Considerazioni sul modello di Ehrenfest [(#)]

§1. *Premessa*

Sul n. 241 del 2006 di *Didattica delle Scienze* è stato pubblicato l'articolo: "Entropia: un modello statistico per Microsoft Excel" di Davide Neri e Valerio Innocenti Sedili. Nell'articolo, gli autori analizzano il modello che Paul e Tatiana Ehrenfest introdussero nel 1907 per rendere conto della natura statistica dell'entropia.

Non intendo, né potrei farlo, aggiungere nulla al lavoro dei due autori, voglio menzionarlo perché essi hanno realizzato con Microsoft Excel una simulazione, molto efficace, del modello di Ehrenfest. L'articolo di Neri e Innocenti Sedili non è centrato, comunque, sulla simulazione del modello di Ehrenfest, essa è stata sviluppata dagli autori perchè è uno strumento che agevola gli studenti nel fecondo passaggio dal microscopico al macroscopico aiutandoli a distinguere tra il carattere delle affermazioni della termodinamica classica e quelle della termodinamica statistica. Le prime hanno carattere tendenzialmente assoluto, le seconde hanno carattere probabilistico e consentono di superare la dicotomia tra descrizione macroscopica e microscopica di un dato sistema conciliandole in una visione complessiva. In ambito didattico, il modello di Ehrenfest può essere usato dagli studenti delle scuole superiori, ed i suoi risultati possono essere opportunamente esaminati e discussi ad un livello che ciascun docente riconoscerà più adeguato all'utenza ed ai curricoli. Questo contributo parte dall'uso concreto dei risultati della simulazione del modello di Ehrenfest per proporre lo sviluppo di argomenti che generalmente non vengono trattati o non possono essere approfonditi come meriterebbero. Inoltre, ho cercato di evidenziare la necessità di usare un approccio microscopico per comprendere

[(#)] B. Raimondi. I.T.I.S. "V. E. III", via duca della Verdura, 90143 Palermo.

l'evoluzione spontanea dei sistemi macroscopici verso stati d'equilibrio. La simulazione del modello è disponibile sul web, l'url è:
www.liceosabin.it/testi/Ehrenfest.html

2§. *Cenni al modello di Ehrenfest e uso pratico della simulazione di Neri e Innocenti Sedili.*

Il concetto di entropia è forse uno tra i più "indigesti" per gli studenti delle scuole medie superiori. Comprendere, senza concezioni difformi, la natura statistica dell'entropia aiuta gli studenti a comprendere, in termini microscopici, il comportamento macroscopico di un sistema chimico-fisico. In questa cornice, lo studio e l'applicazione del modello di Ehrenfest giocano un ruolo chiave. Tale modello esemplifica un fenomeno di diffusione nel seguente modo. Siano date N palline, numerate da 1 a N, distribuibili tra due scatole indicate con A e B. Indichiamo con N_A e N_B il numero di palline contenute, rispettivamente nelle scatole A e B (popolazioni rispettive delle due scatole), col vincolo che:

$N = N_A + N_B$

Uno stato macroscopico del sistema, con N_A palline in A e N_B in B, lo indichiamo con $[N_A, N_B]$. Ad ogni stato macroscopico corrispondono tutti gli stati microscopici permessi dalle permutazioni tra le palline senza modificare le popolazioni N_A e N_B. Inizialmente tutte le N palline siano nella scarola A, lo stato macroscopico é $[N, 0]$. Lo stato macroscopico $[N, 0]$ corrisponde a quello di una certa quantità di gas, costituito da N molecole uguali, inizialmente confinata in una metà del recipiente che lo contiene. L'altra metà è vuota ed è separata da quella che contiene il gas da un rubinetto, la temperatura è costante. Ad ogni pallina (corrispondente ad una molecola) associamo un solo biglietto con lo stesso numero, i biglietti sono contenuti in un'urna. Ogni volta che viene estratto un biglietto, la pallina corrispondente verrà spostata dalla scatola in cui si trovava prima dell'estrazione all'altra, il biglietto verrà reintrodotto nell'urna. Lo spostamento d'una pallina da una scatola all'altra corrisponde alla migrazione di una molecola del gas da una parte all'altra del recipiente dopo l'apertura del rubinetto. Dopo il ricollocamento del biglietto nell'urna, si procede con una nuova estrazione spostando la pallina, avente il numero del biglietto estratto, dalla scatola in cui si trovava prima dell'estrazione all'altra. Sia K il numero delle estrazioni, se questo è sufficiente grande, le palline tenderanno a distribuirsi equamente tra le due scatole con possibili fluttuazioni, anche ampie, dallo stato d'equilibrio: quello con lo stesso numero di palline in A e B cioè lo stato [N/2, N/2]. Raggiunto lo stato d'equilibrio [N/2, N/2], la probabilità di discostarsi da esso, o che si riproduca uno degli stati con tutte le palline rispettivamente in A (stato [N, 0]), o in B (stato [0, N]), è tanto più piccola quanto più grande è N. [N, 0] e [0, N] non corrispondono solo alla localizzazione iniziale delle particelle del gas su uno solo dei due lati del contenitore. Il gas, raggiunto lo stato d'equilibrio [N/2, N/2], potrebbe autocomprimersi fino ad avere tutte le sue molecole su una sola metà del suo contenitore, gli stati saranno proprio [N, 0] oppure [0, N]. Il modello di Ehrenfest è piuttosto semplice ed è facile da realizzare ed applicabile concretamente. Esso ha uno svantaggio: i tempi occorrenti per ottenere risultati significativi sono lunghi. Ad esempio, se N = 20 e K = 1.000, ipotizzando che basterebbero 5 secondi per ogni osservazione (estrazione, spostamento, conteggio, etc.), **il lavoro si completerebbe in circa 5.000 secondi, cioè più di un'ora**! La simulazione realizzata da Neri ed Innocenti Sedili permette, invece, di verificare tutti i risultati accennati in pochi secondi. Essa è strutturata su 5 fogli di lavoro di Microsoft Excel. Nei primi quattro fogli, a partire dallo stato [N, 0] e per N rispettivamente uguale a: 20, 40, 80 e 160, si simulano 1.000 estrazioni ovvero $1 \le K \le 1.000$. Ciascuno dei primi quattro fogli, contiene due grafici, uno riporta il N_B vs K estrazioni, l'altro grafico riporta il valore dell'entropia S, ricavato applicando l'equazione di Boltzmann ad ogni stato raggiunto dopo K estrazioni, sempre rispetto a K. In ciascuno dei quattro grafici di S rispetto a K, il valore massimo di S è contraddistinto da una linea orizzontale verde. Il quinto foglio, chiamato "Confronto grafici", contiene i quattro precedenti grafici dell'entropia e visualizza le differenti fluttuazioni dal valore massimo di S, quello all'equilibrio, per *N* rispettivamente uguale a: 20, 40, 80 e 160. Ognuno dei primi quatto fogli contiene due pulsanti. Cliccando sul pulsante 

si lancia la sequenza delle 1.000 estrazioni. Cliccando sul pulsante 

si ripristina lo stato [*N*, 0], si cancellano i grafici e si può ricominciare con la sequenza delle estrazioni. La simulazione del modello di Ehrenfest rende conto di tre importantissimi aspetti che evidenziano la natura statistica dell'entropia e fanno risaltare il carattere d'attrattore che lo stato d'equilibrio esercita sui sistemi lontani da questo. I tre aspetti sono:

1. Lo stato d'equilibrio è quello più probabile.
2. Se si parte da uno stato lontano dall'equilibrio si avrà evoluzione verso lo stato d'equilibrio.
3. Può sempre accadere che un sistema transiti da uno stato più probabile verso uno meno probabile.

