grupp om följande villkor är uppfyllda $\big((G,G) \to G\big)$.*

1. *För alla $a, b \in G, a \circ b \in G$.*
2. *För alla $a, b, c \in G, a \circ (b \circ c) = (a \circ b) \circ c$.*
3. *Det existerar $e \in G$ sådan att $a \circ e = e \circ a = a$ för alla $a \in G$.*
4. *För alla $a \in G$ existerar det ett element $b \in G$ sådan att $a \circ b = b \circ a = e$.*

De vanligaste binära operationerna som grupper utgå i från är addition, multiplikation och matrismultiplikation och grupperna definieras sedan som en delmängd av mängden av tal, matriser eller funktioner. En vanlig grupp är mängden av alla heltal under addition (Z,+). En grupp som kommer ha stor betydelse senare i uppsatsen är gruppen för mängden av permutationer på en given ändlig mängd X, denna grupp brukar vanligtvis betecknas S(X).

Definition 1.2 *Givet en grupp G som verkar på en mängd X definieras fixmängden,*

$$F_A \subset G \cdot X$$

som mängden av alla par (g,x) sådan att gx=x där A är en given verkan av G på X.

1.2 Evivalensklasser

Det finns många viktiga relationer som är ekvivalensrelationer, likhet är kanske den viktigaste av dessa. För att definiera vad en ekvivalensrelation är låter vi X vara en mängd och R en relation på X. Om relationen är reflexiv, symmetrisk och transitiv så kallas denna relation för en ekvivalensrelation.

Exempel 1.1 *Låt A vara mängden av räta linjer i planet och låt x och y vara två linjer i A. Då är xPy, om x och y är parallella eller sammanfaller en ekvivalensrelation.*

Vi betecknar nu ekvivalensrelationen på mängden X med $\sim$ och låter x vara ett element. En mängd A_x kallas för *ekvivalensklass* om den bildas genom

$$A_x = \{y \in X; x \sim y\}$$

1.3 Genererande funktioner

Ett viktigt begrepp att förstå inom matematiken innan Pólyas enumerationssats kan formuleras är genererande funktioner. Man kan tänka sig att dessa funktioner omformar talföljder till så kallade vanliga funktioner. Det är vanligt att genererande funktioner används för att få ett svar i kombinatoriska problem, det är speciellt användbart i just enumerationsproblem [Gr03]. Problemen är då formulerade för att bestämma antalet sätt en viss sak kan utföras på. Svaret blir då lika med koefficienten framför exempelvis x^k.

Definition 1.3 *Om talföljden $\{a_k\}_1^\infty$ är given så sägs*

$$G_a(x) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k x^k$$

vara den generande serien till talföljden.

En genererande serie kommer att kallas genererande funktion om serien konvergerar. Följande exempel belyser användandet av just generande funktioner i kombinatoriska problem.

Exempel 1.2 *Problemet vi ska fokusera på är vilken den vanligaste summan är av prickarna på en tärning om den kastas tre gånger. Vi låter Ω vara mängden utfall av ett tärningskast, $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Eftersom tärningen ska kastas tre gånger kommer utfallsrummet att vara*

$$\Omega_u = \Omega\Omega\Omega.$$

Utfallsrummet består alltså av taltrippar (i,j,k) där talen i, j, k ligger mellan 1 och 6. Vi är intresserade av summan av dessa tal så vi låter termen x^k vara händelsen att ett kast blir en k:a.

Det första kastet kommer vara ett tal mellan 1 och 6 och polynomet

$$g(x) = x + x^2 + x^3 + x^4 + x^5 + x^6$$

motsvarar detta. Självklart gäller även detta polynom för de andra två kasten. Den genererande funktionen för de tre kasten motsvara då $G(x) = g^3(x)$

$$G(x) = (x + x^2 + x^3 + x^4 + x^5 + x^6)^3 =$$

$$x^3 + 3x^4 + 6x^5 + 10x^6 + 15x^7 + 21x^8 + 25x^9 + 27x^{10} +$$

$$+27x^{11} + 25x^{12} + 21x^{13} + 15x^{14} + 10x^{15} + 6x^{16} + 3x^{17} + x^{18}. \tag{1}$$

Termen x^3 står för summan 3 och eftersom koefficienten är lika med 1 motsvarar det att det finns 1 sätt att få summan 3, koefficienenten 3 framför x^4 står för att det finns 3 olika sätt att få summan 4 på och så vidare. Svaret på vårt problem blir då potensen till den koefficient som är störst. I detta fall är den största koefficienten 27 och eftersom två termer har denna koefficient blir de två vanligast summorna 10 och 11.

Att polynomet G(x) genereras av tärningskasten kan vara lättare att förstå om man använder olika variabler, x, y och z i polynomen g(x) i stället för samma.

$$G(x, y, z) = g(x)g(y)g(z) = \sum_{i=1}^{6} \sum_{j=1}^{6} \sum_{k=1}^{6} x^i y^j z^k \tag{2}$$

I polynomet (1) så har alla termer med samma gradtal (i+j+k) slagits samman till en enda term, nämligen Ax^{i+j+k} och vi sökte det största värdet på A.

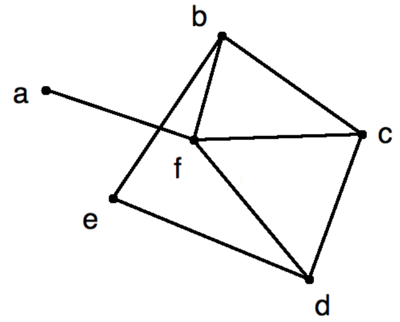
1.4 Element av grafteori

Grafteorin är ett stort och omfattande området inom matematiken. Vi kommer därför inte att ta upp teorin som helhet här, utan vi kommer endast att titta på några definitioner från valda delar som kommer ha betydelse senare i arbetet.

En graf brukar jämföras mer bildligt med en vägkarta. Vi tittar då på distinkta mängder objekt så som städer och vägar. I en matematisk graf så är denna beståendes av en mängd hörn, $V = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ och en mängd kanter $E = \{e_1, e_2, \ldots, e_m\}$. En graf betecknas $G = (V, E)$.

Definition 1.4 *Låt V vara en ändlig icke-tom mängd och låt $E \subseteq V \times V$. Paret (V,E) kallas riktad graf. Om E är symmetrisk med avseende på $V \times V \to V \times V$ kallas grafen oriktad.*

Exempel 1.3 *Vi låter V bestå av hörnen $\{a, b, c, d, e, f\}$ och kanterna $E = \{(a, f), (b, c), (b, e), (b, f), (c, d), (c, f), (d, e), (d, f)\}$. Grafen G = (V,E) ser då ut på följande sätt.*



Definition 1.5 *Låt a,b vara hörn i en graf $G = (V, E)$. En ab-promenad i G är en (loop-fri) ändlig sekvens*

$$a = x_0, e_1, v_1, e_2, v_3, \ldots, e_{n-1}, v_{n-1}, e_n, v_n = b$$

av hörn och kanter i G med start i hörnet a och slut i hörnet b. I promenaden kommer n kanter att ha passerats, $e_i = \{x_{i-1}, x_i\}$ där $1 \leq i \leq n$. Alla ab-promenader där a=b kallas slutna.

