

Производящие функции в задаче о димерах на прямоугольных сеточных графах¹

А.М. Караваев, С.Н. Перепечко

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

Поступила в редколлегию 18.11.2013

Аннотация—Обсуждаются способы получения и свойства производящих функций, возникающих при подсчёте количества совершенных паросочетаний в семействах прямоугольных сеточных графов. Показано, что зависимость порядков рекуррентных соотношений от ширины решётки не во всех случаях согласуется с гипотезой Стенли. На примере параметра «молекулярная свобода» продемонстрирована возможность его вычисления с высокой точностью из небольшого числа производящих функций.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: задача о димерах, подсчёт паросочетаний, производящие функции, молекулярная свобода.

1. ВВЕДЕНИЕ

С точки зрения перечислительной комбинаторики классическая задача о димерах сводится к подсчёту совершенных паросочетаний в семействах сеточных графов $P_m \times P_n$. Уникальность данной задачи среди множества других решёточных моделей статистической механики состоит прежде всего в том, что для двухпараметрического семейства графов удаётся явно выписать решение непосредственно через параметры семейства m и n .

Впервые решение задачи о димерах было независимо найдено сразу несколькими исследователями более полувека назад. Используемая в этих работах техника построения пфаффовый ориентации существенным образом опиралась на планарность рассматриваемых графов. Однако, несмотря на то, что ещё в исследованиях раннего периода отмечалась возможность обобщить метод пфаффианов на некоторые другие семейства графов, каких-либо систематических подходов к решению задачи о димерах в рамках указанного метода так и не было предложено. Анализ литературных источников приводит автора обзора [1] к следующему выводу:

A folklore in lattice statistics states that close-packed dimers can always be enumerated for two-dimensional lattices. Indeed, the seminal works of Kasteleyn [2] and Fisher and Temperley [3, 4] on the simple-quartic lattice produced the first exact solution. However, a search of the literature indicates that very little else has appeared in print on other lattices.

Следует отметить и то обстоятельство, что совершенные паросочетания соответствуют предельному случаю решётки, полностью заполненной димерами. Для исследования более реалистичных физических моделей чрезвычайно важным оказывается наличие методов подсчёта и других видов паросочетаний. К сожалению, в силу своей специфичности метод пфаффианов в принципе не пригоден для анализа моделей типа мономер-димер и других обобщений задачи о димерах.

¹ Работа выполнена при поддержке программы стратегического развития Петрозаводского государственного университета

Актуальность развития альтернативных способов подсчёта, свободных от ограничений метода пфаффианов, делает почти очевидной попытку проанализировать задачу о димерах с помощью производящих функций – классического аппарата перечислительной комбинаторики. Существуют различные приёмы нахождения производящих функций, среди которых наиболее перспективным нам представляется метод матрицы переноса. Все упомянутые выше ограничения являются несущественными для этого метода, однако он применим лишь к однопараметрическим семействам графов. Если зафиксировать один из параметров решётки, который в дальнейшем будем обозначать через m , то задача о димерах сводится к вычислению набора производящих функций $G_m(x)$ для каждого значения m .

Приступая к выполнению данной работы, авторы преследовали две основные цели. Во-первых, выяснить каким образом разрешимость рассматриваемой модели проявляется в свойствах производящих функций $G_m(x)$. Обнаружение аналогичных или структурно близких свойств в других семействах решёточных графов может не только стать весомым аргументом в пользу разрешимости задачи о димерах для данного семейства, но и привести к разработке более эффективных алгоритмов нахождения производящих функций.

Вопросы оптимизации алгоритмов оказываются крайне важными, поскольку задача подсчёта количества совершенных паросочетаний в двудольных графах принадлежит классу сложности $\#P$ -complete. По этой причине вряд ли можно рассчитывать на получение большого набора функций $G_m(x)$. Данное замечание поясняет интерес ко второй цели работы – демонстрации того, что важнейшие свойства модели могут быть извлечены из производящих функций, соответствующих весьма ограниченному диапазону изменения параметра m .

2. ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ И РАНЕЕ ИЗВЕСТНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Поскольку в графах с нечётным числом вершин не может быть совершенных паросочетаний, то, по крайней мере, один из параметров рассматриваемого семейства должен быть чётным. В данной работе такие вырожденные случаи обсуждаться не будут, что позволяет обозначить одним и тем же символом $K_{m,n}$ число совершенных паросочетаний в графах $P_m \times P_n$ при чётных значениях m и в графах $P_m \times P_{2n}$ при нечётных m . По общепринятому соглашению $K_{m,0} = 1$.

При фиксированном m числовая последовательность $\{K_{m,n}\} = K_{m,0}, K_{m,1}, K_{m,2}, \dots$ является монотонно возрастающей. Явный вид этой последовательности при $m = 2$ был впервые найден в работе [5] как частный случай более общей модели мономер-димер. Авторы [5] показали, что $\{K_{2,n}\}$ удовлетворяет линейному рекуррентному соотношению с постоянными коэффициентами. В терминах производящих функций $G_m(x) = \sum_{n=0}^{\infty} K_{m,n} x^n$ отмеченная закономерность соответствует тому, что $G_2(x)$ рациональна.

К началу 80-х годов прошлого столетия удалось алгоритмизировать все ключевые этапы метода матрицы переноса. В простейших случаях $m = 3, 4$ это позволяло в ручном режиме выписать и решить систему линейных уравнений для семейства производящих функций [6]. Искомая функция $G_m(x)$ являлась одной из компонент найденного решения. Для больших значений m приходилось ограничиваться вычислением начального отрезка последовательности $\{K_{m,n}\}$. В то же время следует отметить, что взаимосвязи между символьными и численными вариантами метода ещё не были общеизвестны. Так, например, приведенных в [6] табличных данных было более чем достаточно, чтобы реконструировать из них функции $G_5(x)$ и $G_6(x)$. Однако такая возможность автором даже не рассматривалась.

Первое систематическое изложение численного варианта метода матрицы переноса приводится в [7]. Важным теоретическим результатом данной работы стало доказательство того, что функции $G_m(x)$ рациональны при всех m , то есть они представимы в виде отношения двух

взаимно простых полиномов $P_m(x)$ и $Q_m(x)$ с целыми коэффициентами, причём $Q_m(0) = 1$. Из симметрии матрицы переноса также следует вещественность всех корней $Q_m(x)$.

Вычислив производящие функции для всех $m \leq 8$, авторы [7] отметили, что порядки рекуррентных соотношений $q_m = \deg Q_m(x)$ оказываются равными $2^{\lfloor m/2 \rfloor}$. Более того, при некоторых значениях m знаменатели $Q_m(x)$ удовлетворяют соотношению $Q_m(x) = x^{q_m} Q_m(1/x)$. Близкие по структуре соотношения имеют место и для числителей $P_m(x)$.

Обширное исследование знаменателей производящих функций было предпринято в [8]. Авторы этой работы сосредоточились на выводе рекуррентных соотношений, которым удовлетворяют последовательности $\{K_{m,n}\}$. Получив требуемые соотношения для $1 \leq m \leq 10$, они обратили внимание на то, что корни характеристического полинома $x^{q_m} Q_m(1/x)$ попарно связаны друг с другом. Произведение каждой такой пары корней существенным образом зависит от величины $m \bmod 4$.

Ответы на многие вопросы, касающиеся свойств производящих функций, были даны в работе [9]. Опираясь на явные выражения для $K_{m,n}$, полученные в [2, 3, 4], автор предложил конструктивный способ нахождения полиномов $P_m(x)$ и $Q_m(x)$. В принципе, полученные Р. Стенли результаты исчерпывали бы проблему исследования свойств производящих функций, если бы полиномы $P_m(x)$ и $Q_m(x)$ были взаимно просты, то есть приводили к рекуррентному соотношению минимального порядка.

Однако доказать данное свойство автору не удаётся и в заключении работы [9] он формулирует гипотезу, предполагающую наличие у полинома $Q_m(x)$ только простых корней. Фактически данная гипотеза эквивалентна утверждению о том, что $2^{\lfloor m/2 \rfloor}$ является минимальным порядком рекуррентного соотношения, которому удовлетворяет последовательность $\{K_{m,n}\}$. Проверка данной гипотезы в широком диапазоне изменения параметра m стала одним из этапов нашей работы.

Несмотря на то, что обосновать гипотезу удалось лишь для некоторых значений m , важным результатом [9] стало доказательство простоты максимального корня характеристического полинома $x^{q_m} Q_m(1/x)$, который будет обозначаться через $\lambda(m)$. Это позволяет оценить количество совершенных паросочетаний при $n \rightarrow \infty$ величиной $K_{m,n} \sim C(m)\lambda(m)^n$. Достаточно неожиданным оказалось существование простой зависимости, позволяющей выразить $C(m)$ через $\lambda(m)$. Её наличие даёт возможность получить асимптотику числа паросочетаний при любом m , зная только значение корня $\lambda(m)$.

Ещё одним интересным результатом, не связанным с гипотезой о корнях, стало вычисление $\deg Q_m(x) - \deg P_m(x)$. Величина разности равна 2 при чётных m и 1 при нечётных. Зависимость от чётности, отсутствующая в оригинальной версии [9], является следствием того, что в нашей работе из последовательностей $\{K_{m,n}\}$ удалены все нулевые элементы.

Явные выражения для производящих функций $G_m(x)$ и обширные наборы табличных данных при $m \leq 12$ приводятся в Электронной энциклопедии целочисленных последовательностей (OEIS) [10]. Для каждого семейства графов номер соответствующей последовательности указан в приложении А. Производительность современных компьютеров такова, что все известные ранее данные могут быть без значительных усилий получены любым из методов, описанных в цитированных выше работах. В связи с этим при обсуждении в следующем разделе способов оптимизации вычислительных процедур условие $m > 12$ будет предполагаться выполненным. Подсчёт паросочетаний в рассматриваемых семействах графов становится весьма нетривиальным, когда порядок графа начинает превышать 10^5 .

В физических приложениях расчёты, как правило, ведутся в термодинамическом приближении, которое делает избыточным знание точных значений $K_{m,n}$. Для больших решёток полностью покрытых $N = mn/2$ димерами ($N \gg 1$) можно ограничиться приближением

$K_{m,n} = K_N \sim \phi^N$. Вычисление параметра ϕ представляет основной интерес во многих решёточных моделях. У него имеется исторически сложившееся название — *молекулярная свобода*.

Точное значение $\phi = \exp(2G/\pi) = 1.791\,622\,812\dots$, где G — константа Каталана, для прямоугольных сеточных графов было получено ещё в классических работах [2, 3, 4]. В данной статье мы продемонстрируем, что, имея в наличии весьма ограниченный набор производящих функций $G_m(x)$, можно оценить величину ϕ с точностью, достаточной для большинства приложений. Именно таким способом впервые удалось вычислить молекулярную свободу в двуслойных прямоугольных сетках вида $P_2 \times P_m \times P_n$ [11].

В рамках предложенного подхода параметр ϕ находится как $\phi = \lim_{m \rightarrow \infty} \phi(m)$, где $\phi(m) = \lambda(m)^{2/m}$ при чётных m и $\phi(m) = \lambda(m)^{1/m}$ при нечётных значениях m . Имея в распоряжении начальный отрезок последовательности $\{\phi(m)\}$, можно применить методы ускорения сходимости числовых последовательностей, которые в полной мере учитывают асимптотические свойства $\phi(m)$. Практически обеспечить требуемую точность удаётся при наличии $10 \div 15$ первых членов.

Начальные элементы последовательности $\{\phi(m)\}$ вычислялись и ранее в работах [7, 8], однако никаких способов их обработки авторы не предлагали. Рассматриваемая модель сеточных графов интересна прежде всего тем, что приходится учитывать соображения чётности и разбивать $\{\phi(m)\}$ на две подпоследовательности, сходимость каждой из которых следует ускорять независимо от другой.

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ $K_{m,n}$

Поскольку нашей основной задачей является нахождение производящих функций $G_m(x)$, то было бы естественно воспользоваться одной из символьных модификаций метода матрицы переноса. При таком подходе $G_m(x)$ получается непосредственно из решения системы линейных уравнений, коэффициенты которой являются полиномами от x . Однако реализация соответствующих алгоритмов в системах компьютерной алгебры оказывается чрезвычайно ресурсоёмкой, поскольку при заданном m порядок системы, как правило, равен $2^{\lfloor m/2 \rfloor}$. Кроме того, экспоненциально растут как степени самих полиномов, так и их коэффициенты. При выполнении расчётов на персональном компьютере с 32-битовой операционной системой можно в лучшем случае рассчитывать лишь на то, что удастся воспроизвести ранее известные результаты.

