

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

**Колебательные и волновые явления в упорядоченных и
неупорядоченных ансамблях взаимодействующих частиц**
НАУЧНЫЙ ДОКЛАД ОБ ОСНОВНЫХ РЕЗУЛЬТАТАХ ПОДГОТОВЛЕННОЙ
НАУЧНО-КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ (ДИССЕРТАЦИИ)

аспиранта 4 курса

направления 03.06.01 «Физика и астрономия»

физического факультета

Сергеева Константина Сергеевича

Научный руководитель

д. ф.-м. н., профессор

Четвериков А.П.

Саратов – 2018

Актуальность темы. Статистическое описание неравновесных систем является одним из актуальных направлений современной нелинейной динамики. Для этого направления характерно моделирование больших ансамблей из множества элементов, которые тем или иным образом взаимодействуют друг с другом. Природа парциальных элементов и связей между ними может в значительной степени различаться. Интерес к задачам подобного рода подтверждается большим количеством работ по моделированию динамики ансамблей, изданных за последние годы.

Однако, большая часть этих работ посвящена исследованиям ансамблей осцилляторов. При этом задачи динамики ансамблей неосциллирующих активных элементов – частиц выглядят освещенными в меньшей степени.

Таким образом, исследования ансамблей активных и консервативных частиц, связанных нелинейными силами, выполненные в рамках настоящей работы, представляют собой актуальную задачу нелинейной динамики.

Целью данной работы является поиск общих свойств упорядоченных и неупорядоченных ансамблей взаимодействующих элементов, а так же определение возможностей применения особенностей динамики таких ансамблей для переноса зарядов (в частности, на примере молекулы ДНК). Кроме того, необходимо систематизировать различные стационарные и метастабильные режимы ансамблей активных элементов и ввести характеристики для их количественной оценки.

Для достижения поставленных целей в рамках диссертационного исследования необходимо решить следующие **основные задачи**:

1. Разработать необходимое программное обеспечение для численного моделирования ансамблей
2. Исследовать влияние «активности» частиц на динамику одномерной плотноупакованной цепочки частиц с потенциальной связью

3. Определить, какие новые динамические режимы возникают в двумерной решетке активных частиц и сопоставить полученные результаты с консервативной решеткой
4. Разработать метод количественной идентификации обнаруженных режимов, в том числе в присутствии шума
5. Определить особенности динамики неупорядоченного ансамбля активных частиц с взаимодействием через выравнивание скорости
6. Определить условия, необходимые для формирования в молекуле ДНК локализованных возбуждений требуемой конфигурации

Достоверность научных выводов работы подтверждается, в первую очередь, воспроизводимостью результатов численного эксперимента вне зависимости от конкретных схем численного анализа. Разработанное программное обеспечение тестировалось путем сопоставления с ранее полученными известными результатами. Достоверность так же подтверждается соответствием результатов, полученных в численном эксперименте, с аналитическими результатами, когда таковые существуют.

Научная новизна результатов диссертационной работы определяется следующим:

1. Впервые показано, что в цепочках активных частиц, связанных нелинейными потенциальными силами, состояние с неравномерным распределением солитонов является метастабильным и соответствует длительному переходному процессу к состоянию с равномерным распределением солитонов. Показано, что длительность метастабильной стадии экспоненциально нарастает с ростом числа частиц в цепочке, определены зависимости ее длительности от параметров и получены аналитические аппроксимации соответствующих зависимостей.

2. Обнаружено, что стационарные моды цепочки активных частиц переключаются под влиянием шума. Приведены аппроксимации функций распределения вероятностей. Показано, что меняя интенсивность шума, можно управлять преимущественным направлением переключения мод (в сторону увеличения либо уменьшения числа солитонов). Показано, что переключения мод связаны с двумя независимыми механизмами.
3. Обнаружено, что при переходе от частиц как осцилляторов с нулевой частотой к осцилляторам Рэля в цепочке возможно возбуждение локализованных состояний, подобных дискретным бризерам. Обнаруженные возбуждения обладают неограниченным временем жизни.
4. Определены основные метастабильные возбуждения в двумерной решетке активных частиц. Впервые определены условия, необходимые для возбуждения и распространения краудионов в двумерных активных решетках. Показано, что времена жизни и длины пробегов краудионов в активных решетках значительно выше, чем в консервативных.
5. Впервые сопоставлено поведение малых ансамблей активных элементов, взаимодействующих через общее поле скоростей, с поведением больших ансамблей и с существующим аналитическим описанием. Определены границы применимости аналитического описания для малых ансамблей, продемонстрировано существование области бистабильности и бимодальности.
6. Впервые определен вид практически реализуемых начальных условий, оптимальных для запуска мобильных бризеров в молекуле ДНК на основе модели Пейрарда-Бишопа-Доксуа.

Научная и практическая значимость результатов диссертационной работы обусловлена тем, что полученные научные результаты вносят определенный вклад в современную теорию колебаний и волн, а так же в другие смежные области науки. В частности, полученные результаты могут найти применение

ние в задачах транспорта зарядов. Изложенные в настоящей диссертационной работе результаты позволяют провести параллели между динамикой неосциллирующих частиц и динамикой ансамблей осцилляторов, а так же теорией химерных состояний.

В ходе исследований было впервые показано существование диссипативных краудионов с большим временем жизни в двумерных решетках. Установлено, что в упорядоченных активных цепочках возможно управлять переключениями мод посредством нагрева (шумового воздействия), изучен механизм индуцированных шумом переходов в неупорядоченных ансамблях неосциллирующих элементов.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

1. В одномерных цепочках активных частиц состояния, возникающие из стохастических начальных условий, имеют вид неравномерно распределенных солитонов и являются метастабильными состояниями с длительностью, экспоненциально зависящей от числа частиц в цепочке. Стационарными состояниями (модами) цепочек с периодическими граничными условиями являются кноидальные волны с равномерным распределением максимумов плотности частиц (солитонов) по длине цепочки. Под воздействием шума возможно переключение мод, причем преимущественное направление переключений определяется интенсивностью шума.
2. В двумерных плотноупакованных активных решетках существуют локализованные метастабильные состояния в виде солитоноподобных волн различной конфигурации. Существуют области в пространстве параметров, в которых активная решетка способна восстанавливать свою структуру после локализованного внешнего воздействия, а так же области, в которых локализованное внешнее воздействие ведет к возбуждению долгоживущего метастабильного состояния – краудиона.