En graf vars kanter bara får passeras åt ett håll, till exempel en enkelriktad väg, kallas riktad graf, eller digraf [$Gr03$].

Definition 1.6 *Låt a,b vara hörn i en graf $G = (V, E)$. Om inget hörn passeras mer än en gång i en ändlig sekvens av hörn och kanter i G med start i hörnet a och slut i hörnet b så kallas sekvensen för en ab-stig. En sluten stig kallas cykel.*

Definition 1.7 *Låt $G = (V, E)$ var en graf. G kallas sammanhängande om det finns en stig mellan två godtyckliga hörn i G.*

Definition 1.8 *Låt $G_1 = (V_1, E_1)$ och $G_2 = (V_2, E_2)$ vara två icke-riktade grafer. En funktion f: $V_1 \to V_2$ kallas isomorfism om*

1. *f är en bijektion;*
2. *för alla $a, b \in V_1, \{a, b\} \in E_1$ om och endast om $\{f(a), f(b)\} \in E_2$.*

Om sådan funktion existerar är G_1 och G_2 isomorfa grafer.

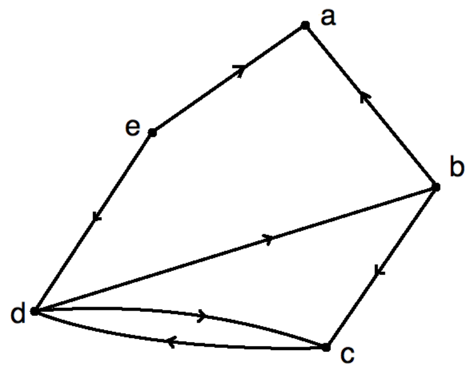
Definition 1.9 *Låt G vara en icke-riktad graf. För varje hörn v i G är graden av v, betecknas deg(v), lika med antalet kanter i G som är bundna till v. En loop i ett hörn räknas som två tillbundna kanter.*

Definition 1.10 *Låt G = (V,E) vara en riktad graf. För varje $v \in V$ är den*

1. *ingående graden av v lika med antalet kanter i G som är bundna till v, betecknas id(v)*
2. *utgående graden av v lika med antalet kanter i G som är bundna från v, betecknas od(v)*

Om grafen innehåller en eller flera loopar, ger varje loop till ett givet hörn v en ökning med 1 till både id(v) och od(v).

Exempel 1.4 *Låt $V = \{a, b, c, d, \}$ och $E = \{(b, a), (b, c), (c, d), (d, c), (d, b), (e, d), (e, a)\}$. De olika ingående och utgående graderna för respektive hörn är då*



id(a)=2 od(a)=0
id(b)=1 od(b)=2
id(c)=2 od(c)=1
id(d)=2 od(d)=2
id(e)=0 od(e)=2

Definition 1.11 *Låt $G = (V, E)$ vara en loop-fri icke-riktad graf. G kallas träd om G är sammanhängade och inte innehåller någon cykel.*

Definition 1.12 *Om G är ett riktat träd, kallas G rotad om det finns ett unikt hörn r, med ingående grad lika med noll.*

1.5 Burnsides lemma

Låt G vara en ändlig grupp som verkar på en ändlig mängd X och X_g vara fixmängden till g, det vill säga alla $x \in X$ så att $gx = x$ där $g \in G$. $|X_g|$ kommer då vara antalet element i X som lämnas oförändrad av g. Burnsides lemma säger att antalet ekvivalensklasser, eller antalet banor, N är lika med det aritmetiska medelvärdet av storleken på fixpunktsmängden

Sats 1.1 (Burnsides lemma) *Antalet ekvivalensklasser, N, är*

$$N = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} |X_g| \tag{3}$$

Bevis Beviset för Burnsides lemma är ganska kort men det bör dock först belysas att

$$\sum_{g \in G} |X_g| = \sum_{x \in X} |G_x|. \tag{4}$$

Att detta är lika fås från att $(g, x) \in G \times X$ och att gx = x. Det gäller även att storleken av G_x, $|G_x|$, är densamma som storleken på hela gruppen G delat på ekvivalensklassen för x.

$$\sum_{x \in X} |G_x| = |G| \sum_{x \in X} \frac{1}{|ekv(x)|} \tag{5}$$

Om vi tittar på en godtycklig ekvivalensklass, E i X så kommer

$$\sum_{x \in E} \frac{1}{|ekv(x)|} = \frac{1}{|E|} + \ldots + \frac{1}{|E|} = |E| \frac{1}{|E|} = 1 \tag{6}$$

och det följer då att

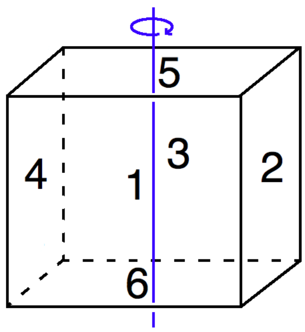
$$\sum_{g \in G} |X_g| = |G| \sum_{x \in X} \frac{1}{|ekv(x)|} = |G| \cdot N. \tag{7}$$

$$N = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} |X_g|. \tag{8}$$

Exempel 1.5 *Det går att använda Burnsides lemma för att räkna ut antalet sätt att färga sidorna på en 3-dimensionell kub i tre färger. Mängden G är då permutationer som roterar sidorna på kuben och X är mängden sidor. Vi färgar alltid alla sidor i varje cykel i permutationerna med samma färg.*

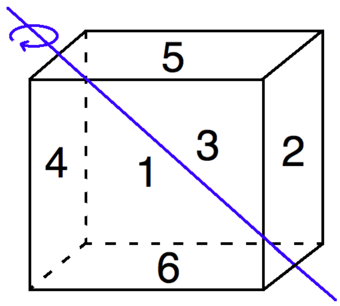
1. *Det finns en rotation i G som lämnar kuben oförändrad,* $(1)(2)(3)(4)(5)(6)$*. Detta medför* 3^6 *olika färgningar.*

2. *När en kub roterar runt en axel som går igenom två motstående sidor kan dessa sidor väljas på 3 sätt. Vi kan rotera kuben* $90°$, $180°$ *och* $270°$.



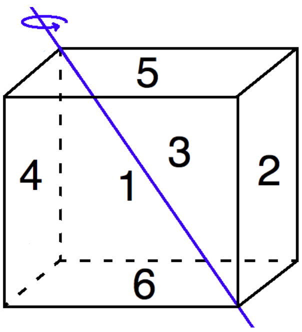
En av $90°$*-rotationerna ger permutationen* $(1234)(5)(6)$ *och antal färgläggningar av denna rotation bli lika med* 3^3*. En* $180°$ *roterar sidorna* $(13)(24)(5)(6)$ *och ger* 3^4 *färgningar. En av* $270°$*-rotationerna är* $(1432)(5)(6)$ *och ger lika många färgningar som* $90°$*. Rotationer med avseende på en sida ger totalt* $3 \cdot 3^3 + 3 \cdot 3^4 + 3 \cdot 3^3 = 3 \cdot 3^4 + 6 \cdot 3^3$ *färgläggningar.*

3. *Kuben roteras nu runt en axel genom två motstående kanter, vilka kan väljas på 6 olika sätt. Vi kan bara rotera kuben* $180°$.



