

АГРЕГАЦИЯ И ФРАГМЕНТАЦИЯ КЛАСТЕРОВ В РАМКАХ gTASEP С ПРИТЯГИВАЮЩИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Н. Ж. Бънзарова, Н. Х. Пешева*

Институт механики Болгарской академии наук, София

Представлен обзор некоторых результатов, полученных при изучении агрегации и фрагментации кластеров частиц, подчиняющихся стохастической дискретной по времени и пространству динамике обобщенного полностью асимметрического процесса с простым исключением (оПАППИ — gTASEP) с открытыми граничными условиями. Модель по сути является обычным ПАППИ (TASEP) с упорядоченным назад (обратным) последовательным алгоритмом обновления, но с добавленным специальным кинематическим взаимодействием, а именно дополнительной вероятностью прыжка вправо p_m для частиц кластера помимо обычной вероятности прыжка p . Отдельно рассмотрены два случая взаимодействия притяжения: 1) предельный случай необратимой агрегации ($p_m = 1$) и 2) общий случай притяжения, когда $p < p_m < 1$ (возможна агрегация и фрагментация кластеров). Сосредоточим наше внимание на использовании теории случайных блужданий при изучении оПАППИ. Она применяется для изучения временной эволюции межкластерных интервалов, посредством которой проанализированы свойства неравновесных стационарных фаз системы, а также фазовые переходы между ними. Теоретические выводы подтверждены результатами численного моделирования.

This paper provides summary of some of our results, concerning a model of aggregation and fragmentation of clusters of particles obeying the stochastic discrete-time discrete-space kinetics of the generalized Totally Asymmetric Simple Exclusion Process (gTASEP) with open boundaries. The model in essence is the ordinary TASEP with backward ordered sequential update with special kinematic interaction added, i.e., it has a second modified hopping probability p_m for particles in a cluster in addition to the standard hopping probability p . We consider separately the two cases of attraction interaction: 1) the limiting case of irreversible aggregation ($p_m = 1$) and 2) the generic case of attraction, when $p < p_m < 1$ (then aggregation and fragmentation of clusters is allowed). We put special emphasis on the use of random walk theory in the study of gTASEP. It is applied to study the inter-cluster gaps time evolution, which helps to assess the properties

*E-mail: nadezhda@imbm.bas.bg

of the non-equilibrium stationary phases of the system and the phase transitions between them. Theoretical conclusions are in agreement with the Monte Carlo simulations.

PACS: 02.50.Ey; 05.40.-a; 05.70.Ln

Авторы выражают глубокую признательность выдающемуся ученому, всемирно известному физико-теоретику Вячеславу Борисовичу Приезжеву за годы плодотворного научного сотрудничества и теплых дружеских отношений. Результаты, представленные в данной статье, получены во многом благодаря идеям и советам Вячеслава Борисовича.

ВВЕДЕНИЕ

Процессы агрегации и фрагментации кластеров произвольного размера, состоящих из объектов различной природы, возникают во многих физико-химических процессах в природе и представляют интерес с разных точек зрения. Эти явления наблюдаются в физике аэрозолей [1], росте полимеров [2], агрегации тромбоцитов в крови [3], агрегации белка [4] и даже в астрофизике [5].

Например, в медицине способность контролировать агрегацию белка имеет большое значение при разработке новых лекарств. Как известно, в биохимии в некоторых случаях необратимая агрегация может иметь разрушительные последствия. Некоторые нейродегенеративные заболевания, такие как болезнь Альцгеймера, болезнь Паркинсона или прионные заболевания, характеризуются внутриклеточной агрегацией и отложением патогенных белков [6]. Аналогично аномальная необратимая агрегация рибосом приводит к непоправимому нарушению синтеза белка и к гибели нейронов после очаговой ишемии головного мозга. С другой стороны, агрегация тромбоцитов в крови является важным защитным механизмом организма [3]. На первом этапе агрегация тромбоцитов обратима, но позже процесс может стать необратимым и во многих случаях даже вредным. Несложно привести много других примеров.

Нужно отметить, что изучаемая модель является довольно упрощенной и в ней не учитывается вся сложность реальных систем, но мы считаем, что подобные идеализированные и упрощенные модели являются полезным инструментом для изучения и понимания более сложных систем, существующих в реальном мире, в частности в биофизике и при изучении транспортных потоков.

Одна из основных причин активного изучения моделей, подобных асимметрическому процессу с простым исключением (ASEP/АППИ), связана с тем, что на данный момент он является своего рода парадигмой (подобно модели Изинга в случае равновесия), помогающей нам в исследовании свойств

неравновесных систем. Некоторые из этих свойств не имеют аналога в равновесном случае (см. [7]). В полностью асимметрическом случае, когда частицам разрешено перемещаться только в одном направлении, ASEP сводится к своей направленной версии — полностью асимметрическому процессу с простым исключением (TASEP/ПАППИ). Эта модель является редким примером точно решаемых моделей, далеких от равновесия (см. в [8] обзор свойств этих моделей).

Важность изучения подобных упрощенных моделей вытекает из того факта, что в окружающем мире мы редко сталкиваемся с настоящими равновесными процессами. Во многих случаях они, скорее, являются идеализацией реальных процессов. Большинство реальных систем, в том числе живые системы, обмениваются веществом и/или энергией с окружающей средой, поддерживая нетривиальные потоки. Однако сегодняшнее понимание неравновесных систем отстает от наших знаний о равновесных системах. Важность разработки фундаментальной и всеобъемлющей теории систем, далеких от равновесия, была признана довольно давно [9, 10], и с тех пор ведутся очень активные исследования. В результате ASEP и его различные варианты находят широкое применение в моделировании движения транспортных потоков [8, 11, 12], биологического транспорта [13, 14], вынужденного движения коллоидов в узких каналах [15–17], роста поверхностей [18], переноса пакетов данных в интернете и т. д.

Стоит упомянуть, что TASEP применяется со времени появления работы McDonald и др. [19], опубликованной в 1968 г., в которой он использовался для моделирования кинетики синтеза белка. В 1970 г. он был признан марковским процессом с взаимодействием [20]. Для TASEP с непрерывной временной динамикой (реализованной в МК-моделированиях как случайное последовательное обновление (RSU)) Derrida и др. [21] построили точное стационарное состояние для специальных значений параметров с помощью рекуррентных соотношений, а в более поздней работе Schütz и Domany [22] — в общем случае. Настоящим прорывом в методах решения TASEP с открытыми границами стало предложенное Derrida и др. в [23] матричное представление произведения стационарного распределения вероятностей. Позднее этот подход (Matrix Product Ansatz) был доработан для изучения стационарных состояний ASEP и TASEP для различных алгоритмов обновления, таких как TASEP с подрешеточно-параллельным обновлением [24, 25], TASEP с полностью параллельным обновлением (PU) [26, 27] и TASEP с упорядоченными вперед и упорядоченным назад последовательными обновлениями [28, 29]. Сравнение процедур обновления в ASEP и связь между различными физическими величинами в ASEP с разными алгоритмами обновлений были представлены в работе [30].

Свойства моделей TASEP сильно зависят от выбора граничных условий [7, 8]. В термодинамическом пределе открытая система демонстрирует

три фазы в плоскости скоростей ввода-вывода частиц. При пересечении границ этих фаз объемная плотность меняется непрерывно или скачком [30]. Открытые граничные условия можно рассмотреть в терминах автомобильного трафика. Можно интерпретировать конечные точки рассматриваемого сегмента дороги с одной полосой движения как точки оплаты за проезд, работающие независимо с разной эффективностью, пропорциональной соответственно α на входе и β на выходе.

В наших работах [31–34] предложена и изучена одномерная модель агрегации и фрагментации кластеров в терминах стохастической дискретной (по времени и пространству) динамики частиц с исключенным объемом на открытых цепях с использованием обобщенного ПАППИ (gTASEP) [35]. Эта модель впервые была изучена в [36–40] как интегрируемое обобщение TASEP с периодическими граничными условиями. Эта обобщенная версия TASEP базируется на динамике обычного TASEP с упорядоченным назад последовательным обновлением (BOSU), оснащенного двумя вероятностями прыжка: p и p_m . Мы использовали TASEP с упорядоченным назад последовательным обновлением, поскольку это единственная динамика, которая позволяет кластерам частиц двигаться вперед как единое целое. Вторая модифицированная вероятность, p_m , моделирует специфическое кинематическое взаимодействие между частицами кластера в дополнение к простому взаимодействию с исключенным объемом. Значение второй вероятности прыжка p_m определяет тип кинематического взаимодействия между транспортными средствами. Случай $p_m < p$ соответствует отталкиванию, а $p_m > p$ — притяжению. Предельный случай $p_m = 1$ является случаем необратимой агрегации (IA), когда кластеры, однажды возникшие в объеме системы, не могут распадаться на части. Случай притяжения (включая предельный случай необратимой агрегации) отражает естественную тенденцию большинства водителей догнать и следовать плотно за автомобилем впереди. Таким образом, появляются скопления одновременно движущихся автомобилей, которые точно следуют за движением ведущего транспортного средства. Этот тип коллективного движения приводит к увеличению потока в системе. Вышеописанная модификация TASEP считается более общей версией TASEP, поскольку она включает в себя TASEP с параллельным обновлением (PU) и TASEP с BOSU для конкретных значений второй вероятности прыжка p_m .

В данной работе содержится краткое изложение некоторых наших результатов, касающихся gTASEP с открытыми границами, при $p < p_m$. Она организована следующим образом. В разд. 1 представлена подробно рассматриваемая модель, в разд. 2 кратко перечислены известные результаты для стандартного TASEP. В разд. 3 сначала приведен краткий обзор полученных результатов в случае необратимой агрегации, когда $p_m = 1$ [31–33], затем в рамках теории случайных блужданий рассмотрена временная эволюция межкластерных интервалов при различных граничных условиях. Разд. 4 начина-

ется с обзора основных результатов для gTASEP в общем случае притяжения, когда $p < p_m < 1$ [34, 41]. Затем представлены наши результаты временной эволюции межкластерных интервалов, полученные с использованием теории случайных блужданий. Основные результаты и некоторые перспективы дальнейших исследований приведены в заключении.

