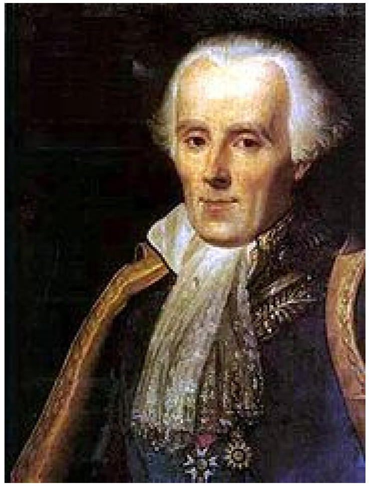
Física Computacional

El Sistema Solar y las Galaxias: Una Introducción a la Dinámica Molecular

1. Introducción.

- Hace 200 años, Pierre Simon, Marqués de Laplace, comenzó a pensar sobre el origen del sistema solar. Su hipótesis fue presentada en 1796 en *Exposition du Système du Monde*.

- De acuerdo con la teoría de Laplace, el Sistema Solar evolucionó a partir de un gas incandescente girando alrededor de un eje. Según se iba enfriando, el gas se contraía, lo que originaba un rotación más rápida debido a la conservación del momento angular. En algún momento la parte exterior del gas se separó formando anillos que posteriormente condensaron para formar planetas. La parte interior colapsó en un sólo cuerpo: el Sol.



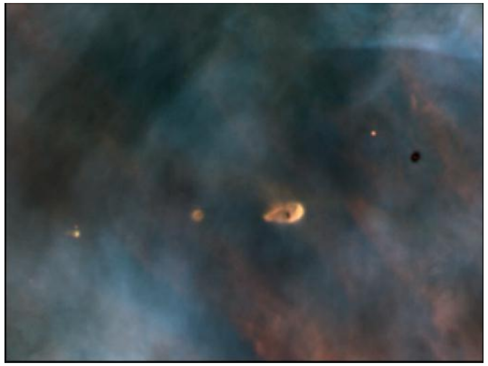
Laplace

- La idea detrás de esta hipótesis no se debe sólo a Laplace; ya fue propuesta antes en una forma menos elaborada por Emanuel Swedenborg e Immanuel Kant. En cualquier caso Laplace desarrolló la idea cuyos detalles técnicos plasmó en su gran obra *Traite de Mécanique Céleste* (5 volúmenes publicados entre 1799 y 1825). Esta obra es la culminación del punto de vista newtoniano sobre la gravitación.

- De hecho, en ella Laplace mostró que el Sistema Solar era estable bajo la acción de pequeñas perturbaciones. Su trabajo demostraba la no necesidad de intervención divina en la formación y estabilidad del Sistema Solar. Se dice que Napoleón le comentó este hecho y Laplace le respondió: *No necesito introducir dicha hipótesis*.

- Esta imágen genérica de Laplace es la que actualmente aceptamos como la teoría más viable para explicar la formación del Sistema Solar. En su versión más moderna se conoce como la *hipótesis nebular*.

- Esta hipótesis sostiene que el Sistema Solar se formó a partir del colapso gravitacional de un fragmento de nube molecular gigante (de varios años luz de diámetro probablemente). Estudios recientes apuntan a que cierto número de explosiones de supernovas ocurrieron cerca de esta nube molecular. Las ondas de choque procedentes de estas supernovas iniciaron la formación del Sistema Solar al crear fluctuaciones en la densidad dentro de la nube, con el consiguiente colapso de las regiones de mayor densidad. Una de estas regiones de gas en colapso (llamadas nubes presolares) formaría lo que más tarde sería el Sistema Solar.



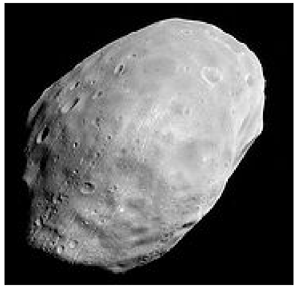
Disco protoplanetario en la Nube de Orión

- Debido a la conservación del momento angular, la nube presolar gira más rápido conforme colapsa. El material dentro de la nube comienza a condensar, lo que incrementa la frecuencia de colisión de las partículas, convirtiendo energía cinética en calor. De esta manera, la zona central en la que se acumula la mayor parte de la masa se calienta mucho más que la región circundante.

