

La distribución de Maxwell-Jüttner: implementación y aplicación en una simulación PIC de un jet en un medio intergaláctico magnetizado

Daniel D. Castiblanco^{*1}, Luis C. Duran^{†1}, and Yul E. Lha^{‡1}

¹Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia - Sede Bogotá, Introducción a la investigación teórica

10 de agosto del 2021

Resumen

El presente trabajo busca explicar las características fundamentales de la función de distribución de Maxwell-Jüttner en su versión estacionaria y desplazada, así como lo que concierne a la utilidad que esta trae para la descripción de sistemas relativistas, partiendo desde su deducción hasta la implementación de algoritmos computacionales que permitan reproducirla mediante la generación de variables aleatorias. En particular, mediante el lenguaje *Python* se implementan los algoritmos de *rechazo*, *Sobol* y de *transformada inversa* para la descripción estacionaria y el algoritmo *flipping-method* para el caso desplazado. Adicionalmente, con el fin de poner en práctica las aplicaciones astrofísicas de la distribución, se modela un sistema de transporte de jets relativistas en un medio intergaláctico magnetizado. Así, siguiendo el modelo de anchura limitada se realizan simulaciones computacionales para casos débil y altamente magnetizados, empleando un esquema tipo *particle-in-cell* (PIC) para el estudio de dicho sistema, sobre el cual se lleva a cabo un análisis principalmente cualitativo.

Palabras clave. Maxwell-Jüttner, algoritmo PIC, IGM, jet AGN, Maxwell-Vlasov.

1. Introducción

Al analizar sistemas termodinámicos y/o de muchas partículas, es importante tener en cuenta la distribución de partículas del sistema, y sobre todo de velocidades, como es el caso clásico de Maxwell-Boltzmann. Al trasladar el problema a un ámbito relativista, como por ejemplo, en sistemas astrofísicos, surge la tarea de poder caracterizar sistemas termodinámicos con velocidades relativistas (aleatorias).

Hacer esta transición debe contener los principios básicos de la relatividad especial, lo que implica la restricción de la velocidad de la luz, cosa que no cumple la distribución clásica en la descripción de estos sistemas, puesto que en principio, velocidades superiores a c tienen probabilidades no nulas. Así pues, F. Jüttner introduce por primera vez en [1], una versión generalizada de la distribución Maxwell-Boltzmann, válida para sistemas relativistas y posteriormente J. Synge introduce una versión covariante de Lorentz en [2], donde se plantea la descripción de un gas relativista.

Así, el manejo de estas distribuciones, que son un caso particular de un grupo conocido como *hiperbólicas gene-*

ralizadas [3], es de sumo interés para el estudio de sistemas relativistas. En particular, se resalta su utilidad en la descripción de espectros de emisión por radiación sincrotrón de partículas cargadas [4] y en general para la descripción de plasmas. Aunado a lo anterior, son de destacar en trabajos como los de Swisdak [5] y Zenitani [6], que llevan a cabo un acercamiento para el estudio y reproducción de la distribución de Maxwell-Jüttner desde un punto de vista computacional. El primer objetivo será entonces recrear los algoritmos de la distribución en diferentes casos con el fin de aplicarlos en un caso específico.

En particular, y con base al estudio realizado por Yao et. al en [7], que se concentra en examinar el efecto que tiene la componente perpendicular del campo magnético externo sobre la inyección de jets relativistas en un medio intergaláctico magnetizado, bajo un modelo computacional basado en el algoritmo de PIC (*particle in cell*) y en la distribución de Maxwell-Jüttner para respecto a la velocidad de inyección del sistema, el segundo objetivo será construir un algoritmo PIC para un caso más simplificado y ver hasta qué punto se pueden reproducir los resultados de [7].

^{*}ddcastiblanco@unal.edu.co

[†]lcdurann@unal.edu.co

[‡]ylha@unal.edu.co

El fenómeno astrofísico de interés se presenta en núcleos activos de galaxias (AGN) o en cúmulos galácticos, que son los llamados *jets*, que consisten en la efusión de plasma y materia colimada en dirección al medio intergaláctico, exhibiendo una estructura lineal originaria de una fuente común, en los cuales se presenta transporte de energía y momentum. Particularmente se destacan aquellos que alcanzan velocidades relativistas, los que según se estima son producidos y acelerados en el disco de acreción de los agujeros negros súper masivos (SMBH) de los AGN [8][7].

A pesar de las múltiples observaciones que se han realizado de eventos de este tipo aún existen muchos interrogantes respecto a los parámetros fundamentales que caracterizan a los jets, así como tampoco se conoce con absoluta certeza los materiales de los que se componen. Sin embargo, si se ha logrado evidenciar algunas características de las que destaca principalmente el rol que juega la existencia de campo magnético como mecanismo de transporte de jets [7]. La influencia del campo magnético en el comportamiento de los jets produce efectos como la *radiación sincrotrón* al deflectar partículas relativistas cargadas o la *reconexión magnética*. En general, se sabe que para el transporte en los jets relativistas, se consideran varios factores relacionados con el comportamiento del plasma y su energía cinética [9].

2. Modelo físico

En primera instancia, se estudia la situación que involucra la distribución de velocidades (o momentum) de partículas relativistas a una temperatura dada. En este caso, en analogía con la distribución clásica de Maxwell-Boltzmann, se tiene un gas ideal (i.e., las partículas no interactúan significativamente) con velocidades relativistas. En este caso, para hacer la transición bajo la dinámica relativista, se asume que se cumple la distribución de Maxwell-Boltzmann bajo una energía cinética relativista.

Por otro lado, para realizar una descripción del comportamiento de un jet en un medio intergaláctico no magnetizado, se asume que un chorro de partículas (compuesto de electrones y iones, de igual magnitud) de anchura limitada, que es introducido al medio (también compuesto de electrones y iones) a velocidades de inyección ultra-relativistas. El medio está sujeto a un campo magnético externo, debido al campo magnético helicoidal que rodea al jet de un núcleo activo de galaxia, o más específicamente su parte perpendicular. Este campo alterna su polaridad en una franja centrada alrededor del jet, en un cierto ancho. Esto, junto a la simetría del jet, reduce el sistema a un análisis 2D de la dinámica del sistema. Un esquema de este sistema se muestra en la figura (1).