1. МОДЕЛЬ

Рассматриваемая модель является обобщенным TASEP, который впервые был представлен Wólki в 2005 г. как точно решаемое обобщение TASEP на кольце [35]. Модель основывается на стандартном TASEP с BOSU, снабженным второй модифицированной вероятностью прыжка p_m в дополнение к стандартной вероятности p . Мы изучаем gTASEP на открытых цепях (см. рис. 1, где приведена схема модели). Эта модель описывается следующим образом. Рассмотрим открытую цепочку из L узлов, пронумерованных слева направо: $i = 1, 2, \dots, L$. Конфигурация системы определяется набором L бинарных переменных τ_i , где $\tau_i = 0$ означает, что узел пуст, а $\tau_i = 1$, что он занят только одной частицей. Каждое обновление конфигурации системы начинается с обновления последнего узла цепи L . Если узел $i = L$ занят, то частица в нем покидает систему с вероятностью β или остается на месте с вероятностью $1 - \beta$. Затем конфигурация системы обновляется посредством

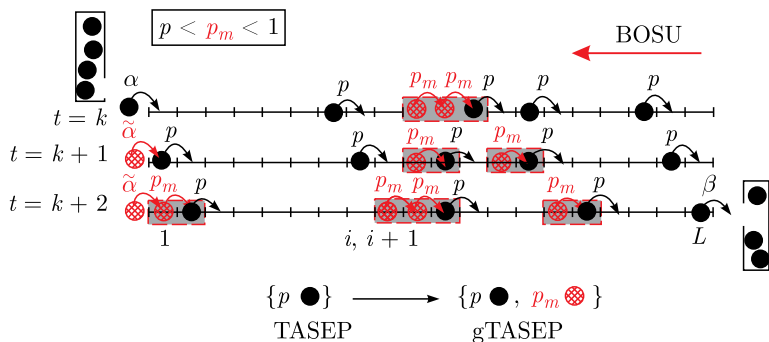


Рис. 1 (цветной в электронной версии). Схематическое изображение обобщенного TASEP с открытыми границами и дополнительным кинематическим взаимодействием (т. е. второй модифицированной вероятностью прыжка p_m) между частицами в кластере. Правила обновления для временной эволюции системы проиллюстрированы демонстрацией изменения конфигурации системы за три последовательных временных шага в случае, когда $p < p_m < 1$ (случай притягивающего взаимодействия, когда в системе разрешена фрагментация кластеров). Окрашенные в красный цвет частицы — это частицы, для которых правила обновления отличаются от правил, действующих в стандартном TASEP с BOSU

выполнения $L - 1$ последовательных обновлений всех пар ближайших соседних узлов в обратном порядке $(L - 1, L), \dots, (i, i + 1), \dots, (1, 2)$. При этом вероятность прыжка вдоль цепочки $(i, i + 1)$ зависит от того, перепрыгнула ли частица с узла $i + 1$ в узел $i + 2$ при обновлении $(i + 1, i + 2)$ в тот же момент времени или нет. Изолированные частицы, а также первая (головная) частица кластера справа могут переместиться на один узел вправо с вероятностью p или остаться на месте с вероятностью $1 - p$.

Частицы, принадлежащие кластеру, за исключением головной частицы, могут переместиться на один узел вправо при условии, что частица перед ними тоже переместится в тот же момент времени с модифицированной вероятностью p_m , или же останется на месте с вероятностью $1 - p_m$.

Для того чтобы удовлетворить открытым граничным условиям, которые должны согласовываться с правилами обновления в объеме системы, необходимо соответствующим образом изменить левое граничное условие (модификация была впервые предложена Hrabák [39, 40], а также независимо нами в [31]). Так, если узел $i = 1$ пуст в начале текущего обновления, то частица входит в систему с вероятностью α или узел $i = 1$ остается пустым с вероятностью $1 - \alpha$. Если же узел $i = 1$ занят в начале данного момента времени, но опустел при текущем обновлении, то $\tilde{\alpha} = \min \{\alpha p_m / p, 1\}$. Это граничное условие также обеспечивает плавный переход к ранее известным версиям TASEP, а именно, при значении $p_m = 0$ восстанавливается TASEP с параллельным обновлением (PU), а при $p_m = p$ gTASEP сводится к обычному TASEP с BOSU.

Частный случай при $p_m = 1$ («необратимая агрегация») подразумевает, что существующие кластеры попавших в пробку транспортных средств не распадаются на части, и всякий раз, когда ведущее транспортное средство кластера переходит с вероятностью p в пустой узел справа, весь кластер следует за ним как единое целое. При $p_m > p$ (притягивающее взаимодействие) частицы имеют большую вероятность остаться в кластере, чем фрагментировать.

2. СТАНДАРТНЫЙ TASEP С BOSU — ИЗВЕСТНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Стационарные свойства стандартного TASEP с различными типами обновлений конфигурации системы широко изучены и в настоящее время хорошо известны. Здесь мы лишь кратко упомянем некоторые из них. На рис. 2, *a* приведена фазовая диаграмма для обыкновенного TASEP с BOSU в плоскости вероятности ввода-вывода. Она состоит из трех фаз: фазы низкой плотности (LD) ($LD = AI \cup AII$), фазы высокой плотности (HD) ($HD = BI \cup BII$) и фазы максимального тока (MC).

Названия фаз связаны с величиной объемной плотности. Соответственно, в фазе LD она низкая, а в фазе HD — высокая, см. рис. 2, *b*, где показаны

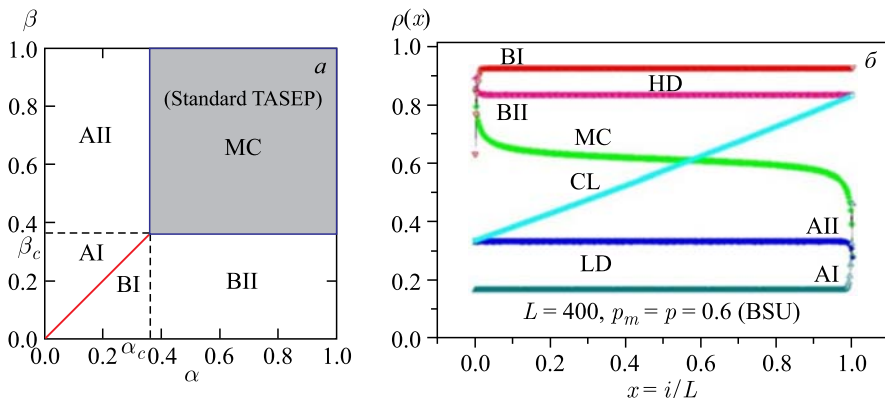


Рис. 2 (цветной в электронной версии). *а*) Фазовая диаграмма стандартного TASEP с BOSU в плоскости вероятностей ввода-вывода частиц, т.е. в (α, β) -плоскости. Критические значения ввода-вывода: $\alpha_c = \beta_c = 1 - \sqrt{1-p}$. При $p = 0,6$ это дает $\alpha_c = \beta_c = 0,367544$. Фазовая диаграмма содержит три фазы: фазу низкой плотности (LD), состоящую из двух подобластей (AI и AII), фазу высокой плотности (HD), состоящую также из двух подобластей (BI и BII), и фазу максимального тока (MC) (заштрихованная серая область). Сплошная линия, разделяющая подобласти AI и BI, является линией сосуществования (CL) между фазами LD и HD. *б*) Профили плотности (локальная плотность $\rho(x)$) как функция пространственной переменной $x = i/L$, характерные для TASEP с BOSU ($p_m = 0,6$) для цепочки из $L = 400$ узлов. Профили показаны в характерных точках фазовой диаграммы: для фазы LD — $\alpha = 0,2$, $\beta = 0,6$ (AII) (синие повернутые вниз треугольники); $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,2$ (AI) (темно-голубые повернутые вниз треугольники); CL — $\alpha = 0,2$, $\beta = 0,2$ (голубые кружки); для MC-фазы $\alpha = 0,6$, $\beta = 0,8$ (зеленые ромбы), для HD-фазы $\alpha = 0,2$, $\beta = 0,1$ (BI) (красные повернутые вниз треугольники), $\alpha = 0,6$, $\beta = 0,2$ (BII) (розовые повернутые влево треугольники)

типичные профили плотности (локальной плотности $\rho(x)$) как функции пространственной переменной $x = i/L$ в характерных точках соответствующих фаз. В фазе MC поток максимален, а профиль плотности имеет характерную повернутую S-форму, показанную зеленой линией на рис. 2, б.

Соответственно, имеются следующие неравновесные фазовые переходы, происходящие при пересечении границ между этими фазами (см. рис. 2, а): между фазами LD и MC, а также между фазами HD и MC фазовые переходы являются непрерывными, в то время как переход между фазами LD и HD первого рода сопровождается конечным скачком объемной плотности ρ_b на линии сосуществования (CL). Подобласти AI (BI) и AII (BII) различаются формой профилей локальной плотности (см. также рис. 2, б). Точные критические значения скоростей ввода-вывода для TASEP при $p = 0,6$ составляют $\alpha_c = \beta_c = 0,367544$.

3. gTASEP ПРИ $p_m = 1$ — НЕОБРАТИМАЯ АГРЕГАЦИЯ

3.1. Краткий обзор основных результатов. Соотношение значений ввода и вывода частиц в gTASEP определяет неравновесные стационарные фазы,

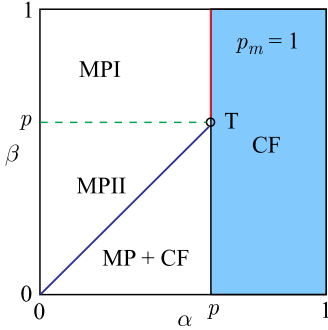


Рис. 3. Фазовая диаграмма gTASEP при $p_m = 1$ в плоскости (α, β) . Она содержит три фазы: многочастичную (MP) фазу, состоящую из двух подобластей (MPI и MPII), полностью заполненную (CF) фазу и смешанную фазу MP + CF. Критическая скорость ввода $\alpha_c = p$. Отметим, что топология и природа фаз отличаются от таковых в стандартном TASEP (см. рис. 2, а)

появляющиеся при $p_m = 1$. Путем интенсивного компьютерного моделирования методом Монте-Карло (МК-метод) мы установили, что фазовая диаграмма имеет новую топологию. Она состоит из трех стационарных фаз в плоскости вероятностей ввода-вывода (рис. 3), а именно: многочастичной фазы MP (Many Particle), которая содержит множество частиц или кластеров с объемной плотностью $\rho_b = \alpha/p$, фазы CF (Completely Filled), полностью заполненной частицами, и смешанной фазы MP + CF. Фаза MP состоит из подобластей MPI ($\alpha < p$ и $\beta > p$) и MPII ($\alpha < p$ и $\beta > \alpha$).

Фаза MP расположена в том месте фазовой диаграммы, где в стандартном TASEP находится фаза LD. В отличие от стандартного TASEP в MP объемная плотность может принимать любое значение от нуля до единицы. Профили локальной плотности, начиная с первого узла, плоские, $\rho_1 = \alpha/p \equiv \tilde{\alpha}$, но различаются формой на концах цепочки, где мы установили, что $\rho_L = \alpha/\beta$ (в MPII профиль изогнут на конце вверх, в то время как в MPI — вниз (см. профили плотности, показанные на рис. 4, а и б)).

Профили плотности на граничной линии $\beta = p$ (см. рис. 4, б) между подобластями MPI и MPII полностью плоские: $\rho_i = \alpha/p \equiv \tilde{\alpha}$, $i = 1, \dots, L$, для всех $\alpha \leq p$. Полученная фазовая диаграмма и фазовые переходы подтверждаются результатами моделирования по методу Монте-Карло. Некоторые из этих результатов также показаны на рис. 5, а и б).

Фаза CF ($\alpha \in [p, 1]$) состоит из цепочек, полностью заполненных частицами, $\rho_i = 1$, $i = 1, \dots, L$. Это является следствием результата левого граничного условия $\tilde{\alpha} \equiv 1$ (по определению), при $\alpha \geq p$. Стационарный поток частиц в CF-фазе равен $J = \beta$, что подтверждается результатами моделирования по методу Монте-Карло.