Более перспективным представляется подход, который вовсе не использует символьных вычислений. В рамках этого подхода задача вывода $G_m(x)$ распадается на два этапа. Вначале каким-либо способом строится достаточно длинный отрезок последовательности $\{K_{m,n}\}$. Затем из полученных данных реконструируется сама производящая функция. По затратам процессорного времени первый этап является более трудоёмким, поэтому на нём стоит остановиться более подробно. Полезно также обсудить несколько независимых вариантов вычисления элементов $K_{m,n}$, каждый из которых имеет свои достоинства и недостатки.

3.1. Расчёты по явным формулам

Явные формулы для нахождения $K_{m,n}$, приведенные в [2, 4], имеют вид двойных произведений, в которых каждый множитель содержит тригонометрические функции. Вычисление этих функций с большим числом значащих цифр в графах высокого порядка представляет серьёзную проблему. В ходе нашего исследования изучались графы, имеющие более $10^{96\,000}$ совершенных паросочетаний. Степень этого числа позволяет получить представление о точности, с которой должны проводиться расчёты. Следует сразу же отметить нецелесообразность применения каких-либо символьных преобразований в ходе вычисления $K_{m,n}$. Такой приём,

предложенный в [4], срабатывает лишь для миниатюрных примеров, рассматривавшихся в указанной работе.

Основная оптимизация исходных формул сводится к вычислению одного из произведений. Поскольку параметр m фиксирован, а n может принимать достаточно большие значения, то разумно избавиться от произведения с верхним индексом равным n . Выполнив такое преобразование, приходим к известному выражению [9], которое в наших обозначениях имеет вид

$$K_{m,n} = \prod_{j=1}^{\lfloor m/2 \rfloor} \frac{c_j(m)^{(1+\delta(m))n+1} - \bar{c}_j(m)^{(1+\delta(m))n+1}}{2b_j(m)}. \quad (1)$$

Фигурирующие в (1) величины определяются следующими соотношениями:

$$b_j(m) = \sqrt{1 + \cos^2 \left(\frac{\pi j}{m+1} \right)}, \quad c_j(m) = \cos \left(\frac{\pi j}{m+1} \right) + b_j(m), \quad c_j(m)\bar{c}_j(m) = -1. \quad (2)$$

Признак нечётности числа $\delta(m)$ равен 1 для нечётных m и 0 для чётных.

Существенное упрощение (1) может быть достигнуто, если воспользоваться леммой из работы [9]. Эта лемма утверждает, что произведение $\prod_{j=1}^{\lfloor m/2 \rfloor} b_j^2(m)$ является рациональным числом. При расчётах удобнее иметь дело непосредственно с квадратом $D_m^2 = \prod_{j=1}^{\lfloor m/2 \rfloor} (2b_j(m))^2$ знаменателя (1), который оказывается целым.

Повторяя рассуждения из доказательства леммы, можно показать, что

$$D_m^2 = \frac{(\sqrt{2} + 1)^{m+1} + (-1)^{\delta(m)}(\sqrt{2} - 1)^{m+1}}{2^{3/2+\delta(m)}}. \quad (3)$$

На этапе численной реализации алгоритма вместо (3) целесообразно воспользоваться рекуррентным соотношением $D_m^2 = 6D_{m-2}^2 - D_{m-4}^2$ с начальными условиями $D_1^2 = 1, D_2^2 = 5, D_3^2 = 6, D_4^2 = 29$. Наборы коэффициентов $c_j(m)$ и $\bar{c}_j(m)$ достаточно вычислить только один раз перед началом построения $\{K_{m,n}\}$.

Большая часть расчётов была выполнена в системе компьютерной алгебры Maple 16. Одной из причин такого выбора являлась встроенная поддержка арифметики с плавающей точкой высокой точности, позволяющая динамически наращивать точность вычислений при увеличении параметра n . Второй важной особенностью именно этой системы компьютерной алгебры оказалась простота распараллеливания циклов при вычислении сумм и произведений. Такая возможность позволяет полностью загружать все вычислительные ядра процессора, в значительной мере компенсируя невысокую скорость исполнения интерпретируемого кода.

Для проведения расчётов использовался персональный компьютер, оснащённый процессором Core i7 980, работающим на частоте 3.33 GHz, и 24 GiB оперативной памяти. Компьютер функционировал под управлением 64-битовой версии операционной системы Windows 7. Система компьютерной алгебры также была 64-битовой.

Производительность Maple 16 оказалась вполне достаточной для того, чтобы получить необходимое для восстановления $G_m(x)$ количество элементов $K_{m,n}$ при всех $m < 27$. Однако в случае $m = 27$ удалось вычислить лишь чуть более 11 тысяч первых элементов. Проблемы были вызваны потерей сходимости в алгоритмах вычисления тригонометрических функций. Для завершения расчётов была написана программа на языке Fortran, использующая библиотеку MPFUN90 [12]. Подпрограммы этой библиотеки позволяют проводить расчёты и при значениях $m > 27$, но в однопоточном режиме.

3.2. Численный вариант метода матрицы переноса

Применённый в работе алгоритм подсчёта, в целом, достаточно подробно описан в [7], поэтому в данном разделе мы остановимся только на тех его модификациях, которые позволяют существенно расширить диапазон доступных для изучения значений параметра m .

В оригинальной версии алгоритма рассматривается семейство *разрезов* решётки. Визуально такой разрез можно представить прямой, проходящей параллельно одной из сторон решётки и пересекающей построенное на ней паросочетание. Будем считать прямые параллельными той стороне, которая содержит m вершин. На рис. 1 разрезы показаны горизонтальными штриховыми линиями, слегка выступающими за края решётки.

Результат пересечения прямой с рёбрами решётки, начиная с номера 1 и кончая номером m , кодируется бинарным вектором $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_m)$. Компонента $u_k = 1$, если пересекаемое ребро с номером k входит в паросочетание, и 0 в противном случае. Построенный по указанным правилам вектор \mathbf{u} принято называть состоянием.

При фиксированном m существует 2^m различных векторов \mathbf{u}_j ($j = 0, 1, \dots, 2^m - 1$). Для нумерации состояний можно воспользоваться естественным упорядочением компонент \mathbf{u} , трактуя его содержимое как двоичное число, в котором самым младшим считается левый бит. Состояние \mathbf{u}_0 используется также для кодирования начального (рис. 1 слева) и конечного разрезов, не пересекающих рёбер решётки.

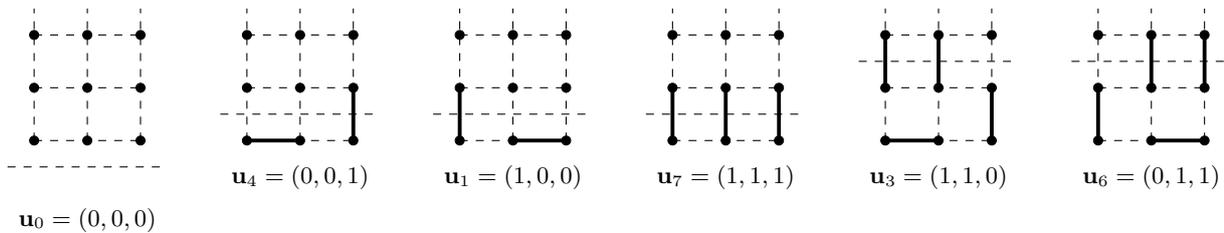


Рис. 1. Допустимые состояния для семейства $P_3 \times P_{2n}$

Связи между состояниями задаются бинарной матрицей \mathbf{T} — матрицей переноса с элементами $t_{i,j}$. Равенство $t_{i,j} = 1$ указывает на возможность перехода из \mathbf{u}_i в \mathbf{u}_j . Данное обстоятельство позволяет интерпретировать $t_{i,j}$ как элементы матрицы смежности некоторого графа, в котором вершинами являются состояния \mathbf{u}_j . В правой части рис. 1 показано, каким образом состояние \mathbf{u}_6 получается из \mathbf{u}_1 включением в паросочетание двух вертикальных рёбер. Очевидно, что экспоненциальный рост порядка матрицы является наиболее серьёзным препятствием на пути успешного применения метода.

На языке теории графов $K_{m,n}$ определяется как количество замкнутых маршрутов из \mathbf{u}_0 в \mathbf{u}_0 длины n . По этой причине во многих реализациях метода для нахождения $K_{m,n}$ используется возведение \mathbf{T} в степень n . (В наших обозначениях для вычисления $K_{m,n}$ при нечётных m требуется возведение \mathbf{T} в степень $2n$.) Подобная операция также является ресурсоёмкой, поскольку с ростом n некоторые элементы \mathbf{T}^n будут увеличиваться в геометрической прогрессии со знаменателем $\lambda(m)$.

Отмеченные закономерности не являются специфичными для задачи о димерах и наблюдаются во многих других перечислительных задачах, решаемых данным методом. В связи с этим можно считать, что эффективные реализации метода отличаются от прямолинейных в первую очередь по количеству усилий, затраченных на экономию ресурсов памяти.

Наиболее естественная оптимизация состоит в том, чтобы избавиться от тех состояний, которые никогда не достигаются. Для прямоугольных сеточных графов соответствующий при-

ём основан на соображениях чётности и использован во многих работах, в том числе и в [7]. Фактически вместо 2^m состояний необходимы только $\binom{m+\delta(m)}{\lfloor (m+1)/2 \rfloor}$. Эффект от такого сжатия матрицы \mathbf{T} наиболее заметен при малых m , позволяя решить задачу даже без использования компьютера.

Перечислив вручную при $m = 3$ все возможные способы перехода от одних допустимых состояний, показанных на рис. 1, к другим, нетрудно получить приведенную ниже матрицу переноса и вычислить её четвёртую степень

$$\mathbf{T} = \begin{matrix} & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{3} & \mathbf{4} & \mathbf{6} & \mathbf{7} \\ \mathbf{0} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \mathbf{1} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{3} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{4} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{6} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{7} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}, \quad \mathbf{T}^4 = \begin{matrix} & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{3} & \mathbf{4} & \mathbf{6} & \mathbf{7} \\ \mathbf{0} & \begin{pmatrix} 11 & 0 & 4 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{1} & \begin{pmatrix} 0 & 6 & 0 & 5 & 0 & 4 \end{pmatrix} \\ \mathbf{3} & \begin{pmatrix} 4 & 0 & 2 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{4} & \begin{pmatrix} 0 & 5 & 0 & 6 & 0 & 4 \end{pmatrix} \\ \mathbf{6} & \begin{pmatrix} 4 & 0 & 1 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{7} & \begin{pmatrix} 0 & 4 & 0 & 4 & 0 & 3 \end{pmatrix} \end{matrix}. \quad (4)$$

Изображённые по бокам матриц наборы чисел обозначают номера состояний. Интересующая нас величина $K_{3,2} = 11$ находится на пересечении той строки и столбца \mathbf{T}^4 , которые соответствуют состоянию \mathbf{u}_0 . Поскольку нумерацию состояний принято начинать с \mathbf{u}_0 , то в общем случае результат будет расположен в левом верхнем углу матрицы \mathbf{T}^n .

В то же время от внимания многих авторов ускользал тот факт, что любое совершенное паросочетание на прямоугольной решётке обладает симметрией относительно середины цепи P_m . При построении матрицы переноса состояния \mathbf{u}_i и \mathbf{u}_j , являющиеся «зеркальными отражениями» друг друга, можно считать идентичными. Показанные на рис. 1 состояния \mathbf{u}_1 и \mathbf{u}_4 , а также \mathbf{u}_3 и \mathbf{u}_6 являются примерами таких «зеркальных отражений».

При отождествлении \mathbf{u}_i и \mathbf{u}_j порождается новое состояние \mathbf{u}_i . В матрице переноса столбец соответствующий \mathbf{u}_i следует разместить на месте столбца состояния \mathbf{u}_i , поскольку его элементы должны представлять собой сумму элементов, расположенных в столбцах состояний \mathbf{u}_i и \mathbf{u}_j . После перерасчёта всех величин строка и столбец, соответствующие состоянию \mathbf{u}_j , удаляются из матрицы. Ниже приводится результат трансформации \mathbf{T} из (4) посредством двух вышеуказанных отождествлений.

$$\begin{matrix} & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{3} & \mathbf{4} & \mathbf{6} & \mathbf{7} \\ \mathbf{0} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \mathbf{1} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{3} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{4} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{6} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{7} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \longrightarrow \begin{matrix} & \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{1}} & \mathbf{3} & \tilde{\mathbf{6}} & \mathbf{7} \\ \mathbf{0} & \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \tilde{\mathbf{1}} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{3} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \tilde{\mathbf{6}} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{7} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \longrightarrow \begin{matrix} & \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{1}} & \tilde{\mathbf{3}} & \mathbf{7} \\ \mathbf{0} & \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \tilde{\mathbf{1}} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \tilde{\mathbf{3}} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{7} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}.$$

По сути дела в данном случае речь идёт об объединении исходных состояний в некоторые классы эквивалентности и построении новой матрицы $\tilde{\mathbf{T}}$ на множестве таких классов. Следует отметить, что элементы $\tilde{\mathbf{T}}$ уже не допускают столь же простой интерпретации как элементы \mathbf{T} , а сама матрица $\tilde{\mathbf{T}}$ становится несимметричной.

