

MASTER IN COMUNICAZIONE DELLA SCIENZA DELLA SISSA DI TRIESTE

**COMUNICARE LA SIMULAZIONE
NUMERICA UN PERCORSO STORICO**

Tesi di:

Francesca Riccioni

Relatore:

Nico Pitrelli

Febbraio 2008

A tutti coloro che si sentono stretti in una morsa

Indice

Introduzione	4
Una storia da raccontare	5
Capitolo 1	9
La fisica e il problema degli n corpi	12
Cenni di preistoria. Un aneddoto	15
Il metodo Monte Carlo. Fatti e personaggi	18
Il metodo Monte Carlo. I testi scientifici dal 1953 al 1984	21
Capitolo 2	38
Comunicare o divulgare?	39
Simulazione e società. Un'applicazione per il futuro	41
Immaginario e rappresentazioni sociali	44
Conclusioni	46
Bibliografia	48

*Non bisogna mai esaurire un argomento
Al punto che al lettore non resti più nulla da fare.*

Non si tratta di far leggere ma di far pensare.

Charles-Louis de Montesquieu, 1748

Introduzione

Proporremo una breve indagine su come, su quali basi scientifiche e in quale contesto storico - tecnologico, uno dei metodi matematici che stanno alla base della simulazione numerica sia nato e abbia acquisito nel tempo un'importanza tale da contribuire a fare della simulazione un nuovo paradigma metodologico. In particolare, per restringere il campo di indagine, ci riferiremo al metodo Monte Carlo e alle sue applicazioni in fisica della materia condensata.

Più in generale l'approccio simulativo ha cambiato l'ambizione nella risoluzione dei problemi proposti alla fisica teorica. Gli scopi della fisica teorica si sono arricchiti e amplificati, permeando altre discipline scientifiche, perché la simulazione numerica si è posta come risposta esplicita alla complessità sperimentale. Problemi risolvibili analiticamente soltanto in casi particolari e non realistici si sono potuti affrontare di "bruta forza" giungendo a risultati scientificamente acquisibili.

Nonostante il successo e uso delle simulazioni numeriche nelle più disparate discipline, la nascita delle idee attorno a questo nuovo modo di studiare la realtà è un problema poco studiato nella storia della fisica. Ancor di meno è stata affrontata la questione di come diffondere le vicende, i personaggi e le teorie fondamentali delle simulazioni a un pubblico di non addetti ai lavori.

Saranno, infatti, tema di discussione le modalità possibili attraverso le quali un messaggio così specialistico possa essere trasmesso a un più largo pubblico.

Una storia da raccontare

Le simulazioni numeriche sono uno strumento che ha cambiato radicalmente il modo di fare fisica e che si pone oggi come una terza possibilità di indagare il mondo naturale oltre ai due tradizionali, vale a dire gli esperimenti in laboratorio e le teorie.

L'affermarsi della simulazione numerica in molte discipline scientifiche, dalla fisica alla biologia, e la nascita delle idee attorno a questo nuovo modo di studiare la realtà,

pone le basi per future indagini di tipo storico e sociologico attorno a questa comunità di scienziati emergente. Chiunque chieda a uno scienziato, anche tra i simulatori, “Che cos’è, in fisica, la simulazione?”, egli, scegliendo la strada più breve, risponderà: “È una terza via che, con l’ausilio di grandi calcolatori, corre a metà tra la fisica teorica e la fisica sperimentale”.¹ Ma c’è anche qualcuno che non la pensa così, o meglio, che non la pensa *più* così alla luce del grande sviluppo che questa disciplina scientifica ha attraversato fin dagli anni Cinquanta e della maturità che ha meritatamente conquistato entrando a far parte della fisica teorica a tutti gli effetti.

Lo studio dei sistemi termodinamici con la simulazione permette di avere una sintesi in tempo reale tra teoria ed esperimento. Come, infatti, afferma Jean-Pierre Hansen², professore di chimica computazionale all’università di Cambridge, gli esperimenti al computer, in meccanica statistica e in materia condensata, sviluppati a partire dagli anni Cinquanta con la comparsa dei primi calcolatori, sono adesso strumento diffuso e indispensabile in molti campi della fisica e della chimica e sono legittimamente considerati alla stregua degli esperimenti di laboratorio e della teoria. È naturale che la lettura e la percezione del potere di un metodo scientifico cambia drasticamente se si ascoltano punti di vista provenienti dall’interno o dall’esterno della comunità. Ed è proprio su questa percezione che si gioca il ruolo e l’entità della narrazione dei fatti e delle idee legate alla simulazione numerica: le fonti, ovvero oggi soltanto chi *pratica* la simulazione nelle università e nei centri di ricerca, munito delle sue pubblicazioni scientifiche iperspecialistiche, sa che cosa è importante e *interessante* narrare a un pubblico allargato?

La simulazione, che ha cominciato il suo cammino in sordina nei laboratori di Los Alamos e che ha pagato a ogni conquista scientifica il confronto con il potere dimostrativo della sperimentazione tradizionale e con la purezza dei risultati teorici, è oggi uno dei campi di ricerca più fertili che apre prospettive multidisciplinari in biologia, chimica, fisica dello stato solido, scienze dei materiali, geofisica, climatologia, proprio perché è riuscita a sondare terreni di ricerca dove gli altri due approcci trovavano limiti.

Il carattere multidisciplinare di questa pratica il cui sviluppo, inutile dirlo, va di pari

¹ Intervista a Michele PARRINELLO, Il Sole 24 Ore, 26 Aprile 2007

² HANSEN, Jean-Pierre, “An Introduction to molecular dynamics, with applications to the glass transition”, *Computer simulation in material science*, a cura di Madeleine Meyer e Vassilis Pontikis

passo con il potenziamento tecnologico dei calcolatori, fa sì che l'origine della simulazione come disciplina scientifica a tutti gli effetti scaturisca da una convergenza di esigenze e contributi provenienti da numerosi rami della ricerca scientifica. Esigenze che spesso rimanevano irrisolte appellandosi ai metodi di ricerca più tradizionali.

Domande a cui oggi la simulazione può dare una risposta sono state formulate molto tempo prima dei vagiti del primo calcolatore e delle prime implementazioni di algoritmi in grado di descrivere e far evolvere i sistemi fisici da studiare.

Il primo a formulare la tendenza e lo spirito che governano ancora oggi la simulazione fu il marchese Pierre Simon De Laplace (1749 – 1827), matematico francese. Egli era convinto che una volta comprese e descritte matematicamente tutte le forze che “animano” la natura e le rispettive posizioni dei corpi che la compongono e una volta riusciti a sottoporre i dati descrittivi ad analisi matematiche, saremmo arrivati a conoscere il passato, a capire il presente e a prevedere il futuro di ogni sistema preso in esame.

L'idea baconiana di scienza come potere, controllo e previsione sul mondo è stata totalmente realizzata dall'idea meccanicistica di Galilei e Newton. Addirittura quelle che noi vediamo come revisioni della meccanica classica, come cambiamenti di paradigmi (la relatività e la meccanica quantistica), in realtà “non hanno riguardato l'intero edificio della spiegazione scientifica dell'universo, quanto la consistenza interna di alcuni presupposti”.³

Negli anni Trenta, con l'introduzione dell'approccio statistico e il completamento della teoria quantistica da parte di Schrödinger, Pauli e Dirac, la fisica teorica ha ampliato enormemente le sue capacità esplicative e predittive. Se per via teorica si riuscivano a raggiungere capacità di previsione importanti, dal punto di vista pratico non era facile andare lontano. La simulazione numerica ha ovviato all'incapacità dei metodi tradizionali (analitici) della fisica teorica di risolvere non solo casi particolari di problemi generali. L'introduzione della potenza di calcolo e la richiesta di algoritmi a fianco dei metodi di lavoro in fisica teorica tradizionali (modello descrittivo e risoluzione per via analitica dello stesso) comporta un importante cambiamento epistemologico: il progresso scientifico non è più aggiunta di nuove leggi scientifiche,

³ CICCOTTI, Giovanni, “Il computer, macchina dei sogni della Fisica Teorica”, *Lettera internazionale*, 61, terzo trimestre, 1999

ma derivazione di *tutte* le conseguenze dalle leggi conosciute, ed è per questo che oggi molta della fisica teorica è diventata simulativa.⁴ Non solo, la simulazione permette l'applicazione dei modelli a un numero maggiore di condizioni e aumenta la casistica di verifica del modello, ma diventa anche mezzo di scoperta attraverso la capacità di seguire i comportamenti di un sistema da uno stato all'altro, passo per passo, in cerca di nuove condizioni termodinamiche relative ai rispettivi stati del sistema.

Entrando nel merito dei problemi proposti dalla fisica della materia condensata, branca della fisica teorica che studia le proprietà fisiche microscopiche della materia, già nel 1935, Wigner e Huntington⁵ posero la domanda: come mai l'idrogeno, che ha un solo elettrone, forma a basse pressioni un solido molecolare e isolante? Questi autori supposero che l'idrogeno solido doveva subire, ad alta pressione, una transizione da molecolare a monoatomico e, quindi, da isolante a metallo. Ma come verificare sperimentalmente la supposizione di Wigner e Huntington se solo dieci anni dopo, nel 1946, gli esperimenti di Bridgman riuscirono a riprodurre in laboratorio la pressione più elevata mai riprodotta di 100000 kg/cm², comunque insufficiente a produrre idrogeno monoatomico?

Le domande di Wigner e Huntington sono solo un esempio per comprendere come esperimenti che fino agli anni Cinquanta rimanevano "esperimenti di pensiero", abbiano via via trovato nella simulazione una strada nuova per essere risolti e un "non-luogo" in cui verificarsi ed essere osservati.

Superare le barriere del laboratorio e i limiti dei tradizionali metodi analitici è stato il motore propulsivo del lavoro di questi nuovi fisici, i simulatori. Il problema generale a cui si rivolge la simulazione è quello che viene chiamato "degli n corpi". Tecniche analitiche per affrontare completamente il problema o non ci sono o richiedono enormi quantità di calcolo. La simulazione ha tentato e proposto una strada alternativa per risolvere questo problema evitando di restar inchiodati ad approssimazioni povere o "calcolisticamente" pesanti.

Nel prossimo capitolo saranno presentati alcuni *momenti* narrativi che tentano, per il linguaggio e per la scelta dei contenuti di avvicinare un pubblico di non addetti ai lavori alla parte più scientificamente rigorosa che prende come fonti direttamente gli

⁴ CICCOTTI, Giovanni, "Il computer, macchina dei sogni della Fisica Teorica", *Lettera internazionale*, 61, terzo trimestre, 1999

⁵ E.P. WIGNER and H.P. HUNTINGTON, *The Journal of Chemical Physics*, 3, 764, 1935

articoli specialistici. C'è da dire che la storia delle idee attraverso di essi, chiave narrativa scelta, in questo caso, proprio dagli addetti ai lavori, è risultata difficilmente comprensibile anche a un pubblico di studiosi che non si sono occupati di simulazione nello specifico. Nasce quindi da questa constatazione un interrogativo più profondo: quali devono essere i modi, e quali i contenuti da scegliere, per divulgare una storia di idee scientifiche, prodotti di conoscenza prettamente interna alla comunità scientifica, a un pubblico che ormai vive la scienza nelle sue forme *post-normali*, ovvero ne è invaso e se ne sente parte?

Nel capitolo successivo sarà quindi presentata una riflessione sull'ultimo interrogativo. Si porrà l'attenzione sul ruolo del *comunicatore della scienza*, sulla differenza tra comunicazione e divulgazione e sulla scelta del pubblico. Essa rischia, infatti, di dipendere, nel momento della progettazione del prodotto comunicativo, dalla volontà inconscia di parlare ai propri *simili* (per cultura e appartenenza alla comunità). Tutto sarà affrontato nel caso specifico della storia delle origini della simulazione numerica.