Фаза MP + CF ($\beta < \alpha < p$) представляет собой смесь многочастичной конфигурации и ненулевой вероятности $P(1)$ полного заполнения цепи при стремлении к бесконечному размеру. В этой фазе цепь полностью заполнена

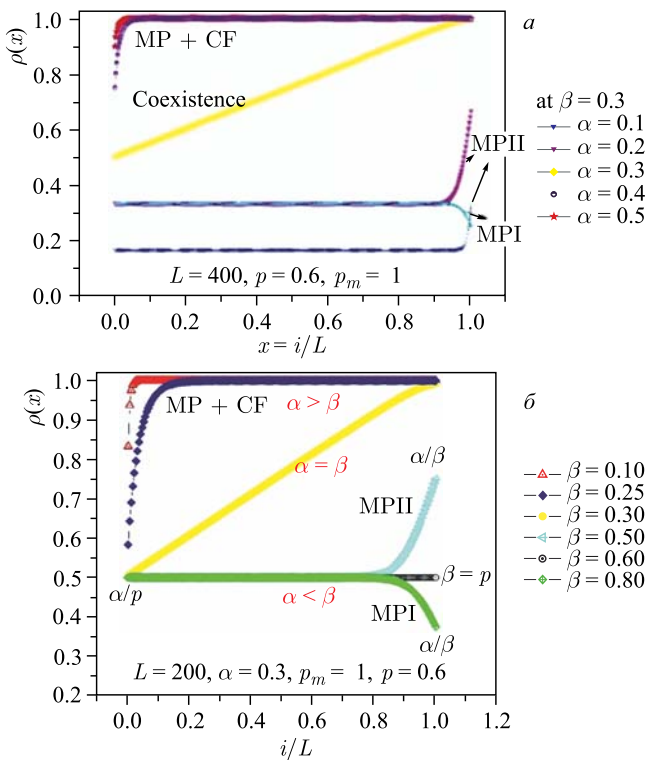


Рис. 4 (цветной в электронной версии). Профили плотности (локальная плотность $\rho(x)$) как функция пространственной переменной $x = i/L$: а) gTASEP при $p = 0,6$ и $p_m = 1$ (IA) для цепочки из $L = 400$ узлов в характерных точках фазового пространства: MPII при $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,3$ (синие треугольники вниз) и при $\alpha = 0,2$, $\beta = 0,3$ (пурпурные треугольники вниз); линия сосуществования фаз MPII и MP + CF (желтые ромбы), фаза MP + CF при $\alpha = 0,4$, $\beta = 0,3$ (фиолетовые кружки), при $\alpha = 0,5$, $\beta = 0,3$ (красные звезды). Профиль плотности фазы MPI показан при $\alpha = 0,2$, $\beta = 0,8$ (голубые ромбы). б) gTASEP при $p = 0,6$ и $p_m = 1$ (IA) для цепочки из $L = 200$ узлов при фиксированном $\alpha = 0,3$ и различных значениях β . Показано, как меняются профили плотности при попадании в разные фазы с изменением β при фиксированном α . При $\beta = p = 0,6$ (на линии, разделяющей подобласти MPI и MPII) профиль плотности плоский, $\rho_i = \rho_1 = \alpha/p$, $i = 1, \dots, L$, и равен локальной плотности в первом узле решетки

в объеме до последнего узла, $\rho_b = \rho_i = 1$. Однако возле левой границы заполнение неполное, так как локальная плотность ρ_1 линейно убывает вместе с β до α/p при $\beta = \alpha$ (см. рис. 4, б). Поток частиц опять равен $J = \beta$, как и в чистой фазе CF.

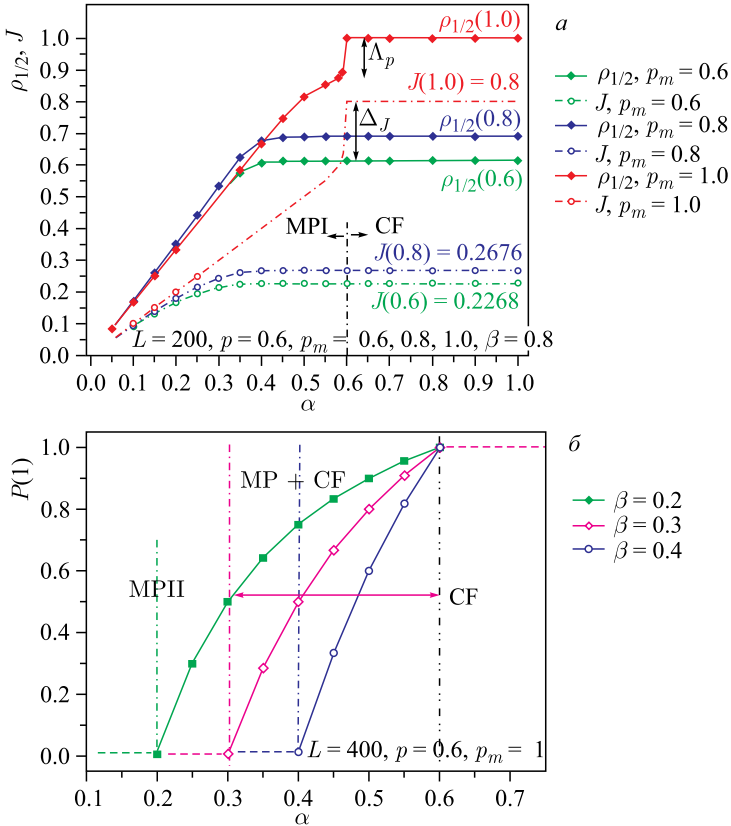


Рис. 5 (цветной в электронной версии). а) Поведение потока J и объемной плотности ρ_b ($\rho_b \approx \rho_{1/2}$) при $p = 0,6$ как функции вероятности ввода α при фиксированном значении вероятности вывода $\beta = 0,8$. Результаты показаны для трех значений модифицированной вероятности $p_m = 0,6, 0,8$ и $1,0$ для цепочки длиной $L = 200$ узлов. Хорошо видны скачки не только объемной плотности ρ_b (красные ромбы), но и тока J (красные кружки), появляющиеся при $p_m = 1$. б) Зависимость вероятности $P(1)$ полного заполнения решетки в смешанной фазе MF + CF gTASEP при $p = 0,6$ и $p_m = 1$ как функции вероятности ввода α (для трех значений $\beta = 0,2, 0,3, 0,4$). Показаны результаты для системы $L = 400$ узлов. $P(1)$ тождественно равна нулю в объеме фазы МРП, но экспоненциально быстро нарастает при приближении и непосредственно около фазы CF, которая находится справа от вертикальной (черной) штрихпунктирной линии при $\alpha = p$ и где $P(1)$ равна 1

Переходы между этими фазами выглядят следующим образом. Мы наблюдаем необычный переход между фазой MP и CF со скачком как объемной плотности, так и тока (см. рис. 5, а, где показаны скачки, происходящие в

$J(\alpha)$ и $\rho_b(\alpha)$ при пересечении линии $\alpha = p$, т. е. при переходе от фазы MPI к фазе CF). Обнаружен непрерывный переход кластерного типа от фазы MP к CF, который происходит на протяжении всей фазы MP + CF, между фазами MP и CF (см. рис. 5, б).

Мы также установили, что при переходе от фазы MP + CF к фазе MP с увеличением β при фиксированном $\alpha < p$ на границе $\beta = \alpha$ происходит «скачок» объемной плотности от значения $\rho_b = 1$ вниз к $\rho_b = \alpha/p$, вместе с разрывом в первой производной тока $J(\beta)$. Это сигнал о появлении неравновесного фазового перехода первого рода в пределе бесконечной цепи между фазами MP + CF и MP.

С помощью метода «Data Collapse» (метода свертывания данных) мы установили, что законы конечноразмерного скейлинга (FFS) выполняются для объемной плотности ρ_b и тока J вблизи точки фазового перехода при $\alpha = p$. Соответствующая переменная FFS ($x = L(p - \alpha)$) предлагает для потока и объемной плотности определение расходящейся корреляционной длины в данном фазовом переходе (от MPI к фазе CF) и ее интерпретацию как размера самого большого кластера в пределе бесконечной цепи $L \rightarrow \infty$.

3.2. Теория случайных блужданий ($p_m = 1$). Чтобы применить эту теорию, мы обратились к дуальному представлению конфигураций системы, т. е. сосредоточились на рассмотрении позиций пустых узлов вместо узлов, занятых частицами. Такое представление позволяет наблюдать весьма специфическую динамику межкластерных интервалов, так как наглядно демонстрирует, как ширина каждого промежутка выполняет случайное блуждание (рис. 6, а).

При необратимой агрегации, т. е. при $p_m = 1$, есть несколько важных наблюдений. Во-первых, интервалы могут появляться только в первом узле цепочки, поскольку уже существующие кластеры не могут распадаться. Во-вторых, интервалы могут исчезать, когда два соседних кластера сливаются или когда самый правый кластер покидает систему, а следующий за ним достигает последнего узла цепи. Очень важной характеристикой динамики интервалов является то, что пока существуют два последовательных интервала, расстояние между ними остается постоянным, поскольку число частиц в кластере между двумя интервалами остается фиксированным. Таким образом, соседние границы двух сосуществующих интервалов должны двигаться параллельно, и интервалы могут не пересечься или слиться. В результате ширина каждого интервала выполняет случайное блуждание с начальным состоянием, включающим один или несколько соседних пустых узлов, и заканчивается, когда случайное блуждание достигает выхода. Если конфигурация имеет два или более интервала, то случайные блуждания, выполняемые их границами, не являются независимыми.

В общем случае (при $\beta \neq p$) самый правый интервал выполняет асимметричное случайное блуждание, в то время как все интервалы слева от него

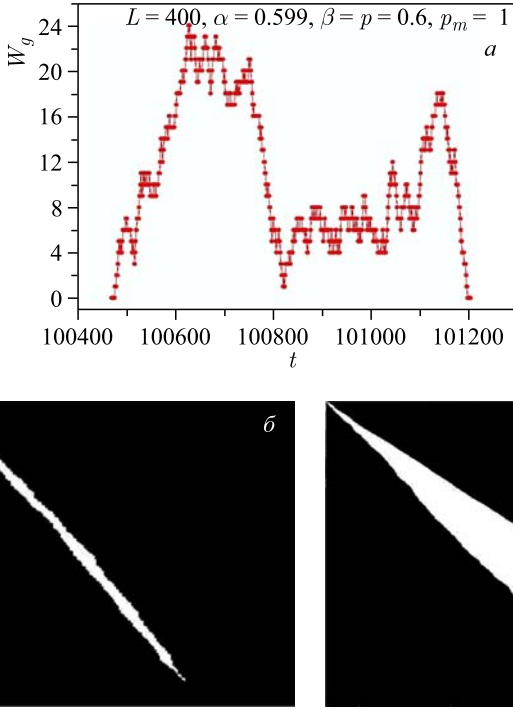


Рис. 6. *а)* Эволюция во времени ширины интервала W_g в ограниченном промежутке времени для системы с $L = 400$ узлами и $p = 0,6$, $p_m = 1$ при $\alpha = 0,599$ и $\beta = 0,6$ для одной конкретной реализации процесса моделирования. *б, в)* Пространственно-временной график (время направлено вертикально вниз, а пространственная переменная изменяется в горизонтальном направлении); для gTASEP при $p = 0,6$, $p_m = 1$ показывающий появление критического интервала при $\alpha = 0,59$, $\beta = 0,6$ для системы в $L = 200$ узлов (*б*); для gTASEP при $p = 0,6$ и $p_m = 1$ показывающий появление увеличивающегося интервала при $\alpha = 0,5995$, $\beta = 0,9$ для системы в $L = 400$ узлов (*в*)

выполняют симметричные случайные блуждания. Это происходит из-за того, что его правая граница движется вправо с другой вероятностью, в отличие от всех границ интервалов слева. Правая граница самого правого интервала принадлежит кластеру, который смещается вправо с вероятностью вывода из системы β , а его левая граница принадлежит предыдущему кластеру и, следовательно, смещается вправо с вероятностью p . Поэтому после каждого обновления ширина интервала увеличивается на один узел с вероятностью:

$$p_g = \beta(1 - p),$$

уменьшается на один узел с вероятностью

$$q_g = p(1 - \beta)$$

и остается такой же с вероятностью

$$r = 1 - q_g - p_g = 1 - \beta - p + 2\beta p.$$

В то же время обе границы интервалов слева выполняют направленное случайное блуждание с равной вероятностью прыжка p . Следовательно, все интервалы слева от самого правого выполняют симметричное случайное блуждание. Для соответствующей ширины интервала выполняется

$$p_g = q_g = p(1 - p), \quad r = 1 - 2p(1 - p).$$

В результате получаем набор взаимодействующих случайных блужданий, за исключением случайных блужданий внешних границ (которые независимы) первого и последнего интервалов, т. е. правой границы самого правого интервала и левой границы самого левого интервала.

