



## Scuola Permanente per l'Aggiornamento degli Insegnanti di Scienze Sperimentali

Quali conoscenze di base per comprendere l'innovazione?

XVIII Edizione

*Dal Caos al Cosmos. Casualità e probabilità nelle scienze*

Hotel Eolian - Milazzo (Me), 24-28 luglio 2024

### Programma

	Mer 24	Gio 25	Ven 26	Sab 27	Dom 28
9:00		Arianna Calistri	Valeria Pittalà	Roberto Pirrone	Paolo Arena
10:00		A. Cannata F. Panzera	Alessandro Pluchino	Anna Maria Pappalardo	Isabella Felli
11:00	INTERVALLO				
11:30		Paolo Ossi	Alfredo Pulvirenti	Rosario Lo Franco	
13:00	PRANZO				
15:00	Registrazione	Lab 1 Il principio Scolastica Serroni	Lab. 2 Escursione Naturalistica	Lab 3 Giuseppa Cappuccio	
15,30	Apertura:				
16:00	Alfio Briguglia				
17:00	Salvatore Magazù				
18:00	Discussione				
19.00					

**Arena Paolo**, Dipartimento di Ingegneria Elettrica, Elettronica e Informatica,  
Università degli Studi di Catania.  
Email: paolo.arena@unict.it

*Neuroscienze computazionali e Biorobotica*

Una delle prospettive più affascinanti di una branca dell'intelligenza artificiale e della robotica è quella di comprendere, studiare e carpire i dettagli della struttura anatomico-funzionale del cervello per poterne costruire modelli matematico-computazionali che possano riprodurre le capacità e quindi costruire delle macchine dotate di intelligenza "neuro-ispinata". Se ciò risulta particolarmente ostico in riferimento all'estrema complessità del cervello umano, lo è in misura certamente inferiore per cervelli di esseri molto più semplici, ma certamente ricchi di sorprendenti capacità e mirabili comportamenti adattativi: gli insetti. In questa prospettiva verrà presentato un breve viaggio alla scoperta di alcune caratteristiche degli insetti che sono state riprodotte all'interno dei nostri laboratori, in insettoidi, ovvero robot bio-ispinati, con comportamenti e con fattezze che mimano le complesse strutture cerebro-corporee degli insetti.

**Alfio Briguglia**, Docente di Matematica e Fisica e Componente gruppo Storia della Fisica AIF  
Email: alfiobriguglia@gmail.com

*La sfida termodinamica alla meccanica: Maxwell, Boltzmann, Planck, Einstein e la nascita della meccanica statistica.*

Nella seconda metà dell'Ottocento si accende il dibattito sul ruolo, solo euristico o anche esplicativo, dei modelli, sulla loro capacità di rappresentare il mondo. Nel tentativo di dare una risposta meccanica al problema della irreversibilità non si poteva fare a meno di tirare in ballo modelli atomici. E per spiegare il macroscopico attraverso il microscopico era inevitabile utilizzare concetti tratti dal calcolo delle probabilità che avevano conosciuto con Laplace una sistemazione rigorosa. Clausius e Maxwell focalizzarono la loro attenzione su situazioni di equilibrio. Ma come trattare l'irreversibilità tipica del passaggio da una situazione qualunque all'equilibrio? Bisognava accettare la irreversibilità come un fatto o si poteva darne una spiegazione a partire da atomi e molecole? Boltzmann si lanciò per questa strada e con lui la statistica irruppe nella "scienza del calore". Nasceva la meccanica statistica.

L'ingresso del caso e della probabilità nella meccanica è un ingresso che non si rivelerà solo provvisorio o come utile strategia algoritmica ma che si insidierà nel cuore dei processi microfisici sempre più a fondo. Così la scienza del calore, "prototipo dell'ideale meccanicistico" (M. Badino), si rivelerà la via maestra verso un nuovo paradigma della razionalità scientifica. Planck, qualche decennio dopo Boltzmann, dopo una lunga lotta contro il caso, dovette adottare i metodi dello scienziato viennese per spiegare lo spettro di radiazione del corpo nero. Sarà considerato da Planck un gesto disperato. Einstein, invece, con la baldanza dell'iconoclasta, farà della probabilità una comoda via verso la quantizzazione della radiazione elettromagnetica e lo studio del moto browniano. Con l'avvento della MQ la probabilità da "epistemica" diventerà "intrinseca" o, come preferiscono alcuni fisici "ontologica".

