

# Giant Diffusion bei Brownschen Teilchen und Burstenden Neuronen

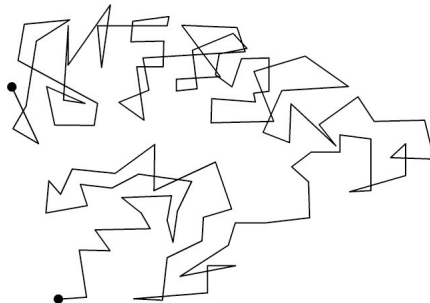
Richard Kullmann

11. Juni 2019

# Klassische Brownsche Bewegung

- ▶ (unregelmäßige) Bewegung von Teilchen in viskosem Medium
- ▶ Langevin-Gleichung:

$$m\dot{v} = -\lambda v + \xi(t)$$



Random Walk eines Brownschen Teilchens<sup>1</sup>

<sup>1</sup><https://www.spektrum.de/lexika/images/physik/fff1491.jpg>

# Aktive Brownsche Bewegung

- ▶ beschreibt Bakterien/Zellen, die sich aus eigenem Antrieb fortbewegen
- ▶ Langevin-Gleichung:

$$\dot{v} = f(v) + g(v)\xi(t)$$



E. coli - Bakterium<sup>1</sup>

<sup>1</sup><https://www.biocote.com/wp-content/uploads/2016/07/Five-Facts-about-E-coli-mg.jpg>

# Größen von Interesse

- ▶ mittlere Geschwindigkeit (Feuerrate):

$$\langle v \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle x(t) - x(0) \rangle}{t} \left( = \frac{\langle N(t) \rangle}{t} \right)$$

- ▶ Diffusionskoeffizient:

$$D_{eff} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2}{2t} \left( = \frac{\langle N^2(t) \rangle - \langle N(t) \rangle^2}{2t} \right)$$

- ▶ Fano-Faktor:

$$F = \frac{\langle \Delta N^2(t) \rangle}{\langle N(t) \rangle} = \frac{2D_{eff}}{\langle v \rangle}$$

# Aktive Brownsche Teilchen

# Grundlagen: Bewegungsgleichung

- ▶ nichtlineare Langevin-Gleichung:

$$\dot{x} = v$$

$$\dot{v} = f(v) + g(v)\xi(t)$$

mit

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2Q\delta(t-t')$$

- ▶ ABP: negativer Reibungsterm  $f(v)$  bei betraglich geringen Geschwindigkeiten
- ▶ z.B. über bistabiles Geschwindigkeitspotential

# Theorie: Modell

- ▶ Betrachtung an einfachem Modell mit  $g(v) = 1$  und  $f(v) = v - v^3 + F^1$ :

$$\dot{x} = v$$

$$\dot{v} = -\frac{dU(v)}{dv} + \xi(t)$$

wobei

$$U(v) = \frac{1}{4}v^4 - \frac{1}{2}v^2 - Fv$$

- ▶ symmetrisch unter Inversion von  $x, v, F$

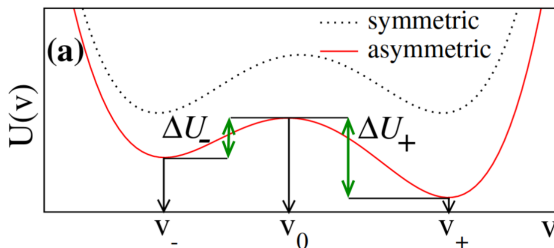
$$\rightarrow \langle v(F) \rangle = -\langle v(-F) \rangle \quad \text{und} \quad D_{\text{eff}}(F) = D_{\text{eff}}(-F)$$

---

<sup>1</sup>Benjamin Lindner und Ernesto M. Nicola, "Critical Asymmetry for Giant Diffusion of Active Brownian Particles," *Physical Review Letters* 101, 2008.

# Theorie: Geschwindigkeitspotential

- Form von  $U(v)$ :



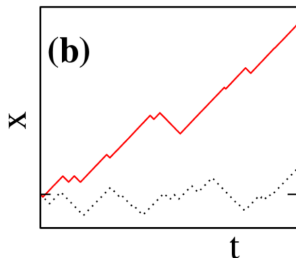
Geschwindigkeitspotential im vereinfachten Modell

- 2 Minima bei  $v_-$  und  $v_+$  mit zugehörigen Barrieren  
 $\Delta U_{\pm} = U(v_0) - U(v_{\pm})$



