



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN
NICOLÁS DE HIDALGO



Facultad de Ciencias Físico Matemáticas
"Mat. Luis Manuel Rivera Gutiérrez"

**COMPORTAMIENTO DE UN CANAL
COMO UN DIODO TÉRMICO**

T E S I S

Para obtener el grado de:

**MAESTRA EN CIENCIAS EN
INGENIERÍA FÍSICA**

Presentado por:

Lic. Irma Rangel Recio

Bajo la asesoría de:

Dr. Eduardo S. Tututi Hernández

Morelia Mich., Febrero de 2016

Índice general

1. Introducción	1
2. Canal bidimensional ondulado	4
2.1. Descripción del canal	5
2.2. Dinámica de las partículas dentro del canal	7
2.2.1. Newton-Raphson	11
2.2.2. Implementación numérica	12
2.3. Mapas de Poincaré	16
2.3.1. Canal estrecho	18
3. Propiedades térmicas y de transporte del canal	22
3.1. Flujo de partículas	23
3.1.1. Transmisión y reflexión de partículas	23
3.2. Amplitudes pequeñas	26
3.2.1. Flujo de calor	28
3.3. Diodo térmico	32
3.3.1. Rectificación térmica	32
4. Análisis de resultados	34
4.1. Flujo de partículas para la amplitud	35
4.2. Flujo de calor para la amplitud	40
4.3. Flujo como función de la fase	43
4.3.1. Flujo de partículas	44
4.3.2. Flujo de calor	49
5. Conclusiones	52

Resumen

En este trabajo se estudiará la conducción de calor en el régimen balístico, en un canal de billar con paredes onduladas, desfasadas y de diferente amplitud. Los extremos del canal se encuentran en contacto con baños térmicos a temperaturas T_1 y T_2 tal que $T_2 > T_1$. Como es conocido, cuando dos sistemas están en contacto térmico a diferente temperatura, se establece un flujo de calor, que fluirá del sistema de mayor temperatura al de menor temperatura hasta alcanzar el equilibrio termodinámico. Se establecerá un flujo en sentido opuesto cuando las temperaturas estén cambiadas. Para algunas geometrías puede ocurrir que el flujo de calor sea mayor en una dirección que en la otra cuando se intercambian las posiciones de los baños térmicos. Si bajo la geometría del canal propuesto se satisface la propiedad anterior, lo llamaremos diodo térmico.

El objetivo de esta investigación, es estudiar las propiedades de transporte y la posibilidad de que el canal tenga el comportamiento de un diodo térmico, para ciertos valores de la amplitud de las paredes y desfasamiento entre las mismas.

Palabras clave: canal, reservorio, diodo térmico, flujo, rectificación.

Abstract

In this paper the heat conduction in the ballistic regime will be studied in a pool channel with corrugated walls, outdated and different amplitude. The ends of the channel are in contact with thermal baths at temperatures T_1 and T_2 such that $T_2 > T_1$. As it is known, when two systems are in thermal contact at different temperature, heat flow, which flow system higher temperature to lower temperature to reach thermodynamic equilibrium is established. A flow in the opposite direction will be established when temperatures are changed. For some geometries it may happen that the heat flow is greater in one direction than another when the positions of the thermal baths are exchanged. If under the proposed channel geometry of the above property is satisfied, we will call thermal diode.

The objective of this research is to study the transport properties and the possibility that the channel has the behavior of a thermal diode, for certain values of the amplitude and phase shift of the walls between them.

Chapter 1

Introducción

El estudio de las propiedades de transporte en canales de billar clásicos y cuánticos ha resultado ser de gran interés debido a las aplicaciones directas que presenta, como en nano-física [1], superconductores [2], fibras ópticas [3], cristales fotónicos [4], entre muchas otras. Estos sistemas pueden simular, por ejemplo, el paso de la luz por una fibra óptica doblada, en cuyo caso el canal de billar de serpiente estudiado en [5] representa a la fibra óptica doblada.

Como un antecedente cronológico presentamos a continuación algunos de los canales de billar más citados en la literatura, considerados como los precursores de la teoría de caos en billares.

El billar de Hadamard: Analiza el movimiento de una partícula libre (sin fricción) en una superficie de curvatura negativa. El modelo posee solución exacta, la que corresponde al flujo geodésico en la superficie. Es el caso más antiguo de caos determinístico que se haya estudiado, el mismo fue desarrollado y analizado por Jacques Hadamard en 1898 [6].

El billar de Sinaí: Consiste de una partícula que se mueve en el plano dentro de un cuadrado, en cuyo centro se coloca un obstáculo circular. Se supone que la partícula obedece las leyes de la mecánica clásica y sólo experimenta choques elásticos. El concepto de este tipo de billar fue desarrollado por Yákov Sinaí como un ejemplo de un sistema hamiltoniano interactivo que presenta propiedades físicas termodinámicas: es ergódico y tiene un exponente de Lyapunov positivo. Sirve como modelo de un gas clásico, el billar

de Sinaí es a veces denominado un **gas de Lorentz** [7]. El mayor logro que consiguió Sinaí con este modelo fue demostrar que el ensamble de Boltzmann-Gibbs clásico para un gas ideal es esencialmente el más caótico de los billares de Hadamard.

Canal de Lorentz o gas de Lorentz: Lo introduce H. A. Lorentz cuya motivación física es analizar una mezcla de gases de dos especies, suponiendo que estas son esferas rígidas y cada especie de diferente tamaño, además de considerar despreciables los choques entre las esferas del gas más pequeño. De forma esquemática el canal de Lorentz es una serie de semi-círculos de radio R llamados también dispersores circulares, colocados a lo largo del canal. Este esquema es el más sencillo, sin embargo, hay muchas más configuraciones, la idea central es la interacción entre dos gases. El gas de Lorentz en particular es determinista, reversible, caótico y representa un sistema en equilibrio [8]. Es un sistema bien estudiado y es empleado como referencia en el análisis de muy diversos canales como en [9, 10, 11].

A la fecha hay una basta literatura sobre caos en canales de billar, enfocados a muchas áreas de la ciencia. En este trabajo nos basamos principalmente en el esquema mostrado en [9, 12], donde analizan un canal formado por paredes onduladas de tipo sinusoidal, cuyos extremos están conectados a baños térmicos de tipo Gaussiano. La dinámica del canal es caótica del tipo Hamiltoniana y consecuentemente la evolución del sistema hacia el caos se puede describir mediante el teorema de KAM (Kolmogorov-Arnold-Moser) [13, 14]. Los autores presentan varios estudios numéricos de tipo distributivo en relación a las propiedades de transporte y resistividad en el canal. Muestran también la relación entre el caos y la geometría del canal, a saber, determinaron que a mayor amplitud de los perfiles se presenta una transición más rápida al caos.

A diferencia de este canal sinusoidal, nosotros partiremos de un canal ondulado donde cada pared tiene distinto periodo además de considerar un flujo de partículas bidireccional. El razonamiento para obtener las secciones de Poincaré es análogo y de igual forma emplearemos los algoritmos de la bisección y de Newton-Raphson.

La propiedad que pretendemos estudiar en nuestro canal es que tenga comportamiento de **Diodo térmico**. Es decir, *que el flujo de calor dentro del canal tenga una dirección preferente*, algunos autores llaman rectificadores

térmicos a los sistemas que tienen tal comportamiento, o que bajo alguna circunstancia puedan modificar la dirección del flujo de calor. Hay varias formas de diodos térmicos, algunos se construyen con canales de billar, otros con arreglos de cristales anarmónicos graduados interactuando con fonones [15], o en electrónica con circuitos RC y diodos de conmutación [16], etc. Para nuestros fines nos centraremos en los canales de billar que se comportan como diodos térmicos.

El flujo de calor se refiere al tránsito de partículas puntuales, que emanan de los baños térmicos con una determinada distribución de velocidades (según el baño térmico al que esté conectado cada extremo del canal). Tales partículas pueden o no interactuar entre sí y su trayectoria a través del canal, por lo general, cumple choques elásticos. Algunos sistemas requieren usar agentes externos al canal para regular el flujo, como en [17], que emplean un campo magnético externo perpendicular al canal para regular la trayectoria de las partículas; así como dispersores en forma de semi-círculos dentro del canal para lograr un flujo de calor preferencial. Notemos que en este sistema no consideran interacción entre partículas. Otro modelo de diodo térmico interesante por su geometría es propuesto en [18], donde los perfiles del canal se forman por segmentos de arco circular colocados en forma de triángulo; además de colocar discos rotatorios fijos en el centro de cada celda como dispersores. Aquí las partículas fluyen en ambos sentidos y se consideran partículas interactuantes.

No pretendemos ser exhaustivos en la mención de todos los trabajos publicados en torno a billares que presentan rectificación térmica. Sólo diremos que, como antecedente, existe un amplio estudio en torno a ellos y que la mayoría de las investigaciones se han basado en simulaciones numéricas y en especulaciones sobre su posible implementación en la práctica [19]. La mayoría de los artículos se refiere a billares asimétricos [17, 20], cadenas de osciladores anarmónicos [15], modelos con distribución de masa graduada no uniforme [21], sólo por mencionar algunos.

Chapter 2

Canal bidimensional ondulado

Un canal de billar en general es un espacio cerrado o abierto en el que transitan una o varias partículas con movimiento rectilíneo, tales partículas pueden o no interactuar entre sí. La interacción con la frontera (o contorno) del canal es mediante choques y reflexiones especulares, i.e. el ángulo de entrada es igual al de salida respecto al plano normal a la superficie de la frontera.

Las propiedades dinámicas de un billar son determinadas principalmente por la forma (o geometría) de la frontera y pueden variar en gran medida de totalmente regular (integrable) a fuertemente caótica. En términos generales, la frontera de un billar puede consistir en curvas de tres tipos: *convexa interior* (también llamada dispersor), *convexa hacia el exterior* (también llamada enfoque) y *plano* llamado neutro [22].

Como ejemplo de billares cerrados podemos tomar el juego de billar, que es una mesa con forma rectangular, en la que se puede predecir la trayectoria de la bola y llevarla hasta la buchaca. Esto toma un sentido más interesante cuando se describe la matemática detrás del juego (cuando se desprecia la fricción). En particular, cuando la mesa no es rectangular y tiene formas geométricas diversas (circular, elíptica, ondulada, etc.) se puede tener caos, en cuyo caso ya no es posible predecir la trayectoria de la bola. Notemos que en el análisis numérico la región de un billar cerrado debe referirse a un conjunto compacto conexo (sin hoyos).

De particular interés para nosotros son los billares abiertos o canales de billar (en lo sucesivo los llamaremos canales), en los cuales la partícula puede fugarse del sistema.

En este capítulo analizaremos la dinámica de las partículas dentro del

canal. Plantearemos la metodología para el análisis numérico del sistema y mostraremos las secciones de Poincaré asociadas a la dinámica caótica del canal.

2.1. Descripción del canal

Consideremos un canal finito bidimensional formado por dos paredes onduladas de diferente amplitud, periodo y desfase. Los perfiles de las paredes superior e inferior del canal son determinados respectivamente por las ecuaciones con variables adimensionales:

$$y_1 = b + a_1 \sin 2\pi(x + w_1), \quad (2.1)$$

$$y_2 = -b + a_2 \sin 2\pi(x + w_2). \quad (2.2)$$

Las variables adimensionales empleadas son: $x = \frac{X}{l}$, $y = \frac{Y}{l}$, $b = \frac{B}{l}$, $a = \frac{A}{l}$, $w = \frac{W}{l}$. l es el largo del canal, b es la mitad de la anchura promedio del canal, a la amplitud de las oscilaciones y w el desfase relativo entre los perfiles del canal. Usamos los subíndices 1 y 2 para distinguir los perfiles superior e inferior, aunque para nuestros fines, tienen el mismo ancho medio b . Los parámetros a variar son la amplitud relativa a y la fase w . Empleamos l como la longitud de un periodo, la cual se considera como la unidad ($l = 1$) y la llamaremos celda unitaria o fundamental (ver Fig. 2.1).

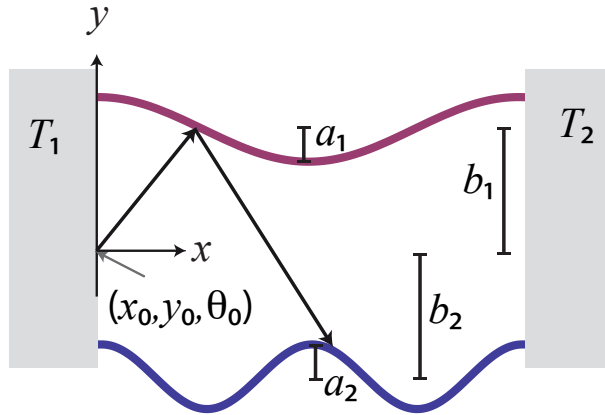


Figure 2.1: Geometría del canal en contacto con dos baños térmicos en una celda unitaria.

La longitud del canal estará dada por i celdas unitarias $L = il$, con $i = 1, 2, 3 \dots N$ colocadas sucesivamente. Los extremos del canal se conectan a baños térmicos (o reservorios térmicos) de tipo Gaussiano, con temperaturas T_1 y T_2 constantes, de tal forma que $T_1 > T_2$. Los reservorios térmicos los podemos visualizar como recipientes muy grandes que contienen a un gas ideal. Dentro de estos, el movimiento de sus partículas es completamente al azar, es decir, todas las direcciones del espacio son igualmente probables, pero no es posible que todas las velocidades v de las partículas sean igualmente probables, así que, consideraremos que tienen una probabilidad de distribución de velocidades de tipo Gaussiana.

Al estar los reservorios interconectados por el canal, pensaremos que el ancho total del canal es el equivalente a una abertura en los reservorios (la abertura equivale a la fuente de partículas del canal en cada extremo). Por cada abertura emergen partículas del gas hacia el canal (notemos que esto implica un flujo bidireccional). A este fenómeno se le conoce como *efusión de un gas*. El canal se considera térmicamente aislado o de perfiles adiabáticos, por lo que no hay transferencia de calor entre las partículas y el canal. Las partículas emergentes al canal saldrán con la distribución de velocidades propias de la temperatura del reservorio. Para este caso las partículas tendrán una distribución de velocidades $P(v_x)$ y $P(v_y)$ de tipo Gaussiana expresada por las siguientes Ecuaciones.

$$P(v_x) = \frac{|v_x|}{T} e^{-\frac{v_x^2}{2T}}, \quad (2.3)$$

$$P(v_y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} e^{-\frac{v_y^2}{2T}}. \quad (2.4)$$

En las Ecs. (2.3) y (2.4) consideramos la masa de las partículas $m = 1$ y la constante de Boltzman $k = 1$. Esta distribución implica que las partículas emergentes del baño térmico T_1 podrán tomar velocidades más grandes que las del baño térmico T_2 debido a que $T_1 > T_2$.

Para el caso del canal infinito, consideraremos una cantidad de celdas unitarias N lo suficientemente grande, de tal manera que el $2b \ll L$, esto en un sentido numérico se considera infinito. Debemos notar que, para fines de describir las propiedades dinámicas del canal, mediante diagramas de Poincaré, estaremos recurriendo al canal infinito. Sin embargo, para fines de estudio de las propiedades de transporte de calor recurriremos al canal finito cuyos perfiles de onda están descritos por las Ecs. (2.1) y (2.2).

2.2. Dinámica de las partículas dentro del canal

Debido al hecho de que las partículas no interactúan entre sí, es equivalente a considerar el movimiento de una sola partícula durante un periodo de tiempo t grande, para posteriormente hacer promedios y obtener las propiedades de transporte del sistema en cuestión. Es importante mencionar que no existen fuerzas externas a este sistema, por lo que cada partícula se comporta como partícula libre (excepto cuando choca con las paredes).

Las trayectorias de las partículas obedecen a un comportamiento lineal y las únicas interacciones dentro del canal son las colisiones con las fronteras y con los baños térmicos. La velocidad de una partícula justo después de una colisión con un baño térmico es determinada por la distribución de velocidades Gaussianas (Ecs. (2.3) y (2.4)). Las colisiones con la frontera son especulares, esto es, el ángulo de incidencia θ_i es igual al ángulo reflejado θ_r ($\theta_i = \theta_r$), donde los ángulos son medidos respecto a la normal al plano de incidencia (ver Fig. 2.2).

Por ser un caso bidimensional, el plano de incidencia se debe tomar como la recta tangente al punto x_n que es el punto donde colisiona la partícula por n -ésima vez con el perfil del canal. El cálculo nos dice que la pendiente m_t de una recta tangente a una curva cualquiera $F(x)$ en cualquier punto, está relacionada con la derivada según la Ec. (2.5), siempre y cuando exista la derivada de $F(x)$ en tal punto (ver Fig. 2.2),

$$\left. \frac{dF(x)}{dx} \right|_{x_n} = m_t. \quad (2.5)$$

Claramente el ángulo de la recta tangente en el punto de colisión está dado por $\theta_t = \arctan(m_t)$.

Obtenemos entonces que la expresión (2.5) es válida en nuestro canal siempre y cuando los perfiles descritos por las Ecs. (2.1) y (2.2) sean continuamente derivables, lo cual no representa ningún problema, pues los perfiles del canal son armónicos. Podemos entonces garantizar que en cualquier punto donde las partículas colisionen existirá un plano de incidencia (recta tangente).

En un sentido más profundo, que los perfiles sean armónicos indica que siempre podremos calcular la posición de cada partícula así como la dirección del rebote.

