ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи
УДК 531.19

ПОГОСЯН СЕРГЕЙ СУРЕНОВИЧ

ФУНКЦИИ ГРИНА В НЕРАВНОВЕСНЫХ МОДЕЛЯХ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Специальность: 01.04.02 – Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 2012

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики
им. Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований.

Научные руководители: доктор физико-математических наук
(главный научный сотрудник ЛТФ ОИЯИ)
профессор В.Б. Приезжев

кандидат физико-математических наук
(старший научный сотрудник ЛТФ ОИЯИ)
А.М. Поволоцкий

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук
(начальник сектора ЛТФ ОИЯИ)
профессор Й. Бранков

доктор физико-математических наук
(Санкт-Петербургское отделение МИАН им. В.А. Стеклова)
профессор Н.М. Боголюбов

Ведущая организация: Петербургский институт ядерной физики
им. Б.П. Константинова РАН, Гатчина

Защита состоится "____" ________ 2012 г. в ____ ч. ____ мин. на заседании диссертационного совета Д 720.001.01 в Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований, 141980, г. Дубна, Московская область, ул. Жолио-Кюри, 6.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ЛТФ ОИЯИ.

Автореферат разослан "____" ________ 2012 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук А.Б. Арбузов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Объект исследования и актуальность темы.

Решеточные модели играют важную роль во многих областях теоретической физики, например, в статистической механике, квантовой теории поля, гидродинамике и т.д. Особый интерес представляют точно решаемые решеточные модели, которые позволяют обнаружить критические явления в системах. Такое критическое поведение трудно исследовать численно или какими-то приближенными методами. Одним из важнейших примеров точно решаемых моделей в равновесной статистической механике является двумерная модель Изинга, решение которой было впервые дано Онсагером в 1944 году. Она описывается относительно простым гамильтонианом с короткодействующими взаимодействиями между частицами, и в ней может возникнуть фазовый переход второго рода.

В последние десятилетия большое внимание уделялось исследованиям неравновесных фазовых переходов, часто встречающихся в неравновесной статистической физике. Они могут возникать даже в простейших одномерных многочастичных системах с нетривиальной динамикой. Примерами таких систем являются: кинетический процесс биополимеризации, движение транспорта по длинному шоссе, подвижный решеточный газ, самоорганизованная критичность, растущие поверхности и т.д. Большинство явлений, встречающихся в таких системах, невозможно описать в рамках теории среднего поля. Эти системы можно смоделировать с помощью одномерных многочастичных процессов, в частности, полностью асимметричного процесса с простым исключением (Totally Asymmetric Simple Exclusion Process, TASEP). TASEP является стохастической системой взаимодействующих частиц и служит парадигматической моделью для неравновесной статистической механики, как двумерная модель Изинга в равновесной статистической механике. Для конечного числа частиц его динамика описывается с помощью основного кинетического уравнения.

Динамические правила системы определяют вероятности переходов для марковских цепей, построенных на множестве конфигураций частиц.

Задав начальные условия, можно узнать вероятности различных событий, происходящих в ходе эволюции Маркова. Динамика модели TASEP в дискретном времени характеризуется законом обновления состояния на каждом временном шаге. На одномерной решетке с дискретным временем наиболее важными случаями являются модели с обратным последовательным, параллельным и параллельно-подрешеточным обновлениями.

Общим свойством этих правил обновления является короткодействующее отталкивание между частицами за счет условия исключения. Второе важное свойство указанных обновлений - это их “решаемость”, т.е. основное кинетическое уравнение может быть решено с помощью анзаца Бете и функция Грина, т.е. решение основного кинетического уравнения с заданными начальными координатами частиц, может быть аналитически вычислена явным образом.

Для случая TASEP с непрерывным временем, а также с обратным последовательным и параллельным обновлениями, функции Грина были найдены ранее в виде определителя матрицы. Такое представление дает возможность прямого вывода распределения потока частиц и детального анализа динамических свойств TASEP.

