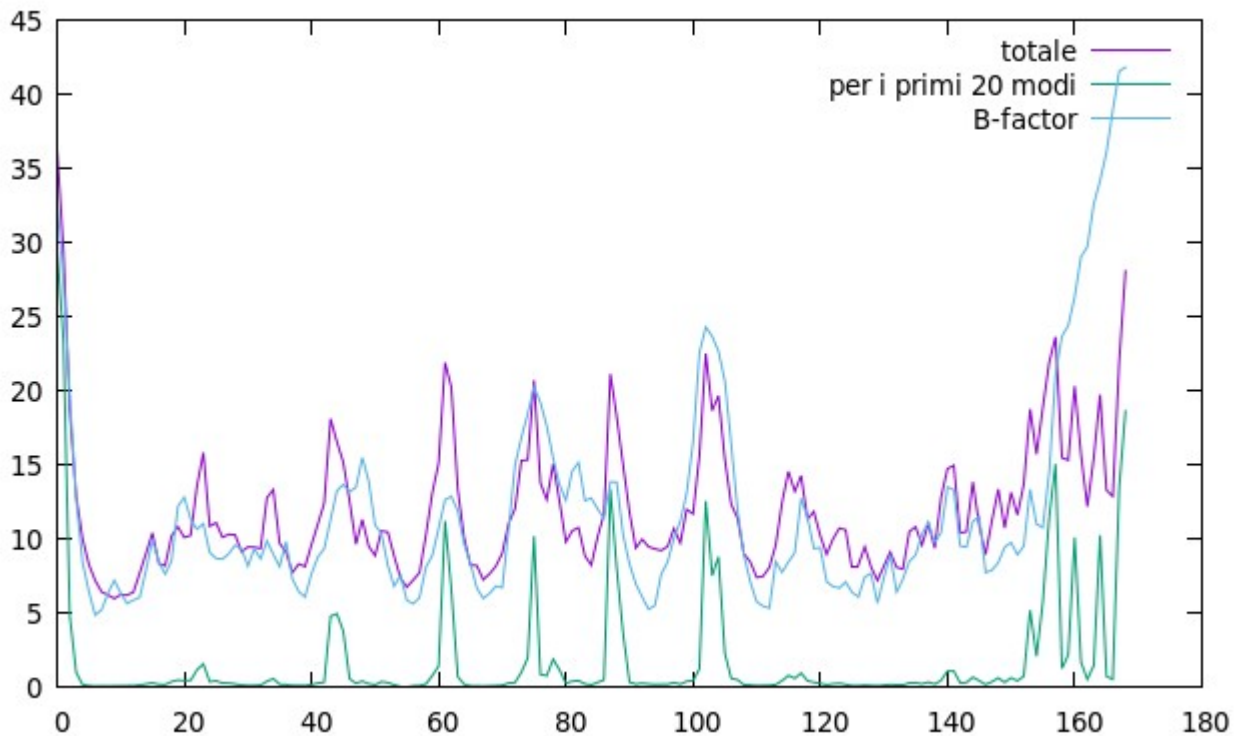


1) Ho effettuato il test sulle mobilità. Nel grafico ho riportato il B-factor, i coefficienti di mobilità ottenuti sommando su tutti i modi e quelli ottenuti sommando solo sui primi 20 modi non nulli. Si vede in effetti che sommando i primi 20 modi si arriva molto sotto il valore del B-factor.



2) Ho scritto le derivate come operazioni tra i vettori:

$$\vec{d}(s) = \begin{pmatrix} q_{10,x}^0 \\ q_{10,y}^0 \\ q_{10,z}^0 \end{pmatrix} + s\lambda_k^{-1/2} \begin{pmatrix} u_{k,10,x} \\ u_{k,10,y} \\ u_{k,10,z} \end{pmatrix} - \left[ \begin{pmatrix} q_{50,x}^0 \\ q_{50,y}^0 \\ q_{50,z}^0 \end{pmatrix} + s\lambda_k^{-1/2} \begin{pmatrix} u_{k,50,x} \\ u_{k,50,y} \\ u_{k,50,z} \end{pmatrix} \right] = \vec{a} + s\vec{b}$$

con

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} q_{10,x}^0 - q_{50,x}^0 \\ q_{10,y}^0 - q_{50,y}^0 \\ q_{10,z}^0 - q_{50,z}^0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{b} = \lambda_k^{-1/2} \begin{pmatrix} u_{k,10,x} - u_{k,50,x} \\ u_{k,10,y} - u_{k,50,y} \\ u_{k,10,z} - u_{k,50,z} \end{pmatrix}$$