3. Малые ансамбли неупорядоченных частиц, связанные посредством общего поля скоростей, имеют области бистабильности в пространстве параметров, границы которых связаны с жесткими стохастическими бифуркациями. Внутри областей бистабильности возможно установление одного из двух стационарных состояний с разными вероятностными распределениями скорости. Присутствие аддитивного шума приводит к смене области бистабильности на область бимодальности.
4. Для возбуждения в молекуле ДНК устойчивых мобильных дискретных бризеров необходимо начальное возмущение скорости либо координаты нескольких нуклеотидных пар, находящихся вблизи одного из закрепленных концов молекулы.

Апробация работы. Основные результаты научных исследований были представлены на десяти международных конференциях:

1. Международная конференция "Nonlinear Dynamics of Deterministic and Stochastic systems: Unraveling Complexity", 19–21 мая 2014, Саратов, Т.Е. Vadivasova, K.S. Sergeev "Noise induced transition in a small ensemble of active brownian particles"
2. Международная конференция "Saratov Fall Meeting", 23–26 сентября 2014, Саратов, K.S. Sergeev, A.P. Chetverikov "Behaviour of ensemble of active Brownian particles under influence of active and passive noise"
3. Международная конференция "Dynamics, Bifurcations and Chaos", 20–24 июля 2015, Нижний Новгород, K.S. Sergeev, Т.Е. Vadivasova "Dynamics of ensemble of active Brownian particles interacting via Morse potential forces"
4. Международная конференция "Saratov Fall Meeting", 21–25 сентября 2015, Саратов, K.S. Sergeev, A.P. Chetverikov "Dissipative solitons in ensemble of active Brownian particles interacting via Morse potential forces"

5. Международная конференция "International conference on Control of Complex systems and Networks", 4–8 сентября 2016, Германия, Херингсдорф, K.S. Sergeev, A.P. Chetverikov "Noise influence on steady states and metastable modes in a nonlinear chain of interacting non-oscillating elements"
6. Международная конференция "Saratov Fall Meeting", 27–30 сентября 2016, Саратов, K.S. Sergeev, A.P. Chetverikov "Metastable modes in Morse-Rayleigh chain"
7. Международная конференция «Математическая биология и биоинформатика», 16-21 октября 2016, Пушино, Лахно В.Д., Сергеев К.С., Четвериков А.П. «Транспорт заряда мобильными бризерами в молекуле ДНК, возмущенной начальными смещениями нуклеотидных пар»
8. Международная конференция "Saratov Fall Meeting", 25–30 сентября 2017, Саратов, K.S. Sergeev, A.P. Chetverikov "Structure formation in chain of nonlocal coupled active elements"
9. Международная конференция "Saratov Fall Meeting", 25–30 сентября 2017, Саратов, K.S. Sergeev, A.P. Chetverikov "Spatial structures formation in two-dimensional ensemble of active particles"
10. Научная школа «Нелинейные волны – 2018», 26 февраля – 4 марта 2018, Нижний Новгород, Сергеев К.С., Четвериков А.П. «Плоские солитоны в двумерной решетке активных частиц»

Публикации. По теме диссертации опубликовано 5 статей и принята к печати одна статья в изданиях, входящих в список ВАК [1–6]. Диссертационная работа поддержана грантом РФФ № 16-12-10175

Личный вклад выразился в проведении всего объема экспериментальных работ, проведении компьютерного моделирования и анализе полученных результатов. Все численные эксперименты проводились при помощи собствен-

ного программного обеспечения, разработанного автором. Также автор принимал участие в постановке задач.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы.

Во введении обосновывается актуальность выбранной темы диссертации, проводится краткий обзор имеющихся в научной литературе результатов по теме проводимого исследования, определяются цели и задачи исследования, формулируются положения и результаты, выносимые на защиту.

В первой главе проводится исследование динамики одномерной цепочки активных частиц, связанных силами потенциала Морзе. Динамика каждой частицы описывается уравнением в безразмерных переменных

$$\ddot{q}_i - \mu \left(1 - \frac{\dot{q}_i^2}{v^2}\right) \dot{q}_i = (1 - e^{q_i - q_{i+1}}) e^{q_i - q_{i+1}} - (1 - e^{q_{i-1} - q_i}) e^{q_{i-1} - q_i} + \sqrt{2D_E} \xi_i(t). \quad (1)$$

Здесь D - глубина потенциальной ямы Морзе (потенциал имеет значение $-D$ при $r = 0$), b характеризует жесткость потенциальных сил, $q_i = b(x_i - i\sigma)$ - безразмерное отклонение i -той частицы от ее равновесного положения в невозмущенной цепочке $x_{i0} = i\sigma$ (т.е. безразмерная координата), σ определяет равновесное расстояние между соседними частицами, точками обозначено дифференцирование по безразмерному времени $\tau = \omega_M t$, $\omega_M = \sqrt{\frac{2Db^2}{m}}$ - частота линейных колебаний частиц цепочки за счет связи вблизи положений равновесия, $v = v_0 b / \omega_M$, $\mu = \gamma_0 / m \omega_M$, $\xi_i(t)$ - источник белого Гауссова шума с нулевым средним, а D_E - интенсивность шума. Предполагается, что уравнения удовлетворяют периодическим граничным условиям: $q_{N+1} = q_1, v_{N+1} = v_1$, где $v_i = \frac{dq_i}{d\tau}$.

Исследуется механизм возбуждения диссипативных солитонов. Показано, что при малой «жесткости» потенциала $b\sigma$ частицы отталкиваются недостаточно сильно для того, чтобы «отразиться» и изменить направление скорости на противоположное, поэтому формируется мало солитонов. С ростом жесткости

потенциала всё больше частиц меняют направление скорости при взаимодействии, и, соответственно, возбуждается большее число солитонов. С ростом коэффициента трения μ влияние потенциального взаимодействия становится слабым по сравнению с трением, поэтому большинство частиц не изменяют свою скорость при взаимодействии с соседями, и число солитонов уменьшается. Таким образом, число солитонов, формирующихся от одной первоначально возмущенной частицы, сильно зависит от значений параметров связи и трения.

При старте со случайных начальных условий в ансамбле формируются солитоны и солитонные кластеры. Принципиальным является вопрос о количестве солитонов, формирующих кластер. Зависимости наиболее вероятного размера возбуждающихся кластеров от управляющих параметров приведены на рисунке 1.

