



**UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI TRIESTE**



Dipartimento di

Fisica

Dipartimento d'Eccellenza 2023-2027

Laboratorio di Fisica Computazionale FIO20004-4

Maria Peressi

Università degli Studi di Trieste - Dipartimento di Fisica

Sede di Miramare (Strada Costiera 11, Trieste)

e-mail: peressi@units.it

Computer in FISICA: qual è la vostra esperienza?

- Visualizzazione
- Raccolta e Analisi dati
- Controllo strumenti
- Manipolazione simbolica
- ...
- ...
- ...
- ...
- Analisi numerica?
- Simulazioni numeriche?

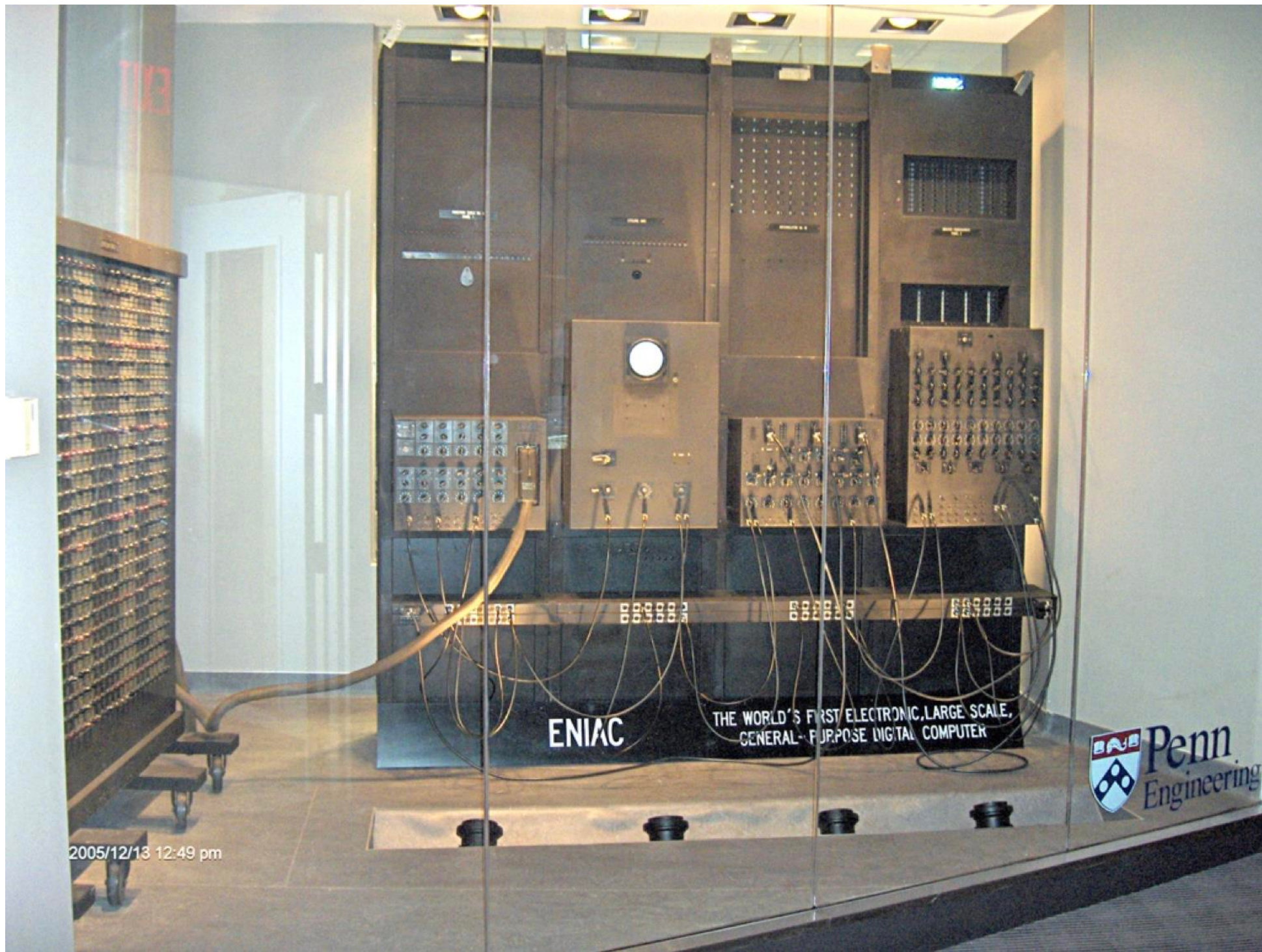
- **analisi numerica:** risolvere equazioni che non possono essere affrontate con metodi analitici
- **simulazioni:** modellare e studiare fenomeni fisici con tecniche numeriche. Ciò significa fare esperimenti virtuali in cui la nostra rappresentazione della realtà fisica, sebbene necessariamente schematica e semplificata, possa essere modificata e variata a piacimento.

Introduzione

- La nascita della fisica computazionale
- Simulazioni ed esperimenti “what-if”
- Approcci deterministici e stocastici
- Alcuni esempi

Qual è il primo computer «general purpose»?

Electronic Numerical Integrator And Computer



Perché ci è utile un computer per fare fisica?

moltissime operazioni in pochissimo tempo!

Ieri (1946): ENIAC poteva eseguire 357 moltiplicazioni o 38 divisioni al secondo. Alla presentazione ufficiale, eseguì 5.000 volte la moltiplicazione di 97.367 per se stesso in meno di un secondo.

**Qual è la potenza di calcolo
disponibile oggi?**



<https://top500.org/>

Novembre 2024

Rank	System	Cores	Rmax (PFlop/s)	Rpeak (PFlop/s)	Power (kW)
1	El Capitan - HPE Cray EX255a, AMD 4th Gen EPYC 24C 1.8GHz, AMD Instinct MI300A, Slingshot-11, TOSS, HPE DOE/NNSA/LLNL United States	11,039,616	1,742.00	2,746.38	29,581
2	Frontier - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE Cray OS, HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	9,066,176	1,353.00	2,055.72	24,607
3	Aurora - HPE Cray EX - Intel Exascale Compute Blade, Xeon CPU Max 9470 52C 2.4GHz, Intel Data Center GPU Max, Slingshot-11, Intel DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	9,264,128	1,012.00	1,980.01	38,698
4	Eagle - Microsoft NDv5, Xeon Platinum 8480C 48C 2GHz, NVIDIA H100, NVIDIA Infiniband NDR, Microsoft Azure United States	2,073,600	561.20	846.84	
5	HPC6 - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, RHEL 8.9, HPE Eni S.p.A. Italy	3,143,520	477.90	606.97	8,461
9	Leonardo - BullSequana XH2000, Xeon Platinum 8358 32C 2.6GHz, NVIDIA A100 SXM4 64 GB, Quad-rail NVIDIA HDR100 Infiniband, EVIDEN EuroHPC/CINECA Italy	1,824,768	241.20	306.31	7,494

Flop/s: numero di operazioni in virgola mobile eseguite in un secondo;
GIGA(G) / TERA(T) / PETA(O) / EXA(E):
prefissi che indicano 10^9 , 10^{12} , 10^{15} , 10^{18}





<https://top500.org/>

Giugno 2000

Rank	System	Cores	Rmax (GFlop/s)	Rpeak (GFlop/s)
1	ASCI Red, Intel Sandia National Laboratories United States	9,632	2,379.00	3,207.00
2	ASCI Blue-Pacific SST, IBM SP 604e, IBM Lawrence Livermore National Laboratory United States	5,808	2,144.00	3,856.50
3	ASCI Blue Mountain, HPE Los Alamos National Laboratory United States			

Flop/s: numero di operazioni in virgola mobile eseguite in un secondo;
GIGA(G) / TERA(T) / PETA(O) / EXA(E):
prefissi che indicano 10^9 , 10^{12} , 10^{15} , 10^{18}

Apple A17 Pro (6 GPU Cores)



Settembre 2023

NB:

1) NON è pubblicità !!! Solo un esempio!!!

