Métodos Numéricos y Simulaciones en Astrofísica

Parte 8: Simulaciones con Partículas – Principios de Dinámica Estelar – Problema de N-cuerpos

Sistemas de Partículas

- Los fenómenos físicos descriptos por la teoría clásica pueden simularse mediante partículas.
- Un sistema clásico puede describirse en función de posiciones, velocidades y fuerzas de las partículas que lo componen.
- El objetivo es lograr modelos que reproduzcan los efectos físicos pero que resulte posible su cálculo.
- La elección del modelo se basa en las dimensiones físicas y escalas de tiempo del sistema.

Sistemas de Partículas

Sistemas correlacionados:

• hay correspondencia exacta entre partículas físicas y simuladas.
• la simulación es determinista.
• el estado inicial se define por las posiciones y velocidades para t=0.
• las fuerzas sobre cada partícula se obtienen de la suma de las fuerzas ejercidas por las restantes sobre ella.

Sistemas de Partículas

Sistemas no correlacionados:

• no hay correspondencia exacta entre partículas físicas y simuladas.

• la simulación es estadística.

• el estado inicial se define por las posiciones y velocidades para t=0 de las partículas simuladas.

• las fuerzas sobre cada partícula se obtienen mediante un proceso de cálculo simplificado.

• se pueden dividir en sistemas no colisionales o colisionales dependiendo de la sección eficaz y separación de las partículas.

Sistemas de Partículas

Table 1-1 Examples of physical systems represented by particle models

Scale lengths L are in meters and times T in seconds. N_p is the number of particles in L^3.

Example	Computer particles	Particle attributes	Physical N_p	Physical L	Physical T	Computer model N_p	Computer model L	Computer model T
1. *Correlated systems*								
Covalent liquids	Atoms or molecules	Strength constants related to quantum-mechanical dipole and quadruple interactions, mass, force, position, velocity	10^5	10^{-8}	10^{-12}	$10^3 - 10^4$	$10^{-8} - 10^{-9}$	10^{-12}
Ionic liquids	Positive ions, Negative ions	Charge, mass, force, position, velocity, radius	10^5	10^{-8}	10^{-12}	$10^3 - 10^4$	$10^{-8} - 10^{-9}$	10^{-12}
Stellar clusters	Stars	Mass, position, velocity, force, radius	$10^2 - 10^3$	10^{17}	10^{15}	$10^2 - 10^3$	10^{17}	10^{15}
Galaxy clusters	Galaxies	Mass, position, velocity, force, radius	$10^4 - 10^5$	10^{23}	10^{17}	$10^4 - 10^5$	10^{23}	10^{17}
2. *Collisionless systems*								
Collisionless plasma	"Superparticle" $\simeq 10^8$ electrons or 10^8 ions	Charge, mass, position, velocity, radius	$10^9 - 10^{12}$	$10^{-5} - 10^{-2}$	$10^{-9} - 10^{-12}$	$< 10^5$	$10^{-5} - 10^{-2}$	$10^{-9} - 10^{-12}$
Galaxies—spiral structures	"Superparticle" $\simeq 10^6$ stars	Mass, position, velocity, radius	$10^{10} - 10^{11}$	10^{21}	10^{13}	$< 10^5$	10^{21}	10^{13}
3. *Collisional systems*								
Submicron Semiconductor devices (microscopic Monte-Carlo model)	"Superparticle" $= 10^4$ electron wavepackets	Charge, mass, position, wavenumber, radius	10^8	10^{-7}	10^{-10}	$< 10^5$	10^{-7}	10^{-10}
4. *Collision-dominated systems*								
Semiconductor devices (diffusion model)	"Superparticle" $= 10^4$ electrons or holes	Charge, position	10^9	10^{-6}	10^{-9}	$< 10^5$	10^{-6}	10^{-9}
Inviscid, incompressible fluids (vortex)	Vortex element	Vorticity, position	continuum	$10^{-3} - 10^6$	$10^{-3} - 10^5$	$< 10^5$	$10^{-3} - 10^6$	$10^{-3} - 10^5$

Sistemas de Partículas

La dificultad aparece en el cálculo de las fuerzas (o de la interacción).