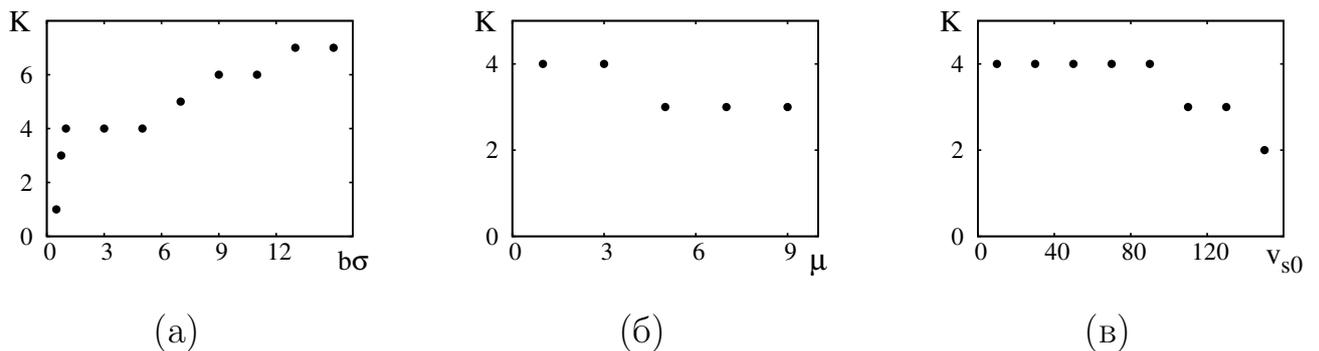


Рис. 1. Зависимость наиболее вероятного размера кластеров K от управляющих параметров: (а) от параметра $b\sigma$ при $\mu = 1$; $v_{s0} = 10$; (б) от параметра μ при $b\sigma = 5$; $v_{s0} = 10$; (в) от уровня v_{s0} при $b\sigma = 5$; $\mu = 1$.

Как следует из полученных результатов, в большинстве случаев наиболее вероятно возникновение кластера из 4-5 солитонов. Увеличение «жесткости» потенциала $b\sigma$ приводит к увеличению характерного размера кластера (рис. 1 а). Влияние на размер кластера оказывает также величина отрицательного трения μ (рис. 1 б): с ростом параметра μ возбуждение солитонов становится всё более затруднительным и наиболее вероятный размер кластера также

уменьшается. С ростом величины начальных возмущений происходит снижение характерного размера кластеров (рис. 1 в).

В рассматриваемой цепочке с периодическими граничными условиями стационарным является состояние, при котором солитоны на кольце распределены равномерно. Следовательно, состояние, в котором пара диссипативных солитонов находится на небольшом расстоянии друг от друга, является метастабильным. Процесс перехода к стационарному равномерному распределению солитонов занимает существенное время, зависящее от управляющих параметров, поэтому солитонные кластеры можно рассматривать как метастабильные состояния с большим временем жизни, которые могут влиять на интегральные характеристики системы, особенно находящейся под внешним шумовым воздействием. Этим обусловлен интерес к изучению эволюции солитонных кластеров.

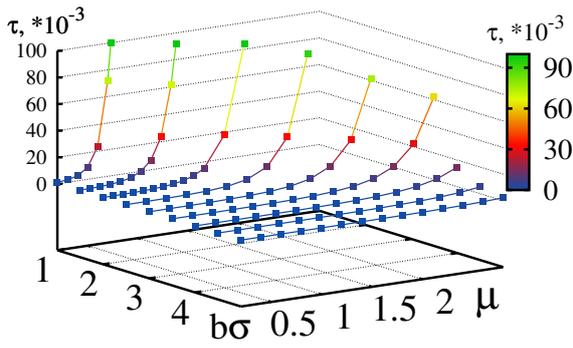
Существенное влияние на длительность переходного процесса оказывает нелинейное трение (величина параметра μ). На рисунке 2 показано семейство зависимостей длительности переходного процесса от параметров $b\sigma$ и μ и от числа частиц в цепочке. Видно, что зависимости от параметра μ и от числа частиц имеют экспоненциальный характер.

В качестве инструмента для точного количественного анализа поведения солитонов предлагается использовать структурный динамический фактор (СДФ), содержащий информацию об эволюции во времени пространственной корреляции частиц.

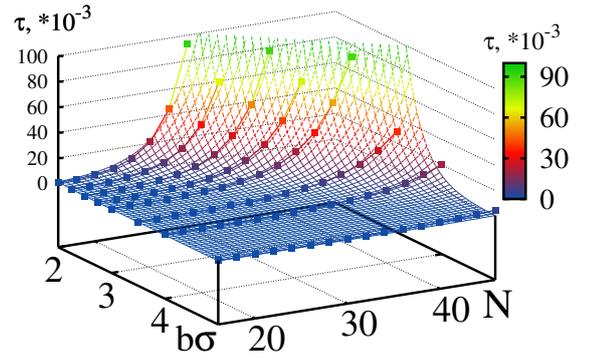
В простейшем случае структурный динамический фактор $S(\omega, k)$ определяется как

$$S(\omega, k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{j\omega\tau} \langle \rho_{1d}(k, \tau) \rho_{1d}(-k, 0) \rangle d\tau, \quad (2)$$

где угловые скобки указывают на усреднение по множеству реализаций, ω и k - частота и волновое число, соответствующее направлению распространения волны, а $\rho_{1d}(x, \tau)$ и $\rho_{1d}(k, \tau)$ - функция плотности и ее пространственное преобразование Фурье.



(a)



(б)

Рис. 2. (а) Семейство зависимостей длительности переходного процесса от параметра μ и $b\sigma$ в цепочке из $N = 20$ частиц; (б) семейство зависимостей длительности переходного процесса от числа частиц N при различных значениях $b\sigma$ при $\mu = 1$ (линии с точками) и соответствующая аппроксимация функцией $\tau(b\sigma, 1, N) = 1000\exp(-3.2b\sigma + 0.285N + 2.1)$.

Применение СДФ рассматривается на нескольких простых примерах. Пусть в цепочке из $N = 24$ частиц распространяется один диссипативный солитон, зависимость $S(\omega, k_1)$ имеет ярко выраженный пик, соответствующий частоте обращения солитона по цепочке $0.36\omega_M$. Если той же цепочке устанавливается двухсолитонная мода с волновым числом $k_2 = \pi/6\sigma$, в силу полной идентичности солитонов частота изменения функции плотности удваивается: для двух солитонов пик зависимости $S(\omega, k_2)$ приходится на частоту $0.68\omega_M$.

