



PRESIDÊNCIA DA REPÚBLICA
SECRETARIA DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

INPE-5370-TDI/469

**IMPLEMENTAÇÃO DE UM CÓDIGO EM ÁRVORE
PARA SIMULAÇÕES NUMÉRICAS
DE SISTEMAS ESTELARES**

Eraldo Pereira Marinho

INPE

São José dos Campos

Outubro de 1991

INPE-5370-TDI/469

**IMPLEMENTAÇÃO DE UM CÓDIGO EM ÁRVORE
PARA SIMULAÇÕES NUMÉRICAS
DE SISTEMAS ESTELARES**

Eraldo Pereira Marinho

**INPE
São José dos Campos
Outubro de 1991**

**SECRETARIA DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS**

INPE-5370-TDI/469

**IMPLEMENTAÇÃO DE UM CÓDIGO EM ÁRVORE
PARA SIMULAÇÕES NUMÉRICAS
DE SISTEMAS ESTELARES**

Eraldo Pereira Marinho

**Dissertação de Mestrado em Ciência Espacial/Astrofísica, orientada pelo
Dr. Hugo Vicente Capelato, aprovada em agosto de 1991.**

**INPE
São José dos Campos
Outubro de 1991**

524.6

MARINHO, E.P.

Implementação de um código em árvore
para simulações numéricas de sistemas
estelares. / E.P. Marinho. -- São José
dos Campos: INPE, 1991. 131p. --
(INPE-5370-TDI/469)

1. Galáxias. 2. Simulações numéricas.
3. Título

Aprovada pela Banca Examinadora
em cumprimento a requisito exigido
para a obtenção do Título de Mestre
em Ciência Espacial.

Dr. Ivo Cláudio Busko



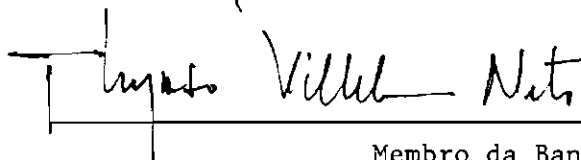
Presidente

Dr. Hugo Vicente Capelato



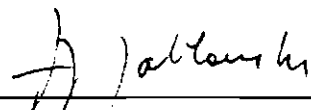
Orientador

Dr. Thyrso Villela Neto



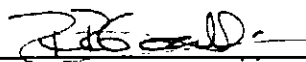
Membro da Banca

Dr. Francisco José Jablonski



Membro da Banca

Dr. Reinaldo Ramos de Carvalho



Membro da Banca
- Convidado -

Candidato: Eraldo Pereira Marinho

São José dos Campos, 30 de agosto de 1991

Aos Meus Pais

Gilberto Pires Marinho (*in memoriam*)

e

Ana Maria Pereira Marinho

AGRADECIMENTOS

A Hugo Vicente Capelato, meu orientador, pela valiosa supervisão deste trabalho.

A Danton Nunes pelas discussões, importantes sugestões e, sobretudo, pela concessão de uma conta no VAX 11/780 do Satélite.

A Marcelo Lopes de Oliveira e Souza pela autorização do meu acesso às instalações do prédio Satélite.

A Carmen Maria Andreazza pela amizade, pelas sugestões e apoio, principalmente nos momentos mais difíceis.

A Raymundo Baptista, pelo incentivo e sugestões.

Ao Prof. Abraham Chian pelo constante incentivo e aos Professores Francisco J. Jablonski, Ivo Busco e Thyrso Villela pelas sugestões e discussões.

Aos meus Colegas do Curso de Astrofísica, pela amizade, reconhecimento e incessante apoio.

A Clemens Gneiding pelo suporte técnico, ao pessoal da Gráfica e da Secretaria de Pós-graduação.

Ao CNPq e à FAPESP pelo suporte financeiro.

RESUMO

Uma implementação de código em árvore para o cálculo das forças em problemas de muitos corpos é apresentada. A técnica consiste essencialmente em virtualizar todo o sistema em uma estrutura de dados em árvore, o que torna o esforço computacional para o cálculo das forças da ordem de $\mathcal{O}(N \log N)$ contra os $\mathcal{O}(N^2)$ da soma direta. O integrador adotado é o simples "*leap-frog*" de segunda ordem de acurácia. Uma rápida discussão sobre os efeitos dos erros de truncamento sobre a morfologia do modelo é feita. Conclui-se que estes erros são pequenos. Contudo, o processo de propagação é markoviano se o passo de integração se adapta aos potenciais, mantendo o erro esperado aproximadamente o mesmo por todo o sistema. Também é apresentado um breve estudo sobre efeitos dinâmicos do comprimento de amolecimento, bem como os efeitos da estrutura da árvore sobre as forças perturbativas, oriundas da natureza discreta da distribuição. Os testes mostram que, mesmo para distribuições completamente arbitrárias, o código tem uma eficiência às vezes melhor que $\mathcal{O}(N \log N)$. A aplicação do código é feita com o colapso de uma esfera homogênea fria, simulando um processo primordial de formação galáctica. A evolução da entropia do sistema sugere que um estado de quase-equilíbrio foi atingido após aproximadamente $2 \cdot 10^9$ anos. É mostrado que a configuração final mantém uma boa semelhança com as propriedades dinâmicas e morfológicas das mais conhecidas elípticas gigantes. Uma discussão é feita sobre a evolução das principais variáveis dinâmicas do sistema. Durante toda a simulação, a energia total foi conservada dentro de 0,1%.

IMPLEMENTATION OF A TREE-CODE FOR NUMERICAL SIMULATIONS OF STELLAR SYSTEMS

ABSTRACT

An implementation of a tree code for the force calculations in gravitational N-body systems simulations is presented. The technique consists in virtualizing the entire system in a tree data-structure, which reduces the computational effort to $\mathcal{O}(N \log N)$ instead of $\mathcal{O}(N^2)$, typical of direct summation. The time integrator adopted is the simple *leap-frog* with second-order accuracy. A brief discussion about the truncation-error effects on the morphology of the system shows them to be essentially negligible. However, these errors do propagate in a Markovian way if a potential-adaptive time-step is used in order to maintain the expected truncation-error approximately constant in the entire system. The dynamic effects of the softening length are discussed as well as the effects of the tree structure on the perturbative forces typical of discrete systems. The tests show that, even with totally arbitrary distributions, the total computation-time obeys an $\mathcal{O}(N \log N)$ behaviour. In some cases, we get an improvement better than $\mathcal{O}(N \log N)$. As an application of the code we evolved an initially cold and homogeneous sphere of point masses to simulate a primordial process of galaxy formation. The evolution of the global entropy of the system suggests that a quasi-equilibrium configuration is achieved after approximately $2 \cdot 10^9$ years. It is shown that the final configuration displays a close resemblance with the well observed giant elliptical galaxies, in both kinematical and luminosity distribution properties. A discussion is given on the evolution of the important dynamic quantities characterizing the model. During all the computations the energy is conserved to better than 0.1%.

SUMÁRIO

	<u>Pág.</u>
LISTA DE FIGURAS	xv
<u>CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO</u>	1
<u>CAPÍTULO 2 - O MÉTODO</u>	5
2.1 - Introdução.....	5
2.1.1 - Método de árvore binária.....	7
2.1.2 - Método de árvore octal.....	8
2.2 - Construção da árvore octal.....	10
2.2.1 - Método escalar para a construção da árvore octal.....	19
2.2.2 - Método parcialmente vetorial.....	20
2.3 - Cálculo das forças.....	20
2.4 - Estimativa do esforço computacional.....	22
2.5 - Integração das órbitas.....	26
2.5.1 - O método leapfrog.....	26
2.5.2 - Erros de truncamento.....	28
2.5.3 - Efeito dos erros de integração sobre a resolução espacial do modelo computacional.....	31
2.5.4 - Estabilidade numérica.....	35
<u>CAPÍTULO 3 - O POTENCIAL AMOLECIDO</u>	38
3.1 - Introdução.....	38
3.2 - Relaxação de pares.....	40
3.3 - Teorema do virial (escalar) com potencial amolecido.....	47
3.4 - Influência do amolecimento nos efeitos de flutuações locais..	52
3.5 - Influência do amolecimento na resolução espacial.....	60
<u>CAPÍTULO 4 - APLICAÇÃO E TESTE DO CÓDIGO</u>	61
4.1 - Introdução.....	61
4.2 - Escalonamento das unidades físico-computacionais.....	62

4.3 - Escolha do passo de integração e do comprimento de amolecimento.....	64
4.4 - Teste da eficiência do código.....	66
4.5 - Aplicação: Colapso de uma distribuição fria de partículas....	69
4.5.1 - Descrição do experimento.....	71
4.5.2 - Discussão dos resultados.....	74
4.5.3 - Interpretação dos resultados.....	98
<u>CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS.....</u>	103
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	107
APÊNDICE A - OBTENÇÃO DE DISTRIBUIÇÕES ESFÉRICAS.....	113
APÊNDICE B - UTILIZAÇÃO DE ÁRVORE PARA A OBTENÇÃO DE FUNÇÕES DISTRIBUIÇÃO.....	115

LISTA DE FIGURAS

	<u>Pág.</u>
2.1 - Divisão recursiva do quadrado unitário.....	11
2.2 - Representação esquemática de uma árvore quaternária.....	15
2.3 - Ilustração de árvore quaternária degenerada.....	16
2.4 - Representação grosseira de como cada partícula no centróide de uma distribuição esférica homogênea "enxerga" as fontes do campo gravitacional pelo método da árvore.....	24
3.1 - Ilustração idealizada de um encontro rápido entre duas par- tículas, com uma delas colocada como referencial.....	42
3.2 - Evolução das energias cinética e total.....	50
4.1 - Erro na força resultante por unidade de massa versus parâ- metro de tolerância θ	68
4.2 - Erro no torque resultante versus θ	68
4.3 - Esforço computacional versus $\log_2 N$ para 6 valores de θ	69
4.4 - Dezesesseis primeiras etapas da evolução do colapso.....	75
4.5 - Ampliação dos quadros correspondentes a (a) $62,88 \cdot 10^6$, (b) $83,84 \cdot 10^6$, (c) $136,2 \cdot 10^6$ e (d) $167,7 \cdot 10^6$ anos.....	77
4.6 - Evolução das energias total e cinética durante $670 \cdot 10^6$ anos	78
4.7 - Etapas da evolução do sistema nos primeiros $670,7 \cdot 10^6$ anos.....	80
4.8 - Quatro configurações do sistema nos instantes $2,3 \cdot 10^9$, $3,1 \cdot 10^9$, $3,8 \cdot 10^9$ e $4,9 \cdot 10^9$ anos, respectivamente.....	85
4.9 - Superposição de quatro gráficos $\rho(r) \times r$	86
4.10 - Superposição de quatro perfis de densidade superficial....	87
4.11 - Gráficos superpostos de dispersão de velocidades.....	88
4.12 - Energia de ligação média por camada radial.....	89
4.13 - Superposição da função distribuição de energia de ligação por massa unitária.....	90
4.14 - Evolução da entropia do sistema.....	92
4.15 - Densidade espacial $\rho(r)$ versus r , avaliada do ensemble....	95
4.16 - $\log_{10} \Sigma(r)$ contra $r^{1/4}$ avaliado no "ensemble".....	95
4.17 - Dispersão de velocidades $\sigma(r)$ contra posição radial r avaliada do ensemble.....	96

4.18 - Fator ou grau de anisotropia $\beta(r)$ do ensemble.....	97
4.19 - Função distribuição de energia de ligação por unidade de tomada do ensemble.....	98
4.20 - Ampliação do quadro, correspondente a $t = 52,40 \cdot 10^6$ anos da Figura 4.4a.....	99

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Nos últimos 50 anos, uma crescente atenção tem sido voltada para a viabilidade de se calcular variáveis dinâmicas de sistemas físicos com muitos graus de liberdade, apresentando resultados cada vez mais confiáveis, à medida que computadores mais velozes e técnicas computacionais mais sofisticadas vêm sendo desenvolvidos.

A possibilidade de, a partir de leis fundamentais da física, realizar experimentos numéricos que preveem desde o funcionamento de dispositivos eletrônicos (v. Hockney e Eastwood 1981) até resultados cosmológicos, que aparentemente concordam com o que é observado (Efstathiou e Eastwood 1981), recompensa todos os esforços empreendidos pelos matemáticos dos três últimos séculos.

Com o advento do cálculo integral e diferencial por Newton e Leibnitz, no final do século XVII, os dois séculos posteriores foram dedicados ao desenvolvimento de ferramentas matemáticas da física teórica e da astronomia. Este período foi presenteado por trabalhos revolucionários tais como os estudos de equações a derivadas parciais, os estudos das séries e integrais de Fourier e suas generalizações até os espaços de Hilbert, a geometria diferencial e as abstratas álgebra, teoria de grupos e topologia. Todos estes desenvolvimentos assistiram a física, tanto a da época quanto a moderna, muito mais com o propósito de construção de teorias fundamentais, tais como a mecânica analítica, a eletrodinâmica, a mecânica quântica e as teorias da relatividade, que o de resolver problemas de cunho prático, que nem sempre podem ser descritos em termos de uma simples série de harmônicos cilíndricos, esféricos *etc.*, que exigem sempre um conjunto de simetrias simplificadoras.

Nos tempos de hoje, é possível, a partir do conhecimento de conceitos já então clássicos, resolver problemas que envolvam situações mais realistas como, por exemplo, a equação de Poisson para um problema com fronteiras no infinito e com uma distribuição arbitrária de fontes do potencial.

Contudo, a representação limitada dos números reais na forma de mantissas de comprimento finito, os truncamentos necessários das séries de potências, que definem as funções transcendentais, e os truncamentos típicos de técnicas de integração e de diferenciação dão lugar a um estudo bastante complexo, denominado **Análise Numérica**. O ramo da física teórica que é subsidiado pela análise numérica é a física computacional, cujo propósito é o de desenvolver e analisar experimentos numéricos, com modelos que correspondem a sistemas físicos quaisquer, apresentando resultados precisos e consistentes com o que é observado.

Quase toda a física teórica foi construída em função de dados experimentais obtidos em laboratório. A mecânica quântica, por exemplo, surgiu para explicar os resultados fornecidos pelas pesquisas de espectrometria (*e.g.*, as linhas de emissão e absorção dos elementos químicos) e de outros trabalhos envolvendo partículas elementares, tais como espalhamento de elétrons em redes cristalinas. Contudo, existe um ramo da física teórica, cujos alicerces são puramente as leis da mecânica e da gravitação de Newton, mas seu objeto de estudo são as propriedades dinâmicas e morfológicas de sistemas compostos de um grande número de partículas que vai desde alguns milhares até muitos bilhões. Trata-se da Dinâmica Galáctica, ou também dinâmica de sistemas estelares, (Binney-Tremaine 1987; Saslaw 1985), cuja origem monta do início do Século com os trabalhos de Sir James Jeans (1919).

A dinâmica galáctica tem como motivação fenomenológica os objetos de estudo da astronomia extra-galáctica: galáxias, aglomerados de estrelas, aglomerados de galáxias e estruturas em grande escala. A metodologia empregada é essencialmente a mesma da física de plasmas e teoria cinética dos gases. Há uma tentativa de se fazer uma termodinâmica de sistemas autogravitantes e até mesmo um formalismo semelhante ao da mecânica quântica (*c.f.* Saslaw 1985).

Ao contrário das físicas do início do século, a dinâmica galáctica não pode testar suas hipóteses e modelos em laboratórios analógicos. Felizmente, o advento da computação eletrônica tornou viável a experimentação numérica de sistemas estelares. O computador é o laboratório de física de sistemas estelares.

Nos últimos 30 anos houve um enorme progresso, tanto na precisão dos cálculos quanto na sua velocidade de processamento. Assim, experimentos realizados no início da década de 1970 (*e.g.*, Aarseth 1971) em grandes computadores da época, com cem a mil partículas, são realizados, hoje em dia, em PC's incrementados (*e.g.*, as simulações-teste que foram realizadas neste trabalho). Atualmente, as novas técnicas computacionais, combinadas com os supercomputadores e "workstations", permitem realizar experimentos, em apenas um ou dois dias, com um número de partículas da ordem de 10^4 a 10^5 , em escalas de tempo físico comparáveis a um tempo de Hubble (*e.g.*, Barnes 1988, 1989; Burkert 1990).

Quanto mais experimentos numéricos de sistemas estelares forem realizados, combinados com observações feitas com instrumentos e técnicas de análise mais precisos, mais chances teremos de inferir corretamente a respeito da formação de galáxias, da sua diferenciação morfológica, da razão massa-luminosidade, da importância de processos dissipativos na formação das partes centrais *etc.* Enfim, importantes conclusões podem nos levar a uma visão mais aclarada do Universo, da sua origem e, talvez, do seu destino.

O objetivo deste trabalho é o de apresentar uma nova técnica computacional, introduzida na segunda metade dos anos 80, para simulação de sistemas estelares (*e.g.*, Appel 1981, 1985; Barnes e Hut 1986). Trata-se da utilização de árvores de dados para o cálculo das forças, seguindo uma hierarquia de distâncias em que porções-fonte do campo têm seus tamanhos determinados aproximadamente por um ângulo sólido pré-fixado. A principal consequência desta técnica é que as forças são calculadas com maior resolução para as contribuições mais próximas e com baixo nível de detalhamento para as contribuições remotas, acarretando num esforço computacional da ordem de $\mathcal{O}(N \log N)$ contra os $\mathcal{O}(N^2)$ da soma direta.

Aqui o enfoque é dado aos sistemas estelares não-colisionais, também conhecidos como sistemas não-correlacionados (Hockney e Eastwood 1981, p. 13). Um sistema não-colisional é uma idealização, que estabelece que todas partículas obedecem exclusivamente às forças coletivas (componentes lisas), que são bem descritas por integrais sobre distribuições contínuas. Sistemas como

galáxias, em escalas de tempo comparáveis ao tempo de Hubble, estão muito próximas desta idealização.

A apresentação e construção do código em árvore para o cálculo das forças são feitas no Capítulo 2. Aqui é adotada a técnica desenvolvida por Barnes e Hut (1986), mas com uma certa independência no desenvolvimento dos programas. A linguagem computacional adotada é o Pascal padrão, visto que é uma linguagem que facilita o desenvolvimento de programas científicos que utilizam a filosofia de estrutura de dados. Contudo, as versões que são utilizadas neste trabalho não são de fácil tradução para o FORTRAN 77, ficando a versão otimizada para computadores com arquitetura "pipe line", inclusive, para um trabalho posterior (v. Capítulo 5). Os algoritmos fundamentais do método são apresentados em "PORTUGOL" (pseudo-código com termos em português). Também no Capítulo 2, é calculado o esforço computacional dos códigos de montagem da árvore e de utilização desta para o cálculo das forças. O método de integração adotado é o "leap-frog" de segunda ordem e são discutidos os erros de truncamento, a propagação destes para a morfologia do sistema e a estabilidade numérica do integrador.

No Capítulo 3, são discutidos alguns efeitos do artifício que atribui aos modelos as propriedades de sistemas estelares não-colisionais: o comprimento de amolecimento ϵ (Aarseth 1963). Também são discutidos os efeitos de flutuações de densidade, para os métodos da soma direta e da árvore, e a influência do amolecimento sobre estes.

No Capítulo 4, efetua-se os testes do código com um experimento de colapso violento de um objeto esferóide, cujas condições iniciais são obtidas por Monte Carlo. Os resultados mostram que os remanescentes de colapsos violentos têm alta densidade superficial central. Este resultado concorda com os de um trabalho recente (Burkert 1990).

A conclusão e as perspectivas de futuros trabalhos que empregam a gama de aplicações das técnicas de árvore (c.f. Hernquist 1989; Hernquist e Katz 1990) são apresentadas no Capítulo 5.

CAPÍTULO 2

O MÉTODO

2.1 - INTRODUÇÃO

Até bem pouco tempo, os métodos empregados na solução numérica do problema de muitos corpos autogravitantes têm sido ou variantes da soma direta (*e.g.*, Aarseth 1971; Ahmad e Cohen 1973) ou variantes de técnicas numéricas utilizadas na solução de equações a derivadas parciais (*e.g.*, Hockney e Eastwood 1981, p. 18-23 e Caps. 5-8; Tjonov e Samarsky 1980, pgs. 620 - 700; Binney e Tremaine 1987, pgs. 90 - 99). Nos primeiros, os esforços são voltados para a otimização das técnicas de integração das órbitas das partículas do sistema, incorporando métodos preditores-corretores (Hockney e Eastwood 1981, Cap. 4) e atribuindo às partículas passos individuais de integração. Nos segundos, as técnicas são voltadas para o cálculo rápido do potencial coletivo do sistema, utilizando grades espaciais, onde o conjunto de partículas no interior de uma célula é substituído por uma superpartícula (também chamada nuvem). Os mais famosos são os **PM** (particle-mesh) e os **P³M** (particle-particle_particle-mesh).

Os métodos **PM** consistem simplesmente em levantar a grade de potenciais (forças) e integrar as órbitas das partículas no interior das células da grade. Já os métodos **P³M** são um pouco mais complexos, consistem em computar as interações entre as partículas de mesma célula e, separadamente, computar as forças da grade (componentes coletivas).