Ejemplo clásico: El problema de N-cuerpos

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = -G \sum_{j=1;\, j\neq i}^{N} \frac{m_j(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3}$$

G = 1

A partir de la aceleración y las condiciones iniciales se aplica Euler para avanzar en el tiempo las 6*N ecuaciones diferenciales de primer orden.

Modelos de Simulación

- Partícula – Partícula (PP):

  Es el más simple y exacto.

  Calcula todas las fuerzas actuantes.

- Partícula – Grilla (PM).

  Considera las fuerzas actuantes como una propiedad del campo.

  Es más rápido pero menos exacto que el PP.

- Particula – Partícula – Partícula – Grilla (P^3M).

  Es un híbrido entre el PP y PM.

  Se decide el modelo en función de la escala.

Dinámica Estelar

Conceptos básicos:

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = -G \sum_{j=1;\, j\neq i}^{N} \frac{m_j(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3}$$

Energía total y momento angular:

$$E = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} m_i \mathbf{v}_i^2 - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N} \frac{G m_i m_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}\,,$$

$$\mathbf{J} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{r}_i \times m_i \mathbf{v}_i\,.$$

E = T + U

Dinámica Estelar

Movimiento del centro de masas:

$$\sum_{i=1}^{N} m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = 0$$

Tiempo de cruce para sistemas en equilibrio:

$$t_{\rm cr} = 2\, R_{\rm V}/\sigma\,,$$

Radio virial y dispersión de velocidades:

$$R_{\rm V} \;=\; G N^2 \bar{m}^2 / 2|U|,$$

$$\sigma^2 \simeq G N \bar{m} / 2 R_{\rm V},$$

$$t_{\rm cr} \;\simeq\; 2\,\sqrt{2}\,(R_{\rm V}^3 / G N \bar{m})^{1/2}\,,$$

Dinámica Estelar

Ejemplo: Cúmulo abierto rico

$N = 10000$
$m = 0.5$ masas solares
$R_V = 4$ pc

$t_{cr} = 5 \times 10^6$ yr

Entonces, con edades de varios Gyr, las estrellas cruzan la región central varias veces dependiendo del valor de **J.**

Dinámica Estelar

Distancia de acercamiento:

$$R_{\rm cl} = 2\,G\bar{m}/\sigma^2\,,$$

Tiempo de relajación:

$$t_{\rm E} = \frac{1}{16}\left(\frac{3\pi}{2}\right)^{1/2}\left(\frac{NR^3}{Gm}\right)^{1/2}\frac{1}{\ln(0.4N)}\,,$$

Donde R es el radio del sistema.

Dinámica Estelar

Teorema del Virial:

$$d^2I/dt^2 = 4T + 2U + 4A - 4W\,,$$

$$E = T + U + W\,,$$

Donde I es el momento de inercia, W es la energía externa, y A es el momento angular de sistema debido a su movimiento.

En este caso, el radio virial es:

$$Q_{\rm vir} = (T + A)/|U - 2W|)\,.$$

Problema de N-cuerpos

- Consideraremos por ahora un método partícula – partícula (PP).
- Si el número de partículas es ~10^3 o menor, se puede utilizar un integrador de Bulirsch – Stoer.
- Si el número de partículas está entre ~10^3 y 10^4, es mejor utilizar un Euler modificado (leapfrog).
- una posible mejora es utilizar una variante del leapfrog del tipo predictor – corrector.