Кроме того, показано, что при нелокальной связи, когда каждая i -я частица связана не только «локально» с двумя ближайшими соседями, как в обычной цепочке, но и с двумя частицами с номерами $i + 2$ и $i - 2$ («соседними к соседним»), обогащается множество стационарных состояний. Стационарными являются не только состояния с равномерным распределением максимумов скорости на цепочке, но и состояния с равномерным распределением кластеров из нескольких максимумов.

Показано, что при повышении интенсивности шума солитоны могут возбуждаться и разрушаться, причем, как правило, индуцированные шумом солитоны возникают рядом с существующими. В общем случае вероятности увеличения и уменьшения числа солитонов не равны, а соотношение между этими вероятностями зависит от интенсивности шума.

Продемонстрировано, что форма вероятностных распределений $P(k)$ (здесь $P(k)$ – вероятность обнаружить в системе k солитонов в произвольный момент времени) меняется в зависимости от интенсивности шума. В случае низкой интенсивности шума ($D_E = 0.05$, рис. 3 а) зависимость $P(k)$ имеет максимум при $k = 0$: вероятность уменьшения числа солитонов больше, чем вероятность увеличения, и шум малой интенсивности упорядочивает ансамбль. С увеличением интенсивности шума растет вероятность переключений в моды с большим числом солитонов. На рисунке 3 б показано состояние с почти «плоским» распределением при $D_E = 0.0672$, что примерно соответствует равенству вероятностей увеличения и уменьшения числа солитонов. Наконец, при большой интенсивности шума $D_E = 0.08$ распределение вероятностей имеет ярко выраженный максимум на $k = 9$, как показано на рисунке 3 в.

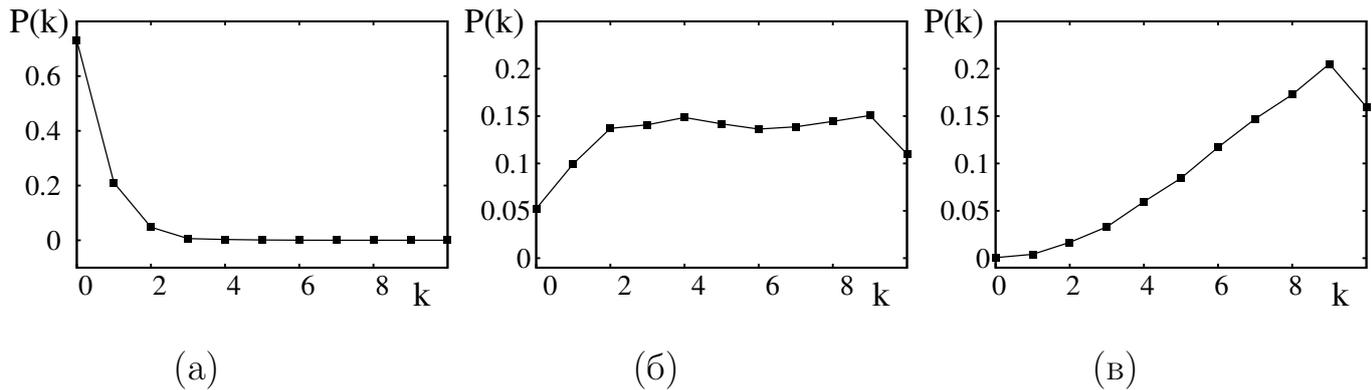


Рис. 3. Стационарные вероятностные распределения $P(k)$ для различных значений интенсивности шума: а) $D_E = 0.05$, б) $D_E = 0.0672$, в) $D_E = 0.08$.

Показано, что существует два независимых механизма, управляющих распределениями $P(k)$: один из них определяет время жизни τ_k^{short} моды k , а другой – вероятность переключения в эту моду.

Вводится плотность вероятности $\rho(k, \tau)$, такая, что вероятность обнаружить цепочку в состоянии с k солитонами в интервале времени $[\tau; \tau + d\tau]$ равна $\rho(k, \tau)d\tau$:

$$\rho(k, \tau) = w_k(\tau)p(k), \quad (3)$$

где $w_k(\tau)$ соответствует плотности вероятности существования моды k в течение времени τ , а $p(k)$ представляет собой вероятность переключения в моду с k солитонами, а $p(k) \approx L_k/L$, где L_k – число переключений в конкретную моду, а L – общее число всех переключений.

Путём аппроксимации результатов обработки данных, полученных в численных экспериментах, показано, что плотности вероятности существования моды с k солитонами можно описать экспоненциальной плотностью вероятности $w_k(\tau)$ в виде

$$w_k(\tau) = \lambda(k)e^{-\lambda(k)\tau}, \quad (4)$$

где величина $\lambda(k)$ характеризует, как часто происходят переключения из моды k за единицу времени.

Число переключений между модами увеличивается с ростом интенсивности шума. Кроме того, величина $\lambda(k)$ монотонно увеличивается с ростом числа солитонов.

Плотность вероятности $p(k)$ переключения в моду с k солитонами возрастает с ростом k , однако вид аппроксимирующей функции сильно зависит от интенсивности шума и меняется от экспоненциального до квадратичного.

Таким образом, определены оба механизма переключения числа солитонов при различных значениях интенсивности шума.

Кроме того, производится асимптотический переход от неосциллирующих частиц к осцилляторам Рэля, таким образом, что динамика каждого осциллятора описывается уравнением

$$\ddot{q}_i - \mu\left(1 - \frac{\dot{q}_i^2}{v^2}\right)\dot{q}_i + \omega_r^2 q_i = (1 - e^{q_i - q_{i+1}})e^{q_i - q_{i+1}} - (1 - e^{q_{i-1} - q_i})e^{q_{i-1} - q_i}. \quad (5)$$

Основные обозначения в этом уравнении аналогичны таковым для уравнения (1), а величина ω_r^2 представляет собой частоту собственных колебаний осцилляторов Рэля, выраженную в единицах частоты линейных колебаний за счет связи $\omega_M^2 = \frac{2Db^2}{m}$.

В диапазоне $1.2\omega_M \lesssim \omega_r \lesssim 6\omega_M$ соотношение частот таково, что возникают особые возбуждения, подобные бризерам в консервативных решетках. В качестве иллюстрации на рисунке 4 а, б приведены пространственно-временная диаграмма и мгновенный пространственный профиль такого возбуждения при $\omega_r = 1.3\omega_M$, которое уместно обозначить термином «диссипативный бризер».