Figura 1: Esquema representativo de un jet entrando a un medio intergaláctico magnetizado (IGM). El IGM y el jet tienen dos especies de partículas cargadas: iones y electrones. Las partículas del jet son inyectadas continuamente a velocidades de inyección ultra-relativistas en dirección x . El campo magnético externo perpendicular cambia de polaridad alrededor del centro. Imagen extraída de [7].

Así, la presencia de cargas en el medio hace imperativo resolver la dinámica de las cargas por la presencia de los campos (ecuaciones de movimiento relativista, fuerza de Lorentz y distribución de velocidades del jet por Maxwell-Jüttner) y la variación de los campos por la presencia de cargas (ecuaciones de Maxwell). Esto está incluido dentro del formalismo de la ecuación de Vlasov, que reduce el comportamiento del sistema al de la dinámica de cuasi-partículas con una cierta forma finita.

3. Aspectos conceptuales

3.1. Marco teórico

En primera instancia, se desarrolla la teoría de la distribución de velocidades de partículas relativistas.

Es bien sabido de la mecánica estadística que los estados de un sistema clásico de energía E pueden ser descritos mediante la distribución de Maxwell-Boltzmann [10].

$$f(E) = \frac{1}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right), \quad (1)$$

donde $Z(T)$ representa la función de partición, k_B es la constante de Boltzmann y T la temperatura. Mientras que en el sistema clásico, E representa la energía cinética clásica del sistema, para hacer una transición apropiada de esta distribución a la relatividad especial, esta energía no puede distribuir velocidades mayores que c . De este modo, F. Jüttner, propuso introducir la distribución de Maxwell-Jüttner, donde la energía del sistema corresponde al régimen relativista. Como es usual en relatividad especial, es importante diferenciar un caso estacionario y un caso desplazado, en un sistema de referencia en movimiento relativo [5].

Para introducir el *Maxwelliano estacionario*, en la ecuación (1) se toma E como la energía cinética relativista

$mc^2(\gamma - 1)$, siendo γ el factor del Lorentz. Así mismo, trabajando con la componente espacial de la cuadrivelocity $\mathbf{u} = \gamma\mathbf{v}$. De esto, puede hallarse que $\gamma = \sqrt{1 + u^2}$ (donde \mathbf{u} está en unidades de c).

Luego de lo anterior, se obtiene una distribución para \mathbf{u} , la cual, tras considerar el sistema en coordenadas esféricas e integrar respecto a las variables angulares, puede llegarse a la distribución de la magnitud de \mathbf{u} (en unidades naturales) [6]:

$$f(u) = \frac{1}{\Theta K_2(1/\Theta)} u^2 \exp\left(-\frac{\sqrt{1+u^2}}{\Theta}\right), \quad (2)$$

la cual se normaliza a 1; K_2 es la función modificada de Bessel de segundo tipo y $\Theta = k_B T / mc^2$ es la temperatura adimensionalizada. Aunque no parece explícitamente, puede probarse que esta expresión es covariante. Además, esta expresión está limitada por sistemas interactuantes o efectos cuánticos (como en altas energías).

Ahora bien, para el *Maxwelliano desplazado* se considera un marco de referencia S' que se desplaza en dirección $-x$ con una velocidad β (en unidades naturales). Luego, tras realizar un boost de Lorentz de S a S' en dicha dirección y considerando que $f(\mathbf{u})d^3\mathbf{u} = f'(\mathbf{u}')d^3\mathbf{u}'$ se obtiene la distribución de \mathbf{u} en el sistema desplazado [6]:

$$f'(\mathbf{u}') = \frac{1}{4\pi\Theta K_2(1/\Theta)} \exp\left(-\frac{\gamma_0}{\Theta}(\sqrt{1+u'^2} - u'_x\beta)\right), \quad (3)$$

donde γ_0 es el factor de Lorentz asociado al boost. La velocidad del boost afecta severamente la distribución de velocidades, desplazando la velocidad promedio

Como caso de prueba, puede muestrearse la magnitud de \mathbf{u}' en el caso desplazado; en este caso, se expresa \mathbf{u} en coordenadas esféricas y se integra sobre todo el ángulo sólido (definiendo el ángulo polar entre \mathbf{u}' y el eje x), dando:

$$f'(u') \propto u' \frac{\sinh(\gamma_0\beta u' / \Theta)}{\gamma_0\beta / \Theta} \exp\left(-\frac{\gamma_0}{\Theta}\sqrt{1+u'^2}\right). \quad (4)$$

Es de interés muestrear variables aleatorias bajo estas distribuciones puesto que permiten describir la dinámica de partículas relativistas. Así, se verá que hallar un método para muestrear la variable estacionaria, permitirá muestrear la desplazada realizando un boost a un sistema de referencia desplazado. La distribución desplazada permite describir la inyección de partículas relativistas a una velocidad dada.

Para poder describir de forma apropiada el comportamiento de un sistema termodinámico relativista sujeto a campos electromagnéticos, se toma un enfoque relacionado al de la ecuación de Boltzmann.

Se considera un sistema que involucra movimiento de

partículas cargadas en un plasma no colisional (bajo una interacción de largo alcance, p. ej.), como es el caso de los jets; allí están presentes campos magnéticos $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$ y eléctricos $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ dentro del mismo, que satisfacen las ecuaciones de Maxwell. Así, para describir adecuadamente estos eventos se implementa el sistema de ecuaciones de *Maxwell-Vlasov*. En esta descripción, las especies s de partículas, de masa m_s y carga q_s , que conforman el plasma siguen un comportamiento dado por una función de distribución $f_s(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$, la cual satisface la ecuación de Vlasov [11]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m_s\gamma} \cdot \nabla + \mathbf{F}_L \cdot \nabla_{\mathbf{p}}\right) f_s = 0, \quad (5)$$

en la cual, $\mathbf{F}_L = q_s(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{u}}{\gamma} \times \mathbf{B})$ representa la fuerza de Lorentz. De este modo, la ecuación (5), junto a las ecuaciones de Maxwell y \mathbf{F}_L , forman el sistema de ecuaciones de Maxwell-Vlasov. Así, se logra describir la dinámica del plasma y sus partículas, las cuales, como consecuencia de la acción de la fuerza de Lorentz sobre ellas, modifican continuamente los campos del medio por medio de sus densidades de carga $\rho(t, \mathbf{x})$ y corriente $\mathbf{J}(t, \mathbf{x})$ (calculadas como el promedio respectivo sobre la distribución de partículas) [11].