Поскольку в каждом классе содержатся не более двух элементов, то можно рассчитывать на то, что порядок $\tilde{\mathbf{T}}$ будет примерно в 2 раза меньше чем \mathbf{T} . Например, семейство $P_{10} \times P_n$ обладает 252 достижимыми состояниями. Однако с учётом симметрии их количество уменьшается до 142. Простота топологии планарных сеток делает избыточным применение более сложных алгоритмов для сжатия матрицы переноса, основанных на изучении группы автоморфизмов графа [13].

Из асимптотики биномиального коэффициента $\binom{m+\delta(m)}{\lfloor (m+1)/2 \rfloor} \sim 2^{m+\delta(m)} / \sqrt{\pi \lfloor m/2 \rfloor}$ следует, что удаление недостижимых состояний позволяет уменьшить порядок исходной матрицы \mathbf{T} только на степенной множитель. Даже при учёте симметрии сжатие $\tilde{\mathbf{T}}$ не будет превышать $2\sqrt{\pi \lfloor m/2 \rfloor}$. Сделанная оценка наглядно демонстрирует, что любые алгоритмы, основанные на хранении всей матрицы $\tilde{\mathbf{T}}$ или её аналогов в памяти компьютера, не могут рассматриваться как практичные.

В нашей реализации сама матрица $\tilde{\mathbf{T}}$ явно не строится. Используется метод динамического программирования, суть которого сводится к нахождению вектора $\mathbf{d}_n = \tilde{\mathbf{T}}^n \mathbf{e}_0$, где \mathbf{e}_0 — вектор, состоящий из нулей и одной единицы в начальной позиции. Данный вычислительный процесс удобно представить в виде итерационной схемы $\mathbf{d}_k = \tilde{\mathbf{T}} \mathbf{d}_{k-1}$ ($k = 1, 2, \dots, n$) с начальным условием $\mathbf{d}_0 = \mathbf{e}_0$. Такая схема интересна прежде всего тем, что не требует хранения всей матрицы $\tilde{\mathbf{T}}$ в памяти компьютера, поскольку представляет собой последовательность независимых друг от друга операций умножения строк матрицы $\tilde{\mathbf{T}}$ на вектор \mathbf{d}_{k-1} .

При нахождении очередной компоненты вектора \mathbf{d}_k нужная строка матрицы $\tilde{\mathbf{T}}$ пересчитывается заново и в силу независимости операций сразу несколько компонент могут параллельно вычисляться на различных процессорах, формируя локальные фрагменты этого вектора. Объединением фрагментов занят один из процессоров. Величина $K_{m,k}$ хранится в начальной позиции вектора \mathbf{d}_k .

Значения других компонент векторов \mathbf{d}_k также увеличиваются с ростом k и могут оказаться соизмеримы с $K_{m,k}$. С учётом приведенной в предыдущем разделе оценки оказывается, что для $m = 26$ каждый из векторов с учётом сжатия содержит более 5 миллионов чисел. Количество десятичных цифр в записи этих чисел может приближаться к 100 000. В процессе расчётов необходимо хранить оба вектора \mathbf{d}_k и \mathbf{d}_{k-1} , а также ряд вспомогательных структур, необходимых для обменных операций между процессорами. Суммарный объём таких структур соизмерим с \mathbf{d}_k . Из сделанных замечаний следует, что даже без хранения всей матрицы \mathbf{T} рассмотренная выше схема расчётов является весьма требовательной к ресурсам памяти.

При работе с очень большими числами радикальным средством экономии оперативной памяти считается переход к модулярной арифметике. Все указанные в нашей вычислительной схеме операции выполнялись по модулю различных простых чисел, произведение которых превышало ожидаемые значения $K_{m,k}$. Поскольку размер одного модуля зависит лишь от нашего выбора, можно подобрать такие простые числа, при которых необходимые вычисления удаётся выполнить в доступной на компьютере оперативной памяти. На заключительном этапе применение китайской теоремы об остатках позволяет восстановить значения $K_{m,k}$.

В имеющейся реализации выбирались в необходимом количестве подряд идущие (по убыванию) простые числа, начиная с $2^{63} - 25$. Так, например, для вычисления первых 2 100 элементов последовательности $\{K_{20,n}\}$ потребовалось 274 простых числа.

К сожалению, даже аккуратная реализация описанного алгоритма не позволяет завершать решение задачи при $m > 24$, поскольку для восстановления ответа приходится выполнять расчёты по тысячам модулей. Вследствие ограничений используемого кластера [17] вычисления проводились одновременно лишь по 100 модулям, с тем, чтобы уложиться в имеющуюся оперативную память и избежать аварийного завершения программы из-за превышения максимально допустимого по регламенту времени счёта. В настоящий момент проводятся работы по улучшению метода за счёт использования более эффективной схемы кодирования состояний [16].

4. ВЫВОД ПРОИЗВОДЯЩИХ ФУНКЦИЙ

Стадию восстановления $G_m(x)$ из начальных отрезков последовательностей $\{K_{m,n}\}$ имеет смысл разделить на два этапа. Вначале находится линейное однородное рекуррентное соотношение с постоянными коэффициентами $\sum_{j=0}^{M_m} \alpha_j(m) K_{m,n-j} = 0$ ($n \geq M_m$), которому удовлетворяет $\{K_{m,n}\}$ при фиксированном значении m . Порядок M_m этого соотношения равен степени $Q_m(x)$. С учётом нормировки $\alpha_0(m) = 1$ имеем $Q_m(x) = \sum_{j=0}^{M_m} \alpha_j(m) x^j$.

Коэффициенты числителя производящей функции $P_m(x) = \sum_{j=0}^{p_m} \beta_j(m) x^j$ вычисляются на втором этапе исходя из соотношения

$$\beta_j(m) = \sum_{i=0}^j \alpha_i(m) K_{m,j-i}. \quad (5)$$

В записи верхнего предела суммирования учтено, что $p_m < q_m = M_m$. Принимая во внимание используемые в работе обозначения, разность степеней можно представить в виде $q_m - p_m = 2 - \delta(m)$.

Первый этап восстановления $G_m(x)$ оказывается весьма трудоёмким как по затратам процессорного времени, так и оперативной памяти. Проблема состоит в том, что для нахождения $\alpha_j(m)$ необходимо решить в целых числах систему линейных уравнений, в которой коэффициентами являются элементы $K_{m,n}$. В то же время второй этап представляет собой чисто техническую задачу. В некоторых программных продуктах вычисление $P_m(x)$ происходит автоматически по окончании первого этапа и по этой причине может оказаться скрытым от пользователя.

В тех случаях, когда порядок M_m заранее известен, для вывода соотношения следует иметь в наличии, по крайней мере, $2M_m$ первых элементов последовательности $\{K_{m,n}\}$. Дополнительные элементы могут понадобиться для проверки полученного результата. Фактически такая проверка должна быть неотъемлемой частью любого надёжного алгоритма.

Если же величина M_m неизвестна, то необходимо получить её оценку сверху и составить систему уравнений для вычисления $\alpha_j(m)$ с учётом полученного результата. Ранг матрицы этой системы даст точную величину порядка соотношения. К достоинствам метода матрицы переноса следует отнести то, что в качестве требуемой оценки достаточно просто взять порядок матрицы \mathbf{T} . Однако на практике такие оценки часто оказываются слишком консервативными и приводят к нерациональной трате вычислительных ресурсов.

К счастью в задаче о димерах, благодаря наличию явных формул, удалось получить такие оценки, которые в большинстве случаев являются точными. Как следует из результатов работы [9], для заданного значения m порядок соотношения не превышает $2^{\lfloor m/2 \rfloor}$. Таким образом, перед тем как приступать к реконструкции $G_m(x)$ необходимо предварительно вычислить не менее чем $2^{\lfloor m/2 \rfloor + 1} + 1$ элементов последовательности.

Задача вывода рекуррентного соотношения может считаться полностью решённой только в том случае, когда удаётся доказать, что порядок найденного соотношения является минимально возможным. В терминах производящих функций данное условие соответствует отсутствию у $P_m(x)$ и $Q_m(x)$ общих множителей, являющихся полиномами ненулевой степени с целочисленными коэффициентами. С учётом сказанного вполне естественно ожидать, что выполнение условия минимальности порядка должно быть положено в основу любого алгоритма вывода.

Однако если рекуррентное соотношение получено не в результате формального вывода, а на основе каких-либо иных соображений, трудно рассчитывать на то, что его порядок окажется минимальным. Данная особенность была впервые отмечена ещё в одной из ранних работ [5]. Получив рекуррентное соотношение для полиномов паросочетаний в семействе $P_2 \times P_n$, авторы рассмотрели предельный случай плотноупакованных димеров и пришли к соотношению

третьего порядка $K_{2,n} = 2K_{2,n-1} - K_{2,n-3}$. При выборе в качестве начальных условий значений $K_{2,0} = 1, K_{2,1} = 1, K_{2,2} = 2$, получаем хорошо известную последовательность чисел Фибоначчи, которая традиционно вводится на основе соотношения второго порядка.

Позднее важность поиска соотношений минимального порядка отмечалась в [7, 8], а затем с этой же проблемой столкнулся и автор [9]. В данной работе был предложен конструктивный алгоритм построения полиномов $P_m(x)$ и $Q_m(x)$, из которого, в частности, следовала верхняя граница на порядок соотношения. Однако обосновать отсутствие у числителя и знаменателя производящей функции общих множителей удалось лишь для некоторых значений m . Опираясь на известный к моменту написания [9] набор $G_m(x)$, автор выдвинул предположение о том, что описанный им способ всегда приводит к соотношениям минимального порядка. Проверке данной гипотезы будет посвящён подраздел 5.3.

Благодаря популярности метода производящих функций для решения различных перечислительных задач, разработчики многих систем компьютерной алгебры включают в библиотеки своих систем алгоритмы вывода производящих функций. Не является исключением и использованная нами система Maple, которая имеет специализированный пакет **gfun** для вывода линейных рекуррентных соотношений из начальных отрезков числовых последовательностей. В состав этого пакета входит процедура **listtoratpoly**, включающая в себя оба этапа восстановления производящей функции. Наличие такой возможности в значительной мере определило наш выбор на начальной стадии работы.

Однако выяснилось, что реализованные в **listtoratpoly** алгоритмы непригодны для вывода соотношений даже умеренного порядка, особенно в случае быстрорастущих последовательностей. Попытка вычислить производящую функцию, соответствующую соотношению 512 порядка при $m = 18$, завершилась аварийной остановкой ядра системы через 14 часов счёта. Единственными полезными результатами, которые удалось получить с помощью **listtoratpoly**, стала проверка известных сведений из OEIS.

После серии вычислительных экспериментов выяснилось, что для рассматриваемых нами последовательностей следует использовать средства пакета **genfunc**. В составе этого пакета имеется процедура **rgf_findrecur**, способная восстанавливать рекуррентное соотношение при наличии достаточного количества начальных элементов $\{K_{m,n}\}$. Для нахождения самой производящей функции необходимо дополнительно вызывать **rsolve** с опцией '**genfunc**' (x).

Эффективность **rgf_findrecur** существенно превосходит упоминавшуюся выше процедуру **listtoratpoly**, поскольку для решения системы линейных уравнений используются p -адические разложения. Такой подход позволяет в значительной мере избавиться от проблем, связанных с обработкой очень больших чисел. В частности, на вывод соотношения при $m = 18$, с которым не смогла справиться **listtoratpoly**, потребовалось всего 308 секунд. Ещё около 10 секунд понадобилось **rsolve** для реконструкции производящей функции.

Возможности **rgf_findrecur** позволяют находить соотношения достаточно высокого порядка. В ходе выполнения данной работы было получено соотношение 4 096 порядка для семейства графов $P_{25} \times P_{2n}$. На его вывод потребовалось 152 часа и 36 минут. Для функционирования ядра системы компьютерной алгебры было выделено около 7.5 GiB оперативной памяти.

Время вывода существенно зависит от величины элементов $\{K_{m,n}\}$. Например, последовательность $\{K_{24,n}\}$, также как и $\{K_{25,n}\}$, описывается соотношением 4 096 порядка, однако на его получение было затрачено только 82 часа 32 минуты. Такую разницу можно объяснить тем, что элементы $\{K_{25,n}\}$ увеличиваются примерно как квадраты $\{K_{24,n}\}$.

