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 minor edi un certo valore. Come si fa a trovare la teshold migliroe per il raggio in quesot modello? Si runna il modello al fine di minimizzare i MAE sui residui ogni volta ocn un raggio diverso. Il modello che ottiene il mae min,ore è quello che meglio descrive il tutto. Inoltre in questo modo è possibile ottenre anche il miglior grafo senza alcun tipo di vincolo. Prima di predirre i beta factor per davvero (con autovalori e autovettori) avrei bisogno di utilizzare i parametri corretti epr 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:

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

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

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

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

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

$$\mathbf{K} = \mathbf{U}\Lambda\mathbf{U}^\dagger \tag{6}$$

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

4 Calcolo risposta

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

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

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

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

5 Cross-Entropy

$$TE_{j\to i}(t) = \left\langle \log\frac{P[x_i(t)|x_i(0), x_j(0)]}{P[x_i(t)|x_i(0)]}\right\rangle \tag{12}$$

$$T_{j\to i}(t) = -\frac{1}{2}\ln\left(1 - \frac{\alpha_{ij}(t)}{\beta_{ij}(t)}\right) \tag{13}$$

$$\alpha_{ij}(t) = [C_{ii}(0)C_{ij}(t) - C_{ij}(0)C_{ii}(t)]^2 \tag{14}$$

6 2M0Z

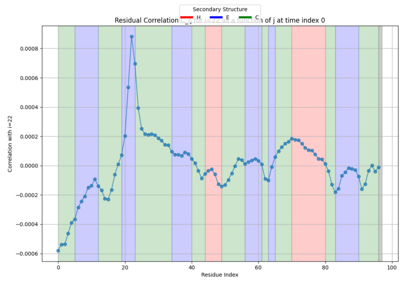

Figure 1: Correlazione

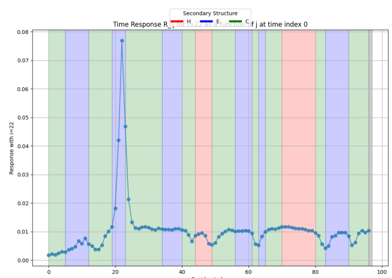

Figure 2: Risposta

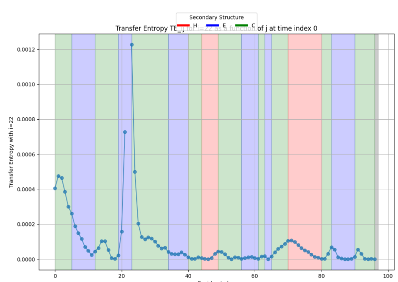

Figure 3: Transfer Entropy

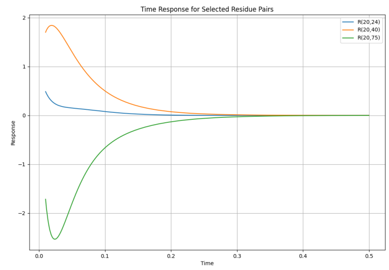

Figure 4: Multiple time response

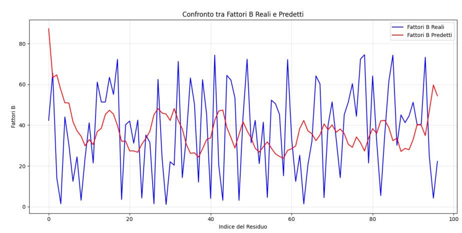

Figure 5: B factors

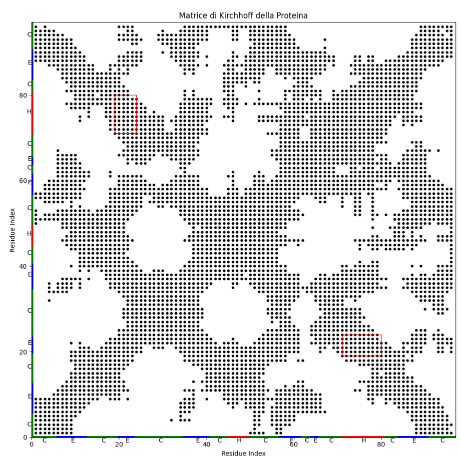

Figure 6: Kirchhoff

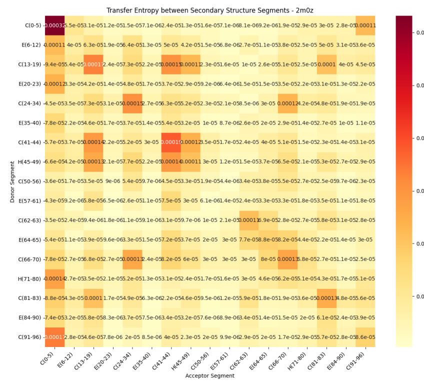

Figure 7: Secodnaria Structure

7 2M10

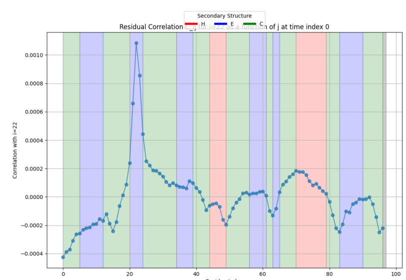

Figure 8: Correlazione

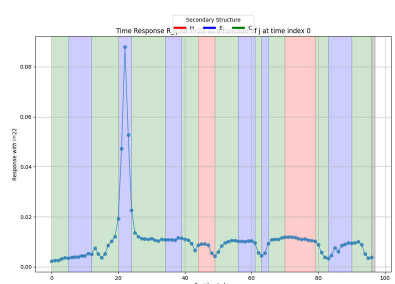

Figure 9: Risposta

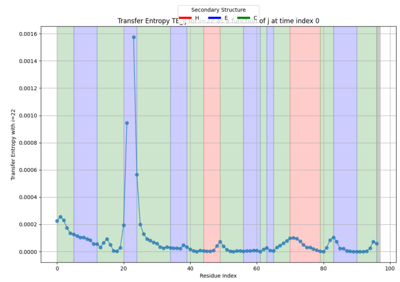