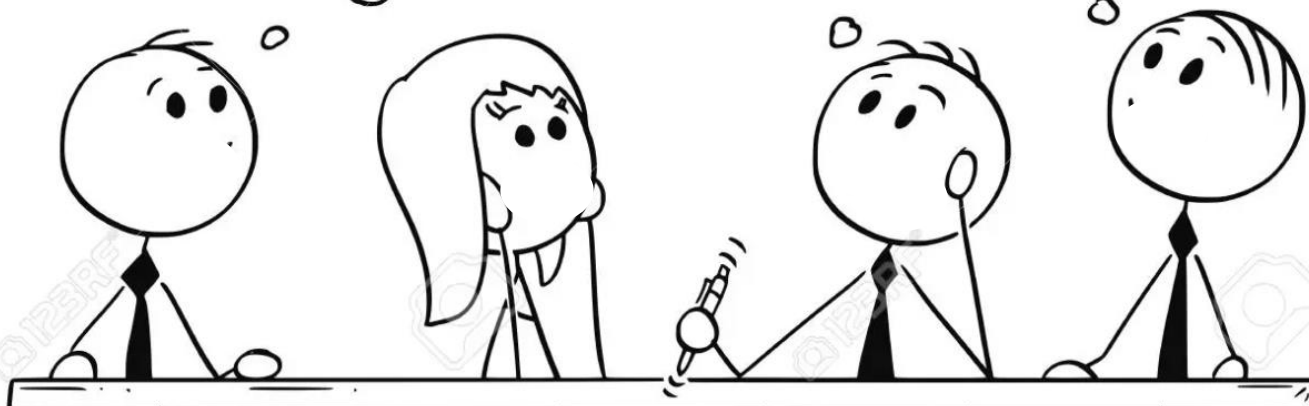
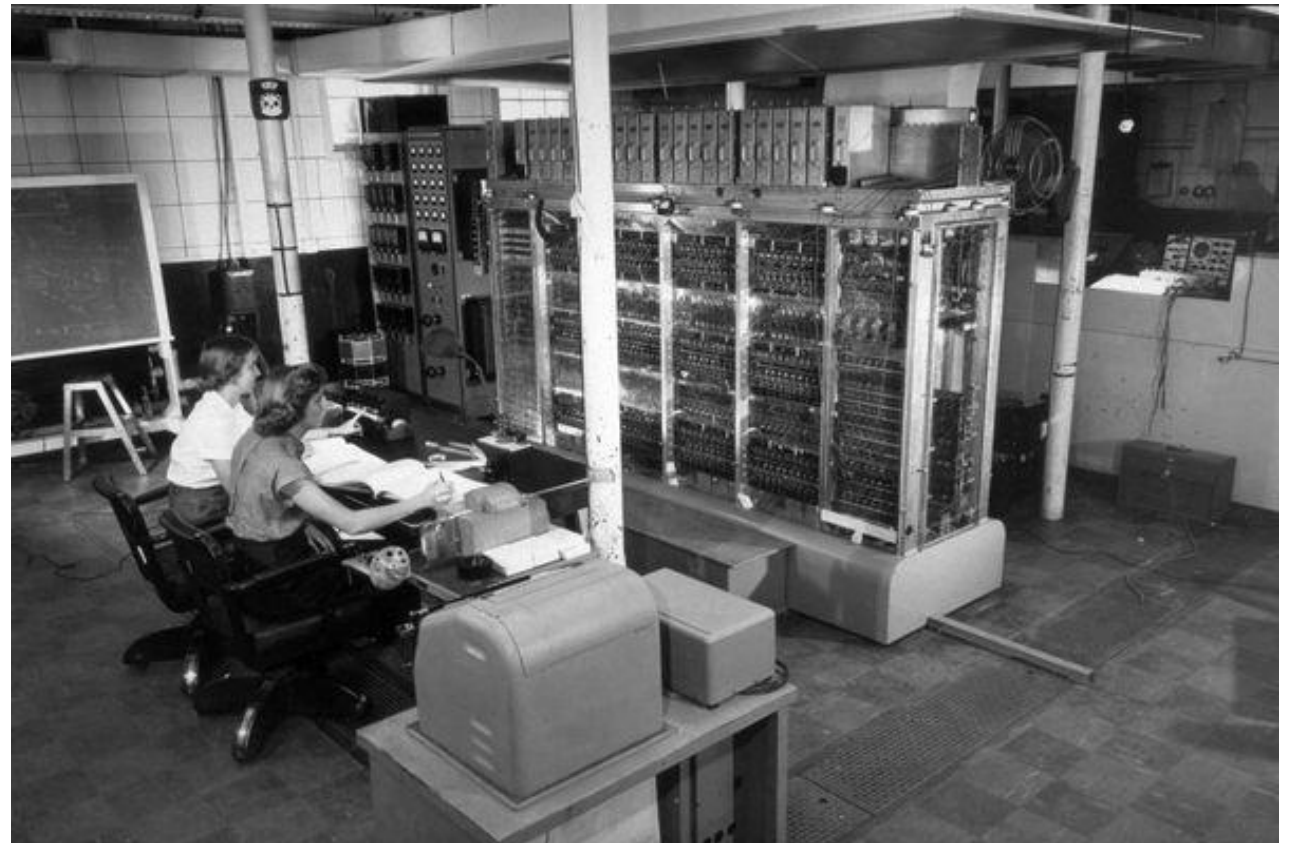
2) da capire se il bechmark di TOP500 del 2000 utilizzava per Rmax
FP64(doppia precisione per i numeri reali):
in tal caso, il valore FP32 sarebbe piu' o meno doppio, ma comunque il paragone è impressionante!!!!

GPU frequencies

GPU frequency	Frequency (Turbo)	FP16 (Half Precision)	FP32 (Single Precision)
0.39 GHz	1.40 GHz	4.29 TFLOPS	2.15 TFLOPS

La nascita della fisica computazionale

Un PROBLEMA per il computer MANIAC (Los Alamos, 1955)

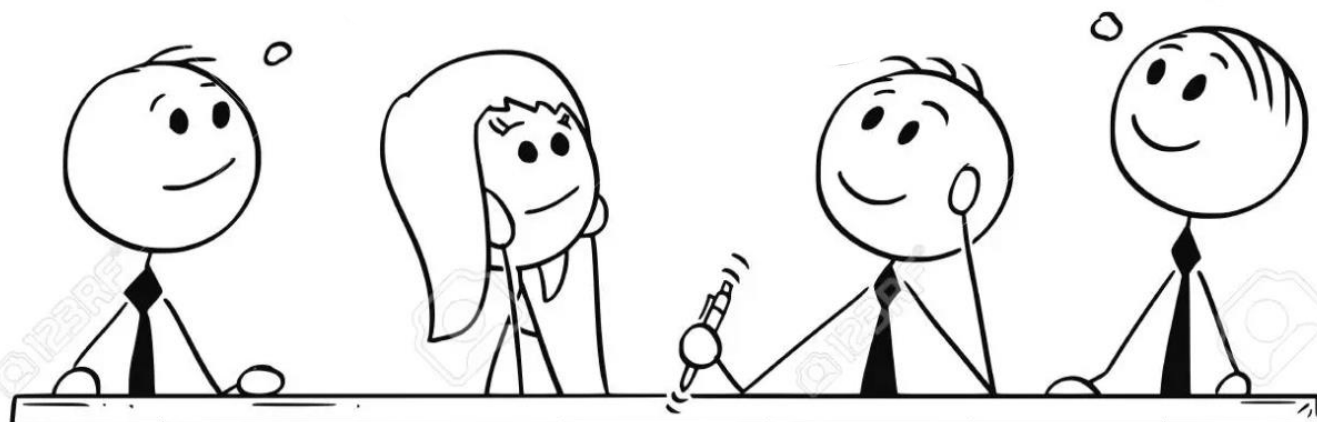
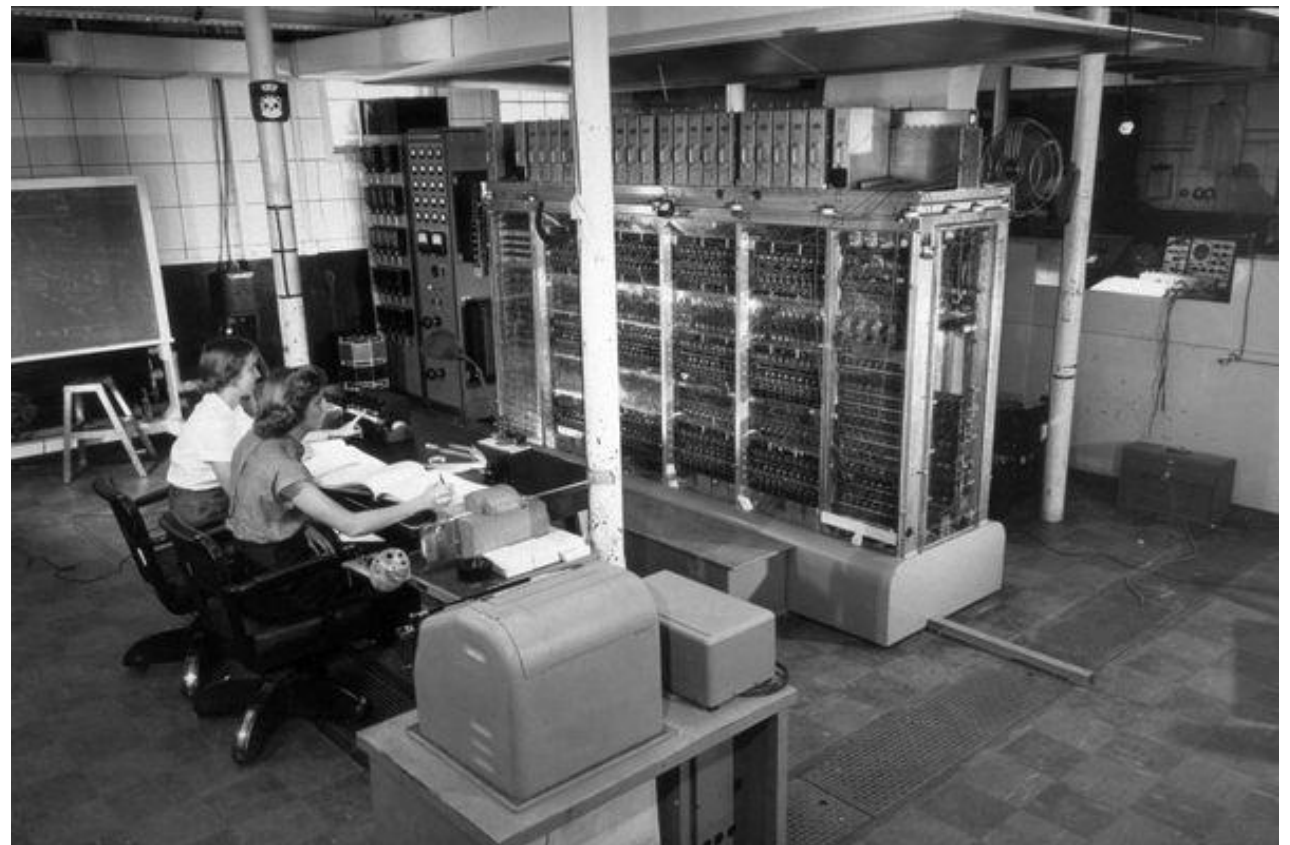


Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou

La nascita della fisica computazionale

Un PROBLEMA per il computer MANIAC (Los Alamos, 1955)

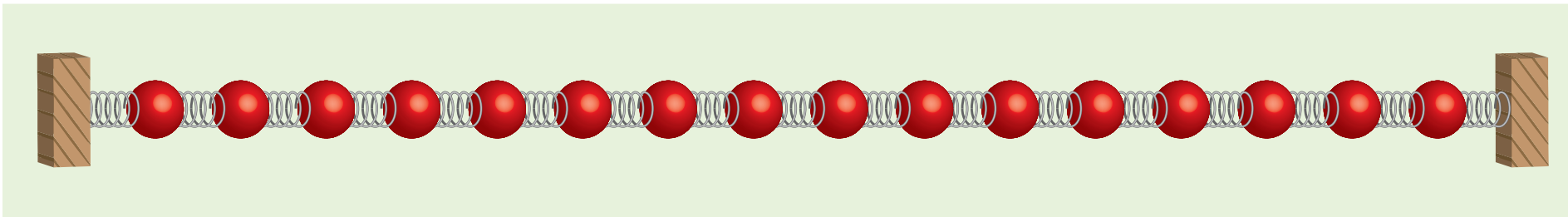
termalizzazione!