- La competición entre la gravedad, la presión del gas, los campos magnéticos y la rotación da lugar a la contracción de la nube en un disco protoplanetario de unas 200 Unidades Astronómicas de diámetro y forma una protoestrella densa y caliente en el centro. En un período de 50 millones de años, la temperatura y la densidad en el núcleo de la protoestrella aumentan de manera sostenida hasta que el hidrógeno comienza a fusionarse, lo que marca la entrada del Sol en su primera fase de existencia, la *secuencia principal*.

- Los diferentes planetas se forman entonces a partir del disco protoplanetario remanente que orbita alrededor del Sol recién formado, a través de un mecanismo conocido como *acreción*. Las partículas del gas colisionan entre sí de manera inelástica formando agregados cada vez mayores. En cuanto alcanzan tamaños suficientemente grandes, su atracción gravitatoria favorece su acumulación, dando lugar a objetos con un de tamaño que ronda los 5 Km de diámetro que se denominan *planetesimales*. Éstos incrementan gradualmente su tamaño con más colisiones, creciendo a un ritmo de varios centímetros al año a lo largo de varios millones de años. Los cometas y los asteroides se cree que son planetesimales sobrantes durante la formación del Sistema Solar.

- La zona interior del Sistema Solar en formación está demasiado caliente para que moléculas volátiles tales como las de agua o metano condensen, de manera que los planetesimales formados en esta región sólo pueden estar compuestos de elementos con puntos de fusión altos (como metales y silicatos). Estos cuerpos rocosos darán lugar a los planetas terrestres (Mercurio, Venus, la Tierra y Marte). Los compuestos que los forman son poco abundantes en la nube molecular inicial ($\sim 0{,}6\,\%$), por lo que los planetas terrestres no pueden crecer demasiado.



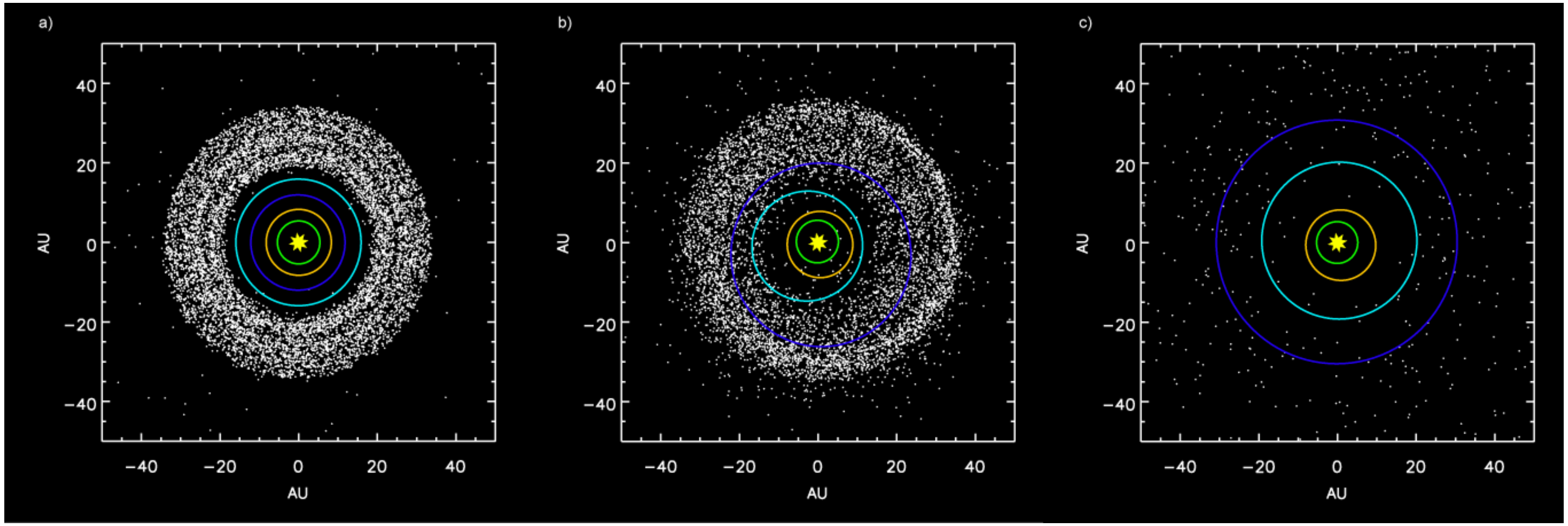
Fobos, planetesimal remanente de la formación del Sistema Solar