Figure 10: Transfer Entropy

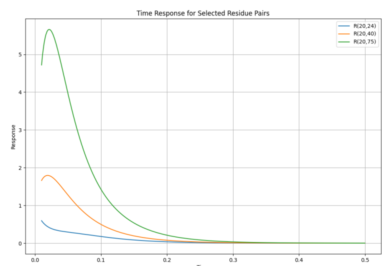

Figure 11: Multiple time response

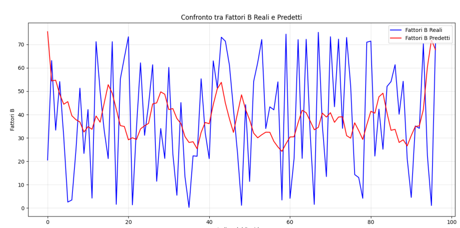

Figure 12: B factors

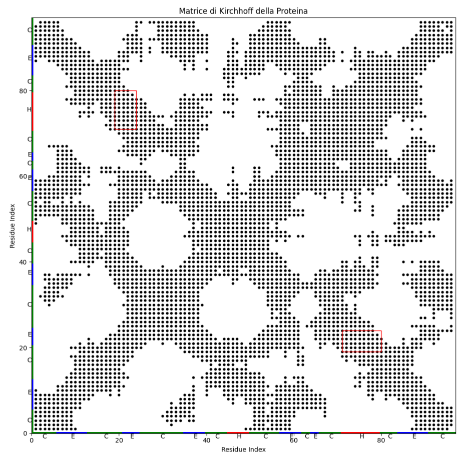

Figure 13: Kirchhoff

Figure 14: Transfer struttura Secondaria

8 3LNX

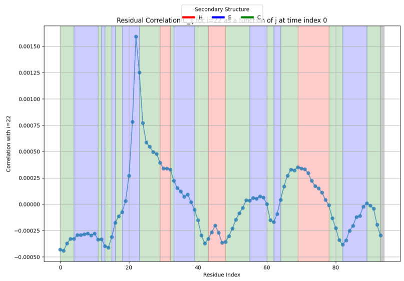

Figure 15: Correlazione

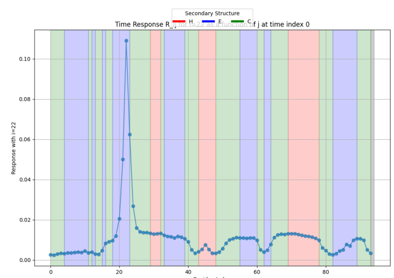

Figure 16: Risposta

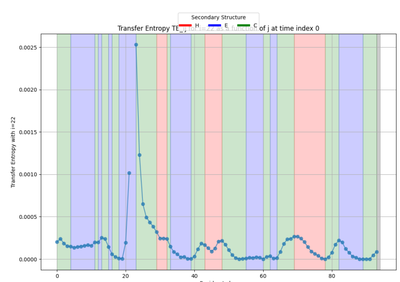

Figure 17: Transfer Entropy

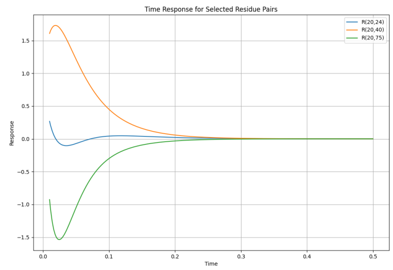

Figure 18: Multiple time response

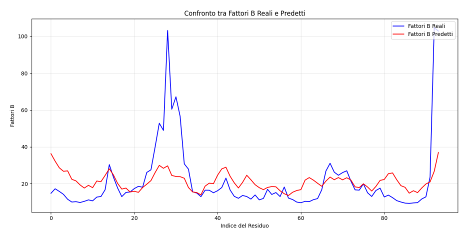

Figure 19: B factors

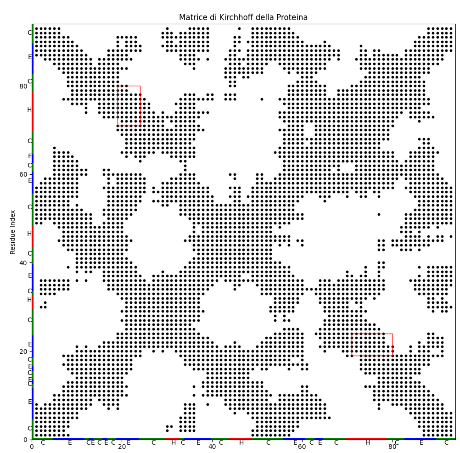

Figure 20: Kirchhoff

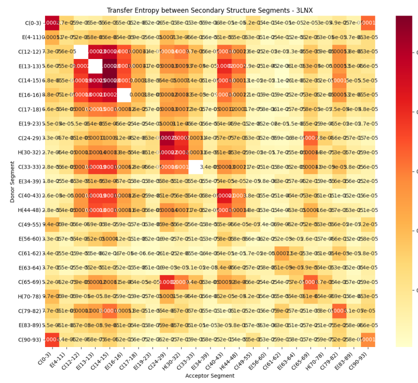

Figure 21: Secondaria

9 3LNY

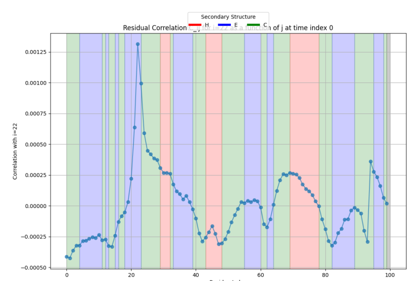

Figure 22: Correlazione

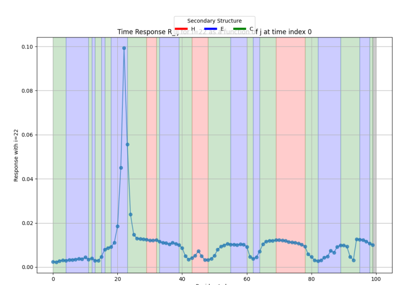

Figure 23: Risposta

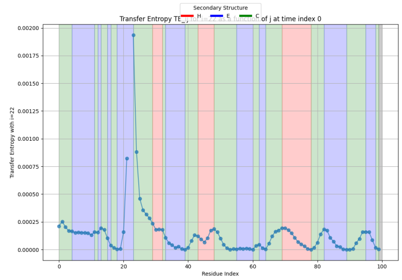

Figure 24: Transfer Entropy

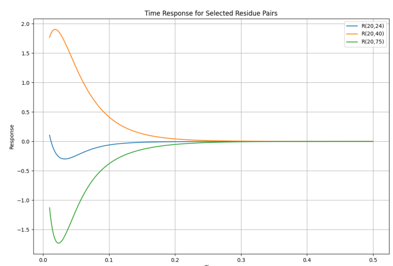

Figure 25: Multiple time response

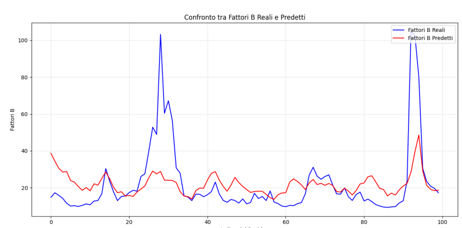

Figure 26: B factors