Métodos de grade não funcionam em sistemas colisionais e são limitados em resolução espacial em decorrência da restrição do domínio do sistema a células pré-estabelecidas em algum sistema de coordenadas. Em compensação, são extremamente rápidos, podendo em alguns casos ter um esforço computacional da ordem de $\mathcal{O}(N)$, onde N é o número de partículas do sistema. Técnicas de soma direta são as mais precisas e, infelizmente, são as mais dispendiosas computacionalmente falando; o esforço computacional de técnicas derivadas da de Ahmad e Cohen (1973) é da ordem de $\mathcal{O}(N^a)$, com $1 < a \leq 2$, em sistemas relativamente homogêneos sendo que, quando ocorrem fortes aglutinações, o esforço

degrada para $\mathcal{O}(N^2)$ (vide um breve histórico de simulações de muitos corpos que é feito por Appel (1985)).

Recentemente, uma nova classe de algoritmos tem sido proposta (Appel 1981, 1985; Barnes e Hut 1986), que reúne as vantagens da soma direta às das técnicas de grade. A técnica consiste essencialmente em calcular as forças segundo uma hierarquia de tamanhos (distâncias) das partes do sistema, usando uma estrutura de dados em árvore (*e.g.*, M. Wand 1984, Cap. 1, para uma definição rigorosa). Regiões mais próximas de onde se está calculando as forças são tomadas com maior nível de detalhamento, enquanto as partes remotas são acessadas com menor resolução. O tamanho de cada porção avistada pelo método é limitado pelo critério de tolerância, $a \leq r\theta$, onde a é o tamanho da porção e θ é o parâmetro de tolerância. As principais vantagens desta técnica, além da que já foi citada acima, são:

- a) segmentação do sistema, para o cálculo das forças, não depende de uma grade fixa pré-estabelecida, o que dá ao método um caráter lagrangiano (Hernquist e Katz 1989), eliminando as desvantagens das grades que, naturalmente, impõem ao potencial uma simetria prévia;
- b) em virtude de se percorrer uma árvore para o cálculo das forças, o esforço computacional é, em média, aproximadamente $\mathcal{O}(\log N)$ por partícula, quando θ não é muito menor que a unidade (Hernquist 1987).

Pode-se dizer que métodos de árvore atualmente dividem-se em duas subclasses: (i) a dos algoritmos que utilizam árvores binárias (*e.g.*, Appel 1981, 1985) e (ii) a dos códigos que lançam mão de árvores octais (Barnes e Hut 1986). A primeira vincula o sistema, em sua extensão, à construção da árvore. A segunda associa a árvore ao espaço que contém o sistema.

2.1.1 - MÉTODO DE ÁRVORE BINÁRIA

Este método consiste na bipartição recursiva do sistema em dois subsistemas filhos, cada um com metade da massa do sistema pai, até que a última divisão consista em separar um par de partículas. As propriedades dinâmicas de cada porção são cadastradas nos nós de uma árvore binária, sempre com respeito ao centróide da porção-pai. Assim, a raiz da árvore corresponde ao sistema inteiro, enquanto cada porção obtida por bipartição corresponde a um nó e cada partícula corresponde a uma folha.

O método possui ambigüidades quanto à fronteira que separa os subsistemas filhos. A remoção desta ambigüidade é efetivada mediante alguma restrição geométrica imposta à divisão. O usual (Appel 1985) é impor que pares de nós minimamente distanciados sejam associados a nós comuns. Isto obviamente impõe que a construção da árvore dê-se de baixo para cima, encontrando o nó mais próximo para cada outro ainda não associado, restringindo o número de partículas a uma potência inteira de dois (*i.e.*, $N = 2^n$, $n \in \{1, 2, 3, \dots\}$).

As forças são calculadas percorrendo-se a árvore de cima para baixo. Dados dois nós irmãos, se ambos satisfazem o critério de tolerância, calcula-se as forças do binário (usando expansão multipolar para maior precisão) e integra-se as órbitas dos centróides dos dois nós, com respeito ao centróide do nó-pai, ao longo de um intervalo de tempo Δt . Uma vez que isto é feito, propaga-se recursivamente este raciocínio para os nós interiores, até se chegar à integração das órbitas de um par de partículas. No final, a combinação dos movimentos dos nós-pais com os movimentos dos nós-filhos dá como resultado a integração das órbitas individuais das partículas. Se o critério de tolerância não é satisfeito, resolve-se o nó maior em dois nós internos até que o critério seja satisfeito. Este método de se calcular as forças, e de se integrar as órbitas, é eficiente enquanto não ocorra interpenetração de nós.

Uma versão recente (Jerningan e Porter 1989) combina as vantagens da árvore ao método de passos de integração regularizáveis, dando ao código a possibilidade de se realizar simulações extremamente realistas sem apresentar perdas de resolução espacial nas regiões concentradas.

2.1.2 - MÉTODO DE ÁRVORE OCTAL

Este método baseia-se em técnicas utilizadas em mapeamento de densidades e pesquisas de vizinhos mais próximos (*e.g.*, Finkel e Bentley 1974; Bentley e Stanat 1975; Bentley e Friedman 1979) que consiste na divisão recursiva de uma região cúbica, que contém um conjunto de pontos, em octantes até que algum critério de controle seja satisfeito para todos os octantes. A divisão é acompanhada pela construção de uma árvore octal onde cada octante (octeto) corresponde a um nó da árvore.

A primeira implementação deste recurso, para o cálculo das forças em problemas de muitos corpos, foi apresentada por Barnes e Hut (1986), a qual consiste basicamente em dividir recursivamente a região em que o sistema se encontra em octantes, até que cada um contenha no máximo uma única partícula. Os octantes (octetos) são encadeados em uma árvore octal, a qual será usada para o cálculo das forças, considerando cada octante como superpartícula. O cálculo é feito percorrendo a árvore de cima para baixo, buscando para cada partícula os octantes que satisfazem o critério de tolerância. O método da árvore octal está diretamente ligado ao espaço que contém o sistema e não ao sistema propriamente dito, diferentemente da árvore binária que é intimamente ligada às partículas do sistema.

Diferentes implementações surgiram nestes últimos quatro anos (*e.g.*, Hernquist 1987, 1990; Barnes 1990; Makino 1990a; Makino e Hut 1989) em que esforços são voltados para a adaptação da filosofia de árvores às versões existentes de compiladores FORTRAN e aos seus respectivos empregos em processadores paralelos/vetoriais (*e.g.*, CRAY X-MP, CONVEX, FPS 5000 array processor), sendo que, destas, a versão mais otimizada é a de Makino (1990a) em que todas partículas são cadastradas em seus correspondentes nós, a uma só vez em cada nível, no sentido unicamente descendente.

Diferentemente do método da árvore binária, no método da árvore octal não ocorre hierarquia de composição de movimento de centróides. As integrações das órbitas são feitas diretamente sobre as partículas, uma vez que sobre cada uma se tenha calculado as forças. A precisão do cálculo das forças é consideravelmente aumentada se são incorporadas às células componentes de

multipolo.

Devido à simetria simples das células, é possível se fazer uma estimativa, mesmo grosseira, dos erros produzidos pelo desprezo de termos de multipolo de maior ordem, *e.g.*, aproximação de monopolo (Barnes e Hut 1989); ao contrário, isto não é possível com o método da árvore binária em virtude da arbitrária geometria de suas células.

Uma comparação entre os dois métodos é feita por Makino (1990b) na qual se mostra que, embora a construção da árvore binária seja mais prolongada, ambos os métodos têm aproximadamente a mesma eficiência tanto em tempo de computação quanto em consistência dos resultados em máquinas convencionais (computadores escalares). Em processadores vetoriais o método de Barnes e Hut tem-se mostrado mais eficiente em virtude de procedimentos de construção de árvores serem relativamente mais dispendiosos em tais máquinas.

Recentes trabalhos (Greengard e Rokhlin 1987; Greengard 1988; Ambrosiano, Greengard e Rokhlin 1988; Carrier, Greengard e Rokhlin 1988) mostram que é possível reduzir o esforço computacional de $\mathcal{O}(N \log N)$ para $\mathcal{O}(N)$, simetrizando o cálculo das forças entre células. Assim, cada célula avista em média $\mathcal{O}(\log N)$ outras células o que torna o cálculo das interações entre células, com um esforço de $\mathcal{O}(\log^2 N)$, muito mais rápido que a integração das órbitas das partículas que dispense um tempo proporcional a $\mathcal{O}(N)$.

Neste trabalho, apresenta-se duas versões de algoritmos em árvore octal para N-corpos. Uma é versão é escalar e foi montada com base na descrição dada por Barnes e Hut (1986). A outra é uma versão parcialmente vetorial que serve como ponto de partida para a transcrição deste algoritmo para o FORTRAN 77, uma vez que se conheça regras de substituição de procedimentos recursivos por procedimentos iterativos. A versão do código utilizada foi a escalar (Secs. 2.2 e 2.3), visto que esta é a mais adequada para a máquina utilizada. A linguagem adotada para o desenvolvimento e execução dos programas foi o Pascal padrão (Jensen e Wirth 1974) para o ambiente computacional VAX VMS, sendo que o código da simulação tem pouco mais de 300 linhas incluindo comentários.

Nas próximas duas seções (2.2 e 2.3) são dadas as etapas de elaboração dos códigos de construção e de transversalização da árvore octal. Na Seção 2.4 deduz-se os esforços computacionais, tanto para o código de construção da árvore de dados quanto para o código de transversalização (para o cálculo das forças). Detalhes da técnica de integração da órbitas são discutidos na Seção 2.5. Os testes do código são feitos no Capítulo 4.

2.2 - CONSTRUÇÃO DA ÁRVORE OCTAL

A construção da árvore octal está diretamente ligada ao processo de construção da **curva de Peano**¹, que associa o intervalo unitário $I = [0,1)$ ao cubo unitário $I^3 = I \times I \times I$. O encadeamento dos nós da árvore segue o caminho inverso ao do conjunto de procedimentos que faz a associação $f:I \rightarrow I^3$.

A rigor, qualquer ponto do I^3 é acessado por um único caminho, infinito, de vizinhanças cúbicas, obtido por divisões recursivas do cubo unitário em octantes. Se é estabelecida uma ordem de numeração dos octantes (e.g., de 0 a 7) é possível montar um número real $t \in I$, a partir de um ponto P do I^3 . Inversamente, existe um conjunto de processos, que desmonta um número $t \in I$ em uma seqüência infinita de rótulos, donde, segundo o critério de numeração estabelecido, obtém-se as coordenadas x,y,z do ponto P . Este último processo é o que caracteriza a curva de Peano.

Pode-se fazer as construções no caso bidimensional a fim de facilitar as ilustrações. Considere-se um ponto (x,y) do quadrado unitário I^2 (Figura 2.1). Através da divisão recursiva dos quadrados que contém o ponto, começando pelo I^2 , chega-se a uma seqüência infinita de quadrantes, $\{q_n; n = 0,1,2,\dots\}$, onde cada quadrante q_{n+1} possui arestas que são metade das arestas do quadrante-pai q_n . O quadrado q_0 é trivialmente o quadrado I^2 e, por isso, não precisa configurar na representação do ponto (x,y) .

¹ Curva de Peano, num espaço X , é o caminho $f:I \rightarrow X$ tal que $f(I) = X$ (v. Elon Lages Lima 1970).

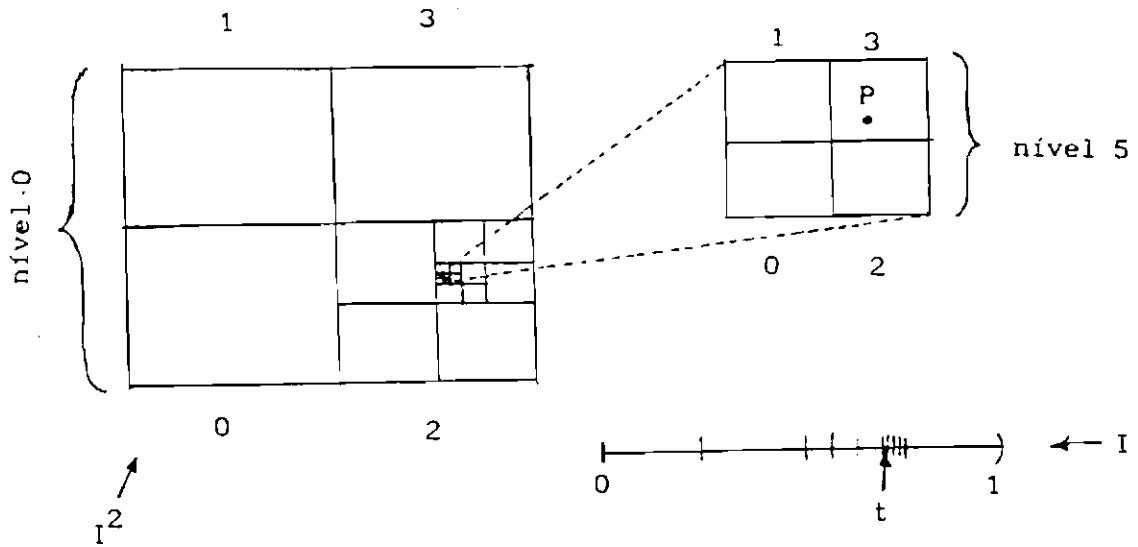


Fig. 2.1 - Divisão recursiva do quadrado unitário I^2 (quadrado maior) em quadrantes idênticos. O quadrado à parte (canto superior direito) é uma ampliação da região hachureada que contém o ponto P, representado pelo escalar t , na reta unitária I (canto inferior direito).

Se é adotado o critério de enumeração da Figura 2.1, tem-se que cada quadrante q_n é identificado pelo rótulo $q_n \in \{0,1,2,3\}$. A partir desta seqüência de quadrantes obtém-se imediatamente um número real t que associa biunivocamente o ponto (x,y) através de

$$t = \frac{q_1}{4} + \frac{q_2}{4^2} + \dots + \frac{q_n}{4^n} + \dots = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q_n}{4^n}, \quad (2.1)$$

que facilmente se verifica que esta soma em (2.1) representa qualquer ponto do intervalo I , onde os q_n são os algarismos da representação de t na base quatro:

$$t = (0, q_1 q_2 q_3 \dots q_n \dots)_4. \quad (2.2)$$

Inversamente, existe um procedimento A que desmonta o número t em quadrantes q_1, \dots, q_n, \dots :

$$(q_1, q_2, \dots, q_n, \dots) = A t. \quad (2.3)$$

Ainda, cada rótulo q_n pode ser escrito na base dois:

$$q_n = 2x_n + y_n = (x_n y_n)_2, \quad (2.4)$$

com $x_n, y_n \in \{0,1\}$. Assim, existem os procedimentos \mathbb{X} e \mathbb{Y} que desmontam os quadrantes q_1, \dots, q_n, \dots em bits x_1, \dots, x_n e y_1, \dots, y_n , respectivamente:

$$(x_n, y_n) = (\mathbb{X}, \mathbb{Y}) q_n. \quad (2.5)$$

Estabelecendo-se que os bits x_n, y_n compõem a representação binária das coordenadas x, y , respectivamente, tem-se que

$$x = \sum x_n/2^n \text{ e } y = \sum y_n/2^n, \quad (2.6)$$

ou ainda na base dois:

$$x = (0, x_1 x_2 x_3 \dots x_n \dots)_2 \quad (2.7)$$

$$y = (0, y_1 y_2 y_3 \dots y_n \dots)_2$$

onde (2.6) e (2.7) correspondem ao procedimento \mathbb{B} , que monta as seqüências de bits x_1, \dots, x_n, \dots e y_1, \dots, y_n, \dots correspondentes às coordenadas x e y , respectivamente:

$$x = \mathbb{B}(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n, \dots) \quad (2.8)$$

$$y = \mathbb{B}(y_1, y_2, y_3, \dots, y_n, \dots)$$

Assim, tem-se que a curva de Peano é representada pela composição de procedimentos

$$(x, y) = \mathbf{f}_{(t)} = \mathbb{B} \circ (\mathbb{X}, \mathbb{Y}) \circ \mathbb{A} t. \quad (2.9)$$

Para a construção da árvore é de interesse o processo inverso ao descrito em (2.9):

$$t = f^{-1}(x,y) = A^{-1} \circ (X,Y)^{-1} \circ B^{-1}(x,y) , \quad (2.10)$$

onde B^{-1} caracteriza o procedimento de decomposição binária; $(X,Y)^{-1}$ é o processo de montagem dos bits de x e de y em quadrantes:

$$(X,Y)^{-1}(x_n, y_n) = 2x_n + y_n = q_n; \quad (2.11)$$

finalmente, A^{-1} é o procedimento de montagem dos quadrantes $q_1, q_2, \dots, q_n, \dots$, na série dada em (2.1). Este último procedimento não é necessário para a construção da árvore, visto que, o que interessa é apenas a indexação das células (quadrantes) com os rótulos q_n obtidos por

$$(q_1, q_2, \dots, q_n, \dots) = (X,Y)^{-1} \circ B^{-1}(x,y) . \quad (2.12)$$

Computacionalmente, o procedimento B^{-1} consiste em empurrar para a esquerda os bits das representações em (2.7) e na subsequente retirada da parte inteira do resultado recém obtido. Este procedimento pode ser ilustrado pelo algoritmo abaixo:

```

procedimento  $B^{-1}(x)$ ;
comece
  {empurre os bits de  $x$  à esquerda;}
   $x \leftarrow 2x$ ;
  {tome o bit à esquerda da vírgula;}
  se  $x > 1$ 
    então
      comece
         $x_n \leftarrow 1$ ;
         $x \leftarrow x - 1$ 
      fim
    senão
       $x_n \leftarrow 0$ ;
  { $B^{-1}$  assume o valor da função}
   $B^{-1} \leftarrow x_n$ 
fim
retorne  $x$ ;

```

Cada vez que o procedimento \mathbb{B}^{-1} atua nas coordenadas x, y , seus valores são alterados. Assim, após a n -ésima atuação de \mathbb{B}^{-1} sobre (x, y) , a configuração de x e de y é

$$x = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{x_{l+n}}{2^l} \equiv (0, x_{n+1} x_{n+2} x_{n+3} \dots)_2$$

$$y = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{y_{l+n}}{2^l} \equiv (0, y_{n+1} y_{n+2} y_{n+3} \dots)_2$$
(2.13)

O procedimento $(\mathbb{X}, \mathbb{Y})^{-1}$ é ilustrado com o algoritmo abaixo:

```

procedimento  $(\mathbb{X}, \mathbb{Y})^{-1}(x, y);$ 
  comece
     $q \leftarrow 2x + y;$ 
     $(\mathbb{X}, \mathbb{Y})^{-1} \leftarrow q$ 
  fim;

```

Embora a sequência de quadrantes, que estabelece um ponto (x, y) no quadrado unitário, seja infinita, o número de termos necessário para distinguir dois pontos (x', y') e (x'', y'') , quaisquer, tais que $(x', y') \neq (x'', y'')$, é finito. A distinção entre os dois pontos é evidente quando ambos passam a ter vizinhanças disjuntas. Assim, os escalares t' e t'' que passam a representar (x', y') e (x'', y'') , respectivamente, só precisam ser escritos como

$$t' \equiv (0, q_1 q_2 \dots q_{n-1} q'_n)_4$$

$$t'' \equiv (0, q_1 q_2 \dots q_{n-1} q''_n)_4$$
(2.14)

com $q'_n \neq q''_n$, o que mostra que existem $n-1$ quadrantes recursivos, comuns aos dois pontos (x', y') e (x'', y'') , e uma bifurcação do nível $n-1$ para o nível n que origina dois quadrantes disjuntos q'_n e q''_n , no nível n , diferenciando ambos os pontos.

Para um conjunto $S \subset I^2$, de N pontos não coincidentes dois a dois, tem-se representações semelhantes a (2.14). O fato de, para qualquer subconjunto S' de S , sempre existir uma representação semelhante a (2.14), sugere que rótulos comuns a grupos de pontos sejam substituídos por nós de uma árvore quaternária (Figura 2.2); os quadrantes que isolam as partículas umas das outras são folhas da árvore; o quadrante comum a todos os pontos do conjunto S é a raiz da árvore, que é o próprio universo I^2 ; os ramos são indexados pelos rótulos $q_1, q_2, \dots, q_n, \dots \in \{0, 1, 2, 3\}$, que são obtidos pelo procedimento composto $(\mathcal{X}, \mathcal{Y})^{-1} \circ \mathbb{B}^{-1}$, que aparece em (2.12).

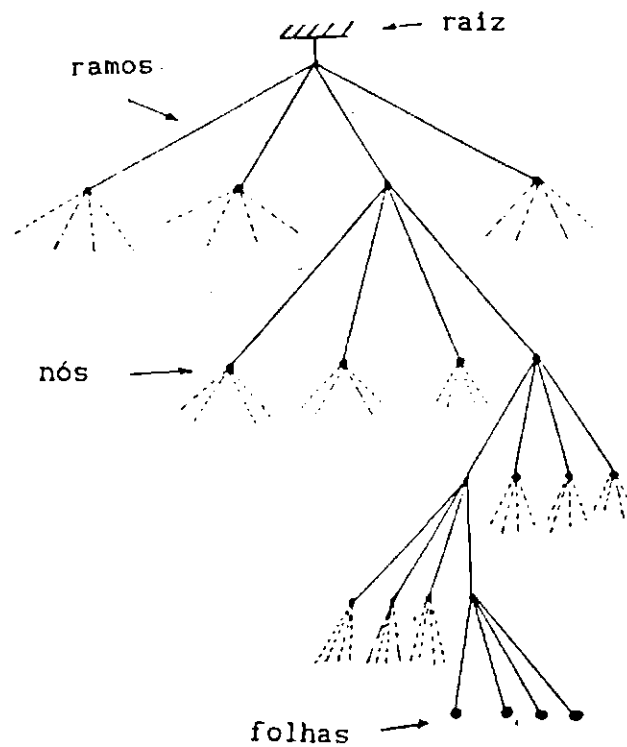


Fig. 2.2 - Representação esquemática de uma árvore quaternária, associada a um conjunto arbitrário de pontos, distribuídos no quadrado unitário. A raiz representa o próprio I^2 , enquanto as folhas representam as maiores células que isolam os pontos uns dos outros.

