

УДК 517.98

© У. А. Розиков, Н. М. Хатамов, Н. Н. Маликов

## МЕРЫ ГИББСА СЛИЯНИЯ ПУЗЫРЬКОВ ВО ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕЙ СИСТЕМЕ МОЛЕКУЛ ДНК ДЛЯ МОДЕЛИ ИЗИНГА–SOS НА ДЕРЕВЕ КЭЛИ

В данной работе рассмотрены две модели взаимодействующих молекул ДНК. Первая — это (четырёхпараметрическая) модель слияния пузырьков во взаимодействующих ДНК (сокращенно: СПВ–ДНК). Вторая — это (трехпараметрическая) модель слияния пузырьков в конденсированных молекулах ДНК (сокращенно: СПК–ДНК). Для изучения термодинамики слияния пузырьков этих моделей развит метод статистической физики. А именно, определяется гамильтониан (определяемый функциями) каждой модели и для конкретных функций гамильтониана даны их трансляционно-инвариантные меры Гиббса (ТИМГ).

В этой работе выбраны такие функции гамильтониана, что модель имеет вид модели Изинга–SOS. В этом случае для модели СПВ–ДНК найдены такие параметры, что соответствующий гамильтониан имеет до трех ТИМГ (три фазы системы), что биологически означает существование трех состояний: «Нет слияния пузырьков», «Доминирующая мягкая зона», «Слияние пузырьков».

Для модели СПК–ДНК показано, что при любых (допустимых) параметрах эта модель тоже имеет до трех ТИМГ, что биологически означает существование трех состояний: «Нет слияния пузырьков», «Доминирующая мягкая зона», «Слияние пузырьков».

*Ключевые слова:* ДНК, пузырь, конфигурация, дерево Кэли, мера Гиббса, модель Изинга–SOS.

DOI: [10.35634/vm250106](https://doi.org/10.35634/vm250106)

### § 1. Введение

Теория мер Гиббса — относительно новая область теории мер, хотя сами эти меры являются основным объектом изучения в статистической физике и квантовой евклидовой теории. Мера Гиббса — это фундаментальный закон, определяющий вероятность микроскопического состояния данной физической системы. Каждой предельной мере Гиббса соответствует одна фаза физической системы. Если существует более одной предельной меры Гиббса, то говорят, что существует фазовый переход. [1–3].

Множество работ посвящено изучению предельных мер Гиббса на дереве Кэли для таких моделей статистической физики, как модель Изинга, модель Поттса, модель жесткой сердцевины (Hard-Core), модель SOS и модель Блюма–Капелля (см., например, [4–13]). В этих работах описываются трансляционно-инвариантные и периодические меры Гиббса, а в некоторых работах исследуется задача экстремальности этих мер.

Известно, что генетическая информация закодирована в последовательности нуклеотидов ДНК. Каждая молекула ДНК представляет собой двойную спираль, образованную из двух комплементарных нуклеотидных цепей, соединенных связями  $G + C$  и  $A + T$  между парами оснований, где  $C$  — цитозин,  $G$  — гуанин,  $A$  — аденин, а  $T$  — тимин. Кодирование генетической информации происходит с использованием одной цепи ДНК в качестве матрицы для формирования комплементарной цепи. Генетическая информация, хранящаяся в ДНК организма, содержит инструкции для всех белков, которые организм когда-либо синтезирует [14].

Структуру ДНК можно описать методами статистической физики (см. [15,16]), моделируя одну цепь ДНК как стохастическую систему взаимодействующих оснований с дальними корреляциями. Это описание устанавливает важную связь между структурой последо-

вательности ДНК и *температурой*; например, фазовые переходы в такой системе можно интерпретировать как конформационную перестройку.

В последние годы термодинамика изучалась для некоторых моделей ДНК в статистической физике. Например, в работах [17–19] изучались соединения Холлидея молекулы ДНК моделей Изинга, Поттса и Блюма–Капеля на дереве Кэли. В книге [17] представлены недавние математические результаты о мерах Гиббса модели Поттса с  $q$  состояниями на целочисленной решетке и деревьях Кэли. Он также иллюстрирует многие приложения модели Поттса к реальным ситуациям в биологии, физике, финансовой инженерии, медицине, социологии, нейронных сетях и других науках. В [20] методы статистической механики, а именно теории мер Гиббса, используются для исследования термодинамических свойств новой модели. С помощью этих мер описываются фазы (состояния) системы ДНК–РНК и приводятся условия (по температуре) ренатурации ДНК–РНК.

В недавней работе [21] рассмотрены две модели взаимодействующих молекул ДНК. Для мотивации рассмотрения этих моделей см. [21]. Для исследования термодинамики слияния пузырьков в этих моделях разработан метод статистической физики. А именно, определяется гамильтониан (определяемый некоторыми функциями) каждой модели и для конкретных функций гамильтониана задаются их трансляционно-инвариантные меры Гиббса (ТИМГ). В этой работе мы выберем функции гамильтониана так, чтобы они имели форму Изинга–SOS.

Для удобства читателя напомним некоторые определения (см. [17,21]).

Дерево Кэли  $\Gamma^k$  порядка  $k \geq 1$  есть бесконечное дерево, то есть граф без циклов, из каждой вершины которого исходят ровно  $k + 1$  ребер. Пусть  $\Gamma^k = (V, L, i)$ , где  $V$  и  $L$  — множества вершин и ребер дерева Кэли, а  $i$  — функция инцидентности, сопоставляющая каждому ребру  $l \in L$  его конечные точки  $x, y \in V$ . Если  $i(l) = \{x, y\}$ , то вершины  $x$  и  $y$  называются ближайшими соседями; это обозначается как  $l = \langle x, y \rangle$ . Для двух вершин  $x, y \in V$  расстояние  $d(x, y)$  равно количеству ребер кратчайшего пути, соединяющего  $x$  и  $y$ :

$$d(x, y) = \min\{d \mid \exists x = x_0, x_1, \dots, x_{d-1}, x_d = y \in V \text{ такие, что } \langle x_0, x_1 \rangle, \dots, \langle x_{d-1}, x_d \rangle\}.$$

Для фиксированной вершины  $x^0 \in V$  и  $n \geq 1$  положим

$$W_n = \{x \in V \mid d(x^0, x) = n\}, \quad V_n = \{x \in V \mid d(x^0, x) \leq n\}, \\ L_n = \{l = \langle x, y \rangle \in L \mid x, y \in V_n\}.$$

Пусть  $\mathbb{Z} = \{\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots\}$ . В работе [22] было доказано, что все вершины дерева Кэли можно разбить на классы эквивалентности, пронумерованные целыми числами, и через каждую вершину, принадлежащую  $m$ -му классу эквивалентности, проходит единственный путь такой, что номера классов эквивалентности, которым принадлежат последовательные вершины этого пути, образуют бесконечную в обе стороны последовательность  $\dots, m-2, m-1, m, m+1, m+2, \dots$  целых чисел. Он называется  $\mathbb{Z}$ -*путь* ( $\mathbb{Z}$ -path).

Поскольку каждая вершина  $x$  имеет свой  $\mathbb{Z}$ -*путь*, можно видеть, что дерево Кэли содержит бесконечное число (счетных) наборов  $\mathbb{Z}$ -*путей*.

**Конфигурационное пространство.** Рассмотрим значения спина из  $\Phi = \Psi \times \Phi_0$  с  $\Psi = \{b, r\}$  и  $\Phi_0 = \{1, -1\}$ , где  $b$  = синий,  $r$  = красный.

Конфигурация — это любое отображение  $V \ni x \mapsto s(x) = (\varphi(x), \sigma(x)) \in \Phi$ . Обозначим через  $\Omega = \Phi^V$  множество конфигураций.

Конфигурации в  $V_n$  определяются аналогично, а множество всех конфигураций в  $V_n$  обозначается  $\Omega_n$ .

Ограничение конфигурации на  $\mathbb{Z}$ -*путь* называется *ДНК*. Поскольку  $\mathbb{Z}$ -*путь* счетен, мы имеем счетное число различных ДНК.

**Древовидная иерархия множества молекул ДНК.** Следуя [17], определим древесную иерархию дерева Кэли множества молекул ДНК следующим образом. Две ДНК являются соседями, если существует ребро (дерева Кэли) такое, что один конец ребра принадлежит первой ДНК, а другой конец ребра принадлежит второй ДНК. Согласно этой конструкции ясно, что такое ребро единственно для каждой соседней пары ДНК. Это ребро имеет эквивалентные концы, то есть оба конца принадлежат одному и тому же классу для некоторого  $m \in \mathbb{Z}$ . Более того, эти счетные бесконечные множества молекул ДНК имеют иерархию такую, что:

- (i) любые две ДНК не пересекаются;
- (ii) каждая ДНК имеет свой счетный набор соседних ДНК;
- (iii) для любых двух соседних ДНК, скажем  $D_1$  и  $D_2$ , существует единственное ребро  $l = l(D_1, D_2) = \langle x, y \rangle$  с  $x \sim y$ , которое соединяет ДНК;
- (iv) для любого конечного  $n \geq 1$  шар  $V_n$  пересекается только с конечным числом ДНК.