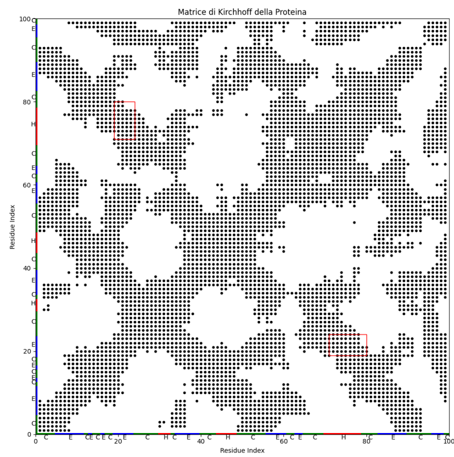

Figure 27: Kirchhoff

Figure 28: Seocndaria

10 Dinamica

$$\gamma \dot{x}_i = -g \sum_j K_{ij} x_j + \epsilon(t)(r_{21} - r_{76})\delta_{i,21} - \epsilon(t)(r_{21} - r_{76})\delta_{i,76} + \sqrt{2\gamma k_B T}\xi_i(t) \quad (15)$$

Ora posso simulare il moto Time dependent di ogni atomo e vedere come si propagano le vibrazioni. Gli autovalori sono smere le frequeze naturali del sistema.

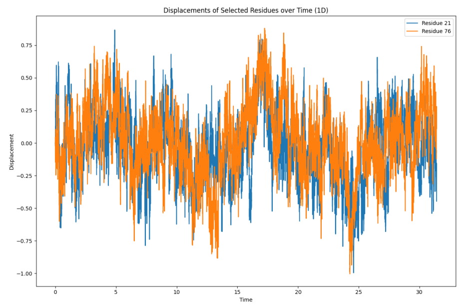

Figure 29: Seocndaria

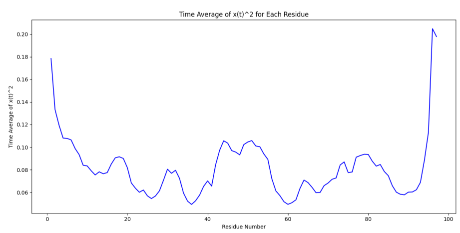

Figure 30: Seocndaria

11 Gradienete di temperature

$$\gamma_i \dot{x}_i = -g \sum_j K_{ij} x_j + \sqrt{2\gamma_i k_B T_i} \xi_i(t) \tag{16}$$

Gamma e T sono diventati vettori. Se la risolvi ottieni:

$$\sum_u \exp\left(\sum_j K_{ij} u_j\right) \cdot \beta \cdot \beta^\top \cdot \exp\left(\sum_s K_{is} u_s\right) \tag{17}$$

Ora hai diversi modi di scegliere i valori di T:

12 Troncamento Tmeperatura

se sono sotto 5 legami allora ho temperatura bassa. Se sono sopra allora ho temperatura piu' alta. Posso prendere banalmente 2 valori 0,1 .

