

# Computerphysik WS 2017/2018

Prof. Dr. Petra Imhof, FU Berlin

## Hausarbeit (50 Punkte)

17. Januar 2018

Abgabe bis **07.02.2018** 23:55 Uhr

*Hinweis: Zur Lösung von linearen Gleichungssystemen können Sie `np.linalg.solve` verwenden.*

*Für Zufallszahlen verwenden Sie `numpy.random`.*

*Erlaubt sind außerdem die üblichen "simplen" numpy Funktionen `numpy.log()`, `numpy.sin()`, `numpy.cos()`, `math.sqrt()`, `math.factorial()`, `numpy.arange()`, `numpy.exp()`, ... und natürlich `matplotlib.pyplot`*

*Analytische Ableitungen sind nur in Aufgabe 3 gestattet.*

### Aufgabe 1: Hyperkugeln (15 Punkte)

Die Zustandsfunktion eines Systems aus  $N$  Teilchen mit Masse  $m$  in einem Volumen  $V$  mit konstanter totaler Energie  $E$  ist gegeben als die Zustandssumme

$$\Omega = \int_a^b dq^{3N} dp^{3N} \delta(E - H(\vec{q}, \vec{p})) \quad (1)$$

wobei  $a, b$  die Begrenzungen des Volumens angeben, z.B. ein (Hyper-)würfel mit Kantenlänge  $L = a - b$ .  $H$  ist dabei eine Funktion, die einen Energiewert in Abhängigkeit von den Positionen  $\vec{q}$  und den Impulsen  $\vec{p}$  der  $N$  Teilchen liefert.

Wenn die Teilchen nicht wechselwirken und sonst kein Potential herrscht, ist die Energie nur durch den kinetischen Teil  $E = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$  gegeben. Mit quantisierten Impulsen  $p_k = \frac{\pi \hbar}{L} n_k$  kann man so im Prinzip alle möglichen Energiezustände des Systems "abzählen" bzw. aufsummieren. Bei kontinuierlichen Zuständen liefert das Integral  $\Omega$  die Anzahl Zustände.

Um die Anzahl der möglichen Zustände zu einem gegebenen Energiewert zu berechnen, kann man die Oberfläche einer Hyperkugel in  $3N$  Dimensionen heranziehen, bzw. für die Anzahl Zustände  $\leq E$  das Volumen einer solchen Hyperkugel.

Das Volumen einer  $n$ -dimensionalen Einheits-Hyperkugel (Radius=1) ist definiert als

$$V_n(1) = \frac{2\pi^{n/2}}{n\Gamma(n/2)} \quad (2)$$

wobei  $\Gamma$  die Gamma-Funktion ist.

Diese hat folgende Eigenschaften

$$\Gamma(1) = 1 \quad (3)$$

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi} \quad (4)$$

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \quad (5)$$

$$\Gamma(n+1) = n! \text{ fuer } n \in \mathbb{N} \quad (6)$$

Daraus ergibt sich eine allgemeine Gleichung zur Volumenberechnung:

$$V_n(1) = \frac{\sqrt{\pi}^n}{\frac{n}{2} \cdot \frac{n-2}{2} \cdot \frac{n-4}{2} \dots 1}, \text{ falls } n \text{ gerade} \quad (7)$$

$$V_n(1) = \frac{\sqrt{\pi}^{n-1}}{\frac{n}{2} \cdot \frac{n-2}{2} \cdot \frac{n-4}{2} \dots \frac{1}{2}}, \text{ falls } n \text{ ungerade} \quad (8)$$