На основании приведенных выше результатов можно сделать вывод, что временная эволюция самого правого интервала в фазе МР влияет на поведение профиля локальной плотности вблизи конца цепочки. Таким образом, когда $\beta > p$ ($\beta < p$), ширина [32] этого интервала увеличивается (уменьшается), стационарный профиль локальной плотности изгибается вниз (вверх) вблизи конца цепочки (см. рис. 4, б).

Картина упрощается при $\beta = p$. В этом случае ширины всех существующих интервалов выполняют симметричные случайные блуждания, а профиль локальной плотности полностью плоский (см. рис. 4, б). По существу, распределение вероятности времени жизни для всех промежутков может быть вычислено при условии, что заданы начальные условия. Но проблема вычисления стационарной вероятности полностью заполненной конфигурации $P(1)$ путем усреднения по времени эволюции системы в настоящее время остается недостижимой.

Наблюдаются три режима эволюции ширины интервалов. Первый — увеличивающийся самый правый интервал (показан на рис. 6, в). Увеличение происходит в области МР1, при $\beta > p$, и, следовательно, для самого правого интервала $p_g > q_g$. Все интервалы слева от него выполняют симметричные случайные блуждания, так как обе границы каждого из этих интервалов выполняют направленное случайное блуждание с вероятностью прыжка p .

Второй — режим короткоживущего правого интервала. Он наблюдается в области МР2, где $\beta < p$. Случайное блуждание самого правого интервала выполняется с $p_g < q_g$, и в результате самый правый интервал «схлопывается», в то время как все интервалы слева от него выполняют симметричные случайные блуждания.

Критический режим интервалов наблюдается при $\beta = p$, тогда ширины всех существующих интервалов выполняют симметричные случайные блуждания, начиная с соответствующих начальных условий. Профиль локальной плотности полностью плоский.

В $MP + CF$ ($\beta < \alpha < p$) (см. рис. 4, *a* и *b*) путь полностью перекрыт, начиная с объема и вплоть до последнего участка, $\rho_b = \rho_L = 1$. Это не так для левого конца цепочки. Для плотности в первом узле в работе [32] нами доказан результат:

$$\rho_1^{MP+CF} = 1 - \left(\frac{1}{\alpha} - \frac{1}{p} \right) \beta.$$

Отличительной особенностью гранично возмущенной фазы $MP + CF$ является появление межкластерных интервалов только на конечном расстоянии от левого конца цепочки (см. рис. 11, *з*).

Эволюция конфигураций в случае одиночного интервала. Начнем с изучения временной эволюции одиночных интервалов в разных областях CF -фазы, которая представляет собой цепь, до конца заполненную частицами со стационарным потоком $J = \beta$. Это означает, что мы рассматриваем эволюцию конфигураций с одним интервалом и аналитически оцениваем вероятность $P(1)$ появления полностью заполненной конфигурации при условии, что появление интервала в первом узле конфигурации CF происходит чрезвычайно редко. Это событие происходит, когда частица целиком заполняющего цепочку кластера покидает систему в правом конце с вероятностью β , что приводит к детерминированному сдвигу всех оставшихся частиц $L - 1$ на один узел вправо. Тогда образовавшаяся вакансия в первом узле не сразу заполняется частицей из левого источника. Это событие происходит с вероятностью $(1 - \tilde{\alpha}) \ll 1$. Следовательно, для появления вакансии в первом узле до конца заполненной цепочки необходимо в среднем \bar{N} обновлений, где

$$\bar{N} = [(1 - \tilde{\alpha})\beta]^{-1} \gg 1.$$

За единицу времени из одной вакансии могут образоваться интервалы размером в один или несколько пустых узлов, которые находятся между кластерами заполненных узлов. Если \bar{n} — среднее время жизни интервала (за число обновлений) в различных асимптотических режимах и $\bar{n} < \bar{N}$, то вероятность $P(1)$ определяется соотношением

$$P(1) \simeq \frac{\bar{N} - \bar{n}}{\bar{N}}.$$

В режиме увеличивающегося интервала к границе $\alpha = p$ с фазой CF мы приближаемся от области MP , где $\beta > p$. В этом случае $p_g > q_g$ и интервал асимптотически увеличивается с числом n обновлений. Он будет существовать до тех пор, пока его границы не достигнут конца цепи, т. е. $\bar{n} \sim L$. Такой

длинный интервал, распространяющийся по всей цепи, появляется в среднем после \bar{N} обновлений, где

$$\bar{N} \sim [\beta(p - \alpha)]^{-1}.$$

Важным допущением является то, что $\bar{n} \ll \bar{N}$ и что в течение рассматриваемого промежутка времени нет других долгоживущих интервалов. В таком случае мы получаем

$$P(1) \simeq 1 - a_1 L(p - \alpha),$$

где коэффициент a_1 выражается через p и β следующим образом:

$$a_1 = \frac{\beta - p}{p^2(1 - p)}.$$

Здесь $L(p - \alpha)$ — конечноразмерная скейлинговая переменная, появление которой является важным результатом. Это подтверждается численно методом свертывания данных (Data Collapse), примененным к нашим результатам компьютерного моделирования для цепей различной длины L модели системы. Мы установили, что режим короткоживущего интервала появляется при приближении к границе фазы CF от границы возмущенной фазы MP + CF, т. е. при $\beta < p$. Тогда $p_g < q_g$ и интервал между вновь растущим кластером и кластером, покидающим систему из его правой границы, разрушается за конечное число временных шагов. Верхняя оценка может быть результатом случайного блуждания по бесконечной цепочке с начальным состоянием в точке $i = 1$ и одним поглощающим состоянием в начале координат $i = 0$:

$$\bar{n} < (q_g - p_g)^{-1} = (p - \beta)^{-1}.$$

Таким образом,

$$P(1) \approx 1 - \bar{n}/\bar{N} \rightarrow 1, \text{ когда } \alpha \rightarrow p \text{ при } \beta < p.$$

Критический режим интервала возникает при приближении границы $\alpha = p$ фазы CF вдоль линии $\beta = p$. Здесь ширина интервала выполняет симметричное случайное блуждание с $p_g = q_g = p(1 - p)$ и $r = 1 - 2p(1 - p)$. Вычисление \bar{n} в этом случае становится сложным, так как средняя длина симметричного случайного блуждания по бесконечной цепочке с начальным состоянием при $i = 1$ и одним поглощающим состоянием при $i = 0$ расходится.

Время жизни симметричного случайного блуждания на конечной цепочке в среднем ограничено L/p . Определим среднее время жизни \bar{n}_M интервала при M обновлениях, $\bar{n}_M = \sum_{m=1}^M m f_{1,0}^{(m)}$, где $f_{1,0}^{(m)}$ — вероятность того, что

начальный интервал с шириной единица исчезнет при обновлении m . Используя известную производящую функцию $f_{1,0}^{(m)}$, получаем следующее точное выражение:

$$\bar{n}_M = \frac{p(1-p)}{r} \sum_{n=0}^{M/2-1} \left(\frac{p(1-p)}{r} \right)^{2n} \binom{2n+1}{n} \sum_{k=2n+1}^M r^k \binom{k}{2n+1}.$$

Чтобы получить более простое выражение для $M \gg 1$, мы применили аппроксимирующую цепочку, которая приводит к следующей оценке:

$$\bar{n}_M \cong \frac{1}{2\sqrt{\pi}p(1-p)} \int_0^{M/2} \frac{dx}{\sqrt{x}} = \frac{\sqrt{M}}{\sqrt{2\pi}p(1-p)}.$$

Следовательно, для $M = L/p$ получаем результат конечноразмерного скейлинга, подтвержденный нашим компьютерным моделированием:

$$P(1) \simeq 1 - b_1 L^{1/2}(p - \alpha),$$

где $x = L^{1/2}(p - \alpha)$ — это критическая конечноразмерная скейлинговая переменная, а b_1 — константа пропорциональности.

4. gTASEP С ПРИТЯГИВАЮЩИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ $p < p_m < 1$, КОГДА ВОЗМОЖНА ФРАГМЕНТАЦИЯ КЛАСТЕРОВ

4.1. Краткий обзор главных результатов. Начнем этот раздел с иллюстрации влияния введения дополнительного взаимодействия p_m в TASEP с фиксированным $p = 0,6$ на некоторые свойства системы в одной точке ($\alpha = 0,5$, $\beta = 0,5$) фазовой диаграммы. Важно отметить, что взаимодействия между частицами в системе определяют то, как частицы влияют на движение друг друга [27]. Случай, когда $p_m > p$, мы называем взаимодействием «притяжения», так как частицы имеют больше шансов остаться вместе в кластере, чем распасться, так как у них вероятность перемещения (p_m) больше, чем вероятность перемещения (p) головной частицы кластера.

Влияние дополнительного взаимодействия между частицами на свойства системы показано на рис. 7, 8. На рис. 7 изображено, как профили плотности $\rho(x)$ ($x = i/L$, $x \in [0, 1]$) (и соответствующая корреляция F_{cor} для ближайших соседей) в одной точке фазового пространства ($\alpha = 0,5$, $\beta = 0,5$) в gTASEP меняются при увеличении параметра p_m от 0 до 1. При $p_m = 0$ наблюдается профиль плотности стандартного TASEP с PU (черные пустые символы), при $p_m = 0,6$ — профиль стандартного TASEP с BOSU (показан зелеными символами).

