

La meccanica statistica dei sistemi complessi

The more is different. The behavior of large and complex aggregates of elementary particles, it turns out, is not to be understood in terms of a simple extrapolation of a few particles. Instead, at each level of complexity, entirely new properties appear, and the understanding of the new behaviors requires research which I think is as fundamental in its nature as any other.

Philip Warren Anderson

Elena Agliari

Dipartimento di Matematica "Guido Castelnuovo", Sapienza Università di Roma

Adriano Barra

Dipartimento di Matematica e Fisica "Ennio De Giorgi", Università del Salento

In questo articolo esponiamo una prospettiva, stilizzata e sintetizzata, inerentemente la genesi della Teoria della Complessità nella Meccanica Statistica: dopo un'introduzione storica ed una minima digressione sulla Meccanica Statistica tout-court utilizziamo la stessa per riassumere alcune riflessioni sulla Teoria dei Sistemi Complessi, originariamente formulata da Giorgio Parisi, ed alcune sue implicazioni.

Come *overture*, per prendere confidenza amatoriale con la Meccanica Statistica, mostriamo che *complesso* e *riduzionistico* non sono necessariamente aggettivi antitetici: per fare questo tratteremo esempi di *complessità emergente* utilizzando unicamente modelli in cui le energie sono forme quadratiche nelle loro variabili microscopiche e, median-

te il principio di massima entropia, legheremo queste funzioni costo al riduzionismo in un'accezione che chiameremo *riduzionismo statistico*.

Il cuore del lavoro che segue vuole invece enfatizzare come la conditio sine qua non per avere un comportamento complesso sia la simultanea presenza, nella pletora di interazioni tra gli elementi microscopici che formano il sistema in esame, tanto di coesione quanto di competizione (anche in un quadro riduzionista): a supporto di questa visione, e come omaggio alla prolifica e storica Scuola di Sistemi Dinamici del Fiorini, chiuderemo lo scritto mostrando alcune similitudini nei requisiti per la genesi della fenomenologia complessa in Meccanica Statistica (a dire un connubio tra coesione e competizione)

con gli ingredienti fondamentali per la genesi del chaos deterministico nei sistemi dinamici, traendo ispirazione, inerentemente questi ultimi, dalla mappa logistica di Robert May. Inizieremo questa chiacchierata informale usando variabili microscopiche continue, con cui si ha forse più familiarità nei primi anni di Università, per poi estendere il quadro a variabili discrete nella seconda metà dello scritto: l'idea sottostante è che, in questa maniera, il quadro tracciato possa avere un suo senso proprio ma possa anche essere usato, volendo, come una chiave di lettura per alcuni articoli del numero di Ithaca sull'Intelligenza Artificiale.

Parte Uno: il Riduzionismo Statistico

Perché nei corsi di base di Statistica o nei laboratori di Fisica ci è stato insegnato che, per descrivere opportunamente un campione statistico, abbiamo bisogno (almeno) di due quantificatori (a dire, la media e la deviazione standard)? E cosa c'entra questo con il telaio riduzionista che appare egemone nella Meccanica Elementare? Per rispondere a queste domande, serve una definizione minimale di Principio di Riduzione, sulla quale non c'è unanimità ma che, sovente, viene sintetizzata sancendo che, per conoscere la soluzione di un dato problema, possiamo spezzare lo stesso in sotto-problemi da risolvere separatamente ottenendo delle soluzioni parziali che, opportunamente sommate, forniscono la soluzione del sistema oggetto di studio iniziale. Questa operazione può essere schematizzata come *Se A implica C e B implica D, allora (A+B) implica (C+D)*

$$(A \rightarrow C) \wedge (B \rightarrow D) \Rightarrow (A \cup B) \rightarrow (C \cup D).$$

Un archetipo di comportamento riduzionista in Fisica, nella Meccanica Elementare, è offerto dall'*oscillatore armonico*: chiamata x una coordinata spaziale e k il valore della costante elastica della molla in questione (e.g., una bilancia) consideriamo una forza $F_k = -kx$ (scalare per semplicità). Se poniamo sulla bilancia una mela e la sua molla si estende per un tratto x_1 , se ne ricava

un valore per la forza peso $F_1 := F_k(x_1) = -kx_1$ (l'informazione sull'elongazione è convertita in un'informazione sul peso della mela). Parimenti, in un secondo esperimento, ponendo sulla stessa bilancia una pera, questa si estenderà per un tratto x_2 , e se ne ricava una forza $F_2 := F_k(x_2) = -kx_2$; chiaramente, se pesiamo simultaneamente la mela e la pera, la bilancia si estenderà per un tratto $x_1 + x_2 = x_{totale}$ ottenendo una forza $-k(x_1 + x_2) = -kx_{totale} = F_1 + F_2 =: F_{totale}$. L'oscillatore armonico gioca un ruolo così importante in Fisica che quando, in un certo campo di studio, un modello costituisce il riferimento da cui discende una pletera di estensioni e variazioni sul tema, si epiteta lo stesso come *l'oscillatore armonico del campo in questione*.

Per i nostri fini è importante ora notare che, se la generica forza $F_k(x)$, nel generico parametro k , è una funzione lineare delle variabili microscopiche x , l'energia $E_k(x)$ a questa associata (ovvero il suo integrale lungo la traiettoria) è una forma quadratica nelle stesse variabili microscopiche, a dire, se $F_k(x) := -kx \Rightarrow E_k(x) = \frac{1}{2}kx^2$: quest'osservazione banale avrà il suo peso per capire cosa intendiamo per *riduzionismo statistico*.

Il Principio di Massima Entropia in Fisica ed in Matematica

Le prime formulazioni del *principio di massima entropia* sono state dipinte in Fisica da celebri nomi quali quelle di Ludwig E. Boltzmann, Josiah W. Gibbs e James C. Maxwell alla volta di una formulazione meccanicistica e microscopica della Termodinamica sul finire della *belle époque* (in un periodo prolifico che ha portato anche alla nascita della Teoria Ergodica). Di contro, in Matematica (in particolare in Statistica), negli anni '50 del secolo scorso, Edwin T. Jaynes mostrava come un generico telaio inferenziale derivabile dal principio di massima entropia fosse in completa armonia con quelli derivabili mediante principi variazionali classici quali il *principio di massima verosimiglianza*.

Vediamo cosa dice il principio di massima entropia, partendo dalla sua formulazione come metodo matematico generale e successivamente come postulato cardine della Fisica. Per farlo introduciamo ed utilizziamo l'entropia nella sua espressione fornita da Claude Shannon nell'ambito della Teoria dell'Informazione (ma nella

prossima sottosezione vedremo come questa sia fondamentalmente la stessa definita dai fisici, rendendo Teoria dell'Informazione e Meccanica Statistica due volti dello stesso Giano).

Consideriamo N estrazioni indipendenti della variabile casuale $x \in \mathbb{R}$, estratte da una densità di probabilità incognita $p(x)$; per fissare le idee possiamo immaginare di avere a che fare con una moltitudine di N molle indipendenti¹ per cui x_1, x_2, \dots, x_N rappresentano le loro elongazioni in un opportuno sistema di riferimento. L'entropia di Shannon $S[p]$ associata a questo sistema si scrive

$$S_{\lambda_0}[p] = - \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \ln p(x) dx + \lambda_0 \left(\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx - 1 \right),$$

dove l'ultimo termine nel membro di destra dell'equazione esprime il vincolo (in forma di moltiplicatore Lagrangiano) che la variabile funzionale p che compare in $S_{\lambda_0}[p]$ sia proprio una probabilità (la relazione di chiusura).

Massimizzando questa entropia otteniamo come soluzione la distribuzione $p(x)$ meno strutturata possibile², quella cioè *al massimo disordine eventualmente in accordo con i dati a disposizione su questo insieme di molle*. In particolare, se non facciamo alcuna misura su queste molle, semplicemente ne postuliamo l'esistenza, estremizzando $S_{\lambda_0}[p]$ rispetto a p e λ_0 si ottiene una distribuzione uniforme. La derivazione è tanto facile quanto intuitivo il risultato: senza nessuna informazione sul sistema, il principio ci suggerisce che qualunque realizzazione ha la stessa probabilità di verificarsi; d'altronde, se non suppliamo al principio alcuna informazione sul sistema, cos'altro di ragionevole dovremmo aspettarci?