С ростом порядка соотношения в работе процедуры **rgf_findrecur** начинают проявляться ограничения, обусловленные постепенной деградацией возможностей масштабирования ядра системы компьютерной алгебры. Такого рода явления характерны для многих программных

продуктов, в которых непосредственное управление памятью подменяется работой сборщика мусора. Не является исключением и система Maple.

В сложившейся ситуации было бы разумно отказаться от использования систем компьютерной алгебры и переключиться на бинарные реализации алгоритмов вывода. К счастью такая реализация недавно была разработана одним из авторов в связи с потребностями подсчёта гамильтоновых циклов в некоторых семействах сеточных графов [14].

Подобно `rgf_findrecur` в программе из работы [14] используются p -адические разложения в рамках вычислительной схемы Диксона. Однако учёт теплицевой структуры матрицы и модификация критерия завершения алгоритма позволяют более рационально распорядиться ресурсами компьютера. На вывод упоминавшегося выше соотношения для семейства $P_{25} \times P_{2n}$ было затрачено 6 часов 16 минут процессорного времени и 372 MiB оперативной памяти. Именно таким способом и были найдены рекуррентные соотношения для семейств $P_{26} \times P_n$ и $P_{27} \times P_{2n}$, которые не удалось получить в среде Maple. Возможности же самой программы не ограничиваются данными результатами и позволяют выводить соотношения, порядок которых превышает 10 000.

После того, как найдены значения $\alpha_j(m)$, коэффициенты числителя $P_m(x)$ без труда вычисляются в системе компьютерной алгебры на основе соотношения (5). В данном случае применение Maple обосновано тем, что, например, в десятичной записи максимального по модулю коэффициента $Q_{27}(x)$ содержится 6 296 цифр.

5. ПРОИЗВОДЯЩИЕ ФУНКЦИИ И СВЯЗАННЫЕ С НИМИ ВЕЛИЧИНЫ

Опираясь на рекомендации, изложенные в разделах 3 и 4, были найдены рекуррентные соотношения и ассоциированные с ними производящие функции $G_m(x)$ для $m \leq 27$. При всех $m \leq 11$ полученные результаты совпали с теми, которые приводятся в OEIS (см. приложение А). Производящая функция для случая $m = 12$ была восстановлена нами из $\{K_{12,n}\}$ и зарегистрирована в OEIS ещё до начала данной работы. Остальные $G_m(x)$ были впервые получены в ходе выполненного исследования.

Простейшей из неизвестных ранее производящих функций является $G_{13}(x)$, приведенная в приложении С. Архив, содержащий $G_m(x)$ при $14 \leq m \leq 21$, находится в открытом доступе на сайте [15]. Остальные более громоздкие функции могут быть предоставлены авторами по запросу. Порядки рекуррентных соотношений для всех m указаны в последнем столбце таблицы приложения В.

В данном разделе подробно обсуждаются свойства производящих функций $G_m(x)$, а также некоторых других величин, тесно связанных с ними.

5.1. Асимптотика последовательностей $\{K_{m,n}\}$ при фиксированном m

Асимптотика числа паросочетаний является простейшей величиной, которая может быть найдена из $G_m(x)$ даже без знания всех деталей структуры производящей функции. Как отмечалось в [9], из выражения (1) следует простота максимального корня характеристического полинома $x^{qm} Q_m(1/x)$. В таком случае при $n \rightarrow \infty$ элементы последовательностей $\{K_{m,n}\}$ возрастают как $\tilde{K}_{m,n} = C(m)\lambda(m)^n$. Величина $\lambda(m)$ связана с минимальным положительным корнем x_m полинома $Q_m(x)$ соотношением $\lambda(m) = 1/x_m$. С вычислительной точки зрения нахождение x_m более предпочтительно, поскольку его местоположение задаётся естественными границами $0 < x_{m+2} < x_m$.

Расчёты проводились в системе Maple, имеющей пакет `RootFinding`, который содержит достаточно эффективные средства поиска вещественных корней уравнений, локализованных на заданном интервале. В работе использовалась процедура `NextZero`, позволяющая указать

верхнюю границу интервала посредством параметра `maxdistance`. При подстановке x_m в качестве `maxdistance` сразу же находился требуемый корень полинома $Q_{m+2}(x)$.

Однако по мере увеличения m коэффициенты $Q_m(x)$ быстро возрастают и вычисления требуют очень высокой точности. В такой ситуации целесообразно перевести процесс поиска x_m в режим ручного управления. Подходящим кандидатом для этой цели является процедура `Roots` из пакета `Student[NumericalAnalysis]`. Используемый этой процедурой по умолчанию метод Ньютона-Рафсона, в сочетании с тонкой настройкой параметров, позволяет в несколько раз уменьшить время нахождения x_m по сравнению с предыдущим способом. Для прямоугольных решёток в качестве начального значения x_{m+2} можно выбрать $x_m/1.8$ при чётных m и $x_m/3.2$ при нечётных.

Определение параметра $C(m)$ осуществляется аналогично вычету функции в точке, являющейся простым полюсом

$$C(m) = -\frac{P_m(x_m)}{x_m Q'_m(x_m)}.$$

Точность промежуточных вычислений при расчётах по этой формуле должна быть не ниже той, что использовалась для нахождения x_m .

Полученные указанными выше методами наборы значений $C(m)$ и $\lambda(m)$ приведены в таблице приложения В. На основе этих данных были построены зависимости $\tilde{K}_{m,n}$. Поскольку асимптотика $\tilde{K}_{m,n}$ справедлива лишь при фиксированном значении m , то, формально, условие её применимости имеет вид $n \gg m$. Более реалистичное представление о погрешности может быть получено из графиков отношений приближённых величин к точным.

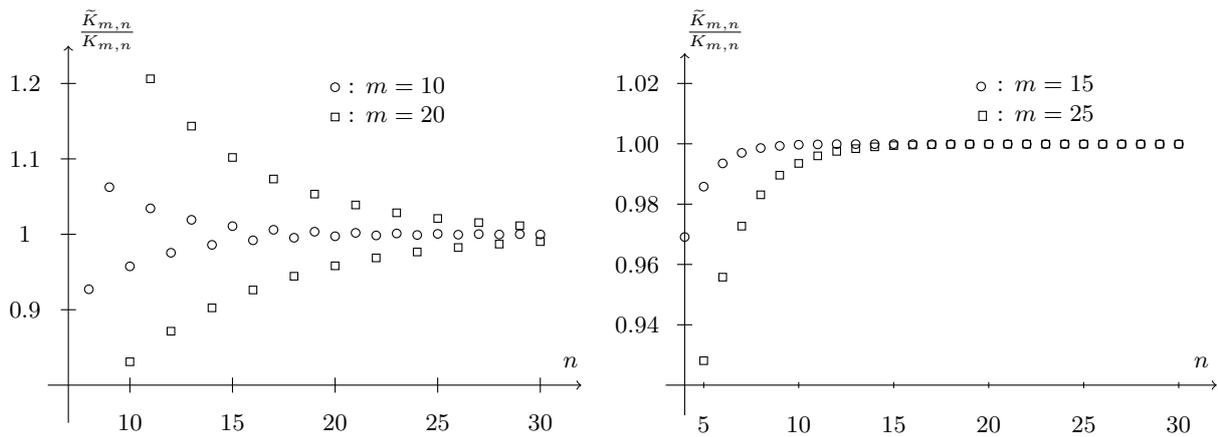


Рис. 2. Отношение асимптотической оценки $\tilde{K}_{m,n}$ числа совершенных паросочетаний к точному значению $K_{m,n}$. Слева чётные значения m , справа — нечётные.

Если приемлемый уровень погрешности ограничить величиной $\varepsilon = 10^{-2}$, то для $m = 10$ условие

$$\left| \frac{\tilde{K}_{m,n}}{K_{m,n}} - 1 \right| < \varepsilon \tag{6}$$

будет выполняться при всех $n > 15$. В случае $m = 20$ это же условие имеет место при $n > 29$.

Более быструю сходимость при нечётных m можно объяснить двумя причинами. Во-первых, одному и тому же значению n соответствует удвоенный порядок графа по сравнению с чётным случаем. Для пояснения второй причины упорядочим все корни $x^{q_m} Q_m(1/x)$ в порядке убывания их модулей и рассмотрим величину $|\lambda_2(m)/\lambda_1(m)| < 1$ ($\lambda_1(m) = \lambda(m)$). Если для

некоторого чётного m данное отношение равно μ , то для следующего нечётного m оно будет меньше чем μ^2 , что и позволяет пренебречь высшими членами асимптотического разложения при меньших n .

Приведём некоторые количественные оценки для нечётных m с тем же значением ε , что и в чётном случае. Для $m = 15$ условие (6) будет выполнено уже при $n > 5$, а для $m = 25$ можно с указанной точностью использовать $\tilde{K}_{m,n}$ при $n > 9$. В то же время следует иметь в виду, что $|1 - \mu| = O(1/m)$ при $m \rightarrow \infty$.

Качественные различия в графиках, изображённых на рис. 2, обусловлены тем, что для чётных m половина корней $x^{qm}Q_m(1/x)$, и в том числе $\lambda_2(m)$, являются отрицательными. Если же m нечётно, то все корни характеристического полинома положительны и отношение $\tilde{K}_{m,n}/K_{m,n}$ стремится к 1 монотонно.

Изложенный выше способ нахождения $C(m)$ и $\lambda(m)$ является достаточно универсальным и наиболее полезен в тех ситуациях, когда альтернативные методы вычисления указанных параметров неизвестны. Однако для разрешимых моделей можно получить дополнительное соотношение, связывающее $C(m)$ с $\lambda(m)$. Это означает, что для построения асимптотики $\tilde{K}_{m,n}$ достаточно только знания $\lambda(m)$.

Если ввести функцию $\Lambda(m) = \prod_{j=1}^{\lfloor m/2 \rfloor} c_j(m)$, то из явной формулы (1) для числа паросочетаний вытекают соотношения

$$C(m) = \frac{\Lambda(m)}{\sqrt{D_m^2}}, \quad \lambda(m) = \Lambda(m)^{1+\delta(m)}. \quad (7)$$

Из последнего равенства (7) следует, что $\phi(m) = \Lambda(m)^{2/m}$ независимо от чётности m .

Для нахождения молекулярной свободы необходимо оценить $\Lambda(m)$ при больших m . Поскольку вычислять суммы обычно проще, чем произведения, перейдём к логарифмам

$$\ln \Lambda(m) = \sum_{j=1}^{\lfloor m/2 \rfloor} \ln(c_j(m)) = \sum_{j=1}^{\lfloor m/2 \rfloor} \ln \left(\cos \left(\frac{\pi j}{m+1} \right) + \sqrt{1 + \cos^2 \left(\frac{\pi j}{m+1} \right)} \right).$$

Когда $m \rightarrow \infty$, сумму можно заменить интегралом

$$\ln \Lambda(m) = \frac{m}{\pi} \int_0^{\pi/2} \ln \left(\cos t + \sqrt{1 + \cos^2 t} \right) dt + O(1).$$

При переходе к пределу получим достаточно компактное выражение

$$\ln \phi = \lim_{m \rightarrow \infty} \ln \phi(m) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \ln \left(\cos t + \sqrt{1 + \cos^2 t} \right) dt = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \operatorname{arsinh}(\cos t) dt.$$

Для вычисления последнего интеграла воспользуемся разложением обратной гиперболической функции в степенной ряд

$$\frac{\operatorname{arsinh} x}{x} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} \binom{2k}{k} \left(\frac{x}{2} \right)^{2k}.$$

Тогда

$$\ln \phi = \frac{2}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)2^{2k}} \binom{2k}{k} \int_0^{\pi/2} \cos^{2k+1} t dt.$$

Поскольку

$$\int_0^{\pi/2} \cos^{2k+1} t dt = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(k+1)}{2 \Gamma(k + \frac{3}{2})},$$

то после упрощения факториалов и гамма-функций конечный результат примет очень простой вид

$$\ln \phi = \frac{2}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)^2} = \frac{2G}{\pi}.$$

Таким образом, в больших графах с чётным числом вершин ($n \gg m \gg 1$)

$$\ln K_{m,n} \sim \frac{mn}{2} \ln \phi = mn \frac{G}{\pi}.$$

В ходе проделанных расчётов определяющую роль сыграло знание $\Lambda(m)$. Однако в заключительном разделе работы будет показано, что величина ϕ может быть с высокой точностью вычислена и в тех случаях, когда явный вид функции $\Lambda(m)$ нам неизвестен.

5.2. Свойства полиномов $P_m(x)$ и $Q_m(x)$

Полиномы, о которых пойдёт речь в данном подразделе, получены из рекуррентных соотношений минимального порядка. Поскольку проверка минимальности была выполнена лишь для $m \leq 27$, то свойства, непосредственно не вытекающие из (1), могут и не выполняться при других m .