Cuando nos referimos a la dinámica del sistema, estamos hablando de conocer exactamente la evolución de la trayectoria descrita por cada una de

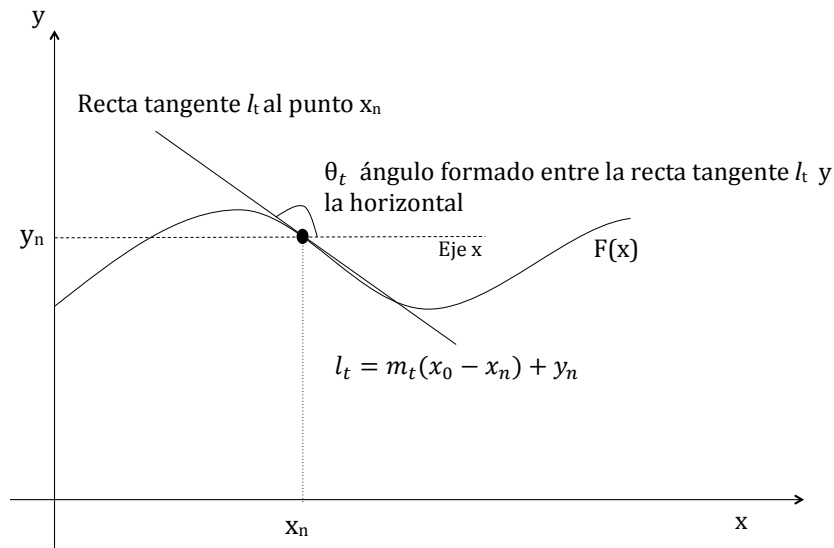


Figure 2.2: Pendiente de la recta tangente a una curva $F(x)$ en el punto de choque x_n .

las partículas que entran al canal. La trayectoria de una partícula estará compuesta por segmentos de rectas, definidas entre los puntos de colisión. A fin de conocer estas trayectorias para cada partícula requerimos conocer dos cosas:

- *Primero*: conocer las condiciones iniciales (x_0, y_0, θ_i) con que lanzamos la partícula dentro del canal. (x_0, y_0) son la posición inicial y θ_i es el ángulo inicial medido desde la horizontal en sentido anti-horario. Estas condiciones determinan la ecuación de la recta que describe a la partícula inicialmente antes de su primer impacto,

$$l_i = m_i(x - x_0) + y_0, \quad (2.6)$$

donde evidentemente $m_i = \tan(\theta_i)$.

- *Segundo*: conocer el conjunto discreto de puntos (x_n, y_n, θ_{R_n}) , siendo (x_n, y_n) la posición del punto de choque y θ_{R_n} el ángulo con el que es

reflejada la partícula, medido respecto a la horizontal en sentido positivo, ambos para el n -ésimo rebote de una partícula dentro del canal. Este conjunto de puntos forman un mapeo discreto que solamente se puede analizar en forma numérica. Para obtener (x_n, y_n) es necesario emplear el método de la bisección y de Newton-Raphson, que como bien sabemos de nuestros cursos de cálculo, estos algoritmos encuentran la intersección (o raíz) entre dos funciones (ver Sec. 2.2.1). Considerando que las colisiones de la partícula con los perfiles del canal son de forma especular, tenemos el mapeo siguiente:

$$\theta_{R_{n+1}} = 2Z_{x_{n+1}} - 2Z_{x_n} + \theta_{R_n}, \quad (2.7)$$

$$2b + a \sin(2\pi(x_{n+1} + w)) = (x_{n+1} - x_n) \tan \gamma_n + a \sin(2\pi(x_n + w)),$$

donde:

$$Z_{x_n} = \arctan \left(\frac{dy}{dx} \right)_{x_n} = (\theta_t)_{x_n},$$

$$\theta_{R_n} = \pi + 2Z_{x_n} - \theta_i,$$

$$\gamma_n = \theta_{R_n}.$$

El mapeo de la Ec. (2.7) considera la posibilidad de choques múltiples en los perfiles. Esto implica que una partícula puede rebotar consecutivamente en el mismo perfil. Para fines de notación nombramos a γ_n como el ángulo de incidencia para la $(n+1)$ -ésima colisión. En principio consideramos dos choques consecutivos, el n -ésimo y el $(n+1)$ -ésimo. Tenemos que considerar en el mapeo con qué perfil fueron las colisiones para emplear la amplitud (a_1 o a_2) y desfase (w_1 o w_2) correspondientes. Por ejemplo, si el n -ésimo choque fue con el perfil inferior (y_2) en x_n y el choque $(n+1)$ -ésimo fue con el perfil superior (y_1) en x_{n+1} , entonces la Ec. (2.7) debería expresarse como

$$2b + a_1 \sin(2\pi(x_{n+1} + w_1)) = (x_{n+1} - x_n) \tan \gamma_n + a_2 \sin(2\pi(x_n + w_2)).$$

Para obtener la expresión del ángulo θ_{R_n} con que es reflejada la partícula justo después del n -ésimo choque, empleamos el esquema de la figura 2.3, consideramos una partícula que es lanzada con un ángulo inicial cualquiera θ_i . El ángulo entre la recta l_t y la recta x es θ_t ; la recta c y la recta l_t son perpendiculares (c es la recta normal a l_t) y la recta x es

paralela a la recta x' . Entonces el ángulo contiguo de θ_i debe ser igual a $\frac{\pi}{2} - \theta_t$. Con esto podemos escribir el ángulo reflejado como:

$$\theta_{R_n} = \theta_i + 2W_i = 2\left(\frac{\pi}{2} + \theta_t\right) - \theta_i,$$

donde θ_{R_n} es medido desde la horizontal y la pendiente de la recta reflejada $m_{R_n} = \tan \theta_{R_n}$, tenemos así que la trayectoria de la partícula después de la colisión queda determinada por

$$l_R = m_{R_n}(x - x_n) + y_n. \quad (2.8)$$

La Ec. (2.8) será la ecuación de la recta después de cualquier colisión con alguno de los perfiles.

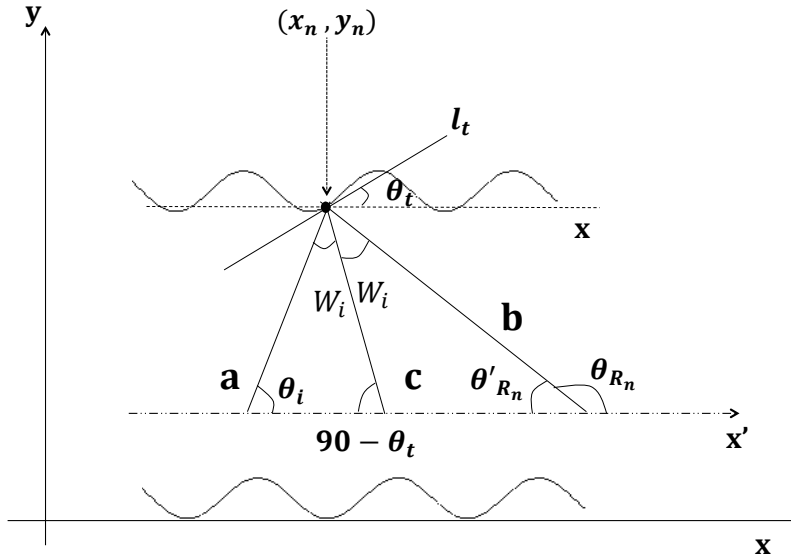


Figure 2.3: Análisis geométrico para determinar el ángulo de reflexión de una partícula, donde a es la recta incidente, c la recta normal a l_t y b la recta reflejada.

Una dato importante a mencionar es, que después del n -ésimo choque hay que redefinir las condiciones iniciales para la siguiente colisión. Los

nuevos valores iniciales para la colisión $(n + 1)$ -ésima serán los datos ya obtenidos en el choque anterior $(x_n, y_n, \theta_i = \theta_{R_n})$. Siendo estos ahora los datos iniciales, los puntos de choque y ángulo de reflexión próximos a calcular son $(x_{n+1}, y_{n+1}, \theta_{R_{n+1}})$. De igual forma debemos redefinir las condiciones iniciales para los choques posteriores $(n+2)$ -ésimo, $(n+3)$ -ésimo, etc. Siempre los datos del choque anterior tendrán el papel de las condiciones iniciales para realizar el cálculo de la siguiente colisión. Con el procedimiento anterior obtendremos todos los segmentos de recta que conforman la trayectoria de la partícula a lo largo de un tiempo t o hasta que la partícula salga del canal.

2.2.1. Newton-Raphson

En este apartado hablaremos brevemente de los algoritmos implementados numéricamente para la obtención de datos, así como algunas cuestiones numéricas relevantes.

Como mencionamos anteriormente, los métodos numéricos empleados en este trabajo son: el de la Bisección y el de Newton-Raphson. El propósito es calcular el punto de intersección (o colisión (x_n, y_n)) entre la recta inicial l_i (trayectoria que inicialmente tiene la partícula al entrar al canal) y alguno de los perfiles y_1 o y_2 . Para esto se requiere resolver la ecuación $F_1(x_n) = 0$ o $F_2(x_n) = 0$, que corresponden a las colisiones con el perfil superior y_1 o inferior y_2 respectivamente, siendo

$$F_1(x_n) = b + a_1 \sin 2\pi(x_n + w_1) - m_0(x_0 - x_n) - y_0 = 0, \quad (2.9)$$

$$F_2(x_n) = -b + a_2 \sin 2\pi(x_n + w_2) - m_0(x_0 - x_n) - y_0 = 0. \quad (2.10)$$

El cálculo de x_n lo obtendremos en dos pasos: Primeramente aplicamos el *método de la bisección* al intervalo $[c, d]$ para encontrar un punto $x'_n \in [c, d]$ lo cual será evidente al satisfacerse la desigualdad

$$F_1(c) * F_1(d) \leq 0$$

o

$$F_2(c) * F_2(d) \leq 0.$$

Posteriormente aplicamos el método de Newton-Raphson para llevar a la convergencia en el punto de choque x_n , considerando un error del orden de 10^{-15} . Mostramos a continuación el esquema del método para el caso de una colisión con el perfil superior, donde $F_1'(x'_{nj})$ es la derivada evaluada en el punto x'_{nj} .

Sea la relación de recurrencia:

$$x'_{nj} = \frac{c + d}{2},$$

$$x'_{n(j+1)} = x_{nj} - \frac{F_1(x'_{nj})}{F_1'(x'_{nj})}.$$

Cuando se satisfaga $|x'_{nj} - x'_{n(j+1)}| \leq 10^{-15}$, entonces $x_n = x'_{nj} = x'_{n(j+1)}$.

Este método se puede emplear por que F_1 y F_2 son continuamente derivables y por lo tanto F_1' y F_2' existen en cualquier punto. Como mencionamos en la sección anterior estamos considerando rebotes múltiples, i.e., que una partícula puede rebotar consecutivamente las veces que sea en un solo perfil. Lo anterior conduce a preguntarnos ¿qué tan cercanos pueden ser dos colisiones consecutivas? la respuesta es, hasta el orden de 10^{-15} , que es el error que definimos para el método de Newton-Raphson. Por ejemplo, las colisiones $x_n = 1 \times 10^{-15}$ y $x_{n+1} = 1.5 \times 10^{-15}$ se considerarían el mismo punto desde una perspectiva numérica.

2.2.2. Implementación numérica

Ya sabemos como encontrar los puntos de colisión y los ángulos de reflexión para una partícula dentro de un canal. Pero algo que no hemos mencionado es, el análisis que usamos para seguir el sentido de la trayectoria de la partícula, i.e. ¿cómo establecemos que una partícula rebotó hacia la derecha o hacia la izquierda? o ¿cómo saber que tipo de rebotes nunca serán posibles? Para dar respuesta a estas preguntas empleamos el programa Geogebra5 y construimos el esquema direccional de la tabla 2.1, basado en el signo de las pendientes m_i , m_t , m_R (pendientes de la recta inicial, recta tangente en un punto de choque x_n y pendiente de la recta reflejada al punto de choque x_n , respectivamente) así como en los casos límite cuando sus valores se aproximan a cero y a infinito. Este esquema representa básicamente la

estructura condicional (if and else) implementada en fortran90 que modela la dinámica de una partícula dentro del canal.

- Consideramos (x_0, y_0, θ_i) el primer punto de donde sale la partícula. Inmediatamente después de que la partícula entra en el canal, tendrá su primer choque (x_1^*, y_1^*) . Este nos servirá como punto de partida en la implementación numérica. Nos ubicará en la primera columna de la tabla 2.1, pues con él podremos identificar en qué perfil se encuentra la partícula al primer rebote.

Si $y_1^* > 0$, está en el perfil superior.

Si $y_1^* < 0$, está en el perfil inferior.

No consideramos el caso $y_1^* = 0$ porque este valor indica que no hubo colisión con ninguno de los perfiles y que la partícula entró directamente al otro reservorio. El objetivo es saber en qué dirección rebota la partícula.

- Ahora veremos el valor que toma la pendiente de la tangente en (x_1^*, y_1^*) , si es: $m_t > 0$, $m_t < 0$ o $m_t = 0$. Esto nos ubica en la segunda columna de la tabla 2.1.
- Analizaremos el signo del ángulo β , definido como el ángulo más pequeño formado entre la recta incidente l_i y la recta tangente l_t (ver Fig. 2.4). La expresión analítica para β es la siguiente

$$\beta = \arctan \left(\frac{m_t - m_i}{1 + m_t * m_i} \right).$$

El ángulo β siempre se medirá de la recta incidente l_i hacia la recta tangente l_t . Enfatizamos que β es siempre el ángulo más pequeño formado entre dos rectas cualesquiera. Se define $\beta > 0$ en sentido anti-horario y $\beta < 0$ en sentido horario. Pensaremos en la recta l_i como si fuera el eje horizontal al momento de calcular β .

- Finalmente conociendo el signo de β positivo, negativo o cero, hay que analizar el signo de la pendiente reflejada m_R . Esta última pendiente determinará la dirección (sentido) en que rebota la partícula, i.e. si

$y_n > 0$	$m_t < 0$	$\beta > 0$	$m_r > 0$ ← $m_r < 0$ ← $m_r = 0$ ← $m_r = \infty$ No es posible	
		$\beta \leq 0$	$m_r > 0$ ← $m_r < 0$ → $m_r = 0$ No es posible $m_r = \infty$ ↓	
	$m_t > 0$	$\beta \geq 0$	$m_r > 0$ ← $m_r < 0$ → $m_r = 0$ No es posible $m_r = \infty$ ↓	
		$\beta < 0$	$m_r > 0$ → $m_r < 0$ → $m_r = 0$ → $m_r = \infty$ No es posible	
	$m_t = 0$	$\beta > 0$	$m_r > 0$ ← $m_r = 0$ ↓	
		$\beta < 0$	$m_r < 0$ → $m_r = \infty$ ↓	
		$\beta = 0$	$m_r = 0$ No hay colision	
	$y_n < 0$	$m_t < 0$	$\beta > 0$	$m_r > 0$ → $m_r < 0$ → $m_r = 0$ → $m_r = \infty$ No es posible
			$\beta \leq 0$	$m_r > 0$ → $m_r < 0$ ← $m_r = 0$ No es posible $m_r = \infty$ ↑
$m_t > 0$		$\beta \geq 0$	$m_r > 0$ → $m_r < 0$ ← $m_r = 0$ No es posible $m_r = \infty$ ↑	
		$\beta < 0$	$m_r > 0$ ← $m_r < 0$ ← $m_r = 0$ ← $m_r = \infty$ No es posible	
$m_t = 0$		$\beta > 0$	$m_r > 0$ → $m_r = 0$ ↑	
		$\beta < 0$	$m_r < 0$ ← $m_r = \infty$ ↑	
		$\beta = 0$	$m_r = 0$ No hay colisión	

Table 2.1: Esquema direccional para la trayectoria de una partícula, cuando ya es conocido el primer punto de choque.

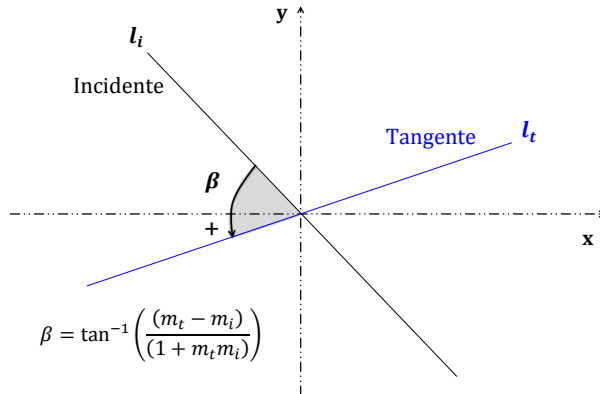


Figure 2.4: β es el ángulo más pequeño formado entre dos rectas.

viaja hacia adelante (derecha) o hacia atrás (izquierda), sin importar de que reservorio térmico provenga la partícula.

Recordemos que la tabla 2.1 funciona como un instructivo que indica la dirección en que se mueve cada partícula después de una colisión, conociendo únicamente $(y_n, m_t, \beta$ y $m_R)$.

La implementación numérica se realizó en Fortran90. La base del código es en esencia el esquema direccional ya mencionado, en el que empleamos como subrutinas los métodos de bisección y de Newton-Raphson para calcular todos los rebotes que pueda realizar una partícula. Si nos preguntamos ¿qué hace el Código para modelar el sistema?, de forma muy sencilla hace lo siguiente:

Al inicio conocemos las condiciones iniciales (x_0, y_0, θ_0) . Se sabe que las partículas recién salidas del reservorio izquierdo viajan hacia la derecha y viceversa las que salen del reservorio derecho, entonces:

- Se calcula el primer punto de choque (x_1, y_1) de la partícula número uno y su ángulo reflejado θ_R . → (Se llama a la subrutina **Newton-Raphson y bisección**).

- Analiza hacia dónde rebotó, izquierda o derecha. → (**Corre esquema direccional**).
- Calcula la segunda colisión (x_2, y_2) de esta partícula. → (**Llama a subrutina Newton-Raphson y bisección**).
- Analiza hacia dónde rebotó, izquierda o derecha. → (**Corre esquema direccional**).

