

Informatica per Chimici

Laurea Triennale in Chimica

□ Docente: Prof. **William Spataro**

- Studio: Dipartimento di Matematica – Cubo 31B – 2° Piano
- Studio: Centro di Eccellenza HPCC – Cubo 22B
- Ricevimento/ricieste: ??? o email (spataro@unical.it)
- Web: www.mat.unical.it/spataro

□ **Esercitori** del corso:

- Dott. William Spataro
 - spataro@unical.it, 0984-494875 (493691)

- Sito del corso (lucidi, risultati esami, ecc. ecc. ecc.)
<http://https://sv.mat.unical.it/~spataro/teaching/InformaticaChimica/InformaticaChimica.html>
-

Programma del corso (teoria)

-1

- # L'algebra di Boole; i sistemi di numerazione; la rappresentazione dei dati e l'aritmetica degli elaboratori
 - # La struttura del calcolatore
 - # Analisi e programmazione; algoritmi e loro proprietà; i linguaggi per la formalizzazione di algoritmi: diagrammi a blocchi e pseudocodifica
 - # Introduzione alla programmazione; i linguaggi di programmazione di alto livello: il linguaggio C
 - # I fondamenti del linguaggio C — lo sviluppo dei programmi, la compilazione dei file sorgente, il link ed il caricamento in memoria principale, la libreria di run-time, l'impaginazione dei file sorgente, il preprocessore
-

Programma del corso (teoria)

-2

- # Il linguaggio C — tipi di dati scalari, controllo di flusso, operatori ed espressioni, array e puntatori, classi di memorizzazione, strutture ed unioni, funzioni, direttive del preprocessore, input e output
-

Programma del corso (laboratorio)

- *Esercitazioni sugli argomenti e codici visti a lezione*

La frequenza nelle lezioni di laboratorio è obbligatoria!

Prove di accertamento

- Prova di teoria (test a risposta multipla, codici)**
 - Prova di laboratorio (non prevista)**
-

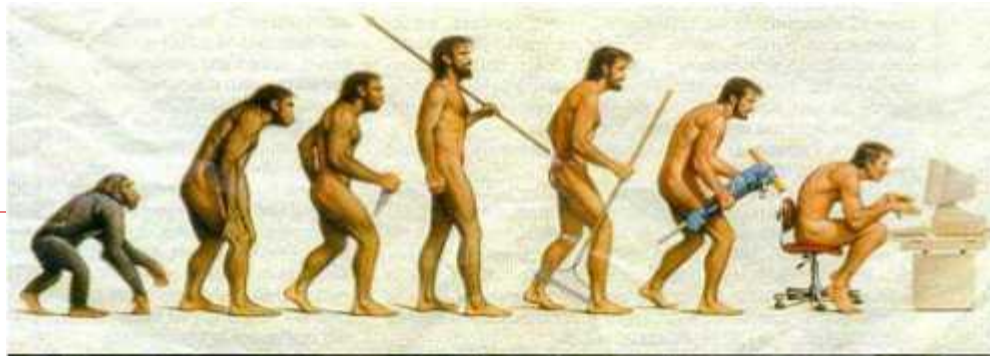
Testi consigliati

- ❑ Programmazione Scientifica. Luciano M. Barone, Enzo Marinari, Giovanni Organtini, Federico Ricci-Tersenghi - Pearson Education Ed.
 - ❑ Stanley B. Lippman, Josée Lajoie, Barbara E. Moo. C++ Primer, 4th Edition. Addison Wesley Professional, 2005
 - ❑ Deitel & Deitel, "C++ Fondamenti di programmazione", Ed. Apogeo, 2a edizione, 2005
 - ❑ Lucidi/Dispense reperibili direttamente sul sito web del Docente.
-

Cosa è l'Informatica ? - 1

- ❑ Scienza degli elaboratori elettronici (*Computer Science*)
- ❑ Scienza dell'informazione

Scienza della rappresentazione,
memorizzazione, elaborazione e trasmissione
dell'informazione



Cosa è l'Informatica ? - 2

- ✚ **Informatica** — fusione delle parole **informazione** e **automatica** — l'insieme delle discipline che studiano gli strumenti per l'elaborazione automatica dell'informazione e i metodi per un loro uso corretto ed efficace
 - ✚ ***L'informatica è la scienza della rappresentazione e dell'elaborazione dell'informazione***
 - ✚ L'accento sull'"informazione" fornisce una spiegazione del perché l'informatica sia ormai parte integrante di molte attività umane: laddove deve essere gestita dell'informazione, l'informatica è un valido strumento di supporto
 - ✚ Il termine "scienza" sottolinea il fatto che, nell'informatica, l'elaborazione dell'informazione avviene in maniera sistematica e rigorosa, e pertanto può essere automatizzata
-

Cosa è l'Informatica ? - 3

- # L'informatica non è, quindi, la scienza e la tecnologia dei calcolatori elettronici: il calcolatore è lo strumento che la rende "operativa"
 - # L'**elaboratore** (computer, calcolatore) è un'apparecchiatura **digitale**, **elettronica** ed **automatica** capace di effettuare trasformazioni sui dati:
 - Digitale: i dati sono rappresentati mediante un alfabeto finito, costituito da cifre (digit), che ne permette il trattamento mediante regole matematiche
 - Elettronica: realizzazione tramite tecnologie di tipo elettronico
 - Automatica: capacità di eseguire una successione di operazioni senza interventi esterni
 - # "La disumanità del computer sta nel fatto che, una volta programmato e messo in funzione, si comporta in maniera perfettamente onesta." (Isaac Asimov)
-



Introduzione all'Informatica

- Che cosa si intende per INFORMAZIONE?
 - Non corrisponde semplicemente ai *dati* di origine
 - Non coincide con il *supporto fisico* con cui viene espressa e trattata, che però è indispensabile per gestirla
- Caratteristiche necessarie a un supporto fisico per portare informazione:
 - Deve poter *identificare delle differenze*
 - Esempio di supporto fisico: la mano
- Informazione come "*Riduzione di incertezza*"
 - Unità elementare di informazione: *bit* (Sì/No)





Introduzione all'Informatica

■ Cosa studia l'informatica?

