

Programación básica

Proyecto 3 Simulaciones de N-Cuerpos.

Máximo 4 personas por equipo

Prof. Alma González

November 26, 2018

El objetivo de este proyecto es resolver la dinámica de N -cuerpos por efecto de la fuerza entre ellos. Esto es utilizado para hacer simulaciones cosmológicas conocidas como N-cuerpos. Este proyecto es una extensión del realizado para el caso de un planeta y el sol. Ahora veremos como se mueven N partículas (de masa igual) debido a la fuerza presente entre ellas. Hay tres opciones a realizar (cada una es un proyecto diferente, así que deben elegir uno).

- Simulación cosmológica. Se usará la fuerza gravitacional y partículas inicialmente distribuidas en forma de malla en una caja cúbica de longitud L (condición inicial).
- Colisión de "galaxias". Se usará la fuerza gravitacional y partículas inicialmente distribuidas en forma de dos esferas separadas a una distancia R (condición inicial).
- Simulación de gases (átomos o moléculas). Se usará la fuerza conocida como Lennard-Jones y partículas inicialmente distribuidas en forma de malla en una caja cúbica de longitud L (condición inicial).

A continuación se darán instrucciones generales que comparten los tres proyectos. Los detalles de cada uno se dan a lo largo de la explicación, donde corresponde, si no se menciona nada es que es igual en cualquier caso.

1 Ecuaciones de movimiento. Ecuaciones a resolver

Sabemos que la partícula j -ésima se moverá de acuerdo a la Segunda Ley de Newton:

$$\vec{F} = m_p \vec{a}_j. \quad (1)$$

Donde m_p , es la masa de una partícula (la misma para todas las partículas), \vec{a}_j es la aceleración y \vec{F} es la fuerza neta que siente dicha partícula. La fuerza neta que siente una partícula debido a la presencia de todas las demás será la suma de la fuerza debida a cada una, i.e.:

$$\vec{F} = \sum_{i \neq j}^N \vec{f}_{ij}, \quad (2)$$

Donde f_{ij} es la fuerza que siente la partícula j -ésima debido a la partícula i -ésima, Nota que la suma es sobre todas las partículas excepto aquella para cual se está calculando la Fuerza neta que siente. La fuerza f_{ij} es diferente si usa la fuerza gravitacional o la fuerza de Lennard-Jones:

Fuerza Gravitacional

$$\vec{f}_{ij} = -\frac{Gm_p m_p}{r^3} \vec{r}_{ij}, \quad (3)$$

donde $G = 4\pi^2 yr^{-2} AU M_{\odot}^{-1}$ es la constante de Gravitación Universal, en unidades de Masas Solares, unidad astronómica y años.

Combinando las ecuaciones 1 y 5 se obtiene la ecuación de movimiento:

$$m_p \ddot{\vec{r}}_i = - \sum_{i \neq j}^N \frac{G m_p m_p \vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3}. \quad (4)$$

Nota que \vec{r} es el vector distancia de la partícula i respecto a un origen elegido.

Lennard-Jones

$$\vec{f}_{ij} = 4\epsilon \left[\frac{12\sigma^{12}}{r_{ij}^{13}} - \frac{6\sigma^6}{r_{ij}^7} \right] \hat{r}_{ij}, \quad (5)$$

donde ϵ es la profundidad del potencial, es la distancia a la que la fuerza entre partículas es cero y r_{ij} es la distancia entre partículas.

Combinando las ecuaciones 1 y 5 se obtiene la ecuación de movimiento:

$$m_p \ddot{\vec{r}}_i = - \sum_{i \neq j}^N \frac{G m_p m_p \vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3}. \quad (6)$$

Método de integración.

