



2023-24

Linux Bash C++ Root LaTex Python



UNIVERSITÀ
DI PAVIA

Metodi informatici della Fisica



Intro 0: l'informatica e
il mestiere del fisico

Susanna.Costanza@unipv.it

Andrea.Negri@unipv.it

1) XYZ

$$H = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi - [E - V_{ext}] \Psi = 0$$

$$\Psi = (\Psi_{0,0,0} + i\varepsilon \Phi) e^{iE \frac{x}{\hbar}}$$

$$E - E_0 \sim \varepsilon^2$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_0}{\partial x} = (E - H)\Psi_0$$

$$\Psi_{0,0,0} = P_0 e^{-K}$$

$$\Psi = (\Psi_{0,0,0} + i\varepsilon \Phi) e^{iE \frac{x}{\hbar}}$$

$$V_{ext}(x)$$

$$\Phi = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{L^3}{L^3} = \frac{k \cdot L^3}{L^3}$$

$$\Psi = P_k \rightarrow \Psi = V$$

$$S = \sum_i S(x_i)$$

$$S = \int dV (\bar{\Psi} - \Psi \bar{\Psi}) dV$$

$$\frac{H_0}{2) M \ll \infty}$$

$$V \leq V_0$$

$$\begin{matrix} E=0 \\ A=0 \end{matrix}$$

$$\frac{\Psi - V}{U} H_0 = 0$$

$$E_y = E_{3,3} - \frac{2}{3}$$

$$V = V_0 e^{-\frac{3}{4}}$$

$$H_2 = H_0 e^{-\frac{3}{4}}$$





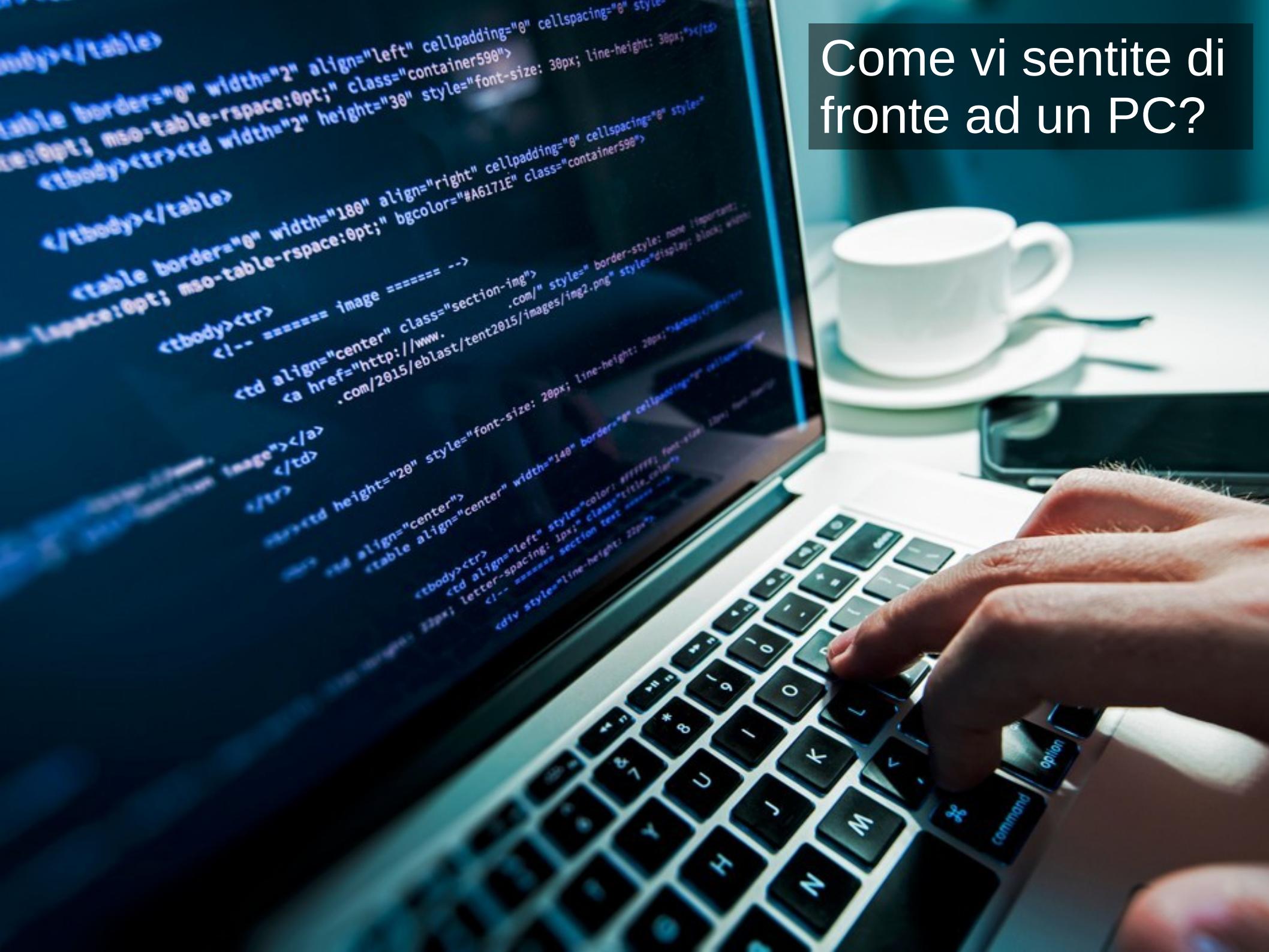
```
tbody>/table>

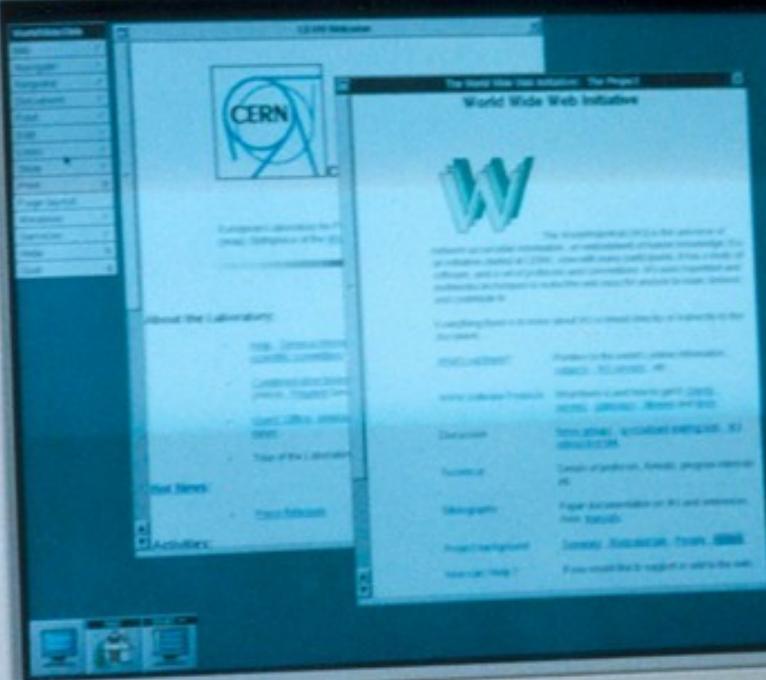

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <tr><td width="2" height="2" style="font-size: 30px; line-height: 30px;">                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| <tr>   <td align="center" class="section-img" style="border-style: none; width: 140px; height: 20px; font-size: 20px; line-height: 20px; letter-spacing: 1px; color: #FFFFFF; font-weight: bold; text-align: center; vertical-align: middle; padding: 0; margin: 0; border: 0; background-color: #A6171E; position: relative; z-index: 1; <div style="line-height: 22px; position: absolute; top: -10px; left: 0; width: 100%; height: 10px; background-color: #A6171E; border-radius: 5px; </div><div style="position: absolute; top: 0; left: 0; width: 100%; height: 100%; background-color: black; opacity: 0.5; z-index: 0; </div></td> |


```



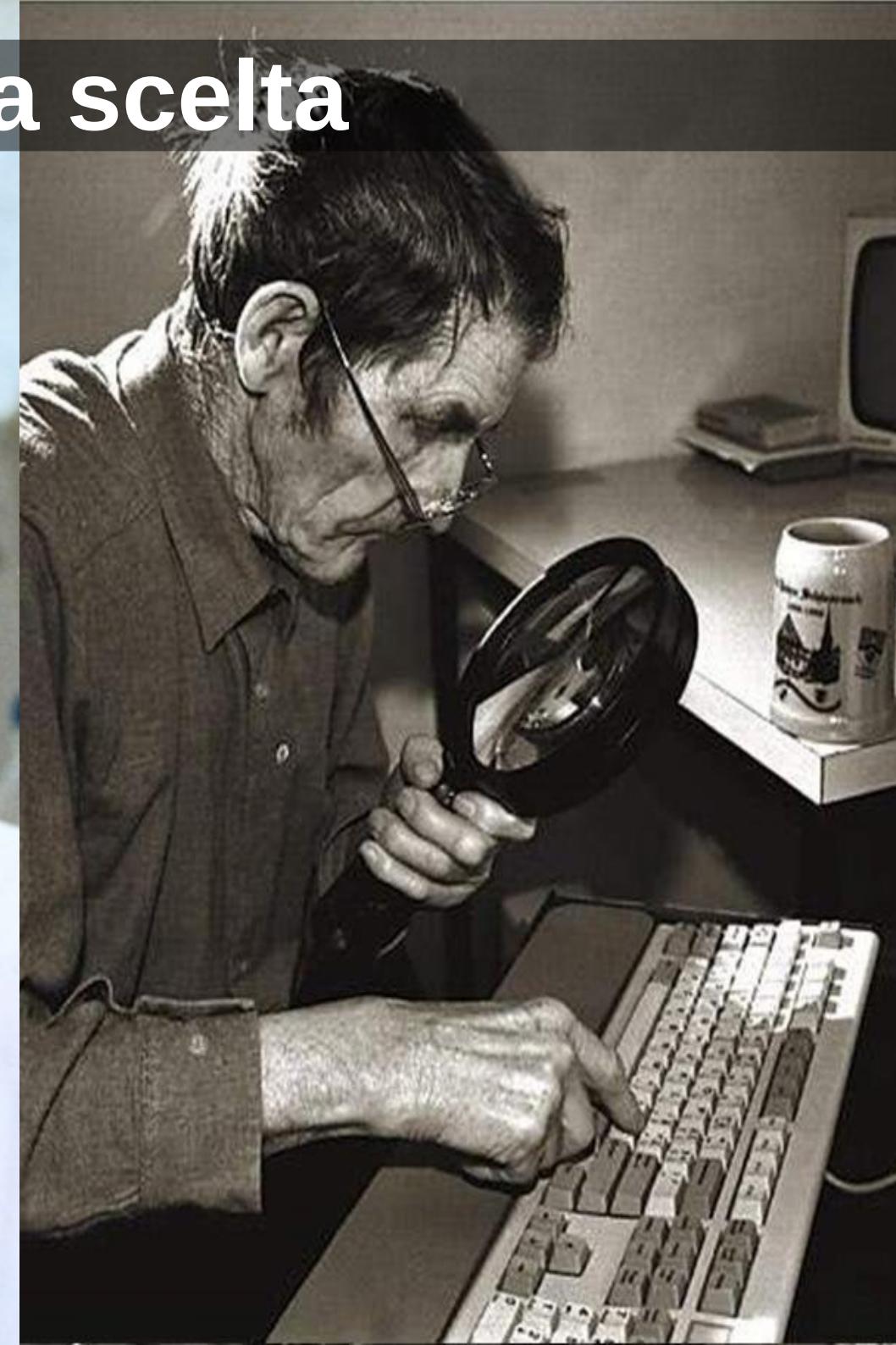
Come vi sentite di
fronte ad un PC?







A voi la scelta





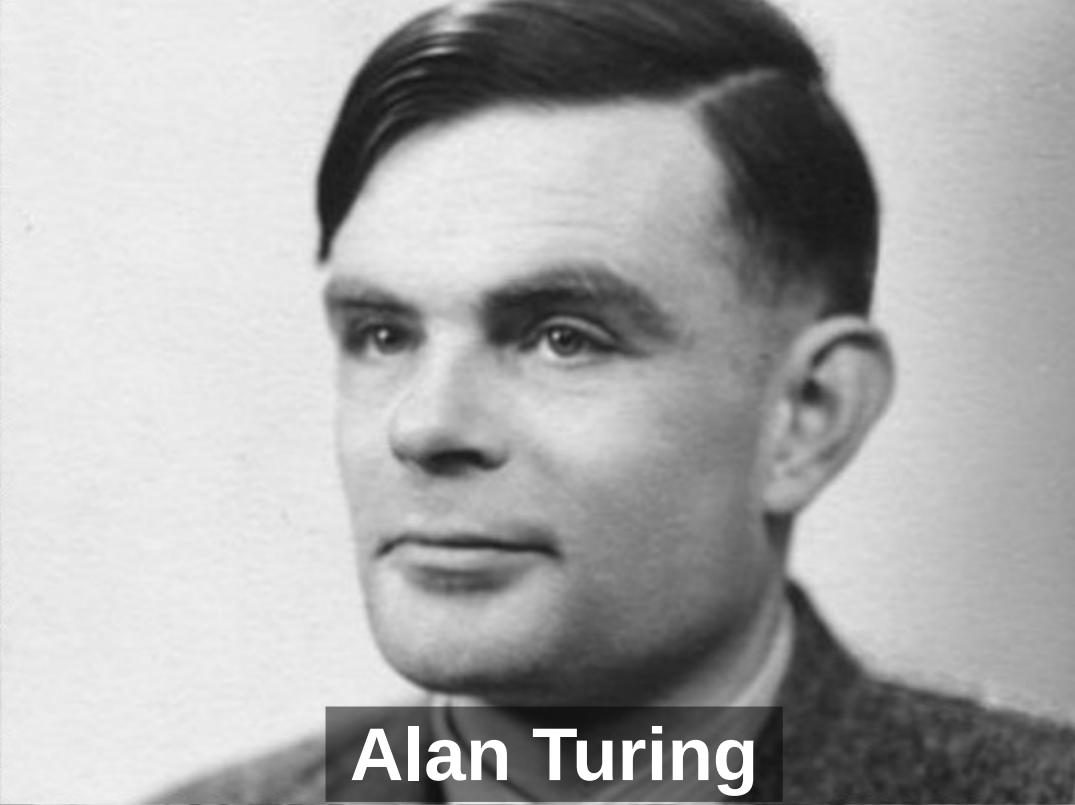
Ma siamo fisici,
l'informatica è puro
tecnicismo!