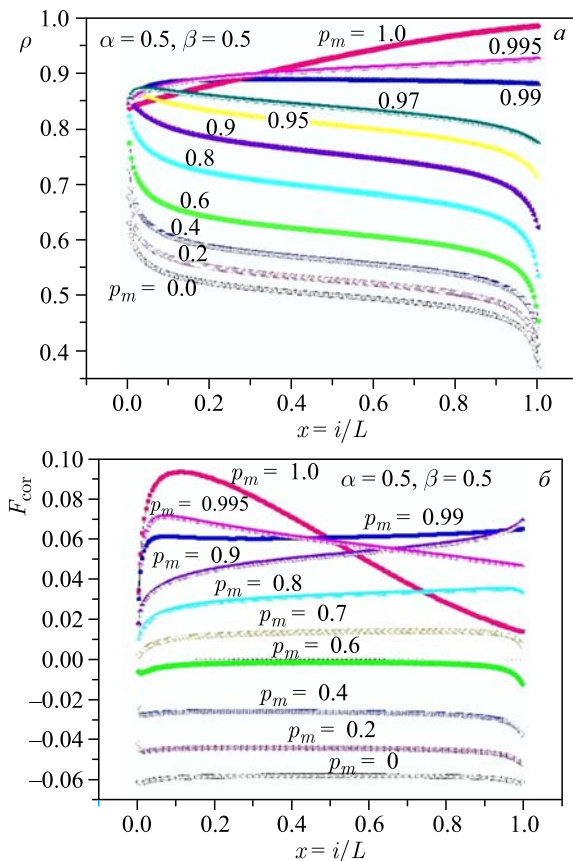


Рис. 7 (цветной в электронной версии). а) Изменение профиля плотности $\rho(x)$, $x = i/L$, для gTASEP при фиксированном $p = 0,6$ при изменении второй модифицированной вероятности скачка p_m в интервале $[0, 1]$. Профили плотности (полученные с помощью моделирования МК-методом) показаны в фазовой точке $\alpha = 0,5$, $\beta = 0,5$. б) Соответствующие корреляции F_{cor} между ближайшими соседями как функции пространственной переменной $x = i/L$ для различных значений дополнительной вероятности скачка p_m

Эти профили плотности характерны для фазы МС. Профили плотности при $p_m > p$ — это профили для gTASEP с притягивающим взаимодействием. Профиль плотности непрерывно изменяется с увеличением p_m до профиля плотности, найденного при $p_m = 0,99$, который является профилем плотности фактически в тройной точке gTASEP с $p_m = 0,99$, поскольку для него (см. фазовую диаграмму, показанную на рис. 9, б)) находим $\alpha_c = \beta_c = 0,502$. При $p_m = 0,99$ наблюдается переход к типичному профилю плотности, харак-

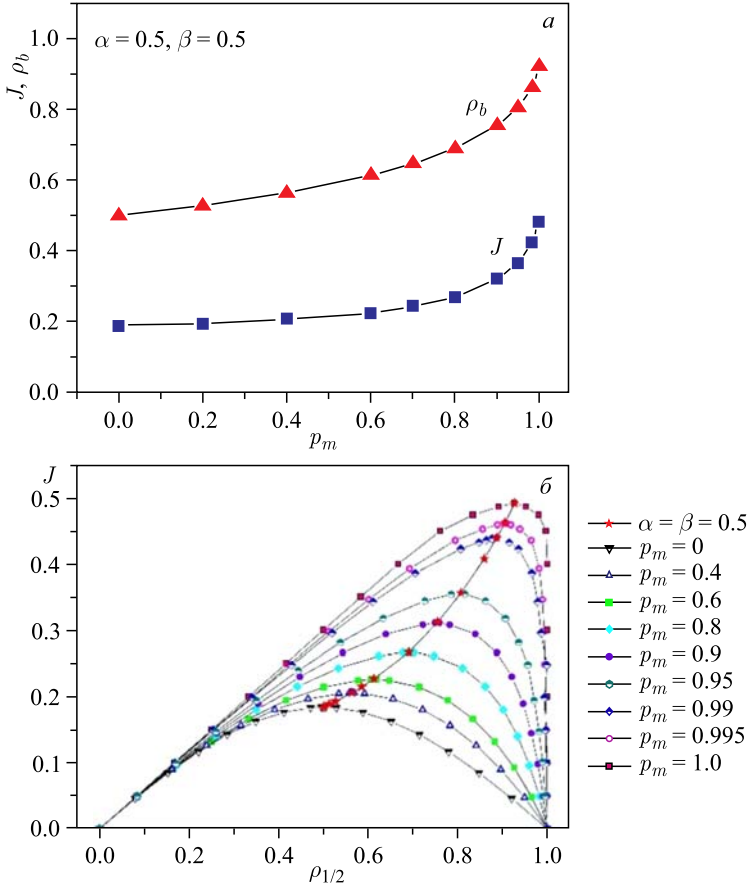


Рис. 8 (цветной в электронной версии). *а*) Поток J и объемная плотность ρ_b в гTASEP (при фиксированном $p = 0,6$) при $\alpha = 0,5$, $\beta = 0,5$ как функции модифицированной вероятности скачков p_m . *б*) Фундаментальная диаграмма (поток J и объемная плотность ρ_b , где $\rho_b \approx \rho_{1/2}$) для гTASEP (с фиксированным $p = 0,6$) при различных значениях p_m : $p_m = 0,6$ (TASEP с BOSU) (сплошная линия из зеленых символов); гTASEP с $p_m = 0,99$ (сплошная линия из голубых символов) и гTASEP с $p_m = 1,0$ (IA) (сплошная линия из розовых символов). Сплошная линия из красных звездочек показывает результат для $J(\rho_{1/2})$ при различных значениях p_m , полученных в фазовой точке $\alpha = 0,5$, $\beta = 0,5$

терному для гTASEP при $p_m = 1$, — случай, когда происходит IA кластеров и частиц. Профиль плотности при $p_m = 1$ — это профиль на линии сосуществования между фазами МРІІ и МР + CF на фазовой диаграмме в предельном случае гTASEP с IA (см. рис. 2, *а*).

Случай $p_m > p$ (в терминах реального автомобильного трафика) предназначен для моделирования наблюдаемой в реальном движении тенденции водителя следовать за автомобилем впереди него (так называемые модели следования за автомобилем, см., например, работу [30] и ссылки в ней). Таким образом, с большей вероятностью появляются кластеры синхронно движущихся частиц, что, в свою очередь, приводит к более высокой пропускной способности (поток) в системе при любой плотности. Это хорошо видно на рис. 8. На рис. 8, *а* представлена зависимость потока и объемной плотности в системе (при $\alpha = 0,5$, $\beta = 0,5$) от p_m , а на рис. 8, *б* показана фундаментальная диаграмма (поток объемной плотности в gTASEP с фиксированным $p = 0,6$) для различных значений p_m .

Плотность в середине цепочки, $\rho_{1/2}$, при $x = 1/2$ (где $x = i/L$) является очень хорошей аппроксимацией к объемной плотности ρ_b системы, и мы используем ее вместо ρ . Фундаментальная диаграмма была впервые получена Hrabák (см. рис. 6.2 в работе [39], где $\gamma = p_m/p$) для gTASEP с периодическими граничными условиями. Результаты нашего моделирования для gTASEP с открытыми граничными условиями (при фиксированном $p = 0,6$) для системы с $L = 200$ узлами показаны на рис. 8, *б*. Видно, что при фиксированном ρ поток J растет с увеличением p_m . Максимальное значение J_{\max} тока при фиксированном p_m (показанное красными звездочками) сдвигается вместе с p_m в сторону более высоких значений плотности — очень полезное и желательное свойство для реального трафика. При $p_m = 1$ поток более чем вдвое превышает свое значение при $p_m = 0,6$ и объемная плотность больше чем $\rho_b \geq 0,9$. На рис. 8, *б* также можно увидеть, что только для TASEP с PU фундаментальная диаграмма симметрична по отношению к половинной плотности $\rho = 0,5$. Уже при $p_m = p = 0,6$ (TASEP с BOSU) заметен существенный сдвиг положения максимального значения потока J_{\max} в сторону больших плотностей, т. е. имеем $J_{\max} = 0,2267$ при $\rho = 0,6146$ (для $L = 200$), и в пределе $p_m \rightarrow 1$ форма диаграммы принимает форму почти прямоугольного треугольника (с закругленной вершиной, которая становится острее с ростом L) с $J_{\max} \approx 0,5$.

Детальное исследование обобщенного TASEP в режиме притяжения ($p_m > p$) между перескакивающими ближайшими соседними частицами, проведенное с помощью интенсивного компьютерного моделирования, предложило топологию модифицированной фазовой диаграммы со сдвигом тройной точки $[\alpha_c(p, p_m), \beta_c(p, p_m)]$ при изменении $p_m \in [p, 1]$ с фиксированным p , а также природу фазовых переходов между стационарными неравновесными фазами. Точнее, мы обнаружили, что топология фазовой диаграммы в случае IA, возникающая при $p_m = 1$ (см. рис. 3), резко меняется на топологию фазовой диаграммы, характерной для обычного TASEP с BOSU, как только модифицированная вероятность p_m становится меньше единицы и возникает агрегация-фрагментация кластеров. Она имеет типичную структуру, показан-

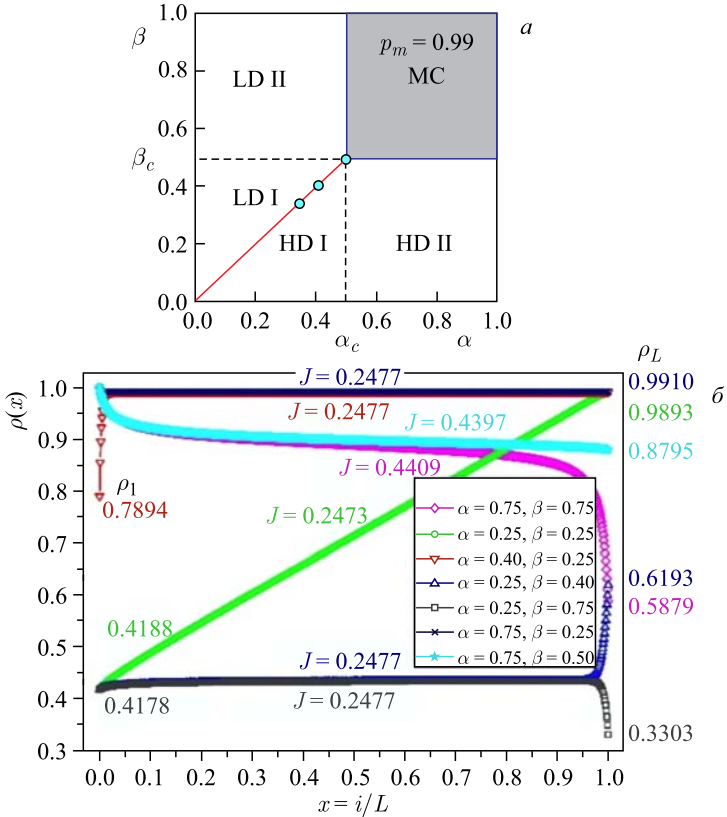


Рис. 9 (цветной в электронной версии). *а*) Предполагаемая фазовая диаграмма gTASEP при $p = 0,6$ и $p_m = 0,99$ (фиолетовые линии) с открытыми границами. Она имеет ту же топологию, что и в случае стандартного TASEP с обратным последовательным обновлением (показано на рис. 1, *а*), но с другими критическими значениями скорости ввода-вывода, зависящими от p_m , по нашим оценкам, $\alpha_c(0,6; 0,99) = \beta_c(0,6; 0,99) = 0,502$. *б*) Профили локальной плотности gTASEP при $p = 0,6$ и $p_m = 0,99$ в разных точках фазового пространства. Точка $(\alpha = 0,25, \beta = 0,25)$ лежит на CL (линии сосуществования) между фазой LD, представленной точками $\alpha = 0,25, \beta = 0,40$ и $\alpha = 0,25, \beta = 0,75$, и фазой HD, представленной точками $\alpha = 0,40, \beta = 0,25$, $\alpha = 0,75, \beta = 0,25$ и $\alpha = 0,75, \beta = 0,50$. Значение потока J указано рядом с каждым профилем плотности

