

Scienza. Intelligenza Artificiale. Arte.

Riccardo Torre
&
Andrea Coccaro
INFN - Sezione di Genova



22 Aprile 2025
Art&Science 2025
DIFI - Università di Genova



Su di noi

Riccardo Torre



Andrea Cocco

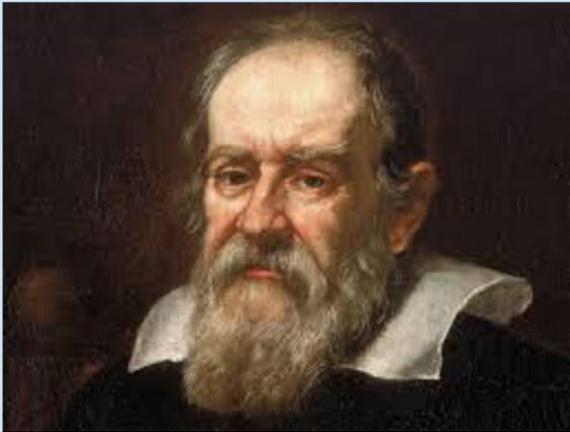


Di che cosa parleremo

- **Il metodo scientifico**
- **Le sfide della scienza moderna**
- **L'intelligenza artificiale**
- **L'IA al servizio della scienza**
- **Dalla biologia alla fisica delle particelle**

Il Metodo Scientifico

Sensate esperienze...



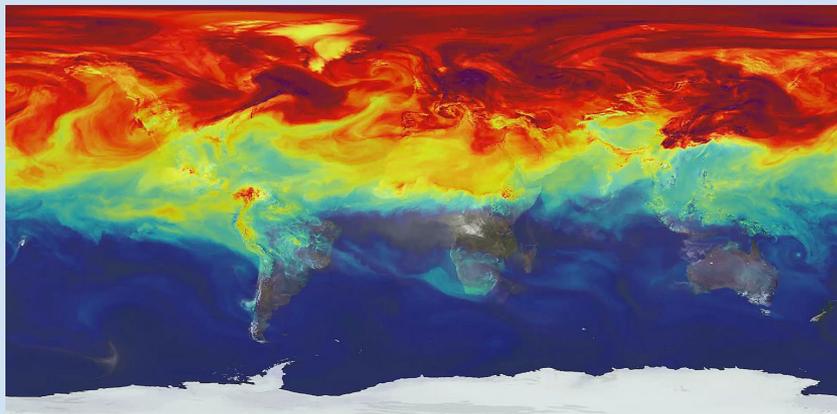
... e necessarie dimostrazioni

- Formulare un'ipotesi
 - Dedurre conseguenze osservabili
 - Predisporre un esperimento (scienza sperimentale) o un'osservazione (scienza osservativa)
 - Raccogliere dati
 - ~~Verificare l'ipotesi (Galileo)~~
 - Verificare se l'ipotesi è falsa (Popper)
-

Le "necessarie dimostrazioni"

- Modellizzazione matematica e analisi statistica
- "Dedurre conseguenze osservabili" vuol dire simulare l'esperimento prima di realizzarlo
- Per "verificare/falsificare l'ipotesi" occorre analizzare grandi quantità di dati e, sovente, estrarre il segnale da un grande rumore

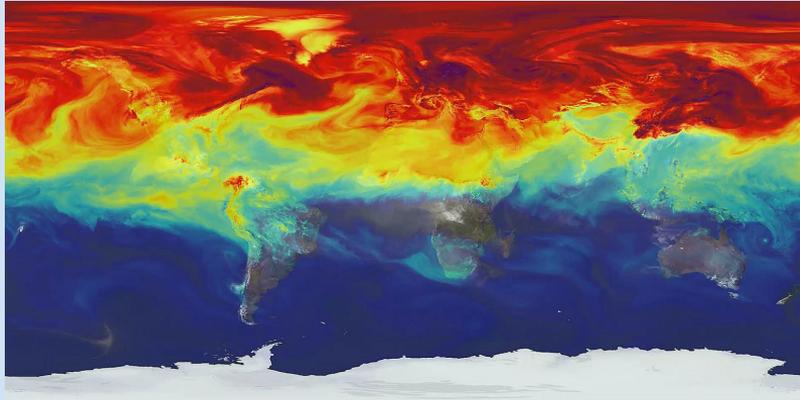
Le sfide della scienza moderna



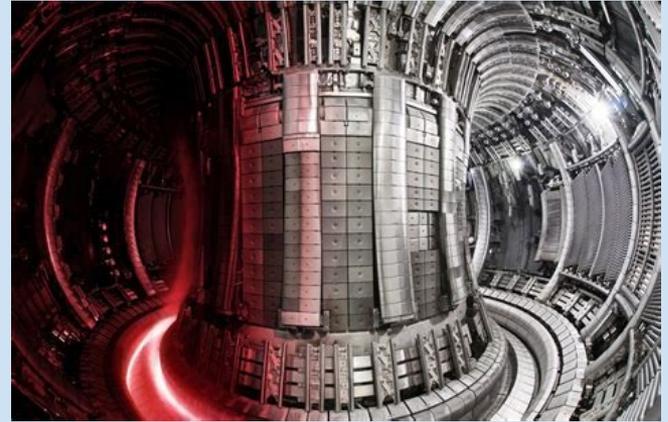
- *Big data*: quantità enormi di dati
 - Simulazioni sempre più accurate di sistemi sempre più complessi
 - Tecniche sperimentali sempre più innovative
 - Estrazione di segnali molto piccoli da un rumore molto grande
 - Analisi statistica sufficientemente accurata (e stima accurata delle incertezze!)
-

