

Fisica in Libertà

Jacopo Nespolo

GULP - Linux Day 2011

Pisa, 22 ottobre 2011

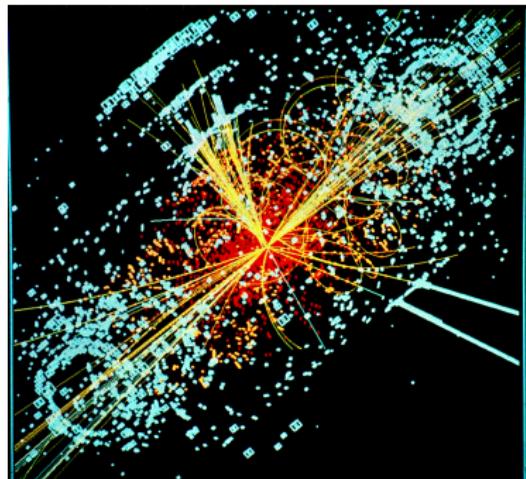
Il software libero nella scienza...cosa ci facciamo?



Esperimento Fermi (Gamma-ray
large area space telescope)
Usa il software libero per

- ▶ DAQ e monitoraggio in fase di costruzione;
- ▶ Beam test;
- ▶ Monitoraggio dei dati;
- ▶ Analisi scientifica.

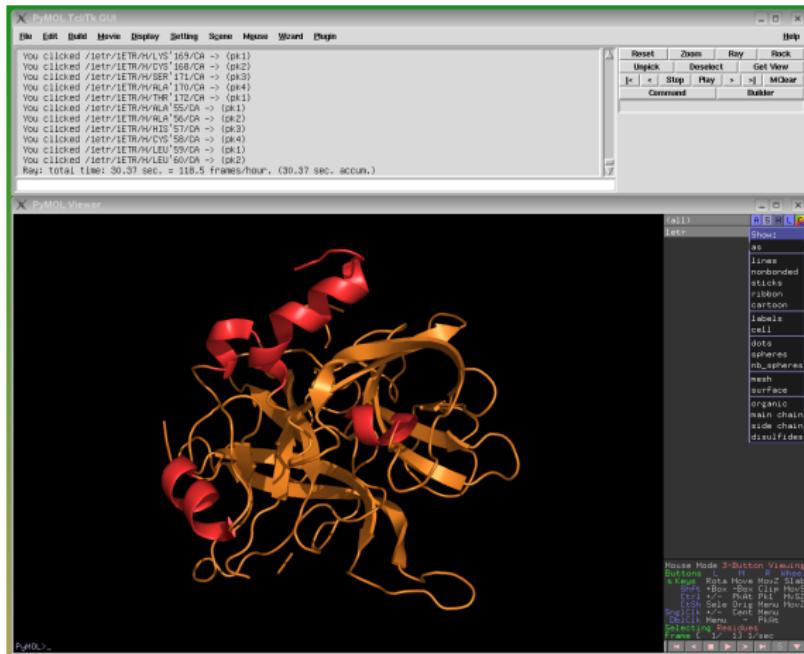
Il software libero nella scienza...cosa ci facciamo?



LHC (Large Hadron Collider)
Usa il software libero per

- ▶ Simulazione dei fasci in fase di progettazione (anche con BOINC);
- ▶ Controllo della macchina e degli esperimenti;
- ▶ Monitoraggio dei dati;
- ▶ Analisi scientifica;
- ▶ ...praticamente tutto il resto.

Il software libero nella scienza...cosa ci facciamo?



Modellizzazione e simulazione di proteine.

Simulazione del *folding* di molecole complesse e visualizzazione tridimensionale. Calcolo di varie proprietà delle molecole.

Il software libero nella scienza...cosa ci facciamo?

3

$$\langle f_i(T) f_j(T') \rangle = D \delta_{i,j} \delta(T - T'), \quad (8)$$

which can all be obtained from the microscopic Hamiltonian by integrating out the bath degrees of freedom [24] or from the corresponding Langevin equation, Eq. [25] [26]. The functional probability density of a given realization of a fluctuation can be expressed as

$$p(path) \sim \exp \left(-\frac{S[f_Q(t), f_P(t), \lambda_Q(t) \lambda_P(t), Q(t), P(t)]}{D} \right). \quad (9)$$