Supponiamo ora di aver effettuato alcune misure su queste molle, per esempio, assumiamo di conoscere il momento primo empirico (i.e., la media campionaria) $\langle x \rangle_{\text{exp}}$ di $p(x)$ ed il momento secondo empirico $\langle x^2 \rangle_{\text{exp}}$ di $p(x)$ (e quindi la varianza empirica $\sigma_{\text{exp}}^2 := \langle x^2 \rangle_{\text{exp}} - \langle x \rangle_{\text{exp}}^2$), ed imponiamo, sempre mediante vincoli Lagrangiani, che la distribu-

zione di massima entropia che vogliamo sia in accordo con queste misure, cioè tale che i primi due momenti, che chiamiamo teorici, riproducano quelli sperimentali, i.e. $\langle x \rangle_{\text{exp}} = \langle x \rangle_{\text{theor}} := \int_{-\infty}^{+\infty} xp(x)dx$ e $\langle x^2 \rangle_{\text{exp}} = \langle x^2 \rangle_{\text{theor}} := \int_{-\infty}^{+\infty} x^2p(x)dx$. Dobbiamo quindi estremizzare rispetto a p ed ai tre moltiplicatori Lagrangiani $\lambda := \{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2\}$ la seguente espressione

$$S_{\lambda}[p] = S_{\lambda_0}[p] + \lambda_1(\langle x^1 \rangle_{\text{theor}} - \langle x^1 \rangle_{\text{exp}}) + \lambda_2(\langle x^2 \rangle_{\text{theor}} - \langle x^2 \rangle_{\text{exp}}). \quad (1)$$

Risolvendo il sistema di quattro equazioni che tale estremizzazione implica otteniamo

$$\hat{p}(x) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{(x-\hat{\lambda}_1)^2}{2\lambda_2}}, \quad (2)$$

dove $\hat{\lambda}_1 = \langle x \rangle_{\text{exp}}$, $\hat{\lambda}_2 = \sigma_{\text{exp}}^2$ e la normalizzazione (nota in Meccanica Statistica come *funzione di partizione*) vale $Z = \sqrt{2\pi\sigma_{\text{exp}}^2}$, cioè una distribuzione di Gauss, centrata proprio sul valor medio delle elongazioni misurate e con varianza che ne riproduce le fluttuazioni: un risultato che il Teorema del Limite Centrale avrebbe previsto senza necessità di fare alcun conto.

In Fisica, in particolare in Meccanica Statistica, il Principio di Massima Entropia si formula in maniera differente: considerato un generico sistema, descritto sempre mediante coordinate microscopiche x , ed al quale si assegna energia media \bar{E} , quello che vogliamo massimizzare si scrive

$$S_{\lambda_0, \lambda_E}[p] = S_{\lambda_0}[p] + \lambda_E \left(\int p(x)E(x)dx - \bar{E} \right).$$

Il moltiplicatore lagrangiano λ_E ha un ruolo cruciale: impone che l'energia media sia definibile (i.e., che esista), ovvero che il sistema possa termalizzare poiché così facendo rimuoviamo eventuali patologie, come divergenze iperboliche in cui particelle scappano via all'infinito (rimanendo perennemente in moto) o collassano reciprocamente (e.g., la legge di repulsione di Coulomb tra due protoni o la sua variante attrattiva tra un protone ed un elettrone).

La massimizzazione dell'entropia $S_{\lambda_0, \lambda_E}[p]$ ci restituisce la seguente espressione, nota come distribuzione di Maxwell-Boltzmann o di Gibbs:

$$p_{\text{Gibbs}}(x) = \frac{1}{Z} e^{-E(x)/T}, \quad (3)$$

dove Z ha sempre il ruolo di normalizzazione e T -la temperatura del *bagno termico* nel quale il sistema vive- è legata al moltiplicatore di Lagrange, che tacitamente mostra quanto sia esponenzialmente improbabile trovare il sistema in uno stato lontano da quello a cui corrisponde la sua minima energia.

Uniamo allora i punti elencati fino a qui: se co-

¹Questo esempio si potrebbe rendere molto più interessante facendo interagire le molle, invece di considerare un "gas" di oscillatori, per esempio, senza ricorrere alla meccanica quantistica, ritrovando il calore specifico dei solidi empiricamente stimato essere costante (per temperature non troppo basse) da Dulong e Petit, ma esulerebbe dagli scopi del manoscritto.

²L'ottenere come risultato una distribuzione *il meno strutturata possibile* deve essere visto in una luce positiva, à la *rasoio di Occam*: sia meno *pregiudizi aprioristici* introduco meno rischio di sbagliare l'interpretazione dei risultati, sia meno *assumo in partenzas* più capisco alla fine (a parità di contenuto informativo nel risultato). Si veda, a tal proposito, i contributi di Michele Castellana e Matteo Marsili, in questo volume.

struiamo una disciplina sul telaio riduzionista (e.g., la Fisica dell'oscillatore armonico) e quindi usiamo forze lineari generate da energie che sono forme quadratiche, approdiamo sempre a distribuzioni di massima entropia che sono Gaussiane nelle variabili microscopiche, per cui per estrarre informazioni dai relativi esperimenti sarà sufficiente controllare il momento primo ed il secondo (nel limite di cospicua statistica) come sancito dai Teoremi del Limite Centrale: è questa armonia di indagine, tra la Meccanica Elementare (per formulare modelli) e l'Inferenza Statistica di base (per verificarne la bontà) che, noi autori del presente scritto, chiamiamo *riduzionismo statistico*.

Chiaramente, così come esistono modelli meccanici che esulano da una trattazione riduzionista (e.g., i sistemi non lineari), esistono distribuzioni che si svincolano dai dictat dei teoremi di convergenza in probabilità (e.g., le distribuzioni a potenza): tanto i primi generano sovente caoticità nei Sistemi Dinamici quanto i secondi di prassi generano complessità nella Meccanica Statistica.

Il modello di Erhnenfest: l'entropia da Gibbs a Shannon

Poiché l'entropia è un'osservabile cardine dell'intera Meccanica Statistica, e poiché a breve vogliamo descrivere sistemi le cui variabili microscopiche sono interi e non reali ³, in questa sotto-sezione affrontiamo da una prospettiva entropica un modello discreto elementare, il modello di Erhnenfest, che si preoccupa di *far termalizzare palline di due diversi colori in due urne (o buche)*.

Per vedere che legame esista tra le due celebri formule dell'entropia, quella supplita da Boltzmann $S = \ln \Omega(x)$ (dove $\Omega(x)$ è il numero di microstati compatibili col macrostato di cui calcoliamo S) e quella supplita da Shannon $S = -p(x) \ln p(x)$ (dove p è la probabilità di osservare un particolare microstato x), vediamo la termalizzazione del modello di Erhnenfest, che, essendo un modello iso-energetico, ci permette proprio di prendere confidenza con l'entropia.

In questo modello esistono due buche, inizialmente contenenti la prima N_A palline rosse ed N_B palline blu, la seconda N_B palline rosse ed N_A palline blu, tali che $N = N_A + N_B$; le buche possono liberamente e casualmente scambiarsi palline tra di loro (le palline si mischiano quindi), conservando il numero N di palline in ciascuna buca. Ci chiediamo due cose:

³Questo passaggio permette di usare questo scritto come prospettiva con cui leggere alcuni articoli pubblicati in parallelo sul volume dedicato all'Intelligenza Artificiale di Ithaca. Con la stessa filosofia, nel seguito, come prototipo di sistema semplice studieremo il modello di Curie-Weiss, che è un modello definito al discreto, ma si sarebbe parimenti potuto usare il modello di Van Der Waals, che è un modello definito nel continuo.

Domanda di Statistica: quale è la distribuzione di massima entropia di questo sistema?

Domanda di Fisica: il sistema raggiunge l'equilibrio? Se sì, che caratteristiche ha?

Iniziamo dalla descrizione statica (quindi rispondendo alla domanda Statistica): il numero di configurazioni possibili per una buca di questo sistema (per l'altra il discorso è identico) è $\Omega = \binom{N}{N_A}$, pertanto l'entropia di Boltzmann di pertinenza può essere scritta come $S = \ln \Omega = \ln N! - \ln N_A! - \ln N_B! \sim N \ln N - N_A \ln N_A - N_B \ln N_B$. Possiamo ora aggiungere $0 = N_A + N_B - N$ al membro di destra della precedente equazione lasciandone ovviamente inalterato il contenuto informativo per ottenere $S = -N_A \ln(\frac{N_A}{N}) - N_B \ln(\frac{N_B}{N})$. Ora facciamo due operazioni, la prima banale la seconda lievemente meno: la prima introduce le densità di particelle $\rho_i := N_i/N$, $i \in (A, B)$, la seconda introduce anche la densità di entropia, cioè ci interessiamo ad S/N al posto di S . Cui prodest? Il vantaggio nel passaggio da quantità linearmente estensive (ricordiamo che le osservabili termodinamiche scalano linearmente con il volume, i.e. con il numero di particelle) a quantità intensive (basta dividere le estensive per il volume, qui rappresentato da N) risiede nel fatto che per le prime i valori medi crescono linearmente in N alla stregua delle loro varianze (non delle loro deviazioni standard!), mentre per le seconde, non potendo crescere in N per definizione, le relative distribuzioni si *concentrano* sul valor medio, in accordo con la convergenza a zero delle loro varianze campionarie per $N \rightarrow \infty$. Per queste osservabili, anche dette *auto-medianti*, si ottengono così delle comode rappresentazioni δ -like, molto usate nella Meccanica Statistica.

Notando che ρ_A e ρ_B , se interpretate come frequenze, per $N \rightarrow \infty$ tendono alle rispettive probabilità per la legge dei grandi numeri (infatti formano una partizione, i.e. $(\rho_A \cap \rho_B = 0) \wedge (\rho_A \cup \rho_B = 1)$), tralasciando le etichette A, B in favore di $\rho, 1 - \rho$, e chiamando $s[\rho] = S[\rho]/N$ l'entropia intensiva, possiamo scrivere

$$s[\rho] = -\rho_A \ln \rho_A - \rho_B \ln \rho_B = \rho \ln \rho + (1 - \rho) \ln(1 - \rho),$$

che molto somiglia alla rappresentazione à la Shannon per un esperimento bernoulliano $s[p] = p \ln p + (1 - p) \ln(1 - p)$, dove p rappresenta la "probabilità di successo".

