Métodos Numéricos y Simulaciones en Astrofísica

Parte 9: Problema de N-cuerpos – Métodos Predictor-Corrector – Método de Aarseth – Método de Hermite

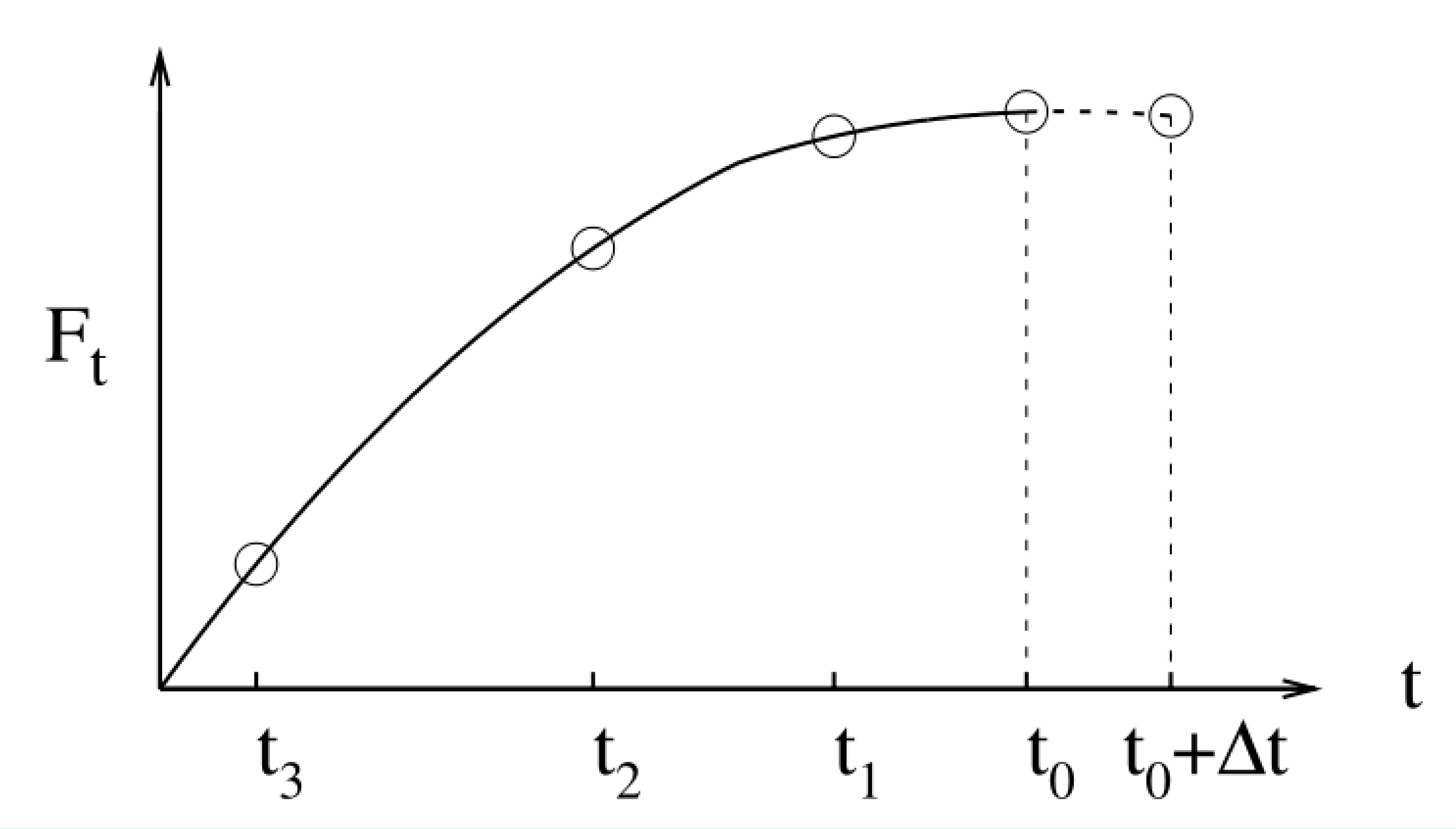
Problema de N-cuerpos

Una de las dificultades de calcular el problema de N-cuerpos con N grande es evaluar las aceleraciones:

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

Pero si N es grande, $\mathbf{a}_i$ varía lentamente a lo largo de la órbita, por lo cual se podría utilizar algún tipo de extrapolación a partir de valores conocidos.