- Architettura degli Elaboratori (componenti hardware ...)
 - Linguaggi di programmazione (progetto, analisi e realizzazione dei linguaggi)
 - Algoritmi (progetto e analisi di sequenze di passi per la soluzione dei problemi)
 - Teoria della calcolabilità (quali problemi è possibile risolvere)
 - Sistemi operativi (come utilizzare al meglio le risorse hardware di un pc)
 - Ingegneria del software (metodologia per lo sviluppo di programmi)
 - Reti di calcolatori (studio della comunicazione tra computer)
 - Intelligenza artificiale (simulazione dei processi mentali umani)
 - Multimedia (audio, filmati, grafica, ...)
 - Calcolo parallelo e distribuito
 - Basi di dati
 - Internet
-

Cos'è l'informatica? (1)

Tutto ciò che riguarda il
trattamento (automatico) dell'informazione
codifica, memorizzazione, elaborazione, trasmissione...



Esempio: Google Earth

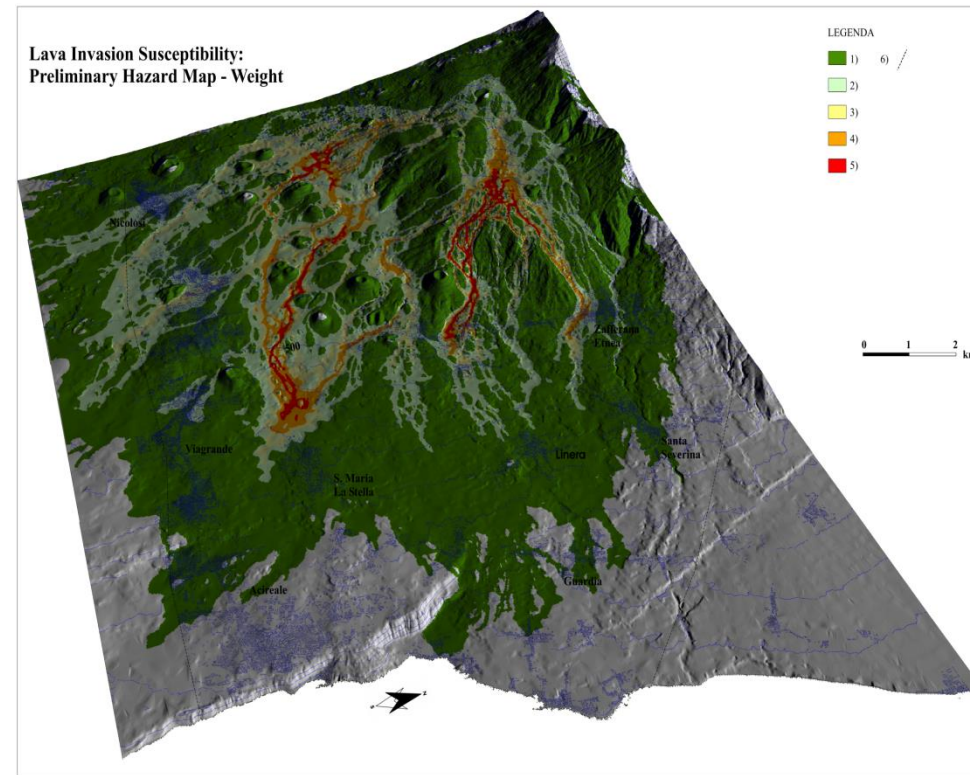
- Informazioni: mappe
- Elaborazioni:
 - calcolo della prospettiva
 - gestione degli “hot spot”
 - definizione degli itinerari
 - etc...
- Trasmissione: mappe in rete

Cos'è l'informatica? (2)

Esempio: Simulazioni

- Informazioni: dati geologici
- Elaborazioni:
 - modellazione della realtà
 - acquisizione dati
 - simulazioni
 - rappresentazioni grafiche

(Mappa di Rischio – Mt Etna)

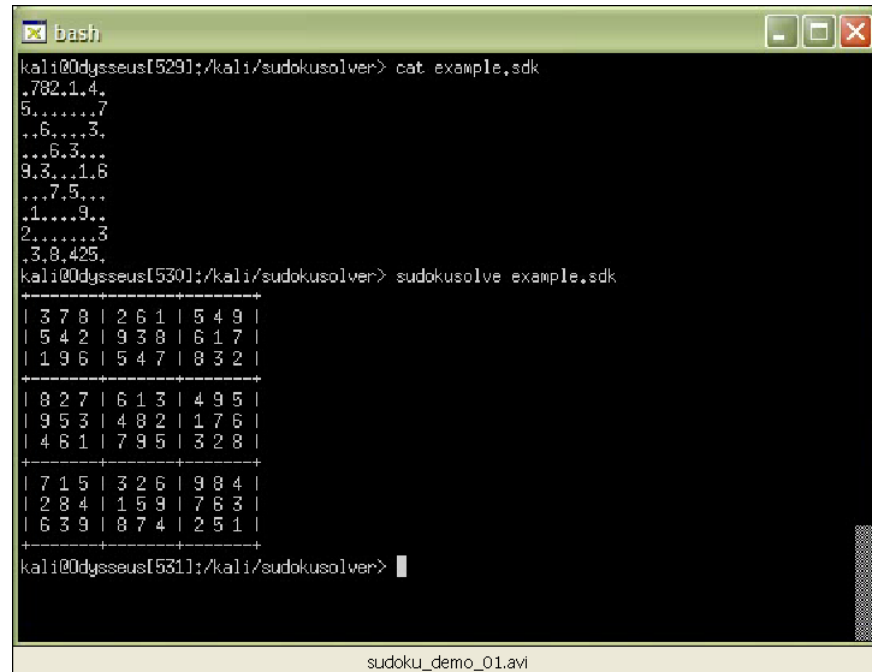


Cos'è l'informatica? (3)