Così, partendo dall'espressione di Boltzmann per l'entropia, siamo approdati a quella di Shannon.

È elementare verificare che il massimo di $S[\rho]$ (che si ottiene richiedendo $dS[\rho]/d\rho = 0$) si ha per $\rho = 1/2$, cioè quando un ugual numero di palline di ogni tipo riempie le buche, ovvero per la configurazione di *massimo disordine* (i due casi di massimo ordine sarebbero stati, di contro, tutte palline blu in una buca e rosse nell'altra e la situazione speculare con tutte le palline rosse nella prima e tutte quelle blu nella secon-

da). Questa configurazione (distribuzione informe) è anche quella prevista in uno scenario inferenziale nel caso in cui nessuna informazione empirica venga fornita al Principio di Massima Entropia.

Proseguiamo ora con una descrizione dinamica, rispondendo alla domanda di Fisica: che scenario offre la termalizzazione all'equilibrio?

Proviamo a scrivere un'evoluzione dinamica per la densità di palline, ma senza ricorrere a strumenti matematici sofisticati (e.g., le catene di Markov), scegliamo delle regole dinamiche che siano semplicemente *ragionevoli* (si veda anche figura 1):

1) Scegliamo una pallina a caso, uniformemente da una delle due buche, diciamo la prima per fissare le idee, quindi con probabilità di esser estratta pari ad $1/N$.

2) Attribuiamo a questa pallina una probabilità q di rimanere nella buca di appartenenza ed una probabilità $1 - q$ di saltare nell'altra buca, secondo questo criterio:

$\Delta N_A = +1$ con probabilità $p = \frac{N_B}{N}(1 - q)$ (N_A cresce quando una pallina blu si trasferisce nella seconda buca).

$\Delta N_A = -1$ con probabilità $p = \frac{N_A}{N}(1 - q)$ (N_A decresce quando una pallina rossa lascia la prima buca).

Se ora scriviamo (oculatamente perché ci sono dei passaggi al limite che non svisceriamo come si dovrebbe) il rapporto incrementale $\Delta N_A / \Delta t$, dove il lasso di tempo da impiegarsi lo assumiamo ragionevolmente proporzionale al volume delle buche, cioè $\Delta t \sim N \delta t$, e parimenti assumiamo $\Delta N_A \sim N \delta \rho_A$, possiamo scrivere un'equazione differenziale ordinaria per ρ_A che si legge

$$\frac{\delta \rho_A}{\delta t} = \rho_B(1 - q) - \rho_A(1 - q) \rightarrow \frac{d\rho}{dt} = (1 - q)(1 - 2\rho).$$

dove le stesse considerazioni fatte nella statica ci permettono di dimenticare le etichette A, B .

È immediato verificare che, a patto che la dinamica esista (i.e., $q \neq 1$), un rilassamento all'equilibrio avviene quando $d\rho/dt = 0$, cioè quando $\rho = 1/2$, in completo accordo con il previo approccio.

Parte Due (statica): Semplice versus Complesso in Meccanica Statistica

La distribuzione di probabilità che quindi usiamo per sancire l'occorrenza di una certa configurazione x di un dato sistema è $p(x) = e^{-\frac{E(x)}{T}}/Z$, dove $E(x)$ rappresenta l'energia del sistema nella configurazione x mentre T rappresenta la temperatura a cui il sistema vive: se la temperatura è molto alta (i.e., $T \gg E$), l'evoluzione del sistema è fondamentalmente randomica, infatti, è governata dalla massima entropia e

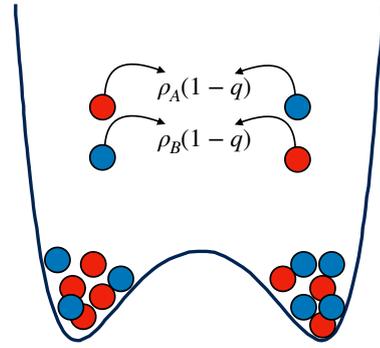


Figura 1: Nel modello di Erhenfest si hanno due buche (o urne), la prima contenente N_A palline rosse ed N_B palline blu, la seconda contenente N_B palline rosse ed N_A palline blu; nell'esempio mostrato in figura la prima buca è quella di sinistra ed $N_A = 4$, $N_B = 3$. Il sistema viene fatto "termalizzare" iso-energeticamente, conservando cioè il numero $N = N_A + N_B$ di palline in ciascuna buca. La probabilità che una pallina rossa si trasferisca dalla prima alla seconda buca (e quindi, simultaneamente, una pallina blu si trasferisca dalla seconda alla prima buca) è $(N_A/N)(1 - q)$ e, come conseguenza di questo scambio, il numero di palline blu nella prima urna cresce di una unità. Lo scambio opposto, per cui il numero di palline rosse nella prima urna cresce di una unit, a si verifica con una probabilità $(N_B/N)(1 - q)$.

le varie configurazioni tendono ad essere equiprobabili, come si evince banalmente prendendo il limite $T \rightarrow \infty$ di $p(E)^4$; di contro, nel limite $T \rightarrow 0$, il contributo entropico viene soppresso e la dinamica del sistema torna ad essere una deterministica ricerca del minimo dell'energia, alla volta dell'ordine celato dietro la formula che esplicita la forma funzionale di E (che funge da funzione di Lyapounov a temperatura nulla grazie al Teorema Spettrale) in termini delle configurazioni microscopiche x : capire questo barcamenarsi tra ordine e disordine è il ruolo della Meccanica Statistica.

Una questione cardine nella Meccanica Statistica di una cinquantina di anni fa verteva sullo studio delle transizioni di fase *classiche*: se a temperature alte vince il disordine e la massima entropia è dominante nella selezione delle configurazioni osservabili, mentre alle basse temperature vince l'ordine e a dominare è la minima energia, due osservazioni sono facilmen-

⁴C'è una ben nota relazione termodinamica tra l'aumento della temperatura e quello dell'entropia e, proprio come l'entropia ha un ruolo tanto nella Fisica quanto nella Teoria dell'Informazione, lo stesso succede per la temperatura: si veda a tal proposito il box *la temperatura ubriaca*.

te deducibili:

a) per capire “chi prevalga su chi” è bene confrontarle, energia ed entropia, ed effettivamente i meccanici statistici studiano le proprietà dell’energia libera F di un sistema, definita come $F := E - TS$

b) tra il limite di temperatura infinita, dove sicuramente vince la massimizzazione di entropia, e quello di temperatura nulla, dove sicuramente vince la minimizzazione dell’energia, qualcosa deve succedere: quel qualcosa è una *transizione di fase*.

Di cosa si tratta? All’atto pratico è evidente che la conoscenza della fase di un sistema è importante per una moltitudine di motivi. Si pensi ad una bottiglietta d’acqua che vogliamo bere: sapere che l’acqua sia nella sua fase liquida piuttosto che solida certamente ci evita una figuraccia, qualora cercassimo di far uscire un cilindro di ghiaccio dall’esile buco della bottiglietta in presenza di amici; l’altro limite sarebbe ancor peggiore: provare ad aprire una bottiglietta di vapore per tentare di bere non produrrebbe neanche più una risposta ilare da amici ormai attoniti...

Il nodo centrale è che, qualsiasi sia il nostro grado di conoscenza inerentemente la molecola dell’acqua (conosciamo la chimica e sappiamo che ci sono due atomi di idrogeno per atomo di ossigeno; di più, conosciamo la meccanica quantistica ed addirittura possiamo dire che gli orbitali formano degli angoli medi di 104.4 gradi tra loro, etc.), da tutta questa informazione (che neanche serve) in nessuna maniera si evince che quando un bicchiere d’acqua si mette in freezer questo ghiaccia e parimenti quando si mette una pentola d’acqua sul fuoco questa evapora formando delle caratteristiche bolle di vapore all’interno della rimanente acqua in forma liquida. Se abbiamo perseguito lo schema logico di riduzione spezzando il sistema *bicchiere d’acqua* in sotto-sistemi *le singole molecole* e le abbiamo studiate *indipendentemente* (trascurando cioè il loro interagire), la nostra ignoranza sull’emergenza di una transizione di fase è alquanto ragionevole: le transizioni di fase sono proprietà collettive, *fenomeni emergenti dalle reti che le molecole d’acqua formano mediante il loro tumultuoso interagire* nelle quali, tipicamente, le distribuzioni statistiche non rispettano i dictat del Teorema del Limite Centrale, optando per comportamenti *scale-free*⁵. Notiamo tuttavia che questo tipo di transizioni di fase, benché estremamente interessanti, non rappresentano dei veri “fenomeni complessi”, nel senso che le fasi che separano possono essere estrapolate direttamente a partire dalla forma funzionale dell’energia $E(x)$ e corrispondono a diversi gradi di ordine (o simmetria) facilmente

⁵Un esempio di distribuzione a potenza, tipico delle transizioni di fase, lo si ottiene guardando l’istogramma della grandezza delle bolle di vapore che risalgono l’acqua *bollente*: tipicamente queste spaziano su molti ordini di grandezza, dal microscopico all’agevolmente visibile ad occhio nudo.

definibile. Per chiarire meglio questi concetti, nella prossima sottosezione approfondiamo un esempio di sistema *semplice*, prima di avventurarci alla volta di un sistema *complesso* nella successiva sottosezione.

