

---

# *La Matematica nella Società e nella Cultura*

RIVISTA DELL'UNIONE MATEMATICA ITALIANA

---

CARLO BIANCA

## **Modelli di biliardi caotici e poligonali per lo studio del trasporto in mezzi microporosi**

*La Matematica nella Società e nella Cultura. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Serie 1, Vol. 2 (2009), n.2 (Fascicolo Tesi di Dottorato), p. 203-206.*

Unione Matematica Italiana

[http://www.bdim.eu/item?id=RIUMI\\_2009\\_1\\_2\\_2\\_203\\_0](http://www.bdim.eu/item?id=RIUMI_2009_1_2_2_203_0)

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

---

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma  
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)  
SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>

La Matematica nella Società e nella Cultura. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Unione Matematica Italiana, 2009.

## Modelli di biliardi caotici e poligonali per lo studio del trasporto in mezzi microporosi

CARLO BIANCA

I recenti sviluppi in nanotecnologia hanno reso possibile la costruzione di membrane microporose aventi pori di qualche nanometro, utili in campo medico per la somministrazione controllata dei farmaci. La piccola dimensione dei pori non permette di descrivere i differenti fenomeni di trasporto che si manifestano né mediante le leggi della fluidodinamica né mediante la teoria cinetica dei gas.

La necessità di sviluppare una consistente e completa teoria del trasporto all'interno di tali mezzi microporosi richiede lo sviluppo di specifici modelli matematici. Un approccio per lo studio della dinamica delle particelle nel mezzo è quello della teoria matematica dei biliardi.

*DEFINIZIONE 1. – I biliardi sono sistemi (hamiltoniani) in cui una o più particelle si muovono all'interno di un dominio (limitato o illimitato), detto tavola del biliardo, che può essere semplicemente connesso (dominio con ostacoli). La frontiera risulta unione di curve di classe  $C^1$  le quali possono intersecarsi solo agli estremi.*

La dinamica (caotica o regolare) delle particelle (ed il relativo trasporto) è fortemente influenzata dal tipo di curve (poligonali, focalizzanti, dispersive) che costituiscono la frontiera (sulla quale la particella urta elasticamente) [4]. Gli ostacoli della tavola possono essere disposti in modo casuale o secondo una griglia periodica.

Lo stato stazionario viene garantito introducendo un campo esterno (che traduce l'eventuale presenza all'interno del mezzo di un gradiente chimico o di concentrazione) accoppiato con un termostato gaussiano (che ha lo scopo di mantenere costante la temperatura del sistema). Le equazioni del moto di Newton vengono modificate facendo uso del principio di Gauss del minimo vincolo e la dinamica di non-equilibrio di un tale biliardo non è più newtoniana [2].

La teoria dei biliardi non in equilibrio è molto meno sviluppata della teoria dei biliardi all'equilibrio ed i risultati che verranno presentati costituiscono un contributo sia di tipo teorico che di tipo applicativo.

## 1. – Il gas di Ehrenfest non in equilibrio GENE

Il modello di diffusione di Paul e Tatiana Ehrenfest fu proposto agli inizi del 1900 per illuminare l'interpretazione statistica della seconda legge della termodinamica secondo la quale l'entropia di un sistema chiuso può solamente aumentare e per studiare la validità dell'equazione di Boltzmann. In questo biliardo le particelle puntiformi collidono con ostacoli fissi di forma quadrata disposti in modo casuale nel piano. Tale modello è stato ulteriormente considerato sotto l'assunzione che la dinamica non fosse caotica dal momento che le collisioni con una frontiera poligonale non conducono ad una separazione esponenziale di traiettorie inizialmente vicine (caos). Differentemente, la caoticità (almeno un esponente di Lyapunov positivo, [4]) del modello di Ehrenfest non in equilibrio (biliardo con campo elettrico, termostato gaussiano ed ostacoli a forma di rombo disposti nel piano con un lattice triangolare) costituisce un problema aperto, dal momento che i suoi ostacoli sono poligonali e le tecniche per la determinazione di dinamiche caotiche sviluppate fino ad oggi (caso del gas di Lorentz non in equilibrio) dipendono fortemente dalla natura dispesiva degli ostacoli.