Наиболее известны свойства симметрии знаменателей $Q_m(x)$, обнаруженные ещё в [7, 8]. Как было показано в [9], если m нечётно либо делится на 4, то $Q_m(x) = x^{qm} Q_m(1/x)$. Соответствующее утверждение сформулировано в пункте (е) основной теоремы работы [9]. Однако при разборе последнего оставшегося случая $m \bmod 4 = 2$, автором была допущена неточность. Действительно, при указанных значениях m если x_0 является корнем $Q_m(x)$, то и $-1/x_0$ будет корнем этого же полинома. Следовательно, должно выполняться соотношение $Q_m(-x) = x^{qm} Q_m(1/x)$. В оригинальной версии [9] знак минус оказался не в том месте.

Свойства числителей также нуждаются в корректировке. При выполнении условия $m \bmod 4 \neq 2$ для полиномов $P_m(x)$ имеет место равенство $P_m(x) = -x^{pm} P_m(1/x)$, которое, согласно [9], должно выполняться при всех $m > 1$. Фактически, за исключением граничного случая $m = 2$, для $m \bmod 4 = 2$ справедливо несколько иное соотношение $P_m(-x) = -x^{pm} P_m(1/x)$.

Ряд важных задач, связанных с разрешимостью модели, поиском рекуррентных соотношений минимального порядка, требует выяснения условий приводимости $P_m(x)$ и $Q_m(x)$ в $\mathbb{Z}[x]$. О возможности разложения на множители с целочисленными коэффициентами знаменателей $Q_m(x)$ более подробно пойдёт речь в следующем подразделе. Здесь же мы приведём те свойства, которые характерны для числителей.

Для всех нечётных значений $m > 1$ числитель производящей функции $P_m(x)$ может быть представлен в виде $P_m(x) = (1-x)\bar{P}_m(x)$, где $\bar{P}_m(x)$ — неприводимый в $\mathbb{Z}[x]$ полином. Когда m делится на 4, имеет место похожее соотношение $P_m(x) = (1-x^2)\bar{P}_m(x)$. Несущественные внешние различия обусловлены тем, что если последовательность $\{K_{m,n}\}$ при нечётных m разредить нулями, то её производящая функция получится из $G_m(x)$ путём подстановки x^2 вместо x . В результате такой замены свойства числителей в обоих случаях оказываются идентичными. Сами полиномы $\bar{P}_m(x)$ удовлетворяют такому же соотношению, что и $Q_m(x)$, а именно $\bar{P}_m(x) = x^{p_m-2+\delta(m)} \bar{P}_m(1/x)$.

В изученном нами диапазоне изменения параметра m , при $m \bmod 4 = 2$ полиномы $P_m(x)$ почти всегда были неприводимы. Исключение имело место лишь при $m = 6$. Как отмечалось в [9], это единственный нетривиальный случай, когда величина D_m^2 является полным квадратом. Из указанного свойства следует приводимость не только $Q_6(x)$, но и $P_6(x)$.

Совокупность изложенных выше свойств позволяет получить достаточно полное представление о структуре $G_m(x)$. Разрешимость задачи приводит к весьма специфическому виду

производящих функций. Когда аналогичные соотношения удаётся обнаружить в других семействах решёточных графов, весьма вероятно существование явных формул подобных (1). В качестве примера отметим, что в двуслойных решётках $P_2 \times P_m \times P_n$ наблюдается периодичность свойств $P_m(x)$ и $Q_m(x)$ [11]. Если m делится на 4, то имеют место соотношения $P_m(x) = x^{P_m} P_m(1/x)$, $Q_m(x) = -x^{Q_m} Q_m(1/x)$. Разработка алгоритмов трансформации решений из одного представления в другое является достаточно интересной, но пока ещё не исследованной проблемой.

Помимо изучения общих свойств $G_m(x)$ представляют интерес оценки коэффициентов полиномов $P_m(x)$ и $Q_m(x)$, тем более что соответствующие сведения в литературе не приводятся. Однако детальный анализ этих коэффициентов потребовал бы написания отдельной работы, поэтому в данном подразделе мы ограничимся вычислением только нескольких первых значений $\alpha_j(m)$, которые входят в рекуррентное соотношение и могут использоваться для контроля корректности его вывода.

Для нахождения $\alpha_j(m)$ был использован метод построения полиномов $Q_m(x)$, предложенный в [9]. Строго говоря, это означает, что приведённые ниже выражения представляют собой оценки сверху на модули коэффициентов. Однако в большинстве случаев данные оценки являются точными. Как будет видно из результатов следующего подраздела, особые случаи возникают не слишком часто и лишь для нечётных значений m .

В подразделе 5.1 было показано, что характер изменения $\{K_{m,n}\}$ существенно зависит от чётности m , поэтому при фиксированном j целесообразно разбить $\{\alpha_j(m)\}$ на две подпоследовательности. Для всех чётных m коэффициент $\alpha_1(m) = -1$. Вычисление других $\alpha_j(m)$ позволило выявить весьма интересную закономерность. Оказалось, что подпоследовательности $\{\alpha_j(m)\}$, также как и $\{K_{m,n}\}$, удовлетворяют линейным рекуррентным соотношениям, причём такого же вида. Если обозначить $|\alpha_2(2k)| = a_k$, то оказывается

$$a_{k+2} - 4a_{k+1} + a_k = 1, \quad (a_1 = 1, a_2 = 5). \quad (8)$$

Нетрудно заметить, что свойства коэффициентов (8) аналогичны свойствам $Q_3(x)$.

Решая данное соотношение и возвращаясь к исходной переменной, получаем явное выражение для всех чётных m

$$|\alpha_2(m)| = \frac{(\sqrt{3} + 1)^{m+1} + (\sqrt{3} - 1)^{m+1}}{\sqrt{3} 2^{\lfloor m/2 \rfloor + 2}} - \frac{1}{2}.$$

Знак ненулевых коэффициентов $\alpha_j(m)$ не зависит от m , поэтому при необходимости можно избавиться от модуля, поскольку $\alpha_2(m) < 0$.

При нечётных значениях m будем иметь соотношение с такой же левой частью как (8), но однородное. С учётом начальных данных $|\alpha_1(1)| = 1$, $|\alpha_1(3)| = 4$ находим

$$|\alpha_1(m)| = \frac{(\sqrt{3} + 1)^{m+1} - (\sqrt{3} - 1)^{m+1}}{\sqrt{3} 2^{\lfloor m/2 \rfloor + 2}}.$$

Как и в предыдущем случае $\alpha_1(m) < 0$, если m нечётно.

С ростом j порядок соотношения также увеличивается, однако свойства его коэффициентов остаются такими же, как в (8). В качестве примера рассмотрим случай $j = 3$ при чётных m . Обозначая, как и ранее, $|\alpha_3(2k)| = a_k$, приходим к неоднородному соотношению 4 порядка

$$a_{k+4} - 9a_{k+3} + 22a_{k+2} - 9a_{k+1} + a_k = 1, \quad (a_1 = 0, a_2 = 1, a_3 = 10, a_4 = 69).$$

Его решение, выраженное через параметр исходного семейства графов, имеет вид

$$|\alpha_3(m)| = \frac{1}{3\sqrt{7}} \left(\left(\frac{\sqrt{7} + \sqrt{3}}{2} \right)^{m+1} + \left(\frac{\sqrt{7} - \sqrt{3}}{2} \right)^{m+1} \right) - \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\left(\frac{\sqrt{3} + 1}{\sqrt{2}} \right)^{m+1} + \left(\frac{\sqrt{3} - 1}{\sqrt{2}} \right)^{m+1} \right) + \frac{1}{6}.$$

Ненулевые элементы последовательности $\{\alpha_3(m)\}$ отрицательны.

Экспоненциальный рост коэффициентов $\alpha_j(m)$ представляет серьёзную проблему при выводе производящих функций $G_m(x)$.

5.3. Проверка гипотезы Стенли

Упомянутая в предыдущих разделах гипотеза Р. Стенли о простоте корней $Q_m(x)$, полученная на основе предложенного в [9] метода, играет важную роль в обосновании минимальности порядков рекуррентных соотношений. В обзоре нерешённых задач, связанных с подсчётом паросочетаний [18], проблема доказательства или же опровержения этой гипотезы сформулирована под номером 23. Задачей данного подраздела является демонстрация существования множества значений параметра m , при которых данная гипотеза не выполняется.

В заключении работы [9] автор обсуждает даже более сильное утверждение о неприводимости $Q_m(x)$ в $\mathbb{Z}[x]$. Однако там же отмечается, что из приводимости $Q_6(x)$ следует приводимость $Q_m(x)$, когда $m+1$ делится на 7. Данное замечание является ключом к поиску особых значений m . Действительно, в пункте (g) основной теоремы [9] утверждается, что наличие у $Q_6(x)$ множителя $1-x^2$ является следствием «удивительного» равенства $c_1(6) = c_2(6)c_3(6)$. В то же время путём непосредственной подстановки в коэффициенты $c_j(m)$ соответствующих значений j и m нетрудно убедиться в существовании целого семейства подобных равенств.

Лемма 1. Для $k = 1, 2, \dots$ справедливы равенства $c_k(7k-1) = c_{2k}(7k-1)c_{3k}(7k-1)$.

При $m = 7k - 1$ равенства леммы 1 будут по-разному проявлять себя в свойствах $Q_m(x)$. Если m чётно, то $Q_m(x)$ приводим, однако все его корни различны. Такая ситуация возникает, например, для $m = 20$. В этом случае знаменатель производящей функции раскладывается на 4 множителя, два из которых имеют степень 128, а два других — 384. Поскольку при таких m гипотеза остаётся верной, посмотрим, что изменится для нечётных m .

Лемма 2. При $m = 14k - 1$, $k = 1, 2, \dots$, полиномы $Q_m(x)$, построенные на основе метода работы [9], имеют кратные корни. Степень знаменателя производящей функции, соответствующей рекуррентному соотношению минимального порядка, не превышает $\frac{7}{8}2^{\lfloor m/2 \rfloor}$.

Доказательство. В соответствии с [9], $Q_m(x)$ представляют собой произведения множителей вида $(1 - c_S x)$ при чётных m и $(1 - c_S^2 x)$ при нечётных. Следовательно, для поиска кратных корней необходимо выяснить, при каких условиях возможно равенство двух различных коэффициентов c_S .

Сами коэффициенты c_S строятся на основе набора значений $c_j(m)$, входящих в (1). Если в качестве S взять какое-либо подмножество $\{1, 2, \dots, \lfloor m/2 \rfloor\}$, то c_S выражается в виде рациональной дроби. Числитель этой дроби содержит произведение $c_j(m)$ с теми индексами j , которые входят в S . Произведение всех остальных $c_j(m)$ образует знаменатель c_S . Знак коэффициента равен $(-1)^{\lfloor m/2 \rfloor - |S|}$.

Поскольку при фиксированном m всегда справедливо неравенство $c_i(m) \neq c_j(m)$ если $i \neq j$, то в общем случае будем иметь $2^{\lfloor m/2 \rfloor}$ различных значений c_S , что и соответствует гипотезе [9]. Однако ситуация меняется если выполняются условия леммы 1. В этом случае из всех подмножеств можно выделить такой набор S' , который характеризуется тем, что каждое подмножество S_k , входящее в S' , содержит k , но не содержит $2k$ и $3k$.

Каждому S_k можно поставить в соответствие подмножество S'_k , получаемое путём удаления из S_k элемента k и добавления туда $2k$ и $3k$. Вычисляя теперь коэффициенты c_{S_k} и $c_{S'_k}$, замечаем, что они отличаются друг от друга только знаком. Если m чётно, знаменатель $Q_m(x)$ приобретает ряд новых свойств, но простота его корней сохраняется. При нечётных m

квадраты c_{S_k} и $c_{S'_k}$ оказываются равными, что и доказывает существование у $Q_m(x)$ кратных корней.

Явные формулы (1) для вычисления $K_{m,n}$ представляют собой суммы геометрических прогрессий, поэтому знаменатель производящей функции, соответствующей рекуррентному соотношению минимального порядка, должен иметь только простые корни. Однако выше было показано, что у $Q_m(x)$ имеются множители вида $\bar{Q}_m^2(x)$. В таком случае и числитель $P_m(x)$, полученный на основе соотношений (5), будет содержать множитель $\bar{Q}_m(x)$, который впоследствии сократится.