Esempi di sfide della scienza moderna

Modelli climatici

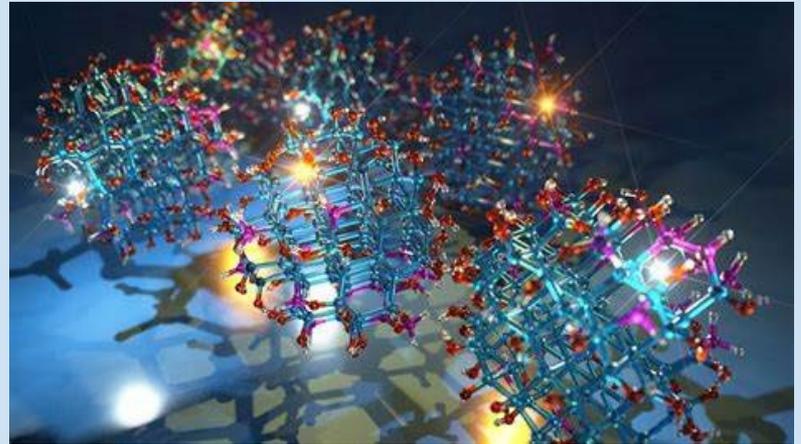
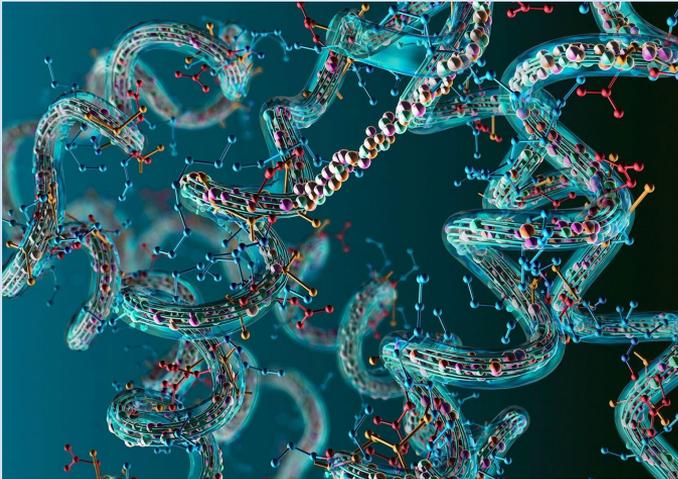


Fusione nucleare



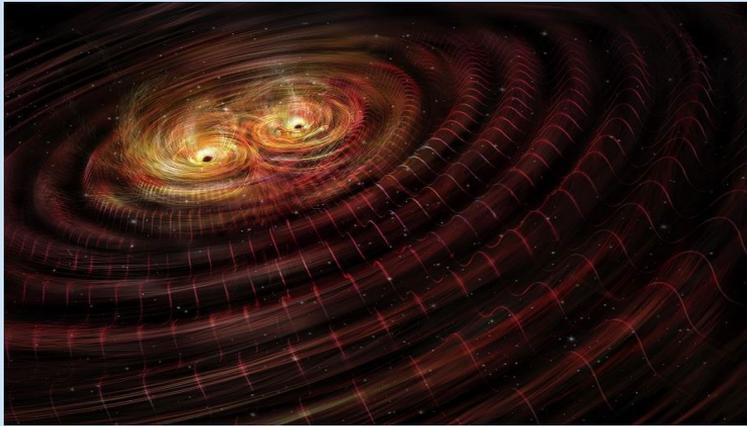
Esempi di sfide della scienza moderna

Biologia, genetica, medicina, Chimica e scienza dei materiali
scienze della vita

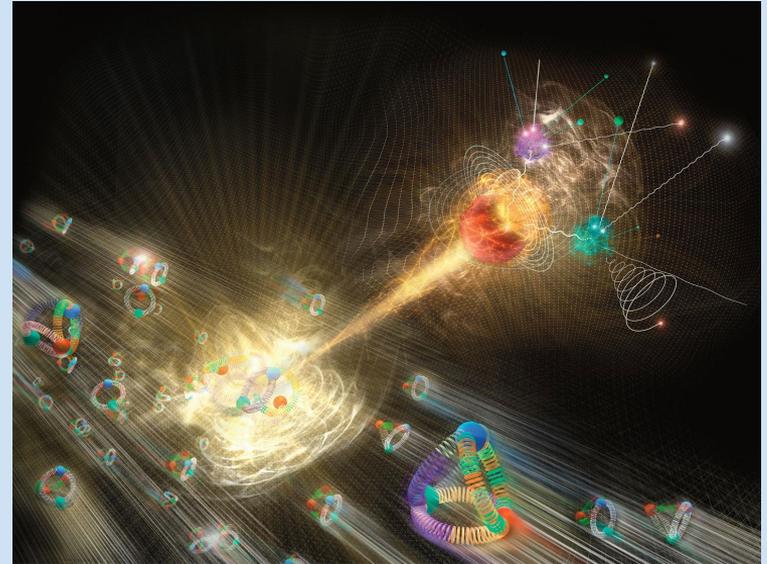


Esempi di sfide della scienza moderna

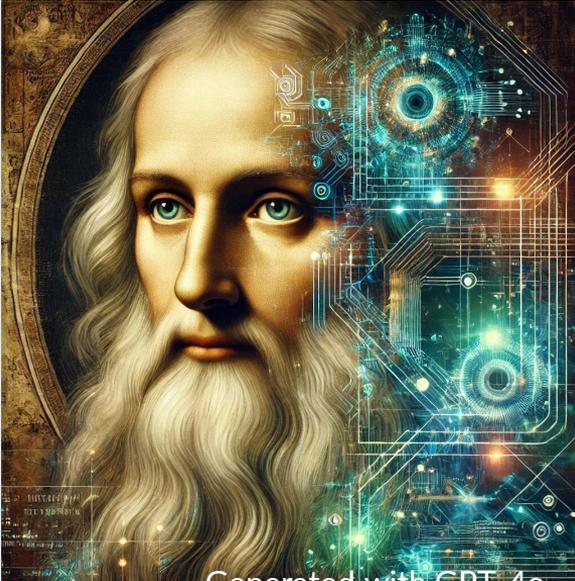
Astrofisica, cosmologia, buchi neri, onde gravitazionali