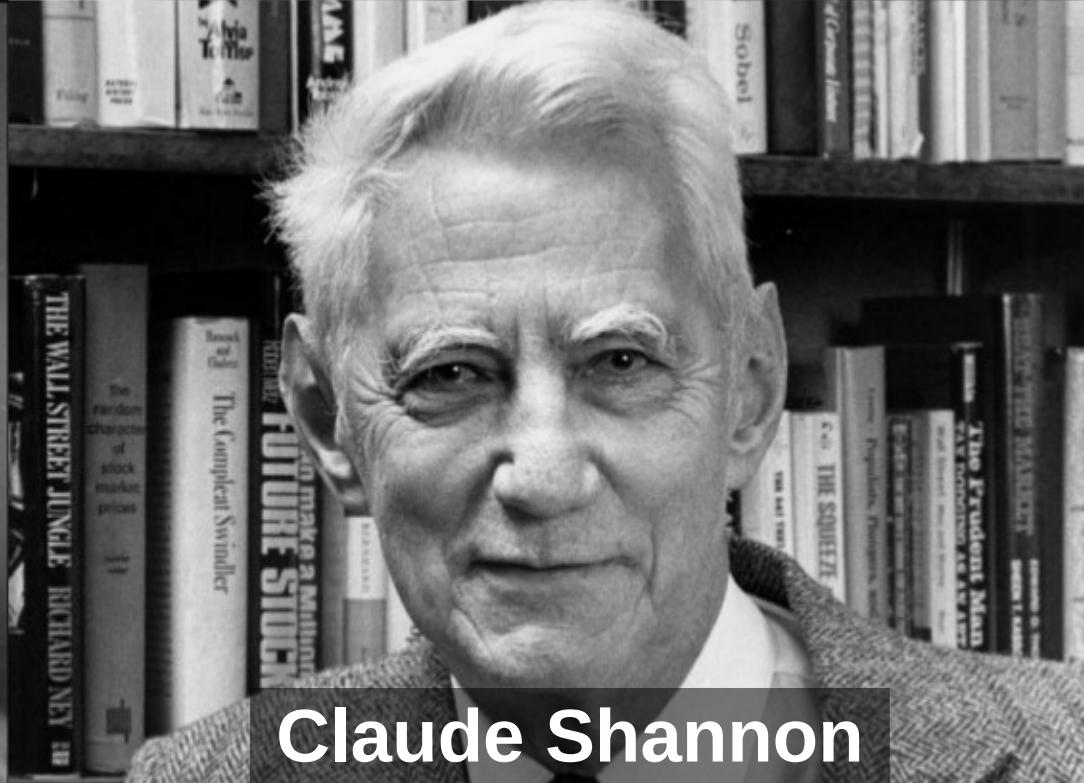
Gottfried Leibniz



Alan Turing



John von Neumann



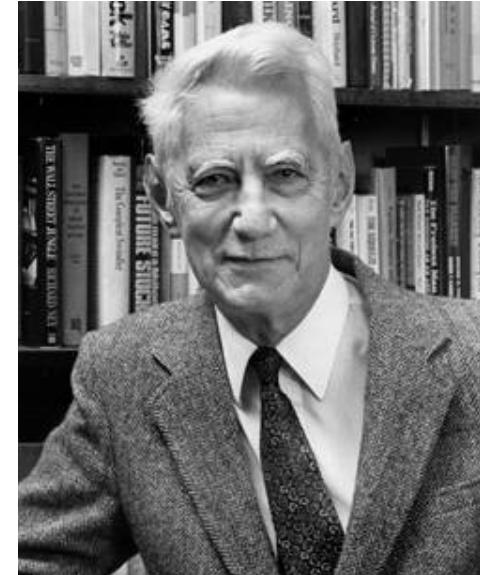
Claude Shannon



Informatica & fisica



- Ma siamo fisici, l'informatica è puro tecnicismo!
 - Non esattamente ;-)
- Ditelo a questi signori
 - L'universo digitale deriva dalla logica simbolica formalizzata da matematici e fisici





L'universo digitale



- **Leibniz** è il precursore dell'informatica e del calcolo automatico
- Formalizza il sistema binario
 - Francis Bacon aveva già dimostrato che con 2 simboli si può codificare \forall tipo di comunicazione
- Dimostra che un sistema coerente di logica e linguaggio è formalizzabile per mezzo di un alfabeto di simboli manipolabili per via meccanica
 - Mappatura tra **numeri** e **concetti**
 - Tra logica e meccanismo: cioè il **software**

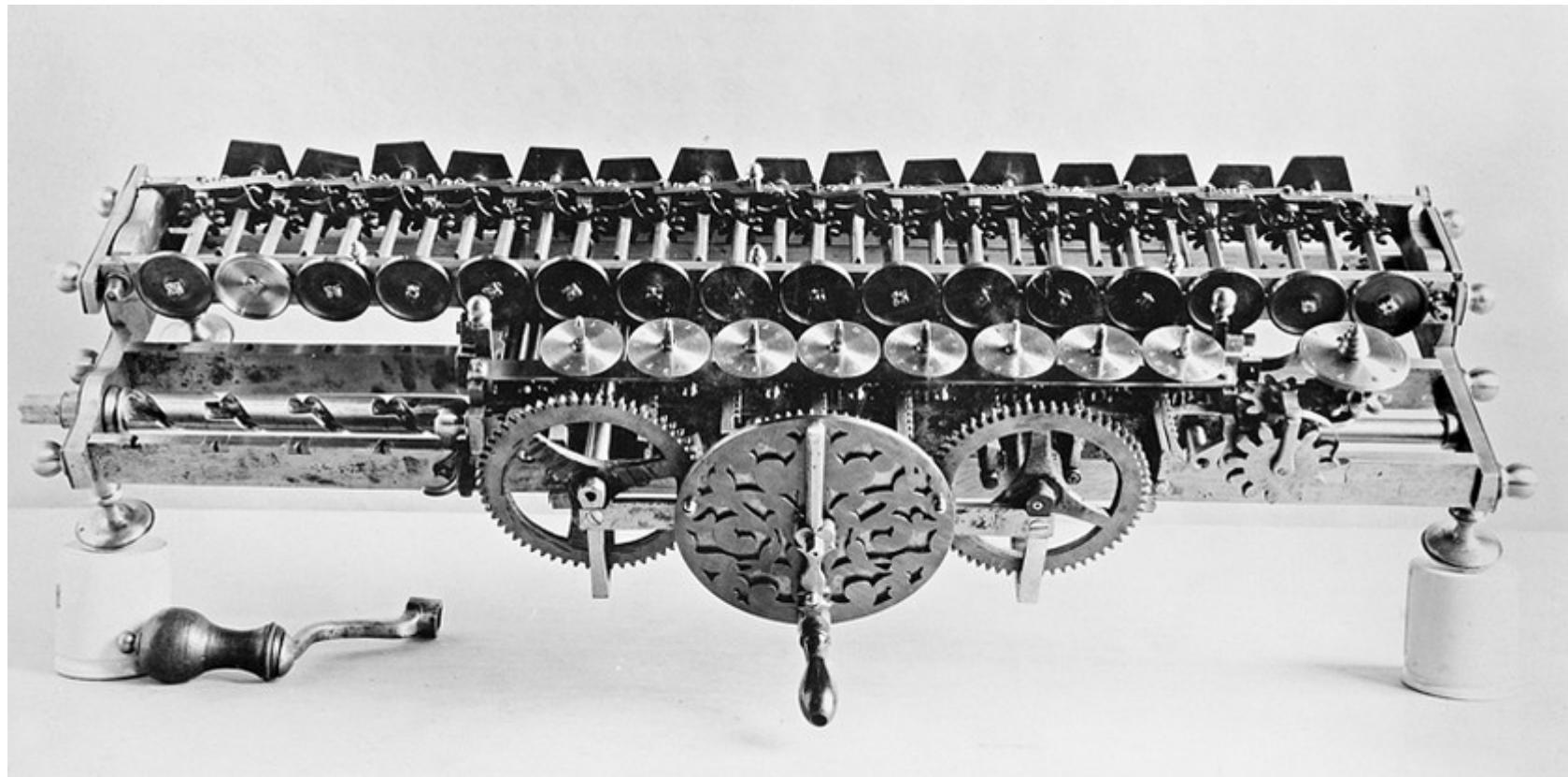




L'universo digitale



- Inventa calcolatrice meccanica
 - Col sistema binario e la possibilità di scorrere a sx e dx si può **automatizzare l'aritmetica**
 - Mancava poter salvare i dati: la memoria





Problema delle decisione



- 1900 David **Hilbert**:
“Entscheidungproblem”,
 - E' possibile definire a priori e in un tempo finito la **dimostrabilità** di un enunciato attraverso procedure automatizzabili?
- 1931 Kurt **Gödel**:
teorema dell'incompletezza
 - In qualunque sistema formale esisteranno sempre enunciati indimostrabili





Problema delle decisione



- 1900 David **Hilbert**:
“Entscheidungproblem”,
 - E' possibile definire a priori e in un tempo finito la **dimostrabilità** di un enunciato attraverso procedure automatizzabili?
- 1931 Kurt **Gödel**:
teorema dell'incompletezza
 - In qualunque sistema formale esisteranno sempre enunciati indimostrabili

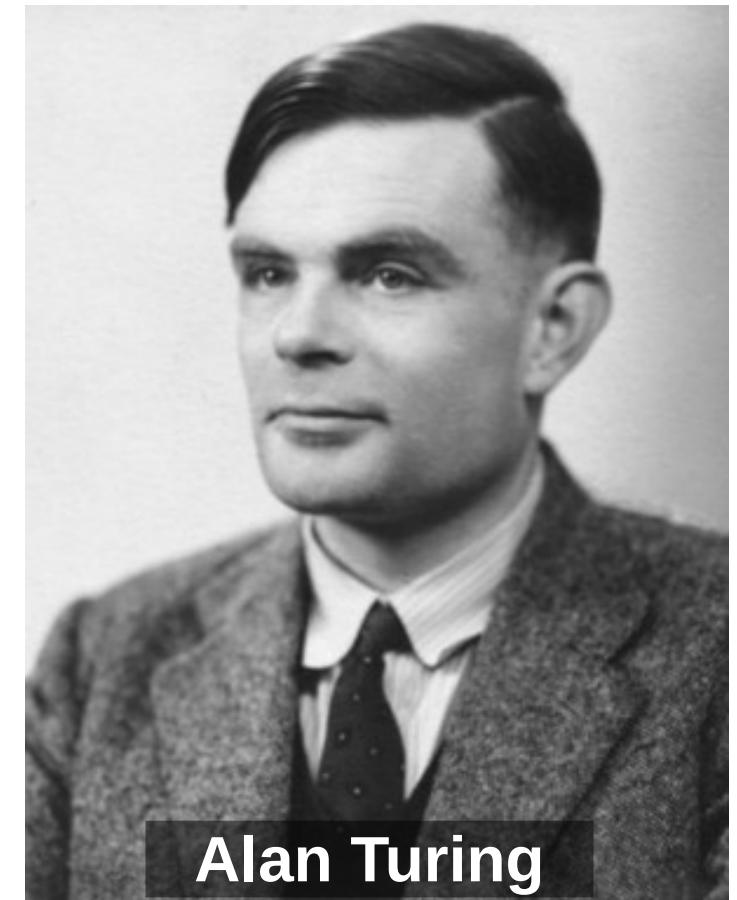




Problema delle decisione



- 1936 Alan **Turing**: “*On Computable Numbers, with an application to Entscheidungsproblem*”
 - Dimostra che non esiste metodo definito per decidere a priori della **computabilità** di un algoritmo ([pdf](#))
- Definendo una macchina ideale (**di Turing**) dimostrò:
 - che era possibile costruire funzioni di cui si poteva dare una descrizione finita
 - ma che non potevano essere calcolate con strumenti e tempi finiti