- Por otra parte, los planetas gaseosos gigantes (Júpiter, Saturno, Urano y Neptuno) se forman más lejos, más allá de la *línea de congelación* (el punto entre las órbitas de Marte y Júpiter donde el material está lo suficientemente frío como para que los compuestos volátiles congelados permanezcan en estado sólido). Estos materiales helados son mucho más abundantes que los metales y silicatos de los planetas terrestres, lo que permite que los planeta Jovianos crezcan lo suficiente como para capturar hidrógeno y helio, los elementos más ligeros y abundantes.

- Así, los planetesimales más allá de la línea de congelación pueden acumular hasta 4 veces la masa de la Tierra en 3 millones de años, y hoy en día los cuatro gigantes gaseosos acumulan el 99 % de la masa total del Sistema Solar.

- La formación como tal del Sistema Solar termina cuando, después de varios millones de años (entre 3 y 10), los vientos solares de la joven estrella central han barrido todo el gas y el polvo sobrantes del disco protoplanetario, dispersándolos por el espacio interestelar.

- El futuro del sistema solar puede ser estudiado a partir de simulaciones numéricas exhaustivas. Como ejemplo, se puede consultar el artículo de J. Sackmann, A.I. Boothroyd y K. Kraemer *Our Sun. III. Present and Future*



Simulación de los planetas exteriores y el cinturón de Kuiper, antes, durante y después de un salto orbital de Neptuno que produjo un bombardeo masivo en el resto de planetas

en The Astrophysical Journal **418** 457-468 (1993). Allí se nos relata como el Sol se convertirá en gigante roja, y despué de varios episodios de inestabilidad y pérdida de masa, acabará su vida como enana blanca.

- La evolución de las galaxias se parece a la de un sistema solar pero en unas escalas superiores en espacio y tiempo y con dos ingredientes relevantes: la existencia de un agujero negro supermasivo en sus centros y la relevancia de las interacciones gravitatorias entre sistemas solares.

2. Modelo Básico

- Nuestro sistema está compuesto por N cuerpos que incluyen al Sol o a un agujero negro. Los cuerpos no tienen estructura interna (discos) y están caracterizados por su masa (m_i) y su radio (R_i). La única interacción presente entre los cuerpos es la gravedad y, si hay colisiones entre los cuerpos. Por simplicidad asumimos que el movimiento de los cuerpos se realiza en un plano.

- La ecuación de evolución del cuerpo i es:

$$m_i \frac{d^2 \boldsymbol{r}_i}{dt^2} = -G m_i \sum_{j \neq i} \frac{m_j (\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|^3} \tag{1}$$

- Existen métodos muy precisos para resolver numéricamente este conjunto de N ecuaciones diferenciales. Sin embargo, resultan muy costosos computacionalmete, en especial cuando N es muy grande. En estos casos, uno puede renunciar en parte a la precisión del cálculo de cada una de las trayectorias de las partículas por la rápidez del cálculo. Este hecho, *per se*, justifica el uso de algoritmos simplificados. El uso de estos algoritmos simplificados sólo tendrá sentido cuando nos interesen propiedades globales o macroscópicas del sistema, puesto que en ese caso lo que importa no es el detalle del camino seguido sino sus propiedades promedio.

