Theoretische Biophysik
-
Statistische Physik

13. Vorlesung

Pawel Romanczuk

Wintersemester 2018

http://lab.romanczuk.de/teaching/

Zusammenfassung letzte VL

- Geburt und Sterbeprozesse – Generelle Formulierung als Mastergleichung
- Einfache Beispielprozesse
- Ausblick: Methode der Erzeugenden Funktionen
- Mastergleichung → Übergang zu kontinuierlichen Zuständen („kleine Sprünge“) → Fokker-Planck Gleichung
- Beispiele Brownsche Bewegung

Aktive Brownsche Bewegung

- Biologische Agenten können Energie aus der Umgebung aufnehmen und diese für selbst-angetriebene stochastische Bewegung, fern vom Gleichgewicht einsetzen.

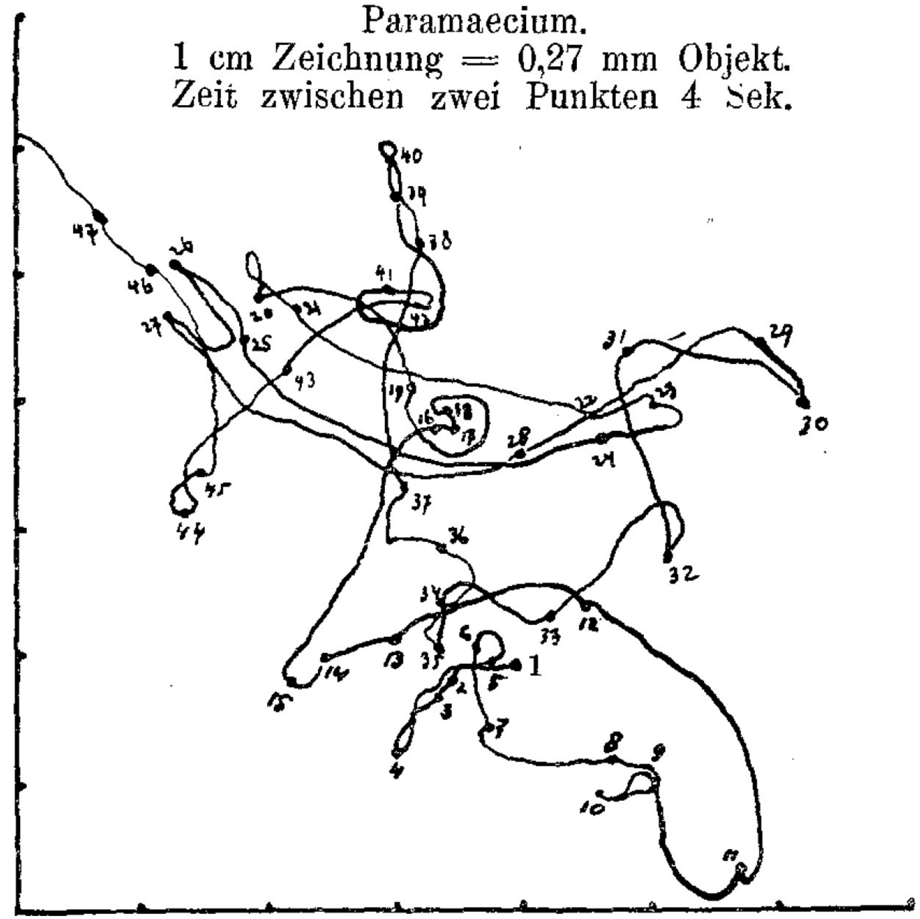
Die Brownsche Bewegung bei Berücksichtigung einer Persistenz der Bewegungsrichtung. Mit Anwendungen auf die Bewegung lebender Infusorien.