I tre punti possono essere esaminati, e compresi anche da un punto di vista quantitativo, applicando l'equazione di Boltzmann che lega l'entropia S alla probabilità termodinamica W di un dato stato macroscopico, k è la costante di Boltzmann:

$$S = k \ln W$$

La probabilità termodinamica W è il numero di complessioni corrispondenti a tutte le permutazioni tra le palline che lasciano invariati N_A e N_B. W è data da:

$$W = \frac{N!}{N_A!\,N_B!}$$

quindi l'equazione di Boltzmann può essere scritta come:

$$S = k\ \ln\left(\frac{N!}{N_A!\,N_B!}\right) \quad (1)$$

L'entropia S cresce al crescere di W e, per un dato valore di N, **il valore massimo di W e quindi dell'entropia S, si ha proprio se $N_A = N_B = N/2$ cioè se le palline sono equidistribuite tra le due scatole**.

Passiamo al punto 2, lo stato iniziale [N, 0] è lontano da quello d'equilibrio. Vediamo come il modello di Ehrenfest permette di verificare facilmente che se un sistema si trova lontano dall'equilibrio, esso evolverà spontaneamente verso questo. Se il sistema si trova, ad un dato istante, nello stato [N_A, N_B] la probabilità che transiti, in seguito a spostamento d'una pallina da A a B, allo stato [N_A -1, N_B +1] è uguale al rapporto N_A /N. La probabilità di passare, in seguito a migrazione d'una pallina da B ad A, da [N_A, N_B] a [N_A +1, N_B -1] è uguale al rapporto N_B /N. È evidente che:

a) se $N_A > N_B$ è più probabile la transizione da [N_A , N_B] verso [N_A -1, N_B +1];
b) se $N_A < N_B$ è più probabile la transizione da [N_A , N_B] verso [N_A +1, N_B -1].

Le precedenti considerazioni possono essere applicate fedelmente all'espansione spontanea d'un gas nel vuoto o da regioni a pressione (o concentrazione) maggiore verso altre a pressione (o concentrazione) minore. **La diffusione è sempre più probabile nel verso da dove la concentrazione è maggiore a dove la concentrazione è minore**. **La diffusione in verso opposto non è impossibile, è solo meno probabile**.

Per quanto riguarda il punto 3, consideriamo la transizione dallo stato d'equilibrio [N/2, N/2], avente massima probabilità ed entropia, verso uno degli stati [N, 0] oppure [0, N] attraverso una sequenza di estrazioni che corrispondono a migrazioni di molecole del gas da un solo lato del contenitore verso l'altro. In altri termini la transizione dallo stato [N/2, N/2] verso uno degli stati [N, 0] o [0, N] corrisponde all'autocompressione del gas verso una sola metà del recipiente che lo contiene. Lo stato d'equilibrio [N/2, N/2] ha entropia massima, pari a $k \ln \frac{N!}{N/2!\ N/2!}$, i due stati [*N*, 0] e [0, *N*] hanno entropia minore della precedente, pari a $k\ \ln\left(\frac{N!}{N!\ 0!}\right) = 0$.

Se $N = 20$, la probabilità che avvenga l'autocompressione è $3{,}5 \cdot 10^{-7}$, se $N = 100$, la probabilità scende a $3 \cdot 10^{-36}$. Per valori ancora più grandi di *N*, dell'ordine del numero d'Avogadro, la probabilità d'evoluzione da stati più probabili verso stati meno probabili decresce fino a valori praticamente irrisori. Per chiarire ulteriormente le idee, consideriamo una ben precisa sequenza di estrazioni che portano il sistema da [*N*, 0] allo stato d'equilibrio [*N*/2, *N*/2] e la sequenza inversa d'estrazioni che porta il sistema dallo stato d'equilibrio [*N*/2, *N*/2] allo stato [*N*, 0]. Le due sequenze, considerate singolarmente, hanno la stessa probabilità, ma la prima, quella nel verso [*N*, 0] $\rightarrow$ [*N*/2, *N*/2], è solo **una delle più numerose** che fanno evolvere il sistema verso l'equilibrio. La sequenza d'estrazioni che provoca la transizione inversa: [*N*/2, *N*/2] $\rightarrow$ [*N*, 0] è, invece **una delle poche** che allontano il sistema dall'equilibrio verso la condizione iniziale (ciò corrisponde alla poco probabile autocompressione spontanea d'un gas).