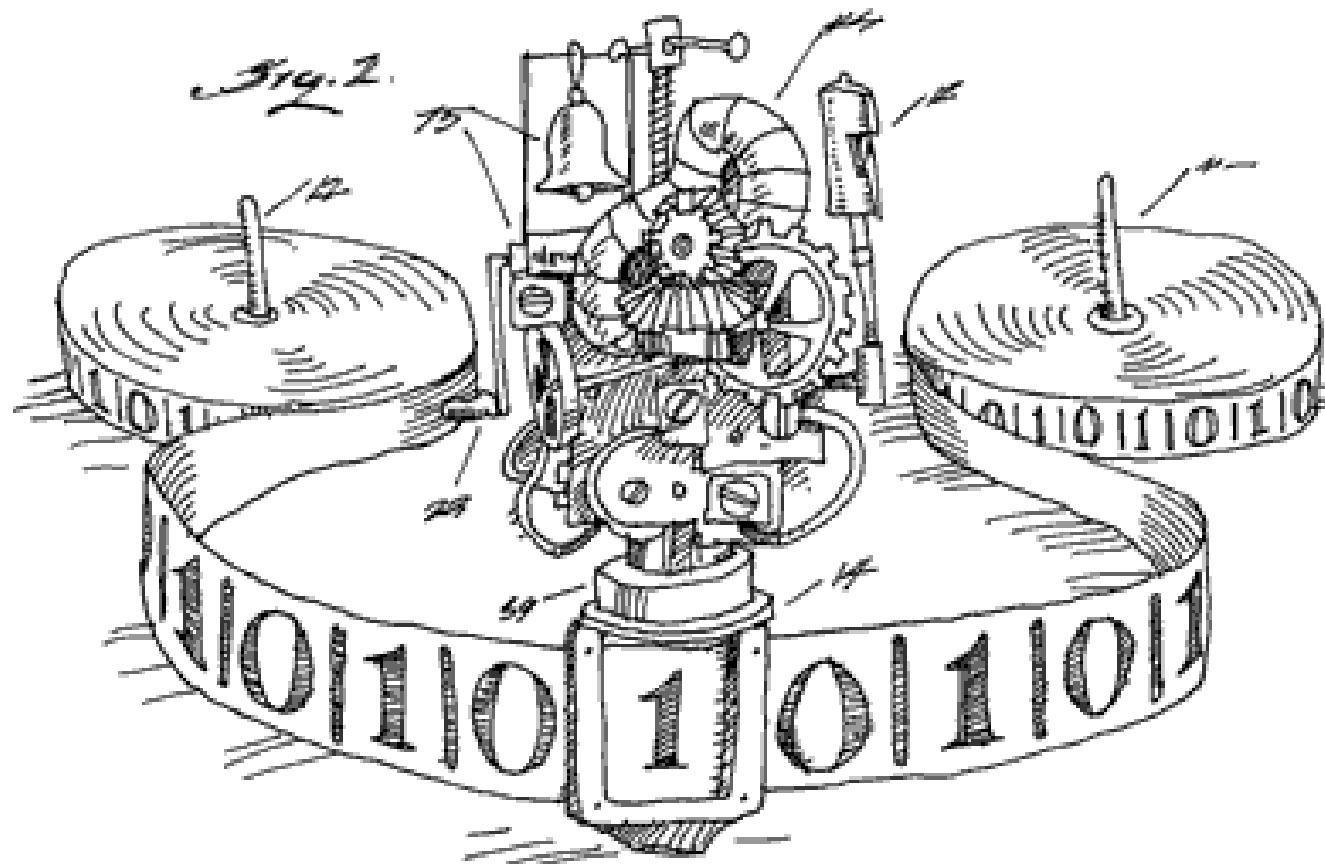
Alan Turing



La macchina di Turing



- Ipotetico nastro infinito con caselle contenenti simboli di un sistema formale
 - I simboli sono **numeri** e sono sia dati sia istruzioni

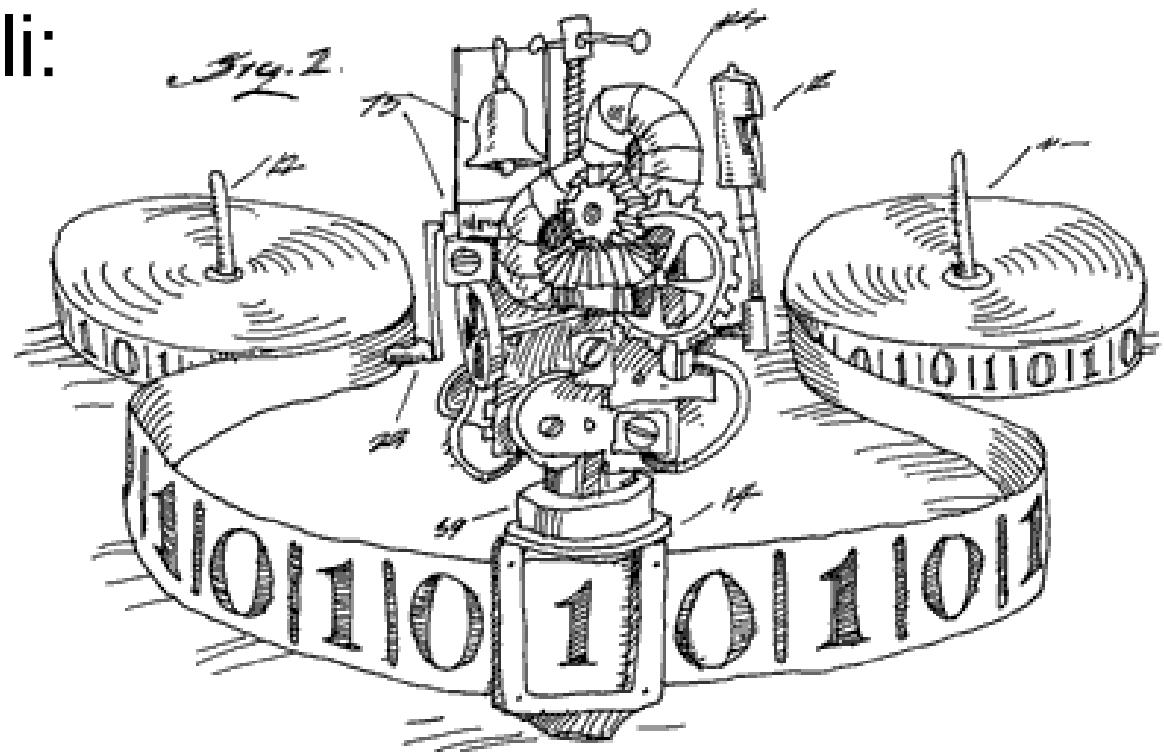




La macchina di Turing



- Ad ogni **istante discreto (t_n)** la macchina è in uno **stato finito (s_i)** definito da
 - il contenuto della casella in lettura
 - gli stati precedenti (memoria)
- Operazioni possibili:
 - Spostamento della testina
 - Lettura o scrittura
 - Cambio di stato s_i

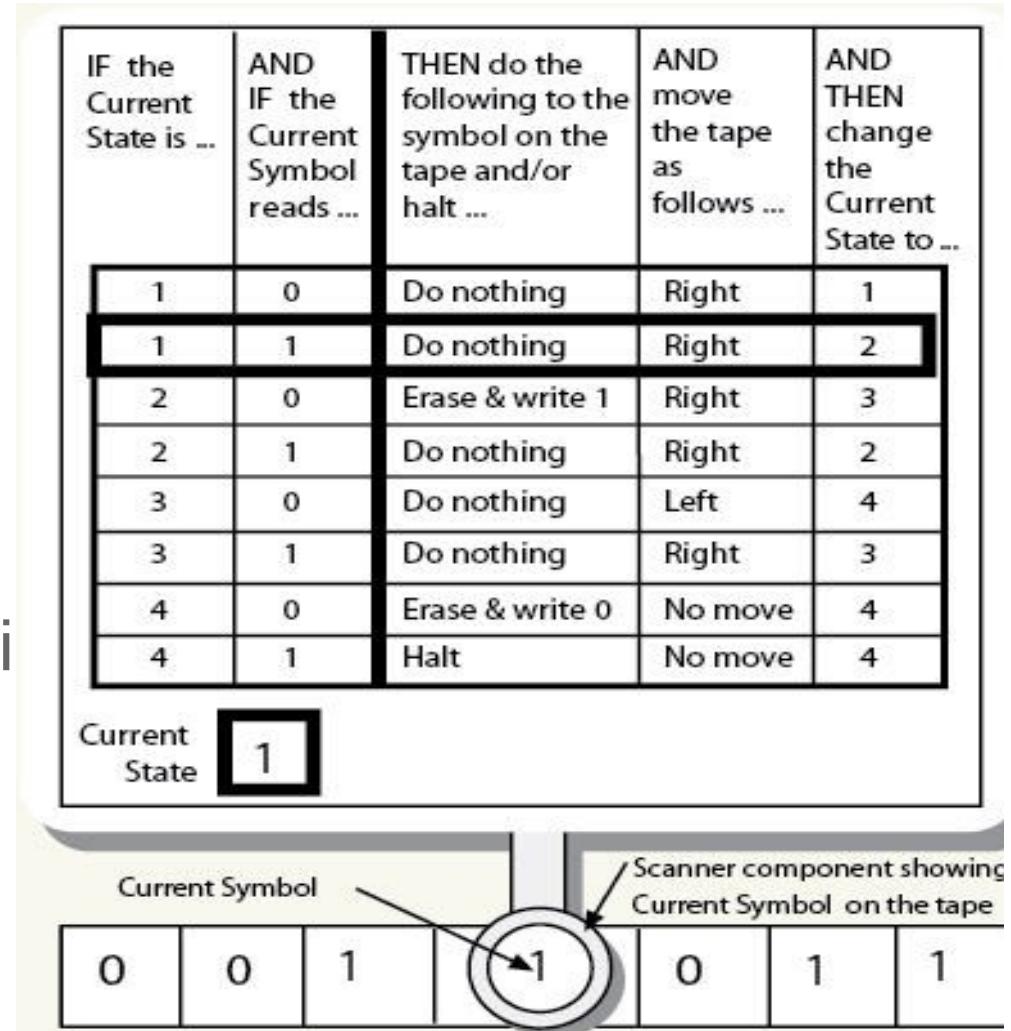




La macchina di Turing



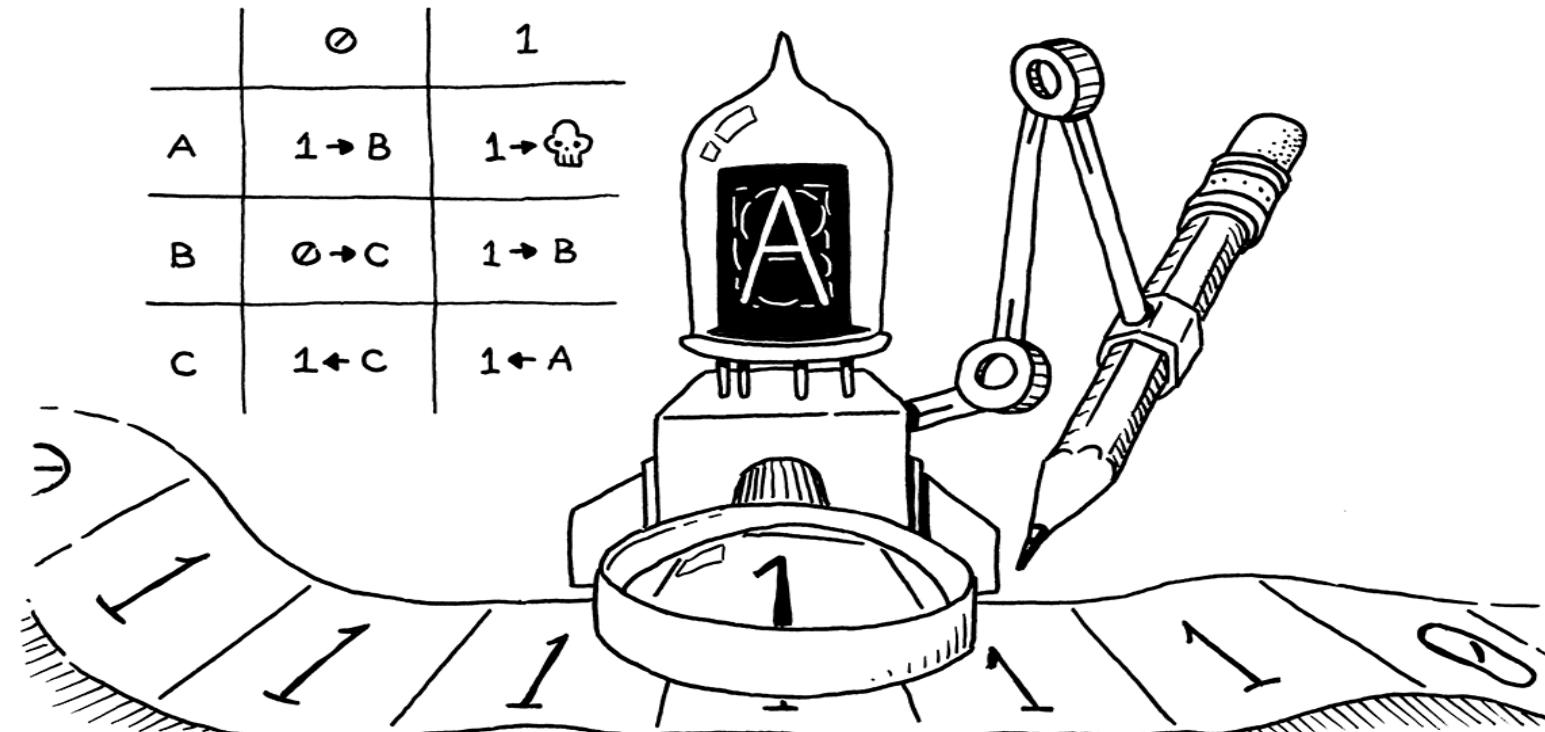
- Ogni relazione tra il nastro e la macchina è determinato da una **tabella di istruzioni (numeri!)** che elenca
 - tutti i possibili stati interni
 - tutti i possibili stati esterni
 - cosa fare quando si verificano le possibili combinazioni
- Ad esempio
 - Se: lo stato è s_i e leggi il simbolo c_k
 - Allora: $s_i \rightarrow s_j$ e scrivi c_m nella casella +3





Computabilità

- Def: una funzione è algoritmicamente **computabile**
↔ è computabile da una macchina di Turing
 - Una macchina reale che permetta di risolvere tutti i problemi risolvibili da m. di Turing è “**Turing-completa**”
 - Una macchina di Turing può simulare altre m. di Turing