Problema de N-cuerpos



Si F varía suavemente y conozco algunos valores puedo extrapolar para un (t_0 + Δt)

Polinomio para Fuerzas

- La idea original fue de von Hoerner (1960).
- El orden del polinomio es importante porque implica un costo numérico.
- Makino (1991) encuentra que el cuarto orden siempre se encuentra dentro del 30% de la mayor eficiencia.
- La formulación usual se debe a Aarseth (1985).
- El polinomio corresponde a la fórmula de interpolación de Newton (variante de Lagrange).

Polinomio para Fuerzas

Si se conocen las fuerzas para una partícula en cuatro instantes t_i para i=3,2,1,0 (t_0 es el instante más reciente), el valor en $t=(t_0 + \Delta t)$ será:

$$\mathbf{F}_t = \left\{ \left[\left(\mathbf{D}^4 (t - t_3) + \mathbf{D}^3 \right) (t - t_2) + \mathbf{D}^2 \right] (t - t_1) + \mathbf{D}^1 \right\} (t - t_0) + \mathbf{F}_0 \,.$$

donde las D son diferencias tabulares:

$$\mathbf{D}^1[t_j, t_k] = \frac{\mathbf{D}^0(t_j) - \mathbf{D}^0(t_k)}{t_j - t_k} \quad (j = k - 1)$$

$$\mathbf{D}^2[t_j, t_k] = \frac{\mathbf{D}^1[t_j, t_{k-1}] - \mathbf{D}^1[t_{k-1}, t_k]}{t_j - t_k} \quad (j = k - 2)$$

$$\mathbf{D}^3[t_j, t_k] = \frac{\mathbf{D}^2[t_j, t_{k-1}] - \mathbf{D}^2[t_{k-2}, t_k]}{t_j - t_k} \quad (j = k - 3)$$

$$\mathbf{D}^4 = \frac{\mathbf{D}^3[t, t_2] - \mathbf{D}^3[t_0, t_3]}{t - t_3}.$$

Polinomio para Fuerzas

Si se conoce el polinomio para **F**, se pueden calcular sus derivadas en t_0:

$$\mathbf{F}^{(1)} = [(\mathbf{D}^4 t'_3 + \mathbf{D}^3) t'_2 + \mathbf{D}^2] t'_1 + \mathbf{D}^1 \,,$$
$$\mathbf{F}^{(2)} = 2![\mathbf{D}^4 (t'_1 t'_2 + t'_2 t'_3 + t'_1 t'_3) + \mathbf{D}^3 (t'_1 + t'_2) + \mathbf{D}^2] \,,$$
$$\mathbf{F}^{(3)} = 3![\mathbf{D}^4 (t'_1 + t'_2 + t'_3) + \mathbf{D}^3] \,,$$
$$\mathbf{F}^{(4)} = 4!\mathbf{D}^4 \,,$$

donde $t'_k = t_0 - t_k.$. Si se conocen las derivadas puedo expresar **F** en una serie de Taylor alrededor de t_0.

Si tengo la serie de Taylor para **F** puedo calcular **v** y **r** por integración directa.

Polinomio para Fuerzas

Se inicia el cálculo a partir de m, **r** y **v** para cada partícula, definimos $\mathbf{R} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j,$ y $\mathbf{V} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j,$, y tenemos que:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{F}_{ij} &= -m_j \mathbf{R}/R^3 \,, \\
\mathbf{F}_{ij}^{(1)} &= -m_j \mathbf{V}/R^3 - 3a\mathbf{F}_{ij} \,,
\end{aligned}
$$

con $a = \mathbf{R} \cdot \mathbf{V}/R^2.$. Las contribuciones totales se obtienen por suma sobre todas las partículas.