En este sistema, puede ahondarse aún más en la distribución de las partículas como indican los modelos PIC (*particle in cell*), donde es usual recurrir al concepto de *cuasi-partículas*, lo cual consiste en un método para representar un grupo de cierto número de partículas físicas al interior de una celda. Esto se lleva a cabo con el fin de trabajar con las posiciones \mathbf{x}_p de estas cuasi-partículas para dar una forma de la función de distribución del sistema discretizada como una suma de N_s cuasi-partículas [11]:

$$f_s(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) = \sum_{p=1}^{N_s} w_p S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_p), \quad (6)$$

donde w_p es un peso asociado a la densidad de partículas físicas en la celda y S hace referencia a una *función de forma*. Esta última se emplea para definir la estructura de las cuasi-partículas encapsuladas en la celda PIC.

Para obtener la dinámica del sistema de cuasi-partículas y campos, se introduce la función de distribución en la ecuación de Vlasov, y multiplicando por \mathbf{p} , integrando sobre \mathbf{p} y \mathbf{r} , y considerando las propiedades de la función de forma y las cuasi-partículas independientes, se obtiene que las cuasi-partículas satisfacen unas ecuaciones de movimiento relativistas estándar. Estas, aunadas a las ecuaciones de Maxwell, determinan el comportamiento

del sistema partículas y campos a resolver:

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \frac{\mathbf{u}_p}{\gamma_p}, \quad \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = 2\pi\alpha \frac{q_s}{m_s} \left(\mathbf{E}_p + \frac{\mathbf{u}_p}{\gamma_p} \times \mathbf{B}_p \right), \quad (7)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{2\pi}{\alpha} \rho, \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (8)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \nabla \times \mathbf{B} = \frac{2\pi}{\alpha} \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (9)$$

donde los campos sobre las cuasi-partículas están promediados sobre la celda: $\mathbf{E}_p = \int d^3\mathbf{x} S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \mathbf{E}(\mathbf{x})$ y $\mathbf{B}_p = \int d^3\mathbf{x} S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \mathbf{B}(\mathbf{x})$.

Las ecuaciones anteriores son tales que se cumple el siguiente esquema de adimensionalización: $\mathbf{x} \rightarrow \lambda_{ji}^{-1} \mathbf{x}$, $t \rightarrow f_{ji}^{-1}$, $\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{u}/c$, $\mathbf{E} \rightarrow E_0^{-1} \mathbf{E}$, $\mathbf{B} \rightarrow B_0^{-1} \mathbf{B}$, $q_s \rightarrow q_s/q_i$, $m_s \rightarrow m_s/m_i$, $\rho \rightarrow (\epsilon_0 m_i \omega_{ji}^2/q_i)^{-1} \rho$ y $\mathbf{J} \rightarrow (c\epsilon_0 m_i \omega_{ji}^2/q_i)^{-1} \mathbf{J}$, donde $\lambda_{ji} = c/f_{ji} = 2\pi c/\omega_{ji}$, $E_0 = cB_0$, q_i y m_i son cantidades de referencia. En el caso de interés de un chorro de plasma entrando a un medio magnetizado, ω_{ji} , q_i y m_i serán la frecuencia de plasma, carga y masa de los iones del plasma (más específicamente, el jet) y B_0 es la intensidad máxima del campo magnético. Además, $\alpha = \gamma_0 \sqrt{\sigma_{ji}}$, donde $\sigma_{ji} = (\Omega_{ji}/\omega_{ji})^2$, $\Omega_{ji} = q_i B_0/\gamma_0 m_i$, son la rata de magnetización y frecuencia de ciclotrón de los iones, y γ_0 es el factor de Lorentz de inyección.

Así, puede anticiparse que las posiciones de las cuasi-partículas se avanzan con las ecuaciones de movimiento y los campos interpolados en cada posición, y los campos se avanzan con las distribuciones de carga y corriente de las partículas en un instante dado.

Aún falta discutir cómo debería de ser la función de forma de las cuasi-partículas para describirlas dentro del esquema PIC. Al estar distribuidas las partículas físicas uniformemente en la celda, la función de forma debe ser simétrica, no nula alrededor de un cierto volumen de celda y normalizada a 1. Así, se considera la función de forma como el producto de las tres funciones 1D, i.e., $S(\mathbf{x}) = s^{(n)}(x)s^{(n)}(y)s^{(n)}(z)P(x)P(y)P(z)$, donde n es un entero que describe el orden de ajuste [11]. Es usual tomar estas funciones de forma como funciones de ajuste spline, que permiten describir una base de funciones polinomiales a trozos de forma recursiva (con el orden de las funciones). El orden está entonces relacionado con el grado de los polinomios utilizados, y P es una función generatriz de *splines* de mayor orden.

La ventaja de utilizar estas funciones de ajuste es utilizarlas para interpolación y proyección directa: la interpolación permite obtener los valores intermedios de los puntos del campo en una grilla fija (campos sobre las partículas) y la proyección permite conocer los valores de la función en los puntos de grilla por valores intermedios dados (densidades de carga y corriente en la grilla). Este ajuste es mejor con un grado mayor de la función de forma.

Así, puede probarse que el esquema de interpolación y el esquema de proyección se calcularán sobre $s^{(n+1)}$ [11]:

$$F_p = \sum_i F_i \hat{s}^{(n+1)}(x_p - x_i), \quad (10)$$

$$Q_i = \sum_p Q_p \hat{s}^{(n+1)}(x_i - x_p), \quad (11)$$

donde $\hat{s}^{(n)}(x) = \Delta x s^{(n)}(x)$ y Δx es el tamaño de celda; además, en (10), se interpola el valor de la función F_i en los puntos de grilla x_i en la posición x_p , y en (11) se proyecta la función en las posiciones x_p en el punto de grilla x_i . El caso 3D sólo cambia \hat{s} como el producto de las respectivas \hat{s} en cada dimensión: $\hat{s}(\mathbf{x}) = \hat{s}(x)\hat{s}(y)\hat{s}(z)$. Para el interés de este trabajo se opta por trabajar con una función de forma $s^{(1)}$, que es igual a 1 en el tamaño de celda Δx y nulo afuera (forma rectangular); usando así en los esquemas de interpolación y proyección una de orden 2: $s^{(2)}(x)$ vale $1 - |x/\Delta x|$ en un rango $2\Delta x$ y nulo afuera (forma triangular).

Así pues, el uso de estas funciones es de suma importancia para la implementación computacional del modelo trabajado, pues se usarán para la definición de las densidades de carga y corriente de las especies de partículas así como en la descripción de los campos.