**Гамильтониан модели СПВ–ДНК.** Рассмотрим следующую модель энергии конфигурации  $s \in \Omega$  множества молекул ДНК (см. [21]):

$$H(s) = \sum_{\langle x, y \rangle \in L} f_{x, y}(s(x), s(y)), \quad (1)$$

где  $s(x) = (\varphi(x), \sigma(x))$  и

$$f_{x, y}(s(x), s(y)) = \begin{cases} (1 - \delta_{\varphi(x)\varphi(y)}) \left( J_b \delta_{b\varphi(x)} B(\sigma(x), \sigma(y)) + J_r \delta_{r\varphi(x)} R(\sigma(x), \sigma(y)) \right), & \text{если } \langle x, y \rangle \in \mathbb{Z}\text{-пути,} \\ J \delta_{\varphi(x)\varphi(y)} \delta_{\sigma(x)\sigma(y)}, & \text{если } \langle x, y \rangle \notin \mathbb{Z}\text{-пути,} \end{cases}$$

$J > 0$  — константа связи между соседними ДНК,  $\delta$  — символ Кронекера,  $J_b < 0$ ,  $J_r < 0$  — параметры, а  $B, R: \Phi_0 \times \Phi_0 \rightarrow R$  — неотрицательные функции, задающие взаимодействие между парами оснований ДНК.

В этой статье для простоты мы в основном рассматриваем случай, когда функции  $B$  и  $R$  задаются функцией Изинг–SOS (то есть моделью Изинга, см. [4,5]) и SOS (то есть моделью SOS, см. [9,10]), которая принимает аргументы из  $\Phi_0$ .

**Гамильтониан модели СПК–ДНК.** В этой модели любой путь дерева Кэли рассматривается как часть ДНК, полное дерево Кэли рассматривается как одна молекула конденсированной ДНК. Следуя [21] мы рассмотрим следующую модель СПК–ДНК энергии конфигурации  $s \in \Omega$ :

$$H(s) = \sum_{\langle x, y \rangle \in L} g(s(x), s(y)),$$

где  $s(x) = (\varphi(x), \sigma(x))$  и

$$g(s(x), s(y)) = (1 - \delta_{\varphi(x)\varphi(y)}) \left( J_b \delta_{b\varphi(x)} B(\sigma(x), \sigma(y)) + J_r \delta_{r\varphi(x)} R(\sigma(x), \sigma(y)) \right),$$

где  $J_b < 0$ ,  $J_r < 0$  — параметры, а  $B, R: \Phi_0 \times \Phi_0 \rightarrow R$  — неотрицательные функции, задающие взаимодействие между парами оснований ДНК.

### 1.1. Система функциональных уравнений конечномерных распределений

Пусть  $\Omega_n$  — множество всех конфигураций на  $V_n$ . Определим конечномерное распределение вероятностной меры  $\mu$  на  $\Omega_n$  как

$$\mu_n(s_n) = Z_n^{-1} \exp \left\{ \beta H_n(s_n) + \sum_{y \in W_n} h_{\varphi(y), \sigma(y), y} \right\}, \quad (2)$$

где  $s_n(x) = (\varphi(x), \sigma(x))$ ,  $x \in V_n$ ,  $\beta = 1/T$ ,  $T > 0$  — температура,  $Z_n^{-1}$  — нормирующий множитель,  $\{h_{a,i,x} \in \mathbb{R}, a \in \Psi, i \in \Phi_0, x \in V\}$  — это набор действительных чисел и

$$H_n(s_n) = \sum_{\langle x,y \rangle \in L_n} f_{x,y}(s_n(x), s_n(y)).$$

Говорят, что распределения вероятностей (2) согласованы, если для всех  $n \geq 1$  и  $s_{n-1} \in \Omega_{n-1}$ :

$$\sum_{\omega_n \in \Omega_{W_n}} \mu_n(s_{n-1} \vee \omega_n) = \mu_{n-1}(s_{n-1}).$$

Здесь  $s_{n-1} \vee \omega_n$  — объединение конфигураций.

Для  $x \in W_{n-1}$  введем обозначение

$$S(x) = \{t \in W_n \mid \langle x, t \rangle\}.$$

Для  $x \in V$  обозначим через  $x_\downarrow$  единственную точку множества  $\{y \in V \mid \langle x, y \rangle\} \setminus S(x)$ .

Нетрудно видеть, что

$$S(x) \cap \mathbb{Z}\text{-пути} = \begin{cases} \{x_0, x_1\} \subset V, & \text{если } \langle x_\downarrow, x \rangle \notin \mathbb{Z}\text{-пути,} \\ \{x_1\} \subset V, & \text{если } \langle x_\downarrow, x \rangle \in \mathbb{Z}\text{-пути.} \end{cases}$$

Положим

$$S_0(x) = S(x) \setminus \{x_0, x_1\}, \quad \langle x_\downarrow, x \rangle \notin \mathbb{Z}\text{-пути}, \quad S_1(x) = S(x) \setminus \{x_1\}, \quad \langle x_\downarrow, x \rangle \in \mathbb{Z}\text{-пути}.$$

В [21] доказана следующая теорема, дающая критерий согласованности конечномерных распределений.

**Теорема 1.** *Последовательность вероятностных распределений  $\mu_n(s_n)$  в (2) является согласованной тогда и только тогда, когда для любого  $x \in V \setminus x^0$  имеет место следующее функциональное уравнение.*

*Если  $\langle x_\downarrow, x \rangle \notin \mathbb{Z}\text{-пути}$ , тогда*

$$z_{b,1,x} = \prod_{t \in \{x_0, x_1\}} \frac{1 + \eta^{R(1,-1)} \hat{z}_{r,-1,t} + \hat{z}_{b,1,t} + \eta^{R(1,1)} \hat{z}_{r,1,t}}{1 + \eta^{R(-1,-1)} \hat{z}_{r,-1,t} + \hat{z}_{b,1,t} + \eta^{R(-1,1)} \hat{z}_{r,1,t}} \times \\ \times \prod_{y \in S_0(x)} \frac{1 + z_{r,-1,y} + \theta z_{b,1,y} + z_{r,1,y}}{\theta + z_{r,-1,y} + z_{b,1,y} + z_{r,1,y}}, \quad (3)$$

$$z_{r,i,x} = \prod_{t \in \{x_0, x_1\}} \frac{\zeta^{B(i,-1)} + \hat{z}_{r,-1,t} + \zeta^{B(i,1)} \hat{z}_{b,1,t} + \hat{z}_{r,1,t}}{1 + \eta^{R(-1,-1)} \hat{z}_{r,-1,t} + \hat{z}_{b,1,t} + \eta^{R(-1,1)} \hat{z}_{r,1,t}} \times \\ \times \prod_{y \in S_0(x)} \frac{1 + \theta^{\delta_{i(-1)}} z_{r,-1,y} + z_{b,1,y} + \theta^{\delta_{i(1)}} z_{r,1,y}}{\theta + z_{r,-1,y} + z_{b,1,y} + z_{r,1,y}}, \quad i \in \Phi_0. \quad (4)$$

Если  $\langle x_{\downarrow}, x \rangle \in \mathbb{Z}$ -пути, тогда

$$\hat{z}_{b,1,x} = \prod_{t \in \{x_0, x_1\}} \frac{1 + \eta^{R(1,-1)} \hat{z}_{r,-1,x_1} + \hat{z}_{b,1,x_1} + \eta^{R(1,1)} \hat{z}_{r,1,x_1}}{1 + \eta^{R(-1,-1)} \hat{z}_{r,-1,x_1} + \hat{z}_{b,1,x_1} + \eta^{R(-1,1)} \hat{z}_{r,1,x_1}} \times \prod_{y \in S_1(x)} \frac{1 + z_{r,-1,y} + \theta z_{b,1,y} + z_{r,1,y}}{\theta + z_{r,-1,y} + z_{b,1,y} + z_{r,1,y}}, \quad (5)$$

$$\hat{z}_{r,i,x} = \prod_{t \in \{x_0, x_1\}} \frac{\zeta^{B(i,-1)} + \hat{z}_{r,-1,x_1} + \zeta^{B(i,1)} \hat{z}_{b,1,x_1} + \hat{z}_{r,1,x_1}}{1 + \eta^{R(-1,-1)} \hat{z}_{r,-1,x_1} + \hat{z}_{b,1,x_1} + \eta^{R(-1,1)} \hat{z}_{r,1,x_1}} \times \prod_{y \in S_1(x)} \frac{1 + \theta^{\delta_{i(-1)}} z_{r,-1,y} + z_{b,1,y} + \theta^{\delta_{i(1)}} z_{r,1,y}}{\theta + z_{r,-1,y} + z_{b,1,y} + z_{r,1,y}}, \quad i \in \Phi_0, \quad (6)$$

где  $\theta = e^{J\beta}$ ,  $\zeta = e^{J_b\beta}$  и  $\eta = e^{J_r\beta}$ ;

$$z_{a,i,x} = \exp(h_{a,i,x} - h_{b,-1,x}), \quad a \in \Psi, \quad i \in \Phi_0, \quad \langle x_{\downarrow}, x \rangle \notin \mathbb{Z}\text{-пути},$$

$$\hat{z}_{a,i,x} = \exp(h_{a,i,x} - h_{b,-1,x}), \quad a \in \Psi, \quad i \in \Phi_0, \quad \langle x_{\downarrow}, x \rangle \in \mathbb{Z}\text{-пути}.$$

Это 6-мерная нелинейная система функциональных уравнений. Неизвестные функции определены в вершинах дерева и принимают строго положительные вещественные значения.

В данной работе мы будем изучать уравнения теоремы 1 в случае функций

$$B(i, j) = |i - j|, \quad R(i, j) = 1 - i \cdot j.$$

Структура работы следующая. Исследуется система функциональных уравнений из теоремы 1, каждое решение которой определяет совместное семейство конечномерных распределений Гиббса и гарантирует существование термодинамического предела для таких распределений. Эту систему очень сложно решить; после некоторых допущений в пункте 2.1 она сводится к одномерной задаче с неподвижной точкой. Используются некоторые численные расчеты, чтобы показать, что уравнение с неподвижной точкой может иметь до трех решений. Каждая такая фиксированная точка соответствует ТИМГ. Таким образом, существует до трех ТИМГ (неединственность–фазовый переход). В пункте 2.2 о свойствах цепей Маркова (соответствующих ТИМГ) приведены свойства модели слияния пузырьков. Пункт 2.3 посвящен биологической интерпретации результатов. В пункте 2.4 приведены аналогичные задачи исследования для модели СПК–ДНК.

