

Método de distribución de partículas para el colapso homólogo de una esfera

Particle distribution method for the homologous collapse of a sphere

Joe Alejandro García Ospina¹ *, Nicanor Poveda Tejada¹, Juan David Gómez Aponte¹, Nelson Vera-Villamizar¹

¹Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Grupo de Astrofísica y Cosmología, Tunja (Boyacá)

*Correo autor: joe.garcia@uptc.edu.co

Resumen

En este trabajo se estudia el colapso adiabático de una esfera autogravitante, mediante una simulación computacional realizada con Gadget-2. Este paquete tiene un arquetipo de simulación para el colapso homólogo de una esfera unidad, la cual se representa mediante una serie de cascarones esféricos concéntricos, en donde se distribuyen las partículas de manera equidistante para representar un número de partículas $n_i/N = r^2$. Se ha creado otro método basado en considerar la esfera unidad constituida por pequeñas esferas en su interior. El problema se reduce a empaquetar las esferas pequeñas de la mejor manera posible. Este problema ha sido resuelto en física estado sólido, para la simetría esférica el máximo factor de empaquetamiento lo da una estructura de Bravais tipo Face-Centered Cubic (FCC). En este trabajo se muestra que la mejor manera de representar una esfera de gas computacionalmente es mediante una distribución FCC.

Palabras clave: Colapso homólogo, nube molecular, Gadget-2.

Abstract

In this work the adiabatic collapse of a self-gravitating sphere is studied, by means of a computational simulation carried out with Gadget-2. This package has a simulation archetype for the homologous collapse of a unit sphere, which is represented by a series of concentric spherical shells, where the particles are distributed equidistantly to represent a particles number $n_i/N = r^2$. Another method has been created based on considering the unit sphere made up of small spheres inside. The problem boils down to packing the small spheres in the best possible way. This problem has been solved in solid state physics, for spherical symmetry the maximum packing factor is given by a Face-Centered Cubic (FCC) type Bravais structure. In this work it is shown that the best way to represent a sphere of gas computationally is by means of an FCC distribution.

Key words: Homologous collapse, Molecular cloud, Gadget-2.

1 Introducción

La distribución equidistante de un número arbitrario de puntos sobre la superficie de una esfera, es un problema clásico de la geometría discreta propuesto inicialmente por Pieter Tammes en 1930 [Tammes, 1930], es un problema abierto en donde se han encontrado algunas soluciones exactas y aproximadas, aplicando métodos geométricos, numéricos o usando potenciales electrostáticos [Saff and Kuijlaars, 1997, Katanforoush and Shahshahani, 2003, Brass and Pach, 2006].

En el ámbito de la astrofísica, se han realizado simulaciones hidrodinámicas aplicando diferentes métodos de distribución de partículas con el propósito formar una nube molecular con una simetría esférica, esta representación resulta útil para simular su colapso que conduce a la formación de una estrella o sistemas planetarios [Diehl et al., 2015, Raskin and Owen, 2016], por otra parte los modelos teóricos permiten estimar la escala temporal evolutiva de una nube molecular a través de sus propiedades físicas y los tipos de energías presentes [Bodenheimer, 2011].

Gadget-2 [Springel et al., 2001, Springel, 2005] es un código hidrodinámico que se utiliza para simulaciones cosmológicas, pero puede ser utilizado para simular procesos de colapso gravitacional en nubes moleculares, posee un arquetipo de simulación que se utiliza para probar la precisión del código hidrodinámico simulando el colapso homólogo a través de una distribución de 1472 partículas que representan centros de masa interactuando térmica y gravitacionalmente, incorpora la técnica *smoothed-particle hydrodynamics (SPH)* que permite resolver las ecuaciones diferenciales hidrodinámicas involucradas en el proceso de colapso [Evrard, 1988, Price, 2012, Springel, 2010], también utiliza el algoritmo de Barnes-Hut Tree Method [Barnes and Hut, 1986] para resolver ecuaciones dinámicas derivadas de interacciones gravitacionales entre las partículas del sistema [Czaja, 2016].