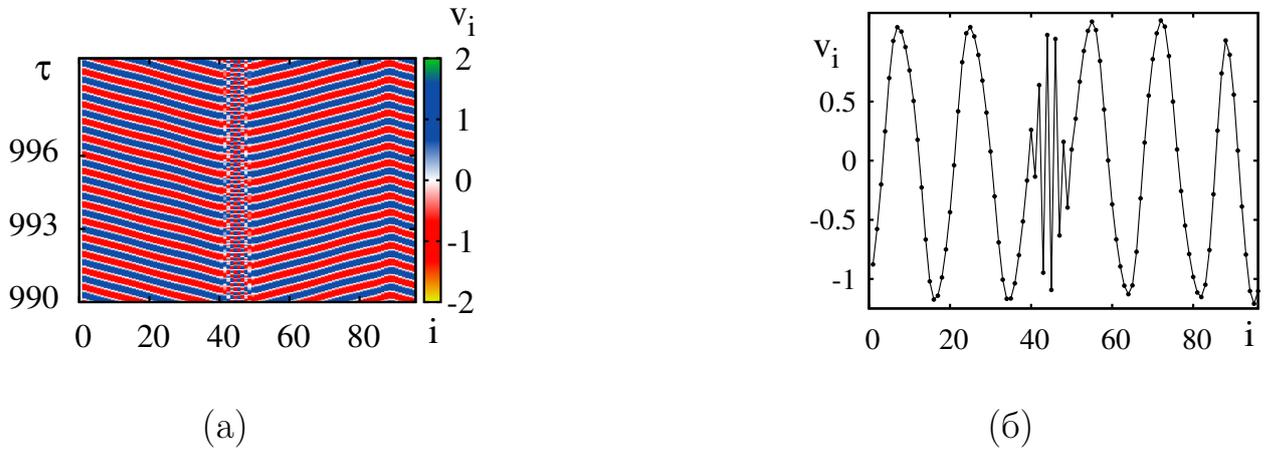


Рис. 4. (а) пространственно-временная диаграмма, иллюстрирующая диссипативный бризер; (б) мгновенный пространственный профиль ансамбля (эквивалент распределения скоростей частиц) в момент времени $\tau = 990$.

$$\omega_r = 1.3\omega_M$$

В зависимости от начальных условий бризер может быть локализован на различном числе частиц (чётном либо нечётном), а так же может быть неподвижным либо мобильным, соответственно.

Время жизни бризеров не ограничено (за счет отрицательного трения энергия бризеров поддерживается на постоянном уровне), и их можно считать стационарными режимами ансамбля осцилляторов.

Во второй главе проводится исследование двумерной плотноупакованной решетки активных частиц, связанных посредством потенциала Морзе. Ди-

намика i -той частицы подчиняется уравнению в безразмерных переменных:

$$\begin{aligned} \ddot{\vec{q}}_i - \mu \left(1 - \frac{|\dot{\vec{q}}_i|^2}{v_0^2}\right) \dot{\vec{q}}_i = \\ = \sum_{|\vec{q}_i^k| < R} \frac{\vec{q}_i^k}{|\vec{q}_i^k|} \left[(e^{b\sigma - |\vec{q}_i^k|} - e^{2(b\sigma - |\vec{q}_i^k|)}) \cdot \frac{1}{1 + e^{-\frac{|\vec{q}_i^k|}{2\nu}}} - \frac{1}{2b} \frac{e^{2(b\sigma - |\vec{q}_i^k|)} - 2e^{b\sigma - |\vec{q}_i^k|}}{2\nu e^{-\frac{|\vec{q}_i^k|}{2\nu}}} \cdot e^{\frac{|\vec{q}_i^k|}{2\nu}} \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь используются следующие обозначения: $\vec{q}_i = b\vec{r}_i$ - безразмерная координата (где $\vec{r}_i = \{x_i; y_i\}$ - размерная координата частицы), $\dot{\vec{q}}_i = \frac{\omega_c}{b} \vec{v}_i$ - безразмерная скорость, точками обозначается дифференцирование по безразмерному времени $\tau = \omega_c t$. Параметр $\mu = \tilde{\mu}\omega_c/b$ - безразмерный коэффициент отрицательного трения, величина $|\vec{q}_i^k|$ - безразмерное расстояние между i -той и k -той частицами, а $\frac{\vec{q}_i^k}{|\vec{q}_i^k|}$ - единичный вектор, указывающий направление от i -той частицы к k -той. Таким образом, в выбранных обозначениях $1/\omega_c$ - единица времени, а $2D$ - единица энергии, $\omega_c = \sqrt{2Db^2/m}$ - частота линейных колебаний в яме потенциала Морзе, m - масса частицы.

Показано, что основное стационарное состояние активной решетки - трансляционное движение решетки как целого со скоростью \vec{v}_0 . В этом режиме скорости всех частиц равны по величине и сонаправлены. Такое состояние является основным аттрактором системы. Трансляционная мода способна восстанавливать кинетическую и потенциальную энергию после локального внешнего воздействия, однако направление движения центра масс решетки не является устойчивым и изменяется под внешним воздействием. Кроме того, существует набор трансляционных мод с дефектами в решетке в виде вакансий и междоузельных частиц.

Помимо стационарных мод, выбором начальных условий для частиц в решетке можно возбуждать множество типов метастабильных состояний, представляющих собой длительные процессы перехода к стационарной моде.

Наиболее долгоживущей метастабильной модой треугольной решетки является плоская солитоноподобная волна (далее для краткости обозначаемая термином «плоский солитон»), представляющая собой суперпозицию одинаковых диссипативных метастабильных солитонов в смежных рядах частиц, ори-

ентированных вдоль любой из трех кристаллографических осей треугольной решетки (рис. 5 а). В общем случае возможно существование нескольких солитонов.

