



武汉理工大学

生命网络体系的虚熵研究

Im-entropy study for bio-network system

报告人：何祖坦

指导老师：毕桥教授

武汉理工大学 理学院 物理科学与技术系 中国 武汉 430070



武汉理工大学

主要内容

一

引言

二

研究内容及创新点

三

总结

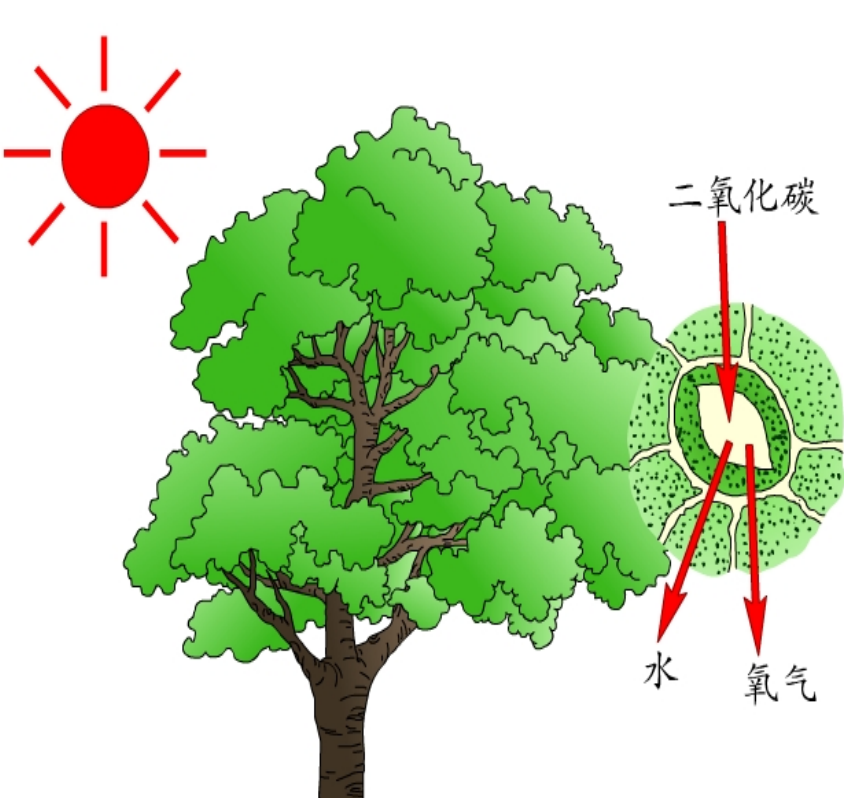


一、引言

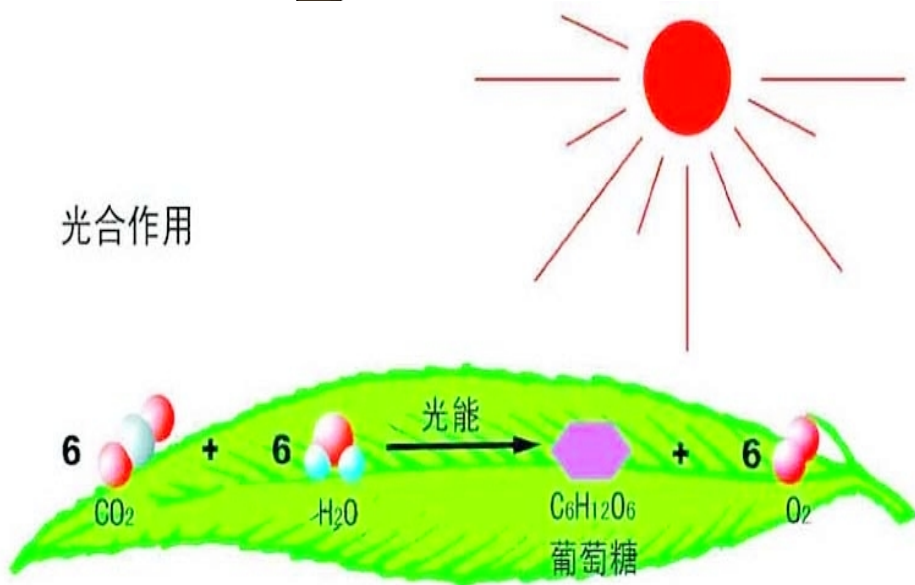
目前，随着人们对身体健康状况重视程度的加强，科学界也在进行着对人/生命体系的性质及其发展前景作出一些研究工作。人/生命体系可以看作一个网络（例如：人体经络），人/生命体系是一个开放体系，这一网络是否具有开放体系的性质？如何体现出开放体系熵的一些信息，也就是熵是怎样揭示生命体系的外在性质？



