



COMPLESSITÀ E RIDUZIONE

a cura di

Vincenzo Fano
Enrico Giannetto
Giulia Giannini
Pierluigi Graziani



Isonomia *Epistemologica*

Isonomia – Epistemologica

Volume 2

COMPLESSITÀ E RIDUZIONISMO

Volume 1
Il Realismo Scientifico di Evandro Agazzi
Mario Alai, ed.

Volume 2
Complessità e Riduzionismo
Vincenzo Fano, Enrico Giannetto, Giulia Giannini, Pierluigi Graziani, eds.

ISONOMIA - Epistemologica Series Editor
Gino Tarozzi

gino.tarozzi@uniurb.it

COMPLESSITÀ E RIDUZIONE

a cura di

Vincenzo Fano
Enrico Giannetto
Giulia Giannini
Pierluigi Graziani

© ISONOMIA – Epistemologica
All rights reserved.

ISSN 2037-4348

Scientific Director: Gino Tarozzi
Managing Director: Pierluigi Graziani
Department of Foundation of Sciences
P.za della Repubblica, 13 – 61029 Urbino (PU)

<http://isonomia.uniurb.it/>

Design by massimosangoi@gmail.com

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system or transmitted in any form, or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise without prior permission, in writing, from the publisher.

Sommario

VINCENZO FANO, ENRICO GIANNETTO, GIULIA GIANNINI, PIERLUIGI GRAZIANI <i>Riflettendo su complessità e riduzionismo</i>	1
GIAN-ITALO BISCHI <i>Modelli dinamici per le scienze sociali</i>	7
LUCIANO BOI <i>Remarks on the geometry of complex systems and self-organization</i>	21
CLAUDIO CALOSI, VINCENZO FANO <i>Coscienza e fisicalismo minimale</i>	37
SALVO D'AGOSTINO <i>Newton, Ampère, Maxwell, Einstein: sulla deduzione dei fenomeni</i>	47
PIERLUIGI GRAZIANI <i>Elementare ma complessa: la prospettiva della complessità computazionale attraverso il caso studio della geometria di Tarski</i>	59
ARCANGELO ROSSI <i>Dai modelli riduzionistici della realtà fisica nella scienza classica alla complessità nella scienza contemporanea</i>	75
ROBERTO SERRA <i>Complex Systems Biology</i>	93
GIORGIO TURCHETTI <i>Dai modelli fisici ai sistemi complessi</i>	101
SERGIO CHIBBARO, LAMBERTO RONDONI, ANGELO VULPIANI <i>Considerazioni sui fondamenti della meccanica statistica</i>	123

Riflettendo su complessità e riduzionismo

Vincenzo Fano
Università degli Studi di Urbino Carlo Bo
vincenzo.fano@uniurb.it

Enrico Giannetto
Università degli Studi di Bergamo
egiannet@unibg.it

Giulia Giannini
Centre Alexandre Koyré, Paris
giulia.giannini@gmail.com

Pierluigi Graziani
Università degli Studi di Urbino Carlo Bo
pierluigi.graziani@uniurb.it

Il volume raccoglie gli atti della XIII Scuola Estiva di Filosofia della Fisica, tenutasi a Cesena dal 13 al 18 settembre 2010. A partire dal 1998, il Centro Interuniversitario di ricerca in Filosofia e Fondamenti della Fisica (Urbino, Bologna, Salento e Insubria) organizza annualmente una scuola estiva in collaborazione con la Società Italiana di Logica e Filosofia delle Scienze (SILFS) e il Comune di Cesena. La scuola, diventata ormai punto di riferimento annuale per studenti, insegnanti e studiosi di varie discipline, affronta ogni anno un tema differente invitando i maggiori esperti italiani sull'argomento. Dedicata a "Complessità e Riduzionismo", l'edizione del 2010 si è avvalsa anche della collaborazione della Scuola di Dottorato in Antropologia ed Epistemologia della Complessità dell'Università degli

© 2012 Vincenzo Fano, Enrico Giannetto, Giulia Giannini, Pierluigi Graziani
"Riflettendo su complessità e riduzionismo", in *Complessità e riduzionismo*, pp. 1-5
Published by Isonomia, Rivista online di Filosofia – Epistemologica – ISSN 2037-4348
Università degli Studi di Urbino Carlo Bo
<http://isonomia.uniurb.it/epistemologica>

Studi di Bergamo che, dal 2002, promuove in Italia e nel mondo la formazione e il perfezionamento di ricercatori esperti nella complessità storica, filosofica e antropologica delle scienze naturali e umane.

Come mostrano i contributi qui raccolti, durante i lavori della scuola, complessità e riduzionismo sono stati affrontati dai relatori a partire da prospettive diverse e sotto differenti punti di vista.

Gian-Italo Bischi, dopo aver brevemente delineato la storia della progressiva matematizzazione dell'economia, si è concentrato soprattutto sull'utilizzo di modelli dinamici non lineari. Sviluppati inizialmente in ambito fisico e basati su equazioni di evoluzione, tali modelli deterministici vengono utilizzati per prevedere – ed eventualmente controllare – l'evoluzione temporale di sistemi reali. Secondo Bischi, la scoperta che modelli dinamici non lineari (tipici dei sistemi sociali che presentano continue interazioni e meccanismi di feed-back) possono esibire comportamenti di caos deterministico, caratterizzato dalla proprietà di amplificare in modo difficilmente prevedibile perturbazioni arbitrariamente piccole, ha suscitato un certo imbarazzo e nel contempo creato nuove possibilità. Imbarazzo perché la presenza di caos deterministico rende insostenibile l'ipotesi dell'agente economico razionale, ovvero capace di prevedere correttamente; ma apre anche nuove possibilità, poiché tale scoperta mostra che quei sistemi economici e sociali caratterizzati da fluttuazioni in apparenza casuali potrebbero in realtà essere governati da leggi del moto deterministiche (anche se non lineari).