- En cualquier caso, el algoritmo utilizado debe cumplir ciertas propiedades de estabilidad. Por ejemplo, si la dinámica conserva la energía y el momento angular, es importante y necesario que el algoritmo sea diseñado para que los conserve.

- Desde el punto de vista computacional los algoritmos más eficaces son los llamados algoritmos de *un paso*, esto es, dadas las posiciones y momentos de la partículas en un instante dado, podemos a partir de ellas calcular sus respectivas posiciones y momentos en un paso posterior.

- Veamos cómo construir uno de estos algoritmos, el llamado *algoritmo de Verlet en velocidad*. Este algoritmo se basa en el desarrollo de Taylor de la posición y velocidad de la partícula,

$$\boldsymbol{r}(t+h) = \boldsymbol{r}(t) + h\frac{d\boldsymbol{r}(t)}{dt} + \frac{h^2}{2}\frac{d^2\boldsymbol{r}(t)}{dt^2} + \mathcal{O}(h^3)\,,$$
$$\boldsymbol{v}(t+h) = \boldsymbol{v}(t) + h\frac{d\boldsymbol{v}(t)}{dt} + \frac{h^2}{2}\frac{d^2\boldsymbol{v}(t)}{dt^2} + \mathcal{O}(h^3)\,,$$

identificamos $\boldsymbol{v}(t) = \frac{d\boldsymbol{r}(t)}{dt}$ y $\boldsymbol{a}(t) = \frac{d\boldsymbol{v}(t)}{dt}$ obteniendo

$$\boldsymbol{r}(t+h) = \boldsymbol{r}(t) + h\boldsymbol{v}(t) + \frac{h^2}{2}\boldsymbol{a}(t) + \mathcal{O}(h^3)\,,$$
$$\boldsymbol{v}(t+h) = \boldsymbol{v}(t) + h\boldsymbol{a}(t) + \frac{h^2}{2}\frac{d\boldsymbol{a}(t)}{dt} + \mathcal{O}(h^3)\,,$$

El algoritmo de Verlet se obtiene al discretizar la derivada de la aceleración y quedarse hasta el orden h^2 en las series de Taylor. Esto es:

$$\frac{d\boldsymbol{a}(t)}{dt} = \frac{\boldsymbol{a}(t+h) - \boldsymbol{a}(t)}{h} + \mathcal{O}(h)\,.$$

y obtenemos

$$\boldsymbol{r}(t+h) = \boldsymbol{r}(t) + h\boldsymbol{v}(t) + \frac{h^2}{2}\boldsymbol{a}(t)\,, \tag{2}$$
$$\boldsymbol{v}(t+h) = \boldsymbol{v}(t) + \frac{h}{2}\left[\boldsymbol{a}(t) + \boldsymbol{a}(t+h)\right]\,. \tag{3}$$

- El Algortimo de Verlet es reversible y conserva (en media) la energía y el momento angular. Sin embargo, es importante notar que esto no significa que cuando introduzcamos el algoritmo en el ordenador se conserven dichas cantidades, puesto que los errores de redondeo se irán acumulando y pueden afectar a dichos valores. El conocimiento en todo momento de su evolución nos dará idea de cuan lejos evolutivamente podemos llegar manteniendo el sentido físico de los resultados.

- La forma óptima de programar el algoritmo es:

(0) Dar una h inicial, $t = 0$, y las posiciones y velocidades de las particulas inicialmente.
(1) Evaluar $\{\boldsymbol{a}_i(t)\}_{i=1}^N$ a partir de la suma de fuerzas que se ejercen sobre cada partícula i.
(2) Evaluar $\{\boldsymbol{r}_i(t+h)\}_{i=1}^N$ y $\{\boldsymbol{w}_i\}_{i=1}^N$ donde $\boldsymbol{w}_i = \boldsymbol{v}_i(t) + \frac{h}{2}\boldsymbol{a}_i(t)$.
(3) Evaluar $\{\boldsymbol{a}_i(t+h)\}_{i=1}^N$ usando las nuevas posiciones, $\{\boldsymbol{r}_i(t+h)\}_{i=1}^N$.
(4) Evaluar $\{\boldsymbol{v}_i(t+h)\}_{i=1}^N$ donde $\boldsymbol{v}_i(t+h) = \boldsymbol{w}_i + \frac{h}{2}\boldsymbol{a}(t+h)$.
(5) $t = t + h$. Ir a (2).

