

# 3D Data Processing in Structural Biology

תרגיל 3

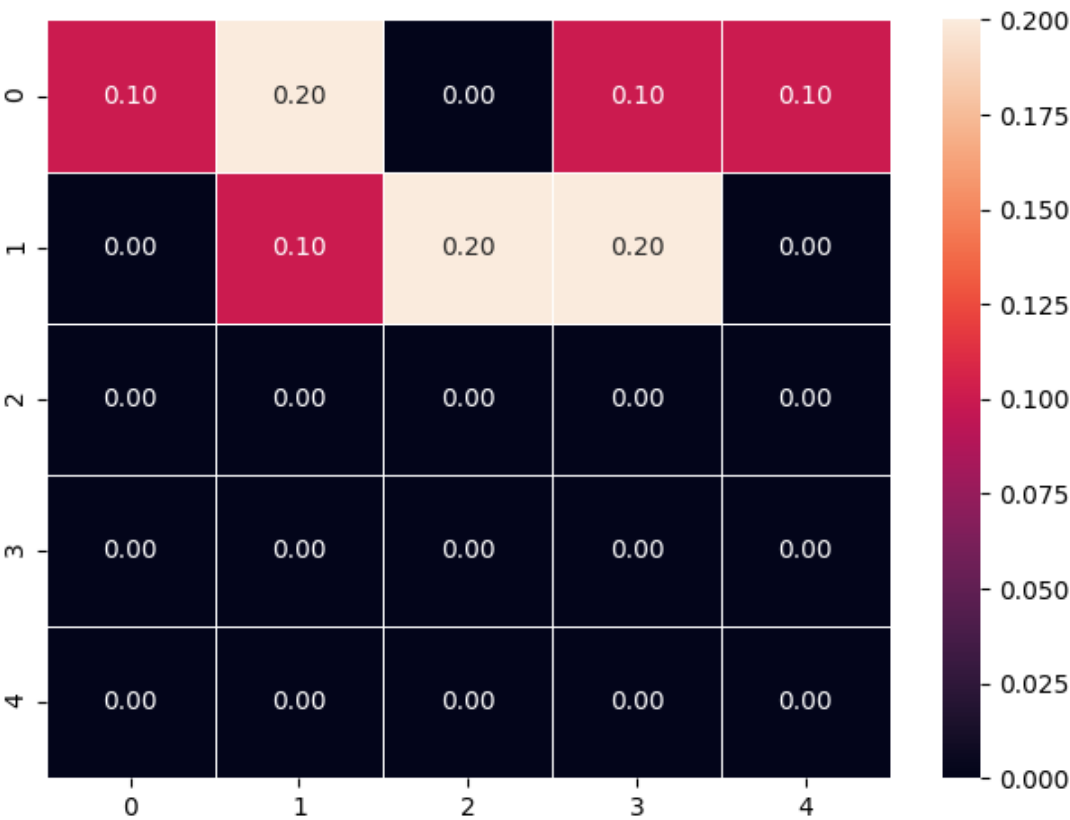
מגישים:

- בר מלינרסקי – ת"ז 318189982
- רחל בן המוזג - ת"ז 300880143

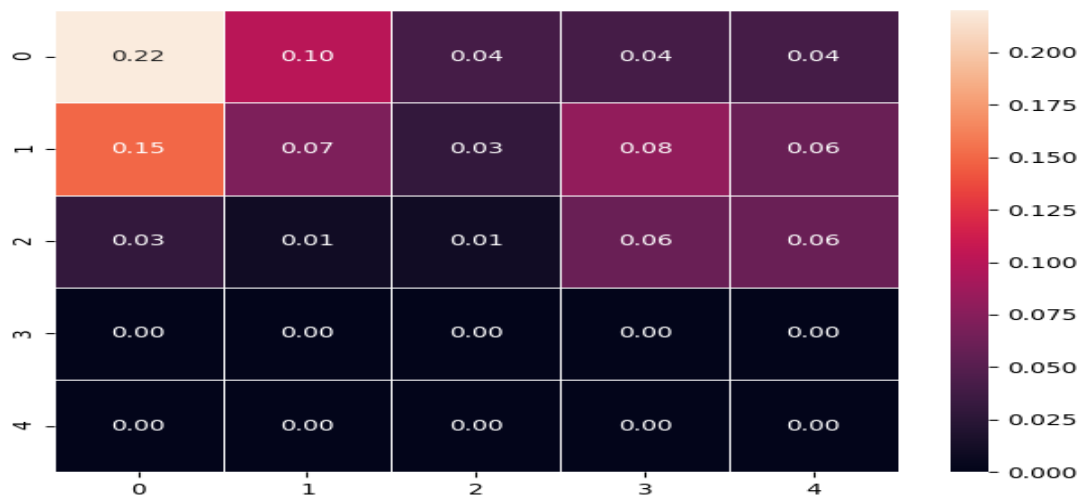
חלק א

2.

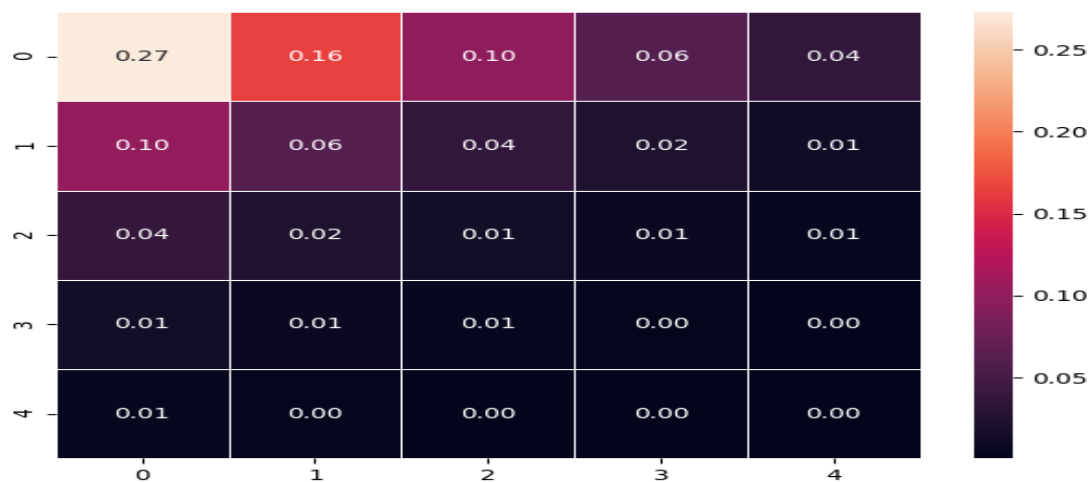
m=10



m=100

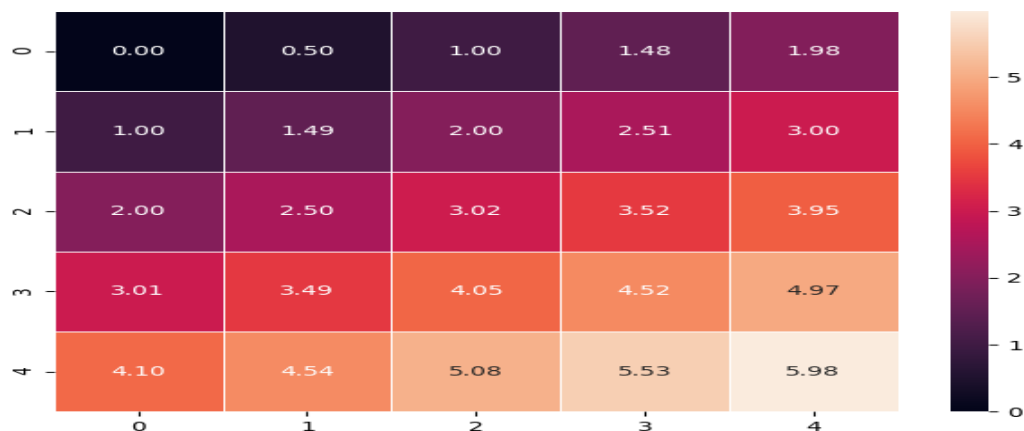


m=500,000



3) ככל שיש יותר איטרציות תדירות ההמצאות בנקודת עם האנרגיה הנמוכה ביותר גדלה. זאת מכיוון שההסתברות לעבור אליה גדולה יותר (אנרגיה נמוכה) והגיוני שההתכנסות תהיה לקונפיגורציה הזו. בנוסף התדירות של שאר הקונפיגורציות (בעיקר אלה באלות האנרגיה הגבוהה) שואפת לאפס וזאת משום שגם אם ביקרנו בהן מספר קטן של פעמים אז החלוקה במ משאיפה אותן לאפס.