Se Bischi ha affrontato il tema della complessità in ambito economico, Salvo D'Agostino ha invece introdotto e approfondito il problema dei successi e dei fallimenti dell'assiomatizzazione in campo fisico. Uno degli aspetti più dibattuti della complessità sul versante scientifico e filosofico è infatti quello della supposta rinuncia a una generalizzazione dei procedimenti assiomatico-deduttivi come metodo generale della ricerca scientifica. A partire dalla considerazione che la fisica pre-relativistica è spesso stata considerata fondata prevalentemente sul trionfo di tale metodo, D'Agostino ha evidenziato la presenza di una posizione antagonista presente già in Newton e ripresa successivamente da Ampère e Maxwell. Alternativa al metodo assiomatico-deduttivo, tale prospettiva si fonda sul ricorso alla cosiddetta deduzione dai fenomeni. Una variazione sul tema, è stata individuata da D'Agostino anche nel contributo di Einstein in cui alla celebrazione del metodo assiomatico-deduttivo si contrappone una lode dell'osservazione dei fenomeni e della riflessione sugli esperimenti: è proprio ponendo il problema di una scelta o conciliazione fra le due che

Einstein avrebbe, secondo D'Agostino, il merito di aver aperto la via al pensiero scientifico moderno.

Sempre in ambito fisico, Arcangelo Rossi ha tracciato, da un punto di vista storico, il passaggio dai modelli riduzionistici che hanno caratterizzato lo studio delle realtà fisica nella scienza classica all'emergere della questione della complessità nella scienza contemporanea. In particolare, a partire dall'affermazione di Ernst Cassirer secondo cui la piena transizione da un'accezione sostantiva ed esplicativa dei modelli a una formale e funzionale sarebbe rintracciabile già alle origini della scienza moderna, Rossi ha mostrato come la visione della natura che emerge dalla scienza classica illuminista fosse comunque realista e riduzionista. Benché alcuni aspetti e alcune visioni non propriamente qualificabili come riduzioniste e meccaniciste siano già presenti all'interno della scienza classica, la tematica della complessità comincia a svilupparsi in fisica solo alla fine dell'Ottocento.

Sergio Chibarro, Lamberto Rondoni e Angelo Vulpiani hanno affrontato il ruolo del caos e l'emergenza di proprietà collettive all'interno della meccanica statistica. In particolare, hanno mostrato l'esistenza di due posizioni nettamente diverse: da una parte il punto di vista "tradizionale", risalente a Boltzmann e parzialmente formalizzato da Khinchin, secondo cui la meccanica statistica sarebbe caratterizzata in primo luogo dall'enorme numero di gradi di libertà; dall'altro la scuola "moderna" cresciuta intorno a Prigogine e ai suoi collaboratori, che considera il caos come l'ingrediente fondamentale. Anche attraverso alcune simulazioni numeriche, gli autori hanno mostrato come anche all'interno della meccanica statistica si faccia avanti il problema della complessità e del riduzionismo. Sebbene i risultati di Khinchin non siano in grado di rispondere in modo definitivo a tutti i problemi sollevati dalla relazione fra termodinamica e meccanica statistica, il numero estremamente grande di gradi di libertà che tale approccio prende in considerazione permette *l'emergere*, nei sistemi macroscopici, di proprietà del tutto assenti in sistemi piccoli.

Giorgio Turchetti ha introdotto il problema del passaggio dai modelli fisici ai sistemi complessi mostrando come i limiti che il disegno riduzionista incontra già per i sistemi fisici diventino decisamente più forti nel caso dei sistemi complessi. La grande differenza tra un sistema fisico e un sistema complesso risiederebbe infatti, secondo Turchetti, nel fatto che il primo, fissate le condizioni esterne, ha sempre le medesime proprietà, mentre il secondo cambia con il fluire del tempo, perché la sua organizzazione interna muta non solo al cambiare di fattori ambientali ma anche con il succedersi delle generazioni. È in tale prospettiva che egli

giunge a definire complessi non tanto i sistemi caratterizzati da proprietà emergenti e da interazioni non lineari tra i loro componenti (definibili come sistemi dinamici), ma piuttosto i sistemi viventi o quelli di vita artificiale che ne condividono le proprietà essenziali.

Il problema di complessità e riduzionismo in campo biologico è stato poi affrontato in maniera diretta da Luciano Boi e da Roberto Serra. Il primo ha mostrato come lo studio del comportamento dinamico delle strutture cellulari non possa essere descritto con sufficiente accuratezza né dalla convenzionale dinamica dell'equilibrio né da modelli statici e richieda quindi nuovi strumenti. In particolare, egli ha affrontato la necessità – per una comprensione del comportamento dei sistemi (dinamici) complessi – di un'adeguata conoscenza delle caratteristiche cinetiche e topologiche delle loro componenti. A differenza dello studio dei meccanismi molecolari, l'analisi del comportamento dinamico delle strutture cellulari non necessita tanto di una profonda e dettagliata conoscenza del comportamento di ogni singola molecola, ma piuttosto delle regole che governano il comportamento globale e collettivo dei sistemi.

In consonanza con il contributo di Boi, Serra ha spiegato come la scienza dei sistemi complessi abbia mostrato l'esistenza di "leggi" in gran parte indipendenti dalle specifiche caratteristiche delle entità microscopiche che tuttavia ne descrivono il comportamento e l'interazione. Se la ricerca di proprietà generali ha ormai assunto una grande rilevanza in ambito fisico, nelle scienze biologiche si trova ancora nei suoi primi stadi di vita. Attraverso una serie di esempi, Serra ha mostrato come tale approccio, da considerarsi non in opposizione alla biologia molecolare classica ma a essa complementare, sembra però portare anche in ambito biologico a importanti e promettenti risultati. Emblematico in questo senso è per Serra il lavoro di Kauffman che rivela come un sistema dinamico di geni che interagiscono fra loro mostri delle proprietà di auto-organizzazione che spiegano alcuni aspetti della vita, fra cui l'esistenza di un numero limitato di tipi cellulari in ogni organismo multicellulare.