С помощью функции Грина можно исследовать многочастичные корреляционные функции, т.е. вероятности нахождения нескольких фиксированных частиц в данных пространственно-временных точках. Первый точный результат для корреляционных функций в TASEP был получен в работе Йоханссона, где рассматривалась эволюция TASEP с параллельным обновлением и ступенчатым начальным условием. В дальнейшем этот результат был обобщен для обратно-последовательного обновления и плоского начального условия. Связь TASEP с теорией детерминантных точечных процессов позволила также рассчитать многочастичные корреляционные функции. В общем случае результат может быть представлен в виде определителя Фредгольма оператора с некоторым интегральным ядром. Асимптотический анализ ядра представляет особый интерес, так как позволяет изучать скейлинговый предел корреляционных функций, которые дают универсальные скейлинговые функции класса Кардара-Паризи-Жанга.

С 1960-х годов переход спираль-клубок в биополимерах был предметом интенсивных теоретических исследований и активно исследуется до сих пор. Есть две основные причины, из-за которых интерес к этой проблеме не убывает. С биологической точки зрения переход спираль-клубок связан с такими важными генетическими процессами, как транскрипция и трансляция. С другой стороны, с точки зрения физики, ДНК, состоящая из двух цепей, является примером квазиодномерной системы с дальнодействующими корреляциями. Для описания перехода спираль-клубок обычно применяются теоретические модели, основанные на одномерных Изингоподобных моделях или используется аналогия между поведением полимера и квантово-механической частицы в потенциальной яме. Многие теоретические конструкции включают возможность формирования петель. В большинстве теорий рассматриваются топологические проблемы образования петель в термодинамическом пределе или в приближении среднего поля. В настоящее время существуют много работ по теории перехода спиральклубок в гомополимерах, в частности в ДНК, где учитывается влияние молекул воды, ионов, межмолекулярных взаимодействий лигандов и неоднородности цепочки. Тем не менее, до сих пор открытым остается вопрос о “минимальной” модели перехода спираль-клубок в гомополинуклеотидах, основанной только на фундаментальных свойствах двухцепочечной структуры. Существуют несколько работ, посвященных этой проблеме, а также разработана модель перехода спираль-клубок для двухцепочечной гомополимерной ДНК. Эта модель описывает общие свойства системы, такие как большое количество внутренних состояний вращения, энергию дополнительных связей и ограничения на конформационные возможности цепи, возникающие в связи с образованием водородной связи в двухцепочечной системе. Обычно такое ограничение описывается через отношение статистических сумм полимера в состоянии петли и в состоянии открытой цепи. Эта величина рассматривается во многих полуэмпирических теориях среднего поля при модификации теории Штокмайера для достаточно длинных цепей. Статистическая сумма и свободная энергия были рассчитаны путем решения характеристического уравнения, которое связывает длину петли с энергией образования водородной связи.

Цель работы.

Целью настоящей диссертации является развитие уже существующих и создание новых аналитических методов исследования неравновесных моделей статистической механики.

Научная новизна и практическая ценность.

С помощью найденных функций Грина для моделей TASEP с параллельным подрешеточным обновлением и TASEP с обобщенными правилами обновления можно исследовать одночастичные или многочастичные корреляционные функции.

Разработанный метод обобщенных функций Грина позволяет рассматривать многокаскадный процесс и расширить область применимости полученных корреляционных функций.

Моделирование двухцепочечного биополимера с помощью двумерного случайного блуждания одной частицы на квадратной решетке позволило проводить новые исследования фазового перехода спираль-клубок.

На защиту выдвигаются следующие результаты:

- Показано, что модель TASEP с параллельным подрешеточным обновлением эквивалентна модели TASEP с обратной последовательной динамикой, в которой частицы начинают и заканчивают движение в различные моменты времени. С помощью этого соответствия получены функции Грина для TASEP с параллельным подрешеточным обновлением для различных начальных и конечных условий.

- Обобщены правила обновления положений частиц полностью асимметричного процесса с исключенным объемом в дискретном времени. Введен новый параметр взаимодействия между частицами и с помощью анзаца Бете решено кинетическое уравнение модели для конечного числа частиц на бесконечной решетке. Нестационарное решение для произвольных начальных условий представлено в виде детерминанта.

- Исследованы совместные вероятности выходов частиц модели TASEP из множеств с заданной пространственно-временной структурой. Вероятности выходов частиц из последовательности обобщенных границ получены в виде определителя Фредгольма. Показано, что искомая вероятность в скейлинговом пределе асимптотически сходится к универсальному процессу Эйри-2.