ную на рис. 9, *а*, снова состоящую из трех фаз — LD, HD и MC, однако с различными критическими значениями вероятностей ввода-вывода. Этот вывод основывается на поведении различных физических величин, таких как поток J и объемная плотность ρ_b как функций вероятностей ввода α и вы-

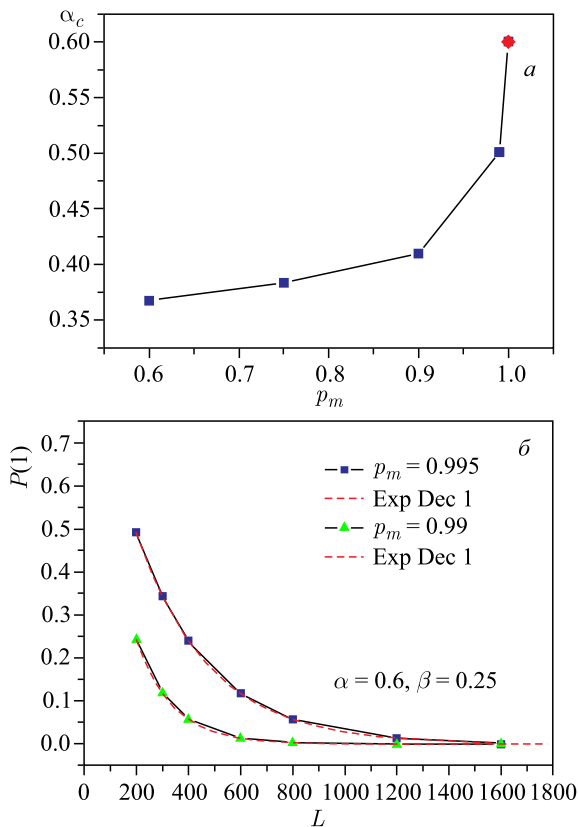


Рис. 10. а) Зависимость критической скорости ввода $\alpha_c(p, p_m)$ от p_m для gTASEP при фиксированном $p = 0,6$. Обращаем внимание, что $\alpha_c(p, p_m) = \beta_c(p, p_m)$ для gTASEP с $p_m < 1$. При $p_m = 1$ $\alpha_c(p, 1) = p$ и фазовая диаграмма имеет другую топологию. б) Экспоненциальное уменьшение вероятности полного заполнения кластера $P(1)$ при $\alpha = 0,6$ и $\beta = 0,25$ при неограниченном увеличении длины цепи L в gTASEP при $p = 0,6$ и $p_m = 0,99, 0,995$

вода β , формы профилей плотности в различных представительных точках фазового пространства (см. рис. 9, б), где показаны профили плотности для gTASEP с $p = 0,6$ и $p_m = 0,99$.

С помощью интенсивного моделирования методом МК оценено критическое значение $\beta_c(0,6, 0,99) = 0,502 \pm 0,001$ и аналогично $\alpha_c(0,6, 0,99) = 0,503$ для gTASEP с $p_m = 0,99$. Таким же образом была проведена оценка $\alpha_c(0,6; 0,9) = \beta_c(0,6; 0,9) = 0,41$ и т.д. Напомним, что для стандартного TASEP с BOSU мы имеем $\alpha_c(0,6, 0,6) = \beta_c(0,6; 0,6) = 0,3675$. Таким образом, оказывается, что тройная точка $[\alpha_c, \beta_c]$ для gTASEP зависит от

вероятностей скачка, т. е. $[\alpha_c(p, p_m), \beta_c(p, p_m)]$. Наши результаты для зависимости критической скорости ввода $\alpha_c(p, p_m)$ (обращаем внимание, что $[\alpha_c(p, p_m) = \beta_c(p, p_m)]$ для $p_m < 1$) фазовой диаграммы для gTASEP при фиксированном $p = 0,6$ при изменении $p_m \in [p, 1]$ представлены на рис. 10, а. Последняя точка ($\alpha_c = p$ при $p_m = 1$) отмечена другим символом и цветом, так как у нее фазовая диаграмма имеет другую природу (отсутствует β_c при $p_m = 1$).

Интересным результатом является экспоненциальный спад до нуля вероятности появления полностью заполненного кластера $P(1)$ (см. рис. 10, б) с увеличением длины цепи L в фазе HDII (фаза, которая возникает в нижней области фазы CF в gTASEP при $p_m = 1$), как только p_m становится меньше единицы.

Здесь стоит упомянуть, что мы обнаружили довольно неожиданное свойство gTASEP при $p < p_m$, а именно то, что потоки в фазах LD и HD, вычисленные в симметричных точках (α, β) и (β, α) фазового пространства, равны: $J_{LD}(\alpha = 0,25, \beta = 0,75) = J_{HD}(\alpha = 0,75, \beta = 0,25) = 0,2477$. Этот результат является довольно «неожиданным», поскольку gTASEP не удовлетворяет симметрии частица–дырка, присутствующей в стандартных версиях TASEP. Например, фундаментальная диаграмма общей модели, показанная на рис. 8, б, не будет симметричной при замене $\rho \leftrightarrow 1 - \rho$. Кроме того, динамика глубоко в объеме при $p < p_m$ не обладает симметрией частица–дырка. А также в случае открытых границ левое граничное условие, уравнение (1), не подходит при введении дырок с правого конца цепи.

4.2. Теория случайных блужданий в общем случае притяжения. Как уже упоминалось, в этом случае, т. е. когда $p < p_m < 1$, в системе разрешены как агрегация, так и фрагментация кластеров, что осложняет решение проблемы.

Начнем с выяснения вероятности появления единственного интервала при граничных условиях, соответствующих фазе CF (самый простой случай для начала), и рассмотрим первый шаг во временной эволюции ширины интервала. Проблема совсем нетривиальна, поскольку вероятность появления интервала позиционно зависима, в отличие от случая $p_m = 1$. Таким образом, когда $\beta \neq p$, ширина интервала выполняет специальное, зависящее от позиции случайное блуждание.

Для простоты исключаем появление второго интервала в наших рассмотренных случаях. Тогда, если обозначить $P_i(pp_m)$ вероятность появления единственного интервала в конфигурации CF при $\tau_1 = \tau_2 = \dots \tau_L = 1$, когда $0 < 1 - p_m \ll 1$, то мы получаем следующие выражения:

$$P_{L-k}(p, p_m) = (1 - p_m)p_m^k \beta, \quad k = 0, 1, 2, \dots, L - 2,$$

$$P_1(p, p_m) = (1 - \tilde{\alpha})p_m^{L-1}\beta.$$

Здесь интервалы появляются в узлах $2 \leq i \leq L$ как результат левого граничного условия (так как оно дает $\tilde{\alpha} = 1$ для всех $p < \alpha \leq 1$, что приводит к $P_1(p, p_m) = 0$ в начале каждого обновления). Правая граница интервала, расположенная в узле $i + 1 < L$, может переместиться на один узел вправо при условии, что этот узел пуст. Это произойдет, только если частица в узле $i = L$ покинет систему с вероятностью β , а оставшийся кластер, состоящий из $L - i - 1$ частиц в узлах $i + 1, \dots, L - 1$, сдвинется на один узел вправо с вероятностью $p_m^{L-i-1}\beta$. Исходя из этих соображений можно оценить, что ширина интервала увеличится на один узел с вероятностью

$$p_g(i) = (1 - p)p_m^{L-i-1}\beta,$$

уменьшится на один узел с вероятностью

$$q_g(i) = [(1 - \beta) + (1 - p_m^{L-i-1})\beta]p = (1 - p_m^{L-i-1}\beta)p$$

и останется такой же с вероятностью

$$r_g(i) = 1 - p + p_m^{L-i-1}\beta(2p - 1).$$

Как и следовало ожидать, при $p_m = 1$ эти выражения сводятся к равенствам (4), полученным ранее в работе [32]. Отметим, что в альтернативном случае нескольких сосуществующих интервалов указанные выше вероятности применимы именно к крайнему правому интервалу. Усредняем изменение ширины интервала по нормированным начальным вероятностям $P_i(p, p_m)$, а затем отслеживаем изменения ширины интервала на первом временном шаге его эволюции. Не вдаваясь в подробности, получаем, что ширина зазора увеличивается в среднем на один узел с вероятностью

$$\bar{p}_g = \frac{(1 - p)(1 + p_m^{L-1})\beta}{p_m(1 + p_m)},$$

уменьшается на один узел с вероятностью

$$\bar{q}_g = p - \frac{p(1 + p_m^{L-1})\beta}{p_m(1 + p_m)}$$

и остается без изменений с вероятностью

$$\bar{r}_g = 1 - p + \frac{(2p - 1)\beta(1 + p_m^{L-1})}{p_m(1 + p_m)}.$$

При $p_m = 1$ эти выражения также сводятся к равенствам (4) в работе [32]. Сравнивая выражения для \bar{p}_g и \bar{q}_g , можно сделать вывод, что в среднем одноузельный разрыв будет расти после первого временного шага его эволюции, когда