(4)

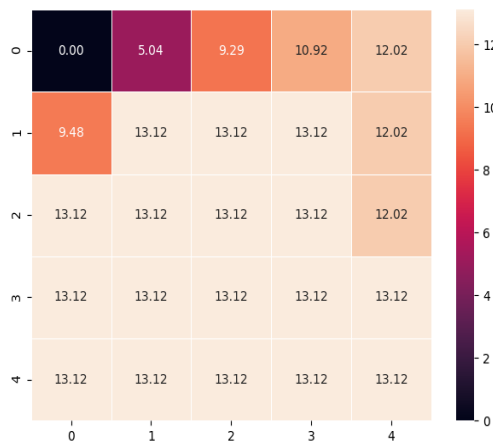


(5) ההבדל בין עמודות עוקבות היינו 0.5 ובין שורות עוקבות כ1. הסיבה לכך היא חישוב האנרגיה (שמשפיע על הסיכוי לקבלת הצעד) שנותן משקולת של  $1 * \text{אינדקס השורה}$  ו-  $0.5 * \text{אינדקס העמודה}$ . מכיוון  $k_B T = 1$  אז לוג על הביטוי מבטא בדיוק את ההפרש הזה (+) ההפרשים הקטנים של ההסתברות למעבר בין מצבים).

(6) מכיון שהמספרים פה קטנים מוסיפים קבוע כדי לקבל התפלגות "יפה" יותר. השימוש ב- $\log(1+x)$  מפעיל  $\log(1+x)$  כש- $x$  קטן מאוד -  $\log(x+1) = 0$  לעומת  $\log(x) = -\infty$

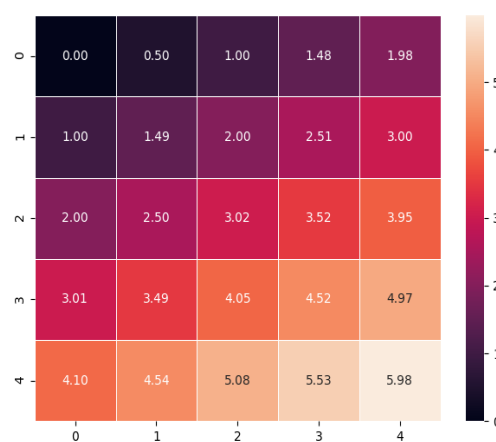
(7)