For Gaussian noise with the correlator $\langle f_i(t) f_j(t') \rangle = D \delta_{i,j} \delta(t - t')$ (white noise), the functional S is given to lowest order in D by [27] [28]:

$$S = \sum_{j=(Q,P)} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{4} f_j^2(t) - i \lambda_j(t) (\dot{x}_j - K_j - f_j(t)) \right] dt \quad (10)$$

where x stands for either $Q(t)$ or $P(t)$ and K_s are also functions of these dynamical variables. Performing the functional integral in λ_s and f_s leaving the following Wentzel-Freidlin action [30]:

$$S = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(\dot{Q} - K_Q \right)^2 + \left(\dot{P} - K_P \right)^2 \right] dt. \quad (11)$$

Because our goal in this work is to understand the properties of the exponential part of distributions in the limit

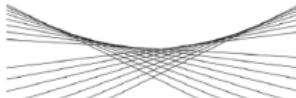


FIG. 1. An envelope of intersecting neighboring straight lines is a simple example of caustic, as seen at the top of the figure.

fixed point, this manifold is tangent to the plane spanned by two unstable eigenvectors of this FP. Thus, the fluctuational trajectories lie on the unstable “Lagrangian Manifold” [31] [32] of the attracting fixed point. We calculate the set of trajectories that escape the attractor by evolving a set of initial conditions placed on a circle on this unstable manifold very close to the attracting FP.

All calculations of trajectories are terminated either when a stopping radius is reached or when a trajectory reaches a caustic. In section III A we show explicitly that radius of a trajectory at $F = 0$ grows as a simple exponential, which means that to provide an accurate solution valid at larger radii, the time steps must decrease dramatically. The choice of the stopping radius

Scrivere gli articoli e i libri e disegnare grafici in modo che non si riceva un pugno in un occhio quando li si legge.

“Ci vorrebbero punizioni corporali per chi scrive testi scientifici in Word.”

Il prof. di Struttura della Materia a lezione.

Il software libero nella scienza...cosa ci facciamo?



Open access to 708,323 e-prints in Physics, Mathematics, Computer Science
Subject search and browse: **Physics**

29 Jul 2011: [arXiv Sustainability Initiative Update](#): An update on the effort to update.

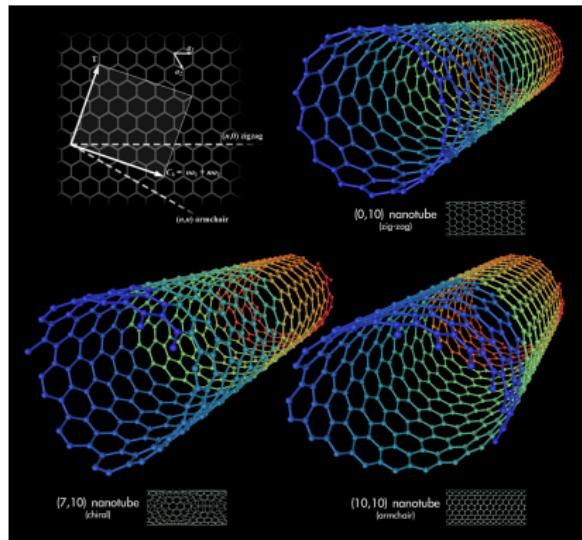
25 Apr 2011: [Data sets accepted as part of Data Conservancy pilot](#); [Science](#)
See cumulative "[What's New](#)" pages. Read [robots beware](#) before attempting

Physics

- [Astrophysics \(astro-ph new, recent, find\)](#)
includes: [Cosmology](#) and [Extragalactic Astrophysics](#); [Earth and Plane Methods for Astrophysics](#); [Solar and Stellar Astrophysics](#)
- [Condensed Matter \(cond-mat new, recent, find\)](#)
includes: [Disordered Systems and Neural Networks](#); [Materials Science](#); [Matter](#); [Statistical Mechanics](#); [Strongly Correlated Electrons](#); [Superconductivity](#)
- [General Relativity and Quantum Cosmology \(gr-qc new, recent, find\)](#)
- [High Energy Physics - Experiment \(hep-ex new, recent, find\)](#)
- [High Energy Physics - Lattice \(hep-lat new, recent, find\)](#)
- [High Energy Physics - Phenomenology \(hep-ph new, recent, find\)](#)
- [High Energy Physics - Theory \(hep-th new, recent, find\)](#)

Condividere gli articoli scientifici con il resto della comunità.

Il software libero nella scienza...cosa ci facciamo?



...e tanto altro ancora.

Perché il software scientifico deve essere libero?