Степень $\bar{Q}_m(x)$ равна количеству подмножеств в наборе S' . Поскольку в каждом S_k из S' зафиксировано положение трёх индексов из $\lfloor m/2 \rfloor$, то $\deg \bar{Q}_m(x) = 2^{\lfloor m/2 \rfloor - 3}$. После сокращения степень знаменателя не будет превышать $\frac{7}{8}2^{\lfloor m/2 \rfloor}$. \square

Из леммы 2 следует, что минимальное значение m , при котором гипотеза [9] перестанет быть верной, равно 13. Явный вид $G_{13}(x)$ приводится в приложении С. Первый множитель $Q_{13}(x)$ представляет собой $\bar{Q}_m(x)$. Доказательство не предполагает того, что рассмотрены все условия, при которых возможно равенство квадратов двух различных коэффициентов c_S . Однако полученные нами рекуррентные соотношения, порядки которых содержатся в последнем столбце таблицы приложения В, свидетельствуют о том, что при $m = 13$ и $m = 27$ других ситуаций нет.

В изученном нами диапазоне изменения параметра m выполнение условий леммы 1 приводило к тому, что при чётных m знаменатель $Q_m(x)$ раскладывался на 4 множителя с целочисленными коэффициентами. Два из них имели степень $2^{\lfloor m/2 \rfloor - 3}$, а два других — $3 \cdot 2^{\lfloor m/2 \rfloor - 3}$. Для нечётных m остаётся только один множитель степени $2^{\lfloor m/2 \rfloor - 3}$. Например, $\deg Q_{13}(x) = 2 \cdot 24 + 8 = 56$. Открытым остаётся вопрос о том, будет данная закономерность иметь место при всех m .

Предложенный в [9] метод построения $Q_m(x)$ наводит на мысль о том, что равенства леммы 1 представляют собой простейшие, но не единственные условия, которые могут приводить к появлению кратных корней. При больших m вполне возможно существование равенств более сложного вида, которые будут проявляться в свойствах знаменателей производящих функций только, когда $m > 27$.

Поиск и классификация всех возможных типов равенств необходимы для получения окончательного ответа на вопрос о том, как может меняться порядок рекуррентного соотношения при других значениях m . Однако уже сейчас можно сказать, что реальная картина представляется гораздо более сложной по сравнению с упрощённой ситуацией, вытекающей из гипотезы работы [9]. Модель димеров на прямоугольных решётках наглядно иллюстрирует те закономерности, которые будут иметь место и в других семействах сеточных графов.

6. АСИМПТОТИКА $\lambda(m)$

Данный раздел посвящён более подробному изучению асимптотического поведения $\lambda(m)$. Как уже отмечалось в подразделе 5.1, в разрешимых моделях знания $\lambda(m)$ оказывается достаточно, чтобы определить $\tilde{K}_{m,n}$. Однако не менее важно исследование общих свойств таких асимптотических разложений, поскольку аналогичные свойства будут характерны и для множества других модификаций задачи о димерах. Впоследствии эти особенности могут быть учтены при разработке эффективных алгоритмов вычисления $\phi(m)$ в моделях, не допускающих явного решения.

Фактически расчёты будут выполнены для функции $\Lambda(m)$, а точнее — для $\ln \Lambda(m)$. Остальные параметры без труда пересчитываются на основе соотношений (7).

Основой наших рассуждений будет формула суммирования Эйлера-Маклорена в том виде, как она приводится в [19] (пункт 23.1.30) при $a = 0$. Функция $F(x) = \ln(\cos x + \sqrt{1 + \cos^2 x})$, стоящая под знаком суммирования в $\ln \Lambda(m)$, является чётной, поэтому все её производные нечётного порядка в точке $x = 0$ обращаются в 0. С учётом сделанных замечаний приходим к следующему равенству

$$\sum_{j=1}^k F(jh) = \frac{1}{h} \int_0^b F(t) dt + \frac{1}{2}(F(b) - F(0)) + \sum_{j=1}^{n-1} \frac{h^{2j-1}}{(2j)!} B_{2j} F^{2j-1}(b) + \frac{h^{2n}}{(2n)!} B_{2n} \sum_{j=1}^k F^{2n}((j - \theta)h). \tag{9}$$

В обозначениях данной работы верхний предел суммирования следует заменить на $\lfloor m/2 \rfloor$, а в качестве h выбрать величину $\pi/(m+1)$. Тогда для параметра b получаем $b = \pi \lfloor m/2 \rfloor / (m+1)$. Для вывода асимптотических разложений этот результат следует преобразовать, опираясь на тождество $2\lfloor m/2 \rfloor = m - \delta(m)$, с тем, чтобы явно выделить малый параметр σ :

$$b = \frac{\pi}{2} - \frac{\pi(1 + \delta(m))}{2(m+1)} = \frac{\pi}{2} - \sigma.$$

При выборе n будем ориентироваться на такое минимальное значение этого параметра, которое бы позволило корректно учесть зависимость $\Lambda(m)$ от чётности. Ниже выяснится, что для этого достаточно положить $n = 2$. Остаточный член в (9) при указанном n оценивается величиной $O(1/(m+1)^3)$, задавая необходимую точность расчёта всех остальных слагаемых в правой части. Поскольку естественным параметром разложения является не m , а $\bar{m} = m + 1$, перепишем (9) через \bar{m} с учётом того, что число Бернулли $B_2 = 1/6$

$$\sum_{j=1}^{\lfloor m/2 \rfloor} F\left(\frac{\pi j}{\bar{m}}\right) = \frac{\bar{m}}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2} - \sigma} F(t) dt + \frac{1}{2} \left(F\left(\frac{\pi}{2} - \sigma\right) - F(0) \right) + \frac{\pi}{12\bar{m}} \left(\frac{d}{dx} F(x) \right) \Big|_{x=\frac{\pi}{2} - \sigma} + O\left(\frac{1}{\bar{m}^3}\right). \tag{10}$$

Стоящий в правой части (10) интеграл разобьём на два

$$\int_0^{\frac{\pi}{2} - \sigma} F(t) dt = \int_0^{\frac{\pi}{2}} F(t) dt - \int_{\frac{\pi}{2} - \sigma}^{\frac{\pi}{2}} F(t) dt.$$

Первый из этих интегралов уже был вычислен в подразделе 5.1, а во втором сделаем замену переменных $t = \pi/2 - \tau$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2} - \sigma} F(t) dt = G - \int_0^{\sigma} \ln\left(\sin \tau + \sqrt{1 + \sin^2 \tau}\right) d\tau.$$

Поскольку $\ln(\sin \tau + \sqrt{1 + \sin^2 \tau}) = \tau + O(\tau^3)$, получаем оценку первого слагаемого в правой части (10)

$$\frac{\bar{m}}{\pi} \left(G - \frac{1}{2} \sigma^2 + O(\sigma^4) \right) = \frac{\bar{m}G}{\pi} - \frac{\bar{m}}{2\pi} \sigma^2 + O\left(\frac{1}{\bar{m}^3}\right),$$

в которой учтено, что σ имеет порядок малости $O(1/\bar{m})$.

Перейдём ко второму слагаемому в правой части (10)

$$\frac{1}{2} \left(F\left(\frac{\pi}{2} - \sigma\right) - F(0) \right) = \frac{1}{2} \left(\ln(\sin \sigma + \sqrt{1 + \sin^2 \sigma}) - \ln(1 + \sqrt{2}) \right) = -\frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) + \frac{1}{2} \sigma + O(\sigma^3),$$

а затем и к третьему

$$\frac{\pi}{12\bar{m}} \left(\frac{d}{dx} F(x) \right) \Big|_{x=\frac{\pi}{2}-\sigma} = -\frac{\pi}{12\bar{m}} \frac{\cos \sigma}{\sqrt{1 + \sin^2 \sigma}} = -\frac{\pi}{12\bar{m}} (1 - \sigma^2 + O(\sigma^4)) = -\frac{\pi}{12\bar{m}} + O\left(\frac{1}{\bar{m}^3}\right).$$

Складывая полученные результаты и возвращаясь к исходным переменным, получаем искомую асимптотику

$$\ln \Lambda(m) = \frac{G\bar{m}}{\pi} - \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) + \frac{\pi}{24\bar{m}} (1 - 3\delta^2(m)) + O\left(\frac{1}{\bar{m}^3}\right). \tag{11}$$

Третье слагаемое в правой части (11) позволяет оценить влияние эффектов чётности параметра m на исследуемые величины. Учитывая порядок отброшенных членов, соотношением (11) можно пользоваться даже при $m < 10$ (см. рис. 3 слева).

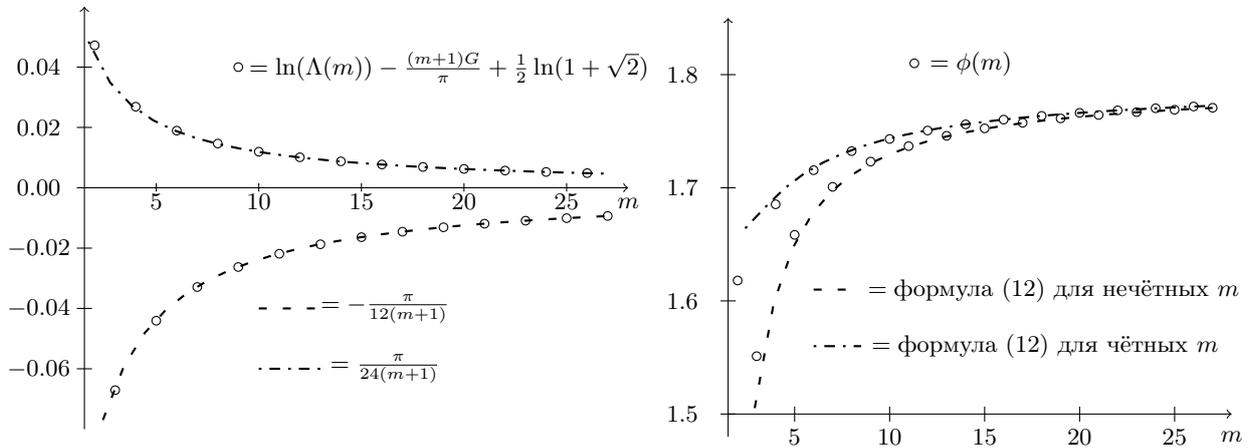


Рис. 3. Зависимость величин $\Lambda(m)$ (слева) и $\phi(m)$ (справа) от чётности параметра m . Штриховые линии соответствуют нечётным значениям m , штрихпунктирные — чётным.

Из (11) непосредственно находится $\ln \phi(m)$

$$\ln \phi(m) = \frac{2G}{\pi} - \left(\ln(1 + \sqrt{2}) - \frac{2G}{\pi} \right) \frac{1}{m} + \frac{\pi(1 - 3\delta(m))}{12 m^2} + O\left(\frac{1}{m^3}\right).$$

В записи данного выражения было учтено, что $\delta^2(m) = \delta(m)$. Полученный результат позволяет рассчитать асимптотику параметра молекулярная свобода

$$\phi(m) = \exp\left(\frac{2G}{\pi}\right) \left(1 - \frac{B}{m} + \frac{1}{2} \left(\frac{\pi(1 - 3\delta(m))}{6} + B^2 \right) \frac{1}{m^2} + O\left(\frac{1}{m^3}\right) \right), \tag{12}$$

где $B = \ln(1 + \sqrt{2}) - 2G/\pi \approx 0.298\ 251\ 779$. Построенные на основе (12) графики $\phi(m)$, показаны справа на рис. 3. Изображённые на этом рисунке кривые наглядно иллюстрируют целесообразность разбиения последовательности $\{\phi(m)\}$ на две части и их последующую независимую обработку на этапе вычисления параметра ϕ .

Соотношений (7) и (11) достаточно для нахождения асимптотики $\tilde{K}_{m,n}$. Полагая для определённости параметр m чётным, получаем выражение

$$\ln \tilde{K}_{m,n} \sim \frac{Gmn}{\pi} - \frac{B}{2}(m+n),$$

совпадающее с формулой (81) работы [4]. Совпадение двух первых членов асимптотик $K_{m,n}$ и $\tilde{K}_{m,n}$ означает, что вклад в свободную энергию системы от границ решётки может быть рассчитан даже при отсутствии явных выражений типа (1). Достаточно в некотором диапазоне m решить набор однопараметрических задач и вычислить $C(m)$ и $\lambda(m)$. Как уже отмечалось ранее, данное обстоятельство расширяет возможности изучения тех модификаций задачи о димерах, для которых неприменим метод пфаффианов.

7. ОЦЕНКА ПАРАМЕТРА МОЛЕКУЛЯРНАЯ СВОБОДА

Использованный в данной работе метод сводит решение двухпараметрической задачи к решению набора однопараметрических задач. Многие важные параметры модели в рамках такого подхода представляются числовыми последовательностями $\{a_m\}$ и особый интерес вызывает их поведение при больших m . Если элементам a_m поставлена в соответствие некоторая физическая величина, то такие последовательности, как правило, оказываются сходящимися и нахождение их предела является одним из основных этапов исследования. В данном разделе на примере последовательности $\{\phi(m)\}$ будет рассмотрен способ оценки параметра $\phi = \lim_{m \rightarrow \infty} \phi(m)$.