## § 2. Термодинамика модели Изинга–SOS

### 2.1. Постоянные неизвестные функции

В общем случае найти решения системы (3), (4), (5), (6) очень сложно. По этой причине будем решать ее в классе трансляционно–инвариантных (постоянных) функций. То есть мы предполагаем, что наши неизвестные функции не зависят от вершин дерева:

$$\begin{aligned} z_{b,1,x} &= u_1 \quad \text{для всех } x \in V; & z_{r,i,x} &= v_i \quad \text{для всех } x \in V, \quad i \in \Phi_0; \\ \hat{z}_{b,1,x} &= \hat{u}_1 \quad \text{для всех } x \in V; & \hat{z}_{r,i,x} &= \hat{v}_i \quad \text{для всех } x \in V, \quad i \in \Phi_0. \end{aligned}$$

Тогда система (3)–(6) сводится к

$$u_1 = \left( \frac{1 + \eta^{R(1,-1)}\hat{v}_{-1} + \hat{u}_1 + \eta^{R(1,1)}\hat{v}_1}{1 + \eta^{R(-1,-1)}\hat{v}_{-1} + \hat{u}_1 + \eta^{R(-1,1)}\hat{v}_1} \right)^2 \left( \frac{1 + v_{-1} + \theta u_1 + v_1}{\theta + v_{-1} + u_1 + v_1} \right)^{k-2}, \quad (7)$$

$$v_i = \left( \frac{\zeta^{B(i,-1)} + \hat{v}_{-1} + \zeta^{B(i,1)}\hat{u}_1 + \hat{v}_1}{1 + \eta^{R(-1,-1)}\hat{v}_{-1} + \hat{u}_1 + \eta^{R(-1,1)}\hat{v}_1} \right)^2 \left( \frac{1 + \theta^{\delta_i(-1)}v_{-1} + u_1 + \theta^{\delta_{i1}}v_1}{\theta + v_{-1} + u_1 + v_1} \right)^{k-2}, \quad i \in \Phi_0, \quad (8)$$

$$\hat{u}_1 = \left( \frac{1 + \eta^{R(1,-1)}\hat{v}_{-1} + \hat{u}_1 + \eta^{R(1,1)}\hat{v}_1}{1 + \eta^{R(-1,-1)}\hat{v}_{-1} + \hat{u}_1 + \eta^{R(-1,1)}\hat{v}_1} \right) \left( \frac{1 + v_{-1} + \theta u_1 + v_1}{\theta + v_{-1} + u_1 + v_1} \right)^{k-1}, \quad (9)$$

$$\hat{v}_i = \left( \frac{\zeta^{B(i,-1)} + \hat{v}_{-1} + \zeta^{B(i,1)}\hat{u}_1 + \hat{v}_1}{1 + \eta^{R(-1,-1)}\hat{v}_{-1} + \hat{u}_1 + \eta^{R(-1,1)}\hat{v}_1} \right) \left( \frac{1 + \theta^{\delta_i(-1)}v_{-1} + u_1 + \theta^{\delta_{i1}}v_1}{\theta + v_{-1} + u_1 + v_1} \right)^{k-1}, \quad i \in \Phi_0. \quad (10)$$

Теперь можно выбрать конкретные функции и затем попытаться решить соответствующую систему уравнений (7)–(10).

Для модели слияния пузырьков представляется разумным принять эти функции как

$$B(i, j) = |i - j|, \quad R(i, j) = 1 - i \cdot j. \quad (11)$$

В этом случае модель (1) будем называть моделью Изинга–SOS.

Тогда система упрощается до

$$u_1 = \left( \frac{1 + \eta^2\hat{v}_{-1} + \hat{u}_1 + \hat{v}_1}{1 + \hat{v}_{-1} + \hat{u}_1 + \eta^2\hat{v}_1} \right)^2 \left( \frac{1 + v_{-1} + \theta u_1 + v_1}{\theta + v_{-1} + u_1 + v_1} \right)^{k-2}, \quad (12)$$

$$v_i = \left( \frac{\zeta^{|i+1|} + \hat{v}_{-1} + \zeta^{|i-1|}\hat{u}_1 + \hat{v}_1}{1 + \hat{v}_{-1} + \hat{u}_1 + \eta^2\hat{v}_1} \right)^2 \left( \frac{1 + \theta^{\delta_i(-1)}v_{-1} + u_1 + \theta^{\delta_{i1}}v_1}{\theta + v_{-1} + u_1 + v_1} \right)^{k-2}, \quad i \in \Phi_0, \quad (13)$$

$$\hat{u}_1 = \left( \frac{1 + \eta^2\hat{v}_{-1} + \hat{u}_1 + \hat{v}_1}{1 + \hat{v}_{-1} + \hat{u}_1 + \eta^2\hat{v}_1} \right) \left( \frac{1 + v_{-1} + \theta u_1 + v_1}{\theta + v_{-1} + u_1 + v_1} \right)^{k-1}, \quad (14)$$

$$\hat{v}_i = \left( \frac{\zeta^{|i+1|} + \hat{v}_{-1} + \zeta^{|i-1|}\hat{u}_1 + \hat{v}_1}{1 + \hat{v}_{-1} + \hat{u}_1 + \eta^2\hat{v}_1} \right) \left( \frac{1 + \theta^{\delta_i(-1)}v_{-1} + u_1 + \theta^{\delta_{i1}}v_1}{\theta + v_{-1} + u_1 + v_1} \right)^{k-1}, \quad i \in \Phi_0. \quad (15)$$

Тогда из системы (12)–(15) получаем  $u = u_1$ ,  $v = v_1$ ,  $\omega = v_2$ ,  $\hat{u} = \hat{u}_1$ ,  $\hat{v} = \hat{v}_1$ ,  $\hat{\omega} = \hat{v}_2$ :

$$\begin{aligned} u &= \left( \frac{1 + \hat{u} + \hat{v} + \eta^2\hat{\omega}}{1 + \hat{u} + \eta^2\hat{v} + \hat{\omega}} \right)^2 \left( \frac{1 + \theta u + v + \omega}{\theta + u + v + \omega} \right)^{k-2}, \\ v &= \left( \frac{\zeta^2 + \hat{u} + \hat{v} + \hat{\omega}}{1 + \hat{u} + \eta^2\hat{v} + \hat{\omega}} \right)^2 \left( \frac{1 + u + \theta v + \omega}{\theta + u + v + \omega} \right)^{k-2}, \\ \omega &= \left( \frac{1 + \zeta^2\hat{u} + \hat{v} + \hat{\omega}}{1 + \hat{u} + \eta^2\hat{v} + \hat{\omega}} \right)^2 \left( \frac{1 + u + v + \theta\omega}{\theta + u + v + \omega} \right)^{k-2}, \\ \hat{u} &= \left( \frac{1 + \hat{u} + \hat{v} + \eta^2\hat{\omega}}{1 + \hat{u} + \eta^2\hat{v} + \hat{\omega}} \right) \left( \frac{1 + \theta u + v + \omega}{\theta + u + v + \omega} \right)^{k-1}, \\ \hat{v} &= \left( \frac{\zeta^2 + \hat{u} + \hat{v} + \hat{\omega}}{1 + \hat{u} + \eta^2\hat{v} + \hat{\omega}} \right) \left( \frac{1 + u + \theta v + \omega}{\theta + u + v + \omega} \right)^{k-1}, \\ \hat{\omega} &= \left( \frac{1 + \zeta^2\hat{u} + \hat{v} + \hat{\omega}}{1 + \hat{u} + \eta^2\hat{v} + \hat{\omega}} \right) \left( \frac{1 + u + v + \theta\omega}{\theta + u + v + \omega} \right)^{k-1}, \end{aligned}$$

где  $\theta > 1$ ,  $0 < \zeta, \eta < 1$  и  $u, v, \omega > 0$ .

Для решения этой системы отметим, что это уравнение неподвижной точки для оператора  $F: \mathbb{R}_+^6 \rightarrow \mathbb{R}_+^6$ , определяемого формулой

$$F: \begin{cases} u' = \left( \frac{1 + \hat{u} + \hat{v} + \eta^2 \hat{\omega}}{1 + \hat{u} + \eta^2 \hat{v} + \hat{\omega}} \right)^2 \left( \frac{1 + \theta u + v + \omega}{\theta + u + v + \omega} \right)^{k-2}, \\ v' = \left( \frac{\zeta^2 + \hat{u} + \hat{v} + \hat{\omega}}{1 + \hat{u} + \eta^2 \hat{v} + \hat{\omega}} \right)^2 \left( \frac{1 + u + \theta v + \omega}{\theta + u + v + \omega} \right)^{k-2}, \\ \omega' = \left( \frac{1 + \zeta^2 \hat{u} + \hat{v} + \hat{\omega}}{1 + \hat{u} + \eta^2 \hat{v} + \hat{\omega}} \right)^2 \left( \frac{1 + u + v + \theta \omega}{\theta + u + v + \omega} \right)^{k-2}, \\ \hat{u}' = \left( \frac{1 + \hat{u} + \hat{v} + \eta^2 \hat{\omega}}{1 + \hat{u} + \eta^2 \hat{v} + \hat{\omega}} \right) \left( \frac{1 + \theta u + v + \omega}{\theta + u + v + \omega} \right)^{k-1}, \\ \hat{v}' = \left( \frac{\zeta^2 + \hat{u} + \hat{v} + \hat{\omega}}{1 + \hat{u} + \eta^2 \hat{v} + \hat{\omega}} \right) \left( \frac{1 + u + \theta v + \omega}{\theta + u + v + \omega} \right)^{k-1}, \\ \hat{\omega}' = \left( \frac{1 + \zeta^2 \hat{u} + \hat{v} + \hat{\omega}}{1 + \hat{u} + \eta^2 \hat{v} + \hat{\omega}} \right) \left( \frac{1 + u + v + \theta \omega}{\theta + u + v + \omega} \right)^{k-1}. \end{cases} \quad (16)$$

Определим  $M = \{(u, v, \omega, \hat{u}, \hat{v}, \hat{\omega}) \in \mathbb{R}_+^6, u = 1, v = \omega, \hat{u} = 1, \hat{v} = \hat{\omega}\}$ .

