

IMMAGINI E RIFLESSIONI TESI

bignozzi.1855163

September 2024

1 GRAFO

Allora la scelta per il grafo, per semplicità di scrittura è stato quello di fare dei legami solo e solo se il raggio di interazione è minore di un certo valore. Come si fa a trovare la threshold migliore per il raggio in questo modello? Si runna il modello al fine di minimizzare i MAE sui residui ogni volta con un raggio diverso. Il modello che ottiene il mae minore è quello che meglio descrive il tutto. Inoltre in questo modo è possibile ottenere anche il miglior grafo senza alcun tipo di vincolo. Prima di predire i beta factor per davvero (con autovalori e autovettori) avrei bisogno di utilizzare i parametri corretti e per temperatura Kb ecc.

2 Matrice di kirchoff

La matrice di Kirchhoff (o laplaciana) rappresenta un'analogia con una rete elastica in cui le connessioni tra i nodi (atomi) descrivono le interazioni elastiche. Questa matrice codifica il modo in cui ogni nodo è collegato agli altri, e attraverso i suoi autovalori e autovettori, si può studiare come le vibrazioni collettive (modi normali) si propagano attraverso il sistema. Autovalori e autovettori della matrice di Kirchhoff: Gli autovalori della matrice di Kirchhoff descrivono le frequenze naturali di vibrazione del sistema. Gli autovettori rappresentano i corrispondenti modi normali di vibrazione, cioè come ogni nodo (atomo) si muove in un determinato modo di vibrazione. Quelli a bassa frequenza corrispondono alle vibrazioni collettive del sistema, quelli ad alta frequenza sono fluttuazioni locali

3 Calcolo correlazione

Risolvi l'equazione differenziale:

$$\gamma \dot{x}_i = -g \sum_j K_{ij} x_j + \sqrt{2\gamma k_B T} \xi_i(t) \quad (1)$$

$$\mathbf{x}(t) = e^{-\mu K t} \left\{ \mathbf{x}(0) + \sqrt{\frac{2k_B T}{\gamma}} \int_0^t ds e^{-\mu K s} \xi(s) \right\} \quad (2)$$

$$C(t) = \langle \mathbf{x}(0) \mathbf{x}^\top(t) \rangle \quad (3)$$

$$C(t) = e^{-\mu \mathbf{K} t} C(0) \quad (4)$$

$$C(0) = \langle \mathbf{x}(0) \mathbf{x}^\top(0) \rangle \quad (5)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda} \mathbf{U}^\dagger \quad (6)$$

$$C_{ij}(t) = \frac{3k_B T}{g} \sum_{k=2}^N \frac{u_i(k) u_j(k)}{\lambda(k)} e^{-\lambda(k)t} \quad (7)$$

4 Calcolo risposta

$$R(t) = \frac{C(t)}{C(0)} \quad (8)$$

$$\mathbf{R}(t) = e^{-\mu \mathbf{K} t} \quad (9)$$

$$R_{ij}(t) = - \left\langle \frac{\partial \ln P_s(x)}{\partial x_j(t)} x_i(0) \right\rangle \quad (10)$$

$$R_{ij}(t) = \sum_{k=1}^N u_i(k) u_j(k) e^{-\lambda(k)t} \quad (11)$$

images/2m10Residual Correlation C_{ij} for i = 22 as a function of j at time index 0.png