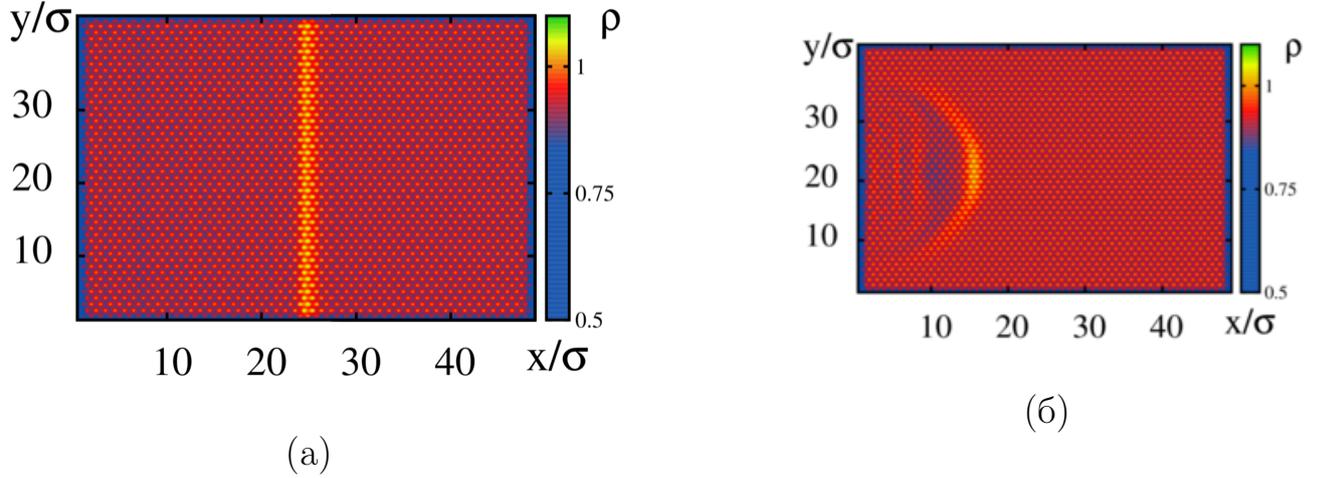


Рис. 5. Мгновенные пространственные распределения плотности частиц в треугольной решетке 48×48 частиц при возбуждении одного (а) солитона, распространяющегося вдоль оси x ; (б) подковообразный солитон, в начальный момент локализованный на 15 частицах. $b\sigma = 5, \mu = 1.41, v_0 = 0.14\omega_c\sigma$.

Кроме плоских волн, в двумерной решетке можно формировать локализованные возмущения в виде солитонов с фронтом конечной ширины (рис. 5 б). Их время жизни линейно зависит от ширины фронта. В предельном случае солитон может быть возбужден только в одном ряду, такой тип возбуждений представляет собой квазиодномерный солитон.

При старте из состояния со стохастическим начальным распределением скоростей наблюдается хаотический (квазихаотический) переходной процесс, завершающийся переходом в режим трансляции.

Исследовано поведение квазиодномерных солитонов и краудионов в активных решетках для асимптотических случаев: при малом коэффициенте трения μ (любое v_0), и при большом коэффициенте трения μ (большое и малое значение v_0). Когда коэффициент трения μ мал, динамика решетки активных частиц аналогична динамике консервативной решетки. Возбуждается краудион,

способный распространяться вдоль любой кристаллографической оси в обоих направлениях независимо от величины средней скорости ансамбля. Если первоначальной энергии частицы недостаточно для преодоления потенциального барьера, возбуждается квазиодномерный солитон.

В случае, когда коэффициент трения большой, а стационарное значение кинетической энергии мало, возбуждение краудионов невозможно; возникают только диссипативные солитоны.

Наконец, когда и отрицательное трение, и стационарная кинетическая энергия велики, в решетке возможно возбуждение краудионов. Минимальная необходимая для их запуска начальная энергия уменьшается с ростом μ , а сами краудионы могут существовать долго, поскольку отрицательное трение восполняет потери кинетической энергии на излучение фононов.

В третьей главе исследуется поведение ансамбля идентичных двумерных активных броуновских частиц, взаимодействие которых происходит таким образом, что частицы ансамбля стремятся выровнять свои скорости со средней скоростью ансамбля. Динамика частиц определяется уравнением Ланжевеновского типа

$$\begin{aligned}\frac{d\vec{r}_i}{dt} &= \vec{v}_i, \\ \frac{d\vec{v}_i}{dt} &= \vec{e}_{i,v} - \vec{v}_i + \mu(\vec{u}_{A_i} - \vec{v}_i) + \sqrt{2D_E} \begin{pmatrix} \xi_{i,x} \\ \xi_{i,y} \end{pmatrix} + \sqrt{2D_v} \xi_{i,v} \vec{e}_{i,v} + \sqrt{2D_\phi} \xi_{i,\phi} \vec{e}_{i,\phi},\end{aligned}\tag{7}$$

где $\mu = \frac{\tilde{\mu}}{\alpha}$, $D_\beta = \frac{d_\beta}{m\alpha v_0^2}$ – безразмерные параметры. В уравнения входят преобразованные источники шума $\xi(t') = \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \xi(t)$.

Известно, что для макроскопического поведения бесконечно большого ансамбля активных броуновских частиц можно применить гидродинамическое описание, в рамках которого ансамбль движущихся частиц представляется в виде непрерывного гидродинамического потока. Применение такого подхода свидетельствуют о наличии в ансамбле частиц индуцированного шумом перехода: при увеличении интенсивности шума D_ϕ наблюдается переход от упорядочен-

ного состояния к неупорядоченному, который может сопровождаться явлением бистабильности в некоторой области значений D_ϕ . Однако теоретические результаты могут неадекватно отражать поведение ансамбля, если число его элементов недостаточно велико.

Показано, что если число частиц в ансамбле менее 100, индуцированный шумом переход не сопровождается явлениями бистабильности. состоит в исчезновении области бистабильности в ансамбле из малого числа частиц при заданном значении μ .

Причины исчезновения бистабильности в малых ансамблях скрыты в механизме взаимодействия частиц. Чем меньше количество элементов ансамбля, тем большее разупорядочивающее влияние оказывает каждая частица.

Этот эффект можно ослабить, увеличив параметр μ . На рис. 6 показана нижняя граница значения параметра μ , начиная с которого переход к неупорядоченному состоянию сопровождается бистабильностью, в зависимости от величины ансамбля N . Видно, что чем меньше частиц, тем более сильное взаимодействие нужно для существования области бистабильности.

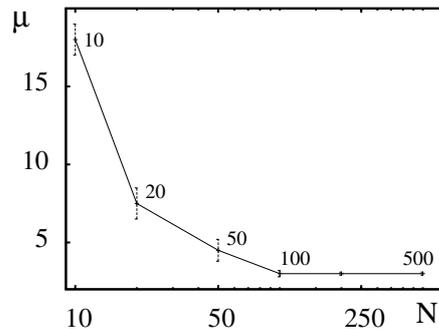


Рис. 6. Граница существования области бистабильности на параметрической плоскости N, μ .

Проанализировано влияние индуцированного шумом перехода на поведение отдельных частиц на основе вероятностного распределения компонент вектора скорости произвольно выбранной частицы.

Продемонстрировано, что распределения скорости частиц имеют вид аксиально-симметричного кратера. Максимум поперечного сечения кратера расположен на некоторой окружности, а симметрия распределения объясняется изотропностью системы. Принципиален вопрос, как меняется распределение скорости при переходе «порядок–беспорядок».