Pierluigi Graziani ha affrontato invece il problema della complessità computazionale in riferimento alla decidibilità della geometria elementare di Tarski. A partire soprattutto dai lavori di Fisher, Rabin e Meyers e in confronto con il lavoro di Tarski, Graziani ha analizzato come il problema della decisione si trasformi nella determinazione di quanto tempo e spazio di memoria impieghi un algoritmo di decisione per una teoria a determinare se un enunciato della teoria ne sia o meno un teorema. In teoria della complessità computazionale, infatti, si assume che siano computazionalmente intrattabili quei compiti che richiedono risorse di

tempo e spazio di memoria (le cosiddette risorse computazionali) che crescono esponenzialmente con la lunghezza dell'input; e che siano computazionalmente trattabili quelli che richiedono risorse che crescono al più in modo polinomiale con la lunghezza dell'input. In tale prospettiva, la complessità computazionale non concerne dunque quante risorse richiede lo svolgere un determinato compito, bensì quanto aumentano le risorse richieste al crescere delle dimensioni dei dati.

Claudio Calosi e Vincenzo Fano hanno mostrato come il problema della complessità e del riduzionismo riguardi anche il rapporto fra psicologia e fisica. In particolare, hanno proposto qui un nuovo esperimento mentale che hanno chiamato Shem-Shaun – dal nome dei due gemelli protagonisti del *Finnegan's Wake* di Joyce – e che solleva un problema per il Fisicalismo minimale in filosofia della mente. Il fisicalismo minimale viene infatti caratterizzato come quella tesi secondo cui le proprietà mentali sopravvengono nomologicamente sulla proprietà fisiche, una forma di riduzionismo per cui, stabilite le proprietà fisiche del mondo, quelle mentali sarebbero necessariamente determinate. Gli autori sostengono che, o il Fisicalismo minimale è incapace di dare un resoconto adeguato dell'esperimento Shem-Shaun o ne deve dare un resoconto che è in forte tensione con la nostra attuale immagine scientifica del mondo.

Nel loro insieme, i lavori presentati testimoniano da un lato la vivacità degli studi epistemologici sulla complessità e dall'altro l'importanza del concetto di complessità per la filosofia della scienza e, in particolare, della fisica.

Considerazioni sui fondamenti della Meccanica Statistica

Sergio Chibbaro
Université Pierre et Marie Curie
chibbaro@lmm.jussieu.fr

Lamberto Rondoni
Politecnico di Torino
lamberto.rondoni@polito.it

Angelo Vulpiani
Università di Roma “La Sapienza”
angelo.vulpiani@roma1.infn.it

Alla memoria di Carlo Cercignani

A differenza della meccanica quantistica, i cui fondamenti sono sempre stati al centro di un ininterrotto dibattito, gli aspetti concettuali della meccanica statistica non hanno attratto interessi così vasti; tra le eccezioni citiamo il bel libro di Emch e Liu¹. In questo breve contributo discuteremo alcuni problemi concettuali della meccanica statistica, in particolare il ruolo del

¹ Emch, Liu (2001).

caos² e l'emergenza di proprietà collettive che appaiono quando il numero delle particelle del sistema è molto grande³.

1. Dal microscopico al macroscopico

I sistemi macroscopici sono composti da un numero molto elevato (dell'ordine del numero di Avogadro $N_A \simeq 6.02 \cdot 10^{23}$) di particelle che, sotto opportune condizioni⁴, seguono le leggi di Newton della meccanica classica. In questa descrizione ogni particella è rappresentata dalla sua posizione \mathbf{q}_i e la sua velocità \mathbf{v}_i , che evolvono nel tempo secondo le leggi di Newton. In meccanica analitica invece della velocità si preferisce utilizzare l'impulso $\mathbf{p}_i = m\mathbf{v}_i$ e le equazioni di evoluzione sono determinate da una funzione del sistema, chiamata Hamiltoniana e solitamente indicata con H ⁵. Lo stato di un sistema di N particelle è rappresentato, al tempo t , da un vettore $\mathbf{X}(t) \equiv (\mathbf{q}_1(t), \dots, \mathbf{q}_N(t), \mathbf{p}_1(t), \dots, \mathbf{p}_N(t))$ in uno spazio \mathfrak{M} di dimensione $6N$, che contiene gli stati microscopici del sistema e viene chiamato spazio delle fasi. Una traiettoria in \mathfrak{M} rappresenta il susseguirsi di questi stati allo scorrere del tempo ed è determinata dalle equazioni di Hamilton:

$$\frac{d\mathbf{q}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}_i}, \quad (1)$$

con $i = 1, \dots, N$. Se la Hamiltoniana, che contiene l'interazione tra le particelle, non dipende esplicitamente dal tempo, allora l'energia è una quantità conservata ed il moto si sviluppa su una ipersuperficie ad energia fissata. Notiamo che le equazioni (1) sono invarianti rispetto ad inversione temporale, cioè rispetto al seguente scambio di variabili:

$$\mathbf{q}_i \rightarrow \mathbf{q}_i, \quad \mathbf{p}_i \rightarrow -\mathbf{p}_i, \quad t \rightarrow -t. \quad (2)$$

Si immagini di far evolvere il sistema descritto dalle equazioni (1), a partire da una certa condizione iniziale $(\mathbf{q}_1(0), \dots, \mathbf{q}_N(0); \mathbf{p}_1(0), \dots, \mathbf{p}_N(0))$ fino ad un certo tempo $t > 0$. All'istante t si "inverte il tempo", cioè, lasciando invariate le posizioni $\mathbf{q}_1(t), \dots, \mathbf{q}_N(t)$, si invertano i momenti, sostituendo $\mathbf{p}_1(t), \dots, \mathbf{p}_N(t)$ con $-\mathbf{p}_1(t), \dots, -\mathbf{p}_N(t)$, e si faccia evolvere nuovamente il sistema; questa operazione è l'analogo matematico del proiettare un film all'indietro. Poiché le equazioni di Hamilton sono invarianti rispetto alla trasformazione

² Castiglione, Falcioni, Lesne, Vulpiani (2008).