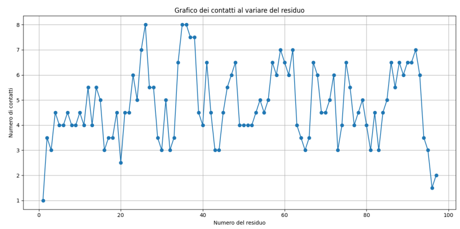

Figure 31: Temperatura Troncamento

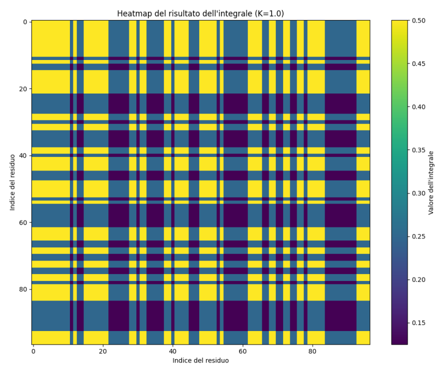

Figure 32: Temperatura Troncamento

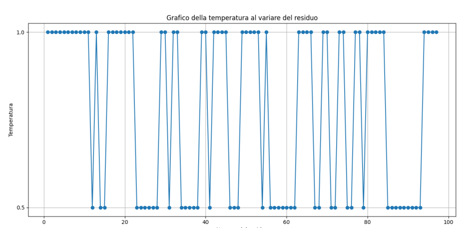

Figure 33: Temperatura Troncamento

13 Temperatura radiale

T(r)=$T_0 + (Tb - T0)/R * r$

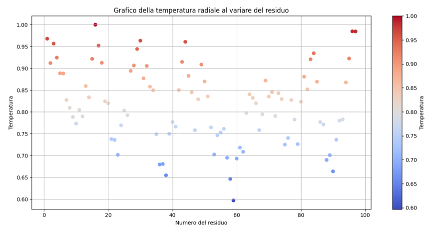

Figure 34: Temperatura Radiale

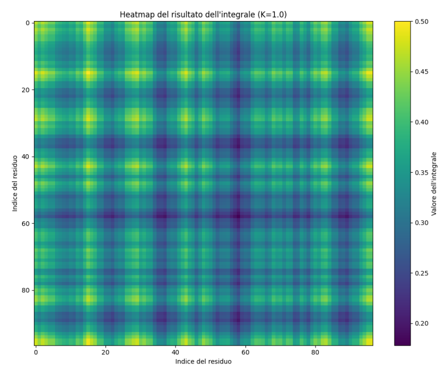

Figure 35: Correlazione Radiale

Risoluzione dell'equazione differenziale e calcolo della correlazione

Partiamo dall'equazione differenziale data per $x_i(t)$:

$$\frac{dx_i}{dt} = -\sum_j K_{ij} x_j + \sqrt{2k_B T}\,\eta_i + (1 - \cos(\omega t))\,(\delta_{a_i} - \delta_{b_i})$$

dove: - K_{ij} rappresenta la matrice di accoppiamento tra i nodi, - η_i è un processo di Wiener (rumore bianco gaussiano) con $\langle \eta_i(t)\eta_j(s)\rangle = \delta_{ij}\delta(t-s)$, - δ_{a_i} e δ_{b_i} sono costanti di offset che definiscono la parte oscillatoria del sistema.

