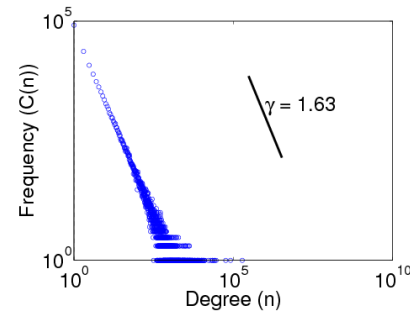
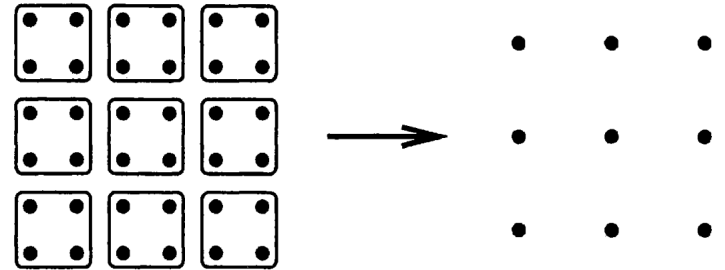


TO SAMO W RÓŻNEJ SKALI

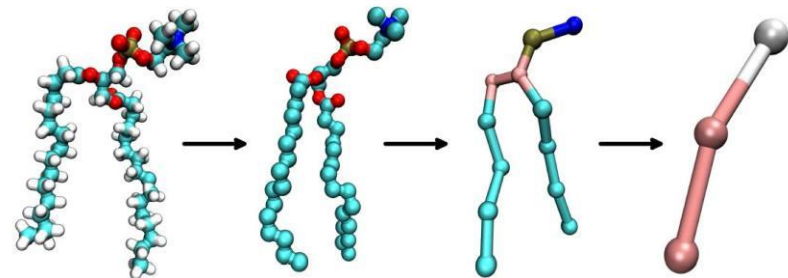
- Prawa potęgowe



- Renormalizacja



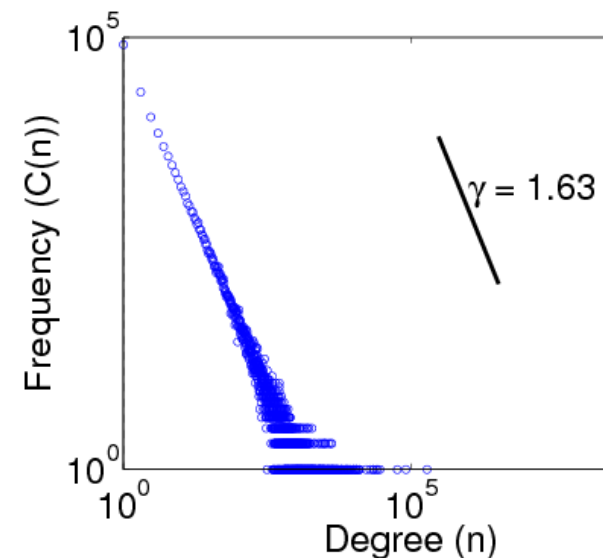
- Modele gruboziarniste



Łukasz Mioduszewski, UKSW
Szkoła Matematyki Poglądowej 2022

PRAWA POTĘGOWE

- Częstość występowania różnych zjawisk zależy od ich wielkości
- CTG zakłada że średnia i wariancja są skończone... a co jeśli nie?
- $p(x)$ = prawdop. że zjawisko ma rozmiar x
- Prawo potęgowe: $p(x) \propto x^{-\gamma}$
- Duże x częstsze niż dla Gaussa



PRAWA POTĘGOWE

- Częstość występowania różnych zjawisk zależy od ich wielkości
- CTG zakłada że średnia i wariancja są skończone... a co jeśli nie?
- $p(x)$ = prawdop. że zjawisko ma rozmiar x
- Prawo potęgowe: $p(x) \propto x^{-\gamma}$
- Duże x częstsze niż dla Gaussa
- Przeskalowanie: $f(cx) = a(cx)^{-k} = c^{-k} f(x) \propto f(x)$
- Skąd nieskończona wariancja?
Zjawiska krytyczne!

ILE TAGÓW W CITEULIKE

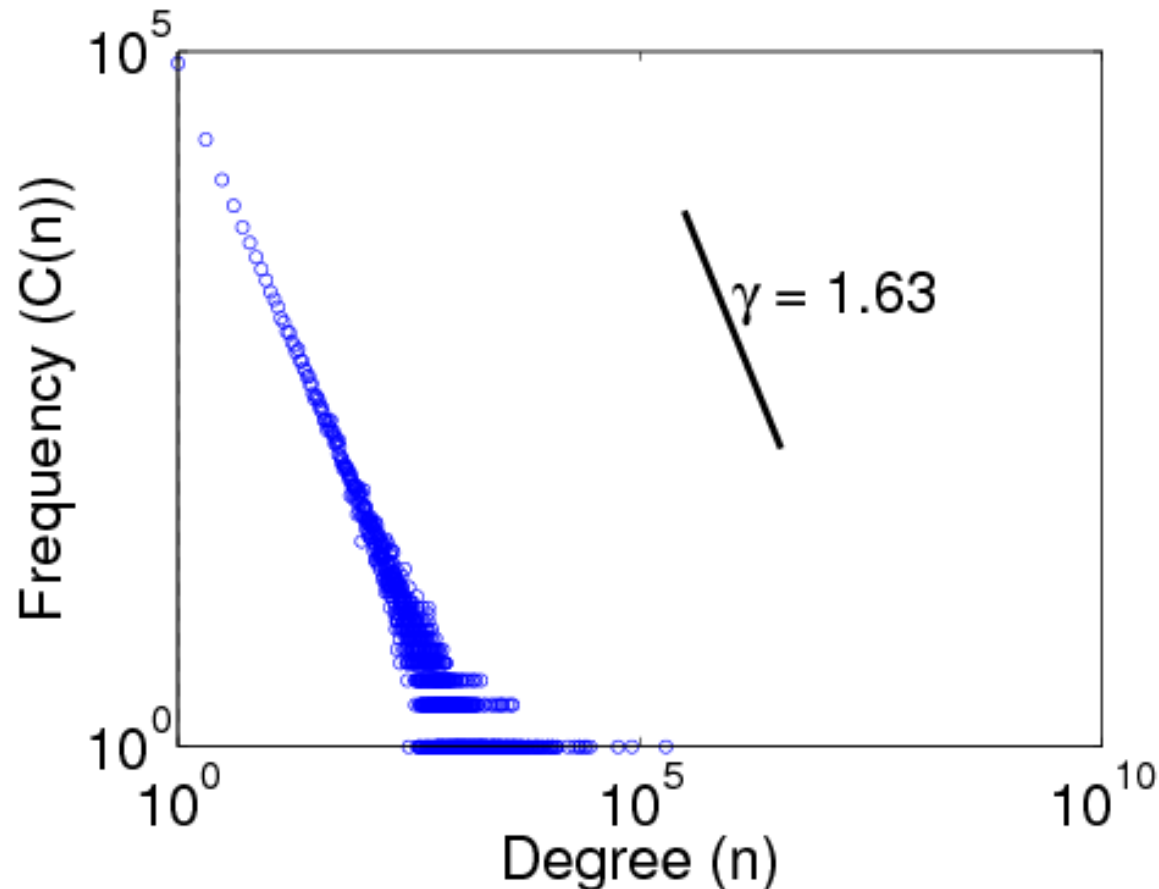
- Stopień wierzchołka w grafie gdzie wierzchołkami są użytkownicy i ich tagi
- Duże gamma