Concludiamo sottolineando che, in questo scritto, volutamente continueremo a discutere solo energie che siano forme quadratiche nelle loro variabili microscopiche (e quindi, in linea di principio, riducibili) al fine di mostrare che non è così banale sancire un divario tra lo schema di riduzione e la complessità.

L’oscillatore armonico dei sistemi semplici: il Curie-Weiss

Assunto ormai che, con il termine alquanto lasco *sistema* intendiamo una generica collezione di oggetti, i quali possono eventualmente interagire, in questo testo optiamo per prendere “a paradigma del semplice” il *modello di Curie-Weiss*: questo modello, inizialmente proposto da Lenz, costituisce l’oscillatore armonico delle transizioni di fase paramagnete-ferromagnete nei sistemi composti da spin (è quindi un modello definito sugli interi) e le due fasi sono chiamate *paramagnetica* (o *ergodica*, quella ad alta temperatura) e *ferromagnetica* (o *non-ergodica*, quella a bassa temperatura).

Vediamo di cosa si tratta: innanzitutto assumiamo che ci siano N spin il cui stato è indicato con $\sigma_i = \pm 1$, $i \in (1, \dots, N)$ che interagiscono tutti con tutti e con la stessa intensità (i Fisici di solito chiamano questa approssimazione *di campo medio*, secondo una lunga tradizione iniziata da Llewellyn Thomas ed Enrico Fermi, mentre i Matematici chiamano le funzioni energia di questa classe *funzioni somma* di Aleksandr Khinchin). In virtù di questa interazione, quantificata mediante una costante di accoppiamento $J_{ij} > 0$ ($i, j = 1, \dots, N$) nell’eq. (4), gli spin cercano di allinearsi tra loro: maggiore J_{ij} e maggiore la propensione degli spin i e j al reciproco allineamento. Gli spin possono anche sentire il mondo esterno che viene loro supplito in forma di un campo magnetico $h \in \mathbb{R}$, che, se positivo, tenderà a far allineare gli spin verso lo stato $+1$, se negativo, verso lo stato -1 . È allora ragionevole scrivere l’energia del modello di Curie-Weiss

La temperatura ubriaca

Abbiamo visto che, per un generico sistema di energia E , la sua distribuzione di equilibrio si legge $P(E) = e^{-E/T}/Z$, ma fino ad ora non ci siamo soffermati sul ruolo chiave della temperatura: sappiamo che un incremento di entropia si manifesta sovente trasportato dal calore (non per caso quando ascoltiamo musica a volume sostenuto e mettiamo la mano sull'amplificatore che la produce, questo si è scaldato) ma il legame tra temperatura e disordine è ancora oscuro. È immediato sincerarsi che se $T \gg E$ fondamentalmente la distribuzione di Boltzmann pesa uniformemente qualunque stato accessibile al sistema (mentre nel limite $T \rightarrow 0$ il sistema si impunta sull'unico stato di minima energia), quindi effettivamente T deve giocare un ruolo cruciale, e molto generale.

Come fa la temperatura, un'osservabile in linea di principio relegabile alle scienze applicate (fisica, chimica, etc.), ad avere un ruolo così saliente anche in un generale telaio inferenziale *à la* Jaynes (che si usa, per dire, anche in Economia ed in Intelligenza Artificiale)? Stiamo chiamando *temperatura* un concetto più generale? Sì.

La temperatura obbedisce l'equazione di Fourier, un'equazione alle derivate parziali dove il termine di derivata temporale è del primo ordine e quindi, se si applica il *time reversal*, si manda cioè $t \rightarrow -t$, il quadro che lei dipinge cambia completamente, cioè T percepisce la freccia del tempo (cosa che non avviene per esempio nella propagazione delle onde, fruendo i Dalambertiani anche di derivate temporali seconde e non prime).

L'equazione di Fourier si può ottenere mediante un attento passaggio al limite di un modello discreto chiamato *random walk* (o *drunk walk* per i più epicurei) che si può riassumere come segue: immaginiamo che il camminatore viva su una retta (discretizzata) e, ad ogni scoccare di orologio (ad esempio puntualmente ogni secondo), questi si muove a passi obbligati, con probabilità $1/2$ verso destra e $1/2$ verso sinistra. Nel *passaggio al continuo*, possiamo identificare la densità di probabilità $p(x, t)$ di trovare il camminatore nel punto x al tempo t proprio come la temperatura $T(x, t)$.

Se si prende questo camminatore come ragionevole modello di generatore di casualità, effettivamente capiamo che ad alte temperature lo scenario è dominato dal massimo disordine ed il caso favorisce la massima entropia, di contro diminuendo la temperatura, il principio di minima energia torna ad essere egemone ed il rigore scolpito nell'espressione dell'energia che di volta in volta si studia si manifesta macroscopicamente ordinando il sistema.

così⁶

$$\begin{aligned} E(\sigma|J, h) &= -\frac{1}{N} \sum_{i < j}^{N, N} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \\ &\sim -\frac{NJ}{2} m^2 - Nhm, \end{aligned} \quad (4)$$

⁶Questa ipotesi è chiamata di campo medio ed è alquanto irragionevole in Fisica, dove le interazioni scemano con la distanza, ma parimenti di largo uso in altre branche della Scienza, quali, per esempio, l'Intelligenza Artificiale [1] e la Sociologia Quantitativa [2]. D'altronde è matematicamente conveniente rispetto ad un modello più realistico in Fisica, come per esempio un modello reticolare $E = \sum_{i=1}^N J_i \sigma_i \sigma_{i+1}$ in cui gli accoppiamenti coinvolgono solo spin contigui. Infatti, mentre nel campo medio le somme su $i \in 1, \dots, N$ permettono di applicare Teoremi di Convergenza nel limite di volumi grandi, queste comodità si perdono nei reticoli, dove, anche se $N \rightarrow \infty$, i primi vicini (metrici) rimangono sempre gli stessi.

dove $m := N^{-1} \sum_{i=1}^N \sigma_i$ (con fortuito opportunismo, m può rappresentare tanto la *media aritmetica*, i.e., uno stimatore ottimale per l'inferenza statistica, per i Matematici quanto la *magnetizzazione* per i Fisici) rappresenta il *parametro d'ordine* del modello, a dire, un'osservabile in grado di discernere in quale fase viva il sistema (vide infra). Si noti che il fattore N che compare al denominatore del termine che esprime l'accoppiamento tra gli spin serve a garantire la linearità estensività della termodinamica, infatti, l'energia $E(\sigma|J, h)$ risulta scalare come un fattore N^1 che moltiplica oggetti che non crescono in N (seconda riga dell'eq. 4).

Chiaramente m è un parametro d'ordine poichè, se il sistema si trova nel regime ergodico (dominato dal caso imposto dalla massima entropia), per il Teorema del Limite Centrale (per un sistema sufficientemente

grande) risulta $m = 0^7$, di contro, se la temperatura permette agli spin di sentirsi reciprocamente (e quindi alla minima energia di imporsi), questi si allineano, risultando quindi in $m \neq 0$ (il lettore che non ha confidenza con l'energia sopra scritta spenda dieci secondi per sincerarsi che il termine di accoppiamento a due corpi $\sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$ tende a far allineare gli spin grazie al segno meno davanti ad esso, assunto $J_{ij} > 0$).

La fase ad alta temperatura è relativamente semplice da caratterizzare anche con l'opportuno rigore formale, mentre cesellare la fase a bassa temperatura di questo sistema è un poco più complicato. Qui, senza perderci in tecnicismi, capiamo intuitivamente cosa succede per $T \rightarrow 0$: gli spin tendono ad allinearsi ed il panorama energetico (*landscape*) è dato da due buche di potenziale, una con il minimo in $+m$ e l'altra con il minimo in $-m$ le quali, al crescere della taglia del sistema N , non proliferano ma semplicemente diventano via via più profonde, in maniera da rompere rigorosamente l'ergodicità intrappolando il sistema in una sola delle due buche, si veda figura 2, nel limite termodinamico $N \rightarrow \infty$.

Siamo arrivati a proporre una nostra prima definizione di sistema semplice: *Un sistema termodinamico è semplice quando il numero di minimi che compongono il suo panorama energetico (intendendo con "energia" l'energia libera a sua disposizione ovviamente) non cresce come funzione del suo volume N (i.e. del numero di particelle che lo compongono), proprio come nel Curie-Weiss (o nel VanDerWaals). Come stiamo per vedere, questo non vale nei sistemi complessi, cosa che avrà conseguenze piuttosto significative sulla loro Fisica.*

L'oscillatore armonico dei sistemi complessi: lo Sherrington-Kirkpatrick

A quasi un secolo di distanza, avendo investito incredibili sforzi nell'ottenere una Teoria Ergodica (sulla quale sorvoliamo totalmente, ma è una branca stupenda tra la Fisica e la Matematica), la rottura di ergodicità ci ha lasciati affascinati e sorpresi anche nei casi elementari quali il Curie-Weiss. D'altra parte, la nostra generazione, mentre studiava sui libri la rottura di simmetria per inversione di spin, ha vissuto come contemporanea la rottura di simmetria di replica, i.e. la rottura di invarianza permutazionale (che affrontiamo ora come paradigma dei sistemi complessi) e rimane sbalordita dalla stessa. In effetti, nonostante il fascino innegabile delle transizioni di fase, in realtà le proprietà emergenti del Curie-Weiss non sono poi così impreviste, poiché di fatto sono

⁷Ad alta temperatura l'energia non gioca un ruolo saliente quindi dovremmo aspettarci di riscontrare similitudini con il modello di Erhenfest: infatti, in un'analogia 1 : 1 tra palline blu e spin up e palline rosse e spin down, nel previo paragrafo trovavamo un ugual numero di palline in ogni buca, a dire $m = 0$.