Passaggio agli autovettori

Definiamo il cambiamento di base usando gli autovettori della matrice K, scrivendo:

$$x_i(t) = \sum_k V_{ik} Q_k(t)$$

dove V è la matrice degli autovettori di K, e $Q_k(t)$ rappresenta la dinamica lungo ciascun autovettore. L'equazione differenziale per $Q_k(t)$ diventa:

$$\frac{dQ_k}{dt} = -\lambda_k Q_k + C_k(1-\cos(\omega t)) + \sqrt{2k_BT}\,\tilde{\eta}_k$$

con: - λ_k autovalori associati agli autovettori di K, - $C_k = \sum_i V_{ik}(\delta_{a_i} - \delta_{b_i})$, - $\tilde{\eta}_k = \sum_i V_{ik}\eta_i$ è il rumore proiettato sugli autovettori.

Soluzione dell'equazione differenziale per $Q_k(t)$

La soluzione formale per $Q_k(t)$ è data dalla somma di una parte deterministica e di una parte stocastica:

$$Q_k(t) = Q_k^{det}(t) + Q_k^{rumore}(t)$$

1. **Parte deterministica**: Integrando la parte deterministica, otteniamo

$$Q_k^{det}(t) = C_k\left(\frac{1-e^{-\lambda_k t}}{\lambda_k} - \frac{e^{-\lambda_k t} - \cos(\omega t) + \frac{\lambda_k}{\omega}\sin(\omega t)}{\lambda_k^2+\omega^2}\right)$$

2. **Parte stocastica**: La soluzione per la parte stocastica dovuta al rumore è

$$Q_k^{rumore}(t) = \sqrt{2k_BT}\int_0^t e^{-\lambda_k(t-u)}\tilde{\eta}_k(u)\,du$$

Calcolo della correlazione $\langle x_i(t)x_j(s)\rangle$

La correlazione media $\langle x_i(t)x_j(s)\rangle$ è:

$$\langle x_i(t)x_j(s)\rangle = \sum_{k,l} V_{ik}V_{jl}\langle Q_k(t)Q_l(s)\rangle,$$

dove $\langle Q_k(t)Q_l(s)\rangle$ può essere suddivisa nei contributi deterministico e stocastico:

$$\langle Q_k(t)Q_l(s)\rangle = \langle Q_k^{det}(t)Q_l^{det}(s)\rangle + \langle Q_k^{rumore}(t)Q_l^{rumore}(s)\rangle.$$

Contributo deterministico

La correlazione tra le parti deterministiche è:

$$\langle Q_k^{det}(t)Q_k^{det}(s)\rangle = C_k^2\left(f_k(t,s) + g_k(t,s)\cos(\omega(t-s)) + h_k(t,s)\sin(\omega(t-s))\right),$$

dove: - $f_k(t,s)$ rappresenta il termine di decadimento esponenziale dato da:

$$f_k(t,s) = \frac{(1-e^{-\lambda_k t})(1-e^{-\lambda_k s})}{\lambda_k^2},$$

- $g_k(t,s)$ rappresenta il termine di correlazione coseno:

$$g_k(t,s) = \frac{e^{-\lambda_k(t+s)} - \cos(\omega t)\cos(\omega s)}{\lambda_k^2+\omega^2},$$

- $h_k(t,s)$ rappresenta il termine di correlazione seno:

$$h_k(t,s) = \frac{\lambda_k(\sin(\omega t)\cos(\omega s) + \cos(\omega t)\sin(\omega s))}{\lambda_k^2 + \omega^2}.$$

Contributo stocastico
Per la parte stocastica, otteniamo:

$$\langle Q_k^{rumore}(t) Q_k^{rumore}(s) \rangle = \frac{k_B T}{\lambda_k} \delta_{kl} e^{-\lambda_k |t-s|}.$$

Risultato finale
Combinando i termini, otteniamo la correlazione media finale per $\langle x_i(t) x_j(s) \rangle$:

$$\langle x_i(t) x_j(s) \rangle = \sum_k V_{ik} V_{jk} \left(C_k^2 \left(f_k(t,s) + g_k(t,s)\cos(\omega(t-s)) + h_k(t,s)\sin(\omega(t-s)) \right) + \frac{k_B T}{\lambda_k} e^{-\lambda_k |t-s|} \right).$$

Ogni termine è ora chiaramente identificato: - $C_k^2 f_k(t,s)$: componente di decadimento esponenziale, - $C_k^2 g_k(t,s)\cos(\omega(t-s))$: componente oscillatoria con coseno, - $C_k^2 h_k(t,s)\sin(\omega(t-s))$: componente oscillatoria con seno, - $\frac{k_B T}{\lambda_k} e^{-\lambda_k |t-s|}$: contributo del rumore termico.