Um caso interessante, que ocorre quando grupos estão muito condensados, é a degenerescência de nós (Figura 2.3) (c.f. Schildt 1987), que consiste no fato de um nó possuir uma única derivação, servindo apenas de simples

conector. Se ocorrem situações em que muitas aglutinações de pontos aparecem, formando grupos relativamente isolados (e.g., em simulações de formação das primeiras estruturas), o problema de degenerescência pode ser relevante e algum cuidado deve ser tomado ao se elaborar o código de construção da árvore (Seção 2.2.2) a fim de que degenerescências sejam eliminadas.

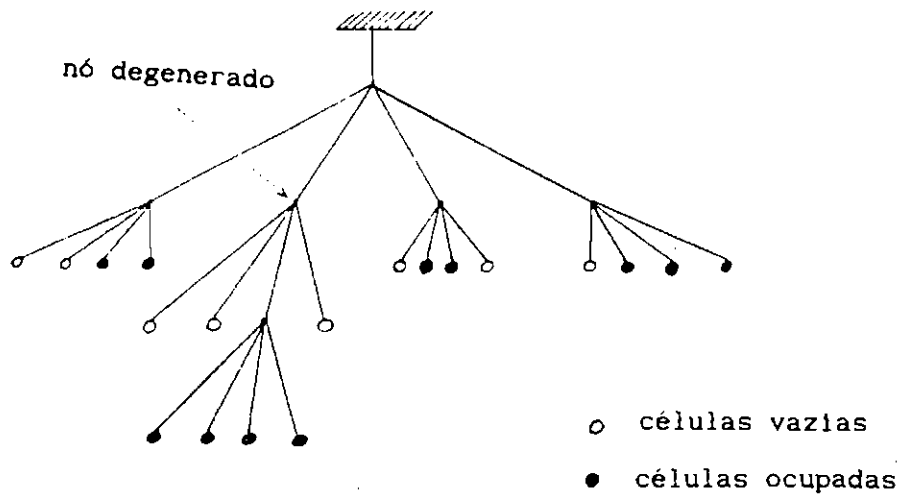


Fig. 2.3 - Ilustração de uma árvore quaternária degenerada; observe-se que existe um nó com apenas uma única derivação (ramo), o que o torna supérfluo.

Os raciocínios acima são facilmente generalizados para qualquer número de dimensões do espaço. No caso tridimensional, o número do ramo que acessa um dado octante é obtido de forma análoga a (2.11), num dado nível n de recursão:

$$q_n \equiv 4 x_n + 2 y_n + z_n \quad (2.15)$$

O nó, do ponto de vista computacional, é uma estrutura de dados que guarda não somente as informações úteis aos processamentos, mas também os endereços de acesso a outras estruturas idênticas. Assim, o nó consiste em registros que guardam informações, necessárias para o cálculo das forças (massa, momentos de multipolo, coordenadas do centróide da célula etc.), e guarda a informação de acesso (ramos) aos nós internos.

Em linguagens computacionais, propostas para a programação estruturada e inteligência artificial (*e.g.*, Pascal, C, Lisp etc.), existe um recurso bastante poderoso que é a alocação dinâmica de variáveis. Isto viabiliza significativamente o manuseio de estruturas de dados encadeadas. Por outro lado, em linguagens mais antigas (*e.g.*, FORTRAN), mesmo em suas versões mais recentes (*e.g.*, F77 e CFT), só é possível desenvolver tais estruturas por meio de variáveis indexadas, o que exige do programador uma certa habilidade na estimativa da quantidade de memória, necessária para a estrutura de dados (*e.g.*, Hernquist 1987).

Como o propósito deste capítulo é de descrever um método que é muito útil, não somente para o cálculo de forças de muitos corpos como também para outros fins em Astrofísica (Hernquist e Katz 1989; Hernquist 1988; Cap. 5), os esforços estão voltados para sua análise ao invés de desenvolver códigos otimizados em FORTRAN², ficando a promessa de apresentar tais códigos em trabalhos futuros.

O cadastramento das partículas é feito atribuindo-se aos nós as informações que são úteis para o cálculo das forças. Assim, dados como massa total (ou número de partículas) do octante, momento de quadrupolo (ou de maior ordem) com respeito ao centro de massa do octante, centróide do octante etc., devem ser cadastrados no momento de construção da árvore.

A fim de reduzir o número de chamadas recursivas, durante a transversalização da árvore para o cálculo das forças, adota-se a estrutura de dados nó-octeto ao invés de nó-octante. A justificativa é simples: se cada nó é um octante, toda vez que este tem de ser resolvido em oito octantes filhos, o programa tem de ingressar (e retornar) em cada um dos octantes através de chamadas recursivas; por outro lado, se o nó é visto como um "array" de octantes (ou simplesmente octeto), uma única chamada recursiva é feita e, para se acessar os oito octantes, simplesmente varia-se o índice do "array".

² Há uma necessidade de se desenvolver tais códigos em FORTRAN, se possível em versões bem portáteis para quaisquer máquinas, visto que todos fabricantes de compiladores para máquinas vetoriais/paralelas (*e.g.*, compiladores FTN200 do Cyber 205, CFT77 do Cray X-MP) são em linguagem FORTRAN (Hernquist 1990; Makino 1990a; Barnes 1990).

A construção da árvore pode ser feita de três maneiras: (i) cadastrando as partículas, uma a uma, a partir da raiz, toda vez que duas partículas caírem no mesmo octante, este se divide em oito novos octantes internos e ambas partículas devem ser transferidas para as células internas até que cada uma fique isolada. Este processo é chamado método escalar de construção da árvore e é exatamente o que foi apresentado por Barnes e Hut (1986). Contudo, este método permite a ocorrência de degenerescência de nós; (ii) existe a forma parcialmente vetorial que consiste em cadastrar em cada octante, a uma só vez, todas partículas que a este pertencem; então, as partículas que se encontram em um dado nó são distribuídas em oito listas de partículas, uma para cada octante, em seguida são cadastradas nos seus respectivos octantes; (iii) por último, a forma completamente vetorial, apresentada por Makino (1990a), cadastra todas as partículas nos seus correspondentes octantes em todos os nós de um dado nível a uma só vez. Este método é completamente iterativo, portanto isento de sub-rotinas recursivas e é ideal para computadores vetoriais. Nos métodos (ii) e (iii) é possível eliminar degenerescências.

Na etapa de construção da árvore, que antecede o cálculo das forças, é criado um espaço virtual a partir do universo da simulação. Para o conjunto de coordenadas X, Y, Z das partículas faz-se corresponder um conjunto de coordenadas $x, y, z \in I$, de forma que seja possível fazer-se a indexação dos nós, pelos processos descritos desde (2.1) até (2.12). A princípio regulariza-se o domínio da simulação, estabelecendo-se o menor cubo que contenha o sistema e cujas arestas sejam potência inteira de dois. Esta exigência advém do fato de divisões sucessivas, de uma variável ponto-flutuante, solicitam uma boa fração do tempo de execução dos procedimentos de construção da árvore, a menos que as expressões apresentem nos acumuladores de ponto flutuante, apenas um bit aceso.

A criação das coordenadas x, y, z é feita através de uma translação da origem do sistema de coordenadas para um dos vértices do cubo inicial, de maneira que as novas coordenadas sejam todas não negativas. Em seguida, divide-se estas novas coordenadas pelo comprimento da aresta do domínio da simulação, obtendo-se assim uma réplica do sistema no interior do cubo unitário I^3 . A seguir, são apresentadas as versões escalar e a parcialmente vetorial da construção da árvore.

2.2.1 - MÉTODO ESCALAR PARA A CONSTRUÇÃO DA ÁRVORE OCTAL

Esta é a versão proposta por Barnes e Hut (1986), na qual a construção é feita da seguinte maneira: começa-se pela raiz cadastrando-se as partículas, uma a uma, nos seus correspondentes octantes; se uma dada partícula é alojada em um octante, já ocupado por uma única partícula, então cria-se um octeto interno e transfere-se ambas para o nível mais interno, até que estas estejam separadas; se houver mais de uma partícula no octante, então a partícula recém ingressada é cadastrada e transferida para os níveis mais internos. O algoritmo abaixo ilustra o método:

```

procedimento Construa_árvore_I (i, nó) ;
  comece
    Ache_octante_para ( $x_j^i = 1, 2, 3$ , ramo) ;
    dentro do nó faça
      comece
        Atualize octante [ramo] com partícula [i];
        n ← número de partículas no octante [ramo];
        se n = 1 então primeira ← i
      fim;
    se n > 1
      então
        comece
          se n = 2
            então
              comece
                Crie_nó para próximo_nó [ramo];
                Construa_árvore (primeira, próximo_nó[ramo])
              fim;
            construa_árvore (i, próximo_nó [ramo])
          fim
        fim;
  fim;

```

O tamanho das células de um dado octante faz parte da estrutura nó. Esta variável é atualizada cada vez que o procedimento **Crie_nó** é acessado, tomando-se a metade do tamanho das células do nível anterior.

2.2.2 - MÉTODO PARCIALMENTE VETORIAL

Como já foi dito, a versão totalmente vetorial caracteriza-se pelo cadastramento coletivo das partículas, a uma só vez em cada nó, completando todos os nós de cada nível e sempre no sentido descendente (Makino 1990a). A versão aqui apresentada é parcialmente vetorial, na qual as partículas são cadastradas a uma só vez, em cada nó, mas de forma recursiva, o que implica que a construção não é continuamente descendente e sim alternada, havendo retorno para níveis superiores (em direção à raiz), toda vez que os nós (octetos) internos a um determinado ramo são completados. A seguir é mostrado um algoritmo do procedimento parcialmente vetorial:

```

procedimento Construa_árvore_II (nó, lista);
comece
  Separe lista em oito parcial_lista para os respectivos
  octantes ;
  para ramo = 0,1,...,7 comece
    Atualize octante [ramo] com parcial_lista [ramo];
    se há mais de uma partícula em octante [ramo]
      então
        comece
          Crie_nó para próximo_nó [ramo];
          Construa_árvore_II (próximo_nó [ramo])
        fim
      fim
    fim
  fim;

```

2.3 - CÁLCULO DAS FORÇAS

Como na construção da árvore, o cálculo das forças pode ser feito tanto de forma escalar quanto de forma vetorial. Na versão escalar, para cada partícula, o programa busca recursivamente as células (octantes) que satisfazem o critério de tolerância $a \leq r\theta$. Já a versão vetorial consiste em percorrer a árvore da raiz para as folhas e, durante a transversalização, busca-se, para cada octante, o conjunto (lista) de partículas que satisfazem o critério de tolerância e o conjunto das partículas que não satisfazem o critério. Para as partículas bem

distanciadas processa-se vetorialmente as forças que este exerce sobre as mesmas. Para a lista de partículas mal-separadas do octante (que não obedecem o critério de tolerância), dá-se prosseguimento na busca recursiva de octantes, repetindo o raciocínio anterior, até que toda a árvore tenha sido percorrida. Os dois métodos são ilustrados nos algoritmos abaixo:

1) MÉTODO ESCALAR:

```

procedimento   Percorra_árvore_I (nó, i);
comece
    dentro de nó faça
        para cada octante [ramo] (ramo=0,1,...,7) faça
            se Bem_distanciados (centroide, partícula [i])
                então
                    Calcule_força_sobre (partícula[i])
                senão
                    se octante [ramo] não é uma folha
                        então
                            Percorra_árvore_I (próximo_nó [ramo], i)
    fim;

```

2) MÉTODO VETORIAL:

```

procedimento Percorra_árvore_II (lista, nó);
comece
  dentro de nó faça
    para cada octante [ramo] (ramo=0,1,...,7) faça
      se há pelo menos uma partícula em octante [ramo]
        então
          comece
            Separe lista em listas de partículas:
            mal_separadas e bem_separadas;
            se há alguma partícula em bem_separadas
              então
                Calcule_forças_sobre (bem_separadas);
                se há alguma partícula em mal_separadas
                  então
                    Percorra_árvore_II
                    (mal_separadas, próximo_nó[ramo])
          fim
    fim;

```

2.4 - ESTIMATIVA DO ESFORÇO COMPUTACIONAL

A estimativa do esforço computacional é relativamente simples, no caso especial em que a distribuição de partículas é razoavelmente homogênea. Neste caso, a árvore correspondente à distribuição apresenta relativa homogeneidade na distribuição de ramos por nó. Na prática, mesmo para distribuições não homogêneas, o esforço computacional é próximo de $\mathcal{O}(N \log N)$, para valores de θ não muito menores que a unidade (Hernquist 1987).

Admitindo a homogeneidade, o número de níveis (ou também a altura da árvore) necessário para cadastrar as partículas, usando octetos-nó, é aproximadamente:

$$l \approx \log_8 \frac{N}{8} \quad (2.16)$$

Conseqüentemente, o número de octetos (nós) criados no cadastramento das partículas é

$$N_{\text{nós}} \approx \sum_{n=0}^{\ell} 8^n = \frac{8^{\ell+1} - 1}{7} = \frac{N - 1}{7} . \quad (2.17)$$

A cada nível, uma partícula é cadastrada em algum octante. Então, o número de cadastramentos feitos é

$$N_{\text{cad}} \approx N \times \ell \approx N (\log_8 N - 1) . \quad (2.18)$$

O esforço computacional despendido na criação da árvore octal é então

$$\mathcal{G} \approx \alpha N_{\text{cad}} + \beta N_{\text{nós}} , \quad (2.19)$$

onde α e β são, respectivamente, os números de operações ponto-flutuante, feitas, no cadastramento de cada partícula em um octante, e na criação de um nó. O cadastramento de uma única partícula dispense muito mais tempo atualizando o centro de massa do octante que criando um octeto (nó). Assim, $\alpha \gg \beta$ e, essencialmente, o esforço computacional na construção da árvore é, aproximadamente,

$$\mathcal{G} \approx \alpha N \log_8 N , \quad (2.20)$$

confirmando que este código tem complexidade $\mathcal{O}(N \log N)$.

O esforço computacional do código de cálculo das forças (procedimentos **Percorra_árvore_I** e **Percorra_árvore_II**) deve ser estimado a partir de argumentos geométricos (Hernquist 1988). A idéia consiste em mostrar que, para um sistema de partículas com distribuição aproximadamente homogênea, cada ponto de observação (*i.e.* onde se calcula a força) avista porções, no interior do ângulo sólido $\Delta\Omega \approx \theta^2$, segundo a hierarquia de distâncias $a = r\theta$, onde a é o tamanho de cada porção. A Figura 2.4 ilustra este raciocínio. De acordo com a mesma, o volume de cada porção avistada, a uma distância r , é aproximadamente

$$\delta V \approx (r\theta)^3 . \quad (2.21)$$

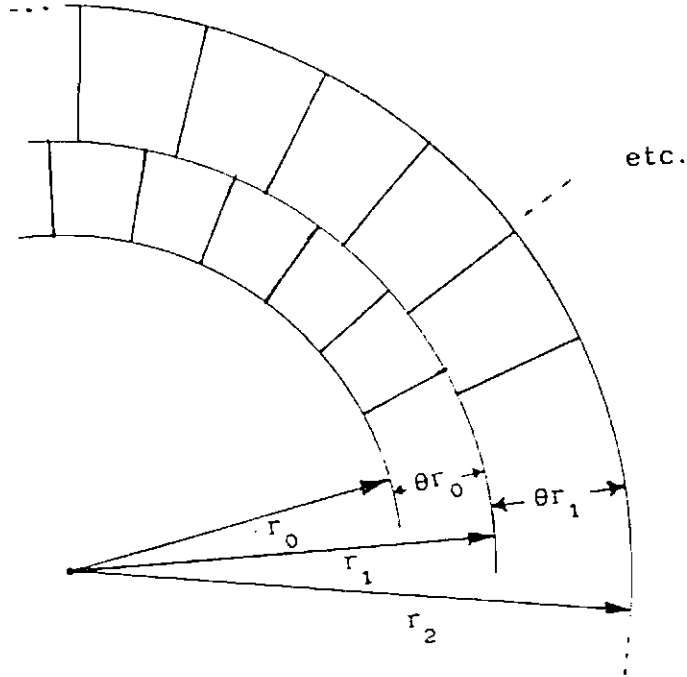


Fig. 2.4 - Representação grosseira de como uma partícula no centro de uma distribuição esférica homogênea "enxerga" as fontes do campo gravitacional pelo método da árvore.

O número de porções em cada camada esférica, de espessura $r\theta$, é

$$n \approx \frac{4\pi r^3 \theta}{(r\theta)^3} = \frac{4\pi}{\theta^2} . \quad (2.22)$$

O raio da i -ésima camada relaciona-se com o raio da esfera inicial por:

$$r_i = (1+\theta)^i r_0 , \quad (2.23)$$

donde se tira

$$i = \frac{\log(r_i / r_0)}{\log(1+\theta)} ; \quad (2.24)$$

então, o número de camadas existente entre o raio total R da distribuição e o raio r_0 da esfera inicial é

$$N_c \approx \frac{\log (R/r_0)}{\log (1+\theta)} . \quad (2.25)$$

Se r_0 é o raio interno da concha onde as aglomerações passam a acontecer, tem-se que

$$\theta r \approx v^{-1/3} \approx \left(\frac{4}{3} \pi \frac{R^3}{N} \right)^{1/3} , \quad (2.26)$$

donde

$$R/r_0 \approx \left(\frac{N}{4\pi/3} \right)^{1/3} \theta . \quad (2.27)$$

Portanto,

$$N_c \approx \frac{1}{3} \frac{\log (3\theta^3 N/4\pi)}{\log(1+\theta)} . \quad (2.28)$$

O número total de termos de força é, então, igual ao número total de porções nas camadas concêntricas adicionado do número de partículas no interior da camada mais interna:

$$N_{\text{termos}} \approx n \times N_c + n_0 , \quad (2.29)$$

onde

$$n_0 \approx \frac{4}{3} \pi r_0^3 v - 1 \approx \frac{4}{3} \pi 1/\theta^3 - 1 . \quad (2.30)$$

Finalmente, o número de termos de força é

$$N_{\text{termos}} \approx \frac{4}{3} \frac{1}{\theta^2} \left\{ \frac{\log(3\theta^3 N/4\pi)}{\log(1+\theta)} + \frac{1}{\theta} - 1 \right\} , \quad (2.31)$$

que verifica que, de fato, a complexidade do código de cálculo das forças pelo

método de árvores é do tipo $\mathcal{O}(\log N)$ por partícula.

Embora a dedução tenha sido feita para sistemas homogêneos, a dependência logarítmica do esforço computacional é verificada para sistemas com um pronunciado gradiente de densidades, como é verificado experimentalmente no Capítulo 4, mostrando que o código funciona com $\mathcal{O}(N \log N)$, para $\theta = 0,7$, em um modelo que se aproxima do perfil de de Vaucouleurs. Para $\theta \geq 1$, o número de termos da força varia com uma lei mais suave que $\mathcal{O}(N \log N)$. Contudo, para aproximação de monopolo, valores de θ maiores que a unidade pode produzir resultados insatisfatórios, em virtude dos erros de truncamento dos efeitos de estruturas internas às células.

2.5 - INTEGRAÇÃO DAS ÓRBITAS

Uma vez estabelecido um código que calcule as forças produzidas sobre as partículas do sistema, deve-se adotar um método de integração das órbitas. Infelizmente, os esquemas de integração mais complexos exigem um grande esforço computacional. Neste trabalho, em virtude de usarmos um computador relativamente lento e sobrecarregado de tarefas, adotamos o mais simples destes métodos que é o "leapfrog" (Hockney e Eastwood 1981) de segunda ordem, com passos de integração fixos. Convém lembrar que todas as deduções são feitas para as forças coletivas (componentes lisas) e admite-se que o sistema encontra-se num estado de quase-equilíbrio.

2.5.1 - O MÉTODO "LEAPFROG"

O método "leapfrog" é uma modificação do método de Euler, na qual são incorporadas diferenças temporalmente centralizadas. As equações de Newton para o movimento de partículas, submetidas a uma força por massa unitária $\mathbf{F}(\mathbf{x})$,

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}, \quad (2.32)$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{x}), \quad (2.33)$$

são reescritas em um esquema de diferenças finitas, temporalmente centralizadas:

$$\frac{x^n - x^{n-1}}{\Delta t} = v^{n-1/2}, \quad (2.34)$$

$$\frac{v^{n+1/2} - v^{n-1/2}}{\Delta t} = F(x^n), \quad (2.35)$$

onde a diferença $(x^n - x^{n-1})$ é centralizada no instante $t^{n-1/2}$ enquanto a diferença $(v^{n+1/2} - v^{n-1/2})$ é centralizada em t^n , com $t^n \equiv n\Delta t$; portanto, posições e velocidades estão sempre defasadas de um semipasso de integração.