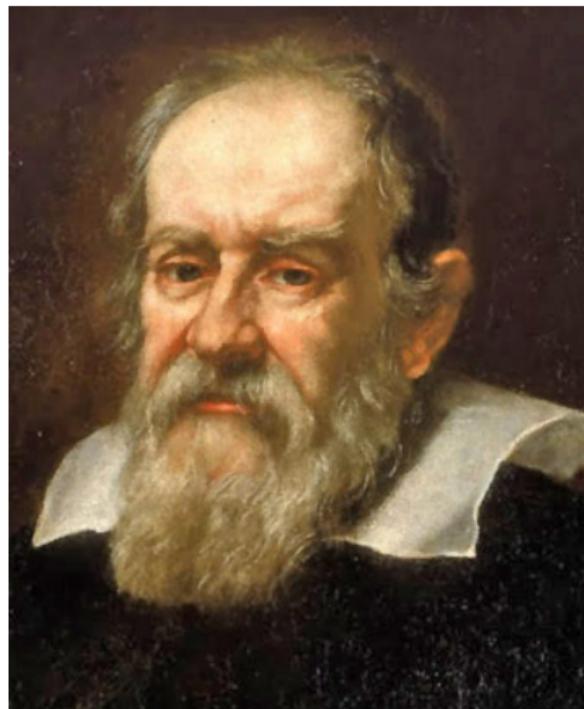
Motivi frivoli

- ▶ Perché ci piace, altrimenti non faremmo il Linux Day;
- ▶ Perché la scienza e la cultura sono beni che appartengono a tutti, a maggior ragione se finanziate con i soldi pubblici;
- ▶ Consente agli scienziati di distribuire il calcolo su molte macchine, talvolta di volontari;
- ▶ Di solito costa meno, e la ricerca costa;
- ▶ Evita di diventare dipendenti da un'azienda (*lock-in*);
- ▶ Perché non si deve reinventare la ruota ogni volta!

Perché il software scientifico deve essere libero?

No amount of experimentation can ever prove me right; a single experiment can prove me wrong.

A.Einstein



Motivi seri: il Metodo scientifico

1. Osserva il problema. Usa l'esperienza;
2. Formula una congettura;
3. Elabora una predizione conseguente alla congettura;
4. Controlla mediante una nuova osservazione se la predizione è corretta.

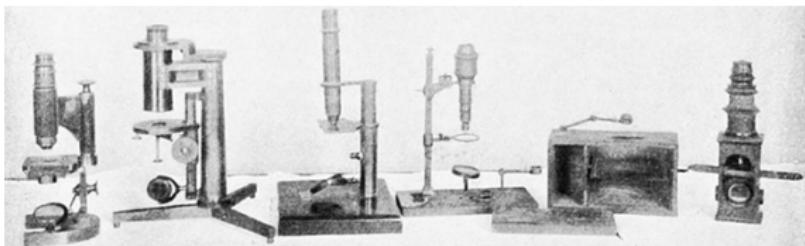
Perché il software scientifico deve essere libero?

Centralità dell'osservazione e falsificabilità

- ▶ Come viene eseguita l'osservazione?
- ▶ Posso ripetere l'esperimento allo stesso modo e ritrovare i tuoi risultati?
- ▶ Posso ripetere l'esperimento in un modo alternativo e ritrovare i tuoi risultati?

Metodo scientifico

1. Osserva il problema. Usa l'esperienza;
3. Controlla mediante una nuova osservazione se la predizione è corretta.



Perché il software scientifico deve essere libero?

Il software libero

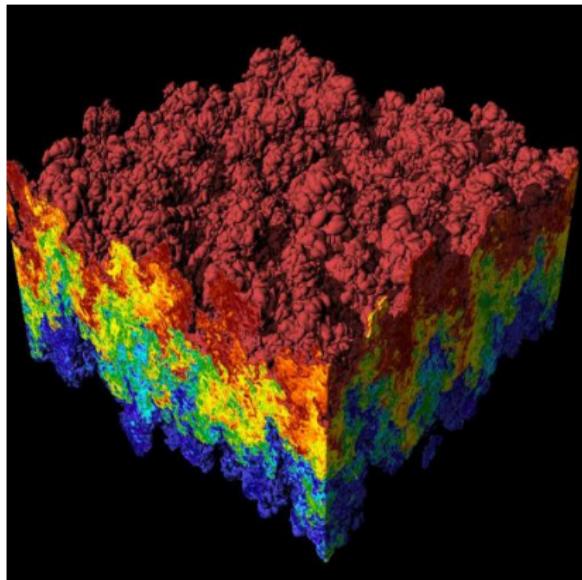
Può essere ridistribuito. Altri scienziati possono prendere il nostro programma e rifare l'esperimento.