Calculará de esta forma todos los rebotes (x_n, y_n) que realice la partícula hasta que se cumpla cualquiera de las dos condiciones siguientes:

1) Que la partícula haya estado dentro del canal rebotando por un tiempo t que nosotros fijamos,

o

2) Que la partícula llegue a cualquiera de los dos baños térmicos antes del tiempo t . Sin importar si salió y regresó al mismo reservorio.

Se hará toda esta secuencia para cada partícula que se lance dentro del canal y al final tendremos las trayectorias de todas las partículas. Se requiere mucho poder de cómputo pues se pretende lanzar miles de partículas para poder caracterizar el flujo de calor, esto implica numéricamente calcular miles de millones de colisiones. Anexamos al código un contador de partículas para saber cuantas partículas cruzaron al reservorio izquierdo, derecho y las que se quedaron dentro del canal. Esto nos ayudará mas adelante para el análisis del flujo de partículas.

2.3. Mapas de Poincaré

Este sistema exhibe secciones de Poincaré con una estructura de KAM típica de los sistemas hamiltonianos genéricos. Al hablar de sistemas hamiltonianos sabemos que se refiere a sistemas conservativos que vienen caracterizados por el teorema KAM (Kolmogorov-Arnold-Moser) [13, 14]. Para entender un poco el teorema KAM imaginemos un hamiltoniano que consta de dos partes

$$H = H_0 + \epsilon H_1,$$

con un coeficiente numérico ϵ . Supongamos que H_0 es integrable pero, debido a H_1 , el Hamiltoniano completo H no lo es. Cuando $\epsilon = 0$ hay n constantes de movimiento F_α , donde n es la dimensión del espacio de configuraciones. Para un sistema Hamiltoniano una de esas constantes de movimiento debe ser la energía,

$$F_\alpha(q_i, p_i) = cte \alpha, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Estas n ecuaciones definen un toro n -dimensional en el *espacio fase* $2n$ -dimensional. Por lo tanto, la trayectoria permanece en este toro para todo t . El movimiento es equivalente a n movimientos en una dimensión cada uno con su propia frecuencia. Si las razones entre las diferentes frecuencias son **fracciones racionales**, las *trayectorias son todas periódicas*. Si la relación entre las distintas frecuencias es **irracional**, el *toro tiene una única trayectoria que nunca se cierra y lo recubre completamente*. El movimiento se denomina cuasiperiódico. En cualquiera de los dos casos el movimiento es regular. Podemos dividir el movimiento en el toro n -dimensional en movimientos en toros bidimensionales que corresponden a cada una de las relaciones entre las distintas constantes de movimiento. Llamaremos a estos toros **racionales** o **irracionales** según que la relación de frecuencias correspondiente sea racional o no.

Cuando ϵ es distinto de cero el sistema deja de ser completamente integrable, pero la energía sigue siendo una constante del movimiento. Por lo tanto, todas las trayectorias permanecerán en la capa de energía constante. Y, ¿qué es lo que ocurre con los toros, según el toro sea racional o no? en tanto ϵ se incrementa, todos los toros racionales desaparecerán mientras que aquellos toros irracionales, cuya relación entre frecuencias sea suficientemente irracional en el sentido de las fracciones continuas permanecieran. El último toro KAM que será destruido será aquel con la razón de frecuencias más irracional de todas, $\frac{w_1}{w_2} = \frac{(\sqrt{5}-1)}{2}$ la razón áurea de los griegos. Cuando todas las trayectorias hayan desaparecido, entonces tendremos un estado de caos global.

Si en nuestro sistema consideramos directamente el mapeo (x_n, θ_{R_n}) , tendremos que estudiar el movimiento en un espacio fase de 4 dimensiones. Por conveniencia trabajaremos con su equivalente, el par conjugado (x_n, P_n) , donde $P_n = \cos(\theta_{R_n})$ es la componente en la dirección x justo después de la n -ésima colisión con alguna de las paredes, dividido por su magnitud. Así trabajaremos solamente con el conjunto de puntos (x_n, P_n) que corresponden

al mapa de Poincaré. Por lo tanto, cada vez que se lancen partículas en el canal con condiciones iniciales diferentes, estas trazarán un conjunto de puntos (x_n, P_n) diferentes e irán llenando la sección de Poincaré mostrándonos la dinámica del sistema.

2.3.1. Canal estrecho

Se clasifican dos tipos de canales: estrecho y amplio. Un canal se considera estrecho cuando $b \ll 1$ y canal amplio cuando $b > 1$. Nosotros solamente estudiaremos el caso de un canal estrecho. Para los cálculos numéricos utilizamos $b = 0.1$, y nos basamos en los valores empleados en [9]. Fijamos $w_1 = 0.5$ y $w_2 = 0$, mientras que las amplitudes se consideran iguales en ambos perfiles, $a_1 = a_2$ y toman los valores $(0.001, 0.01, 0.02, 0.04, 0.09)$. Veremos como evolucionan las secciones de Poincaré a medida que la amplitud a va aumentando, manteniendo un desfase $w_1 = 0.5$.

Como era de esperarse, las secciones de Poincaré que obtuvimos son semejantes a las mostradas en [9]. Para el caso de pequeñas amplitudes, por ejemplo $a = 0.001$, independientemente del desfase entre los perfiles, las secciones de Poincaré muestran una dinámica regular como la del péndulo unidimensional, con trayectorias elípticas y sinusoidales en el espacio fase (ver Fig. 2.5). Las trayectorias elípticas corresponden a partículas cicladas o atrapadas moviéndose hacia atrás y hacia adelante en el canal, alrededor de un punto fijo. Las trayectorias sinusoidales corresponden a partículas que viajan indefinidamente a lo largo del canal: hacia la derecha cuando $P_n > 0$ y hacia la izquierda cuando $P_n < 0$. Debido a la simetría del canal la estructura de los mapas de Poincaré es periódica: por lo tanto, podemos elegir el dominio de x en el intervalo $[2, 4]$ que corresponde a dos periodos de ondulación a fin de obtener una visión general de la dinámica del sistema.

Notemos que en la Figura 2.5, las elipses tienden a cambiar en función de la fase w_1 . Mientras más cercano se esté de $w_1 = 0$ (paredes sin desfase), la región de elipses tiende a hacerse más pequeña hasta que en $w_1 = 0$ (ver Fig. 2.5(b)) las elipses desaparecen, lo cual indica que prácticamente no hay partículas atrapadas, todas las partículas viajan a lo largo del canal describiendo una trayectoria similar a los perfiles sinusoidales. Esto es comparable con el canal plano [23] cuyos perfiles son rectas horizontales en el que las trayectorias de las partículas en (x_n, P_n) , también son

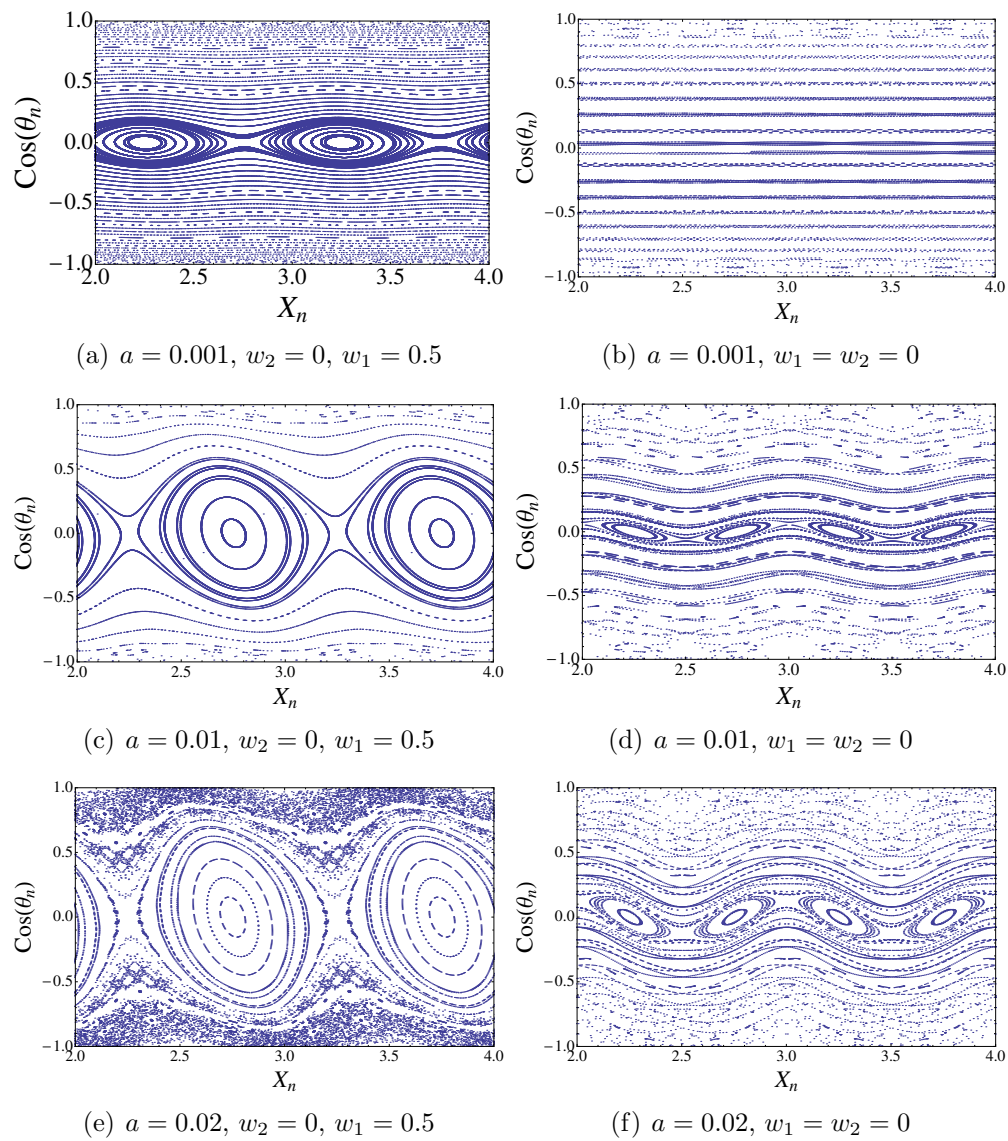


Figure 2.5: Secciones de Poincaré en el intervalo $[2, 4]$ para $b = 0.1$. Se consideran dos casos: perfiles con desfase de π y sin desfase.

rectas horizontales.

A medida que incrementamos la amplitud a , la dinámica sigue siendo regular, pero la región de elipses se hace cada vez más grande como se muestra en las Figs. 2.5(c) y 2.5(d) en relación a las Figs 2.5(a) y 2.5(b). Esto indica que el número de partículas atrapadas se incrementa. Si continuamos incrementando la amplitud, las elipses comienzan a deformarse y a ocupar una región aún más grande, pero ahora la ruptura de algunas trayectorias es más notoria, dando lugar a un comportamiento caótico. En la Fig. 2.6(a) se aprecia claramente la formación de pequeñas islas alrededor de las elipses que no se han roto.

Es importante mencionar que estas trayectorias elípticas son características de un sistema KAM y comúnmente se les llama curvas KAM. Estas curvas delimitan la dinámica en el espacio (x_n, P_n) , pues las regiones caóticas no podrán extenderse mientras existan curvas KAM que no se hayan roto. Como el ancho medio de nuestro canal es $b = 0.1$, sólo analizaremos las secciones de Poincaré hasta una amplitud de $a = 0.09$. Para esta amplitud observemos la Fig. 2.6(e), donde podemos apreciar que ya no hay curvas KAM que prohíban la conexión entre las diferentes zonas caóticas, lo que tendremos finalmente, es una región central de islas rodeadas por un mar caótico. También se pueden observar regiones de islas secundarias rodeando a las primarias. Estas representan a partículas en el canal con órbitas cerradas de periodo k . Un punto fijo de periodo k es un punto fijo del mapeo en la Ec. (2.7), que en este caso representa a una partícula que después de k rebotes regresa a su posición inicial en el espacio fase. El periodo está dado por el número de islas alrededor de la isla central. Cabe mencionar que corroboramos según [9], que conforme se incrementa la amplitud a mientras más cerca se esté de $w_1 = 0.5$, las trayectorias cerradas tienden a romperse de forma más rápida. En cambio, mientras el desfaseamiento esté más cerca de $w_1 = 0$, la ruptura de las curvas KAM será más lenta. Las Figs 2.5 y 2.6, muestran claramente este patrón de ruptura dependiente de la fase. Comparando las imágenes del lado izquierdo con las del lado derecho, en ambas tenemos los mismos valores para la amplitud y el desfase $w_2 = 0$ (siempre fijo), mientras que w_1 toma los valores $w_1 = 0.5$ del lado izquierdo y $w_1 = 0$ del derecho.

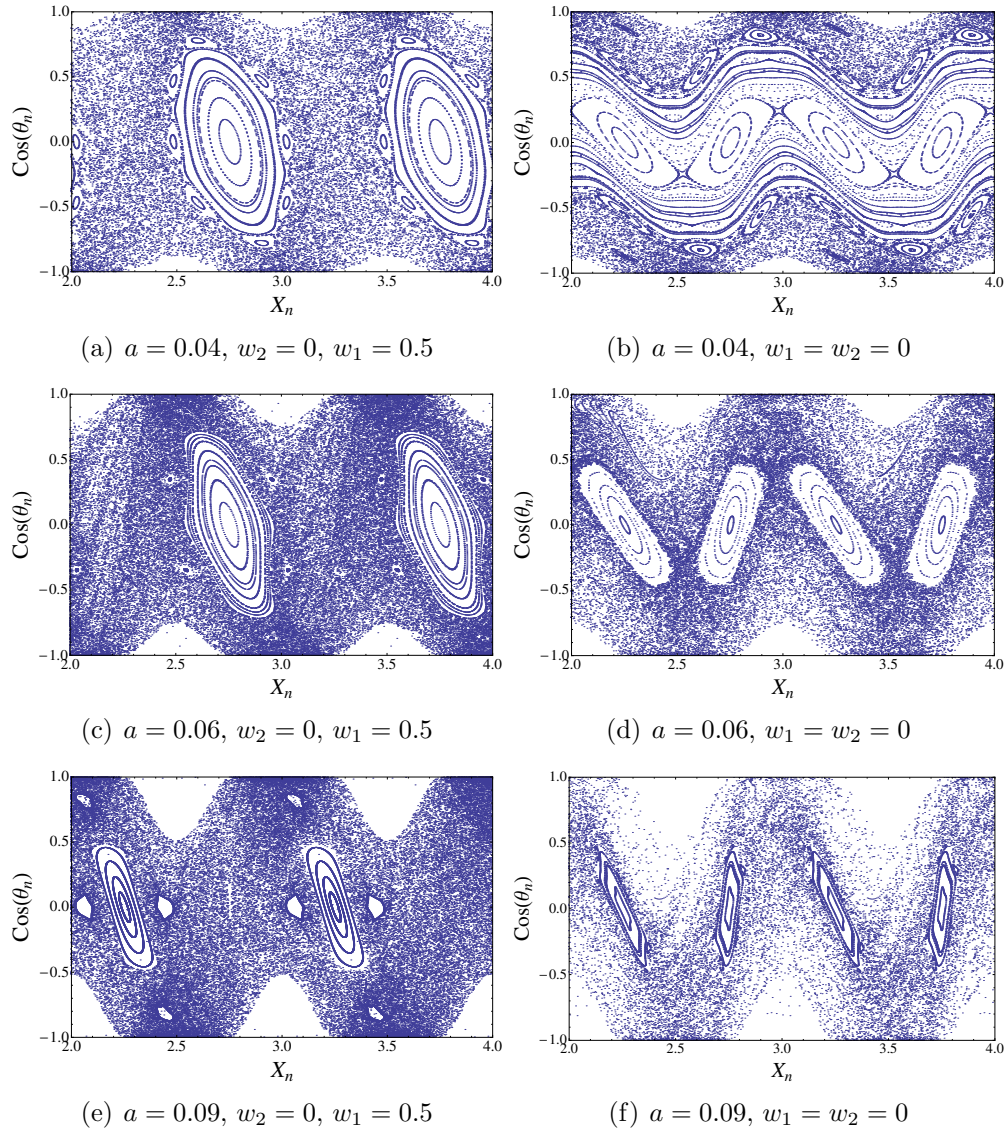


Figure 2.6: Secciones de Poincaré en el intervalo $[2, 4]$ para $b = 0.1$. Se consideran dos casos: perfiles con desfase de π y sin desfase.

Chapter 3

Propiedades térmicas y de transporte del canal

Analizar las propiedades térmicas de cualquier sistema puede extenderse a muchos conceptos, todos relacionados con la termodinámica y fenómenos de transporte como: flujo de calor, perfil de temperaturas, reversibilidad térmica del sistema, rectificación térmica (diodo térmico), transporte de masa, energía, momento, etc. Además, de considerar si es para un caso estacionario o no estacionario. En fin, son muchas cosas las que podemos estudiar en este sistema. Nos abocaremos al estudio del flujo de calor y flujo de partículas (transporte de partículas) dentro del canal. En ambos casos analizaremos si se presenta una rectificación del flujo en función de la geometría del canal. Estas propiedades las estudiaremos considerando un canal con pequeñas amplitudes, pues en este régimen, las secciones de Poincaré indican confinamiento de partículas. Obtendremos una estimación analítica para el flujo de calor en estado estacionario por medio de un potencial efectivo y corroboraremos nuestra estimación con los cálculos numéricos.

Como el flujo de partículas es un flujo bidireccional dentro del canal, lo analizaremos como la transmisión de partículas (flujo de partículas en dirección positiva) y reflexión de partículas (flujo de partículas en dirección negativa), en función de la amplitud y luego como función de la fase. Posteriormente, analizaremos si el cambio de la geometría genera alguna rectificación en el flujo de partículas, i.e. si el flujo promedio global se establece en una dirección preferente en función del cambio de amplitud o cambio de fase; de ser así, diremos que bajo esa geometría se presenta rectificación del flujo de partículas. La finalidad en ambos casos es controlar el flujo de partículas

y/o flujo de calor, variando la geometría del canal. Diremos entonces que, un sistema en el cual podamos controlar la dirección de flujo de calor (al menos en un 80%), mediante la variación de ciertos parámetros lo llamaremos diodo térmico. Si sólo controlamos una fracción pequeña del flujo, diremos que hay un porcentaje de rectificación térmica.