Per il GENE abbiamo provato [2], in funzione dei parametri della geometria e per un generico insieme di condizioni iniziali, l'esistenza di due tipi di orbite periodiche: quelle che ritornano nella posizione di partenza (chiuse) e quelle che ritornano nella stessa posizione relativa, ma in una cella diversa (aperte).

Allo scopo di catturare un attrattore caotico e vista la difficoltà di ottenere dei risultati rigorosi, sono state realizzate, usando l'algoritmo di Benettin-Galgani-Giorgilli-Strelcyn, simulazioni numeriche per calcolare gli esponenti di Lyapunov in funzione sia della magnitudine del campo elettrico sia dei parametri che definiscono la geometria.

Partendo da condizioni iniziali random sono stati catturati stati asintotici non banali per tutto il tempo della simulazione [2]. Infatti, per certi valori del campo elettrico, il moto della particella appare eccentrico e copre una grande frazione dello spazio delle fasi. La presenza di un'orbita periodica instabile di periodo quattro che si trova sopra l'attrattore rafforza l'ipotesi di aver catturato uno stato asintotico caotico; l'altra possibilità è che l'orbita è isolata e separata dall'attrattore da una regione talmente piccola che numericamente è impossibile da determinare.

L'analisi dello stato asintotico mostra anche l'esistenza di alcuni campi elettrici il cui stato stazionario è quello di un'orbita stabile (periodica o quasi periodica), ma catturare tale stato richiede un numero elevatissimo di collisioni durante le quali la particella copre ancora una buona parte dello spazio delle fasi, quasi come se lo stato asintotico fosse caotico, prima di catturare il reale stato stazionario regolare. Tale peculiare ed inusuale comportamento ammette spiegazione se investighiamo sulla forma e dimensione del bacino di attrazione dell'orbita periodica. La nostra analisi dell'evoluzione di traiettorie, con condizioni iniziali vicine all'orbita periodica attraente, mostra che il bacino di attrazione è molto piccolo e particolarmente difficile

da raggiungere perché contiene una regione molto piccola intorno al vertice destro del rombo [2]. Congetturiamo che la base di tale attrattore (non caotico) si trova al confine con il supporto di uno stato caotico transiente ed è piuttosto piccola in dimensione ed irregolare nella forma.

L'analisi analitica e numerica sviluppata e rappresentata in diagrammi di multi-forcazione, supporta l'idea che questo modello di trasporto ha stati asintotici che sono sia caotici sia regolari con una sensibilissima e piuttosto particolare dipendenza dal campo elettrico e dai parametri della geometria, non osservata prima in letteratura.

## 2. – Il modello pompa

Negli ultimi anni lo studio di biliardi auto-similari ha fortemente contribuito a stabilire collegamenti tra i fenomeni irreversibili alle scale macroscopiche e le proprietà caotiche della dinamica classica ed invertibile alle scale microscopiche.

Un biliardo auto-similare è una successione infinita di celle bidimensionali identiche in forma e dimensione, incollate fra loro lungo un asse orizzontale.

Il modello pompa [1] è un biliardo dissipativo termostato (con un elementare termostato non gaussiano) la cui cella elementare è un dominio connesso, limitato da due archi di cerchio disposti orizzontalmente ed aventi ugual raggio ed ampiezza, posti ad una minima distanza verticale l'uno dall'altro; la dinamica della particella cambia quando questa attraversa le celle (dilatazione/compressione della variabile spaziale verticale e della velocità). Tale modello introduce un fenomeno di trasporto elementare che non è mai stato preso in esame, vale a dire la libera espansione di un gas da un piccolo ad un grande serbatoio e rappresenta un modello elementare per quello che concerne il termostato, nella sfida di ottenere la massima semplicità microscopica, che si traduca in un normale comportamento macroscopico.

In tale modello abbiamo dimostrato l'esistenza di involuzioni e di una relazione della corrente.