En este trabajo se presenta un nuevo método numérico para generar una distribución equidistante de partículas con simetría esférica para simular una esfera isoterma singular, este sistema físico se utiliza en muchas aplicaciones, por ejemplo, el colapso que da origen a una estrella, modelar el efecto de

lente gravitacional de galaxias y cúmulo de galaxias. El potencial generado por esta distribución de masa es $\phi(r) \sim \ln r$, siendo la velocidad circular $v_c^2 = r|d\phi/dr|$, el cual da lugar a curvas planas de rotación. El método usado por Gadget-2 para distribuir las partículas en una esfera está basado en distribuir equidistantemente las partículas en cascarones concéntricos [Hernquist and Katz, 1989, Springel, 2005, Raskin and Owen, 2016].

2 La esfera isoterma

En general las ecuaciones de equilibrio hidrostático:

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{GM}{r^2}\rho, \quad \frac{dM}{dr} = 4\pi r^2\rho, \quad (1)$$

no pueden ser resueltas, tal como ocurre con las ecuaciones hidrodinámicas requerimos de una ecuación adicional pues éstas involucran tres funciones a determinar, densidad $\rho = \rho(r)$, presión $P = P(r)$ y masa $M = M(r)$. En el caso de una esfera de gas ideal isoterma, la presión y la densidad satisfacen la relación $P = K\rho$, $K = k_B T / \mu m_H$, donde la presión es politrópica y corresponde al caso $\gamma = 1$, siendo K una constante positiva. De la ecuación (1) se obtiene,

$$\left[\frac{K}{4\pi G} \right] \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(\frac{r^2 d\rho}{\rho dr} \right) = -\rho, \quad (2)$$

la ecuación (2) admite una solución particular en donde la densidad no es finita en el origen, está dada por una ley de potencia $\rho(r) = Cr^n$, que reemplazada en (2) resulta

$$\left[\frac{nK}{4\pi G} \right] \frac{d}{dr}(r) = -Cr^{n+2},$$

esta última igualdad sólo se satisface para $n = -2$, lo que nos permite además determinar C , resultando que la densidad es,

$$\rho(r) = \frac{K}{2\pi G} \frac{1}{r^2},$$

que se denomina *esfera isoterma singular*, debido a su singularidad en el origen.

El criterio de inestabilidad de Jeans establece las condiciones físicas necesarias para el colapso homólogo de una nube interestelar con simetría esférica. El colapso ocurre cuando se pierde el equilibrio

hidrostático debido a perturbaciones en el interior de la nube o factores externos (como la onda de choque de una supernova) [Jeans, 1902]. Durante el proceso de colapso gravitacional se dan diversos intercambios entre los tipos de energías: potencial, cinética y térmica en una escala temporal estimada por el *free-fall-time*, $t_{ff} = \sqrt{3\pi/32G\rho_0}$ [Stahler and Palla, 2008, Bodenheimer, 2011].

El objetivo principal del cálculo numérico es representar el comportamiento del gas interestelar resolviendo numéricamente las ecuaciones diferenciales que representan la dinámica e hidrodinámica para cada una de las partículas de la simulación, la dinámica del sistema involucra interacciones gravitacionales entre todas las partículas vecinas, fuerza de interacción entre dos partículas está dada por la ley de gravitacional de Newton [Evrard, 1988, Czaja, 2016]:

$$F_{ij} = -Gm_i m_j \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{\left(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2 + \varepsilon^2\right)^{\frac{3}{2}}} \quad (3)$$

donde el término ε se conoce como *softening gravitacional* y su función es contrarrestar los errores computacionales, $\varepsilon = \left(\frac{4\pi}{3}R_{vir}^3\right)^{\frac{1}{3}}N^{-\frac{1}{3}}$, siendo R_{vir} la distancia media entre partículas y N el número total de partículas. Calcular la fuerza entre todas las partículas en cada instante de tiempo tiene un alto costo computacional del orden de $\mathcal{O}(N^2)$ cálculos, aplicando el método de Barnes-Hut se reduce al orden de $\mathcal{O}(N \log N)$ [Barnes and Hut, 1986].