- С помощью двумерного случайного блуждания на квадратной решетке исследована математическая модель двухцепочечного биополимера. Учтены два конкурирующих взаимодействия мономеров в цепях и доказано существование полностью денатурированных состояний полимера при конечных температурах.

Апробация работы.

Результаты диссертации докладывались на:

- International Conference Quantum Theory and Symmetries (QTS-7) 2011, Prague, Czech Republic.

- XV научной конференции молодых ученых и специалистов 2011, ОИЯИ, Дубна.

- I школе-конференции молодых ученых и специалистов 2012, Алушта, Украина.

- Семинаре отдела "Статистическая механика" Лаборатории теоретической физики ОИЯИ, Дубна.

Публикации.

Диссертация написана на основании содержания работ [1–5].

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения. Общий объем диссертации 108 страниц машинописного текста, включая 19 рисунков и список литературы из 85 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении представлен краткий обзор основных работ и результатов по теме точно решаемых решеточных моделей в статистической механике. Там же кратко описаны основные результаты, составляющие данную диссертацию.

В первой главе *"TASEP с параллельным подрешеточным обновлением"* описаны свойства модели TASEP и исследована модель TASEP с параллельным подрешеточным обновлением, в которой в нечетные моменты времени обновляются положения частиц, находящихся в четных узлах, а в четные моменты времени могут двигаться частицы, стоящие в нечетных узлах.

Полностью асимметричный процесс с исключенным объемом представляет собой марковский процесс, и его динамика описывается системой уравнений Маркова, которая называется основным кинетическим уравнением. Для того, чтобы решить кинетические уравнения, нужно привести трансфер-матрицу к диагональному виду. Метод анзаца Бете дает возможность изучать динамические свойства TASEP. В частности, задавая начальные условия, можно решить кинетические уравнения и получить функцию Грина в виде детерминанта. Такое аналитическое вычисление с помощью анзаца Бете впервые было выполнено Шутцем для TASEP с непрерывным временем, а в дальнейшем такой подход был развит для моделей с дискретным временем, в частности, для обратного последовательного и параллельного обновлений, где была использована также геометрическая интерпретация анзаца Бете, основанная на комбинаторном анализе траекторий частиц.

Для того, чтобы найти функцию Грина для TASEP с параллельным подрешеточным обновлением, рассмотрено множество дискретных пространственно-временных траекторий на решетке с шахматной структурой. С помощью двух последовательных отображений траекторий показано, что модель эквивалентна модели TASEP с обратной последовательной динамикой, в которой частицы начинают и заканчивают движение в разные моменты времени. Используя выражение для функции Грина TASEP с обратным последовательным обновлением, получена точная детерминантная формула функции Грина для TASEP с параллельной подрешеточной динамикой при различных начальных и конечных условий.

Функция Грина для параллельной подрешеточной динамики однородна по координатам частиц, симметрична по отношению к преобразованию частица-дырка и имеет относительно простую аналитическую форму. С другой стороны, она содержит более сложную временную зависимость, которая включает начальные и конечные координаты под знаком функции округления, что может привести к усложнению многочастичных корреляционных функций.

Во второй главе *"TASEP с обобщенным правилом обновления"* введено обобщенное правило обновления для модели TASEP на бесконечной одномерной решетке и аналитически вычислена функция Грина.

За счет обобщения изменяется свойство короткодействующего отталкивания между частицами, но модель остается точно решаемой. Помимо условия исключения, допускается притяжение между соседними частицами, которое меняет эволюцию системы коренным образом. В частности, вводится параметр взаимодействия между частицами, и, в зависимости от его значения, можно получить либо притяжение, либо дополнительное отталкивание между частицами. Два частных значения этого параметра соответствуют предельным случаям TASEP с параллельным и обратным последовательным обновлениями. В случае притяжения поток частиц имеет тенденцию к образованию скоплений частиц, которая не характерна для известных видов обновления. В этом случае система демонстрирует коллективное поведение, которое типично для автомобильного трафика.