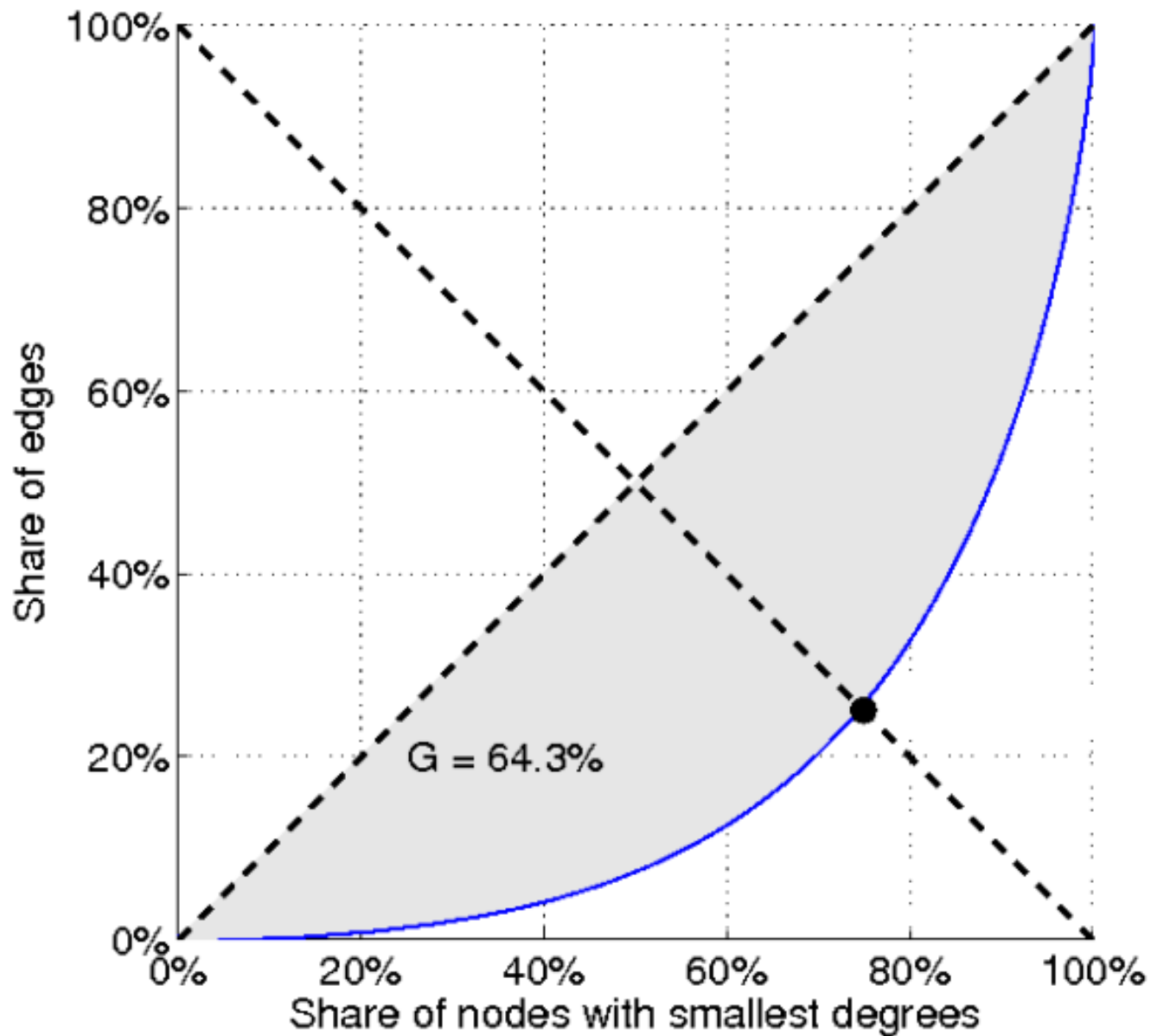
szybszy spadek



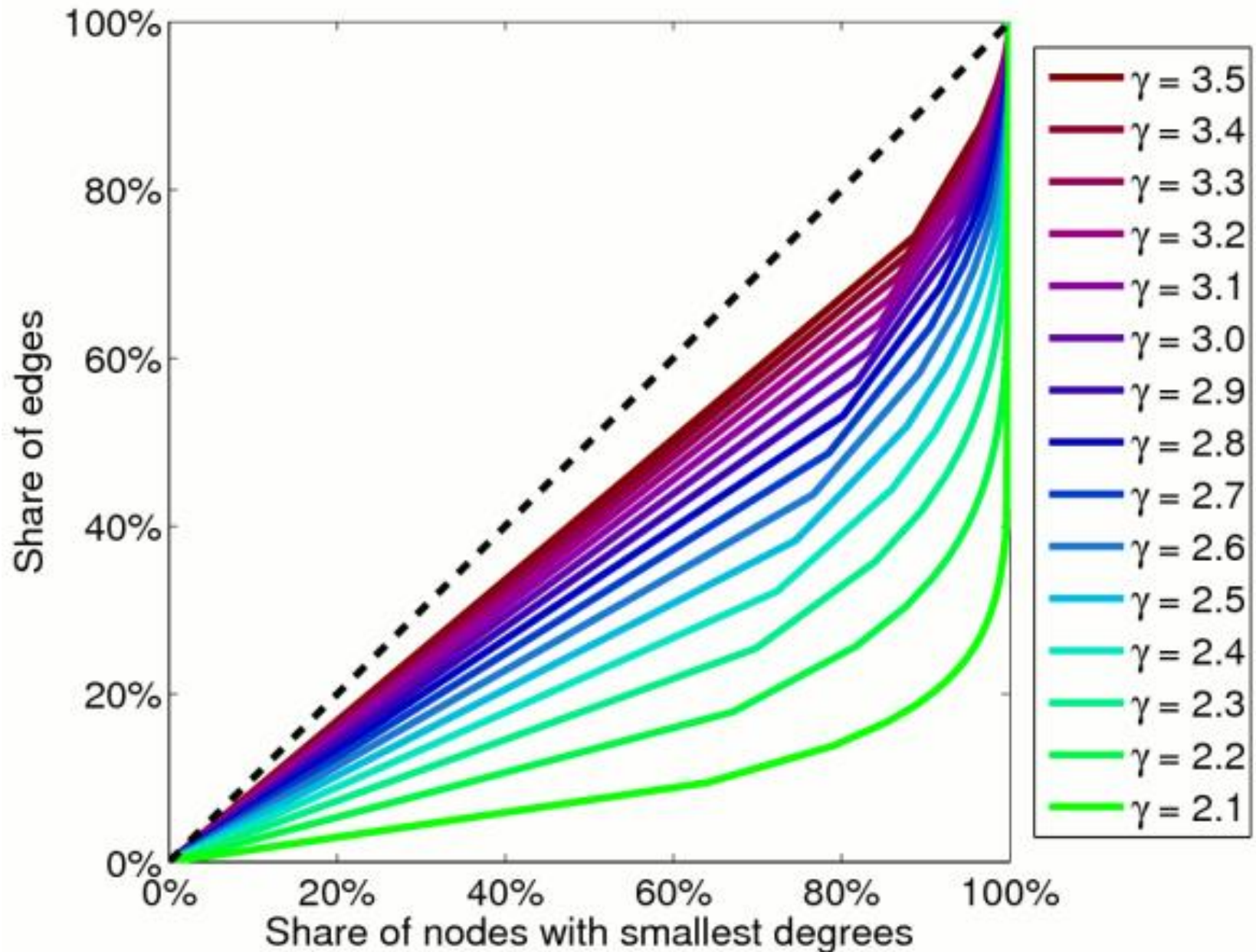
mniejsze czy
większe
nierówności?



