

COMPITI E SUDDIVISIONE FONDI TRA LE UNITÀ DI RICERCA
prot. 2005027808

Coordinatore Scientifico	Vittorio LORETO
Ateneo	Università degli Studi di ROMA "La Sapienza"
Titolo della Ricerca	Meccanica statistica dei sistemi complessi
Finanziamento assegnato	Euro 302.000
Durata	24 Mesi

Obiettivo della Ricerca

L'obiettivo del progetto è lo studio delle proprietà collettive presenti nei sistemi complessi e con molti di gradi di libertà. Le caratteristiche principali di tali sistemi, che hanno una rilevanza anche applicativa, sono le forti correlazioni spazio-temporali e le fluttuazioni non gaussiane. Quindi non è quasi mai possibile usare tecniche standard di meccanica statistica (come approssimazioni di campo medio e sviluppi in serie ad alte temperature) o approssimazioni che hanno come base di partenza sistemi lineari gaussiani. Tipici esempi sono rappresentati dai sistemi caratterizzati da invarianza di scala, caos e fenomeni d'intermittenza che appartengono ad un'area di ricerca che è parte della meccanica statistica "non-convenzionale", quella relativa allo studio di sistemi fuori dall'equilibrio e, più in generale, dei sistemi non Hamiltoniani. Nell'ambito di quest'area molto vasta di problemi, ci occuperemo in particolare dei seguenti temi.

a) TURBOLENZA e TRASPORTO (Unità 2,4,5)

L'obiettivo principale è la caratterizzazione delle proprietà statistiche del trasporto turbolento di traccianti attivi complessi. Nel caso delle soluzioni polimeriche, indagheremo in dettaglio la fenomenologia della turbolenza elastica, regime turbolento che è stato osservato solo di recente. Il nostro obiettivo è lo studio, mai effettuato in precedenza, della fenomenologia della turbolenza elastica descritta per mezzo di simulazioni numeriche dirette di semplici modelli viscoelastici. Ci aspettiamo che la fenomenologia della turbolenza elastica (che emerge ad alti numeri di Deborah e bassi numeri di Reynolds) sia intimamente legata alla nascita di instabilità puramente elastiche che avvengono per moderati valori del numero di Deborah. Indagheremo tale possibilità sia attraverso metodi perturbativi di tipo multiscala sia per mezzo della risoluzione numerica del problema di Orr-Sommerfeld associato all'analisi di stabilità lineare. Tale indagine fornirà la base teorica per la comprensione dei meccanismi alla base della turbolenza elastica. Ancora nell'ambito dei traccianti attivi complessi focalizzeremo la nostra attenzione sulla dinamica di particelle inerziali utilizzando sia metodi perturbativi di tipo asintotico che simulazioni numeriche dirette. L'obiettivo principale di tale ricerca è lo studio dell'effetto della turbolenza sulla velocità terminale di caduta delle particelle inerziali, problema su cui, ad oggi, non esistono risultati esatti (cioè ai principi primi) ma sono disponibili argomenti di sola natura euristica.

Per quanto riguarda il problema dei fluidi bi-fasici, intendiamo proporre un modello a due fluidi per la descrizione del trasporto di un gas in un liquido (per esempio aria in acqua). Il vantaggio della descrizione campista rispetto a quella in termini di singole bolle (descrizione Lagrangiana) sta nella possibilità di considerare in modo semplice la controreazione delle bolle sul fluido. Il modello sarà validato attraverso il confronto con il modello Lagrangiano in condizioni geometriche semplici.

Un altro problema che intendiamo indagare è la turbolenza generata da instabilità di tipo Rayleigh-Taylor. Stiamo al momento lavorando sul problema miscibile di due fluidi di diversa densità ed intendiamo generalizzare l'analisi al caso di due fluidi immiscibili. Per concludere, indagheremo (sia analiticamente che per mezzo di simulazioni numeriche) il trasporto in regime pre asintotico di scalari passivi dove il modello classico di tipo "eddy diffusivity/viscosity" fallisce a causa della mancanza di separazione di scala tra campo di velocità e campo scalare trasportato.

b) CAOS, COMPLESSITÀ e INFORMAZIONE (Unità 1,2,4)

Gli obiettivi in questo ambito possono essere riassunti come segue.