$k_B T = 0.1$

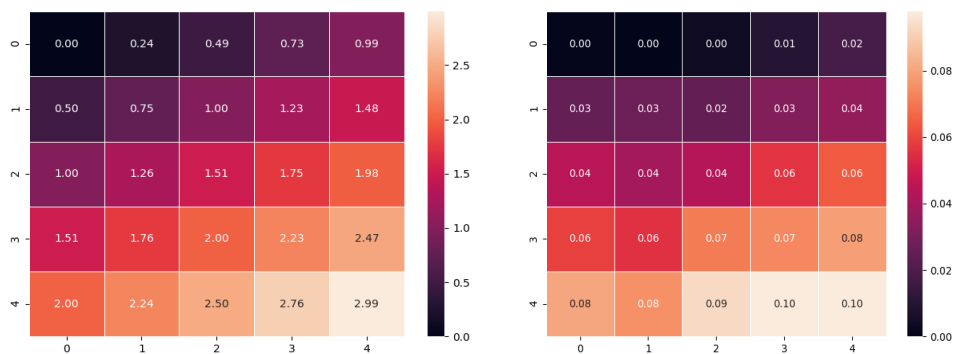


$k_B T = 2$

$k_B T = 1$



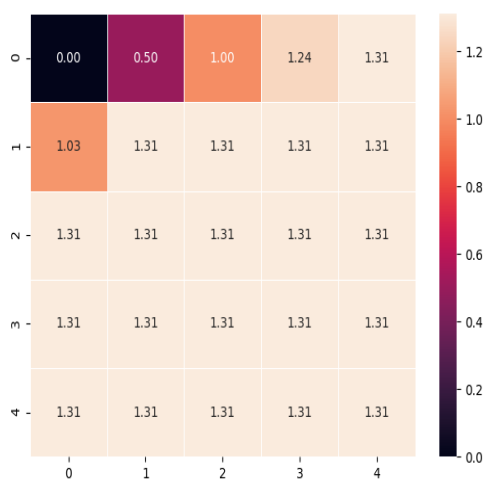
$k_B T = 50$



הביטוי  $k_b T$  הוא ביחס הפוך לכל הביטוי (נמצא במונה) ולכן ניתן לראות את ההשפעה של על הפרשי האנרגיה שבאים לידי ביטוי ה  $k_b T=1$ . לדוגמא ב  $k_b T=2$  כל הערכים הם בערך חצי מהערך המקורי. עבור ערכים קטנים של  $k_b T = 0.1$  נוביל להגדלה (משמעותית) של ההסתברות של קונפיגורציות עם אנרגיה נמוכה. לעומת זאת, ב  $k_b T = 50$  מקטינים את הפרש האנרגיות (הדלטה) ולכן ההסתברות שואפת להיות הסתברות אחידה (או עם הפרשים קטנים).

.8

$k_b T=0.1$

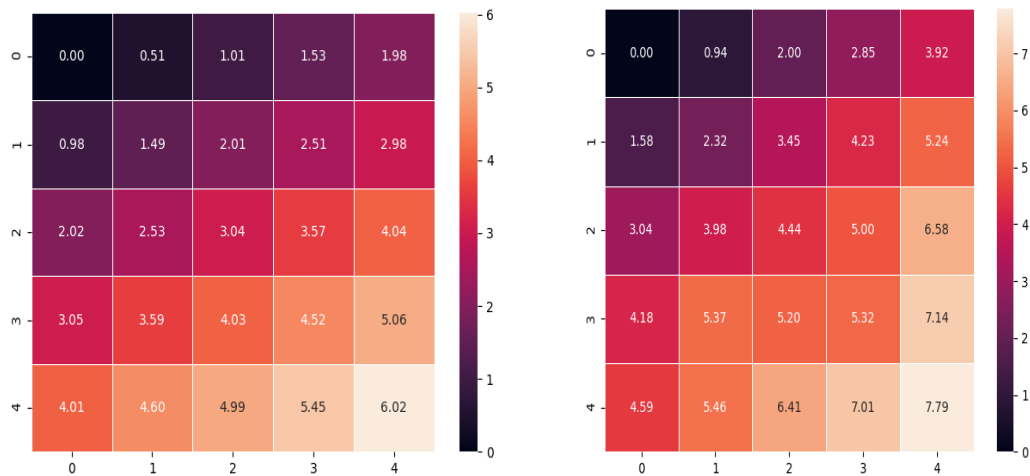


$k_b T=2$

$k_b T=1$



$k_b T=50$



9. עבור m גדול אנו שואפים לבoltzmann distribution

$$Z = \sum_i \exp\left(\frac{-E_i}{k_B T}\right) \quad p_i = \frac{\exp(-E_i/k_B T)}{Z}$$

$$(-E_o, o) - (-E_c)$$

$$\forall i. \log(\max(p)) - \log(p_i) = \frac{(-E_o, o) - (-E_c)}{k_B T}$$

התוצאות מזכירות את התשובה של שאלה 4 :  $k_B T = 1$  - זה למשוואה שקיבלנו.

10. ב  $k_B T = 0.1$  ההתפלגות נראת שונה וישנה קפיצת מדרגה. הסיבה לכך שהערכים נמוכים מתבדרת פונקציה החלוקה (או שואפת ל0) והסתברות כמעט בכל הקונפיגורציות הינה אפס (מאוד קרובה). לעומת ב  $k_B T$  האחרים במקרה זה למרות המ הגדול לא נגיע לכל הקונפיגורציות.

11.

force eq = (1, 0.5)