Esempio: Intelligenza Artificiale

SUDOKU

- Informazioni:
 - schema iniziale
 - regole di gioco
- Elaborazioni:
 - passi da fare per completare lo schema



```
kali@00dysseus[5291]:/kali/sudokusolver> cat example.sdk
.782.1.4.
5.....7
..6...3.
...6.3...
9.3...1.6
...7.5...
.1...9..
2.....3
.3.8.425.
kali@00dysseus[5301]:/kali/sudokusolver> sudokusolve example.sdk
+-----+
| 3 7 8 | 2 6 1 | 5 4 9 |
| 5 4 2 | 9 3 8 | 6 1 7 |
| 1 9 6 | 5 4 7 | 8 3 2 |
+-----+
| 8 2 7 | 6 1 3 | 4 9 5 |
| 9 5 3 | 4 8 2 | 1 7 6 |
| 4 6 1 | 7 9 5 | 3 2 8 |
+-----+
| 7 1 5 | 3 2 6 | 9 8 4 |
| 2 8 4 | 1 5 9 | 7 6 3 |
| 6 3 9 | 8 7 4 | 2 5 1 |
+-----+
kali@00dysseus[5311]:/kali/sudokusolver> |
```

sudoku_demo_01.avi

Elaboratore elettronico (o "computer" o "calcolatore")

- E' uno strumento per la rappresentazione, la memorizzazione e l'elaborazione delle informazioni
 - E' **programmabile**: può essere predisposto per eseguire un ***particolare insieme di azioni***, allo scopo di ***risolvere un problema***
-



Il computer

■ Computer: Elaboratore Elettronico Digitale

- *Elaboratore*: macchina in grado di immagazzinare ed elaborare dati in base ad una serie di istruzioni (programma)
- *Elettronico*: utilizza componenti elettronici per elaborare le informazioni
- *Digitale*: i dati sono memorizzati mediante cifre binarie (0/1)



Cosa possiamo fare con un calcolatore?

- **Word Processing.** *Memorizzare, elaborare testi.*
 - **Basi di Dati.** *Memorizzare grossi archivi di dati, recupero veloce, produrre informazioni globali.*
 - **Accesso Remoto.** *Trasmissione e recupero di informazioni (ex: Facebook!)*
 - **Calcolo.** *Risolvere problemi matematici.*
 - **Simulazioni.** *Rappresentare e elaborare informazioni che simulano l'ambiente reale.*
-

Utilizzo di un elaboratore

Come utente:

- Uso software applicativo esistente per creare documenti e interfacce grafiche, effettuare calcoli, navigare in rete

Come sviluppatore:

- Creo nuovi programmi basato sullo strato software esistente
 - Nuovi programmi applicativi
 - Nuovi programmi di sistema (cioè che fanno funzionare il calcolatore)
-

Architettura dei Sistemi Informatici

- *Sistemi Informatici*: PC, Reti di Calc., ...
 - *Architettura*: insieme delle componenti del sistema, descrizione delle loro funzionalità e della loro interazione
 - Suddivisione principale:
 - ***Hardware***
 - ***Software***
-



Hardware e Software (1)

- Definizione di computer
 - “Una *macchina* in grado di risolvere problemi eseguendo *istruzioni* appositamente specificate”
- La definizione evidenzia i due pilastri su cui si regge l’informatica:
 - *Hardware*: l’insieme dei dispositivi che compongono il calcolatore. L’hardware si compone di oggetti tangibili: circuiti integrati, memorie, stampanti, ecc.
 - *Software*: indica l’insieme delle istruzioni e delle informazioni necessarie per risolvere i problemi a cui il sistema è preposto

L’hardware è la parte del computer che si può prendere a calci; il software quella contro cui si può solo imprecare.



Hardware

- **Unità di Elaborazione** (Processore o CPU):
 - Svolge le elaborazioni
 - Coordina il trasferimento dei dati
 - Esegue i programmi
 - **Memoria Centrale** (solitamente, la RAM)
 - Memorizza dati e programmi per l'elaborazione
 - Volatile
 - Accesso rapido
 - Capacità limitata
-

Hardware

- Memoria Secondaria (es. Hard disk, floppy)
 - Grande capacità
 - Persistente
 - Accesso più lento della RAM
 - Unità Periferiche
 - Interfaccia verso l'esterno
 - Terminali (tastiera, video)
 - Stampanti
-

Hardware

Bus di Sistema

- Collega le altre componenti
 - RAM
 - Memorie Secondarie
 - Periferiche
- Insieme di collegamenti di vario tipo

Esempi di Sistemi Informatici: Personal Computer

Contenitore con

- CPU, RAM

- Memoria Centrale

 - Disco Fisso

 - Unità per Dischetti/CD – Penne USB

Monitor

Tastiera, Mouse

Altri Sistemi Informatici

□ *Workstation*

- Calcolatore con elevate prestazioni

□ *Mini-computer*

- Servono reti di terminali con pochi utenti

□ *Main-frame*

- Servono reti di terminali con centinaia di utenti

□ *Calcolatori High Performance*

- Solitamente calcolatori composti da più CPU collegati in parallelo (es: Dual/Quad Core, Cluster, ecc)
-

Altri Sistemi Informatici

□ Reti di Calcolatori

- *Reti Locali*: collegano terminali vicini tra loro; i terminali usufruiscono di servizi quali stampanti di diverso tipo, memorie di massa,...
 - *Reti Geografiche*: collegano dei calcolatori (detti) *host* a medio-grandi distanze; ad esempio possono collegare diverse reti locali tra loro
-

Software

□ *Software di base:*

- Dedicato alla **gestione** dell'elaboratore
- Esempio: **Sistema Operativo (Windows, Linux, MacOS, etc)**

□ *Software applicativo:*

- Dedicato alla realizzazione di specifiche applicazioni (Word, Excel, etc)
 - Esempio: programmi per scrittura, gestione aziendale, navigazione su internet, ecc
-

I problemi tipici dell'informatica



Ricerca di informazioni

- ❑ Trovare il numero di telefono di una persona in un elenco
 - ❑ Individuare il numero più piccolo di una sequenza
 - ❑ Stabilire se una parola precede alfabeticamente un'altra
 - ❑ Cercare un post su Facebook (?)
-