La hidrodinámica de partículas está descrita por las ecuaciones de Euler para la mecánica de fluidos, expresadas por el grupo de ecuaciones [Evrard, 1988, Springel, 2010, Price, 2012]:

$$\frac{d\rho}{dt} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \times (\rho \vec{u})) + \nabla P = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} (E + P)) = 0 \quad (6)$$

$$E = \rho \left(u + \frac{\vec{u}^2}{2} \right) \quad (7)$$

donde ρ representa la densidad del fluido, \vec{u} la velocidad del fluido, P la presión térmica del gas, E

la densidad de energía total y u la energía interna por unidad de masa [Springel, 2005]. El paquete de simulación Gadget-2 resuelve las ecuaciones dinámicas e hidrodinámicas de manera adecuada, suministrándole las condiciones iniciales del sistema de partículas.

3 Distribución de partículas dentro de la esfera

La distribución de partículas se ha determinado proponiendo una densidad inicial de masa expresada mediante la ecuación [Evrard, 1988]:

$$\rho(r) = \frac{M_s}{2\pi R_s^2} \frac{1}{r}, \quad (8)$$

donde M_s representa la masa y R_s el radio de la esfera. La esfera se representa en forma de cascarones esféricos concéntricos equidistantes de radio r_i ($i = 1, 2, 3, \dots$), en la superficie de cada cascarón el número total de partículas n_i viene dado por la siguiente expresión:

$$n_i = \frac{2M_s}{mR_s^2} \int_0^{r_i} r dr. \quad (9)$$

Se asume de todas las partículas tiene una masa individual denotada como m , siendo $M_s = mN$. Integrando la expresión (9) anterior el número de partículas distribuidas en la superficie del cascarón es,

$$\frac{n_i}{N} = \left(\frac{r_i}{R_s} \right)^2 = r^2 \quad (10)$$

donde $r = r_i/R_s$, nótese que $0 \leq r \leq 1$, de tal manera que para normalizar la expresión, se puede considerar una esfera de radio unidad $R_s = 1$. A partir de la ecuación 10 la i -ésima capa tendrá una masa equivalente a:

$$m_i = m n_i = \frac{2M_s}{R_s^2} \int_0^{r_i} r dr \quad (11)$$

En consecuencia, integrando la expresión anterior y separando términos semejantes se obtiene:

$$\frac{m_i}{M_s} = \left(\frac{r_i}{R_s} \right)^2 = r^2 \quad (12)$$

La expresión 10 permite calcular el número de partículas y (12) la masa de las partículas distribuidas

en la superficie de cada uno de los cascarones esféricos. El método se basa en considerar la esfera unidad constituida con pequeñas esferas de gas de radio R en su interior. Las esferas pequeñas son un artificio para cierta cantidad de gas y su centro corresponde al centro de masa de esa cantidad de gas. La principal característica de un gas es que ocupa todo el espacio que lo contiene, en consecuencia, el problema es distribuir equidistantemente este número de partículas sobre la superficie de cada cascarón esférico y encontrar la manera de empaquetar las esferas pequeñas en el interior de la esfera unidad de tal manera que queden uniformemente distribuidas para representar el gas.

La manera de empaquetar esferas ha sido resuelta en física del estado sólido y se conoce como redes de Bravais [Kittel, 2005]. Mediante teoría de grupos se ha demostrado que sólo existen catorce estructuras distintas de redes tridimensionales de Bravais. Cada estructura (o celda) de Bravais tiene la particularidad de poder repetirse ocupando todo el volumen disponible, sin solaparse ni dejar espacios vacíos; cada celda tiene un factor de empaquetamiento, es decir, cuantas esferas caben en una celda convencional. Para representar el gas, debemos escoger la estructura de Bravais que permita el mayor empaquetamiento de esferas (0.7405) y conserve la simetría esférica, la estructura más adecuada es la cúbica centrada en las caras (FCC) [Kittel, 2005].