Reversibilidade é verificada imediatamente, a menos de erros de arredondamento da máquina. De fato, substituindo Δt por $-\Delta t$, temos que o movimento descrito por (2.34) e (2.35) reverte:

$$\frac{v^{n-1/2} - v^{n+1/2}}{\Delta t} = F(x^n), \quad (2.36)$$

$$\frac{x^{n-1} - x^n}{\Delta t} = v^{n-1/2}, \quad (2.37)$$

Um certo cuidado deve ser tomado quanto às condições iniciais e à saída de resultados da simulação. Se os dados iniciais estão com as posições e velocidades sincronizadas, deve-se retroceder as posições de meio passo de integração ao se dar início à simulação:

$$x^0 = x^{1/2} - v^{1/2}\Delta t/2, \quad (2.38)$$

Já na saída dos dados, deve-se adiantar as posições de meio passo de integração a fim de que o sincronismo seja verificado:

$$v^{l+1/2} = x^l + v^{l+1/2}\Delta t/2, \quad (2.39)$$

onde l é o último nível de tempo de integração.

A escolha do passo de integração deve ser feita em função dos erros esperados, a fim de que estes não produzam distorções significativas nas integrais de movimento do modelo, nem gerem instabilidades numéricas sobre suas órbitas (Sec. 2.5.4). Em métodos de integração com passos regularizados (*e.g.*, Ahmad e Cohen 1973; Jerningan e Porter 1989) os erros esperados são

aproximadamente constantes por todo o sistema. Já em métodos com passos constantes os erros se apresentam de forma seletiva, sendo crescentes em regiões próximas ao poço de potencial. Em decorrência disso, os erros sobre a dinâmica macroscópica do sistema se acumulam com uma certa relevância. No entanto, nos métodos que utilizam passos variáveis (ou algum outro que estabilize os erros) os modelos são mais consistentes e, mesmo que os erros na determinação das órbitas se acumulem, os erros globais sobre a morfologia do sistema não se acumulam significativamente ao longo da simulação.

2.5.2 - ERROS DE TRUNCAMENTO

Os erros na previsão da futura posição de uma partícula, no espaço de fase são essencialmente devidos ao truncamento da expansão de Taylor. O reflexo imediato destes erros ocorre nas integrais de movimento da partícula. Conseqüentemente, a consistência do modelo de muitos corpos pode ser ferida se tais erros são relevantes se comparados à escala de separação das partículas do conjunto. Uma outra consequência dos erros de truncamento é a perturbação destes na morfologia do sistema, ou seja, na forma da função distribuição no espaço de fase e, conseqüentemente, na forma da densidade espacial.

Se $X^n \equiv X(n\Delta t)$ é a solução exata para as equações de movimento (2.32) e (2.33) então, a partir desta solução, e expandindo em série de Taylor em torno $t^n \equiv n\Delta t$, obtém-se a solução para o nível de tempo $n+1$:

$$X^{n+1} = X^n + \Delta t \frac{d}{dt} X^n + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2}{dt^2} X^n + \dots + \frac{\Delta t^n}{n!} \frac{d^n}{dt^n} X^n + \dots \quad (2.40)$$

Então, a partir de uma solução $X^{n+1/2}$, sincronizada com a solução $V^{n+1/2}$, obtém-se para o nível de tempo $n+1$:

$$\begin{aligned} X^{n+1} = X^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{2} \frac{d}{dt} X^{n+1/2} + \frac{\Delta t^2}{2!2^2} \frac{d^2}{dt^2} X^{n+1/2} + \\ + \frac{\Delta t^3}{2!2^3} \frac{d^3}{dt^3} X^{n+1/2} + \mathcal{O}(\Delta t^4). \end{aligned} \quad (2.41)$$

Do mesmo modo, obtém-se a solução exata para o nível de tempo n :

$$\begin{aligned} X^n = X^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2} \frac{d}{dt} X^{n+1/2} + \frac{\Delta t^2}{2!2^2} \frac{d^2}{dt^2} X^{n+1/2} - \\ - \frac{\Delta t^3}{2!2^3} \frac{d^3}{dt^3} X^{n+1/2} + \mathcal{O}(\Delta t^4). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Subtraindo (2.42) de (2.41), membro a membro, chega-se ao seguinte resultado:

$$X^{n+1} - X^n = V^{n+1/2} \Delta t + \frac{\Delta t^3}{3!2^2} \frac{d^2}{dt^2} V^{n+1/2} + \Delta t^5, \quad (2.43)$$

onde $V^{n+1/2} \equiv \frac{d}{dt} X^{n+1/2}$. De forma análoga, obtém-se para a segunda derivada da velocidade, no nível de tempo $n+1/2$, a partir do nível n ,

$$\ddot{V}^{n+1/2} = \ddot{F}(X^n) + \frac{\Delta t}{2} \ddot{F}(X^n) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (2.44)$$

Substituindo este último resultado em (2.43), tem-se

$$X^{n+1} - X^n = V^{n+1/2} \Delta t + \frac{\Delta t^3}{3!2^2} \ddot{F}(X^n) + \mathcal{O}(\Delta t^4). \quad (2.45)$$

Reescrevendo (2.34) como

$$x^{n+1} - x^n = v^{n+1/2} \Delta t \quad (2.46)$$

e comparando esta última equação com a Eq. (2.45) chega-se facilmente à conclusão de que o erro de truncamento na determinação da posição x^{n+1} , a partir de X^n é

$$\delta_x^{n+1/2} = - \frac{\Delta t^3}{3!2^2} \ddot{F}(X^n) + \mathcal{O}(\Delta t^4). \quad (2.47)$$

Por um procedimento análogo, usando a Eq. (2.44) na expansão da velocidade, obtém-se que o erro de truncamento na determinação da velocidade $v^{n+1/2}$, por "leap-frog", é

$$\delta_v^n = - \frac{\Delta t^3}{3!2^2} \ddot{F}(X^n) + \mathcal{O}(\Delta t^4). \quad (2.48)$$

A energia total \mathcal{E} por unidade de massa, de uma dada partícula do sistema, com \mathcal{E} escrita por

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} v^2 + \phi_{(x,t)}, \quad (2.49)$$

é uma integral de movimento se ϕ não depende explicitamente do tempo.

Se ocorrem erros ao se prever a posição de uma dada partícula no espaço de fase $\{(x,v)\}$, então \mathcal{E} sofre um erro $\delta\mathcal{E}$ na conservação de energia:

$$\delta\mathcal{E} = v \cdot \delta v + \nabla\phi_{(x,t)} \cdot \delta x. \quad (2.50)$$

Então, ao fim de um ciclo de "leap-frog", o erro $\delta\mathcal{E}$ devido as contribuições δx e δv na posição e velocidade, obtidos das Eqs. (2.47) e (2.48) respectivamente, é

$$\delta\mathcal{E} \approx \left\{ \nabla\phi \cdot \nabla\dot{\phi} - v \cdot \nabla\ddot{\phi} \right\} \frac{\Delta t^3}{24} + \mathcal{O}(\Delta t^4), \quad (2.51)$$

onde $-\nabla\phi = \mathbf{F}$.

Em função de (2.47) e (2.51) pode-se estabelecer um esquema de integração em que os passos sejam determinados em função das derivadas primeira e segunda da força resultante, com o propósito de manter alguma regularidade do erro na posição, ou na energia, em torno de um certo valor esperado, em qualquer região do sistema. Na prática, é bastante complicado incorporar passos de integração regularizados às órbitas individuais das partículas (*e.g.*, Ahmad e Cohen 1973). Além do mais, os esquemas de integração que se incorporam aos métodos de soma direta nem sempre se encaixam diretamente em métodos de árvore. Até o presente, apenas uma versão de código de árvore que regulariza passos de integração (Jernigan e Porter 1989) foi apresentada, todas as demais citadas aqui utilizam métodos de integração a passos constantes, semelhantes ao que é usado aqui neste trabalho.

2.5.3 - EFEITO DOS ERROS DE INTEGRAÇÃO SOBRE A RESOLUÇÃO ESPACIAL DO MODELO COMPUTACIONAL

Os erros de truncamento, inerentes aos métodos numéricos das integrações das órbitas, refletem uma redução na resolução espacial do modelo. De um modo geral, os erros na determinação das futuras posições das partículas distribuem-se segundo uma função distribuição ϑ , típica do método de integração numérica.

Após a integração de todas as órbitas, do instante t para o instante $t+\Delta t$, a densidade do modelo evolui de $\rho(\mathbf{x};t)$ para $\rho(\mathbf{x};t+\Delta t)$, pela atuação do procedimento $\mathcal{J}^{\Delta t}$, que caracteriza o método empregado na integração das órbitas, sobre a densidade do sistema:

$$\rho(\mathbf{x};t+\Delta t) = \mathcal{J}^{\Delta t} \rho(\mathbf{x};t). \quad (2.52)$$

Mas, se o valor de \mathbf{x} , previsto para a posição de uma dada partícula, flutua em torno do valor exato \mathbf{X} , segundo a função distribuição de erros ϑ , então, para uma massa $\rho_{(\mathbf{X})}^{\text{ideal}} d^3\mathbf{X}$ do sistema idealizado, com ρ^{ideal} sendo a sua densidade, tem-se que, no modelo numérico, devido aos erros de truncamento, as correspondentes partículas se espalham nas vizinhanças do ponto \mathbf{X} segundo $\vartheta(\mathbf{x}-\mathbf{X};\mathbf{X};\Delta t) \rho_{(\mathbf{X})}^{\text{ideal}} d^3\mathbf{X}$. Então, a soma das contribuições de todos os elementos, do sistema idealizado, sobre o modelo numérico resulta em:

$$\rho(\mathbf{x};t) = \int \vartheta(\mathbf{x}-\mathbf{x}';\mathbf{x}';\Delta t) \rho_{(\mathbf{x}';t)}^{\text{ideal}} d^3\mathbf{x}'. \quad (2.53)$$

Seja $\rho_{(\mathbf{x};t)}$ a densidade da configuração inicial de um sistema no instante t . Suponhamos que, a partir desta configuração seja feita uma integração exata, do instante t para o instante $t+\Delta t$, sobre as órbitas do sistema, fornecendo uma densidade $\rho_{(\mathbf{x};t+\Delta t)}^{\text{ideal}}$ para a configuração idealizadamente obtida. Concomitantemente, a partir do mesmo resultado inicial $\rho_{(\mathbf{x};t)}$, efetua-se uma integração numérica $\mathcal{J}^{\Delta t}$ sobre as órbitas das partículas, fornecendo uma densidade $\rho_{(\mathbf{x};t+\Delta t)}$ para a configuração obtida numericamente. Expandindo $\rho_{(\mathbf{x};t+\Delta t)}^{\text{ideal}}$ em série de Taylor, em torno de t , vem

$$\begin{aligned}
\rho_{(\mathbf{x};t+\Delta t)}^{\text{ideal}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Delta t^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial t^n} \rho_{(\mathbf{x};t)} \\
&\equiv e^{\Delta t \partial/\partial t} \rho_{(\mathbf{x};t)} \\
&\equiv (e^{\partial/\partial t})^{\Delta t} \rho_{(\mathbf{x};t)},
\end{aligned} \tag{2.54}$$

onde $(e^{\partial/\partial t})^{\Delta t}$ representa o grupo de transformações, parametrizado em Δt (e.g., Arnold 1987), que caracteriza a expansão em série de Taylor. A densidade da configuração, obtida pelo método aproximado $\mathcal{J}^{\Delta t}$, de integração das órbitas, relaciona-se com a densidade do sistema obtido pela integração exata, através da Eq. (2.53):

$$\rho_{(\mathbf{x};t+\Delta t)} = \int \vartheta(\mathbf{x}-\mathbf{x}';\mathbf{x}';\Delta t) \rho_{(\mathbf{x}';t+\Delta t)}^{\text{ideal}} d^3\mathbf{x}', \tag{2.55}$$

que, da Equação (2.54) e de (2.52), fica

$$\rho_{(\mathbf{x};t+\Delta t)} = \mathcal{J}^{\Delta t} \rho_{(\mathbf{x};t)} = \int \vartheta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') e^{\Delta t \partial/\partial t} \rho_{(\mathbf{x}';t)} d^3\mathbf{x}', \tag{2.56}$$

que é operacionalmente semelhante à Eq. (2.52), que relaciona dois estado, final, $\rho_{(\mathbf{x};t+\Delta t)}$, e inicial, $\rho_{(\mathbf{x}';t)}$, sem aparecer explicitamente a solução exata $\rho_{(\mathbf{x}';t+\Delta t)}^{\text{ideal}}$ como na Eq. (2.55). Este resultado será útil mais adiante.

Até o presente momento, nenhum comentário a respeito da função ϑ foi feito. Na verdade, os erros de truncamento da expansão em série de Taylor, são determinísticos (assim como o são os números pseudo-aleatórios). Contudo, devido à diversidade de situações que surgem, tanto em função das derivadas da força, quanto de todas as possíveis órbitas que conduzem uma partícula a uma reduzida vizinhança de um ponto \mathbf{X} , do instante t até o instante $t+\Delta t$ podemos dizer que erros de truncamento flutuam de maneira praticamente imprevisível. Em outras palavras, temos que: se a um **ensemble** de condições iniciais, de uma dada partícula, no instante t , corresponde uma solução exata \mathbf{X} , no instante $t+\Delta t$,

então um método numérico, $\mathcal{J}^{\Delta t}$, faz corresponder, a estas mesmas condições iniciais, um conjunto de pontos distribuídos, segundo a função ϑ , em torno do ponto X no instante $t+\Delta t$, em decorrência do truncamento de termos em derivadas de ordem superior das forças, nas correspondentes posições iniciais do ensemble. Assim a função distribuição ϑ estabelece a densidade de probabilidade de que uma partícula, após um cálculo aproximado de sua futura posição, venha a cair em uma dada vizinhança do valor exato.

A forma de ϑ , bem como sua dependência com a densidade ρ do sistema, depende do método de integração. Quanto mais preciso for o método, mais a função ϑ aproxima-se da função δ de Dirac. Por outro lado, quanto maior o erro de integração, mais "espalhado" deve ser o perfil de ϑ , refletindo este aspecto na morfologia do modelo.

Uma decorrência imediata das Eqs. (2.55) e (2.56) é que, se ϑ não depende da morfologia do sistema (o que na prática é um tanto difícil de se obter), que implica na não dependência temporal de ϑ , o processo de propagação de erros não depende do histórico de integrações. Isto caracteriza um processo aproximadamente markoviano.

Firmando esta hipótese de que ϑ é estacionária durante toda a simulação, damos prosseguimento à discussão. Deseja-se saber de quanto um modelo computacional, que usa métodos de integração com passos de integração regularizados, se distancia do sistema idealizado, obtido por métodos exatos de integração. Seja $\rho_{(X)}^{(0)} \equiv \rho_{(X;t=0)}$, $\rho_{(X)}^{(n)} \equiv \rho_{(X;t=n\Delta t)}$, tem-se que, após n integrações, as soluções numéricas das posições das partículas distribuem-se segundo

$$\rho_{(X)}^{(n)} = \mathcal{J}^{\Delta t} \rho_{(X)}^{(n-1)} = \mathcal{J}^{n\Delta t} \rho_{(X)}^{(0)}. \quad (2.57)$$

Por outro lado, no instante $t = n\Delta t$, a solução exata ρ_e é dada por

$$\rho_e^{(n)}(X) = e^{n\Delta t \partial/\partial t} \rho_{(X)}^{(0)} = (e^{\partial/\partial t})^{n\Delta t} \rho_{(X)}^{(0)}. \quad (2.58)$$

As soluções aproximadas $\rho_{(x)}^{(n)}$ e $\rho_{(x)}^{(n-1)}$ relacionam-se por

$$\rho_{(x)}^{(n)} = \int \vartheta_{(x-x')} e^{\Delta t \partial/\partial t} \rho_{(x')}^{(n-1)} d^3 x'. \quad (2.59)$$

Examinando as Eqs. (2.57) e (2.58) conclui-se que os erros de truncamento podem refletir-se gradativamente sobre a morfologia do modelo, à medida que se aplica o procedimento $\mathcal{J}^{\Delta t}$ sobre o sistema, os erros de truncamento no cálculo das órbitas refletem-se de forma cumulativa sobre a morfologia do modelo numérico, fazendo com que este último se distancie gradativamente do sistema, obtido por integrações infinitamente precisas. Felizmente, isto não ocorre se o valor esperado dos erros não depende da região do sistema, ou seja, se os passos de integração se adequam às órbitas a fim de manter o erro esperado aproximadamente constante. Neste caso, mesmo que as órbitas individuais se dispersem das órbitas reais, à medida que a simulação tem prosseguimento, a dispersão morfológica é um processo aproximadamente markoviano, portanto, independente do número de integrações realizadas na simulação.

A demonstração da afirmação acima é muito simples. Consideremos um experimento numérico que seja acompanhado por um experimento idealizado, em que as integrações sejam exatas. Ambos experimentos, o real e o idealizado, partem das mesmas condições iniciais, que caracterizam uma distribuição com densidade $\rho_{(x)}^{(0)}$. Seguindo a recursividade expressa na Eq. (2.59) e observando a não dependência temporal de ϑ , tem-se que

$$\rho_{(x)}^{(n)} = \int \vartheta_{(x-x_1)} \dots \vartheta_{(x_{n-1}-x_n)} (e^{\partial/\partial t})^{n\Delta t} \rho_{(x)}^{(0)} d^3 x_1 \dots d^3 x_n. \quad (2.60)$$

Notando que $\int \vartheta d^3 x = 1$, a Eq. (2.60) reduz-se a

$$\rho_{(x)}^{(n)} = \int \vartheta_{(x-x')} (e^{\partial/\partial t})^{n\Delta t} \rho_{(x')}^{(0)} d^3 x', \quad (2.61)$$

que, da Equação (2.58), obtém-se

$$\rho_{(x)}^{(n)} = \int \vartheta_{(x-x')} \rho_{e(x')}^{(n)} d^3 x' \quad (2.62)$$

demonstrando que, não importando a sequência de passos de integração, os resultados finais, do modelo numérico e do modelo teórico, se relacionam da mesma forma em que uma única integração sobre as órbitas do sistema, vide Eq. (2.53):

$$\rho(\mathbf{x};t) = \int \vartheta(\mathbf{x}-\mathbf{x}';\mathbf{x}';\Delta t) \rho_{(\mathbf{x}';t)}^{\text{ideal}} d^3\mathbf{x}'.$$

Como já foi dito na Seção 2.5.2, é uma dura tarefa determinar um algoritmo, acoplado ao código de árvore, que estabeleça uma dependência entre o valor esperado do erro e o passo de integração, via uma equação do tipo (2.47) ou (2.51), quando, pelo que foi discutido acima, o ideal é manter a distribuição de erros, ϑ , mais próxima possível de um comportamento estacionário. Por analogia ao trabalho de Jernigan e Porter (1989), estudaremos, para um trabalho posterior, possibilidade de se incorporar passos de integração individuais à própria hierarquia da árvore octal (e.g., em função do comprimento das arestas dos octantes).

2.5.4 - ESTABILIDADE NUMÉRICA

Nas duas últimas seções o enfoque foi dado aos erros de truncamento do método "leap-frog" e, genericamente, aos efeitos dos erros de integração sobre a resolução espacial do modelo. Contudo, nada se mencionou a respeito da estabilidade numérica da integração das órbitas.

Um esquema numérico é dito estável se os erros propagados não se amplificam exponencialmente, fazendo com que os resultados diverjam do que se é esperado. Muitas vezes, o esquema numérico é instável apenas em algumas regiões do domínio de integração. Contudo, existem esquemas de integração numérica que são estáveis em todo domínio, embora possam ser mais precisos que o simples "leap-frog" (e.g. exemplo dado por Hockney-Eastwood 1981, p. 103).

A rigor, um esquema qualquer de integração é uma transformação não-linear de coordenadas do espaço de fase $\{(\mathbf{x}^n, \mathbf{v}^{n+1/2})\}$, das condições iniciais, para o espaço $\{(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{v}^{n+1/2})\}$ das condições finais. Se uma partícula é submetida a um regime oscilatório então os erros propagados, ao longo das integrações, devem também assumir um comportamento oscilante, caso o esquema seja estável.

Para certos valores de Δt as transformações $(x^n, v^{n+1/2}) \rightarrow (x^{n+1}, v^{n+1/2})$ passam a amplificar os erros de uma forma aproximadamente exponencial. Maiores detalhes desta discussão estão muito bem expostas em Hockney-Eastwood (1981).

Uma breve discussão, que é bastante útil para determinar um critério de estabilidade para as órbitas das simulações, realizadas aqui, é feita para o caso unidimensional, em que a partícula se encontra no fundo do poço de potencial, a menos de pequenas perturbações em torno do ponto de equilíbrio. Neste caso, a força por unidade de massa exercida sobre a partícula, na posição x com respeito ao ponto de equilíbrio, $x = 0$, é aproximadamente $-\Omega^2 x$ e o esquema "leap-frog" correspondente ao movimento da partícula é

$$\begin{aligned} x^{n+1} &= x^n + v^{n+1/2} \Delta t, \\ v^{n+1/2} &= v^{n-1/2} - \Omega^2 x^n \Delta t \end{aligned} \quad (2.63)$$

ou, em termos de posições somente, tem-se o esquema:

$$x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1} = -\Omega^2 x^n \Delta t^2 = -\Gamma x^n. \quad (2.64)$$

Como ocorrem erros de arredondamento na representação dos valores de x , na equação acima, é fácil verificar que os esquema de propagação dos erros ϵ é:

$$\epsilon^{n+1} - 2\epsilon^n + \epsilon^{n-1} = -\Gamma \epsilon^n. \quad (2.65)$$

Decorre de (2.65) ser uma equação de diferenças finitas, linear em ϵ , que as soluções independentes (autofunções) devem ter a forma $\epsilon^n = \lambda^n = \exp(i\omega n \Delta t)$, onde o sobrescrito passa a valer como n -ésima potência de λ . Substituindo esta solução tentativa na Eq. (2.65), tem-se a equação característica:

$$\lambda^2 - 2\lambda + 1 = -\Gamma \lambda, \quad (2.66)$$

donde se obtém as duas soluções características λ_+ e λ_- :

$$\lambda_{\pm} = 1 - \frac{\Gamma}{2} \pm \frac{\Gamma}{2} \left[1 - \frac{4}{\Gamma^2} \right]^{1/2}. \quad (2.67)$$

A solução geral para a Eq. (2.65) é escrita como

$$\epsilon^n = a\lambda_+^n + b\lambda_-^n, \quad (2.68)$$

onde as constantes a e b são determinadas pelos erros iniciais. De um modo geral, tanto as constantes a e b quanto as soluções características devem ser quantidades complexas.