³ Ivi, Zanghì (2005).

⁴ Per esempio in fluidi comuni a temperatura ambiente.

⁵ Fasano, Marmi (2002).

di inversione temporale (2), l'evoluzione diretta e quella inversa sono ugualmente possibili: il sistema ripercorrerà all'indietro la sua storia e, dopo un tempo t , ritornerà nella stessa posizione iniziale ma con le velocità invertite.

A livello microscopico le osservabili del sistema, ovvero le grandezze accessibili a una misura diretta o indiretta, sono rappresentate da funzioni $A : \mathfrak{M} \rightarrow \mathfrak{R}$ definite nello spazio delle fasi, che associano un numero reale $A(X)$ ad ogni stato microscopico $X \in \mathfrak{M}$. A livello macroscopico il sistema è descritto da un piccolo numero di variabili termodinamiche (temperatura, pressione etc); inoltre si hanno comportamenti irreversibili: mescolando un litro di acqua calda (ad esempio a 50 gradi centigradi) uno di acqua fredda (ad esempio a 10 gradi centigradi) si ottengono due litri di acqua tiepida (a 30 gradi centigradi) e mai un litro a 55 gradi centigradi ed un altro a 5 gradi centigradi, nonostante questo sia compatibile con la conservazione dell'energia. Le equazioni macroscopiche, ad esempio le equazione dell'idrodinamica, riflettono questo comportamento e non sono reversibili.

Il problema concettuale e tecnico della meccanica statistica è come conciliare la termodinamica con la dinamica microscopica: data la dinamica microscopica, cioè l'Hamiltoniana del sistema, determinare le proprietà macroscopiche, ad esempio l'equazione di stato.

2.1. L'ipotesi visionaria di Boltzmann

È fondamentale notare che la scala dei tempi macroscopici, quelli di osservazione del sistema, è molto più grande della scala dei tempi della dinamica microscopica (1), quelli che dettano i cambiamenti a livello molecolare. Ciò significa che un dato sperimentale è in realtà il risultato di un'unica osservazione durante la quale il sistema passa attraverso un grandissimo numero di stati microscopici diversi. Se il dato si riferisce all'osservabile $A(X)$, esso va quindi confrontato con una media eseguita lungo l'evoluzione del sistema e calcolata su tempi molto lunghi dal punto di vista microscopico:

$$\bar{A}(t_0, T) = \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} A(X(t)) dt \quad (3)$$

Il calcolo della media temporale A richiede, in linea di principio, sia la conoscenza dello stato microscopico del sistema ad un certo istante, sia la

determinazione della corrispondente traiettoria nello spazio delle fasi. La richiesta è evidentemente impossibile quindi, se A dipendesse in maniera molto forte dallo stato iniziale del sistema, non si potrebbero fare previsioni di tipo statistico, neanche trascurando la difficoltà di trovare la soluzione del sistema (1).

L'ipotesi ergodica di Boltzmann permette di superare questo ostacolo. Essa sostanzialmente afferma che se l'energia del sistema macroscopico è fissata, ogni possibile stato microscopico che abbia quella data energia è equiprobabile ad ogni altro che abbia la stessa energia. Più formalmente si può dire che ogni ipersuperficie di energia fissata è completamente accessibile a qualunque moto con la data energia⁶. Inoltre, il tempo medio di permanenza di ogni traiettoria in una data regione è proporzionale al volume della regione, e questo permette di introdurre una densità di probabilità $P_{mc}(X)$ (detta microcanonica).

Se le condizioni precedenti, che costituiscono appunto il nucleo dell'ipotesi ergodica, sono soddisfatte, segue che, se T è sufficientemente grande, la media in (3) dipende solo dall'energia del sistema e assume quindi lo stesso valore su tutte le evoluzioni con uguale energia. L'ipotesi ergodica permette di scrivere:

$$\bar{A} \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} A(X(t)) dt = \int A(X) P_{mc}(X) dX \equiv \langle A \rangle \quad (4)$$

La validità della precedente equazione ci libera contemporaneamente dalla necessità di determinare uno stato (iniziale) del sistema e di risolvere le equazioni del moto.

La densità di probabilità sulla superficie con energia fissata o, più precisamente, nello strato di energie comprese tra due valori vicini, E ed $E + \Delta$, è:

$$P_{mc}(X) = \frac{1}{\Gamma_{\Delta}(E, V, N)} \quad , \quad \text{se } E < H < E + \Delta$$

e nulla altrimenti, ove

$$\Gamma_{\Delta}(E, V, N) = \int_{E < H < E + \Delta} d^{3N} q d^{3N} p ,$$

⁶ Cfr. Castiglione, Falcioni, Lesne, Vulpiani (2008), Zanghi (2005), Cercignani (1998).

è il volume dello spazio delle fasi contenuto tra le ipersuperfici $H = E$ ed $H = E + \Delta$.

A questo punto manca ancora un ultimo aspetto fondamentale: il legame che permette di connettere le proprietà termodinamiche a quelle meccaniche. Questo ponte concettuale (e tecnico) è dato dal “principio di Boltzmann”:

$$S = k_B \ln \Gamma_{\Delta}(E, V, N) \quad (5)$$

ove k_B è la costante di Boltzmann, $k_B = R/N_A$ e R è la costante dei gas.

Questa relazione, che è incisa (con notazione leggermente diversa) sulla tomba di Ludwig Boltzmann a Vienna, costituisce quella che in filosofia della scienza è chiamata la legge ponte, nella terminologia di Nagel⁷, tra la termodinamica e la meccanica statistica nell'ensemble microcanonico. Aggiungendo la definizione (puramente termodinamica) di temperatura

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T} \quad (6)$$

a partire dalla (5) si può ricavare tutta la termodinamica⁸.