3.1. Flujo de partículas

El flujo está directamente relacionado con el transporte, ya sea de materia, energía, calor, partículas, campo eléctrico, etc. y hay diversas formas para modelarlo. Nuestro interés radica en tener una cantidad que nos diga cuántas partículas se quedan atrapadas, cuántas se transmiten y cuántas se reflejan, dada una distribución inicial de partículas $\rho(\theta_0)$. Para esto, todas las partículas que lleguen a $x_R = L$, se considerarán como partículas transmitidas y contarán para el flujo transmitido ϕ_{Trans} y las que lleguen a $x_L = 0$, serán partículas reflejadas y contarán para el flujo reflejado ϕ_{Ref} .

3.1.1. Transmisión y reflexión de partículas

Definimos en general, al flujo de partículas como la cantidad de partículas que atraviesan una área A en un determinado tiempo. De esta forma, el número de partículas que atraviesen la longitud vertical l_R del extremo derecho del canal, en un determinado tiempo, conformarán el flujo total hacia la derecha ϕ_R . Análogamente se construye el flujo hacia la izquierda ϕ_L y la abertura en este extremo está dada por l_L (l_R y l_L juegan el papel del área A para el flujo, pero en una dimensión). Tenemos entonces que las expresiones para indicar el flujo reflejado y transmitido son:

$$\phi_{Trans} = \frac{\phi_R}{\phi_T} = \frac{\text{flujo derecha}}{\text{flujo total inyectado}},$$

$$\phi_{Ref} = \frac{\phi_L}{\phi_T} = \frac{\text{flujo izquierda}}{\text{flujo total inyectado}}.$$

Trataremos el caso de una densidad inicial de partículas constante ρ_0 (número de partículas por unidad de ángulo), las cuales tienen asociada una

velocidad v y una distribución angular de partículas

$$\rho(\theta_0) = \rho_0 \cos \theta_0. \quad (3.1)$$

La densidad inicial de partículas ρ_0 se puede expresar en términos del número de partículas por volumen unitario,

$$\rho_0 = \frac{N_0}{V_{unitario}}.$$

Consideremos ahora el flujo de partículas lanzadas a un ángulo θ_i que pasan a través de una superficie A :

$$\phi = \int \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} da \quad (3.2)$$

$$= \rho v A \cos \theta_i. \quad (3.3)$$

Consideremos ahora un conjunto discreto de partículas lanzadas en todos los diferentes ángulos posibles. Además de que hay n diferentes ángulos θ_i . Entonces el flujo total Φ_t en el caso discreto toma la forma:

$$\Phi_t = \sum_{i=1}^n \rho v A \cos \theta_i. \quad (3.4)$$

Si consideramos ahora la densidad angular de partículas (Ec. (3.1)), entonces en el continuo tenemos que el flujo total es

$$\phi_t = v \mathbf{A} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \rho(\theta) \cos \theta d\theta \quad (3.5)$$

$$= \rho_0 v A \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2 \theta d\theta. \quad (3.6)$$

Numéricamente ρ_0 equivale a una fuente puntual de la cual emergen N_0 partículas a la derecha o izquierda según esté colocada la fuente. En el análisis numérico colocamos 50 fuentes puntuales a lo largo del eje y tanto en x_L como en x_R , para generar un flujo bidireccional. De cada fuente se lanzan 1000 partículas con la distribución angular (Ec. (3.1)), así el número de partículas inyectadas es del orden de 10^5 .

Para asociar una velocidad v_j a las partículas, empleamos la distribución de velocidades Gaussiana $P(v_x)$ y $P(v_y)$, vista en el capítulo anterior (Ecs. (2.3) y (2.4)), que toman la forma

$$P(v_x, v_y) = P(v_x)P(v_y) = \frac{\|v_x\|}{\sqrt{2\pi T^3}} e^{-\frac{(v_x^2+v_y^2)}{2T}}. \quad (3.7)$$

Normalizamos esta distribución y obtenemos

$$P(v_j) = \frac{P(v_x, v_y)}{\int_{R^2} \int P(v_x, v_y) dv_x dv_y} = 1. \quad (3.8)$$

Entonces, la probabilidad de tener una velocidad arbitraria v_j está dada por la expresión (3.9), donde el intervalo de velocidades quedará delimitado por el valor de la temperatura T que asignemos. En este canal trabajamos con dos temperaturas, la del reservorio izquierdo que corresponde a $T_1 = 10$, fijando un intervalo de velocidades probables de $[-10, 10]$, mientras que el reservorio derecho se encuentra a una temperatura $T_2 = 1$, definiendo un intervalo de velocidades probables de $[-5, 5]$,

$$P(v_j) = \frac{\frac{\|v_x\|}{\sqrt{2\pi T^3}} e^{-\frac{(v_x^2+v_y^2)}{2T}}}{2}. \quad (3.9)$$

Ahora, determinaremos la fracción o porcentaje de partículas dN_j que tienen velocidades cercanas a v_j . Notemos que v_j es la rapidez asociada a las componentes (v_x, v_y) y el conjunto de partículas cercanas a v_j tomarán el valor numérico de v_j ,

$$dN_j = N_0 P(v_j).$$

Esto se puede ver en forma discreta como, un conjunto de partículas con densidad constante, que viajan distribuidas en n grupos de partículas de tamaño dN_j . Cada grupo tendrá una velocidad v_j , i.e. las partículas que conforman un grupo tendrán entre ellas la misma rapidez. A las partículas de cada grupo se les asociará un ángulo θ_i asignado por una distribución angular.

3.2. Amplitudes pequeñas

El canal para pequeñas amplitudes se caracteriza porque se tienen trayectorias cerradas (elipses) bien definidas. De la Fig. 2.5(a), obtenida para la sección de Poincaré, podemos ver que para pequeñas amplitudes, la región de elipses (órbitas libracionales) u órbitas rotacionales cercanas a la separatriz, representan colisiones casi perpendiculares de una partícula con los perfiles del canal. Es decir, la velocidad en y después de cada choque es mucho mayor que la velocidad en x , esto es, $\|v_y\| \gg \|v_x\|$. Bajo estas condiciones decimos que la partícula se mueve adiabáticamente en dirección del eje x y es posible hacer uso del teorema adiabático¹ y concluir que existe una cantidad C , llamada condición de invariancia adiabática que permanece casi constante a medida que la partícula colisiona con los perfiles del canal y_1 y y_2 . Para este caso $C = D(x)\|v_y\|$ donde $v_y = \dot{y}_n$ es la velocidad justo después del n -ésimo choque. $D(x)$ es la separación entre los perfiles en el punto x_n , denotado por $D(x) = y_2(x) - y_1(x)$ o bien por

$$D(x) = 2b + a_2 \sin 2\pi(x + w_2) - a_1 \sin 2\pi(x + w_1).$$

Bajo estas circunstancias podemos estimar un ángulo crítico $\theta_0 = \theta_c$ (para un conjunto de parámetros geométricos) para el cual la partícula realiza el mayor movimiento libracional. Notemos que la partícula ciclada realiza un movimiento de vaivén, cuando la partícula viene de regreso o alcanza su punto de retorno, estará (de forma aleatoria) cerca de un punto fijo hiperbólico que llamaremos x_f^h , que estará a la derecha de x_0 si $\cos \theta_c > 0$. Por otro lado, como el ancho medio del canal es pequeño, θ_c es virtualmente independiente de la condición inicial y_0 (nuestros resultados numéricos lo corroboran) y podemos ajustar el punto de partida para estimar θ_c . Por lo tanto, $(x_0, \cos \theta_c)$ es una condición inicial en la sección de Poincaré.

Con el fin de calcular θ_c usamos la condición de invariancia adiabática para dos choques arbitrarios (x_n, θ_n) y (x_m, θ_m) , tenemos

$$D(x_n)\dot{y}_n = D(x_m)\dot{y}_m \tag{3.10}$$

y considerando que en las colisiones, la energía se conserva $E_n = E_m$, es

¹El teorema adiabático y su demostración puede encontrarse en [24].

posible ver que el movimiento en la dirección x está descrito por

$$\frac{1}{2}(\dot{x}_n)^2 = E - V(x), \quad (3.11)$$

siendo E la energía cinética de la partícula con masa $m = 1$. $V(x) = \frac{1}{2}(\frac{C}{D(x)})^2$ puede ser interpretado como un potencial efectivo que reproduce las regiones de elipses que aparecen en las secciones de Poincaré. Si consideramos $w_1 = w_2 = 0$, tendríamos que $D(x) = 2b$, por tanto, $V(x)$ predice que no hay trayectorias elípticas, lo cual concuerda con la sección de Poincaré obtenida en la Fig. 2.5(b). Este potencial explica por qué las secciones de Poincaré para una amplitud pequeña se asemejan al espacio fase de un péndulo simple.

Para obtener la posición de los puntos fijos x_f^h y x_f^e , hiperbólicos y elípticos respectivamente, hay que calcular los máximos y mínimos de $V(x)$. Derivando e igualando a cero obtenemos que se debe satisfacer

$$\cos(2\pi(x_f + w_2)) = \cos(2\pi(x_f + w_1)).$$

Para $w_1 = 1/2$ y $w_2 = 0$, los puntos fijos hiperbólicos x_f^h se localizan en $x_f^h = \frac{3}{4} \pm n$ mientras los puntos fijos elípticos $x_f^e = \frac{1}{4} \pm n$, con $n = 1, 2, 3, \dots$, esto se verifica claramente en las secciones de Poincaré de la Fig. 2.5(a). Continuando con la estimación del ángulo crítico, hacemos $x_n = x_0$, $\theta_n = \theta_c$, entonces $x_m \approx x_f^h$ y $\theta_m \approx \frac{\pi}{2}$. Usando expansión en series de Taylor para (3.10) manteniendo los términos $\frac{a}{b}$ y β_c^2 , donde $\beta_c = \frac{\pi}{2} - \theta_c$, obtenemos

$$(\beta_c)^2 = \frac{a}{b} \{ \sin[2\pi(x_f^h + w_1)] + \sin[2\pi(x_0)] - \sin[2\pi x_f^h] - \sin[2\pi(x_0 + w_1)] \}. \quad (3.12)$$

Para este caso, como $x_f^h = \frac{3}{4} \pm n$ y x_0 lo podemos considerar como cero por ser una condición inicial cualquiera, la expresión (3.12) se reduce a

$$\beta_c \cong \left(\frac{2a}{b}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.13)$$

β_c es el ángulo formado entre la vertical y los rebotes casi verticales a los perfiles. Las partículas atrapadas dentro del canal, a medida que van rebotando forman un ángulo con la vertical, de esta manera el ángulo β_c irá decreciendo hasta casi llegar a cero, que es cuando la partícula alcanza el punto de retorno.

3.2.1. Flujo de calor

Para el estudio de las propiedades térmicas consideraremos una versión finita del canal. Definimos a éste como la composición de N celdas unitarias C_i con $i = 1, \dots, N$ consecutivas, de tal forma que un extremo del canal está en $x_L = 0$ y el otro está en $x_R = L$, teniendo así que la longitud total del canal será $L = Nl$, donde N debe ser lo suficientemente grande para que el flujo de calor llegue a un valor fijo. Este hecho lo corrobora nuestra simulación numérica. Para inducir el transporte de calor, los extremos del canal son conectados a dos reservorios térmicos (baños térmicos) a temperaturas T_1 y T_2 , tal que $T_1 > T_2$. Esta versión finita debe satisfacer que el ancho medio del canal sea mucho menor que su longitud total $b \ll L$. Esto para mantener la excitación cinética fija en la dirección transversal. Así el número de partículas que puedan atravesar el canal sin chocar con las paredes será mucho menor que aquellas que tendrán colisiones con ellas.

En el capítulo 2 definimos la dinámica de las partículas dentro del canal. Estipulamos que al no interactuar las partículas entre sí, es equivalente a considerar la dinámica de una sola partícula por un tiempo lo suficientemente grande. Bajo este supuesto tenemos que la energía cinética E para una partícula libre de masa unitaria $m = 1$ se define como:

$$E = \frac{1}{2} \dot{x}^2$$

y denotamos $(\Delta E)_k$ como el cambio de energía cinética a la k -ésima colisión con un baño térmico

$$(\Delta E)_k = E_{int} - E_{out}. \quad (3.14)$$

Sumando sobre N_c eventos que tienen lugar durante un instante t_c , tenemos la siguiente definición de flujo de calor

$$J_1(t_c) = \frac{1}{t_c} \sum_{k=1}^{N_c} (\Delta E)_k, \quad (3.15)$$

donde t_c es el tiempo total que a la partícula le toma colisionar N_c veces con un baño térmico. Para obtener el límite termodinámico se debe mantener el número de partículas fijo por celda unitaria, como el tamaño N del canal. Por ejemplo, si consideramos una sola partícula por celda, entonces el flujo de calor en un canal de longitud N es

$$j_N(t_c) = N J_1(t_c). \quad (3.16)$$

El siguiente paso es obtener una estimación analítica para el flujo de calor en el régimen estacionario, para el caso de una pequeña amplitud de onda. En este régimen tenemos dos tipos de órbitas a considerar, por un lado las libracionales que corresponden a partículas en movimiento libracional que ejecutan rebotes casi perpendiculares con las fronteras y las órbitas rotacionales (partículas que cruzan hacia los reservorios), en cuyo caso aquellas órbitas cercanas a la separatriz serán periódicas y también realizarán choques casi verticales con las paredes. Para fines analíticos es equivalente considerar a todas estas partículas inyectadas en el canal como una sola partícula rebotando de tal forma que al colisionar con un baño térmico, ésta es reflejada con una velocidad correspondiente a la distribución de ese reservorio y cuando la partícula no alcance a colisionar con el reservorio opuesto, se reinyectará al reservorio del que emergió. Ahora dividiremos el espacio de configuraciones en cajas o celdas C_i que correspondan a una celda unitaria. En lo sucesivo tomarán mucha importancia las celdas C_1 y C_N que corresponden a las celdas en contacto directo con los baños térmicos (canal de longitud N). En estas celdas se identifica de cuál reservorio emerge la partícula y con cuál colisiona en caso de hacerlo. Entonces el tiempo en la j -ésima visita que la partícula pasa dentro de la celda C_1 se denota por t_j :

$$t_j = \sum_{C_1} \left| \frac{x_{n+1}^{(j)} - x_n^{(j)}}{\dot{x}_n^j} \right|. \quad (3.17)$$

$\dot{x}_n^j(x_n^j)$ denota la velocidad en la dirección x justo después de la n -ésima colisión con cualquier pared durante la visita j -ésima a la celda C_1 . \dot{x}_n^j como función de x_n^j se determina usando el potencial efectivo dado por la Ec. (3.11), mientras que la trayectoria de la partícula se da a conocer una vez que las condiciones iniciales aleatorias $\theta_0^{(j)}, v_0^{(j)}$ se determinan justo después de una colisión con un baño térmico. Cuando la partícula nuevamente colisiona con un baño térmico, continuamos calculando su trayectoria una vez que las nuevas condiciones iniciales $\theta_0^{(j+1)}, v_0^{(j+1)}$ se conocen.

Separaremos t_j según el tipo de órbita que describa. Para las órbitas rotacionales cercanas a la separatriz es aproximadamente

$$t_j^{(r)} = \sum_{C_1} \left| \frac{x_{n+1}^{(j)} - x_n^{(j)}}{\dot{x}_n^j} \right| \approx \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{E_j - V_j(x)}}$$

$$= \int_0^1 \frac{D(x)dx}{v_0^{(j)} \sqrt{D^2(x) - D^2(0) \sin^2 \theta_0}}. \quad (3.18)$$

Mientras que para las órbitas libracionales tenemos

$$\begin{aligned} t_j^{(l)} &= \sum_{C_1} \left| \frac{x_{n+1}^{(j)} - x_n^{(j)}}{\dot{x}_n^j} \right| \approx 2 \int_0^{x_c} \frac{dx}{\sqrt{E_j - V_j(x)}} \\ &= 2 \int_0^{x_c} \frac{D(x)dx}{v_0^{(j)} \sqrt{D^2(x) - D^2(0) \sin^2 \theta_0}}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Las expresiones (3.18) y (3.19) se obtienen empleando el potencial efectivo $V(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{C}{D(x)} \right)^2$, donde $C^j = D(x)|v_y| = D(0)v_0^j \|\sin \theta_0^j\|^2$. En la Ec. (3.19) el límite de integración se considera desde la inyección de la partícula dentro del canal en $x_0 = 0$, hasta el punto de retorno x_c de la órbita elíptica, por este motivo se agrega el factor de 2. El tiempo que le lleva a la partícula ejecutar su órbita libracional antes de ser reinyectada en el mismo reservorio, es el doble de tiempo que pasa desde el reservorio hasta el punto de retorno, donde la dirección de desplazamiento cambia y la velocidad en x es aproximadamente cero. Entonces x_c será la raíz positiva más cercana de $E - V(x) = 0$ para $x_0 = 0$. Para la celda C_N tenemos una expresión similar para el tiempo, sólo que x_c será la raíz más cercana a la izquierda³ de $x_0 = N$.