**Arianna Calistri**, Dipartimento di Medicina Molecolare, Università degli Studi di Padova  
Email: arianna.calistri@unipd.it

*Teoria del Chaos applicata allo studio delle pandemie*

Fin dalla Peste di manzoniana memoria, la gestione di pandemie sostenute da agenti infettivi è considerata uno degli eventi a maggior impatto sulla Salute Pubblica. La recente pandemia di COVID-19, dovuta a SARS-COV-2, ha evidenziato come questa gestione abbia ricadute importanti in ambiti diversi che vanno al di là di quello immediatamente sanitario. Molti modelli matematici sono stati sviluppati e testati nel corso degli anni per aiutare a prevenire ed eventualmente a gestire epidemie e pandemie. In questa relazione cercherò di illustrare, utilizzando principalmente il COVID-19 come modello, alcuni di questi concetti e di come la teoria del Caos possa trovare applicazione in questo e altri aspetti legati alle malattie infettive.

**Andrea Cannata e Francesco Panzera**, Dipartimento di Scienze Biologiche, Geologiche e Ambientali,  
Università degli Studi di Catania  
Email: andrea.cannata@unict.it, francesco.panzera@unict.it

### *Sismologia uno strumento per “ascoltare” la dinamica della Terra*

La sismologia, tradizionalmente focalizzata sullo studio dei terremoti e delle faglie, ha compiuto notevoli progressi, aprendo nuove frontiere di ricerca. Questa presentazione inizierà con una panoramica dei concetti fondamentali relativi ai terremoti e alle faglie, illustrando i meccanismi di generazione dei terremoti, come essi vengono studiati dai sismologi sia per scopi di monitoraggio che di ricerca.

Successivamente, verranno esplorati aspetti innovativi della sismologia moderna. Tra questi, verrà mostrato come la sismologia possa aiutare a ricavare informazioni sulle altre porzioni del sistema Terra, quali l'idrosfera, l'atmosfera e la criosfera. Verrà inoltre come, grazie alle missioni spaziali equipaggiate con sismometri, sia possibile investigare la composizione interna di pianeti come Marte, contribuendo a delineare l'anatomia planetaria e a comprendere meglio la formazione e l'evoluzione del Sistema Solare. Questa presentazione intende fornire una visione integrata delle innovazioni in sismologia, evidenziando come l'applicazione di nuove tecnologie e metodologie stia ampliando le frontiere della ricerca e offrendo nuove prospettive per la comprensione del nostro pianeta e oltre.

**Isabella C. Felli** Dipartimento di Chimica “Ugo Schiff” Università degli Studi di Firenze e CERM  
Email: [felli@cerm.unifi.it](mailto:felli@cerm.unifi.it)

### *Proteine intrinsecamente disordinate: dal caos informazioni per la cellula*

Per tanto tempo si è ritenuto che la funzione delle proteine, macromolecole biologiche che svolgono un ruolo chiave per i processi alla base della vita, fosse strettamente associata al concetto di ordine. Molte proteine con strutture tridimensionali ordinate sono presenti nel database dedicato alla loro raccolta (protein data bank - PDB - <https://www.rcsb.org/>). Il protein data bank costituisce la base per spiegare come l'architettura delle proteine può codificare importanti funzioni svolte dalle proteine stesse, secondo il paradigma struttura-funzione basato sul concetto che la funzione delle proteine è determinata unicamente dalla loro struttura tridimensionale. Vari libri di testo mostrano bellissime immagini delle strutture delle proteine che interagiscono con altre proteine tramite precise superfici complementari o che legano potenziali farmaci. Il settore dello sviluppo di farmaci infatti si basa sull'identificazione di molecole che si adattano perfettamente alle cavità presenti sulla superficie delle proteine secondo il concetto chiave-serratura (lock-and-key) e questa logica viene utilizzata per disegnare molecole con affinità crescente per un determinato target proteico. I recenti progressi dei metodi computazionali basati sull'intelligenza artificiale, partendo dalle informazioni riportate nel protein data bank, hanno permesso di espandere ulteriormente la conoscenza dei principi che regolano l'ordine strutturale delle proteine (Alphafold - <https://alphafold.ebi.ac.uk/>).