Problemi di elaborazione di informazioni

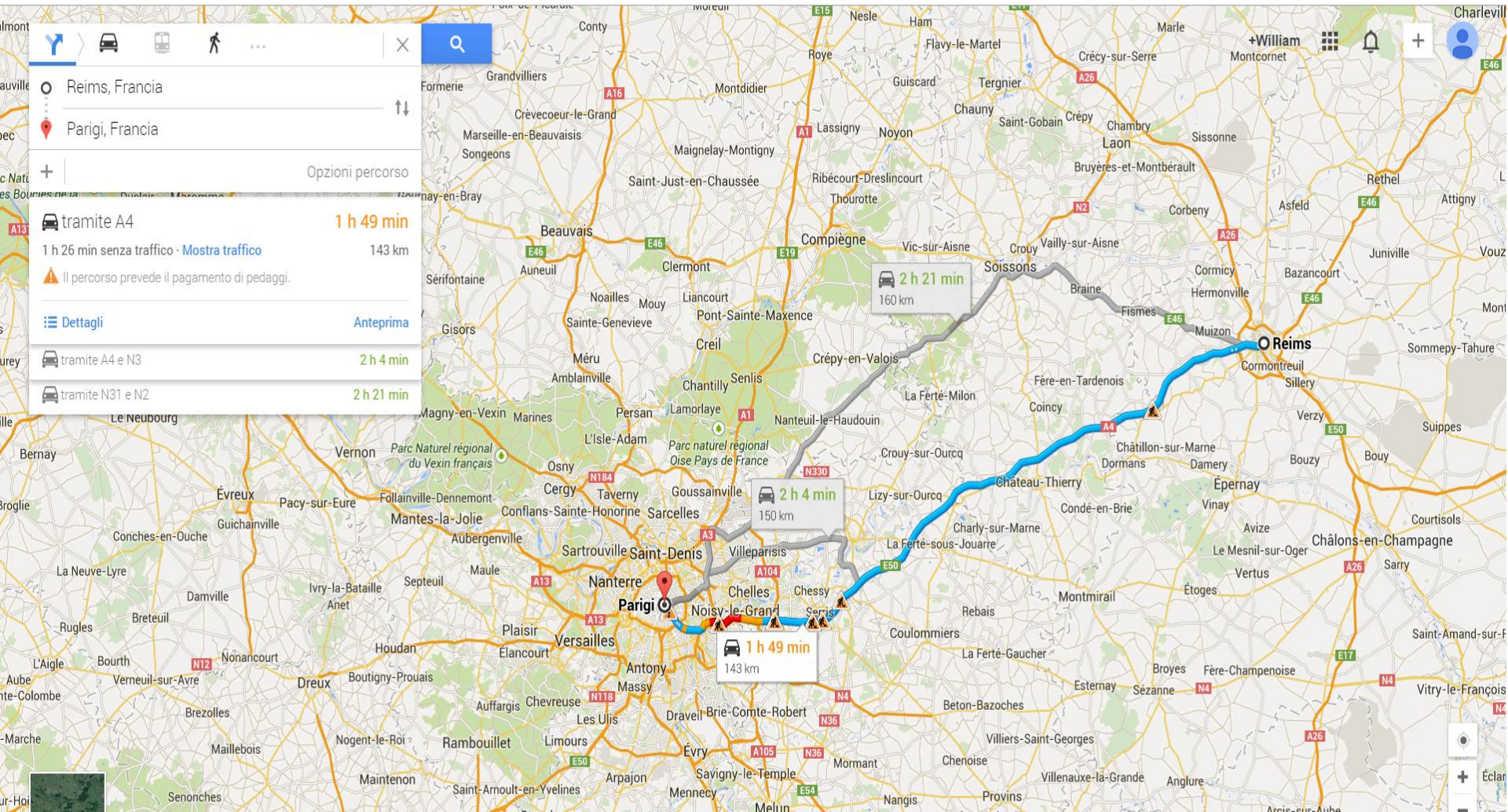
- Calcolare il costo totale di un certo numero di prodotti
- Trovare perimetro e area di una figura geometrica
- ...



Problemi di ottimizzazione

- Trovare tra tutte le soluzioni possibili del problema quella che rende minimo un certo fattore, per esempio scegliere il mezzo di trasporto più economico per andare a Parigi oppure quello con il quale si impiega meno tempo (Es: percorsi google maps)
-





Un calcolatore può fare tutto?

ASSOLUTAMENTE NO!

- Non tutti i problemi sono risolvibili tramite calcolatore!
- **ES 1**: «Calcolare» il ragazzo/a più carino/a del corso di Chimica 😊
- **ES2**: Teorema di Turing (irrisolvibilità del problema della terminazione di un programma)

Non esiste nessuna macchina di Turing che sia in grado di decidere se una macchina di Turing si fermerà.

In altri termini, non esiste nessuna macchina di Turing che, dato l'input (n,m) , produca l'output 1 se la macchina di Turing di indice n e di input m si ferma; produca l'output 0 altrimenti

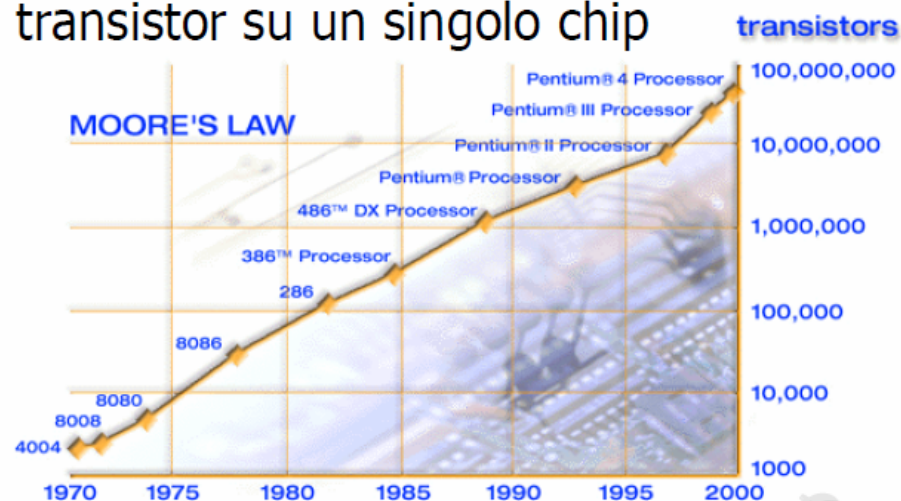
Fraasi celebri ed altro...