$$\beta > p \frac{p_m(1 + p_m)}{(1 + p_m^{L-1})}.$$

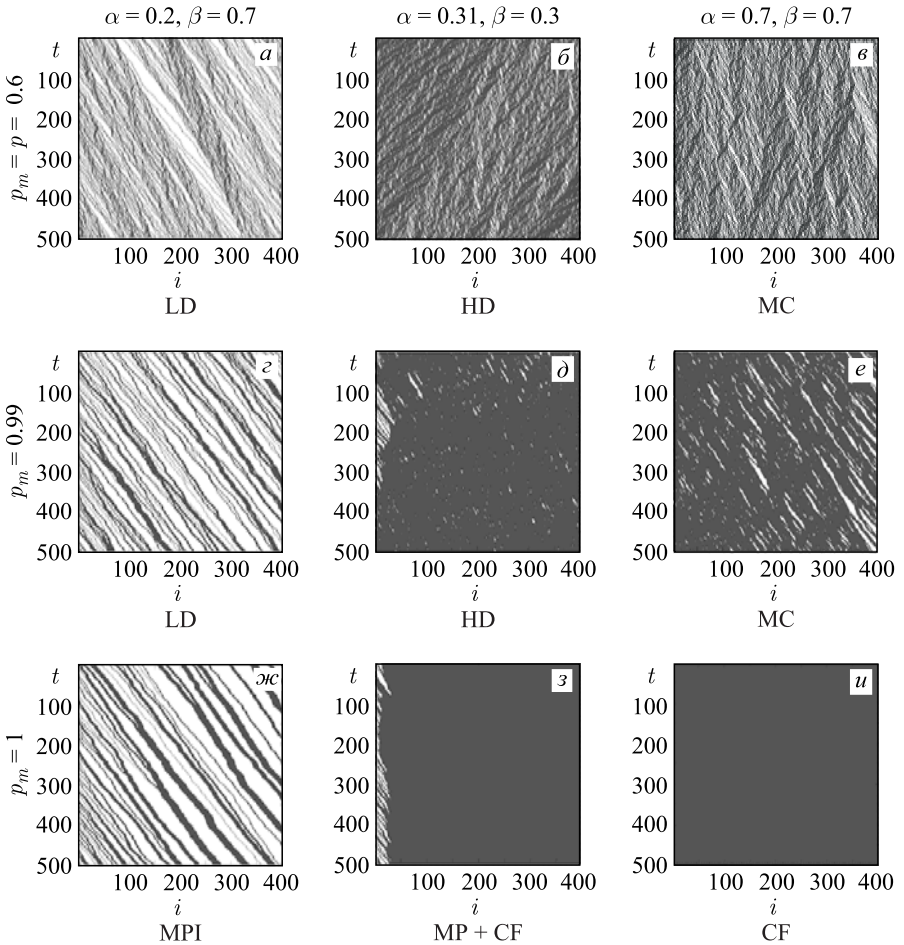


Рис. 11. Пространственно-временные графики (STP) (время течет вниз в вертикальном направлении, пространственная переменная i изменяется в горизонтальном направлении) для gTASEP/оПАППИ (с фиксированной вероятностью скачка $p = 0,6$). Размер системы $L = 400$ узлов. Эволюция интервалов показана в трех представительных точках фазового пространства: в левой колонке $\alpha = 0,2, \beta = 0,7$, в центральной $\alpha = 0,31, \beta = 0,3$ и в правой $\alpha = 0,7, \beta = 0,7$. STP показаны для трех значений модифицированной вероятности p_m . При $p_m = p = 0,6$: а) при $\alpha = 0,2, \beta = 0,7$ (LDI); б) при $\alpha = 0,31, \beta = 0,3$ (HDI), в) $\alpha = 0,7, \beta = 0,7$ (MC); когда $p_m = 0,99$: г) при $\alpha = 0,2, \beta = 0,7$ (LDI); д) при $\alpha = 0,31, \beta = 0,3$ (HDI), е) при $\alpha = 0,7, \beta = 0,7$ (MC); а также когда $p_m = 1$ (IA): ж) при $\alpha = 0,2, \beta = 0,7$ (MPI); з) при $\alpha = 0,31, \beta = 0,3$ (MPII); и) при $\alpha = 0,7, \beta = 0,7$ (CF)

Когда $p_m \rightarrow 1$ и L зафиксированы или когда $L \rightarrow \infty$ так, что $p_m^L \rightarrow 1$, это условие упрощается до $\beta > p$. Однако для фиксированных значений p_m , близких к 1, p_m^L будет уменьшаться до нуля при $L \rightarrow \infty$. На основании нашей теории случайных блужданий и компьютерного моделирования заключаем, что справедливы следующие простые критерии, а именно: $\beta > p$ для увеличивающихся интервалов и $\beta < p$ для уменьшающихся.

Таким образом, принимая во внимание приведенные выше результаты, можно сделать вывод, что в верхней области $(p < \alpha \leq 1] \times (p < \beta \leq 1]$ фазы CF появится фаза максимального потока. Профиль локальной плотности удовлетворяет неравенствам $\rho_1 = 1 > \rho_{1/2} > \rho_L$, что следует из условия $\tilde{\alpha} = 1$, и большей вероятности образования интервала около конца цепочки. В нижней области $(p < \alpha \leq 1] \times (0 < \beta < p]$ CF-фазы интервалы немногочисленны, малы и недолговечны, что характерно для фазы высокой плотности. Левая часть профиля локальной плотности изгибается вверх до $\rho_1 = 1$. Эти выводы подтверждаются результатами нашего моделирования МК-методом, приведем к фазовой диаграмме (см. рис. 9, а), представленной в п. 4.1.

Для иллюстрации и упрощения сравнения различных режимов эволюции интервалов, возникающих в gTASEP при $p = 0,6$, представлены пространственно-временные графики, созданные с помощью моделирования МК-методом для TASEP при $p_m = 0,6$, для gTASEP при $p_m = 0,99$ (показано на рис. 11) и для gTASEP при $p_m = 1$ (IA) (показано на рис. 11), в одних и тех же точках фазового пространства, а именно при $\alpha = 0,2, \beta = 0,7; \alpha = 0,31, \beta = 0,3$ и при $\alpha = 0,7, \beta = 0,7$. При изменении p_m эти точки принадлежат разным фазам gTASEP/оПАППИ. Эти различные фазы указаны под каждым пространственно-временным графиком.

Можно наблюдать различные режимы эволюции интервалов в областях LDI (показаны на рис. 11, а и г) и HDI (рис. 11, б и д). В обоих случаях $\alpha < p$, что означает $\tilde{\alpha} < 1$, и интервалы могут появляться в первом узле $i = 1$ и развиваться по всей цепочке. В фазе LDI (рис. 11, г) интервалы большие и долгосуществующие, в то время как в фазе HDI (рис. 11, д) они маленькие, редкие и очень недолговечные. Такое поведение интервалов согласуется с наблюдаемой большой разницей в плотностях частиц в фазах с низкой и высокой плотностью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлен обзор некоторых наших результатов, полученных при исследовании стационарных неравновесных состояний обобщенного TASEP на конечных открытых цепочках в случае притягивающего взаимодействия ($p < p_m$) [31–34, 41]. Затронуты частный случай необратимой агрегации ($p_m = 1$) и общий случай притяжения ($p < p_m < 1$), при котором проис-

ходят как агрегация, так и фрагментация кластеров частиц. Особый акцент сделан на применении неполной теории случайных блужданий для обоих случаев.

Получена фазовая диаграмма с новой топологией для gTASEP в предельном случае IA [31–33] путем оценки ряда физических величин, например профилей локальной плотности, потока и вероятности полного заполнения решетки, для разных значений параметров модели (т. е. в разных точках фазового пространства). Обнаружена полностью агрегированная фаза CF, которая занимает конечную область $\alpha \leq p$ в фазовом пространстве, а также идентифицированы две другие неравновесные стационарные фазы: многочастичная MP и смешанная фаза MP + CF. Установлено, что свойства двух фаз, CF и MP + CF, отличаются от типичных фаз обычного TASEP.

Кроме того, был обнаружен необычный прерывистый фазовый переход между MP и CF, характеризующийся скачком как объемной плотности частиц $\rho_b(\alpha)$, так и потока частиц $J(\alpha)$ на границе между двумя фазами $\alpha = p$. Мы назвали его фазовым переходом «нулевого рода». Насколько нам известно, о таком переходе ранее не сообщалось. Мы объяснили его появление быстрым увеличением вклада $P(1)$ как в локальную плотность ρ_L , так и в поток J . Значения скачков потока и объемной плотности были оценены в термодинамическом пределе при пересечении границы $\alpha = p$ между фазами MP и CF.

Кроме того, на линии $0 < \alpha = \beta < p$ наблюдался обычный фазовый переход первого рода между фазами MP + CF и MP. Было оценено и представлено типичное поведение профилей локальной плотности и потока на этих переходах. Еще один непрерывный по отношению к вероятности $P(1)$ полного заполнения решетки переход типа кластеризации наблюдался между фазами MP и CF на протяжении всей фазы MP + CF. Этот интересный результат находит свое выражение в зависимости вероятности $P(1)$ полного заполнения решетки (интерпретируемой как параметр порядка) в фазе MP + CF от вероятности ввода α . Однако для понимания микроскопического механизма появления и поведения $P(1)$ в фазе MP + CF необходимы дальнейшие более подробные исследования.

В рамках теории случайных блужданий проанализирована эволюция единственного интервала между двумя большими скоплениями частиц. При приближении скорости ввода слева к границе $\alpha = p$ с CF-фазой были установлены три качественно различных режима: 1) в MP-фазе время жизни самого крайнего правого интервала в конфигурации с затором имеет размер $O(L)$; 2) в фазе MP + CF макроскопические заторы, разделенные короткоживущими интервалами длиной $O(1)$; и 3) критический режим, когда макроскопические заторы разделяются интервалами, с временем жизни порядка $O(L^{1/2})$ при приближении к тройной точке $\alpha = \beta = p$. Эти результаты были использованы для объяснения природы необычного фазового перехода, происходящего между фазами MP и CF.

Также исследован gTASEP в режиме притяжения частиц $p < p_m < 1$, когда в системе происходят как агрегация, так и фрагментация кластеров. На основании результатов моделирования МК-методом неполной теории случайных блужданий построена фазовая диаграмма, типичная для стандартного TASEP с тремя фазами LD, HD и MC. Эффект появляющегося в gTASEP дополнительного взаимодействия приводит к увеличению объемной плотности и потока с увеличением p_m , а также к модифицированной (сильно асимметричной) фундаментальной диаграмме. Ее асимметричная форма ясно показывает увеличение потока (при более высоких значениях p_m), протекающего в системе при более высоких плотностях частиц в сравнении со стандартным TASEP с BOSU. Основным эффектом увеличения модифицированной вероятности скачка p_m , по-видимому, является увеличение объемной плотности и потока, а также значений координат критических точек $\alpha_c(p, p_m) = \beta_c(p, p_m)$.

С помощью теории случайных блужданий аналитически рассмотрен вопрос, как полностью заполненная фаза (CF) при $p_m = 1$ кардинально меняется и трансформируется в новые фазы, характерные для стандартного TASEP, как только p_m становится меньше единицы. Мы представили подробные пространственно-временные графики, полученные моделированием методом Монте-Карло в окрестности тройной точки (фазовой диаграммы), которые иллюстрируют применимость теории случайных блужданий. Вероятность появления интервала зависит от положения, в отличие от случая необратимой агрегации, что, соответственно, делает проблему более сложной.

Основываясь на нашей теории случайных блужданий и результатах компьютерного моделирования, мы убедились, что справедливы простые критерии: $\beta > p$ для увеличивающихся интервалов и $\beta < p$ для уменьшающихся интервалов. Полученные результаты показали, что наше ожидание, подтвержденное компьютерным моделированием, состоит в том, что в верхней области фазы CF ($p < \alpha \leq 1$) \times ($p < \beta \leq 1$) появится фаза MC.

В исследовании gTASEP все еще остается много открытых проблем, таких как использование теории случайных блужданий для получения как качественных, так и количественных прогнозов, аналитический вывод формул локальной плотности на концах цепочки и значения потока в различных стационарных фазах, и это лишь некоторые из них. Для лучшего понимания эффекта дополнительного взаимодействия между частицами необходимы дальнейшие исследования, например, кластерных распределений, корреляции частиц в системе, флуктуационных свойств и т. д.

Несмотря на то, что gTASEP представляет собой довольно упрощенную модель агрегации и фрагментации кластеров в одномерном пространстве, ее изучение может быть полезным и при исследовании конкретных процессов в реальных явлениях агрегации. Ее свойства могут служить руководством для

будущих экспериментальных исследований одномерной агрегации частиц в стационарном потоке, регулируемом граничными условиями.

Изучение простых моделей показало себя очень эффективным методом в равновесной статистической механике. Поэтому изучение упрощенных моделей, таких как TASEP и его вариантов, необходимо и в неравновесном случае. В последние годы продолжают интенсивные исследования, цель которых выйти за рамки простейших неравновесных моделей, например, путем изучения различных вариантов TASEP и TASEP-подобных моделей с разными видами неоднородностей (с медленными связями [42, 43], беспорядком узлов [44–46], динамическими дефектами [47], с наличием точек ветвления и слияния, сетей [48–50], gTASEP с дополнительными взаимодействиями [35]) а также [51, 52] и другие более сложные варианты TASEP, которые нацелены на учет различных новых свойств, существующих в более реалистичных системах. Изучение этих простых моделей приводит к лучшему и новому пониманию очень богатого мира стационарных неравновесных фаз и переходов между ними.