D'altra parte con il progredire della ricerca nel campo delle proteine è emerso che esistono anche molte proteine, o grandi frammenti di proteine complesse, che non adottano una struttura tridimensionale ordinata. Tali proteine, comunemente chiamate proteine intrinsecamente disordinate, sono state a lungo trascurate in quanto non rientravano nella logica del paradigma struttura-funzione e pertanto venivano considerate di scarso interesse e spesso descritte usando termini bizzarri (proteine malleabili, vulnerabili, camaleontiche, nuvole proteiche, proteine danzanti, etc.) e poi raramente studiate in dettaglio. D'altra parte è ovvio che un alto grado di flessibilità e disordine conferisce alle proteine molteplici proprietà che sono complementari rispetto a quelle derivanti da uno stato ordinato. Ad esempio, mentre il mondo della catalisi enzimatica è strettamente associato al concetto di ordine strutturale, quello del riconoscimento molecolare e della trasmissione di segnali nella cellula è invece fortemente legato al concetto di flessibilità e disordine molecolare. Il disordine molecolare sembra addirittura aumentare al crescere della complessità degli organismi. Molte delle proteine intrinsecamente disordinate sono alla base di processi chiave per la vita ed il loro mal funzionamento può portare a malattie ad oggi incurabili (malattie neurodegenerative, tumori, infezioni virali).

Tra le tecniche utilizzate per lo studio ad alta risoluzione delle proteine la spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (NMR) risulta quella più adatta per ottenere informazioni non solo sulla struttura ma anche sulla flessibilità delle proteine e sulle molteplici interazioni in cui sono coinvolte, quali ad esempio con ioni metallici, potenziali farmaci, acidi nucleici, membrane biologiche.

Le proteine intrinsecamente disordinate costituiscono quindi un settore di ricerca emergente e di grande interesse scientifico. In questo seminario illustrerò i recenti progressi in questo settore mettendo in evidenza come è cambiata la nostra percezione del mondo delle proteine, dove al concetto di ordine va ora associata una nuova dimensione, quella del disordine.

**Rosario Lo Franco** Dipartimento di Ingegneria dell'Università di Palermo.  
Email: [rosario.lofranco@unipa.it](mailto:rosario.lofranco@unipa.it)

### *Tecnologie quantistiche: stato dell'arte e prospettive*

L'utilizzo opportuno di proprietà fondamentali di particelle quantistiche (atomi, fotoni, elettroni, nuclei), permette lo sviluppo di tecnologie rivoluzionarie, come il computer quantistico. Quest'ultimo possiede capacità di calcolo che potrebbero risolvere in pochi secondi problemi complessi che richiederebbero migliaia di anni ai più potenti supercomputer odierni (*quantum advantage*). Queste tecnologie si basano su assemblaggi di quantum bit (qubit) ognuno dei quali, a differenza dei bit dei computer classici, può sfruttare combinazioni simultanee di 0 e 1 (coerenza quantistica). I qubit possono essere preparati in modo tale da esibire particolari correlazioni (interdipendenza) impossibili da creare in dispositivi classici. Queste correlazioni quantistiche, note come entanglement, e la coerenza quantistica sono risorse essenziali per attivare le tecnologie quantistiche. Tuttavia, queste risorse quantistiche tendono ad essere rapidamente distrutte dall'interazione dei qubit con l'ambiente in cui sono inglobati, compromettendo il funzionamento dei dispositivi quantistici. La comunità scientifica internazionale, tra cui il *Quantum Things Group* del Dipartimento di Ingegneria dell'Università di Palermo, è fortemente impegnata nella risoluzione di questo problema. In questo seminario faremo un breve viaggio all'interno delle tecnologie quantistiche, discutendo lo stato dell'arte e le sfide che la ricerca dovrà superare.

**Salvatore Magazù**, Dipartimento di Scienze Matematiche e Informatiche, Scienze Fisiche e Scienze della Terra dell'Università di Messina  
Email: smagazu@unime.it

### *Dinamiche dei Sistemi Complessi: Analisi del Clima Terrestre e del Cervello Umano*

I sistemi complessi sono strutture caratterizzate da molteplici componenti interconnesse che interagiscono in modi non lineari, dando origine a comportamenti emergenti che non possono essere previsti semplicemente analizzando le singole parti. In particolare, nonostante l'apparente casualità del sistema, interazioni semplici possono dare origine a un comportamento emergente ben definito. Questa presentazione esplora due esempi distinti di sistemi complessi: il clima terrestre e il cervello umano.