- # "Penso che ci sia mercato nel mondo per non più di cinque computer." (Thomas Watson, Presidente di IBM, 1943)
- # "Ho girato avanti e indietro questa nazione (USA) e ho parlato con la gente. Vi assicuro che questa moda dell'elaborazione automatica non vedrà l'anno prossimo." (Editor di libri scientifici di Prentice Hall, 1947)
- # "Nel futuro i computer verranno a pesare non più di una tonnellata e mezzo." (Popular Mechanics, 1949)
- # Nel 1976, il **New York Times** pubblicò un libro dal titolo *La scienza nel ventesimo secolo*, nel quale il calcolatore veniva menzionato una sola volta e indirettamente, in relazione al calcolo delle orbite dei pianeti
- # "Non c'è ragione perché qualcuno possa volere un computer a casa sua." (Ken Olson, fondatore di Digital, 1977)



Presente e futuro

- L'informatica ha rivoluzionato il modo di vivere nella nostra società in soli 50 anni.
- La velocità di evoluzione dei calcolatori è tale da rendere difficile qualsiasi previsione.
- Tra le poche previsioni che non sono state disattese vi è la *legge di Moore* che nel 1965 stimò che il numero di transistor su un singolo chip raddoppiasse ogni 18 mesi.
- Questa stupefacente crescita ha riguardato molti dei dispositivi connessi ai calcolatori:
 - *Dischi rigidi* (10 MB nel 1980 – 60GB oggi \approx 6.000 volte)
 - *Telecomunicazioni* (in 20 anni da 300 bit/sec a 56Kbit/sec \approx 200 volte)



“Se il settore automobilistico si fosse sviluppato quanto quello dell'informatica, oggi una Rolls Royce costerebbe 2,50 euro, farebbe più di un milione di chilometri con un litro e andrebbe da Bologna a Milano in un secondo!”



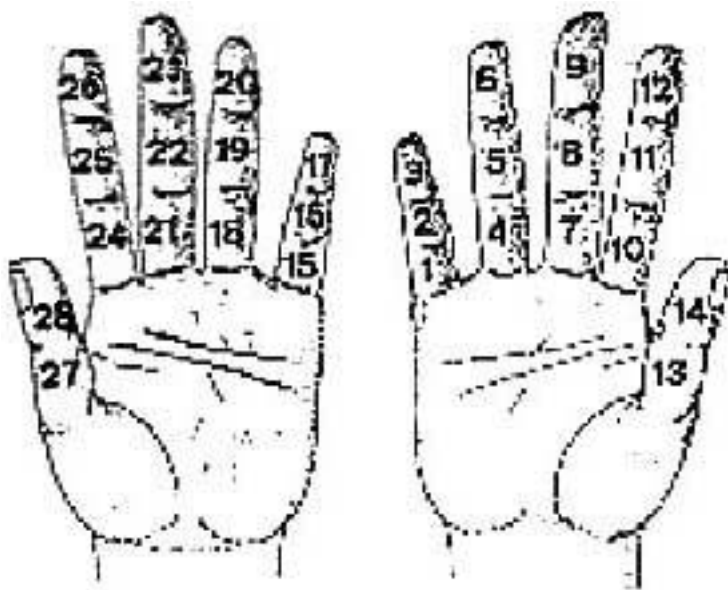
Un po' di Storia...

Le dita, il primo strumento di supporto al calcolo

Le dita sono il più lontano antenato del calcolatore

La funzione più semplice delle dita è quella di rappresentazione di un numero.

Tenendo conto delle falangi delle due mani si può contare da 0 fino a 28



Il sistema di calcolo digitale proposto dal Venerabile Beda

Il Venerabile Beda (672-735), propone un sistema di rappresentazione che fa corrispondere le posizioni delle dita e i gesti per ottenere numeri da uno a un milione

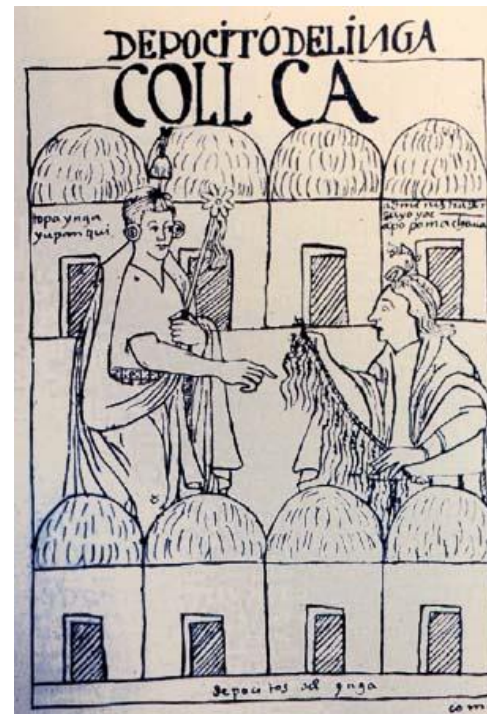
I diversi numeri sono rappresentati attraverso regole precise. Ad esempio per le unità venivano usati soltanto il mignolo, l'anulare e il medio della mano sinistra



Altri supporti al calcolo

Le popolazioni andine (dal 600 al 1000) utilizzano per fare memorizzare numeri i *quipu*