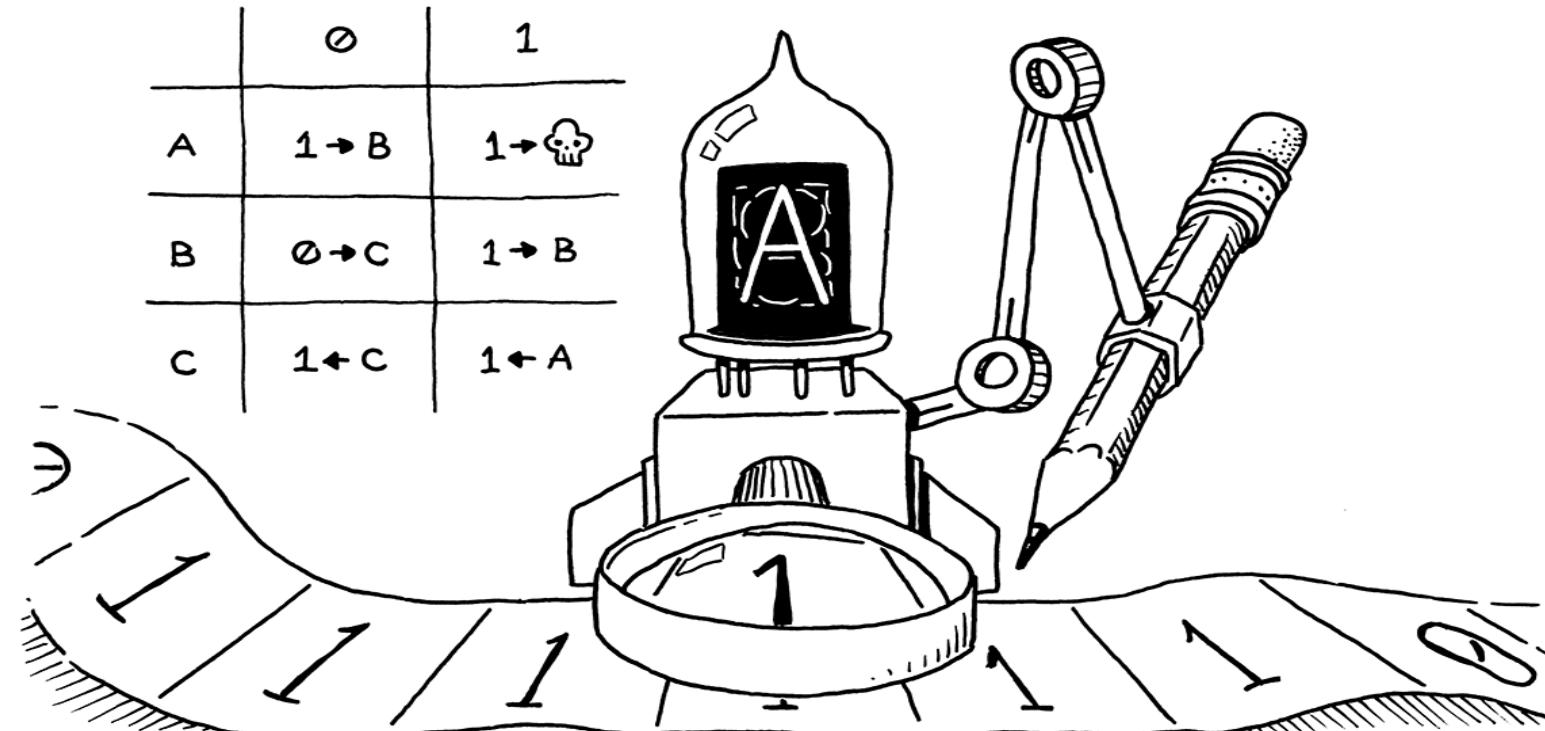




Concetti chiave



- **Discretezza** temporale e di stato
 - Per m. Turing il tempo == sequenza di cambiamenti di stato
- Sia i **dati** che le **istruzioni** sono **numeri**
 - prima di Turing si facevano cose con i numeri
 - dopo Turing i numeri cominciano a fare cose

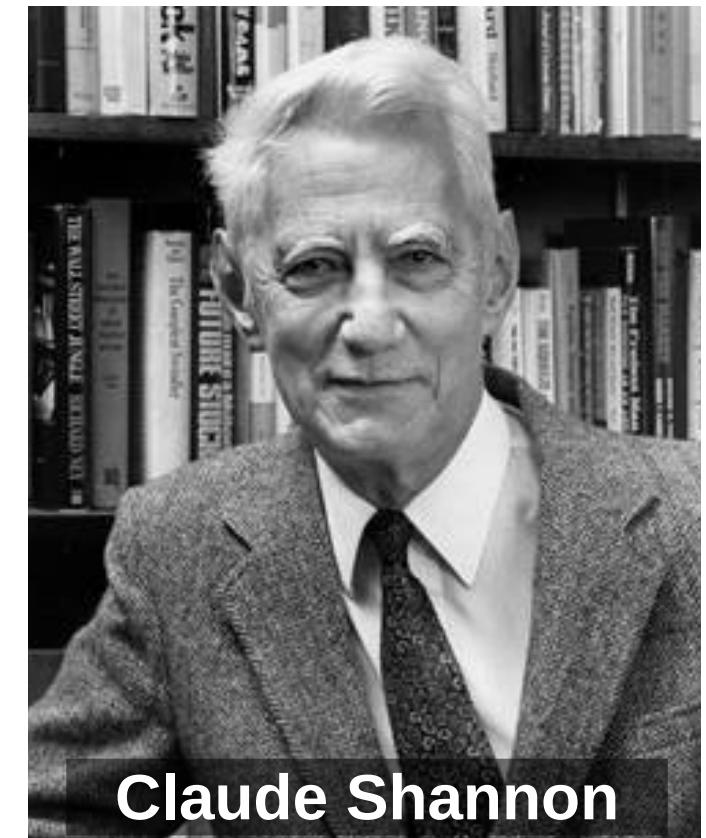




Shannon



- Fonda le basi per i **circuiti digitali**
 - dimostrando che è possibile implementare logica booleana e aritmetica binaria su circuiti elettrici
- Fonda le basi della teoria matematica della **crittografia**
 - *Communication Theory of Secrecy Systems*, 1949
- Contribuisce al teorema del **campionamento**
 - rappresentazione di un segnale continuo (analogico) mediante un insieme discreto di campioni temporali: la **digitalizzazione**



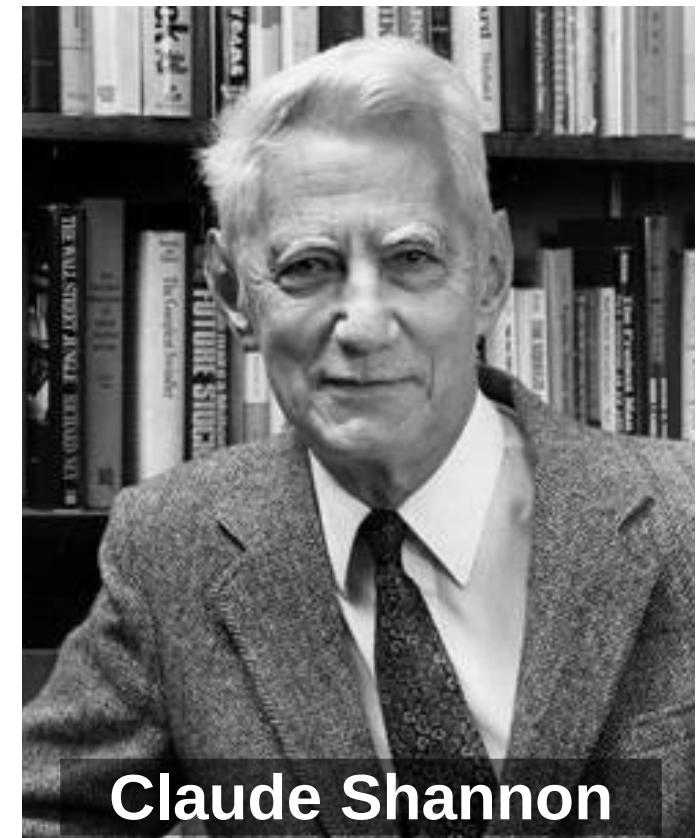
Claude Shannon



Binary digit (bit)



- Fonda la **teoria dell'informazione**
 - *A Mathematical Theory of Communication*, 1948
- Definisce la quantità di **informazione** come misura dell'incertezza di una variabile (entropia di Shannon)
 - Se P è la probabilità di un evento l'informazione è definita come
$$I[\text{bit}] = -\log_2 P$$
 - Quindi
 - $P = .5 \rightarrow I = 1 \text{ bit}$
 - $P = 0 \rightarrow I = \infty \text{ bit}$
 - $P = 1 \rightarrow I = 0 \text{ bit}$
 - Seguono i limiti di trasmissione e comprimibilità dell'informazione



Claude Shannon



Von Neumann



- Contributi in innumerevoli campi
 - teoria degli insiemi, analisi funzionale, topologia, fisica quantistica, economia, teoria dei giochi, fluidodinamica ...
- Informatica
 - Contributo alla nascita del **metodo Montecarlo**
 - Sviluppo del concetto degli **automi autoreplicanti**
 - Evoluzione virtuale (studio DNA), virus (infomatici)
 - **Programma** memorizzato
 - Formalizzazione dell'**architettura** alla base dei computer moderni



John von Neumann



WWW e fisica



- WWW nato al CERN nel 1989
 - Per condividere le informazioni di ricerca
 - **Tim Berners-Lee** l'idea di fondere le tecnologie di network, computing e ipertesto in un unico sistema di informazione globale: il **WWW**



Ma è roba da nerd





Siamo nerd (geek)

L'informatica è
proprio necessaria
per fare il fisico?



L'informatica è
proprio necessaria
per fare il fisico?

SI



- Necessarie buone conoscenze informatiche in **qualsiasi** campo delle fisica
- Un fisico deve sapere come funzionano gli strumenti che utilizza
 - I wonder why, I wonder why, ...
- L'informatica è metodo sperimentale all'opera
- Per noi è solo **un mezzo, non il fine**

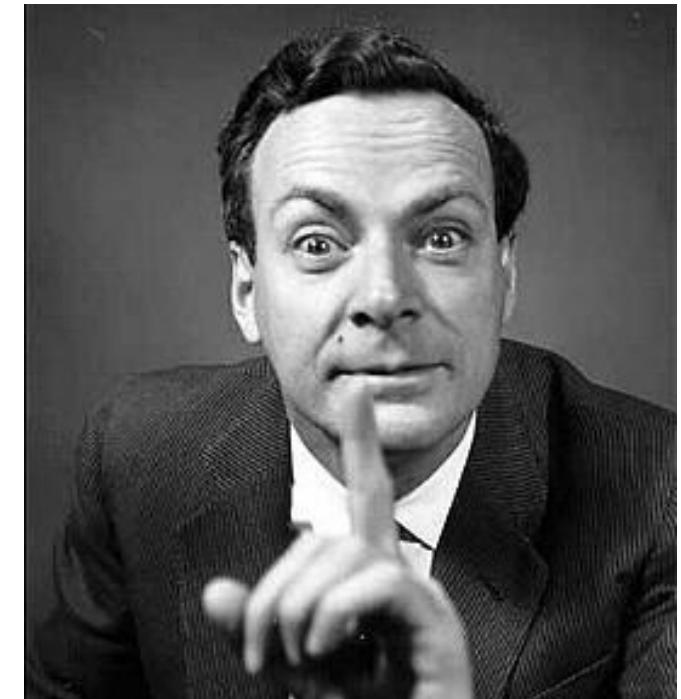




Informatica & fisica



- L'informatica è proprio necessaria per fare il fisico? **SI**
- Necessarie buone conoscenze informatiche in **qualsiasi** campo delle fisica
 - Oltre il livello di alfabetizzazione
 - Spesso può fare la differenza
- Un fisico deve sapere come funzionano gli strumenti che utilizza
 - Per conoscerne i limiti
 - Perché se non è **curioso** ...
ha sbagliato corso di laurea
- L'informatica è metodo sperimentale all'opera
 - Esperimenti virtuali
- Ovviamente per noi è **un mezzo, non il fine**



I wonder why.
I wonder why.
I wonder ...
[R.Feynman]

A che livello?



(An)alfabetizzazione informatica

Email Account Browser Install
Dropbox Web Surfing Google
Word Password Social Networks
bit byte pdf Excel



(An)alfabetizzazione informatica



 **ECDL**
European Computer
Driving Licence

Alfabetizzazione

Email Account Browser Install
Dropbox Web Surfing Google
Word Password Social Networks
bit byte pdf Excel



(An)alfabetizzazione informatica



 **ECDL**
European Computer
Driving Licence

Alfabetizzazione

Email Account Browser Install
Dropbox Web Surfing Google
Word Password Social Networks
bit byte pdf Excel

Analogia
scolastica

Scuole
elementari

Scuole
medie

Scuole
superiori

Fisico quadratico medio

(An)alfabetizzazione informatica



ECDL
European Computer
Driving Licence

Alfabetizzazione

Fisico quadratico medio

Email Account Browser Install
Dropbox Web Surfing Google
Word Password Social Networks
bit byte pdf Excel

BIOS ADSI root ls sudo
Labview port
Programming cp UEFI
host binary OperativeSystem exadecimal
IMAP python mkdir Word usb mv
Gateway Shell Router CommandLine
HTML cloud loops

Analogia
scolastica

Scuole
elementari

Scuole
medie

Scuole
superiori

(An)alfabetizzazione informatica



 **ECDL**
European Computer
Driving Licence

Alfabetizzazione

Email Account Browser Install
Dropbox Web Surfing Google
Word Password Social Networks
bit byte pdf Excel

Fisico quadratico medio

BIOS ADSI root ls
Labview port sudo
Programming cp UEFI
host binary mkdir exadecimal
IMAP python OperativeSystem Word
Gateway Shell Router mv
CommandLine HTML cloud loops



Parallel Programming

SegFault sed
SSL nfs UDP
SMTP tunnel VPN Grid
tunnel C++ DualBoot Protocols
mount awk Virtualization RSA
grep CoreDump NetworkMask
afs Mathematica debugger
VHDL pointers guiDesign FPGA
ssh TCP



Analogia
scolastica

Scuole
elementari

Scuole
medie

Scuole
superiori



Notizie dal fronte



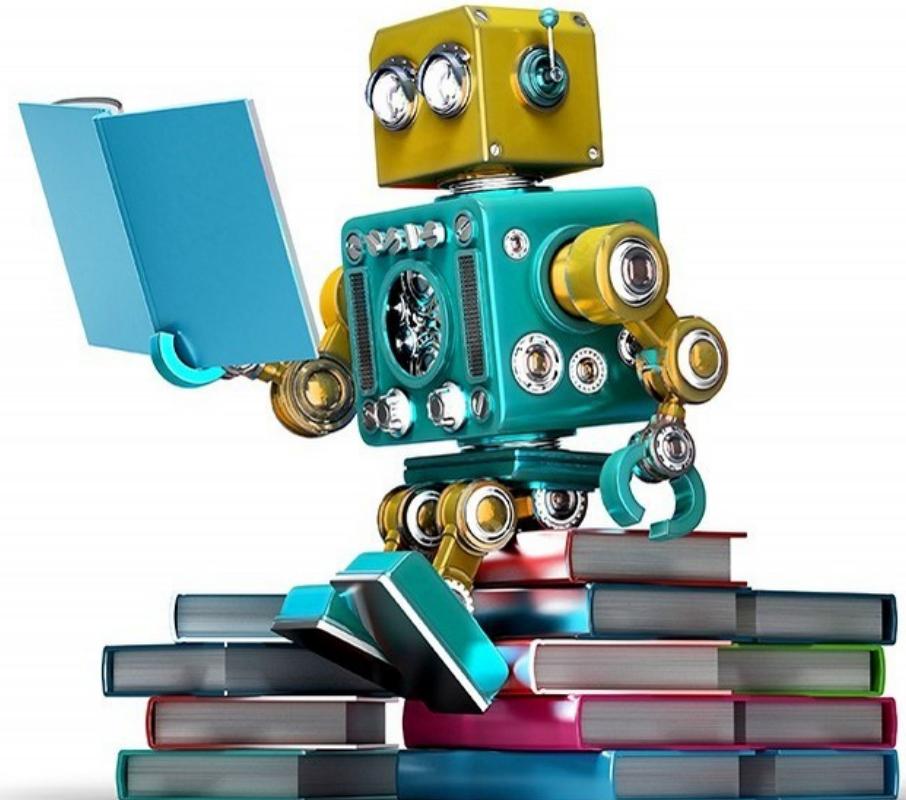
- **Big data**

- I fisici sono stati i primi ad affrontare il problema



- **Machine learning**

- Il tema del momento
 - Pervasivo in tutti i campi della scienza
 - I fisici sono stati precursori nell'uso delle reti neurali



- **Quantum computing**

- La prossima frontiera?