Fisica fondamentale e fisica delle particelle



L'Intelligenza Artificiale



Generated with GPT-4o

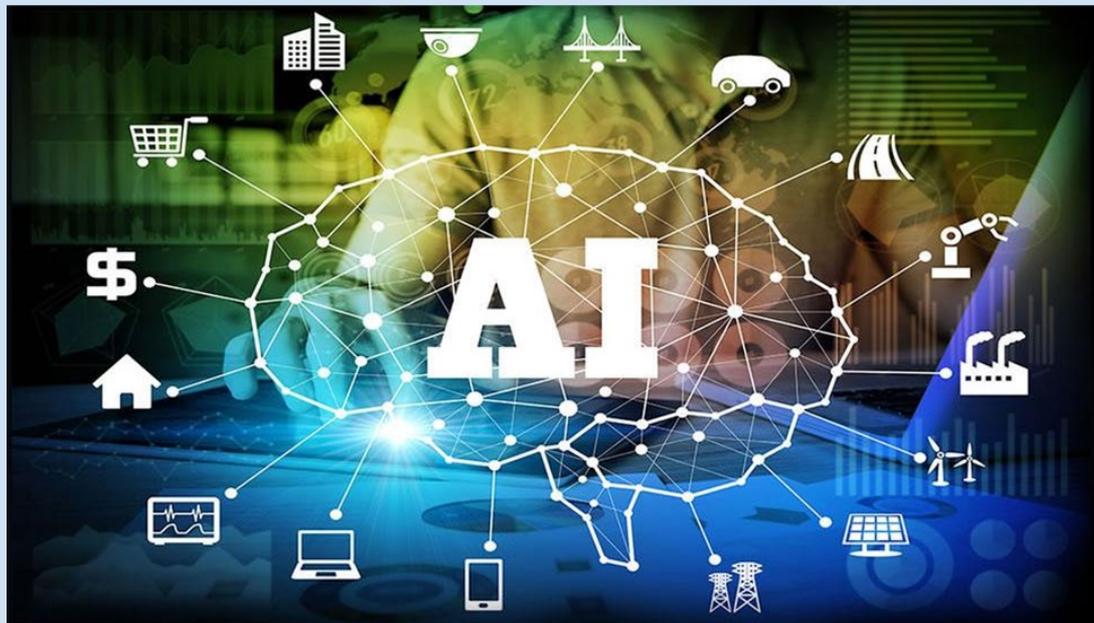
- Genericamente: capacità di replicare abilità umane (tutte o alcune)
 - Capacità di "apprendere"
 - Capacità di "ragionare"
 - Capacità di "pianificare"
 - Capacità di "reagire"
 - ...
 - Capacità di "svolgere compiti complessi"
-

La rivoluzione dell'IA

La recente esplosione dell'IA è legata a tre principali fattori

- Big data: immense quantità di dati, spesso raccolti a spese di esplicite violazioni di privacy, copyright, etc.
- Hardware sempre più potente e specializzato: schede grafiche e non solo (NVDA +2K% negli ultimi 5 anni!)
- Software accessibile a tutti (o quasi): software sviluppato dalle "big-tech" e distribuito con licenze "open source"

Una rivoluzione su ogni fronte



Ma "il pranzo non è gratuito"!

- *No-free-lunch Theorem*: nessun algoritmo è perfetto per tutti i problemi
- Più l'IA è generale, meno accuratamente può svolgere compiti specifici (un concetto vagamente Socratico!)
- Ma la scienza è specializzata per definizione!

IA Generale



IA Scientifica

L'IA al servizio della scienza



- IA scientifica: allenata su dati di dominio e per compiti specifici
 - Simulare (IA generativa)
 - Analizzare (IA di inferenza)
 - Estrarre il segnale (IA di classificazione)
 - IA generale come assistente del ricercatore (ChatGPT)
-

I vantaggi e le sfide

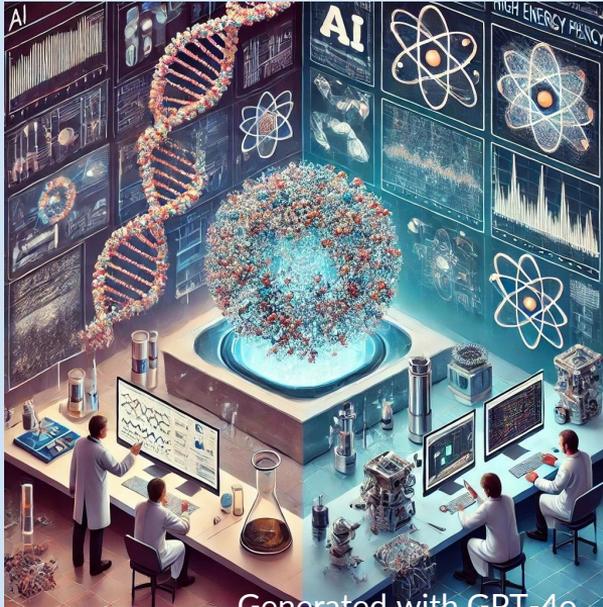
Punti di forza del campo scientifico

- Migliore qualità dei dati
- Conoscenza, almeno approssimata, di un modello per i dati (le "necessarie dimostrazioni")

Difficoltà

- IA sviluppata soprattutto da privati per privati con scopi molto diversi da quello scientifico
- Precisione spesso non al livello necessario per la scienza