# heorie: Geschwindigkeitspotential

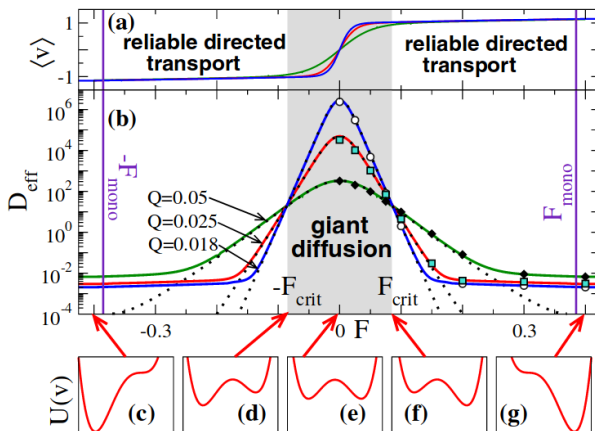
- ▶ bistabiles Geschwindigkeitspotential ruft bidirektionale Bewegung hervor



x-t-Diagramm bei symmetrischem und asymmetrischem Geschwindigkeitspotential

- ▶ Asymmetrie führt zu nichtverschwindendem  $\langle v \rangle$

# Simulation



Bestimmung von Geschwindigkeit und Diffusionskoeffizient

# Zwei-Zustands-System

- ▶ geringes Rauschen: Verhalten des Systems durch Übergänge zwischen Zuständen bestimmt
- ▶ für Übergangsraten wird Arrhenius-Gleichung angenommen:

$$r_{\pm} = r_{0,\pm} e^{-\frac{\Delta U_{\pm}}{Q}}$$

- ▶  $r_-$ : rückwärts zu vorwärts,  $r_+$  umgekehrt,  $Q$ : Rauschintensität
- ▶  $D_{\text{eff}}$  aus Raten und  $\Delta v = v_+ - v_-$ :

$$D_{\text{eff}} = \frac{(\Delta v)^2 r_+ r_-}{(r_+ + r_-)^3}$$

# Zwei-Zustands-System

- ▶ gesucht:  $F_{crit}$
- ▶ nahe Schnittpunkt:  $D_{eff}(Q, F) = D_{eff}(F)$
- ▶ Einsetzen:

$$\begin{aligned}
 D_{eff} &= \frac{(\Delta v)^2 r_{0,+} r_{0,-} e^{-\frac{\Delta U_+ + \Delta U_-}{Q}}}{\left( r_{0,+} e^{-\frac{-\Delta U_+}{Q}} + r_{0,-} e^{-\frac{-\Delta U_-}{Q}} \right)^3} \\
 &= \frac{(\Delta v)^2 r_{0,+} r_{0,-}}{\left( r_{0,+} e^{-\frac{3\Delta U_+ - \Delta U_+ - \Delta U_-}{3Q}} + r_{0,-} e^{-\frac{3\Delta U_- - \Delta U_+ - \Delta U_-}{3Q}} \right)^3} \\
 &= \frac{(\Delta v)^2 r_{0,+} r_{0,-}}{\left( r_{0,+} e^{-\frac{2\Delta U_+ - \Delta U_-}{3Q}} + r_{0,-} e^{-\frac{2\Delta U_- - \Delta U_+}{3Q}} \right)^3}
 \end{aligned}$$

# Zwei-Zustands-System

- Grenzfall  $Q \rightarrow 0, \Delta U_+ > \Delta U_-$ :

$$D_{\text{eff}} = \frac{(\Delta v)^2 r_{0,+}}{r_{0,-}^2} e^{-\frac{\Delta U_+ - 2\Delta U_-}{Q}}$$

- bei  $\left| \frac{d}{dF} \left( \frac{(\Delta v)^2 r_{0,+}}{r_{0,-}^2} \right) / \frac{d}{dF} D_{\text{eff}} \right| \ll 1$ :

$$\Delta U_+ = 2\Delta U_-$$

- symmetrisches Problem  $\rightarrow$  2. Schnittpunkt bei

$$\Delta U_- = 2\Delta U_+$$

- $\Delta U_{\pm} = 2\Delta U_{\mp}$

# Brownsche Teilchen im gekippten periodischen Potential

# Theorie: Bewegungsgleichungen

- ▶ Langevin-Gleichung:

$$\dot{x} = v$$

$$\dot{v} = -\gamma v - U'(x) + \sqrt{2\gamma kT} \xi(t)$$

mit<sup>1</sup>

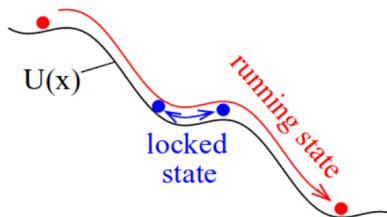
$$U(x) = -Fx - d \cos(x)$$

- ▶  $\gamma$ : Reibungskoeffizient,  $\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \delta(t - t')$ ,  $d = 1$

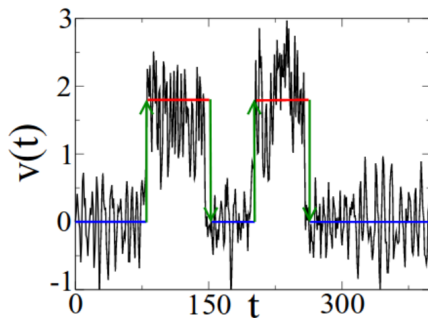
---

<sup>1</sup>Benjamin Lindner und Igor M. Sokolov, "Giant diffusion of underdamped particles in a biased periodic potential," *Physical Review E* 93, 2016.