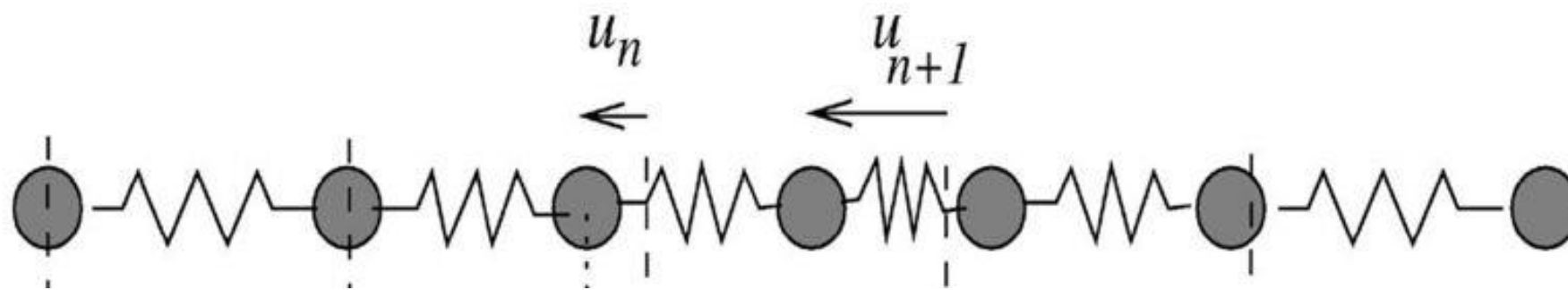
<https://discover.lanl.gov/publications/national-security-science/2020-winter/we-thank-miss-mary-tsingou/>

La nascita della fisica computazionale

PROBLEMA: Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou 1955



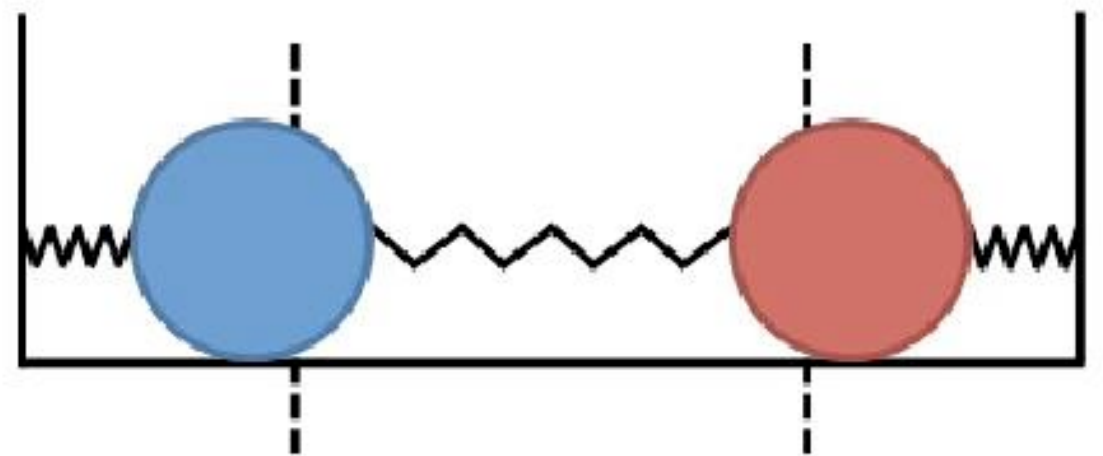
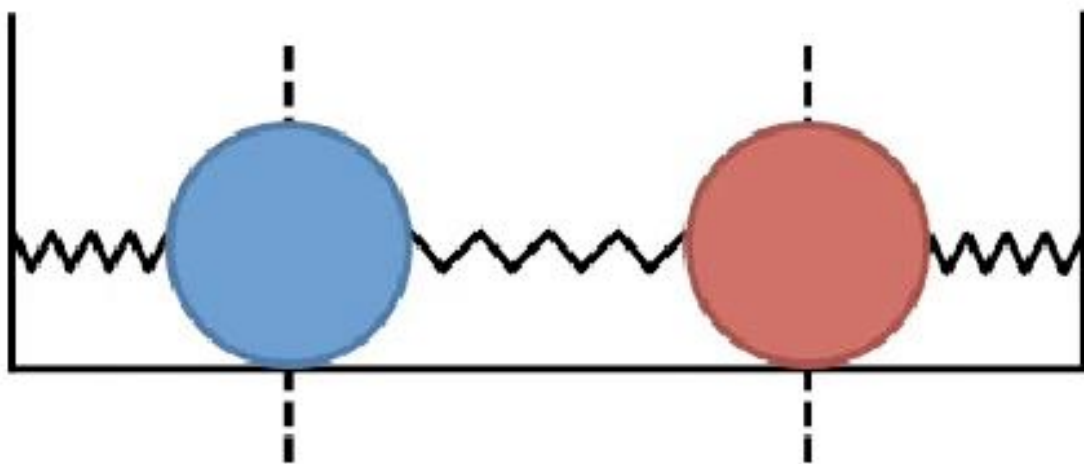
Una catena di N particelle legate da molle (analogo unidimensionale degli atomi in un cristallo)



Interazione lineare (legge di Hooke, $f = -k \Delta u$):

ci sono N «modi normali» (cioè schemi di movimento in cui tutte le parti del sistema oscillano con la stessa frequenza e con una relazione di fase fissa)

Esempio con 2 oscillatori: Modi normali

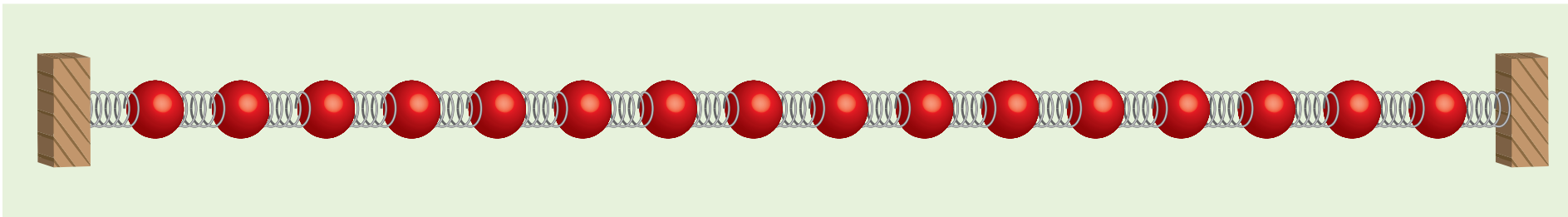


http://fisicaondemusica.unimore.it/Oscillatori_accoppiati.html

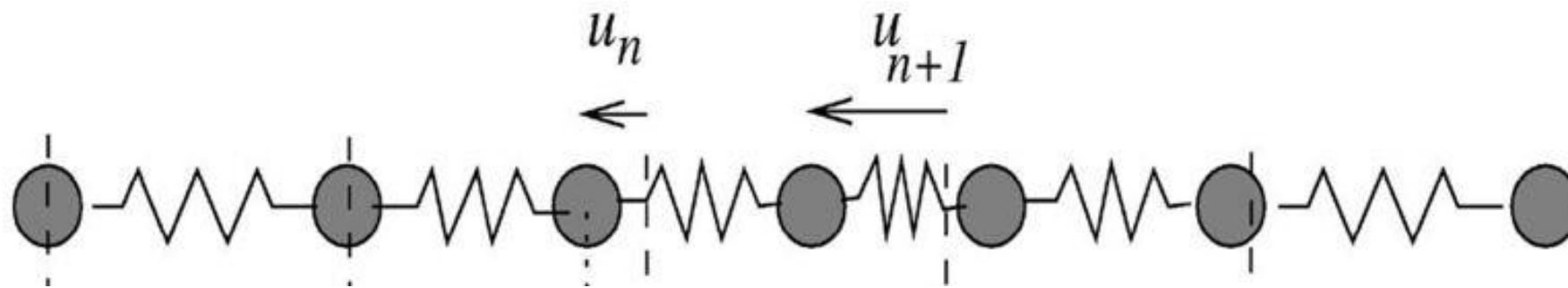
Anche: https://fisicaondemusica.unimore.it/Catena_di_Fermi-Pasta-Ulam.html

La nascita della fisica computazionale

PROBLEMA: Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou 1955



Una catena di N particelle legate da molle (analogo unidimensionale degli atomi in un cristallo)



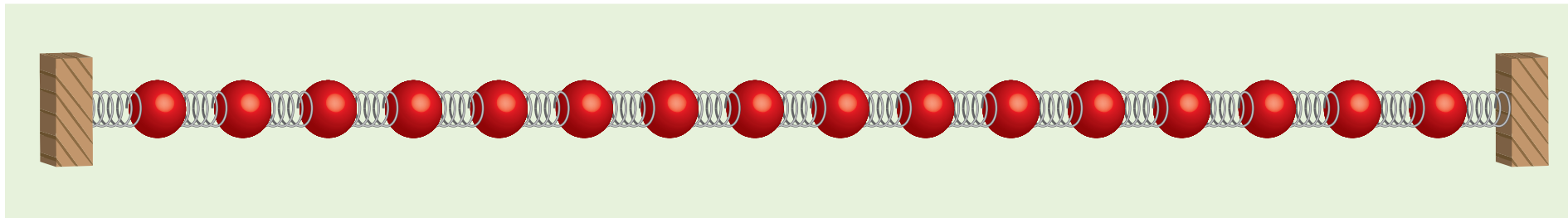
Interazione lineare (legge di Hooke, $f = -k \Delta u$):

soluzione analitica:

L'energia fornita a un singolo «modo normale»
rimane sempre in quel modo

La nascita della fisica computazionale

PROBLEMA: Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou 1955



in presenza di un **debole accoppiamento non lineare**
(correzione quadratica o cubica al termine lineare $-k\Delta u$),
quali modi verranno eccitati dopo un tempo
sufficientemente lungo?