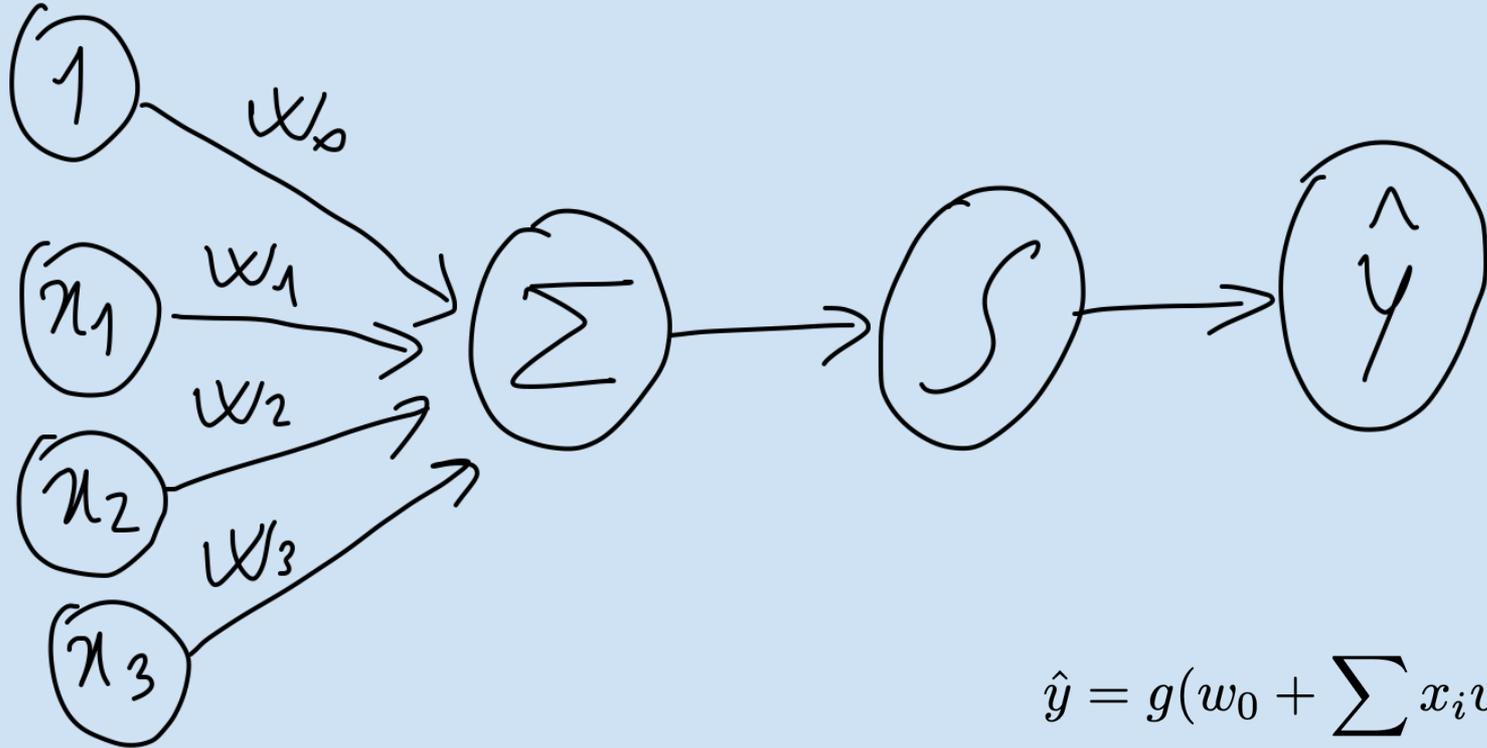
Come impara l'IA



Generated with GPT-4o

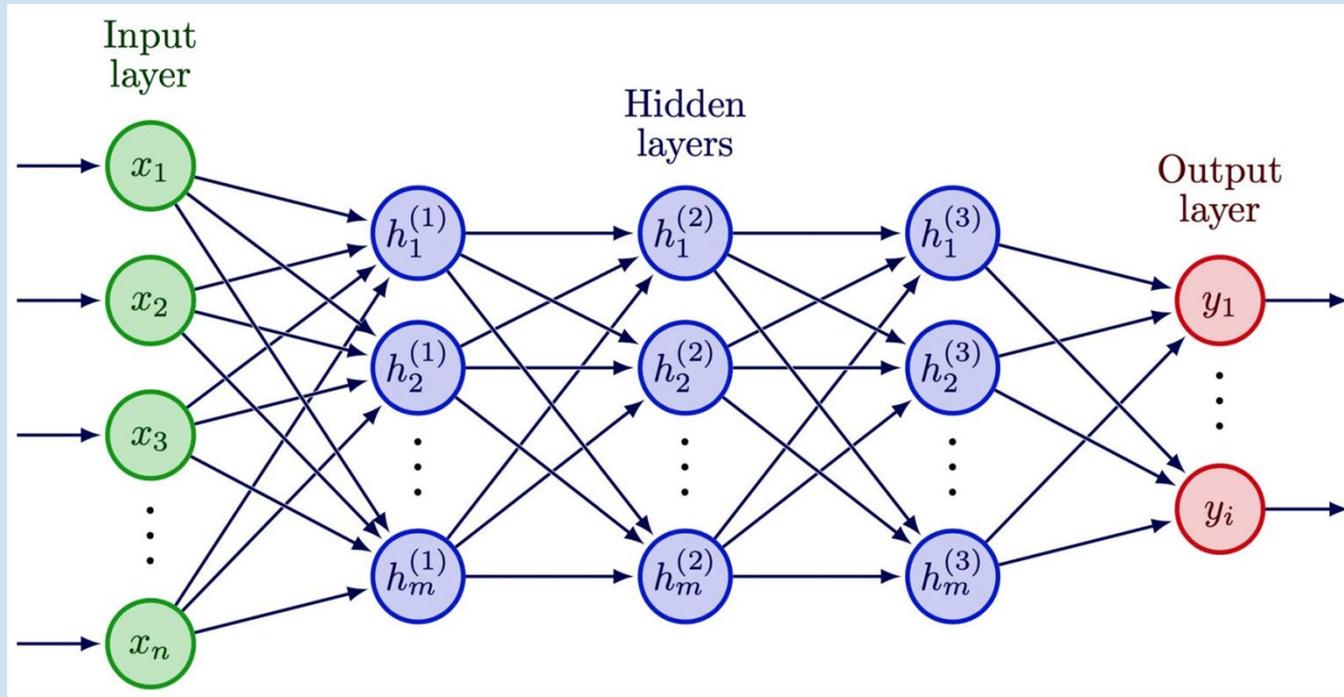
- Il perceptrone
 - Le reti neurali
 - La funzione di perdita e il processo di apprendimento
-