开放体系



光合作用





生命网络体系的构成

生命网络体系

定域子

外界环境
(这里指光子)



定域子与光子

1、蛋白质共振孤立子、准粒子、激发子（包括有可作局域运动的电子对（通过交换虚声子来实现的））等都具有局域振荡特征，我们定义为定域子，一般来说属于玻色子。

这些定域子处于具有某种简并度的一定量子能级上。当它和光与电磁场等相互作用后，其状态将要发生变化，可从一个量子能级跃迁到另一个能级上去。从而引起系统的熵和生理状态的变化。

2、由光子、电磁场组成的外界环境。由于处于外界环境中的生命体总是和光无时无刻的地相互作用着，所以我们可以认为生命体同光的作用是最基本和最主要的作用过程，并且考虑利用定域子和光子的相互作用机制来研究生命体系。



二、研究内容及创新点

1

主要思路

2

物理模型

3

计算过程

4

虚熵及其特征—创新点



1、主要思路

我们从构造人/生命体系中定域子和光子之间的相互作用的Hamiltonian出发，利用格林函数来求解定域子生命开放体系的能量，经过建立的非平衡正则系综配分函数公式、吉布斯函数等一系列的过程，从而可得出定域子的虚熵；然后对虚熵进行讨论。从虚熵公式中分析出：在生命体系的演化中，生命体系与外界环境的相互作用发挥着至关重要的作用，从而使生命体系中的定域子演化趋于衰减或增强。



构造人/生命体系中定域子和光子之间的相互作用的Hamiltonian

格林函数

求解定域子生命开放体系的能量

非平衡正则系综配分函数公式

吉布斯函数

定域子的虚熵

对虚熵进行讨论



2、物理模型

采用一个定域子-光子相互作用的模型来构建生命网络。生命网络的节点是由定域子来构成；定域子与定域子之间具有关联作用，形成网络的边；定域子在外界环境（这里是光子）发生相互作用时，吸收或发出光子。



总哈密顿量 H 的构建

定域子-光子系统的总哈密顿量 H ：

$$H = H_0 + H_{cc} + H_{cp}$$

其中： $H_0 = H_p + H_c$

节点（定域子）的自由哈密顿量： $H_c = \sum_k \varepsilon_k n_k$ ($n_k = C_k^+ C_k$)

光子的哈密顿量： $H_p = \sum_p \omega_p n_p$ ($n_p = a_p^+ a_p$)

定域子和光子之间的相互作用哈密顿量： $H_{cp} = \sum_{p,k} V_{pk} (C_k^+ a_p + C_k a_p^+)$

定域子间的关联作用： $H_{cc} = \lambda \sum_{k,k'} n_k n_{k'}$ ($n_k = C_k^+ C_k, n_{k'} = C_{k'}^+ C_{k'}$)



3、计算过程

定域子的格林函数的解为：

$$\langle\langle C_{k\sigma} | C_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega+i\eta} = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - 2\lambda \langle n_{k'} \rangle + i\pi V_{pk}^2 \rho^{(0)}(\omega)}$$

$$\langle\langle C_{k\sigma} | C_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega-i\eta} = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - 2\lambda \langle n_{k'} \rangle - i\pi V_{pk}^2 \rho^{(0)}(\omega)}$$

则推迟（超前）格林函数的极点为：

$$E_{k\mp} = \varepsilon_k + 2\lambda \langle n_{k'} \rangle \mp i\pi V_{pk}^2 \rho^{(0)}(\omega)$$

代表定域子网络的能量，且是个复数。对于式中 \mp 号的选取，当为推迟格林函数时，取 $-$ 号；当为超前格林函数时，取 $+$ 号。



子动力学公式

近年来，我们发现Schrodinger形式的SKE方程和Schrodinger方程可以通过一个相似算符联系起来。当相似算符 Ω 为非么正时，Schrodinger形式的SKE方程可以作为描述开放体系的动力学方程。所以，碰撞算符 Θ 的期望值可以通过总哈密顿量 H 的相似变换而得出：

$$Tr(H\rho) = \langle H \rangle \rightarrow Tr(\Theta\rho_{proj}) = \langle \Theta \rangle = \langle \Omega H \Omega^{-1} \rangle$$