As soluções características λ_{\pm} estabelecem o comportamento das soluções da equação de propagação de erros. Se $|\lambda_{\pm}| \leq 1$, a solução geral (2.68) não diverge para $n \gg 1$ e o esquema é, neste caso, estável. Por outro lado, se $|\lambda_{\pm}|$ é maior que a unidade então os erros propagam-se exponencialmente e o esquema de integração torna-se instável. Resolvendo-se a desigualdade $|\lambda_{\pm}| \leq 1$ para o lado direito da Eq. (2.67) conclui-se que o valor de $\Omega\Delta t$ deve ser menor ou igual a 2 para que o esquema seja estável.

Em simulações de sistemas estelares, deve-se ter uma garantia de que pelo menos as órbitas ligadas ao sistema sejam numericamente estáveis. Então, se ω_e é a frequência epicíclica de uma órbita, aproximadamente circular, tem-se que o maior valor do passo de integração, para que ocorra estabilidade numérica, é $\Delta t = 2 / \omega_e$. Obviamente, este critério de escolha superestima Δt , conseqüentemente, os erros de truncamento sobre as órbitas são máximos. Isto acarreta numa perda de resolução espacial, como foi visto na Seção 2.5.3. Contudo, se se deseja realizar experimentos mais acurados, a escolha de passos de integração menores tornam a simulação computacionalmente mais cara e, neste caso, o simples "leap-frog" deve ser substituído por técnicas mais sofisticadas de integração numérica.

CAPÍTULO 3

O POTENCIAL AMOLECIDO

3.1 - INTRODUÇÃO

O propósito deste trabalho é o desenvolvimento e execução de simulações de sistemas estelares não-colisionais (não-correlacionados¹). Contudo, quando se tenta simular sistemas desta natureza, esbarra-se no critério de não-colisionalidade, que requer que o número de estrelas seja grande o suficiente para que a frequência de encontros estelares seja desprezível, dentro de escalas de tempo em que tais sistemas são estudados. Uma galáxia, por exemplo, é vista como um sistema não-correlacionado por uma escala de tempo da ordem de muitos tempos de Hubble, exatamente em virtude do grande número de estrelas ($N \sim 10^{11} - 10^{12}$) que a compõe. Já em um aglomerado globular ou em um núcleo galáctico ($N \sim 10^4 - 10^8$), colisões (encontros estelares) ocorrem com muito mais frequência, de forma que tais sistemas só podem ser considerados não-correlacionados em pequenas escalas de tempo em comparação às de uma galáxia.

Em sistemas não-correlacionados, o efeito gravitacional coletivo, sobre cada estrela, é muito mais significativo que os efeitos de eventuais encontros estelares ou de flutuações de densidade nas vizinhanças locais. Com efeito, para tais sistemas a função distribuição de uma partícula $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ no espaço de fase a seis dimensões $\{(\mathbf{r}, \mathbf{v})\}$, também conhecido como espaço μ , obedece a equação de Boltzman não-colisional (Binney e Tremaine 1987; Saslaw 1985):

$$\dot{f}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \left[\mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{v}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} + \frac{\partial}{\partial t} \right] f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = 0, \quad (3.1)$$

conhecida como equação de Vlasov, quando a aceleração $\dot{\mathbf{v}}$ aparece escrita explicitamente como $-\partial\phi/\partial\mathbf{r}$, onde $\phi(\mathbf{r}, t)$ é o potencial gravitacional total no

¹ Este termo advém da função correlação de dois pontos no espaço de fase do sistema (c.f., Hockney e Eastwood 1981, Cap. 1). Em sistemas correlacionados, a presença de uma estrela, em um ponto \mathbf{r}' , perturba a probabilidade de se encontrar uma outra estrela, em um ponto \mathbf{r}'' na vizinhança de \mathbf{r}' , em virtude das interações locais serem relevantes.

ponto r . Assim, o comportamento deste sistema é análogo ao de um fluido incompressível no espaço de fase.

A idealização de reproduzir fielmente um sistema não-colisional é praticamente impossível, do ponto de vista computacional, pois, mesmo utilizando o método da árvore para o cálculo das forças, trabalhar com cem bilhões de partículas exigiria em torno de alguns trilhões de operações em ponto flutuante; nem os mais modernos supercomputadores seriam capazes de realizar simulações de tamanho porte. A fim de contornar o problema, introduz-se artifícios que minimizam os efeitos de encontros estelares no modelo de simulação (Aarseth 1963), para que se possa trabalhar com um reduzido número de partículas, imitando o caráter não-colisional de uma galáxia. O mais usual é o emprego de um comprimento de amolecimento, ϵ , ou seja, escreve-se o potencial num ponto r , produzido por uma partícula de massa m' , localizada na posição r' , do seguinte modo:

$$\phi(r, r'; \epsilon) = \frac{-G m'}{(|r - r'|^2 + \epsilon^2)^{1/2}}, \quad (3.2)$$

que foi introduzido por Aarseth (1963) para representar o potencial produzido por galáxias de raio característico ϵ . Também, pode ser interpretado como sendo o potencial produzido por uma distribuição de massa m' com densidade

$$\rho(r; \epsilon) = \frac{3m'}{4\pi} \frac{\epsilon^2}{(r^2 + \epsilon^2)^{5/2}}, \quad (3.3)$$

que é o perfil de densidade de uma esfera de Plummer com massa m' e raio ϵ . Esta substituição também pode ser interpretada sob a luz da **Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas** (*Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH*) como é comentada no Cap. 5.

Este artifício de suavização de encontros impõe algumas limitações.

(i) Embora o efeito de suavização dos encontros estelares e das flutuações aleatórias, na distribuição de partículas que se avizinham, seja verificado, como será visto nas Seções 3.2 e 3.4, o amolecimento de uma distribuição limita inferiormente a resolução espacial da distribuição de partículas do sistema

(Seção 3.5). (ii) Outra consequência de se usar potencial amolecido é uma distorção nas frequências de oscilação do sistema em relaxação coletiva (relaxação violenta), quando ϵ é comparável ao tamanho característico, fazendo com que o sistema oscile mais rápido do que se estivesse sem nenhum artifício de amolecimento (Seção 3.3).

Uma análise teórica rigorosa dos efeitos do potencial amolecido, de uma maneira geral, sobre a dinâmica de um modelo gravitacional, é praticamente impossível. Contudo, o que se faz é obter estimativas grosseiras dos efeitos do potencial amolecido sobre a dinâmica interna do sistema.

3.2 - RELAXAÇÃO DE PARES

É possível fazer uma estimativa do grau de dispersão na velocidade de uma partícula teste (que transita radialmente em um sistema esférico) devido ao efeito acumulado de encontros com outras partículas do sistema. Tal estimativa nos dá uma idéia, pelo menos em ordem de grandeza, de quanto as estrelas mudam suas órbitas por relaxação binária, durante um tempo de travessia, ou, inversamente, o número de travessias necessário para que as estrelas do sistema tenham se dispersado significativamente² das órbitas que seriam seguidas se o potencial sobre cada partícula fosse de natureza exclusivamente coletiva (componente lisa).

Primeiramente, verifica-se que a energia orbital típica de pares de partículas em um sistema estelar em equilíbrio é positiva. Admitindo-se que o sistema é virializado, no referencial do centro de massa, tem-se que a velocidade quadrática média $\langle v^2 \rangle$ relaciona-se com o raio gravitacional R por

$$\langle v^2 \rangle = GM/R . \quad (3.4)$$

A velocidade orbital de um par de partículas qualquer é dada por $\mathbf{v}_{\text{orb}} = \mathbf{v}' - \mathbf{v}''$, cujo valor quadrático fica $v_{\text{orb}}^2 = v'^2 + v''^2 - 2 \mathbf{v}' \cdot \mathbf{v}''$. Neste caso,

² Admite-se que, em média, isto ocorra quando a perturbação acumulada sobre a velocidade das partículas é da ordem da raiz da velocidade quadrática média interna do sistema.

o valor típico é igual a

$$\langle v_{\text{orb}}^2 \rangle = 2 \langle v^2 \rangle = 2GM/R . \quad (3.5)$$

Se M é a massa total do sistema e N seu número de partículas, a massa média³ das partículas é simplesmente

$$m = M/N . \quad (3.6)$$

A distância média entre vizinhos é tida como

$$\lambda = R N^{-1/3} . \quad (3.7)$$

Enfim, a energia orbital típica de um par de estrelas é da ordem de

$$\langle E_{\text{orb}} \rangle \approx \mu \langle v_{\text{orb}}^2 \rangle / 2 - Gm^2/\lambda, \quad (3.8)$$

onde μ é a massa reduzida do par:

$$\mu = \frac{m m'}{m+m'} = \frac{m}{2} . \quad (3.9)$$

Substituindo os valores de $\langle v_{\text{orb}}^2 \rangle$, μ , m e λ das Eqs. (3.5) a (3.9) tem-se

$$\langle E_{\text{orb}} \rangle \approx (2N)^{-1} (1-2N^{-2/3}) (GM^2/R), \quad (3.10a)$$

o que implica que $\langle E_{\text{orb}} \rangle > 0$. Assim, pode-se afirmar que encontros típicos ocorrem ao longo de órbitas hiperbólicas. E como $N \gg 1$, tem-se

$$\langle E_{\text{orb}} \rangle \approx \frac{1}{2} \frac{M}{N} (GM/R) \approx \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle . \quad (3.11)$$

Uma situação de encontro distante é ilustrada na Figura 3.1 em que

³ Se nossos modelos são todos de sistemas não-colisionais, não há necessidade de se tomar partículas com diferentes massas.

considera-se uma trajetória aproximadamente retilínea. Do que foi discutido acima, o impulso gravitacional que uma partícula impõe à outra é suficientemente pequeno para que $|\delta v| \ll v$, onde δv é a flutuação na velocidade orbital v do par. Decorre desta aproximação que

$$x \approx vt. \quad (3.11)$$

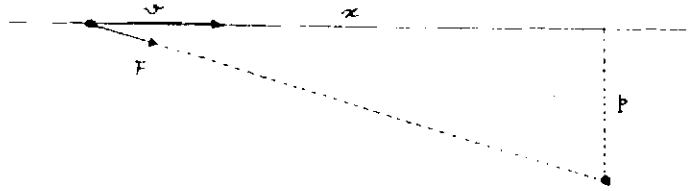


Fig. 3.1 - Ilustração de uma situação idealizada de um encontro rápido entre duas partículas, com uma delas colocada como referencial.

A força experimentada pelo par divide-se em duas componentes (Figura 3.1): paralela F_{\parallel} e perpendicular F_{\perp} . Assim, a aceleração da partícula, nas respectivas componentes paralela e perpendicular, é dada por:

$$\dot{v}_{\parallel} \approx \frac{Gm}{(r^2 + \epsilon^2)^{3/2}} x, \quad (3.12a)$$

$$\dot{v}_{\perp} \approx \frac{Gm}{(r^2 + \epsilon^2)^{3/2}} p, \quad (3.12b)$$

onde p é o parâmetro de impacto do par.

Se o que interessa aqui é estimar o quanto uma partícula é desviada de sua órbita original quando sofre um único encontro, segundo os parâmetros orbitais p e v , deve-se calcular o impulso transversal (por unidade de massa) que esse encontro produz. Portanto, toma-se (3.12b) e calcula-se a variação δv_{\perp} na componente perpendicular da velocidade da partícula:

$$\delta v_{\perp} \approx \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{v}_{\perp} dt = \frac{Gm}{p v} \int_{-\infty}^{+\infty} (s^2 + a^2)^{-3/2} ds = \frac{2Gm}{p v} (1/a^2), \quad (3.13a)$$

com $a^2 = 1 + \epsilon^2/p^2$, $s = x/p$. Enfim, chega-se a

$$\delta v_{\perp} \approx \frac{2Gm}{\epsilon} \frac{p/\epsilon}{(p/\epsilon)^2 + 1} \frac{1}{v}, \quad (3.13b)$$

que nos dá uma razoável estimativa do efeito de um único encontro de partículas sobre suas órbitas individuais. Todavia, uma série de sucessivos encontros produz perturbações aleatórias que, em média, se cancelam, ao longo da travessia. Então, deve-se contabilizar o desvio quadrático total ao longo de uma única travessia radial pelo sistema para se ter uma idéia da quantidade total de energia orbital que uma dada partícula troca com as vizinhas através de sucessivos encontros.

Admite-se que, efetivamente, uma partícula, que cruza radialmente o sistema, "enxerga" a distribuição projetada no plano perpendicular ao movimento com uma densidade superficial média da ordem de $N(\pi R^2)^{-1}$. Assim, o número de partículas, com parâmetros de impacto entre p e $p+dp$, que perturba a partícula teste, é igual a $N(\pi R^2)^{-1}(2\pi p dp)$ e o efeito cumulativo sobre a dispersão quadrática da velocidade da partícula teste é:

$$d(\Delta v^2) \approx (N/\pi R^2)(2\pi p dp)(\delta v_{\perp})^2 \quad (3.14)$$

Substituindo (3.13b) em (3.14) e integrando sobre os possíveis parâmetros de impacto, tem-se

$$\Delta v^2 \approx \frac{8 (GM/R)^2}{N} \frac{\zeta}{v^2} \approx \frac{8}{N} \langle v^2 \rangle \zeta, \quad (3.15)$$

onde fez-se a substituição de m por M/N , a velocidade orbital quadrática v^2 como sendo igual à velocidade quadrática média $\langle v^2 \rangle$ e definiu-se a integral

$$\zeta = \int_{p_{\min}}^{p_{\max}} \frac{p^3 dp}{(p^2 + \epsilon^2)^2} . \quad (3.16)$$

As restrições aos parâmetros de impacto são decorrentes das aproximações feitas no cálculo de Δv^2 . Naturalmente, um limite superior para p é o próprio raio característico R . O limite inferior está ligado à energia típica de encontros. Do que foi discutido anteriormente, os encontros ocorrem em órbitas tipicamente hiperbólicas, conseqüentemente, os encontros entre pares são distantes, *ie.*, ocorrem para p não muito pequeno.

As Eqs. (3.13 b) e (3.15) foram obtidas a partir da Figura 3.1 e, portanto, são válidas para $\delta v_{\perp}/v \ll 1$. Mas, estas aproximações mostram-se válidas mesmo nos casos em que $\delta v_{\perp}/v \sim 1$, coincidindo com deduções mais rigorosas, para o caso não amolecido (*e.g.*, Saslaw, 1987; Kockney e Eastwood, 1981). O parâmetro de impacto mínimo é um valor tal que a energia orbital seja mínima, isto é, p_{\min} é um valor minimante para

$$E = \frac{1}{2} \langle v_{\text{orb}}^2 \rangle - 2Gm/(p_{\min}^2 + \epsilon^2)^{1/2} > 0 , \quad (3.17a)$$

sob a restrição de $p_{\min}^2 \geq 0$. De (3.5) e (3.6) a Relação (3.17a) torna-se

$$E = \frac{1}{2} \frac{G M}{R} \left[\frac{N}{2} - R/(p_{\min}^2 + \epsilon^2)^{1/2} \right] > 0 . \quad (3.17b)$$

Para valores de $\epsilon \leq 2R/N$, o valor mínimo da energia tende para zero à medida que $p_{\min} \rightarrow [(2R/N)^2 - \epsilon^2]^{1/2}$. Para valores de ϵ maiores que $2R/N$ a desigualdade só se verifica para $p_{\min} = 0$ visto que só tem sentido, dentro da abordagem que foi feita, considerar-se valores reais para o parâmetro de impacto mínimo p_{\min} . Assim, para efeito de compactação fórmula, toma-se p_{\min} como sendo a parte real da expressão $[(2R/N)^2 - \epsilon^2]^{1/2}$ para qualquer valor de ϵ :

$$p_{\min} = \text{Re} \left[(2R/N)^2 - \epsilon^2 \right]^{1/2}. \quad (3.18)$$

A integral em (3.16) torna-se

$$\zeta = \frac{1}{2} \ln \frac{R^2 + \epsilon^2}{p_{\min}^2 + \epsilon^2} - \frac{\epsilon^2}{2R^2} \left[\frac{R^2}{p_{\min}^2 + \epsilon^2} - \frac{R^2}{R^2 + \epsilon^2} \right]. \quad (3.19)$$

Fazendo as devidas aproximações em virtude de $N \gg 1$ e de $\epsilon \ll R$, tem-se de (3.19) que

$$\zeta \approx \ln \Lambda \quad (3.20)$$

onde

$$\Lambda \approx \begin{cases} \frac{N}{2} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{N}{2} \frac{\epsilon}{R} \right)^2 \right] & \text{para } \epsilon \leq 2R/N \\ \frac{1}{\sqrt{e}} \frac{R}{\epsilon} & \text{para } \epsilon > 2R/N \end{cases} \quad (3.21)$$

Na Equação (3.21) tem-se que, para valores de $\epsilon > 2R/N$, Λ lembra o resultado empírico $\Lambda \approx R_h/3\epsilon$, obtido por Farouki e Salpeter (1982), onde R_h é o raio de meia-massa do sistema. Esta quase coincidência de resultados mostra que a discussão acima é consistente e a discrepância entre os fatores $1/\sqrt{e}$ e $1/3$ está na subjetividade da definição, que aqui é dada, de raio característico como sendo igual ao próprio raio gravitacional do sistema. Contudo, para o nosso propósito, a diferença entre os termos $1/2$ e $\ln 3$ é de pouca relevância em comparação a $\ln(R/\epsilon)$.

A Equação (3.15), após a substituição de (3.20), fica escrita de forma conveniente como

$$\frac{\Delta v^2}{\langle v^2 \rangle} \approx \frac{8}{N} \ln \Lambda \approx \frac{10 \ln \Lambda}{N}. \quad (3.22)$$

que expressa a fração típica de energia orbital que as partículas do sistema ganham (perdem), em média, ao longo de uma travessia. Neste caso, o número médio necessário de travessias para que uma partícula sofra uma perturbação em energia orbital comparável à energia orbital típica das partículas do sistema é simplesmente

$$N_{\text{relax}} = \frac{\langle v^2 \rangle}{\Delta v^2} \approx \frac{N}{10 \ln \Lambda} \quad (3.23)$$

Como exemplo, pode-se tomar um sistema esférico, com 1024 partículas e raio gravitacional $R = 1$. Se não se usa potencial amolecido, tem-se $\Lambda = 512$ e

$$N_{\text{relax}}(\epsilon=0) \approx 16 \text{ travessias.} \quad (3.24)$$

Usando um comprimento de amolecimento igual $2R/N$, tem-se $\Lambda = 311$ e

$$N_{\text{relax}}(\epsilon=2R/N=0,00195) \approx 18 \text{ travessias,} \quad (3.25)$$

muito pouco diferente do caso não amolecido, Eq. (3.24). Com um comprimento de amolecimento da ordem da distancia média, $\epsilon \approx R/N^{1/3}$, tem-se um significativo amolecimento dos encontros: $\Lambda = 6,11$ e o número de travessias para relaxação é

$$N_{\text{relax}}(\epsilon = R^{1/3}/N = 0,0992) \approx 57 \text{ travessias.} \quad (3.26)$$

Se são usadas 2048 partículas, os resultados acima tornam-se, respectivamente,

$$N_{\text{relax}}(\epsilon=0) \approx 30 \text{ travessias,} \quad (3.27)$$

$$N_{\text{relax}}(\epsilon=R/2N) \approx 32 \text{ travessias} \quad (3.28)$$

e, finalmente,

$$N_{\text{relax}}(\epsilon=R/N^{1/3}) \approx 81 \text{ travessias} \quad (3.29)$$

Estas estimativas ilustram o efeito positivo do comprimento de amolecimento no aumento do tempo de relaxação de pares. Isto mostra que pode-se prolongar o tempo de confiabilidade de uma simulação numérica de sistemas não-colisionais para um tempo razoavelmente maior do que o que duraria uma simulação com potenciais não amolecidos.