Capitolo 1

In questa parte sono proposti e presentati momenti narrativi visti sia come vere e proprie chiavi di lettura *monodisciplinari* per una stesura della storia delle origini della simulazione numerica, sia come diverse parti di un approccio più generale e *multidisciplinare*, che tenta di toccare, coinvolgere, amalgamare idee scientifiche e fatti storici, politici, comunicativi, di una storia non solo narrante della nascita di un metodo scientifico, ma anche dello sviluppo di una comunità di nuovi scienziati che sono stati in grado di far crescere una disciplina parallelamente al cambiamento che la scienza ha attraversato negli ultimi cinquanta anni.

La simulazione, e di seguito la comunità di scienziati che la praticano, sembra, infatti, avere in sé i numeri per conquistare un posto considerevolmente importante nello sviluppo futuro della scienza. La sua doppia valenza di *metodo* e *disciplina* è una caratteristica cruciale per l'avanzamento nella società e l'intrusività all'interno della comunità scientifica *tout court* di questo nuovo gruppo di scienziati.

Si partirà da un problema *antico*, legato strettamente alle problematiche di base della fisica e che accompagna tutta la ricerca in fisica: il “problema degli n corpi”.

Tale problema non è solo correlato al raggiungimento del potere predittivo su un sistema di particelle, ma affianca, e in un certo senso traduce, l’arcaica volontà di controllo della scienza sulla natura.

La fisica simulativa, o fisica *computazionale*, si autocaratterizza⁶ con un approccio estremamente deterministico, dovuto alla tendenza di capire passo per passo, con strette relazioni di causa-effetto, l’evoluzione *realistica* di un sistema fisico. Tutto questo sembra porre altre risposte, in chiave più prettamente riduzionistica, alle domande poste dal filone di ricerca che si occupa di complessità e sistemi complessi.

A tale proposito, ma non sarà questa la sede della riflessione, Domenico Parisi, nel saggio *Simulazioni. La realtà rifatta nel computer*, mette a confronto la simulazione utilizzata per le scienze della natura (fisica, chimica) e la simulazione utilizzata invece per le scienze umane (psicologia, economia, storia), affermando che la vera rivoluzione, per aumento del potere conoscitivo, che porterà la simulazione, sarà nelle scienze umane, ovvero nella trattazione e risoluzione di quei sistemi più difficilmente modellizzabili e controllabili. Essa dona, infatti, a tali discipline una possibilità mai avuta; di avvicinarsi a essere trattate con un metodo scientificamente riconosciuto, attraverso modelli, parametrizzazioni, ripetibilità delle condizioni al contorno, pur rispettando la loro complessità e multifattorialità.

La fisica la fanno gli uomini, gli stessi uomini che si muovono nel tempo e nello spazio dando vita alla storia che si tinge di scienza. È quindi il momento dell’aneddoto storico, raccontato nel paragrafo successivo.

Che piaccia o meno, l’aneddoto è una trovata narrativa che senza alcun dubbio sa avvicinare un pubblico a una storia di scienza. Che lo scienziato sia più pazzo o più “umano”, assecondare un’idea del pubblico o, al contrario, confliggere con essa attraverso una provocazione, spinge l’interlocutore a una reazione, aumentandone l’attenzione e la curiosità per ciò che stiamo raccontando.⁷ L’aneddoto è una pausa, un *pezzo facile*, un momento di respiro, quasi un’indiscrezione da gossip scientifico, da integrare alla storia delle idee a volte un po’ asettica.

⁶ Colloquio con Stefano BARONI, professore ordinario in Condensed matter alla Sissa di Trieste e direttore del Centro di ricerca e sviluppo DEMOCRITOS (Democritos Modelling Center for Research on aTOMistic Simulation) del Cnr-Infm di Trieste

⁷ MERZAGORA Matteo, *Scienza da vedere*, Sironi Editore, Milano, 2006

La storia dell'origine delle simulazioni, ha un altro punto interessante a suo favore, e a favore soprattutto della narrazione. I fatti storici che fanno da cornice agli eventi scientifici, ovvero la nascita dei laboratori di Los Alamos durante il periodo bellico, la Grande Guerra, il via vai di cervelli dall'Europa agli Stati Uniti, permeano l'immaginario di tutti noi, ma, in particolare, pongono fortemente all'interno della società le motivazioni e i perché della nascita e dello sviluppo della disciplina. "Gruppi eterogenei, e di grandi dimensioni lavorano a progetti di carattere interdisciplinare, con ingenti fondi e sottoposti a ingenti forme di controllo e direzione della ricerca", in questo modo Pitrelli e Castelfranchi descrivono la *tecnoscienza* durante il colossale Progetto Manhattan. Si narrano fatti passati, ma sono pregni di ciò che la scienza sta vivendo ancora adesso. Viene, infatti, da candidare la simulazione unita al suo primordiale contesto storico, una disciplina che precocemente si inserisce nel *frame* post-accademico⁸.

Andando poi nel particolare, come avvicinandosi sui fatti con una lente di ingrandimento, si guarnisce la nascita di un metodo statistico usato ancora oggi, il metodo Monte Carlo, degli intrecci delle storie umane che ne hanno permesso la nascita e la successiva diffusione.

Lo studio e l'analisi dei testi scientifici è da considerarsi comunque il nucleo della ricerca. In primo luogo perché ancora poche sono le fonti più prettamente divulgative a disposizione sulla trattazione dei problemi della materia condensata con i metodi simulativi, secondo perché la fonte primaria di conoscenza per chi si interessa allo studio della storia delle idee scientifiche è la produzione diretta, che fa da base lecita, legittima e rigorosa.

Ma ritorniamo al primo problema che, una volta impostato, ha messo in moto i maggiori cervelli scientifici fin dalle origini della scienza moderna, nonché, più tardi anche i più potenti calcolatori.

⁸ Il termine post-accademica, si riferisce a una scienza per la quale si è registrato un radicale cambiamento nella costruzione, la gestione e la trasformazione del suo rapporto con la società. Gli interessi sulla scienza e in generale sulla produzione di conoscenza non sono più nelle mani di accademici o di comunità specifiche, ma sono permeati da altri interessi di tipo politico, economico e sociale. GIBBONS M., LIMOGES C., NOWOTNY H., SCHWARTZMAN S., SCOTT P., TROW M., *The new production of knowledge: the dynamic of science and research in contemporary societies*, Sage Publication, 1994

La fisica e il problema degli n corpi

Dato un sistema di n corpi liberi di muoversi influenzati da un potenziale di interazione dovuto alla presenza stessa dei corpi, la meccanica classica permette di impostare un sistema di $3n$ equazioni differenziali, dette equazioni del moto classiche.

Il problema degli n corpi consiste nel calcolare, data la posizione iniziale, la massa e la velocità degli n corpi, l'evoluzione futura di un sistema costituito da n oggetti sotto l'influsso della loro reciproca interazione. La descrizione di un sistema di n corpi, siano essi particelle classiche, di cui si conoscono i parametri fisici che li descrivono e l'interazione che li lega, è quello che in fisica si indica come "modello". Risolvere il modello consiste nell'eseguire tutte quelle operazioni matematiche che dalle equazioni del moto di Newton portano all'esplicitazione delle traiettorie di ciascuna delle particelle che formano il sistema. Quindi, in linea di principio dall'integrazione delle equazioni del moto, una volta fissate le condizioni iniziali su posizione e velocità di tutte le particelle del sistema, sarebbe possibile ottenere la soluzione generale delle equazioni dinamiche, ovvero le n traiettorie.

Per un sistema di due corpi si riescono a trovare, con metodi analitici, le soluzioni delle traiettorie, ma già quando i corpi diventano tre è necessario ricorrere a soluzioni approssimate o valide solo per casi particolari, ottenibili introducendo alcune semplificazioni a discapito dell'aderenza del modello al problema reale. Alla fine del secolo scorso il matematico francese Henri Poincaré dimostrò che per n maggiore o uguale a 3 il problema degli n corpi non può essere risolto per via puramente analitica, ma soltanto in maniera approssimata per via numerica o utilizzando per esempio metodi detti perturbativi.

La risoluzione del problema degli n corpi interessa numerosi campi di ricerca della fisica moderna, dalla cosmologia alla fisica della materia condensata, passando per la fisica dello stato solido. Il problema degli n corpi si traduce nella spiegazione microscopica delle proprietà termodinamiche di sistemi macroscopici.

Alla fine dell'Ottocento, Boltzman introdusse il concetto di sistema ergodico: secondo l'ipotesi ergodica i sistemi meccanici a n corpi avrebbero la proprietà di assumere, nella loro evoluzione spontanea, tutti gli stati dinamici microscopici compatibili con il loro stato macroscopico. Le particelle costituenti il sistema, cioè, assumerebbero ogni insieme di valori istantanei di posizione e velocità le cui caratteristiche medie corrispondono allo stato macroscopico del sistema. Capire il

collegamento tra struttura atomica e proprietà termodinamiche di un sistema serve per comprendere a fondo il comportamento della materia, con tutte le implicazioni pratiche che ne derivano (per esempio nel dominio delle scienze dei materiali).

La meccanica statistica fornisce un modello per collegare le proprietà di atomi singoli e molecole alle proprietà macroscopiche dei materiali che vediamo nella vita quotidiana, spiegando dunque la termodinamica come un risultato naturale di statistica e meccanica (classica e quantistica) a livello microscopico. In particolare può essere usata per calcolare le proprietà termodinamiche dei materiali a partire dai dati spettroscopici delle singole molecole.

La meccanica statistica applica la statistica al campo della meccanica per gestire insiemi formati da numerosi elementi. In particolare si occupa dello studio di sistemi composti da molte particelle, per esempio di sistemi termodinamici come i gas perfetti. L'approccio statistico ha avuto la meglio sui metodi analitici dal momento che, come già detto, da un punto di vista classico, lo studio di un sistema con n particelle richiede la soluzione di $3n$ equazioni differenziali, ovvero le equazioni del moto di ogni particella nelle tre dimensioni. Se pensiamo che in una mole di gas sono contenute un numero di Avogadro di particelle (6×10^{23}) il numero delle equazioni diventa enorme. Le equazioni possono essere risolte analiticamente solo limitandosi a casi particolari come i gas perfetti, caratterizzati da assenza di interazione fra le particelle, o modelli semplici di interazione come per i solidi cristallini.

La fisica dello stato solido, ovvero quella branca della fisica che affronta lo studio delle proprietà meccaniche microscopiche dei solidi, ha focalizzato nel tempo la sua attenzione sulle strutture cristalline facilmente modellizzabili. La struttura atomica periodica, rende infatti il modello cristallino risolvibile attraverso metodi analitici.

Con la formulazione di Schroedinger della metà degli anni Venti i fisici dello stato solido sono riusciti a ricavare la funzione d'onda nel cristallo, sfruttando quella che sarà una delle più significative eredità nel passaggio da fisica dello stato solido a fisica della materia condensata. L'approssimazione di Born – Oppenheimer è una tecnica matematica che permette di “disaccoppiare” i moti di nuclei ed elettroni, ovvero di separare le variabili corrispondenti al moto nucleare e le coordinate elettroniche nell'equazione di Schroedinger associata all'Hamiltoniana di un sistema di atomi. Questa approssimazione permette di trattare un sistema di atomi come nuclei non relativistici (hanno infatti masse molto maggiori degli elettroni e velocità molto

più basse) semplicemente aggiungendo nell'Hamiltoniana del sistema un potenziale efficace che "mima" la presenza degli elettroni, di cui si conoscono le energie (autovalori ricavati risolvendo l'equazione di Schroedinger solo per gli elettroni) corrispondenti alle varie configurazioni.

I fisici dello stato solido si disinteressavano però a tutto quel dominio della materia che non avesse le proprietà facilmente "matematizzabili" di gas perfetti e solidi cristallini. È proprio riguardo a questi problemi, tra cui lo studio del comportamento microscopico dei fluidi (idrodinamica), che la nuova comunità dei fisici simulatori ha trovato terreno fertile per mettere le prime radici e sfide inedite per portare avanti e, in un certo senso, dare nuova vita alla ricerca in fisica teorica.