Для описания динамики модели используется принцип обратного последовательного обновления: в данный момент времени положения частиц обновляются справа налево и рассматриваются ситуации, когда две частицы встречаются в соседних узлах в начале временного шага. Правая частица такого кластера (в том числе и изолированная частица) двигается с вероятностью p и остается на месте с вероятностью $1-p$. Если правая частица пары не двигается в течение данного временного шага, то левая частица остается на месте с вероятностью 1. Если же правая частица делает шаг, то следующая частица прыгает с вероятностью $(1+\nu)p$ или стоит с вероятностью $1-(1+\nu)p$. Естественным ограничением параметра ν являются неравенства $0 \le (1+\nu) \le 1/p$. Для $\nu = 0$ имеем обычный TASEP с обратным последовательным обновлением, а для $\nu = -1$ получаем TASEP с параллельным обновлением.

В начале главы с помощью анзаца Бете дано нестационарное решение основного кинетического уравнения, когда имеется кластер, состоящий из двух частиц. В конце главы приведено общее доказательство анзаца Бете для кластера из N частиц. В последнем случае при аналитических вычислениях использована математическая индукция. При произвольных начальных условиях показано, что функцию Грина можно представить в детерминантной форме. Решение обобщает известные результаты для обратной последовательной и параллельной динамики и совпадает с ними при вышеуказанных значениях параметра взаимодействия.

В третьей главе *"Разновременные корреляционные функции"* исследованы совместные вероятности выходов частиц модели TASEP из множеств с заданной пространственно -временной структурой.

Многочастичные корреляционные функции могут быть исследованы с помощью рассмотрения TASEP как вероятностной меры на совокупности взаимодействующих решеточных путей. Эти пути описывают динамику распространения частиц на пространственно-временной плоскости. Когда путь идет вниз, это соответствует тому, что частица стоит на месте, а когда вниз-вправо, то частица делает шаг. В таком представлении корреляционные функции дают маргинальную вероятность прохождения путей, соответствующих заданным частицам, через определенные точки или ребра решетки.

В третьей главе диссертации вычислена вероятность того, что траектории выбранных частиц содержат заданные точки или ребра. Такое вычисление является обобщением известных результатов для пространственно-временных корреляционных функций TASEP, которые соответствуют выходам из множества, ограниченного прямыми вертикальными или горизонтальными линиями. Применение обобщенных функций Грина позволяет полностью избавиться от условия временной упорядоченности, которое возникало в работах других авторов, и остается только пространственно-подобное упорядочение координат частиц. Для расширения области пространственно-временных конфигураций, рассмотрены границы в наиболее общем виде. Они представлены в виде ломаных линий, идущих с северо-востока на юго-запад единичными вертикальными или горизонтальными шагами. Каждая из границ делит пространственно-временную плоскость на две части. Такая конструкция границ позволяет избавиться от любого ограничения временной упорядоченности и дает возможность рассматривать вероятности того, что частицы покидают части плоскости, ограниченные границами, выходя из данных точек границ.

Вероятности выходов частиц из последовательности обобщенных границ получены в виде определителя Фредгольма. После получения выражения для вероятности выходов из границ, в третьей главе диссертации выполнен также асимптотический анализ ядра определителя Фредгольма. Решеточные границы использованы в качестве приближения гладких кривых на пространственно-временной плоскости, а выбранные точки рассмотрены в непосредственной близости от гладкого пути, пересекающего эти кривые. Основной вывод, который следует из этого анализа состоит в том, что поведение вероятностной функции выходов на большом масштабе является универсальным, пока рассматриваемый путь не нарушает ограничения на условие пространственно-подобности. Флуктуации обобщенных координат выходов частиц, распространяющихся с начальным условием в виде ступеньки, описываются ансамблем Эйри-2 так же, как в чисто пространственном случае.

В четвертой главе *"Биополимеры и двумерные случайные блуждания"* исследована математическая модель двухцепочечного биополимера с помощью двумерного случайного блуждания на квадратной решетке.

Структура гомополинуклеотида, в частности ДНК, описывается с помощью последовательных областей, которые имеют вид спирали или клубка. Спиральные области, которые по существу являются одномерными, стабилизируются водородными связями и ароматическими взаимодействиями. Будем предполагать, что водородные связи могут формироваться только между основаниями, имеющими одинаковые номера, т.е. все петли симметричны. Молекула ДНК рассматривается в виде двух случайных цепей, которые имеют одинаковые начальные точки. Комплементарные пары азотных оснований в состоянии создать водородные связи и каждому такому соединению соответствует пересечение двух случайных цепей. Отсутствие меандров обеспечивает исключение трехмерных узлов и дополнительных пар в основании внутри петель.