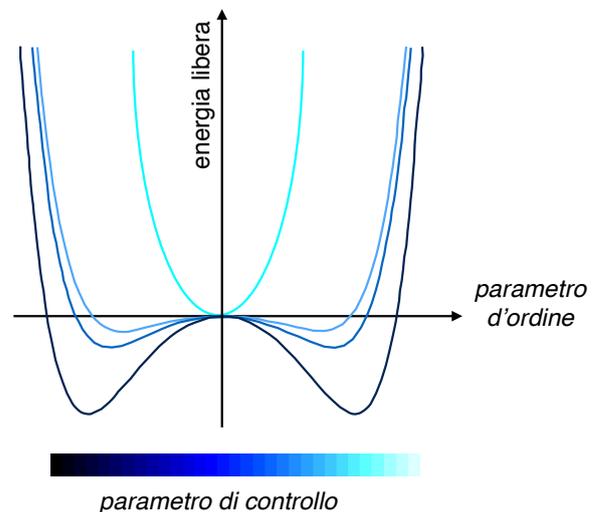


Figura 2: Rappresentazione schematica dell'energia libera in funzione del parametro d'ordine, al variare del parametro di controllo per un sistema semplice. Per il modello di Curie-Weiss descritto nel testo, m gioca il ruolo di parametro d'ordine e la temperatura T gioca il ruolo di parametro di controllo. Si noti che a basse temperature il profilo energetico presenta due buche, mentre ad alte temperature si ha un unico minimo corrispondente alla fase ergodica.

derivabili direttamente dalla forma dell'energia, si tratta solo di mettere gli spin in condizione di riuscire a sentirsi, cioè di abbassare il rumore temperatura opportunamente; al contrario, nei sistemi complessi il comportamento emergente non è immediatamente deducibile guardando alle interazioni microscopiche delle reti di elementi che li compongono.

A seguire discutiamo la meccanica statistica dei sistemi complessi -in gergo tecnico chiamati *vetri di spin* (spin glasses)- rubando maldestramente dalla Teoria di Giorgio Parisi [3] (e dalle successive formulazioni di Francesco Guerra [4] e Michel Talagrand [5]), e nell'ultima sezione dedicata ai Sistemi Dinamici, mostriamo come lo stesso passaggio logico (dal considerare reti di elementi solo coesivi al considerare reti in cui i costituenti elementari siano sia in coesione che in competizione) ci porti dagli equilibri di Malthus al caos deterministico [6].

Il primo concetto, che è anche quello cardine, che dobbiamo affrontare è quello della *frustrazione* (sostantivo preso in prestito, a ragione, dalla Psicologia, poiché nelle reti oggetto della presente digressione gli spin ricevono istruzioni conflittuali, rendendoli *frustrati*, si veda figura 3): nel Curie-Weiss, c'è solo *coesione* per cui gli spin lavorano sinergicamente per un bene comune, raggiungere la minima energia, l'unica minima energia possibile; cosa cambia quando questi devono anche competere, a dire, quando

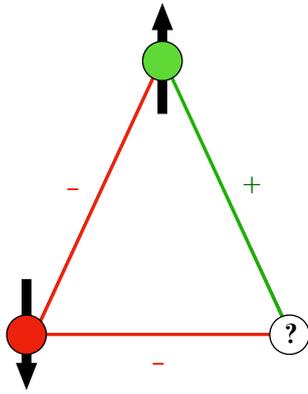


Figura 3: Questa figura, beché essenziale, permette di capire l'origine della frustrazione: gli archi rossi indicano un accoppiamento negativo, quello verde un accoppiamento positivo. Se lo spin in alto si allinea verso l'alto, lo spin in basso a sinistra è sollecitato ad orientarsi verso il basso ma così per allo spin in basso a destra arriveranno due stimoli contrastanti, rendendolo frustrato.

oltre ad avere accoppiamenti positivi $J > 0$ (ferromagnetici) che favoriscono l'allineamento, si hanno anche accoppiamenti negativi $J < 0$ (antiferromagnetici) che favoriscono l'antiallineamento e quindi generano competizione? Per sincerarci di lavorare nel regime più tumultuoso possibile, prenderemo gli accoppiamenti tra spin casuali, identicamente ed indipendentemente estratti da una Gaussiana $\mathcal{N}[0, 1]$, in maniera tale che si abbiano grossomodo la stessa quantità di *clausole*⁸ allineanti (e.g., $J_{14} = +1$, che vuole mettere paralleli σ_1 e σ_4) e di *clausole* anti-allineanti (e.g., $J_{23} = -1$, che vuole mettere anti-paralleli σ_2 e σ_3): non con poco stupore, vedremo che da questo scenario massimamente disordinato in realtà, come fenomeno emergente e spontaneo scaturisce un ordinamento supremo, l'*ultrametricità*.

Un'occhiata alla figura 4 ci fa capire subito come in questo caso il numero di minimi (tecnicamente stati stabili e metastabili) proliferi con il volume (addirittura crescendo *esponenzialmente* in N^9): un modello

⁸Quelli che in Fisica si chiamano *accoppiamenti* J_{ij} sono anche detti *archi* nella teoria dei grafi, o *clausole* in problemi di complessità algoritmica, o *sinapsi* (i.e. efficacie sinaptiche) nelle reti neurali o *weights* in machine learning e molto altro ancora, in ragione del campo di applicazione della meccanica statistica come telaio inferenziale di Jaynes.

⁹Se consideriamo spin binari, come quelli di Ising che stiamo usando, per un sistema di N spin esistono 2^N possibili configurazioni: un numero astronomico anche per N relativamente piccolo. Di contro è rimarchevole che, mettendoci a $T = 0$ per semplicità, il numero di minimi del sistema -se complesso- cresce parimenti esponenzialmente. Nei sistemi complessi, una fetta non così esigua dello spazio delle configurazioni è una solu-

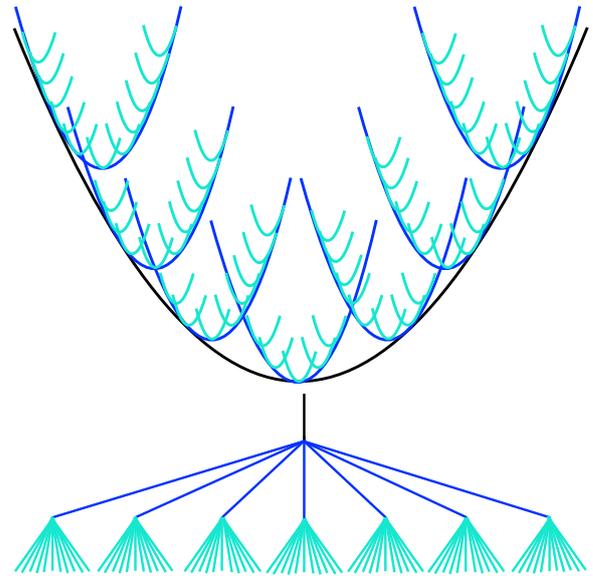


Figura 4: Rappresentazione schematica dell'energia libera di un sistema complesso (in alto) e della struttura ultrametrica (in basso). Nel grafico in alto si osserva come ogni buca dia luogo (al livello di rottura di simmetria di replica successivo) ad un proliferare di altre buche in essa annidate (quasi come se gli steps di RSB fossero ingrandimenti di un microscopio) e questo corrisponde, nel grafico in basso, ad avere una foliazione (non nell'accezione geologica del termine) di repliche (le quali numerano le pendici degli ultimi rami disegnati in basso) che sono identiche a gruppi: repliche nello stesso gruppo (foglie appartenenti allo stesso ramo) sono identiche ma, man mano, che si allontanano reciprocamente nell'albero, diventano via via diverse.

siffatto, sempre di campo medio, è stato introdotto da Sherrington e Kirkpatrick nel 1975 prendendo da loro il nome¹⁰, e rappresenta l'oscillatore armonico dei Sistemi Complessi nella Meccanica Statistica ed ha energia

$$E_{SK}(\sigma|J) = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i < j}^{N,N} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \sim \frac{N}{2} (1 - q_{ab}^2)$$

con $P(J_{ij})$ (i.e. la probabilità di estrarre un valore dell'interazione tra gli spin i e j) assunta Gaussiana ed indipendente ed identicamente distribuita per tutti gli accoppiamenti. Il parametro d'ordine q_{ab} che compare nell'ultima espressione al membro di destra,

zione, un compromesso di meta-stabilità... uno scenario alquanto diverso dal Curie-Weiss.