Von **Reinhold Fürth.**

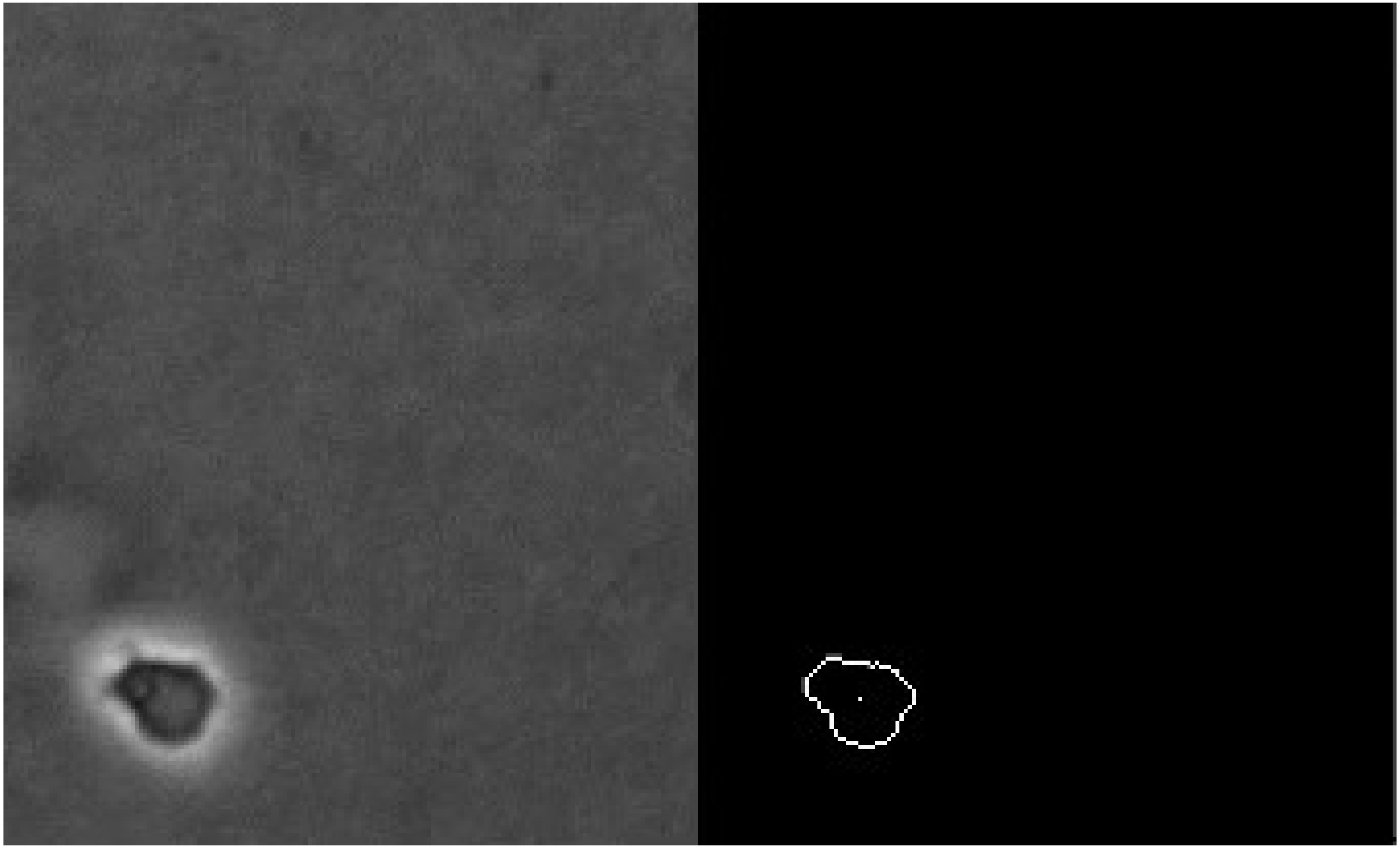
Mit zwei Abbildungen.

Aus dem physikalischen Institut der deutschen Universität in Prag.

(Eingegangen am 26. Juni 1920.)



