Exercício 04: Dinâmica Molecular

Ana Moreira 54514

Este trabalho foi realizado com o intuito de implementar o método de Verlet para simular a dinâmica de um aglomerado estelar e para a criação de distribuições com números aleatórios.

I. EXERCÍCIO 1: SIMULAÇÃO DA INTERAÇÃO ENTRE DUAS ESTRELAS

Como este trabalho lida com um problema de astrofísica, as unidades utilizadas para as diferentes grandezas têm de ser adequadas ao tamanho do sistema em questão. Assim, durante todo este trabalho utilizou-se distâncias em parsec, massas em massas solares e medidas de tempo em anos.

Inicialmente, simulou-se a interação de duas estrelas de massas m_1 e m_2 através do método de Verlet, utilizando equações de movimento da mecânica newtoniana. Sabemos que a próxima posição das estrelas é dada pela expressão:

$$x(t+\Delta t) = 2x(t) - x(t-\Delta t) + a_x(t)\Delta t^2 \quad \textbf{(1)}$$

onde a_x é a componente x da aceleração. O método é reversível pois podemos obter $x(t-\Delta t)$ a partir da próxima iteração. A equação é análoga para as coordenadas y e z.

O vetor $\vec{r}$ é dado pela expressão $\vec{r} = (x_2 - x_1, y_2 - y_1, z_1 - z_2)$ neste caso.

Para calcular a aceleração, calculou-se a força correspondente a cada uma das coordenas através da expressão:

$$\vec{F} = \frac{Gm_1m_2}{r^3}\vec{r} \quad \textbf{(2)}$$

Assim, obtemos a aceleração através da equação $\vec{F} = m\vec{a}$ (com m=1), em que a aceleração é na mesma direção mas em sentidos opostos para cada uma das estrelas. Para calcular a energia mecânica do sistema de duas estrelas, obtemos primeiro as componentes da velocidade das estrelas pela expressão (sendo esta análoga para as componentes v_y e v_z):

$$v_x(t) = \frac{x(t+\Delta t) - x(t-\Delta t)}{2\Delta t} \quad \textbf{(3)}$$

sendo o módulo da velocidade então:

$$v(t) = \sqrt{{v_x}^2(t) + {v_y}^2 + {v_z}^2} \quad \textbf{(4)}$$

Assim, para um sistema de duas estrelas, podemos calcular a energia cinética ($E_c = \frac{1}{2}(m_1{v_1}^2 + m_2{v_2}^2)$) e a energia potencial ($E_p = -\frac{Gm_1m_2}{r}$), que nos levam à energia mecânica $E_m = E_p + E_c$.

A partir destas expressões, calcularam-se a energia cinética, potencial e mecânica para um sistema de duas estrelas, a uma distância de 2 pc uma da outra e velocidades iniciais iguais de direção igual mas sentidos opostos, cujo gráfico em função do tempo está representado na Figura 1.

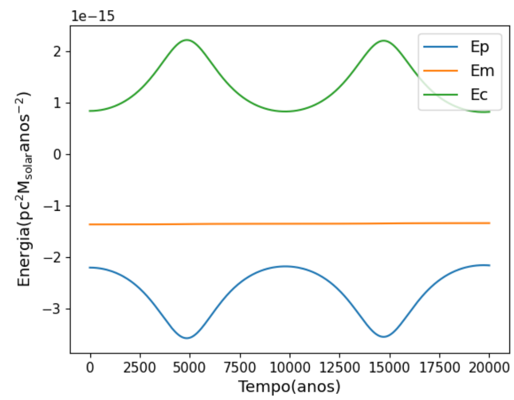

Figura 1. Gráfico das energias potencial (azul), cinética (verde) e mecânica (amarela) em função do tempo para o sistema de duas estrelas. 20000 iterações.

Do gráfico conclui-se que a energia mecânica manteve-se constante durante todo o intervalo de tempo, e que as energias mecânica e potencial apresentam máximos e mínimos relativos (respetivamente) em dois pontos do gráfico, nomeadamente $t = 4855$ anos e $t = 14770$ anos, que correspondem aos pontos em que as estrelas estão mais próximas.

II. EXERCÍCIO 2: SIMULAÇÃO DA DINÂMICA DO AGLOMERADO ESTELAR

De modo a simular aglomerados com N estrelas, temos de considerar que a aceleração de cada estrela depende da interação desta com todas as outras. A partir dos ficheiros fornecidos em anexo, obtiveram-se as posições e velocidades iniciais, juntamente com a massa para cada estrela nos aglomerados com 10, 100 e 500 estrelas. Usando estes valores, calculou-se o número de estrelas a uma distância r inferior a $r_t = 5$ pc do centro do aglomerado, com r_t definido como a distância a partir da qual a densidade passa a ser nula, e fez-se o gráfico da fração de estrelas com $r < r_t$ para cada aglomerado em função do tempo, com um passo de 5×10^4 anos e

200 iterações, equivalente a um tempo total de 10^7 anos, apresentado na Figura 2.

