Física Computacional

3^{er} curso Licenciatura de Físicas

Lección 2. Pasado y Futuro del Sistema Solar: Una introduccin a la Dinmica Molecular

1. Introducción.

Hace 200 años, Pierre Simon, Marqués de Laplace comenzó a pensar sobre el origen del sistema solar. Su hipótesis fué 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 incasdencente girando alrededor de un eje. Según se iba enfriando, el gas se iba contrayendo lo que originaba un rotación más rápida debido a la conservación del momento angular. En algun momento la parte exterior del gas se separó formando anillos que posteriormente condensaron para formar planetas. La parte interior se condensó en un sólo cuerpo: el sol. La idea detrás de esta hipótesis no fue del todo de Laplace, ya fue propuesta antes en una forma menos elaborada por Thomas Wright e Immanuel Kant. En cualquier caso Laplace elaboró formalmente la idea cuyos detalles técnicos se encuentran en su gran obra *Mécanique céleste* 1799−1825 (5 volúmenes). Esta obra se piensa que es la culminación del punto de vista newtoniano sobre la gravitación. De hecho, Laplace mostró que el sistema solar era estable bajo la acción de pequeñas perturbaciones. Su trabajo mostraba 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 que explica la formación del sistema solar. Sin embargo, Laplace no consiguió explicar con precisión como a partir de discos de gas se podían formar planetas. Hoy sabemos lo que pudo ocurrir para la formación de los planetas: las partículas del gas comenzaron a colisionar entre si formando partículas cada vez mayores. En cuanto alcanzaron tamaños suficientemente grandes, su atracción gravitatoria favoreció su acumulación. Esos objetos se denominan *planetesimales*. Los cometas y los asteroides se cree que son planetesimales sobrantes durante la formación del sistema solar. En una última etapa, los planetesimales se fueron uniendo para formar los planetas.

Podemos finalmente resumir la teoría actual sobre la formación del sol y de los planetas:

- 1. Inicialmente existe una nube de Hidrógeno y Helio girando alrededor de un eje.
- 2. El gas comienza a contraerse debido a la fuerza de la gravedad.
- 3. La nube forma un disco. Las partículas tienden a dirigirse hacia el centro formando un proto-sol.
- 4. Debido a la rotación, algo de polvo y gas orbita alrededor del centro del protosol como un disco plano.
- 5. El proto-sol colapsa, la temperatura se incrementa hasta que los átomos de Hidrógeno comienzan a fusionarse.

- 6. Los proto-planetas comienzan a formarse a partir del polvo y gas que se encuentra orbitando el proto-sol.
- 7. El sistema solar se va vaciando de escombros.
- 8. Se separan los elementos sólidos de los gaseosos: los elementos gaseosos fueron expulsados de los planetas interiores por el viento solar.
- 9. Diferenciación: se separan los elementos pesados de los ligeros. Los elementos pesados (Fe, Ni) se depositan en los centros de los planetas, los elementos ligeros (Al, Si, Mg, Na, K, Ca) se sitúan el la corteza y manto.

El futuro del sistema solar puede ser estudiado a partir de simulaciones numéricas exhaustivas. Como ejemplo ver el artículo de J. Sackmann, A.I. Boothroyd y K. Kraemer *Our Sun. III. Present and Future* in The Astrophysical Journal 418 457-468 (1993). Allí se nos realata 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.

Problemas:

- *Obligatorio:* Diseñar y escribir el programa que simula el comportamiento del sistema solar. Supondremos sólo la existencia del Sol y los nueve planetas. Suponer que el movimiento planetario se realiza en un plano. Usar datos reales de excentricidad de las órbitas, masas y distancias.
- *Voluntario (1):* 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. Los pequeños planetesimales interaccionan entre si gravitatoriamente. La formación de planetas se va realizando mediante choques totalmente inelásticos entre planetesimales. Dada una condición inicial de planetesimales, estudiar la distribución de tamaños de los planetas finales. 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 de la distribución de planetas finales. Comparar las propiedades obtenidas con las del sistema solar en la actualidad.

