

Exercício 04: Dinâmica Molecular

Victor Sultanum Calazans Santos*

Este estudo consistiu na simulação da dinâmica de aglomerados de estrelas e suas respectivas dissoluções. Foi considerado um sistema binário e sistemas de 10, 100 e 500 estrelas, e por último um sistema de 100 estrelas empregando distribuições avançadas para a posição, velocidade e massa.

I. INTRODUÇÃO

A. Teoria

Devido às forças gravíticas, nuvens de gás no espaço formam aglomerados de estrelas. A força gravítica também mantém o aglomerado unido, fazendo com que as estrelas fiquem, em geral, atraídas na direção do centro de massa.

Contudo, algumas estrelas podem alcançar velocidades de escape e sair do sistema, diminuindo a massa total do aglomerado e, com ela, a força de atração que mantém os corpos unidos. Assim, as restantes estrelas podem se afastar mais facilmente do sistema, acelerando o processo.

Neste projeto, foram simulados sistemas de 2, 10, 100 e 500 estrelas, com parâmetros iniciais de posição, velocidade e massa obtidos de diferentes maneiras. Estes diferentes métodos têm, em comum, o uso do algoritmo elucidado na subseção que se segue.

B. Algoritmo

Todas as simulações aqui documentadas empregam alguma versão do seguinte algoritmo, escrito em C++ (utilizando sempre `rand(777)` e `srand(777)`):

- definir condições iniciais
- para N iterações:
 - \forall corpo i :
 - * $\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2$
 - * $\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v} + \vec{a}(t)\Delta t$
 - * \forall corpo $j \neq i$:
 - $\vec{a}_i(t) += \left| G \frac{m_j}{d^2} \right| \frac{\vec{r}_j - \vec{r}_i}{d}$
- obter quantidades de interesse

II. ESTUDO DE UM SISTEMA BINÁRIO

Inicialmente, considerou-se um sistema de duas estrelas, com a seguinte configuração

estrela	$r(\text{pc})$	$v(\text{km/s})$	$m(M_\odot)$
1	(-1,0,0)	(0,0.02,0)	1
2	(1,0,0)	(0,-0.02,0)	1

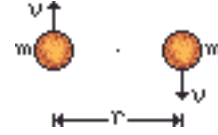


Figura 1. Sistema binário de estrelas com massas iguais de $1(M_\odot)$, distância de 2pc, e velocidades iniciais de 0.02km/s, com direções iguais e sentidos opostos.

Utilizando o algoritmo exposto previamente, com passo $\Delta t = 10^4$ anos para um total de 10^7 anos, foram então obtidos os gráficos da energia cinética, energia potencial e energia mecânica em função do tempo para este sistema. A apuração pode ser vista na Figura 2. O pico de energia cinética e o correspondente vale de energia potencial fortemente sugerem que os corpos se cruzam, atingindo um pico de velocidade no instante do cruzamento, e passando por uma diminuição gradual da velocidade devido à atração gravítica produzida pelo outro corpo. No instante do cruzamento, r tem um valor muito baixo, pelo que se pode observar um leve erro oriundo do arredondamento numérico. Salvo esta peculiaridade, pela curva da energia mecânica podemos concluir que a energia neste sistema é, em geral, conservada.

III. ESTUDO DOS SISTEMAS DE 10, 100 E 500 ESTRELAS

Dispondo dos dados fornecidos em ficheiros para as condições iniciais, foram simulados os sistemas S_{10} , S_{100} e S_{500} de 10, 100 e 500 estrelas respectivamente, com passo $\Delta t = 10^5$ anos para um total de 10^7 anos. Desta vez, a quantidade de interesse é a *fração de estrelas com distância menor que $r_t = 5\text{pc}$ do centro do aglomerado*, a cada instante t . Nitidamente, esta é uma medida da dissolução de um aglomerado estelar. O gráfico para cada sistema pode ser visto na Figura 3.

* fc57017@alunos.fc.ul.pt

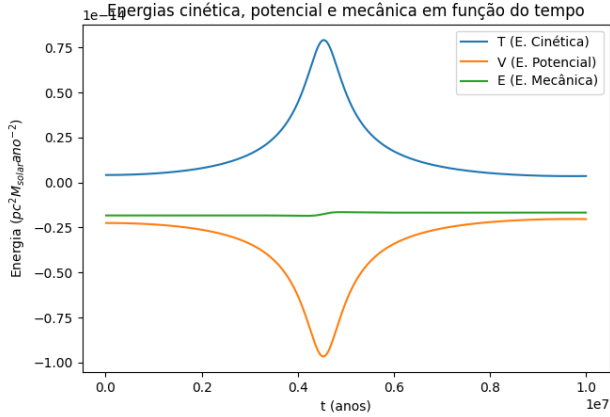


Figura 2. Gráficos da energia cinética, energia potencial e energia mecânica em função do tempo, para o sistema binário de estrelas em questão, com passo de tempo $\Delta t = 10^4$ anos para um total de 10^7 anos.