Obiettivi del corso

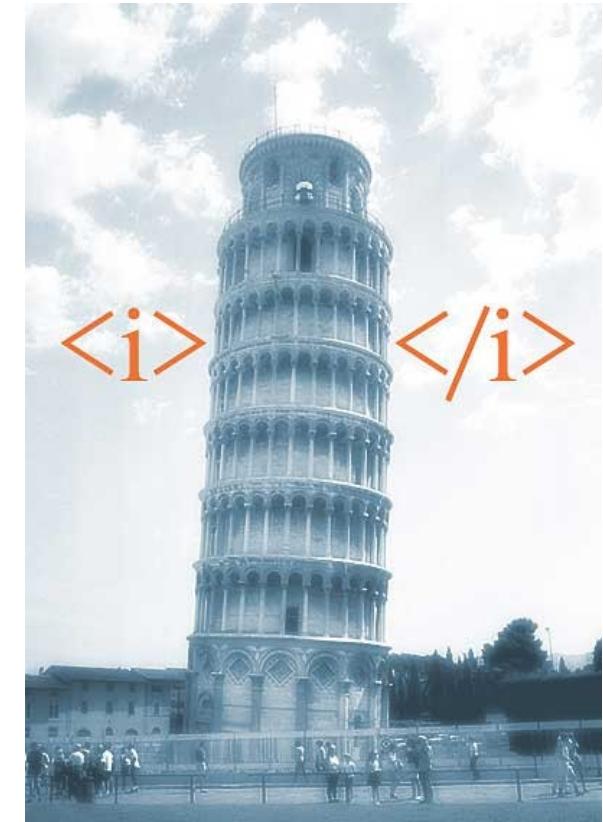
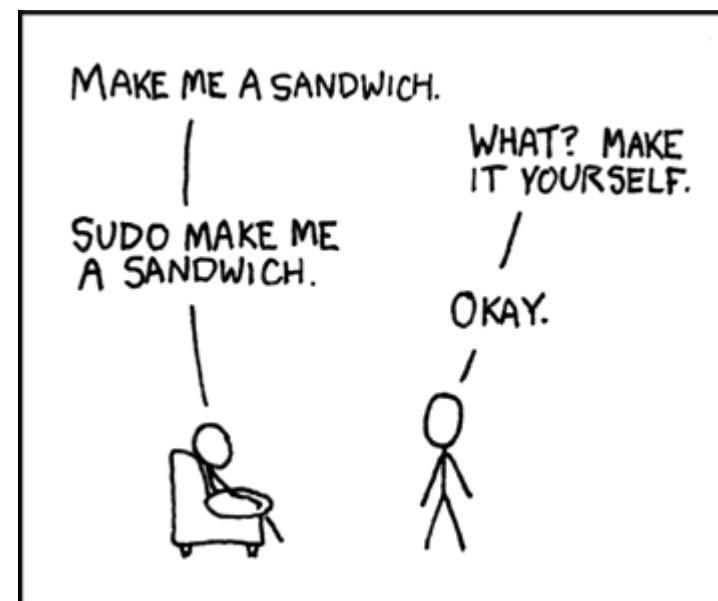




Capire le battute nerd



Ceci n'est pas
une pipe



Corretto uso dello strumento



Potenzialità del computer



Concetti base



Per poter imparare da soli



Approccio pragmattico



Un mezzo, non il fine



Focus sulla pratica





Obiettivi del corso



- Introduzione all'informatica con approccio **pragmatico**
 - formalizzazione dei problemi risolvibili per via informatica
 - procedure di debugging
- Familiarizzare con l'**uso consapevole del PC**
 - Cioé sfruttarlo in modo appropriato
- **Conoscenza** delle potenzialità del computer
 - Precisioni raggiungibili, durata di un calcolo, ecc
- **Concetti base** dei linguaggi di programmazione
 - **Non** dei dettagli di un linguaggio specifico
- Fornire le **basi** per poter apprendere nuovi linguaggi e/o strumenti informatici quando necessario
- Focus sulla **pratica**



Conoscenze preliminari?



- Non è necessaria alcuna conoscenza preliminare
 - I ringraziamenti qui sotto (tesi di laurea in fisica del 1988) sono di uno dei massimi esperti di informatica del CERN

Introduzione xi

Ringraziamenti

Durante lo svolgimento di questa tesi, sono spesso dovuto ricorrere all'aiuto ed ai suggerimenti di numerose persone, di Pavia e del CERN: è molto difficile riuscire a ricordare qui tutti quanti abbiano in qualche misura contribuito alla realizzazione di questo lavoro, per cui mi scuso anticipatamente con chi venga trascurato nelle poche righe seguenti.

Un doveroso ringraziamento va al mio relatore, Prof. Claudio Conta, che ha dovuto sopportarmi per tutto questo periodo di Tesi, e al Dott. Valerio Vercesi il quale ha dovuto fare i conti con la mia assoluta inesperienza nel campo del software.

Devo anche ringraziare tutti i membri del gruppo di UA2 della Sezione



Altri corsi sul tema



UNIVERSITÀ DI PAVIA

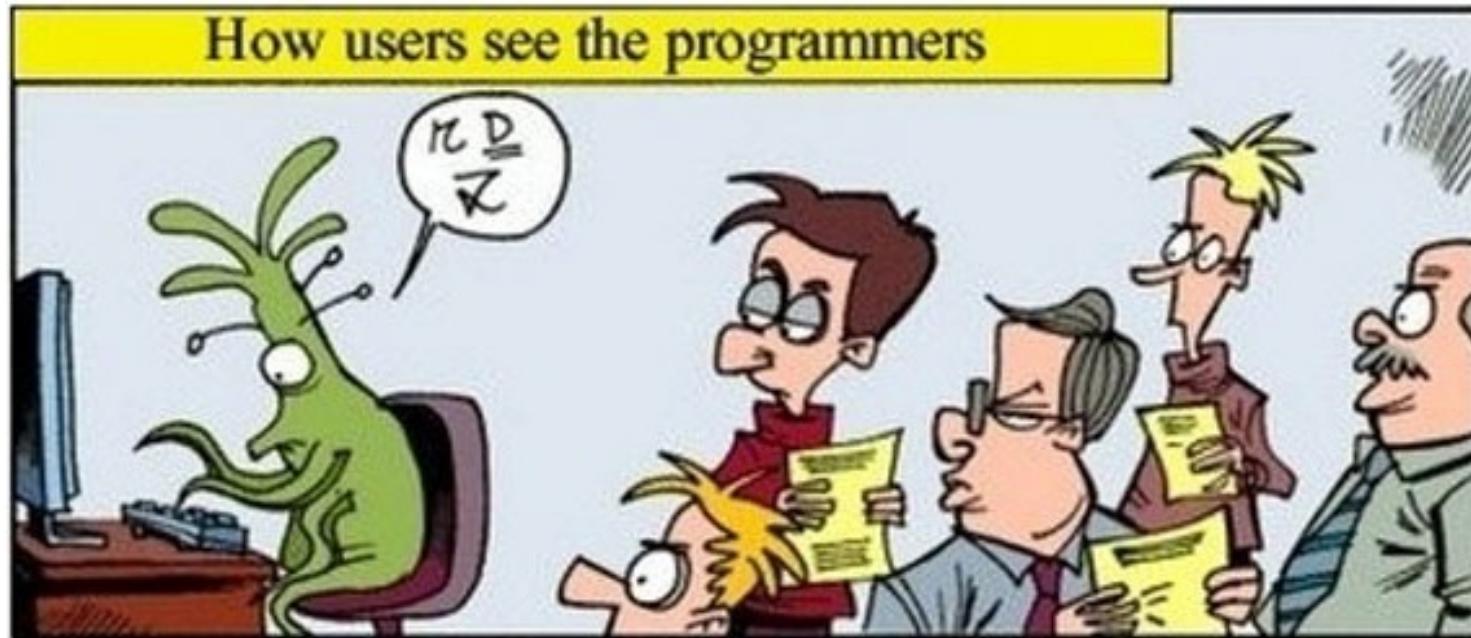
Dipartimento di Fisica



- Triennale
 - Tecniche digitali di acquisizione dati [A.N., Ferrari]
 - Problem Solving in Fisica
[A.N., Andreani, Carante, Livan]
- Magistrale
 - Metodi Computazionali della Fisica [Piccinini]
 - Artificial Intelligence for experimental physics
[Costanza, Postuma, Polesello]
 - Simulations in particle and medical physics
[Bortolussi, Costanza]

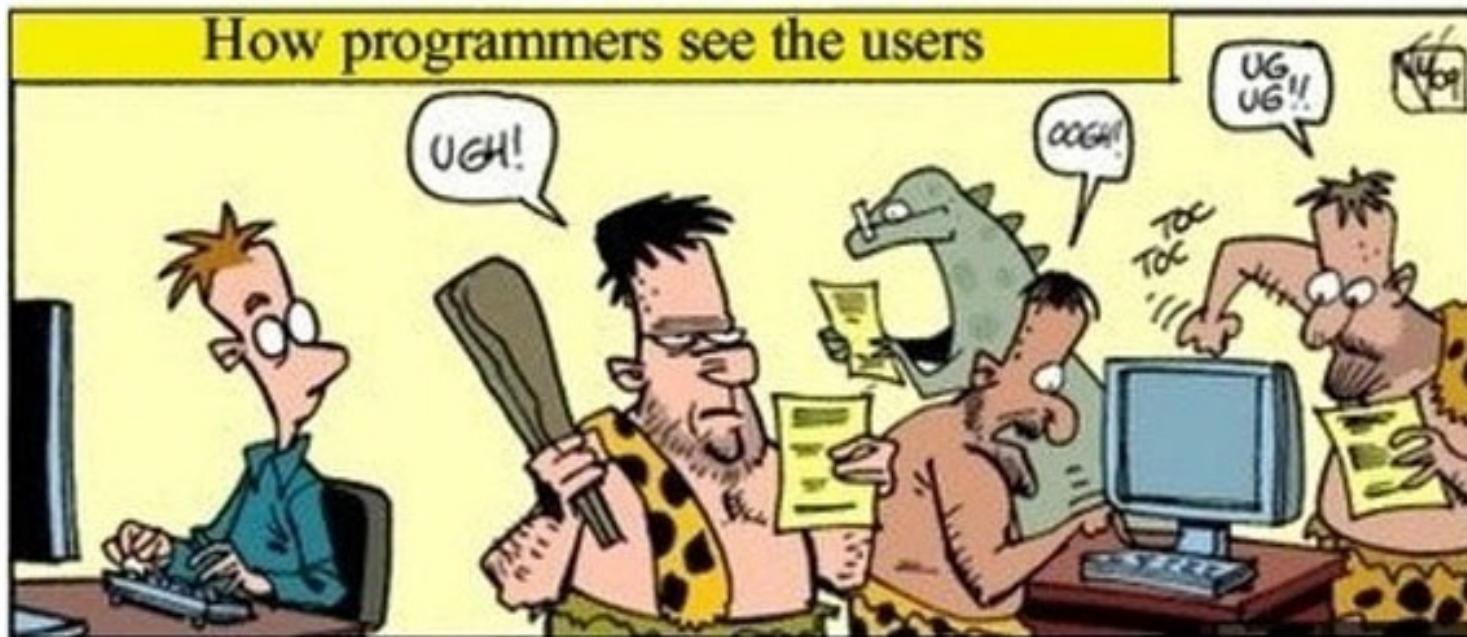
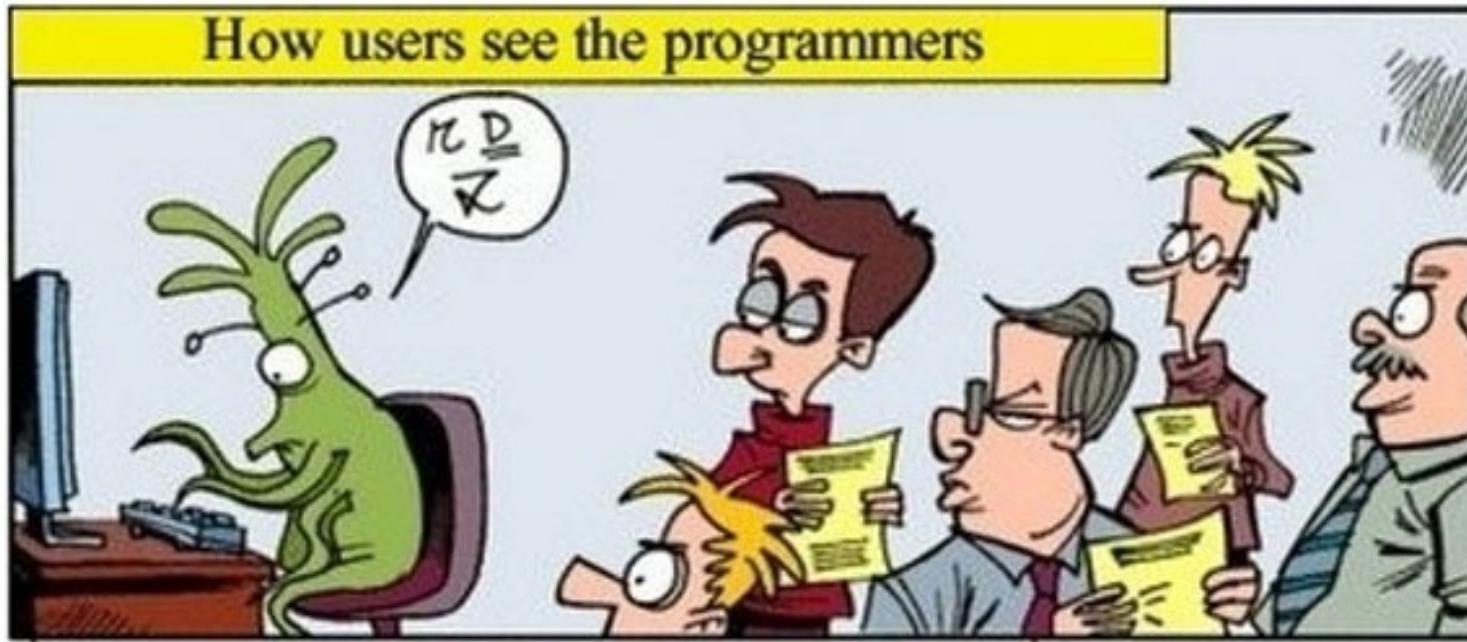