3.2. Herramientas computacionales

Todo el esquema computacional se desarrolla en el lenguaje de programación *Python* (con el uso de librerías básicas de él para construir de cero los algoritmos utilizados).

Respecto a la primera parte, es de interés muestrear variables aleatorias con la distribución de Maxwell-Jüttner por medio de algoritmos que permitan eficientemente obtener las velocidades de un conjunto de partículas relativistas. P. ej., al inyectar partículas al IGM, es necesario inicializar sus velocidades por esta distribución y esto se quiere hacer de forma precisa y eficiente.

Se plantean tres diferentes algoritmos consultados de [5] y [6] que permiten reproducir la distribución de Maxwell-Jüttner estacionaria. Específicamente, la estrategia será muestrear con cada algoritmo la distribución estacionaria y aplicar un algoritmo para boostear cualquiera de estas al caso desplazado. Todos los algoritmos implementados se reúnen en el archivo **maxwell_juttner_algorithms.py**, como funciones que reciben los parámetros de la distribución y el número n (máx.) de valores a muestrear.

El primer algoritmo estacionario, extraído de [5], consiste en un algoritmo de rechazo adaptado para una categoría general de funciones unimodales log-cóncavas ($(\log f)'' \leq 0$), entre las cuales están cubiertas las distribuciones de probabilidad más comunes y sobre todo, la de Maxwell-Jüttner estacionaria. El algoritmo de rechazo

estándar permite acotar con una distribución conocida a la distribución de interés y probar una cierta condición con números aleatorios de una distribución uniforme asociada, que dependiendo de si se cumple o no, se aceptará o rechazará el valor como valor muestreado de interés. En este caso, la función de interés es un valor constante que intersecta la moda $f(u_{\text{moda}})$ entre los valores u_{\pm} tal que $f(u_{\pm}) = f(u_{\text{moda}})/e$, y con distribuciones exponenciales a los lados (esta configuración minimiza el área y a la vez es bastante general para múltiples distribuciones) [12].

Este algoritmo está descrito en el apéndice de [5]; inicialmente requiere hallar la moda y los valores u_{\pm} asociados, y tras generar un número n de valores aleatorios uniformes, verifica el rechazo en las regiones constante y exponenciales; al final retorna una cantidad de números ($\leq n$) distribuidos como se desea.

El segundo algoritmo es el algoritmo de Sobol, extraído de [6], el cual también está basado en un algoritmo de rechazo. Sin embargo, es más sutil, puesto que se puede identificar que la distribución gamma de tercer orden $\sim u^2 \exp(-u/\Theta)$ es comparable a la de Maxwell-Jüttner. La primera puede muestrearse como suma de tres variables aleatorias exponenciales, y estas a su vez como logaritmos de distribuciones uniformes estándar. Así, se aplica el método de rechazo con esta distribución, aceptando un valor de u si cumple el criterio de Sobol: $\eta^2 - u^2 > 1$, donde $u = -\Theta \ln X_1 X_2 X_3$ y $\eta = -\Theta \ln X_1 X_2 X_3 X_4$, donde todas las X son uniformes estándar. De nuevo, al final se retorna una cantidad de números ($\leq n$) distribuidos como se desea.

El tercer algoritmo es el de la transformada inversa. Este hace uso del hecho de que si la distribución f_X tiene una CDF $F_X(u)$, entonces $F_X^{-1}(U)$ está distribuido como X si U es una variable aleatoria estándar. La estrategia es entonces hallar la CDF de la distribución estacionaria por integración numérica y la inversa por interpolación. El retorno será el mismo número n de valores de U introducidos.

Por último, la estrategia para boostear a la distribución desplazada será, primero, descomponer u en $u_x = u(2X_5 - 1)$, $u_y = 2u\sqrt{X_5(1-X_5)}\cos(2\pi X_6)$ y $u_z = 2u\sqrt{X_5(1-X_5)}\sin(2\pi X_6)$, y así actualizar la componente x con el boost en dirección $-x$, $u_x \leftarrow \gamma_0(u_x + \beta\sqrt{1+u^2})$. Esto debe hacerse teniendo en cuenta la transformación de volumen por el boost (que varía de partícula en partícula), crucial en un algoritmo PIC, de modo que se hace una especie de algoritmo de rechazo asociado a este factor de transformación (o a γ más específicamente), donde si se cumple cierta condición se reversa el signo de u_x antes de aplicar el boost. Este es el llamado *flipping method*. El retorno de este algoritmo es la distribución de las tres componentes de \mathbf{u}' .

El archivo **maxwell_juttner_results.py** busca (1) calcular con el algoritmo de Sobol el histograma de velocidades para 3 valores de Θ en el caso estacionario y 3 valores de β en el caso desplazado (Θ fijo), y (2) comparar con el caso predicho para los tres algoritmos por medio del error.

Por otro lado, el esquema de simulación de la inyección de un jet en un medio magnetizado, se debe estructurar el algoritmo PIC que tiene varias etapas. Esta es una herramienta de simulación muy común, relativamente simple en concepto y puede estructurarse muy eficientemente. Este se basa en la descripción de un sistema de cuasi-partículas que representan un cierto conjunto de partículas físicas y que están definidas por un cierto tamaño de celda finita, y están sujetas a campos electromagnéticos. Las trayectorias continuas de las cuasi-partículas son resueltas por las ecuaciones (7) y los campos se resuelven en una grilla espacial discreta, donde los espacios entre estos puntos representan las llamadas celdas. Los tiempos se discretizan en instantes enteros n y semienteros. El problema se plantea 2D, por lo que las variables de interés son las posiciones x, y de las cuasi-partículas asociadas a iones y electrones del IGM y el jet, $\mathbf{x}_s^{\text{IGM}}, \mathbf{x}_s^{\text{jet}}$, $s = i, e$, las velocidades asociadas en x, y , $\mathbf{u}_s^{\text{IGM}}, \mathbf{u}_s^{\text{jet}}$, y los campos $E_x(\mathbf{x})$, $E_y(\mathbf{x})$ y $B_z(\mathbf{x})$, evaluados en los puntos de grilla.