Il perceptrone

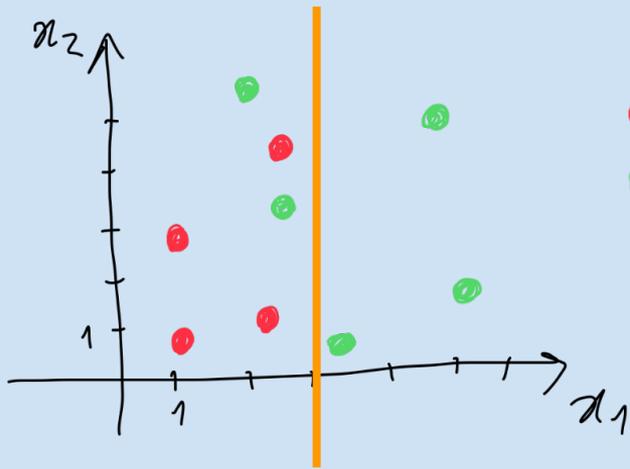


$$\hat{y} = g(w_0 + \sum_i x_i w_i)$$

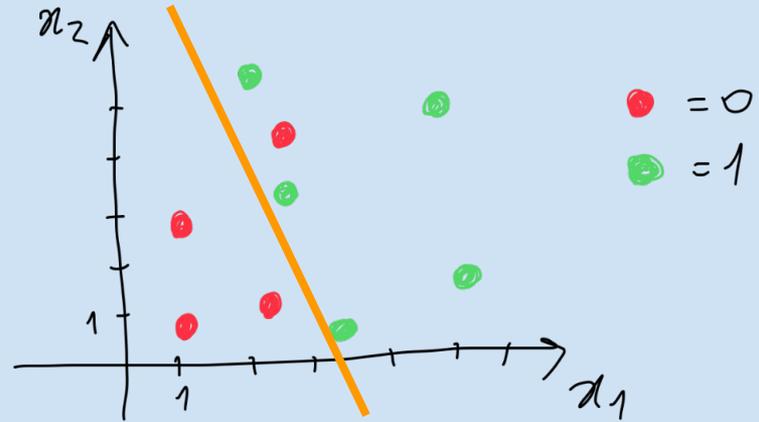
Le reti neurali



Esempio di rete neurale

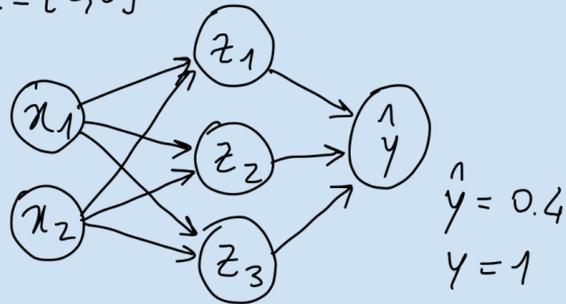


● = 0
● = 1



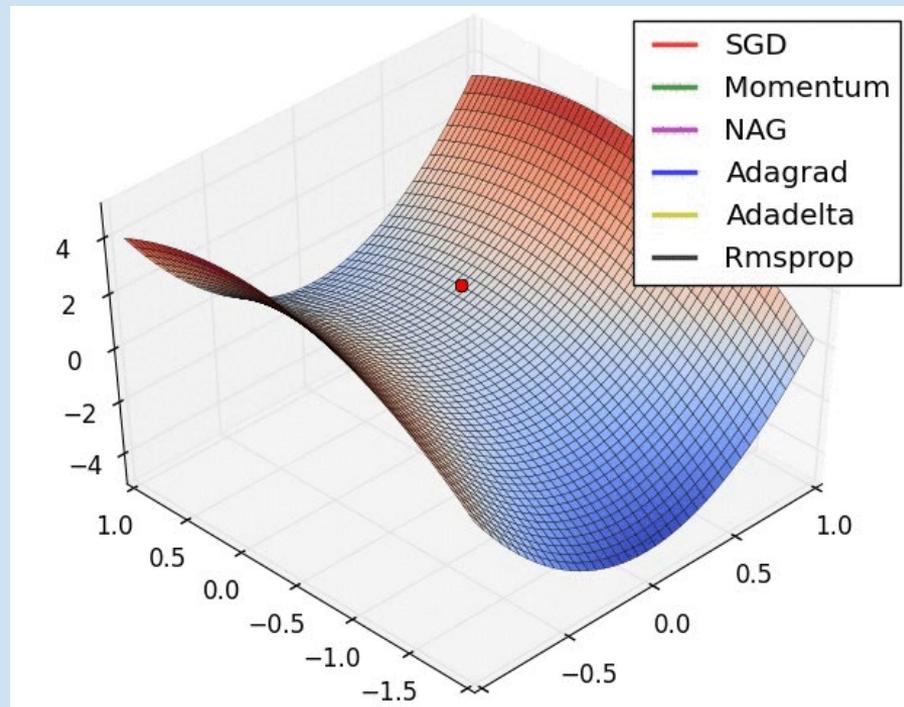
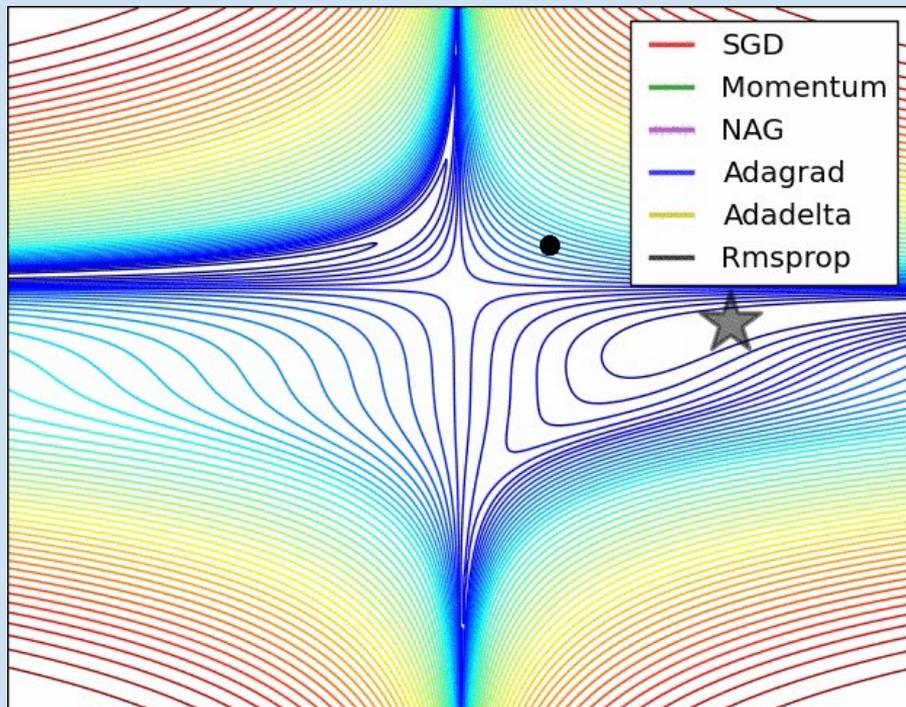
● = 0
● = 1