Recentemente è stata presentata in [5] una generalizzazione del formalismo hamiltoniano detta struttura conformemente simplettica la quale stabilisce le condizioni per ottenere la simmetria nello spettro di Lyapunov (*se  $\lambda$  è un esponente allora  $a - \lambda$  è anche un esponente, dove  $a$  è una costante uguale per ogni coppia di esponenti,  $a = 0$  per sistemi hamiltoniani*) in sistemi più generali di quelli hamiltoniani, ma molto vicini al formalismo simplettico. Il nostro principale risultato è contenuto nel seguente teorema.

**TEOREMA 2.1.** – *Il modello pompa è un sistema conformemente simplettico.*

Il precedente teorema permette inoltre di stabilire l'iperbolicità del modello pompa in funzione di alcuni parametri della geometria e della dinamica, argomento oggetto dell'attuale attività di ricerca.

### 3. – Il modello a dente di sega

Nei sistemi in nanoscala, la frontiera del mezzo gioca un ruolo significativo nell'influenzare la manifestazione di differenti tipi di trasporto (diffusione). La transizione verso un comportamento diffusivo e l'importanza delle collisioni particella-frontiera e delle interazioni particella-particella è stata anche investigata [3].

Inspirati dal biliardo poligonale (un modello giocattolo tradizionale per lo studio del trasporto) abbiamo ideato e studiato un sistema semi-dispersivo, il quale modella semplici membrane microporose, costituito da particelle di taglia finita che interagiscono fra loro e con la frontiera di un canale poligonale: modello a dente di sega. Tale modello è un biliardo auto-similare la cui cella elementare ha una frontiera poligonale disposta in una configurazione a dente di sega; le altezze dei triangoli isosceli che comprendono i denti sono in fase.

Nel caso di particella puntiforme è stato mostrato [3] che il tipo di trasporto (diffusivo, super-diffusivo o sub-diffusivo) cambia fortemente con piccole variazioni dei parametri che definiscono la frontiera, a causa di un lento decadimento di correlazione dovuto all'assenza di collisioni defocalizzanti. Inoltre abbiamo investigato quali dei precedenti fenomeni di trasporto sopravvivono nel caso di particelle aventi taglia finita e che possono interagire fra loro.

La nostra ricerca mostra [3] che, dentro certe scale di tempo, il trasporto di particelle di taglia finita mostra caratteristiche tipiche delle particelle puntiformi ed inoltre trovano che le collisioni fra le particelle guidano il sistema verso un comportamento diffusivo più fortemente delle collisioni defocalizzanti con la frontiera. Quando il numero di particelle interagenti cresce notevolmente ed il libero cammino medio diventa trascurabile rispetto alla taglia del mezzo, appare il tipico comportamento termodinamico (come descritto dalla teoria cinetica dei gas).

### BIBLIOGRAFIA

- [1] BENETTIN G. e RONDONI L., *A new model for the transport of particles in a thermostatted system*, Math. Ph. Elec. J., **7** (2001).
- [2] BIANCA C. e RONDONI L., *The nonequilibrium Ehrenfest gas: a chaotic model with flat obstacles?*, Chaos, **19** (2009).
- [3] JEPPE O., BIANCA C. e RONDONI L., *Onset of diffusive behaviour in confined transport systems*, Chaos, **18** (2008).
- [4] CHERNOV N. e MARKARIN R., *Introduction to the ergodic theory of chaotic billiards*, 2nd Ed., IMPA, Rio de Janeiro, Brasil (2003).
- [5] WOJTKOWSKI M.P. e LIVERANI C., *Conformally symplectic dynamics and symmetry of the Lyapunov spectrum*, Commun. Math. Phys., **194** (1998), 47-60.

Dipartimento di Matematica, Politecnico di Torino  
e-mail: carlo.bianca@polito.it  
Dottorato in Matematica per le Scienze dell'Ingegneria  
con sede presso il Politecnico di Torino - Ciclo XX  
Direttore della ricerca: Prof. Lamberto Rondoni