Aktive Brownsche Bewegung von *Dictyostelium Discoideum*



Aktive Brownsche Bewegung

- Mittlere quadratische Verschiebung wächst, für lange Zeiten, proportional zur Zeit → Diffusion

$$\langle \vec{r}^2 \rangle(t) \sim t$$

- Der entsprechende Diffusionskoeffizient ist im allgemeinen keine lineare Funktion der Temperatur wie bei normaler Brownsche Bewegung.

$$\langle \vec{r}^2 \rangle(t) \neq \frac{4kT}{\gamma} t$$

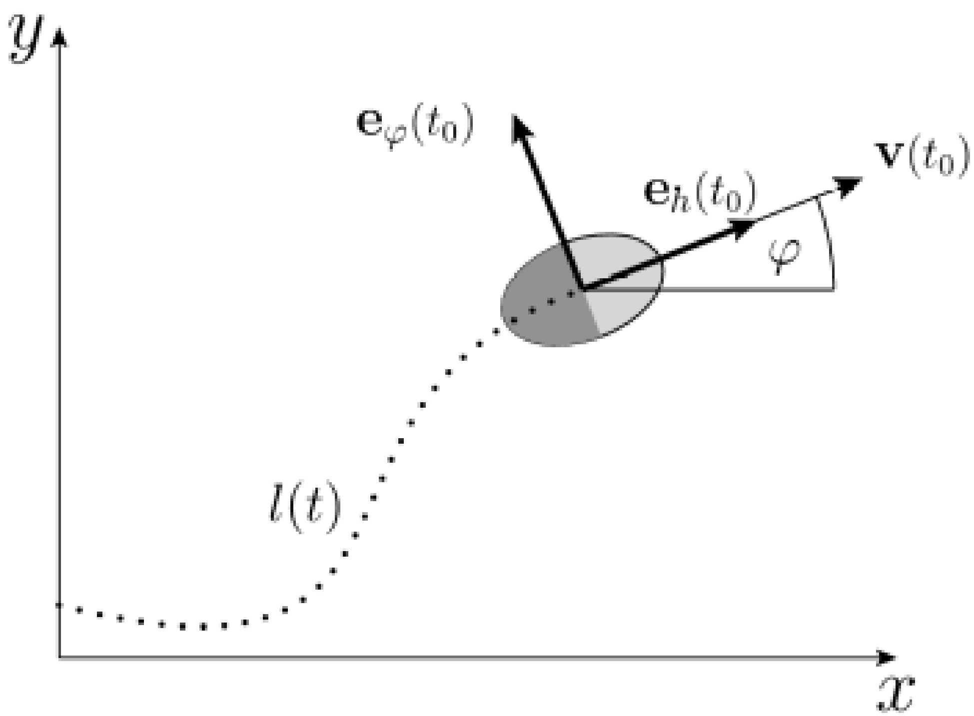
- Der Grund:

Physik: selbst-angetriebene Bewegung nicht getrieben durch die zufälligen Stöße einer Flüssigkeit.

Biologie: Änderungen der Temperatur beeinflussen viele biologische Prozesse, also auch die Fortbewegung von Zellen in komplexer Weise.

Aktive Brownsche Bewegung

Stochastische bzw. statistische Beschreibung der aktiven Bewegung von biologischen Agenten (Zellen, Bakterien, Amoeben, etc...):



$$\vec{e}_h = \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{pmatrix}$$

$$\vec{e}_\varphi = \begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \end{pmatrix}$$

In zwei Dimensionen kann die selbst-angetriebene, stochastische Bewegung durch die Geschwindigkeit $v(t)$ entlang $\vec{e}_h$ und den Richtungswinkel $\varphi(t)$ vollständig beschrieben werden.

Beschreibung in mit-bewegten Koordinatensystem

Einfacher Ansatz für die Beschreibung Aktiver Brownscher Bewegung:

$$\frac{dv}{dt} = \alpha\big(v_0 - v(t)\big) + \sigma_v \eta_v(t)$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \sigma_\varphi \eta_\varphi(t)$$