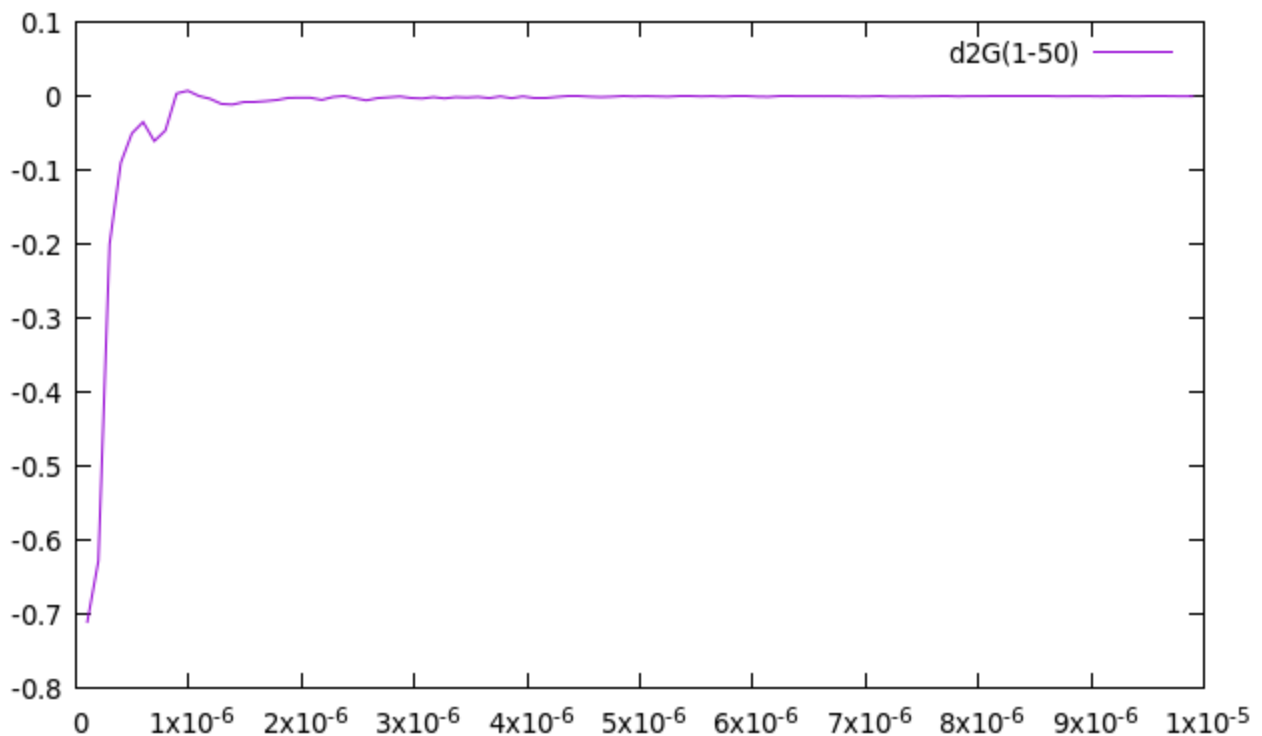
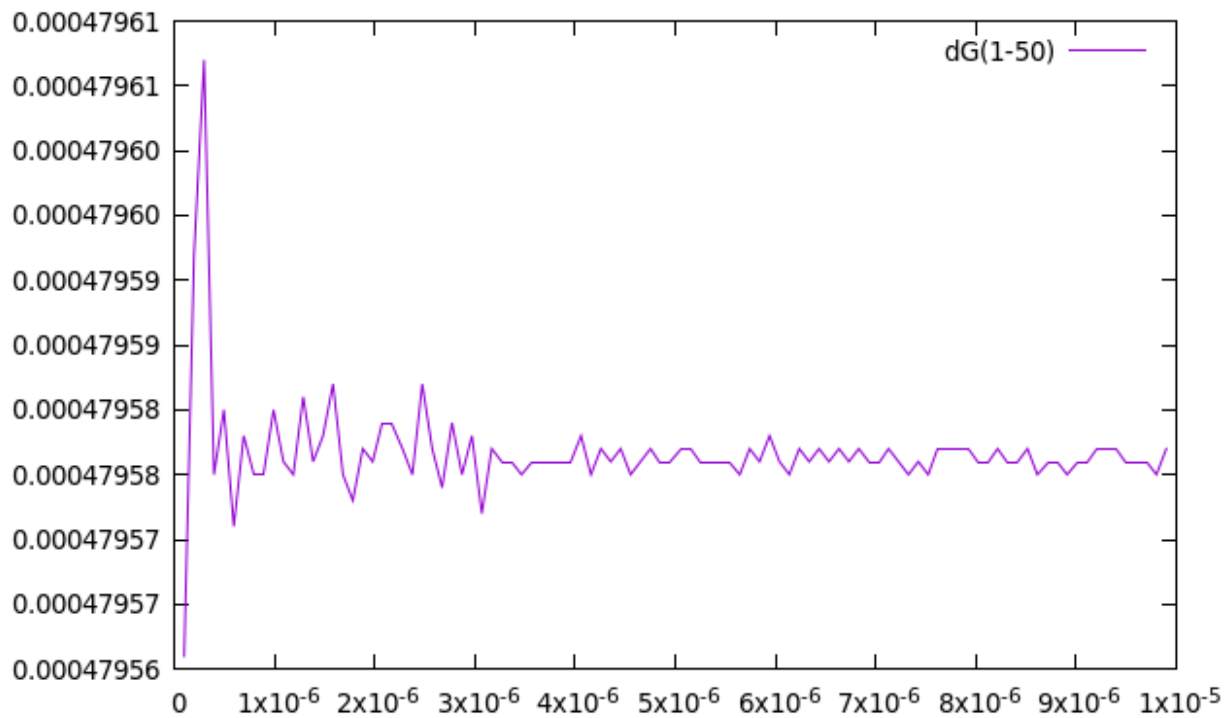
$$\text{ossia } d(s) = \|\vec{d}\| = \|\vec{a} + s\vec{b}\|$$