Inicialmente, se deben dar las posiciones iniciales y velocidades de las partículas presentes en la región; en este caso, $\mathbf{x}_s^{\text{IGM}(n=0)}$ se distribuye uniformemente y se toman en reposo por simplicidad, i.e., $\mathbf{u}_s^{\text{IGM}(n=-\frac{1}{2})} = 0$. La inyección del jet se realiza posteriormente. Con estas posiciones iniciales se calcula la densidad de carga inicial $\rho^{(n=0)}(\mathbf{x}_i)$ en los puntos de grilla por medio del esquema de proyección directa (11), donde $Q_p = w_p q_p$, con q_p la carga de cada partícula (+1 para iones, -1 para electrones), y w_p es un peso que se toma como 1/8 al tomar 8 partículas reales por cuasi-partícula.

Esta densidad de carga se determina para resolver la ecuación de Poisson en el instante inicial para el potencial electrostático y así obtener el campo eléctrico $E_x^{(n=0)}(\mathbf{x})$ y $E_y^{(n=0)}(\mathbf{x})$ en cada punto de grilla. Esto se hace por el método de sobre-relajación (que itera y actualiza el potencial por diferencias finitas con un sumando adicional hasta que converge a una tolerancia deseada).

El campo magnético inicial se toma como $B_z^{(n=\frac{1}{2})}(\mathbf{x}) = B_0 \tanh(y/W_b)$, donde W_b es el ancho de la región de transición de polaridad.

El archivo **PIC_initialization.py** calcula las cantidades iniciales de los campos y las partículas del IGM y las extrae en archivos .csv para su posterior uso.

Ahora, el ciclo PIC, que actualiza la dinámica del sistema cada paso de tiempo Δt , de n a $n+1$, está compuesto de

5 etapas. Se considera que posiciones y campos eléctricos se evalúan en n enteros y velocidades, campo magnético y densidades de corriente se evalúan en n semienteros.

(1) inyección de nuevas partículas del jet: cada instante de tiempo, se agrega un número fijo de partículas al medio, que se sumarán para avanzarlas con los campos previos; sus posiciones $y_s^{\text{jet}(n)}$ están inicializadas uniformemente en un ancho W_n y las velocidades $u_{x,s}^{\text{jet}(n+\frac{1}{2})}$ están muestreadas con el algoritmo de Sobol (luego se discutirá el por qué de la elección) para la distribución desplazada a un γ_0 de inyección fijo, y $x_s^{\text{jet}(n)} = u_{y,s}^{\text{jet}(n)} = 0$.

(2) interpolación de los campos en las posiciones de las partículas: para poder avanzar las partículas al siguiente instante, se necesitan los campos en las posiciones de las partículas $E_{x,p}^{(n)}$, $E_{y,p}^{(n)}$ y $B_{z,p}^{(n)}$, que originalmente están en los puntos de grilla. El campo magnético se centra en el tiempo en la etapa (5). Se utiliza el esquema de interpolación (10) para cada uno con las posiciones de las partículas del paso anterior (más las nuevas del jet).

(3) avance de las partículas: las partículas del IGM y el jet se avanzan calculando posiciones y velocidades con el *pusher* descrito en [13], basado en el algoritmo de *leap-frog*:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_p^{(n)} &= \mathbf{u}_p^{(n-\frac{1}{2})} + \alpha \frac{q_s \Delta t}{2m_s} \left(\mathbf{E}_p^{(n)} + \frac{\mathbf{u}_p^{(n-\frac{1}{2})}}{\gamma_p^{(n-\frac{1}{2})}} \times \mathbf{B}_p^{(n)} \right), \\ \gamma_p^{(n+\frac{1}{2})} &= \sqrt{\frac{\sigma + \sqrt{\sigma^2 + 4(\tau^2 + u^{*2})}}{2}}, \\ \mathbf{u}_p^{(n+\frac{1}{2})} &= \frac{1}{1+t^2} \left(\mathbf{u}' + \frac{u^*}{\gamma_p^{(n+\frac{1}{2})}} \mathbf{t} + \mathbf{u}' \times \mathbf{t} \right), \\ \mathbf{x}_p^{(n+1)} &= \mathbf{x}_p^{(n)} + \frac{\mathbf{u}_p^{(n+\frac{1}{2})}}{\gamma_p^{(n+\frac{1}{2})}} \Delta t, \end{aligned}$$

donde $\mathbf{t} = \boldsymbol{\tau}/\gamma_p^{(n+\frac{1}{2})}$, $\sigma = 1 + u'^2 - \tau^2$, $u^* = \mathbf{u}' \cdot \boldsymbol{\tau}$, $\mathbf{u}' = \mathbf{u}_p^{(n)} + \alpha q_s \Delta t \mathbf{E}_p^{(n)}/2m_s$ y $\boldsymbol{\tau} = \alpha q_s \Delta t \mathbf{B}_p^{(n)}/2m_s$. Nótese que en el caso 2D, $u^* = 0$.

Posterior al avance, deben verificarse las condiciones de contorno sobre las partículas, que se toman: periódicas en y (partículas que salen por un lado vuelven a entrar por el otro) y de borrado en x (partículas que salen son borradas de la lista).

(4) deposición de corriente: los campos serán resueltos usando las ecuaciones de Maxwell con derivadas temporales, y la necesidad de las otras dos será subsanada resolviendo la ecuación de conservación de carga, como describe [14]. Para ello, descompone la densidad de corriente calculándola para cada punto de grilla por medio de las funciones de forma (traídas de la proyección directa) y los desplazamientos después de (3). Para 2D,

Esirkepov prueba que:

$$\begin{aligned} J_{x,i+1,j}^{(n+\frac{1}{2})} &= J_{x,i,j}^{(n+\frac{1}{2})} - \frac{\Delta x}{\Delta t} \sum_p q_p W_{p,i,j}^1, \\ J_{y,i+1,j}^{(n+\frac{1}{2})} &= J_{y,i,j}^{(n+\frac{1}{2})} - \frac{\Delta y}{\Delta t} \sum_p q_p W_{p,i,j}^2, \end{aligned}$$

donde $\Delta x = \Delta y$ es el espaciamiento de grilla, y el vector W está dado por $W_{p,i,j}^1 = \frac{1}{2} \hat{s}_{i,j}(x_p^{(n+1)}, y_p^{(n+1)}) - \frac{1}{2} \hat{s}_{i,j}(x_p^{(n)}, y_p^{(n+1)}) + \frac{1}{2} \hat{s}_{i,j}(x_p^{(n+1)}, y_p^{(n)}) - \frac{1}{2} \hat{s}_{i,j}(x_p^{(n)}, y_p^{(n)})$ y $W_{p,i,j}^2 = \frac{1}{2} \hat{s}_{i,j}(x_p^{(n+1)}, y_p^{(n+1)}) - \frac{1}{2} \hat{s}_{i,j}(x_p^{(n+1)}, y_p^{(n)}) + \frac{1}{2} \hat{s}_{i,j}(x_p^{(n)}, y_p^{(n+1)}) - \frac{1}{2} \hat{s}_{i,j}(x_p^{(n)}, y_p^{(n)})$, con $\hat{s}_{i,j}(x, y) = \hat{s}(x_i - x, y_i - y)$. Este esquema evita solucionar explícitamente la ley de Gauss.