Расстояние между основаниями описывается положением частицы, блуждающей по двумерной решетке в дискретном времени. Вначале, для удобства, рассмотрено простое случайное блуждание частицы на квадратной решетке. В простом двумерном случайном блуждании предполагается, что частица в каждый временной шаг обязательно перемещается налево, направо, вверх или вниз с равными вероятностями. Каждый раз, когда частица проходит через начало координат, общая вероятность траектории умножается на статистический вес k, что соответствует статистическому весу формирования пар в основании. Вероятность возврата частицы в начало координат после N шагов, т.е. статистическая сумма полимера, состоящего из двух цепочек, связанных между собой первыми и последними мономерами, записывается с помощью производящей функции первых возвратов в начало координат. В диссертации проведен асимптотический анализ статистической суммы путем вычисления контурных интегралов на комплексной плоскости. Получены средняя энергия и спиральность полимера при $k > 1$ и $k < 1$.

В диссертации также обобщена модель простого случайного блуждания, в которой частица может оставаться в начале координат в течение нескольких временных шагов. С помощью такого обобщения можно рассмотреть два вида образования водородных связей. Первый вид возникает при непосредственном контакте между полимерными цепями, который приводит к возникновению одной водородной связи при последующей свободной эволюции обоих полимеров. Это контактное взаимодействие компенсируется короткодействующим межмолекулярным отталкиванием. Вторым видом является формирование последовательностей водородных связей. Этот случай соответствует прилипанию полимерных цепей в спиральной фазе, когда межмолекулярное отталкивание подавлено. Энергия такой связи состоит из двух слагаемых – энергии водородной связи и энергии ароматического взаимодействия между соседними парами азотистых оснований в области спирального состояния ДНК. Соответственно, полный статистический вес траектории случайного блуждания умножается на k_1 при посещении частицы начала координат и на k_2, когда частица не выходит из него в данный момент времени.

Температурное поведение системы можно получить, рассматривая сингулярности подынтегрального выражения для статистической суммы. В зависимости от параметров модели критическая температура T_c может существовать там, где поведение меняется сингулярным образом. Учтены два конкурирующих взаимодействия мономеров в цепях и получены полностью денатурированные состояния полимера при конечных температурах. Спиральность полностью исчезает, когда температура превосходит критическую T_c. Отметим, что в случае простого случайного блуждания при $k > 1$, степень спиральности стремится к нулю только при больших температурах. Можно заключить, что модель случайного блуждания с остановками в начале координат описывает резкий переход от спирального состояния в клубок. Такое же поведение наблюдается для средней энергии.

В заключении кратко сформулированы полученные в диссертации результаты, которые и выносятся на защиту.

Литература

[1] S.S. Poghosyan, V.B. Priezzhev and G.M. Schütz,
Green functions for the TASEP with sublattice parallel update,
Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, Vol. 2010, No. 04, P04022, pp. 1-8 (2010).

[2] A.E. Derbyshev, S.S. Poghosyan, A.M. Povolotsky and V.B. Priezzhev,
The totally asymmetric exclusion process with generalized update,
Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, Vol. 2012, No. 05, P05014, pp. 1-13 (2012).

[3] S.S. Poghosyan, A.M. Povolotsky and V.B. Priezzhev,
Universal exit probabilities in the TASEP,
Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, Vol. 2012, No. 08, P08013, pp. 1-37 (2012).

[4] G.N. Hayrapetyan, E.Sh. Mamasakhlisov, Vl.V. Papoyan and S.S. Poghosyan,
The melting phenomenon in random-walk model of DNA,
Physics of Atomic Nuclei, Vol. 75, No. 10, pp. 1268-1271 (2012).

[5] G.N. Hayrapetyan, V.F. Morozov, Vl.V. Papoyan, S.S. Poghosyan and V.B. Priezzhev,
The helix-coil transition in a double-stranded polynucleotide and the two-dimensional random walk,
Modern Physics Letters B, Vol. 26, No. 13, pp. 1250083-1 – 1250083-15 (2012).