Comportamento atteso in base al teorema di equipartizione: l'energia
sarà equamente distribuita tra tutti i gradi di libertà del sistema.

Tuttavia: **soluzione analitica impossibile**

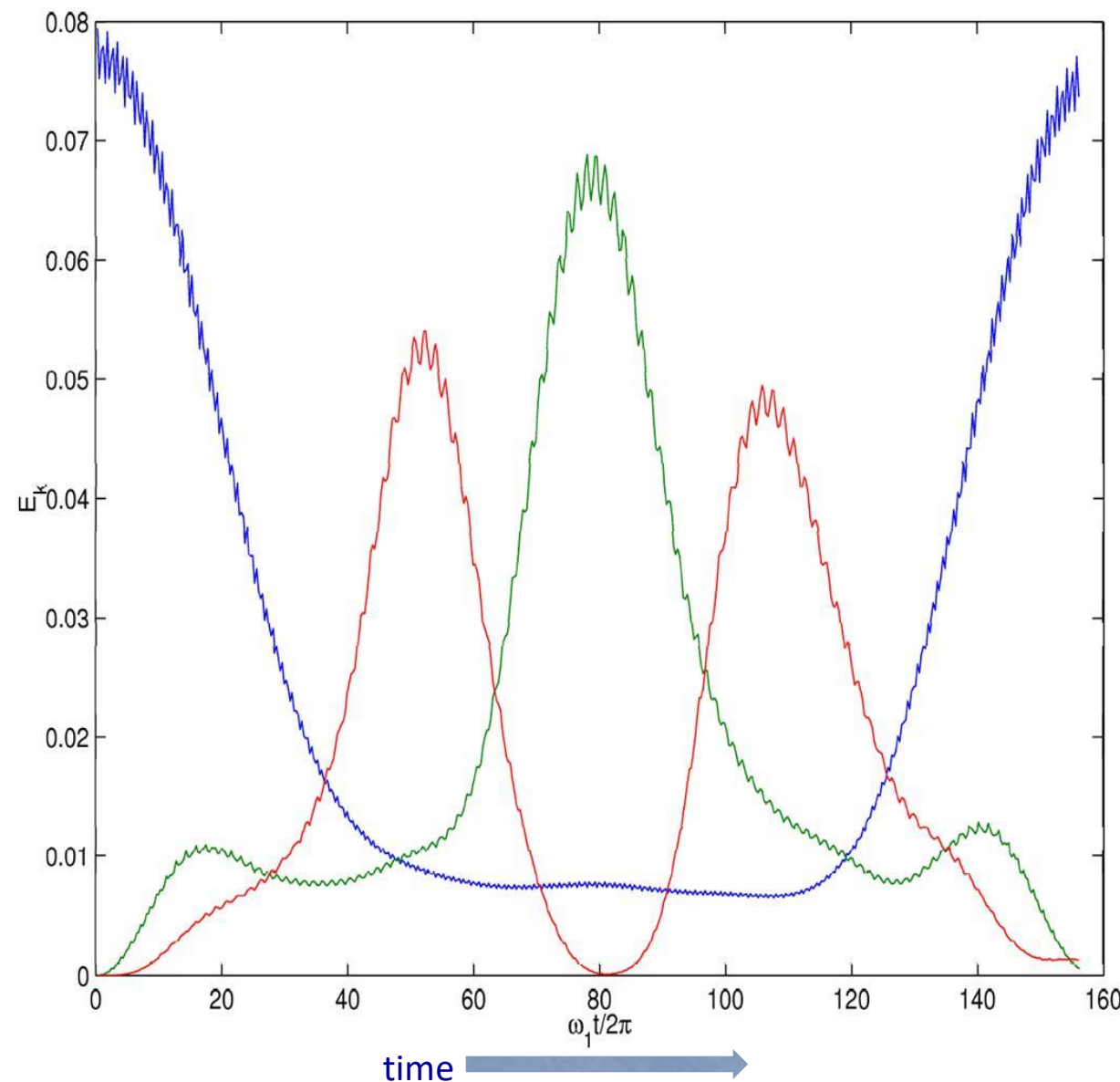
La nascita della fisica computazionale

PROBLEMA: Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou 1955

Soluzione numerica con MANIAC (originalmente: calcolo per $N=5$)

Energia verso
tempo per 3
modi normali:

$K=$ 1 2 3



qui: $N=32$; dopo
l'eccitazione
iniziale del modo
 $k=1$ e 157 periodi,
quasi tutta
l'energia ritorna in
questo modo!!!

Simulazioni come “esperimenti virtuali”

Alcune similitudini:

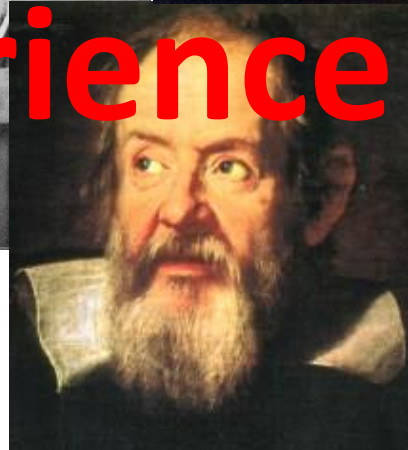
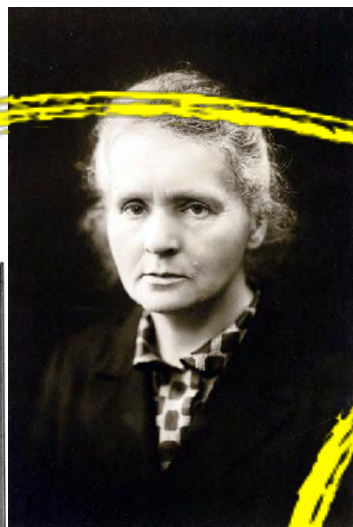
Esperimento reale (in laboratorio tradizionale)	Esperimento virtuale (computazionale)
campione	modelli e algoritmi
apparato fisico	codice
calibrazione degli strumenti	test del codice
misure	risultati numerici
analisi dati	analisi dati



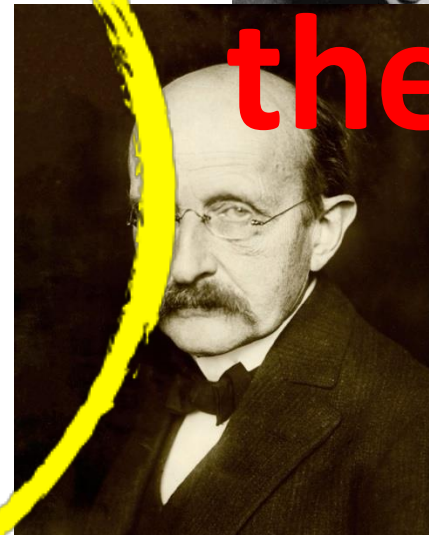
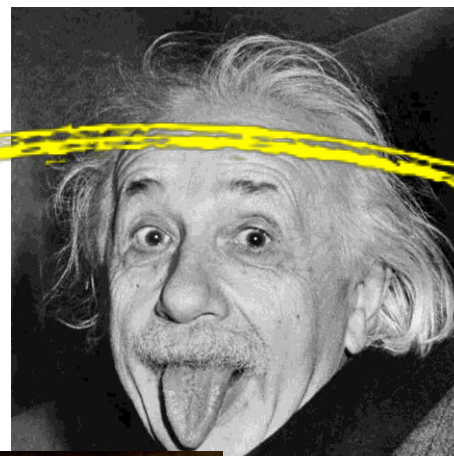
Con errori!!!

- Importanza delle simulazioni: **experimenti “what-if”** (ampia flessibilità nel variare parametri; ad es., le proprietà dei materiali possono essere studiate anche in condizioni non accessibili nei laboratori reali); **previsioni**, non solo descrizioni.
- Uso delle simulazioni: **non “fine a sè stesse”, ma “strumenti”** per studiare e far luce su fenomeni complessi e/o sistemi con molti gradi di libertà o molte variabili e parametri
- Negli ultimi decenni, le simulazioni numeriche sono emerse come il terzo pilastro della scienza, oltre alla teoria e agli esperimenti

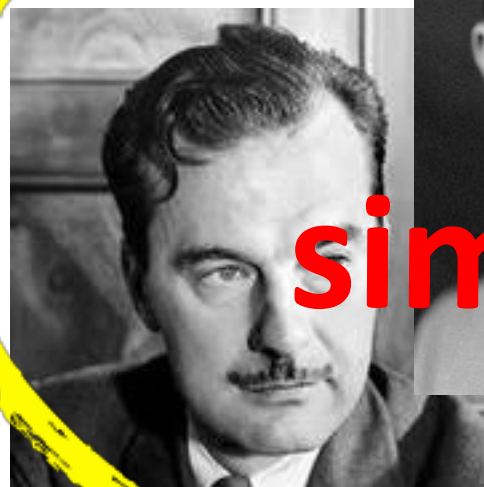
experience



theory



simulation



Lo scopo del calcolo scientifico

- “The computer is a tool for clear thinking”
(Freeman J. Dyson)
- “. . . whose [of the calculations] purpose is
insight, not numbers” (Richard W. Hamming)