ρ_{proj}

量子正则系综 投影密度算符

$$\rho_{proj} = \Omega^{-1} \rho \Omega = \Omega^{-1} \frac{\exp(-\beta H)}{\text{Tr} \exp(-\beta H)} \Omega$$

$$= \frac{\exp(-\Omega^{-1} \beta \Omega \Omega^{-1} H \Omega)}{\text{Tr} \exp(-\beta_{proj} H)}$$

$$= \frac{\exp(-\beta_{proj} \Theta)}{\text{Tr} \exp(-\beta_{proj} \Theta)}$$



1) 当定域子网络的能量为

$$E_{k-} = \varepsilon_k + 2\lambda \langle n_{k'} \rangle - i\pi V_{pk}^2 \rho^{(0)}(\omega) \text{ 时:}$$

定域子的熵为:

$$S_{c-} = -\frac{\partial G_{c-}}{\partial T} = k_B \left(\ln Z - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \right) = \text{Re}S_{c-} + \text{Im}S_{c-}$$

2) 当定域子网络的能量为

$$E_{k+} = \varepsilon_k + 2\lambda \langle n_{k'} \rangle + i\pi V_{pk}^2 \rho^{(0)}(\omega) \text{ 时:}$$

定域子的熵为:

$$S_{c+} = -\frac{\partial G_{c+}}{\partial T} = k_B \left(\ln Z - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \right) = \text{Re}S_{c+} + \text{Im}S_{c+}$$



两种实熵比较：相同

$$\text{Re}S_{c-} = k_B \ln \left[\left(\sum_k \cos \beta b \exp(-\beta a) \right)^2 + \left(\sum_k \sin \beta b \exp(-\beta a) \right)^2 \right]^{1/2} + k_B \beta \frac{\left\{ \begin{array}{l} \sum_k [(a \cos \beta b + b \sin \beta b) \exp(-\beta a)] \cdot \sum_k \cos \beta b \exp(-\beta a) \\ - \sum_k [(b \cos \beta b - a \sin \beta b) \exp(-\beta a)] \cdot \sum_k \sin \beta b \exp(-\beta a) \end{array} \right\}}{\left(\sum_k \cos \beta b \exp(-\beta a) \right)^2 + \left(\sum_k \sin \beta b \exp(-\beta a) \right)^2}$$

$a = \varepsilon_k + 2\lambda \langle n_{k'} \rangle$
 $b = \pi V_{pk}^2 \rho^{(0)}(\omega)$

$$\text{Re}S_{c+} = k_B \ln \left[\left(\sum_k \cos \beta b' \exp(-\beta a') \right)^2 + \left(\sum_k \sin \beta b' \exp(-\beta a') \right)^2 \right]^{1/2} + k_B \beta \frac{\left\{ \begin{array}{l} \sum_k [(a \cos \beta b' + b \sin \beta b') \exp(-\beta a')] \cdot \sum_k \cos \beta b' \exp(-\beta a') \\ - \sum_k [(b \cos \beta b' - a \sin \beta b') \exp(-\beta a')] \cdot \sum_k \sin \beta b' \exp(-\beta a') \end{array} \right\}}{\left(\sum_k \cos \beta b' \exp(-\beta a') \right)^2 + \left(\sum_k \sin \beta b' \exp(-\beta a') \right)^2}$$

$a' = \varepsilon_k + 2\lambda \langle n_{k'} \rangle$
 $b' = -\pi V_{pk}^2 \rho^{(0)}(\omega)$