Polinomio para Fuerzas

Los términos de segundo y tercer orden se obtienen por la suma para N partículas de:

$$\mathbf{F}_{ij}^{(2)} = -m_j(\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_j)/R^3 - 6a\mathbf{F}_{ij}^{(1)} - 3b\mathbf{F}_{ij} \,,$$
$$\mathbf{F}_{ij}^{(3)} = -m_j(\mathbf{F}_i^{(1)} - \mathbf{F}_j^{(1)})/R^3 - 9a\mathbf{F}_{ij}^{(2)} - 9b\mathbf{F}_{ij}^{(1)} - 3c\mathbf{F}_{ij} \,,$$

donde:

$$b = \left(\frac{V}{R}\right)^2 + \frac{\mathbf{R}\cdot(\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_j)}{R^2} + a^2 \,,$$
$$c = \frac{3\mathbf{V}\cdot(\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_j)}{R^2} + \frac{\mathbf{R}\cdot(\mathbf{F}_i^{(1)} - \mathbf{F}_j^{(1)})}{R^2} + a(3b - 4a^2) \,.$$

Polinomio para Fuerzas

Iniciando en $t_0=0$, definimos tres instantes mediante:

$$t_k = -k\Delta t_i \, (k = 1, 2, 3).$$

Y limitando a tercer orden, las diferencias tabulares iniciales son:

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}^1 &= (\tfrac{1}{6}\mathbf{F}^{(3)} t'_1 - \tfrac{1}{2}\mathbf{F}^{(2)}) t'_1 + \mathbf{F}^{(1)}\,, \\
\mathbf{D}^2 &= -\tfrac{1}{6}\mathbf{F}^{(3)}(t'_1 + t'_2) + \tfrac{1}{2}\mathbf{F}^{(2)}\,, \\
\mathbf{D}^3 &= \tfrac{1}{6}\mathbf{F}^{(3)}\,.
\end{aligned}$$

Polinomio para Fuerzas

La idea es avanzar la integración con el menor número posible de evaluaciones de la fuerza.

Se calculará primero un predictor para la fuerza de bajo orden y luego se corregirá a cuarto orden.

Luego de la inicialización hay que determinar qué partícula avanzar. Para eso se elije la partícula j con el instante ($t_j+\Delta t_j$) más pequeño, donde t_j es el instante de la última evaluación de fuerzas.

Polinomio para Fuerzas

Algorithm 2.1. *Individual time-step cycle.*

1. Determine the next particle: $i = \min_j \{t_j + \Delta t_j\}$
2. Set the new global time by $t = t_i + \Delta t_i$
3. Predict all coordinates $\mathbf{r}_j$ to order $\mathbf{F}^{(1)}$
4. Form $\mathbf{F}^{(2)}$ by the second equation (2.3)
5. Improve $\mathbf{r}_i$ and predict $\mathbf{v}_i$ to order $\mathbf{F}^{(3)}$
6. Obtain the new force $\mathbf{F}_i$
7. Update the times t_k and differences $\mathbf{D}^k$
8. Apply the corrector $\mathbf{D}^4$ to $\mathbf{r}_i$ and $\mathbf{v}_i$
9. Specify the new time-step Δt_i
10. Repeat the calculation at step 1

Polinomio para Fuerzas

La predicción a primer orden de **r** se obtiene usando Taylor. Por ejemplo:

$$\mathbf{r}_j = [(\tfrac{1}{6}\mathbf{F}^{(1)}\delta t'_j + \tfrac{1}{2}\mathbf{F})\delta t'_j + \mathbf{v}_0]\delta t'_j + \mathbf{r}_0 \,,$$

donde $\delta t'_j = t - t_j$ (with $\delta t'_j \leq \Delta t_j$).