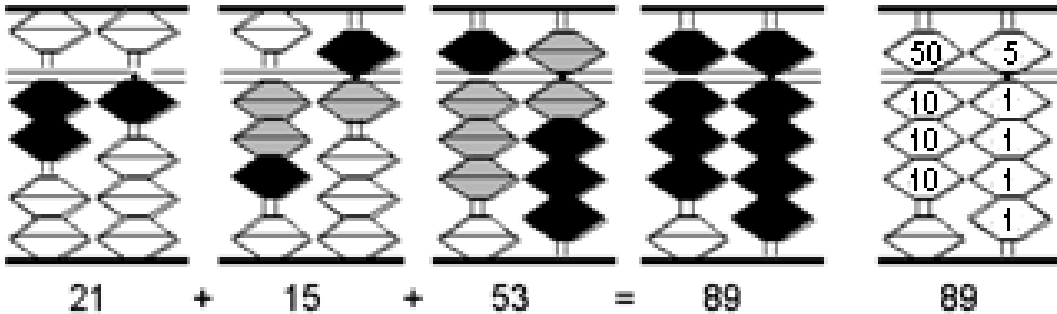
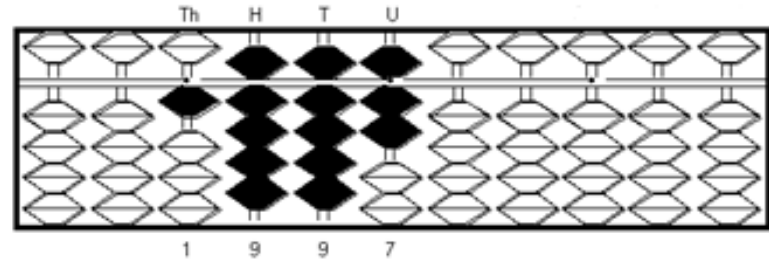
Un sistema di corde e nodi in posizione differente consentono di rappresentare i numeri



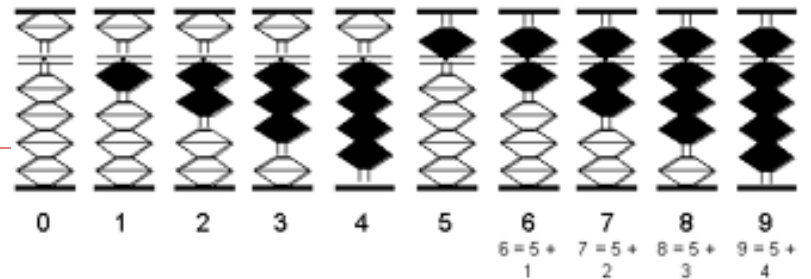
Altri supporti al calcolo

ABACO (Soroban) usato da oltre 450 anni in Giappone arrivato dalla Cina

Costruisco numero in base alla posizione dei "gettoni"



posso fare delle somme



Nasce il calcolo automatico

**Fin qui strumenti di supporto alla memorizzazione:
l'esecuzione dei calcoli è affidata integralmente agli utenti**

Nasce il calcolo automatico

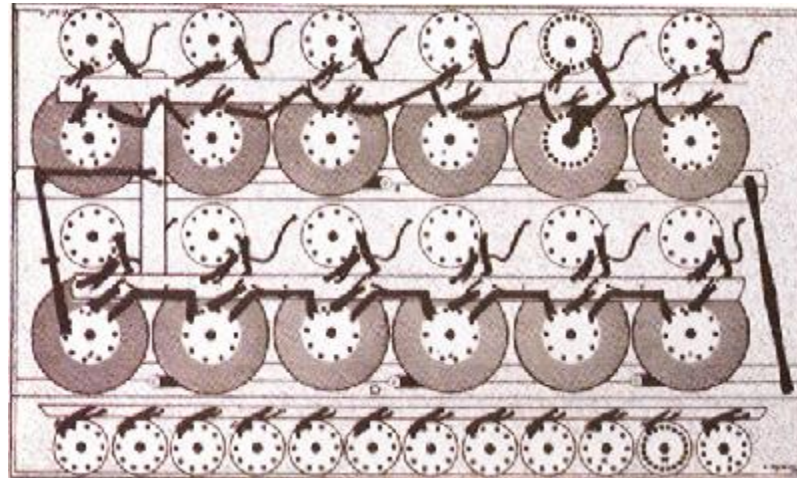
“Non è ammissibile che studiosi e scienziati, anzichè elaborare e confrontare nuove teorie, **perdano le proprie ore come schiavi nelle fatiche del calcolo**, che potrebbe essere affidato a chiunque se si potessero usare delle macchine...”

G.W. Leibniz (1646-1716)

La Pascalina

Nel 1642, a 19 anni, Blaise Pascal inventa una macchina che dimostra come i calcoli possano essere compiuti in modo puramente meccanico

Per la prima volta una
macchina esegue
automaticamente il riporto
nelle addizioni



La Macchina di Leibniz

Nel 1671, G.W. Leibniz progetta una macchina calcolatrice che utilizza pignoni dentati di varia lunghezza e una versione perfezionata del meccanismo di riporto automatico ideato da Pascal

vengono eseguite
automaticamente
moltiplicazioni e divisioni
sotto forma di addizioni e
sottrazioni ripetute



Tutti i dispositivi visti finora non contengono dei congegni automatici veri e propri se non per effettuare riporti

All'utente era richiesta la capacità di indicare correttamente gli operandi e di scomporre le operazioni più complesse in operazioni elementari che venivano eseguite passo passo con l'ausilio del dispositivo

Manca ancora un sistema di comando che consenta alla macchina di passare da un'operazione all'altra senza l'intervento dell'uomo...