¹⁰Così come il modello di Curie-Weiss costituisce la versione campo-medio del modello di Ising-Lenz, il modello di Sherrington-Kirkpatrick costituisce la versione campo-medio del modello di Edwards-Anderson

chiamato *overlap* (o parametro d'ordine di Edward-Anderson) è meno intuitivo della magnetizzazione. Proviamo a capirci qualcosa: innanzitutto che si sia alle alte o alle basse temperature, dal punto di vista del previo parametro d'ordine $m := N^{-1} \sum_{i=1}^N \sigma_i$ poco cambia, questo è zero in entrambe le fasi. Quello che cambia è che, mentre nella fase ergodica (ad alta temperatura), gli spin si muovono continuamente e a casaccio, nella fase vetrosa (a bassa temperatura) gli spin rimangono congelati, ma sempre disordinatamente, quindi un'osservabile intelligente potrebbe essere la seguente: replichiamo il sistema, cioè, chiamata la copia originale del sistema *replica a* costruiamo una *replica b*, a dire una rete di spin che presenti la stessa identica realizzazione degli accoppiamenti della prima replica e vediamo quanto le rispettive configurazioni di spin, costrette ad obbedire alle stesse clausole, si assomigliano al variare del rumore (cioè della temperatura). Chiaramente la prospettiva di una soluzione unica è un miraggio: c'è un proliferare di compromessi più o meno buoni con cui il sistema dovrà barcamenarsi (come nella vita di tutti i giorni delle reti sociali), ma confrontare due configurazioni dovrebbe poter essere facile, in linea di principio basta fare il prodotto scalare tra queste e leggerne il valore, che null'altro è che l'overlap definito come $q_{ab} := N^{-1} \sum_{i=1}^N \sigma_i^a \sigma_i^b$. Questo sarà nullo a temperatura alta (poiché gli spin oscillano in continuazione in maniera scorrelata) mentre sarà diverso da zero a bassa temperatura, suggellando una certa similitudine tra i compromessi intrapresi dalla prima replica, rispetto a quelli scelti dalla seconda. . Come l'interazione tra spin nel Curie-Weiss rompe la simmetria di spin-flip a bassa temperatura, l'interazione tra repliche nello Sherrington-Kirkpatrick (che si vede con conti non elementari che qui non mostriamo), una volta raggiunta la temperatura critica, rompe la simmetria di replica: qui si ha la genesi della complessità, un'orgoglio in gran parte italiano (tralasciando numerosi contributi importanti, in estrema sintesi, la fenomenologia che stiamo per stilizzare è stata infatti prima euristicamente -ma esaustivamente- proposta da Giorgio Parisi in una serie di lavori conclusasi nel 1980 [3] e poi de facto dimostrata rigorosamente da Francesco Guerra in una serie di lavori conclusasi nel 2003 [4]).

La prima osservazione da fare, quando si rompe la simmetria di replica, è che il parametro d'ordine non è più automediante. Per capire questo concetto confrontiamo le distribuzioni del parametro d'ordine nel Curie-Weiss e nello Sherrington-Kirkpatrick nel limite termodinamico; indicando con \bar{m} e con \bar{q}_{ab} i rispettivi valori d'aspettazione, per il primo si ha

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P_N(m) = \begin{cases} 0 & \text{se } m = 0 \\ 1 & \text{se } m = \pm \bar{m} \end{cases}, \quad (5)$$

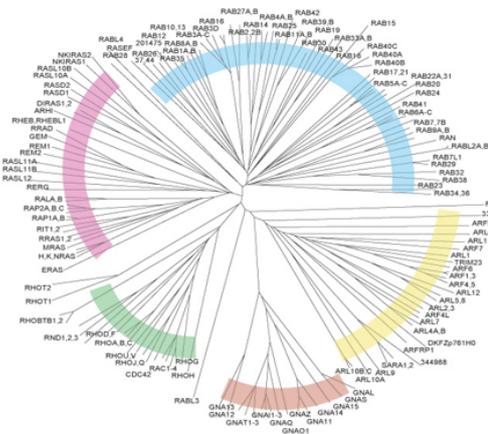
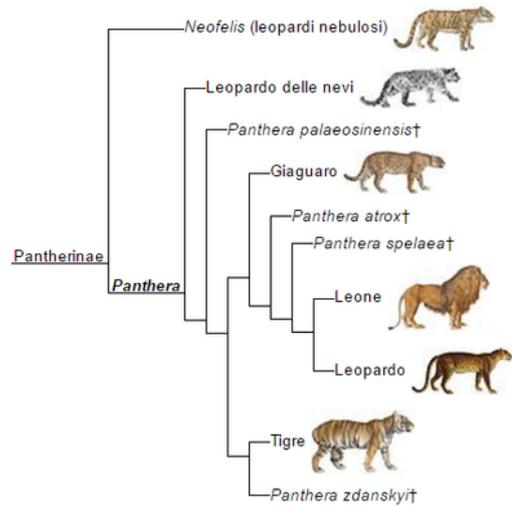


Figura 5: Esempi di sistemi ultrametrici. Dall'alto: cladogramma basato su uno studio filogenetico di V.A. Vero, et al. (2018) su felini viventi e fossili e che indica la relazione delle specie Pantherinae (una sottofamiglia di felidi); Dendrogramma della superfamiglia delle proteine RAS ottenuto da J. Colicelli (2011) (le lunghezze dei bracci sono direttamente proporzionali al numero delle differenze tra le sequenze confrontate).

perché più il sistema diventa grande, più i due minimi centrati su $\pm|\bar{m}|$ diventano profondi, mentre per il secondo

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P_N(q_{ab}) \neq \begin{cases} 0 & \text{se } q_{ab} = 0 \\ 1 & \text{se } q_{ab} = \pm \bar{q}_{ab} \end{cases}, \quad (6)$$

perché nei vetri di spin, più N cresce più le possibili soluzioni proliferano.

La seconda osservazione (legata ovviamente alla perdita dell'automedia per q_{ab}) riguarda il tipo di rottura e la scoperta dell'ultrametricità come proprietà di ordinamento spontaneo emergente¹¹: le repliche non

¹¹Uno spazio è ultrametrico se in esso la disuguaglianza triangolare è rafforzata in $d(x, z) \leq$

sono tutte uguali o, in altre parole, la soluzione che prevede che tutte assumano gli stessi compromessi, la soluzione *replica simmetrica*, è sbagliata e, per esempio, la distribuzione congiunta di tre repliche si scrive

$$P(q_{12}, q_{13}) = \frac{1}{2}P(q_{12})\delta(q_{12} - q_{13}) + \frac{1}{2}P(q_{12})P(q_{13}),$$

cioè con probabilità 1/2 gli overlap tra due repliche si comportano in maniera analoga (i.e. $q_{12} = q_{13}$, le repliche appartengono quindi allo stesso gruppo) e con probabilità 1/2 si comportano in maniera indipendente (la loro probabilità fattorizza e le repliche appartengono a gruppi diversi, si veda la foliazione riportata in Figura 4).

Inoltre, quando si rompe una simmetria, se esiste un sotto-gruppo proprio della stessa, il sistema si decompone rispettandolo: quando passiamo dalla fase di alta temperatura dello spin glass (che è replica simmetrica) alla fase vetrosa, nel rompersi la simmetria di replica (l'invarianza di permutazione) si approda ad un sottogruppo che è ancora invariante sotto permutazione: questa è l'unica simmetria che si può rompere (gerarchicamente) infinite volte (nel limite termodinamico), come rappresentato dalle matrici a blocchi di Paris a seguire (rispettivamente replica simmetrica Q_{RS} , ad uno step di rottura di simmetria di replica Q_{1RSB} e a due steps di rottura di simmetria di replica Q_{2RSB}). Con un volo pindarico, in maniera simile avviene il continuo biforcarsi delle possibilità di valori permessi dalla soluzione della mappa logistica di May (che tratteremo nella prossima sezione) al variare del suo parametro di controllo¹².

$$Q_{RS} = \begin{bmatrix} 1 & q_1 \\ q_1 & 1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_1 & q_1 & 1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_1 & q_1 & q_1 & 1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & 1 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & 1 & q_1 & q_1 \\ q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & 1 & q_1 \\ q_1 & 1 \end{bmatrix},$$

$$Q_{1RSB} = \begin{bmatrix} 1 & q_2 & q_2 & q_2 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_2 & 1 & q_2 & q_2 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_2 & q_2 & 1 & q_2 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_2 & q_2 & q_2 & 1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & 1 & q_2 & q_2 & q_2 \\ q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_2 & 1 & q_2 & q_2 \\ q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_2 & q_2 & 1 & q_2 \\ q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_2 & q_2 & q_2 & 1 \end{bmatrix},$$

$\max\{d(x, y), d(y, z)\}$.

¹²Nel presente scenario il parametro d'ordine è q_{ab} mentre il parametro di controllo è la temperatura T che regola l'intensità con cui gli spin percepiscono l'accoppiamento: di fatto vedremo che concettualmente è lo stesso parametro di controllo della mappa logistica.

$$Q_{2RSB} = \begin{bmatrix} 1 & q_3 & q_2 & q_2 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_3 & 1 & q_2 & q_2 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_2 & q_2 & 1 & q_3 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_2 & q_2 & q_3 & 1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_1 \\ q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & 1 & q_3 & q_2 & q_2 \\ q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_3 & 1 & q_2 & q_2 \\ q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_2 & q_2 & 1 & q_3 \\ q_1 & q_1 & q_1 & q_1 & q_2 & q_2 & q_3 & 1 \end{bmatrix}.$$

In relazione alla poliedricità delle applicazioni della meccanica statistica complessa, le conseguenze interpretative della rottura di simmetria di replica sono molto profonde: un sistema (i.e., una rete di elementi potenzialmente in interazione) senza la minima organizzazione a-prioristica, anzi lasciato a termalizzare nella sua anarchia (ma nel quale sia permesso ai suoi sudditi tanto di essere sinergici tra loro quanto, alla bisogna, di competere), si ordina spontaneamente secondo un ordinamento tassonomico (come l'ordinamento sociale sovrano, vassallo, valvassino, valvassore, etc, oppure, secondo l'ordinamento biologico degli alberi filogenetici, o semplicemente rispettando la catalogazione aristotelica della realtà in genere-specie¹³, si veda figura 5).