En av dessa rotationer permuteras som $(13)(26)(45)$ *och ger* $6 \cdot 3^3$ *färgningar.*

4. *Slutligen ska vi rotera kuben* $120°$ *och* $240°$ *runt en axel som passerar genom diagonalen på kuben. Det finns 4 olika diagonaler att välja emellan.*



En av $120°$*-rotationerna är* $(126)(345)$ *och en* $240°$*-rotation är* $(126)(345)$. *Detta bli då totalt* $8 \cdot 3^2$ *sätt att färga en kubs sidor på genom att rotera sidorna längs diagonalen.*

Storleken på G är summan av alla dessa rotationer och $|G| = 1{+}3{+}6{+}6{+}8 = 24$. *Ekvivalensklasserna och antal sätt att färga sidorna på i tre färger är*

$$N = \frac{1}{24}(3^6 + 3 \cdot 3^4 + 6 \cdot 3^3 + 6 \cdot 3^3 + 8 \cdot 3^2) = 57 \tag{9}$$

Vi återkommer till det här exemplet senare i arbetet men då som en tillämpning av Pólyas enumerationssats och med n färger istället för tre.

2 Pólyas enumerationsteori

Vi börjar med att införa begrepp som Pólya själv använde sig av då han formulerade sin teori. Vi introducerar först begreppet figurer och betecknar dem med ϕ. Figurerna kommer att ha ett innehåll som kan anta olika former men brukar vara ett positivt heltal eller mer vanligtvis en färg. Anta just nu att figur $\phi^{(\lambda)}$ innehåller k stycken röda, l stycken blåa och m stycken gula bollar. Vi låtar α^{λ}, β^{λ} och γ^{λ} beteckna respektive sorts boll i figur $\phi^{(\lambda)}$. Figuren ϕ^{λ} kommer kunna skrivas som en taltrippel med utseende (k,l,m). Antalet figurer som har samma antal av de olika bollarna, alltså alla figurer som består av (k,l,m) betecknar vi $a_{k,l,m}$. $[\phi]$ är samlingen av de skilda figurerna ϕ', ϕ'',..., $\phi^{(\lambda)}$.

Exempel 2.1 *$\{\alpha, \alpha, \beta, \alpha, \gamma, \gamma\}$ och $\{\beta, \alpha, \gamma, \alpha, \gamma, \alpha\}$ är två skilda figurer men består båda av taltrippeln (3,1,2) och ger då* $a_{3,1,2} = 2$

Den genererande serien för alla dessa möjligheter av figurer kommer, om vi använder variablerna x, y, och z för de olika bollarna att se ut på följande sätt

$$f(x, y, z) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} a_{k,l,m} x^k y^l z^m \tag{10}$$

Pólya definierar även en annan potensserie och denna är på hela $[\phi]$, [Po87].

$$\phi' x^{\alpha_1} y^{\beta_1} z^{\gamma_1} + \phi'' x^{\alpha_2} y^{\beta_2} z^{\gamma_2} + \ldots + \phi^{(\lambda)} x^{\alpha_\lambda} y^{\beta_\lambda} z^{\gamma_\lambda} + \ldots = \sum_{\phi} \phi x^{\alpha} y^{\beta} z^{\gamma}. \tag{11}$$

Vi låter H vara en permutationsgrupp som agerar på en icke-tom ändlig mängd D. Permutationsgruppen H har grad s och ordning h. En permutation i gruppen sägs vara av typen $[j_1, j_2, \ldots, j_s]$ där j_1 är antalet cykler av ordning 1, j_2 av ordning två och så vidare. Att en cykel har ordning k menas med att det finns k stycken tal i cykeln, till exempel är en cykel av ordning 3, tre tal (abc) som permuteras till varandra, a permuteras till b, b permuteras till c och c permuteras till a. Ett tal tillhörandes D kan bara förekomma en gång och då i en av cyklarna, därför följer det att

$$1 \cdot j_1 + 2 \cdot j_2 + \ldots + s \cdot j_s = s \tag{12}$$

Om $h_{j_1, j_2, \ldots, j_s}$ är antalet skilda permutationer av typen $[j_1, j_2, \ldots, j_s]$ så definieras ordningen av H som summan av alla möjliga kombinationer av $h_{j_1, j_2, \ldots, j_n}$

$$h = \sum_{j} h_{j_1, j_2, \ldots, j_s}. \tag{13}$$

Definition 2.1 *Cykelindexet för H är lika med*

$$Z(H; f_1, f_2, \ldots, f_s) = \frac{1}{h} \sum_{j} h_{j_1, \ldots, j_s} f_1^{j_1} \ldots f_s^{j_s} \tag{14}$$

där $f_1, f_2, \ldots, f_s$ är oberoende variabler.

Exempel 2.2 *För att illustrera cykelindex låter vi H vara permutationsgruppen som permuterar mängden $\{1, 2, 3\}$. Det finns totalt $3! = 6$ stycken olika permutationer. Dessa är:*

$$\begin{array}{rcl} \{123\} & = & (1)(2)(3) \\ \{132\} & = & (1)(23) \\ \{231\} & = & (123) \\ \{213\} & = & (12)(3) \\ \{321\} & = & (13)(2) \\ \{312\} & = & (132). \end{array}$$

Det finns bara en permutation som ger 3 stycken cyklar av längd 1 ($h_3 = 1$). Vårt andra h får vi från att det finns 3 stycken permutationer som resulterar i en cykel av längd ett och en cykel av längd två i detta fall är $j_1 = 1$ och $j_2 = 1$ ($h_{1,1} = 3$). Det sista h:et kommer av att det finns 2 stycken med enbart en cykel av längd 3, nu är både j_1 och j_2 lika med noll och j_3 är lika med 1 ($h_{0,0,1} = 2$). För denna permutationsgrupp kommer alltså cykelindexet att vara

$$Z(f_1, f_2, f_3) = \frac{1}{6}(f_1^3 + 3f_1 f_2 + 2f_3). \tag{15}$$

Vi definierar ett nytt matematiskt objekt som kallas *konfiguration*[1]. En konfiguration är en avbildning av en mängd D på en annan mängd R. I vårt fall är mängden R mängden av våra figurer. Om D skulle vara en mängd med identiska lådor skulle antalet konfigurationer vara lika med antalet sätt att lägga en figur i varje låda, samma figur får läggas i flera lådor. En konfigurations innehåll blir summan av vad figurerna i lådorna innehåller. En konfiguration $(\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_s)$ innehåller då (k,l,m) om alla s figurerna $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_s$ innehåller totalt k röda, l blåa och m gula kulor.