3.3 - TEOREMA DO VIRIAL (ESCALAR) COM POTENCIAL AMOLECIDO

Considere-se um sistema (modelo) esférico, com N partículas amolecidas por um comprimento ϵ . Toma-se as posições e velocidades todas com respeito ao centro de massa do conjunto. De acordo com a Eq. (3.2), a energia potencial interna do sistema é

$$W = - \frac{1}{2} G \sum_{i \neq j} \frac{m_i m_j}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{1/2}} \quad (3.30)$$

A energia cinética interna é

$$T = \frac{1}{2} \sum_i m_i v_i^2, \quad (3.31)$$

onde

$$r_{ij} = | \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j | \quad (3.32)$$

e

$$v_i = | \mathbf{v}_i |. \quad (3.33)$$

A energia interna do sistema é simplesmente

$$E = W + T. \quad (3.34)$$

O momento de inércia (escalar), com respeito ao centróide, é definido como:

$$I = \sum_i m_i r_i^2, \quad (3.35)$$

com

$$r_i = |\mathbf{r}_i|. \quad (3.36)$$

A força exercida sobre uma partícula de massa m_i é

$$\mathbf{F}_i = -m_i \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}_i} = -G m_i \frac{m_j \mathbf{r}_{ij}}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{3/2}}, \quad (3.37)$$

com

$$\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_j, \quad (3.38)$$

A equação de virial de Clausius (*e.g.*, Chandrasekhar, 1957, p. 50) diz que

$$\frac{1}{2} \ddot{I} = 2T + \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F} \quad (3.39a)$$

ou, de (3.37):

$$\frac{1}{2} \ddot{I} = 2T - G \frac{m_i m_j \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_{ij}}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{3/2}}. \quad (3.39b)$$

Observando que $\mathbf{r}_{ij} = -\mathbf{r}_{ji}$, e como os índices i, j são mudos, tem-se

$$\frac{1}{2} \ddot{I} = 2T + G \frac{m_i m_j \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{r}_{ij}}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{3/2}}. \quad (3.39c)$$

Somando-se (3.39b) e (3.39c), membro a membro, em seguida dividindo-se por dois, tem-se finalmente:

$$\frac{1}{2} \ddot{I} = 2T - \frac{1}{2} G \frac{m_i m_j r_{ij}^2}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{3/2}}. \quad (3.40)$$

Definindo a grandeza

$$S = -\frac{1}{2} G \frac{m_i m_j \epsilon^2}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{3/2}}, \quad (3.41)$$

tem-se a equação de virial escalar para partículas amolecidas:

$$\frac{1}{2} \ddot{I} + S = 2T + W = 2E - W = T + E, \quad (3.42)$$

Se o sistema atinge o equilíbrio de virial, $\ddot{I} = 0$, tem-se o seguinte resultado:

$$S = 2T + W = 2E - W = T + E, \quad (3.43)$$

que é verificado experimentalmente (Figura 3.2). No limite para $\epsilon \rightarrow 0$, tem-se simplesmente $S = 0$, e então a Eq. (3.42) torna-se a já conhecida equação de virial escalar:

$$\frac{1}{2} \ddot{I} = 2T + W = 2E - W = T + E. \quad (3.44)$$

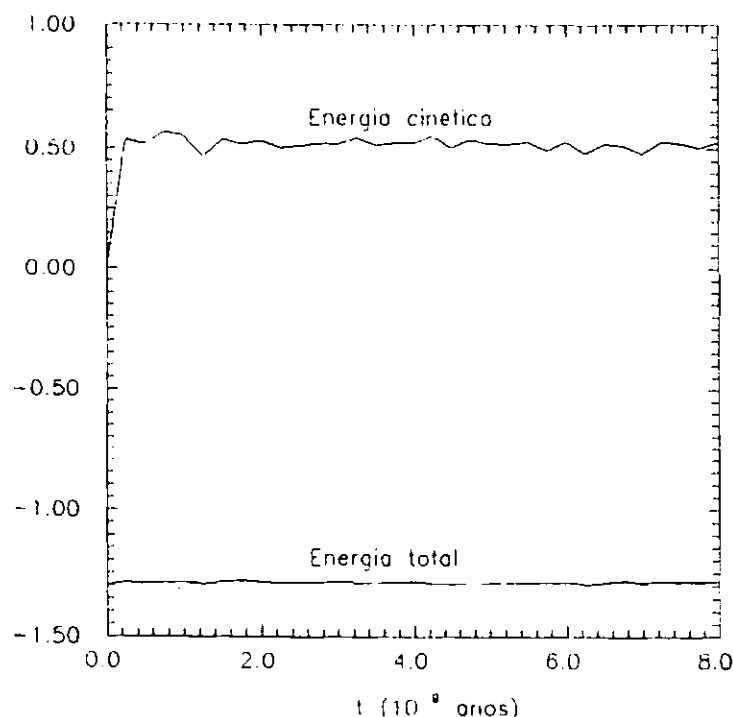


Fig. 3.2 - Evolução das energias cinética e total de uma simulação de colapso de uma esfera homogênea, com perfil inicial que se projeta aproximadamente no perfil de de Vaucouleurs. As partículas foram abandonadas do repouso. A massa total equivale a $2,3 \cdot 10^{11} M_{\odot}$.

Em todas simulações de relaxação violenta que foram realizadas os sistemas acomodaram-se em apenas alguns tempos de travessia⁵, restando apenas algumas flutuações aleatórias, superpostas a uma oscilação de período aparentemente regular (Figura 3.2). Nesta fase virializada, verifica-se que $2E - W$ mantém-se aproximadamente constante, a menos de pequenas oscilações em torno de um valor não nulo.

Oscilações em torno do equilíbrio devem-se essencialmente a duas componentes de naturezas distintas: (i) aleatórias, cujas origens são diversas, que vão desde as flutuações de densidade nas vizinhanças de cada partícula, devidas principalmente ao reduzido número de partículas do modelo, até os erros

⁵ Usualmente, define-se tempo de travessia t_c de um sistema, de raio característico R , e velocidade típica de suas partículas v por:

$$t_c = R/v = R/(GM/R)^{1/2} = (R^3/GM)^{1/2}$$

do método de integração, principalmente nas regiões mais densas do sistema; (ii) componente regular, que expressa os efeitos de relaxação coletiva, equivalendo a uma redistribuição de energia entre os graus internos de liberdade do sistema (*c.f.*, D. Lynden-Bell 1967). O equilíbrio é atingido graças a efeitos de amortecimento não-dissipativos combinados: mistura de fase e amortecimento de Landau gravitacional das ondas de densidade que se propagam pelo sistema durante a acomodação (*e.g.*, Saslaw 1987, Cap. 16).

Pode-se fazer uma análise grosseira das pequenas perturbações em torno do ponto de equilíbrio de virial ($\ddot{I}=0$). Assim, reescreve-se a energia potencial W , o momento de inércia I e a função S em termos de parâmetros característicos como:

$$W = - \frac{GM^2}{R}, \quad (3.45)$$

$$S = - \alpha \frac{GM^2}{R^3} \varepsilon^2, \quad (3.46)$$

e

$$I = \lambda^2 MR^2 \quad (3.47)$$

Seja h uma pequena perturbação em torno do ponto de equilíbrio R , com $h \ll R$. Assim, a equação de virial, Eq. (3.42), fica equivalente a

$$\ddot{h} \approx - \frac{GM}{\lambda^2 R^3} \left(1 + 3\alpha \frac{\varepsilon^2}{R^2} \right) h, \quad (3.48)$$

donde se tira que a frequência natural do sistema, na fase quase linear, é

$$\omega^2 \approx \frac{GM}{\lambda^2 R^3} \left(1 + 3\alpha \frac{\varepsilon^2}{R^2} \right). \quad (3.49)$$

A Equação (3.49) mostra que, para valores de $\varepsilon \ll R$, a introdução do comprimento de amolecimento não ocasiona praticamente quase nenhuma influência

sobre o comportamento oscilatório do sistema. Contudo, na maioria dos modelos, uma super-simplificação é feita ao se manter ϵ constante por todo o sistema, o que, a rigor, não deveria acontecer⁵ visto que efeitos oscilatórios indesejáveis surgem nas regiões mais concentradas, onde o comprimento de amolecimento passa a ser comprável à escala de tamanho destas regiões.

3.4 - INFLUÊNCIA DO AMOLECIMENTO NOS EFEITOS DE FLUTUAÇÕES LOCAIS

Em um sistema estelar (ou em um aglomerado de galáxias), cada estrela (galáxia) experimenta acelerações de origem coletiva (componente regular) e componentes locais (aleatórias) devidos tanto aos encontros distantes (seção anterior) quanto às flutuações estatísticas na densidade numérica de estrelas (galáxias) do sistema.

Um sistema auto-gravitante, com muitas partículas, pode ser aproximado a um fluido somente do ponto de vista macroscópico. Contudo, em regiões com pequenas escalas, onde o número de partículas é pequeno, tem-se que o caráter discreto da distribuição manifesta flutuações estatísticas em torno da densidade numérica esperada v . Assim, as flutuações em torno do número $\Delta N' = v(r')\Delta^3 r'$ de partículas no interior de um volume $\Delta^3 r'$, centrado no ponto r' , refletem no surgimento de forças perturbativas do tipo aleatório. A força (valor esperado) exercida por tal elemento de volume $\Delta^3 r'$ é

$$\Delta F \approx - G m^2 \Delta N' \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} . \quad (3.50)$$

Este número de partículas no interior do volume $\Delta^3 r'$ distribui-se essencialmente de acordo com a estatística de Poisson e, portanto, flutua, em média, de uma quantidade igual a $\sqrt{\Delta N'}$. Então, a contribuição desta flutuação é a força

⁵ Nas técnicas de suavização, empregadas na hidrodinâmica de partículas suavizadas, o essencial é que o comprimento de amolecimento seja função da densidade local do fluido (Hernquist e Katz 1989), o que torna um pouco complicado o cálculo das forças que passam a envolver os gradientes da densidade que, em princípio, é uma função desconhecida.

perturbativa

$$\Delta F \approx \bar{\tau} G m^2 \sqrt{\Delta N'} \frac{r - r'}{|r - r'|^3} . \quad (3.51)$$

Considere-se uma estrela no interior de um sistema estelar, infinito e homogêneo ($v = \text{Cte.}$), tem-se que a contribuição líquida da componente lisa da distribuição é nula. Contudo, forças do tipo que aparece na Eq. (3.51) impõem impulsos aleatórios à velocidade da estrela, de forma que, mesmo que esta esteja inicialmente em repouso, ao final de um tempo suficientemente longo, haverá se distanciado da sua posição original; estas flutuações induzem uma difusão browniana da estrela no espaço de fase (r, v) . Contudo, pelo teorema de flutuação-dissipação (*c.f.*, Kandrup 1989), a velocidade da estrela é limitada por fricção dinâmica com as suas vizinhanças. Se τ é o tempo característico das flutuações, que deve ser algo próximo da razão entre a separação média e a velocidade efetiva das partículas do sistema, pode-se dizer que os impulsos aleatórios recebidos por uma partícula são efetivamente o produto de τ pelas forças perturbativas, do tipo que aparece em (3.51). Como este movimento é "randômico", a média temporal das contribuições dos impulsos e, conseqüentemente, das forças em (3.51) é nula. Porém, a contribuição quadrática de todas flutuações, ao longo de um tempo finito, é não nula e traduz a quantidade líquida de impulsos recebidos das forças de flutuações de densidade, o que expressa o quanto a partícula se dispersou das órbitas que seriam regidas unicamente por forças regulares.

Pode-se fazer uma estimativa da contribuição efetiva das flutuações de densidade sobre uma dada estrela em um meio homogêneo e infinito, admitindo que as forças sejam amaciadas pelo comprimento de amolecimento ϵ . Primeiramente, considere-se uma estrela, dentro das suposições feitas acima, e calcula-se a contribuição efetiva de flutuações no número de estrelas distribuídas no interior de uma concha esférica, de raio r , centrada na estrela teste. Seja h a espessura desta concha, então o número de estrelas ali dentro é simplesmente $4\pi r^2 v h$. O erro esperado desta estimativa é igual à raiz deste número. A contribuição quadrática desta flutuação na força exercida por esta concha, sobre a partícula é então

$$\delta(\Delta F)^2 \approx 4\pi(Gm^2)^2 v \frac{r^4 h}{(r^2 + \epsilon^2)^3} . \quad (3.52)$$

Admitindo que h é suficientemente pequeno de modo que pode-se fazer $h \rightarrow dr$, tem-se que

$$d(\Delta F)^2 \approx 4\pi(Gm^2)^2 v \frac{r^4 dr}{(r^2 + \epsilon^2)^3} . \quad (3.53)$$

A resultante quadrática de toda a distribuição é, neste caso

$$\Delta F^2 \approx 4\pi(Gm^2)^2 v \int_{\lambda}^{\infty} \frac{r^4 dr}{(r^2 + \epsilon^2)^3} . \quad (3.54)$$

No caso de um sistema estelar verdadeiro, $\epsilon = 0$, a Eq. (3.54) reduz-se simplesmente a:

$$\begin{aligned} \Delta F^2 &\approx 4\pi(Gm^2)^2 v \int_{\lambda}^{\infty} \frac{dr}{r^2} \\ &\approx 4\pi(Gm^2)^2 \frac{v}{\lambda} \end{aligned} \quad (3.55)$$

onde λ é a separação média entre as estrelas da distribuição, dada por

$$\lambda = v^{1/3} . \quad (3.56)$$

Portanto, de (3.55) e (3.56), obtém-se

$$\Delta F \approx 2\pi^{1/2} G m^2 v^{2/3} . \quad (3.57)$$

que mostra que o valor efetivo das forças de flutuação é da ordem de grandeza da força de interação de um par separado pela distância $v^{1/3}$.

Se é tomado $\varepsilon > 0$ a Eq. (3.54) vale

$$\Delta F^2 \approx (2\pi^{1/2}Gm^2v^{2/3})^2 \left\{ \frac{3}{8} \left(\frac{\pi}{2} - \arctan \frac{\lambda}{\varepsilon} \right) + \frac{1}{4} \sin(2\arctan \frac{\lambda}{\varepsilon}) - \frac{1}{32} \sin(4\arctan \frac{\lambda}{\varepsilon}) \right\} \frac{\lambda}{\varepsilon} \quad (3.58)$$

Adotando $\lambda/\varepsilon \approx 1$ tem-se, então, que o valor efetivo das forças perturbativas torna-se

$$\Delta F (2\pi^{1/2}Gm^2v^{2/3}) . \quad (3.59)$$

Para $\lambda/\varepsilon = 0,5$ tem-se

$$\Delta F \approx 0,54 (2\pi^{1/2}Gm^2v^{2/3}) , \quad (3.60)$$

que é metade do valor estimado para um sistema sem amolecimento. Estes dois resultados mostram que o modelo usual de amolecimento (Eq. (3.3)) não é tão eficiente na atenuação dos efeitos de flutuações de densidade, quanto o é na suavização de efeitos de encontros estelares. De fato, ao se tomar $\varepsilon = v^{-1/3}$, que é uma medida razoável da granulação do sistema, vê-se que os efeitos perturbativos são reduzidos em apenas 30%. Porém, tomando ε igual ao dobro da separação média das partículas os efeitos são reduzidos à metade. Mas valores de ε maiores que a separação média, em um sistema com relativamente poucos corpos (*e.g.*, $N \sim 1000$), pode ferir significativamente a consistência do modelo, em virtude da reduzida resolução espacial nas regiões centrais.

A discussão acima é válida exclusivamente para o método da soma direta, onde cada partícula de um sistema com N integrantes, "enxergam" $N-1$ contribuições para o campo gravitacional. Quanto maior o número de partículas do modelo computacional (representando sempre o mesmo sistema físico) menores os efeitos decorrentes de flutuações de densidade. De fato, fazendo-se uma breve análise dimensional, na Eq. (3.57), vê-se que a força perturbativa, ΔF , depende

de $N^{4/3}$. Assim, por exemplo, um modelo computacional com o dobro do número de partículas de um outro modelo é 2,5 vezes mais "calmo". Em outras palavras, no modelo mais pobre, as forças perturbativas são, efetivamente, 2,5 vezes mais intensas que no modelo mais rico, ambos representando (é claro!) o mesmo sistema físico. Isto, de certo modo, é entusiasmante se é lembrado que as simulações aqui feitas, usando um VAX 11/780, poderiam ser realizadas com cem vezes o número de partículas se fosse usado um supercomputador (*e.g.*, CONVEX). Infelizmente, o método de árvore, bem como quaisquer outros métodos que substituem células do sistema por superpartículas, reduz o número de fontes do campo gravitacional, o que, embora acelere eficientemente o cálculo, amplifica os efeitos de flutuações.

Enquanto no método da soma direta as flutuações de densidade são naturais, nos métodos que utilizam malhas as flutuações de densidade são artificiais, ou seja, cada partícula avista uma distribuição de células ao invés de outras partículas. Quanto maior a ordem de expansão de multipolos, em cada célula, menores os efeitos perturbativos devido a redução do número de termos de força. Conseqüentemente, as flutuações de densidade de fontes são máximas na aproximação de monopolo (aproximação de ordem zero).

O método de árvore tem uma certa vantagem com respeito aos métodos de grade fixa, no que concerne flutuações decorrentes do truncamento de multipolo, em virtude da determinação das células ser completamente lagrangiana, o que torna o cálculo das forças locais com a mesma resolução da soma direta. Mesmo assim, este método faz com que células mais distantes tenham um tamanho arbitrariamente grande, acarretando uma grande perda de resolução espacial nas regiões mais remotas. Portanto, a aproximação de monopolo pode prejudicar consideravelmente o realismo de uma simulação em que sejam relevantes grandes estruturas, que possuam fortes componentes quadripolares (*e.g.*, estruturas filamentosas). Contudo, a apresentação de trabalhos futuros, com resultados importantes para a Astronomia Extragaláctica só será possível com o acesso a um supercomputador ou uma **Workstation** (Cap. 5), visto que, neste caso, pode-se adotar técnicas de integração bem mais precisas e atribuir às células da árvore os componentes do tensor momento de quadrupolo.

Usando o mesmo artifício empregado na Seção 2.4, com o auxílio da Figura 2.4, tem-se que a massa de cada subunidade é igual a

$$m_{\text{sub}}^i \approx \frac{4}{3} \pi \theta^3 r_i^3 m v, \quad (3.61)$$

ou, genericamente, diz-se que a massa $m_f(r)$ da fonte, determinada pela hierarquia de distâncias, na posição r , é

$$m_f(r) \approx \frac{4}{3} \pi \theta^3 r^3. \quad (3.62)$$

A densidade numérica de subunidades em cada concha é então

$$v_{\text{concha}}^i \approx \left(\frac{4}{3} \pi \theta^3 r_i^3 \right)^{-1} \quad (3.63)$$

ou, para uma distância r da partícula, diz-se que a densidade numérica de fontes é

$$v_f(r) \approx \left(\frac{4}{3} \pi \theta^3 \right)^{-1} r^{-3}, \quad (3.64)$$

que concorda com a idéia do método, que é justamente a de reduzir o número específico de fontes gravitacionais avistadas por cada partícula do sistema. Como já foi dito, esta redução de termos de força acarreta uma perda de resolução espacial, em virtude da reduzida distribuição de fontes aparentes, com um conseqüente aumento dos efeitos de flutuações de densidade.

Se o número esperado de fontes, no volume $d^3\mathbf{r} = d\Omega r^2 dr$, estabelecido pela interseção do ângulo sólido $d\Omega$ com a camada esférica de espessura dr , é $v_f(r)d\Omega r^2 dr$, então este número flutua, em média, de $\pm (v_f(r)d\Omega r^2 dr)^{1/2}$. Como foi feito anteriormente, a contribuição desta flutuação na força sobre uma partícula é

$$\delta\Delta F \approx \frac{Gmm_f(r)r}{(r^2 + \varepsilon^2)^{3/2}} (v_f(r)d\Omega r^2 dr)^{1/2}. \quad (3.65)$$

Contabilizando as contribuições quadráticas de todas as direções e distâncias, por um argumento semelhante ao que foi usado no caso da soma direta, tem-se da Eq. (3.65) que

$$\delta\Delta F^2 \approx (2\pi^{1/2}Gm^2v^{2/3})^2 \theta^3 v^{2/3} \int_{r_0}^R \frac{r^7 dr}{(r^2 + \epsilon^2)^3} . \quad (3.66)$$

A fim de comparar os efeitos da aproximação de monopolo, estuda-se a função

$$A^2_{(\theta, \epsilon/R, N)} \equiv \theta^3 v^{2/3} \int_{r_0}^R \frac{r^7 dr}{(r^2 + \epsilon^2)^3} . \quad (3.67)$$

A solução da integral é

$$\begin{aligned} A^2 = \frac{1}{2} R^2 \left\{ 1 - (r_0/R)^2 - 3(\epsilon/R)^2 \ln \frac{R^2 + \epsilon^2}{r_0^2 + \epsilon^2} \right. \\ \left. + \frac{3(\epsilon/R)^4}{1+(\epsilon/R)^2} \left[\frac{R^2 + \epsilon^2}{r_0^2 + \epsilon^2} - 1 \right] \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \frac{(\epsilon/R)^6}{1+(\epsilon/R)^2} \left[\left(\frac{R^2 + \epsilon^2}{r_0^2 + \epsilon^2} \right)^2 - 1 \right] \right\} \quad (3.68) \end{aligned}$$

Lembrando, da Seção 2.4, que $r_0 \approx (\theta v^{1/3})^{-1}$, e admitindo que $\epsilon/R \ll 1$, tem-se

$$A^2 \approx \frac{1}{2} \left\{ \left[1 - 6(\epsilon/R)^2 \ln \frac{R/\epsilon}{\sqrt{1+(4\pi/3N)^{2/3}(R/\theta\epsilon)^2}} \right] \left(\frac{N}{4\pi/3} \right)^{2/3} \theta^3 - \theta \right\} \quad (3.69)$$

que é uma expressão nada simples, mas é útil para se ter uma idéia grosseira do aumento nos efeitos de flutuações de densidade aparente de fontes do campo.