Informatica & fisica: esempi





Informatica & fisica: esempi

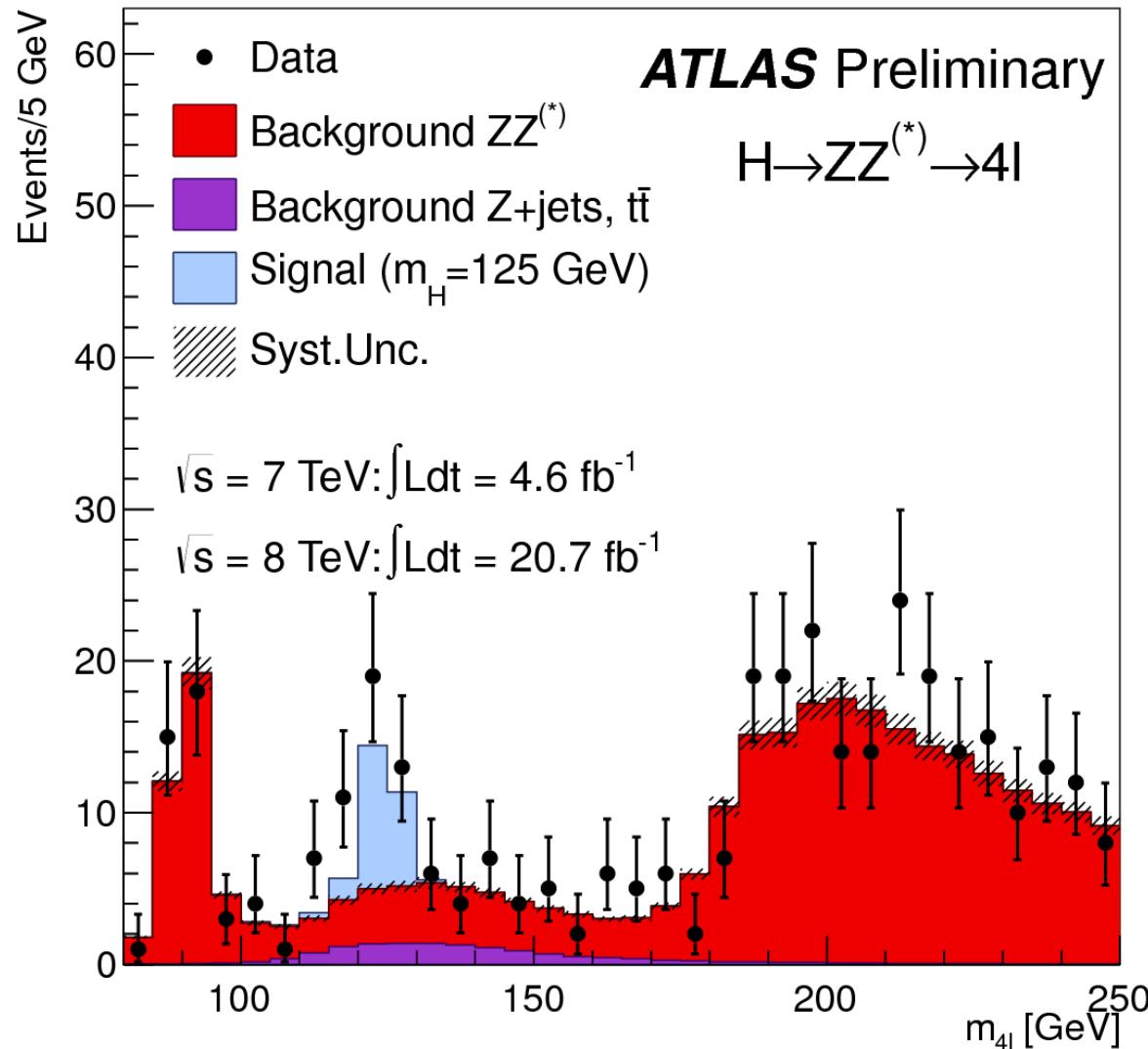




Fisica delle particelle



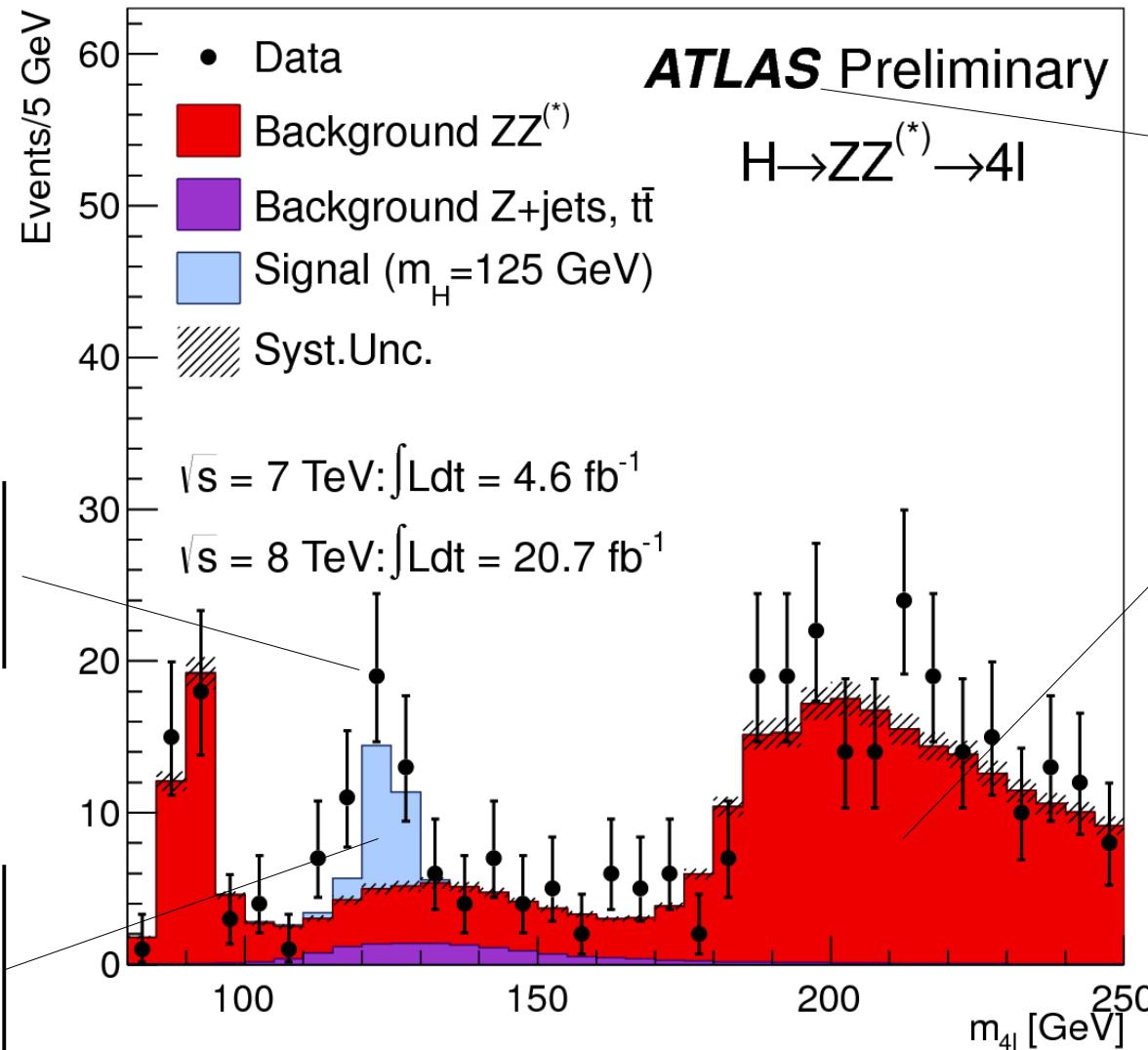
- Quanta informatica c'è di questo plot?





Cyber-bosone

- Quanta informatica c'è di questo plot?





Il mestiere del “particellaio”

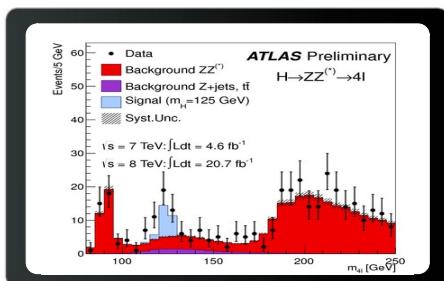
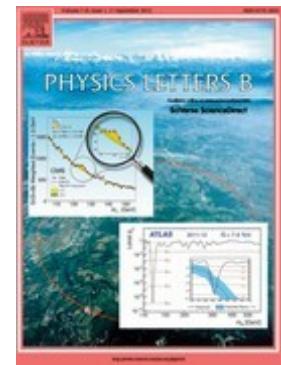
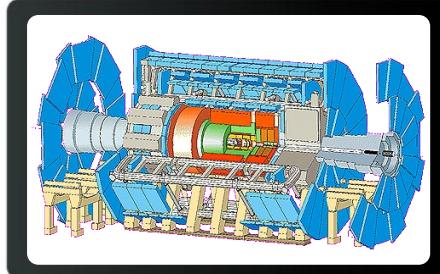


Teoria

$$\begin{aligned}\mathcal{L} = & -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \\ & + i\bar{\psi}\not{D}\psi + h.c. \\ & + \bar{\psi}_i Y_{ij} \psi_j \Phi + h.c. \\ & + |\not{D}_\mu \Phi|^2 - V(\Phi)\end{aligned}$$



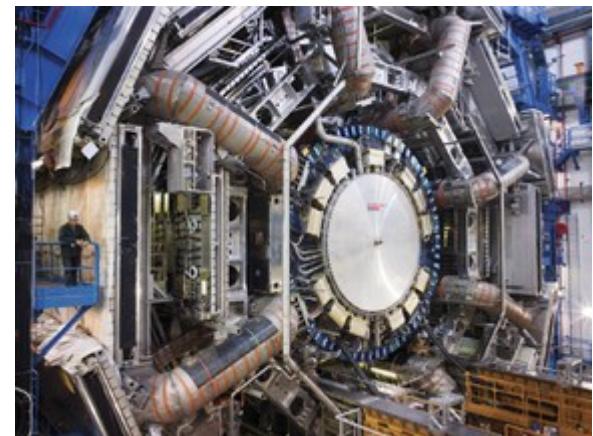
Simulazione



Analisi dati



Presa dati



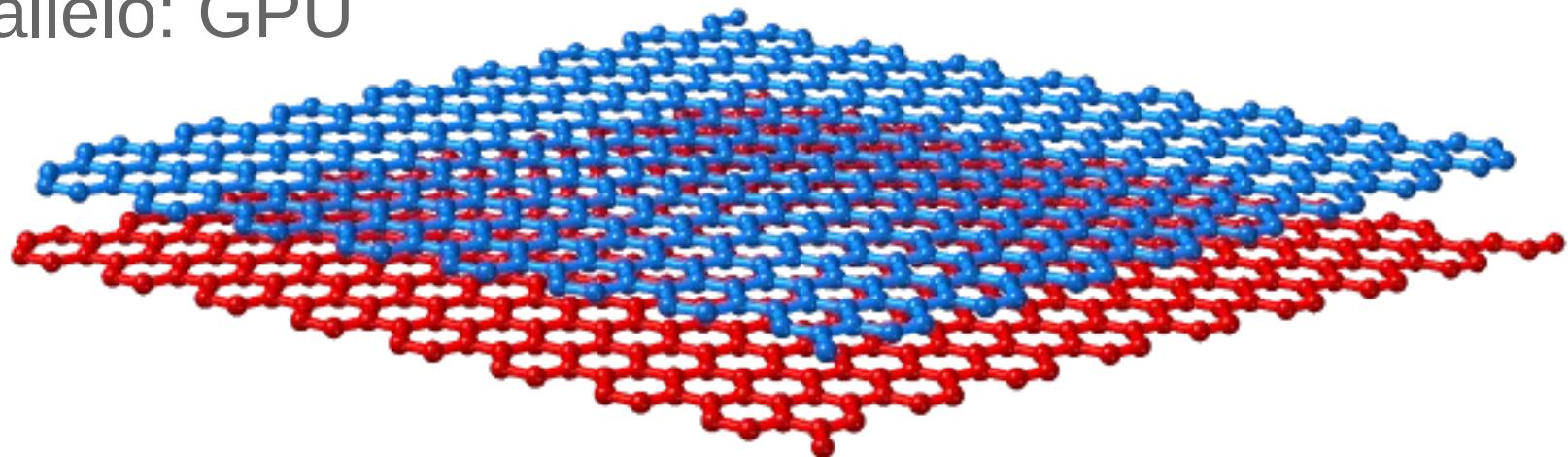
Costruzione



Fisica dello stato solido



- Computing come ponte teoria / esperimento
 - Simulare/disegnare nuovi materiali
 - Per studiarne/predirne le caratteristiche
- Es. studio proprietà di un materiale sintetizzato di recentemente: twisted bilayer graphene
 - Un mese di calcolo su cluster da ~6000 core
 - Necessità di usare nuove tecnologie di calcolo parallelo: GPU