Två konfigurationer är ekvivalenta om den ena kan fås från den andra genom att permutera elementen i D. Denna permutation kommer från permutationsgruppen H. Mer bildligt så betyder detta att den ena konfigurationen fås från den andra genom att lådorna roteras. Alla ekvivalenta konfigurationer bildar ett transitivt system, följaktligen så har alla konfigurationer i ett sådant transitivt system samma innehåll, [Po87]. Vi låter nu $A_{k,l,m}$ vara antalet olika transitiva system som innehåller (k,l,m). Den genererande funktionen för dessa transitiva systemen definieras som

$$F(x, y, z) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} A_{k,l,m} x^k y^l z^m. \tag{16}$$

Vi ska nu titta på hur de genererande funktionerna för de transitiva systemen ser ut för två olika permutationsgrupper, först för de symmetriska grupper och sedan för de alternerande grupper.

Den symmetrisk grupp av ordning s, Sym(s) består av alla bijektiva avbildningar från mängden med s element till sig själv med funktionssammansättning[2] som operation. I detta fall är det tillåtet att lägga samma figur i flera lådor i konfigurationerna, repetition av figurer är alltså tillåten. Vi ska nu bestämma alla F_i ($i = \{1, \ldots, s\}$) samtidigt. Vi börjar med att titta på produken

[1] Min översättning, den etablerade engelska terminologin är *configuration*

[2] en funktionssammansättning brukar betecknas med $\circ$, $f \circ g(x) = f(g(x))$

$$(1 + u\phi' x^{\alpha_1} y^{\beta_1} z^{\gamma_1} + u^2 \phi' \phi' x^{2\alpha_1} y^{2\beta_1} z^{2\gamma_1} + \ldots) \cdot$$
$$\cdot (1 + u\phi'' x^{\alpha_2} y^{\beta_2} z^{\gamma_2} + u^2 \phi'' \phi'' x^{2\alpha_2} y^{2\beta_2} z^{2\gamma_2} + \ldots) \cdot \ldots =$$

$$= \prod_{[\phi]} (1 + u\phi x^{\alpha} y^{\beta} z^{\gamma} + u^2 \phi\phi x^{2\alpha} y^{2\beta} z^{2\gamma} + \ldots). \tag{17}$$

I denna produkt står $u^s \phi_1 \cdots \phi_s x^k y^l z^m$ för alla kombinationer av s figurer $\phi_1 \ldots \phi_s$ som innehåller (k, l, m). Följande villkor ska gälla

$$\phi' = \phi'' = \ldots = 1. \tag{18}$$

$A_{k,l,m}$ kommer då nu vara koefficienten framför $u^s x^k y^l z^m$, koefficienten framför u^s är den genererade funktionen $F_s(x, y, z)$. Om vi vidareutvecklar produkten (17) får vi

$$\prod_{[\phi]} (1 - u\phi x^{\alpha} y^{\beta} z^{\gamma})^{-1} = exp\Big(- \sum_{[\phi]} log(1 - u\phi x^{\alpha} y^{\beta} z^{\gamma})\Big) =$$

$$exp\Big(u \sum_{[\phi]} \phi x^{\alpha} y^{\beta} z^{\gamma} + \frac{u^2}{2} \sum_{[\phi]} \phi^2 x^{2\alpha} y^{2\beta} z^{2\gamma} + \ldots)\Big). \tag{19}$$

Med förutsättningen (18) att alla ϕ ska vara lika med 1 kommer (19) att bli

$$1 + uF_1(x, y, z) + u^2 F_2(x, y, z) + \ldots + u^s F_s(x, y, z) + \ldots = \tag{20}$$

$$= \prod_{k=0}^{\infty} \prod_{l=0}^{\infty} \prod_{m=0}^{\infty} (1 + ux^k y^l z^m)^{-a_{k,l,m}} =$$

$$= exp\Big(uf(x, y, z) + \frac{u^2}{2} f(x^2, y^2, z^2) + \frac{u^3}{3} f(x^3, y^3, z^3) + \ldots \Big) =$$

$$= e^{uf(x,y,z)} e^{\frac{u^2}{2} f(x^2,y^2,z^2)} \cdot \ldots =$$

$$= \sum_{j_1=0}^{\infty} \frac{u^{j_1} f(x, y, z)^{j_1}}{j_1!} \sum_{j_2=0}^{\infty} \frac{u^{2j_2} f(x^2, y^2, z^2)^{j_2}}{j_2! 2^{j_2}} \cdot \ldots \tag{21}$$

Om vi nu jämför koefficienterna framför u^s i (20) och (21) så ser vi att

$$F_s(x, y, z) = \frac{1}{s!} \sum_{j} \frac{s!}{j_1! j_2! 2^{j_2} \ldots j_s! s^{j_s}} f(x, y, z)^{j_1} f(x^2, y^2, z^2)^{j_2} \ldots f(x^s, y^s, z^s)^{j_s}. \tag{22}$$

Vi har hittills tillåtit repetition, men det ska vi inte längre göra. Vi låter $B_{k,l,m}$ vara antalet kombinationer av s figurer från $[\phi]$ med (k,l,m) som innehåll och som tidigare definierar vi den genererande funktionen som

$$\sum_{k,l,m} B_{k,l,m} x^k y^l z^m = G_s(x,y,z). \tag{23}$$

Vi utvecklar igen produkten

$$(1 + u\phi' x^{\alpha_1} y^{\beta_1} z^{\gamma_1})(1 + u\phi'' x^{\alpha_2} y^{\beta_2} z^{\gamma_2}) \cdot \ldots = \prod_{[\phi]} (1 + u\phi x^{\alpha} y^{\beta} z^{\gamma}). \tag{24}$$

Som i fallet då repetition av figurer var tillåtet, är antalet kombinationer utan repetition av s figurer med innehåll (k,l,m) lika med koefficienten framför $u^s x^k y^l z^m$. Villkor (18) gäller fortfarande. Detta ger oss

$$1 + uG_1(x,y,z) + u^2 G_2(x,y,z) + \ldots + u^s G_s(x,y,z) + \ldots =$$

$$= \prod_{k=0}^{\infty} \prod_{l=0}^{\infty} \prod_{m=0}^{\infty} (1 + u x^k y^l z^m)^{-a_{k,l,m}} =$$

$$= exp\Big(uf(x,y,z) - \frac{u^2}{2} f(x^2,y^2,z^2) + \frac{u^3}{3} f(x^3,y^3,z^3) + \ldots \Big). \tag{25}$$

Med samma tillvägagångssätt som ovan kommer vidare uträkningar leda fram till

$$G_s(x,y,z) = \frac{1}{s!} \sum_j \frac{s!(-1)^{j_2+j_4+\ldots}}{j_1! j_2! 2^{j_2} \ldots j_s! s^{j_s}} f(x,y,z)^{j_1} f(x^2,y^2,z^2)^{j_2} \ldots f(x^s,y^s,z^s)^{j_2}. \tag{26}$$

Nu i det andra fallet är H den alternerande gruppen av ordning s, Alt(s). Den alternerande gruppen består av alla jämna permutationer av en ändlig mängd. Vi tänker oss nu två stycken konfigurationer C och C', där båda består av s figurer och dessa kommer från $[\phi]$. C och C' måste innehålla samma kombinationer (repetition av figurer är dock tillåtet) av s figurer. Kombinationer med minst en repetition av en figur bildar ett transitivt system medan kombinationer utan repetition bildar två transitiva system med avseende på Alt(s).