(5) FDTD: el esquema de diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD por sus siglas en inglés) permite discretizar eficientemente las ecuaciones de Maxwell, específicamente, la ley de Faraday y Ampère-Maxwell, para avanzar al siguiente instante de tiempo los campos \mathbf{E} y \mathbf{B} en todo punto de grilla. La discretización se hace como sigue para el caso 2D:

$$\begin{aligned} E_{x,i+\frac{1}{2},j}^{(n+1)} &= E_{x,i+\frac{1}{2},j}^{(n)} + \Delta t \left((\partial_y B_z)^{(n+\frac{1}{2})}_{i+\frac{1}{2},j} - \frac{2\pi}{\alpha} J_{x,i,j}^{(n+\frac{1}{2})} \right), \\ E_{y,i,j+\frac{1}{2}}^{(n+1)} &= E_{y,i,j+\frac{1}{2}}^{(n)} - \Delta t \left((\partial_x B_z)^{(n+\frac{1}{2})}_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{2\pi}{\alpha} J_{y,i,j}^{(n+\frac{1}{2})} \right), \\ B_{z,i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{(n+\frac{3}{2})} &= B_{z,i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{(n+\frac{1}{2})} - \Delta t (\nabla \times \mathbf{E})_{z,i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{(n+1)}, \end{aligned}$$

donde $(\partial_x F)_{i,j} = (F_{i+\frac{1}{2},j} - F_{i-\frac{1}{2},j})/\Delta x$, análogamente con y y $(\nabla \times \mathbf{E})_{z,i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{(n+1)} = (\partial_x E_y)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{(n+1)} - (\partial_y E_x)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{(n+1)}$. Este esquema fue implementado basado en un código extraído de [15].

Por simplicidad, se implementaron condiciones de contorno periódicas. Para asegurar la estabilidad de FDTD, debe cumplirse la condición de Courant sobre el paso de tiempo, que en 2D y con espaciamientos iguales cumple que Δt debe ser más pequeño que $\Delta t_{\text{CFL}} = \Delta x/\sqrt{2}$ [11]. Finalmente, para centrar en el tiempo el campo magnético en el avance de las partículas se hace $B_z^{(n+1)} = \frac{1}{2}(B_z^{(n+\frac{1}{2})} + B_z^{(n+\frac{3}{2})})$. En cada iteración, antes de FDTD se hace una copia de $B_z^{(n+\frac{1}{2})}$ para hacer este promedio. El archivo **PIC_algorithms.py** cuenta con todas las funciones para aplicar los algoritmos de la etapa inicial y el ciclo PIC (sobre-relajación, proyección, interpolación, *pusher*, FDTD, etc.). El archivo **PIC_loop.py** implementa el ciclo PIC, extrayendo las posiciones, velocidades y campos de las partículas en el instante final en archivos .csv, después de N_t pasos de tiempo.

Finalmente el archivo **PIC_results.py** importa los archivos finales para realizar gráficas respectivas.

4. Resultados

De acuerdo a lo discutido en las secciones anteriores, con el objetivo de determinar los algoritmos más óptimos para generar la distribución Maxwell-Jüttner estacionaria, se llevan a cabo múltiples pruebas para cada algoritmo en las cuales se varían el parámetro Θ . En base a esto, en la figura (2) se exhiben gráficas de errores $\log_2(f_{\text{simul}}/f_{\text{teo}})$ para los algoritmos de generación de

Maxwell-Jüttner estacionaria. Así mismo, teniendo en cuenta que las distribuciones desplazadas, si bien se generan todas con el mismo algoritmo (*flipping method*), su formación depende de el método bajo el cual se encuentra su distribución estacionaria asociada. Luego, también se realizan pruebas en las que se varía el parámetro β en el caso desplazado.

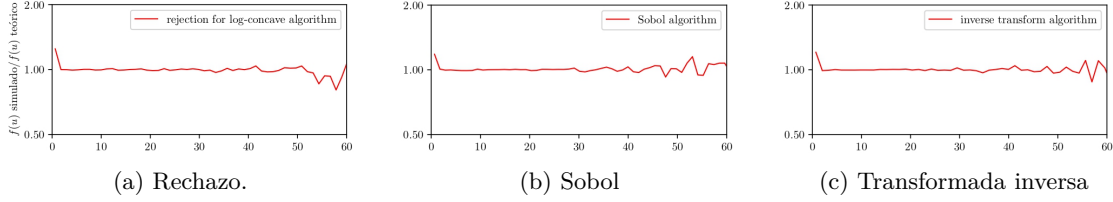


Figura 2: Error obtenido respecto a la distribución teórica para la generación de Maxwellianas estacionarias empleando los algoritmos de rechazo (a), Sobol (b) y de transformada inversa (c), graficado respecto a la magnitud de velocidad u .

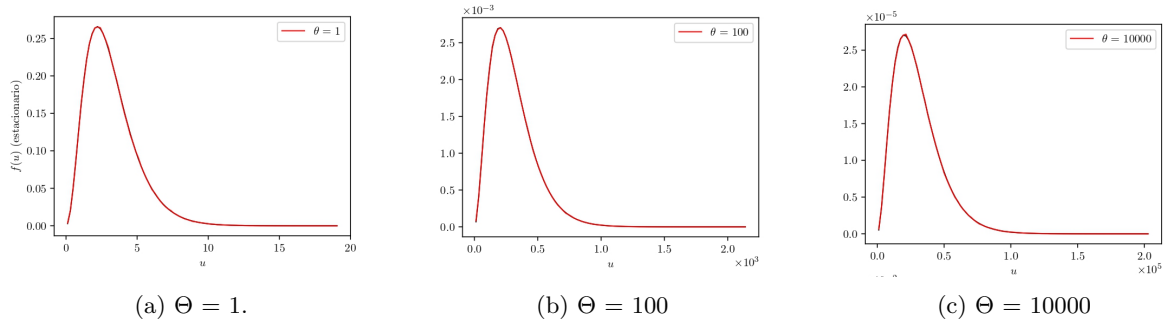


Figura 3: Distribuciones Maxwellianas estacionarias calculadas mediante el algoritmo de Sobol para tres valores de Θ distintos. En cada caso se ilustra la distribución generada mediante la simulación (rojo) en conjunto con la versión teórica (negro).