Produzione di Entropia

La produzione di entropia S può essere calcolata utilizzando l'espressione data per la forza F e l'equazione differenziale associata al sistema.

Equazione Differenziale

Consideriamo l'equazione differenziale:

$$\frac{dx_i}{dt} = -\sum_j K_{ij} x_j + \sqrt{2 k_B T} \eta_i + (1 - \cos(\omega t))(\delta_{a_i} - \delta_{b_i}).$$

Espressione per F

L'espressione per F è data da:

$$F = \sum_j K_{ij} x_j + (1 - \cos(\omega t))(\delta_{a_i} - \delta_{b_i}).$$

Produzione di Entropia

La produzione di entropia può essere espressa come:

$$S = \frac{F \cdot \frac{dx}{dt}}{T}.$$

Sostituendo F e $\frac{dx}{dt}$, otteniamo:
1. Sostituendo F:

$$F = \sum_j K_{ij} x_j + (1 - \cos(\omega t))(\delta_{a_i} - \delta_{b_i}).$$

2. Sostituendo $\frac{dx}{dt}$:

$$\frac{dx_i}{dt} = -\sum_k K_{ik} x_k + \sqrt{2k_B T}\eta_i + (1 - \cos(\omega t))(\delta_{a_i} - \delta_{b_i}).$$

Produzione di Entropia Completa

Pertanto, la produzione di entropia può essere scritta come:

$$S = \frac{1}{T}\left[\sum_j K_{ij} x_j \left(-\sum_k K_{ik} x_k + \sqrt{2k_B T}\eta_i + (1 - \cos(\omega t))(\delta_{a_i} - \delta_{b_i})\right) + (1 - \cos(\omega t))(\delta_{a_i} - \delta_{b_i}) \left(-\sum_k K_{ik}\right.\right.$$

Considerazioni sulle Semplificazioni

Esploriamo ora alcune possibili semplificazioni dell'espressione per la produzione di entropia:

1. **Condizioni di Equilibrio**: Se il sistema è in equilibrio termico, potremmo avere $\langle x_j \rangle$ costante, semplificando il calcolo della somma sui termini di $K_{ij} x_j$.

2. **Media Temporale**: Considerando la media temporale di S, alcuni termini oscillatori (come quelli con $\cos(\omega t)$) potrebbero cancellarsi nel lungo termine, specialmente se le oscillazioni sono simmetriche attorno a zero.

3. **Domini di Oscillazione**: Se i contributi oscillatori non sono dominanti, potremmo trascurarli per un'analisi qualitativa.

4. **Assunzione di Piccole Oscillazioni**: Se le oscillazioni sono piccole, possiamo linearizzare i termini, ma questa assunzione potrebbe non essere sempre valida a seconda dell'ampiezza delle oscillazioni.

Conclusioni

In generale, mentre l'espressione per la produzione di entropia è complessa, alcune semplificazioni possono essere applicabili in condizioni specifiche, come stati di equilibrio o considerando medie temporali. Tuttavia, senza ulteriori informazioni sulle dinamiche del sistema o sul comportamento dei termini, non è facile ottenere una forma significativamente più semplice dell'espressione.

14 Fokker planck N temperature

L'equazione di Fokker-Planck associata all'equazione differenziale

$$\frac{dx_i}{dt} = -\sum_j K_{ij} x_j + B\eta_i$$

è data da:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\sum_j K_{ij} x_j P \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [B_{ii} \delta_{ij} P]$$

dove:

- $P(x,t)$ è la densità di probabilità del sistema,
- $A_i = -\sum_j K_{ij} x_j$ è il termine drift,
- $D_{ij} = B_{ii} \delta_{ij}$ è la matrice di diffusione.