Antalet olika transitiva system av konfigurationer med avseende på Alt(s) är då lika med summan av kombinationer med och utan repetition, [Po87]. Det vill säga att den genererande funktionen för icke-ekvivalenta permutationer blir

$$F_s(x,y,z) + G_s(x,y,z). \tag{27}$$

Sammanfattningsvis är antalet permutationer av s objekt och typen $[j_1, \ldots, j_s]$ lika med

$$\frac{s!}{j_1!j_2!2^{j_2}\dots j_s!s^{j_s}}. \tag{28}$$

Cykelindexet för den symmetriska gruppen, Sym(s) kommer då vara

$$\frac{1}{s!}\sum \frac{s!}{j_1!j_2!2^{j_2}\dots j_s s^{j_s}} f_1^{j_1} f_2^{j_2}\dots f_s^{j_s} \tag{29}$$

och för den alternerande gruppen, Alt(s)

$$\frac{1}{s!}\sum \frac{s!(1+(-1)^{j_2+j_4+\dots})}{j_1!j_2!2^{j_2}\dots j_s s^{j_s}} f_1^{j_1} f_2^{j_2}\dots f_s^{j_s}. \tag{30}$$

Vi sätter för Sym(s)

$$f_1 = f(x), f_2 = f(x^2), \dots, f_s = f(x^s)$$

och för Alt(s)

$$f_1 = f(x,y), f_2 = f(x^2,y^2), \dots, f_s = f(x^s,y^s).$$

2.1 Pólyas enumerationssats

Nu har vi alla definitioner och begrepp som behövs för att kunna formulera Pólyas enumerationssats. Pólya utformade följande sats för de två specialfallen, då H är den symmetriska gruppen Sym(s) eller den alternerande gruppen Alt(s).

Sats 2.1 (Pólyas enumerationssats) *Den genererande funktionen för konfigurationen $[\phi]$ som är icke-ekvivalent med avseende på H fås från att ersätta den genererande funktionen av $[\phi]$ i cykelindexet av H.*

$$P_H = Z_H\big(F(x_1,\dots,x_n), F(x_1^2,\dots,x_n^2),\dots,F(x_1^s,\dots,x_n^s)\big). \tag{31}$$

Pólyas enumerationssats fokuserar på antalet särskiljbara färgläggningar av elementen i den mängd som permutationsgruppen verkar på om figurernas innehåll är olika färger i stället för bollar.

Vi har hittills bara tittat på funktioner med tre variabler men det är ingen restriktion utan det kan vara hur många som helst. Att detta är sant ska vi nu visa.

Låt f, g, h vara genererande funktioner till tre samlingar av figurer $[\phi], [\psi]$ och $[X]$. Vi söker den genererande funktionen till (ϕ, ψ, X) om ϕ, ψ och X fås från respektive samling $[\phi]$, $[\psi]$ och [X] oberoende av varandra. Det finns som förut tre sorters bollar i figurerna, röda, blåa och gula. α står för antalet röda, β för antalet blå och γ för antalet gula i ϕ, α' är antalet röda, β' för blå och γ' för gula i ψ och på samma sätt är α'', β'' och γ'' representerade i X. De sökta funktionerna kommer vara potensserien med tre variabler x, y och z. Koefficienten framför $x^k y^l z^m$ står för antalet trippleter med figurer beståendes av k röda, l blåa och m gula bollar, (k, l, m). Varje taltrippel (ϕ, ψ,X) kommer att vara representerade genom produkten $\phi\psi$X. Man får

$$\sum_{[\phi]}\sum_{[\psi]}\sum_{[X]}\phi\psi X x^{\alpha+\alpha'+\alpha''}y^{\beta+\beta'+\beta''}z^{\gamma+\gamma'+\gamma''} =$$

$$\sum_{[\phi]}\phi x^{\alpha}y^{\beta}z^{\gamma}\sum_{[\psi]}\psi x^{\alpha'}y^{\beta'}z^{\gamma'}\sum_{[X]}X x^{\alpha''}y^{\beta''}z^{\gamma''}. \tag{32}$$

Då vi sätter alla variabler $\phi, \phi', \ldots, \psi, \psi', \ldots, X, X', \ldots$ till 1 får vi den genererande funktionen. Detta är en elementär princip som Pólya uttrycker på följande sätt:

Om elementen av en ordnad mängd kan väljas oberoende, då är den genererande funktionen av mängden lika med produkten av de genererande funktionerna för de individuella elementen[3], [Po87].

Vi tänker oss som förut taltripplar av numrera k, l, m och en mängd av alla konfigurationer med (k,l,m). Vi låter C vara en godtycklig konfiguration och G en delmängd till H som lämnar C oförändrat. Identiteten är en sådan permutation och därför kan G aldrig vara tom. Vidare säger vi att g är ordningen av G. Antalet konfigurationer som C är ekvivalent med, med avseende på H är $\frac{h}{g}$. Varje konfiguration är oförändrad under exakt g permutationer av H. Så varje konfiguration som är ekvivalent med C är inkluderad i exakt g termer av summan

$$X_{k,l,m}(S_1) + X_{k,l,m}(S_2) + \ldots + X_{k,lm}(S_s) \tag{33}$$

där $X_{k,l,m}$ är antalet konfigurationer med (k,l,m) som är oförändrade under permutationen S. S är en permutation som transformerar $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_s$ till $\phi_{i_1}, \phi_{i_2}, \ldots, \phi_{i_s}$.

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & s \\ i_1 & i_2 & \cdots & i_s \end{pmatrix}. \tag{34}$$

Eftersom antalet konfigurationer som är C är ekvivalent med, med avseende på H är $\frac{h}{g}$ så kommer det transitiva systemet bidra med $\frac{h}{g}g = h$ delar till summan (33). Alla de olika transitiva systemen ger samma mängd h så

$$X_{k,l,m}(S_1) + X_{k,l,m}(S_2) + \ldots + X_{k,lm}(S_s) = hA_{k,l,m}. \tag{35}$$

Den genererande funktionen vi är ute efter är

$$F(x,y,z) = \sum_{k,l,m}\frac{X_{k,l,m}(S_1) + X_{k,l,m}(S_2) + \ldots + X_{k,l,m}(S_n)}{h} =$$

$$= \frac{1}{h}\sum_{H}\sum_{k,l,m}X_{k,lm}(S)x^k y^l z^m =$$

[3] Min översättning

Alltså,

$$F(x,y,z) = \frac{1}{h} \sum_{j} h_{j_1 \ldots j_s} f(x,y,z)^{j_1} f(x^2,y^2,z^2)^{j_s} \ldots f(x^s,y^s,z^s)^{j_s} \tag{36}$$

där $h_{j_1 \ldots j_s}$ som förut är antalet permutationer av typen $[j_1, \ldots, j_s]$. Detta visar att Pólyas enumerationssats även gäller för en godtycklig permutationsgrupp H och antalet icke-ekvivalenta konfigurationer är lika med koefficienten framför $x^k y^l z^m$ i P_H.