In molti libri di filosofia della scienza, ad esempio nello stesso Nagel⁹, si trova scritto che la legge ponte tra meccanica e termodinamica è la connessione tra temperatura ed energia cinetica media. Questo a nostro avviso non è corretto. La sua validità è infatti limitata ad una certa classe di sistemi (gas monoatomici), inoltre l'energia cinetica è una grandezza puramente meccanica che non può in alcun modo rendere conto di proprietà fondamentale della temperatura, ed esempio il principio zero della termodinamica¹⁰. Al contrario la (5) è del tutto generale e mette in relazione il livello microscopico con quello macroscopico.

⁷ Nagel (1984).

⁸ Cercignani (1998).

⁹ Nagel (1984).

¹⁰ Peliti (2003).

2. Perché la meccanica statistica funziona?

Se $N \gg 1$ si possono ottenere risultati molto generali ed è possibile introdurre tecniche di calcolo (e metodi di approssimazione) molto potenti che consentono lo studio dettagliato dei sistemi macroscopici¹¹. La meccanica statistica è sicuramente una teoria di grande successo, e di questo nessuno dubita; ma non c'è un completo consenso sul perché funzioni tanto bene.

2.1. Ergodicità, meccanica analitica e caos

Una possibile proposta per giustificare il successo della meccanica statistica è la seguente: la dinamica è abbastanza “complicata” (caotica in linguaggio tecnico), quindi il sistema è ergodico e l'insieme microcanonico è dinamicamente giustificato. Una volta assunta la validità dell'insieme microcanonico, si può facilmente introdurre l'insieme canonico in cui l'energia può variare, etc. Rimane da capire se i sistemi siano genericamente ergodici oppure non lo siano.

Questo è un problema decisamente difficile che si intreccia con la meccanica analitica. Infatti, se esistessero integrali primi¹² oltre all'energia, il sistema risulterebbe sicuramente non ergodico: scegliendo come osservabile A uno degli integrali primi si avrebbe $\bar{A} = A(\mathbf{X}(0))$ che dipende dalla condizione iniziale $\mathbf{X}(0)$ ed è quindi generalmente diverso da $\langle A \rangle$.

Nel fondamentale lavoro sul problema dei tre corpi Poincaré ha dimostrato che, in generale (cioè a parte casi patologici o banali), un sistema Hamiltoniano non ammette integrali primi analitici oltre all'energia¹³. Nel 1923, Fermi generalizzando il teorema di Poincaré argomentò che i sistemi Hamiltoniani in genere sono ergodici.

Purtroppo Fermi si sbagliava, questo lo capì lui stesso in un suo importante lavoro numerico (FPU) in collaborazione con Pasta e Ulam¹⁴. Un anno prima di questo lavoro, Kolmogorov aveva enunciato un importante teorema, che è ora noto con la sigla KAM, poiché la dimostrazione venne in seguito completata da Arnold e Moser. In modo molto informale si può dire

¹¹ Ivi.

¹² Quantità costanti durante l'evoluzione del sistema.

¹³ Fasano, Marmi (2002).

¹⁴ Fermi, Pasta, Ulam (1955); Falcioni, Vulpiani (2001).

che il teorema stabilisce che un sistema esprimibile come un sistema integrabile (in cui il moto è quasi-periodico) più una debole perturbazione, si comporta “sostanzialmente” come il sistema senza perturbazione¹⁵.

Il FPU e il teorema KAM mostrano in modo inequivocabile che un generico sistema Hamiltoniano non è ergodico, almeno da un punto di vista strettamente matematico.

Tuttavia la connessione tra i risultati rigorosi della matematica e la fisica non è mai semplice e anche dopo oltre mezzo secolo la comprensione della rilevanza del KAM, e più in generale del caos, per la meccanica statistica non può considerarsi ancora completamente risolta¹⁶, anche se questi lavori rimangono fondamentali, perché hanno in evidenza la relazione tra non-linearità, caos e meccanica statistica.

Per alcuni studiosi è proprio il caos l'ingrediente fondamentale che giustifica la validità della meccanica statistica. Ad esempio Prigogine¹⁷ sostiene che *la nozione di caos porta a rivedere il concetto di “legge di natura”... e che nei sistemi caotici le traiettorie sono eliminate dalla descrizione probabilistica. E ancora L' irreversibilità o è vera ad ogni livello oppure non è vera mai: non può emergere dal nulla nel passaggio da un livello all' altro.*

La stessa idea è espressa da Driebe¹⁸, in un acceso dibattito con Lebowitz¹⁹ sui fondamenti della meccanica statistica:

*Processi irreversibili sono osservati in sistemi con pochi gradi di libertà... La freccia del tempo non è dovuta a qualche approssimazione fenomenologica ma è una proprietà intrinseca dei sistemi caotici*²⁰.

¹⁵ Il teorema, si può enunciare come segue:

Data una Hamiltoniana $H(\mathbf{I}, \phi) = H_0(\mathbf{I}) + \varepsilon H_1(\mathbf{I}, \phi)$, con $H_0(I)$ sufficientemente regolare e inoltre $\det \left| \partial^2 H_0(\mathbf{I}) / \partial I_i \partial I_j \right| \neq 0$, se ε è piccolo allora sulla superficie di energia costante sopravvivono dei tori invarianti (che sono detti tori KAM e che risultano una piccola deformazione di quelli presenti per $\varepsilon = 0$) in un insieme la cui misura tende a 1 quando $\varepsilon \rightarrow 0$.

¹⁶ Cfr. Castiglione, Falcioni, Lesne, Vulpiani (2008); Falcioni, Vulpiani (2001).

¹⁷ Prigogine (1994).

¹⁸ Driebe (1994).

¹⁹ Lebowitz (1993).

²⁰ Driebe (1994).