- unabhängige Dynamik von $v(t)$ und $\varphi(t)$
- Lineare Reibungsfunktion mit der Relaxationsrate $\alpha = \tau_v^{-1}$ auf die Vorzugsgeschwindigkeit v_0.
- Geschwindigkeitsrauschen $\eta_v(t)$ und Winkel- bzw. Richtungsrauschen $\eta_\varphi(t)$

$$\langle \eta_i(t)\eta_j(t')\rangle = \delta(t - t')\delta_{i,j}$$

Fokker-Planck Gleichung

$$\frac{dv}{dt} = \alpha(v_0 - v) + \sigma_v \eta_v(t) \qquad\qquad \frac{d\varphi}{dt} = \sigma_\varphi \eta_\varphi(t)$$

Die zugehörigen Fokker-Planck-Gleichungen lauten:

$$\frac{\partial}{\partial t} p_v(v,t|v',t') = -\frac{\partial}{\partial v}\left[\alpha(v - v_0) p_v(v,t|v',t')\right] + \sigma_v^2 \frac{\partial^2}{\partial v^2} p_v(v,t|v',t')$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p_\varphi(\varphi,t|\varphi',t) = \sigma_\varphi^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} p_\varphi(\varphi,t|\varphi',t') \qquad\qquad \varphi \in [0, 2\pi]$$

Die stationären Wahrscheinlichkeitsverteilung der Geschwindigkeit und des Winkels erhalten wir durch lösen der Gleichungen mit:

$$\frac{\partial p_v}{\partial t} = 0 \qquad\qquad \frac{\partial p_\varphi}{\partial t} = 0$$

Stationäre Lösung

Die stationäre Geschwindigkeitsverteilung ist eine Normalverteilung um die Vorzugsgeschwindigkeit v_0:

$$p_v^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(v-v_0)^2/2\sigma_v^2}$$

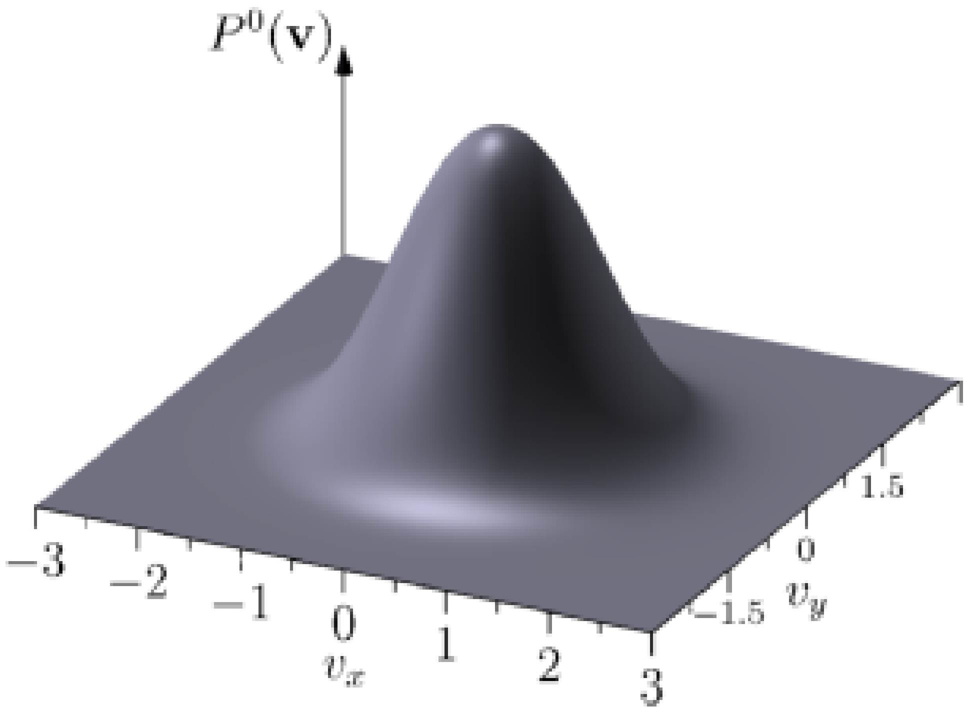
Die stationären Wahrscheinlichkeitsverteilung der Winkel kann auch ohne Rechnen direkt mit grundlegenden Überlegungen angegeben werden:

- Es gibt keine ausgezeichnete Bewegungsrichtung
- Freie Diffusion der Winkelvariable $\leftrightarrow$ jede beliebige Anfangsrichtung wird für lange Zeiten „vergessen“