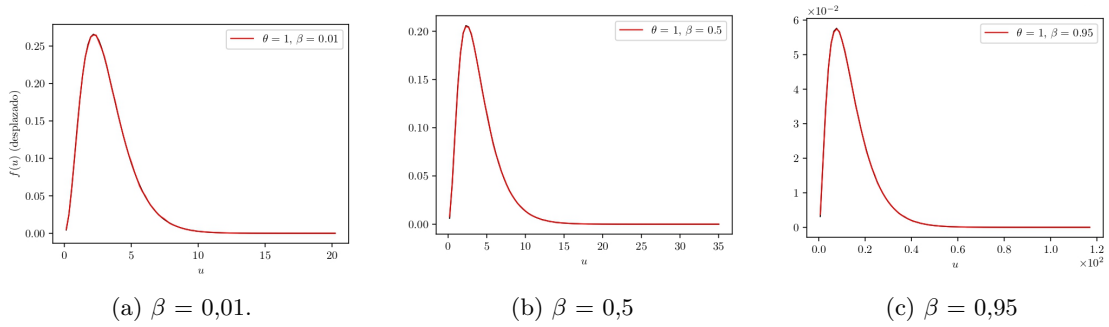


Figura 4: Distribuciones Maxwellianas desplazadas calculadas mediante flipping method para tres valores de β distintos. En cada caso se ilustra la distribución generada mediante la simulación (rojo) en conjunto con la versión teórica (negro).

De la figura (2), se observa que los errores asociados a los tres algoritmos no parecen exhibir diferencias considerables entre ellos. En general, logra apreciarse que estos se mantienen suficientemente estables hasta alcanzar altos valores de u . Sin embargo, durante la implementación se obtienen tiempos de cómputo que difieren ampliamente entre los casos, siendo el algoritmo de rechazo de Swisdak el que requiere más tiempo en finalizar. Por lo tanto, para asignar velocidades durante la inyección de las especies del jet en el medio intergaláctico magnetizado, se opta por emplear el algoritmo de Sobol en cada paso de tiempo del algo.

Continuando con lo anterior y con el objetivo de evidenciar la capacidad del algoritmo de Sobol para reproducir las distribuciones deseadas, en la figura (3) se ilustran los resultados de tres ensayos del caso estacionario, en los que se emplean valores de Θ distintos, y son graficadas en conjunto con su respectiva distribución teórica. Por otro lado, en la figura (4) se muestran tres pruebas realizadas para reproducir el caso desplazado, esto se lleva a cabo para un valor de Θ fijo y variando el parámetro β . De las figuras (3) y (4), se observa que las curvas obtenidas tienen un ajuste significativamente bueno respecto a la curva teórica. Así mismo, del comportamiento de las distribuciones, para el caso estacionario se puede notar que a medida que aumenta el parámetro Θ la curva se va aplanando mientras su máximo se desplaza. Es decir, a medida que la energía térmica del sistema se hace mayor que la energía en reposo de las partículas el sistema descrito, estas alcanzan valores mayores de velocidad. Sin embargo, nótese que en cada caso, el ancho de la distribución se encuentra concentrado mayoritariamente a la izquierda de la gráfica, lo que significa que los valores probables de velocidad que pueden alcanzar siempre se encuentran limitados, con lo cual se verifica que la forma de estas curvas concuerdan el planteamiento realizado para sistemas relativistas, pues se respeta el límite de la velocidad de la luz. Análogamente, en el caso de los Maxwellianos desplazados se evidencia un fenómeno similar. En estos casos, como consecuencia del incremento en β , la curva nuevamente se aplanan, el máximo se desplaza y su cola se encuentra mucho más extendida.

Ahora bien, en la simulación realizada para el modelo de transporte de jets en IGM, se toma: un ancho del jet de $W_n = 2$, se decide inyectar igual número de electrones e iones al medio por cada paso de tiempo (3 partículas por especie), el factor de Lorentz de inyección se toma como $\gamma_0 = 16$. La grilla se toma de 100×100 puntos con dimensión lineal $L = 10$, empleada para representar el medio intergaláctico. Por otra parte, para llevar a cabo el esquema del algoritmo PIC, se escoge un tamaño de celda igual al paso de grilla, $\Delta x = 0,1$ y para la representación en macro-partículas. El ancho del cambio de polaridad

del campo magnético externo se toma como $W_b = 1$. Continuando con los planteamientos anteriores, para el interés del presente estudio se indaga en dos casos: uno *débilmente magnetizado* y otro *altamente magnetizado*. Para la simulación en magnetización débil, se inicializan un total de 50 partículas por especie (iones y electrones) en el IGM, tomando un valor de $\sigma_{ji} = 0,04$. De esta forma en la figura (5)(a) se muestra la distribución de partículas dentro de la grilla para el estado del sistema para 100 pasos de tiempo (con un $\Delta t = \Delta t_{\text{CFL}} = 0,07$). Adicionalmente, en la figura (5) (b) se presenta la intensidad del campo magnético final B_z a lo largo de la grilla para este instante de tiempo.

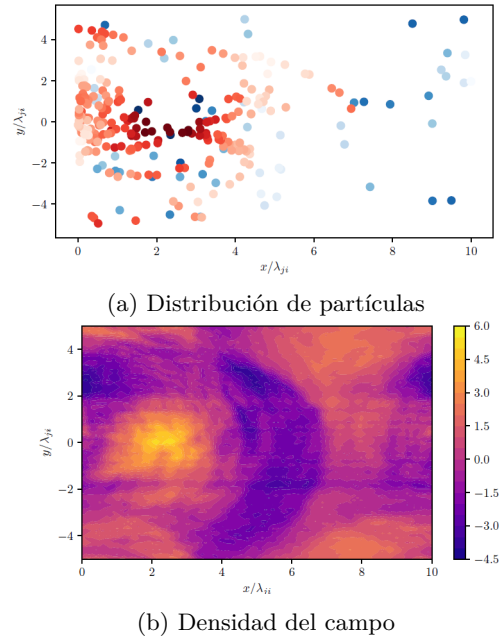


Figura 5: Distribución de partículas del jet y del IGM al interior de la grilla (a), densidad de campo magnético en la grilla (b). Caso débilmente magnetizado para $N_t = 100$.