- *Voluntario (2):* **Futuro del sistemas solar. A partir de las condiciones iniciales actuales (posición, velocidad y excentricidad de la órbita) de los planetas, estudiar su comportamiento futuro sabiendo que el Sol irá sufriendo cambios estructurales, asi realizar la simulación siguiendo el siguiente proceso:**
  - *Secuencia Principal:* **Dejar evolucionar la condición inicial un tiempo (para que se ajusten las órbitas). La masa del Sol es $M = 1$ y su radio $R = 1$ (en unidades apropiadas).**
  - *Se va consumiendo el Hidrógeno:* **Cambiar la masa y el radio del Sol a $M = 1$, $R = 1.575$. Dejar evolucionar para que se ajusten las órbitas.**
  - *Se va consumiendo el Hidrógeno:* **Cambiar la masa y el**

radio del Sol a $M = 0.9998$, $R = 2.3$. Dejar evolucionar para que se ajusten las órbitas.

- *Se va consumiendo el Hidrógeno:* **Cambiar la masa y el radio del Sol a $M = 0.9935$, $R = 9.5$. Dejar evolucionar para que se ajusten las órbitas.**
- *Ignición del Helio:* **Cambiar la masa y el radio del Sol a $M = 0.7249$, $R = 166$. Dejar evolucionar para que se ajusten las órbitas.**
- *Se acaba el Helio del núcleo:* **Cambiar la masa y el radio del Sol a $M = 0.708$, $R = 20$. Dejar evolucionar para que se ajusten las órbitas.**
- *Pulsos inestable de la corteza de Helio:* **Cambiar la masa y el radio del Sol a $M = 0.591$, $R = 100$. Dejar evolucionar para que se ajusten las órbitas.**
- *Enana Blanca:* **Cambiar la masa y el radio del Sol a $M = 0.54137$, $R = 0.058$. Dejar evolucionar para que se ajusten las órbitas.**

Recordatorio: Movimiento de una partícula bajo la acción de Fuerzas Centrales

- **Ecuaciones del movimiento en 3 dimensiones:**

$$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \vec{F}(\vec{r})$$

$$\vec{F}(\vec{r}) = -G\frac{Mm}{r^3}\vec{r}$$

- **Conservación del Momento Angular:**

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

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

$$L_i = \epsilon_{ijk} r_j p_k \quad , \quad \epsilon_{123} = 1 \quad , \quad \epsilon_{213} = -1 \quad \ldots$$

- **Las condiciones iniciales fijan $\vec{L}$ que es perpendicular al plano donde se realiza el movimiento de la partícula:**

- **ES UN PROBLEMA BIDIMENSIONAL**

- **Lagrangiano:**

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2\right) + G\frac{Mm}{r}$$

- **Lagrangiano en polares:**

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2\right) + G\frac{Mm}{r}$$

- **Ecuaciones del movimiento en polares:**

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{r}}\right) - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial r} = 0 \Rightarrow m\ddot{r} = -G\frac{Mm}{r^2} + \frac{l^2}{mr^3}$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}}\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt}\left(mr^2\dot{\theta}\right) = 0$$

- **Solución a la segunda ecuación:**

$$mr^2\dot{\theta} = l = cte$$

- **OBSERVAR: Parametrizar nuestro problema con t, $(r(t), \theta(t))$ es equivalente a parametrizarlo con θ, $(r(\theta), t(\theta))$, pues ambas descripciones se relacionan trivialmente por la segunda ecuación.**

- **Reescribimos la primera ecuación en función de θ:**

$$\frac{d}{dt} = \frac{d\theta}{dt}\frac{d}{d\theta} = \frac{l}{mr^2}\frac{d}{d\theta}$$

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

- **Hacemos dos cambios de variables:**
  - $u = 1/r$

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

  - $u = y + G\frac{Mm^2}{l^2}$

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

- **SOLUCION:**

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

donde $\varepsilon \geq 0$ y θ' se fijan por las condiciones iniciales.