Когда $\{a_m\}$ сходится логарифмически, то никаких универсальных методов ускорения сходимости, позволяющих численно оценить величину $A = \lim_{m \rightarrow \infty} a_m$, попросту не существует. Однако из множества таких последовательностей можно выделить особый класс \mathcal{L} , который характеризуется тем, что при $m \rightarrow \infty$

$$a_m \sim A + \frac{1}{m} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{s_j}{m^j}.$$

В приведённом выражении коэффициенты s_j не зависят от m , причём $s_0 \neq 0$.

Для всех $\{a_m\}$ из класса \mathcal{L} разработаны методы ускорения сходимости. Эти методы хорошо известны в численном анализе, однако эффективность их применения часто бывает ограничена погрешностями вычисления элементов a_m . В силу специфики вычислительного процесса даже небольшие ошибки имеют тенденцию быстро накапливаться от итерации к итерации, что в конечном итоге и определяет точность полученного результата. Общей рекомендацией в такой ситуации является увеличение разрядности промежуточных вычислений. Для реализации соответствующих алгоритмов наиболее удобны системы компьютерной алгебры.

При использовании производящих функций описанные выше проблемы несущественны. Причина этого кроется в том, что в основу расчётов элементов интересующей нас последовательности, например $\{\phi(m)\}$, положены корни полиномов с целочисленными коэффициентами. Поскольку такие корни могут быть вычислены с любой разумной степенью точности, то погрешность конечного результата определяется исключительно возможностями самого метода ускорения и количеством фактически имеющихся элементов последовательности.

В данной работе для ускорения сходимости использовались таблицы Невилля, которые с успехом применялись при исследовании других решёточных моделей [20]. Такие таблицы обычно представляются в виде треугольных матриц с элементами e_m^r . Начальный отрезок исходной последовательности записывается в крайний левый (нулевой) столбец матрицы. Элементы всех

остальных столбцов ($r = 1, 2, \dots$) рассчитываются на основе соотношения

$$e_m^r = (me_m^{r-1} - (m-r)e_{m-1}^{r-1})/r.$$

Если нумерация строк таблицы начинается с 1, то в столбце r следует заполнить те строки, номера которых больше r .

Каждый столбец таблицы Невилля можно рассматривать как новую последовательность $\{e_m^r\}$, которая асимптотически сходится быстрее предыдущих. Смысл данного утверждения состоит в том, что если $\{e_m^0\}$ принадлежит \mathcal{L} , то $e_m^0 - A = O(1/m)$ при $m \rightarrow \infty$. В то же время для других r имеем $e_m^r - A = O(1/m^{r+1})$.

Характерной особенностью последовательностей из класса \mathcal{L} является то, что при достаточно больших m они становятся монотонными. Аналогичным свойством будут обладать и все остальные итерированные по Невиллю последовательности $\{e_m^r\}$. Условие монотонности может быть использовано для получения односторонних, а в ряде случаев и двусторонних оценок на величину A .

Проблема, однако, заключается в том, что переходу к стадии монотонности часто предшествует одно или несколько колебаний относительно предельного значения. Количество таких колебаний имеет тенденцию увеличиваться с ростом r . Поскольку данные в таблице представлены в численной, а не в аналитической форме, то на практике гарантировать монотонный характер изменения элементов $\{e_m^r\}$ в последних строках таблицы удаётся только для нескольких первых столбцов. Именно это ограничение и определяет максимальное число итераций, которое имеет смысл выполнить в ходе работы алгоритма.

Перед тем как приступить к демонстрации возможностей метода сформулируем следующее утверждение.

Лемма 3. *Подпоследовательности $\{\phi(2k)\}$ и $\{\phi(2k+1)\}$ ($k = 1, 2, \dots$), выделенные из $\{\phi(m)\}$, принадлежат классу \mathcal{L} .*

Доказательство. Заметим, что функция $F(x) = \ln(\cos x + \sqrt{1 + \cos^2 x})$ при всех x имеет непрерывные производные любого порядка. В таком случае параметр n в формуле суммирования (9) можно устремить к бесконечности. Это даёт возможность представить $\ln \Lambda(m)$ в виде ряда по степеням параметра $h = \pi/(m+1)$. Последующая перестройка ряда, детали которой показаны в разделе 6, позволяет получить для $\ln \phi(m)$, а, следовательно, и для самой зависимости $\phi(m)$ разложения по обратным степеням m . Коэффициенты полученного разложения зависят от $\delta(m)$, однако после разбиения $\{\phi(m)\}$ на две части, соответствующие чётным и нечётным значениям индекса, получаем подпоследовательности, каждая из которых принадлежит \mathcal{L} . \square

Результаты расчёта параметра ϕ приведены в приложении D. Значения $\phi(m)$ брались из предпоследнего столбца таблицы приложения В. Эти значения были вычислены в системе Maple с 20 значащими цифрами. С такой же точностью определялись и элементы таблиц Невилля. При выводе полученные результаты округлялись до 10 цифр.

В рассматриваемом нами случае итерированные по Невиллю последовательности обладали весьма полезным свойством. При чётных m все $\{e_m^r\}$ оказались возрастающими, в то время как для нечётных m они были убывающими. Указанная особенность позволила получить для параметра молекулярная свобода двустороннюю оценку $1.791\,622\,81 \leq \phi \leq 1.791\,622\,85$. Если учесть, что исходные данные содержали лишь одну верную цифру в дробной части числа, то увеличение точности до семи разрядов не оставляет сомнений в целесообразности применения методов ускорения сходимости.

По характеру изменения данных в столбцах таблицы можно определять знаки коэффициентов s_j . Такая возможность является следствием линейности самого преобразования, а также принадлежности исходной последовательности $\{e_m^0\}$ классу \mathcal{L} .

В случае $\{\phi(m)\}$ коэффициент s_0 отрицателен и его знак не зависит от чётности m . Если теперь заметить, что для элементов первого столбца при $m \rightarrow \infty$ имеет место разложение

$$e_m^1 = A - \frac{s_1}{m^2} - \frac{2s_1 + s_2}{m^3} + O\left(\frac{1}{m^4}\right),$$

то, с учётом того, что первый столбец таблицы Невилля для подпоследовательности $\{\phi(2k)\}$ является возрастающим, делаем вывод о положительности s_1 . Для $\{\phi(2k+1)\}$ наблюдаем убывание значений в последних строках первого столбца таблицы, что свидетельствует об отрицательности s_1 . Корректность сделанных выводов можно проверить непосредственно при помощи соотношения (12).

Чередование знаков коэффициентов асимптотического разложения $\phi(m)$ в модели прямоугольных решёток оказывается достаточно простым, поэтому эффект колебания элементов $\{e_m^r\}$ относительно предельного значения наблюдается только в таблице соответствующей нечётным m при $r = 1$. Тем не менее, даже на основании этого единственного случая можно сделать некоторые практические рекомендации.

Для того чтобы с достаточной уверенностью идентифицировать стадию монотонного приближения к пределу, мы полагали, что характер изменения данных в четырёх последних строках таблицы должен сохраняться. В упомянутом выше случае максимальное значение e_m^1 достигалось в 8 строке таблицы. Рассматривая описываемую ситуацию как вполне типичную, приходим к выводу о том, что для применения методов ускорения сходимости желательно иметь в наличии $12 \div 14$ элементов последовательности. Если искомая величина существенно зависит от чётности параметров семейства графов, то указанное значение следует удвоить.

Для более сложных моделей немонотонность $\{e_m^r\}$ может проявляться при всех r . Как правило, с ростом r нерегулярность поведения только усиливается. Извлечение полезной информации из таких данных оказывается весьма проблематичным, поэтому выполнение максимального возможного количества итераций вовсе не гарантирует получение более точных оценок. В подобных ситуациях хорошим дополнением к таблицам Невилля станут нелинейные методы ускорения сходимости.

В моделях, не допускающих нахождения явного решения, утверждение леммы 3 выдвигается в качестве гипотезы. Если эта гипотеза справедлива, то описанный в данном разделе метод позволяет с высокой точностью рассчитать искомую величину. В противном случае последовательность не ускоряется, и количество верных разрядов будет одинаковым во всех столбцах таблицы, совпадая с их количеством в нулевом столбце.

А. ЧИСЛОВЫЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ, ПРИСУТСТВУЮЩИЕ В OEIS

Семейство графов	$P_2 \times P_n$	$P_3 \times P_{2n}$	$P_4 \times P_n$	$P_5 \times P_{2n}$	$P_6 \times P_n$	$P_7 \times P_{2n}$
Номер посл-ти	A000045	A001835	A005178	A003775	A028468	A028469
Семейство графов	$P_8 \times P_n$	$P_9 \times P_{2n}$	$P_{10} \times P_n$	$P_{11} \times P_{2n}$	$P_{12} \times P_n$	
Номер посл-ти	A028470	A028471	A028472	A028473	A028474	

В. ПОРЯДКИ РЕКУРРЕНТНЫХ СООТНОШЕНИЙ И АСИМПТОТИКА ЧИСЛА СОВЕРШЕННЫХ ПАРОСОЧЕТАНИЙ

Семейство графов	$C(m)$	$\lambda(m)$	$\phi(m)$	Порядок соотн.
$P_2 \times P_n$	$7.236\ 067\ 977\ 500 \cdot 10^{-1}$	$1.618\ 033\ 988\ 750 \cdot 10^0$	1.618 033 989	2
$P_3 \times P_{2n}$	$7.886\ 751\ 345\ 948 \cdot 10^{-1}$	$3.732\ 050\ 807\ 569 \cdot 10^0$	1.551 133 518	2
$P_4 \times P_n$	$5.274\ 743\ 291\ 666 \cdot 10^{-1}$	$2.840\ 536\ 194\ 095 \cdot 10^0$	1.685 389 033	4
$P_5 \times P_{2n}$	$5.986\ 593\ 220\ 231 \cdot 10^{-1}$	$1.254\ 375\ 443\ 458 \cdot 10^1$	1.658 385 564	4
$P_6 \times P_n$	$3.883\ 782\ 568\ 850 \cdot 10^{-1}$	$5.048\ 917\ 339\ 522 \cdot 10^0$	1.715 534 357	8
$P_7 \times P_{2n}$	$4.492\ 571\ 010\ 574 \cdot 10^{-1}$	$4.117\ 371\ 634\ 150 \cdot 10^1$	1.700 826 484	8
$P_8 \times P_n$	$2.869\ 899\ 903\ 981 \cdot 10^{-1}$	$9.007\ 097\ 521\ 947 \cdot 10^0$	1.732 392 186	16
$P_9 \times P_{2n}$	$3.356\ 185\ 652\ 248 \cdot 10^{-1}$	$1.339\ 287\ 475\ 537 \cdot 10^2$	1.723 135 032	16
$P_{10} \times P_n$	$2.124\ 065\ 208\ 333 \cdot 10^{-1}$	$1.609\ 391\ 186\ 943 \cdot 10^1$	1.743 140 221	32
$P_{11} \times P_{2n}$	$2.501\ 659\ 420\ 219 \cdot 10^{-1}$	$4.337\ 001\ 799\ 355 \cdot 10^2$	1.736 778 800	32
$P_{12} \times P_n$	$1.573\ 380\ 024\ 555 \cdot 10^{-1}$	$2.878\ 081\ 514\ 526 \cdot 10^1$	1.750 587 602	64
$P_{13} \times P_{2n}$	$1.862\ 348\ 052\ 851 \cdot 10^{-1}$	$1.400\ 897\ 318\ 438 \cdot 10^3$	1.745 947 796	56
$P_{14} \times P_n$	$1.166\ 047\ 222\ 514 \cdot 10^{-1}$	$5.149\ 455\ 175\ 590 \cdot 10^1$	1.756 051 814	128
$P_{15} \times P_{2n}$	$1.385\ 324\ 426\ 279 \cdot 10^{-1}$	$4.517\ 924\ 405\ 073 \cdot 10^3$	1.752 518 444	128
$P_{16} \times P_n$	$8.644\ 464\ 036\ 563 \cdot 10^{-2}$	$9.216\ 348\ 754\ 753 \cdot 10^1$	1.760 231 800	256
$P_{17} \times P_{2n}$	$1.029\ 946\ 620\ 392 \cdot 10^{-1}$	$1.455\ 515\ 319\ 010 \cdot 10^4$	1.757 451 465	256
$P_{18} \times P_n$	$6.409\ 955\ 981\ 677 \cdot 10^{-2}$	$1.649\ 876\ 972\ 589 \cdot 10^2$	1.763 532 659	512
$P_{19} \times P_{2n}$	$7.654\ 538\ 796\ 308 \cdot 10^{-2}$	$4.685\ 724\ 762\ 613 \cdot 10^4$	1.761 287 920	512
$P_{20} \times P_n$	$4.753\ 787\ 192\ 843 \cdot 10^{-2}$	$2.954\ 009\ 825\ 981 \cdot 10^2$	1.766 205 340	1024
$P_{21} \times P_{2n}$	$5.687\ 323\ 204\ 301 \cdot 10^{-2}$	$1.507\ 668\ 659\ 694 \cdot 10^5$	1.764 355 094	1024
$P_{22} \times P_n$	$3.525\ 935\ 657\ 749 \cdot 10^{-2}$	$5.289\ 593\ 126\ 429 \cdot 10^2$	1.768 413 585	2048
$P_{23} \times P_{2n}$	$4.224\ 840\ 280\ 749 \cdot 10^{-2}$	$4.849\ 110\ 148\ 447 \cdot 10^5$	1.766 862 274	2048
$P_{24} \times P_n$	$2.615\ 453\ 152\ 607 \cdot 10^{-2}$	$9.472\ 628\ 719\ 431 \cdot 10^2$	1.770 268 777	4096
$P_{25} \times P_{2n}$	$3.137\ 951\ 244\ 037 \cdot 10^{-2}$	$1.559\ 140\ 355\ 178 \cdot 10^6$	1.768 949 393	4096
$P_{26} \times P_n$	$1.940\ 211\ 022\ 037 \cdot 10^{-2}$	$1.696\ 477\ 963\ 519 \cdot 10^3$	1.771 849 320	8192
$P_{27} \times P_{2n}$	$2.330\ 396\ 790\ 098 \cdot 10^{-2}$	$5.011\ 917\ 887\ 521 \cdot 10^6$	1.770 713 484	7168