Благодарности. Авторы выражают благодарность за совместную работу и плодотворные обсуждения своим рано ушедшим коллегам и соавторам — проф. В. Б. Приезжеву и проф. Й. Г. Бранкову. Многие из представленных здесь результатов получены в сотрудничестве с ними. Статья основывается на презентации, представленной на семинаре «В поисках красоты: от конденсированных сред к интегрируемым системам», посвященном Вячеславу Приезжеву. Авторы очень признательны за приглашение и поддержку со стороны оргкомитета семинара. Частичная финансовая поддержка оказана МОН Болгарии посредством гранта № D01-221/03.12.2018 для НЦВРП — объекта НПКНИ, а также полномочным представителем правительства Болгарии в Объединенном институте ядерных исследований (Дубна), грант № 01-3-1137-2019/2023.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kreidenweis S. M., Petters M., Lohmann U.* 100 Years of Progress in Cloud Physics, Aerosols, and Aerosol Chemistry Research // *Amer. Meteorol. Soc.* 2019. V. 59. Ch. 11.
2. *Aliflerakis M., Sallah K. S., Aksay I. A., Prévost J. H.* Reversible Cluster Aggregation and Growth Model for Graphene Suspensions // *AICh Engin.* 2017. V. 63. P. 5462–5473.
3. *Born G. R., Cross M. J.* Effects of Inorganic Ions and of Plasma Proteins on the Aggregation of Blood Platelets by Adenosine Diphosphate // *J. Physiol.* 1964. V. 170. P. 397–414.
4. *Bourdenx M., Koulakiotis N. S., Sanoudou D., Bezard E., Dehay B., Tzarbopoulos A.* Protein Aggregation and Neurodegeneration in Prototypical Neurodegenerative Dise-

- ases: Examples of Amyloidopathies, Tauopathies and Synucleinopathies // *Progress in Neurobiology*. 2015. V. 155. P. 171–193.
5. *Lee M. H.* On the Validity of the Coagulation Equation and the Nature of Runaway Growth // *Icarus*. 2000. V. 143. P. 74–86.
 6. *Taylor J. P., Hardy J., Fischbeck K. H.* Toxic Proteins in Neurodegenerative Disease // *Science*. 2002. V. 296. P. 1991.
 7. *Krug J.* Boundary-Induced Phase Transitions in Driven Diffusive Systems // *Phys. Rev. Lett.* 1991. V. 67. P. 1882.
 8. *Chowdhury D., Santen L., Schadschneider A.* Statistical Physics of Vehicular Traffic and Some Related Systems // *Phys. Rep.* 2000. V. 329. P. 199.
 9. *Katz S., Lebowitz J. L., Spohn H.* Phase Transitions in Stationary Nonequilibrium States of Model Lattice Systems // *Phys. Rev. B*. 1983. V. 28. P. 1655.
 10. *Katz S., Lebowitz J. L., Spohn H.* Nonequilibrium Steady States of Stochastic Lattice Gas Models of Fast Ionic Conductors // *J. Stat. Phys.* 1984. V. 34. P. 497–537.
 11. *Nagle K.* Particle Hopping Models and Traffic Flow Theory // *Phys. Rev. E*. 1996. V. 53. P. 4655.
 12. *Helbing D.* Traffic and Related Self-Driven Many-Particle Systems // *Rev. Mod. Phys.* 2001. V. 73. P. 1067.
 13. *Tripathi T., Chowdhury D.* Interacting RNA Polymerase Motors on a DNA Track: Effects of Traffic Congestion and Intrinsic Noise on RNA Synthesis // *Phys. Rev. E*. 2008. V. 77. P. 011921.
 14. *Klumpp S., Lipowsky R.* Traffic of Molecular Motors through Tube-Like Compartments // *J. Stat. Phys.* 2003. V. 113. P. 233.
 15. *Greulich P., Garai A., Nishinari K., Schadschneider A., Chowdhury D.* Intracellular Transport by Single-Headed Kinesin KIF1A: Effects of Single-Motor Mechanochemistry and Steric Interactions // *Phys. Rev. E*. 2007. V. 75. P. 041905.
 16. *Kolomeisky A. B.* Channel-Facilitated Molecular Transport across Membranes: Attraction, Repulsion, and Asymmetry // *Phys. Rev. Lett.* 2007. V. 98. P. 048105.
 17. *Zilman A., Pearson J., Bel G.* Effects of Jamming on Nonequilibrium Transport Times in Nanochannels // *Phys. Rev. Lett.* 2009. V. 103. P. 128103.
 18. *Meakin P., Ramanlal P., Sander L. M., Ball R.* Ballistic Deposition on Surfaces // *Phys. Rev. A*. 1986. V. 34. P. 5091.
 19. *MacDonald C. T., Gibbs J. H., Pipkin A. C.* Kinetics of Biopolymerization on Nucleic Acid Templates // *Biopolymers*. 1968. V. 6. P. 1.
 20. *Spitzer F.* Interaction of Markov Processes // *Adv. Math.* 1970. V. 5. P. 246–290.
 21. *Derrida B., Domany E., Mukamel D.* An Exact Solution of a One-Dimensional Asymmetric Exclusion Model with Open Boundaries // *J. Stat. Phys.* 1992. V. 69. P. 66.
 22. *Schütz G. M., Domany E.* Phase Transitions in an Exactly Soluble One-Dimensional Exclusion Process // *J. Stat. Phys.* 1993. V. 72. P. 277.
 23. *Derrida B., Evans M. R., Hakim V., Pasquier V.* Exact Solution of a 1D Asymmetric Exclusion Model Using a Matrix Formulation // *J. Phys. A*. 1993. V. 26. P. 1493.
 24. *Hinrichsen H.* Matrix Product Ground States for Exclusion Processes with Parallel Dynamics // *J. Phys. A*. 1996. V. 29. P. 3659.
 25. *Honecker A., Peschel I.* Matrix-Product States for a One-Dimensional Lattice Gas with Parallel Dynamics // *J. Stat. Phys.* 1997. V. 88. P. 319.

26. *Evans M. R., Rajewski N., Speer E. R.* Exact Solution of a Cellular Automaton for Traffic // *J. Stat. Phys.* 1999. V. 95. P. 45.
27. *de Gier J., Nienhuis B.* Exact Stationary State for an Asymmetric Exclusion Process with Fully Parallel Dynamics // *Phys. Rev. E.* 1999. V. 59. P. 4899.
28. *Rajewski N., Schadschneider A., Schreckenberg M.* The Asymmetric Exclusion Model with Sequential Update // *J. Phys.* 1996. V. 29. P. 305.
29. *Rajewski N., Schreckenberg M.* Exact Results for One-Dimensional Cellular Automata with Different Types of Updates // *Physica A.* 1997. V. 245. P. 239.
30. *Rajewski N., Santen L., Schadschneider A., Schreckenberg M.* The Asymmetric Exclusion Process: Comparison of Update Procedures // *J. Stat. Phys.* 1998. V. 92. P. 151.
31. *Bunzarova N. Zh., Pesheva N. C.* One-Dimensional Irreversible Aggregation with Dynamics of a Totally Asymmetric Simple Exclusion Process // *Phys. Rev. E.* 2017. V. 95. P. 052105.
32. *Brankov J. G., Bunzarova N. Zh., Pesheva N. C., Priezhev V. B.* A Model of Irreversible Jam Formation in Dense Traffic // *Physica A.* 2018. V. 494. P. 340.
33. *Bunzarova N. Zh., Pesheva N. C., Priezhev V. B., Brankov J. G.* A Model of Jam Formation in Congested Traffic // *J. Phys. Conf. Ser.* 2017. V. 936. P. 012026.
34. *Bunzarova N. Zh., Pesheva N. C., Brankov J. G.* One-Dimensional Discrete Aggregation–Fragmentation Model // *Phys. Rev. E.* 2019. V. 100. P. 0022145.
35. *Wölki M.* Steady States of Discrete Mass Transport Models. Master Thesis. Univ. of Duisburg–Essen, 2005.
36. *Derbyshev A. E., Poghosyan S. S., Povolotsky A. M., Priezhev V. B.* The Totally Asymmetric Exclusion Process with Generalized Update // *J. Stat. Mech.* 2012. V. 2012. P. 05014.
37. *Derbyshev A. E., Povolotsky A. M., Priezhev V. B.* Emergence of Jams in the Generalized Totally Asymmetric Simple Exclusion Process // *Phys. Rev. E.* 2015. V. 91. P. 022125.
38. *Aneva B. L., Brankov J. G.* Matrix-Product Ansatz for the Totally Asymmetric Simple Exclusion Process with a Generalized Update on a Ring // *Phys. Rev. E.* 2016. V. 94. P. 022138.
39. *Hrabák P.* Ph.D. Thesis. Czech Techn. Univ. in Prague. Faculty of Nucl. Sciences and Phys. Engin. Prague, 2014.
40. *Hrabák P., Krbálek M.* Time-Headway Distribution for Periodic Totally Asymmetric Exclusion Process with Various Updates // *Phys. Lett. A.* 2016. V. 380. P. 1003–1011.
41. *Pesheva N. C., Bunzarova N. Zh.* gTASEP with Attraction Interaction on Lattices with Open Boundaries. arXiv:2001.02010.
42. *Janowsky S., Lebowitz J.* Finite Size Effects and Shock Fluctuations in the Asymmetric Simple Exclusion Process // *Phys. Rev. A.* 1992. V. 45. P. 618–625.
43. *Janowsky S., Lebowitz J.* Exact Results for the Asymmetric Simple Exclusion Process with a Blockage // *J. Stat. Phys.* 1994. V. 77. P. 35–51.
44. *Jindal A., Midha T., Gupta A. K.* Analysis of Interactions in Totally Asymmetric Exclusion Process with Site-Dependent Hopping Rates: Theory and Simulations // *J. Phys. A.* 2020. V. 53.
45. *Bahadoran C., Bodineau T.* Properties and Conjectures for the Flux of TASEP with Site Disorder // *Braz. J. Probability and Statistics.* 2015. V. 29. P. 282–312.

46. *Arita C., Foulaadvand M. E., Santen L.* Signal Optimization in Urban Transport: A Totally Asymmetric Simple Exclusion Process with Traffic Lights // *Phys. Rev. E.* 2017. V. 95. P. 032108.
47. *Jindal A., Kolomeisky A. B., Gupta A. K.* The Role of Dynamic Defects in Transport of Interacting Molecular Motors // *J. Stat. Mech.: Theory and Experiment.* 2020. V. 2020.
48. *Brankov J., Pesheva N., Bunzarova N.* Totally Asymmetric Exclusion Process on Chains with a Double-Chain Section in the Middle: Computer Simulations and a Simple Theory // *Phys. Rev. E.* 2004. V. 69. P. 066128.
49. *Neri I., Kern N., Parmeggiani A.* TASEP Transport on Networks: Theory for Strongly Connected Networks // *Phys. Rev. Lett.* 2011. V. 107. P. 068702.
50. *Baek Y., Ha M., Jeong H.* Effects of Junctional Correlations in the Totally Asymmetric Simple Exclusion Process on Random Regular Networks // *Phys. Rev. E.* 2014. V. 90. P. 062111.
51. *Pal B., Gupta A. K.* Role of Interactions in a Closed Quenched System. arXiv:2002.07075.
52. *Grüne L., Kriecherbauer T., Margalot M.* Random Attraction in the TASEP Model. arXiv:2001.07764.