Exempel 2.3 *Antag att konfigurationen är ett pärlhalsband. På halsbandet finns det åtta stycken pärlor, antingen svarta eller vita. Det finns inget spänne på halsbandet så vi kan rotera och vända på det hur vi vill. Figurerna är pärlor, så en figur är antingen svart eller vit och innehåller 1 respektive 0. En konfigurations innehåll blir då antalet svarta pärlor. Vårt D i detta fall kan ses som en mängd av 8 lådor. Problemet är nu att ta reda på hur många icke-ekvivalenta konfigurationer som innehåller n svarta pärlor. Permutationsgruppen H är den dihedrala gruppen* D_8[4].

Vi får att cykelindexet för gruppen D_8 *är lika med*

$$Z(D_8) = \frac{1}{16}\big(f_1^8 + 4f_1^2 f_2^3 + 5f_2^4 + 2f_4^2 + 4f_8\big). \tag{37}$$

Eftersom vi bara har två stycken figurer (svart eller vit pärla) så kommer den genererande funktionen för konfigurationer vara lika med

$$F(x) = 1 + x$$

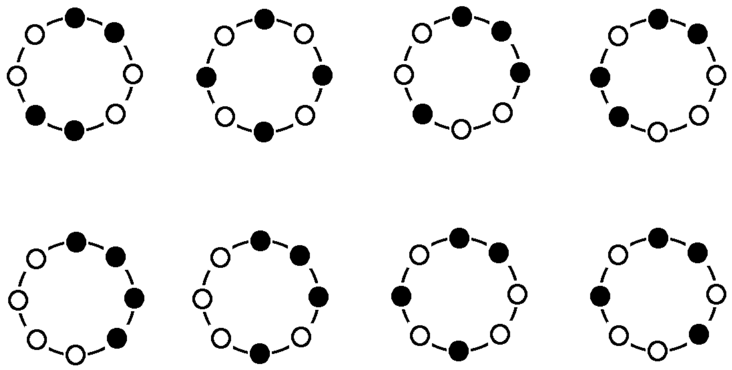
När vi nu substituerar F(x) till cykelindexet får vi

$$P_{D_8} = \frac{1}{16}\big((1+x)^8 + 4(1+x)^2(1+x^2)^3 + 5(1+x^2)^4 + 2(1+x^4)^2 + 4(1+x)^8)\big) =$$

$$1 + x + 4x^2 + 5x^3 + 8x^4 + 5x^5 + 4x^6 + x^7 + x^8.$$

I polynomet ser vi att det till exempel finns 4 stycken sätt att ordna halsbandet med bara 2 svarta pärlor, medan det finns 8 stycken icke-ekvivalenta halsband med 4 svarta pärlor.

[4]En dihedral grupp, D_8 är en symmetrisk grupp för en regelbunden 8-hörning och som avser både rotation och reflexion



3 Exempel av tillämpningar

Det finns flera olika användnings- och tillämpningsområden för Pólyas enumerationssats förutom kemiska föreningar. Men i det här arbetet kommer bara två tillämpningsområden att tas upp. Dessa är hur vi kan räkna ut antalet partitioner av ett heltal och med hjälp av Pólyas sats räkna ut på hur många sätt vi kan färga en kub med n färger i stället för bara tre som vi gjorde i exempel (1.4).

3.1 Antal partitioner av ett heltal

Låt S vara en icke-tom mängd, vi kräver även att D ska vara en delmängd till $\mathbf{Z}$, $D_k = \{1, 2, \ldots, k\}$. Partition av ett heltal n i S är antalet olika summor med värdet n. Summorna får bara bestå av termer tillhörande S och med antalet termer som i D_k. Partitionsfunktionen brukar betecknas P(n) eller P(n;S).

Exempel 3.1 *P(6) är lika med 11, där* $S_k = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. *De olika summorna är*

6	*3+3*	*2+2+2*	*2+1+1+1+1*
5+1	*4+1+1*	*3+1+1+1*	*1+1+1+1+1+1*
4+2	*3+2+1*	*2+2+1+1.*	

Vi börjar med att identifiera våra tidigare använda terminologier. Termerna i de olika summorna jämställer vi med de identiska lådorna som vi nämnt tidigare och låter heltalen i S vara våra figurer. Problemet bli då att bestämma antalet icke-ekvivalenta konfigurationer, där konfigurationerna är summorna.

Vi börjar med att bestämma hur många summor det finns om dessa måste innehålla k termer, mer bestämt på hur många sätt vi kan lägga figurerna i k stycken lådor. Det första vi måste göra är att bestämma cykelindexet för mängden S_k. Cykelindexet får vi som sagt från att identifiera alla olika permutationer av elementen i S. Vi kan lägga vilken som helst av figurerna i vilken låda vi vill och detta medför att den genererande funktionen för konfiguration blir

$$F(x) = \sum_{s \in S} x^s.$$

Ersätter vi f_i med $F(x^i)$ i cykelindexet $Z(S_k)$ får vi konfigurationens sökta potensserie, P_{S_k}. Men eftersom vi är intresserade av att ta reda på antalet summor med olika antal termer behöver vi summera alla alternativ av värdet på k. Så antalet partitioner av n i S, P(n;S) är lika med koefficienten framför x^n i serien

$$\sum_{k=1}^{\infty} Z_{S_k}\Big(\sum_{i\in S} x^i, \sum_{i\in S} x^{2i}, \ldots, \sum_{i\in S} x^{ki}\Big). \tag{38}$$

Exempel 3.2 *Vi vill bestämma antalet partitionen av 3 och då* $S = \{1, 2, 3\}$. *I exempel (2.2) såg vi att alla olika permutationer av (123) var*

$$\begin{array}{rcl} \{123\} & = & (1)(2)(3) \\ \{132\} & = & (1)(23) \\ \{231\} & = & (123) \\ \{213\} & = & (12)(3) \\ \{321\} & = & (13)(2) \\ \{312\} & = & (132). \end{array}$$

Cykelindexet för S_1, S_2, *och* S_3 *blir då*

$$Z_{S_1}(f_1) = f_1,$$

$$Z_{S_2}(f_1, f_2) = \frac{1}{2}(f_1^2 + f_2),$$

$$Z_{S_3}(f_1, f_2, f_3) = \frac{1}{6}(f_1^3 + 2f_3 + 3f_1f_2).$$

Om vi sätter in F(x) i de tre cykelindexen $Z(S_k)$ *får vi den sökta genererande funktionen*

$$P = Z_{S_1}(F(x)) + Z_{S_2}(F(x), F(x^2)) + Z_{S_3}(F(x), F(x^2), F(x^3)) =$$

$$(x + x^2 + x^3 + \ldots) + \frac{1}{2}\big((x + x^2 + x^3 + \ldots)^2 + (x^2 + x^4 + x^6 + \ldots)\big)+$$

$$+\frac{1}{6}\big((x+x^2+x^3+\ldots)^3+2(x^3+x^6+x^9+\ldots)+3(x+x^2+x^3+\ldots)(x^2+x^4+x^6+\ldots)\big) =$$

$$= x + 2x^2 + 3x^3 + \ldots \tag{39}$$

Antalet partitioner av 3 kan vi se från potensserien är lika med 3, dessa är $1 + 1 + 1$, $1 + 2$ *och* 3.