$$(9)$$

Die Oberfläche einer Hyperkugel kann aus dem Volumen berechnet werden nach

$$O_n(1) = n \cdot V_n(1) \quad (10)$$

(a) (7 Punkte) Exakte Volumina und Oberflächen

- (1 Punkt) Implementieren sie eine Funktion, welche das Volumen einer beliebigen  $n$ -dimensionalen Einheits-Hyperkugel berechnet.
- (1 Punkt) Implementieren sie eine Funktion, welche die Oberfläche einer beliebigen  $n$ -dimensionalen Einheits-Hyperkugel berechnet.
- (2 Punkte) Berechnen Sie das Volumen und die Oberfläche für eine  $n$ -dimensional Einheits-Hyperkugel für  $n=1,2,\dots,20$  und plotten Sie beides in geeigneter Weise. Für wieviele Dimensionen finden Sie das größte Volumen, die größte Oberfläche?
- (3 Punkte) Der Verlauf der Volumina und Oberflächen (in Ihrem plot) erweckt den Anschein, dass das Volumen/die Oberfläche nicht den maximal möglichen Wert erreicht, wenn man sich nicht-ganzzahlige Dimensionen vorstellt. Nehmen Sie **den Punkt maximalen Volumens/maximaler Oberfläche, sowie "rechts" und "links" vom Maximum** jeweils 1, 2, und 3 Punkte aus Ihren Berechnungen (also Paare von Dimension  $n$  und Volumen  $V$ , bzw, Dimension  $n$  und Oberfläche  $O$ ) und Interpolieren Sie hierdurch ein Polynom geeigneter Ordnung. Bestimmen Sie für die so gefundenen stetigen Funktionen (die Interpolationspolynome) die Maxima.

(b) (8 Punkte) Genäherte Volumina und Oberflächen

Bei genügend vielen diskreten Energiezuständen ist die Hyperkugel eine sehr gute Näherung für deren Anzahl. Entsprechend ist eine feine Diskretisierung in Hyperwürfel eine Möglichkeit das Volumen der Hyperkugel zu approximieren, indem gezählt wird, wieviele Hyperwürfel sich innerhalb der Hyperkugel befinden.

- (1 Punkt) Implementieren Sie eine Funktion, welche das Volumen einer beliebigen  $n$ -dimensionalen Einheits-Hyperkugel durch Approximation über finite Elemente (Hyperwürfel) berechnet.

- (2 Punkte) Bestimmen Sie so die Volumina der Hyperkugeln für  $n=2,\dots,8$  für verschiedene Diskretisierungen, d.h. mit verschiedenen großen/vielen Mini-Hyperwürfel. Verwenden Sie  $h=10, 100, \dots, 10^7$  Hyperwürfel und vergleichen sie die erhaltenen Werte mit denen Ihrer exakten Berechnungen. Plotten Sie den Fehler gegen die Anzahl Evaluationspunkte (Hyperwürfel).
- (3 Punkte) Bestimmen Sie die Volumina der Hyperkugeln für  $n=2,\dots,8$  mittels Monte-Carlo Verfahren. Verwenden Sie dafür jeweils  $h=10, 100, \dots, 10^7$  Evaluationspunkte, bzw. so viele wie in der entsprechenden finite-Elemente-Berechnung. Da es sich um ein Zufallsexperiment handelt, führen Sie jede Monte-Carlo Rechnung 5mal durch und nehmen den Mittelwert dieser 5 Berechnungen als Wert für das Volumen. Vergleichen sie wieder die erhaltenen Werte mit den exakt berechneten Volumina.
- (2 Punkte) Vergleichen Sie den Fehlerverlauf des finite-elemente Verfahrens und des Hit-or-Miss (Monte-Carlo) Verfahrens. Wie erklären Sie Ihre Beobachtung?

*Hinweis: Die finite-Elemente-Rechnung dauert recht lange, wenn man keine besonderen Tricks benutzt. Daher sollen nur feste Anzahlen von Evaluationspunkten benutzt werden. Wieviel davon auf welche Dimension verteilt werden, kann daher für jedes  $n$  unterschiedlich ausfallen, bzw. bei gleichmäßiger Verteilung können nicht alle Evaluationspunkte ausgenutzt werden. Protokollieren Sie daher die tatsächliche benutzte Anzahl und verwenden Sie diese zur Bewertung des Fehlerverlaufs.*

## Aufgabe 2: Konformationsraum (20 Punkte)

Der Konformationsraum biologischer Strukturen (wie zum Beispiel Enzymen) ist hochkomplex. In einigen Fällen allerdings ist es möglich den Konformationsraum durch einige wenige Variablen (collective variables CVs) zu beschreiben. Zu untersuchen sei hier der hypothetische Konformationsraum eines Enzyms, welcher sich durch zwei CVs ( $CV_1$  und  $CV_2$ ) darstellen lässt. Für beide Variablen gelte ein Wertebereich von  $[0, 1]$ .