5 2M0Z

6 2M10

7 3LNX

8 3LNY

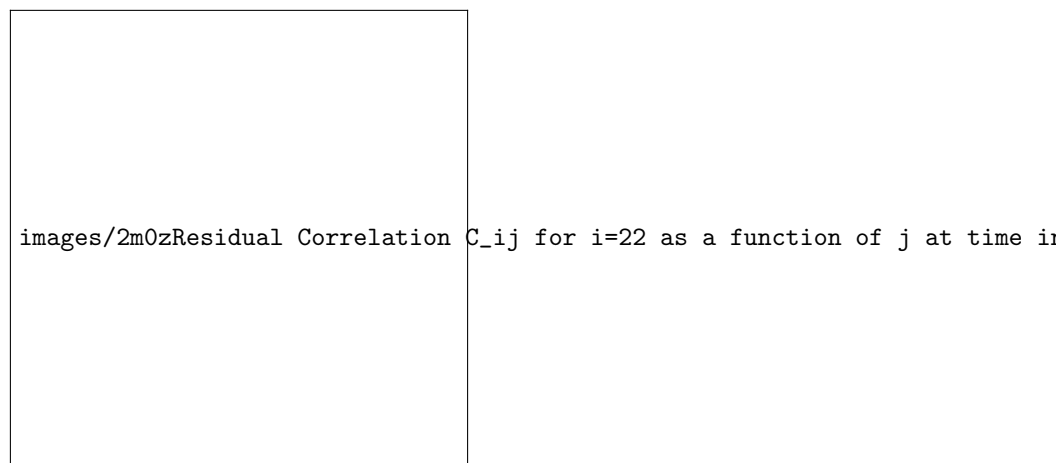


Figure 1: Correlazione

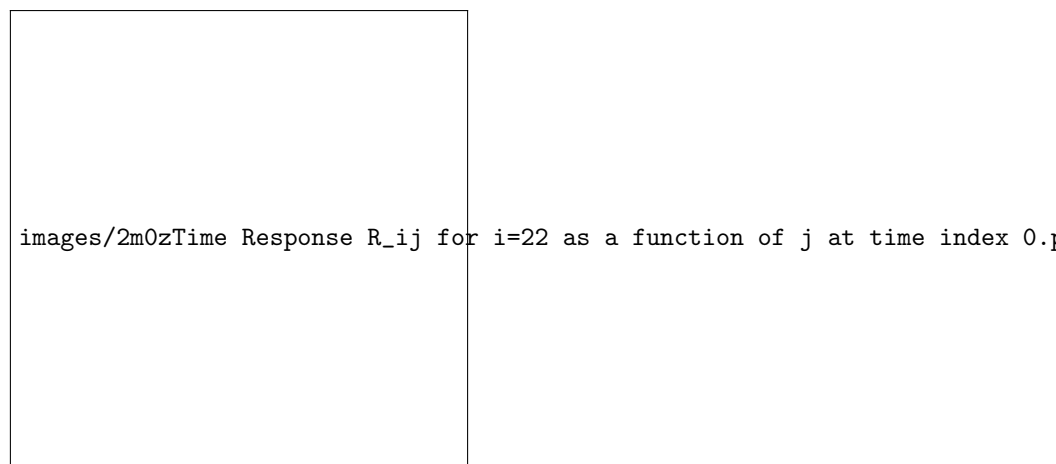


Figure 2: Risposta

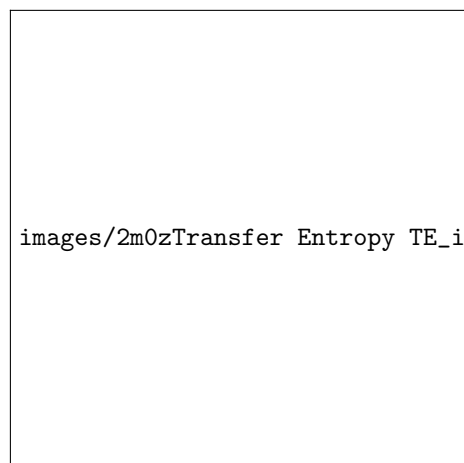