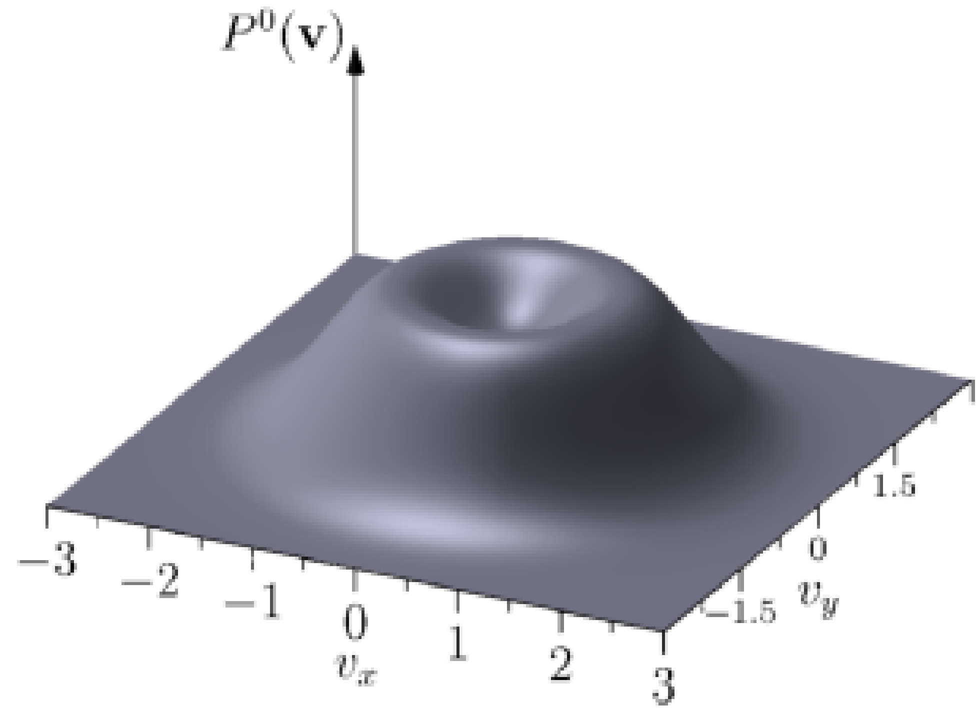
$$p_\varphi^{(0)} = \frac{1}{2\pi}$$

Aktive Brownsche Bewegung - Stationäre Geschwindigkeitsverteilung

$v_0 = 0$



$v_0 > 0$



Effektiver Diffusionskoeffizient

Mittlere Verschiebung:

$$\vec{r}(t) = \int_0^t dt' \vec{v} = \int_0^t dt' v(t') \vec{e}_h(t') \quad \text{wegen } \langle \vec{e}_h \rangle = 0 \text{ folgt:} \quad \boxed{\langle \vec{r}(t) \rangle = 0}$$

Im Grenzfall großer Zeiten ist die mittlere quadratische Verschiebung bei normaler Diffusion (auch aktiv!) eine lineare Funktion der Zeit (d – Dimension der Bewegung):

$$\langle |r(t) - r(0)|^2 \rangle = 2dD_{\text{eff}} t \text{ für } t \to \infty$$

Für den effektiven Diffusionskoeffizienten gilt also bei normaler Diffusion ($\rightarrow$ Grenzwert existiert):

$$\boxed{D_{\text{eff}} = \frac{1}{2d} \lim_{t \to \infty} \frac{d}{dt} \langle |\vec{r}(t) - \vec{r}(0)|^2 \rangle}$$

Effektiver Diffusionskoeffizient

$$D_{\text{eff}} = \frac{1}{2d} \lim_{t\to\infty} \frac{d}{dt} \langle (\vec{r}(t) - \vec{r}(0))^2 \rangle \;\; = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{d} \langle (\vec{r}(t) - \vec{r}(0)) \cdot \vec{v}(t) \rangle$$

$$= \lim_{t\to\infty} \frac{1}{d} \int_0^t d\tau \langle \vec{v}(\tau)\vec{v}(t) \rangle = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{d} \int_0^t d\tau \langle \vec{v}(0)\vec{v}(t-\tau) \rangle$$

$$\boxed{D_{\text{eff}} = \frac{1}{d} \int_0^\infty dt \langle \vec{v}(0)\vec{v}(t) \rangle}$$