两种虚熵比较

$$\text{Im}S_{c-} = ik_B \arcsin \frac{\sum_k \sin \beta b \exp(-\beta a)}{\left[\left(\sum_k \cos \beta b \exp(-\beta a) \right)^2 + \left(\sum_k \sin \beta b \exp(-\beta a) \right)^2 \right]^{1/2}}$$

$$a = \varepsilon_k + 2\lambda \langle n_{k'} \rangle$$

$$b = \pi V_{pk}^2 \rho^{(0)}(\omega)$$

$$-ik_B \beta \frac{\left\{ \sum_k [(a \cos \beta b + b \sin \beta b) \exp(-\beta a)] \cdot \sum_k \sin \beta b \exp(-\beta a) \right.}{\left. + \sum_k [(b \cos \beta b - a \sin \beta b) \exp(-\beta a)] \cdot \sum_k \cos \beta b \exp(-\beta a) \right\}}{\left(\sum_k \cos \beta b \exp(-\beta a) \right)^2 + \left(\sum_k \sin \beta b \exp(-\beta a) \right)^2}$$

$$\text{Im}S_{c+} = ik_B \arcsin \frac{\sum_k \sin \beta b' \exp(-\beta a')}{\left[\left(\sum_k \cos \beta b' \exp(-\beta a') \right)^2 + \left(\sum_k \sin \beta b' \exp(-\beta a') \right)^2 \right]^{1/2}}$$

$$a' = \varepsilon_k + 2\lambda \langle n_{k'} \rangle$$

$$b' = -\pi V_{pk}^2 \rho^{(0)}(\omega)$$

$$-ik_B \beta \frac{\left\{ \sum_k [(a' \cos \beta b' + b' \sin \beta b') \exp(-\beta a')] \cdot \sum_k \sin \beta b' \exp(-\beta a') \right.}{\left. + \sum_k [(b' \cos \beta b' - a' \sin \beta b') \exp(-\beta a')] \cdot \sum_k \cos \beta b' \exp(-\beta a') \right\}}{\left(\sum_k \cos \beta b' \exp(-\beta a') \right)^2 + \left(\sum_k \sin \beta b' \exp(-\beta a') \right)^2}$$



4、虚熵及其特征——创新点

武汉理工大学

我们提出了虚熵（Im-entropy）这一概念。下面我们可以从虚熵公式中分析出，在生命体系的真实演化中，生命体系与外界环境的相互作用发挥着至关重要的作用。



从上面公式可以发现，虚熵同定域子的激发能量有关，由定域子间的关联和同光子的相互作用决定。这是可以理解的。正是定域子间的关联和其同光子的相互作用才能使定域子网络产生演化。但是定域子同光子的相互作用对虚熵是决定性的，表现为，当 $V_{pk} \rightarrow 0$ 时，有

$$\text{Im}S_{c-} = \text{Im}S_{c+} \rightarrow 0$$

而定域子间的关联作用（定域子网络的边）只对虚熵数值的大小和函数形式有影响。



另外,

$$\text{Re}S_{c-} = \text{Re}S_{c+} \rightarrow k_B \ln \left[\sum_k \exp(-\beta a) \right] + k_B \frac{\sum [\beta a \exp(-\beta a)]}{\sum_k \exp(-\beta a)}$$

可以看出实熵部分是同关联作用部分有关系的。我们这里重点讨论虚熵部分。

虚熵描述了定域子在传播过程中的衰减或增加，或生命时间的长短。这是因为对于推迟格林函数 $G_R(k,t)$ 和超前格林函数 $G_A(k,t)$ ，能量的正负虚数部分给出了不同的演化图像：

$$G_R(k,t) \approx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - E_k + i\Gamma_k} = -iu(t)e^{-iE_k t} e^{-\Gamma_k t}$$

即， k 定域子在演化中衰减，其寿命正比于 Γ_k^{-1} ，其中 $u(t)$ 为阶跃函数。而

$$G_A(k,t) \approx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - E_k - i\Gamma_k} = -iu(t)e^{-iE_k t} e^{+\Gamma_k t}$$

即， k 定域子在演化中增加，其寿命正比于 Γ_k^{-1} 。两种虚熵分别描述了两个时间相反方向的演化。其中虚熵 ImS_c 同推迟格林函数 $G_R(k,t)$ 协调，同热力学第二定律方向一致；而其中虚熵 ImS_c+ 同超前格林函数 $G_A(k,t)$ 协调，同热力学第二定律方向相反，可能是生命演化逆时间走向复杂性的方向。两种虚熵指出了我们定域子网络同光子相互作用模型演化的两种可能方向。哪一个方向将成为我们模型的真实演化方向，取决于定域子网络系统的边界条件。



三、总结

构造人/生命体系中定域子和光子之间的相互作用的Hamiltonian

非平衡正则系综
配分函数公式

定域子的虚熵

发现虚熵可以描述定域子激发态的寿命长短等性质。



武汉理工大学

谢谢各位老师，请保重！