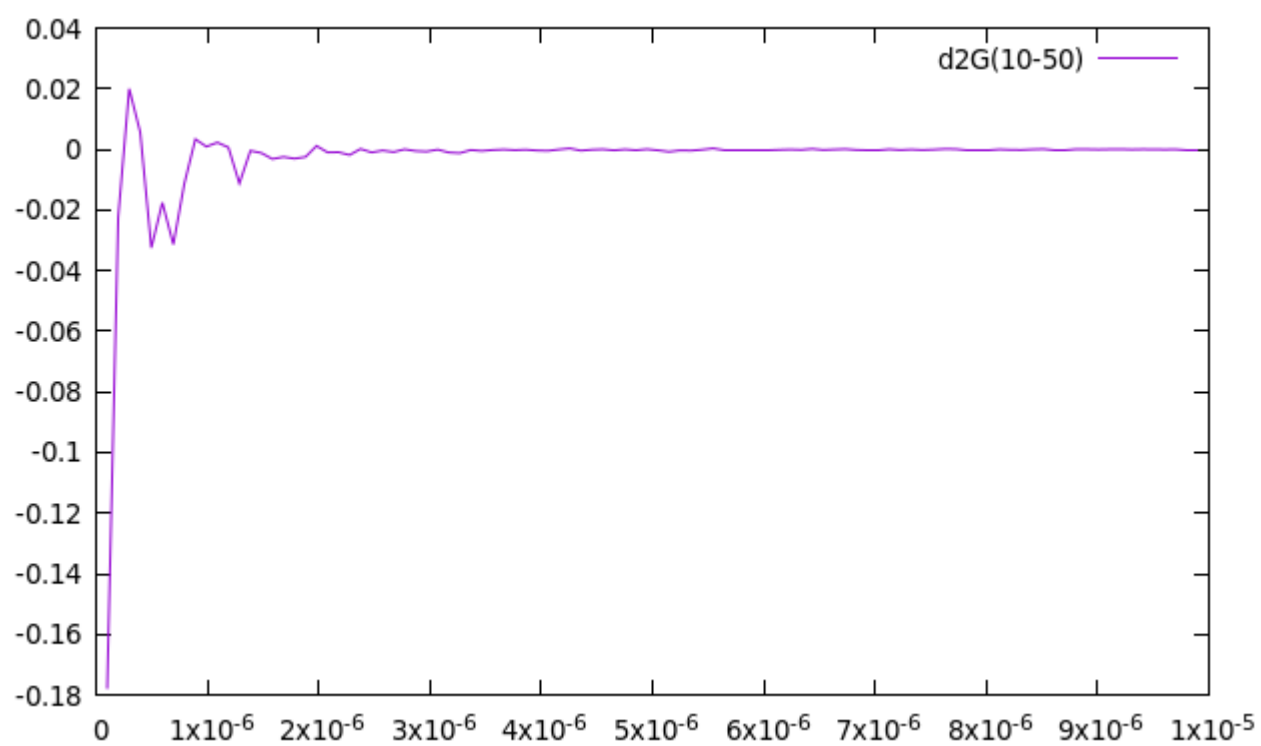
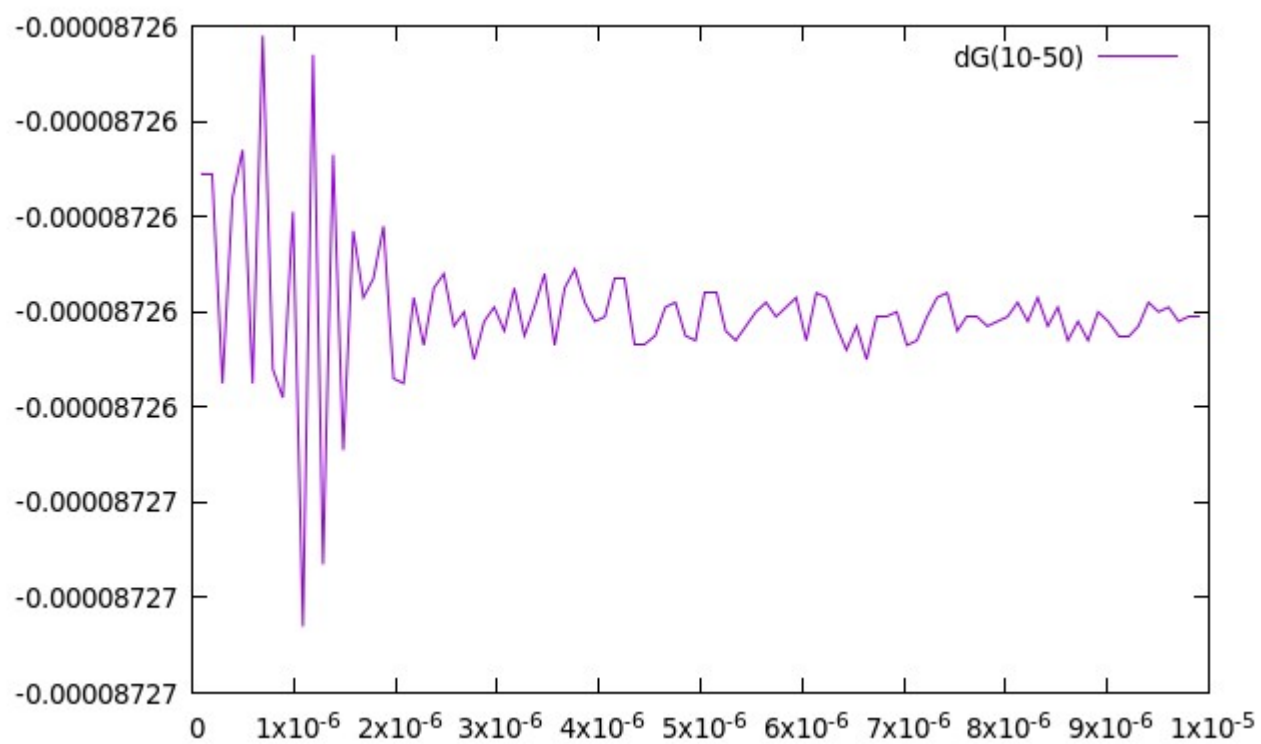
si ottiene dunque calcolando in zero:

$$d'(s=0) = \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{\|\vec{a}\|}$$

$$d''(s=0) = \frac{\|\vec{b}\|^2}{\|\vec{a}\|} - \frac{(\vec{a} \cdot \vec{b})^2}{\|\vec{a}\|^3}$$

3) Per quanto riguarda la stabilità delle derivate ho prodotto 100 valori di delta tra  $1e-5$  e  $1e-7$ . Con G(1-50) intento quello tra i loop 1-50 e 51-122 e analogamente per l'altro. Sembra che le derivate prime siano stabili fino alla terza cifra significativa anche se comunque non monotone. Le derivate seconde invece non sono per nulla stabili.





- 4) Per quanto riguarda i valori delle distanze quelli che avevo riportato erano sbagliati in quanto li calcolavo in modo analitico ma per un errore di digitazione del codice li calcolavo a partire dal vettore deformato di delta e quindi variavano con delta. Ho corretto il problema e ora vengono calcolati analiticamente a partire dal vettore posizione non deformato.
- 5) Ho modificato il programma in modo da restituire le derivate “normalizzate”.
- 6) Sì fortunatamente era solo un errore di battitura nell’output.
- 7) Mi scusi ma non sono riuscito ancora a risolvere il problema perché sto cercando di farlo senza mettere troppo mano al codice, spero di riuscirci al più presto.
- 8) Credo che il problema fosse legato agli errori che avevo commesso nel calcolo delle derivate perché ora non mi sembra che il problema si ripresenti.