Figure 3: Transfer Entropy

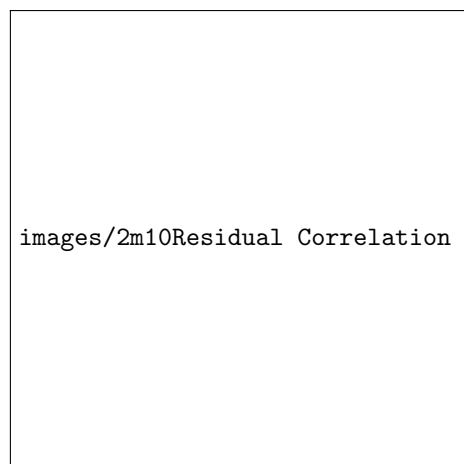


Figure 4: Correlazione

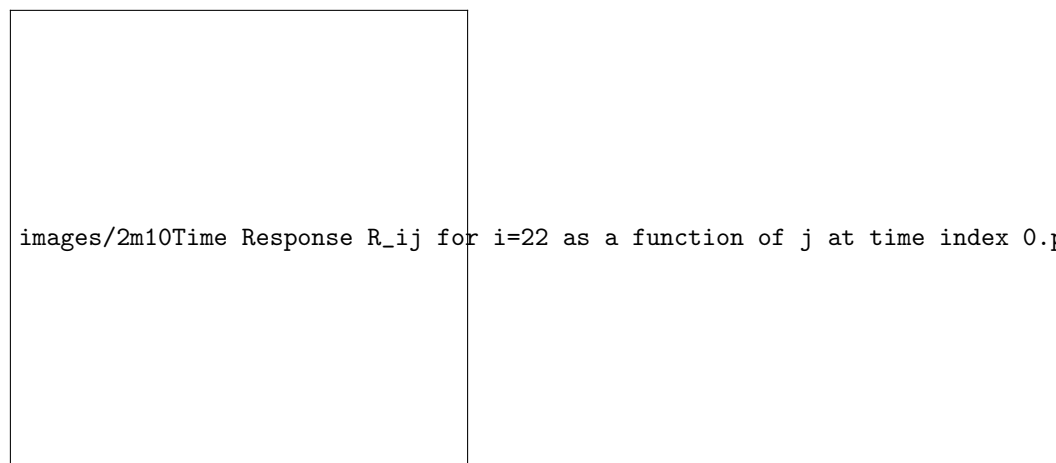


Figure 5: Risposta

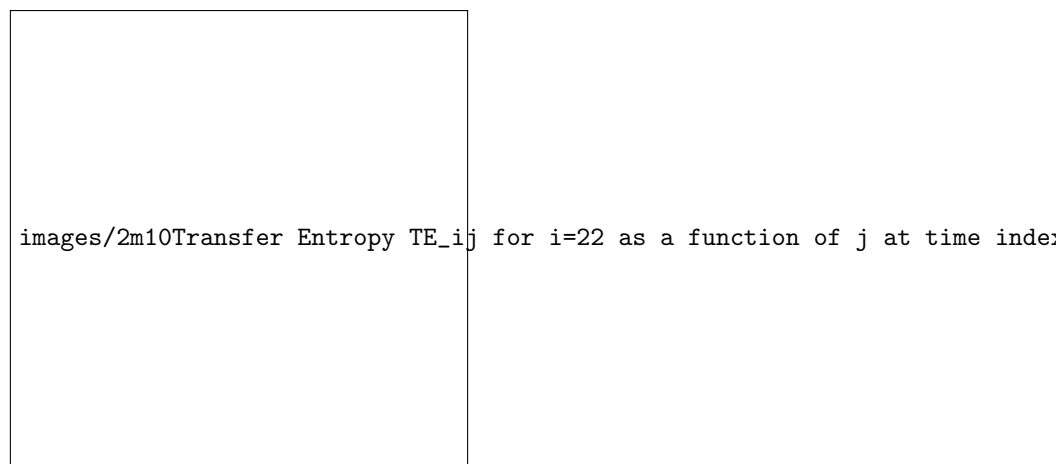