# Theorie - Potential



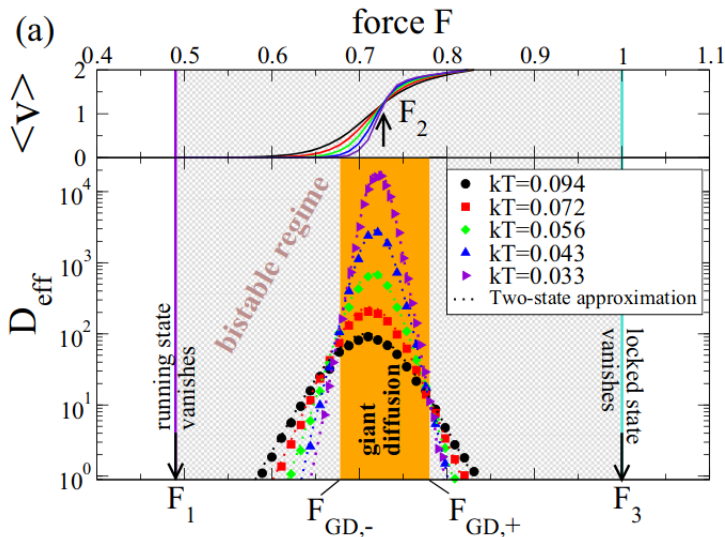
- Bewegung von Kugeln in einem gekippten Kosinuspotential



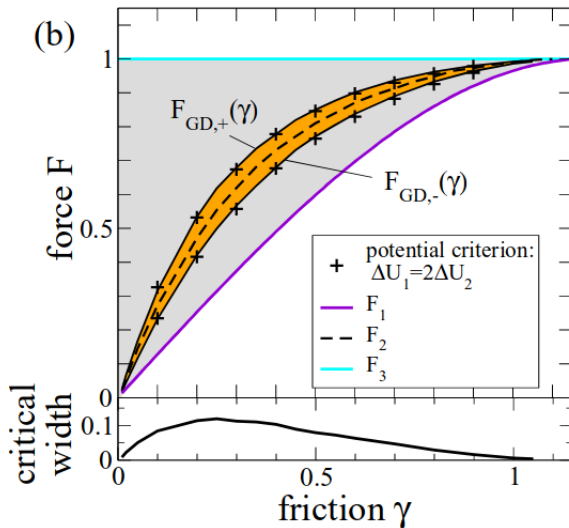
- Bistabilität der Geschwindigkeit



## Simulation: Diffusionskoeffizient



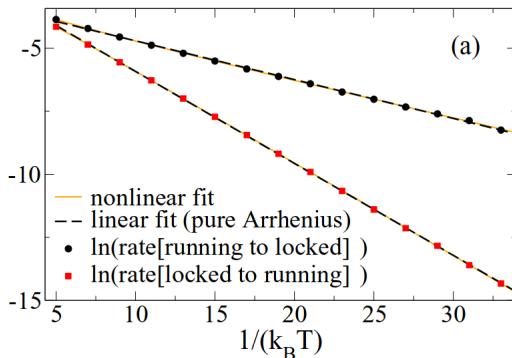
## Simulation - kritischer Bereich



# Berechnung effektiver Potentialbarrieren

- Annahme: Übergangsraten zeigen Kramers-ähnliches Verhalten:

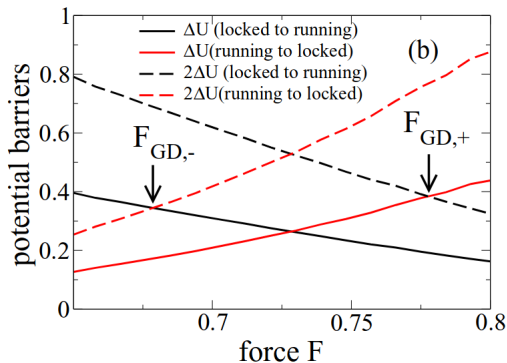
$$r \propto T^\alpha e^{-\frac{\Delta U}{kT}}$$



- Fits für  $\alpha = 0$  und  $\alpha \neq 0$  liefern ähnliche Barrieren

# Berechnung effektiver Potentialbarrieren

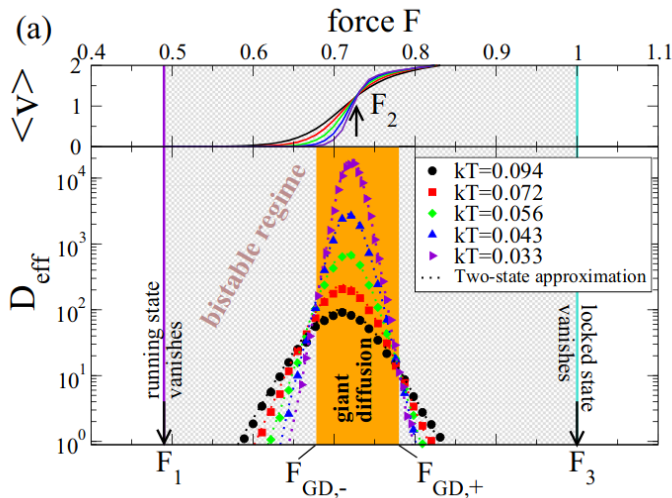
- Plotten von  $\Delta U$  und  $2\Delta U$  für verschiedene Kräfte