Der effektive Diffusionskoeffizient ist gegeben durch das Integral über die Geschwindigkeitsautokorrelationsfunktion

$$C_{vv}(t) = \langle \vec{v}(0)\vec{v}(t) \rangle$$

→ Taylor-Kubo Gleichung (spezielle Form der Green-Kubo Relation)

Effektiver Diffusionskoeffizient
Aktive Brownsche Bewegung in 2D

$$D_{\text{eff}} = \frac{1}{2}\int_0^\infty dt \langle \vec{v}(0)\vec{v}(t)\rangle = \frac{1}{2}\int_0^\infty dt \langle v(0)v(t)\rangle\langle \vec{e}_h(0)\vec{e}_h(t)\rangle$$

$$= \frac{v_0^2}{2}\int_0^\infty dt \underline{\langle \vec{e}_h(0)\vec{e}_h(t)\rangle}$$

Richtugskorrelationfunktion

Aus der FP-Gleichung: $$\frac{\partial}{\partial t} p_\varphi(\varphi, t|\varphi', t) = \sigma_\varphi^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} p_\varphi(\varphi, t|\varphi', t')$$

erhält man für die Richtungskorrelation: $$\langle \vec{e}_h(0)\vec{e}_h(t)\rangle = e^{-\sigma_\varphi^2 t}$$

$$\boxed{D_{\text{eff}} = \frac{v_0^2}{2\sigma_\varphi^2}}$$

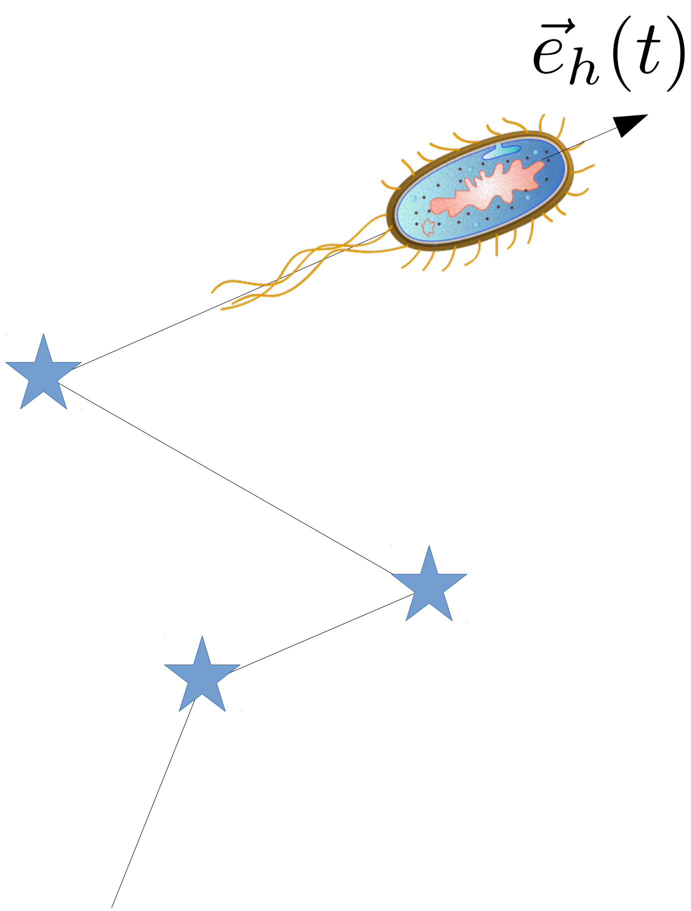
→ mit steigendem (Winkel-) Rauschen nimmt die Diffusion ab!