- ε **se puede relacionar con la Energía Total del sistema que también es una magnitud conservada. Demostrar que**

$$\varepsilon = \sqrt{1 + \frac{2El^2}{G^2M^2m^3}}$$

- **La solución es una CONICA GENERICA:**
  - $\varepsilon = 0$: **Circunferencia**
  - $\varepsilon < 1$: **Elipse**
  - $\varepsilon = 1$: **Parábola**
  - $\varepsilon > 1$: **Hipérbola**
- **Dibujar** (x, y): $r = 1/(1 + \varepsilon \cos\theta)$, $x = r\cos\theta$, $y = r\sin\theta$.

Modelo y método numérico:

- **Nuestro sistema se compone de N discos de diferentes masas m_i $i = 1, N$. Los cuerpos interaccionan entre si mediante fuerzas gravitatorias newtonianas.**
- **La ecuación de evolución del cuerpo i es:**

$$m_i \frac{d^2 \underline{r_i}}{dt^2} = -G m_i \sum_{j \neq i} \frac{m_j(\underline{r_i} - \underline{r_j})}{|\underline{r_i} - \underline{r_j}|^3} \tag{1}$$

- **Hay algoritmos de resolución de ecuaciones diferenciales muy precisos pero muy costosos computacionalmente (sobre todo cuando hay que resolver un gran número de ecuaciones diferenciales.**
- **En estos casos, uno puede renunciar 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 dichos 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 de tener 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 como construir uno de estos algoritmos, el llamado *algoritmo de Verlet*.**

- **Este algoritmo se basa en la discretización más obvia de las primeras y segundas derivadas, esto es:**

$$\frac{du}{dt} = \lim_{h\to 0}\frac{u(t+h)-u(t-h)}{2h} \to \frac{u(t+h)-u(t-h)}{2h}$$
$$\frac{d^2u}{dt^2} = \lim_{h\to 0}\frac{u(t+h)-2u(t)+u(t-h)}{h^2} \to \frac{u(t+h)-2u(t)+u(t-h)}{h^2}$$

donde h es el intervalo temporal del algoritmo.

- **De esta forma la ecuación del movimiento queda**

$$\underline{r_i}(t+h) = 2\underline{r_i}(t) + \underline{r_i}(t-h) + \underline{F}(t)h^2 \tag{2}$$

donde

$$\underline{F}(t) = G\sum_{j\neq i}\frac{m_j(\underline{r_i}(t)-\underline{r_j}(t))}{|\underline{r_i}(t)-\underline{r_j}(t)|^3} \tag{3}$$

- **Observamos que el algoritmo es de dos pasos, necesitamos conocer $\underline{r}(t-h)$ y $\underline{r}(t)$ para calcular $\underline{r}(t+h)$. Sin embargo, esta deficiencia es subsanable si introducimos las velocidades de las partículas en el algoritmo.**

- **Sabemos que**

$$\underline{v_i}(t) = \frac{\underline{r_i}(t+h)-\underline{r_i}(t-h)}{2h} \tag{4}$$

asi,

$$\underline{r_i}(t-h) = \underline{r_i}(t+h) - 2h\underline{v_i}(t) \tag{5}$$

Sustituyendo esta ecuación en (2) obtenemos:

$$\underline{r_i}(t+h) = \underline{r_i}(t) + h\underline{v_i}(t) + \frac{1}{2}h^2\underline{F}(t) \tag{6}$$

- **Ahora necesitamos conocer también la evolución de las velocidades lo cual obtenemos de su discretización:**

$$\begin{aligned} \underline{v_i}(t+h) &= \frac{\underline{r_i}(t+2h) - \underline{r_i}(t)}{2h} \\ &= \frac{1}{2}\big(\underline{v_i}(t) + \underline{v_i}(t+h)\big) + \frac{1}{4}h\left(\underline{F}(t+h) + \underline{F}(t)\right) \end{aligned} \tag{7}$$

  donde hemos hecho uso de la invariancia temporal de las ecuaciones y hemos utilizado (2) con el argumento $t + 2h$ y (6) con el argumento $t + h$.