**Лемма 1.** Множество  $M$  инвариантно относительно  $F$ .

**Доказательство.** Несложно видеть, что если  $(u, v, \omega, \hat{u}, \hat{v}, \hat{\omega}) \in M$ , то

$$(u', v', \omega', \hat{u}', \hat{v}', \hat{\omega}') \in M, \quad \text{то есть } F(M) \subset M. \quad \square$$

Сужаем оператор  $F$  на инвариантном множестве  $M$ , тогда неподвижные точки на  $M$  будут заданы решениями следующей системы уравнений

$$\begin{cases} v = \left( \frac{\zeta^2 + 1 + 2\hat{v}}{2 + (1 + \eta^2)\hat{v}} \right)^2 \left( \frac{2 + (\theta + 1)v}{\theta + 1 + 2v} \right)^{k-2}, \\ \hat{v} = \left( \frac{\zeta^2 + 1 + 2\hat{v}}{2 + (1 + \eta^2)\hat{v}} \right) \left( \frac{2 + (\theta + 1)v}{\theta + 1 + 2v} \right)^{k-1}. \end{cases} \quad (17)$$

Из второго уравнения этой системы получаем

$$\frac{\zeta^2 + 1 + 2\hat{v}}{2 + (1 + \eta^2)\hat{v}} = \hat{v} \left( \frac{2 + (\theta + 1)v}{\theta + 1 + 2v} \right)^{1-k}.$$

Подставив это в первое уравнение (17), получим

$$\hat{v} = \sqrt{v} \left( \frac{2 + (\theta + 1)v}{\theta + 1 + 2v} \right)^{\frac{k}{2}}. \quad (18)$$

Следовательно, из первого уравнения (17) получаем

$$v = f(v) := f(v, \theta, \eta, \zeta, k), \quad (19)$$

где

$$f(v, \theta, \eta, \zeta, k) := \left( \frac{(\zeta^2 + 1)(\theta + 1 + 2v)^{\frac{k}{2}} + 2\sqrt{v}(2 + (\theta + 1)v)^{\frac{k}{2}}}{2(\theta + 1 + 2v)^{\frac{k}{2}} + (1 + \eta^2)\sqrt{v}(2 + (\theta + 1)v)^{\frac{k}{2}}} \right)^2 \left( \frac{2 + (\theta + 1)v}{\theta + 1 + 2v} \right)^{k-2}.$$

**Таблица 1.** Приближенные значения решений  $v$  и  $\hat{v}$ , соответствующие конкретным значениям параметров при  $\theta = 4, \zeta = 0.07, \eta = 0.3$  и для  $k = 2, 3, 4, 5$ . В случае  $k = 2$  существует единственное решение. Но для  $k = 3, k = 4$  и  $k = 5$  существует ровно три решения. Соответствующие меры обозначены, как в последнем столбце.

Параметры	$k$	$v$	$\hat{v}$	Мера
$\theta = 4$	2	0.8753019938	0.8837295360	$\mu$
$\zeta = 0.07$	3	0.2471423781	0.2246785600	$\mu_1$
$\eta = 0.3$	3	1.688335492	1.808329635	$\mu$
	3	2.075178895	2.265872943	$\mu_2$
	4	0.05756043216	0.04799402291	$\mu_1$
	4	1.082559938	1.113636826	$\mu$
	4	13.88764924	17.70445764	$\mu_2$
	5	0.01895620704	0.01534955442	$\mu_1$
	5	1.045045653	1.071684602	$\mu$
	5	43.75116426	58.19605643	$\mu_2$

Это очень сложное уравнение, зависящее от четырех параметров  $k \geq 1, \theta > 1, \zeta, \eta \in (0, 1)$ .

Но наше сведение системы к уравнению (19) с одним неизвестным очень полезно для численного решения системы: можно взять конкретные значения параметров, а затем компьютер выдаст все соответствующие решения.

Нас интересуют значения параметров, когда уравнение (19) имеет более одного решения. Поскольку задача очень сложная, выберем конкретные значения параметров:

$$\theta = 4, \quad \zeta = 0.07, \quad \eta = 0.3 \quad (20)$$

и будем менять значения  $k = 2, 3, 4, 5$ . В таблице 1 приведены решения (17), соответствующие численному решению (19) и подстановке его в (18).

### Замечание 1.

- При фиксированном  $\beta = \frac{1}{T}$  (то есть фиксированной температуре) условие (20) является условием на параметры модели:

$$J = T \log(4) > 0, \quad J_b = T \log(0.07) < 0, \quad J_r = T \log(0.3) < 0.$$

- Численный анализ системы (17) для случая  $k \geq 3$  также показывает, что при фиксированных параметрах  $\theta = 4, \zeta = 0.07, \eta = 0.3$  существуют ровно 3 положительных решения. Когда  $k$  стремится к бесконечности, минимальное решение стремится к нулю, максимальное решение стремится к бесконечности; например, когда  $k = 20$  мы имеем следующие три значения  $v$ :  $1.734865646 \cdot 10^{-8}, 1.005770206, 4.899218389 \cdot 10^7$ . Поскольку неединственность возникает при  $k \geq 3$ , нет никакой надежды показать это аналитически. Но численные результаты, которые мы имеем для  $k = 2, 3, 4, 5$ , уже достаточно интересны, чтобы увидеть биологическую интерпретацию наших результатов.

## 2.2. Цепи Маркова, соответствующие решениям, приведенным в таблице

Отметим, что решения

$$\begin{aligned} z_{a,i,x}, & \quad a \in \Psi, \quad i \in \Phi_0, \quad \langle x_{\downarrow}, x \rangle \notin \mathbb{Z}\text{-пути}, \\ \hat{z}_{a,i,x}, & \quad a \in \Psi, \quad i \in \Phi_0, \quad \langle x_{\downarrow}, x \rangle \in \mathbb{Z}\text{-пути}, \end{aligned} \quad (21)$$

определяют граничный закон [23, гл. 12] биологической системы ДНК.

Для маргиналов на ребре  $l = \langle x, y \rangle$  с учетом граничного закона в случае гамильтониана (1) имеем

$$\mu[s(x) = (a, i), s(y) = (c, j)] = \frac{1}{Z} z_{a,i} \exp(f_{xy}(s(x), s(y)) z_{c,j}),$$

где  $Z$  — нормирующий коэффициент, а  $z_{a,x}$  принимает значения в зависимости от отношения  $l$  к  $\mathbb{Z}$ -пути.

Отсюда связь между граничным законом и матрицей перехода для связанной с ней древовидной цепи Маркова (меры Гиббса) получается из формулы условной вероятности.

Теперь нам интересно изучить термодинамику слияния пузырьков, соответствующую решениям, приведенным в таблице 1. По этой причине мы изучаем цепи Маркова на поддереве, состоящем из ребер, не являющихся  $\mathbb{Z}$ -путем, и отдельно цепи Маркова на  $\mathbb{Z}$ -пути.

Здесь мы определяем эти две цепи Маркова. Для упрощения обозначений обозначим односайтовые значения конфигурации как

$$1 := (b, 1), \quad 2 := (b, -1), \quad 3 := (r, 1), \quad 4 := (r, -1). \quad (22)$$

- Поскольку наши решения не зависят от вершин, мы определяем древовидную однородную цепь Маркова с состояниями  $\{1, 2, 3, 4\}$  (определенными в (22)) с матрицей перехода  $P = (P_{i,j})$ , где  $P_{i,j}$  — вероятность перехода из состояния  $i$  в вершине в состояние  $j$  в соседней вершине дерева. Используя решения  $(u, v, \omega, \hat{u}, \hat{v}, \hat{\omega})$  запишем матрицы (если ребро не принадлежит  $\mathbb{Z}$ -пути):

$$P = \begin{pmatrix} \frac{\theta u}{Z_1} & \frac{1}{Z_1} & \frac{v}{Z_1} & \frac{\omega}{Z_1} \\ \frac{u}{Z_2} & \frac{\theta}{Z_2} & \frac{v}{Z_2} & \frac{\omega}{Z_2} \\ \frac{u}{Z_3} & \frac{1}{Z_3} & \frac{\theta v}{Z_3} & \frac{\omega}{Z_3} \\ \frac{u}{Z_4} & \frac{1}{Z_4} & \frac{v}{Z_4} & \frac{\theta \omega}{Z_4} \end{pmatrix}.$$

Здесь

$$\begin{aligned} Z_1 &= 1 + \theta u + v + \omega, & Z_2 &= \theta + u + v + \omega, \\ Z_3 &= 1 + u + \theta v + \omega, & Z_4 &= 1 + u + v + \theta \omega. \end{aligned}$$

- Определим древовидную цепь Маркова на  $\mathbb{Z}$ -пути:

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{\hat{u}}{Y_1} & \frac{1}{Y_1} & \frac{\hat{v}}{Y_1} & \frac{\eta^2 \hat{\omega}}{Y_1} \\ \frac{\hat{u}}{Y_2} & \frac{1}{Y_2} & \frac{\eta^2 \hat{v}}{Y_2} & \frac{\hat{\omega}}{Y_2} \\ \frac{\hat{u}}{Y_3} & \frac{\zeta^2}{Y_3} & \frac{\hat{v}}{Y_3} & \frac{\hat{\omega}}{Y_3} \\ \frac{\zeta^2 \hat{u}}{Y_4} & \frac{1}{Y_4} & \frac{\hat{v}}{Y_4} & \frac{\hat{\omega}}{Y_4} \end{pmatrix}.$$

Здесь

$$\begin{aligned} Y_1 &= 1 + \hat{u} + \hat{v} + \eta^2 \hat{\omega}, & Y_2 &= 1 + \hat{u} + \eta^2 \hat{v} + \hat{\omega}, \\ Y_3 &= \zeta^2 + \hat{u} + \hat{v} + \hat{\omega}, & Y_4 &= 1 + \zeta^2 \hat{u} + \hat{v} + \hat{\omega}. \end{aligned}$$

Вычисляем матрицы  $P$  и  $Q$  для случая  $k = 4$  и  $\theta = 4$ ,  $\zeta = 0.07$ ,  $\eta = 0.3$ . Поскольку для этих значений параметров имеется три решения, обозначим через  $P_i$  и  $Q_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , соответствующие матрицы. Обозначим через  $p_i$  (соответственно  $q_i$ ) стационарный вектор вероятности  $P_i$  (соответственно  $Q_i$ ).

В случае неединственности меры Гиббса (и соответствующих цепей Маркова) мы имеем разные стационарные состояния для разных мер. Используя значения, приведенные в таблице 1, получаем следующие результаты.

**Случай меры  $\mu_1$ :**

$$P_1 = \begin{pmatrix} 0.782 & 0.196 & 0.011 & 0.011 \\ 0.196 & 0.782 & 0.011 & 0.011 \\ 0.437 & 0.437 & 0.101 & 0.025 \\ 0.437 & 0.437 & 0.025 & 0.101 \end{pmatrix}, \quad Q_1 = \begin{pmatrix} 0.487 & 0.487 & 0.024 & 0.002 \\ 0.487 & 0.487 & 0.002 & 0.024 \\ 0.908 & 0.004 & 0.044 & 0.044 \\ 0.004 & 0.908 & 0.044 & 0.044 \end{pmatrix},$$

$$p_1 = (0.488, 0.488, 0.012, 0.012), \quad q_1 = (0.486, 0.486, 0.014, 0.014).$$

**Случай меры  $\mu$ :**

$$P_2 = \begin{pmatrix} 0.558 & 0.140 & 0.151 & 0.151 \\ 0.140 & 0.558 & 0.151 & 0.151 \\ 0.135 & 0.135 & 0.584 & 0.146 \\ 0.135 & 0.135 & 0.146 & 0.584 \end{pmatrix}, \quad Q_2 = \begin{pmatrix} 0.311 & 0.311 & 0.347 & 0.031 \\ 0.311 & 0.311 & 0.031 & 0.347 \\ 0.309 & 0.001 & 0.345 & 0.345 \\ 0.001 & 0.309 & 0.345 & 0.345 \end{pmatrix},$$

$$p_2 = (0.236, 0.236, 0.264, 0.264), \quad q_2 = (0.225, 0.225, 0.275, 0.275).$$

**Случай меры  $\mu_2$ :**

$$P_3 = \begin{pmatrix} 0.122 & 0.030 & 0.424 & 0.424 \\ 0.030 & 0.122 & 0.424 & 0.424 \\ 0.014 & 0.014 & 0.778 & 0.194 \\ 0.014 & 0.014 & 0.194 & 0.778 \end{pmatrix}, \quad Q_3 = \begin{pmatrix} 0.047 & 0.047 & 0.831 & 0.075 \\ 0.047 & 0.047 & 0.075 & 0.831 \\ 0.027 & 0.001 & 0.486 & 0.486 \\ 0.001 & 0.027 & 0.486 & 0.486 \end{pmatrix},$$

$$p_3 = (0.016, 0.016, 0.484, 0.484), \quad q_3 = (0.015, 0.015, 0.485, 0.485).$$

Следующая теорема известна (см. [23, с. 55]) как эргодическая теорема для положительных стохастических матриц.

**Теорема 2.** Пусть  $P$  — это положительная стохастическая матрица и  $\pi$  — единственный вектор вероятности с  $\pi P = \pi$  (то есть является стационарным распределением). Тогда

$$\lim_{n \rightarrow \infty} xP^n = \pi$$

для всех начальных векторов  $x$ .

### 2.3. Биологические интерпретации

Напомним, что ДНК — это конфигурация на  $\mathbb{Z}$ -пути. По нашей конструкции могут взаимодействовать только соседние ДНК. Взаимодействие осуществляется через ребро  $l = \langle x, y \rangle \notin \mathbb{Z}$ -пути. Соединение двух ДНК происходит только тогда, когда конфигурация на этих конечных точках ребра удовлетворяет условию  $\varphi(x) = \varphi(y)$ , то есть конечные точки имеют одинаковый цвет.

Как следствие теоремы 2 и приведенных выше формул матриц и стационарных распределений мы получаем следующие биологические интерпретации.

**Случай  $\mu_1$ : слияние пузырьков отсутствует.** По отношению к мере  $\mu_1$  модели Изинга–SOS на дереве Кэли порядка 4 мы имеем следующие состояния равновесия:

- две соседние ДНК имеют соединение соседних барьерных зон с вероятностью 0.976 (где состояния 1 и 2 наблюдаются с равной вероятностью 0.488); у них имеется стык мягких зон с вероятностью 0.024 (где состояния 3 и 4 наблюдаются с равной вероятностью 0.012);
- в ДНК барьерные зоны наблюдаются с вероятностью 0.972 (где состояния 1 и 2 имеют одинаковую вероятность 0.486), и мягкие зоны наблюдаются с вероятностью 0.028 (где состояния 3 и 4 имеют одинаковую вероятность 0.014).

**Случай  $\mu$ : доминирование мягкой зоны.** По отношению к мере  $\mu$  модели Изинга–SOS на дереве Кэли порядка 4 имеем следующие состояния равновесия:

- две соседние ДНК имеют соединение соседних барьерных зон с вероятностью 0.472 (где состояния 1 и 2 имеют одинаковую вероятность 0.236); у них есть стык мягких зон с вероятностью 0.528 (где состояния 3 и 4 с вероятностью 0.264);
- в ДНК барьерные зоны наблюдаются с вероятностью 0.45 (где состояния 1 и 2 наблюдаются с вероятностью 0.225), и мягкие зоны наблюдаются с вероятностью 0.55 (где состояния 3 и 4 имеют вероятность 0.275).

**Случай  $\mu_2$ : слияние пузырьков.** По отношению к мере  $\mu_2$  модели Изинга–SOS на дереве Кэли порядка 4 имеем следующие состояния равновесия:

- две соседние ДНК имеют соединение соседних барьерных зон с вероятностью 0.032 (где состояния 1 и 2 имеют вероятность 0.016); у них есть стык мягких зон с вероятностью 0.968 (где состояния 3 и 4 имеют вероятность 0.484);
- в ДНК барьерные зоны наблюдаются с вероятностью 0.03 (где состояния 1 и 2 имеют вероятность 0.015) и мягкие зоны наблюдаются с вероятностью 0.97 (где состояния 3 и 4 имеют вероятность 0.485).

**Замечание 2.** Отметим, что упомянутые выше три состояния равновесия модели Изинга–SOS рассматриваются как сосуществование трех фаз: «Отсутствие слияния пузырьков», «Доминирующая мягкая зона», «Слияние пузырьков». Поскольку наши меры трансляционно-инвариантны, и каждая ДНК имеет счетное множество соседних ДНК, при одной и той же температуре каждая ДНК взаимодействует с несколькими своими соседями. ДНК, имеющие соединения (соединение Холлидея [17]), можно рассматривать как разветвленную ДНК. В случае сосуществования более чем одной меры Гиббса ветви ДНК могут состоять из разных фаз и разных стационарных состояний.

## 2.4. Модель СПК–ДНК

В этом случае уравнение граничного закона (сравн. с теоремой 1) имеет следующий вид:

$$\begin{cases} z_{b,1,x} = \prod_{y \in S(x)} \frac{1 + \eta^2 z_{r,-1,y} + z_{b,1,y} + z_{r,1,y}}{1 + z_{r,-1,y} + z_{b,1,y} + \eta^2 z_{r,1,y}}, \\ z_{r,i,x} = \prod_{y \in S(x)} \frac{\zeta^{|i+1|} + z_{r,-1,y} + \zeta^{|i-1|} z_{b,1,y} + z_{r,1,y}}{1 + z_{r,-1,y} + z_{b,j,y} + \eta^2 z_{r,1,y}}, \quad i = 1, -1, \end{cases} \quad (23)$$

где  $\zeta = e^{J_b \beta}$  и  $\eta = e^{J_r \beta}$ .