Effektive Diffusion
Aktive Brownsche Bewegung in 2D

Demonstration - Simulation

„Run & Tumble“ - Bewegung von Bakterien

- Persistente „Runs“ mit mittlerer Geschwindigkeit v_0 unterbrochen durch zufällige Reorientierungsereignisse „Tumbles“ (Annahme: Tumbles sehr kurz gegenüber Runs)



- Stochastische Tumbling-Ereignisse mit der Rate

$$\kappa = \tau^{-1}$$

- Exponentialverteilte „Run“-Dauern mit mittlerer Dauer τ (siehe 2-Zustands Markovprozess); Richtungskorrelation:

$$\langle \vec{e}_h(0)\vec{e}_h(t) \rangle = e^{-\kappa t}$$

$$\boxed{D_{\text{eff}} = \frac{v_0^2}{2\kappa} = \frac{1}{2} v_0^2 \tau}$$

τ - Korrelationszeit der Bewegungsrichtung

Informationstheorie

Eine Einleitung

Entropie und Information

Claude E. Shannon (1916-2001) → Vater der Informationstheorie:
Entropie als Maß für mittleren Informationsgehalt.

Wir betrachten Z verschiedene Zustände, über die insgesamt N Teilchen verteilt sind. Der Makrozustand ist dann die durch die Z Besetzungszahlen der einzelnen Zustände n_i vollständig definiert (Vgl VL Boltzmann Verteilung).

Es gilt

$$\sum_{i=1}^{Z} n_i = N \qquad\qquad W = \frac{N!}{n_1!n_2!\ldots n_i!}$$

Wir wollen nun erraten in welchem der W möglichen Mikrozustände sich das System befindet bei gegebenen Makrozustand (In welchem Zustand befindet sich jedes einzelne Teilchen?)

Problem: Wie oft müssen wir bei W gleich wahrscheinlichen Antworten mindestens raten, bis wir die richtige Antwort getroffen haben?

Entropie und Information

Antwort: Wenn nur *JA* oder *NEIN* Antworten (0 oder 1) erlaubt sind, brauchen wir mindestens $log_2 W$ Fragen!

Begründung: Die Anzahl der erforderlichen Fragen hängt davon ab, wie geschickt wir fragen. Die optimale Strategie, die minimale Anzahl der Fragen braucht, ist es wenn bei jeder Frage genau die Hälfte der verbleibenden Möglichkeiten ausgeschlossen wird.

Beispiel: Erraten eines der Felder eines Schachbretts

Methode a) Jedes einzelne Feld abfragen →Wir brauchen im Mittel 64/2=32 Fragen

Methode b) Fragen ob das Feld in einer der Hälften des verbliebenen Teils erhalten ist → Wir brauchen immer $log_2 64 = 6$ Fragen zum Ziel.

Allgemeine Deutung

N-malige Wiederholung eines Experiments, das Z mögliche Ereignisse E_i als Ausgang hat.

Beispiele:

- Messung des Zustands eines Teilchens mit Z möglichen Zuständen

- Würfeln mit einem Z-seitigen Würfel (bei symmetrischen Würfel sind alle p_i gleich)

- Lesen des nächsten Buchstaben eines gedruckten Textes mit einem Alphabet von Z Buchstaben.

Allgemeine Deutung

Wir wollen den Mikrozustand erraten, in dieser allgemeinen Deutung entspricht es dem Erraten des Ausgangs für jedes der N Experimente. Wir brauchen also $log_2 W$ - *JA/NEIN*-Fragen

Dabei sollen n_i Experimente den Ausgang E_i haben (Makrozustand)

$$p_i = \frac{n_i}{N} \qquad \sum_{i=1}^{Z} p_i = 1 \qquad n_i = N p_i$$

Makrozustand:

$$\{p_1, p_2, \ldots, p_Z, N\}$$

Allgemeine Deutung

Wir wollen nun $log_2 W$ als Funktion der Wahrscheinlichkeiten p_i ausdrücken.