I. Studio del fenomeno dello "pseudocaos" (comportamento irregolare in sistemi con esponente di Lyapunov nullo), in particolare nel problema dei generatori di numeri pseudo casuali.

II. Rilevanza del caos e del coarse-graining per l'irreversibilità.

III. Analisi con tecniche multiscala e caratterizzazione del comportamento lento di sistemi di catene con masse molto diverse.

IV. Studio dei meccanismi di interazione proteina-proteina e proteina-peptide mediante simulazioni con modelli semplificati di biomolecole.

V. Estrazione di informazioni rilevanti

VI. Comunicazione e auto-organizzazione in sistemi biologici, tecnologici e sociali

c) **MATERIALI GRANULARI e DISORDINATI** (Unità' 1,2,3)

c.1. **Materiali granulari**

i) *Mezzi granulari densi: confronto quantitativo tra risultati teorici e sperimentali nell'ottica di una descrizione termodinamica di tali sistemi.*

ii) *Gas granulari: verifica della validità della relazione di Kubo (Teorema di Fluttuazione-Dissipazione) nelle diverse situazioni fuori dall'equilibrio in cui un gas granulare può trovarsi (diversi meccanismi di iniezione di energia, miscele binarie, ecc.)*

iii) *Attività sperimentale: raccolta di risultati sperimentali e loro confronto con i risultati teorico-numeriche. Considereremo in particolare le esperienze condotte dal Prof. D'Anna all'EPFL a Losanna e il nuovo dispositivo sperimentale montato presso l'ISC-CNR per la misura delle proprietà di attrito di mezzi granulari sottoposti a sforzi di taglio.*

c.2. **Isteresi nei ferromagneti disordinati**

L'isteresi e il rumore nei materiali ferromagnetici disordinati rappresenta un importante problema teorico con dirette applicazioni tecnologiche. Il nostro obiettivo principale sarà di ottenere una descrizione teorica di queste proprietà nei film sottili magnetici. In particolare, descriveremo l'effetto del disordine nell'isteresi dinamica: la dipendenza dalla frequenza dell'energia dissipata nel ciclo. In seguito, discuteremo il ruolo delle interazioni dipolari nelle proprietà di rumore dei film analizzando il caso delle pareti cariche e dei film con anisotropia perpendicolare.

c.3 **Crescita di superfici**

Riguardo alla crescita di superfici, l'obiettivo del programma di ricerca è lo studio della destabilizzazione della crescita epitassiale di tipo step-flow di superfici vicinali. Lo scopo di questo tipo di crescita è la deposizione di film cristallini sottili, in cui la superficie rimanga piatta all'aumentare dello spessore. Varie sorgenti di rumore e l'esistenza di una barriera addizionale per la diffusione degli atomi tra un layer e l'altro (barriera di Ehrlich-Schwoebel) generano meccanismi di instabilità che portano alla formazione di ondulazioni e rugosità nel sistema. L'obiettivo è collegare i meccanismi microscopici ai comportamenti a grande scala del sistema.

d) **NETWORKS** (Unità' 1)

d.1 *Il nostro primo obiettivo è lo studio delle caratteristiche strutturali delle reti, con particolare attenzione alla decomposizione in comunità di reti di grandi dimensioni. I risultati potranno essere applicati in diversi ambiti di ricerca, non sempre riconducibili alla fisica statistica: in particolare, ci concentreremo su linguistica e finanza, in cui le comunità sono rispettivamente insiemi di parole collegate da regole semantiche o sintattiche e agenti economici.*