Due approcci diversi per le simulazioni numeriche

- **deterministici**

si basano su variabili di input precise, forniscono informazioni univoche sulle proprietà di equilibrio e sulla dinamica del sistema

- **stocastici (Monte Carlo, MC)**

tipicamente usati per simulare processi intrinsecamente casuali, e/o per campionare eventi più probabili

L'approccio deterministico

Possiamo scrivere le equazioni del moto
(Classica => Newton; Quantistica => Schroedinger)

e sappiamo le condizioni iniziali =>

Il problema è allora legato “solo” alla
integrazione numerica di equazioni differenziali
(o integro-differenziali nei problemi quantistici)

(come nel problema FPUT)

L'approccio deterministico

**Integrazione numerica delle equazioni del moto:
Discretizzazione e iterazione**

Diversi algoritmi a seconda che l'equazione
sia del **1° , 2° ordine...**

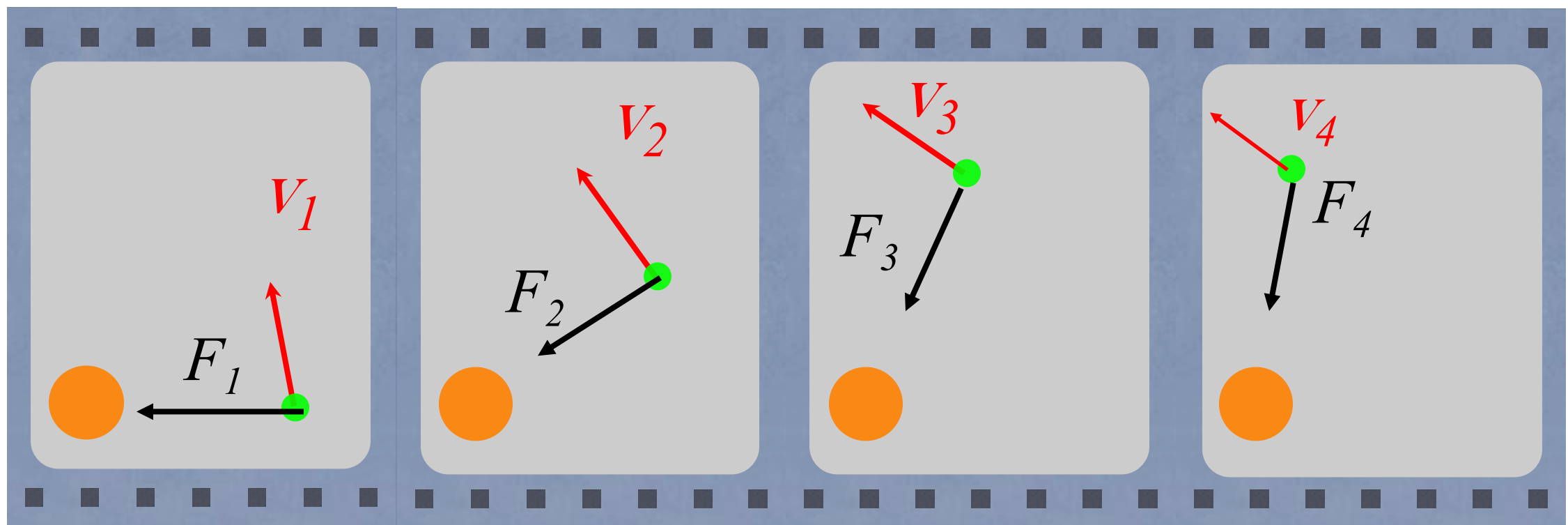
(l'equazione per la velocità è del 1° ordine),
che la **forza sia dipendente or no dalla velocità,**
a quale ordine...

Esempi =>

L'approccio deterministico

1) Discretizzazione dell'equazione del moto **classica** e iterazione:

$$a(t) = \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = \frac{F(t)}{m}$$
$$x(t) = x(0) + v(0)t + \frac{1}{2} \frac{F}{m} t^2$$
$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2} a(t)\Delta t^2$$



$x(1)$ $v(1)$ $F(1)$

$x(2)$ $v(2)$ $F(2)$

$x(3)$ $v(3)$ $F(3)$

... ..

L'approccio deterministico

2) Quantistico

Discretizzazione dell'equazione di Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

L'approccio deterministico

2) Quantistico

Discretizzazione dell'equazione di Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

L'approccio stocastico

Utile per modellizzare:

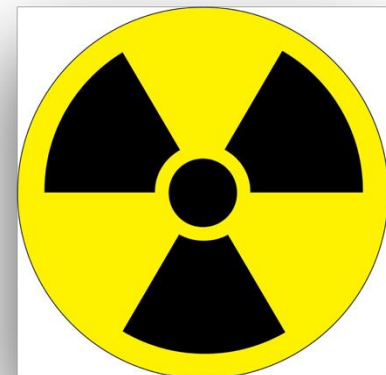
- 1) Alcuni processi fisici che sono per loro natura **intrinsecamente probabilistici**.
- 2) Molti sistemi classici “grandi”, che hanno un **numero** così **elevato** di **variabili** o **gradi di libertà**, che un trattamento esatto sarebbe impossibile ma anche inutile.

L'approccio stocastico

1) Processi fisici probabilistici

Tentiamo di seguire la dipendenza temporale di un modello in cui il cambiamento, o la crescita, non procede in un modo rigorosamente predefinito (ad esempio secondo le equazioni del moto di Newton), ma piuttosto in modo stocastico che dipende da una sequenza di numeri casuali generata durante la simulazione

esempio: decadimento radioattivo

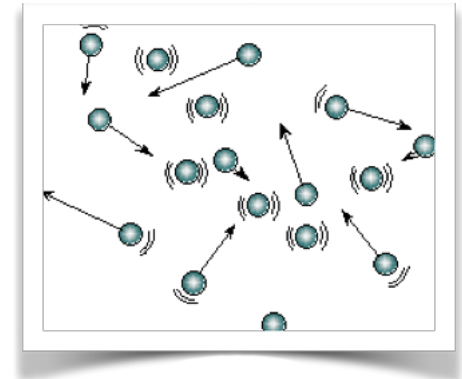


L'approccio stocastico

2) Sistemi con molti gradi di libertà

Esempio: Proprietà termodinamiche dei gas

Impossibile e inutile conoscere le posizioni e le velocità esatte di tutte le molecole!



Le proprietà utili sono le medie statistiche: energia media delle particelle (temperatura), variazione media della quantità di moto dovuta alle collisioni con le pareti del contenitore (pressione), ecc.

L'errore nelle medie diminuisce all'aumentare del numero di particelle. Il volume macroscopico del gas contiene $O(10^{23})$ molecole. Quindi un approccio statistico funziona molto bene!

L'approccio stocastico

2) Sistemi con molti gradi di libertà

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS

VOLUME 21, NUMBER 6

JUNE, 1953

Equation of State Calculations by Fast Computing Machines

NICHOLAS METROPOLIS, ARIANNA W. ROSENBLUTH, MARSHALL N. ROSENBLUTH, AND AUGUSTA H. TELLER,
Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico

AND

EDWARD TELLER,* *Department of Physics, University of Chicago, Chicago, Illinois*

(Received March 6, 1953)

A general method, suitable for fast computing machines, for investigating such properties as equations of state for substances consisting of interacting individual molecules is described. The method consists of a modified Monte Carlo integration over configuration space. Results for the two-dimensional rigid-sphere system have been obtained on the Los Alamos MANIAC and are presented here. These results are compared to the free volume equation of state and to a four-term virial coefficient expansion.

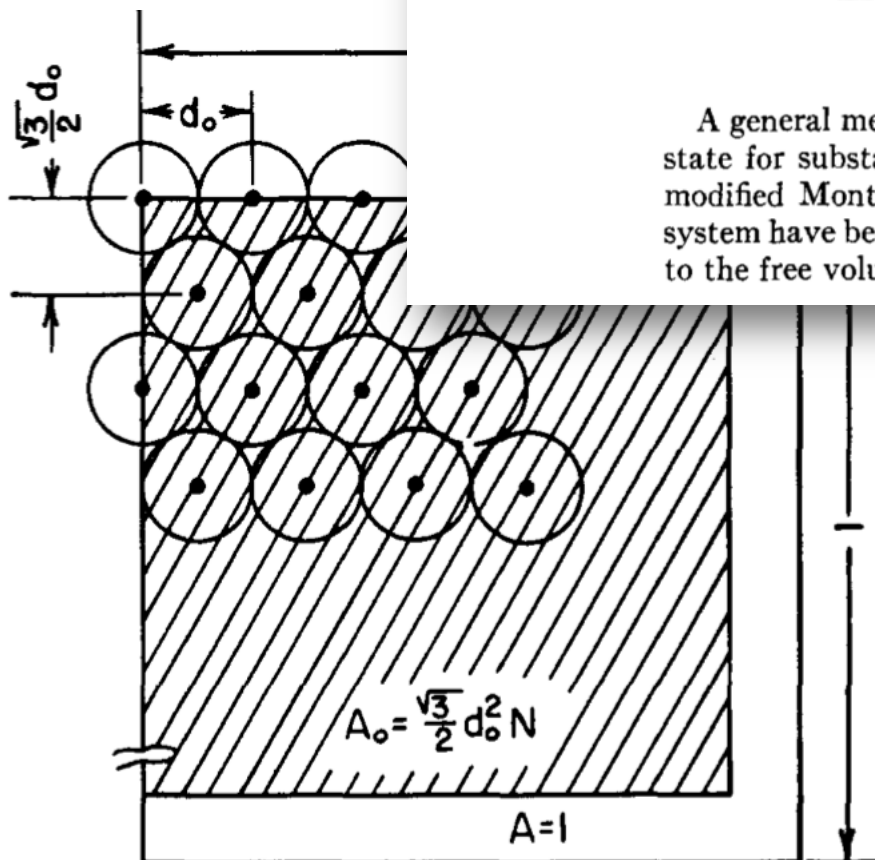


FIG. 3. The close-packed arrangement for determining A_0 .