$$x = [2, 3]$$

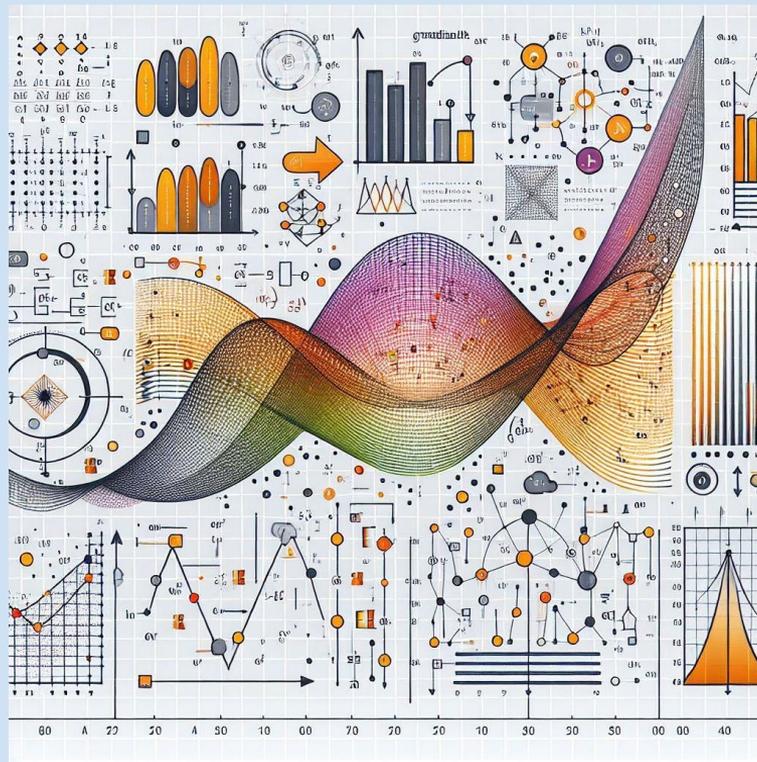


$$\hat{y} = 0.4$$
$$y = 1$$

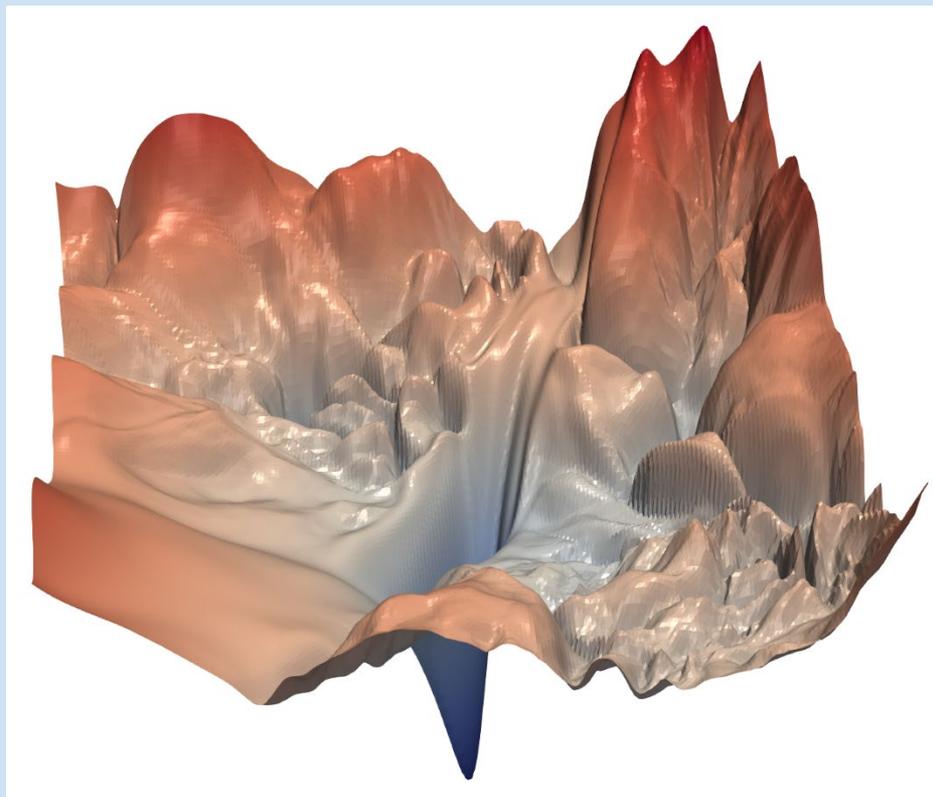
Funzione di perdita



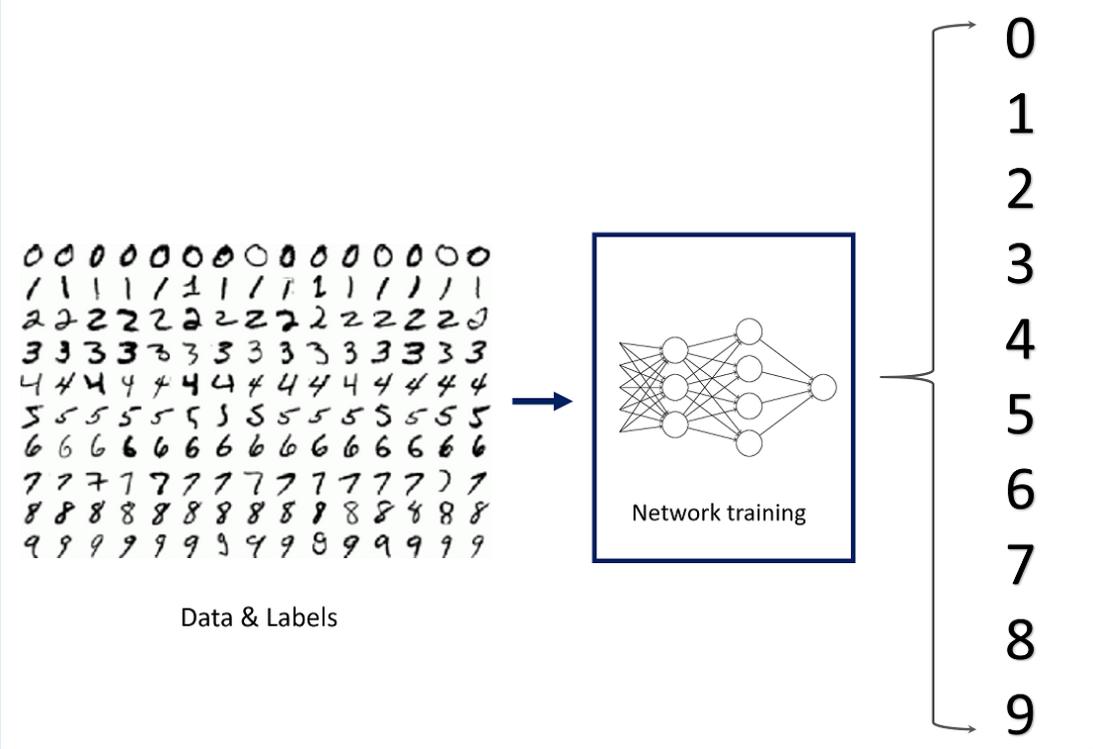
Una funzione di perdita complicata (e falsa!)



Una funzione di perdita complicata (e vera!)

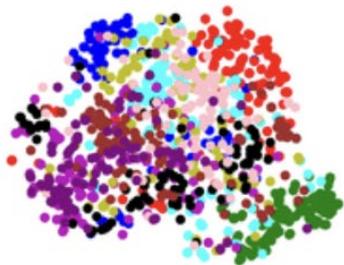


Esempio

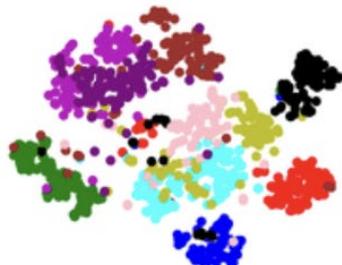


Esempio

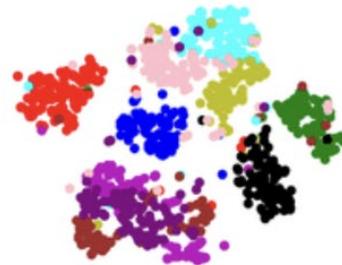
Epoch 0, accuracy: 0.171



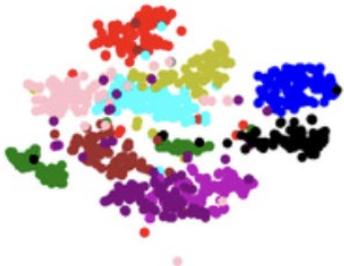
Epoch 20, accuracy: 0.752



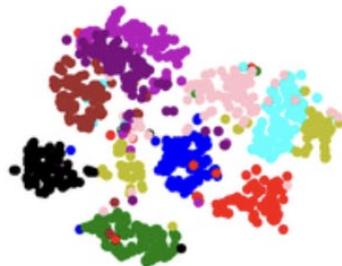