La razón fundamental de hacer esta elección es que un gas ocupa todo el espacio disponible, como el gas se representa mediante un conjunto de centros de masa, si los centros de masa tienen una estructura FCC se representa de la mejor manera la continuidad del gas debido al factor de empaquetamiento y al hecho que es un gas rarificado; las demás estructuras tiene un factor de empaquetamiento mucho menor generando representando vacíos, lo cual no está de acuerdo con el comportamiento físico de un gas.

En la Figura 1 se muestra las partículas (centros de masa) ubicadas en el punto central de la cara del cubo y las cuales definen las aristas de un octaedro. Las partículas que se encuentran en los vértices del octaedro, se encuentran en la superficie de un cascarón esférico de radio $r_1 = a/2$, circunscrito al octaedro. Y las ocho partículas que forman el cubo,

se encuentran en la superficie de un cascarón esférico de radio $r_2 = \sqrt{3}a/2$, circunscrito al cubo.

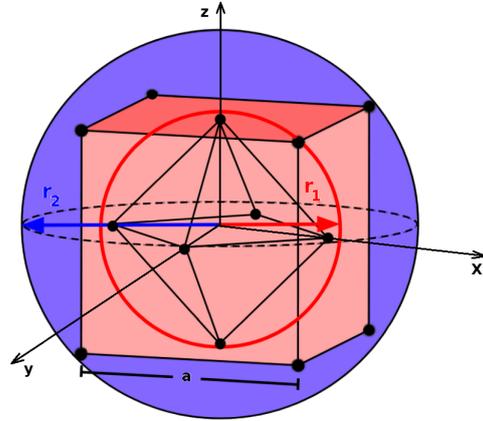


Figure 1. Representación del método de distribución de partículas para generar capas esféricas de partículas superpuestas con un radio igual a $r_1 = \frac{a}{2}$ y $r_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}a$.

Para continuar con el proceso de construcción en todo el espacio, se definen los vectores base $b_i[x, y, z]$: $b_0 [0, 0, 0]$, $b_1 [\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0]$, $b_2 [0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$, $b_3 [\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}]$. Para extender la estructura a todo el espacio se definen las traslaciones: $-N_n \leq t_x, t_y, t_z \leq N_n$ donde $N_n = 1, 2, \dots$, es el número de traslaciones posibles. Finalmente las coordenadas de las cuatro partículas (centros de masa) correspondiente a cada base son:

$$\begin{aligned} x_i &= (t_x - 0.5 + b_i[x]) a \\ y_i &= (t_y - 0.5 + b_i[y]) a \\ z_i &= (t_z - 0.5 + b_i[z]) a \end{aligned}$$

donde $i = 0, 1, 2, 3$. El factor 0.5 permite trasladar el vector base b_0 al centro del sistema de referencia. Los radios de las capas esféricas donde se encuentran las n_i partículas base (x_i, y_i, z_i) están dados por:

$$r_i = \sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2} \quad (13)$$

nótese que $0 < r_i \leq 1$ establece una región de validez para que no existan partículas fuera de esta región. Trazando el radio desde el centro de la esfera siguiendo las diagonales de los cubos, se obtiene una expresión para el radio de la esfera unidad en función del parámetro de red: $(N_n - \frac{1}{2}) a = R_s$, donde el parámetro de red, $a = 2R_s / (2N_n - 1)$, es la longitud de la arista del cubo exterior (ver Figura 1).

4 Simulación del colapso de la esfera

Inicialmente, el trabajo consiste en simular el colapso de una distribución de $N = 1472$ partículas en reposo (con simetría esférica) y una energía interna de 0.05, con unidades normalizadas a la unidad (G, M, R) = 1, este arquetipo se encuentra en el software Gadget-2 [Springel et al., 2001].