С. ПРОИЗВОДЯЩАЯ ФУНКЦИЯ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ $P_{13} \times P_{2n}$

$$G_{13}(x) = \frac{P_{13}(x)}{Q_{13}(x)}$$

$$\begin{aligned} P_{13}(x) = & (1-x)(1-2462x+ \\ & 2168401x^2 - 953769903x^3 + \\ & 245502916554x^4 - 40604835201335x^5 + \\ & 4584588468938816x^6 - 368540891945554289x^7 + \\ & 21753188209768262358x^8 - 965232551186585524553x^9 + \\ & 32798473459242706950327x^{10} - 866299962082122079493154x^{11} + \\ & 18005460507679423643714679x^{12} - 297519403284850383894698624x^{13} + \\ & 3942484123696794203363873669x^{14} - 42206380513232527518384197574x^{15} + \\ & 367346295579950222834695910181x^{16} - 2613262146744899349052737401563x^{17} + \\ & 15263321528197582044578695123682x^{18} - 73466444362848680329085596787571x^{19} + \\ & 292293477329584268935870358383552x^{20} - 963587327236935548554420550636709x^{21} + \\ & 2637098034512979175237434141371390x^{22} - 5999973318981078465758491973548013x^{23} + \\ & 11361088710037742179988838621592083x^{24} - 17916862798277166068340566643239162x^{25} + \\ & 23544405142651325209463659522415939x^{26} - 25787948675377177425456639380857600x^{27} + \\ & 23544405142651325209463659522415939x^{28} - 17916862798277166068340566643239162x^{29} + \\ & 11361088710037742179988838621592083x^{30} - 5999973318981078465758491973548013x^{31} + \\ & 2637098034512979175237434141371390x^{32} - 963587327236935548554420550636709x^{33} + \\ & 292293477329584268935870358383552x^{34} - 73466444362848680329085596787571x^{35} + \\ & 15263321528197582044578695123682x^{36} - 2613262146744899349052737401563x^{37} + \\ & 367346295579950222834695910181x^{38} - 42206380513232527518384197574x^{39} + \\ & 3942484123696794203363873669x^{40} - 297519403284850383894698624x^{41} + \\ & 18005460507679423643714679x^{42} - 866299962082122079493154x^{43} + \\ & 32798473459242706950327x^{44} - 965232551186585524553x^{45} + \\ & 21753188209768262358x^{46} - 368540891945554289x^{47} + \\ & 4584588468938816x^{48} - 40604835201335x^{49} + \\ & 245502916554x^{50} - 953769903x^{51} + \\ & 2168401x^{52} - 2462x^{53} + x^{54}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Q_{13}(x) = & (1-71x+952x^2-3976x^3+6384x^4-3976x^5+952x^6-71x^7+x^8) \\ & (1-1846x+684333x^2-88863671x^3+5304620048x^4-165441761576x^5+ \\ & 2911114622304x^6-30365738521053x^7+194344571749094x^8-781085479259969x^9+ \\ & 2002212789950035x^{10}-3316160898776544x^{11}+3593291750966064x^{12}- \\ & 2571925079697792x^{13}+1222383831824259x^{14}-385896704246482x^{15}+ \\ & 80456527547383x^{16}-10928486271989x^{17}+945014295568x^{18}-50346231208x^{19}+ \\ & 1585650976x^{20}-27716767x^{21}+242450x^{22}-923x^{23}+x^{24})(1-923x+242450x^2- \\ & 27716767x^3+1585650976x^4-50346231208x^5+945014295568x^6-10928486271989x^7+ \\ & 80456527547383x^8-385896704246482x^9+1222383831824259x^{10}-2571925079697792x^{11}+ \\ & 3593291750966064x^{12}-3316160898776544x^{13}+2002212789950035x^{14}- \\ & 781085479259969x^{15}+194344571749094x^{16}-30365738521053x^{17}+2911114622304x^{18}- \\ & 165441761576x^{19}+5304620048x^{20}-88863671x^{21}+684333x^{22}-1846x^{23}+x^{24}) \end{aligned}$$

D. УСКОРЕНИЕ СХОДИМОСТИ ПО НЕВИЛЛЮ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ $\{\phi(m)\}$ D.1. Чётные m

0	1	2	3	4	5	6
1.618 033 989	—	—	—	—	—	—
1.685 389 034	1.752 744 078	—	—	—	—	—
1.715 534 357	1.775 825 005	1.787 365 469	—	—	—	—
1.732 392 186	1.782 965 673	1.790 106 342	1.791 019 966	—	—	—
1.743 140 221	1.786 132 358	1.790 882 384	1.791 399 746	1.791 494 691	—	—
1.750 587 602	1.787 824 508	1.791 208 809	1.791 535 234	1.791 602 978	1.791 624 635	—
1.756 051 814	1.788 837 086	1.791 368 532	1.791 581 495	1.791 616 190	1.791 621 475	1.791 620 948
1.760 231 800	1.789 491 701	1.791 455 546	1.791 600 570	1.791 619 645	1.791 621 717	1.791 621 798
1.763 532 659	1.789 939 532	1.791 506 939	1.791 609 725	1.791 621 168	1.791 622 387	1.791 622 722
1.766 205 340	1.790 259 473	1.791 539 236	1.791 614 596	1.791 621 902	1.791 622 636	1.791 622 802
1.768 413 585	1.790 496 032	1.791 560 550	1.791 617 389	1.791 622 278	1.791 622 728	1.791 622 805
1.770 268 777	1.790 675 891	1.791 575 184	1.791 619 087	1.791 622 482	1.791 622 768	1.791 622 808
1.771 849 321	1.790 815 841	1.791 585 565	1.791 620 168	1.791 622 599	1.791 622 787	1.791 622 810

D.2. Нечётные m

0	1	2	3	4	5	6
1.551 133 518	—	—	—	—	—	—
1.658 385 564	1.765 637 610	—	—	—	—	—
1.700 826 484	1.785 708 324	1.795 743 681	—	—	—	—
1.723 135 032	1.790 060 677	1.794 413 030	1.793 969 480	—	—	—
1.736 778 800	1.791 353 872	1.793 293 665	1.792 547 422	1.792 191 907	—	—
1.745 947 796	1.791 792 776	1.792 670 584	1.792 047 503	1.791 797 543	1.791 718 670	—
1.752 518 444	1.791 942 332	1.792 316 222	1.791 843 740	1.791 690 918	1.791 648 268	1.791 636 534
1.757 451 465	1.791 982 610	1.792 103 444	1.791 748 813	1.791 653 886	1.791 631 666	1.791 626 133
1.761 287 921	1.791 979 566	1.791 968 911	1.791 699 845	1.791 638 634	1.791 626 433	1.791 623 817
1.764 355 094	1.791 959 652	1.791 879 997	1.791 672 530	1.791 631 559	1.791 624 484	1.791 623 184
1.766 862 274	1.791 934 078	1.791 818 995	1.791 656 326	1.791 627 968	1.791 623 658	1.791 622 971
1.768 949 393	1.791 907 699	1.791 775 802	1.791 646 221	1.791 626 011	1.791 623 273	1.791 622 887
1.770 713 484	1.791 882 573	1.791 744 383	1.791 639 656	1.791 624 883	1.791 623 078	1.791 622 850

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wu F.Y. Dimers on two-dimensional lattices. *International Journal of Modern Physics B*, 2006, vol. 20, pp. 5357–5371.
2. Kasteleyn P.W. The statistics of dimers on a lattice. *Physica*, 1961, vol. 27, pp. 1209–1225.
3. Temperley H.N.V., Fisher M.E. Dimer problem in statistical mechanics — an exact result. *Philosophical Magazine*, 1961, vol. 6, pp. 1061–1063.
4. Fisher M.E. Statistical mechanics of dimers on a plane lattice. *Physical Review*, 1961, vol. 124, pp. 1664–1672.
5. McQuistan R.B., Lichtman S.J. Exact recursion relation for $2 \times N$ arrays of dumbbells. *Journal of Mathematical Physics*, 1970, vol. 11, pp. 3095–3099.
6. Read R.C. A note on tiling rectangles with dominoes. *Fibonacci Quartely*, 1980, vol. 18, pp. 24–27.
7. Klarner D., Pollack J. Domino tilings of rectangles with fixed width. *Discrete Mathematics*, 1980, vol. 32, pp. 45–52.
8. Hock J.L., McQuistan R.B. A note on the occupation degeneracy for dimers on a saturated two-dimensional lattice space. *Discrete Applied Mathematics*, 1984, vol. 8, pp. 101–104.
9. Stanley R.P. On dimer coverings of rectangles of fixed width. *Discrete Applied Mathematics*, 1985, vol. 12, pp. 81–87.
10. The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences [Электронный ресурс]. The OEIS Foundation, режим доступа: <http://oeis.org>.
11. Караваев А.М., Перепечко С.Н. Задача о димерах на двуслойных прямоугольных сеточных графах. *Материалы XVIII Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВСППС2013)*. М.: Изд-во МАИ, 2013, стр. 92–94.
12. Bailey D.H. A Fortran-90 based multiprecision system [Электронный ресурс]. RNR Technical Report RNR-94-013, 1995, режим доступа: <http://cfd-legacy.lbl.gov/~dhbailey/mpdist/>.
13. Lundow P. H. Enumeration of matchings in polygraphs (revised and updated version) [Электронный ресурс]. Research Report, 1996, no. 12, Umeå University, режим доступа: <http://www.theorphys.kth.se/phl/Text/1factors.ps.gz>.
14. Караваев А.М. Вывод линейного рекуррентного соотношения с постоянными целыми коэффициентами по заданной целочисленной последовательности. *Естественные и технические науки*, 2012, № 5(61), стр. 22–27.
15. FlowProblem [электронный ресурс]. Copyright © 2008–2013, Artem M. Karavaev, режим доступа: <http://www.flowproblem.ru>.
16. Караваев А.М. Метод динамического программирования для подсчета замощений домино на прямоугольной решетке и цилиндре. *Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук*, 2013, № 06(53), стр. 13–18.
17. Центр высокопроизводительной обработки данных ЦКП КарНЦ РАН [электронный ресурс]. © Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН, 2009–2012, режим доступа: <http://cluster.krc.karelia.ru>.
18. Propp J. Enumeration of matchings: problems and progress. *New perspectives in geometric combinatorics, MSRI Publications*, 1999, vol. 38, pp. 255–291.
19. *Справочник по специальным функциям*. Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. Москва: Наука, 1979.
20. Gaunt D.S., Guttmann A.J. Asymptotic analysis of coefficients. In: *Phase transitions and critical phenomena*. Ed. C.Domb and M.S. Green. Academic Press, 1974, vol. 3, pp. 181–243.

Generating functions for dimer problem on rectangular lattices

A.M.Karavaev, S.N.Perepechko

We consider counting of perfect matchings on rectangular lattices by using generating functions. Methods of derivation and properties of these functions are examined. Special cases of lattice width are found which are not in agreement with Stanley's conjecture. The possibility of a "molecular freedom" parameter evaluation with high precision was demonstrated using only a few generating functions.

KEYWORDS: dimer problem, matching counting, generating functions, molecular freedom.