Показано, что в отсутствие области бистабильности переход происходит плавно и распределение скорости тоже плавно эволюционирует. При бистабильности происходит разрушение одного стационарного распределения и формирование другого (рис. 7): при $D_\phi = 0.225$ система находится в упорядоченном состоянии (кривая 1), но при незначительном увеличении интенсивности шума происходит жесткая стохастическая бифуркация – ансамбль резко переходит в неупорядоченное состояние (кривая 2).

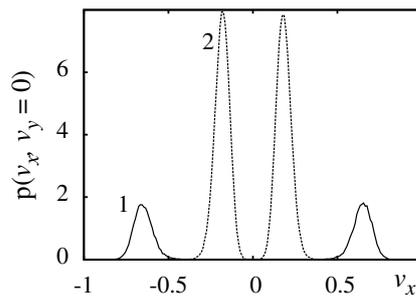


Рис. 7. Стационарные вероятностные распределения $p(v_x, v_y = 0)$ в случае, когда переход «порядок-беспорядок» сопровождается бистабильностью ($\mu = 5$, $D_E = 0$), полученные при $D_\phi = 0.225$ (кривая 1) и $D_\phi = 0.228$ (кривая 2).

Показано, что при введении аддитивного шума будет существовать только одно стационарное распределение скорости, но в некоторой области значений интенсивности мультипликативного шума D_ϕ распределение скорости будет бимодальным – в сечении поверхности $p(v_x, v_y)$ будет не два, а четыре максимума, что означает существование двух наиболее вероятных значений абсолютной величины скорости. При переходе «порядок-беспорядок» с ростом интенсивности углового шума в этом случае наблюдаются стохастические бифуркации Р-типа,

состоящие в появлении и исчезновении двух пар максимумов в сечении распределения плотности вероятности.

Продемонстрировано, что с ростом амплитуды аддитивного шума область бимодальности исчезает. В этом случае стохастические бифуркации перестают наблюдаться, и эволюция распределения скорости сводится к трансформации формы распределения без его каких-либо качественных изменений. При введении аддитивного шума меняется не только механизм перехода «порядок–беспорядок», но также и пороговое значение интенсивности мультипликативного шума, при котором этот переход происходит

Четвертая глава посвящена исследованию динамики дискретных бризеров в молекуле ДНК в контексте возможности переноса заряда. Исследование проводится в рамках модели Пейрарда-Бишопа-Доксуа (ПБД). Из гамильтониана приближенной модели ПБД следует уравнение движения частиц в каждой нуклеотидной паре в безразмерных переменных:

$$\ddot{q}_i + \Gamma \dot{q}_i = e^{-q_i}(e^{-q_i} - 1) + \omega_{bond}^2 \{(q_{i+1} - 2q_i + q_{i-1}) + \rho f_i(q_{i,i-1,i+1})\}. \quad (8)$$

Здесь $q_i = by_i$ – безразмерное смещение i -го нуклеотида от положения равновесия $y_{i0} = 0$, точка теперь обозначает производную по безразмерному времени $\tau = \omega_M t$, причем производная имеет смысл безразмерной скорости, $\omega_M = \sqrt{2Db^2/M}$ – частота линейных колебаний Морзе осциллятора, $\omega_{bond} = \sqrt{k/M}/\omega_M$ – безразмерная частота малых линейных колебаний нуклеотида, возникающих за счет его связи с соседями, функция f_i описывает нелинейность силы взаимодействия:

$$f_i = (q_{i-1} - q_i)[1 + 0.5\alpha(q_{i-1} - q_i)]e^{-\alpha(q_{i-1} + q_i)} + (q_{i-1} - q_i)[1 + 0.5\alpha(q_{i-1} - q_i)]e^{-\alpha(q_{i-1} - q_i)}. \quad (9)$$

Значения параметров выбираются близкими к реализующимся в реальных молекулах.

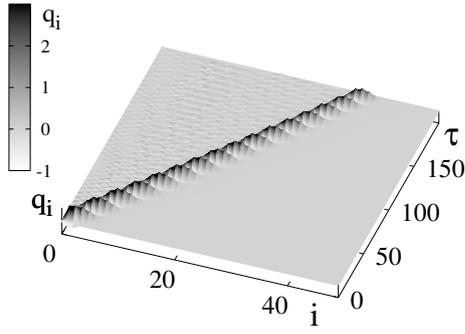
Основной целью исследования является определение возможности возбуждения мобильных дискретных бризеров как локализованных мобильных

квази-частиц, а также как потенциальных носителей добавленных в молекулу внешних зарядов. При возбуждении одной нуклеотидной пары волновые возмущения распространяются симметрично в обе стороны. Чтобы обеспечить однонаправленное движение, предлагается возбуждать цепочку вблизи одного из ее закрепленных концов, с тем, чтобы волна, направляющаяся к этому концу, отражалась от него, и интерферировала с волной другого направления. В результате можно ожидать формирования мобильного бризера, распространяющегося с одного конца молекулы к другому.

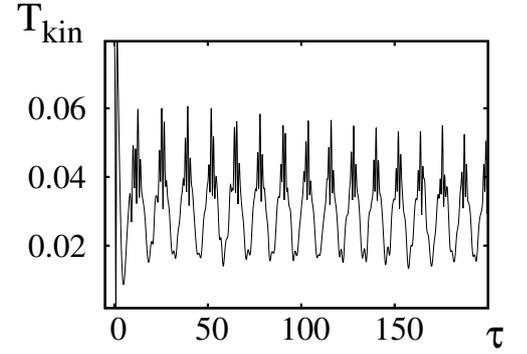
На рисунке 8 представлены результаты моделирования при существенном возмущении двух ($K = 2$) частиц, приобретающих безразмерные значения скорости $v_{20} = v_{30} = -2$ (индекс 1 соответствует закрепленной «концевой» паре, для которой всегда $q_{10} = v_{10} = 0$). Из рисунка видно, что формируется устойчивый локализованный мобильный «кластер» (рис. 8,а), движущийся со скоростью $v_{br} \approx 0.2$, в котором частицы колеблются с частотой $\omega_{br} \approx 0.38$ (рис. 8, б)), т.е. мобильный дискретный бризер. В среднем на одну пару цепочки из 50 частиц приходится кинетическая энергия $T_{kin} = 0.04$ в единицах $2D$ (рис. 8, б)), которая слабо рассеивается при движении вдоль оси молекулы. Малое рассеяние энергии связано с тем, что состояние молекулы остается слабо возмущенным после прохождения бризера с высокой энергией. Отметим также, что образовавшийся дискретный бризер низкочастотный – его частота лежит ниже граничной частоты зоны пропускания молекулы ДНК.