2.2. L'ergodicità non è veramente necessaria

Esiste una scuola di pensiero, che ha tra i suoi maggiori esponenti Khinchin e Landau, che considera tutta la problematica sull'ergodicità sostanzialmente irrilevante nel contesto della meccanica statistica, in quanto l'ipotesi ergodica sarebbe di fatto non necessaria per giustificare l'eq. (4) per osservabili fisicamente rilevanti. Questo punto di vista si basa sui fatti seguenti:

- a. nei sistemi che interessano la meccanica statistica, il numero di gradi di libertà è molto grande;
- b. la questione interessante per la meccanica statistica è la validità della (4) non per un'osservabile qualunque, bensì per le poche grandezze rilevanti per la termodinamica;
- c. è fisicamente accettabile ammettere che l'ergodicità sia violata in una regione "piccola" dello spazio delle fasi.

Le conclusioni ottenute da Khinchin, originariamente per sistemi di particelle non interagenti, ed estese da Mazur e van der Linden a sistemi di particelle interagenti con potenziali a corto raggio, sono riassunte nel seguente risultato²¹: nel limite $N \gg 1$, per una classe non banale di osservabili A la misura relativa (ovvero la probabilità rispetto alla densità di probabilità microcanonica P_{mc}) dei punti, sulla ipersuperficie di energia fissata, in cui \bar{A} è significativamente diverso da $\langle A \rangle$ è una quantità piccola²².

Possiamo perciò dire che, nel limite $N \rightarrow \infty$, la (4) è valida per una classe interessante di funzioni, tranne che in una regione dello spazio delle

²¹ Khinchin (1949).

²² Se l'osservabile A è esprimibile come somma di N termini, dipendenti ognuna dalle

variabili di una sola particella $A = \sum_{i=1}^N f(\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_i)$ allora per sistemi con Hamiltoniana della

forma $H = \sum_{n=1}^N H_n(\mathbf{q}_n, \mathbf{p}_n) + \sum_{n,n'} U(\mathbf{q}_n - \mathbf{q}_{n'})$ ove $U(r)$ è un potenziale di interazione

a corto raggio, si ha $P \left(\frac{|\bar{A} - \langle A \rangle|}{\langle A \rangle} \geq C_1 N^{-1/4} \right) \leq C_2 N^{-1/4}$, ove C_1 e C_2 sono costanti

$O(1)$.

fasi, che si fa sempre più piccola all'aumentare di N ; e questo indipendentemente dai dettagli della dinamica.

3. Who is the winner?

Nella sezione precedente abbiamo accennato a due posizioni nettamente diverse. Da una parte abbiamo il punto di vista “tradizionale”, risalente a Boltzmann e parzialmente formalizzato da Khinchin, che può essere così riassunto: *l'ingrediente che caratterizza la meccanica statistica è l'enorme numero di gradi di libertà*²³. Dall'altra la scuola “moderna” cresciuta intorno a Prigogine ed i suoi collaboratori, che considera il caos come l'ingrediente fondamentale; per una dettagliata critica si veda il lavoro di Bricmont²⁴.

I risultati di Khinchin, pur molto importanti, non sono in grado di rispondere in modo definitivo a tutti i problemi sollevati dalla relazione fra termodinamica e meccanica statistica. Ad esempio, non sono in grado di dire cosa succederebbe a condizioni iniziali microscopiche “atipiche”, come quelle dette di non equilibrio, e, nel caso tutto funzioni, cioè che la (4) sia valida, quale sarebbe il tempo T necessario affinché la media (3) si avvicini adeguatamente al valore $\langle A \rangle$.

Il caos deterministico è certamente importante e la sua riscoperta ha permesso di riconsiderare alcune idee di fondo sulla rilevanza del determinismo e la descrizione statistica. Tuttavia capire la sua reale importanza per la validità della meccanica statistica, e dell'irreversibilità in particolare, non è cosa facile e si deve far ricorso a simulazioni numeriche²⁵.

Prima di discutere brevemente qualche risultato tecnico che permette di districarsi (o almeno orientarsi) tra i diversi approcci, notiamo che i due punti di vista si differenziano nettamente, anche da un punto di vista filosofico. In termini un po' approssimativi, possiamo dire che l'impostazione di Prigogine è un esempio di riduzionismo nella sua forma più semplice: nel passaggio dalla meccanica alla termodinamica non ci sarebbe molto di nuovo. Per Prigogine, infatti, le proprietà statistiche sono contenute nelle proprietà dinamiche, indipendentemente dal numero di gradi di libertà coinvolti. Al contrario, nella scuola tradizionale, si ha un elemento in più: il numero estremamente grande di gradi di libertà. Questo è il fatto

²³ Grad (1967).

²⁴ Bricmont (1996).

²⁵ Castiglione, Falcioni, Lesne, Vulpiani (2008); Falcioni, Vulpiani (2001).

fondamentale che permette *l'emergere*, nei sistemi macroscopici, di proprietà che sono del tutto assenti in sistemi piccoli.

Dettagliati calcoli numerici in sistemi Hamiltoniani mostrano in modo chiaro che il caos non è affatto un ingrediente fondamentale²⁶. Ad esempio in catene di tanti oscillatori non lineari si osserva che il calore specifico misurato con medie temporali è in accordo con le previsioni della meccanica statistica anche quando il sistema non è rigorosamente ergodico. L'idea, apparentemente sensata, che il caos implichi buone proprietà statistiche non supera il controllo numerico e si rivela inconsistente, e questo anche in casi in cui i risultati di Khinchin non sono, matematicamente parlando, validi.

Concludiamo discutendo brevemente il problema dell'irreversibilità in cui, a nostro avviso, è essenziale considerare il problema dei livelli di realtà, cioè il grado di accuratezza o approssimazione con il quale si osserva un dato fenomeno. Consideriamo il seguente esperimento concettuale: si versi del profumo in un angolo di una stanza; le molecole del profumo, inizialmente concentrate in una piccola regione, velocemente occuperanno tutta la stanza. Si immagini ora di poter filmare le molecole. Proiettando la pellicola all'indietro, si vedrà un fenomeno "innaturale": tutte le molecole sparse nella stanza si riuniranno in un angolo. Guardando invece una sola molecola nel film a proiettato al contrario, non si evidenzierà niente di anormale. Analogamente, non si nota niente di strano nel film proiettato al contrario se si limita l'osservazione a poche molecole. Solo guardando un numero elevato di molecole, si ha l'impressione di un comportamento innaturale.