Cenni di preistoria. Un aneddoto

Correva l'anno 1940, il mondo era già in guerra. Gli scienziati americani presentavano che gli Stati Uniti sarebbero stati coinvolti nella Seconda guerra mondiale e che la nuova guerra avrebbe implicato sfide scientifiche e tecnologiche senza precedenti. Il presidente Roosevelt incontrò più volte il vicepresidente del MIT Vannevar Bush alla Casa Bianca e lo incaricò di costituire e dirigere due nuove organizzazioni tese a coordinare la ricerca sugli aspetti scientifici delle questioni militari: l'NDRC (National Defense Research Committee) e l'OSRD (Office of Scientific Research and Development) a cui presero parte oltre 6000 scienziati compresi quelli che si occuparono del lavoro teorico e tecnico nell'ambito del famoso progetto Manhattan. In questo contesto, anche Norbert Wiener⁹ fu chiamato al MIT per occuparsi dei sistemi avanzati di puntamento radar e di controllo del tiro per l'artiglieria contraerea inglese. Gli inglesi, infatti, poco dopo l'inizio del Blitz tedesco, si erano rivolti direttamente a Vannevar Bush per una collaborazione scientifica in funzione antitedesca per dare alle forze alleate un vantaggio nella guerra dei cieli.¹⁰

La sfida dell'artigliere, secondo Wiener, non era tanto mirare all'oggetto volante, ma fare una stima predittiva del punto in cui si sarebbe trovato l'oggetto, una volta che fosse sopraggiunto il colpo, nella speranza che le traiettorie di volo dell'oggetto

⁹ WIENER Norbert, *I am mathematician: the later life of a prodigy*, MIT Press, Cambridge 1964

¹⁰ CONWAY, F. e SIEGELMAN, J., *L'eroe oscuro dell'età dell'informazione. Alla ricerca di Norbert Wiener, il padre della cibernetica*, traduzione di Paola Bonini, Codice Edizioni, Torino 2005

puntato e quella del proiettile sparato convergessero. Il compito di Wiener era quindi raccogliere tutte le informazioni disponibili sulle posizioni passate dell'oggetto e valutare i vincoli che avrebbero influenzato la traiettoria futura. Ma il cervello umano a bordo dell'aereo è quanto di più imprevedibile possa trovarsi davanti un matematico, anche del talento di Wiener. Le traiettorie dei nuovi aerei, veloci e agili, e la preparazione dei piloti, addestrati a compiere azioni elusive risultavano altamente irregolari come il volo di un calabrone o il percorso di un ubriaco! Ogni posizione rendeva possibile una grande quantità di posizioni future. Wiener era comunque lo scienziato giusto per cercare di sbrogliare un problema pratico che era già per lui una sfida matematica.

I nuovi radar inglesi riuscivano a dare informazioni dettagliate sulla distanza e sulla direzione degli oggetti in movimento, che facevano rimbalzare le onde radio inviate: il problema era l'extrapolazione delle traiettorie future in relazione alle informazioni registrate. In un modello realistico descrittivo doveva essere considerata la reazione del pilota sotto l'effetto della contraerea: il pilota infatti avrebbe cominciato a volare a zig zag facendo acrobazie e compiendo azioni imprevedibili. La sfida era di elaborare un modello matematico che tenesse conto di tutto questo e anche dei limiti di manovra di un aereo che viaggia a velocità estremamente elevata. Wiener poté sfruttare tutta la sua esperienza nel risolvere le complesse equazioni differenziali che definivano le coordinate mutevoli degli oggetti in volo, utilizzando funzioni aleatorie per stimare le più probabili deviazioni subite dalla traiettoria. Le distribuzioni probabilistiche provenivano dalla teoria del moto browniano, di cui si era a lungo occupato. Esistevano già in quegli anni delle macchine in grado di svolgere calcoli differenziali complessi, come l'analizzatore differenziale analogico di Vannevar Bush: l'apparecchiatura consentiva di risolvere equazioni differenziali nelle quali entravano fino a 18 variabili indipendenti.

Al problema della predizione seguiva quello della costruzione di un congegno di puntamento automatico che guidasse l'operatore della contraerea: serviva quindi la messa a punto di un simulatore che generasse "fisicamente" le traiettorie probabili degli aerei e quelle dei proiettili della contraerea in funzione delle prime. Wiener, affiancato dall'ingegner Bigelow, mise in pratica le sue conclusioni simulando con un raggio di luce bianca la traiettoria di un aereo in un'aula del Mit e con un raggio rosso la traiettoria dei proiettili della contraerea. Il raggio bianco risultava però non troppo

fedele all'andamento irregolare dovuto alle variazioni casuali, fu quindi proiettato non sul soffitto, ma sulle pareti della stanza, in modo da sfruttare i "salti" dovuti agli spigoli. Tra le diverse traiettorie prodotte le più probabili venivano scelte con metodi statistici.

Intanto la guerra continuava e i tedeschi si facevano sempre più minacciosi. Era arrivato il momento di presentare qualche risultato. Dopo cinque mesi di ricerca il supervisore di Wiener organizzò un incontro con gli ingegneri dei laboratori Bell addetti a realizzare il prototipo di puntatore, ma la squadra della Bell respinse la teoria statistica fino ad allora elaborata. Lo stesso Bigelow affermò che probabilmente essi "non riuscivano a credere che potesse esistere un insieme possibile di curve rappresentanti una rotta, fra cui scegliere le più probabili".

Il modo di procedere di Wiener, pur non avendo tutte le caratteristiche di una vera e propria simulazione, è tuttavia da considerarsi un approccio embrionale in questo campo di ricerca. È significativo notare come l'approccio statistico che caratterizza parte della simulazione, dagli albori fino ai giorni nostri, abbia inizialmente ricevuto cenni di sfiducia e un interesse relativamente basso dal resto della comunità scientifica. Come si deduce dallo studio dello sviluppo di questo metodo attraverso i testi scientifici la legittimazione della simulazione numerica ha sempre avuto bisogno del riscontro sperimentale dei suoi risultati. Quella che oggi si può definire la comunità dei simulatori è il risultato del percorso di scienziati provenienti da varie discipline le quali hanno trovato nei metodi simulativi risposte a problemi altrimenti irrisolvibili. Questi scienziati hanno affrontato lungo il loro cammino interlocutori scettici da convincere spesso attraverso i metodi scientifici tradizionali in un continuo confronto epistemologico teso a elevare la simulazione al pari di teoria ed esperimento.

Il metodo Monte Carlo.¹¹ Fatti e personaggi

Durante la guerra, un gruppo di scienziati, ingegneri e tecnici, stava realizzando il primo calcolatore elettronico, l'ENIAC (Electronic Numerical Integrator And Calculator), a Philadelphia presso l'Università della Pennsylvania. Venne ultimato nella primavera del 1945, era un'apparecchiatura enorme, conteneva migliaia di

¹¹ METROPOLIS, Nicholas, "The beginning of the Monte Carlo Method", *Los Alamos Science*, Special Issue, 1987

valvole a vuoto, ed era stato costruito con pezzi non utilizzati provenienti dall'esercito e dalla marina.

Stan Ulam, matematico polacco, emigrato negli Stati Uniti, era stato chiamato a Los Alamos per collaborare agli studi sulla bomba H. Egli si adoperò per la parte dei calcoli mostrando che il primo modello della bomba a idrogeno proposto da Edward Teller, era inadeguato. Fu il primo a capire che si potevano posizionare tutti i componenti in un unico contenitore nella bomba H, mettere la bomba a fissione da una parte e il materiale termonucleare dall'altra e usare lo "shock meccanico" provocato dalla bomba a fissione per comprimere e poi detonare il materiale da fusione. Teller rigettò inizialmente tale idea, ma vide i suoi benefici e suggerì di usare il plutonio come *spark plug*, localizzandolo al centro del materiale di fusione per iniziare a scatenare la reazione di fusione. Teller modificò l'idea di Ulam sulla compressione capendo che le radiazioni della fissione nucleare sarebbero state più efficaci dello "shock meccanico". I calcoli di idrodinamica per verificare la fattibilità della bomba vennero sottoposti al nuovo calcolatore e i risultati furono accolti con relativo ottimismo, nonostante le forti semplificazioni nel modello, considerate inadeguate in particolare da John von Neumann¹², professore di matematica a Princeton e consulente per il Progetto Manhattan. In questo caso, venne sì utilizzato un computer, ma soltanto come una veloce calcolatrice. Stan Ulam rimase comunque impressionato dalla velocità e dalla versatilità dell' ENIAC, e pensò subito che una macchina del genere poteva essere utilizzata per affrontare una quantità di problemi, tra cui quelli in cui era impegnato, con metodi statistici.

Già dagli anni Trenta, infatti, la comunità dei matematici internazionale lavorava alla formalizzazione e assiomatizzazione della teoria della probabilità. Il primo problema su cui Ulam utilizzò l'approccio statistico riguardava la diffusione dei neutroni nella materia. L'idea era semplice: si trattava, date le condizioni iniziali su posizione e velocità, di seguire la "storia" di un neutrone che, interagendo con i nuclei della materia, poteva, con probabilità assegnate, o essere assorbito, o essere deviato, o causare una fissione e quindi generare altri neutroni¹³. Il problema generale di quegli anni era capire come dare basi sperimentali agli assiomi della fisica teorica, e la strada

¹² ULAM, Stanislaw, M., *Adventures of a mathematician*, University of California Press, Berkeley, 1976

¹³ ULAM, Stanislaw, M., *Adventures of a mathematician*, University of California Press, Berkeley, 1976

statistica, la nascente teoria dell'informazione di Wiener e Shannon¹⁴ e la costruzione di macchine veloci nei calcoli sembrava il perfetto connubio tra teoria e tecnica per arrivare a risultati soddisfacenti e realistici.

Secondo Ulam l'ideale sarebbe stato seguire i cammini di un gran numero di neutroni e da questi, attraverso le tecniche dell'inferenza statistica, risalire al comportamento generale dei neutroni nel materiale fissile. Von Neumann spedì nel marzo del 1947 al capo della divisione teorica di Los Alamos una lettera esponendo quelli che sono i fondamenti del metodo Monte Carlo da applicare alla risoluzione del problema della diffusione dei neutroni nel materiale fissile¹⁵: preso un pezzo di materiale fissile e assunta una distribuzione iniziale di neutroni in posizione e velocità, l'idea è seguire l'evoluzione di un neutrone sottoposto a fenomeni di deviazione, assorbimento, fissione o fuga, nell'interazione con i nuclei del materiale. A ogni passo di tale evoluzione si devono prendere delle "decisioni" su condizioni iniziali del neutrone, posizione e natura delle collisioni. Il gioco è quello di richiedere a un algoritmo matematico di "generare" quelle scelte, in base a una distribuzione di probabilità dipendente da fattori fisici e geometrici del sistema. Il processo viene ripetuto per un gran numero di neutroni finché non si ottiene un quadro del comportamento del sistema statisticamente valido. Le scelte sul comportamento casuale dei neutroni vengono generate attraverso algoritmi che simulano una sequenza di eventi la cui frequenza segue fedelmente la distribuzione di probabilità che li caratterizza.