WSPÓŁCZYNNIK GINI



WSPÓŁCZYNNIK GINI

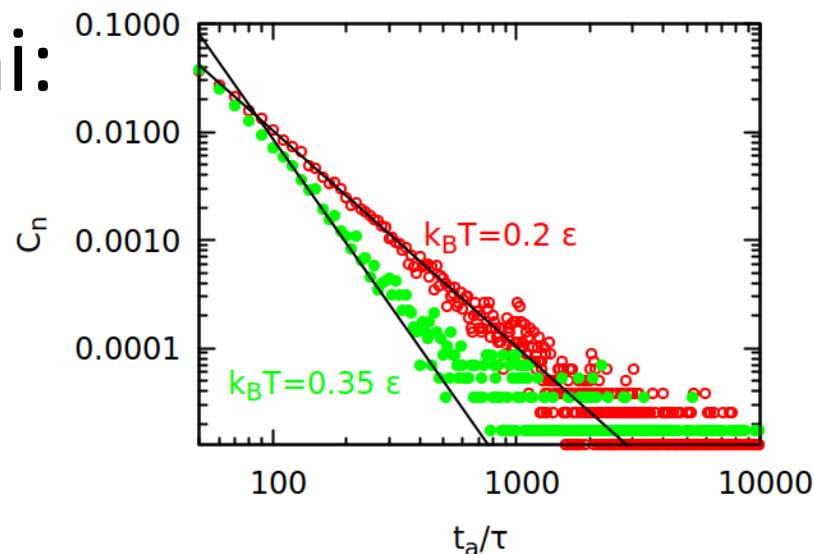


PRAWA POTĘGOWE

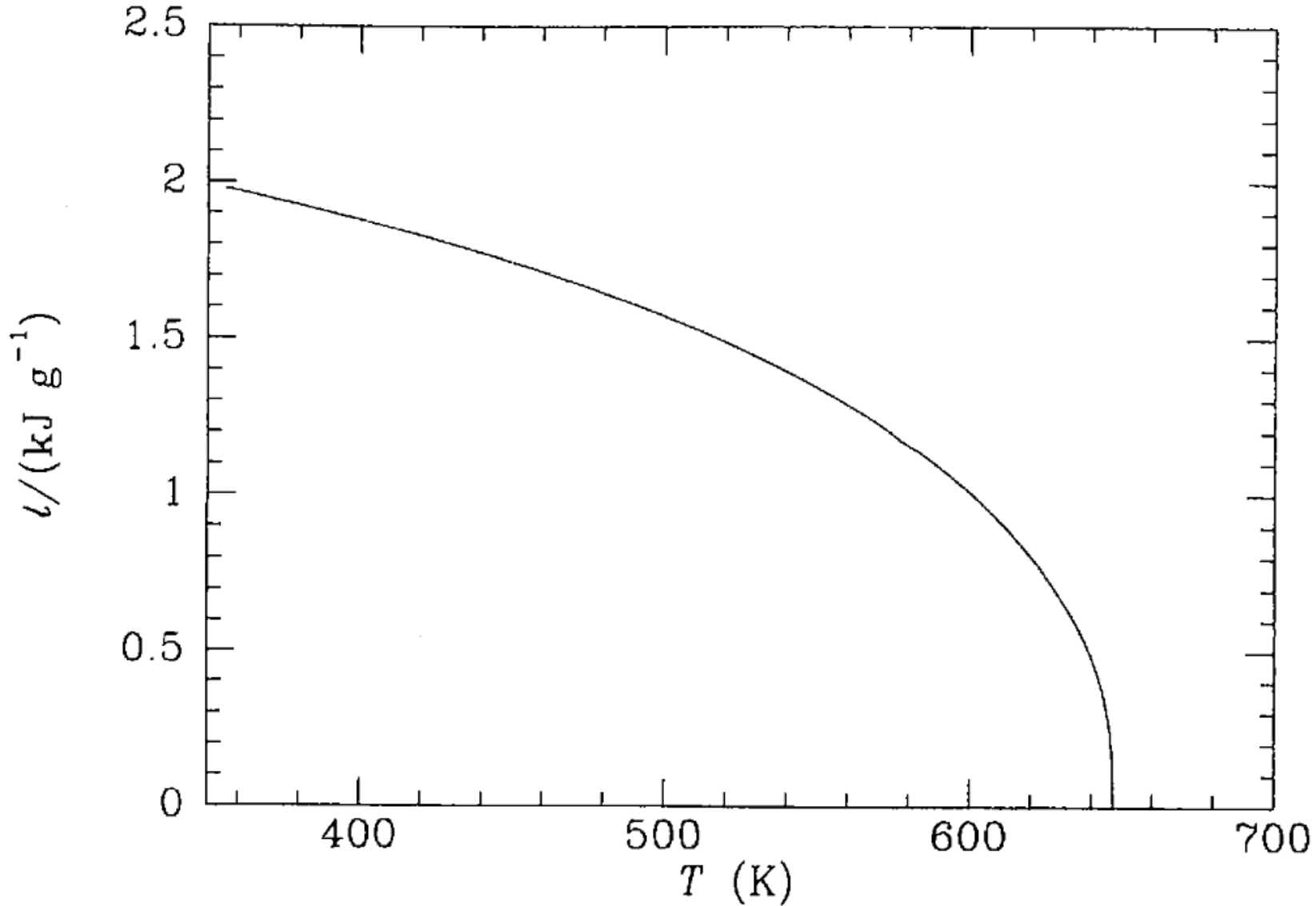
- Rozmiar kraterów na księżycu, flar na słońcu
- Częstość występowania słów, nazwisk
- Liczba gatunków w danym kładzie
- Przerwy w zasilaniu, erupcje wulkanów
- Powierzchnia aminokwasów dostępna dla rozpuszczalnika, czas życia kontaktu

między aminokwasami:

- $\gamma = 2$ dla niskich T
- $\gamma = 3.2$ dla wysokich T

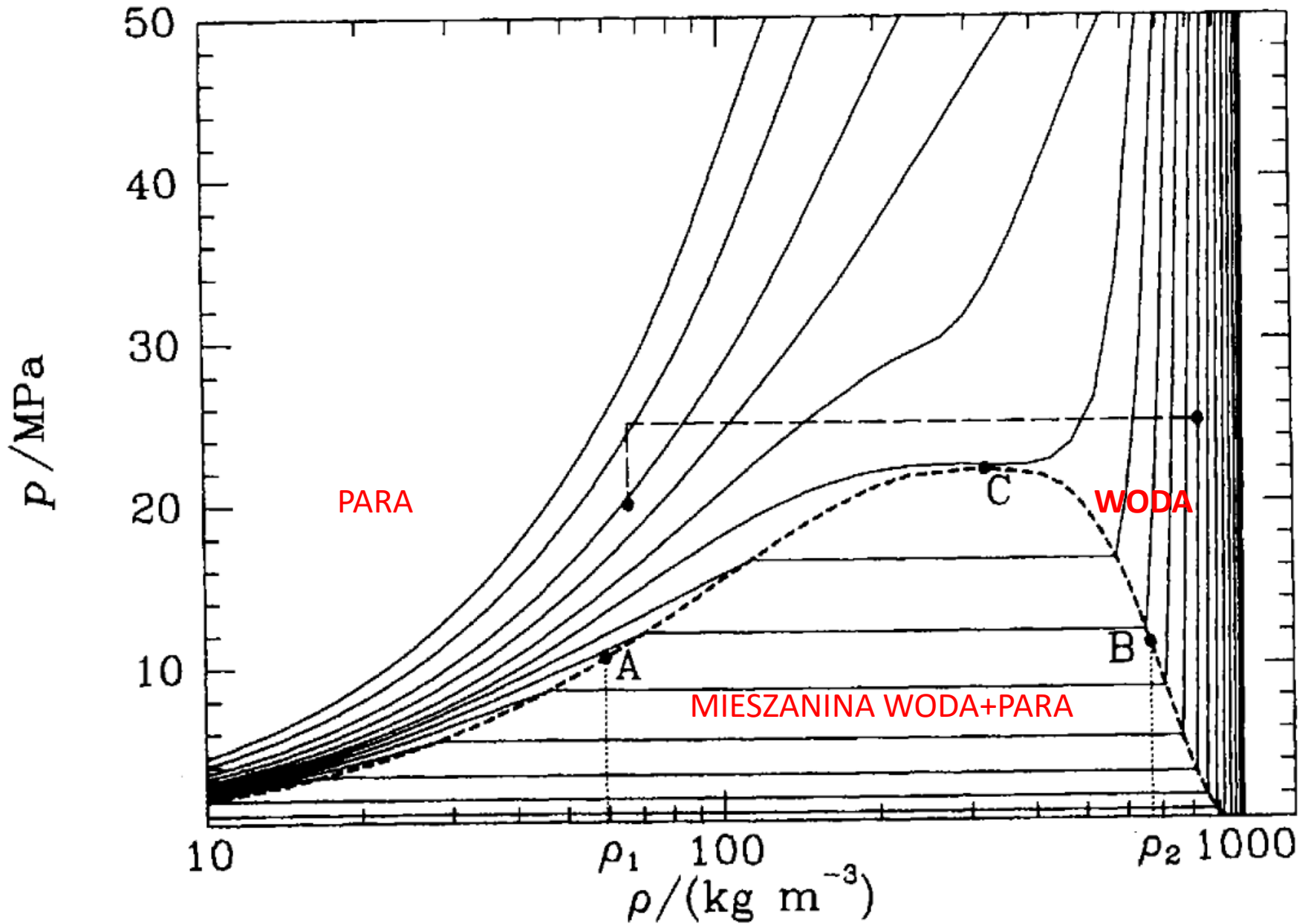


PRZEJŚCIA FAZOWE



Ciepło parowania wody w funkcji temperatury

PRZEJŚCIA FAZOWE



W POBLIŻU $T_{\text{KRYTYCZNEJ}}$

- Ciepło właściwe $c(T) \sim \frac{1}{\alpha} \left(\left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\alpha} - 1 \right)$
- Różnica gęstości (parametr porządku) $\rho_{\text{liquid}} - \rho_{\text{gas}} \sim (T_c - T)^\beta$
- Ścisłość izoT $\kappa_T \sim (T - T_c)^{-\gamma}$
- Gęstość dla $T=T_c$ $\rho \sim (p - p_c)^{1/\delta}$
- Dlaczego wykładniki krytyczne są ważne?