Il codice è consultabile. Si può controllare che cosa fa esattamente il programma, e verificare che il comportamento sia quello corretto.

Il codice può essere modificato e riutilizzato. Chi fosse interessato potrà continuare da dove noi abbiamo lasciato, senza dover riscrivere il nostro programma ex novo.

La nostra ricerca è allora falsificabile, in accordo con le prescrizioni del metodo scientifico.

Cos'è una simulazione



Simulazione dell'instabilità di Reyleigh-Taylor in fluidodinamica.

- ▶ Formuliamo un modello matematico per descrivere un processo fisico;
- ▶ Lo diamo in pasto a un calcolatore per risolvere il modello matematico e trarre informazioni sul processo fisico.
- ▶ ACHTUNG! È importante che il nostro modello sappia stimare anche la bontà delle informazioni che traiamo, ovvero bisogna poter stimare l'errore.

Cos'è una simulazione

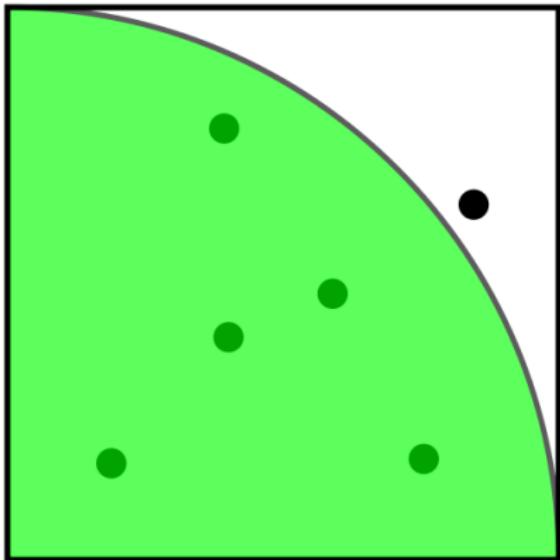
Un metodo importante: il Monte Carlo

Metodo Monte Carlo è in realtà il nome attribuito a una classe di algoritmi utilizzati per condurre simulazioni con metodi statistici.

1. Definisco un dominio per gli *input*;
2. Genero gli input in maniera casuale (*random*) da un'opportuna *distribuzione di probabilità*;
3. Opero un calcolo deterministico sugli input;
4. Analizzo i risultati.



Un piccolo esempio



Calcoliamo π con una simulazione Monte Carlo

Sfruttiamo alcune proprietà geometriche del cerchio e del quadrato

- ▶ Area del quadrato di lato $L = 2$:
 $A_{\square} = L^2 = 4$;
- ▶ Area del cerchio inscritto nel quadrato, che ha quindi raggio $r = 1$:
 $A_{\bigcirc} = \pi r^2 = \pi$.

Quindi

$$4 \cdot \frac{A_{\bigcirc}}{A_{\square}} = \pi.$$

Un piccolo esempio

Calcoliamo π con una simulazione Monte Carlo

Controlliamo il rispetto delle prescrizioni del metodo Monte Carlo:

1. Definisco un dominio per gli input.

Gli input saranno coppie di numeri reali (x, y) compresi tra -1 e 1:

$$D_{in} = R^2 \cap [-1, 1] \times [-1, 1].$$

2. Genero gli input in maniera casuale da un'opportuna distribuzione di probabilità.

Gli input devono essere distribuiti in maniera uniforme all'interno del dominio.

3. Opero un calcolo deterministico sugli input.

Controllo se (x, y) sta all'interno del cerchio.

4. Analizzo i risultati.

Conto quanti numeri ho estratto e quanti sono finiti dentro al cerchio.
La stima di π sarà data da

$$\pi_{MC} = 4 \cdot \frac{N_{\bigcirc}}{N_{\square}}.$$

Nota legale

Fisica in Libertà

Copyright © 2011 Jacopo Nespolo

<j.nespolo_AT_gmail.com>

Questa presentazione e il codice sorgente con la quale è stata formattata sono rilasciati secondo i termini della Licenza Creative Commons - Attribution - Share Alike 3.0 Unported.

Il testo della licenza è reperibile al seguente indirizzo Internet:

<http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>



Immagini non prodotte dall'autore: Wikimedia Commons (<http://commons.wikimedia.org>), utenti Ramac, Pjotr Morgen, Uutela, Derek Ramsey, Mstroeck. Per dettagli, consultare il file license nel sorgente.