- Como ejercicio, podemos aplicar el algoritmo de Verlet a la resolución del movimiento de un péndulo real, $m\frac{d^2\theta}{dt^2} = -mg\sin\theta$.

- Para aplicar el algoritmo de Verlet en nuestro caso, hemos de tener en cuenta que vamos a trabajar con números muy grandes y muy pequeños simultáneamente (por ejemplo, $G = 6{,}67 \times 10^{-11}\, N\,m^2/Kg^2$ y la masa solar es $M_s = 1{,}99 \times 10^{30}\, Kg$). Por tanto resulta conveniente reescalar las ecuaciones del movimiento.

- En particular, podemos elegir el siguiente reescalamiento:

$$r' = \frac{r}{c} \quad ; \quad t' = \left[\frac{GM_s}{c^3}\right]^{1/2} t \quad ; \quad m' = \frac{m}{M_s}\,,$$

donde elegimos $c = 1{,}496 \times 10^{11}\, m$, que no es más que la distancia entre la tierra y el Sol. En estas unidades, Neptuno se encuentra aproximadamente a 30 unidades c de distancia al Sol, y la unidad temporal t' corresponde a unos 58,1 dias.

- Las ecuaciones del movimiento se convierten ahora en

$$\frac{d^2 \boldsymbol{r'_i}}{dt'^2} = -\sum_{j \neq i} \frac{m'_j(\boldsymbol{r'_i} - \boldsymbol{r'_j})}{|\boldsymbol{r'_i} - \boldsymbol{r'_j}|^3} \tag{4}$$

3. Condiciones iniciales: órbitas

- En la mayoria de los casos querremos dar unas condiciones iniciales a los cuerpos con las que se garantice, a priori, que étos orbiten alrededor de la estrella o agujero negro masivos. Para ello debemos de resolver las ecuaciones del movimiento de una partícula bajo la acción de un campo gravitatorio.

- Las ecuaciones del movimiento para un planeta de masa m que sufre la atracción gravitatoria del Sol (de masa M) son, en 3 dimensiones,

$$m\frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}) \qquad \text{con} \qquad \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}) = -G\frac{Mm}{r^3}\boldsymbol{r}\,,$$

  donde G es la constante de gravitación universal.

- El momento angular se define como $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$, o equivalentemente $L_i = \epsilon_{ijk} r_j p_k$, donde ϵ_{ijk} es el símbolo de Levi-Civita (o de las permutaciones), tal que $\epsilon_{123} = 1$, $\epsilon_{213} = -1$, etc. La conservación del momento angular implica que

$$\frac{d\boldsymbol{L}}{dt} = \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{p} + \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{F} = 0\,.$$

  Las condiciones iniciales fijan entonces $\boldsymbol{L}$, que es perpendicular al plano de movimiento del planeta. Por tanto, tenemos un problema puramente bidimensional.

- El lagrangiano del planeta, $\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2\right) + G\frac{Mm}{r}$, se puede escribir en coordenadas polares como $\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2\right) + G\frac{Mm}{r}$, con lo que las ecuaciones del movimiento quedan

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}}\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = 0 \quad &\Rightarrow \quad m\ddot{r} = -G\frac{Mm}{r^2} + \frac{l^2}{mr^3}\,, \\
\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}}\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta} = 0 \quad &\Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\left(mr^2\dot{\theta}\right) = 0\,.
\end{aligned}
$$