De la figura anterior, se observa que las partículas del jet logran llegar prácticamente a la mitad de la grilla y en general dispersándose a lo largo de la dirección y , a su vez puede notarse como las especies de jet y medio intergaláctico parecen exhibir trayectorias curvadas, corroborando el efecto del campo magnético. Prosiguiendo con la distribución de B_z se aprecia que este logra esparcir partículas y concentrarlas en el centro pero al ser débilmente magnetizado no lo hace de forma tan notable ni con tanta intensidad.

Por otro lado, para modelar el caso con magnetización alta, se emplean un total de 200 partículas para el estado

inicial del medio, con igual número de electrones e iones, y se toma una tasa de magnetización $\sigma_{ji} = 1$. Nuevamente para un total de 100 pasos de tiempo. Análogamente al caso anterior, se realizan las gráficas de distribución de partículas e intensidad de campo magnético, las cuales se muestran en la figura (6).

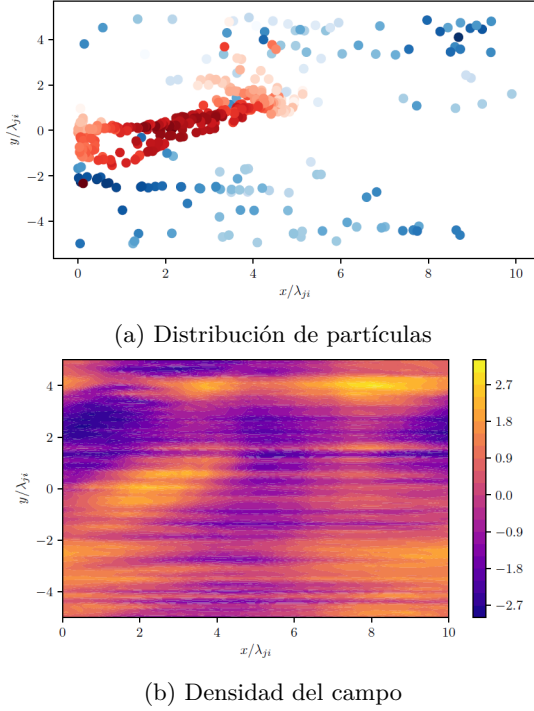


Figura 6: Distribución de partículas del jet y del IGM al interior de la grilla (a), densidad de campo magnético en la grilla (b). Caso altamente magnetizado para $N_t = 100$.

En la figura anterior, se percibe que si bien la trayectoria de las partículas del jet se ve alterada, estas no se dispersan significativamente a lo largo de la grilla, al contrario, exhiben un desplazamiento más concentrado respecto al caso débilmente magnetizado. Puede inferirse el efecto de los campos eléctricos para contrarrestar esta deflexión. Se observó de los datos obtenidos que los iones no logran avanzar mucho por el medio y terminan siendo rechazados en mayor medida. Además las partículas del medio parece que dan mayor paso al jet por los efectos de los campos. Por otra parte, se hace notoria una separación respecto al centro de grilla de las partículas del medio intergaláctico. Adicionalmente, de la densidad de campo magnético, se nota una intensidad más concentrada en franjas que impiden la dispersión óptima.

En general, comparado al trabajo de Yao et al. se obtiene un chorro de partículas altamente influenciado por el comportamiento de los campos, que afectan su deflexión e influencia por el medio. Realizar medidas cuantitati-

vas requiere una grilla más grande y mayor número de partículas, que requieren una potencia computacional de supercomputadoras o computadoras en paralelo, por lo que recrear por completo de Yao et al. (de momento) no es posible. Por último, el cálculo óptimo de campos y corrientes requiere precisión y potencia computacional, por lo que ciertas simplificaciones tomadas en cuenta afectan los resultados.

5. Conclusiones

Se logra implementar satisfactoriamente algoritmos computacionales para reproducir las distribuciones de Maxwell-Jüttner en su caso estacionario y desplazado, obteniendo un resultado considerablemente cercano a la curva teórica para cada caso. Adicionalmente, se lleva a cabo mediante un esquema de *particle-in-cell* la simulación computacional de transporte de un jet relativista dentro de un medio intergaláctico, para casos débil y altamente magnetizados, bajo un modelo de anchura limitada. En el primer caso, se evidencia la deflexión de partículas del jet por efecto del campo y su dispersión a lo largo de la grilla y por otro lado, en el segundo se presenta un comportamiento de desplazamiento colimado por parte de las especies del jet.

Referencias

- [1] F. Jüttner, *Annalen der Physik* **339**, 856 (1911).
- [2] J. L. Synge, *The relativistic gas*, Series in physics, North-Holland Publications Co, Amsterdam, 1957.
- [3] O. E. Barndorff-Nielsen, T. Mikosch, and S. . Resnick, editors, *Lévy Processes Theory and Applications*, pages 321–324, Springer Science+Business Media, LLC, 1 edition, 2001.
- [4] L. Zaninetti, *International Journal of Astronomy and Astrophysics* **10**, 302 (2020).
- [5] M. Swisdak, *Physics Of Plasmas* **20** (2013).
- [6] S. Zenitani, *Physics Of Plasmas* **22** (2015).
- [7] W. Yao et al., *The American Astronomical Society, The Astrophysical Journal* **876** (2019).
- [8] J. H. Beall, A review of astrophysical jets, in *XI Multifrequency Behaviour of High Energy Cosmic Sources Workshop (MULTIF15)*, page 58, Palermo-Italia, 2015.
- [9] M. Böttcher, D. E. Harris, and H. Krawczynski, editors, *Relativistic Jets from Active Galactic Nuclei*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2012.

- [10] J. P. Sethna, *Statistical Mechanics: Entropy, Order Parameters and Complexity*, page 88, Physics, Cornell University, Ithaca-NY, 2005.
- [11] J. Derouillat et al., Computer Physics Communications **COMPHY**, **6338** (2017).
- [12] L. Devroye, *Non-Uniform Random Variate Generation*, chapter 7, pages 298–299, Springer-Verlag, New York, 1986.
- [13] J.-L. Vay, Physics Of Plasmas **15** (2008).
- [14] T. Z. Esirkepov, Computer Physics Communications **COMPHY**, **135**, 144 (2001).
- [15] S. S. Ganta et al., [Program17 2D FDTD for TE wave Unitless Open Boundary For Loops](#).