d.2 *Un altro obiettivo è l'analisi teorica ed empirica delle correlazioni tra le connettività di nodi vicini, sia in modelli teorici che in reti reali. In tal modo, otterremo una comprensione, seppur parziale, dell'origine dei diversi "mixing pattern" che si osservano in reti di diversa natura: nelle reti sociali, nodi con caratteristiche comuni tendono a connettersi tra loro (assortatività), mentre un comportamento opposto (disassortativo) si osserva nelle reti tecnologiche.*

d.3 *In ultimo, intendiamo comprendere come la dinamica che genera una rete si rifletta sulle proprietà di correlazione citate in precedenza. Ciò consentirà di applicare i risultati ottenuti nello studio delle proprietà di correlazione (punto 2) al problema del "data mining" e alla progettazione di motori di ricerca.*

Innovazione rispetto allo stato dell'arte nel campo

1 TURBOLENZA e TRASPORTO

Studio di sistemi con turbolenza elastica (soluzioni con polimeri e drag reduction).

Caratterizzazione del trasporto passivo di particelle inerziali in campi turbolenti e sviluppo di modelli conseguenti.

Propagazione di fronti reattivi e decomposizione spinodale in miscele trasportate da campi di velocità turbolenti e laminari.

2 CAOS, COMPLESSITÀ e INFORMAZIONE

Ruolo del caos (e pseudocaos) e del processo di "coarse-graining" nei fenomeni di trasporto e per la meccanica statistica di non equilibrio.

Studio delle relazioni fluttuazione/risposta (fluttuazione/dissipazione) in sistemi con struttura multiscale; contributo delle grandi deviazioni (e termini "di bordo") per la relazione di Gallavotti-Cohen.

Tecniche multiscale (e.g. media condizionata) per la meccanica statistica di sistemi con diversi tempi caratteristici: applicazione alla proteine.

Definizione di nuove metodologie e nuovi algoritmi per la misura (o più precisamente la stima) della complessità (ossia del

contenuto di informazione) di stringhe di caratteri. Applicazioni al problema dell'estrazione di informazione in linguistica e genomica.

Studio di come forme di comunicazione emergono in popolazioni di agenti. Identificazione degli elementi chiave perché possa evolvere ed auto-organizzarsi una forma di comunicazione in una popolazione di agenti. Ci si propone di identificare e studiare modelli minimali (ossia le procedure algoritmiche) che possano portare a sistemi efficienti di comunicazione.

3 MATERIALI GRANULARI e DISORDINATI

Studio delle proprietà di risposta in mezzi granulari densi. In questo ambito si è interessati in particolare alla definizione di opportuni "ensemble" statistici che permettano di descrivere la fenomenologia dei materiali granulari e più in generale dei sistemi vetrosi.

Studio delle proprietà di risposta nei cosiddetti "Gas Granulari" sia nel caso monodisperso sia nel caso delle miscele binarie. In particolare si è interessati della validità della relazione di Kubo (ossia del teorema di Fluttuazione-Dissipazione) in una situazione in cui il gas è tenuto in uno stato di non equilibrio stazionario caratterizzato da correlazioni frattali di densità e distribuzioni di velocità non gaussiane.

Attività di tipo sperimentale condotta sia presso l'ISC-CNR (sotto la direzione del Dr. A. Petri) sia in collaborazione con il Prof. D'Anna del politecnico di Losanna). L'esperimento in corso all'ISC-CNR mira alla comprensione dei fenomeni di attrito in un mezzo granulare sottoposto a sforzi di taglio. L'attività sperimentale condotta in collaborazione con il politecnico di Losanna sarà concentrata sulla dipendenza della temperatura di un mezzo granulare, misurata mediante pendoli di torsione, dalle caratteristiche del mezzo granulare stesso, con particolare enfasi sulle proprietà tribologiche dei granelli stessi.