- La solución de la segunda ecuación es trivial, $mr^2\dot{\theta} = l = \text{cte}$. Es importante notar que parametrizar nuestro problema en función del tiempo, $(r(t), \theta(t))$, es equivalente a parametrizarlo en función del ángulo θ, $(r(\theta), t(\theta))$, pues ambas descripciones se relacionan trivialmente usando la segunda ecuación. Así, podemos reescribir la primera ecuación en función de θ,

$$
\left(\frac{d}{dt} = \frac{d\theta}{dt}\frac{d}{d\theta} = \frac{l}{mr^2}\frac{d}{d\theta}\right) \qquad \Rightarrow \qquad \frac{l}{r^2}\frac{d}{d\theta}\left(\frac{l}{mr^2}\frac{dr}{d\theta}\right) - \frac{l^2}{mr^3} = -G\frac{Mm}{r^2}\,.
$$

Si ahora hacemos primero un cambio de variable $u = 1/r$, que lleva a,

$$
\frac{d^2u}{d\theta^2} + u = G\frac{Mm^2}{l^2}
$$

y definimos una nueva variable y tal que $u = y + G\frac{Mm^2}{l^2}$, obtenemos la siguiente ecuación diferencial

$$
\frac{d^2y}{d\theta^2} + y = 0\,,
$$

que es la ecuación diferencial de un movimiento armónico simple. Deshaciendo los cambios obtenemos la solución ,

$$
\frac{1}{r} = G\frac{Mm^2}{l^2}\left[1 + \varepsilon\cos(\theta - \theta')\right]\,,
$$

donde $\varepsilon \geq 0$ y θ' son constantes que dependen de las condiciones iniciales.

- En particular, ε se puede relacionar con la energía total del sistema, E, que también es una magnitud conservada. Resulta sencillo demostrar que
$$\varepsilon = \sqrt{1 + \frac{2El^2}{G^2M^2m^3}}\,.$$

- La solución obtenida es una curva cónica genérica:
  - $\varepsilon = 0$: Circunferencia
  - $\varepsilon < 1$: Elipse
  - $\varepsilon = 1$: Parábola
  - $\varepsilon > 1$: Hipérbola

- Finalmente, dejamos como ejercicio dibujar para valores diferentes de ε la curva (x, y): $r = 1/(1 + \varepsilon \cos\theta)$, $x = r\cos\theta$, $y = r\sin\theta$.

4. Problemas

Obligatorio: Simular la Dinámica del Sistema Solar (1p)

- Diseñar y escribir el programa que simula el comportamiento del Sistema Solar. Usando datos reales para la excentricidad de las órbitas, las distancias y las masas de los diferentes planetas, podemos dar una condición inicial realista para el Sistema Solar y así estudiar su dinámica y estabilidad frente a perturbaciones. Incluir todas las interacciones gravitatorias entre los planetas.

Comprobar la validez de la simulación midiendo los períodos de rotación de los diferentes planetas y comparándolos con los reales. Mostrar la órbita relativa respecto a la Tierra del resto de planetas, en función del tiempo.

Voluntario A: Formación de los planetas a partir de planetesimales

- Partimos de la condición inicial de un sol masivo y un gran número de pequeños cuerpos orbitando alrededor de éste con diferentes energías y excentricidades. Hay dos tipos de cuerpos: rocosos (el 10 % del total) y gaseosos (el 90 % restante). Todos los cuerpos tienen inicialmente la misma masa y radio (usar la densidad media del sistema solar). Despreciaremos la interacción gravitatoria entre los planetesimales y solo consideraremos la interacción de éstos con el Sol. La formación de planetas se va realizando mediante la colisión entre los planetesimales siguiendo estas reglas: (a) dos cuerpos rocosos interaccionan mediante choques totalmente inelásticos cuyo resultado es un nuevo planetesimal con una masa que es la suma de las masas iniciales y un nuevo radio. (b) los cuerpos gasesos solo interaccionan cuando se encuentran a una distancia del Sol mayor que cierto valor (por ejemplo la distancia al cinturon de asteroides en el Sistema Solar) y en ese caso lo hacen como los cuerpos rocosos.