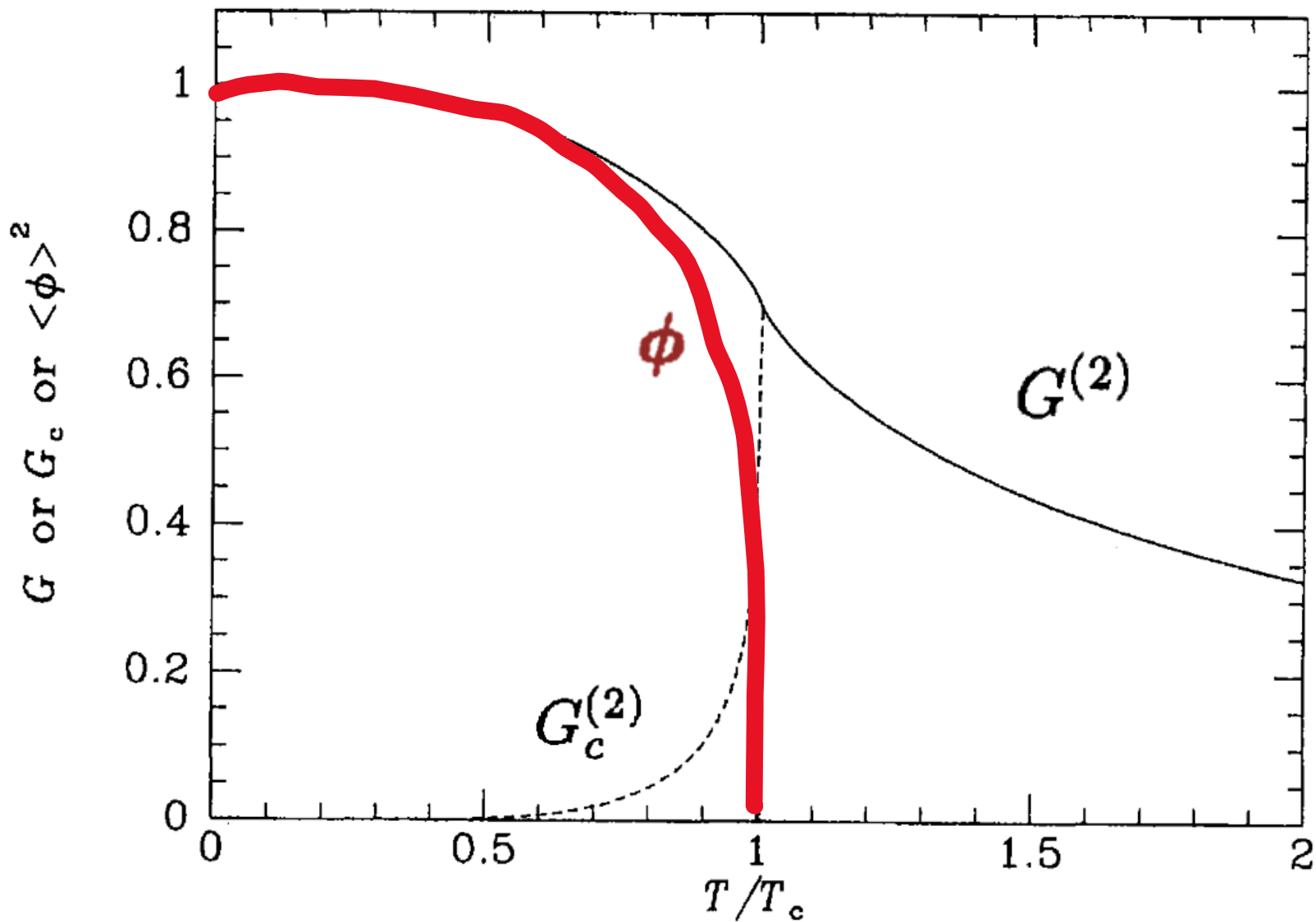
FUNKCJE KORELACJI

- Dla magnetyka: $G^{(2)}(\mathbf{i}, \mathbf{j}) \equiv \langle \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j \rangle$
- W ogólności: $G^{(2)}(r) \equiv \langle \boldsymbol{\phi}(0) \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{r}) \rangle$
($\boldsymbol{\phi}$ to parametr porządku)
- Można go odjąć: $G_c^{(2)}(r) \equiv \langle \boldsymbol{\phi}(0) \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{r}) \rangle - |\langle \boldsymbol{\phi} \rangle|^2$
(wtedy liczą się fluktuacje)
- Dla temperatury krytycznej: $G_c^{(2)}(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$

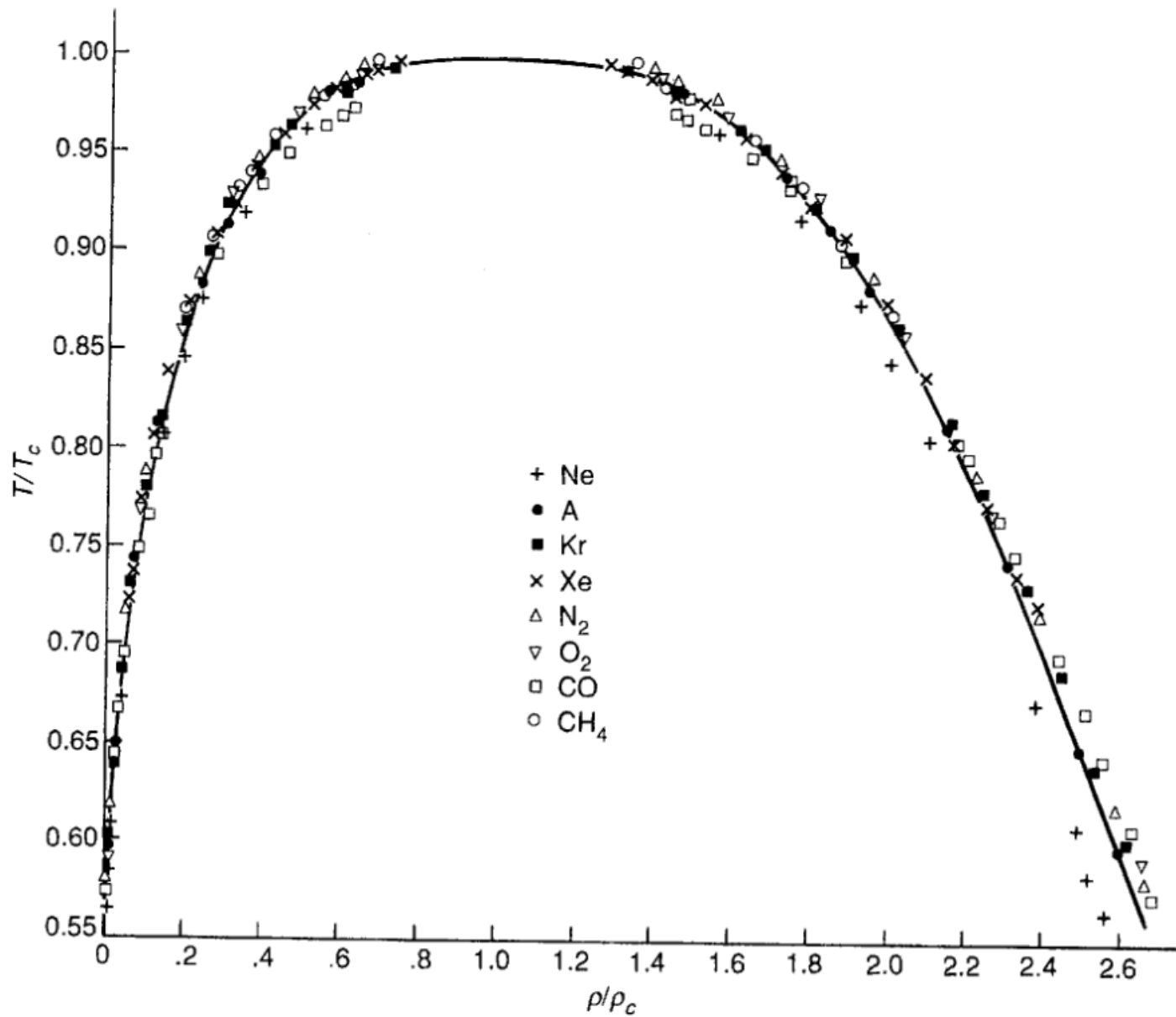
FUNKCJE KORELACJI

- Dla magnetyka: $G^{(2)}(\mathbf{i}, \mathbf{j}) \equiv \langle \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j \rangle$
- W ogólności: $G^{(2)}(r) \equiv \langle \boldsymbol{\phi}(0) \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{r}) \rangle$
($\boldsymbol{\phi}$ to parametr porządku)
- Można go odjąć: $G_c^{(2)}(r) \equiv \langle \boldsymbol{\phi}(0) \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{r}) \rangle - |\langle \boldsymbol{\phi} \rangle|^2$
(wtedy liczą się fluktuacje)
- Długość korelacji: $G_c^{(2)}(r) \sim e^{-r/\xi}$
 $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu} \quad (|T - T_c|/T_c \ll 1)$