Durch verschiedene Analysen konnten mehrere metastabile Zustände des Enzyms (hier: Teilflächen des durch  $CV_1$  und  $CV_2$  aufgespannten Konformationsraums) gefunden werden. Die Grenzen dieser metastabilen Zustände konnten durch die folgenden 6 Funktionen wieder gegeben werden:

$$CV_2(CV_1) = 0.5 \quad (11)$$

$$CV_2(CV_1) = 1 - CV_1 \quad (12)$$

$$CV_2(CV_1) = \sin(2 \cdot \pi \cdot CV_1) + 0.5 \quad (13)$$

$$CV_2(CV_1) = CV_1^{\frac{1}{3}} - 0.6 \quad (14)$$

$$CV_2(CV_1) = \frac{2}{3 \cdot CV_1 + 0.1} \quad (15)$$

$$CV_2(CV_1) = -CV_1^2 + 0.3 \quad (16)$$

(a) (4 Punkte) Visualisierung des von  $CV_1$  und  $CV_2$  aufgespannten Konformationsraums.

- (0.5 Punkte) Stellen Sie den von  $CV_1$  und  $CV_2$  aufgespannten Konformationsraum mit seinen metastabilen Zuständen grafisch durch einen *Line Plot* dar.
- (2 Punkte) Berechnen Sie die Positionen der Schnittpunkte der 6 Funktionen untereinander und mit den Rändern des Konformationsraums mit einem Ihnen aus der Vorlesung bekannten Verfahren. Geben Sie die Schnittpunkte in einer Tabelle aus.
- (0.5 Punkte) Heben Sie die Schnittpunkte in Ihrem zuvor erstellten Plot grafisch durch einen *Scatter Plot* hervor.
- (1 Punkt) Wie viele (einzigartige) Schnittpunkte und metastabile Zustände zählen Sie?

(b) (4 Punkte) Untersuchung der metastabilen Zustände.

- (4 Punkte) Berechnen Sie die Flächeninhalte aller metastabilen Zustände mit einem Ihnen aus der Vorlesung bekannten Verfahren. Geben Sie die Flächeninhalte in einer Tabelle aus. Überprüfen Sie ihr Ergebnis, in dem Sie die Summe aller Teilflächen mit der Gesamtfläche vergleichen.

Hinweis: Beschriften Sie die metastabilen Zustände in Ihrer Grafik aus der vorigen Teilaufgabe mit der *matplotlib.pyplot* Funktion *text* um kenntlich zu machen, welcher Flächeninhalt zu welcher Fläche gehört.

(c) (2 Punkte) Zuordnung von Zuständen im Konformationsraum.

- (2 Punkte) Definieren Sie eine Funktion, welche einem beliebig platzierten Punkt im von  $CV_1$  und  $CV_2$  aufgespannten Konformationsraum einen metastabilen Zustand zuordnet.

Hinweis: Sollte sich der platzierte Punkt auf einer der Trennungslinien oder einem der Schnittpunkte befinden, soll er allen angrenzenden metastabilen Zuständen zugeordnet werden.

(d) (1 Punkt) Monte-Carlo-Integration

- (1 Punkt) Wie viele Punkte müssen Sie zufällig in dem von  $CV_1$  und  $CV_2$  aufgespannten Konformationsraum platzieren, damit der Betrag des maximalen, relativen Fehlers der so bestimmten Flächen im Vergleich zu den Flächen aus der vorigen Teilaufgabe kleiner 50 %, 40 %, 30 %, 20 %, 10 % und 5 % ist?

Hinweis: Verwenden Sie die *numpy* Funktion *random.uniform* zur Erzeugung der Punkte.

(e) (5 Punkte) Bewegung durch den Konformationsraum (I)

- (1 Punkt) Definieren Sie eine Funktion, die einen beliebigen Punkt im von  $CV_1$  und  $CV_2$  aufgespannten Konformationsraum erhält und diesen in eine zufällige Richtung verschiebt. Die Ränder des Konformationsraums seien reflektierend. Der Abstand zwischen der Anfangs- und Endposition des Punktes (direkt oder "über Bande") soll als weiterer Eingabeparameter festgelegt werden. Die Endposition des Punktes soll ausgegeben werden.

Hinweis: Verwenden Sie hier und im Folgenden die *numpy* Funktion *random.uniform* zur Verschiebung des Punktes.