Quanto precedentemente accennato lascia sperare che sia possibile dimostrare, entro opportuni limiti, l'irreversibilità dei fenomeni macroscopici, che riguardano un grande numero di particelle, a partire dalla dinamica microscopica. Partendo da un fondamentale lavoro di Grad del 1948 si è arrivati a formulare e dimostrare in modo rigoroso quanto intuito da Boltzmann. Tra i tanti che hanno partecipato a questo significativo progresso ricordiamo Carlo Cercignani, che ha dato contributi fondamentali alla meccanica statistica. Consideriamo un gas diluito di particelle interagenti con un potenziale a corto raggio, ad esempio possiamo pensare che le molecole siano sfere rigide di diametro s , la sostanza del lavoro matematico²⁷ può essere riassunta, in modo molto informale, come segue: nel limite di Boltzmann-Grad:

²⁶ Castiglione, Falcioni, Lesne, Vulpiani (2008).

²⁷ Cercignani, Illner, Pulvirenti (1994).

$$N \rightarrow \infty; \sigma \rightarrow 0; e N\sigma^2 \rightarrow \text{cost}$$

ove N è il numero di molecole nell'unità di volume e σ è il diametro delle molecole e $N\sigma^2$ dà la frequenza di collisione, se la condizione iniziale del sistema è fuori dall'equilibrio termodinamico, dalle equazioni reversibili della meccanica microscopiche si ottengono in modo rigoroso le equazioni irreversibili che descrivono i sistemi macroscopici.

Questo risultato è in netto contrasto con quanto sostenuto dalla scuola di Prigogine. A prima vista può sembrare impossibile che qualcosa (l'irreversibilità) che è assente per ogni sistema con N finito possa apparire nel limite $N \rightarrow \infty$. La cosa non è affatto sorprendente: è quello che succede nel caso dei limiti singolari. Per dare un'idea consideriamo l'equazione algebrica

$$\varepsilon x^2 + x - 1 = 0$$

se $\varepsilon = 0$ si ha una sola soluzione $x = 1$, se $\varepsilon \neq 0$ ci sono due soluzioni: $x_{1,2} = (-1 \pm \sqrt{1 + 4\varepsilon^2})/2\varepsilon$; se $0 < \varepsilon \ll 1$ abbiamo $x_1 = 1 + O(\varepsilon)$ e $x_2 = -1/\varepsilon + O(1)$. I risultati per $0 < \varepsilon \ll 1$ sono drasticamente diversi da quelli $\varepsilon = 0$.

Abbiamo quindi che l'irreversibilità può essere vista come una proprietà emergente nel passaggio dal microscopico al macroscopico; ed è originata dal limite $N \rightarrow \infty, \sigma \rightarrow 0$.

È impressionante l'accordo dei risultati rigorosi con quanto intuito da Boltzmann²⁸:

Nelle equazioni della meccanica non c'è niente di analogo a quanto si ha con la Seconda Legge della termodinamica che può essere ricondotta a termini meccanici solo con assunzioni sulle condizioni iniziali.

Come osservazione generale notiamo il fatto che quasi tutte le volte che si tenta un processo di riduzione tra due teorie ci si trova davanti ad un limite singolare in cui un parametro tende a zero²⁹, come esempi possiamo citare il passaggio:

1. dalla meccanica alla termodinamica: $1/N \rightarrow 0$;
2. dalla meccanica quantistica alla meccanica classica: $\hbar/A \rightarrow 0$, ove \hbar è la costante di Planck ed A l'azione classica del sistema;

²⁸ Cercignani, Illner, Pulvirenti (1994).

²⁹ Batterman (2001).

3. dall'ottica ondulatoria all'ottica geometrica: $\lambda / L \rightarrow 0$, ove λ ed L sono rispettivamente la lunghezza d'onda e la dimensione tipica del sistema.

Una delle poche eccezioni non banali di limite non singolare è il passaggio dalla relatività di Einstein alla meccanica newtoniana; in questo caso il parametro che tende a zero è v/c , ove c e v sono rispettivamente la velocità della luce e la velocità tipica del sistema.

4. Osservazioni finali

Concludiamo con alcune considerazioni generali su alcuni aspetti che sono, almeno parzialmente, ancora materia di dibattito.

4.1. La termodinamica è stata ridotta alla meccanica?

Alla fine di questa breve esposizione è naturale domandarci se c'è stata una vera riduzione della termodinamica alla meccanica. Prima di tentare una risposta ricapitoliamo brevemente lo schema proposto che, a nostro avviso, è sostanzialmente quello immaginato da Boltzmann. Gli ingredienti fondamentali della possibilità di una descrizione termodinamica dei sistemi macroscopici sono:

1. L'ipotesi ergodica (3);
2. La legge ponte, cioè il principio di Boltzmann (5);
3. Il grande numero di gradi di libertà coinvolti ($N \gg 1$);
4. La selezione di opportune condizioni iniziali.

Abbiamo visto che l'ipotesi ergodica non è strettamente vera, ma assumendo il punto **III** possiamo dire che è "moralmente vera". I punti **III** e **IV** sono fondamentali per far emergere i comportamenti collettivi, quali l'irreversibilità. Tentativamente possiamo dire che, nel linguaggio di Nagel, siamo in presenza di un riduzione del secondo tipo (tra teorie eterogenee). Notiamo che non solo c'è solo bisogno di una legge ponte, ma di qualcosa in più (assunzioni **III** e **IV**), solo in questo modo l'emergenza di nuove

proprietà può avvenire. Sembra perciò appropriato parlare di un caso di emergenza debole³⁰.