Для функций (11), предполагая, что неизвестные функции не зависят от вершин дерева, сведем систему (23) к следующему

$$\begin{cases} u = \left( \frac{1 + u + v + \eta^2 \omega}{1 + u + \eta^2 v + \omega} \right)^k, \\ v = \left( \frac{\zeta^2 + u + v + \omega}{1 + u + \eta^2 v + \omega} \right)^k, \\ \omega = \left( \frac{1 + \zeta^2 u + v + \omega}{1 + u + \eta^2 v + \omega} \right)^k. \end{cases}$$

Рассмотрим эту систему как уравнение неподвижной точки для оператора  $G$ , определяемого формулой

$$G: \begin{cases} u' = \left( \frac{1 + u + v + \eta^2 \omega}{1 + u + \eta^2 v + \omega} \right)^k, \\ v' = \left( \frac{\zeta^2 + u + v + \omega}{1 + u + \eta^2 v + \omega} \right)^k, \\ \omega' = \left( \frac{1 + \zeta^2 u + v + \omega}{1 + u + \eta^2 v + \omega} \right)^k. \end{cases} \quad (24)$$

Обозначим через  $\text{Fix}(G)$  множество всех неподвижных точек  $G$  и

$$L = \{(u, v, \omega) \in \mathbb{R}_+^3 \mid u = 1, v = \omega\}.$$

Сужаем оператор  $G$  на инвариантном множестве  $L$ , тогда неподвижные точки на  $L$  будут заданы решениями следующего уравнения

$$v = \left( \frac{\zeta^2 + 1 + 2v}{2 + (1 + \eta^2)v} \right)^k. \quad (25)$$

Введем следующие обозначения:

$$\frac{1}{2} < a = \frac{1 + \zeta^2}{2} < 1, \quad \frac{1}{2} < b = \frac{1 + \eta^2}{2} < 1, \quad v = x. \quad (26)$$

Тогда уравнение (25) примет вид:

$$x = \left( \frac{a + x}{1 + bx} \right)^k. \quad (27)$$

**Теорема 3.** Уравнение (27) (с  $x > 0$ ,  $\frac{1}{2} < a < 1$ ,  $\frac{1}{2} < b < 1$ ,  $k \geq 2$ ) имеет одно решение, если либо  $k = 2$  и  $k = 3$ , либо  $\frac{k-1}{k+1} < ab < 1$ . Если  $k \geq 4$  и  $ab < \left(\frac{k-1}{k+1}\right)^2$ , то существуют  $\rho_1(a, b, k)$ ,  $\rho_2(a, b, k)$  с  $0 < \rho_1(a, b, k) < \rho_2(a, b, k)$  такие, что уравнение имеет три решения, если  $\rho_1(a, b, k) < 1 < \rho_2(a, b, k)$ , и имеет два решения, если  $\rho_1(a, b, k) = 1$  или  $\rho_2(a, b, k) = 1$ . Здесь  $\rho_i(a, b, k) = \frac{1}{x_i} \left( \frac{a + x_i}{1 + bx_i} \right)^k$ ,  $i = 1, 2$ , где  $x_1, x_2$  — решения

$$bx^2 - (k - 1 - (k + 1)ab)x + a = 0.$$

Доказательство. Обозначим  $f(x) = \left(\frac{a+x}{1+bx}\right)^k$ . Эта функция имеет асимптоту  $y = \frac{1}{b^k}$ . Из (26) получаем  $1 < \frac{1}{b^k} < 2^k$ . Нетрудно заметить, что если  $x$  — положительное решение уравнения (27), то для этого решения имеем  $0 < x < 2^k$ .

Первая и вторая производные функции  $f(x)$  равны:

$$f'(x) = \frac{(1-ab)k(a+x)^{k-1}}{(1+bx)^{k+1}},$$

$$f''(x) = -2b(1-ab)k \left( x - \frac{k-1-ab(k+1)}{2b} \right) \frac{(a+x)^{k-2}}{(1+bx)^{k+2}}.$$

Легко показать, что  $f'(x) > 0$  и  $f$  возрастает. Если  $\frac{k-1}{k+1} < ab < 1$ , то  $f''(x) < 0$  и, значит,  $f$  вогнуто возрастает, следовательно, для уравнения (27) существует только одно положительное решение при  $k \geq 2$ .

Сначала для решения уравнения (27) введем обозначение  $z = \sqrt[k]{x}$  и получим:

$$g(z) := bz^{k+1} - z^k + z - a = 0. \quad (28)$$

Уравнение (28) для  $k = 2$  примет вид:

$$z^3 - \frac{z^2}{b} + \frac{z}{b} - \frac{a}{b} = 0,$$

и оно имеет положительное решение

$$z_* = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} + \frac{1}{3b}, \quad (29)$$

где  $p = \frac{3b-1}{3b^2}$ ,  $q = -\frac{a}{b} + \frac{1}{3b^2} - \frac{2}{27b^3}$ ,  $\frac{1}{2} < b < 1$ ,  $\frac{3}{2} < 3b < 3$ ,  $\frac{1}{2} < 3b-1 < 2$ .

Если  $k = 3$ , то уравнение (28) записывается в следующем виде:

$$bz^4 - z^3 + z - a = 0.$$

Используя метод Феррари, находим единственное положительное решение этого уравнения:

$$z_* = \frac{\sqrt{\left(A - \frac{1}{2b}\right)^2 - 4\left(\frac{y_1}{2} - B\right)} - A + \frac{1}{2b}}{2}, \quad (30)$$

где

$$y_1 = \sqrt[3]{\frac{b-a}{2b^3} + \sqrt{\frac{(b-a)^2}{4b^6} + \frac{(4ab-1)^3}{27b^6}}} + \sqrt[3]{\frac{b-a}{2b^3} - \sqrt{\frac{(b-a)^2}{4b^6} + \frac{(4ab-1)^3}{27b^6}}},$$

$$A = \sqrt{y_1 + \frac{1}{4b^2}}, B = \sqrt{\frac{y_1^2}{4} + \frac{a}{b}}.$$

Для  $k \geq 4$  и  $ab < \frac{k-1}{k+1}$  имеем, что  $f$  выпукла при  $x < \frac{k-1-ab(k+1)}{2b}$  и вогнутым для  $x > \frac{k-1-ab(k+1)}{2b}$ , таким образом, существует не более трех решений уравнения (27). Легко показать, что существует более одного решения тогда и только тогда, когда существует более одного решения  $xf'(x) = f(x)$ , которое совпадает с

$$bx^2 - (k-1-(k+1)ab)x + a = 0,$$

**Таблица 2.** Приближенные значения решений  $v$ , соответствующие конкретным значениям параметров, для  $\zeta = 0.07$ ,  $\eta = 0.3$  (как в модели СПВ–ДНК) и для  $k = 3, 4, 5$ . В случае  $k = 3$  существует единственное решение  $v = 2.294013606$ . Но для  $k = 4$  и  $k = 5$  существует ровно три решения. Соответствующие меры указаны, как в последнем столбце.

Параметры	$k$	$v$	Мера
$\zeta = 0.07$	3	2.294013606	$\nu$
$\eta = 0.3$	4	0.2440603034	$\nu_1$
	4	0.6054111023	$\nu$
	4	8.854735060	$\nu_2$
	5	0.07701071175	$\nu_1$
	5	0.7768937534	$\nu$
	5	23.25544603	$\nu_2$

и существуют два положительных корня, если  $k - 1 - (k + 1)ab > 0$ , то есть  $ab < \frac{k - 1}{k + 1}$ , и

$$D = (k - 1 - (k + 1)ab)^2 - 4ab > 0, \text{ или } k - 1 - (k + 1)ab - 2\sqrt{ab} > 0.$$

Обозначив  $t = \sqrt{ab}$ , получим квадратное уравнение относительно  $t$ :

$$-(k + 1)t^2 - 2t + k - 1 = 0.$$

Тогда корни этого квадратного уравнения  $t_1 = -1$ ,  $t_2 = \frac{k - 1}{k + 1}$ .

Таким образом,  $D > 0$ , если  $t < \frac{k - 1}{k + 1}$  или  $ab < \left(\frac{k - 1}{k + 1}\right)^2$ . В итоге мы получаем следующее неравенство

$$ab < \left(\frac{k - 1}{k + 1}\right)^2 < \frac{k - 1}{k + 1}.$$

Из этого вывода извлекаем интервал  $ab < \left(\frac{k - 1}{k + 1}\right)^2$ . Теорема доказана.  $\square$

**Замечание 3.** Мы не имеем явной формулы для решения  $v = x_*^k$ , если  $k \geq 4$ . Только знаем о его существовании и единственности. Но для малых значений  $k$  решение можно найти.

Например, если  $k = 1$ , то  $v = x_* = \sqrt{\frac{1 + \zeta^2}{1 + \eta^2}}$ , для  $k = 2$  и  $k = 3$  решениями является формулы (29), (30) соответственно. Чтобы придать нашей мере  $\nu$  биологический смысл, ниже, для  $k = 4$  и фиксированных параметров, как в (20), численно находим три решения уравнения (25). Также было бы неплохо сравнить модели СПВ–ДНК и СПК–ДНК по одним и тем же параметрам.

Пусть  $(u, v, \omega)$  — решение задачи (23), которое по теореме 3 имеет вид  $(1, v_1^*, v_1^*)$ ,  $(1, v_2^*, v_2^*)$ ,  $(1, v_3^*, v_3^*)$ . Цепь Маркова (мера Гиббса), соответствующая этому решению, опре-

деляется следующей матрицей

$$P = \begin{pmatrix} \frac{1}{\bar{Y}} & \frac{1}{\bar{Y}} & \frac{v}{\bar{Y}} & \frac{\eta^2 v}{\bar{Y}} \\ \frac{1}{\bar{Y}} & \frac{1}{\bar{Y}} & \frac{\eta^2 v}{\bar{Y}} & \frac{v}{\bar{Y}} \\ \frac{1}{\bar{Z}} & \frac{\zeta^2}{\bar{Z}} & \frac{v}{\bar{Z}} & \frac{v}{\bar{Z}} \\ \frac{\zeta^2}{\bar{Z}} & \frac{1}{\bar{Z}} & \frac{v}{\bar{Z}} & \frac{v}{\bar{Z}} \end{pmatrix},$$

где  $Y = 2 + (1 + \eta^2)v$ ,  $Z = 1 + \zeta^2 + 2v$ .