Deve essere realizzato un dispositivo in grado di memorizzare sia un insieme di dati sia la successione di operazioni da compiere (**programma**) sui dati per ottenere un certo risultato

Nasce la scheda perforata

Nel 1804, Joseph-Marie Jacquard perfeziona l'idea del meccanico Falcon che un secolo prima aveva scoperto un nuovo sistema per rendere automatiche alcune fasi del lavoro di tessitura



Il telaio è guidato automaticamente nei suoi movimenti da una serie di fori, praticati su schede, che corrispondono al programma di tessitura



La macchina analitica di Babbage

Nel 1822, Charles Babbage, realizza una macchina differenziale che è in grado di calcolare e stampare automaticamente le tavole nautiche ed astronomiche necessarie alla navigazione marittima

La macchina esegue i calcoli in base al metodo delle differenze evitando il calcolo delle moltiplicazioni



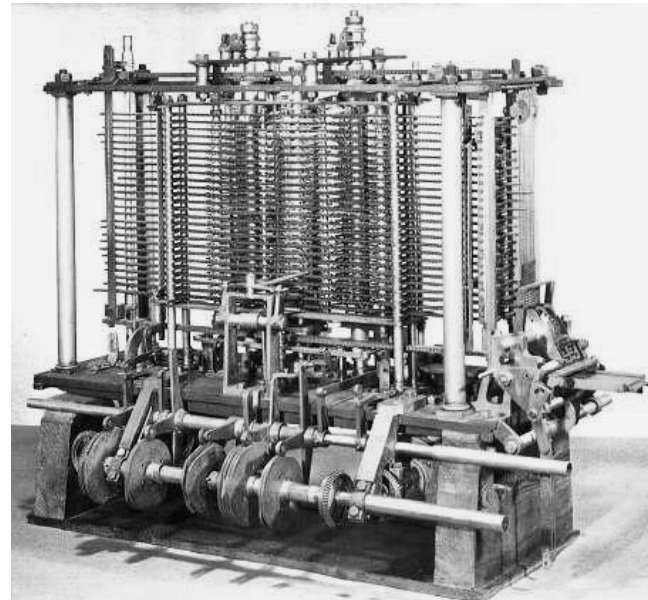
La macchina analitica di Babbage (2)

Nel 1833, Charles Babbage, progetta una macchina analitica di tipo universale, ma non riesce a tradurla in pratica a causa dei limiti della tecnica dell'epoca

La macchina contiene una store (memoria) e un mill (unità di calcolo) che contiene il programma espresso in schede perforate

“La macchina analitica di Babbage tesse forme algebriche, così come il telaio di Jacquard tesse fiori e foglie”

(Augusta Ada Byron, Contessa di Lovelace)



Anni '40:

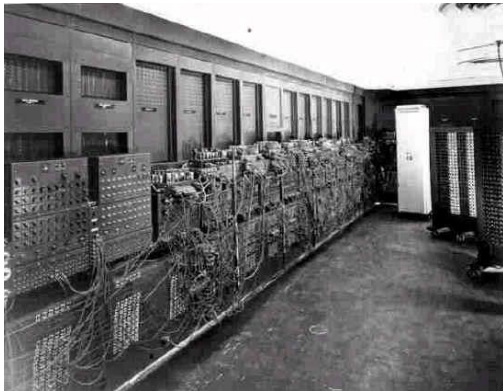
**Un balzo in avanti nella costruzione degli odierni
calcolatori:**

verso la costruzione di un dispositivo “**general purpose**”

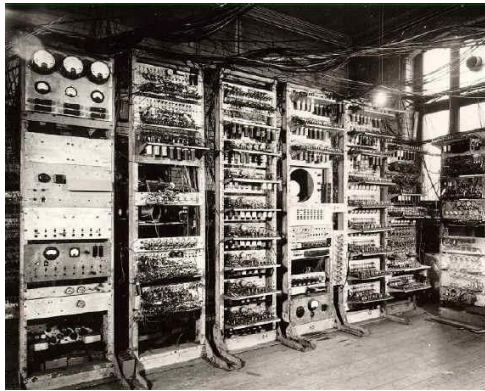
Un balzo in avanti

- 1938 - Konrad Zuse
 - fu il *primo ad usare i relay* per costruire una serie di dispositivi di calcolo automatico, distrutti nel 1944 con i bombardamenti degli alleati

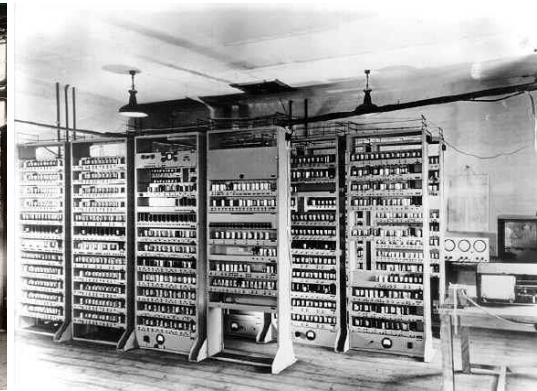
 - 1939 - John Vincent Atanasoff
 - il suo dispositivo era basato sull'aritmetica binaria e per la memoria usava condensatori che venivano periodicamente rinfrescati per mantenerne la carica
 - le attuali memorie RAM funzionano alla stessa maniera. La sua macchina non fu mai completata e, come Babbage, era un lungimirante: la tecnologia del tempo era inadeguata
-



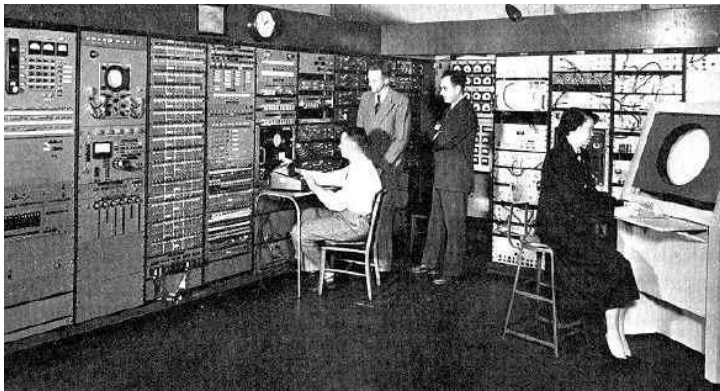
ENIAC (1946)