Soluzione dell'Equazione Differenziale

Consideriamo l'equazione differenziale iniziale:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sum_i \left(\sum_j K_{ij} x_j P \right) + 0.5 \sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (B_{ij} P) \right).$$

Dove $P = P(x,t)$, K è la matrice di Kirchhoff e B è una matrice diagonale. Supponiamo una condizione iniziale:

$$P(x,0) = \delta(x - x_0).$$

Trasformata di Fourier

Applicando la trasformata di Fourier rispetto a x:

$$P(k,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t) e^{-ikx} \, dx.$$

La trasformata dell'equazione diventa:

$$\frac{\partial P(k,t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_i \left(\sum_j K_{ij} x_j P \right) \right) e^{-ikx} \, dx + 0.5 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (B_{ij} P) \right) e^{-ikx} \, dx.$$

Primo Termine: Derivata e Trasformata

Focalizziamoci sul primo termine:

$$\frac{\partial P(k,t)}{\partial t} = \sum_i \left(K_{ii} P(k,t)\right) + \sum_{i,j} K_{ij} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x_j P(x,t) e^{-ikx} \, dx \right).$$

Per il secondo termine, utilizziamo la proprietà della trasformata di Fourier per la derivata:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 P}{\partial x_i \partial x_j} e^{-ikx} \, dx = -k_i k_j P(k,t).$$

Quindi, l'equazione diventa:

$$\frac{\partial P(k,t)}{\partial t} = \sum_i K_{ii} P(k,t) + \sum_{i,j} K_{ij} \left(-i \frac{\partial P(k,t)}{\partial k} \right) - 0.5 \sum_{i,j} B_{ij} k_i k_j P(k,t).$$

Semplificazione

Riorganizzando l'equazione, otteniamo:

$$\frac{\partial P(k,t)}{\partial t} = \sum_i K_{ii} P(k,t) + \sum_{i,j} K_{ij} \left(-i k_j P(k,t) \right) - 0.5 \sum_{i,j} B_{ij} k_i k_j P(k,t).$$

Definiamo $\Lambda(k)$:

$$\Lambda(k) = \sum_i K_{ii} + \sum_{i,j} K_{ij} (-i k_j) - 0.5 \sum_{i,j} B_{ij} k_i k_j.$$

Quindi, l'equazione diventa:

$$\frac{\partial P(k,t)}{\partial t} = \Lambda(k) P(k,t).$$

Risoluzione dell'Equazione Differenziale

La soluzione dell'equazione differenziale è:

$$P(k,t) = P(k,0) e^{\Lambda(k)t}.$$

Utilizzando la condizione iniziale $P(k,0) = e^{-ikx_0}$:

$$P(k,t) = e^{-ikx_0} e^{\Lambda(k)t}.$$

Trasformata Inversa

Per trovare $P(x,t)$, applichiamo la trasformata di Fourier inversa:

$$P(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(k,t) e^{ikx} \, dk.$$

Sostituendo $P(k,t)$:

$$P(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx_0} e^{\Lambda(k)t} e^{ikx} \, dk.$$

Fattorizzando:

$$P(x,t) = e^{-ix_0 k} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x_0)} e^{\Lambda(k)t} \, dk.$$

Assumiamo una forma specifica per $\Lambda(k)$:

$$\Lambda(k) = -\gamma k^2,$$

dove γ è una costante positiva. Allora, otteniamo:

$$P(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x_0)} e^{-\gamma k^2 t} \, dk.$$

Risoluzione dell'Integrale

Utilizziamo la formula dell'integrale gaussiano:

$$P(x,t) = \sqrt{\frac{\pi}{\gamma t}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\gamma t}}.$$

Risultato Finale

La soluzione finale è:

$$P(x,t) = \sqrt{\frac{\pi}{\gamma t}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\gamma t}}.$$