- **Asi obtenemos:**

$$\underline{v_i}(t+h) = \underline{v_i}(t) + \frac{1}{2}h\left(\underline{F}(t+h) + \underline{F}(t)\right) \tag{8}$$

- **El algoritmo de Verlet de un solo paso queda totalmente definido por las ecuaciones (6) y (8). Este algoritmo conserva la energía y el momento angular de nuestro sistema.**

- **Notar que esto no quiere decir que cuando introduzcamos el algoritmo en el ordenador se conserven dichas cantidades puesto que los errores de redondeo se irán acumulando y afectarán a dichos valores. Sin embargo, el conocimiento en todo momento de su evolución nos dará idea de cuan lejos evolutivamente podemos llegar manteniendo el sentido físico de los resultados.**

- **En resumen, el algoritmo de Verlet es:**
  - *(0)* **Dar una** h **inicial,** $t = 0$**, y las posiciones y velocidades de las particulas inicialmente.**
  - *(1)* **Evaluar** $\underline{F}(t)$**.**
  - *(2)* **Evaluar** $\underline{r}(t+h)$ **y** $\underline{w} = \underline{v}(t) + h\underline{F}(t)/2$**.**
  - *(3)* **Evaluar** $\underline{F}(t+h)$**.**
  - *(4)* **Evaluar** $\underline{v}(t+h) = \underline{w} + h\underline{F}(t+h)/2$**.**
  - *(5)* $t = t + h$**. Ir a** *(2)*.
- **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 ($G = 6.67 \times 10^{-11}$ y la Masa solar es $M_s = 1.99 \times 10^30$). Esto nos hace pensar que va a ser conveniente reescalar las ecuaciones del movimiento. En particular, se puede elegir la siguiente reescala:

$$\begin{aligned} r' &= \frac{r}{c} \\ t' &= \left[\frac{GM_s}{c^3}\right]^{1/2} t \\ m' &= \frac{m}{M_s} \end{aligned} \tag{9}$$

donde elegimos $c = 1.496 \times 10^{11}$ 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. Observamos que una unidad t' corresponden a unos 58.1 dias. En estas unidades, las ecuaciones del movimiento dadas por (1) se convierten en:

$$\frac{d^2 \underline{r'_i}}{dt'^2} = -\sum_{j \neq i} \frac{m'_j(\underline{r'_i} - \underline{r'_j})}{|\underline{r'_i} - \underline{r'_j}|^3} \tag{10}$$

Para el caso del problema de la formación de los planetas a partir de los planetesimales suponemos que la agregación de materia se produce mediante colisiones totalmente inelásticas. Asi, el algoritmo de colisión entre las partículas i y j lo elegimos:

– *(0)* **Dados** $\underline{r_i}(t)$**,** $\underline{v_i}(t)$**,** $\underline{r_j}(t)$ **y** $\underline{v_j}(t)$**.**

– *(1)* $t = t + h$

– *(2)* **Evaluar** $\underline{r_i}(t)$**,** $\underline{v_i}(t)$**,** $\underline{r_j}(t)$ **y** $\underline{v_j}(t)$**.**

– *(3)* **Si** $|\underline{r_i}(t) - \underline{r_j}(t)| > R_i + R_j$ **entonces ir a** *(1)***.**

– *(4)* **Hay colisión:** $\underline{v_i} = (m_i\underline{v_i}+m_j\underline{v_j})/(m_i+m_j)$**. 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)***.**

Notar que al introducir el choque inelástico, la energía cinética no se conserva generándose calor en el proceso. Esto hay que tenerlo en cuenta si queremos utilizar la energía total del sistema para controlar los errores de redondeo.