Epoch 40, accuracy: 0.817



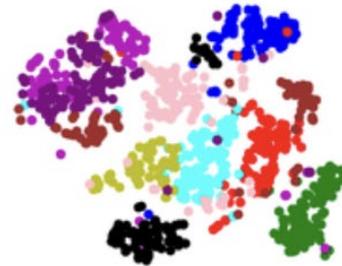
Epoch 60, accuracy: 0.833



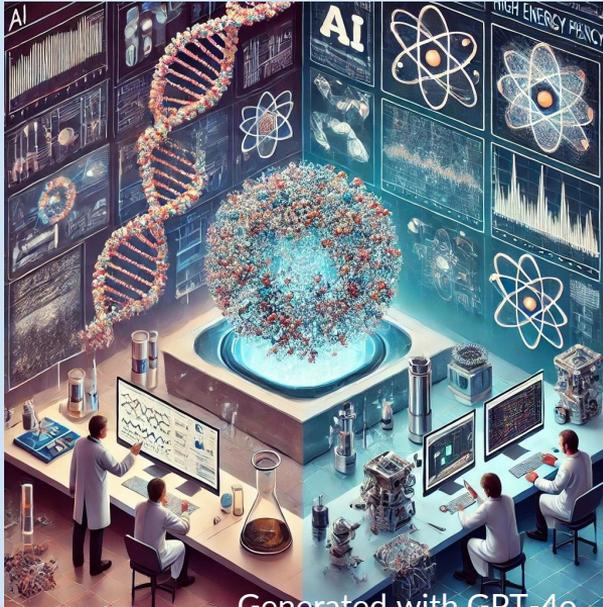
Epoch 80, accuracy: 0.851



Epoch 100, accuracy: 0.856



Due esempi concreti



Generated with GPT-4o

- Biologia molecolare
 - Fisica delle particelle ad alta energia
-

Biologia molecolare



- Analisi delle sequenze di DNA per identificare geni e mutazioni
- Predizione delle strutture proteiche a partire dalla sequenza di aminoacidi
- Supporto nello sviluppo di nuovi farmaci e nella previsione della loro efficacia