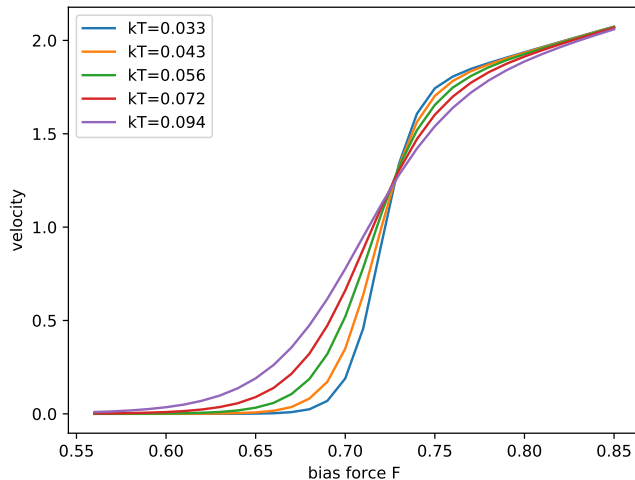
- Schnittpunkte etwa bei  $F = 0.68$  und  $F = 0.78$

# Berechnung effektiver Potentialbarrieren

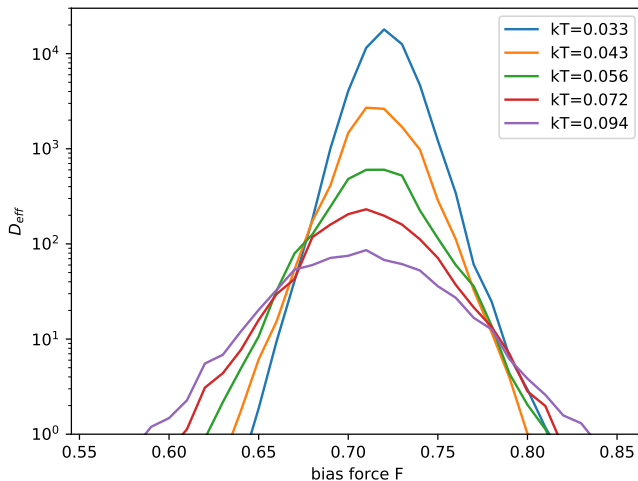
## ► Vergleich mit Simulation



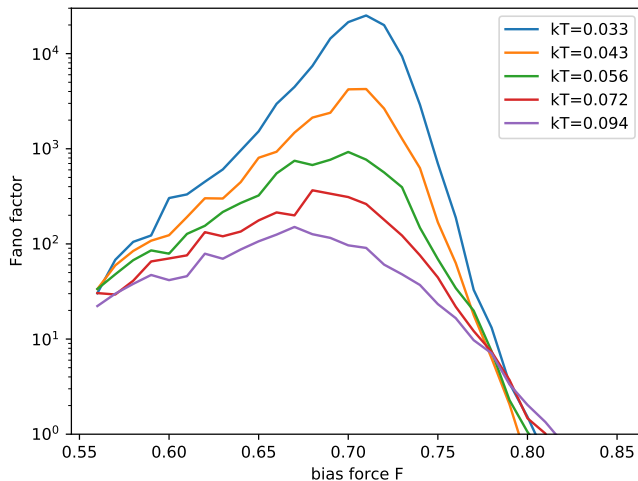
# Reproduktion: Geschwindigkeit



# Reproduktion: Diffusionskoeffizient



# Reproduktion: Fano - Faktor





# Zwei-Zustands-System

- ▶ gesucht: mögliche Schnittpunkte im Fano-Faktor

$$F = \frac{2D_{\text{eff}}}{\langle v \rangle}$$

- ▶ Mittelwert der Geschwindigkeit:

$$\langle v \rangle = v_+ \frac{r_-}{r_+ + r_-}$$

- ▶ Einsetzen der Übergangsraten:

$$\begin{aligned} F &= \frac{2v_+ r_+}{(r_+ + r_-)^2} = \frac{2v_+ r_{0,+} e^{-\frac{\Delta U_+}{Q}}}{\left( r_{0,+} e^{-\frac{\Delta U_+}{Q}} + r_{0,-} e^{-\frac{\Delta U_-}{Q}} \right)^2} \\ &= \frac{2v_+ r_{0,+}}{\left( r_{0,+} e^{-\frac{2\Delta U_+ - \Delta U_+}{2Q}} + r_{0,-} e^{-\frac{2\Delta U_- - \Delta U_+}{2Q}} \right)^2} \end{aligned}$$

# Zwei-Zustands-System

- ▶ Grenzfall  $Q \ll 1 \rightarrow$  zwei Lösungen
- ▶  $\Delta U_+ > \Delta U_-:$

$$F = \frac{2v_+ r_{0,+}}{r_{0,-}^2} e^{-\frac{\Delta U_+ - 2\Delta U_-}{Q}} \rightarrow \Delta U_+ = 2\Delta U_-$$

- ▶  $\Delta U_+ < \Delta U_-:$

$$F = \frac{2v_+}{r_{0,+}} e^{-\frac{\Delta U_+ - 2\Delta U_+}{Q}} \rightarrow \Delta U_+ = 0$$