Anmerkung: Wechsel der Basis des Logarithmus entspricht der Multiplikation mit einer Konstanten.

$$\log_2 W = \frac{1}{\ln 2} \ln W = \frac{1}{\ln 2} \left(\ln \frac{N!}{n_1! n_2! \ldots n_Z!} \right) = \frac{1}{\ln 2} \left(\ln N! - \sum_{i=1}^{Z} \ln n_i! \right)$$

Stirling-Formel

$$= \frac{1}{\ln 2} \left(N \ln N - \cancel{N} - \sum_{i=1}^{Z} n_i \ln n_i + \underbrace{\cancel{\sum_{i=1}^{Z} n_i}}_{= N} \right)$$

$$= \frac{1}{\ln 2} \left(N \ln N - \sum_{i=1}^{Z} n_i \ln n_i \right)$$

Allgemeine Deutung

$$\log_2 W = \frac{1}{\ln 2}\left(N\ln N - \sum_{i=1}^{Z} n_i \ln n_i\right)$$

Einsetzen der p_i:

$$= \frac{1}{\ln 2}\left(N\ln N - \sum_{i=1}^{Z} Np_i \ln Np_i\right)$$

$$= \frac{1}{\ln 2}\left(\cancel{N\ln N} - \cancel{N\ln N \sum_{i=1}^{Z} p_i} - N\sum_{i=1}^{Z} p_i \ln p_i\right), \quad \underbrace{\sum_{i=1}^{Z} p_i}_{=1}$$

$$\log_2 W = -\frac{N}{\ln 2}\sum_{i=1}^{Z} p_i \ln p_i$$

Die Anzahl der mindestens nötigen JA-NEIN-Fragen im Schnitt pro Experiment (bzw. pro Teilchen) ist gegeben durch

.

$$\frac{S}{N} = -\lambda \sum_{i=1}^{Z} p_i \ln p_i \qquad \lambda = \frac{1}{\ln 2} \approx 1.44 \text{ statt } \lambda = k_B$$

Shannon Entropie

Wir führen die **Shannon-Entropie** als Informationsmaß für eine beliebige Wahrscheinlichkeitsverteilung p_i ein:

$$\boxed{H = -\lambda \sum_i p_i \ln p_i = -\sum_i p_i \log_2 p_i}$$

Beispiel: Wir werfen eine Münze. Bevor wir schauen haben wir einen Mangel an Informationen. Danach also entsprechend ein Informationsgewinn („Maß der beseitigten Unsicherheit“)

$$p_Z = \frac{1}{2} \qquad H = \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} = -\log_2\frac{1}{2} = 1$$

$$p_K = \frac{1}{2}$$

Der Informationsgewinn ist also 1 bit (Einheit der Information)

→ Anzahl der JA-Nein-Fragen die man stellen muss um die gewünschte Information zu erhalten → bei Münzwurf nur eine.

Beispiel: 8-seitiger Würfel

Beispiel: Wurf mit einem 8-Seitigen symmetrischen Würfel:

$$H = -8 \cdot \frac{1}{8} \log_2 \frac{1}{8} \quad = -\log_2 \frac{1}{2^3} = 3$$

→ Es sind drei Fragen erforderlich:

$$\text{F1: } X > 4 \text{ ?} \qquad \text{A1: Nein}$$

$$\text{F2: } X > 2 \text{ ?} \qquad \text{A2: Ja}$$

$$\text{F3: } X = 4 \text{ ?} \qquad \text{A3: Nein} \qquad \rightarrow X = 3$$

Beispiel: 2 Würfel

Beispiel: Welche Augenzahl wird mit zwei Würfeln gleichzeitig gewürfelt.

Summe	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Möglich-keiten	1	2	3	4	5	6	5	4	3	2	1

Insgesamt 36 mögliche Mikrozustände aber nur 12 mögliche Makrozustände

$$N = 36 \to p_i = \frac{n_i}{36}$$

$$H = -\sum_{i=1} p_i \log_2 p_i = -\left(\frac{1}{36} \log_2 \frac{1}{36} + \frac{2}{36} \log_2 \frac{2}{36} + \ldots \right) = 3.27 \text{bits}$$

d.h. im Schnitt 3,27 (0,1)-Fragen pro Experiment notwendig.