Las partículas que salen de los baños térmicos no pueden tener acceso a las órbitas libracionales en las celdas C_i con $i = 2, 3, \dots, N-1$, por lo tanto en estas celdas el movimiento es rotacional. Las órbitas rotacionales lejanas a la separatriz son casi planas, como muestra la Fig.2.5(a); de modo que $t_j^{(r)} \approx \frac{1}{v_0^{(j)} \cos \theta_0^{(j)}}$. Una órbita de rotación cerca de la separatriz significa que su condición inicial satisface $\cos \theta_c \simeq \left(\frac{2a}{b}\right)^{1/2} \lesssim \cos \theta_0^{(j)}$. Ahora estableceremos el comportamiento de t_j como una función, tanto del número de celdas y de $t_j^{(r)}$ y $t_j^{(l)}$, utilizando los argumentos siguientes. Cuando la partícula viene de alguno de los baños térmicos en un ángulo $\theta_0 \geq \theta_c$ ejecuta movimiento libracional en las celdas $i = 1$ ó $i = N$ dependiendo del baño térmico del

²Recordemos que al obtener el potencial $V(x)$, supusimos conservación de energía entre dos rebotes, aquí consideramos que uno de esos choques corresponde a las condiciones iniciales con que es inyectada la partícula ($x_0 = 0, \theta_0, v_0$).

³La celda C_N está en contacto directo con el reservorio de la derecha, por este motivo se considera la raíz más cercana a la izquierda.

que provenga; siempre en estas condiciones la partícula será reinsertada en el mismo reservorio del cual salió. Entonces $t_j^{(l)}$ es solamente definido para las celdas $i = 1, N$. θ_c es el mismo ángulo crítico para cualquier baño térmico, debido a que la separación espacial de los baños es igual a un número entero. Cuando $\theta_0 < \theta_c$, tenemos movimiento rotacional periódico; por lo tanto, el tiempo requerido para que una partícula cruce la celda C_i es independiente del índice i . Por lo tanto, el comportamiento de t_j viene dado por

$$t_j(C_i) = \begin{cases} t_j^r & \text{si } \theta_0 < \theta_c \quad i = 1, \dots, N \\ t_j^l & \text{si } \theta_0 \geq \theta_c \quad i = 1, N \end{cases} \quad (3.20)$$

donde θ_c es el ángulo crítico definido en la Ec. (3.13). Ahora bien, expresaremos el flujo de calor de la Ec. (3.16) en términos de las Ecs. (3.18) y (3.19). Tomaremos los promedios temporales denotando $\langle \dots \rangle_L^i$ promedio temporal en la celda C_i , usando la distribución de probabilidad 3.7 con $T = T_L$ (reservorio izquierdo); $\langle \dots \rangle_R^i$ tiene la misma notación pero con $T = T_R$ (reservorio derecho). Sustituyendo la Ec. (3.20) en (3.16) y realizando los promedios temporales correspondientes, así como considerar la energía para un gas ideal, se debe obtener

$$\begin{aligned} j_N(N) &= \frac{\frac{1}{2}N(\langle v_0^2 \rangle_L - \langle v_0^2 \rangle_R)}{\langle t^{(l)} \rangle_L + \langle t^{(l)} \rangle_R + N(\langle t^{(r)} \rangle_L + \langle t^{(r)} \rangle_R)} \\ &= \frac{3N\sqrt{\pi} \sin \theta_c (T_L^{\frac{3}{2}}\sqrt{T_R} - T_R^{\frac{3}{2}}\sqrt{T_L})}{2^{\frac{3}{2}}[\sqrt{T_R}I_1(\theta_c) + \sqrt{T_L}I_3(\theta_c) + N(\sqrt{T_L} + \sqrt{T_R})I_2(\theta_c)]}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

La expresión final para el flujo de calor la tomamos de [9], donde I_1, I_2, I_3 , son las integrales siguientes

$$\begin{aligned} I_{1,3} &= 2 \int_1^{\beta_c} \int_0^{x_c(\beta_0), (x_{cN}(\beta_0))} \frac{D(x) \sin(\beta_0) dx d\beta_0}{\sqrt{D^2(x) - D^2(0) \sin^2(\beta_0)}}, \\ I_2 &= \int_0^{\beta_c} \int_0^1 \frac{D(x) \cos(\theta_0) dx d\theta_0}{\sqrt{D^2(x) - D^2(0) \sin^2(\theta_0)}}, \end{aligned}$$

con $\beta_0 = \frac{\pi}{2} - \theta_0$, $\beta_c \simeq (\frac{2a}{b})^{\frac{1}{2}}$ y $\theta_c \simeq \frac{\pi}{2} - \beta_c$. El factor resultante N en el denominador viene de la periodicidad del movimiento rotacional y del hecho de que una partícula ejecutando este tipo de movimiento debe viajar a través de N celdas de longitud unitaria, antes de colisionar con el otro baño térmico.

3.3. Diodo térmico

Los primeros indicios sobre diodos térmicos, se observaron por primera vez con la manifestación del efecto de rectificación térmica en una interfaz de óxido de cobre cuproso en 1930 [25], seguido de amplios estudios de flujo de calor a través de las interfaces de materiales como cobre sobre acero y el aluminio [26]. Por definición un *diodo térmico* es un sistema que permite el flujo de calor en una dirección, pero lo prohíbe en la dirección opuesta. Esto en un sentido riguroso implica que el total del flujo de calor se debe mover en una sola dirección. La importancia de estos objetos radica en la analogía con los diodos eléctricos, pues si se contara con un diodo térmico podríamos extender su uso a todas las aplicaciones de un diodo eléctrico, pero para el del flujo de calor. El problema más común con las propuestas de diodos térmicos, es su difícil construcción experimental.

Haciendo a un lado el formalismo, muchos autores llaman diodos térmicos a sistemas que presentan rectificación térmica. En adelante llamaremos *diodo térmico* o *rectificador térmico* a aquellos sistemas que presenten rectificación en el flujo de calor y analizaremos si estos son buenos o malos rectificadores térmicos.

3.3.1. Rectificación térmica

Sean dos sistemas A y B con temperaturas T_1 y T_2 respectivamente, tal que $T_1 > T_2$. De la termodinámica sabemos que al poner los dos sistemas A y B en contacto térmico, se establecerá un flujo de calor $J_{(A,B)}$, que fluirá del sistema de mayor temperatura al de menor temperatura $A \rightarrow B$ hasta alcanzar el equilibrio termodinámico. Ahora, si intercambiamos la temperatura de estos sistemas (A con temperatura T_2 y B a T_1), se establecerá un flujo de calor $J_{(B,A)}$ en sentido opuesto al anterior $B \rightarrow A$. Si la magnitud del flujo de calor no es la misma en ambos casos $|J_{(A,B)}| \neq |J_{(B,A)}|$, tendremos una rectificación térmica. La rectificación térmica será $\sigma = |J_{(A,B)} - J_{(B,A)}|$ y la dirección del flujo vendrá dada por el flujo con magnitud mayor.

Notemos que el objetivo principal de este trabajo es analizar si el canal que estudiamos se comporta como un diodo térmico al modificar su geometría. Los parámetros geométricos que manipularemos son, la amplitud a y la fase w . Nuestra idea central es considerar geometrías del canal convenientes (ver Fig. 3.1), de tal forma que inicialmente se propicie un flujo de calor y de

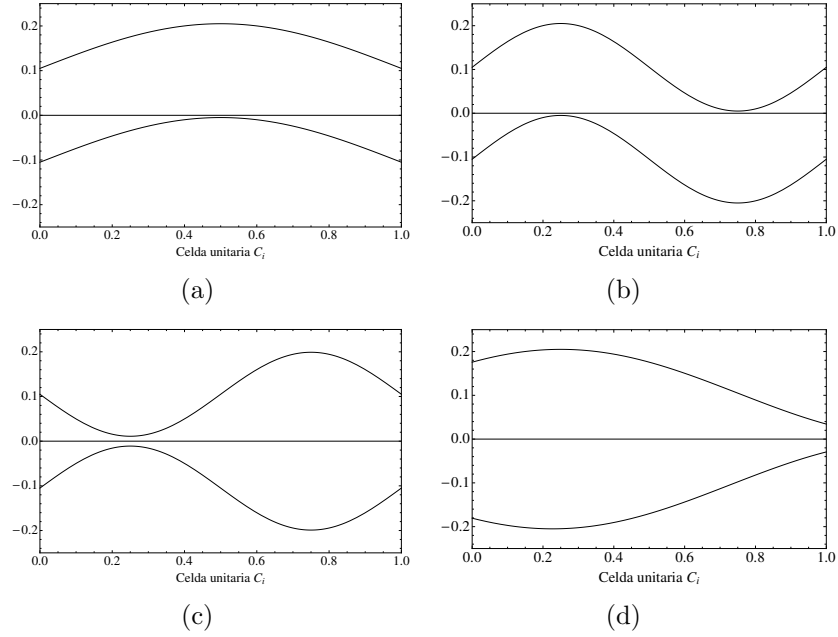


Figure 3.1: Geometrías de celdas unitarias propuestas para el estudio de la rectificación térmica. Con parámetros $a = 0.001$ en a) y b) $w_1 = w_2 = 0$ para uno y dos periodos, c) con $w_1 = 0.5$, $w_2 = 4$ para medio periodo y d) con $w_1 = 0.25$, $w_2 = 4$ para medio periodo.

partículas en una dirección preferente. i.e. que la geometría favorezca el paso de las partículas en una dirección mientras que en la otra dirección lo limite. Los baños térmicos conectados al canal los fijaremos con temperaturas $T_1 = 10$ y $T_2 = 1$. Consideraremos un canal de longitud N lo suficientemente grande, i.e. $N \gg 1$ para que el flujo de calor se estabilice. Para nuestros fines es suficiente considerar $N = 10$. Consideraremos las cuatro geometrías mostradas en la Fig. 3.1. Por lo tanto, construiremos un canal con cada geometría. En cada caso calcularemos los flujos de calor y de partículas considerando la inversión de temperaturas. Esto con la finalidad de buscar rectificación del flujo de calor y del flujo de partículas.

Chapter 4

Análisis de resultados

En este capítulo discutiremos los resultados numéricos obtenidos para el flujo de partículas; así como para el flujo de calor, considerando las diferentes geometrías propuestas en el capítulo anterior (ver Fig. 3.1).

Recordemos que el objetivo de este trabajo es analizar si las simulaciones numéricas muestran indicios de algún tipo de rectificación en el canal. De ser así, concluir a que factor o factores (térmicos o geométricos) se le atribuye. Se ha dicho a lo largo de este trabajo, la simulación numérica considera un canal estrecho para pequeñas amplitudes, con un flujo de partículas bidireccional que sólo interactúan con el canal. Este flujo es del orden de 10^5 partículas, inyectadas desde los reservorios según la distribución de velocidades Gaussiana (Ec. (3.7)). En principio, establecemos una diferencia de temperatura, el reservorio izquierdo a $T_L = 10$ y el derecho a $T_R = 1$ y consideramos longitudes para el canal alrededor de $N = 10$. Todos los cálculos se realizaron considerando dos casos, cuando $T_L = 10$ y $T_R = 1$ y el caso inverso cuando $T_L = 1$ y $T_R = 10$. Esto para analizar si hay una dirección preferente de los flujos al cambiar las temperaturas. Los parámetros geométricos a considerar son: fase y amplitud.

Sabemos que nuestro código simula adecuadamente la dinámica dentro del canal porque reproduce satisfactoriamente tanto las secciones de Poincaré, así como la gráfica para el flujo de calor de [9].

4.1. Flujo de partículas para la amplitud

En las Figs. 4.1 y 4.2 mostramos el flujo de partículas como función de la amplitud, para las primeras dos geometrías. Los canales correspondientes se caracterizan por no estar desfasados ($w_1 = w_2 = 0$) en ambos casos y difieren únicamente en el número de onda por periodo. La Fig. 4.1(a) tiene medio periodo por celda unitaria y longitud $N = 9$, mientras que en la Fig. 4.2(a) un periodo completo por celda unitaria y longitud de $N = 10.5$. Varias simulaciones numéricas mostraron que, al considerar longitudes para el canal con $N \gg b$ el flujo se estabiliza independientemente de la forma que tengan las celdas unitarias. Así que, por conveniencia consideramos diferentes longitudes en los canales, con el fin de aprovechar al máximo cada geometría que se analiza.

Como podemos apreciar en los esquemas 4.1(b) y 4.2(b), el flujo de partículas reflejado es igual al flujo transmitido ya que la resta entre ellos (que es el flujo preferente)¹ forma la recta horizontal en cero. Esto ya era predecible desde la obtención de las secciones de Poincaré. Si recordamos, para $w_1 = w_2 = 0$ tenemos un comportamiento muy similar al caso plano. De hecho, la forma de estos canales se asemeja al caso de un canal plano, pero como si estuviera doblada. Para el caso inverso (Figs. 4.1(c) y 4.2(c)) tenemos esencialmente el mismo comportamiento; el flujo reflejado es igual al transmitido y el flujo preferente es esencialmente cero. En las Fig. 4.1(d) y 4.2(d) mostramos el flujo preferente de partículas para el caso normal $T_L > T_R$ y el caso inverso $T_L < T_R$. Si tomaran valores distintos de cero, implicaría una rectificación de partículas. Claramente este no es el caso, pues ambas toman el mismo valor (cero). Notemos que la cantidad de partículas que se quedaron atrapadas dentro del canal es irrelevante. Teniendo en cuenta que lanzamos la misma cantidad de partículas de cada reservorio, vemos que en la misma proporción se transmiten y reflejan. Podemos apreciar pequeñas fluctuaciones (despreciables) en el flujo para las amplitudes cercanas a 0.1.

Para todas las gráficas realizamos 100 iteraciones en la amplitud, considerando saltos de 0.001 en el intervalo de $[0, 0.1]$, implicó mucho tiempo de cómputo.

En la figura 4.3 vemos resultados para una geometría más interesante, con

¹Flujo preferente es la resta entre el flujo reflejado y el flujo transmitido. Si hubo mayor flujo en sentido derecho (positivo sobre el eje y) o en sentido izquierdo (negativo sobre el eje y).

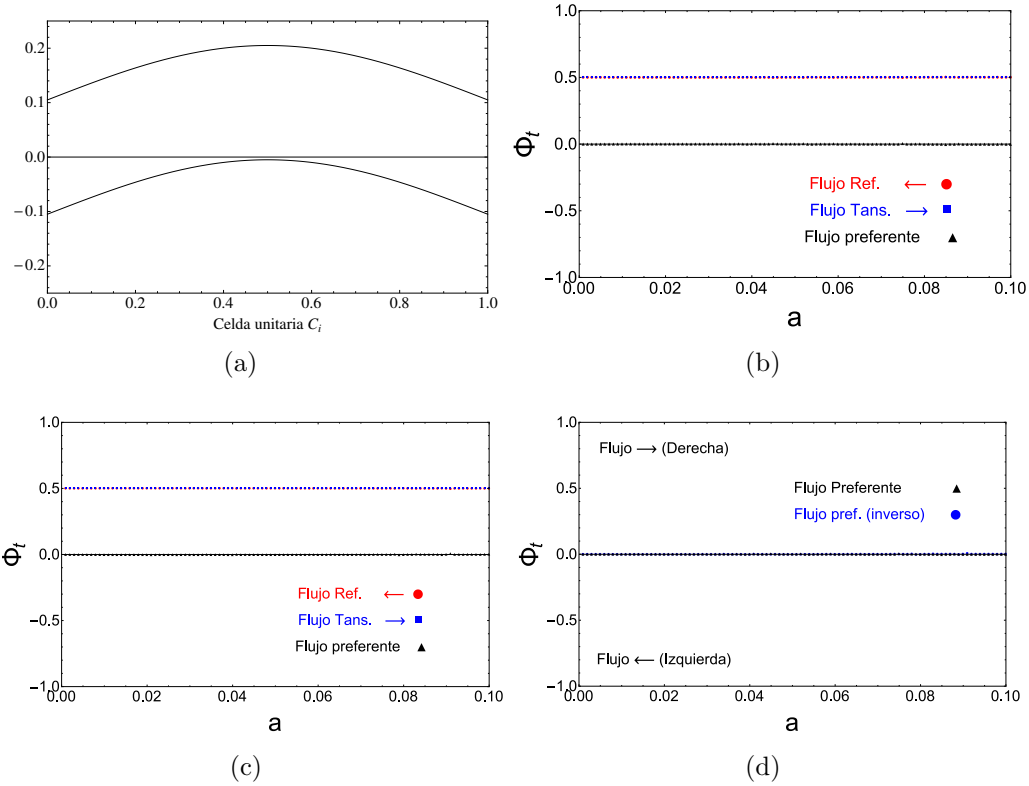


Figure 4.1: Flujo total de partículas como función de la amplitud en el intervalo $[0, 0.1]$, con $N = 9$. a) Celda unitaria con fase $w_1 = w_2 = 0$ y periodo $1/2$. b) Flujo de partículas para $T_1 = 10$ y $T_2 = 1$. c) Flujo de partículas (caso inverso) para $T_1 = 1$ y $T_2 = 10$. d) Flujos preferentes de b) y c), en dirección hacia la derecha para $y > 0$ y a la izquierda para $y < 0$.