(problema affrontato con il computer MANIAC)

Monte Carlo

Monte Carlo si riferisce a qualsiasi procedura che **utilizza numeri casuali (*)**

Monte Carlo è usato in:

- Analisi numerica
- Simulazioni stocastiche

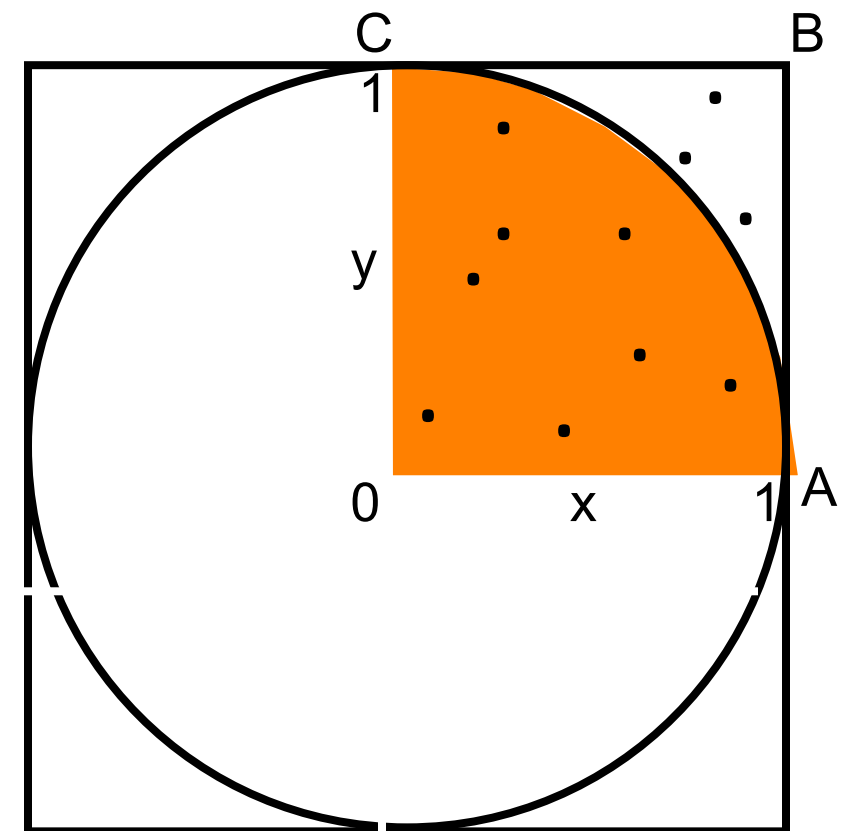
(*) una sequenza di numeri casuali è un insieme di numeri che sembrano imprevedibili ma con proprietà statistiche ben definite

Metodi Monte Carlo : calcolare integrali

Metodo “colpito o mancato”: quanto vale π ?

Algoritmo

- Generare x e y in modo uniforme e casuale tra 0 a 1
- Calcolare la distanza dall'origine: $d = (x^2 + y^2)^{1/2}$
- se $d \leq 1$, $\tau_{hit} = \tau_{hit} + 1$
- ripetere per τ_{tot} volte

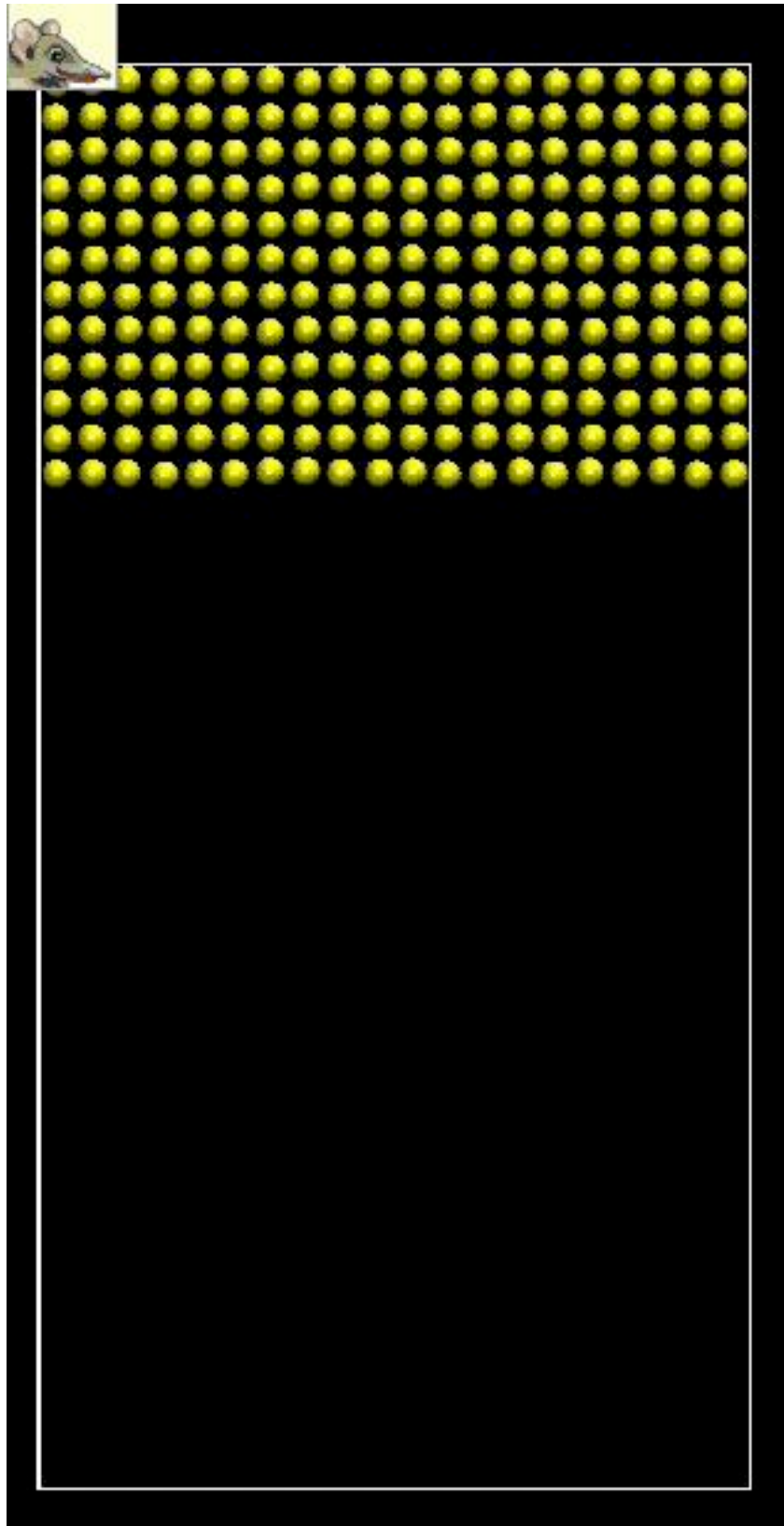


$$\begin{aligned}\pi &\approx \frac{4 \times \text{Area Under Curve CA}}{\text{Area of Square OABC}} \\ &= \frac{4\tau_{hit}}{\tau_{tot}}\end{aligned}$$

Alcuni esempi selezionati di applicazioni

(qui: limitatamente al campo della materia condensata !!!)

Dalle scale “normali”...



(classico)

SIMULAZIONE del moto Browniano

Sedimentazione di sfere dure in un sistema 2D con pareti. Sono incluse interazioni con particelle più piccole (non mostrate qui) che rappresentano il solvente termodinamico.

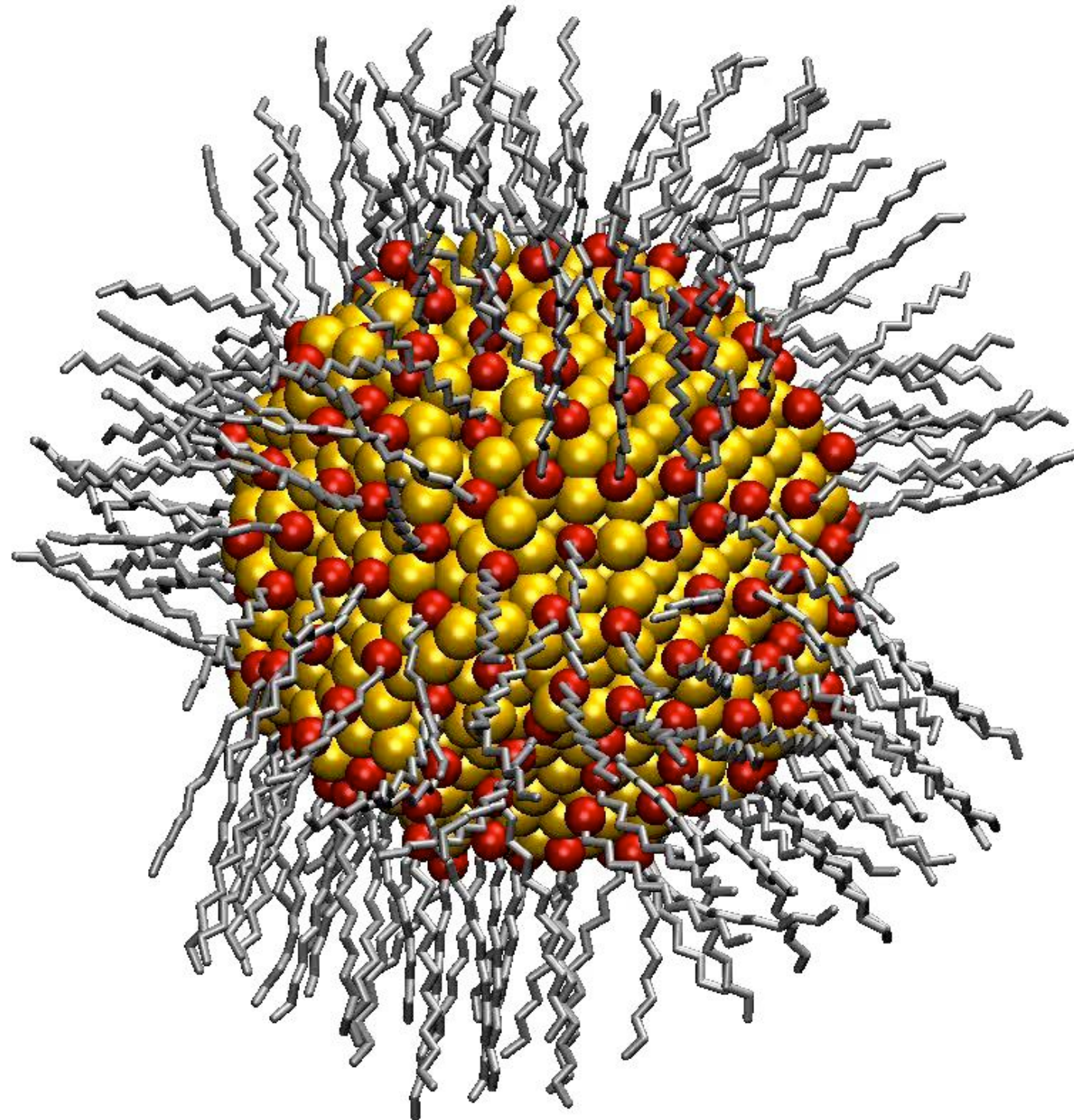
(deterministico, simulazione classica)