FUNKCJE KORELACJI

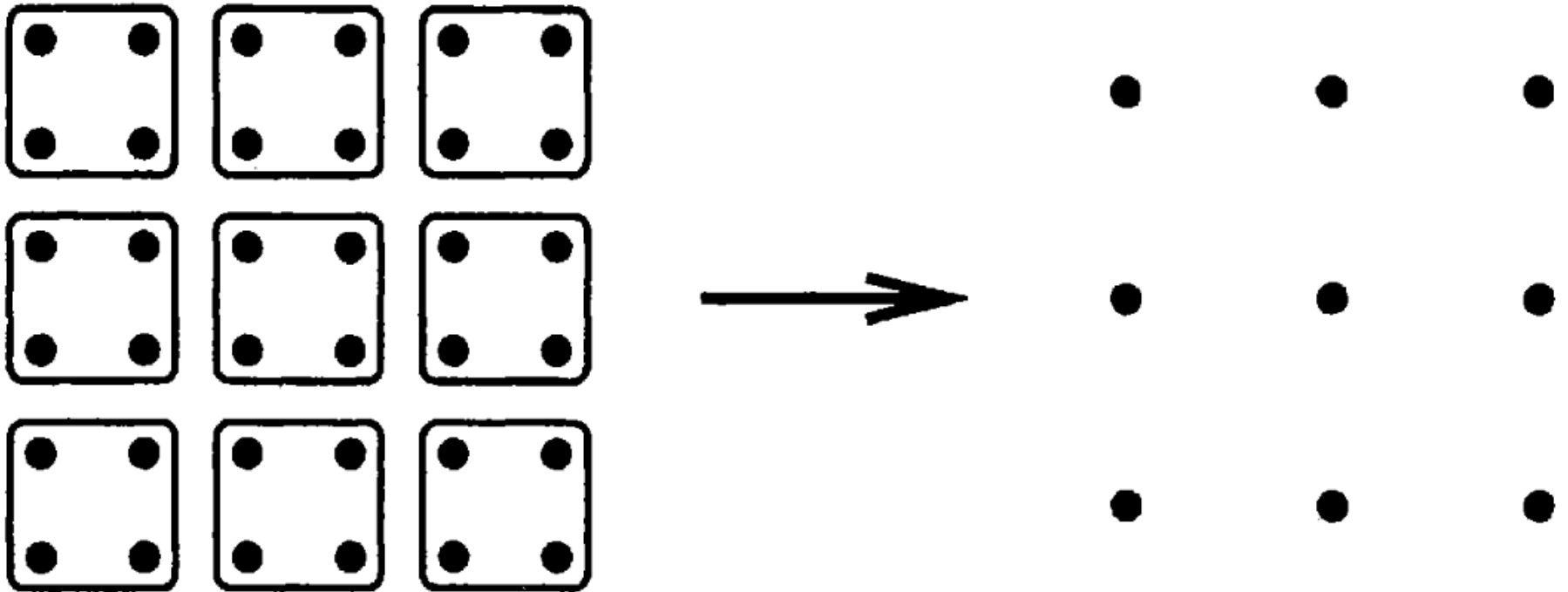


UNIWERSALNOŚĆ



RENORMALIZACJA

* W przestrzeni rzeczywistej, tylko dla modeli na sieci



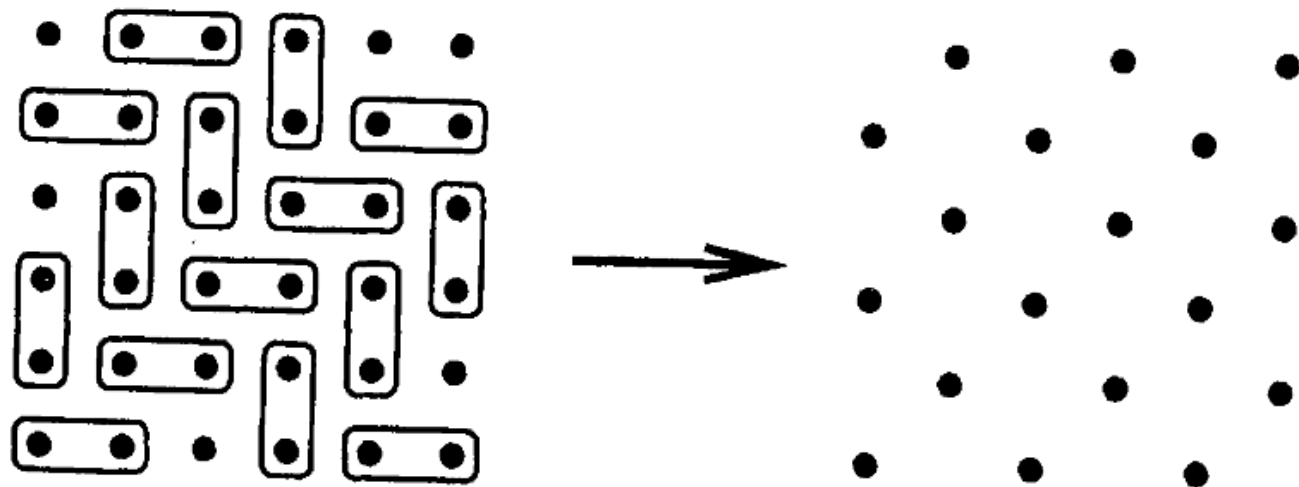


Figure 5.2 An alternative blocking scheme for renormalizing the square lattice. Here all length scales must be divided by a factor of $b = \sqrt{2}$. The final lattice will therefore have fewer sites than the original by a factor of $b^2 = 2$.