Problema de N-cuerpos

1. Compute forces.

    Clear force accumulators

    for $i = 1$ *to* N_p *do*

    $\quad \mathbf{F}_i := 0$

    Accumulate forces

    for $i = 1$ *to* $N_p - 1$ *do*

    $\quad$ *for* $j = i+1$ *to* N_p *do*

    $\quad\quad$ Find force $\mathbf{F}_{ij}$ of particle j on particle i

    $\quad\quad \mathbf{F}_i := \mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{ij}$

    $\quad\quad \mathbf{F}_j := \mathbf{F}_j - \mathbf{F}_{ij}$

2. Integrate equations of motion.

    for $i = 1$ *to* N_p *do*

    $$\mathbf{v}_i^{\text{new}} := \mathbf{v}_i^{\text{old}} + \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} DT$$

    $$\mathbf{x}_i^{\text{new}} := \mathbf{x}_i^{\text{old}} + \mathbf{v}_i DT$$

3. Update time counter.

    $$t := t + DT$$

Problema de N-cuerpos

A partir de posiciones y velocidades iniciales tenemos que calcular:

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = -G \sum_{j=1;\, j\neq i}^{N} \frac{m_j(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3}$$

El sistema se avanza a un instante t a partir del conocimiento que tenemos en el instante t_0. Truncando series de Taylor a bajo orden:

$$\mathbf{v}_i(t) = \mathbf{F}_i \Delta t + \mathbf{v}_i(t_0)\,,$$
$$\mathbf{r}_i(t) = \tfrac{1}{2}\mathbf{F}_i \Delta t^2 + \mathbf{v}_i(t_0)\Delta t + \mathbf{r}_i(t_0)\,,$$

Problema de N-cuerpos

El paso temporal debe respetar $|\mathbf{v}_i|\Delta t \ll r_\mathrm{h}$, donde r_h es el radio que incluye el 50% de la masa del sistema.

Una forma de mejorar el cálculo es utilizar un predictor – corrector para la fuerza. Primero se estima:

$$\tilde{\mathbf{r}}_i(t) = \tfrac{1}{2}\mathbf{F}_i\Delta t^2 + \mathbf{v}_i(t_0)\Delta t + \mathbf{r}_i(t_0)\,,$$

Que se utiliza para calcular un predictor para la fuerza mediante:

$$\bar{\mathbf{F}}_i = \tfrac{1}{2}\left[\mathbf{F}_i(t) + \mathbf{F}_i(t_0)\right]\ .$$

Problema de N-cuerpos

Si la aceleración es muy alta se requieren pasos temporales cortos haciendo ineficiente el cálculo. La solución es considerar pasos temporales diferentes para cada partícula. Si el paso correcto para cada partícula es:

$$\Delta t_i \simeq \eta \sqrt{\frac{1}{a_i}},$$

donde a es la aceleración, y se elige el paso de modo que:

$$\Delta t_i = \frac{\Delta t_s}{2^{n_i}},$$

donde Δt_s es el máximo paso encontrado y n un entero de modo que $\Delta t_i < \eta\, (1/a_i)^{1/2}$.

Problema de N-cuerpos

Si tenemos dos partículas A y B en t=0 cuyos intervalos sean ½ y 1 Δt_s, la sucesión será:

1) Se avanza A a t=¼ y B a t=½.
2) Se recalculan las aceleraciones sobre A.
3) Se avanza A a t=1/2 y se recalcula.
4) Se avanza A a t=3/4 y se recalcula.
5) Se avanza A a t=1.
6) Se promedian las posiciones de A en t=0 y 1.
7) Se recalculan las aceleraciones y se avanza B a t=1.

Problema de N-cuerpos

- Si tenemos un encuentro entre dos partículas, la aceleración se hace muy grande y el paso requerido muy pequeño.
- Si se forma una binaria, los encuentros con otras partículas reducen el semieje y aumentan la velocidad.
- La mejor forma de proteger la simulación es introducir en el potencial un parámetro de ablandamiento ε:

$$\Phi = -m/(R^2 + \epsilon^2)^{1/2}$$

donde G=1 y $r_{\rm h} \simeq 1.3\epsilon$ (potencial de Plummer).
- Sólo resulta útil en sistemas no colisionales.