Figure 6: Transfer Entropy

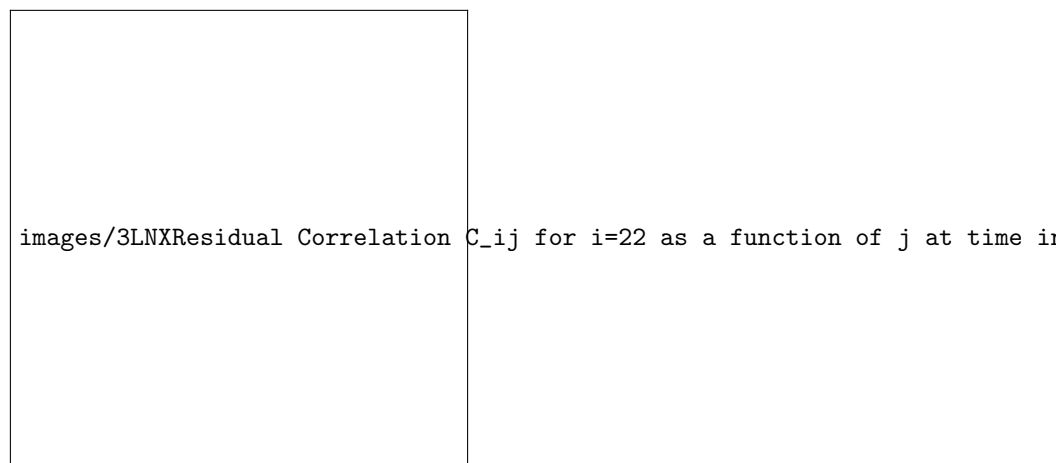


Figure 7: Correlazione

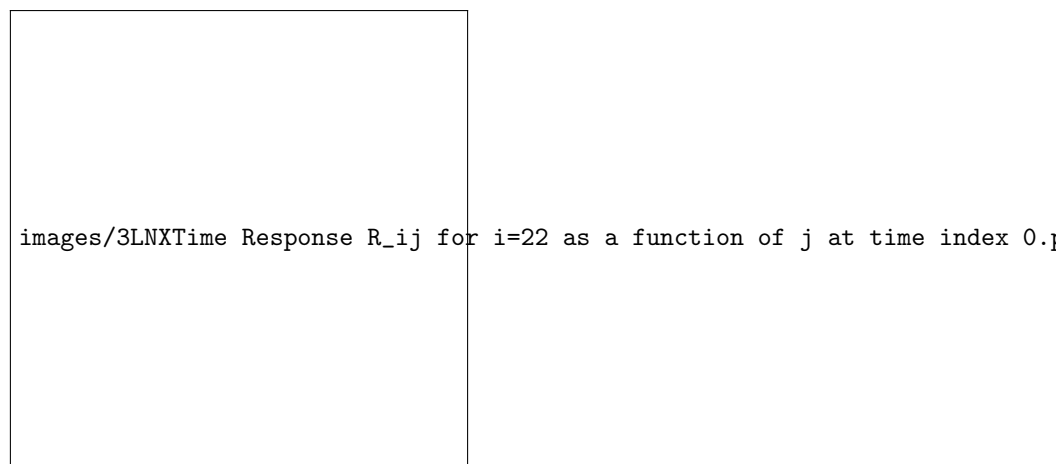


Figure 8: Risposta

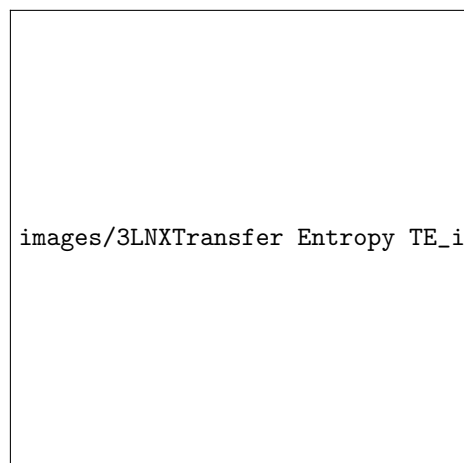


Figure 9: Transfer Entropy