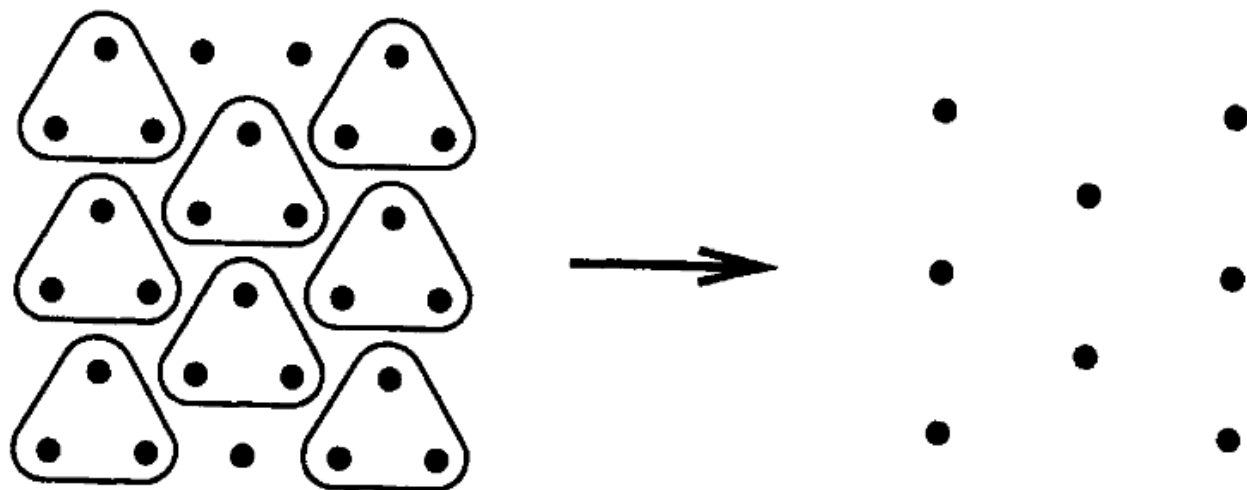


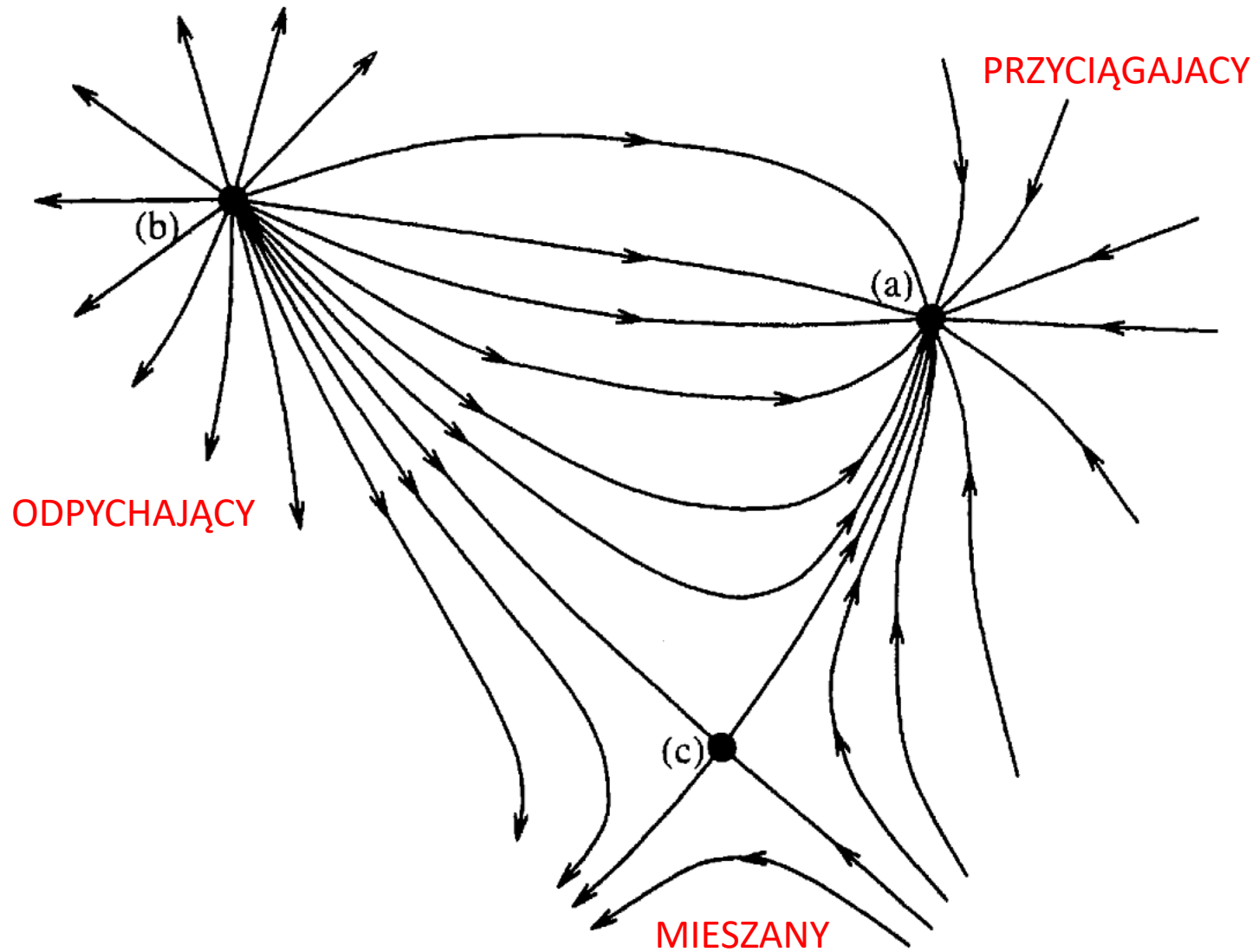
Figure 5.3 Renormalization of a triangular lattice. The linear dimensions of the lattice on the right must be shrunk by a factor of $b = \sqrt{3}$ to render it similar to the original one. The final lattice therefore has fewer sites than the original by a factor of $b^2 = 3$.

RENORMALIZACJA

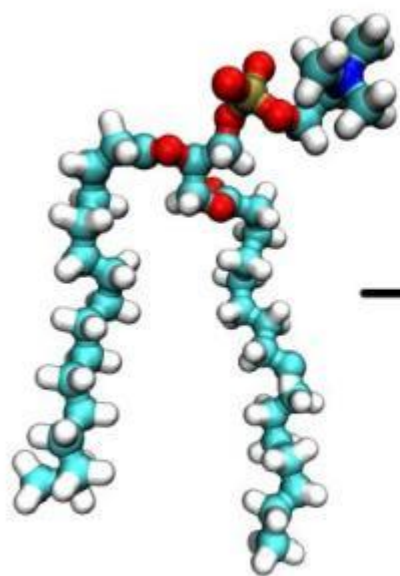
- Hamiltonian: funkcja zwracająca energię
np. dla modelu Isinga: $H = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j - B \sum_i s_i$
- Chcemy żeby po normalizacji miał tę samą postać (w praktyce spełnione w przybliżeniu)
- Wtedy renormalizacja zmienia tylko parametry (np. temperaturę czy stałe):

$$\mathbf{H}^{(n+1)} = \mathbf{R}(\mathbf{H}^{(n)})$$

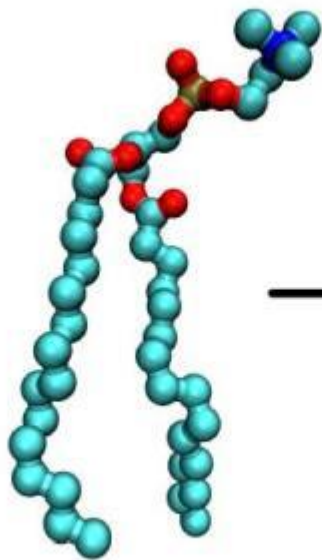
PUNKTY STAŁE



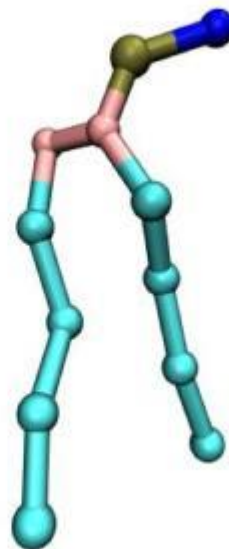
MODELE GRUBOZIARNE



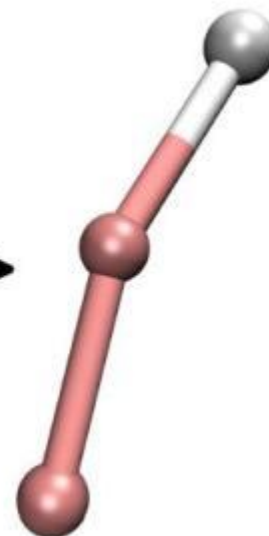
CHARMM



Berger et al.