Lab di RMN



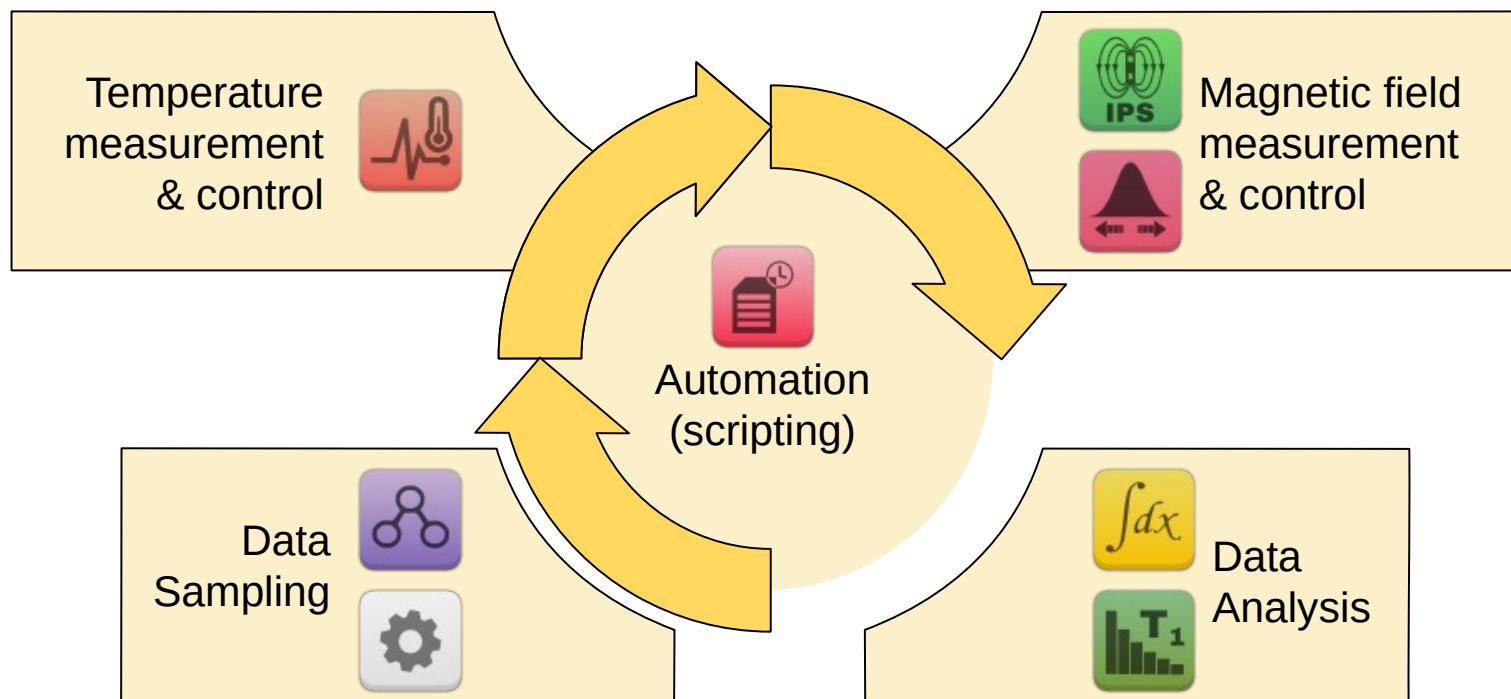
- Per es, l'informatica è fondamentale anche in un laboratorio di risonanza magnetica nucleare
 - **Automazione** delle attività di gestione del laboratorio, della strumentazione e della presa dati
 - Sviluppo di nuove procedure informatiche per **analizzare** e interpretare i dati
 - Spesso gli strumenti software necessari non sono disponibili sul mercato e vanno **sviluppati** appositamente



NMR Utilities



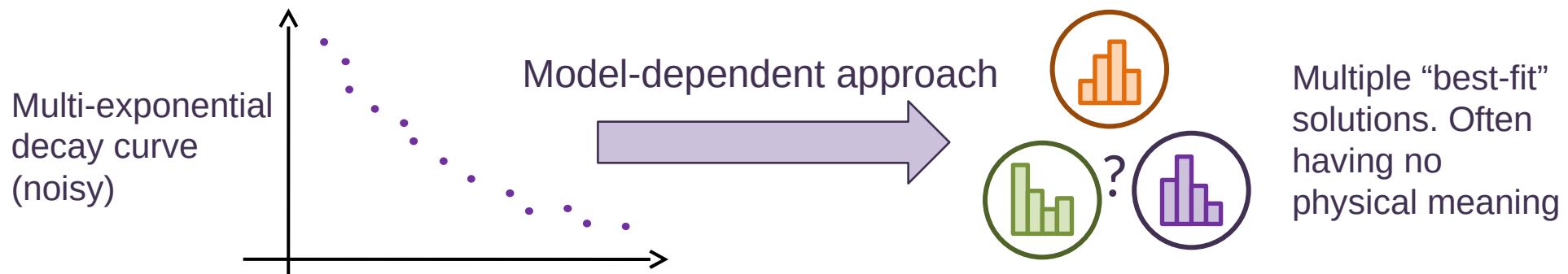
- Tool per l'automazione e il controllo software
 - Per garantire la riproducibilità delle condizioni sperimentale
 - Ridurre la probabilità di errore umano
 - Velocizzare tediosi compiti di laboratorio aumentato l'efficienza di lavoro e ottimizzando l'utilizzo degli strumenti e i costi associati
 - Permettere il controllo remoto



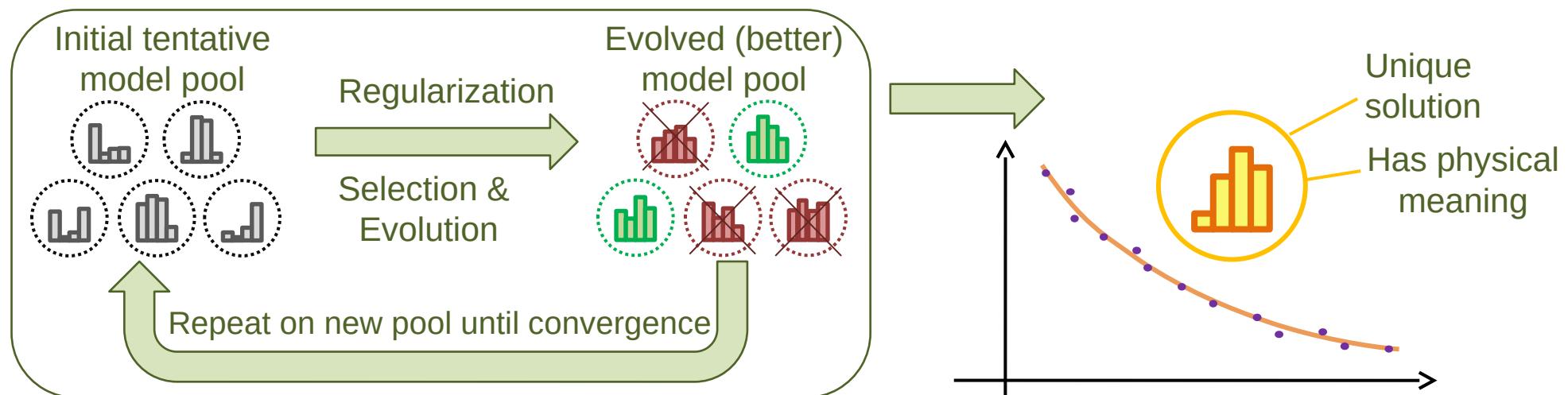
Laplace Transform Inversion



- Un problema comune: l'inversione di una trasformata di Laplace
 - Deconvoluzione: dal grafico sperimentale allo spettro delle curve componenti



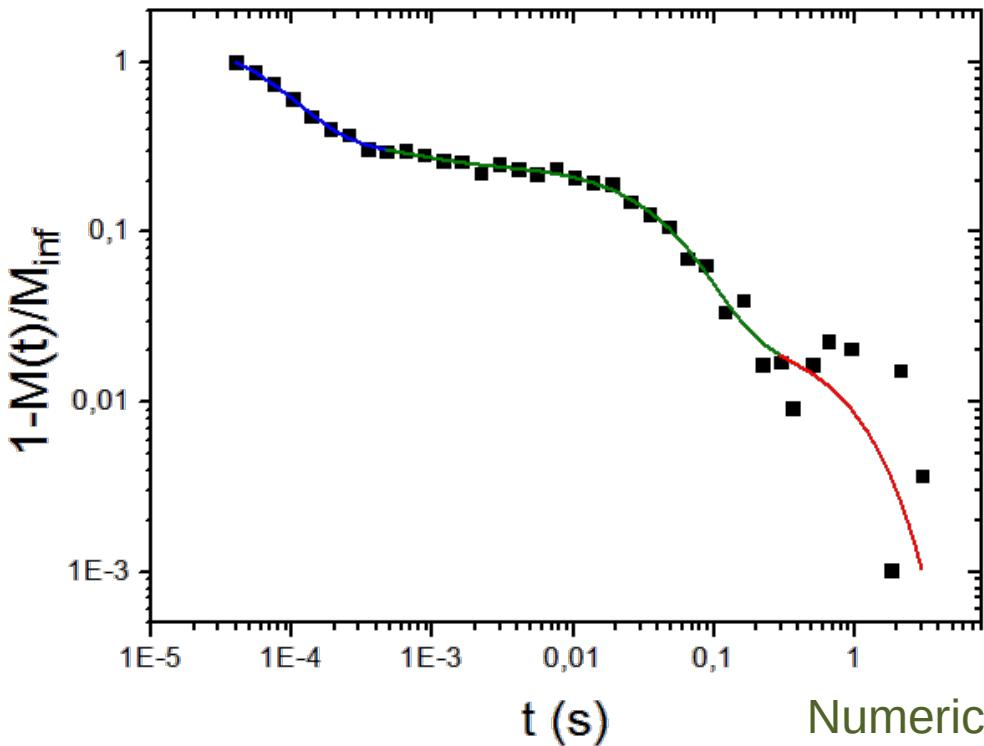
- Una possibile soluzione numerica è la “genetic inversion”
 - Metodo iterativo per selezionare il pool di modelli più pertinenti ai dati



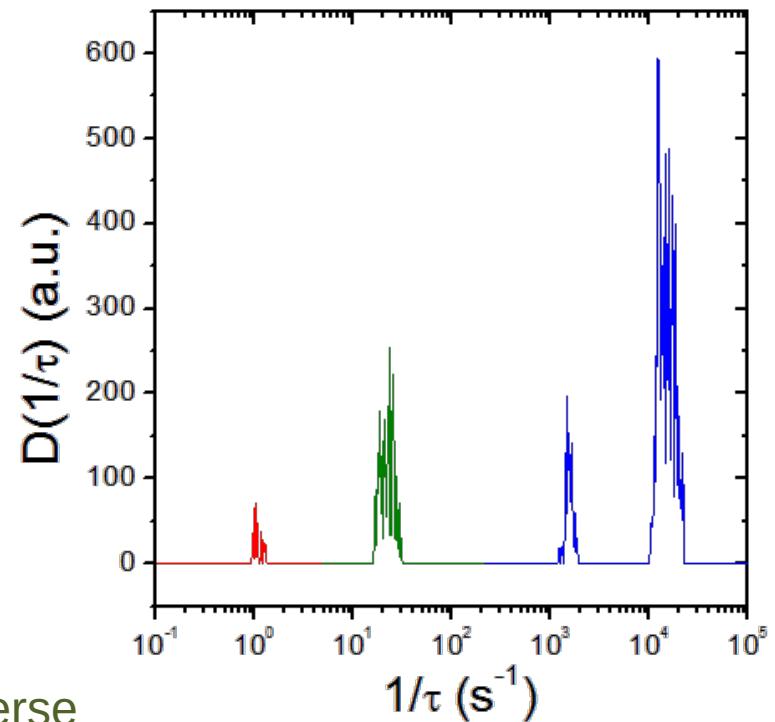
Laplace Transform Inversion



- Sviluppata una procedura informatica per applicare il metodo della genetic inversion all'analisi dei tempi di rilassamento in NMR
 - Scritta in C++



NMR Relaxation Curve
(experiment)



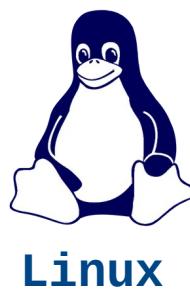
Numerical Inverse
Laplace Transform



Genetic inversion



Programma del corso



Linux

C++



- Introduzione al calcolatore
- Il sistema operativo Linux
- Utilizzo della linea di comando
- Shell scripting
- Network
- Fondamenti di programmazione
- Programmazione procedurale
- Programmazione orientata agli oggetti
- ROOT: data analysys framework
- Latex
- Cenni di Python

Ove possibile
esempi di utilizzo
dell'informatica
nella fisica



Sito del corso



- Sito KIRO
 - <https://elearning.unipv.it/course/view.php?id=6621>
- NB: **tutte** le comunicazioni riguardo lezioni ed esami avverranno su questa piattaforma
 - Leggete le email con regolarità !