La comprensione dell'isteresi dinamica nei film ferromagnetici è un problema ancora aperto, così come il rumore Barkhausen ad essa associato. Proponiamo un confronto tra le leggi delle perdite anomale osservate nei campioni spessi e l'isteresi dinamica dei film utilizzando simulazioni di modelli disordinati. Studieremo poi teoricamente il moto delle pareti a zigzag e dei domini labirintici analizzandone l'isteresi e il rumore.

È stato recentemente studiato il problema della destabilizzazione della crescita virtuale di una superficie vicinale con valori finiti della Barriera di Ehrlich-Schwoebel. Ci proponiamo di estendere l'analisi considerando anche l'effetto del distacco termico degli atomi dagli step e tenendo conto la geometria bidimensionale delle superfici.

4 NETWORKS

Decomposizione delle reti in comunità. A partire da tecniche già note in letteratura, elaboreremo metodi di analisi ottimizzati in funzione delle caratteristiche delle reti complesse che tanto interesse hanno generato nella comunità scientifica.

L'applicazione degli algoritmi di decomposizione in comunità alla linguistica rappresenterà una parte importante di tale progetto. In questo campo, il formalismo delle reti si sta rivelando uno strumento particolarmente efficace. Ad esempio, esso permette di rappresentare sottoinsiemi di parole associate secondo determinati criteri come partizioni di reti sintattiche, o di verificare ipotesi e trovare nuove strutture nell'organizzazione del linguaggio.

Analisi delle correlazioni del grado di nodi vicini in una rete. A questo scopo, verranno utilizzati sia modelli teorici, studiati dal punto di vista analitico e numerico, sia dati riferiti a sistemi reali.

Studio delle relazioni tra evoluzione temporale di una rete e le sue proprietà statistiche delle correlazioni nella connettività di nodi vicini. L'obiettivo finale del progetto è l'applicazione di tali conoscenze teoriche all'elaborazione di un nuovo motore di ricerca di informazioni in reti telematiche.

Criteri di verificabilità

- 1) Pubblicazioni apparse su riviste internazionali ad alto impatto.
- 2) Relazioni su invito a convegni internazionali.
- 3) Citation index dei partecipanti al progetto.

Elenco delle Unità di Ricerca

Sede dell'Unità	Università degli Studi di ROMA "La Sapienza"
Responsabile Scientifico	Vittorio LORETO
Finanziamento assegnato	Euro 160.000

Compito dell'Unità

L'unità di ricerca I di Roma (Loreto) si dedicherà allo studio dei seguenti punti:

- I) Teoria dell'Informazione, comunicazione e complessità*
- II) Materiali granulari*
- III) Isteresi ferromagnetica*
- IV) Crescita di superfici*
- V) Networks*

L'unità di ricerca I garantisce una competenza ben documentata a livello internazionale nei seguenti settori:

- 1) Meccanica statistica dei sistemi disordinati e fuori dall'equilibrio.*
- 2) Esperimenti e teoria dei mezzi granulari.*
- 3) Meccanica statistica delle reti complesse.*

Tra i contributi scientifici più importanti recentemente prodotti dai partecipanti a questa unità ricordiamo:

- a) L'osservazione sperimentale della temperatura granulare [Nature 424, 909 (2003)].*
- b) L'osservazione di una dinamica complessa nella deformazione plastica dei materiali [Nature 410, 667 (2001)].*
- c) La descrizione delle catene alimentari come reti di trasporto [Nature 423 165 (2003)].*

Il ruolo di questa unità si può considerare complementare a quelli delle unità II e III, come testimoniano le pubblicazioni comuni. Di particolare utilità sarà la sinergia nel campo dei materiali granulari, dove le competenze sperimentali della presente unità si potranno unire all'esperienza teorica e numerica dell'unità di Camerino (III). Inoltre segnaliamo la collaborazione esistente sui temi di complessità e teoria dell'informazione con l'unità II.

Sede dell'Unità	Università degli Studi di CAMERINO
Responsabile Scientifico	Umberto MARINI BETTOLO MARCONI
Finanziamento assegnato	Euro 28.000

Compito dell'Unità

L'unità operativa di ricerca di Camerino si dedicherà allo studio dei sistemi granulari.