Come accennato in precedenza, questi oggetti si organizzano in valli gerarchicamente annidate l'una nell'altra, come mostrato in Figura 4, e la densità di queste buche è esponenziale, cioè esiste una moltitudine di piccoli e fragilissimi minimi, poi molti minimi relativamente più profondi, poi sempre meno minimi ancora più stabili e così via. Se stimiamo con $e^{E_k/T}$ il tempo di uscita da una buca di energia E_k a causa di una fluttuazione termica (il *tempo di Arrhenius*), effettivamente, in questa perenne termalizzazione, diventa sempre più difficile procedere: man mano che si visitano buche poco profonde (che sono le più abbondanti e dalle quali è relativamente facile uscire), ci si annida in buche più profonde. Da un lato questo è bene, poichè rispetto alle buche meno profonde ormai alle spalle queste sono più stabili, dall'altro è un male perchè ambire a buche ancora più profonde tende ad essere via via illusorio.

Con una densità degli stati esponenziale, un qualunque calcolo naïve di meccanica statistica smette di convergere quando $T \rightarrow T_c^+ \equiv 1$:

$$\bar{E} := \int E \rho(E) e^{-\frac{E}{T}} dE = \int E e^E e^{-\frac{E}{T}} dE,$$

quando $T = 1$ la densità degli stati si elide con l'esponenziale di Maxwell-Boltzmann, pertanto, il sistema rimane perennemente fuori dall'equilibrio, mostran-

¹³Questa proprietà emegente si renderà particolarmente interessante nello studio di un particolare vetro di spin: la rete neurale. Si veda a tal proposito il nostro contributo sul volume di Ithaca dedicato all'Intelligenza Artificiale.

do fenomeni non canonici in Fisica, quali l'*aging*. Infatti, questi vetri invecchiano¹⁴ rompendo uno dei capisaldi della Fisica, l'invarianza traslazionale nel tempo degli esperimenti (il principio di Galileo). Per chiarire questo concetto, assumiamo di fare un esperimento su un vetro di spin, per esempio di misurarne la suscettività in risposta ad un campo magnetico, ed assumiamo che l'esperimento debba durare 24 ore: troveremo che, se facciamo l'esperimento in momenti differenti della vita del vetro di spin avremo risposte differenti¹⁵, alla stregua di quanto ci aspettiamo da un sistema biologico, infatti, citando Peter Sollich: *One of the core ideas of statistical mechanics is that equilibrium states can be accurately described in terms of only a small number of thermodynamic variables, such as temperature and pressure. For glassy systems, which can remain far from equilibrium on very long time scales, no similar simplification exists a priori; the whole past history of a sample is in principle required to specify its state at a given time* [7].

In relazione alla farraginosità della Matematica della Meccanica Statistica complessa, si pensi che nella prima formulazione – mediante il *replica trick* – il conto prevede di esprimere un logaritmo mediante la relazione $N^{-1} \ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{nN}$, in cui N rappresenta il numero di spin ed n quello delle repliche: poiché il numero di coppie di repliche che possono supplire informazione a q_{ab} è $n(n-1)/2$, prendendo un qualunque $n \in (0, 1)$, alla volta del prolungamento analitico $n \rightarrow 0$, il numero di coppie con cui si ha a che fare è negativo... Michel Talagrand, uno dei più stimati probabilisti francesi (e che ha giocato un ruolo cruciale nel riformulare in maniera matematica rigorosa la teoria dei vetri di spin), ha chiamato il suo libro *Spin Glasses: a challenge for Mathematicians* [5].

Parte Tre (dinamica): Semplice versus Complesso nei Sistemi Dinamici

Per introdurre il lettore al chaos deterministico (e.g., l'*effetto farfalla*) di solito si usa il modello di Edward Lorenz di impiego nella meteorologia, ma qui, prefe-

¹⁴Si può anche dimostrare rigorosamente che ogni step di rottura di simmetria di replica (RSB) aggiunge una scala di tempo alla termalizzazione ed, essendo la soluzione del modello di SK *full-RSB*, la termalizzazione di fatto non si completa mai.

¹⁵Il fenomeno dell'*aging* implica anche la violazione da parte di questi sistemi del Teorema di Fluttuazione-Dissipazione. L'*aging* si può apprezzare anche nei vetri strutturali per esempio osservando come questi filtrano la luce in vecchie abbazie che li espongono secolari: l'intensità della luce nella parte alta del vetro è maggiore perchè il vetro *sta colando* su scala di tempo dei millenni per effetto della forza di gravità.

rendo la Biologia alla Fisica, discuteremo il modello del biologo Robert May che descrive la crescita di una cultura batterica, e vedremo come la caoticità mostri profonde similitudini con la complessità.

Per onestà intellettuale è d'obbligo notare che il padre ante litteram del chaos deterministico è, a buona ragione, Henry Poincarè: infatti nei suoi piccoli denominatori, che trovava per via perturbativa studiando il problema dei tre corpi, aveva già di fatto inferto il colpo letale al determinismo, anche in sistemi del tutto scevri di una trattazione probabilistica. Questa materia è oggetto di studio dei *Sistemi Dinamici* più che della *Meccanica Statistica*, sebbene le due discipline siano fortemente legate, perennemente congiunte dalla Teoria Ergodica, la loro fede nuziale.

Il chaos deterministico

Consideriamo una concentrazione batterica libera di duplicarsi in un disco di Petri¹⁶, ed assumiamo che sia $C = 0$ la concentrazione nulla e $C = 1$ la concentrazione massima (per la quale l'intero disco è saturo di batteri), quindi $C \in (0, 1)$. Assumiamo inoltre che, come certamente ragionevole all'inizio (per concentrazioni basse, dove non ci sia necessità di competere per le risorse) un buon modello per gestire la loro proliferazione sia l'ormai classico sistema dinamico $\dot{C} = AC$, ma in una sua versione discretizzata e, al fine di tenere la trattazione originale (chiamando il parametro $A \rightarrow r$), scriviamo la mappa

$$C_{t+1} = rC_t,$$

dove C_t rappresenta la concentrazione al passo iterativo t -esimo. L'equilibrio, la soluzione per tempi lunghi di questo modello, è trasparente: se $r > 1$ i batteri colonizzano l'intera cella di Petri, se $r < 1$ muoiono e la cella rimane vuota: due sole soluzioni limite, proprio come nel Curie-Weiss dove gli spin possono interagire solo in maniera coesiva e non competono.

Ma cosa succede se vogliamo rendere il modello più realistico ed in prima istanza ci rendiamo conto che questi batteri non vivono nel giardino dell'Eden ma nel disco del Petri in cui il loro nutrimento esiste in quantità finita? La mappa precedente deve essere rivista per tener conto di effetti competitivi: per questo, nel 1976, Robert May introdusse la *mappa logistica* che costituisce una versione discreta del modello demografico precedentemente introdotto dal matematico Pierre François Verhulst nel quale siano presenti sia

¹⁶La piastra di Petri è un recipiente piatto di vetro o plastica, solitamente di forma cilindrica e costituisce un importante strumento di lavoro in molti campi della Biologia, in particolare per la crescita di colture cellulari.

coesione che competizione, cioè

$$C_{t+1} = rC_t \cdot (1 - C_t), \quad (7)$$

il cui significato è di nuovo trasparente – il fattore $1 - C_t$ determina un rallentamento nella crescita della concentrazione, tanto più significativo quando più grande è la concentrazione – ma la sua soluzione stavolta meno. Come sintetizzato in figura 6 se $r \in [0, 1)$, la popolazione calerà fino a morire, indipendentemente dal valore iniziale della popolazione; se $r \in [1, 3)$, la popolazione andrà a stabilirsi al valore $(r - 1)/r$;

se $r \in [3, r_c)$, per quasi tutte le condizioni iniziali, la popolazione arriva ad oscillare indefinitamente tra un certo numero (crescente con r e potenza di 2) di valori dipendenti da r , si ha cioè una cascata di biforcazioni con raddoppiamento del periodo; se $r > r_c \approx 3.56995$ si ha l'insorgenza del caos.

Quando il sistema si trova in una fase caotica, anche se conosciamo l'equazione che governa il modello e la condizione di Cauchy, è comunque impossibile prevedere cosa succederà per tempi lunghi. Cerchiamo di approfondire il concetto: per sviscerare meglio la genesi dell'erraticità della mappa logistica, analizziamola per un particolare valore del parametro di controllo, per $r = 4$ (in pieno regime caotico quindi). Con $r = 4$ esiste un cambio di variabili fortuito che rende trasparenti le iterazioni della mappa logistica: $C_t = [1 - \cos(2\pi\theta_t)]/2$. Passando a variabili angolari l'equazione (7) diventa $\theta_{t+1} = 2\theta_t$.