Luego se calcula a tercer orden **r** y **v**, y se corrige a cuarto orden con:

$$\Delta \mathbf{r}_i = \mathbf{F}^{(4)} \left\{ [(\tfrac{2}{3}t' + c)0.6t' + b]\tfrac{1}{12}t' + \tfrac{1}{6}a \right\} t'^3 \,,$$

$$\Delta \mathbf{v}_i = \mathbf{F}^{(4)} \left\{ [(0.2t' + 0.25c)t' + \tfrac{1}{3}b]t' + 0.5a \right\} t'^2 \,,$$

Con: $t' = t - t_0$ $a = t'_1 t'_2 t'_3,$ $b = t'_1 t'_2 + t'_1 t'_3 + t'_2 t'_3,$ $c = t'_1 + t'_2 + t'_3,$

Polinomio para Fuerzas

Para estimar el paso para cada partícula se considera la distancia a la compañera más cercana, D_m, y su velocidad relativa, v_m:

$$\Delta t_i = \left(\frac{\eta |\mathbf{F}|}{|\mathbf{F}^{(2)}|} \right)^{1/2} ,$$

donde $\eta < 1$.

Una versión más sofisticada para el paso viene dada por:

$$\Delta t_i = \left(\frac{\eta (|\mathbf{F}||\mathbf{F}^{(2)}| + |\mathbf{F}^{(1)}|^2)}{|\mathbf{F}^{(1)}||\mathbf{F}^{(3)}| + |\mathbf{F}^{(2)}|^2} \right)^{1/2} .$$

Método de Hermite

Para mejorar la precisión de **F** y $\mathbf{F}^{(1)}$ es deseable obtener un corrector de alto orden. Makino (1991) utilizó una serie de Taylor de tercer orden para la fuerza y su primer derivada:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_0 + \mathbf{F}_0^{(1)} t + \frac{1}{2}\mathbf{F}_0^{(2)} t^2 + \frac{1}{6}\mathbf{F}_0^{(3)} t^3 ,$$

$$\mathbf{F}^{(1)} = \mathbf{F}_0^{(1)} + \mathbf{F}_0^{(2)} t + \frac{1}{2}\mathbf{F}_0^{(3)} t^2 .$$

Usando la segunda para reemplazar $\mathbf{F}_0^{(2)}$ en la primera, se obtiene:

$$\mathbf{F}_0^{(3)} = 6[2(\mathbf{F}_0 - \mathbf{F}) + (\mathbf{F}_0^{(1)} + \mathbf{F}^{(1)})t]/t^3 .$$

Método de Hermite

Reemplazando esta última en la primera:

$$\mathbf{F}_0^{(2)} = 2[-3(\mathbf{F}_0 - \mathbf{F}) - (2\mathbf{F}_0^{(1)} + \mathbf{F}^{(1)})t]/t^2 \,.$$

La predicción a primer orden para **r** y **v** es:

$$\mathbf{r}_i = [(\tfrac{1}{6}\mathbf{F}_0^{(1)}\delta t_i' + \tfrac{1}{2}\mathbf{F}_0)\delta t_i' + \mathbf{v}_0]\delta t_i' + \mathbf{r}_0 \,,$$
$$\mathbf{v}_i = (\tfrac{1}{2}\mathbf{F}_0^{(1)}\delta t_i' + \mathbf{F}_0)\delta t_i' + \mathbf{v}_0 \,,$$

donde $\delta t_i' = t - t_i.$. Reevaluando $\mathbf{F}$ y $\mathbf{F}^{(1)}$ y utilizando las expresiones encontradas para $\mathbf{F}_0^{(2)}$ y $\mathbf{F}_0^{(3)}$ tenemos el corrector:

$$\Delta\mathbf{r}_i = \tfrac{1}{24}\mathbf{F}_0^{(2)}\Delta t_i^4 + \tfrac{1}{120}\mathbf{F}_0^{(3)}\Delta t_i^5 \,,$$
$$\Delta\mathbf{v}_i = \tfrac{1}{6}\mathbf{F}_0^{(2)}\Delta t_i^3 + \tfrac{1}{24}\mathbf{F}_0^{(3)}\Delta t_i^4 \,.$$

Método de Hermite

- El método de Hermite es muy simple.
- Compensa la necesidad de calcular la primer derivada.
- Es más estable.
- El corrector es mucho más rápido.
- La elección de pasos temporales por jerarquías reduce el número de predicciones.
- Permite pasos temporales más largos al ser más estable.