La Figura 2 muestra el comportamiento energético de la simulación, donde ocurre la conversión de la energía potencial gravitacional en energía térmica y cinética, y viceversa (la energía total del sistema es constante). Se obtuvo un error porcentual para la energía total de 3.82%. Para validar la simulación se compara la Figura 2 con la Figura 10 de Springel et al. [2001].

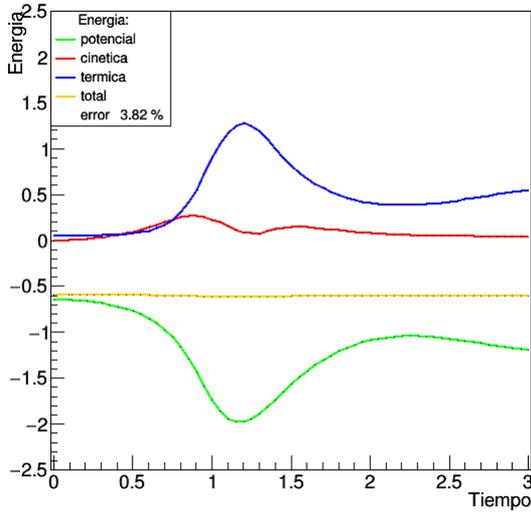


Figure 2. Comportamiento de la energía en el colapso de una esfera (ejemplo del software Gadget-2 con $N = 1472$ partículas), en el intervalo de tiempo $t = [0, 3]$ ky. La línea azul representa la energía térmica, línea roja la energía cinética, línea verde la energía potencial y línea amarilla la energía total del sistema.

Se ha integrado el número de partículas para cada radio y se obtiene una parábola $\rho(r_i) = n_i/N = A_0 r_i^2$ donde los parámetros del ajuste (fit) a ésta ecuación son: $A_0 = 1.008459 \pm 0.004475$, $\chi_{DoF}^2 = 1.778805 \times 10^{-4}$ y bondad de ajuste (likelihood), $e^{-\chi_{DoF}^2} = 0.999822$.

Se ha creado un programa empleando el ROOT/C++ del CERN (<https://root.cern>), con las mismas condiciones iniciales, para generar las partículas con la distribución Cúbica Centrada en

las Caras (FCC). Se realiza un conteo de partículas para cada radio y se divide en el total de partículas, obteniendo una función cúbica: $\eta(r_i) = r_i^3 = n_i/N$. Esto significa que se requiere hacer una transformación de escala para obtener una función $\rho(r'_i) = r_i^2$. Para esto se escala cada coordenada $r'_i \rightarrow r_i \sqrt{r_i}$ de tal manera que al aplicar la transformación se obtiene $\rho(r'_i) = r_i^2 = r_i^3 = n_i/N$. Se realiza el ajuste (fit) a la función $\rho(r'_i) = A_0 r_i^2$ (con $N_n = 5$) obteniendo los parámetros: $A_0 = 1.053430 \pm 0.004642$, $\chi_{DoF}^2 = 2.826215 \times 10^{-4}$ y likelihood, $e^{-\chi_{DoF}^2} = 0.999717$.

En la parte izquierda de la Figura 3 se muestra la distribución utilizada por el Gadget-2, y en la parte derecha la distribución FCC. El número de partículas $\rho(r_i) = n_i/N = A_0 r_i^2$ obtenida para el Gadget-2 y $\rho(r'_i) = A_0 r_i^2 = n_i/N$ para la distribución FCC, son equivalentes como lo evidencia la bondad de ajuste.

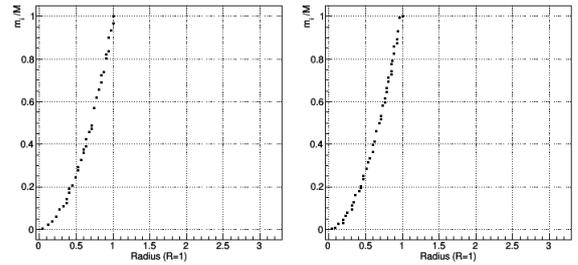


Figure 3. Distribución inicial de las partículas para Gadget-2 y FCC.