Lo sviluppo del metodo Monte Carlo è strettamente legato al desiderio da parte degli scienziati, impegnati nello sforzo bellico, di mettere alla prova la nuova potenza di calcolo che l'ENIAC offriva, una volta finita la guerra.¹⁶ Si pensa, infatti, che lo sviluppo della chimica e della fisica computazionale sia stato incrementato dalla potenza di calcolo crescente che dopo la guerra sarebbe risultata inutilizzata. C'era

¹⁴ CONWAY, F. e SIEGELMAN, J., *L'eroe oscuro dell'età dell'informazione. Alla ricerca di Norbert Wiener, il padre della cibernetica*, traduzione di Paola Bonini, Codice Edizioni, Torino 2005

¹⁵ METROPOLIS, Nicholas, "The beginning of the Monte Carlo Method", *Los Alamos Science*, Special Issue, 1987

¹⁶ GUBERNATIS, J.E., "The heritage", *The Monte Carlo method in the physical science. Celebrating the 50th anniversary of the Metropolis algorithm*, Los Alamos National Laboratory, AIP (American Institute of Physics) Conference Proceedings, 690, New York, 2003

bisogno, come dire, di trovare nuove sfide per impiegare le menti degli scienziati venuti da tutto il mondo negli Stati Uniti.

In realtà, già Fermi, nei suoi esperimenti in via Panisperna, aveva utilizzato calcoli statistici per prevedere il comportamento dei neutroni di cui si stava occupando. Quindi, possono essere considerati “padri fondatori” del metodo Monte Carlo nomi come Fermi che per primo lo applicò, Ulam e Von Neumann che per primi lo formalizzarono, e Nicholas Metropolis che diede il fortunato nome e lo portò allo scoperto con il famoso articolo del 1953 in collaborazione con i coniugi Rosenbluth e i coniugi Teller.¹⁷

Il metodo Monte Carlo. I testi scientifici dal 1953 al 1984¹⁸

Ogni nuova interpretazione della natura, sia essa una scoperta o una teoria [o un metodo], sorge dapprima nella mente di un singolo o di pochi individui. Sono essi che per primi imparano a vedere la scienza e il mondo in maniera differente, e la loro capacità di fare questo cambiamento è facilitata da due condizioni in cui non si trovano la maggior parte degli altri membri della loro specializzazione. Invariabilmente la loro attenzione è stata concentrata intensamente sui problemi che provocano la crisi; inoltre essi sono, di solito, così giovani o così nuovi al campo oppresso dalla crisi che la pratica scientifica non li ha ancora così profondamente condizionati come la maggior parte dei loro contemporanei alla concezione del mondo e alle regole determinate dal vecchio paradigma. In che modo riescono, e che cosa debbono fare per riuscire a convertire l'intero gruppo degli specialisti o il sottogruppo di essi più interessato al problema, al loro modo di

¹⁷ N. METROPOLIS, A.W. ROSENBLUTH, M.N. ROSENBLUTH, A.H. TELLER and E. TELLER, “Equation of state calculations by fast computing machines”, *The Journal of Chemical Physics*, 21, 1087 (1953)

¹⁸ La scelta degli articoli si rifà alle selezioni di HANSEN, Jean-Pierre, “An Introduction to molecular dynamics, with applications to the glass transition”, *Computer simulation in material science*, a cura di Madeleine MEYER e Vassilis PONTIKIS, edito da Applied Science, Volume 5, e della raccolta di reprints di CICCOTTI Giovanni, FRENKEL Daan, McDONALD Ian R., *Simulation of liquids and solids. Molecular dynamics and Monte Carlo Methods in statistical mechanics*, North Holland, Amsterdam, Oxford, New York, Tokyo, 1987

considerare la scienza e il mondo? Che cosa spinge un gruppo ad abbandonare una tradizione di ricerca scientifica a favore di un'altra?

Thomas S. Kuhn

La struttura delle rivoluzioni scientifiche

In questa parte sono analizzati, articolo per articolo e in ordine cronologico, i problemi, le idee, e i risultati con i quali il metodo Monte Carlo è riuscito ad affermarsi come potente strumento di indagine all'interno della comunità dei fisici della materia condensata dagli anni Quaranta agli anni Ottanta.

Per la selezione sono state prese in considerazione, e integrate tra loro, due diverse raccolte di reprints curate da due fisici delle generazioni successive a quella dei padri fondatori della simulazione, Jean-Pierre Hansen, attualmente professore di chimica computazionale all'università britannica di Cambridge, e Giovanni Ciccotti, ordinario di struttura della materia all'università La Sapienza di Roma.

La chiave di lettura utilizzata per l'analisi dei seguenti testi specialistici si ritrova negli scritti di Thomas S. Kuhn, in particolare ne *La struttura delle rivoluzioni scientifiche*, e riguarda la nascita e l'affermazione di un nuovo metodo di fare scienza: il confronto con le pratiche precedenti, la complementarità, a volte il superamento. L'indagine non pretende di essere esaustiva vista l'enorme produzione scientifica intorno ai problemi della fisica della materia condensata. È vasto il dominio dei problemi e grande il numero dei gradi di libertà per ogni problema proposto, tanto che l'analisi cronologica sembra dare una linearità a uno sviluppo che procede invece a salti. Si può comunque accettare, in prima approssimazione, un percorso innegabile di crescita di fiducia e legittimità da parte della comunità dei fisici nell'uso del calcolatore all'interno della disciplina in esame.

1. METROPOLIS N., ROSENBLUTH A.W., ROSENBLUTH M.N., TELLER A.H. e TELLER E., "Equation of State Calculations by Fast Computing Machines", *The Journal of Chemical Physics*, Volume XXI, Issue 6, June 1953, pp. 1087-1092

DESCRIZIONE: In letteratura è l'articolo con cui si marca la nascita della simulazione numerica come tecnica risolutiva di problemi di meccanica statistica classica. L'articolo introduce il metodo Monte Carlo per lo studio delle equazioni di

stato di sistemi di particelle interagenti. In questo articolo è descritto l'utilizzo del metodo Monte Carlo, alla maniera che poi fu attribuita a Metropolis, per calcolare le proprietà all'equilibrio di un sistema a n corpi a una data temperatura. L'applicazione descritta nell'articolo si riferisce a un sistema di dischi rigidi bidimensionale. Metropolis aveva a disposizione il calcolatore MANIAC di cui era appena stata terminata la costruzione a Los Alamos. Dalle conclusioni si deduce che il metodo Monte Carlo è e sarà un approccio vincente per risolvere problemi di meccanica statistica che non sono risolvibili analiticamente.

AUTORI: METROPOLIS N. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico; Dipartimento di Fisica Università di Chicago, Illinois, ROSENBLUTH A.W. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico, ROSENBLUTH M.N. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico, TELLER A.H. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico, TELLER E. Dipartimento di Fisica, Università di Chicago, Illinois.

OSSERVAZIONI: Nell'articolo si parla di confronto e accordo con l'equazione di stato del volume libero e con un'espansione a quattro coefficienti viriali. Il confronto con altri approcci e l'evidenziarne l'accordo nei risultati accompagna l'origine e la legittimazione della simulazione numerica come nuovo metodo scientifico.

2. WOOD, W.W. e PARKER F.R., "Monte Carlo equation of state of molecules interacting with the Lennard – Jones potential. I. A supercritical isotherm at about twice the critical temperature", *The Journal of Chemical Physics*, Volume XXVII, Issue 3, September 1957, pp. 720 – 733

DESCRIZIONE: È la pubblicazione dei risultati della prima simulazione con Monte Carlo di un modello realistico di un fluido atomico. Vengono riportati i valori ottenuti per il fattore di compressibilità, per l'energia interna, per la capacità termica a volume costante e per l'andamento della funzione di distribuzione radiale delle molecole del sistema in esame al variare della temperatura e del volume. Il sistema studiato è un fluido tridimensionale di Lennard-Jones. L'articolo contiene informazioni sugli aspetti pratici di simulazioni di sistemi caratterizzati da potenziali continui di interazione tra

le particelle. La scelta del potenziale di Lennard-Jones fu dettato in parte da considerazioni sulla velocità dei computer del tempo. Nell'articolo i risultati sono paragonati con le osservazioni sperimentali di Michels e Bridgman sull'argon a 55°C ottenuti usando i valori del secondo coefficiente viriale per i parametri di potenziale. Il buon accostamento trovato tra simulazione e esperimento dimostrato nell'articolo ha contribuito alla successiva popolarità del modello Lennard-Jones per gas nobili liquefatti. Questa simulazione mostra la prova di una transizione di fase da solido a fluido ad alte densità; le condizioni precise di questa transizione saranno stabilite soltanto dieci anni più tardi da Hansen e Verlet [7].

AUTORI: WOOD, W.W. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico; Università della California, PARKER F.R. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico.

OSSERVAZIONI: La simulazione è fortemente debitrice alla fisica teorica dalla quale adotta i modelli e ha un forte impatto creativo, grazie al metodo Monte Carlo, sulla meccanica statistica. Il confronto con i risultati sperimentali di Michels e Bridgman conferma ancora una volta la ricerca di legittimazione dei nuovi metodi simulativi.

3. WOOD W.W. e JACOBSON J.D., "Preliminary result from a recalculation of the Monte Carlo equation of state of hard spheres", *Journal of Chemical Physics*, Volume XXVII, Issue 3, 1957, pp. 1207 – 1208

DESCRIZIONE: È un articoletto di una pagina dove si studia l'equazione di stato di un sistema di 32 molecole modellizzate come sfere rigide, lo stesso utilizzato dai Rosenbluth tre anni prima, e la si mette a confronto con i risultati di dinamica molecolare presenti nell'articolo seguente di Alder e Wainwright.¹⁹

¹⁹ ALDER B.J. e WAINWRIGHT T.E., "Phase transition for hard sphere system", *Journal of Chemical Physics*, Volume XXVII, Issue 3, 1957, pp. 1208 – 1209

AUTORI: WOOD, W.W. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico; Università della California, JACOBSON J.D. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico.

OSSERVAZIONI: È un articolo molto importante, che segna una tappa fondamentale per la simulazione. Esce infatti su *The Journal of Chemical Physics* insieme a un altro importante articolo²⁰ dove Alder e Wainwright descrivono lo stesso modello proposto da Wood e Jacobson utilizzando le tecniche simulate di *dinamica molecolare* e dimostrando l'accordo dei risultati. Qui si definiscono le due strade ugualmente lecite e rigorose della simulazione, quella del metodo Monte Carlo e quella della dinamica molecolare. L'equivalenza dei due metodi non era ovvia a quel tempo. Anzi, c'erano prove del contrario. I risultati di dinamica molecolare confliggevano con quelli pubblicati dai coniugi Rosenbluth nel 1954 sempre su *The Journal of Chemical Physics*.²¹ Si è poi scoperto che c'erano degli errori nell'articolo del 1954.

4. BRUSH S.G., SAHLIN H.L. e TELLER E., "Monte Carlo study of a one-component plasma. I", *The Journal of Chemical Physics*, Volume 45, Issue 6, September 1966, pp. 2102 – 2118

DESCRIZIONE: Nell'articolo è descritto uno studio portato avanti utilizzando il metodo Monte Carlo di un sistema composto da un plasma di ioni pesanti immersi in un ambiente isolante. Sono stati usati sistemi contenenti da 32 fino a 500 particelle, con condizioni periodiche al contorno.

Sono presentati due metodi diversi per il calcolo dell'energia potenziale di una configurazione e in entrambi i casi si propone una forma di interazione di ogni singola particella con l'ambiente intorno in modo da avere modelli realistici di interazione con i costituenti del sistema. Viene riscontrato che i due metodi per il calcolo dell'energia potenziale danno essenzialmente gli stessi risultati. Si vanno quindi a

²⁰ ALDER B.J. e WAINWRIGHT T.E., "Phase transition for hard sphere system", *Journal of Chemical Physics*, Volume XXVII, Issue 3, 1957, pp. 1208 – 1209

²¹ ROSENBLUTH M.N. e ROSENBLUTH J., *The Journal of Chemical Physics*, Volume XXII, 1954

studiare le condizioni limite di densità e temperatura, per esempio, per cui i due metodi sono ancora equivalenti.