- ▶ eine Barriere muss verschwinden  $\rightarrow$  Rand des Gültigkeitsbereichs der Zwei-Zustands-Theorie erreicht
- ▶ rechter Schnittpunkt bleibt erhalten, linker verschiebt sich weiter nach links

# Nervenmodell

# Übergang Brownsche Teilchen → Nervenmodell

	<b>mechanical interpretation</b>	<b>neuroscience interpretation</b>
	position, phase	spike count
	mean velocity	firing rate
	diffusion coefficient	Fano factor x rate
	Velocity power spectrum	Spike train power spectrum
	temperature	inverse number of channels

# Theorie: Modell

- ▶  $I_{Na,p} + I_K$ -Modell:

$$C\dot{V} = I - g_L(V - E_L) - g_{Na}m_\infty(V)(V - E_{Na}) - g_Kn(V - E_K) + \sqrt{2D}\xi(t)$$
$$\dot{n} = (n_\infty(V) - n)/\tau(V)$$

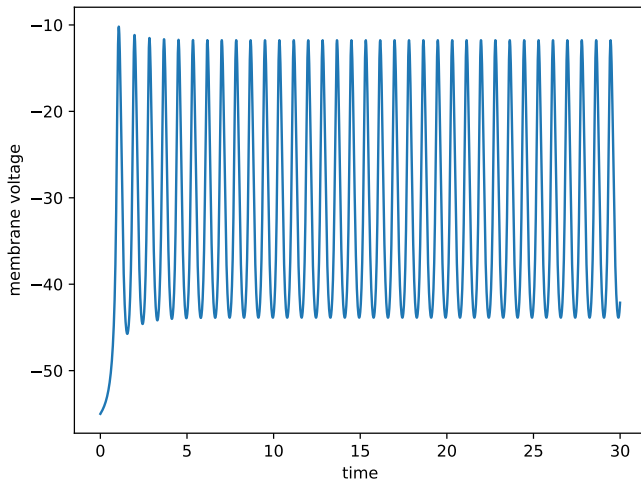
- ▶ Steady-State-Aktivierungsfunktion:

$$f_\infty(V) = \frac{1}{1 + \exp\{(V_{1/2} - V)/k\}}$$

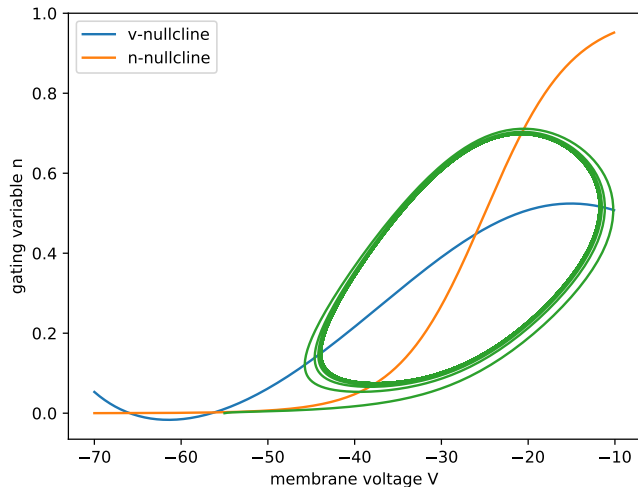
- ▶ hierbei ist k die Steigung, sowie:

$$f_\infty(V_{1/2}) = 1/2$$

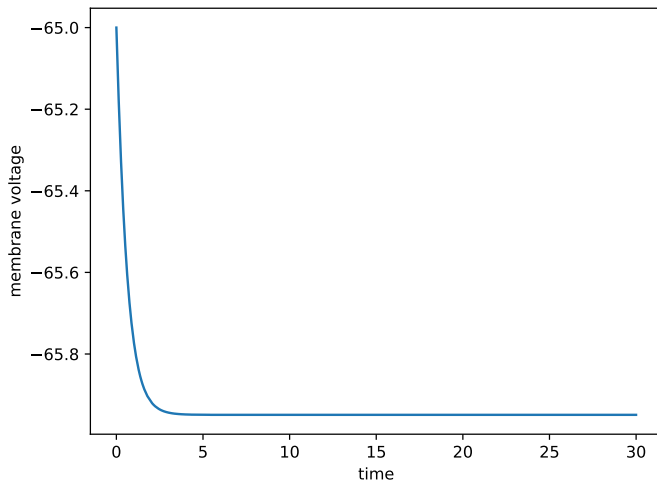
# Deterministisches Verhalten: Bursten



# Deterministisches Verhalten: Bursten

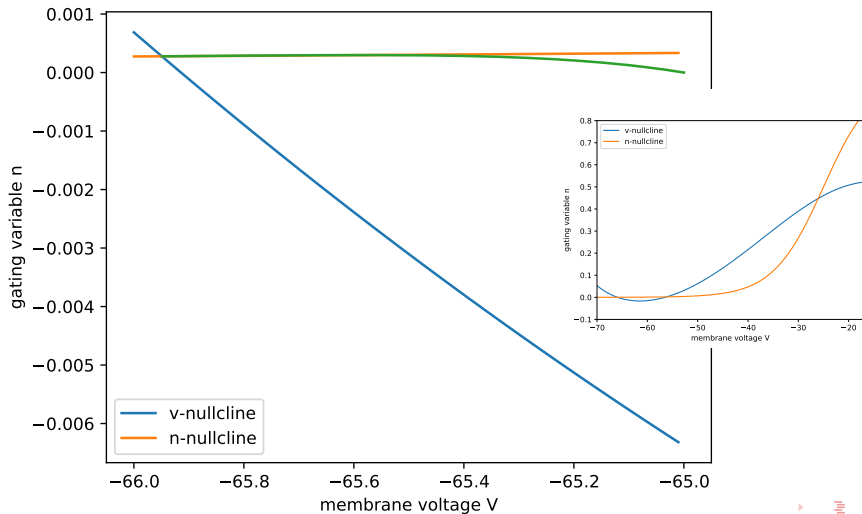


# Deterministisches Verhalten: Ruhen

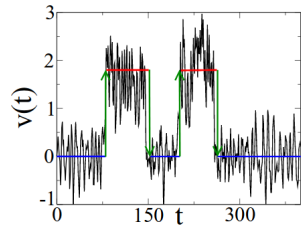
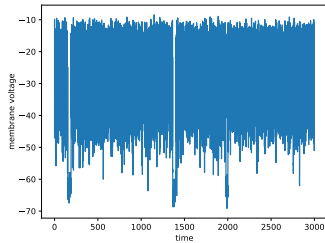
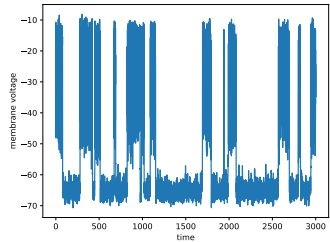
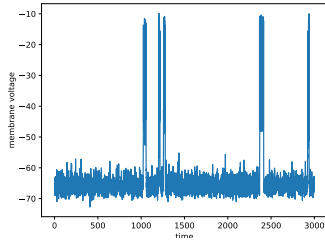