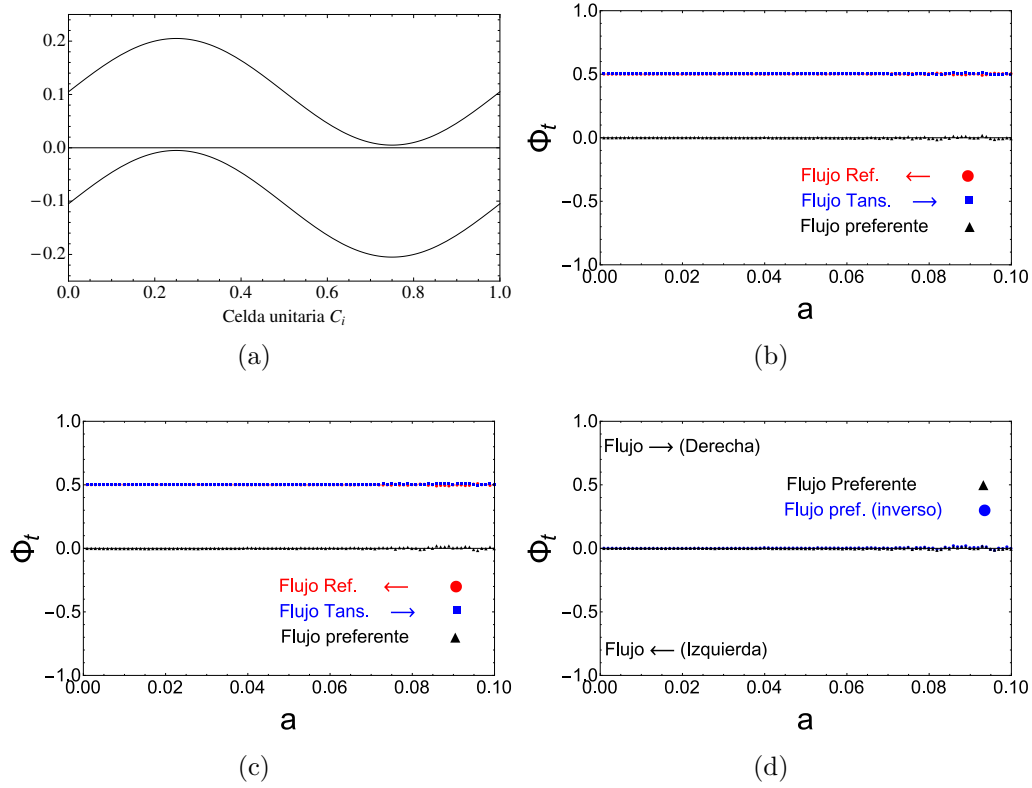


Figure 4.2: Flujo total de partículas como función de la amplitud en el intervalo $[0, 0.1]$, con $N = 10.5$. a) Celda unitaria con fase $w_1 = w_2 = 0$ y periodo 1. b) Flujo de partículas para $T_1 = 10$ y $T_2 = 1$. c) Flujo de partículas (caso inverso) para $T_1 = 1$ y $T_2 = 10$. d) Flujos preferentes de b) y c), en dirección derecha para $y > 0$ y a la izquierda para $y < 0$.

un desfase en el perfil superior de $w_1 = 1/2$. Consideramos para este caso un canal de longitud $N = 10$ convenientemente, con la finalidad de tener una geometría que favorezca una dirección preferente del flujo de partículas. Como podemos observar, el comportamiento del flujo en las Figs. 4.3(b) y 4.3(c) es similar a los esquemas anteriores. Notemos solamente unas pequeñas variaciones que representan, por mucho, alrededor del 5% del total de las partículas, y estas variaciones son más notorias en el intervalo de $[0.035, 0.075]$ para el caso inverso (Fig. 4.3(c)). Estas mismas variaciones se mantienen en la Fig. 4.3(d), pero no podemos decir que haya rectificación.

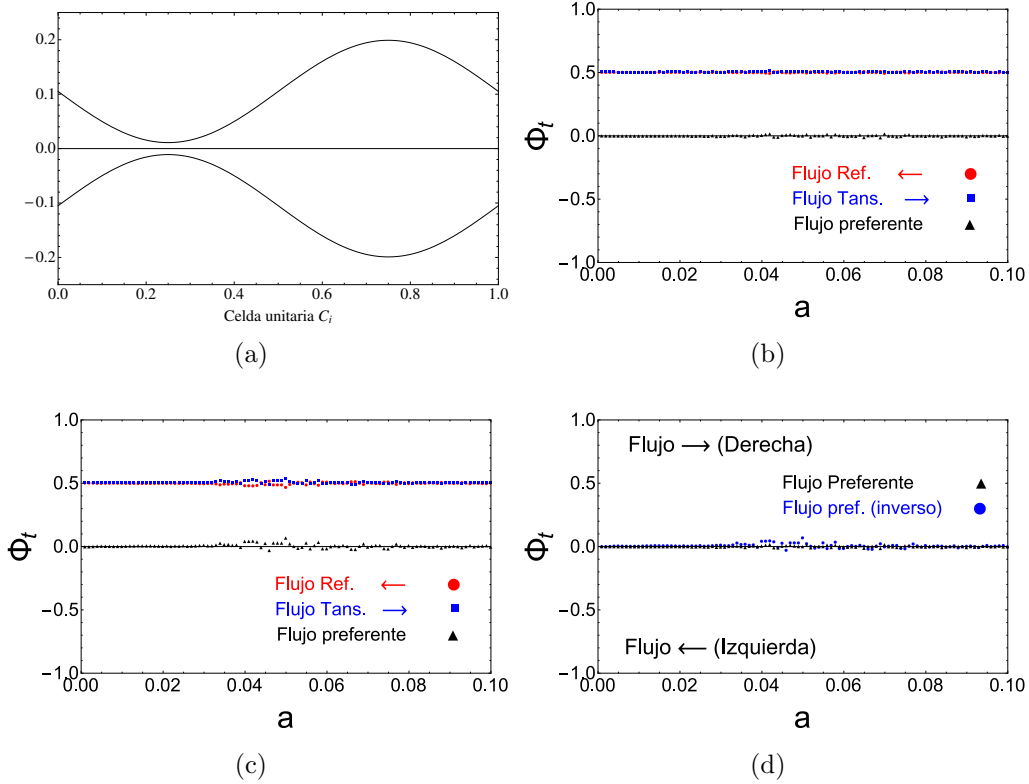


Figure 4.3: Flujo total de partículas como función de la amplitud en el intervalo $[0, 0.1]$, con $N = 10$. a) Celda unitaria con fase $w_1 = \frac{1}{2}$ y $w_2 = 0$ y periodo 1. b) Flujo de partículas para $T_1 = 10$ y $T_2 = 1$. c) Flujo de partículas (caso inverso) para $T_1 = 1$ y $T_2 = 10$. d) Flujos preferentes de b) y c), en dirección derecha para $y > 0$ y a la izquierda para $y < 0$.

La Fig. 4.4 nos muestra resultados más próximos a la rectificación. Primeramente, tenemos que el flujo reflejado es mayor que el transmitido y este flujo se mantiene incluso al invertir las temperaturas, ver Fig. 4.4(b) y 4.4(c). En la Fig. 4.4(d) vemos claramente que el flujo global de partículas tiende a una dirección preferente a medida que la amplitud aumenta. Para amplitudes menores a 0.01 no hay rectificación, pero al ir aumentando la amplitud tenemos una rectificación máxima del 36% del total de partículas. Este porcentaje sólo indica rectificación de partículas, pero no que sea un diodo.

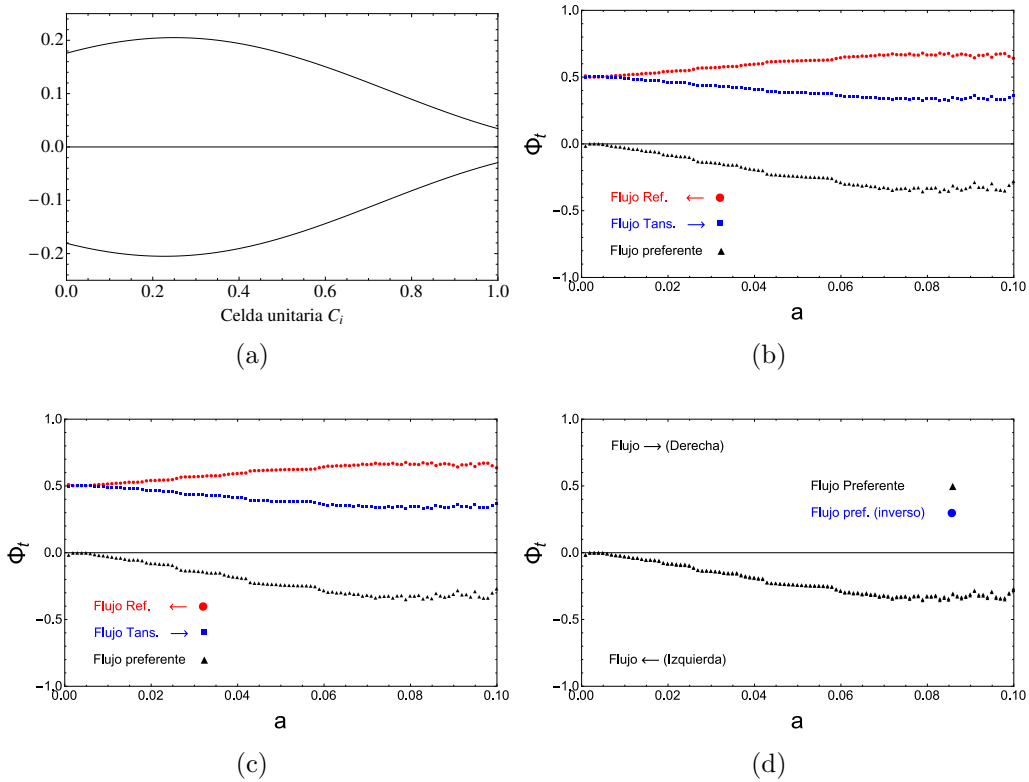


Figure 4.4: Flujo total de partículas como función de la amplitud en el intervalo $[0, 0.1]$, con $N = 11$. a) Celda unitaria con fase $w_1 = 0.25$, $w_2 = 4$ y periodo $1/2$. b) Flujo de partículas para $T_1 = 10$ y $T_2 = 1$. c) Flujo de partículas (caso inverso) para $T_1 = 1$ y $T_2 = 10$. d) Flujos preferentes de b) y c), en dirección hacia la derecha para $y > 0$ y a la izquierda para $y < 0$.

Cabe mencionar que no incluimos los gráficos de las partículas atrapadas dentro del canal en ningún caso. La cantidad de éstas, es prácticamente cero. Esto es de esperarse, pues la dinámica del espacio fase nos muestra cómo se reduce el número de órbitas libracionales hasta llegar a un estado de caos.

4.2. Flujo de calor para la amplitud

Para la obtención del flujo de calor, empleamos la definición dada por la Ec. (3.15). Consideramos como E_{out} a la energía inicial de cada partícula y E_{int} como la energía asociada a la colisión con un reservorio. El sentido del flujo de calor se establecerá siempre del reservorio con temperatura mayor al de temperatura menor. Consideraremos las geometrías para celdas unitarias del capítulo anterior. De igual manera, consideraremos dos casos: para $T_1 = 10$, $T_2 = 1$ y al invertir las temperaturas $T_1 = 1$, $T_2 = 10$. Si la diferencia de flujos para los casos anteriores es distinta de cero, esto implicará una rectificación térmica, pero no necesariamente implicará que este sistema sea un diodo térmico. Definimos que un diodo térmico permitirá el flujo de calor en un solo sentido.

En las Figs. 4.5(a) y 4.5(c) se muestra el flujo de calor (normalizado) como función de la amplitud, obtenido para las geometrías 4.1(a) y 4.2(a), respectivamente. La curva en círculos (negro) representa el flujo para el caso de temperaturas $T_1 = 10$ y $T_2 = 1$; mientras que la curva en cuadros (rojo) representa el caso en el que invertimos las temperaturas de los reservorios ($T_1 = 1$ y $T_2 = 10$). En ambos casos para el intervalo $[0, 0.02]$ superpusimos dos resultados obtenidos para diferentes particiones en el método de bisección. Tenemos que las curvas más cercanas al origen, corresponden a una partición de 4,500 partes. Las curvas situadas por encima, corresponden a una partición de 8,500 partes. Esto indica que, al hacer intervalos mucho más finos en el método de bisección, los valores para el flujo de calor incrementan. Esto da la impresión de que el flujo se estabilizará en el valor de uno, si realizamos cálculos mucho más finos en la bisección. Lamentablemente, el tiempo de cómputo incrementa exorbitantemente, hablamos de semanas o incluso meses en tiempo real de cómputo². En 4.5(c) vemos que el flujo de calor decae conforme la amplitud incrementa. Podríamos suponer que si re-

²El tiempo de cómputo más grande que realizamos fue de 405 horas, que equivale aproximadamente a 16 días. Empleando una computadora potente de 16 GB en RAM.

alizáramos una bisección el flujo se estabilizaría en uno, pero es una mera suposición. Por otro lado, ninguno de los dos casos presenta rectificación térmica. Al intercambiar las temperaturas de los reservorios, la magnitud de los flujos es la misma y por tanto, su diferencia es prácticamente cero (ver Fig. 4.5(b) y 4.5(d)).

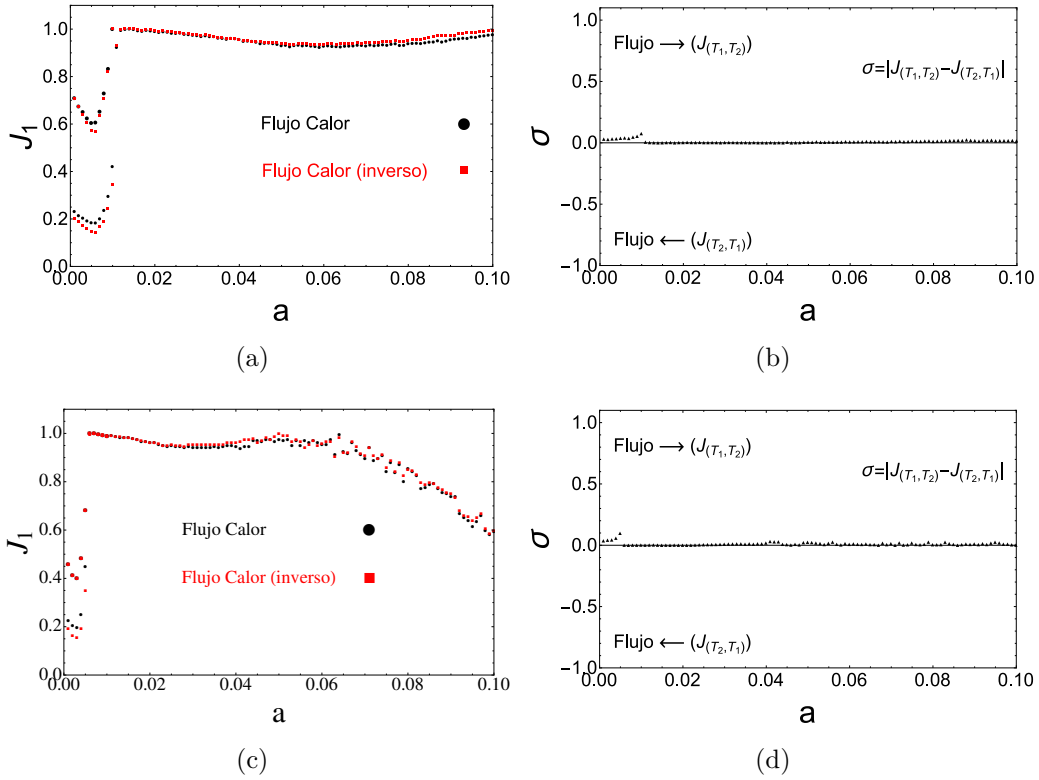


Figure 4.5: a) y c) Curva flujo de calor como función de la amplitud para un canal de longitud $N = 9$ y $N = 10.5$, respectivamente. Empleamos la curva en negro (círculos) para $T_1 = 10$ y $T_2 = 1$ y en rojo (cuadros) cuando invertimos las temperaturas ($T_1 = 1$ y $T_2 = 10$). b) y d) Muestran la magnitud del flujo rectificado. $\sigma > 0$ indica un flujo en dirección $T_1 \mapsto T_2$ y $\sigma < 0$ indica un flujo en dirección $T_2 \mapsto T_1$.

Uno de los resultados más importantes de este trabajo lo muestra la Fig. 4.6(b). Corresponde a un canal de longitud $N = 10$, cuyas celdas unitarias tienen la geometría de la Fig. 4.3(a). Mismo caso para el que obtuvimos las

secciones de Poincaré con fase $w_2 = 0$ y $w_1 = 0.5$. La gráfica corrobora una vez más que nuestros cálculos numéricos son correctos. Al emplear los mismos parámetros que en [9], obtuvimos resultados similares para el flujo de calor. Además de que la predicción teórica de la Ec. (3.21) obtenida para el flujo de calor también es confirmada. No abundaremos en explicación del comportamiento del flujo de calor, ya que en el trabajo [9] exponen una explicación detallada. Nos centraremos en nuestro objetivo, analizar las magnitudes del flujo de calor, que como podemos apreciar en la Fig. 4.6(b), para amplitudes alrededor de $[0, 0.015]$ hay un ligero flujo rectificado en la dirección $T_2 \mapsto T_1$, correspondiente a una rectificación $\sigma \approx 6\%$. Para amplitudes mayores a 0.015 el flujo rectificado tiende a cero.

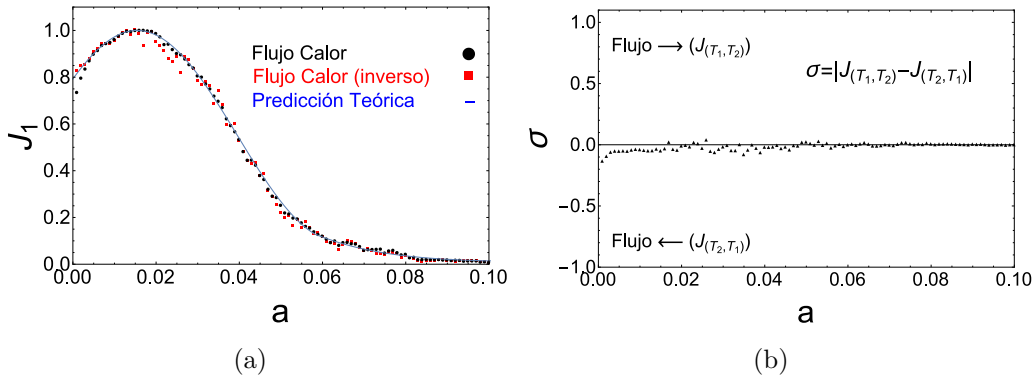


Figure 4.6: a) Flujo de calor como función de la amplitud para un canal de longitud $N = 10$. Empleamos la curva en negro (círculos) para $T_1 = 10$ y $T_2 = 1$ y en rojo (cuadros) cuando invertimos las temperaturas ($T_1 = 1$ y $T_2 = 10$). b) Muestran la magnitud del flujo rectificado. $\sigma > 0$ indica un flujo en dirección $T_1 \mapsto T_2$ y $\sigma < 0$ indica un flujo en dirección $T_2 \mapsto T_1$.