AUTORI: BRUSH S.G Lawrence Radiation Laboratory, Università della California, Livermore, California, SAHLIN H.L Lawrence Radiation Laboratory, Università della Livermore, California; Dipartimento di Scienza Applicata, Università della California, Livermore, California, TELLER E. Dipartimento di Fisica, Università di Chicago, Illinois.

OSSERVAZIONI: In questo articolo è abbastanza chiaro che cosa fa realmente un simulatore, a che cosa deve pensare e perché il suo lavoro si avvicina a essere prettamente teorico, anche se poi ha ricadute che arricchiscono estremamente saperi più applicativi. Un simulatore cerca modelli realistici per descrivere sistemi termodinamici formati da particelle e con questo non si discosta molto da un fisico teorico, ma un simulatore cerca anche metodi nuovi e intelligenti di utilizzare la grande e crescente potenza di calcolo a disposizione, che non siano soltanto lo sfruttamento di una grossa calcolatrice. Brush e Sahlin hanno lavorato a Livermore in California, sede del più potente calcolatore al mondo e ambiente estremamente fiorente per lo sviluppo delle scienze simulate. Gli algoritmi proposti da questi nuovi scienziati, sono nuove strade di pensare le risoluzioni di un problema che nascono via via da un bagaglio sempre più vasto di proposte metodologiche.

5. HOOVER W.G. e REE F.H., "Use of computer experiments to locate the melting transition and calculate the entropy in the solid phase", *The Journal of Chemical Physics*, Volume 47, Issue 12, December 1967, pp. 4873 – 4878

DESCRIZIONE: (TRANSIZIONE DI FASE) I moderni computer possono simulare accuratamente il comportamento di sistemi ideali di diverse centinaia di particelle, ma hanno problemi nello studio di un processo di fusione, nel quale gli effetti di superficie di un sistema di piccole dimensioni rendono la transizione irreversibile. In una fase pura, che sia un fluido o un solido le tecniche simulate possono misurare pressione e energia, a densità e temperature che caratterizzano regioni dello spazio delle fasi dove due fasi coesistono i calcoli al computer diventano inefficienti.

Diventa infatti difficile localizzare e caratterizzare il punto dove avviene la transizione di fase. L'integrazione termodinamica da un fluido a un solido è problematica poiché il cammino non è reversibile. L'idea di Hoover e Ree è quella di simulare un cammino artificiale sul quale riuscire ad integrare.

In una regione in cui coesistono due fasi il sistema subisce delle variazioni consistenti nella densità e nell'energia e il tempo di decadimento di ciascuna fluttuazione aumenta considerevolmente. Di conseguenza diventa difficile calcolare le medie termodinamiche. Viene qui suggerito che un cammino reversibile termodinamicamente che unisca le fasi solida e fluida può essere ottenuto usando un "campo esterno" periodico per stabilizzare la fase solida a bassa densità.

Le proprietà del solido artificialmente stabilizzato a bassa densità sono studiate in teoria, e vengono evidenziati due schemi pratici per determinare i parametri di fusione usando entropie calcolate al computer. La scelta fatta dagli autori è quella di prendere come riferimento uno stato del sistema detto "single occupancy lattice gas" che tramite una compressione reversibile dà la fase solida. Utilizzano quindi un solido artificiale per farlo evolvere comprimendolo reversibilmente.

AUTORI: HOOVER W.G Dipartimento di Scienza Applicata, Università della California, Livermore, California, REE F.H. Lawrence Radiation Laboratory, Università della California, Livermore, California.

OSSERVAZIONI: Fino a questo momento sono stati utilizzati metodi simulativi per ottenere le medie in condizioni di equilibrio delle proprietà "meccaniche" di un sistema di n corpi. Il termine "meccaniche" si riferisce a quantità, come l'energia potenziale e la pressione, che possono essere espresse in funzione delle coordinate e dei momenti delle particelle. Non è infatti possibile ottenere direttamente da una simulazione informazioni su le proprietà termiche di un sistema, ovvero quantità che dipendono dal volume totale nello spazio delle fasi accessibile al sistema. Queste quantità sono per esempio, l'entropia (come in questo articolo), l'energia libera e il potenziale chimico.

uno dei primi articoli in cui si affronta, con la simulazione il problema dell'integrazione su cammini del sistema che incontrano transizioni di fase.

6. WOOD W.W., "Monte Carlo calculation for hard disks in the isothermal - isobaric ensemble", *The Journal of Chemical Physics*, Volume 48, Issue 1, January 1968, pp. 415 – 434
7. WOOD W.W., " NpT -ensemble Monte Carlo calculation for the hard disk fluid", *The Journal of Chemical Physics*, Volume 52, Issue 2, January 1970, pp. 729 – 741

DESCRIZIONE [6]: Wood mostra che il metodo Monte Carlo di Metropolis è facilmente adattabile all'ensemble isobarico isotermico (NpT) prendendo in considerazione un sistema di dischi rigidi in due dimensioni. La procedura di Wood è computazionalmente efficiente ma non è conveniente per sistemi caratterizzati da potenziali continui, cosa che invece affronterà McDonald su una mistura di liquidi di Lennard-Jones nel [10]. L'ensemble NpT per dischi rigidi è formulato come un ensemble equivalente NVT per un'interazione pseudopotenziale in uno spazio di configurazione ridotto, con esatte relazioni per piccoli sistemi periodici amplificate. Il metodo Monte Carlo, originariamente condiviso da Metropolis, viene qui adattato al calcolo dell'equazione di stato e alla funzione di distribuzione radiale. L'articolo descrive i risultati ottenuti per un piccolo sistema (12 dischi rigidi) come un esempio del metodo ed evidenziando l'affidabilità statistica dei risultati e l'effetto di differenti procedure generanti numeri pseudo-casuali. Almeno per tali piccoli sistemi è possibile ottenere, come sottoprodotto, l'equazione di stato dell'ensemble NVT , su una gamma di densità da un calcolo dell'ensemble NpT ad una singola pressione.

DESCRIZIONE [7]: Il metodo Monte Carlo per l'ensemble NpT in [6], nel quale l'interazione hard-disk è rappresentata da un leggero pseudopotenziale in uno spazio di configurazione ridotto con una barriera periodica fissata, è ora usato per calcolare l'equazione di stato e la funzione di distribuzione radiale nella fase fluida ad alta densità. Nell'articolo sono presentati anche alcuni risultati qualitativi per sistemi di 48 e 90 dischi, che apportano ulteriore supporto alla presenza di una transizione di fase solido-liquido che viene ora accettata.

AUTORI: WOOD, W.W. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico; Università della California.

OSSERVAZIONI: Il metodo Monte Carlo nella versione di Metropolis venne utilizzato soltanto per simulare sistemi a temperatura, volume e numero di particelle costanti. Quindi rappresenta un metodo per campionare i comportamenti dinamici specifici dell'ensemble canonico. Come vedremo per i calcoli di dinamica molecolare, l'ensemble più comodo è il microcanonico nel quale sono parametri fissati l'energia totale, il volume e il numero di particelle. Nel limite termodinamico, ovvero quando volume e numero di particelle del sistema sono considerati infiniti, i due ensemble si equivalgono; diventa quindi irrilevante la scelta dell'ensemble nella trattazione termodinamica. Questo non è vero però per i sistemi ridotti utilizzati nella simulazione al computer dove le dimensioni del sistema sono vincolate dalla potenza di calcolo disponibile. Utilizzare un ensemble o l'altro dipende dalle esigenze di collegare i problemi studiati a problemi reali. La simulazione quindi rende disponibili tecniche diverse per trattare il più alto range possibile di ensemble.

8. HANSEN J.P. e VERLET L., "Phase transitions of the Lennard – Jones system", *Physical Review*, Volume 184, Issue 1, August 1969, pp. 151 - 161

DESCRIZIONE: La simulazione con Monte Carlo viene usata per determinare le transizioni di fase di un sistema di particelle interagenti attraverso un potenziale di Lennard-Jones [2]. Il passaggio fluido-solido è stato studiato usando un metodo recentemente introdotto Hoover e Ree [5]. Per il passaggio liquido-gas è stato trovato un metodo che forza il sistema a rimanere sempre omogeneo. Si utilizza ancora il paragone con l'esperimento nel caso dell'argon. Viene fatta una determinazione indiretta della transizione di fase del gas di sfere rigide che è sostanzialmente in accordo con i risultati di calcoli più diretti.

AUTORI: HANSEN J.P. Laboratorio di Fisica Teorica e Alte Energie, 91-Orsay, Francia, VERLET L. Laboratorio di Fisica Teorica e Alte Energie, 91-Orsay, Francia

OSSERVAZIONI: Ancora un paragone con l'esperimento nel caso dell'argon.

9. FILINOV V.S. e NORMAN G.E., “Investigation of phase transitions by the Monte Carlo method (vapor – liquid transition in inert gases based on Monte Carlo method, including comparison with Van der Waals equation and plasma ionization equilibrium)”, *Teplofizika Vysokikh Temperatur*, Volume 7, 1969, pp. 233 – 240

DESCRIZIONE: Non è stato possibile reperire l’articolo, ma Filinov e Norman sono i precursori della trattazione dell’ensemble grancanonico con le tecniche simulate, se ne occuperanno anche Adams [12], Shing e Gubbins²² simulando l’inserimento di una particella per far evolvere il sistema e registrare le variazioni del potenziale chimico. Infine chi con maggior successo ha indagato questo filone è Bennett [13].

AUTORI: FILINOV V.S. Accademia Russa delle Scienze, Centro di ricerca sulle densità alle alte energie, Mosca, Russia.

10. McDONALD I.R., “ NpT – ensemble Monte Carlo calculations for binary liquid mixtures”, *Molecular Physics*, Volume 23, Issue 1, January 1972, pp. 41 – 58

DESCRIZIONE: Lo scopo dell’articolo è di estendere il metodo Monte Carlo per il calcolo delle proprietà termodinamiche all’equilibrio di un sistema di molecole interagenti con un potenziale di Lennard-Jones nella configurazione dell’ensemble NpT . Il metodo viene applicato al calcolo delle proprietà termodinamiche come l’entalpia, il volume e l’energia libera di Gibbs di una miscela di liquidi di Lennard-Jones. Nell’articolo si paragonano i risultati con le previsioni di alcune teorie sulle mescolanze di liquidi: il cosiddetto modello di van der Waals per un fluido e la teoria variazionale di Mansoori e Leland. Il confronto risulta dare eccellenti risultati.

AUTORI: McDONALD I.R. Dipartimento di Chimica, Royal Holloway College, Università di Londra, Surrey, Inghilterra.

²² SHING K.S. e GUBBINS K.E., “The chemical potential in dense fluids and fluid mixtures via computer simulation”, *Molecular Physics*, Volume 46, Issue 5, August 1982, pp. 1109 – 1128

OSSERVAZIONI: L'articolo prima di entrare nel particolare della ricerca ha un approfondita introduzione sui tentativi di estendere il metodo Monte Carlo ai vari tipi di ensemble. Se in alcuni precedenti articoli si cercava una legittimazione dell'esperimento in questo caso si confrontano i risultati della simulazione con approcci teorici di tipo fenomenologico (van der Waals) o variazionali (Mansoori e Leland). Questo dimostra come la simulazione, a seconda della provenienza accademica degli autori, cerchi un confronto con l'esperimento o con la teoria.

11. VALLEAU J.P. e CARD V.N., "Monte Carlo estimation of the free energy by multistage sampling", *The Journal of Chemical Physics*, Volume 57, Issue 12, December 1972, pp. 5457 – 5462

DESCRIZIONE: L'articolo descrive un metodo per stimare l'energia libera e l'entropia di un insieme di particelle, chiamato in gergo *multistage sampling*. Si usano tecniche simulate Monte Carlo di tipo Metropolis per generare distribuzioni di energia dalle quali si può calcolare il volume assoluto dello spazio delle configurazioni corrispondente ad una data energia, e anche l'integrale della configurazione. Si ottengono incidentalmente le quantità termodinamiche su una larga gamma di temperature ridotte. È particolarmente facile applicare il metodo a particelle con nucleo rigido, e vengono riportati i calcoli per sfere rigide interagenti con forze di Coulomb.