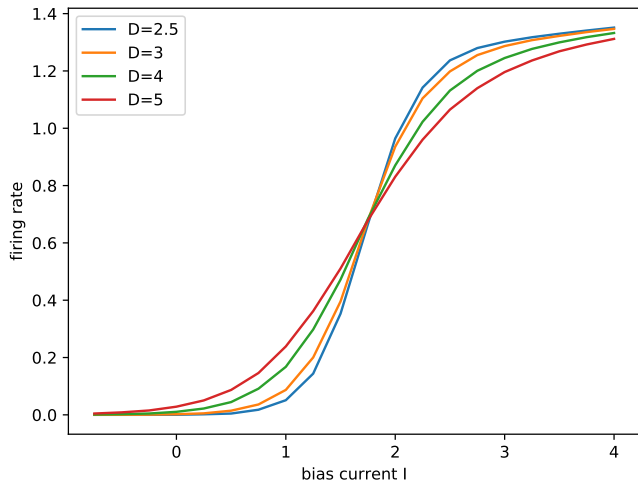
# Deterministisches Verhalten: Ruhen



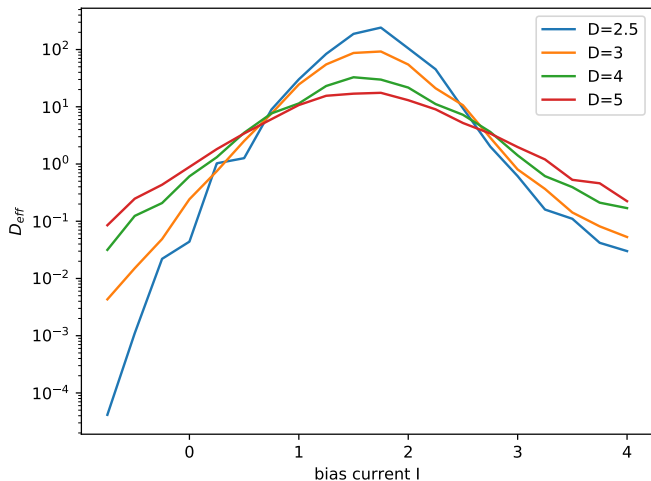
# Verhalten unter Rauschen



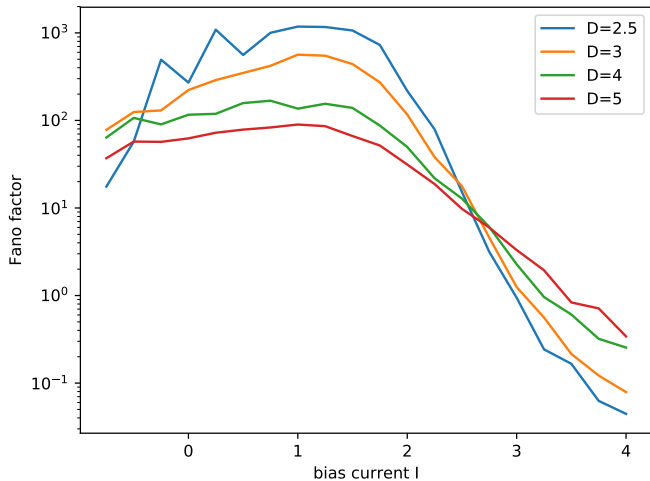
# Simulation: Feuerrate



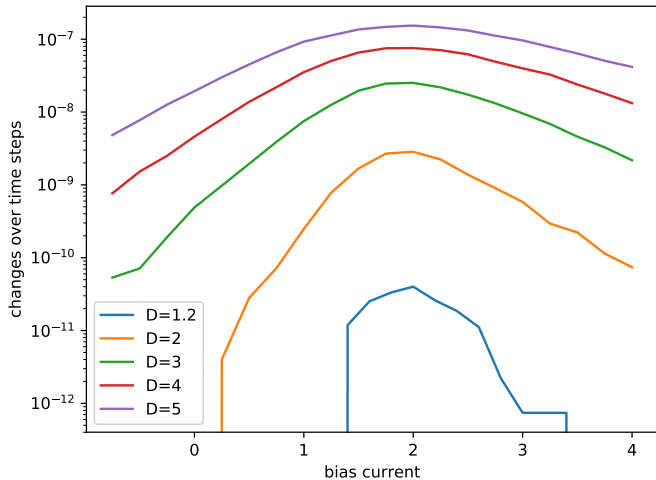
# Simulation: Diffusionskoeffizient



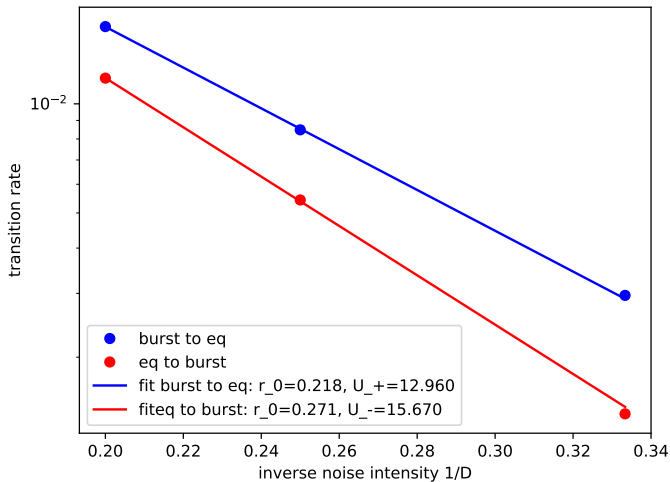
# Simulation: Fano-Faktor



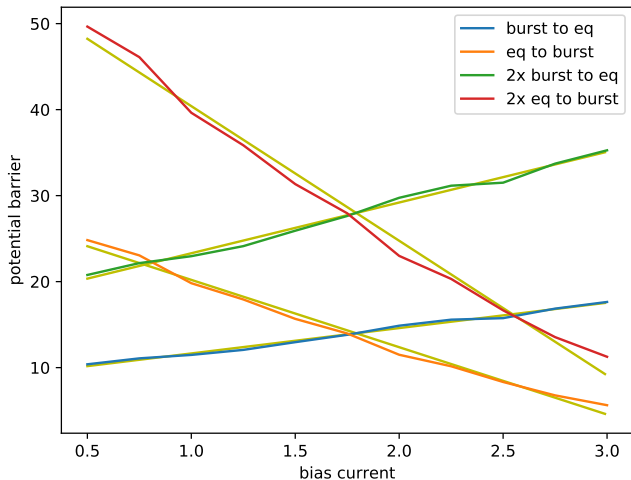
# Anzahl der Übergänge



# Arrhenius-Fit



# Barrieren für verschiedene Ströme





# Wiederholung: Zwei-Zustands-System

- Übergangsraten:

$$r_{\pm} = r_{0,\pm} e^{-\frac{\Delta U_{\pm}}{Q}}$$

- aus Fits:

$$r_{0,\pm} = \text{const}$$

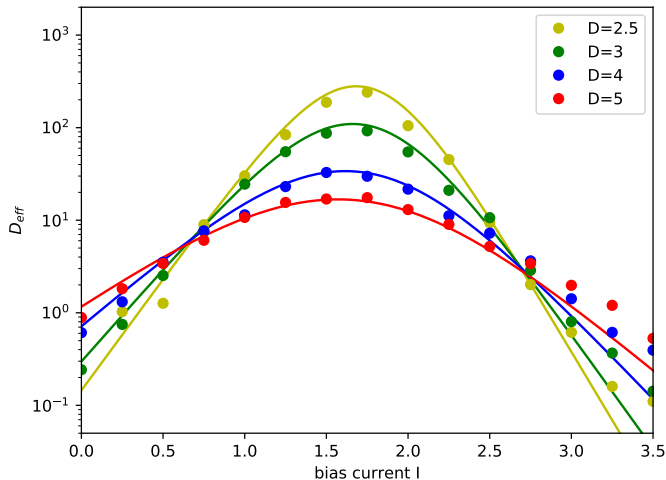
$$\Delta U_{\pm} = a_{\pm} \cdot I + b_{\pm}$$

- $D_{\text{eff}}$  und  $F$  aus Raten und  $\Delta v = v_{+} - v_{-}$ :