La simulazione permette di confrontare visivamente l'evoluzione dei quattro insiemi di palline definiti prima. Essi partono tutti dalla condizione [*N*, 0]. Nel quinto foglio si vede bene che nello stato d'equilibrio [*N*/2, *N*/2], più probabile e di massima entropia, si hanno delle fluttuazioni, ma la loro ampiezza decresce al crescere di *N*. Una conseguenza significativa di questa discussione è che i sistemi macroscopici isolati, lontani dall'equilibrio, evolvono spontaneamente verso questo e che l'equilibrio, comunque, è microscopicamente reversibile.

In ambito didattico, i risultati della simulazione e il confronto tra l'ampiezza delle fluttuazioni che la popolazione delle scatole può subire rispetto allo stato d'equilibrio [*N*/2, *N*/2] possono essere usati per smussare la perentorietà di certe affermazioni con cui il secondo principio della termodinamica è stato formulato.

In particolare occorre insistere sulla sostituzione della parola “impossibile”, tipica degli enunciati originari di Kelvin e Clausius, con l’espressione “estremamente improbabile”. La parola “impossibile” esclude la possibilità di fluttuazioni rispetto alla condizione d’equilibrio; l’espressione “estremamente improbabile”, invece, è di più ampio respiro ed agevola la comprensione della tendenza dei sistemi macroscopici isolati ad evolvere spontaneamente verso condizioni di entropia massima e d’equilibrio. A tal fine, l’approccio microscopico è indispensabile.

3§. *Considerazioni ulteriori e proposte d’approfondimento interdisciplinare*.

Paul Ehrenfest fu allievo di Ludwig Boltzmann e quest’ultimo fu tra gli studiosi che ricorse al concetto di probabilità per studiare i sistemi complessi. La probabilità, però, non servì a Boltzmann come strumento d’approssimazione ma come strumento per spiegare il comportamento di sistemi complessi quali i sistemi molto popolati.

La discussione dei risultati ottenuti con la simulazione del modello di Ehrenfest apre la strada ad approfondimenti disciplinari ed interdisciplinari. Accennerò ad alcune opportunità d’approfondimento, ogni docente potrà sviluppare il proprio lavoro come ritiene più opportuno.

Nell’ottica di uno studio storico della scienza, il modello di Ehrenfest potrebbe essere usato come punto di partenza per approfondire la questione del rapporto tra il concetto termodinamico di attrattore e quello delle leggi del moto. Le leggi del moto di Newton sono simmetriche rispetto al tempo e non proibiscono un’inversione dei fenomeni, non a caso si può parlare dei fenomeni meccanici in termini di fenomeni **idealmente reversibili**. L’evoluzione macroscopica da stati più probabili, aventi maggiore entropia, verso stati meno probabili, di minore entropia, è interpretabile in termini d’inversione del verso del moto delle molecole ma per la termodinamica classica è paradossale. Il modello di Ehrenfest aiuta a comprendere come l'evoluzione, irreversibile, da stati lontani dall'equilibrio verso lo stato d'equilibrio è un'evoluzione da stati meno probabili verso uno stato più probabile, proprio quello d'equilibrio avente massima entropia. Lo stato d'equilibrio è, per i sistemi lontani da esso, un attrattore ed indirizza la loro evoluzione irreversibilmente. Tale evoluzione può essere accompagnata da temporanee, seppure poco probabili, inversioni. Ecco allora che il contrasto tra irreversibilità macroscopica e reversibilità microscopica si ricompone in una prospettiva unica, quella probabilistica che mette in evidenza la complementarità delle dimensioni microscopiche e macroscopiche dei fenomeni reali.

