

Усовершенствованный метод матрицы переноса для подсчета гамильтоновых цепей на прямоугольных решетках и цилиндрах

А.М. Караваев

Петрозаводский государственный университет

Задача подсчета числа гамильтоновых цепей на прямоугольных сеточных графах имеет ряд важных практических приложений [1, 2] и является актуальной задачей физики полимеров. Гамильтонова цепь является достаточно точной моделью плотноупакованной макромолекулы. Задача состоит в том, чтобы рассчитать количество гамильтоновых цепей для заданной прямоугольной решетки $P_m \times P_n$ и заданного цилиндра $C_m \times P_n$.

Традиционно считается, что проводить расчеты на цилиндре $C_m \times P_n$ сложнее, чем на решетке $P_m \times P_n$. Использование нашей технологии дает возможность проводить вычисления для цилиндров с меньшими затратами ресурсов, чем для решеток, и получать, в связи с этим, более точные результаты. Технология заключается в усовершенствовании стандартного метода матрицы переноса, применительно к поставленной задаче.

Помимо нашей технологии, реализованной в алгоритме, к новым результатам также следует отнести получение точного решения задачи для решеток размером до 17×100 и цилиндров размером до 18×100 (ранее были известны лишь результаты для решеток размером 17×17 , а вычисления для цилиндров для $m > 6$ нами проводились впервые), мы получили ряд новых рекуррентных соотношений и уточнили универсальную константу связности для гамильтоновых цепей на решетках и цилиндрах: $\mu = 1.47281 \pm 0.00002$. Порядки полученных соотношений указаны в таблице 1. Все полученные данные доступны для скачивания на нашем сайте [3].

Все вычисления для решеток и цилиндров для $m \geq 17$ проводились на кластере Московского государственного института электронной техники в г. Зеленограде с использованием, в основном, 168 вычислительных ядер (21 узел по 8 ядер и 4 Гб ОП).

Таблица 1. Порядки рекуррентных соотношений для решеток и цилиндров с фиксированным параметром m . Символом «*» отмечены новые результаты

m	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$P_m \times P_n$	3	6	13	27	70	*183	*431		
$C_m \times P_n$		3	7	12	*24	*50	*93	*252	*452

Литература

1. Cloizeaux J., Jannink G. Polymers in Solution: Their Modelling and Structure. Oxford : Clarendon Press, 1990. 928 P.
2. N. Madras, G. Slade, The Self-Avoiding Walk. Birkhauser, Boston, MA, 1993.
3. FlowProblem [электронный ресурс]. Copyright © 2008–2010. Artem M. Karavaev. URL: <http://www.flowproblem.ru>. Загл. с экрана. — Яз. англ.