AUTORI: VALLEAU J.P. Laboratori di Chimica Lash Miller, Università di Toronto, Canada, CARD V.N. Laboratori di Chimica Lash Miller, Università di Toronto, Canada.

OSSERVAZIONI: Calcolare l'energia libera di un sistema è uno dei problemi chiave della simulazione. Anche in questo articolo si presenta un metodo per il calcolo dell'energia libera che sarà poi confrontato e migliorato.

12. ADAMS D.J., "Chemical potential of hard – sphere fluids by Monte Carlo methods", *Molecular Physics*, Volume 28, Issue 5, Novembre 1974, pp. 1241 – 1252

DESCRIZIONE: Le espressioni della distribuzione di potenziale derivate per la pressione e il potenziale chimico di un fluido vengono qui sviluppate per il caso speciale di un fluido a sfere rigide. Le equazioni esatte prodotte sono state usate per determinare il potenziale chimico nei fluidi a sfere rigide sulla gamma di densità molto ridotte, per mezzo della simulazione Monte Carlo. Il potenziale chimico così ottenuto è in accordo eccellente con quello trovato integrando sulla pressione come una funzione di volume. È stato trovato comunque che il potenziale chimico è sensibilmente più dipendente, rispetto alla pressione, dalla misura del campione.

Due semplici metodi di simulazione Monte Carlo dell'ensemble grancanonico, un metodo esatto e uno modificato, più conveniente anche se inesatto, sono stati usati per il fluido di sfere rigide nella stessa gamma di densità. Entrambi hanno dato risultati in accordo con i valori di pressione e potenziale chimico ottenuti con l'altro.

AUTORI: ADAMS D.J. Dipartimento di Chimica, Royal Holloway College (Università di Londra), Surrey, Inghilterra.

OSSERVAZIONI: Per la prima volta in questo articolo si parla di misura del campione. Sta proprio nella misura del campione una delle sfide più grandi della simulazione. La maggior parte dei risultati proposti sono stati verificati su sistemi composti da poche molecole (si pensi che la potenza di calcolo di computer portatile odierno può simulare un sistema di circa 32 molecole d'acqua).

Come comunicatrice della scienza, mi viene subito da pensare a uno dei possibili punti deboli di questa disciplina: portare davanti a un pubblico di non addetti ai lavori buoni risultati per una manciata di molecole, ma generalizzati dagli esperti a sistemi globali complessi potrebbe essere rischioso per il patto di fiducia tra pubblico e comunità scientifico così importante in questo momento.

13. BENNET C.H., "Efficient estimation of free energy differences from Monte Carlo data", *Journal of Computational Physics*, Volume 22, Issue 2, October 1976, pp. 245 – 268

DESCRIZIONE: Sono sviluppate strategie ottimali per stimare la differenza di energia libera tra due ensemble canonici, dato un programma Monte Carlo di tipo Metropolis per simulare entrambi. La strategia di stima dipende dal tentativo di

sovrapposizione tra i due ensemble, dall'adattamento della densità degli stati come una funzione della differenza di potenziale, e dai costi relativi della simulazione Monte Carlo. Si considerano due sistemi simili ovvero che hanno un alto numero di volumi comunemente accessibili nello spazio delle configurazioni. La miglior stima della differenza di energia libera è di solito ottenuta dividendo il tempo disponibile del computer approssimativamente in parti uguali per i due ensemble; la sua efficienza (varianza per tempo macchina) non è mai inferiore e può essere molto maggiore di quella ottenuta simulando solo un ensemble.

AUTORI: BENNET C.H. Divisione di Ricerca IBM, Centro di Ricerca Thomas J. Watson, Yorktown Heights, New York.

OSSERVAZIONI: Con questo articolo Bennet riorganizza, e stende una sintesi particolareggiata dei metodi di calcolo dell'energia libera di un sistema. È un articolo che riesce a dare una visione ampia e generalizzata del problema perché dedica una parte anche alla teoria delle perturbazioni e all'integrazione numerica alle quali la simulazione Monte Carlo si affianca con successo.

14. TORRIE G.M. e VALLEAU J.P., "Nonphysical sampling distributions in Monte Carlo free - energy estimation: umbrella sampling", *Journal of Computational Physics*, Volume 23, Issue 3, March 1977, pp. 327 – 341

DESCRIZIONE: La differenza di energia libera tra un sistema modello e un qualche sistema di riferimento può essere facilmente scritta come una media sull'ensemble, ma i metodi convenzionali di Monte Carlo per ottenere tali medie sono inadeguati per il caso dell'energia libera. Questo articolo descrive l'uso di arbitrarie distribuzioni di campionamento scelte per facilitare il calcolo delle medie. È infatti proposto in questo articolo, il primo esempio di "umbrella sampling", ovvero una efficientissima distribuzione di campionamento che riduce il numero di passi intermedi che il calcolatore deve compiere per il calcolo delle energie libere. I metodi sono stati testati con successo sul sistema di Lennard-Jones per una larga gamma di temperature e densità, inclusa la regione di coesistenza gas-liquido, e sono risultate potenti ed economiche.

AUTORI: TORRIE G.M. Università di Toronto, Canada, VALLEAU J.P. Laboratori di Chimica Lash Miller, Università di Toronto, Canada.

OSSERVAZIONI: La scelta della distribuzione di campionamento può essere faticosa per l'efficienza di una simulazione. La conoscenza della fisica che sta dietro a un sistema, ovvero l'avere solide basi di fisica teorica permette a un simulatore di avvicinarsi al reale con il modello. In più, conoscendo gli algoritmi che possono governare un calcolatore, ma soprattutto conoscendo la filosofia con cui costruirne di nuovi, egli può "guardare" condizioni e situazioni fisiche altrimenti insondabili, verificare la bontà di un modello in situazioni altrimenti sconosciute e scoprire, nella migliore delle ipotesi, nuovi e interessanti stati del sistema.²³

15. VALLEAU J.P. e COHEN L.K., "Primitive model electrolytes. I. Grand canonical Monte Carlo computations", *The Journal of Chemical Physics*, Volume 72, Issue 11, June 1980, pp. 5935 – 5941

DESCRIZIONE: Il metodo Monte Carlo nell'ensemble gran canonico viene descritto per sistemi coulombiani, e sviluppato per elettroliti acquosi. Vengono ottenute le energie e i coefficienti di attività e viene discusso lo scopo e la verosimiglianza del metodo.

AUTORI: VALLEAU J.P. Laboratori di Chimica Lash Miller, Università di Toronto, Canada, COHEN L.K. Università di Toronto, Canada.

OSSERVAZIONI: In accordo con il *frame* della nuova disciplina che si afferma tramite il confronto, la dimostrazione di potenza e efficienza, anche questo articolo propone un'applicazione del metodo Monte Carlo, in particolare si dedica a verificare il funzionamento di tale simulazione anche per l'ensemble grancanonico, cosa che era risultata difficoltosa fino a questo momento.

16. FRENKEL D. e LADD A.J.C., "New Monte Carlo method to compute the free energy of arbitrary solids. Application to the *fcc* and *hcp* phases of hard spheres",

²³ Colloquio informale con Michele Parrinello, in occasione del convegno organizzato per il sessantesimo compleanno del collega Roberto Car, tenutosi alla Sissa di Trieste il 21, 22, e 23 giugno 2007.

The Journal of Chemical Physics, Volume 81, Issue 7, October 1984, pp. 3188 – 3193

DESCRIZIONE: Viene qui presentato un nuovo metodo per calcolare l'energia libera assoluta di fasi solide arbitrarie grazie a una simulazione di Monte Carlo. Il metodo è basato sulla costruzione di un cammino reversibile dalla fase solida di un sistema a scelta in esame che si trasforma in un cristallo di Einstein con la stessa struttura cristallografica di cui si conosce tutta la termodinamica.

L'applicazione del metodo è stata verificata nel calcolo dell'energia libera del solido, descritto con un modello a sfere rigide, durante la fusione. I risultati raggiunti dai due studiosi, si accordano bene con i risultati di Hoover e Ree [5] quando utilizzarono il modello di reticolo a "occupazione singola" nella trasformazione di fusione di un solido di Einstein. La maggior fonte di errore è la natura della procedura di estrapolazione al limite termodinamico.

AUTORI: FRENKEL D. Laboratorio di Fisica, Università di Utrecht, Paesi Bassi, LADD A.J.C. Dipartimento di Scienza Applicata, Università della California, Davis, California.

OSSERVAZIONI: L'accordo con i risultati precedenti sembra quindi essere ancora una volta il punto di forza dei nuovi traguardi. Un'altra osservazione da fare è la costruzione di un bagaglio enorme di conoscenze di settore, una rete di piccoli accorgimenti, modelli, piccoli "trucchi" matematici e algoritmici, che vengono tramandati nella letteratura specialistica.

Da notare, inoltre, la nascita del linguaggio iperspecialistico, tipico di una comunità ristretta; i nomi dei metodi, degli algoritmi, dei modelli rendono ardua la comprensione in mancanza di un riferimento precedente. Proprio questo approccio, che è tipico di tutta la ricerca scientifica, ordisce la trama delle idee che, essendo *fisiologicamente* concatenate, si pongono naturalmente nella narrazione.

Capitolo 2

L'opportunità di raccontare la storia delle origini delle simulazioni numeriche al largo pubblico nasce in primo luogo dal crescente affermarsi della simulazione come metodo risolutivo, con grado crescente di realismo, di problemi complessi affrontati e superati.

La proposta si traduce nella volontà della comunità dei simulatori,²⁴ ormai affermata e caratterizzata da una crescente importanza anche in Italia, di raccogliere informazioni storiche sulle proprie origini e raccontarsi a un pubblico più vasto.

Le domande propedeutiche alla creazione di un prodotto per il largo pubblico sono quindi di varia natura e non riguardano soltanto il tipo di linguaggio; sono le questioni che distinguono un approccio *comunicativo* da uno *divulgativo*.

Perché raccontarsi? C'è una motivazione più profonda (di tipo economico, riguardante fatti di politica della ricerca o legato a ciò che può definirsi “marketing” della scienza) rispetto a quella di “glorificare” un meritato successo scientifico?

C'è una *robustezza sociale* che caratterizza la simulazione come pratica scientifica di cui fare partecipe chi ne potrà essere spontaneo fruitore in futuro? Quale modo di raccontarsi si adatta maggiormente agli scopi prefissati dalla decisione di comunicare con un pubblico? Su quali aspetti è opportuno focalizzare la narrazione, quale la scelta dei contenuti del messaggio?

Una volta effettuata la scelta tra numerosi pubblici, *chi* è in grado di instaurare un ponte comunicativo tra il pubblico e la comunità?

Che cosa conosce già l'interlocutore, quali i suoi preconcetti? Quali sono, se ci sono, le *rappresentazioni sociali* di una scienza simulata? E quali le fonti di tali rappresentazioni?

Comunicare o divulgare?

Quando si parla di scienza e pubblico si tende a focalizzare l'attenzione sulle relazioni esistenti tra le due entità di cui si pensa di conoscere ogni caratteristica, senza

²⁴ Nella persona di Stefano BARONI, professore ordinario in Condensed matter alla Sissa di Trieste e direttore del Centro di ricerca e sviluppo DEMOCRITOS (Democritus Modelling Center for Research on aTOMistic Simulation) del Cnr-Infm di Trieste

costruire un'indagine sull'origine delle due categorie. Da questo l'errore, a cui si faceva riferimento nell'introduzione, di tendere a interloquire tra categorie di *simili*.

Per una pratica scientifica che ancora poco è uscita dal dibattito tra le comunità di esperti è difficile capire da che tipo di comunicazione a largo spettro possa essere affiancata e chi possano essere i pubblici possibili; le scelte potrebbero addirittura considerarsi libere o arbitrarie.