Ahora sólo nos resta un canal por analizar, el canal correspondiente a la geometría de la Fig. 4.4(a). Los flujos de calor para este caso, indican que el flujo decae a partir de amplitudes cercanas a 0.04, después de alcanzar su máximo en uno. Recordemos que es un flujo normalizado a la unidad. Para esta geometría tenemos rectificación térmica (ver Fig. 4.7(b)) muy pequeña, pero estable en casi todo el intervalo de amplitudes. La rectificación se mantiene constante en el intervalo $[0, 0.035]$ con $\sigma = 10\%$. Para valores

mayores a 0.035 la rectificación varía entre 9% y 10%. Es muy poca la rectificación que se presenta para esta geometría; sin embargo, es el caso para el que tenemos mayor rectificación. Hasta ahora, con las geometrías propuestas para el canal de billar no se ha presentado comportamiento de diodo térmico.

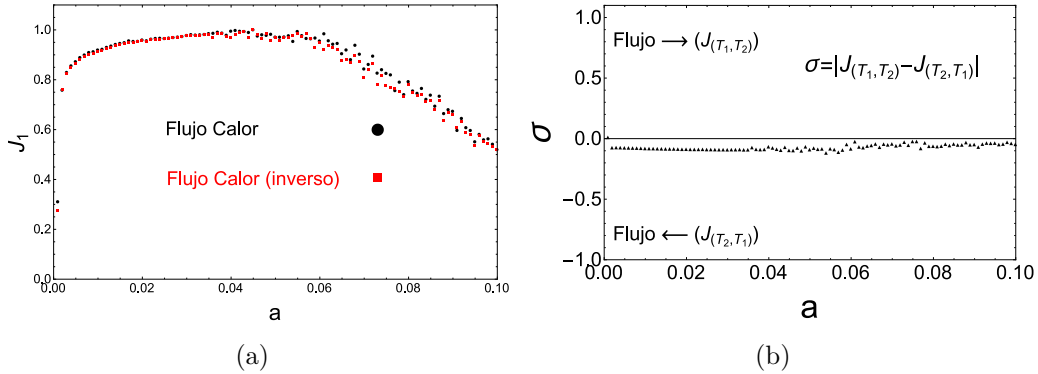


Figure 4.7: a) Flujo de calor como función de la amplitud para un canal de longitud $N = 11$. Empleamos la curva en negro (círculos) para $T_1 = 10$ y $T_2 = 1$ y en rojo (cuadros) cuando invertimos las temperaturas ($T_1 = 1$ y $T_2 = 10$). b) Muestran la magnitud del flujo rectificado. $\sigma > 0$ indica un flujo en dirección $T_1 \mapsto T_2$ y $\sigma < 0$ indica un flujo en dirección $T_2 \mapsto T_1$.

4.3. Flujo como función de la fase

En esta sección trataremos el flujo de partículas y flujo de calor como función de la fase, con el mismo formato que la sección 4.1. En los resultados obtenidos, consideramos la misma amplitud de onda a en ambos perfiles del canal ($a_1 = a_2$), para valores de $a = 0.001, 0.02, 0.04, 0.09$ fijamos la fase del perfil superior (en $w_1 = 0$) mientras que el perfil inferior tomaba valores para w_2 en el intervalo $[0, 1]$ que corresponde a un periodo completo. La diferencia de fase será entonces w_2 . Los demás parámetros del canal se mantienen: $b = 0.1$, $N = 9$, $T_1 = 10$, $T_2 = 1$, un periodo por celda unitaria y flujo bidireccional. De igual forma que en la sección anterior, calculamos los flujos correspondientes al invertir las temperaturas ($T_1 = 1$ y $T_2 = 10$) de los baños térmicos, nos referimos a esto como el caso inverso. Sólo presentamos

resultados numéricos, ya que no contamos con una predicción teórica para el flujo de calor como función de la fase.

4.3.1. Flujo de partículas

Considerar el cambio de fase, implica que en cada iteración que realicemos para la fase, la apertura de los extremos del canal cambiará. Hacer el cambio de fase en el intervalo $[0, 1]$, significa que la primera iteración corresponderá a perfiles con la misma fase (ver Fig. 4.2(a)), al llegar a $w_2 = 0.5$ (la mitad del intervalo) el canal tendrá la forma de la Fig. 4.2(a) y a partir de este valor medio, cada iteración llevará nuevamente a que los perfiles estén en fase (para $w_2 = 1$). Esto porque el intervalo $[0, 1]$ equivale a un periodo de 2π , así que esperamos cierta simetría en los resultados.

Para el caso de $a = 0.001$, el flujo de partículas exhibe un comportamiento simétrico con respecto a $w_2 = 0.5$, tanto para $T_1 = 10$ y $T_2 = 1$, como el inverso $T_1 = 1$ y $T_2 = 10$ (ver Figs 4.8(b) y 4.8(c)). Como podemos ver en la Fig. 4.8(d) tenemos rectificación de partículas. En el intervalo $[0.35, 0.7]$ se presenta una rectificación constante del 6%, en dirección del flujo reflejado. En los intervalos $[0, 0.15] \cup [0.82, 1]$ también tenemos una rectificación constante del 6% en dirección del flujo transmitido. La rectificación es casi despreciable, esto es de esperarse, ya que tenemos un perfil con una amplitud muy pequeña. Para estos casos la dinámica del espacio fase, exhibe una región libracional muy pequeña (pocas partículas con movimiento libracional), mientras que las órbitas rotacionales (partículas que cruzan el canal) se asemejan a la forma de los perfiles (ver Fig. 2.5(a) y 2.5(b)).

Para el caso de $a = 0.02$ y $a = 0.04$, el flujo de partículas presenta un comportamiento de tipo armónico. Únicamente con fines ilustrativos sobrepusimos una función armónica seno de diferente amplitud, en las gráficas de lo flujos preferentes. En la Fig. 4.9(d) para el intervalo $[0.14, 0.5]$ se muestra un incremento en la rectificación en dirección del flujo reflejado, que va desde 0% hasta un máximo del 22% y luego decrece hasta llegar a 0%. Lo anterior en relación a las secciones de Poincaré, corresponde a una transición del espacio fase 2.5(f) donde hay más órbitas libracionales que en $a = 0.001$, al espacio fase 2.5(e) donde las zonas caóticas se empiezan a conectar. En el intervalo $[0.5, 1]$ se invierte la dirección del flujo rectificado (ahora en dirección del flujo transmitido), inicia en 0% hasta un máximo de 22% y decrece hasta un 10%. Por la forma de la rectificación en $[0, 0.14]$, intuimos que seguirá

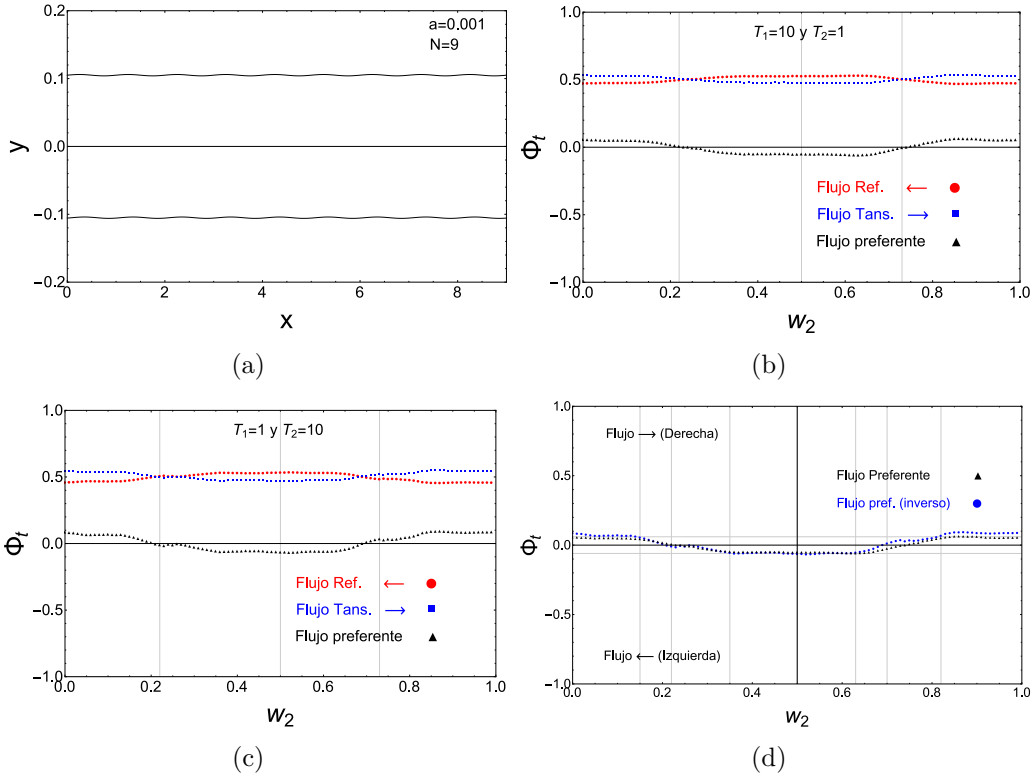


Figure 4.8: a) Canal de amplitud $a = 0.001$, $w_1 = 0$ y de longitud $N = 9$. b) y c) Flujo de partículas en función de w_2 . d) Rectificación de partículas.

decreciendo la rectificación hasta llegar a 0%, suponiendo que el intervalo $[0, 0.14]$ describa la continuación de la curva después de $w_2 = 1$.

En la Fig. 4.10(d) para el intervalo $[0.05, 0.5]$ se muestra un incremento en la rectificación en dirección del flujo reflejado, desde cero hasta un máximo del 60% en $w_2 = 0.27$, después decrece hasta llegar a cero nuevamente. Lo anterior corresponde a la transición del espacio fase 2.6(b) al espacio fase 2.6(a), donde tenemos ya un comportamiento caótico fuerte. En el intervalo $[0.5, 1]$ se invierte la dirección del flujo rectificado (ahora en dirección del flujo transmitido), desde cero hasta un máximo del 47% en $w_2 = 0.87$ y decrece hasta llegar a un 15%. Cabe mencionar que los flujos de partículas no presentan cambios cuando invertimos las temperaturas de los baños térmicos (ver Fig. 4.9(b), 4.9(c), 4.10(b), 4.10(c)).

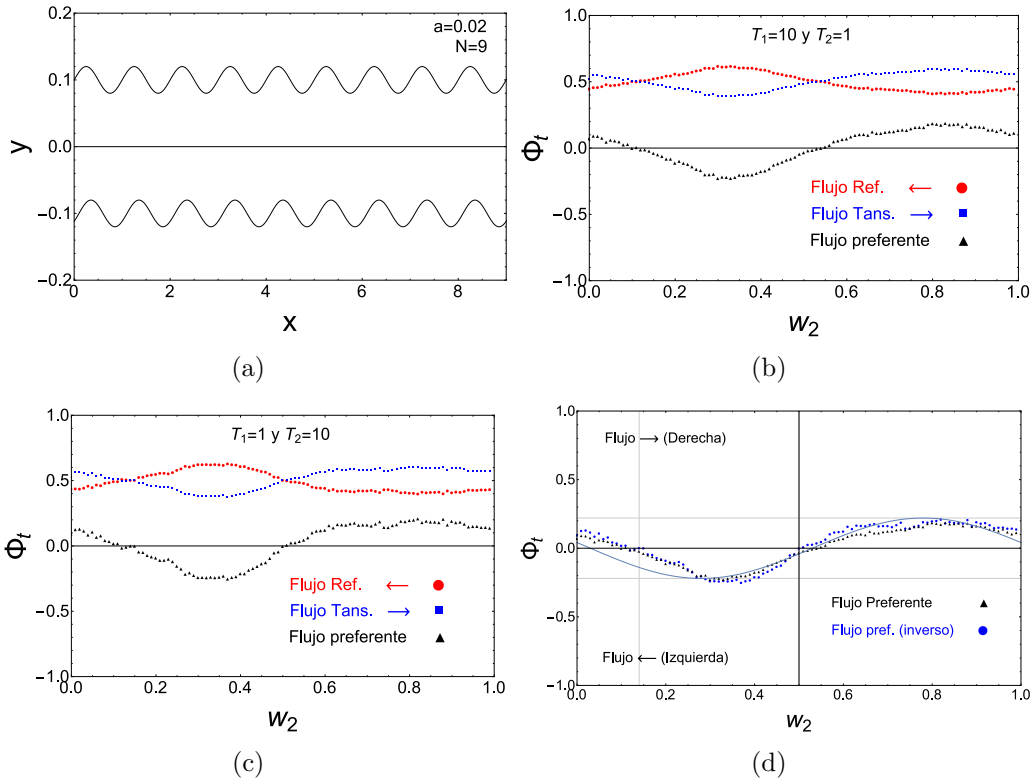


Figure 4.9: a) Canal de amplitud $a = 0.02$, $w_1 = 0$ y de longitud $N = 9$. b) y c) Flujo de partículas en función de w_2 . d) Rectificación de partículas.

Para el caso de $a = 0.09$, el flujo de partículas no cambia al invertir las temperaturas de los baños térmicos (ver Fig. 4.11(b) y 4.11(c)). Se presenta una rectificación en el flujo de partículas muy oscilante, como se aprecia en la Fig. 4.11(d), con un máximo de rectificación de 18%, tanto en dirección del flujo reflejado (en $w_2 = 0.37$), como en la dirección del flujo transmitido (en $w_2 = 0.62$). Valdría la pena obtener las secciones de Poincaré para los valores de w_2 en que se presenta la mayor rectificación, a fin de comprender cómo se lleva la rectificación de partículas.

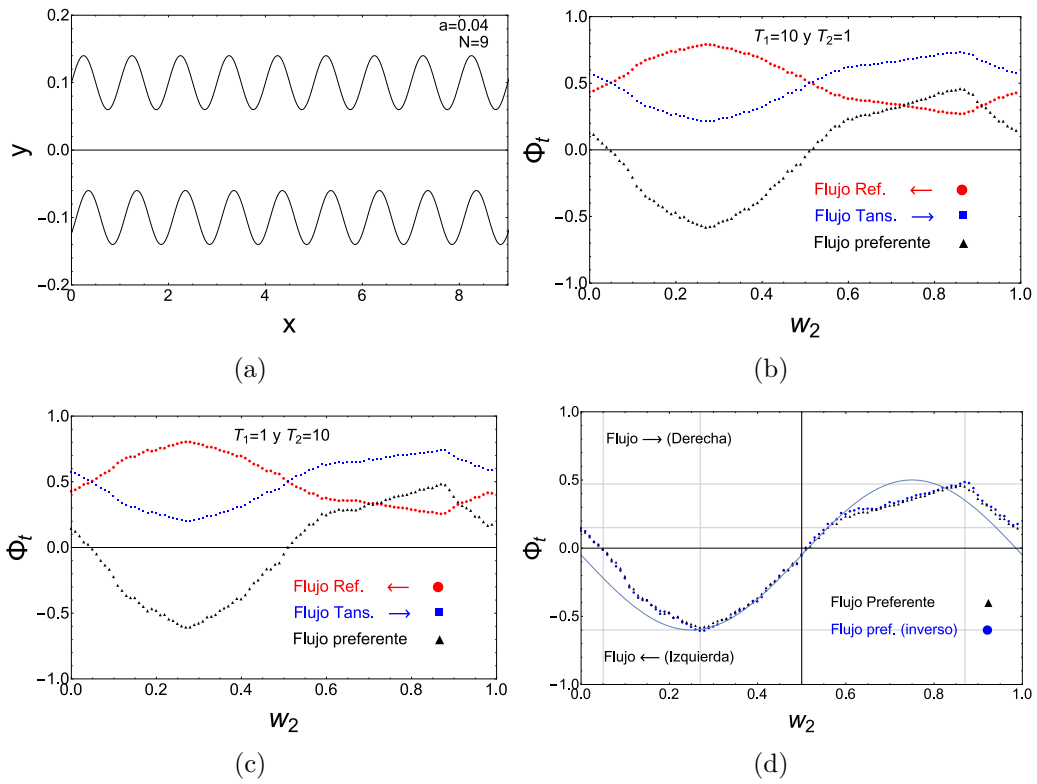


Figure 4.10: a) Canal de amplitud $a = 0.04$, $w_1 = 0$ y de longitud $N = 9$. b) y c) Flujo de partículas en función de w_2 . d) Rectificación de partículas.