Dado que la ecuación 6 es vectorial, podemos separarla en componentes

$$\ddot{x}_i = Fx \quad (7)$$

$$\ddot{y}_i = Fy, \quad (8)$$

$$\ddot{z}_i = Fz, \quad (9)$$

Las ecuaciones diferenciales anteriores, de segundo orden, pueden reescribirse de la forma :

$$\dot{v}_{x,i} = Fx \quad (10)$$

$$\dot{x}_i = v_{x,i} \quad (11)$$

$$\dot{v}_{y,i} = Fy \quad (12)$$

$$\dot{y}_i = v_{y,i} \quad (13)$$

$$\dot{v}_{z,i} = Fz \quad (14)$$

$$\dot{z}_i = v_{z,i} \quad (15)$$

Entonces, resolver la dinámica de las partículas significa resolver las ecuaciones anteriores, para encontrar $x_i(t), y_i(t), z_i(t)$; en el proceso también se calcula $v_{x,i}(t), v_{y,i}(t), v_{z,i}(t)$. Esto se hace para todas las partículas. Es decir se calculan las posiciones y las velocidades de todas las partículas a cada paso de tiempo.

El método óptimo para resolver estas ecuaciones es el método de Leap-frog (similar al método de Euler). Consiste en establecer un conjunto de posiciones

(x_i, y_i, z_i) y velocidades iniciales $(v_{x,i}, v_{y,i}, v_{z,i})$ a un tiempo inicial t , y actualizarlas a un tiempo posterior $t + h$ para obtener las nuevas posiciones y velocidades en el tiempo $t = t + h$, siguiendo la siguiente regla :

$$x_i(t + h) = x_i(t) + h * v_{x,i}(t) + 1/2 * F_x * h^2 \quad (16)$$

$$v_{x,i}(t + h) = v_{x,i}(t) + 1/2 * (F_x(t) + F_x(t + h)) * h \quad (17)$$

donde h es el paso de tiempo. A cada paso de tiempo se remplazan las posiciones y velocidades iniciales por las nuevas, para poder dar un nuevo paso de tiempo. Nota que la regla se ha escrito para las posiciones y velocidades en x , pero se aplica de forma similar para y, z . Consideraremos un paso de tiempo constante y daremos un valor suficientemente pequeño para que la evolución de las partículas precisa (h 0.001 cuando la velocidad está dada en AU/yr). Nota que h es un parámetro con el que se deberán hacer pruebas, hasta obtener un buen resultado.

2 Fronteras periódicas

Para los casos de simulación cosmológica y de fuerza Lennard-Jones, se deben implementar condiciones de frontera periódicas. Esto es que cuando una de las partículas sale del borde de la caja, debemos hacer como si estuviera entrando por la cara opuesta. Esto es simular como si tuviéramos múltiples replicas de la misma caja pegadas a cada uno de los bordes de la caja original, como se muestra en la figura.

Evaluación.:

Para completar este proyecto se requiere :

1. (1 punto) Generar la condición inicial para la simulación. Las velocidades deben seguir una distribución Maxwell-Boltzmann, o en su defecto una distribución aleatoria.
2. (5 puntos) Escribir un programa para calcular la evolución temporal de las posiciones y velocidades de N partículas, a partir de las condiciones iniciales dadas. Leer a partir de un archivo los parámetros (masa de las partículas, el tiempo total de la evolución (recomendado que sean múltiplos de años), y el tamaño del incremento temporal (h , se da en las mismas unidades que el tiempo total, y suele ser una fracción pequeña del mismo.)). Del mismo archivo también se deben leer 6 columnas con las posiciones y velocidades iniciales de las N -partículas (x, y, z, v_x, v_y, v_z).
3. Guardar en un archivo las nuevas posiciones y velocidades de todas las partículas cada cierto numero de pasos en la evolución. **(1Punto)**.
4. Gráficar las posiciones de todas las partículas en los planos $xVsy, xVsz$ y en 3D. Pueden usar el gráficador de su preferencia **(1 Punto)**.
5. Se evaluará la presentación de los resultados. Que el programa esté debidamente comentado, compile y se ejecute correctamente **(1 Punto)**.

6. Extra (1 punto): Calcular la energía total del sistema, cinética mas potencial, y verificar que se conserva a cada paso de tiempo.