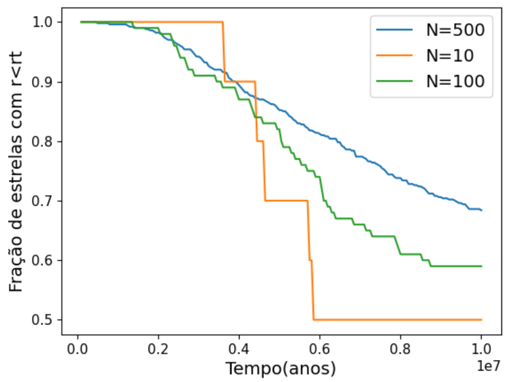

Figura 2. Gráfico da fração de estrelas a uma distância r inferior a $r_t = 5$ pc do centro do aglomerado em função do tempo para aglomerados com 10, 100 e 500 estrelas. 200 iterações com um passo de 5×10^4 anos.

Deste gráfico observa-se que quanto maior for o número de estrelas do aglomerado, mais próximo de uma curva estável é o gráfico. Isto seria de esperar uma vez que o facto de ter mais estrelas faz com que o número de estrelas a obedecer à condição $r < r_t$ possa evoluir de forma mais contínua (caso N=500), em vez de descidas súbitas como no caso de N=10.

Também podemos concluir que a percentagem de estrelas com $r < r_t$ é maior para aglomerados com maior número de estrelas, uma vez que depois de 10^7 anos, apenas metade das estrelas permanecem a uma distância inferior a r_t para N=10, enquanto que para N=100 é cerca de 60% e para N=500 à volta de 70%. Disto conclui-se que aglomerados com maior número de estrelas ficam juntos durante um intervalo de tempo maior.

III. EXERCÍCIO 3: GERAÇÃO DA CONFIGURAÇÃO INICIAL DO AGREGADO ESTELAR PARA SIMULAÇÃO DA DINÂMICA

Para este exercício, simularam-se as condições iniciais de um aglomerado, ou seja as massas, posições e velocidades iniciais, juntamente com a sua dinâmica. As massas iniciais foram obtidas pelo método de transformação apicado à distribuição de Kroupa, dada por $\xi(m) = m^{-\alpha}$ com α a depender do intervalo em que o valor da massa da estrela se insere. Para a distribuição espacial de estrela usou-se o perfil de King, dado por:

$$n(r) = n_0\left[\frac{1}{\sqrt{1+\frac{r}{r_c}^2}} - \frac{1}{\sqrt{1+\frac{r_t}{r_c}^2}}\right] \quad \textbf{(5)}$$

onde n(r) é o número de estrelas a uma distância r do centro do aglomerado, n_0 um fator de escala, $r_c = 1$ pc o raio do core e $r_t = 5$ pc. Usou-se o método da rejeição uma vez que não podemos inverter a função densidade de probabilidade. A distribuição de Maxwell-Boltzmann de velocidades foi obtida através do método de Box-Muller. As distribuições foram consideradas uniformes em toda a esfera. Simulando 100 configurações diferentes com N=100 estrelas e fazendo a média de quantas estrelas obedeciam à condição $r < r_t = 5$ pc com um passo de 5×10^4 anos e 200 iterações, produziu-se o gráfico da Figura 3 (utilizando a fração de estrelas que obedecem a $r < r_t$).

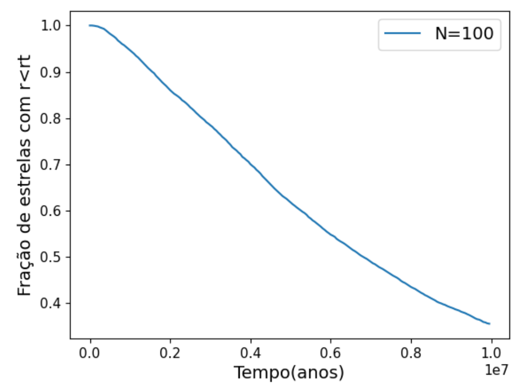

Figura 3. Gráfico da média da fração de estrelas a uma distância r inferior a $r_t = 5$ pc em função do tempo, para um aglomerado com 100 estrelas. 100 configurações diferentes e 200 iterações com um passo de 5×10^4 anos.

Do gráfico podemos concluir que a evolução da fração de estrelas com $r < r_t$ é muito diferente da obtida no exercício anterior, uma vez que a percentagem de estrelas a uma distância r inferior a r_t após 10^7 anos é de aproximadamente 40%. Isto pode ser explicado pelo facto de que as condições iniciais deste caso de posição, velocidade e massa foram geradas por código e não fornecidas num ficheiro, ou por possíveis erros de código na geração destas grandezas.