Scriviamo ora la condizione iniziale θ_0 in un alfabeto binario per semplicità, per esempio $\theta_0 = (0, 1, 1, 1, 0, 1, 0, 1)$ cioè $0 + 1/2 + 1/8 + 1/16 + 0/32 + 1/64 + 0/128 + 1/256 = (128 + 64 + 32 + 8 + 2)/256 = 117/128 \sim 0.9$. Prima di procedere, senza scomodare Werner Heisenberg, ricordiamo che qualunque strumento di misura ha una risoluzione finita, quindi è impossibile conoscere perfettamente la condizione iniziale (la stringa di numeri binari di cui sopra deve essere finita). Quest'osservazione è cruciale perchè la mappa logistica in alfabeto binario, per $r = 4$, non fa altro che prendere la stringa iniziale e, ad ogni iterazione, traslarla rigidamente verso sinistra, di un'unità, quindi $\theta_1 = (1, 1, 1, 0, 1, 0, 1, ?) \rightarrow \theta_2 = (1, 1, 0, 1, 0, 1, ?, ?)$, etc... Pertanto, se conosciamo la condizione iniziale con N cifre significative, dopo N interazioni la mappa avrà perso completamente ricordo della condizione iniziale θ_0 e si comporterà come un cammino aleatorio (e.g., con uno spettro di potenza bianco)¹⁷.

Questa caratteristica della mappa logistica, un sistema dinamico non-lineare, è oltremodo diversa rispetto alla sua controparte lineare, infatti è proprio nella

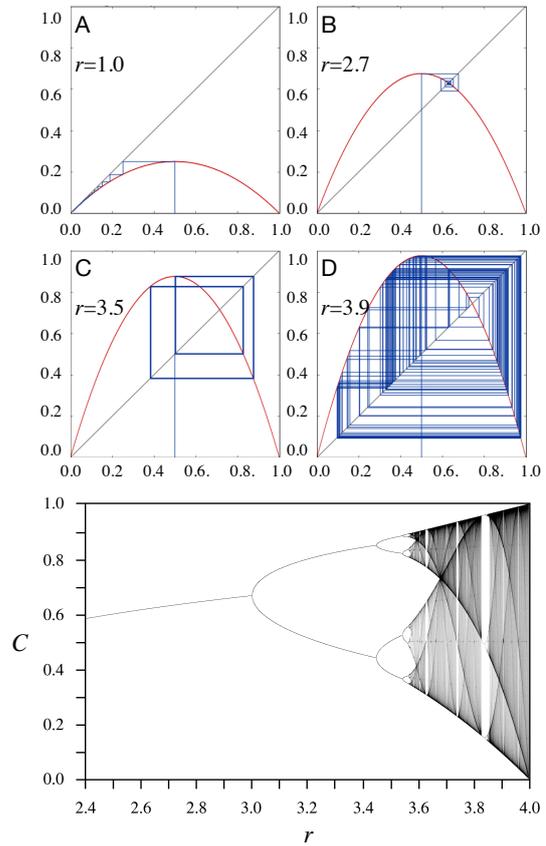


Figura 6: Diagramma a ragnatela o diagramma di Verhulst (in alto) e diagramma di biforcazione (in basso) per la mappa logistica (7). Attraverso il diagramma a ragnatela è possibile dedurre lo stato a lungo termine di una condizione iniziale in seguito all'applicazione ripetuta della mappa: un punto fisso stabile corrisponde ad una spirale interna (A, B), un punto fisso instabile corrisponde ad una esterna, un'orbita di periodo 2 è rappresentata da un rettangolo (C), mentre cicli di periodo maggiore producono linee chiuse di forma più complessa, un'orbita caotica apparirebbe invece come un'area densamente colorata (D) ad indicare un numero infinito di valori non ripetuti. Nel diagramma di biforcazione l'asse orizzontale mostra i valori del parametro r , mentre quello verticale mostra il relativo valore di C_t , con t che tende all'infinito.

linearità che lo schema di riduzione affonda le sue radici: l'oscillatore armonico con cui abbiamo iniziato, a dire $\frac{d^2y}{dt^2} = -\omega^2y$, o scritto in termini di sistema dinamico $\dot{x} = Ax$ come

$$\frac{dx_1}{dt} = x_2, \quad \frac{dx_2}{dt} = -\omega^2x_1,$$

¹⁷Rimandiamo alla digressione sulla temperatura ubriaca affrontata nel box.

ha soluzione esplicita

$$\begin{aligned}x_1(t) &= x_1(0) \cos(\omega t) + x_2(0) \omega^{-1} \sin(\omega t), \\x_2(t) &= x_2(0) \cos(\omega t) - x_1(0) \omega^{-1} \sin(\omega t),\end{aligned}$$

che porta ad una stima dell'incertezza nella sua evoluzione sempre limitata e pari a

$$\begin{aligned}|\delta x|^2 &= \delta x_1^2(t) + \delta x_2^2(t) \\&< (1 + \omega^{+2} + \omega^{-2})(\delta x_1^2(0) + \delta x_2^2(0)),\end{aligned}$$

d'altronde, per i sistemi lineari, l'incertezza rimane sempre polinomiale, a dire $|\delta x(t)| := |x(t) - x'(t)| \sim \epsilon(1 + \mathcal{P}(t))$ con $\mathcal{P}(t)$ non esponenziale (\mathcal{P} sta per "polinomiale") [6].

Nel vedere il paradigma classico (storicamente egemone) di un mondo governato da leggi deterministiche (e, in un certo senso, rassicurantemente prevedibile) sgretolarsi non appena si abbandona il telaio del (vero) oscillatore armonico e nel veder nascere spontaneamente l'ordine dal caso, ci si ferma a riflettere (d'altronde che una costante di Liptshitz positiva nell'evoluzione delle soluzioni di un'equazione differenziale ci avvertisse di una potenziale dipartita esponenziale tra due traiettorie inizialmente contigue era noto per fino a Liptshitz...).

Forse con il determinismo del riduzionismo abbiamo costruito un'Ingegneria che ci permette di leggere di notte e volare da un continente all'altro, ma -ad oggi- meno serve a comprendere fenomeni biologici, dall'omeostasi della singola cellula alla costruzione della Biblioteca di Alessandria (non nell'accezione tecnica del sostantivo *costruzione*, quello lo sappiamo fare, ma come esigenza collettiva emergente della nostra necessita' di sapere), di contro, proprio nel comprendere i limiti dell'approccio di riduzione troviamo una via per superarlo: è una via la cui pavimentazione è iniziata da poco se si guarda al progresso scientifico nel suo complesso, ma i suoi lastroni vengono posizionati con un rinato positivismo (di cui, a nostro avviso, un esempio calzante è offerto dagli sforzi di Luca Peliti [8] nel riformulare mediante la meccanica statistica degli spin-glasses la teoria neutrale dell'evoluzione di Mooto Kimura [9]).

In concerto con il contributo dei colleghi Nando Boero e Giampaolo Co' presente sul numero parallelo di Ithaca Educational dedicato ai Sistemi Complessi, per chiudere questo articolo divulgativo parafrasando un padre fondatore che ha contribuito tanto al telaio riduzionista quanto lo ha messo in dubbio ponendo i pilastri della Teoria della Probabilità, *ce que nous connaissons est peu de chose, ce que nous ignorons est immense*.



- [1] D.J. Amit: *Modeling brain function* Cambridge Press, Cambridge (1985).
- [2] S.N. Durlauf: *How can statistical mechanics contribute to social science?*, Proceedings of the national academy of sciences, 96 (1999) 10582.
- [3] G. Parisi, M. Mezard, M.A. Virasoro: *Spin glass theory and beyond: An Introduction to the Replica Method and Its Applications* World Scientific Publishing, Singapore (1987).
- [4] F. Guerra: *Broken replica symmetry bounds in the mean field spin glass model*, Communications in Mathematical Physics, 233 (2003) 1.
- [5] M. Talagrand: *Spin glasses: a challenge for mathematicians* Springer Science, Paris (2003).
- [6] A. Vulpiani, et al.: *Chaos and coarse graining in statistical mechanics* Cambridge Press, Cambridge (2008).
- [7] P. Sollich: *Fluctuation-dissipation relations and effective temperatures in simple non-mean field systems*, Journal of Physics C, 12 (2002) 1683.
- [8] L. Peliti: *Introduction to the statistical theory of Darwinian evolution* Lectures at the Summer College on Frustrated System, Trieste (1997).
- [9] M. Kimura: *The neutral theory of molecular evolution* Cambridge University Press, Cambridge (1983).



Elena Agliari: è ricercatrice in Fisica Matematica presso Sapienza Università di Roma, dove insegna -tra i vari- *Metodi Matematici per le Reti Neurali*. Si occupa di principalmente di Meccanica Statistica dei Sistemi Complessi, Teoria dei Grafi e Processi Stocastici, con particolare attenzione alle loro applicazioni nella Biologia e nell'Intelligenza Artificiale. Ha all'attivo un centinaio di articoli scientifici di cui gran parte coautorati con Adriano Barra e Francesco Guerra.

Adriano Barra: è professore associato in Fisica Matematica presso l'Università del Salento, dove insegna -tra gli altri- *Metodi Matematici per l'Intelligenza Artificiale* (ed in passato *Sistemi Complessi* per la Scuola Superiore ISUFI). Si occupa di principalmente di Meccanica Statistica dei Sistemi Complessi, Teoria dei Grafi e Processi Stocastici, con particolare attenzione alle loro applicazioni nella Biologia e nell'Intelligenza Artificiale. Ha all'attivo un centinaio di articoli scientifici di cui gran parte coautorati con Elena Agliari e Francesco Guerra, di cui è stato il collaboratore primario per quindici anni (dal 2002 al 2017).