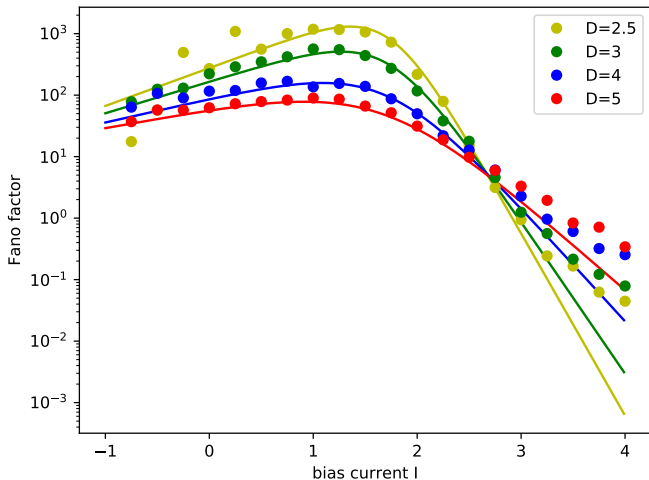
$$D_{\text{eff}} = \frac{v_{+}^2 r_{+} r_{-}}{(r_{+} + r_{-})^3}$$

$$F = \frac{2v_0 r_{+}}{(r_{+} + r_{-})^2}$$

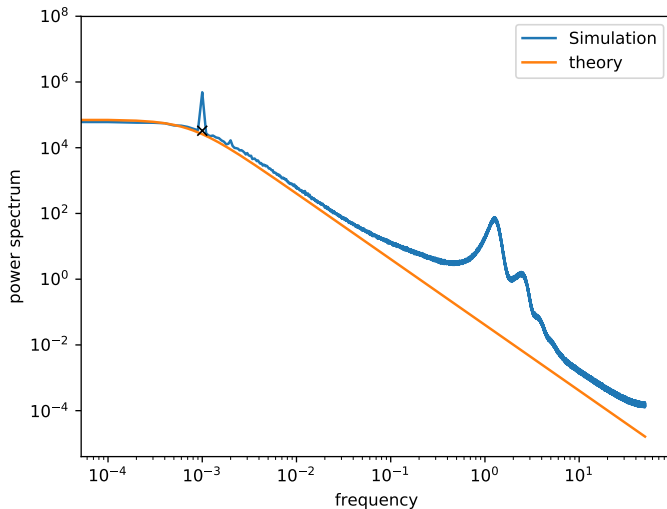
# Vergleich mit Zwei-Zustands-Modell: $D_{eff}$



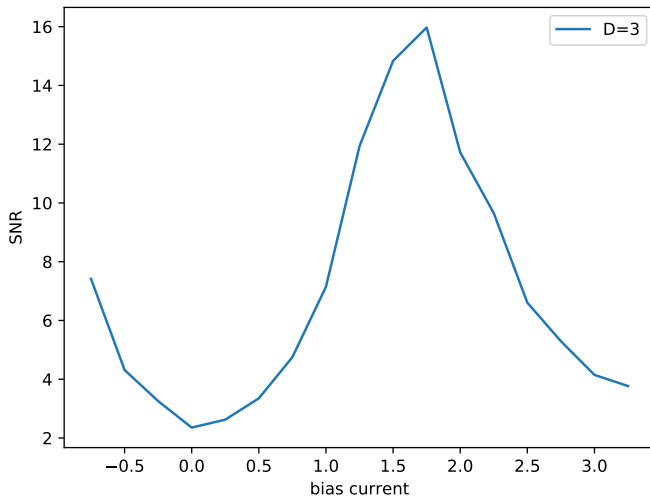
# Vergleich mit Zwei-Zustands-Modell: $F$



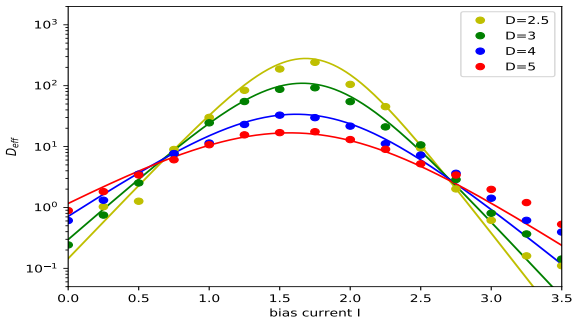
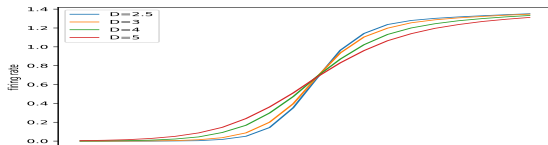
# Spektrum mit schwachem periodischen Signal



# Spektrum mit schwachem periodischen Signal



# Vergleich mit $D_{eff}$ , Feuerrate



# Zusammenfassung und Ausblick

- ▶ analog zu Brownschen Teilchen wurde im Nervenmodell ein Bereich gefunden, in dem Giant Diffusion auftritt
- ▶ kritische Punkte, an denen  $D_{eff}$  von Rauschen unabhängig
- ▶ Zwei-Zustands-Theorie liefert gute Beschreibung
- ▶ als nächstes: Untersuchung der Abhängigkeit des SNR von Rauschintensität