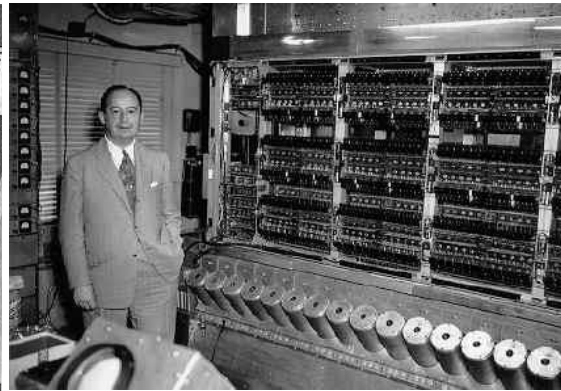
Mark I (1948)



EDSAC (1949)



**Whirlwind
(1949)**



IAS (1952)



UNIVAC (1952)

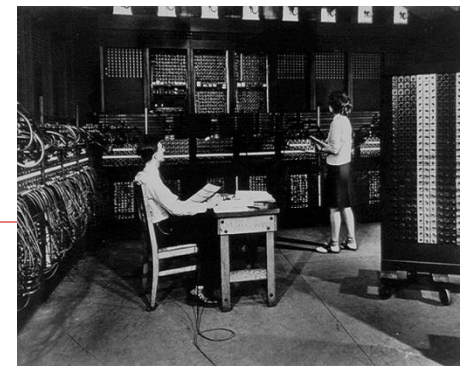
Un balzo in avanti

- 1944 - Howard Aiken
 - costruì la *prima macchina general purpose* americana. Conosciuta come "*IBM automatic sequence controlled calculator (ASCC)*" è più nota come *Mark I*
 - la macchina era costituita da 750.000 componenti, era lunga 15 metri, alta 2,5 e pesava approssimativamente 5 tonnellate



Un balzo in avanti

- Durante la II Guerra Mondiale - Alan Turing
 - Turing, affermato matematico inglese, aiutò il suo governo nella realizzazione del primo computer elettronico: *COLOSSUS*
 - non ebbe un grosso impatto, poiché il lavoro fu classificato come top secret per ben 30 anni
- 1946 - John Mauchley e Presper Eckert
 - fu l'*ENIAC* (*Electronic Numerical Integrator And Computer*) ad essere riconosciuto come il primo calcolatore elettronico general-purpose
 - consisteva di 18.000 valvole e 1.500 relay. Era alto 3 metri per un peso complessivo di 30 tonnellate



La prima generazione di calcolatori moderni

Nel 1945 **John Von Neumann** progetta il primo prototipo dei moderni calcolatori elettronici, l'EDVAC (Electronic Discrete Variable Automatic Computer).

Il calcolatore venne concretamente realizzato e messo in funzione nel 1952

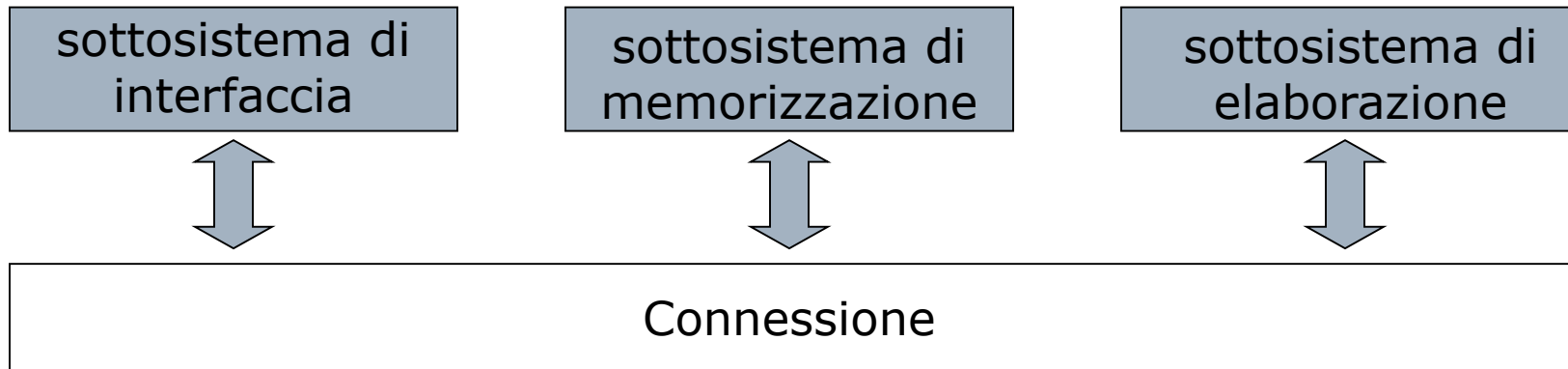
Architettura di Von Neumann

Programma Memorizzato

Dati e Programmi che operano sui dati vengono codificati in uno stesso formato: lo stesso dispositivo può essere impiegato per memorizzare entrambi

Nasce il calcolatore "general purpose"

Architettura di Von Neumann



E' la stessa architettura presente in tutti i calcolatori presenti!

La macchina universale

- ✚ **Programma:** sequenza di operazioni atte a predisporre l'elaboratore alla soluzione di una determinata classe di problemi
 - Il programma è la descrizione di un **algoritmo** in una forma comprensibile all'elaboratore
 - ✚ **Algoritmo:** sequenza finita di istruzioni attraverso le quali un operatore umano è capace di risolvere ogni problema di una data classe; non è direttamente eseguibile dall'elaboratore
 - ✚ L'elaboratore è una **macchina universale:** cambiando il programma residente in memoria, è in grado di risolvere problemi di natura diversa (una classe di problemi per ogni programma)
-

In conclusione

- ✦ *L'informatica è lo studio sistematico degli algoritmi che descrivono e trasformano l'informazione: la loro teoria, analisi, progetto, efficienza, realizzazione (ACM — Association for Computing Machinery)*
 - ✦ **Nota:** È possibile svolgere un'attività concettualmente di tipo informatico senza l'ausilio del calcolatore, per esempio nel progettare ed applicare regole precise per svolgere operazioni aritmetiche con carta e penna; l'elaboratore, tuttavia, è uno strumento di calcolo potente, che permette la gestione di quantità di informazioni altrimenti intrattabili
-