Se é abolido o comprimento de amolecimento, $\epsilon = 0$, é adotado um

parâmetro de tolerância $\theta \approx 1$ e $N = 1024$, tem-se $A \approx 4,3$, que significa que as perturbações na força exercida pelo sistema, sobre uma dada partícula são ~ 4 vezes mais relevantes no método de árvore que no da soma direta, para um valor de $\theta \approx 1$. Repetindo o raciocínio para $N = 2048$, tem-se $A \approx 5,5$. À primeira vista, este resultado parece contradizer a idéia de quanto mais partículas no modelo computacional mais resolução (consistência) deveria-se ter. Isto só seria verdade se o método de se contabilizar as forças, usando-se árvore, não desprezasse a verdadeira distribuição de fontes do campo gravitacional, o que é respeitado exclusivamente na soma direta. Lembrando que o número total de fontes avistadas por cada partícula do modelo é, em média, $\mathcal{O}(\log N)$, então, à medida que o número de partículas aumenta, a razão entre o número relativo de fontes avistadas e o número de partículas diminui. Isto é, a fração de fontes contabilizadas relativa ao número de partículas é $\mathcal{O}(\log N / N) < 1$, mostrando que a distribuição de fontes fica relativamente pobre, à medida que o número de partículas utilizadas aumenta, para um parâmetro de tolerância $\theta \sim 1$.

Usando um comprimento de amolecimento como o que é adotado no Capítulo 4, $\epsilon/R \approx N^{1/3}$, tem-se, para $\theta \approx 1$ e $N \approx 1024$ que $A \approx 4,1$; e, para $N = 2048$, tem-se que $A \approx 5,2$. Estes dois últimos resultados apresentam pouquíssima diferença dos obtidos no parágrafo anterior, evidenciando que, no método de árvore, o comprimento de amolecimento, dentro dos limites de consistência, não tem relevância alguma no que diz respeito à suavização dos efeitos de flutuação de densidade para um valor $\theta \approx 1$. Portanto, as simulações realizadas aqui, têm a característica de serem excessivamente ruidosas quanto aos impulsos dados às partículas dos modelos, pelas forças obtidas pela aproximação de monopolo.

Uma discussão mais geral, acompanhada de testes numéricos, é feita por Barnes-Hut (1989), onde se leva em conta, inclusive, aproximações de quadrupolo gravitacional. Também Hernquist (1988) aborda a questão dos efeitos de flutuações decorrentes do critério de tolerância do código de árvore.

3.5 - INFLUÊNCIA DO AMOLECIMENTO NA RESOLUÇÃO ESPACIAL

Em experimentos numéricos, com partículas amolecidas é de se esperar uma perda de resolução espacial, em regiões com tamanho comparável ao comprimento de amolecimento (Sellwood, 1987). Daí se deduz que o ideal é adotar ϵ da ordem da separação média local entre as partículas, que é o limite natural de resolução espacial do modelo. Neste caso, o cálculo das forças passa a ser um tanto complicado, visto que as derivadas do potencial envolvem também as derivadas do comprimento de amolecimento, cujo comportamento espacial não é conhecido *a priori* e, portanto, a própria árvore é utilizada para se levantar os gradientes de densidades. Obviamente, quando ϵ é constante, estruturas em regiões reduzidas, menores que ϵ , tornam-se desprovidas de significado físico. Contudo, o amolecimento pode afetar o desenvolvimento de até mesmo grandes estruturas (Sellwood, 1987).

Pode-se inferir que o comprimento de amolecimento reduz a resolução espacial do modelo, do seguinte modo. Primeiramente, admite-se que o comprimento de amolecimento favorece a aproximação da equação de Vlasov (Eq. (3.1)). Neste caso, qualquer célula de fase, de volume $\Delta^3x \Delta^3v$, evolui aproximadamente como elemento de um fluido incompressível. Como a força exercida pelas vizinhanças, dentro de uma distância comparável a ϵ , está suavizada, a aceleração imposta ao elemento de fase $\Delta^3x \Delta^3v$ é reduzida. Conseqüentemente, a componente cúbica de velocidades do elemento sofre uma dilatação menor do que a que sofreria sem o artifício de amolecimento. Assim, por ser o volume de fase aproximadamente constante, ao longo da evolução do sistema, a componente cúbica espacial sofre uma contração menor do que a que ocorreria se não houvesse amolecimento. Portanto, o artifício de suavização de encontros limita inferiormente os elementos de volume espacial, em virtude de limitar superiormente a componente cúbica das velocidades.

Uma versão de código com ϵ adaptável à densidade local faz parte de um futuro projeto, em que a própria estrutura de dados, em árvore octal, é utilizada para se obter ϵ e seu gradiente $\nabla\epsilon$, essenciais para o cálculo das forças (Cap. 5).

CAPÍTULO 4

TESTE E APLICAÇÃO DO CÓDIGO

4.1 - INTRODUÇÃO

Simulações de colapso de sistemas estelares são de extrema importância para o entendimento das etapas de formação de galáxias (Binney e Tremaine 1987, p. 275), pelo menos no que concerne os processos puramente gravitacionais onde, obviamente, não são incluídos efeitos dissipativos. Provavelmente, detalhes morfológicos e estruturais, tais como a formação de disco (Frenk 1988) e de um núcleo compacto (Kormendy 1987), exigem modelos dissipativos implementando o cálculo das forças no código de N-corpos. No entanto, as tentativas de incluir tais efeitos ainda estão em fase rudimentar (Frenk 1988).

Para dar conta de aspectos globais da dinâmica de formação de galáxias elípticas, apenas os processos gravitacionais são suficientes. Para estes, existem técnicas de N-corpos cada vez mais sofisticadas, para cada problema específico. Contudo, como já foi mencionado nos capítulos anteriores, o método de árvore é o que mais se adapta a problemas que envolvem geometria arbitrária. Até mesmo sistemas com uma geometria inicial simples (*eg.* esférica) podem sofrer perturbações anisotrópicas na fase de menor configuração do colapso, em virtude dos efeitos das flutuações de densidade serem amplificados naquela etapa. Tais efeitos não são evidenciados, por exemplo, nas simulações feitas por Burkert (1990), visto que se usa um método unidimensional, que contabiliza a força resultante do número de partículas, no interior de um dado raio esférico. Embora o método tenha alta resolução central, por utilizar uma grade radial logarítmica, as contribuições de flutuações não-radiais de densidade, no momento do colapso, não são levadas em conta. Desta forma, todos os resultados deste método convergem fatalmente para objetos perfeitamente esféricos e efeitos secundários, tais como triaxialidade, são descartados do modelo.

Um resultado muito importante, das simulações realizadas por Burkert (1990), é que a formação da parte central de galáxias elípticas pode ser obtida, simplesmente por processos não-dissipativos, a despeito do que se inferia dos resultados de fotometria de alta resolução das partes centrais destes objetos (Kormendy 1989). Segundo Burkert, objetos obtidos por colapsos violentos, apresentam estrutura central (caroço) embebida em um envelope difuso, anisotrópico, que segue o perfil de de Vaucouleurs.

Neste capítulo, são feitos testes da eficiência do código e uma aplicação a uma simulação de colapso e evolução de uma distribuição esférica, aproximadamente homogênea, com partículas inicialmente em repouso. Tal situação representa, grosseiramente, o colapso de uma protogaláxia, sem rotação significativa, que evolui para um objeto parecido com um sistema esferóide. Contudo, são usadas apenas 1024 partículas, contra as 20.000 do experimento de Burkert (1990). Conseqüentemente, o comprimento de amolecimento é da ordem de $1/10$ do raio gravitacional do sistema virializado. Não obstante, os resultados são proveitosos no que diz respeito a visualização das etapas de relaxação do objeto e da evolução no espaço de fase. A parte central evolui rapidamente para uma configuração de equilíbrio¹, apresentando em alguns tempos de travessia um perfil de densidade superficial que se aproxima ao de de Vaucouleurs. Uma grande quantidade de partículas ejetadas no colapso forma o halo, que leva um tempo relativamente longo, em comparação ao da parte central, para assumir uma situação de equilíbrio.

4.2 - ESCALONAMENTO DAS UNIDADES FÍSICO-COMPUTACIONAIS

Para que os resultados de uma simulação numérica tenham significado físico é necessário fazer uma correspondência entre as unidades físicas do sistema e as unidades computacionais do modelo. Aqui, apenas as forças gravitacionais são as responsáveis pelos movimentos; logo, as escalas de comprimento, massa e tempo relacionam-se exclusivamente pela constante gravitacional G .

¹ Em sistemas gravitacionais, o termo "equilíbrio" não significa rigorosamente o estado definitivo, mas sim um estado lento de evolução, determinado essencialmente por encontros fracos que conduzem o sistema à catástrofe gravotérmica (*c.f.* Saslaw 1985).

Como ponto de partida, fazemos $G = 1$. Adotamos convenientemente as unidades de tempo, $[t]$, e de massa, $[m]$, de modo que estas correspondam, aproximadamente, ao período orbital solar, $[t] \sim 250 \text{ Ma}$, e à massa de duas galáxias, $[m] \sim 2 \cdot 10^{11} M_{\odot}$, respectivamente. De acordo com a Tabela 4.1, a partir do valor de G , em escala astrofísica, encontra-se facilmente o valor correspondente de $[l]$ nas correspondentes unidades:

$$[l] = \frac{4,49 \cdot 10^{-12} \text{ kpc } M_{\odot}^{-1} \text{ Ma}^{-2}}{(250 \text{ Ma})^{-2} (2 \cdot 10^{11} M_{\odot})^{-1}} = 38,32 \text{ kpc.} \quad (4.1)$$

Reajustando as constantes, em (4.1), convenientemente, tem-se $[l] = 40,0 \text{ kpc}$, $[m] = 2,28 \cdot 10^{11} M_{\odot}$ e $[t] = 250 \text{ Ma}$. Destes valores, obtém-se facilmente a correspondente unidade de velocidade em km s^{-1} , $[v] = 155 \text{ km s}^{-1}$.

TABELA 4.1 - CONVERSÃO DE UNIDADES MKS PARA UNIDADES ASTROFÍSICAS

DIMENSÃO FÍSICA	UNIDADES MKS	UNIDADES ASTROFÍSICAS
comprimento	metro (m)	$3,24 \cdot 10^{-20}$ kiloparsec (kpc)
massa	quilograma (kg)	$5,03 \cdot 10^{-31}$ massa solar (M_{\odot})
tempo	segundo (s)	$3,17 \cdot 10^{-12} \cdot 10^6$ ano (Ma)
const. grav.	$6,67 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$	$4,49 \cdot 10^{-12} \text{ kpc}^3 M_{\odot}^{-1} \text{ Ma}^{-2}$

Se, por exemplo, nosso modelo é um objeto esférico, com massa total $M = 1$ ($\equiv 2,28 \cdot 10^{11} M_{\odot}$), energia total $E = -1$, tem-se que o raio gravitacional do sistema é $R = G M^2 / (-2E) = 0,5$ ($\equiv 20 \text{ kpc}$), a velocidade efetiva das partículas do sistema é $v = \sqrt{-2E/M} = 219 \text{ km s}^{-1}$, um valor razoável para galáxias elípticas, cujas velocidades internas típicas encontram-se na faixa de 140 a 300 km s^{-1} .

4.3 - ESCOLHA DO PASSO DE INTEGRAÇÃO E DO COMPRIMENTO DE AMOLECIMENTO

A estimativa do passo de integração e do comprimento de amolecimento é feita em função da estabilidade numérica das órbitas em situações críticas. O casamento entre Δt e ϵ deve ser feito em função de minimizar lapsos de conservação de energia.

Supõe-se que, em um dado momento da simulação, o sistema colapse a tal ponto que quase toda sua massa esteja em uma região muito reduzida com respeito ao comprimento de amolecimento. O campo gravitacional passa a ser escrito aproximadamente como

$$\mathbf{g}(\mathbf{r}) = -\nabla\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{G M \mathbf{r}}{(r^2 + \epsilon^2)^{3/2}} \quad (4.2)$$

Neste ponto, o passo de integração deve ser suficientemente pequeno para que até mesmo uma partícula em órbita circular seja numericamente estável.

A equação orbital da partícula, submetida ao campo gravitacional da Eq. (4.2), em coordenadas polares, é

$$\ddot{\mathbf{r}} - \dot{\phi}^2 \mathbf{r} = -\frac{G M \mathbf{r}}{(r^2 + \epsilon^2)^{3/2}} \quad (4.3)$$

Sendo $h = \dot{\phi} r^2$ o momento angular orbital, por unidade de massa da partícula, tem-se que a Equação (4.3) torna-se

$$\ddot{r} - \frac{h^2}{r^3} = -\frac{G M r}{(r^2 + \epsilon^2)^{3/2}} \quad (4.4)$$

Como a órbita é aproximadamente circular, admitimos que a posição radial sofre pequenas perturbações ξ em torno do equilíbrio (*i.e.* $\ddot{r} = 0$). Assim, fazendo a substituição $r \rightarrow r + \xi$ na Eq. (4.4), onde r é a posição de equilíbrio radial, obtém-se

$$\frac{h^2}{r^3} = \frac{G M r}{(r^2 + \epsilon^2)^{3/2}} \text{ (no equilíbrio);} \quad (4.4a)$$

$$\ddot{\xi} - \frac{h^2}{r^3} \left(1 + 3 \frac{\xi}{r}\right) = - \frac{G M}{(r^2 + \epsilon^2)^{3/2}} (r + \xi) . \quad (4.4b)$$

Substituindo (4.4a) em (4.4b) tem-se finalmente

$$\ddot{\xi} + \omega_e^2 \xi = 0 \quad (4.5)$$

onde

$$\omega_e = \left\{ \frac{GM(r^2 + 4\epsilon^2)}{(r^2 + \epsilon^2)^{5/2}} \right\}^{1/2} \quad (4.6)$$

é a frequência epicíclica da órbita da partícula.

Para o caso limite de órbitas de pequeno raio, $r \rightarrow 0$, tem-se o maior valor para a frequência epicíclica

$$\omega_e = 2 (GM/\epsilon^3)^{1/2} \quad (4.7)$$

Do critério de estabilidade (vide seção 2.5.4), a relação entre a frequência epicíclica e o passo de integração deve ser

$$\omega_e \Delta t \leq 2 \quad (4.8)$$

Adotando o valor crítico para o passo de integração, tem-se que

$$\Delta t_c = (\epsilon^3/GM)^{1/2} \quad (4.9)$$

Como foi visto no Cap. 3, é conveniente adotar um valor para ϵ que seja aproximado à separação média entre as partículas do sistema na fase relaxada. Assim, escreve-se

$$\varepsilon = R / N^{1/3} \quad (4.10)$$

onde R é o raio gravitacional escrito como:

$$R = \frac{GM}{-2E} \quad (4.11)$$

Substituindo ε , de (4.10) e (4.11), em (4.9), o passo de integração crítico fica escrito por

$$\Delta t_c = G \left[\frac{M^5}{8 N |E|^3} \right]^{1/2} \quad (4.12)$$

A presença de N no denominador do termo entre colchetes, na Eq. (4.12), restringe o critério de escolha de Δt_c para situações em que N não é muito grande (*e.g.*, $N \sim 10^3$). Assim, mantida a massa do sistema constante, este critério de escolha do comprimento de amolecimento, via Eq. (4.10), faz com que o passo de integração convirja para zero quando se usa um grande número de partículas. Portanto, deve-se lançar mão de algum artifício que não fira a consistência do modelo e que limite inferiormente Δt . Uma alternativa é impor um limite inferior ao comprimento de amolecimento, ε_{\min} , por algum argumento de resolução espacial; então, via Eq. (4.9), obtém-se Δt_{\min} . Por exemplo, não há necessidade de realizar experimentos com resolução maior do que o que se observa (*eg.* as partes centrais de galáxias).

4.4 - TESTE DA EFICIÊNCIA DO CÓDIGO

A fim de testar a eficiência do código, tanto na consistência com as leis de conservação de movimento, quanto em velocidade computacional, foram realizados experimentos com cinco sistemas, cada um com 512, 1024, 2048, 4096 e 8192 partículas, respectivamente, e para seis diferentes valores de θ ($= 0, 0,3, 0,7, 1,0, 1,2$ e $1,5$).

O esforço computacional por partícula é estimado como o número médio de termos de força por partícula. Empiricamente, isto equivale a

contabilizar o número de chamadas que o programa faz, em média, às sub-rotinas que calculam as forças sobre cada partícula.

Os erros inerentes à aproximação de monopolo (*i.e.* ao se substituir cada célula por massa puntual no centróide) induzem falhas na conservação de movimento (linear e angular), acarretando no não fechamento da somatória tanto das forças internas quanto dos torques das forças gravitacionais em zero.

A rigor, até na soma direta erros de arredondamento são propagados para a força (torque) resultante do sistema de partículas, de modo que o fechamento em zero não é atingido. Contudo, neste último, o erro esperado é mínimo.

Sejam $\ddot{\delta x}$ o erro na aceleração do centróide do sistema e $\delta \Gamma$ o erro no torque resultante por unidade de massa do sistema. Sendo F_i a força exercida pelo resto do sistema sobre a i -ésima partícula tem-se que, com respeito a uma origem arbitrária do sistema de coordenadas, os erros acima definidos são escritos por:

$$\ddot{\delta x} = \frac{1}{M} \sum_i m_i \ddot{x}_i = \frac{1}{M} \frac{d}{dt} \sum_i m_i \dot{x}_i, \quad (4.13)$$

$$\delta \Gamma = \sum_i x_i \times (m_i \ddot{x}_i) = \frac{d}{dt} \sum_i x_i \times (m_i \dot{x}_i), \quad (4.14)$$

onde M é a massa total do sistema.

Os resultados obtidos para o teste de conservação dos momentos linear e angular, para o sistema com 8192 partículas, são ilustrados na Figuras 4.1 e 4.2, respectivamente, onde são confrontados os valores de $|\ddot{\delta x}|$ e $|\delta \Gamma|$ para os diferentes θ . Como era de se esperar, os erros crescem com θ . Todavia, na Figura 4.1, os erros na força resultante possuem um máximo em $\theta = 1$, ocorrendo um retorno para valores de θ maiores que a unidade. Este comportamento decorre do fato de o ângulo θ estar englobando células maiores que a distância ao ponto

de observação. De qualquer modo, valores de θ maiores que a unidade podem ferir a consistência do modelo quando se adota a aproximação de monopolo.

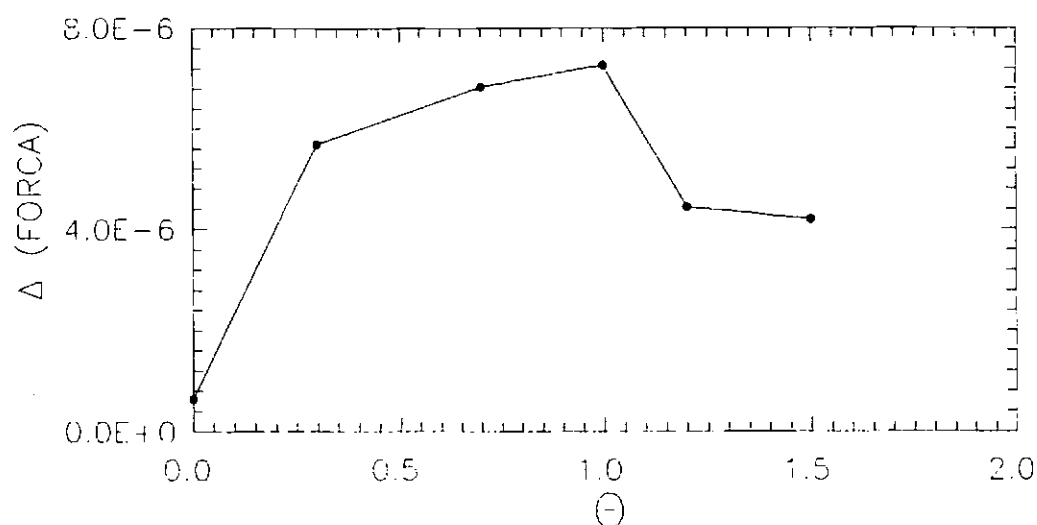


Fig. 4.1 - Erro na força resultante por unidade de massa versus parâmetro de tolerância θ . O erro para a soma direta ($\theta = 0$) deve-se unicamente a erros de arredondamento e truncamento de series, próprias do computador.

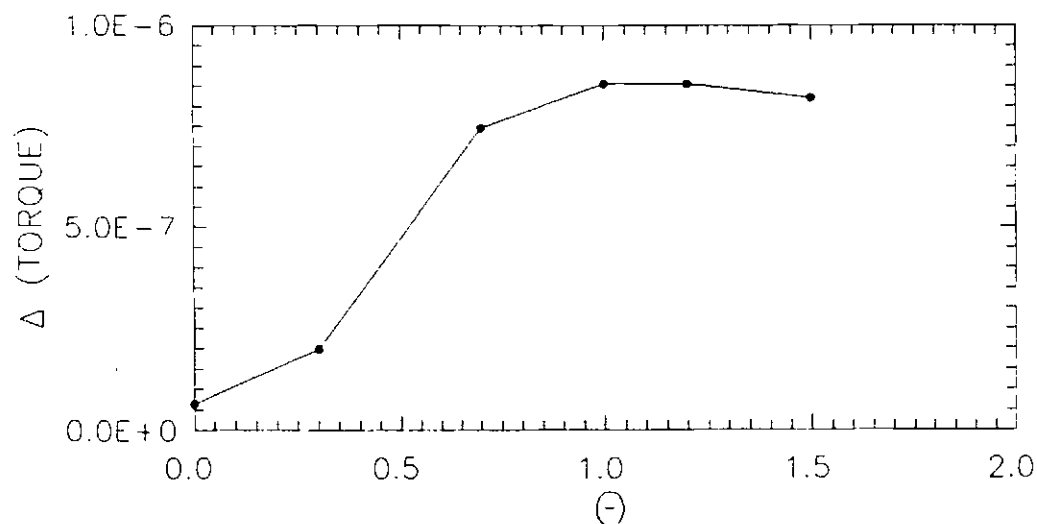


Fig. 4.2 - Erro no torque resultante, com respeito à origem, em função do parâmetro θ . Pelo mesmo argumento da Figura 4.1, a soma dos torques não é exatamente nula em $\theta = 0$.