Al realizar la simulación ocurre el colapso adiabático del gas isotérmico. En la región $0 \leq r \leq 0.5$ el comportamiento es igual para los dos casos (Gadget-2 y FCC). Como se observa en la Figura 4 ($0 \leq r \leq 0.5$), el colapso genera una esfera análoga a un cuerpo rígido (core) porque el número de partículas n_i/N es lineal.

Luego viene el proceso de expansión adiabática del gas, que en $0.5 < r < \infty$ expulsa el recubrimiento exterior de la esfera (shell). Pero en el caso Gadget-2 aparecen discontinuidades y un escalonamiento; esto se debe a los «vacíos» presentes en la distribución espacial de las partículas. Para la distribución FCC se obtiene una expansión sin escalonamiento ni discontinuidades.

En $0 \leq r \leq 0.5$ las partículas colapsan formando un núcleo central (core) y en $0.5 < r < \infty$ la capa más externa (shell) se expande manteniendo cierta con-

tinuidad. Este comportamiento está más de acuerdo con el comportamiento de un gas el cual tiende a ocupar de manera continua el espacio disponible, no deben aparecer sitios vacíos sin gas, ni escalonamientos.

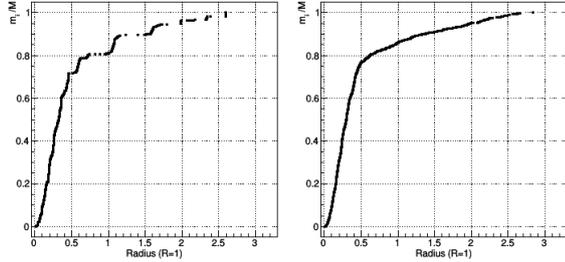


Figure 4. Expansión máxima para la distribución Gadget-2 y FCC.

En la Figura 5 se observa que en el tiempo de $t \simeq 1 \text{ ky}$ las partículas que conforman el gas colapsan por su gravitación mutua. La energía potencial se convierte en energía cinética y térmica haciendo que la temperatura del gas se incremente. Se puede observar que la energía cinética después de alcanzar un valor máximo disminuye estableciendo el tiempo donde el colapso ocurre formando el core.

Luego ocurre una expansión en donde se revierte el proceso haciendo que la energía térmica se convierta en energía potencial gravitacional, este proceso se manifiesta en la expansión del cascarón externo (shell), haciendo que la energía térmica disminuya. A medida que el cascarón se expande es atraído por el núcleo cubriéndolo, generando una réplica menor del primer colapso y seguido una expansión de la parte mas externa del cascarón, estas réplicas se asemejan a un oscilador amortiguado forzado termalizando el sistema, hasta alcanzar el equilibrio donde todas las energías permanecen constantes.

5 Discusión y conclusiones

Hasta donde se sabe todos los autores hasta el momento utilizan diferentes métodos numéricos que terminan solamente distribuyendo las partículas equidistantemente en cada cascarón esférico, como lo hace el arquetipo de Gadget-2, pero este método genera regiones vacías (sitios donde no existe gas); mientras que la distribución FCC tiene el máximo

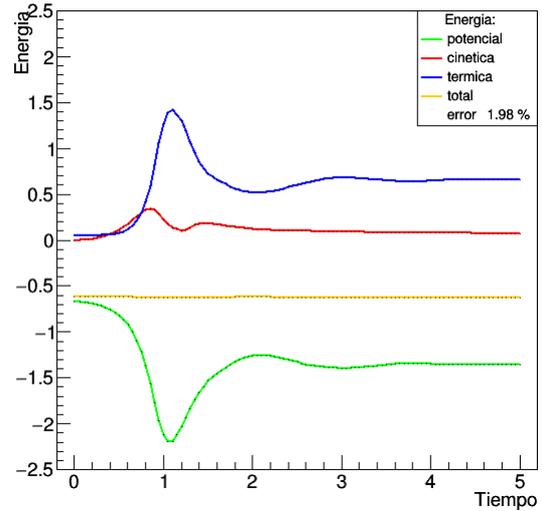


Figure 5. Comportamiento de la energía en el colapso de la esfera de gas isotérmico para la distribución FCC escalada.