Un altro aspetto, molto fecondo, collegato al precedente e non solo di pertinenza della termodinamica, è quello del rapporto tra tempo ed entropia. Si potrebbe ipotizzare che, nel modello di Ehrenfest, lo scorrere del tempo sia scandito dalle estrazioni. Nei sistemi isolati, i fenomeni termodinamici, e non solo, sono **intrinsecamente irreversibili** perché la loro evoluzione temporale è governata dalla tendenza verso uno stato di massima entropia e probabilità. Così la tendenza verso uno stato di massima entropia impone ai fenomeni un verso o, se si vuole, un'evoluzione cronologica non invertibili. La natura, secondo la formulazione di Clausius del secondo principio, si evolve spontaneamente verso una condizione di massima entropia. Vari studiosi, tra cui Ilya Prigogine, hanno fatto notare che se il verso del tempo è determinato dalla natura, cade la distinzione tra tempo fisico, il cui verso è proprio determinato dall'incremento dell'entropia, e tempo filosofico.

Nel lavoro di Neri ed Innocenti Sedili s'evidenzia, pure, il problema del rapporto tra probabilità soggettiva e probabilità oggettiva. Nell'articolo si mette in evidenza che se potessimo sapere in anticipo, come il demone di Laplace, il risultato delle estrazioni senza però influenzarle col nostro arbitrio, assisteremmo in ogni caso ad un netto processo di diffusione delle palline dalla scatola A verso la B fino all'equipartizione. Si può allora dedurre che l'evoluzione verso stati d'equilibrio, e la loro permanenza in tali stati a meno delle fluttuazioni, sono proprietà intrinseche ai sistemi fisici e non dipendono dal grado di conoscenza che possiamo avere di tali sistemi. Per citare gli autori: "*Questi processi irreversibili avvengono sia che conosciamo lo stato dettagliato del sistema, sia che non lo conosciamo. Viene messa in crisi, in questo modo, la falsa analogia spesso invocata dai sostenitori dell'interpretazione soggettivista della probabilità … che porta a considerare l'entropia come misura della mancanza d'informazione (soggettiva) piuttosto che come misura del disordine (oggettivo).*". Una descrizione soggettivista dell'evoluzione spontanea dei fenomeni tende ad assimilare l'entropia alla disinformazione che si ha sul sistema in studio. Con questo tipo di argomentazioni, però, si dimentica che la disinformazione, secondo i soggettivisti, aumenta sempre mentre l'entropia, come si può dimostrare col modello di Ehrenfest, ha un aumento monotono solo se il numero di particelle è infinito. Chi volesse sostenere una descrizione di tipo soggettivista deve, inevitabilmente rinunciare alle fluttuazioni o attribuire a sistemi intrinsecamente discreti una struttura continua. La contraddizione è evidente.

Se si attribuisce alla probabilità della meccanica statistica un carattere oggettivo, la reversibilità microscopica intrinseca di ogni singola estrazione (o migrazione delle molecole di un gas attraverso il contenitore), e l'irreversibilità macroscopica dell'evoluzione verso stati di massima entropia non sono più in contraddizione, ma divengono complementari.

4§. *Conclusioni*

In questa riflessione ho cercato di evidenziare, traendo spunto da un articolo pubblicato su *Didattica delle Scienze*, i vantaggi del modello di Ehrenfest come strumento didattico per comprendere meglio il secondo principio della termodinamica e la natura statistica dell'entropia. Dall'esposizione emerge on forza l'ineludibilità dell'approccio microscopico per comprendere il comportamento dei sistemi macroscopici reali.

Il modello di Ehrenfest è un'occasione per ricchi approfondimenti disciplinari ed interdisciplinari. Bisogna tenere presente che se il livello degli argomenti oggetto di tali approfondimenti è molto elevato, essi non possono essere sviluppati in tutti i tipi di scuola media superiore.

Resta, tuttavia, la possibilità di approfondire molti argomenti, afferenti all'entropia ed al secondo principio, che possono essere il punto di partenza per sviluppare studi interdisciplinari che superino la gratuita separazione tra le due culture, umanistica e scientifica e riuniscano in un'unica prospettiva discorsi propri delle scienze dure, con discorsi storici e filosofici.