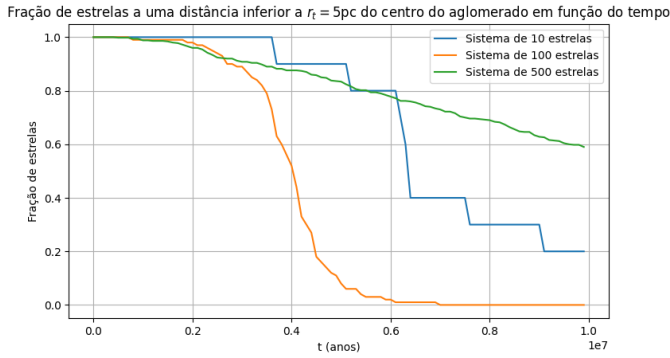


Figura 3. Gráfico da fração de estrelas com distância menor que $r_t = 5\text{pc}$ do centro do aglomerado, em função do tempo t , para os sistemas de 10, 100 e 500 estrelas, com passo de tempo $\Delta t = 10^5$ anos para um total de 10^7 anos.

S_{500} tem a dissolução mais lenta dos três. Isto provavelmente se deve à maior atração gravitacional devido ao elevado número de corpos, mantendo as estrelas mais vigorosamente ligadas ao centro. S_{100} tem menos estrelas e, portanto, tem uma dissolução mais rápida. Mas no caso de S_{10} , claramente as estrelas estão numa configuração mais estável que S_{100} . À vista disso, S_{10} acaba assumindo uma dissolução de velocidade mediana.

IV. SISTEMA DE 100 ESTRELAS COM GERAÇÃO DA CONFIGURAÇÃO INICIAL DO AGREGADO ESTELAR

Finalmente, foi feita uma simulação de 100 estrelas, mas desta vez com parâmetros iniciais mais realistas.

Mais especificamente, as quantidades iniciais foram de-
Média da fração de estrelas a uma distância inferior a $r_t = 5\text{pc}$ do centro do aglomerado

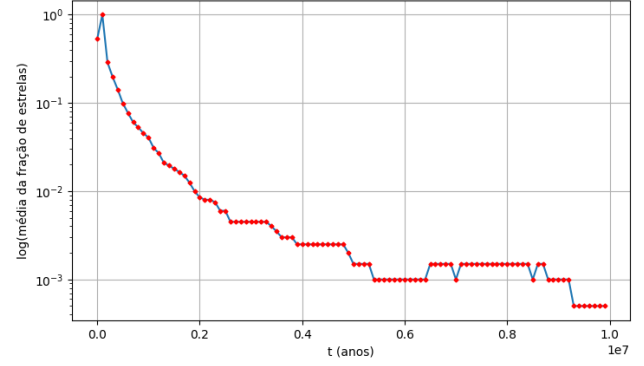


Figura 4. Gráfico do logaritmo da média da fração de estrelas com distância menor que $r_t = 5\text{pc}$ do centro do aglomerado, em função do tempo t , para o sistema de 100 estrelas com quantidades iniciais geradas aleatoriamente, com passo de tempo $\Delta t = 10^5$ anos para um total de 10^7 anos.

terminadas aleatoriamente para cada estrela, seguindo as respectivas distribuições da tabela:

quantidade	distribuição	expressão
m	Kroupa	$\zeta(m) = m^{-\alpha}$
\vec{r}	King	$n(r) = n_0 \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{r}{r_c}\right)^2}} - \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{r_t}{r_c}\right)^2}} \right)$
\vec{v}	Maxwell-Boltzmann	$f(v)d^3v = \left(\frac{1}{\pi v_p^2}\right)^{3/2} e^{-\left(\frac{v}{v_p}\right)^2} d^3v$

Além disso, se fez necessário gerar as posições e velocidades de tal modo que fiquem aleatoriamente distribuídas por uma esfera. Como estamos a lidar com quantidades aleatórias, vale obter uma amostragem suficientemente grande de sistemas. Portanto, esta simulação foi repetida 20 vezes, com passo de 10^5 anos para um total de 10^7 anos. Com isto, calculou-se a média da fração de estrelas cuja distância ao centro do aglomerado é menor que $r_t = 5\text{pc}$ para cada passo de tempo. O gráfico consta na Figura 4, com a média referida em escala logarítmica para facilidade de leitura.

Pela figura, o sistema aparenta começar com cerca de metade das suas estrelas dentro do raio r_t . A posterior evolução do sistema se dá por um breve aumento na quantidade de estrelas próximas do centro (quase 100%), seguida de uma redução ostensiva no tamanho do aglomerado. Ao passar de 4×10^5 anos, apenas 14% das estrelas têm uma distância menor que r_t do centro. Em 5×10^5 anos, este número é reduzido para cerca de 1%.

Uma possível explicação para este comportamento é que, no início da simulação, os corpos são imediatamente atraídos para o centro de massa, o que acarreta numa aceleração altíssima que, por sua vez, acaba atribuindo velocidades de escape para boa parte das estrelas.