В случае неединственности меры Гиббса (и соответствующих цепей Маркова) мы имеем разные стационарные состояния для разных мер. Используя значения, приведенные в таблице 2 (в случае  $k = 4$ ), получаем следующие результаты.

**Случай меры  $\nu_1$ :**

$$P_1 = \begin{pmatrix} 0.442 & 0.442 & 0.107 & 0.009 \\ 0.442 & 0.442 & 0.009 & 0.107 \\ 0.669 & 0.003 & 0.164 & 0.164 \\ 0.003 & 0.669 & 0.164 & 0.164 \end{pmatrix}, \quad p_1 = (0.426, 0.426, 0.074, 0.074).$$

**Случай меры  $\nu$ :**

$$P_2 = \begin{pmatrix} 0.376 & 0.376 & 0.227 & 0.021 \\ 0.376 & 0.376 & 0.021 & 0.227 \\ 0.452 & 0.002 & 0.273 & 0.273 \\ 0.002 & 0.452 & 0.273 & 0.273 \end{pmatrix}, \quad p_2 = (0.323, 0.323, 0.177, 0.177).$$

**Случай меры  $\nu_2$ :**

$$P_3 = \begin{pmatrix} 0.086 & 0.086 & 0.760 & 0.068 \\ 0.086 & 0.086 & 0.068 & 0.760 \\ 0.0534 & 0.0002 & 0.4732 & 0.4732 \\ 0.0002 & 0.0534 & 0.4732 & 0.4732 \end{pmatrix}, \quad p_3 = (0.031, 0.031, 0.469, 0.469).$$

Как следствие теоремы 2 и приведенных выше формул матриц и стационарных распределений мы получаем следующие биологические интерпретации.

**Случай  $\nu_1$ : слияние пузырьков отсутствует.** По отношению к мере  $\nu_1$  модели Изинга–SOS на дереве Кэли порядка 4 мы имеем следующие состояния равновесия:

- две соседние ДНК имеют соединение соседних барьерных зон с вероятностью 0.852 (где состояния 1 и 2 наблюдаются с равной вероятностью 0.426); у них имеется стык мягких зон с вероятностью 0.148 (где состояния 3 и 4 наблюдаются с равной вероятностью 0.074).

**Случай  $\nu$ : доминирование мягкой зоны.** По отношению к мере  $\nu$  модели Изинга–SOS на дереве Кэли порядка 4 имеем следующие состояния равновесия:

- две соседние ДНК имеют соединение соседних барьерных зон с вероятностью 0.646 (где состояния 1 и 2 имеют одинаковую вероятность 0.323); у них есть стык мягких зон с вероятностью 0.354 (где состояния 3 и 4 с вероятностью 0.177).

**Таблица 3.** Показаны сравнения между моделями СПВ–ДНК и СПК–ДНК, приближенные значения решений  $\nu$ , соответствующие конкретным значениям параметров, для  $\zeta = 0.07$ ,  $\eta = 0.3$  и для  $k = 4$ .

Параметры	Вероятность барьерных зон	Вероятность мягких зон	Модели	Мера	Состояния
$\zeta = 0.07$	0.976	0.024	СПВ–ДНК	$\mu_1$	Слияние пузырьков отсутствует
$\eta = 0.3$	0.852	0.148	СПК–ДНК	$\nu_1$	
$k = 4$	0.472	0.528	СПВ–ДНК	$\mu$	Доминирование мягкой зоны
	0.646	0.354	СПК–ДНК	$\nu$	
	0.030	0.970	СПВ–ДНК	$\mu_2$	Слияние пузырьков
	0.062	0.938	СПК–ДНК	$\nu_2$	

**Случай  $\nu_2$ : слияние пузырьков.** По отношению к мере  $\nu_2$  модели Изинга–SOS на дереве Кэли порядка 4 имеем следующие состояния равновесия:

- две соседние ДНК имеют соединение соседних барьерных зон с вероятностью 0.062 (где состояния 1 и 2 имеют вероятность 0.031); у них есть стык мягких зон с вероятностью 0.938 (где состояния 3 и 4 имеют вероятность 0.469).

Сравнение моделей СПВ–ДНК и СПК–ДНК приведено в таблице 3.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Георги Х.-О. Гиббсовские меры и фазовые переходы. М.: Мир, 1992.
2. Preston C. J. Gibbs states on countable sets. Cambridge: Cambridge University Press, 1974. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511897122>
3. Синай Я. Г. Теория фазовых переходов. Строгие результаты. М.: Наука, 1980. <https://zbmath.org/0508.60084>
4. Блехер П. М., Ганиходжаев Н. Н. О чистых фазах модели Изинга на решетках Бете // Теория вероятностей и ее применения. 1990. Т. 35. Вып. 2. С. 220–230. <https://www.mathnet.ru/rus/tvp991>
5. Рахматуллаев М. М. О новых слабо периодических гиббсовских мерах модели Изинга на дереве Кэли // Известия высших учебных заведений. Математика. 2015. № 11. С. 54–63. <https://www.mathnet.ru/rus/ivm9052>
6. Ганиходжаев Н. Н. О чистых фазах ферромагнитной модели Поттса с тремя состояниями на решетке Бете второго порядка // Теоретическая и математическая физика. 1990. Т. 85. № 2. С. 163–175. <https://www.mathnet.ru/rus/tmf5939>
7. Naydarov F. H., Khakimov R. M. An improvement of extremality regions for Gibbs measures of the Potts model on a Cayley tree // Journal of Physics: Conference Series. 2016. Vol. 697. 012019. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/697/1/012019>
8. Хакимов Р. М. Меры Гиббса для плодородных моделей жесткой сердцевины на дереве Кэли // Теоретическая и математическая физика. 2016. Т. 186. № 2. С. 340–352. <https://doi.org/10.4213/tmf8886>

9. Розиков У. А., Шоюсупов Ш. А. Меры Гиббса для модели SOS с четырьмя состояниями на дереве Кэли // Теоретическая и математическая физика. 2006. Т. 149. № 1. С. 18–31.  
<https://doi.org/10.4213/tmf3825>
10. Külske C., Rozikov U. A. Extremality of translation-invariant phases for a three-state SOS-model on the binary tree // Journal of Statistical Physics. 2015. Vol. 160. Issue 3. P. 659–680.  
<https://doi.org/10.1007/s10955-015-1279-9>
11. Rahmatullaev M. M., Rasulova M. A. Extremality of translation-invariant Gibbs measures for the Potts–SOS model on the Cayley tree // Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. 2021. Vol. 2021. Issue 7. 073201. <https://doi.org/10.1088/1742-5468/ac08ff>
12. Khatamov N. M., Khakimov R. M. Translation-invariant Gibbs measures for the Blume–Capel model on a Cayley tree // Журнал математической физики, анализа, геометрии. 2019. Т. 15. № 2. С. 239–255. <https://doi.org/10.15407/mag15.02.239>
13. Хатамов Н. М. Экстремальность некоторых мер Гиббса для  $HC$ -модели Блюма–Капеля на дереве Кэли // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2022. Т. 32. Вып. 2. С. 256–277. <https://doi.org/10.35634/vm220207>
14. Alberts B., Johnson A., Lewis J., Raff M., Roberts K., Walter P. Molecular biology of the cell. New York: Garland Science, 2002.
15. Swigon D. The mathematics of DNA structure, mechanics, and dynamics // Mathematics of DNA structure, function and interactions. New York: Springer, 2009. P. 293–320.  
[https://doi.org/10.1007/978-1-4419-0670-0\\_14](https://doi.org/10.1007/978-1-4419-0670-0_14)
16. Thompson C. J. Mathematical statistical mechanics. Princeton: Princeton University Press, 1972.  
<https://www.jstor.org/stable/j.ctt13x1022>
17. Rozikov U. A. Gibbs measures in biology and physics. Singapore: World Scientific, 2022.  
<https://doi.org/10.1142/12694>
18. Хатамов Н. М. Структуры Холлидея в модели Блюма–Капеля молекулы ДНК // Теоретическая и математическая физика. 2021. Т. 206. № 3. С. 439–447. <https://doi.org/10.4213/tmf9865>
19. Khatamov N. M. Holliday junctions in the  $HC$  Blume–Capel model in “one case” on DNA // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. 2021. Vol. 12. Issue 5. P. 563–568.  
<https://doi.org/10.17586/2220-8054-2021-12-5-563-568>
20. Rozikov U. A. Thermodynamics of DNA–RNA renaturation // International Journal of Geometric Methods in Modern Physics. 2021. Vol. 18. No. 6. 2150096.  
<https://doi.org/10.1142/S0219887821500961>
21. Rozikov U. A. Bubble coalescence in interacting system of DNA molecules // International Journal of Biomathematics. 2024. Vol. 17. No. 4. 2350038. <https://doi.org/10.1142/S1793524523500389>
22. Rozikov U. A., Ishankulov F. T. Description of periodic  $p$ -harmonic functions on Cayley tree // Nonlinear Differential Equations and Applications NoDEA. 2010. Vol. 17. Issue 2. P. 153–160.  
<https://doi.org/10.1007/s00030-009-0045-6>
23. Georgii H.-O. Gibbs measures and phase transitions. Berlin: De Gruyter, 2011.  
<https://doi.org/10.1515/9783110250329>

Поступила в редакцию 24.10.2024

Принята к публикации 05.01.2025

Розиков Уткир Абдуллоевич, д. ф.-м. н., академик, Институт математики имени В. И. Романовского Академии наук Республики Узбекистан, 100174, Узбекистан, г. Ташкент, ул. Университетская, 9; Национальный университет Узбекистана имени Мирзо Улугбека, 100174, Узбекистан, г. Ташкент, ул. Университетская, 4;

Каршинский государственный университет, 180119, Узбекистан, г. Карши, ул. Кучабаг, 17.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9795-2566>

E-mail: [rozikovu@yandex.ru](mailto:rozikovu@yandex.ru)

Хатамов Носирджон Муйдинович, д. ф.-м. н., заведующий кафедрой математики, Наманганский государственный университет, 160119, Узбекистан, г. Наманган, ул. Уйчи, 316;

старший научный сотрудник, Институт математики имени В. И. Романовского Академии наук Республики Узбекистан, 100174, Узбекистан, г. Ташкент, ул. Университетская, 9.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2902-7982>

E-mail: [nxatamov@mail.ru](mailto:nxatamov@mail.ru)

Маликов Нематулла Наимджан угли, аспирант, Наманганский государственный университет, 160119, Узбекистан, г. Наманган, ул. Уйчи, 316.