- (2 Punkte) Im Folgenden soll nicht mehr jede Verschiebung des Punktes akzeptiert werden. Definieren Sie eine Funktion, die einen Punkt mit bedingter Wahrscheinlichkeit durch den von  $CV_1$  und  $CV_2$  aufgespannten Konformationsraum bewegt. Hierbei soll gelten, dass die neue Position des Punktes nur mit einer Wahrscheinlichkeit von  $\frac{A_{neu}}{A_{alt}}$  akzeptiert wird, d.h. Bewegungen innerhalb eines metastabilen Zustands sowie Übergänge von kleineren in größere metastabile Zustände werden immer akzeptiert, während Übergänge von größeren in kleinere metastabile Zustände mit geringerer Wahrscheinlichkeit akzeptiert werden. Wie zuvor soll der Abstand zwischen Anfangs- und Endposition des Punktes (direkt oder "über Bande", d.h. bei Reflektion am Rand ist der Abstand der gesamt zurückgelegte Weg: hin zum Rand plus weg vom Rand) als weiterer Eingabeparameter festgelegt werden und die Endposition des Punktes soll ausgegeben werden.

Hinweis: Sollte sich der Anfangs- bzw. Endpunkt auf einer Trennungslinie oder einem Schnittpunkt befinden, so soll immer die größte angrenzende Fläche verwendet werden.

- (1 Punkt) Plotten Sie die Bewegung eines beliebig platzierten Punktes durch den von  $CV_1$  und  $CV_2$  aufgespannten Konformationsraum mit den beiden zuvor definierten Funktionen. Die Distanz zwischen den Positionen soll jeweils 0.05 betragen und es sollen 1000 Verschiebungen vorgenommen werden. Was fällt ihnen auf?
- (1 Punkt) Erweitern Sie ihre Funktion für die bedingte Verschiebung eines Punktes, so dass mehrere nacheinander erfolgende Verschiebungen vorgenommen werden können. Die Anzahl an Verschiebungen soll dabei als weiterer Eingabeparameter festgelegt werden. Zählen Sie außerdem die Anzahl an Übergängen zwischen den einzelnen metastabilen Zuständen in einer Matrix, d.h. Zelle  $[i, j]$  der Matrix gibt an wie oft der Punkt vom metastabilen Zustand  $i$  in den metastabilen Zustand  $j$  verschoben wurde. Die Übergangsmatrix soll nun die einzige Ausgabe darstellen.

Hinweis: Verschiebungen innerhalb eines metastabilen Zustand sollen nicht gezählt werden.

(f) (2 Punkte) Bewegung durch den Konformationsraum (II)

- (2 Punkte) Nutzen Sie die letzte Funktion aus der vorigen Teilaufgabe um drei Punkte ( $P_1 = [0.05, 0.1]$ ,  $P_2 = [0.99, 0.4]$  und  $P_3$  beliebig) mit 1000, 10000 und 100000 Schritten durch den von  $CV_1$  und  $CV_2$  aufgespannten Konformationsraum zu bewegen. Die Distanz soll erneut 0.05 betragen. Geben Sie die Matrizen mit den Übergängen aus.

(g) (2 Punkte) Auswertung der Bewegung durch den Konformationsraum

- (0.5 Punkte) Definieren Sie eine Funktion, die aus einer Übergangsmatrix eine Adjazenzmatrix  $\mathbf{A}$  bestimmt. Alle Einträge in der Übergangsmatrix gleich 0 sind auch in der Adjazenzmatrix 0, während alle Einträge größer 0 in der Übergangsmatrix in der Adjazenzmatrix 1 sind.
- (0.5 Punkte) Definieren Sie eine Funktion, die aus einer Übergangsmatrix eine Gradmatrix  $\mathbf{D}$  bestimmt. Der Grad ist dabei definiert als die Anzahl an metastabilen Zuständen, die von einem bestimmten metastabilen Zustand aus erreicht wurden, z.B. wurden während der Bewegungen Übergänge vom metastabilen Zustand  $i$  nach  $j$ ,  $k$  und  $l$  beobachtet, ist der Grad des metastabilen Zustands  $i$  gleich 3. Die Grade der metastabilen Zustände sollen sich auf der Diagonalen von  $\mathbf{D}$  befinden, während alle anderen Zellen gleich 0 sind.
- (1 Punkt) Letztlich soll geklärt werden, ob bei den Bewegungen durch den Konformationsraum (mit den drei verschiedenen Startpunkten und unterschiedlichen Anzahlen an Schritten) alle metastabilen Zustände durchlaufen wurden. Bestimmen Sie dazu den jeweils zweitkleinsten Eigenwert der Laplace-Matrizen  $\mathbf{L}$  ihrer Übergangsmatrizen, wobei gilt  $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{A}$ . Ist der zweitkleinste Eigenwert größer 0 wurden alle metastabilen Zustände durchlaufen. Kommentieren Sie Ihre Ergebnisse.