Med hjälp av Pólyas sats kan man även bestämma antalet partitioner om repetition av termer inte är tillåten. Samma figur får då inte längre ligga i flera lådor.

Exempel 3.3 *Partition med olika termer av 6 är 4 st, vilka är*

6	*3+2+1*
5+1	*4+2*

Om vi låter A_k vara den alternerande delgruppen av S_k och definierar $Z_{A_1}(x_1) - Z_{S_1}(x_1) = x_1$ så får vi på samma sätt som beskrivet ovan antalet partitioner, DP(n;S) av ett positivt heltal n i S i k olika termer lika med koefficienten framför x^n i

$$Z_{A_k}\Big(\sum_{i\in S} x^i, \sum_{i\in S} x^{2i}, \ldots, \sum_{i\in S} x^{ki}\Big) - Z_{S_k}\Big(\sum_{i\in S} x^i, \sum_{i\in S} x^{2i}, \ldots, \sum_{i\in S} x^{ki}\Big). \tag{40}$$

Detta är bara ett sätt att bestämma partitioner av n i k olika termer och vi är igen intresserade av alla värden på k. Vilket gör att vi summerar över k.

$$\sum_{k=1}^{\infty}\Bigg(Z_{A_k}\Big(\sum_{i\in S} x^i, \sum_{i\in S} x^{2i}, \ldots, \sum_{i\in S} x^{ki}\Big) - Z_{S_k}\Big(\sum_{i\in S} x^i, \sum_{i\in S} x^{2i}, \ldots, \sum_{i\in S} x^{ki}\Big)\Bigg). \tag{41}$$

Exempel 3.4 *Vi låter i detta exempel $D_k = \{1, 2, \ldots, k\}$ och $S = \{1, 2, 4\}$. Vi ska nu beräkna DP(n;S). Eftersom S bara innehåller 3 positiva heltal och alla mindre än 4 så kan det inte finnas mer än 4 termer i summan.*

$$\sum_{k=1}^{3}\Bigg(Z_{A_k}\Big(\sum_{i\in S} x^i, \sum_{i\in S} x^{2i}, \ldots, \sum_{i\in S} x^{ki}\Big) - Z_{S_k}\Big(\sum_{i\in S} x^i, \sum_{i\in S} x^{2i}, \ldots, \sum_{i\in S} x^{ki}\Big)\Bigg) =$$

$$= Z_{A_1} - Z_{S_1} + Z_{A_2} - Z_{S_2} + Z_{A_3} - Z_{S_2} =$$

$$= (x + x^2 + x^4) + (x + x^2 + x^4)^2 - \frac{1}{2}\Big((x + x^2 + x^4)^2 + (x^2 + x^4 + x^8)\Big) +$$

$$+\frac{1}{3}\Big((x + x^2 + x^4)^3 + 2(x^3 + x^6 + x^{12})\Big) -$$

$$-\frac{1}{6}\Big((x + x^2 + x^4)^3 + 3(x + x^2 + x^4)(x^2 + x^4 + x^8) + 2(x^3 + x^6 + x^{12})\Big) =$$

$$x + x^2 + x^3 + x^4 + x^5 + x^6 + x^7 + \ldots$$

.

Detta betyder att det bara finns en partition för varje $n \leq 7$. Dessa är

1	*1+2=3*	*1+2+4=7*
2	*1+4=5*	
4	*2+4=6.*	

3.2 Antal sätt att färga sidorna på en 3-dimensionell kub

Vi ska titta lite närmare på exempel (1.4) som handlade om antalet sätt att färga en kubs sidor. Vi använde då tre färger och applicerade Burnsides lemma på problemet. Vi ska nu stället applicera Pólyas enumerationssats som är en generalisering av lemmat.

I exempel (1.5) gick vi igenom de olika rotationerna av en kub och om vi sammanfattar detta och lägger till vilka cykelstrukturer de har får vi

Identiteten
Grad: 0°, Exempel: (1)(2)(3)(4)(5)(6), Cykelstruktur: f_1^6

Rotation med avseende på en sida
Grad: 90°, Exempel: (1234)(5)(6), Cykelstruktur: $3f_1^2 f_4$
Grad: 180°, Exempel: (13)(24)(5)(6), Cykelstruktur: $3f_1^2 f_2^2$
Grad: 270°, Exempel: (1432)(5)(6), Cykelstruktur: $3f_1^2 f_4$

Rotation med avseende på en kant
Grad: 180°, Exempel: (13)(26)(45), Cykelstruktur: $6f_2^3$

Rotation med avseende på ett hörn
Grad: 120°, Exempel: (126)(345), Cykelstruktur: $4f_3^2$
Grad: 240°, Exempel: (162)(354), Cykelstruktur: $4f_3^2$

Cykelindexet för alla rotationer tillsammans bli lika med summan av respektive cykelstruktur

$$Z = \frac{1}{24}(f_1^6 + 6f_1^2 f_4 + 3f_1^2 f_2^2 + 6f_2^3 + 8f_3^2). \tag{42}$$

Om vi jämför resultatet i exempel (1.5) med vårt cykelindex, Z ser vi att dessa är lika om vi ersätter f_i med 3.

Figurerna i detta fall är färgerna och sidorna är lådor. Den generaliserade funktionen för färgerna är

$$F(x_1, \ldots, x_i) = x_1 + x_2 + x_3 + \ldots + x_i \tag{43}$$

där i är antalet färger, $i = \{1, 2, \ldots\}$. Om vi ska använda tre färger som i exempel (1.5) är $F(x_1, \ldots, x_i)$

$$F(x, y, z) = x + y + z$$

och ersätter vi f_i med $F(x^i, y^i, z^i)$ i Z får vi

$$P(x, y, z) = \frac{1}{24}\big((x + y + z)^6 + 6(x + y + z)^2(x^4 + y^4 + z^4) +$$

$$+3(x + y + z)^2(x^2 + y^2 + z^2)^2 + 6(x^2 + y^2 + z^2)^3 + 8(x^3 + y^3 + z^3)^2\big) =$$

$$= z^6 + yz^5 + xz^5 + 2y^2z^4 + 2xyz^4 + 2x^2z^4 + 2y^3z^3 + 3xy^2z^3 + 3x^2yz^3 +$$

$$+2x^3z^3 + 2y^4z^2 + 3xy^3z^2 + 6x^2y^2z^2 + 3x^3yz^2 + 2x^4z^2 + y^5z + 2xy^4z + 3x^2y^3z +$$

$$+3x^3y^2z + 2x^4yz + x^5z + y^6 + xy^5 + 2x^2y^4 + 2x^3y^3 + 2x^4y^2 + x^5y + x^6.$$

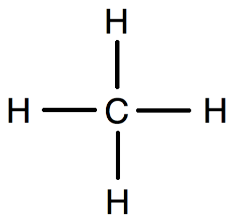
Här ser vi till exempel att det finns ett sätt att färga alla sidorna med färg z, y eller x, 6 sätt att färga kuben med 2 sidor av vardera färg. Sätter vi $x = y = z = 1$ får vi att det finns totalt 57 ($P(1, 1, 1) = 57$) sätt att färga sidorna med tre färger, vilket var resultatet i exempel (1.5).