... Alla nanoscala: passivazione di nanoparticelle

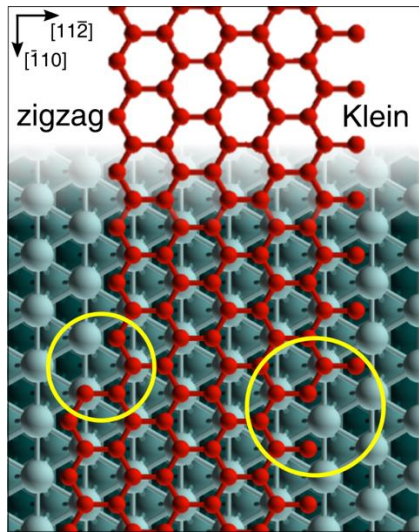
Con molecole organiche
(tioli)

Au

S



Credits: J. Olmos-Asar

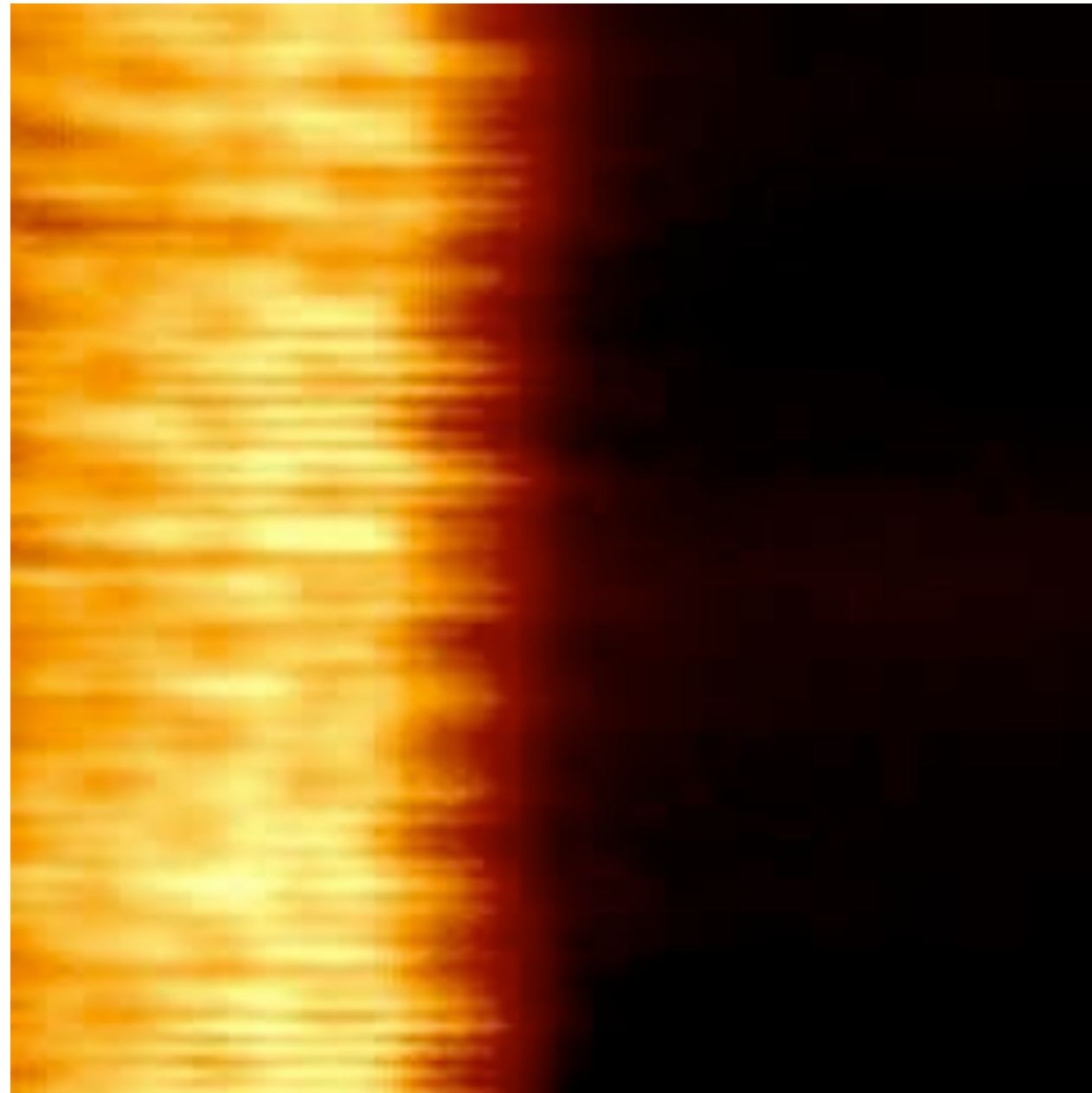


... alla scala atomica

Grafene @Ni(111)

(M.P. in
collaborazione
con TASC;
Science, 2018)