La simulazione è una *scienza*, e in questo caso la parola *scienza* prende un'accezione generica, quasi colloquiale, che ancora rimane lontana, esoterica, fatta da pochi, riservata a pochi (in particolare se ci si riferisce alla fisica teorica simulativa). Essa sembra essere lungi da avere forti ricadute sulla società, ricadute che catalizzerebbero l'attenzione di un largo pubblico direttamente sulla pratica scientifica.

Nei colloqui con Giovanni Ciccotti, la discussione verteva spesso sul ruolo del *comunicatore* inserito tra un esponente della comunità scientifica, e quindi una figura esperta, e il pubblico.

Le modalità per parlare con un pubblico più vasto e quindi i compiti del comunicatore sono, secondo Ciccotti che in questo ambito assume il ruolo di membro di una comunità accademica piuttosto tradizionale, rendere *piacevole* alla lettura e *semplice* alla comprensione un modo innovativo di fare fisica, mantenendo rigore ed esattezza.

I fatti storici, gli intrecci di conoscenze tra i protagonisti, le strategie comunicative e di politica della ricerca, diventano soltanto escamotage narrativi per raccontare una storia fatta di idee scientifiche, quasi come se la teoria, proprio perché così vicina alla verità, bastasse alla narrazione, una volta semplificato il linguaggio.

Possiamo forse pensare alla simulazione come una *scienza* che attraversa il suo primo stadio di diffusione, cioè quella che avviene tramite la pubblicazione scientifica e a maggior ragione possiamo pensarla se ci si riferisce al periodo che è stato preso in esame in questo ambito, ovvero gli anni del suo sviluppo embrionale.

Sono stati trattati nel capitolo 1 gli albori di questa *scienza*, e se non esiste scienza senza comunicazione, in quegli anni le uniche forme di diffusione della simulazione erano gli articoli scientifici, i convegni e i colloqui personali tra esperti appartenenti alle diverse discipline coinvolte.

La riflessione spinge quindi a chiedersi se il primo approccio di una pratica scientifica di successo con il grande pubblico possa considerarsi una forma di semplice “traduzione”, ovvero la presentazione degli stessi contenuti trattati dalla comunità, ma affrontati con un linguaggio più semplice in modo da sfrondare la narrazione di gran parte dei tecnicismi. Ciò che si indica puramente con la parola *divulgazione*.

La volontà della comunità dei simulatori (intesa qui come il gruppo Democritos del Cnr che gravita intorno alla Sissa di Trieste) è quindi un’attività di pura *divulgazione*, con la voglia di proporre un prodotto comunicativo, un saggio per esempio, anche di ampio respiro, dove chi sa della disciplina in esame dona saperi altrimenti lontani a un pubblico di curiosi o interessati.

In questo caso, il pubblico a cui ci si riferisce è un pubblico colto, addirittura facente parte della comunità scientifica, anche se non si occupa necessariamente di fisica: simili che parlano ai propri simili.

Una lettura che ha le stesse caratteristiche di linguaggio e struttura di cui abbiamo detto sopra è il saggio divulgativo degli anni Sessanta sulla meccanica quantistica, *Trent’anni che sconvolsero la fisica. La storia della teoria dei quanti* di George Gamow.

È un tipo di divulgazione che molto si avvicina alla manualistica, tanto che all’interno del volumetto si trovano anche schemi, tabelle e formule, ma allo stesso tempo la prosa è vivace e scorrevole e la narrazione ricca di aneddoti e episodi di vita quotidiana dei fisici protagonisti e testimoni del profondo mutamento della visione dell’universo che ha portato la meccanica quantistica.

Lo scheletro del libro è quindi costituito dalle idee della fisica che hanno il potere di intrecciarsi naturalmente, in modo deterministico. Un teorema con le sue ipotesi, la tesi e la sua dimostrazione, scandisce già i tempi di una storia. E la storia delle idee scientifiche può diventare appetibile a un pubblico fatto non solo di esperti, una volta arricchita con storie di fatti e personaggi.

Assumendosi il compito di parlare a un pubblico allargato è naturale che un comunicatore, che non è necessariamente un membro della comunità per la quale comunica e non necessariamente sceglie le via del divulgare, cerchi un modo che sia anche funzionale e tocchi alcuni centri nevralgici dell’interesse del pubblico per arrivare a far passare una storia di scienza in un modo che non sia del tutto *top-down*.

Simulazione e società. Un'applicazione per il futuro

E quando la scienza arriva all'interesse del pubblico il racconto delle applicazioni e delle ricadute sulla società diventa improcrastinabile: che cosa ci darà questa scienza? E che cosa ci sta già dando?

A questo proposito, staccandomi dal contesto storico delle origini, ho intervistato Christian Micheletti, professore associato al settore di Fisica statistica e biologica della Sissa di Trieste, che si occupa di simulazione. In particolare i suoi studi vertono a comprendere i comportamenti delle proteasi dell'Hiv attraverso una tecnica chiamata "protein folding" (ripiegamento tridimensionale delle proteine).

L'applicazione in questo caso è immediata e ha tutto l'aspetto di essere una ricerca caratterizzata da una discreta robustezza sociale. Banalmente, conoscere le origini di una disciplina che sta producendo qualcosa di molto vicino e di molto importante per la società *adesso* prende una piega più spontanea.

Dagli anni Settanta, infatti, è stato possibile tramite tecniche simulative, avvicinarsi a seguire la dinamica di grosse strutture molecolari, aumentando la quantità o meglio la "qualità" dei campionamenti e quindi, di conseguenza, aumentando il tempo durante il quale seguire l'evoluzione del sistema. È un problema non ancora risolto, ma questo fa capire quanto sia proiettata nel futuro la scienza simulativa.

La funzione delle proteine in particolare è totalmente descritta dalla loro dinamica, da come si muovono, da come interagiscono con l'ambiente biologico; è quindi interessante andare a cercare metodi computazionali per simulare queste strutture e i loro movimenti. Il 35% delle proteine del nostro corpo non ha infatti una forma precisa, ma cambia a seconda del contesto. Una proteina è schematizzabile con una stringa composta da aminoacidi che dettata dalle leggi chimiche e fisiche si ripiega formando un oggetto di forma globulare. Per "visualizzare" una proteina è necessario sfrondarla da tutta la struttura atomica in modo da riconoscere strutture più grandi che si ripetono.

Un'osservazione che è lecito fare è che, una volta che ci si avvicina ad approcci più applicativi, lo scienziato va incontro a un compromesso: se sono interessato a un livello mesoscopico (qualche ordine di grandezza maggiore del livello atomico), ovvero ho bisogno di aumentare la scala temporale di osservazione del sistema, perdo in precisione e fedeltà al reale.

Le ricadute sociali una volta compreso il comportamento della proteina dell'Hiv sono cruciali, basti pensare all'influenza che tale scoperta ha sulla ricerca farmaceutica. Non solo, potendo sondare a livello molecolare la dinamica della proteasi dell'Hiv è possibile progettare e simulare gli effetti di un farmaco in grado di inibire i comportamenti nocivi della proteina. I farmaci sono stati infatti sintetizzati, il problema è che esistono proteine, come quella in esame, che muta con estrema velocità avvalendosi della caratteristica di avere forma diversa ma stesse funzioni biologiche.

La tecnica simulativa utilizzata è quella della dinamica molecolare. Si parte cioè dalle equazioni di Newton che descrivono il sistema particella per particella e si simula quello che avviene al sistema secondo il modello di interazione tra tutti i suoi costituenti. Quello che si osserva è un moto disordinato di vibrazione che, se lasciato evolvere nel tempo dà il comportamento su scala mesoscopica del sistema. È necessario a questo proposito capire quali sono le parti ordinate e interessanti del moto vibrazionale ai fini di isolare i comportamenti funzionali alle domande che ci si è posti sul sistema.

Gli effetti cercati dai simulatori che lavorano su oggetti biologici, come grosse molecole, polimeri, amminoacidi, proteine, non sono quelli della singola interazione chimica, ma hanno scale spaziali e temporali molto più grandi (dell'ordine del nanometro).

Ricercano quindi un metodo un po' più astratto rispetto a quello, tipico della fisica teorica simulativa, che considera tutto il dettaglio atomico. Assumendo le giuste semplificazioni, dalle particelle più grandi alle interazioni "aggiustate" che le legano, si riesce quindi ad avere un sistema "a grana grossa" che mostri la simulazione del movimento a una scala temporale maggiore e che faccia quindi vedere un po' di più, ma in maniera leggermente più sfocata.

Non andare incontro a tali semplificazioni sarebbe come studiare il moto di un aereo nel fluido aria considerando la struttura atomica dei materiali in gioco e le loro interazioni sempre su scala atomica!

Il piccolo caso di studio presentato in questo paragrafo ci dà un ulteriore gancio per parlare di nuovo delle origini di questa disciplina. Furono proprio i chimici e i biologi a fare tesoro delle prime conquiste della simulazione, proprio perché interessati a scale mesoscopiche per la trattazione e lo studio di sistemi molecolari. Anzi, l'uso dei

calcolatori per fare fisica fu in viso ai teorici per parecchio tempo, prima di avvicinarsi a metodologie adeguate a trattare la fisica teorica anche attraverso la simulazione.

Il caso di studio pone poi la simulazione come una scienza che si affaccia prepotentemente sulla società, proiettata in modo cruciale nel futuro e non solo in quello della ricerca di avanguardia.

Immaginario e rappresentazioni sociali

La domanda quindi che preme chi ha il compito di parlare di scienza e in questo caso di una branca così specialistica che si sta diffondendo contaminando sempre più discipline, dalla biologia all'economia, è che cosa sa il pubblico, quali sono le rappresentazioni di una scienza simulante che hanno già raggiunto il largo pubblico e quali sono le fonti produttrici di tali rappresentazioni.

Una prima osservazione si può fare leggendo le definizioni dal De Mauro di simulazione e simulare notando la differenza abissale tra il significato comune e quello tecnico scientifico:

si|mu|la|re

CO 1a manifestare sentimenti insinceri o inesistenti; fingere:

s. amicizia, interesse per qcn.

1b provocare una falsa opinione o favorire una convinzione

fingendo una condizione, un atto e sim.: *s. un dolore, una malattia;*

2 estens., imitare un suono, un movimento, un effetto visivo:

s. il verso del gatto

3 creare un'illusione da cui i sensi o la fantasia sono tratti

in inganno: *le nubi simulavano una montagna lontana*

4 CO TS scient., riprodurre artificialmente le condizioni

in cui si svolge un processo o un fenomeno, per studiarne e

verificarne gli effetti: *s. un esperimento al computer*

si|mu|la|zio|ne

1 CO il simulare, l'essere simulato e il loro risultato;

atto, comportamento o atteggiamento che inganna,

facendo credere ciò che non è: *una s. perfetta,*

il suo interesse non che una s.

2 CO TS mat., stat., nella ricerca operativa,

analisi di un processo o di un sistema attraverso

la costruzione di un modello matematico risolubile per

mezzo di un calcolatore elettronico |
modellizzazione di un fenomeno

Nel significato comune si trovano parole come finzione, falsità, illusione, inganno. C'è da chiedersi se un domani saremo chiamati a decidere soltanto sulla base di una simulazione, se non lo stiamo già facendo.

Una delle cose importanti dal punto di vista comunicativo e di studio del target è quella di capire quali sono, se ci sono, le immagini che i non addetti ai lavori già hanno su che cos'è la simulazione in modo da portare alla luce e, nel migliore dei casi, conciliare richieste, bisogni, esigenze e background di addetti e non addetti ai lavori. Indagare dove la simulazione “tocca” ambiti meno specialistici o più legati alla società allo scopo di trovare un canale preferenziale per una comunicazione efficace e perché no, piacevole.