Показано, что «пятно возбуждения» должно быть приближено непосредственно к концу молекулы, а оптимальным является значение $K = 2 \dots 4$.

Показано, что если в начальный момент времени несколько смежных нуклеотидных пар вблизи закрепленного конца молекулы растягиваются, то также возможно возбуждение мобильных бризеров. При этом формируется узкий мобильный бризер, аналогичный возбужденному за счет возмущения начальной скорости с таким же уровнем начальной энергии.



(a)



(б)

Рис. 8. Мобильный бризер в ДНК с закрепленными концами при $v_{20} = v_{30} = v_{40} = -2, q_{i0} = 0$. а) – эволюция распределений координат $q_i(\tau)$ частиц, б) – зависимость кинетической энергии цепочки T_{kin} (нормированной на число частиц N) от времени. $N = 50, \omega_{bond} = 0.4, \Gamma = 0.001$.

Еще лучше формируется бризер, при начальном сжатии смежных нуклеотидных пар, поскольку такие начальные условия обеспечивают большую начальную энергию. Таким образом, приведены результаты, близкие к оптимальным, и показано, что мобильные бризеры не критичны к отклонению параметров и начальных условий от оптимальных значений.

В **заключении** сформулированы основные выводы и результаты диссертационной работы.

Основные результаты диссертационной работы:

1. Показано, что в цепочках активных частиц с нелинейной потенциальной связью возможно возбуждение режимов с неравномерным распределением максимумов плотности частиц, представляющих собой длительные (сотни и более периодов Морзе-осцилляций) переходные процессы, заканчивающиеся с установлением равномерного распределения. Определены характерные времена жизни метастабильных состояний при различных значениях параметров. В частности, обнаружено, что длительность переходных процессов нарастает по экспоненте от количества частиц в ансамбле.

2. Показано, что при добавлении нелокальной связи возникают новые виды стационарных состояний в виде равномерно распределенных кластеров из различного числа солитонов.
3. При добавлении частицам осцилляторных свойств в цепочках возможно возбуждение диссипативных бризеров.
4. Показано, что под влиянием шума в рассматриваемой цепочке происходит переключение мод (возбуждение и разрушение солитонов). Преимущественное направление переключений зависит от интенсивности шума; шум малой интенсивности уменьшает число солитонов и тем самым упорядочивает ансамбль. Увеличение интенсивности шума продуцирует возбуждение новых солитонов.
5. В двумерных активных решетках возможно возбуждение нескольких типов метастабильных состояний, таких как одиночные плоские солитоны и состояния с несколькими равномерно распределенными плоскими солитонами, подковообразные М-солитоны и квазиодномерные солитоны, краудины. Все метастабильные состояния трансформируются в наиболее устойчивую трансляционную моду (режим полной синхронизации), которая является аттрактором в пространстве скоростей.
6. При глобальном взаимодействии поведение систем из $10 < N < 300$ частиц соответствует поведению более крупных ансамблей, в частности, наблюдаются индуцированные шумом переходы. Показано, что в малых ансамблях существует область бистабильности, однако значение параметра связи между частицами, при котором система становится бистабильной, тем больше, чем меньше частиц в ансамбле. Кроме того, реализация бистабильности в ансамбле из ограниченного числа частиц возможно только в отсутствие аддитивного шума.

7. В присутствии аддитивного шума явление бистабильности сменяется явлением бимодальности, состоящим в существовании двух значений абсолютной величины скорости частицы, характеризующихся максимальной плотностью вероятности. Можно выделить область бимодальности, границы которой соответствуют мягким стохастическим бифуркациям, идентифицируемым по возникновению (исчезновению) экстремумов вероятностного распределения скорости.
8. В молекулах ДНК с закрепленными концами можно возбуждать мобильные дискретные бризеры за счет начального возмущения скорости или координат небольшого числа смежных нуклеотидных пар, расположенных у одного концов, если стэкинговое взаимодействие между нуклеотидными парами превышает определенный порог. Мобильные бризеры возбуждаются при положительном и отрицательном направлении возмущений скорости либо координаты нуклеотидов, причем параметры бризеров (скорость, частота, энергия, ширина) примерно одинаковы в обоих случаях, если возбуждается одинаковое число пар и равны энергии возмущений.
9. Длина пробега бризера может составлять несколько десятков межпарных расстояний и не критично зависит от значений параметров, однако оптимальные условия формирования соответствуют начальному возмущению 2-4 смежных пар, расположенных вплотную к одному из концов молекулы.

Таким образом, поставленная цель диссертационной работы достигнута и основные задачи решены.

Список работ, опубликованных автором по теме диссертации

1. *Сергеев К.С. Вадивасова Т.Е., Четвериков А.П.* Индуцированный шумом переход в малом ансамбле активных броуновских частиц / Четвериков А.П. Сергеев К.С., Вадивасова Т.Е. // *Письма в ЖТФ.* — 2014. — Vol. 40, no. 21. — Pp. 88–96.
2. *Сергеев, К.С.* Динамика ансамбля активных броуновских частиц, управляемых шумом / К.С. Сергеев, Т.Е. Вадивасова, А.П. Четвериков // *Математическая биология и биоинформатика.* — 2015. — Vol. 10, no. 1. — Pp. 72–87.
3. *Сергеев, К.С.* Метастабильные возбуждения в цепочке Морзе–Рэлея / К.С. Сергеев, А.П. Четвериков // *Нелинейная динамика.* — 2016. — Vol. 2, no. 3. — Pp. 341–353.
4. *Четвериков, А.П.* Возбуждение мобильных дискретных бризеров в ДНК начальными возмущениями смещений или скоростей нескольких смежных нуклеотидных пар / А.П. Четвериков, К.С. Сергеев, В.Д. Лахно // *Математическая биология и биоинформатика.* — 2017. — Vol. 12, no. 2. — Pp. 375–384.
5. *Четвериков, А.П.* Захват и транспорт зарядов в ДНК мобильными дискретными бризерами / А.П. Четвериков, К.С. Сергеев, Лахно В.Д. // *Математическая биология и биоинформатика.* — 2018. — Vol. 13, no. 1.
6. Stationary modes and localized metastable states in triangular lattice of active particles / K.S. Sergeev, S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova, A.P. Chetverikov // *Нелинейная динамика.* — 2018. — Vol. 14, no. 2 (в печати).