Il clima terrestre è un sistema complesso formato da numerosi sottosistemi interconnessi, inclusi l'atmosfera, gli oceani, le terre emerse e la biosfera. Le interazioni tra questi componenti avvengono su scale temporali e spaziali diverse, generando fenomeni climatici di vasta portata. Modelli climatici basati su equazioni differenziali non lineari, permettono di studiare le dinamiche del clima e di prevedere cambiamenti futuri. Tuttavia, la sensibilità a condizioni iniziali e la presenza di feedback multipli rendono difficile una previsione precisa, sottolineando la complessità intrinseca del sistema climatico.

Il cervello umano rappresenta un sistema complesso di eccezionale rilevanza, costituito da miliardi di neuroni interconnessi. Le interazioni sinaptiche tra i neuroni danno origine a funzioni cognitive superiori come il pensiero, la memoria e la coscienza. Utilizzando strumenti avanzati di imaging cerebrale e modelli fisico-numeriche, si possono identificare pattern di attività neuronale che sottendono vari processi cognitivi, evidenziando come dinamiche locali possano influenzare il comportamento globale del cervello.

**Paolo M. Ossi** Dipartimento di Scienza Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche e Ambientali  
Università degli Studi di Messina  
Email: paolo.ossi@polimi.it

### *Sul disordine strutturale: fatti, modelli, deviazioni*

La perfezione dell'abito cristallino di cristalli naturali e l'esistenza di una corrispondente perfezione cristallina. La diffrazione di raggi X (XRD) e la prova della disposizione di "atomi" geometricamente regolare ed estesa nello spazio tridimensionale: l'ordine a lungo raggio (LRO). L'allargamento dei picchi XRD dovuto alle dimensioni finite del campione: il ruolo delle superfici; i difetti localizzati; il disordine cellulare. Il profilo di diffrazione di un liquido/amorfo: la perdita di informazioni strutturali, la necessità di funzioni distribuzione statistiche. La funzione di distribuzione radiale (RDF), sua costruzione, significato, limiti; la necessità di modelli strutturali. L'ordine a corto raggio (SRO): unità strutturali elementari e loro proprietà fisico-chimiche; l'estensione spaziale di tali unità con regole di assemblaggio per generare ordine a medio raggio (MRO): strutture modello. Confronto con sistemi-modello reali. Il caso di SiO<sub>2</sub> e del modello CRN: concetti "consolidati". Sviluppi sperimentali recenti: le tecniche Nano-Beam Electron Diffraction (NBED): risultati sperimentali; il modello paracristallino; incompatibilità con il modello CRN.

**Anna Maria Pappalardo**, Dipartimento di Scienze Biologiche, Geologiche e Ambientali, Università degli Studi di Catania  
Email: pappalam@unict.it

*DNA Barcoding e sue applicazioni nel settore ittico*

Negli ultimi decenni il DNA Barcoding si è rivelato un metodo universale per l'identificazione degli organismi viventi attraverso il sequenziamento di un breve tratto genomico standardizzato. Tale metodologia ha aperto nuove prospettive in vari settori tra cui quello della sicurezza alimentare. Nei prodotti ittici trasformati (tranci, affettati e/o precotti) l'identificazione di specie su base morfologica risulta particolarmente problematica in quanto i caratteri morfologici vengono perduti in seguito ai processi di trasformazione. Svariate specie ittiche, che possono essere commercializzate sfilettate e possono avere un valore commerciale anche molto diverso tra loro, si possono prestare così a frodi di sostituzione. Si passeranno in rassegna le varie tappe sperimentali del DNA Barcoding come metodica applicata a campioni incogniti di prodotti ittici acquistati nei mercati locali al fine di identificarne le specie e verificarne l'etichettatura. Sarà altresì mostrata l'efficienza e l'applicabilità, per screening rapidi e su ampia scala, di una nuova strategia molecolare che combina il DNA Barcoding con la tradizionale analisi dei profili di restrizione (COI-BarRFLP) implementata e ottimizzata in diversi gruppi di pesci ossei.

**Roberto Pirrone**, Dipartimento dell'Innovazione Industriale e Digitale dell'Università degli Studi di Palermo  
Email: roberto.pirrone@unipa.it

*Intelligenza Artificiale: Cosa? Come? Chi? Perché?*

Partendo da un breve excursus su "cos'è" l'IA e come si possa e si debba parlare di tante Intelligenze Artificiali, si passa a discutere delle Reti Neurali Profonde le quali sono alla base di quella che chiamiamo comunemente Intelligenza Artificiale e che in realtà si chiama Intelligenza Artificiale Generativa. Si discute "come" funzionano i modelli di IA generativa, del loro impatto economico ed ecologico. Successivamente si focalizza l'attenzione su "chi" gestisce a livello mondiale l'Intelligenza Artificiale e infine si traggono alcune considerazioni finali sul "perché", malgrado tutti i possibili aspetti negativi, l'Intelligenza Artificiale sia ormai irrinunciabile per la vita di tutti noi.