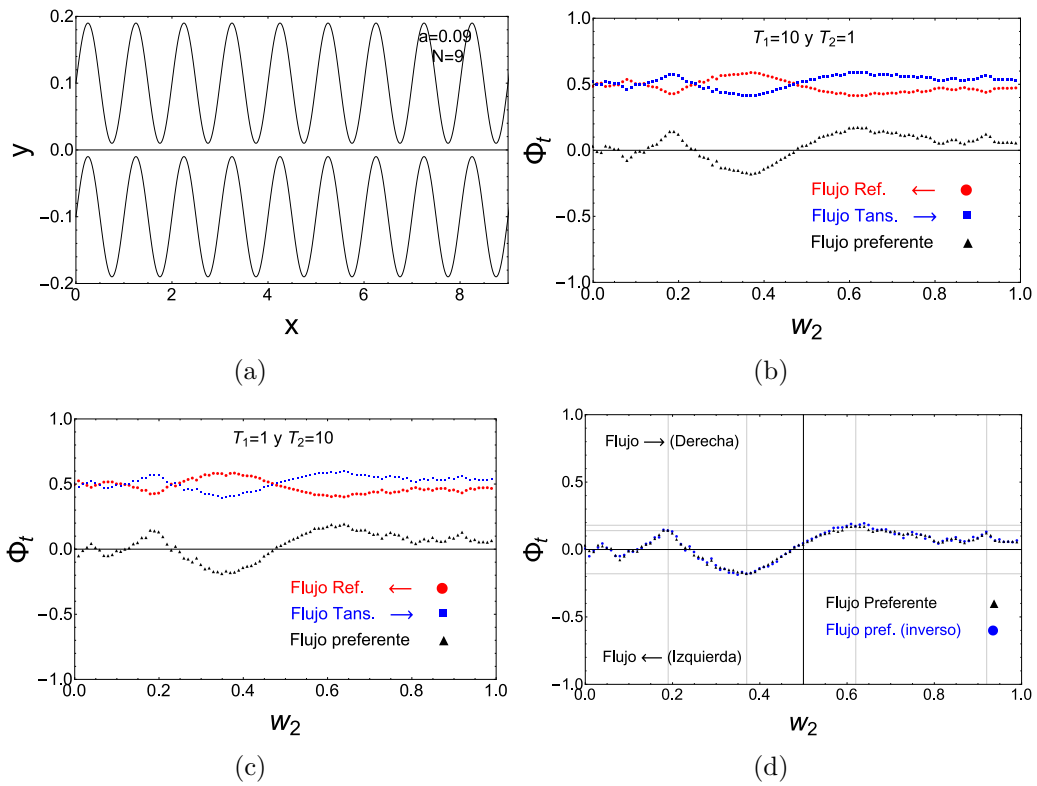


Figure 4.11: a) Canal de amplitud $a = 0.09$, $w_1 = 0$ y de longitud $N = 9$. b) y c) Flujo de partículas en función de w_2 . d) Rectificación de partículas.

4.3.2. Flujo de calor

Realizamos las simulaciones numéricas teniendo las mismas consideraciones que en la sección 4.2, pero ahora para el flujo de calor como función de la fase. No contamos con una predicción teórica y sólo mostraremos los resultados numéricos.

En la Fig. 4.12(a) los flujos de calor son ligeramente diferentes, en magnitud es mayor el flujo en dirección positiva ($T_1 \mapsto T_2$). Se observan cambios abruptos a lo largo de las curvas, en $w_2 = 0.25$ y $w_2 = 0.75$. El flujo de calor nunca es cero, el menor flujo de calor corresponde a la mitad del flujo total. Esto es de esperarse porque este caso corresponde a un canal para una amplitud muy pequeña. Por otro lado, se presenta una rectificación térmica muy pequeña $\sigma \approx 10\%$ en el intervalo $[0, 0.3]$ y $\sigma \approx 7\%$ en el intervalo $[0.87, 1]$ (ver Fig. 4.12(b)).

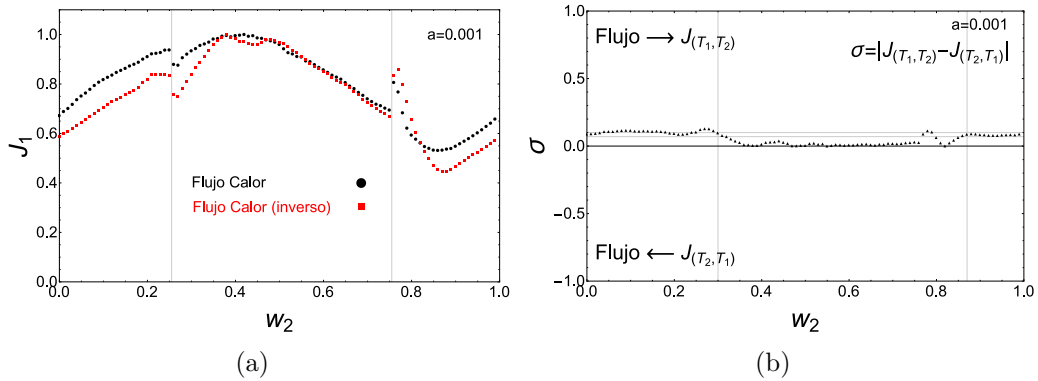


Figure 4.12: a) Flujo de calor como función de la fase w_2 para un canal de longitud $N = 9$, con $a = 0.001$ y $w_1 = 0$. Empleamos la curva en negro (círculos) para $T_1 = 10$ y $T_2 = 1$ y en rojo (cuadros) cuando invertimos las temperaturas ($T_1 = 1$ y $T_2 = 10$) y b) magnitud del flujo rectificado. $\sigma > 0$ indica un flujo en dirección $T_1 \mapsto T_2$ y $\sigma < 0$ indica un flujo en dirección $T_2 \mapsto T_1$.

Los flujos de calor para $a = 0.02$ y $a = 0.04$ mostrados en 4.13(a) y 4.13(c), muestran que el flujo de calor nunca es cero y ambas se comportan de forma armónica. Comparando las gráficas, la de mayor amplitud ($a = 0.04$) exhibe un flujo de calor más bajo. Esto es de esperarse, pues entre más

grande es la amplitud de los perfiles, hay una mayor obstrucción al tránsito libre entre los extremos del canal. En la Fig. 4.13(a) el flujo de calor oscila entre $[0.34, 1]$, siendo el mínimo y máximo valor que toma J_1 . En la Fig. 4.13(c) el flujo de calor oscila entre $[0.125, 1]$, siendo igualmente el valor mínimo y máximo que toma el flujo de calor. En ninguno de estos casos se presenta rectificación térmica, al menos no una considerable (ver Figs. 4.13(b) y 4.13(d)). Esto indica que $|J_{(T_1, T_2)}| \approx |J_{(T_2, T_1)}|$.

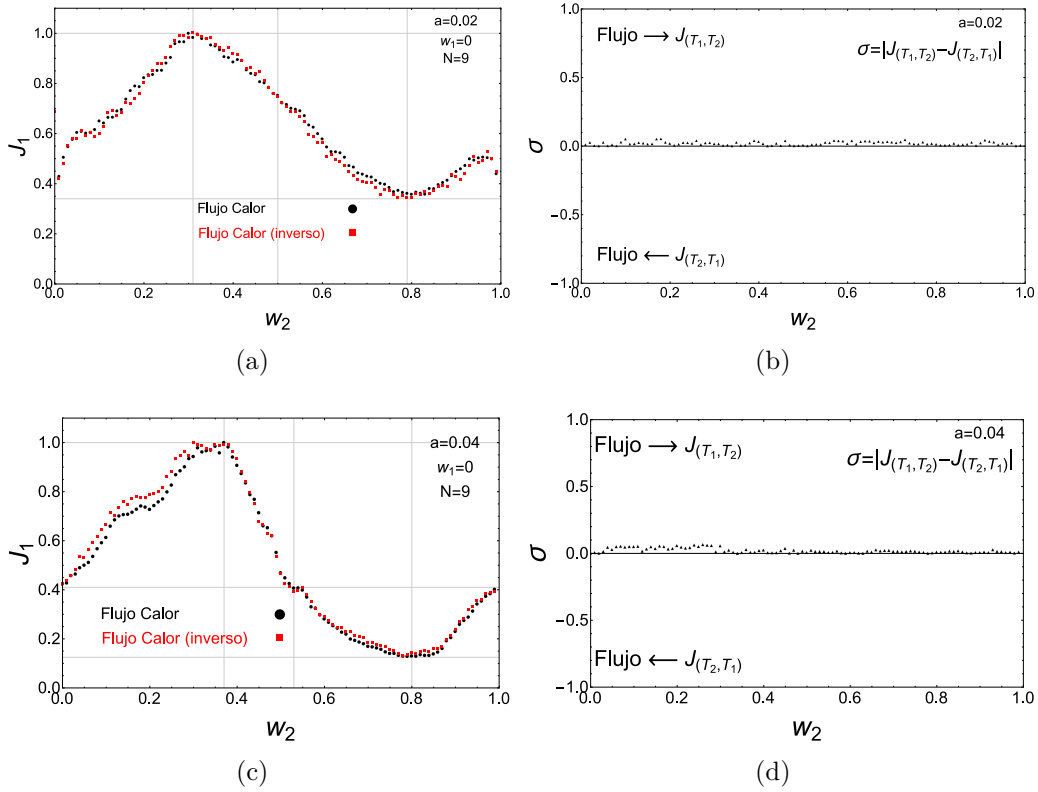


Figure 4.13: a) y c) Flujo de calor como función de la fase w_2 con $a = 0.02$ y $a = 0.04$ respectivamente. Empleamos la curva en negro (círculos) para $T_1 = 10$ y $T_2 = 1$ y en rojo (cuadros) cuando invertimos las temperaturas ($T_1 = 1$ y $T_2 = 10$). b) y d) Muestran la magnitud del flujo rectificado para amplitudes $a = 0.02$ y $a = 0.04$ respectivamente. $\sigma > 0$ indica un flujo en dirección $T_1 \mapsto T_2$ y $\sigma < 0$ indica un flujo en dirección $T_2 \mapsto T_1$.

Para el caso de la amplitud $a = 0.09$, obtuvimos los esquemas de la Fig.

4.14. El flujo de calor tiene una forma muy irregular. Como es de esperarse, el flujo varía entre $[0.074, 1]$ y alcanza estos valores (mínimo y máximo) en $w_2 = 0.4$ y $w_2 = 0.62$, respectivamente (ver Fig. 4.14(a)). Para este caso no se presenta rectificación térmica alguna, como se muestra en la Fig. 4.14(b).

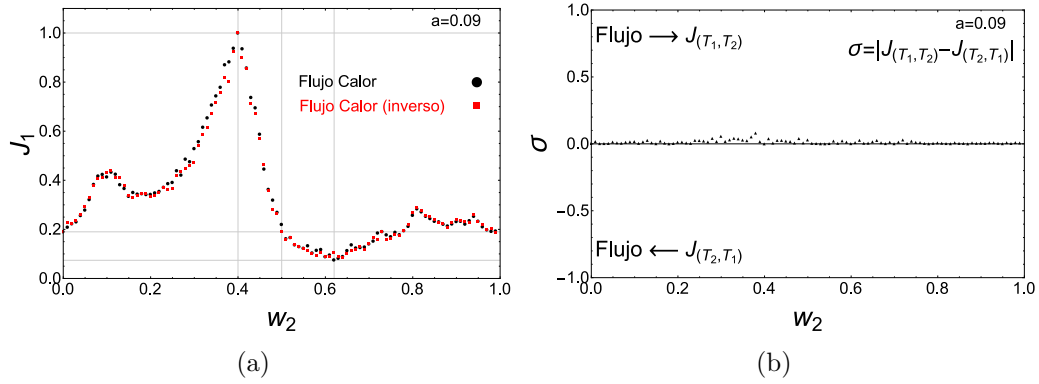


Figure 4.14: a) Flujo de calor como función de la fase w_2 para un canal de longitud $N = 9$, con $a = 0.09$ y $w_1 = 0$. Empleamos la curva en negro (círculos) para $T_1 = 10$ y $T_2 = 1$ y en rojo (cuadros) cuando invertimos las temperaturas ($T_1 = 1$ y $T_2 = 10$) y b) muestra la magnitud del flujo rectificado. $\sigma > 0$ indica un flujo en dirección $T_1 \mapsto T_2$ y $\sigma < 0$ indica un flujo en dirección $T_2 \mapsto T_1$.

Chapter 5

Conclusiones

Hemos estudiado la dinámica de las partículas dentro de un canal bidimensional con perfiles sinusoidales, así como sus propiedades de transporte, particularmente el flujo de partículas y el flujo de calor. Se consideró un canal infinito para obtener la dinámica del espacio fase. De las secciones de Poincaré obtenidas, encontramos que hay una transición de una dinámica regular a una dinámica caótica mixta a medida que la amplitud aumenta; la fase se encarga de que el proceso de rompimiento de las curvas KAM sea más rápido o lento mientras crece la amplitud. Observamos que para pequeñas amplitudes, las secciones de Poincaré se asemejan a las de un péndulo simple. Obtuvimos los ángulos críticos para los cuales, las partículas realizan el mayor movimiento libracional.

En el análisis de las propiedades de transporte se consideró un canal infinito. Se realizaron cálculos numéricos para describir el flujo de partículas y el flujo de calor, primero como función de la amplitud y después como función de la fase. Encontramos que el flujo de partículas y el flujo de calor, como función de la amplitud sólo presentan rectificación para el caso del canal con perfiles $w_1 = 0.25$ y $w_2 = 4$. En tal caso, el flujo rectificado aumenta con la amplitud, desde cero hasta un 36% en la dirección $T_R \mapsto T_L$ (del reservorio derecho al izquierdo) y la rectificación térmica para el flujo de calor es de $\sigma \approx 10\%$. Para el flujo de partículas como función de la fase, encontramos rectificación en todos los casos ($a = 0.09$, $a = 0.02$, $a = 0.04$ y $a = 0.09$), pero esta no toma un valor constante, oscila entre cero y un valor máximo distinto para cada amplitud del canal. Para el caso de $a = 0.04$, se obtuvo el valor más grande de rectificación que es del 60% para $w_2 = 0.27$ en la di-

rección $T_R \mapsto T_L$ y de 47% para $w_2 = 0.87$ en la dirección $T_L \mapsto T_R$. Para el flujo de calor como función de la fase no se encontró rectificación térmica considerable. Sería interesante como trabajo a futuro, analizar más a detalle las regiones de mayor rectificación, para determinar si es posible mejorar la rectificación.

Algo importante de mencionar es que, el tiempo de cómputo requerido para los cálculos es muy grande. Esto representa una limitante para hacer un análisis más minucioso. Por ejemplo, considerar más casos para las amplitudes, o más geometrías del canal. Después de analizar todos los resultados numéricos, concluimos que este canal no presenta comportamiento de diodo térmico, pero sí muestra rectificación, principalmente rectificación en el flujo de partículas. Más específicamente, este sistema no indica ser un buen rectificador térmico, pues a lo más que obtuvimos fue una rectificación térmica $\sigma \approx 10\%$. Considero que es necesario explorar otras geométricas para el canal, en busca de la rectificación térmica.

Bibliography

- [1] H. Park, J. Park, A. K. Lim, E. H. Anderson, A. P. Alivisatos and P. L. McEuen, *Nature*, Vol. **407**, 57 (2000).
- [2] J. Diggins, J. F. Ralph, T. P. Spiller, T. D. Clark, H. Prance and R. J. Prance, *Phys. Rev. E* **48**, 1854 (1994).
- [3] V. Doya, O. Legrand. and F. Mortessagne, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 014102 (2001).
- [4] A. Mendoza-Suárez, H. Pérez-Aguilar and F. Villa-Villa, *Prog. Electromagn. Res.* **121**, 433 (2011).
- [5] M. Horvat and T. Prosen, *J. Phys. A: Math. Gen.* **37**,3133 (2004).
- [6] David Ruelle, *Causalidad y Caos*, Dir. Gen. Div. Csc., UNAM, pp. 60-65 (2003).
- [7] S. A. Triana, D. Campos, *Rev. Acad. Colomb. Cienc.* **23(86)**:61-71. 1999 ISSN 0370-3908.
- [8] P. Gaspard, *Scattering and Statistical Mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
- [9] I. F. Herrera-Gonzales, H. Pérez Aguilar, A. Mendoza-Suarez and E. S. Tututi, *Phy. Rev. E.* **86**, 031138 (2012).
- [10] F. Barra and T. Gilbert, *J. Stat. Mech.* **7**, L01003 (2007).
- [11] P. M. Bleher, *J. Stat. Phys.* **66**, 315 (1992).
- [12] I. F. Herrera-Gonzales, G. Arroyo-Correa, A. Mendoza-Suarez and E. S. Tututi, *International Journal of Modern Physics B*, Vol. **25**, No. 5 (2011) 683-689.

- [13] A. N. Kolmogorov, *Preservation of conditionally periodic movements with small change in the Hamilton function*, Dokl. Akad. Nauk USSR98, **527**(1954).
- [14] A. M. Ozorio de Almeida, *Hamiltonian systems: chaos and quantization*, Cambridge Universiti Press, Cambridge, (1988).
- [15] Emmanuel Pereira, Phys. Rev. E **82**, 040101(R) (2010)
- [16] Jiuliang Liu and Jizhou He, Phys. Rev. E **82**, 022101 (2010)
- [17] Giulio Casati, Carlos Mejia-Monasterio and Tomaz Prosen, Phys. Rev. Lett. **98**, 104302 (2007)
- [18] J. P. Eckmann, C. M. Monasterio, Phys. Rev. Lett. **97** (PRL), 094301 (2006)
- [19] B. Hu, L. Yang and Y. Zhang, Phys. Rev. Lett. **97**, 124302 (2006)
- [20] Teruhisa S.Komatsu and Nobuyasu Ito, Phys. Rev. E. **81**, 010103(R) (2010)
- [21] J. Wang, E. Pereira and G. Cassati, Phys. Rev. E. **86**, 010101(R) (2012)
- [22] N. Chernov and H. K. Zhang, Regular and chaotic dynamics, Vol. **12**, 335 (2007).
- [23] I. F. Herrera-Gonzales, " *Caos clásico y cuántico en túneles bidimensionales con rugosidades*", tesis Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo (2004).
- [24] J. V. E. J. Saletan, *Clasical Dynamics*, Cambridge University Press 2002.
- [25] C. Starr, J. Appl. Phys. **7**, 15 (1936)
- [26] T. R. Thomas and S. D. Probert, Int. J. Heat Mass Transf. **12**, 789 (1970)
- [27] D. Alonso, R. Artuso, G. Casati, and I. Guarneri, Phys. Rev. Lett. **82**, No.9 (1999)
- [28] Ya. G. Sinai, *Dynamical Systems with elastic refectons. Ergodiic properties of dispersing billiards*, Russ. Math. Surv. **25** (1970), 137-189.