Se infine, nella comunità scientifica la simulazione viene subito collegata ad un nuovo metodo di indagine che si traduce nella terza via tra esperimento e teoria, il termine ha tutto un altro sapore se inserito in un contesto di non specialistico. Cyber-spazio, realtà virtuale, videogame e mondi paralleli contaminano il modo di intendere l'uso del calcolatore per simulare il reale.

La conoscenza della disciplina da un punto di vista rigoroso e dell'immaginario costruito riguardo a essa è la chiave per produrre un buon prodotto comunicativo per il largo pubblico.

Conclusioni

La prima idea di prodotto comunicativo è quella sviluppata dalla storia delle idee, si segue cioè un andamento per step logici e problemi specialistici successivi al fine di ricostruire, come già fece Gamow per la meccanica quantistica, un percorso prettamente scientifico di stile quasi manualistico.

L'approccio utilizzato da Kuhn per analizzare le caratteristiche dello sviluppo storico delle discipline scientifiche tramite quelle che lui chiama *rivoluzioni*, sembra calzare a pennello all'affermarsi della simulazione come nuovo paradigma metodologico. Le primissime pubblicazioni, come è sottolineato e verificabile nel capitolo 1, sono tutti votate a confrontare i nuovi risultati al computer con quelli raggiunti con tecniche analitiche o sperimentali al fine di raggiungere una legittimazione scientifica per una pratica che inizialmente non venne accettata di buon occhio.

Il modo di raccontare più apprezzato da chi pratica una particolare disciplina scientifica, è forse il più fedele alla disciplina stessa.

Quando invece il racconto parte da una riflessione teorica sulla comunicazione della scienza, entrano in gioco i rapporti tra comunità scientifiche, la reciproca percezione tra comunità, i linguaggi differenti. Fu, infatti, la comunità dei chimici la prima a credere nelle potenzialità della simulazione e a utilizzare i primi risultati, nonostante oggi la simulazione sia considerata da alcuni accademici una branca del tutto aderente alla fisica teorica, perché si pensa che l'abbia fatta rinvigorire se non addirittura rinascere.²⁵ Il risultato scientifico può quindi diventare *funzionale* alla narrazione e non più protagonista all'interno del racconto.

Si tende a raccontare una storia fatta da persone e fatti dove è quindi fondamentale, per esempio, nel nostro caso, il fervore dei laboratori di Los Alamos dove si ritrovano le idee embrionali della simulazione, con la produzione teorica del matematico Ulam, affiancata alle intuizioni tecnologiche di Von Neumann.

La scienza c'è, e in modo parallelo viene raccontata e diffusa, poiché strettamente legata a eventi storici, politici, industriali e non solo perché produttrice di idee e conoscenza.

²⁵ Colloquio con Giovanni CICCOTTI, professore ordinario di Struttura della materia all'università La Sapienza di Roma

Produrre un prodotto comunicativo, che sia un libro o anche una mostra, non risponde alla volontà di soddisfare un bisogno per così dire “pubblicitario” al servizio di una scienza, quella simulativa, che nei suoi aspetti accademici ancora poco esce allo scoperto e ancora poco è conosciuta davvero nei suoi aspetti di legittima pratica scientifica, ma quello di ricostruire e conoscere se effettivamente esiste un legame tra produzione scientifica tradizionale/accademica e immaginario collettivo.

Per concludere con un ragionamento più generale, la fisica è stata ed è ancora, con le sue nuove pratiche e i suoi nuovi metodi, creatrice di immagini e rappresentazioni per così dire “narrative e affascinanti” che rielaborate e alle volte distorte, contaminano intrusivamente e con fascino i luoghi mentali di chi non la pratica.

La simulazione ne è, a mio avviso, un esempio.

Tutto sta nel capire quanto la *fisica*, intesa come gruppo sociale di persone che la praticano e la diffondono, voglia essere protagonista nel mantenere un contatto con gli immaginari creati allo scopo di comprenderne ruoli e funzionalità.

Bibliografia

1. Intervista a Michele PARRINELLO, *Nòva - Il Sole 24 Ore*, 26 Aprile 2007
2. HANSEN, Jean-Pierre, “An Introduction to molecular dynamics, with applications to the glass transition”, *Computer simulation in material science*, a cura di Madeleine Meyer e Vassilis Pontikis
3. CICCOTTI, Giovanni, “Il computer, macchina dei sogni della Fisica Teorica”, *Lettera internazionale*, 61, terzo trimestre, 1999
4. WIGNER E.P. e HUNTINGTON H.P., *The Journal of Chemical Physics*, 3, 764, 1935
5. WIENER Norbert, *I am mathematician: the later life of a prodigy*, MIT Press, Cambridge 1964
6. CONWAY, F. e SIEGELMAN, J., *L'eroe oscuro dell'età dell'informazione. Alla ricerca di Norbert Wiener, il padre della cibernetica*, traduzione di Paola Bonini, Codice Edizioni, Torino 2005
7. METROPOLIS, Nicholas, The beginning of the Monte Carlo Method, *Los Alamos Science*, Special Issue, 1987
8. ULAM, Stanislaw, M., *Adventures of a mathematician*, University of California Press, Berkeley, 1976
9. GUBERNATIS, J.E., *The heritage. The Monte Carlo method in the physical science. Celebrating the 50th anniversary of the Metropolis algorithm*, Los Alamos National Laboratory, AIP (American Institute of Physics) Conference Proceedings, 690, New York, 2003
10. CICCOTTI Giovanni, FRENKEL Daan, McDONALD Ian R., *Simulation of liquids and solids. Molecular dynamics and Monte Carlo Methods in statistical mechanics*, North Holland, Amserdam, Oxford, New York, Tokyo, 1987
11. PITRELLI N., CASTELFRANCHI Y., *Come si comunica la scienza?*, Editori Laterza, Roma – Bari 2007
12. KUHN Thomas, *La struttura delle rivoluzioni scientifiche*, Einaudi, 1969
13. MERZAGORA Matteo, *Scienza da vedere*, Sironi Editore, Milano, 2006
14. GIBBONS M., LIMOGES C., NOWOTNY H., SCHWARTZMAN S., SCOTT P., TROW M., *The new production of knowledge: the dynamic of science and research in contemporary societies*, Sage Publication, 1994

15. BOURDIEU Paul, *Il mestiere di scienziato*, Feltrinelli, Milano 2003
16. CASTELFRANCHI Yuri, “Per una paleontologia dell’immaginario scientifico”, in PITRELLI N. e STURLONI G. (a cura di), *La comunicazione della scienza. Atti del I e II convegno nazionale*, Zadigroma, Roma 2004
17. GOVONI Paola, *Che cos’è la storia della scienza*, Carocci, Roma 2004
18. GRECO Pietro, “Communicating in the post-academic era of science”, *Journal of Science Communication*, 1 (1), 2002
19. GRECO Pietro, “Il modello Venezia. La comunicazione nell’era post-accademica della scienza”, in PITRELLI N. e STURLONI G. (a cura di), *La comunicazione della scienza. Atti del I e II convegno nazionale*, Zadigroma, Roma 2004
20. PIELKE Roger Jr., *Scienza e politica. La lotta per il consenso*, Editori Laterza, Roma – Bari 2005
21. PITRELLI Nico, “Tra teoria e pratica nelle scuole di comunicazione della scienza”, in PITRELLI N. e STURLONI G. (a cura di), *La comunicazione della scienza. Atti del I e II convegno nazionale*, Zadigroma, Roma 2004
22. RUSSO Lucio, *La rivoluzione dimenticata. Il pensiero scientifico greco e la scienza moderna*, Feltrinelli, Milano 1996
23. TURNEY Jon, *Sulle tracce di Frankenstein*, Edizioni di Comunità, Torino 2000
24. ZIMAN John, *La vera scienza. Natura e modelli operativi della prassi scientifica*, Edizioni Dedalo, Bari 2002
25. GOUTHIER D. e JOLI E., “La scienza di fronte all’inesattezza del reale – il senso del bello scientifico”, *Alliage* 2004
26. GAMOW George, *Trent’anni che sconvolsero la fisica. La storia della teoria dei quanti*, Zanichelli Editore, Bologna 1966
27. PARISI Domenico, *Simulazioni. La realtà rifatta nel computer*, Il Mulino, Bologna, 2001
28. METROPOLIS N., ROSENBLUTH A.W., ROSENBLUTH M.N., TELLER A.H. e TELLER E., “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines”, *The Journal of Chemical Physics*, Volume XXI, Issue 6, June 1953, pp. 1087-1092
29. WOOD, W.W. e PARKER F.R., “Monte Carlo equation of state of molecules interacting with the Lennard – Jones potential. I. A supercritical isotherm at

- about twice the critical temperature”, *The Journal of Chemical Physics*, Volume XXVII, Issue 3, September 1957, pp. 720 – 733
30. BRUSH S.G., SAHLIN H.L. e TELLER E., “Monte Carlo study of a one-component plasma. I”, *The Journal of Chemical Physics*, Volume 45, Issue 6, September 1966, pp. 2102 – 2118
31. HOOVER W.G. e REE F.H., “Use of computer experiments to locate the melting transition and calculate the entropy in the solid phase”, *The Journal of Chemical Physics*, Volume 47, Issue 12, December 1967, pp. 4873 – 4878
32. WOOD W.W., “Monte Carlo calculation for hard disks in the isothermal - isobaric ensemble”, *The Journal of Chemical Physics*, Volume 48, Issue 1, January 1968, pp. 415 – 434
33. WOOD W.W., “ NpT -ensemble Monte Carlo calculation for the hard disk fluid”, *The Journal of Chemical Physics*, Volume 52, Issue 2, January 1970, pp. 729 – 741
34. HANSEN J.P. e VERLET L., “Phase transitions of the Lennard – Jones system”, *Physical Review*, Volume 184, Issue 1, August 1969, pp. 151 - 161
35. FILINOV V.S. e NORMAN G.E., “Investigation of phase transitions by the Monte Carlo method (vapor – liquid transition in inert gases based on Monte Carlo method, including comparison with Van der Waals equation and plasma ionization equilibrium)”, *Teplofizika Vysokikh Temperatur*, Volume 7, 1969, pp. 233 - 240
36. McDONALD I.R., “ NpT – ensemble Monte Carlo calculations for binary liquid mixtures”, *Molecular Physics*, Volume 23, Issue 1, January 1972, pp. 41 – 58
37. VALLEAU J.P. e CARD V.N., “Monte Carlo estimation of the free energy by multistage sampling”, *The Journal of Chemical Physics*, Volume 57, Issue 12, December 1972, pp. 5457 – 5462
38. ADAMS D.J., “Chemical potential of hard – sphere fluids by Monte Carlo methods”, *Molecular Physics*, Volume 28, Issue 5, November 1974, pp. 1241 – 1252
39. BENNET C.H., “Efficient estimation of free energy differences from Monte Carlo data”, *Journal of Computational Physics*, Volume 22, Issue 2, October 1976, pp. 245 – 268

40. TORRIE G.M. e VALLEAU J.P., “Nonphysical sampling distributions in Monte Carlo free - energy estimation: umbrella sampling”, *Journal of Computational Physics*, Volume 23, Issue 3, March 1977, pp. 327 – 341
41. VALLEAU J.P. e COHEN L.K., “Primitive model electrolytes. I. Grand canonical Monte Carlo computations”, *The Journal of Chemical Physics*, Volume 72, Issue 11, June 1980, pp. 5935 – 5941
42. SHING K.S. e GUBBINS K.E., “The chemical potential in dense fluids and fluid mixtures via computer simulation”, *Molecular Physics*, Volume 46, Issue 5, August 1982, pp. 1109 – 1128
43. FRENKEL D. e LADD A.J.C., “New Monte Carlo method to compute the free energy of arbitrary solids. Application to the *fcc* and *hcp* phases of hard spheres”, *The Journal of Chemical Physics*, Volume 81, Issue 7, October 1984, pp. 3188 – 3193