  Dada una distribución inicial de planetesimales el sistema evoluciona hasta que solo quedan unos pocos planetas masivos. Realizar al menos 10^4 simulaciones con distintas condiciones iniciales para los planetesimales y hacer, como mínimo, el siguiente análisis:

  - Estudiar la distribución de tamaños de los planetas finales. Cual es el tamaño medio?
  - Dividir los tamaños en cuatro clases: pequeños, medianos, grandes y muy grandes. Estudiar las propiedades medias de las órbitas en cada una de las clases: distancia media al Sol, excentricidad, periodo,...
  - Puesto que la colisión entre planetesimales es inelástica, parte de su energía cinética antes de su colisión se convierte en calor. Mientras que en ese mismo proceso las energías caloríficas que tenían se suman. Seguir la pista de esas energías y obtener las energías internas medias para cada una de las cuatro clases de planetas.

- Notar que la agregación de materia se produce mediante colisiones totalmente inelásticas. Así, el algoritmo de colisión entre las partículas i y j lo definimos de la siguiente manera:

  (0) Dados $\boldsymbol{r}_i(t)$, $\boldsymbol{v}_i(t)$, $\boldsymbol{r}_j(t)$ y $\boldsymbol{v}_j(t)$, iteramos:

  (1) $t = t + h$

  (2) Evaluar $\boldsymbol{r}_i(t)$, $\boldsymbol{v}_i(t)$, $\boldsymbol{r}_j(t)$ y $\boldsymbol{v}_j(t)$.

  (3) Si $|\boldsymbol{r}_i(t) - \boldsymbol{r}_j(t)| > R_i + R_j$, ir a (1).

  (4) En caso contrario, hay colisión: $\boldsymbol{v}_i = (m_i\boldsymbol{v}_i + m_j\boldsymbol{v}_j)/(m_i + m_j)$. Desaparece la partícula j. $R_i' = R_i[(m_i + m_j)/m_i]^{1/3}$ y $m_i = m_i + m_j$.

  (5) Ir a (1).

  donde R_i es el radio del planetesimal i.

- Cabe destacar que al introducir el choque inelástico, la energía cinética no se conserva, generándose calor en el proceso. Por tanto, este calor disipado hay que tenerlo en cuenta si queremos utilizar la energía total del sistema para controlar los errores de redondeo.

Voluntario B: Formación de los planetas a partir de planetesimales

- Igual que el voluntario A pero con una estrella binaria en el centro dando vueltas con una velocidad angular ω y un radio de giro dados. Además del análisis mínimo idéntico al del voluntario A, estudiar el efecto que tiene ω en la distribución de planetas final.

Voluntario C: Formación de las galaxias a partir de sistemas solares

- Partimos de la condición inicial de un agujero negro masivo y un gran número de pequeños cuerpos (sistemas solares) orbitando alrededor de éste con diferentes energías y excentricidades. Buscar en la literatura la masa estimada del agujero negro masivo de nuestra galaxia y la masa de nuestro sistema solar. En este caso tendremos en cuenta la interacción gravitatoria entre los cuerpos y de éstos con el agujero negro pero para que el programa sea eficiente computacionalmente solo se tendran en cuenta la interacción gravitatoria entre sistemas solares cercanos. Los sistemas solares interaccionan mediante choques totalmente elásticos. En caso de que un sistema solar sea absorbido por al agujero negro central, se generará aleatoriamente otro en la frontera con órbita cerrada. Dada una distribución inicial de cuerpos el sistema evoluciona hasta que se mantiene un estado estacionario. Una vez llegado al estado estacionario, realizar '10^4 mediciones separadas suficientemente en el tiempo y hacer, como mínimo, el siguiente análisis:

  - Estudiar la evolución temporal de diversos observables para comprobar que el sistema se encuentra en un estado estacionario.
  - Estudiar la distribución radial media de la densidad de masa.
  - Estudiar el momento de inercia medio.
  - Calcular el flujo medio de masa absorbido por el agujero negro.