factor posible de empaquetamiento, 0.74, representa una distribución uniforme donde el número de partículas tiene una relación funcional cúbica $\eta \sim r^3$ la cual fácilmente puede escalarse para obtener una relación cuadrática $\rho \sim r^2$. Adicionalmente, se evidencia que el error porcentual en la energía total del arquetipo Gadget-2 es de 3.82% en $t = 3 \text{ ky}$ mientras que con la distribución FCC el error porcentual disminuye apreciablemente, es de 1.98 en $t = 5 \text{ ky}$.

En consecuencia, la mejor manera de representar computacionalmente la distribución de un gas de partículas masivas autogravitantes, para el colapso homólogo, es mediante una distribución FCC escalada.

6 Agradecimientos

Agradecimientos al grupo de investigación de Astrofísica y Cosmología (GAC) de la Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia por brindar todos los instrumentos y equipos necesarios durante la investigación.

References

Josh Barnes and Piet Hut. A hierarchical $O(n \log n)$ force-calculation algorithm. *Nature*, 324(6096): 446–449, 1986.

Peter H. Bodenheimer. *Principles of Star Formation*.

2011. doi: 10.1007/978-3-642-15063-0.
- William Brass, Peter Moser and János Pach. *Research problems in discrete geometry*. Springer Science & Business Media, 2006.
- B. Czaja. Master degree in astronomy. hydrodynamic simulations of star formation from molecular cloud collisions. Master's thesis, Department of physics and astronomy, 2016.
- S. Diehl, G. Rockefeller, C. L. Fryer, D. Riethmiller, and T. S. Statler. Generating Optimal Initial Conditions for Smoothed Particle Hydrodynamics Simulations. *Publications of the Astronomical Society of Australia*, 32:e048, December 2015. doi: 10.1017/pasa.2015.50.
- August E. Evrard. Beyond n-body: 3d cosmological gas dynamics. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 235, 911-934., 1988.
- Lars Hernquist and Neal Katz. TREESPH: A Unification of SPH with the Hierarchical Tree Method. *Astrophysical Journal Supplement Series*, 70:419, June 1989. doi: 10.1086/191344.
- James Hopwood Jeans. I. the stability of a spherical nebula. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, 199 (312-320):1-53, 1902.
- Ali Katanforoush and Mehrdad Shahshahani. Distributing points on the sphere, i. *Experimental Mathematics*, 12(2):199-209, 2003.
- Charles Kittel. *Introduction to solid state physics*. John Wiley & Sons, 8th edition, 2005.
- Daniel J. Price. Smoothed particle hydrodynamics and magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 231(3):759-794, 2012.
- Cody Raskin and J. Michael Owen. Rapid optimal sph particle distributions in spherical geometries for creating astrophysical initial conditions. *The Astrophysical Journal*, 820(2):102, 2016.
- Edward B. Saff and Amo B.J. Kuijlaars. Distributing many points on a sphere. *The mathematical intelligencer*, 19(1):5-11, 1997.
- Volker Springel. The cosmological simulation code gadget-2. *Monthly notices of the royal astronomical society*, 364(4):1105-1134, 2005.
- Volker Springel. Smoothed particle hydrodynamics in astrophysics. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 48:391-430, 2010.
- Volker Springel, Naoki Yoshida, and Simon D. M. White. GADGET: a code for collisionless and gasdynamical cosmological simulations. *New Astronomy*, 6(2):79-117, April 2001. doi: 10.1016/S1384-1076(01)00042-2.
- Steven W. Stahler and Francesco Palla. *The formation of stars*. John Wiley & Sons, 2008.
- Pieter Merkus Lambertus Tammes. On the origin of number and arrangement of the places of exit on the surface of pollen-grains. *Recueil des travaux botaniques néerlandais*, 27(1):1-84, 1930.