4 Kemiska föreningar

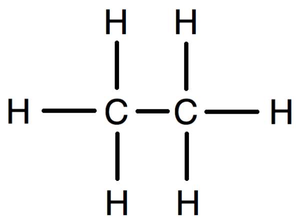
Som det nämnts tidigare så var det Pólyas mål att bestämma antalet isomerer till en given kemisk förening. Dessa kemiska föreningar kan ses som grafer. Graferna som vi ska titta på i det här avsnittet är alltid loop fria och sammanhängande. Vi ska tänka oss att hörnen är atomer och kanterna bindningar. Så varje bindning har alltid en atom i vardera ände. Exempel på en graf som vi kommer att titta på här kallar Pólya *CH-graf.* En CH-graf är en graf som enbart består av hörn med antingen grad 4, $deg(v) = 4$ eller grad 1, $deg(v) = 1$. Inom kemin så är ett hörn med grad 4 exempelvis en kolatom som binder sig till fyra andra atomer och hörn med grad 1 är väteatomer.

Alkaner är en klass av kemiska föreningar som har den kemiska formeln C_nH_{2n+2} vilket är just CH-grafer med n hörn av grad 4 och 2n+2 hörn av grad 1.

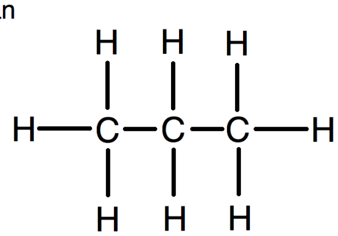
Exempel 4.1 *Några exempel på alkaner är metan, etan och propan. Dessa har formlerna* CH_4*,* C_2H_6 *och* C_3H_8 *och dessa ser ut på följande sätt.*



Metan



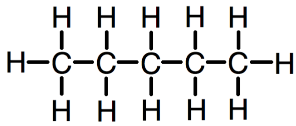
Etan

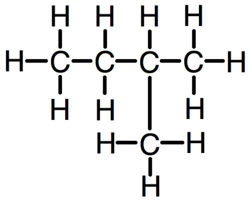


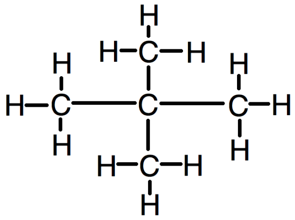
Propan

För ett givet n finns det flera olika sätt att ordna kolatomerna på och dessa olika sätt kallas isomerer. Som nämndes i inledningen är isomerer föreningar med samma antal atomer och typ men med olika struktur. I grafteorin skulle isomerer vara grafer med samma antal hörn men med förgreningar på olika ställen. Det intressanta för en kemist är hur kolatomerna är ordnade.

Exempel 4.2 *Om n är lika med 5 så blir den kemiska formeln* C_5H_{12}*. Men det finns tre olika sätt att ordna kolatmoerna på så att dessa inte är isomorfa.*





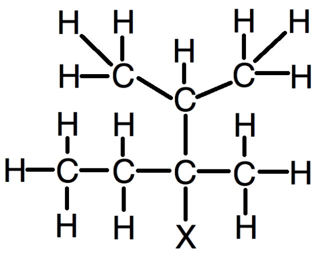


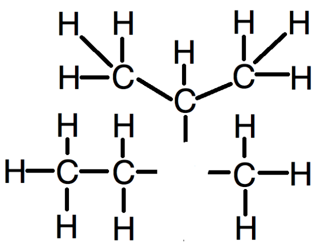
En alkan är som ett träd inom grafteorin. Om vi låter trädet vara rotad blir den kemiska formulan istället C_nH_{n+1}. Föreningen saknar då en väteatom. Man kan ersätta den borttagna väteatomen med en OH-grupp (en syre- och väteatom) så blir alkanen en alkohol och får då formeln $C_nH_{2n-1}OH$ istället. Men OH-gruppen skulle också kunna vara något annat, så för att göra det enklare använder vi X för den ersättande gruppen.

Vi ska räkna hur många konfigurationer det finns av en CH-graf där ett väte har blivit ersatt med X. Vi låter A_n vara antalet sådana alkaner med exakt n kolatomer. Den genererande funktionen för denna talserie är

$$A(x) = A_0 + A_1x + A_2x^2 + \dots \tag{44}$$

Vi tänker oss att den kolatom som X:et är bundet till är roten i ett träd. Till denna kolatom finns det tre till bindningar. Vi tänker oss sedan att roten är X:et i tre andra mindre föreningar.





Vi får alltså ett problem bestående av tre lådor och en mängd alkaner som är våra figurer. Gruppen i fråga är den cykliska gruppen C_3[5], då eftersom de tre bindningar är stumt fästa i kolatomen som är vår ursprungsrot, [Re87]. Cykelindexet för denna grupp blir

$$Z(C_3) = \frac{1}{3}(f_1^3 + 2f_3). \tag{45}$$

Nu när vi applicerar Pólya's enumerationssats och sätter in A(x) i cykelindexet, $Z(C_3)$ får vi

$$\frac{1}{3}(A(x)^3 + 2A(x_3)) \tag{46}$$

Detta är bara ett uttryck för de tre mindre föreningarna. Vi måste även räkna med kolatomen som är våran rot för att få hela konfigurationens räknande potensserie. Detta gör vi genom att lägga till ett x till (46)

$$P(C_3) = \frac{x}{3}(A(x)^3 + 2A(x^3)) =$$

$$= \frac{x}{3}\big((A_0 + A_1x + A_2x^2 + \ldots)^3 + 2(A_0 + A_1x^3 + A_2x^6 + \ldots)\big) \tag{47}$$

Antalet isomerer till ett givet n är följdaktligen koefficienten framför x^n.

[5] En grupp kallas cyklisk om det finns ett element $x \in G$ sådan att för varje $a \in G$, $a = x^n$ för något $n \in \mathbf{Z}$

5 Referenslista

Burnside. W, *Theory of groups of finite*, Second edition, Cambridge (1911); Reprinted New York (1955), s 191.

De Bruijn. N.G, *Color Patterns That Are Invariant under a Given Permutation of the Colors*, Journal of Combinatorial Theory, 2: (1967), 418-421.

Grimaldi. R.P, *Discrete and combinatorial mathematics*, Fifth edition, Pearson: Addison-Wesley (2003), s 514-517, 526, 530 och 581.

Harary. F. Palmer E. M, *Graphical enumeration*, New York: Academic Press (1973), s 48.

Pólya. G, Read. R.C, *Combinatorial Enumeration of Groups, Graphs and Chemical Compounds*, New York: Springer-Verlag (1987), s 10-20 och 38.

Read. R.C, *Pólya's Theorem and Its Progeny*, Mathematical Association of America, 60 (5), 275-282.

Redfield. J Howard, *The Theory of Group-Reduced Distributions*, American Journal of Mathematics, 49 (3), (1927), 433-455.

Wu. X, Chao .C *An Application of Pólya's Enumeration Theorem to Partitions of Subsets of Positive Integrers*, Czechoslovak Mathematical Journal, 55 (130), 611-623.