L'unità V è in grado di fornire competenze riconosciute a livello internazionale nei seguenti settori:

- 1) Sistemi granulari*
- 2) Meccanica Statistica*
- 3) Transizioni di Fase.*

Tra i contributi scientifici recenti più rilevanti di questa unità ricordiamo:

- 1) la soluzione esatta del modello di Maxwell per i modelli granulari;*
- 2) lo studio delle miscele composte da grani di tipo diverso;*
- 3) lo studio della clusterizzazione dei gas granulari in sistemi compartimentalizzati.*

Il ruolo dell'unità di Camerino è da ritenersi complementare a quello delle Unità I e II, i due gruppi che operano a Roma. Per quanto riguarda la complementarità con il gruppo II di Roma, questa è testimoniata dai lavori svolti in collaborazione negli ultimi dieci anni, mentre con l'unità I si potrà sviluppare una collaborazione anche nell'interpretazione dei dati sperimentali.

Sede dell'Unità	Università degli Studi di ROMA "La Sapienza"
Responsabile Scientifico	Angelo VULPIANI
Finanziamento assegnato	Euro 55.000

Compito dell'Unità

L'unità di ricerca di Roma (Vulpiani) si dedicherà allo studio dei seguenti punti:

- I Pseudocaos;*
- II Caos e coarse-graining in meccanica statistica;*
- III Analisi con tecniche multiscala di sistemi dinamici contenenti contemporaneamente gradi di libertà 'lenti' e 'veloci';*
- IV Sincronizzazione in sistemi caotici con interazione a lunga portata;*
- V Interazione proteina-proteina e proteina-peptide;*
- VI Modelli a mesoscala per il trasporto;*
- VII Aggregazione di particelle inerziali trasportate da flussi casuali.*

L'unità di ricerca di Roma (Vulpiani) garantisce una competenza ben documentata a livello internazionale nei seguenti settori:

- a) Caos;*
- b) Trasporto e Turbolenza;*
- c) Meccanica Statistica.*

Tra i contributi scientifici più importanti prodotti dai partecipanti a questa unità ricordiamo:

- 1) L'introduzione della Risonanza Stocastica;*
- 2) L'approccio multifrattale nella turbolenza e nei sistemi dinamici;*
- 3) L'approccio di tipo sistema dinamico alla turbolenza (modelli a shell);*
- 4) L'analisi non convenzionale di sistemi con molti tempi caratteristici, mediante gli 'Esponenti di Lyapunov a Scala Finita' e la 'Epsilon-Entropia'. L'importanza di questi risultati è ben documentata dall'impatto sulla comunità scientifica internazionale: per es., i lavori sulla Risonanza Stocastica e sui Multifrattali hanno ricevuto, rispettivamente, circa 800 e 600 citazioni.*

Il ruolo di questa unità si può considerare complementare a quelli delle unità di Genova e Torino. La sinergia tra i gruppi di Genova, Torino e Roma è testimoniata dai numerosi lavori comuni pubblicati su riviste internazionali e dalla comune organizzazione di scuole e conferenze internazionali.

La collaborazione con l'unità di ricerca di Genova negli ultimi anni ha prodotto parecchie pubblicazioni riguardanti, in particolare, la caratterizzazione della diffusione anomala e lo studio del trasporto pre-asintotico di campi scalari passivi in campi di velocità incompressibili. In questo progetto l'unità di Roma curerà principalmente gli aspetti di modellizzazione e approccio analitico per l'analisi multiscala del regime pre-asintotico nel trasporto passivo; mentre l'unità di Genova si dedicherà, principalmente, agli aspetti computazionali.