AlphaFold



AlphaFold Protein Structure Database

[Home](#) [About](#) [FAQs](#) [Downloads](#) [API](#)

AlphaFold Protein Structure Database

Developed by Google DeepMind and EMBL-EBI

Search for protein, gene, UniProt accession or organism or sequence search

BETA

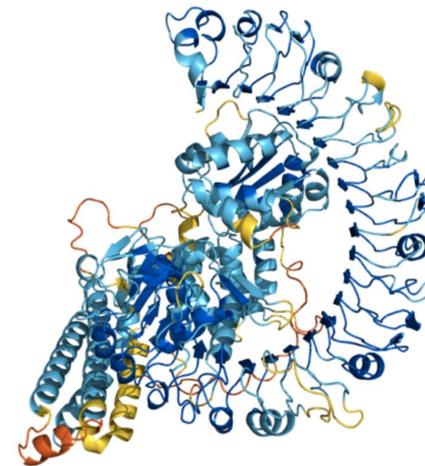
Search

Examples: [MENFQKVEKIGEGTYGV...](#) [Free fatty acid receptor 2](#) [At1g58602](#) [Q5VSL9](#) [E. coli](#)

[See search help](#)

[Go to online course](#)

AlphaFold DB provides open access to over 200 million protein structure predictions to accelerate scientific research.



Q8W3K0: A potential plant disease resistance protein. Mean pLDDT 82.24.

AlphaFold

AlphaFold Protein Structure Database

Protein Structure

Developed by

Search for protein, gene, UniProt accession

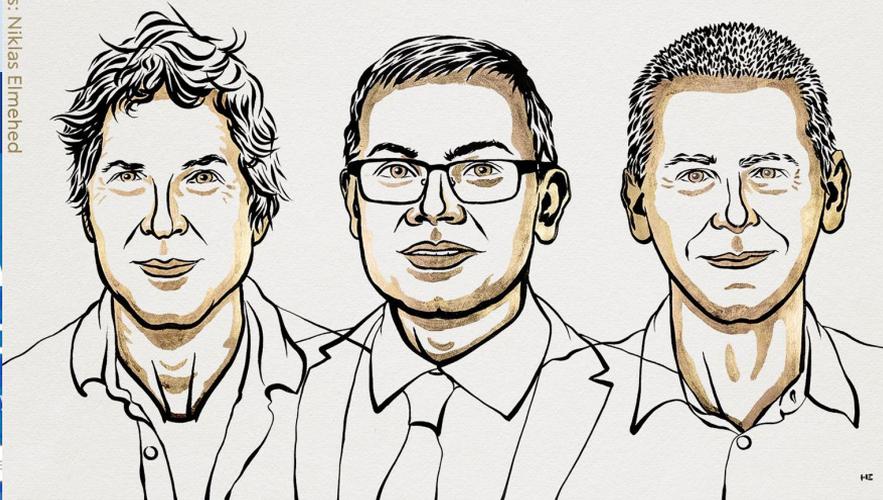
Examples:

[See search help](#) [Go to online course](#)

AlphaFold DB provides protein structure predictions for

Illustrations: Niklas Elmehed

THE NOBEL PRIZE IN CHEMISTRY 2024



David
Baker

“for computational
protein design”

Demis
Hassabis

“for protein structure prediction”

John M.
Jumper

THE ROYAL SWEDISH ACADEMY OF SCIENCES



...al plant disease resistance protein. Mean pLDDT 82.24.

research.

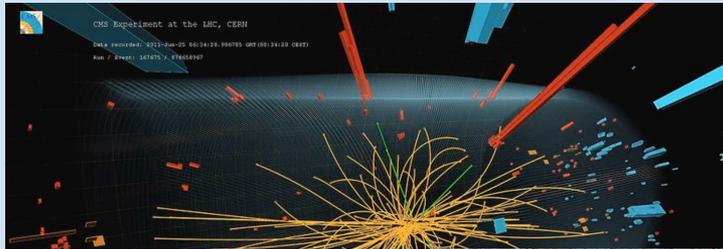
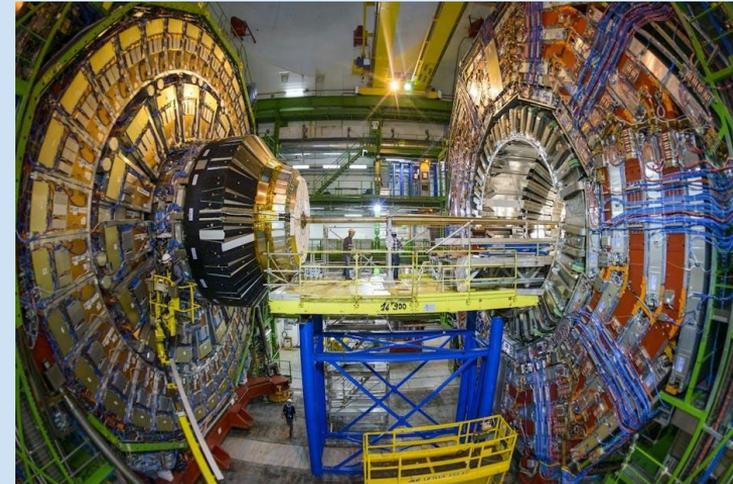
Fisica delle particelle ad alta energia



- Formulazione di teorie
- Produzione di simulazioni delle collisioni tra particelle
- Realizzazione di esperimenti e ricostruzione delle particelle
- Rilevamento di anomalie nei dati riconducibili a segnali di fisica sconosciuta
- Verifica della compatibilità dati/teorie per grandi molteplicità di teorie

Fisica delle particelle ad alta energia

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



Take-home message

*IA scientifica più specifica dell'IA
generale*

Vantaggi

- L'IA può contribuire ad ogni step del metodo scientifico

Sfide

- Traduzione degli algoritmi dall'IA "general-purpose" alle applicazioni scientifiche
 - Miglioramento della precisione dell'IA verso i livelli necessari nel mondo scientifico
-

Grazie per l'attenzione!