ORCID: <https://orcid.org/0009-0009-1710-1004>

E-mail: [malikovnematulla24@gmail.com](mailto:malikovnematulla24@gmail.com)

**Цитирование:** У. А. Розиков, Н. М. Хатамов, Н. Н. Маликов. Меры Гиббса слияния пузырьков во взаимодействующей системе молекул ДНК для модели Изинга-SOS на дереве Кэли // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2025. Т. 35. Вып. 1. С. 96–116.

**U. A. Rozikov, N. M. Khatamov, N. N. Malikov**

**Gibbs measures of bubble coalescence in an interacting system of DNA molecules for the Ising–SOS model on a Cayley tree**

*Keywords:* DNA, bubble, configuration, Cayley tree, Gibbs measure, Ising–SOS model

MSC2020: 82B05, 82B20, 60K35

DOI: [10.35634/vm250106](https://doi.org/10.35634/vm250106)

In this paper, two models of interacting DNA molecules are considered. The first is a (four-parameter) bubble coalescence model in interacting DNAs (shortly, BCI–DNA). The second is a (three-parameter) bubble coalescence model in a condensed DNA molecules (shortly, BCC–DNA). To study the thermodynamics of bubble fusion of these models, a method of statistical physics is developed. Namely, the Hamiltonian (defined by functions) of each model is determined and for specific functions of the Hamiltonian, their translation-invariant Gibbs measures (TIGM) are given.

In this work, such Hamiltonian functions are chosen that the model has the form of the Ising–SOS model. In this case, for the BCI–DNA model, such parameters are found that the corresponding Hamiltonian has up to three TIGMs (three phases of the system), which biologically means the existence of three states: “No bubble coalescence”, “Dominated soft zone”, “Bubble coalescence”.

For the BCC–DNA model, it is shown that for any (acceptable) parameters, this model also has up to three TIGMs, which biologically means the existence of three states: “No bubble coalescence”, “Dominated soft zone”, “Bubble coalescence”.

#### REFERENCES

1. Georgii H.-O. *Gibbs measures and phase transitions*, Berlin: de Gruyter, 1988. <https://zbmath.org/0657.60122>
2. Preston C.J. *Gibbs states on countable sets*, Cambridge: Cambridge University Press, 1974. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511897122>
3. Sinai Ya. G. *Theory of phase transitions: rigorous results*, Oxford: Pergamon, 1982. <https://doi.org/10.1016/C2013-0-03460-3>
4. Blekher P. M., Ganikhodgaev N. N. On pure phases of the Ising model on the Bethe lattice, *Theory of Probability and Its Applications*, 1990, vol. 35, issue 2, pp. 216–227. <https://doi.org/10.1137/1135031>
5. Rakhmatullaev M. M. New weakly periodic Gibbs measures of Ising model on Cayley tree, *Russian Mathematics*, 2015, vol. 59, no. 11, pp. 45–53. <https://doi.org/10.3103/S1066369X15110055>
6. Ganikhodzhaev N. N. Pure phases of the ferromagnetic Potts model with three states on a second-order Bethe lattice, *Theoretical and Mathematical Physics*, 1990, vol. 85, issue 2, pp. 1125–1134. <https://doi.org/10.1007/BF01086840>
7. Haydarov F. H., Khakimov R. M. An improvement of extremality regions for Gibbs measures of the Potts model on a Cayley tree, *Journal of Physics: Conference Series*, 2016, vol. 697, 012019. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/697/1/012019>
8. Khakimov R. M. Gibbs measures for fertile hard-core models on the Cayley tree, *Theoretical and Mathematical Physics*, 2016, vol. 186, issue 2, pp. 294–305. <https://doi.org/10.1134/S0040577916020136>
9. Rozikov U. A., Shoyusupov Sh. A. Gibbs measures for the SOS model with four states on a Cayley tree, *Theoretical and Mathematical Physics*, 2006, vol. 149, issue 1, pp. 1312–1323. <https://doi.org/10.1007/s11232-006-0120-7>
10. Külske C., Rozikov U. A. Extremality of translation-invariant phases for a three-state SOS-model on the binary tree, *Journal of Statistical Physics*, 2015, vol. 160, issue 3, pp. 659–680. <https://doi.org/10.1007/s10955-015-1279-9>

11. Rahmatullaev M.M., Rasulova M.A. Extremality of translation-invariant Gibbs measures for the Potts–SOS model on the Cayley tree, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2021, vol. 2021, issue 7, 073201. <https://doi.org/10.1088/1742-5468/ac08ff>
12. Khatamov N. M., Khakimov R. M. Translation-invariant Gibbs measures for the Blume–Capel model on a Cayley tree, *Journal of Mathematical Physics, Analysis, Geometry*, 2019, vol. 15, no. 2, pp. 239–255. <https://doi.org/10.15407/mag15.02.239>
13. Khatamov N.M. Extremality of some Gibbs measures for the Blume–Capel HC-model on a Cayley tree, *Vestnik Udmurtskogo Universiteta. Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye Nauki*, 2022, vol. 32, issue 2, pp. 256–277. <https://doi.org/10.35634/vm220207>
14. Alberts B., Johnson A., Lewis J., Raff M., Roberts K., Walter P. *Molecular biology of the cell*, New York: Garland Science, 2002.
15. Swigon D. The mathematics of DNA structure, mechanics, and dynamics, *Mathematics of DNA structure, function and interactions*, New York: Springer, 2009. P. 293–320. [https://doi.org/10.1007/978-1-4419-0670-0\\_14](https://doi.org/10.1007/978-1-4419-0670-0_14)
16. Thompson C.J. *Mathematical statistical mechanics*, Princeton: Princeton University Press, 1972. <https://www.jstor.org/stable/j.ctt13x1022>
17. Rozikov U. A. *Gibbs measures in biology and physics*, Singapore: World Scientific, 2022. <https://doi.org/10.1142/12694>
18. Khatamov N.M. Holiday junctions in the Blume–Capel model of DNA, *Theoretical and Mathematical Physics*, 2021, vol. 206, issue 3, pp. 383–390. <https://doi.org/10.1134/S0040577921030090>
19. Khatamov N.M. Holliday junctions in the HC Blume–Capel model in “one case” on DNA, *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 2021, vol. 12, issue 5, pp. 563–568. <https://doi.org/10.17586/2220-8054-2021-12-5-563-568>
20. Rozikov U. A. Thermodynamics of DNA–RNA renaturation, *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*, 2021, vol. 18, no. 6, 2150096. <https://doi.org/10.1142/S0219887821500961>
21. Rozikov U. A. Bubble coalescence in interacting system of DNA molecules, *International Journal of Biomathematics*, 2024, vol. 17, no. 4, 2350038. <https://doi.org/10.1142/S1793524523500389>
22. Rozikov U. A., Ishankulov F. T. Description of periodic  $p$ -harmonic functions on Cayley tree, *Non-linear Differential Equations and Applications NoDEA*, 2010, vol. 17, issue 2, pp. 153–160. <https://doi.org/10.1007/s00030-009-0045-6>
23. Georgii H.-O. *Gibbs measures and phase transitions*, Berlin: De Gruyter, 2011. <https://doi.org/10.1515/9783110250329>

Received 24.10.2024

Accepted 05.01.2025

Utkir Abdulloevich Rozikov, Doctor of Physics and Mathematics, Academician, Institute of Mathematics named after V.I. Romanovsky, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, ul. Universitetskaya, 9, Tashkent, 100174, Uzbekistan;

National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek, ul. Universitetskaya, 4, Tashkent, 100174, Uzbekistan;

Karshi State University, ul. Kuchabag, 17, Karshi, 180119, Uzbekistan.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9795-2566>

E-mail: rozikovu@yandex.ru

Nosirjon Muydinovich Khatamov, Doctor of Physics and Mathematics, Head of Department of Mathematics, Namangan State University, ul. Uichi, 316, Namangan, 160119, Uzbekistan;

Senior Researcher, Institute of Mathematics named after V.I. Romanovsky, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, ul. Universitetskaya, 9, Tashkent, 100174, Uzbekistan.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2902-7982>

E-mail: nxatamov@mail.ru

Nematulla Naimjan ugli Malikov, Post-Graduate Student, Namangan State University, ul. Uichi, 316, Namangan, 160119, Uzbekistan.

ORCID: <https://orcid.org/0009-0009-1710-1004>

E-mail: malikovnematulla24@gmail.com

**Citation:** U. A. Rozikov, N. M. Khatamov, N. N. Malikov. Gibbs measures of bubble coalescence in an interacting system of DNA molecules for the Ising–SOS model on a Cayley tree, *Vestnik Udmurtskogo Universiteta. Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye Nauki*, 2025, vol. 35, issue 1, pp. 96–116.