Nell'ultimo decennio l'interazione coll'unità di Torino è stata molto intensa, con scambi frequenti di giovani ricercatori (studenti di dottorato e borsisti post-dottorato) e collaborazione su vari argomenti, come: modelli a shell, predicibilità in turbolenza, trasporto e diffusione in sistemi non ideali, trasporto di specie reagenti. Attualmente il nostro comune interesse è per le proprietà di aggregazione di particelle inerziali trasportate passivamente da campi casuali. In questo progetto l'unità di Roma studierà principalmente le proprietà del trasporto dal punto di vista dei sistemi dinamici, mentre l'unità di Torino si dedicherà agli aspetti numerici.

Sede dell'Unità	Università degli Studi di GENOVA
Responsabile Scientifico	Roberto FESTA
Finanziamento assegnato	Euro 33.000

Compito dell'Unità

L'unità operativa di Genova è in grado di fornire ottime competenze riconosciute a livello internazionale nel settore della turbolenza dei fluidi complessi sia per quel che riguarda l'applicazione di tecniche analitiche (sviluppi perturbativi a scale multiple e tecniche di gruppo di rinormalizzazione) sia per la messa a punto ed applicazione di strategie di tipo numerico (principalmente metodi di tipo pseudo-spettrale). In quest'ultimo caso, l'unità di Genova ha fornito in passato alcuni contributi di grande rilevanza connessi all'approccio Lagrangiano per lo studio numerico delle proprietà statistiche di campi turbolenti.

Il ruolo dell'unità di Genova è da ritenersi complementare a quello delle unità di Roma e di Torino. Per quel che riguarda la complementarità con l'unità di Torino questa si manifesta nell'ambito dello studio della turbolenza elastica e dei fluidi bi-fasici: l'unità di Genova mira alla comprensione dei meccanismi di instabilità lineare e debolmente non lineare, mentre l'unità di Torino

sfrutterà tali risultati per indagare il regime di turbolenza completamente sviluppata. L'affiatamento con il gruppo di Torino è comprovato da numerose pubblicazioni internazionali congiunte.

Per quel che riguarda la complementarità con l'unità di Roma, questa sussiste in relazione agli studi sulla dinamica pre-asintotica di campi scalari passivi. L'unità di Genova curerà maggiormente gli aspetti numerici del problema sia per corroborare le previsioni teoriche prodotte dall'unità di Roma sia per indagare i regimi non perturbativi non catturabili per via analitica. Anche in questo caso, la collaborazione con il gruppo di Roma è consolidato nel tempo ed ha prodotto svariate pubblicazioni di notevole impatto sulla comunità internazionale.

Sede dell'Unità	Università degli Studi di TORINO
Responsabile Scientifico	Guido BOFFETTA
Finanziamento assegnato	Euro 26.000

Compito dell'Unità

L'unità operativa di Torino ha ottime competenze riconosciute a livello internazionale nel settore della turbolenza pienamente sviluppata e nella teoria dei sistemi dinamici. In questi settori di ricerca l'unità negli ultimi anni ha dato dei contributi di notevole rilevanza, in particolare nell'estensione del concetto di esponente di Lyapunov ai sistemi a molti gradi di libertà e nello studio delle proprietà Lagrangiane della turbolenza. Da un punto di vista metodologico, le competenze specifiche dell'Unità di Torino sono lo sviluppo analitico di modelli e la simulazione numerica a partire da equazioni primitive.

L'unità di Torino ha da diversi anni una collaborazione scientifica attiva con le unità di Roma e Genova, dimostrata dalle numerose pubblicazioni comuni. In particolare, con l'unità di Roma è stato introdotto l'estensione dell'esponente di Lyapunov a scala finita e la sua applicazione allo studio della predicibilità e della diffusione. La collaborazione con l'unità di Genova ha portato negli ultimi anni ad una serie di risultati importanti sulla fluidodinamica di soluzioni di polimeri.

All'interno del presente progetto il ruolo prevalente dell'unità di Torino sarà sui seguenti punti:

- simulazioni numeriche di modelli viscoelastici per lo studio della turbolenza elastica;
- sviluppo ed implementazione di modelli continui per particelle inerziali e microbolle;
- studio del trasporto turbolento.