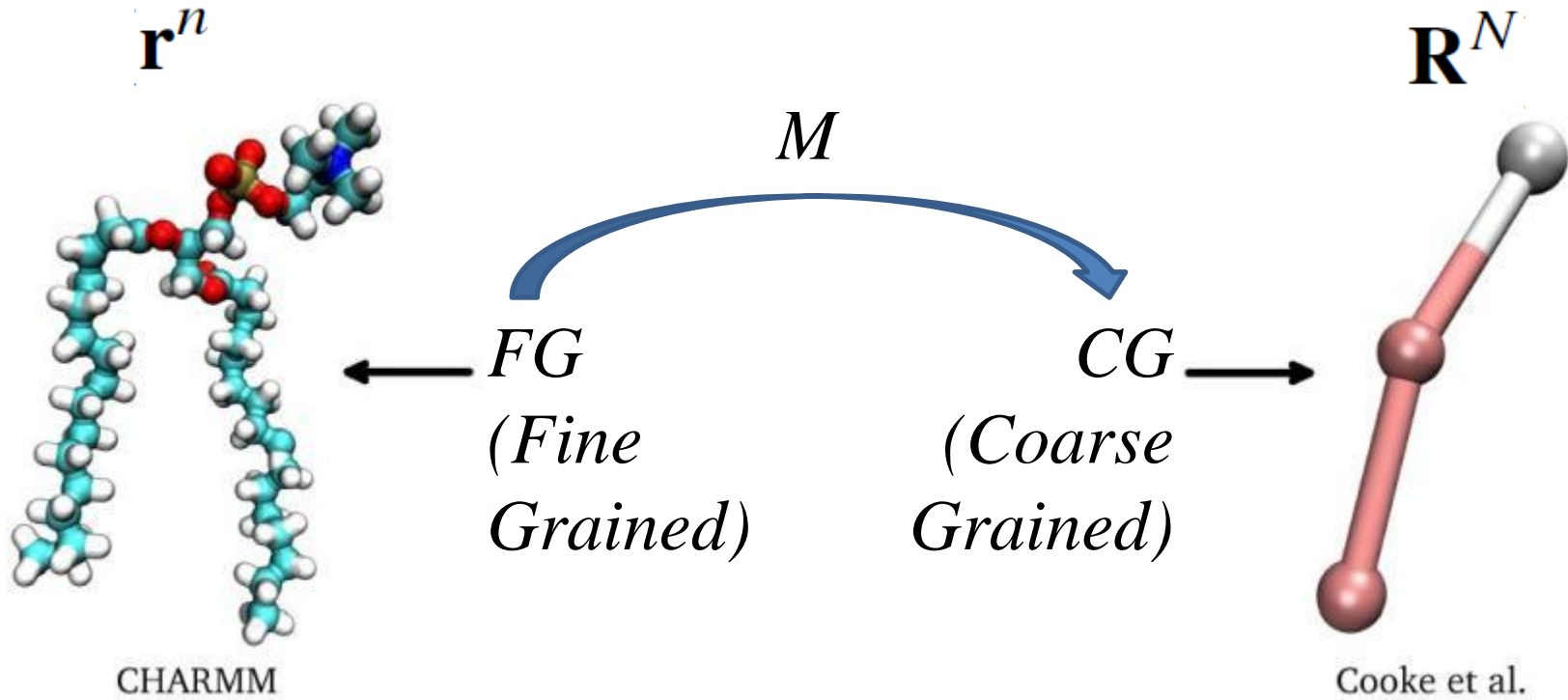


MARTINI



Cooke et al.

ODWZOROWANIE



$$\begin{aligned} A_{CG}(\mathbf{R}^N) &= \langle A_{FG}(\mathbf{r}^n) \rangle_{\mathbf{R}^N} \\ &= \frac{\int d\mathbf{r}^n A_{FG}(\mathbf{r}^n) \delta(M(\mathbf{r}^n) - \mathbf{R}^N) e^{-\beta U_{FG}(\mathbf{r}^n)}}{e^{-\beta U_{CG}(\mathbf{R}^N)}} \end{aligned}$$

ENERGIA WEWNĘTRZNA

$$\begin{aligned} E_{CG}(\mathbf{R}^N) &= \langle U_{FG}(\mathbf{r}^n) \rangle_{\mathbf{R}^N} \\ &= \frac{\int d\mathbf{r}^n \delta(M(\mathbf{r}^n) - \mathbf{R}^N) U_{FG}(\mathbf{r}^n) e^{-\beta U_{FG}(\mathbf{r}^n)}}{\int d\mathbf{r}^n \delta(M(\mathbf{r}^n) - \mathbf{R}^N) e^{-\beta U_{FG}(\mathbf{r}^n)}} \\ &= \frac{\int d\mathbf{r}^n \delta(M(\mathbf{r}^n) - \mathbf{R}^N) \frac{-de^{-\beta U_{FG}(\mathbf{r}^n)}}{d\beta}}{\int d\mathbf{r}^n \delta(M(\mathbf{r}^n) - \mathbf{R}^N) e^{-\beta U_{FG}(\mathbf{r}^n)}} \\ &= -\frac{d}{d\beta} \ln \int d\mathbf{r}^n \delta(M(\mathbf{r}^n) - \mathbf{R}^N) e^{-\beta U_{FG}(\mathbf{r}^n)} = \frac{d\beta U_{CG}(\mathbf{R}^N; \beta)}{d\beta} \\ &= U_{CG}(\mathbf{R}^N; \beta) + \beta \frac{dU_{CG}(\mathbf{R}^N; \beta)}{d\beta} \end{aligned}$$

BIBLIOGRAFIA

Prawa potęgowe:

[0] https://en.wikipedia.org/wiki/Power_law [1]

https://web.physics.ucsb.edu/~mmanning/What_are_Power_Laws.html

[2] <https://networkscience.wordpress.com/2012/04/19/power-law-paradox-power-law-exponent-does-not-mean-what-you-think-it-means/>

Renormalizacja:

[1] Binney J. J., Dowrick N. J., Fisher A. J. & Newman M. 1992. **The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group.** Oxford University Press, Inc., USA.

Modele gruboziarniste:

[1] Wagner J. W., Dama J. F., Voth G. A. (2016). **On the representability problem and the physical meaning of coarse-grained models.** Journal of Chemical Physics, 145, 044108.

[2] Habibi M., Rottler J. & Plotkin S. S. (2016). **As Simple As Possible, but Not Simpler: Exploring the Fidelity of Coarse-Grained Protein Models for Simulated Force Spectroscopy.** PLoS Comp.Biol. 12(11),1-31.