The screenshot shows a web browser window displaying a university course page. The title bar reads "Corso: 500188 - METODI". The address bar shows the URL "elearning.unipv.it/course/view.php?id=6621". The page header includes the university logo, the name "Università degli Studi di Pavia", and a user profile for "ANDREA NEGRI". The main content area displays the course details: "500188 - METODI INFORMATICI DELLA FISICA - PROFF. NEGRI ANDREA, COSTANZA SUSANNA". Below this, a navigation menu lists "TUTTI I CORSI", "RICHIEDI CORSO", and "ITALIANO (IT)". At the bottom, there are links for "HOME", "I miei corsi", "AREA SCIENTIFICA", "[L-30] FISICA", "ANNO 2023-24", and "METODI_INF_2023". A red button on the right says "Attiva modifica".



Materiale per il corso



- Slide delle lezioni e altro materiale sul sito
 - Breviari, esercizi, manuali
- Testi consigliati
 - Queste slide
 - ∀ manuale introduttivo al C++, es:
 - www.cplusplus.com
 - www.learnCPP.com
- Altrimenti
 - “*Programmazione Scientifica*”,
Barone et al., Pearson Education
 - I primi 6 capitoli
 - NB: focalizzato sul C, non tratta il C++





Squadra docenti



Susanna Costanza [2 CFU]

Andrea Negri [4 CFU]

Nicolò Valle [12 seminari]

Davide Rolino, Alessandro Mazzeo,

Roberto Mastrofrancesco, Francesco Scala [tutori]

- Orari di ricevimento?
sempre
 - Non esitate a scriverci per dubbi e chiarimenti





Orario



- Lezioni frontali in 102
 - Più dense all'inizio, poi 2h a settimana
- Lezioni di laboratorio il giovedì dal 14 marzo
 - Turno unico con 3 aule in parallelo :-O

| Ora | Lunedì | Martedì | Mercoledì | Giovedì | Venerdì |
|---------------|---|--|--|---|---|
| 9:15 - 10:00 | Compl. Analisi Mat. 1 @ 102 Dal ?/? termodinamica | Compl. Analisi Mat. 1 @ 102 | Compl. Analisi Mat. 1 @ 102 | Mecc. e Termodin. @ 102 | Mecc. e Termodin. @ 102 |
| 10:15 - 11:00 | Compl. Analisi Mat. 1 @ 102 Dal ?/? termodinamica | Compl. Analisi Mat. 1 @ 102 | Compl. Analisi Mat. 1 @ 102 | Mecc. e Termodin. @ 102 | Mecc. e Termodin. @ 102 |
| 11:15 - 12:00 | Lab. Fisica 1 @ 102 | Mecc. e Termodin. @ 102 | Met. Inform. Fisica @ 102 Dal 27/3 mecc.&termod. | Compl. Analisi Mat. 1 @ 102 | Lab. Fisica 1 @ 102 Dal ??/? eser. termod |
| 12:15 - 13:00 | Lab. Fisica 1 @ 102 | Mecc. e Termodin. @ 102 | Met. Inform. Fisica @ 102 Dal 27/3 mecc.&termod. | Compl. Analisi Mat. 1 @ 102 | Lab. Fisica 1 @ 102 Dal ??/? eser. termod |
| 13:00 - 14:00 | | | | | |
| 14:15 - 15:00 | Mecc. e Termodin. @ 102 Dal 25/04 MetInfo (lezione) | Lab. Fisica 1 @ cascina Cravino Fino al 13/03 MetInfo @102 | Lab. Fisica 1 @ 102 (dal 22/3 @Cravino) | Met. Inform. Fisica @ 102 Lez Frontale | Tutorato @ 102 Compl. Analisi Mat. 1 |
| 15:15 - 16:00 | Mecc. e Termodin. @ 102 | Lab. Fisica 1 @ cascina Cravino Fino al 13/03 MetInfo @102 | Lab. Fisica 1 @ 102 (dal 22/3 @Cravino) | Met. Inform. Fisica @ 101 & 106 & 102 Lab | Tutorato @ 102 Compl. Analisi Mat. 1 |



Valutazione



- Esame pratico al computer
 - Fornito da noi
- **6 esercizi in 3 h**
 - 3 esercizi di C++
 - 3 di unix, latex, ...
- “Montepremi” di ~ **42 / 30**
 - Bastano 4.5 esercizi corretti per arrivare a 30
 - Lode sopra ~35

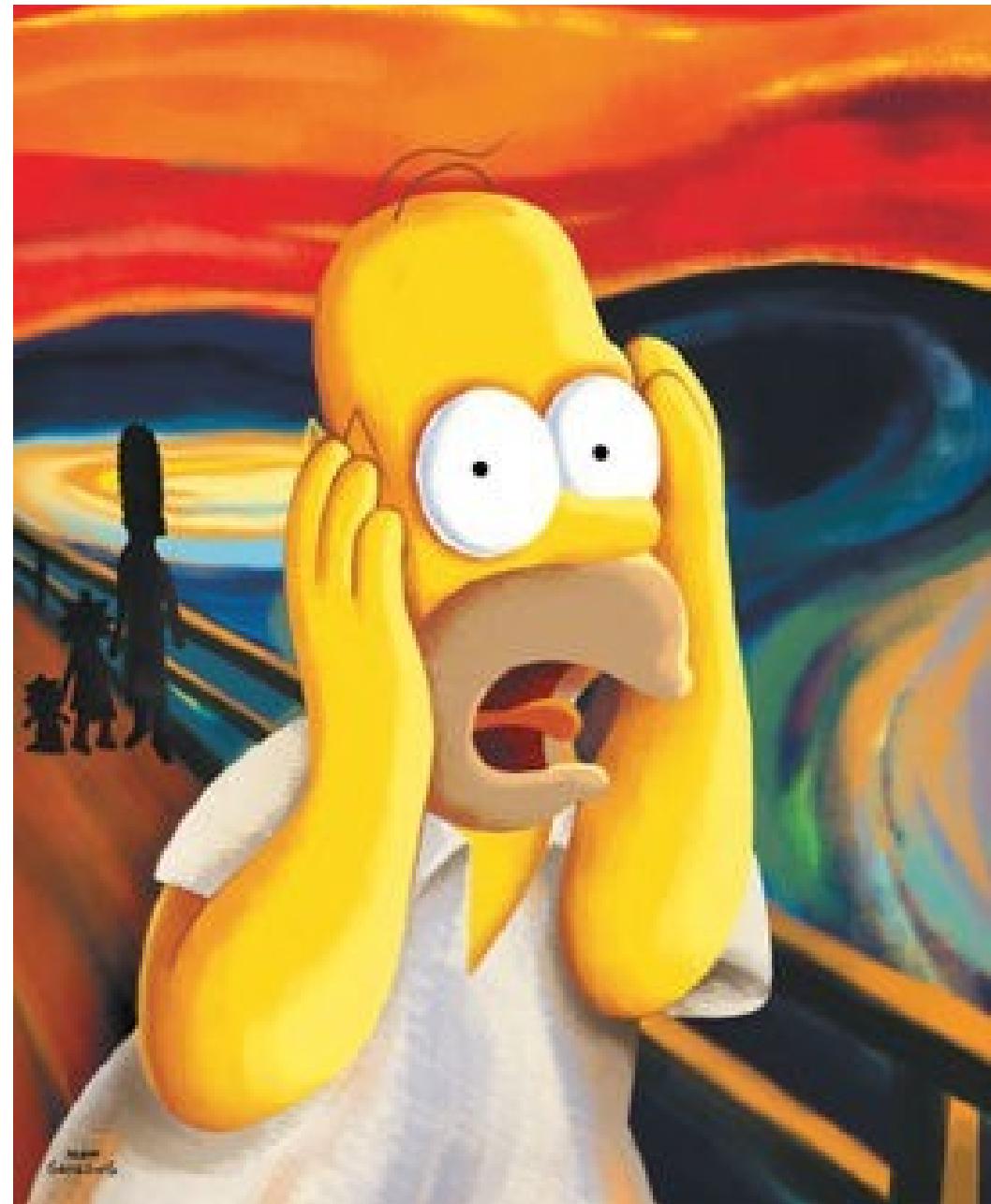




Valutazione



- Possibilità (obbligo!) di consultare materiale
 - slide del corso
 - appunti cartacei
 - appunti su chiavetta
 - risorse di rete (google)
- Ma non
 - Chat ed email
 - piattaforme di file sharing
 - AI (eg. ChatGPT)
- Traffico monitorato

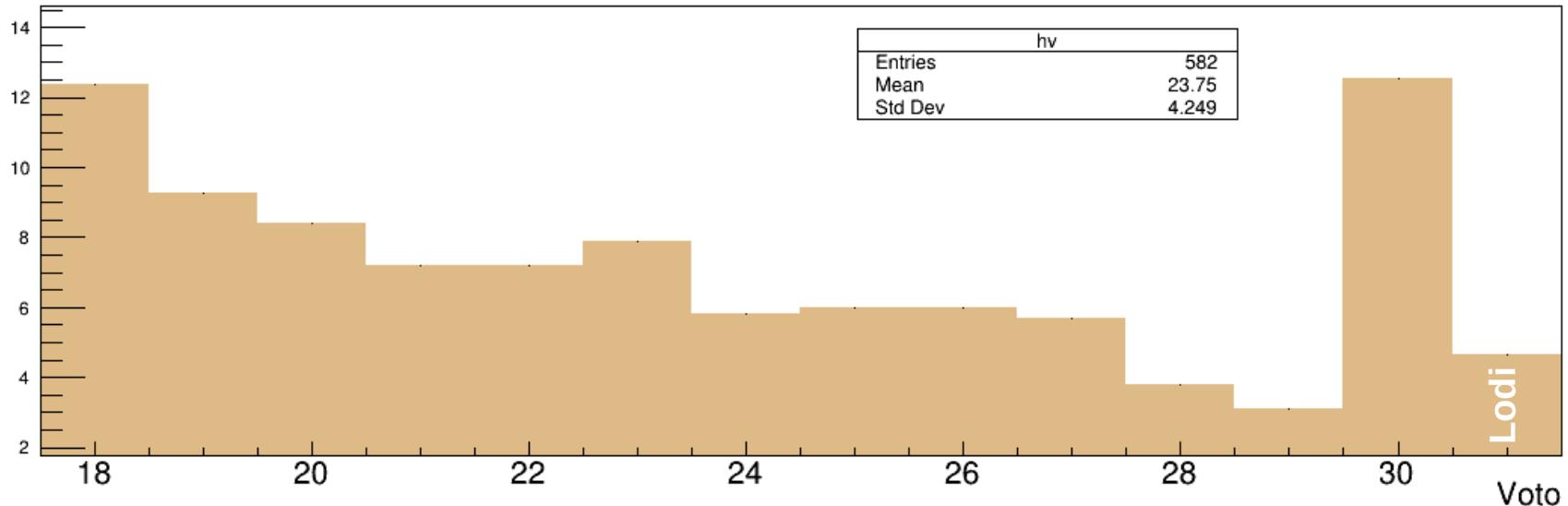


Statistiche



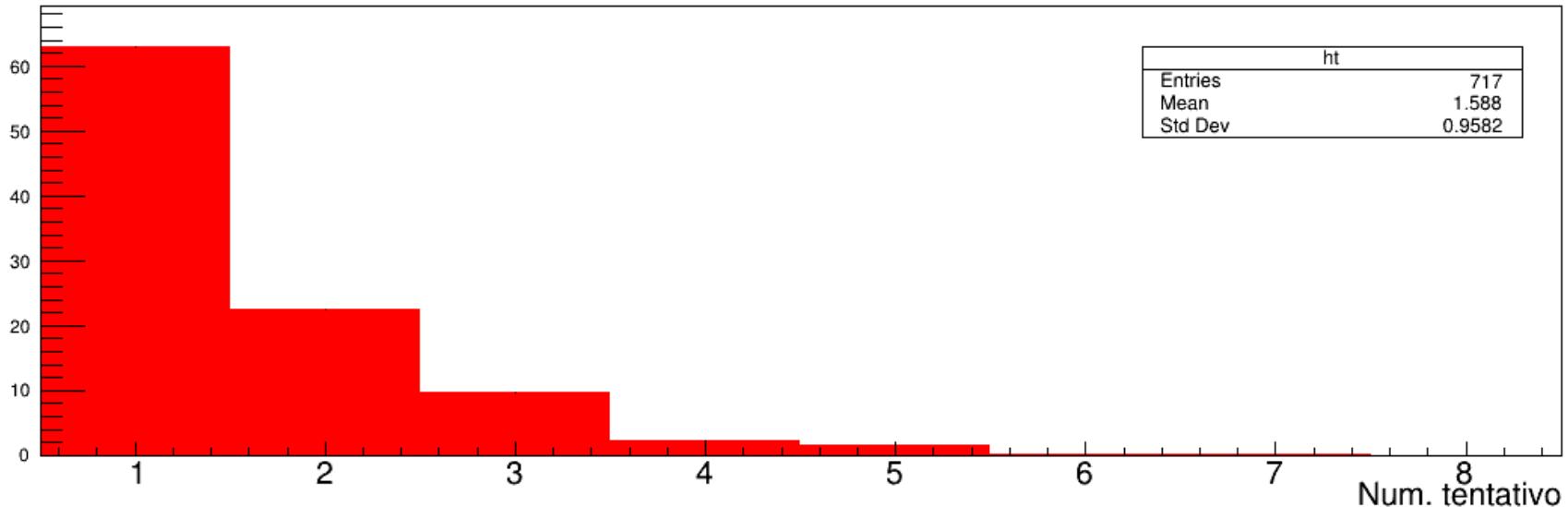
Voti

Percentuale



Tentativi

Percentuale



Statisticamente,
chi non frequenta
fa più **fatica**
a passare l'esame



Sommario



- **Informatica** strumento fondamentale per il fisico
 - Sempre più pervasiva
 - Ma è solo un **mezzo**, non il fine
- Nessuna conoscenza preliminare necessaria
 - Fondamentale **frequenza** al laboratorio
- Approccio pragmatico
 - Focus sulla pratica
 - E sulla metodologia di **autoapprendimento**
- Non esitate a contattarci