È necessario tuttavia rilevare come la grandezza del lavoro di Boltzmann non risieda tanto nell'aver "ridotto la termodinamica alla meccanica", quanto nell'aver compreso l'impossibilità di ricondurre l'irreversibilità alle sole leggi della meccanica. Lo straordinario contributo di Boltzmann fu proprio che comprese a pieno la natura singolare dell'emergere dell'irreversibilità per la quale sono necessarie le assunzioni **III** e **IV**, e trovò una legge, l'equazione (5), che mette in relazione i due livelli di realtà e dunque anche i due linguaggi. Questa relazione ha aperto la via allo sviluppo della moderna meccanica statistica ed è profondamente diversa, e ben più importante, di quella che stabilisce la proporzionalità tra l'energia cinetica delle molecole e la temperatura. Ricordiamo che l'esistenza di una tale relazione era già chiara a Daniel Bernoulli, all'inizio del XVIII secolo, ma non è sufficiente per determinare, in modo coerente e generale, la connessione tra meccanica e termodinamica.

4.2. La meccanica statistica è falsificabile?

La domanda può sembrare provocatoria ma ci sembra che meriti una breve discussione. Il problema si potrebbe presentare nel seguente modo: dato un recipiente di volume V contenente N particelle interagenti con un potenziale noto $U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|) = U(r)$, assumendo che esista una condizione di equilibrio termico a temperatura T , trovare il calore specifico, l'equazione di stato etc. Ad esempio per gas diluiti si ha la seguente equazione di stato:

$$\frac{P}{k_B T} = \rho + b_2(T)\rho^2 + b_3(T)\rho^3 + \dots \quad (8)$$

dove p è la pressione, $\rho = NV$ è la densità ed i coefficienti del viriale b_2, b_3, \dots sono esprimibili in termini di $U(r)$. Una volta effettuati i calcoli si devono confrontare i risultati con l'esperimento.

In pratica non è possibile porsi il problema nella forma precedente, infatti anche assumendo che il problema sia classico, il potenziale $U(r)$ non è noto: ha un'origine quantistica e deve essere calcolato, almeno in linea di principio, dall'equazione di Schrödinger. È possibile ottenere una buona approssimazione solo in casi molto semplici, nella realtà si deve procedere

³⁰ Bedau, Humphreys (2006).

in modo completamente diverso³¹. Si comincia ipotizzando una forma specifica per $U(r)$, ad esempio per i liquidi semplici il potenziale di Lennard-Jones

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (9)$$

che contiene due parametri ε e σ . Una volta calcolati i coefficienti del viriale $b_2(T), b_3(T), \dots$ in termini di $U(r)$, dal confronto con i dati sperimentali si determinano i parametri ε e σ . Questo procedimento è chiaramente autoconsistente e quindi la meccanica statistica potrebbe sembrare una teoria non falsificabile, ma questa conclusione non è corretta: la meccanica statistica è in grado di prevedere comportamenti non banali che possono essere controllati sperimentalmente. Possiamo citare la distribuzione di Maxwell-Boltzmann per la velocità delle molecole, l'esistenza delle transizioni di fase e l'universalità dei fenomeni critici. È interessante notare che in tutti i casi appena citati non è necessario conoscere il potenziale: la distribuzione di Maxwell-Boltzmann vale indipendentemente dalla forma di $U(r)$, mentre nei fenomeni critici solo alcune proprietà qualitative (classi di universalità) del potenziale sono rilevanti³².

Riferimenti

- Batterman, R.W., 2001, *The Devil in the Details*, Oxford University Press.
- Bedau, M., and Humphreys, P., (Eds), 2006, *Emergence: contemporary readings in philosophy and science*, Cambridge University Press.
- Bricmont, J., 1996, *Science of chaos or chaos in science?*, «Annals of the New York Academy of Sciences», **775**, 131.
- Castiglione P., Falcioni M., Lesne A., and Vulpiani A., 2008, *Chaos and Coarse Graining in Statistical Mechanics*, Cambridge University Press.
- Cercignani, C., 1998, *Ludwig Boltzmann: the man who trusted*, Oxford University Press.
- Cercignani, C., Illner, R., and Pulvirenti, M., 1994, *The Mathematical Theory of Dilute Gases*, Springer-Verlag, Berlin.

³¹ Hansen, McDonald (1986).

³² Peliti (2003).

- Driebe, D.J., 1994, *Is Boltzmann entropy time's arrow's archers?*, «Physics Today», November 1994, pp. 13.
- Emch, G.G., and Liu, C., 2001, *The Logic of Thermostatistical Physics*, Springer Verlag, Berlin.
- Falcioni, M., Vulpiani, A., 2001, *Il contributo di Enrico Fermi ai sistemi non lineari* in *Conoscere Fermi*, Ed. Bernardini e Bonolis SIF, Bologna.
- Fasano, A., Marmi, S., 2002, *Meccanica analitica*, Bollati Boringhieri, Torino.
- Fermi, E., Pasta, J., and Ulam, S., 1955, *Studies of Nonlinear Problems*, Document LA 1940.
- Grad, H., 1967, *Levels of Description in Statistical Mechanics and Thermodynamics*, in *Delaware Seminar in the Foundations of Physics*, Ed. Bunge, Springer-Verlag, Berlin.
- Hansen, J.-P., and McDonald, I. R., 1986, *Theory of Simple Liquids*, Academic Press Inc, London.
- Khinchin, A.I., 1949, *Mathematical Foundations of Statistical Mechanics*, Dover Publications Inc., New York.
- Lebowitz, J.L., 1993, *Boltzmann's entropy and time's arrow*, «Physics Today», September 1993, pp. 32.
- Nagel, E., 1984, *La struttura della scienza*, Feltrinelli, Milano.
- Peliti, L., 2003, *Appunti di Meccanica Statistica*, Bollati Boringhieri, Torino.
- Prigogine, I., 1994, *Les Lois du Chaos*, Flammarion, Paris.
- Zanghì, N., 2005, *I fondamenti concettuali dell'approccio statistico in fisica* in *La Natura delle Cose* (a cura di Allori, Dorato, Laudisa e Zanghì), Carocci Editore, Roma, pp. 139.