### Aufgabe 3: Reaktion-Diffusion (15 Punkte)

Hier sollen Sie die Reaktions-Diffusions-Dynamik auf einer Oberfläche untersuchen. Die Oberfläche sei durch ein  $24 \times 24$  -Gitter beschrieben, wobei jede Zelle  $0.2 \text{ mm} \times 0.2 \text{ mm}$  breit ist.

(a) (6 Punkte) Diffusion einer Partikel-Spezies A

- (1 Punkt) Implementieren Sie die Lösung einer 2-dimensionalen Diffusionsgleichung mittels Einschritt-Eulerverfahren.
- (2 Punkte) Berechnen Sie die Diffusion einer Spezies mit Diffusionskonstante  $D = 0.025$  auf der Oberfläche mit absorbierende Randbedingungen, d.h. die äußersten Zellen haben immer eine Besetzung von  $n_{i,j}(t) = 0$  Partikeln. Als Startwerte wird in der Mitte der Oberfläche Substanz eingetropt. Dies simulieren Sie durch eine Anzahl Partikel  $n_{i,j}(0) = N \text{ mol}$  in den mittleren vier Zellen. Berechnen Sie für  $N = 10, 100, \dots, 10^8$  wie lange es dauert bis sich keine ( $< 0.0001 \text{ mol}$ ) Partikel mehr auf der Oberfläche befinden. Verwenden Sie einen Zeitschritt von  $dt = 0.1$ .
- (1 Punkte) Plotten Sie die Verteilung auf der Oberfläche zu Beginn und zu zwei weiteren verschiedenen Zeitpunkten der Simulation (z.B. durch eine geeignete heatmap).
- (2 Punkte) Plotten Sie die benötigten Zeitschritte bis zur Leerung der Oberfläche gegen die Anfangszahl Partikel und bestimmen Sie durch einen geeigneten Fit den funktionalen Zusammenhang zwischen Anfangsmenge und Zeit zur Leerung.

(b) (9 Punkte) Diffusion und Reaktion zweier Partikel-Spezies A und B

- (1 Punkt) Erweitern Sie Ihre Implementierung der Diffusionssimulation so, dass zwei Spezies betrachtet werden können. Die Diffusionskonstanten seien  $D_A = 0.5$  und  $D_B = 0.25$
- (1 Punkt) Führen sie außerdem folgenden Störterm ein, welcher die Reaktion simulieren soll: Wenn sich in einer Zelle mehr als zwei Partikel der Sorte A befinden, wird aus zwei **mol** A-Partikeln ein **mol** B-Partikel. **Beispiel: In der Zelle sind 5 mol A und 1 mol B. Dann sind nach der Reaktion dort 3 mol A und 2 mol B.** Protokollieren Sie die Gesamtzahl an Partikeln A und B, die sich auf der Oberfläche befinden.
- (4 Punkte) Simulieren Sie das Diffusions-Reaktionsverhalten auf der Oberfläche. Benutzen Sie diesmal periodische Randbedingungen, d.h. ein Teilchen, das "link" heraus wandert, gelangt "rechts" auf gleicher Höhe wieder hinein. Verwenden Sie einen Zeitschritt von  $dt = 0.01$ . Initieren Sie die Simulation wieder mit jeweils  $N = 10, 100, \dots, 10^8 \text{ mol}$  Partikeln der Sorte A in den mittleren vier Zellen. Beenden Sie die Simulation, wenn sich die Anzahl der Partikel A und der Partikel B nicht mehr ( $< 0.0001 \text{ mol}$ ) ändert (steady-state).
- (1 Punkte) Plotten Sie getrennt für A und B die Verteilung auf der Oberfläche zu Beginn und zu Ende der Simulation (z.B. durch eine geeignete heatmap).
- (2 Punkte) Plotten Sie die Zeit bis zum Erreichen des steady-state gegen die Anzahl Startpartikel. Erklären Sie Ihre Beobachtung.