**Valeria Pittalà**, Dipartimento Scienze del Farmaco e della Salute dell'Università degli Studi di Catania  
Email: valeria.pittala@unict.it

*Dalla progettazione razionale allo sviluppo di un nuovo farmaco*

*Lo sviluppo di un nuovo farmaco: dal disegno razionale e dall'identificazione del target fino ad arrivare agli studi clinici e all'immissione in commercio.*

La possibilità di accedere a nuovi farmaci per patologie non adeguatamente curate (*unmet clinical needs*) è uno dei più importanti fattori che partecipano ad un significativo aumento della qualità della vita di ogni essere umano. Soprattutto nei Paesi più sviluppati l'accesso alle cure è ormai considerato un diritto inalienabile. Nonostante ciò, è generalmente poco noto il processo che porta alla messa in commercio di un farmaco contenente un nuovo principio attivo (*new chemical entity*, NCE). Si tratta generalmente di un processo multidisciplinare che impiega mediamente più di 10 anni, nei quali le aziende farmaceutiche investono cifre superiori al miliardo di euro.

Durante la comunicazione verranno illustrati tutti gli stadi che, partendo dall'identificazione del target e dal disegno razionale di una nuova sostanza biologicamente attiva ed arrivano agli studi clinici con lo scopo finale di portare all'immissione in commercio nuovi e più efficaci farmaci.

**Alessandro Pluchino**, Dipartimento di Fisica e Astronomia "Ettore Majorana" dell'Università degli Studi di Catania  
Email: alessandro.pluchino@ct.infn.it - alessandro.pluchino@dfa.unict.it

*La Firma della Complessità. Una passeggiata al Margine del Caos.*

Che differenza c'è tra una cosa complicata e una complessa? Qual è la relazione tra caos e complessità? Esiste in natura una "firma" della complessità? È più complesso il nostro cervello o il sistema socio-economico-ecologico globale? In questo seminario cercheremo di rispondere sinteticamente a queste e

a molte altre domande, accompagnando lo spettatore in quella affascinante regione al confine tra ordine e disordine chiamata “Margine del Caos”, alla scoperta delle leggi che governano l’emergere della complessità nel mondo fisico, biologico e sociale e collegandole con argomenti di stringente attualità.

**Alfredo Pulvirenti**, Dipartimento di Medicina Clinica e Sperimentale dell’Università degli Studi di Catania  
Email: [alfredo.pulvirenti@unict.it](mailto:alfredo.pulvirenti@unict.it)

#### *Bioinformatica e Big Data: Strumenti Essenziali per la Scienza Contemporanea*

Nell’era moderna della scienza, la bioinformatica e l’analisi dei Big Data emergono come pilastri fondamentali per il progresso nel campo biomedico. La bioinformatica, attraverso l’integrazione di biologia, informatica e statistica, permette di elaborare e decifrare grandi insiemi di dati biologici, come ad esempio sequenze genomiche e profili proteomici e trascrittomici. I Big Data, distinti per il loro ampio volume, eterogeneità e rapidità di produzione, pongono notevoli sfide ma offrono anche possibilità eccezionali per la scoperta di nuove conoscenze e l’innovazione tecnologica. Questo intervento indaga il modo in cui la combinazione di bioinformatica e Big Data sta trasformando la ricerca biomedica: dal supporto alla scoperta di terapie innovative, all’approfondimento della nostra comprensione sulle patologie, fino alla personalizzazione dei trattamenti sanitari.

#### **Laboratori didattici**

**Giuseppa Cappuccio** Dipartimento Scienze Psicologiche, Pedagogiche, dell’Esercizio Fisico e della Formazione Università degli Studi di Palermo  
Email: [giuseppa.cappuccio@unipa.it](mailto:giuseppa.cappuccio@unipa.it)

#### *La valutazione degli apprendimenti: costruire un piano di valutazione*

**Scolastica Serroni**, Dipartimento di Scienze Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche e Ambientali Università degli Studi di Messina.  
Email: [scolastica.serroni@unime.it](mailto:scolastica.serroni@unime.it)

#### *Il II° Principio della termodinamica*