EXPERIMENTAL
FAST-STM
MOVIE

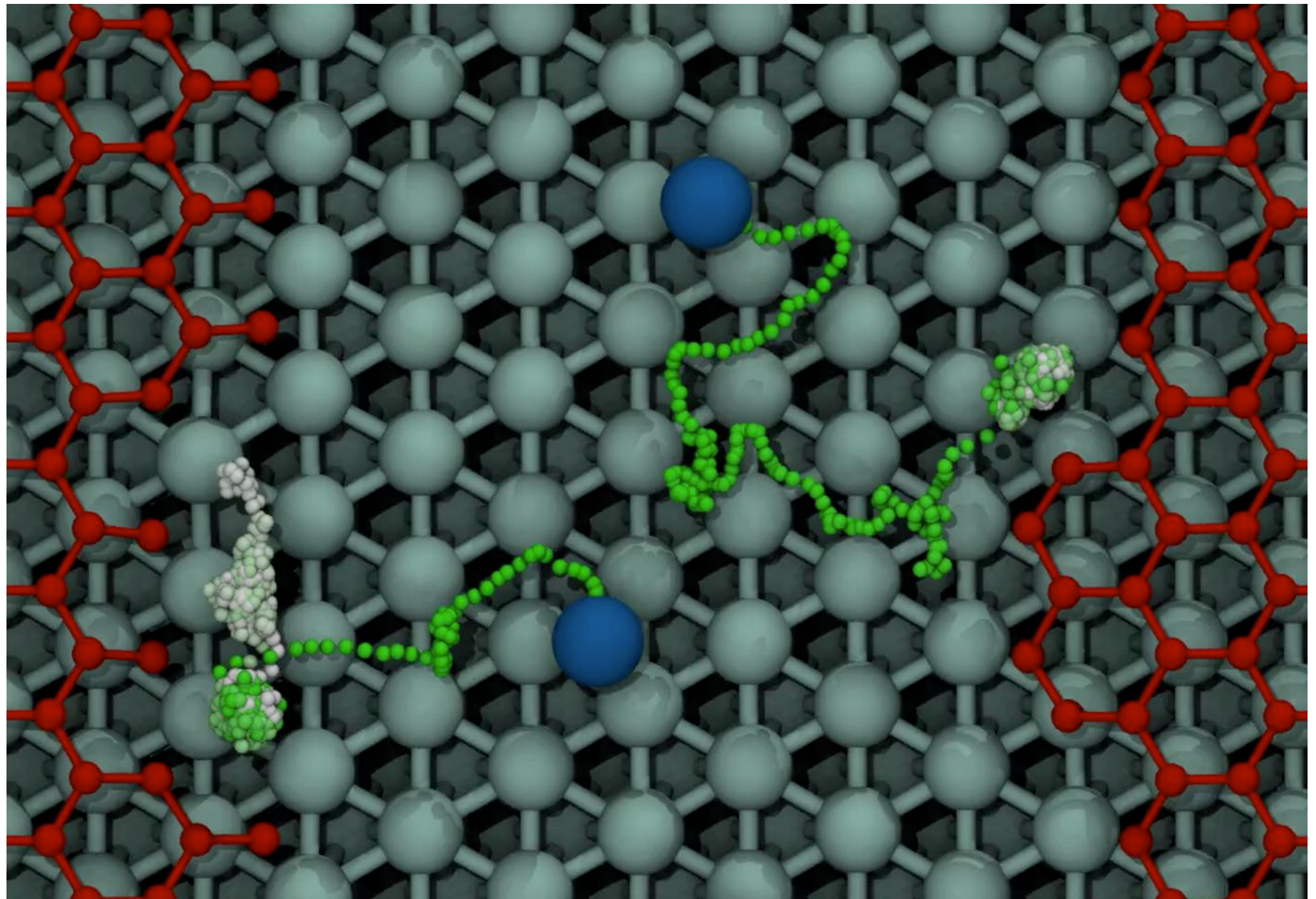


... alla scala atomica

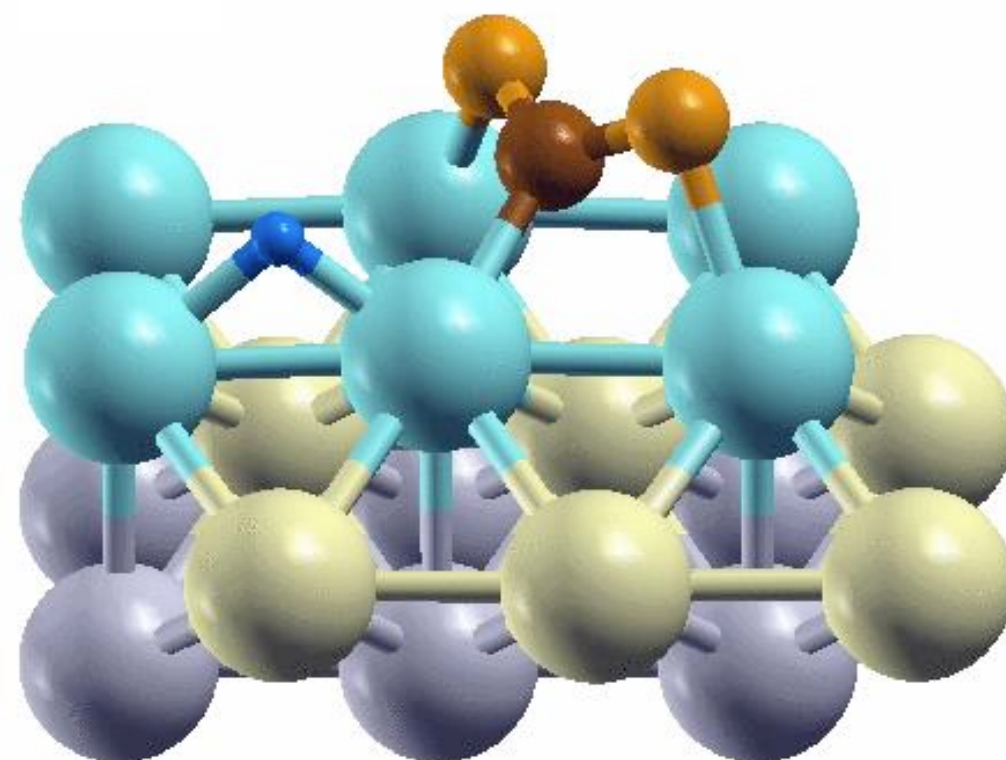
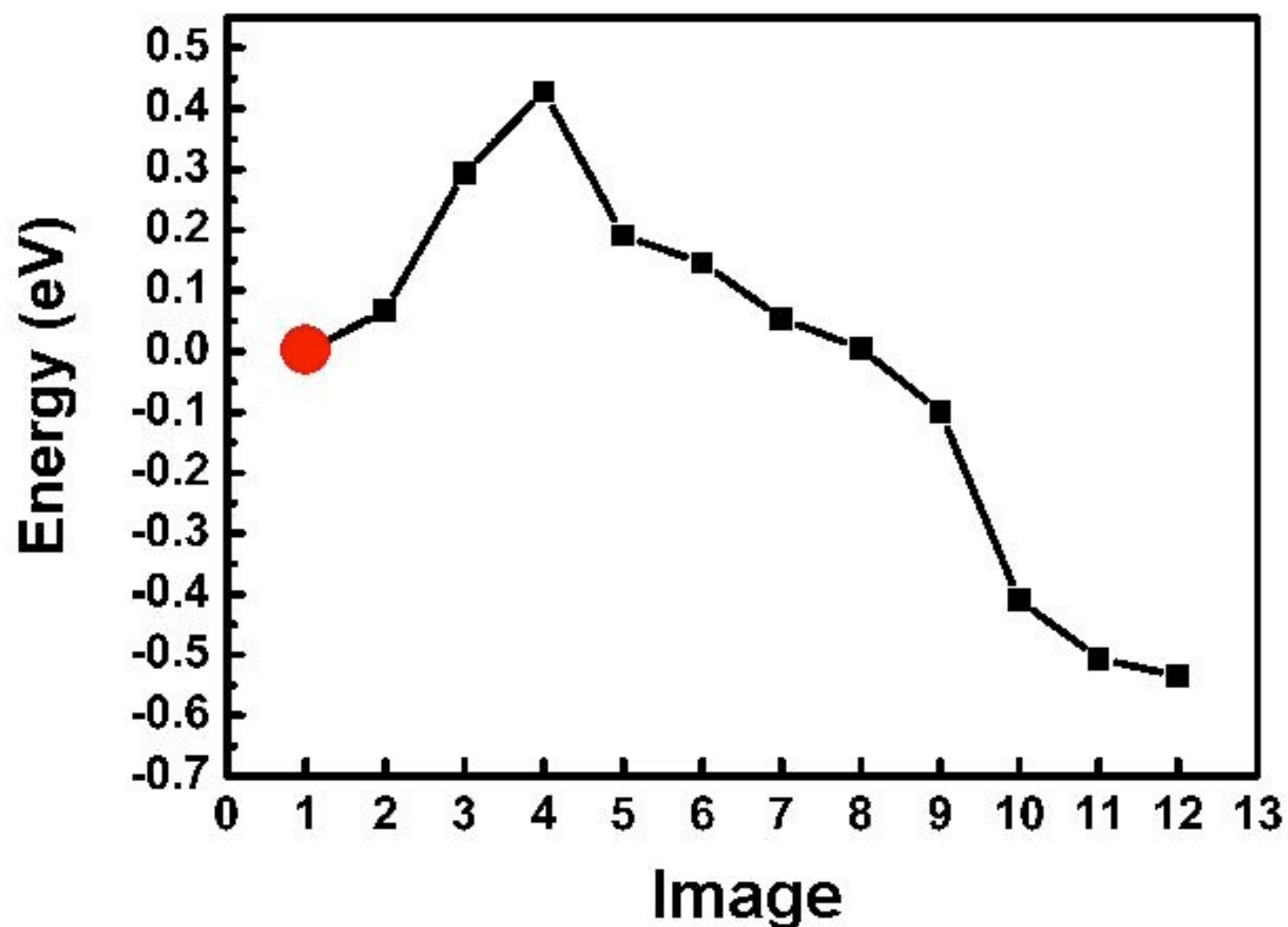
Grafene @Ni(111)

(M.P. in
collaboration
with TASC;
Science, 2018)

CLASSICAL
MOLECULAR
DYNAMICS
SIMULATION



...comprese reazioni chimiche



(deterministico, simulazioni quanto-meccaniche)

Uno scenario ampio... anche solo all'interno della materia condensata :

- ampia gamma di **scale di lunghezza**: ≈ 12 ordini di grandezza (nuclei/elettroni/atomi/legami chimici $\sim 10^{-12}$ m, frattura/fenomeni meccanici macroscopici ~ 100 m; scale nano/micro/meso/macrosopiche)
- ampia gamma di **scale temporali**: ≈ 12 ordini di grandezza (nuclei/elettroni/atomi/legami chimici $\sim 10^{-12}$ s, frattura/fenomeni meccanici macroscopici $\sim$ anno)
- ampia gamma di **proprietà chimico-fisiche**: strutturali, elastiche, vibrazionali, elettroniche, dielettriche, magnetiche, ottiche, termiche...
- ampia gamma di **materiali**: diverse fasi, materiali tradizionali (cristallini/amorfi, metalli/semiconduttori/isolanti...), nuovi materiali...

Diversi tipi di interazioni:

- **Classiche**
- **Quantistiche**

Diversi approcci:

- **Deterministici**
- **Stocastici**

...e anche diverse tecniche specifiche

corrispondenti a diverse scale di dimensioni/tempo:

- **modelli continui** (per sistemi macroscopici)
- **simulazioni atomistiche**
 - tecniche ab - initio (o “da principi primi”): fino a $\sim 10^3$ atomi, 10 ps
 - tecniche semiempiriche : fino a 10^7 atomi, 1 ms
 - Modelli a diversi livelli

...e diversi “sforzi” computazionali

Alcune tecniche e sistemi non sono molto impegnativi dal punto di vista computazionale (i nostri esperimenti saranno piuttosto piccoli e semplici!!!)

altri sono molto pesanti e necessitano di risorse di “calcolo ad alte prestazioni” o

High Performance Computing

Questo modulo:

- NON è un corso di Informatica, Informatica, Linguaggi di programmazione...
- Ma un piccolo **LAB. di FISICA**
- **ci focalizzeremo su modellizzazione, problem solving e algoritmi**
- Ben lungi dall'essere esaustivo, ma solo con pochi spunti ed esempi...

Alcuni possibili esempi

- **Approcci deterministici**

- diffusione dei gas & termodinamica
- problemi gravitazionali
- caos e determinismo: biliardi classici e caotici, mappe logistiche

- **Approcci stocastici**

- approccio Monte Carlo per misurare aree
- “random walks” (=cammini casuali)

Quali strumenti?

- (Do-it-yourself?) Codici in linguaggi diversi (Fortran90, C++, Java, Python, ...) + alcuni strumenti di visualizzazione
- Excel (foglio elettronico)
- Diversi “applets” disponibili su web
- ...

Cosa preferire? Diversi fattori da considerare per mettersi all’opera e per raggiungere uno scopo....



- Esperienze e competenze pregresse
- interessi
- tempo
- risorse
- ...

Materiale del Corso su Moodle

**FI020004-4 - LABORATORIO DI FISICA
COMPUTAZIONALE 2024**

Iscrizione spontanea con chiave d'accesso: FI020004