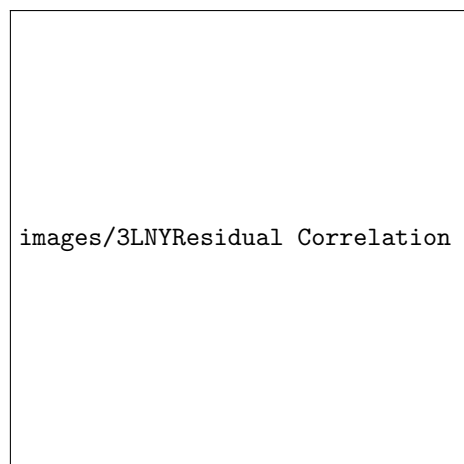


Figure 10: Correlazione

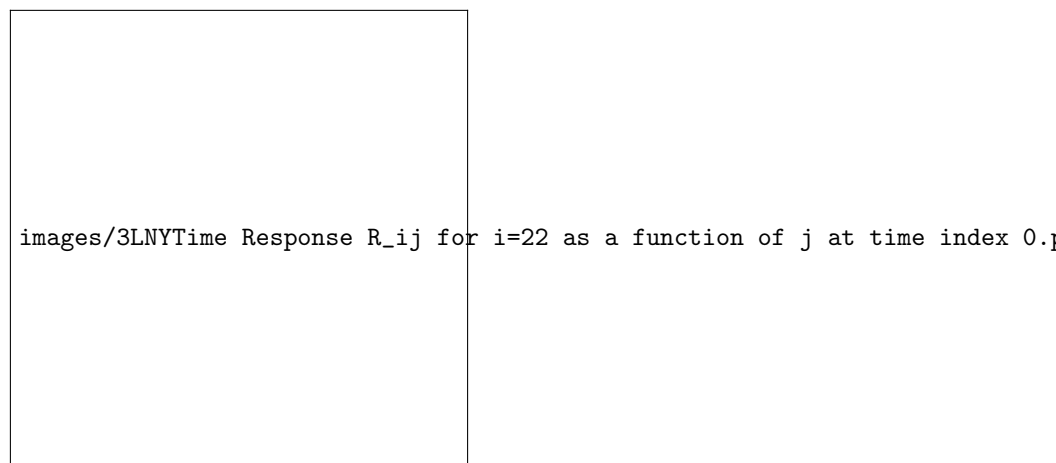


Figure 11: Risposta

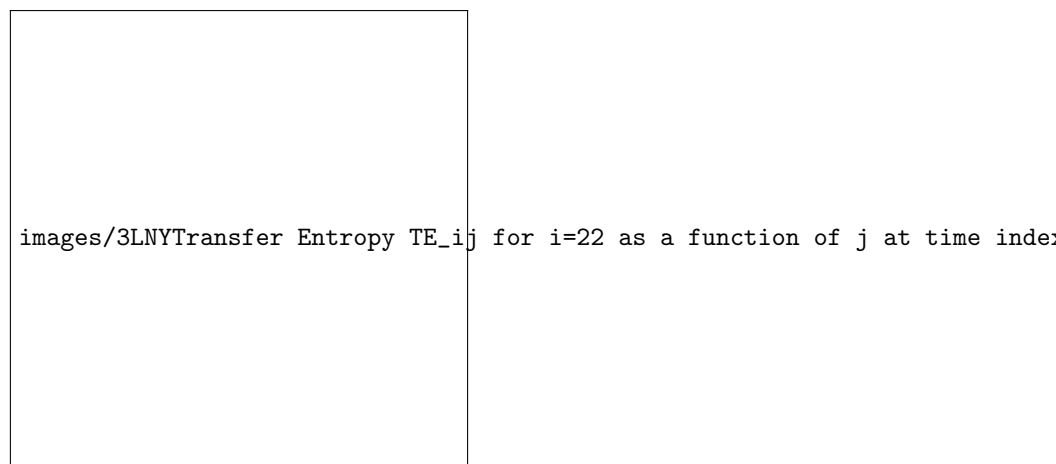


Figure 12: Transfer Entropy