O esforço computacional, expresso em número médio de termos de força por partícula, é mostrado na Figura 4.3. Na Figura 4.3a fica evidente que, mesmo para uma distribuição não-homogênea, o esforço computacional é $\mathcal{O}(\log N)$ para valores de θ ligeiramente menores que a unidade ($\theta = 0,7$). Na Figura 4.3b, vê-se que, para valores pequenos de θ (em particular $\theta = 0,3$), o esforço computacional converge assintoticamente para $\mathcal{O}(N^2)$. Para $\theta \geq 1$ o esforço computacional tem crescimento menor que $\mathcal{O}(\log N)$, o que é um resultado bastante positivo se se pensa em implementar componentes de quadrupolo às células (octantes) da árvore.

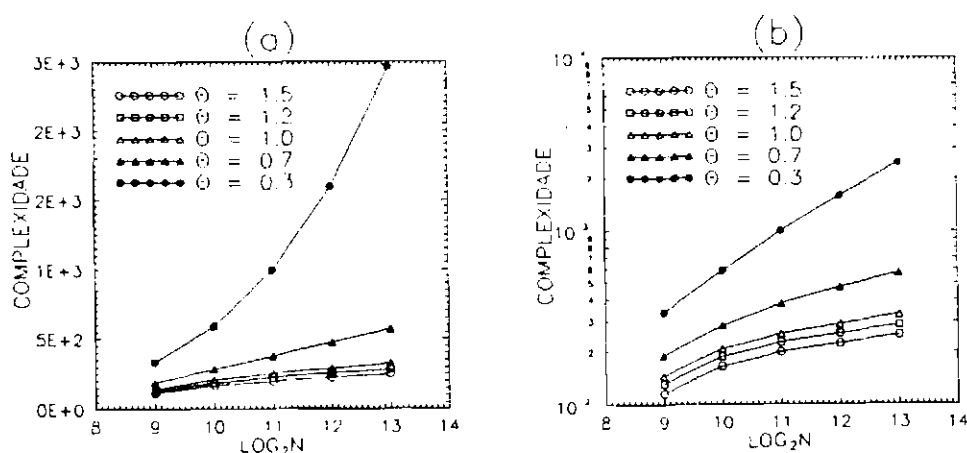


Fig. 4.3 - Esforço computacional versus $\log_2 N$ para 6 parâmetros θ em gráficos com escala vertical (a) linear e (b) logarítmica. Em (a) é perceptível que, para $\theta = 0,7$, o esforço é essencialmente $\mathcal{O}(\log N)$ por partícula. Em (b), verifica-se que o esforço tende assintoticamente para $\mathcal{O}(N^2)$, quando $\theta \rightarrow 0$.

4.5 - APLICAÇÃO: COLAPSO DE UMA DISTRIBUIÇÃO FRIA DE PARTÍCULAS

A idéia desta seção é a de aproveitar um experimento de colapso violento² e ajustá-lo no contexto de formação de galáxias elípticas. Ao invés do cenário de coalescência ("mergers") de galáxias disco, como o principal formador

² Significa que a energia de ligação inicial do sistema é máxima, isto é, as partículas estão todas no repouso.

de objetos esferóides (Toomre 1977), adota-se o modelo de formação de tais objetos por colapso de matéria protogaláctica sem rotação significativa (e.g. Kormendy 1989; Burkert 1990).

Ainda é controvertida a razão pela qual as galáxias se diferenciam morfologicamente. Uma grande variedade de mecanismos teóricos tem sido debatida na literatura, sendo incerto quais e em que medida são realmente importantes para explicar a origem dos tipos morfológicos das galáxias. De maneira geral, estes mecanismos podem ser divididos em duas grandes classes: (i) mecanismos *genéticos*, pelos quais a morfologia das galáxias seria determinada pelas próprias condições iniciais de sua formação e (ii) os mecanismos *evolutivos*, que fazem apelo às interações das galáxias com as suas vizinhanças, capazes de modificar sua estrutura dinâmica e/ou seu conteúdo gasoso.

Os mecanismos privilegiando as condições iniciais de formação das proto-galáxias constituíram-se por muito tempo, no cenário clássico, para explicar a origem dos tipos morfológicos, a partir das hipóteses de Sandage, Freeman e Stokes (1970) de que o parâmetro fundamental determinando a diferenciação seria a quantidade de momento angular da nuvem proto-galáctica. Por outro lado, Gott e Thuan (1976) sugerem o contraste da flutuação de densidade inicial como parâmetro primordial, já que este determinaria o tempo de colapso da nuvem e a taxa de formação estelar. Esta hipótese está na base dos modelos de formação das estruturas de matéria escura fria.

No segundo caso, situam-se, por exemplo, as proposições de Toomre (1977) que explicariam a formação de galáxias elípticas a partir da coalescência de uma população inicial de galáxias disco, ou ainda, como propõem Larson, Tinsley e Caldwell (1980), a formação das lenticulares a partir da inibição do processo de formação estelar, devido à perda do halo gasoso como resultado das interações de maré da galáxia com as vizinhanças ou com o potencial central do aglomerado a que pertenceria. Mecanismos como o da pressão dinâmica do meio intraglomerado sobre o gás interestelar (Gunn e Gott, 1972) também contribuiriam para a perda do gás interestelar e a subsequente transmutação morfológica das galáxias espirais. A maior dificuldade destes mecanismos está relacionada com considerações sobre o momento angular, muito menor nas elípticas que nas espirais: assim, a formação de galáxias elípticas a partir de espirais deve

implicar na remoção de uma enorme quantidade de massa, o que torna difícil entender por que aquelas são mais massivas que estas últimas.

Recentemente, Kormendy (1989) apontou evidências observacionais que tornam inviáveis as hipóteses de que a maioria das galáxias elípticas foi obtida por mergers. Ao invés, somente colapsos dissipativos justificam a alta densidade central das galáxias elípticas; mesmo mergers dissipativos não seriam suficientes para formar objetos tão compactos. Não obstante, Burkert (1990) mostrou, através de simulações de N-corpos, com alta resolução radial, que colapsos violentos, não-dissipativos, conduzem a objetos compostos, com uma parte central compacta, dinamicamente distinta, embebida em um halo difuso que obedece o perfil de de Vaucouleurs. Apesar da técnica empregada ter alta resolução na parte central, o método restringe o sistema a uma perfeita simetria esférica. Desta forma, instabilidades não-radiais, que podem vir a gerar triaxialidade (Merrit e Aguilar 1985; Barnes, Goodman e Hut 1986; Min e Choi 1989) não são detectadas.

Neste cenário de formação de galáxias esferóides, por colapso de matéria protogaláctica, sem rotação significativa, e inspirado pelo experimento de Burkert (1990), acima citado, escolhemos um experimento relativamente simples de colapso de uma distribuição esférica, aproximadamente homogênea. As partículas são abandonadas do repouso e, devido à violência do colapso, a parte central se forma com uma elevada energia de ligação de maneira a se preservar dinamicamente distinta do resto do sistema (o halo). A parte extensa, que forma o halo, mantém um perfil de densidade superficial que se assemelha ao de de Vaucouleurs. Estes resultados concordam com as simulações de Burkert (1990), que mostram que a natureza (violência) do colapso é decisiva na dinâmica da parte central do objeto remanescente.

4.5.1 - DESCRIÇÃO DO EXPERIMENTO

O objeto inicial é obtido sorteando-se 1024 partículas por Monte Carlo (*e.g.* Sobol 1983), mediante transformações de coordenadas (v. Apêndice A), de forma que a densidade esperada seja constante. As partículas são postas inicialmente em repouso. A massa total do sistema é igual a 0,5 unidades

computacionais, que correspondem a $1,14 \cdot 10^{11} M_{\odot}$ (vide Sec. 4.2). A energia potencial do modelo inicial é, em unidades computacionais, $W_0 = -0,5$. Como as partículas estão inicialmente em repouso, a energia total E é de natureza puramente gravitacional, *i.e.* $E = W_0$. O valor esperado da energia potencial é

$$W_0 = - \frac{3}{5} \frac{GM^2}{R_0}, \quad (4.15)$$

onde R_0 é o raio da distribuição e vale

$$R_0 = \frac{3}{5} \frac{GM^2}{-W_0}. \quad (4.16)$$

Fazendo as devidas substituições em (4.16) e lembrando que $G = 1$ (unid. comput.), tem-se

$$R_0 = 0,3 \text{ unidades comput. } (\equiv 12 \text{ kpc}) \quad (4.17)$$

O raio gravitacional R_g do sistema, quando for atingido um suposto equilíbrio de virial ($W = 2E$), é determinado por

$$R_g = \frac{GM^2}{-2E} = 0,25 (\equiv 10 \text{ kpc}). \quad (4.18)$$

Conseqüentemente, o tempo de cruzamento, definido por

$$t_c \equiv R_g / \langle v^2 \rangle^{1/2}, \quad (4.19)$$

vale

$$t_c = \frac{G M^{5/2}}{\sqrt{8} E^{3/2}} \cong 0,177 [1] (\equiv 44,2 \cdot 10^6 \text{ anos}) \quad (4.20)$$

onde foi feito $\langle v^2 \rangle = -2 E / M$.

O valor estimado em (4.20) para R_g é ligeiramente diferente do valor prático por causa do comprimento de amolecimento, mas esta dispersão entre o valor estimado acima e o obtido numericamente ocorre na terceira casa decimal.

As posições $x_i = (x_i, y_i, z_i)$ ($i=1,2,...,N=1024$) foram obtidas pela transformação de coordenadas

$$\begin{aligned} x_i &= r(\mu_i) \Theta(v_i) \cos(2\pi\xi_i), \\ y_i &= r(\mu_i) \Theta(v_i) \sin(2\pi\xi_i), \\ z_i &= r(\mu_i) (1 - 2v_i), \end{aligned} \quad (4.21)$$

onde as variáveis $(\mu_i, v_i, \xi_i) \in (0,1)^3$ formam uma sequência de números aleatórios (vide Sobol 1983) e as funções r e Θ são, respectivamente,

$$\begin{aligned} r(\mu) &= \left(\frac{3\mu}{4\pi} \right)^{1/3} R_0 \\ \Theta(v) &= 2 [v(1-v)]^{1/2} \end{aligned} \quad (4.22)$$

A dedução de (4.21) encontra-se no Apêndice A.

O comprimento de amolecimento ε e o passo de integração Δt foram obtidos pelo critério de escolha da Seção 4.3. Assim, $\varepsilon = 0,0248$ ($\equiv 992$ pc) e $\Delta t = 0,005524$ ($\equiv 1,381 \cdot 10^6$ anos).

O experimento dividiu-se em duas etapas: (i) a simulação propriamente dita e (ii) redução dos dados obtidos na primeira etapa. Os dados de saída da simulação são coordenadas de fase das partículas do sistema em um dado instante. Cada arquivo com as coordenadas de fase é chamado QUADRO XX ($XX=00, 01, 02, ..., 86$). A simulação foi realizada em etapas (vide Tabela 4.2) e durou um total de 3.524 passos de integração. Foram consumidas, ao todo, pouco menos de 40 h de tempo de máquina num VAX 11/780 com acelerador de ponto flutuante. A redução dos dados foi feita parte plotando-se os pontos diretamente em diagramas, *e.g.*, configuração dos pontos no plano xy , diagramas de fase

radial e de energia de ligação versus posição radial, e parte contabilizando-se valores médios das variáveis dinâmicas, *e.g.*, $\rho(r)$, $\sigma(r)$ e $\beta(r)$ em grades radiais recursivas, utilizando técnica de árvore (v. Apêndice B).

TABELA 4.2 - ETAPAS DO EXPERIMENTO

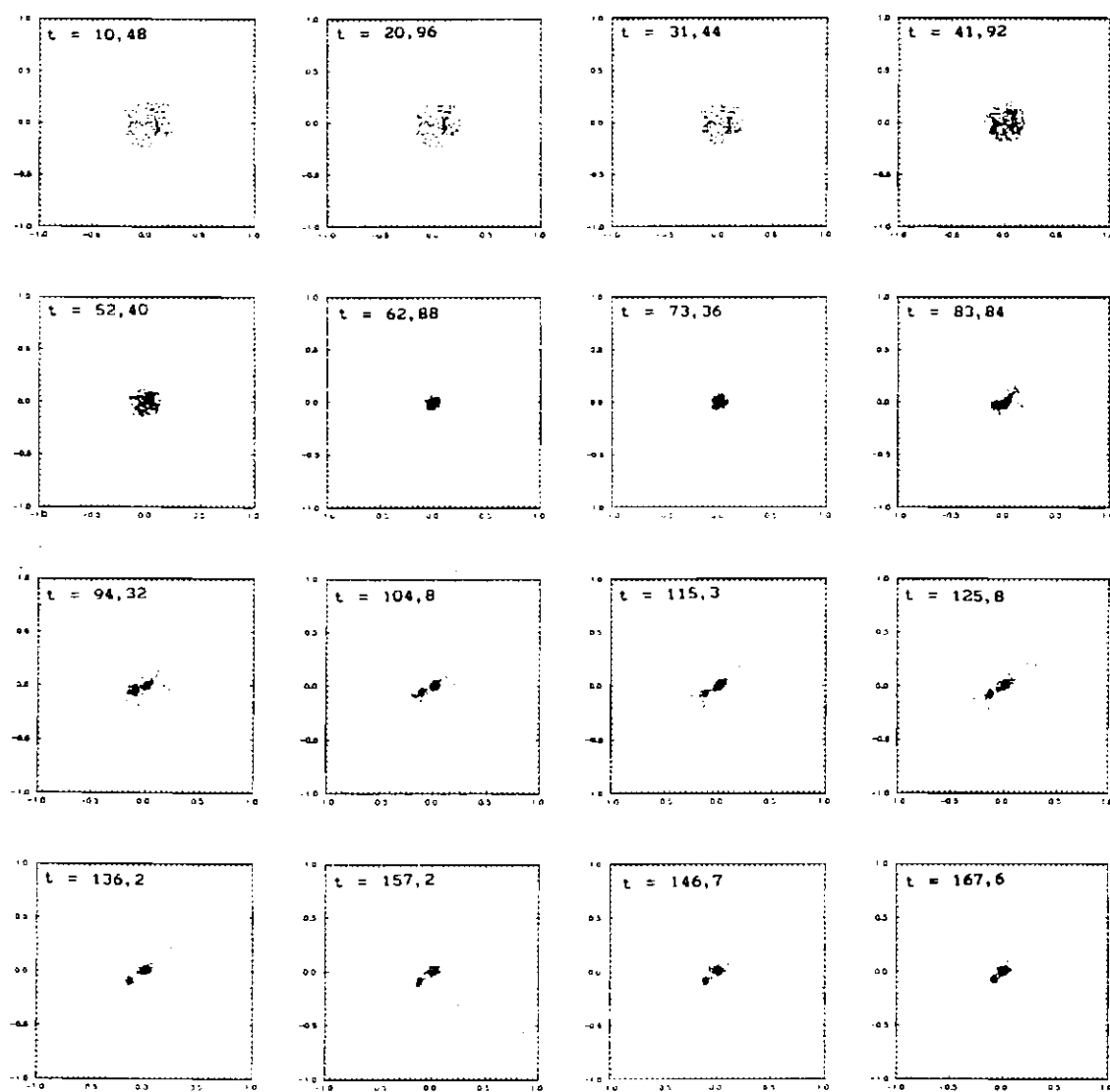
ETAPA	QUADROS	Δt	Nº DE INTEG.	TFC (10^6 anos)	ACUMULADO
1	00 \rightarrow 64	0,00524	512	670,72	670,72
2	64 \rightarrow 68	0,005524	580	800,98	1.471,70
3	68 \rightarrow 69	0,0078125	128	250,00	1.721,70
4	69 \rightarrow 70	"	256	353,54	2.075,24
5	70 \rightarrow 78	"	1024	1.414,14	3.489,38
6	78 \rightarrow 86	"	1024	1.414,14	4.903,52
		TOTAL	3524		

NOTA: TFC \rightarrow tempo físico correspondente à etapa indicada.

O número de partículas na simulação não foi mantido constante por todo o experimento. Como uma grande quantidade de partículas escapou no primeiro colapso (cerca de 15 % da massa inicial), resolveu-se continuar o experimento a partir do QUADRO 68 (terceira etapa em diante na Tabela 4.2) sem as mesmas, a fim de se ganhar tempo computacional.

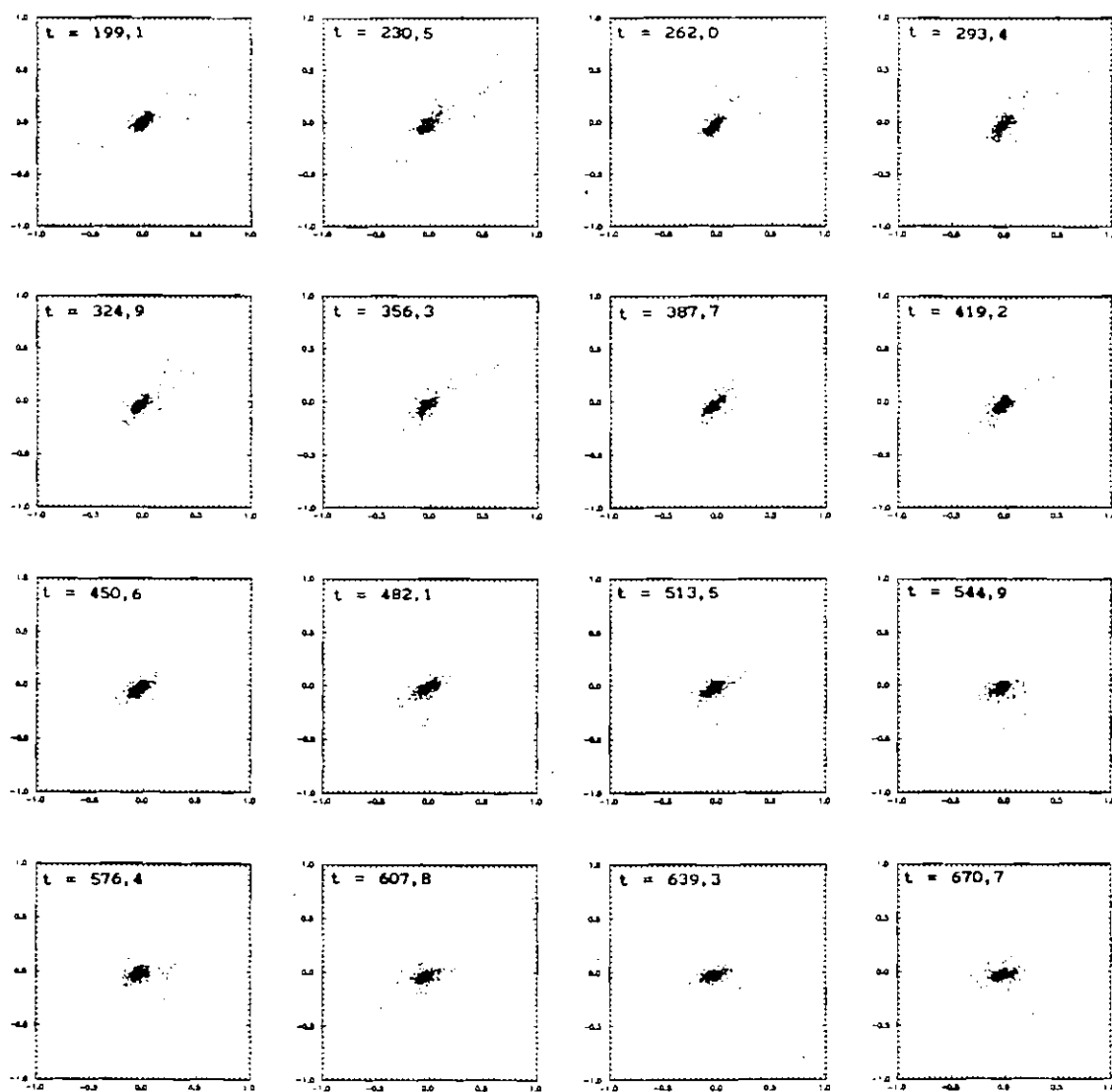
4.5.2 - DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Nas Figuras 4.4, são mostradas 32 etapas iniciais da evolução do sistema. Em $t = 83,8 \cdot 10^6$ anos, as subestruturas dos quadros anteriores promovem a separação do sistema em dois objetos bem definidos (vide também Figura 4.5).



(a)

Fig. 4.4 - (a) Dezesesseis primeiras etapas da evolução do colapso de uma esfera inicialmente homogênea (vide texto), em intervalos de tempos iguais a $10,48 \cdot 10^6$ anos ($\approx 0,24 \, t_c$). (b) Outras dezesseis etapas posteriores, correspondentes aos tempos indicados nos quadros; o intervalo entre quadros é de $31,44 \cdot 10^6$ anos ($\approx 0,71 \, t_c$). Unidades dadas em 10^6 anos.
(continua)



(b)

Fig. 4.4 - Conclusão.

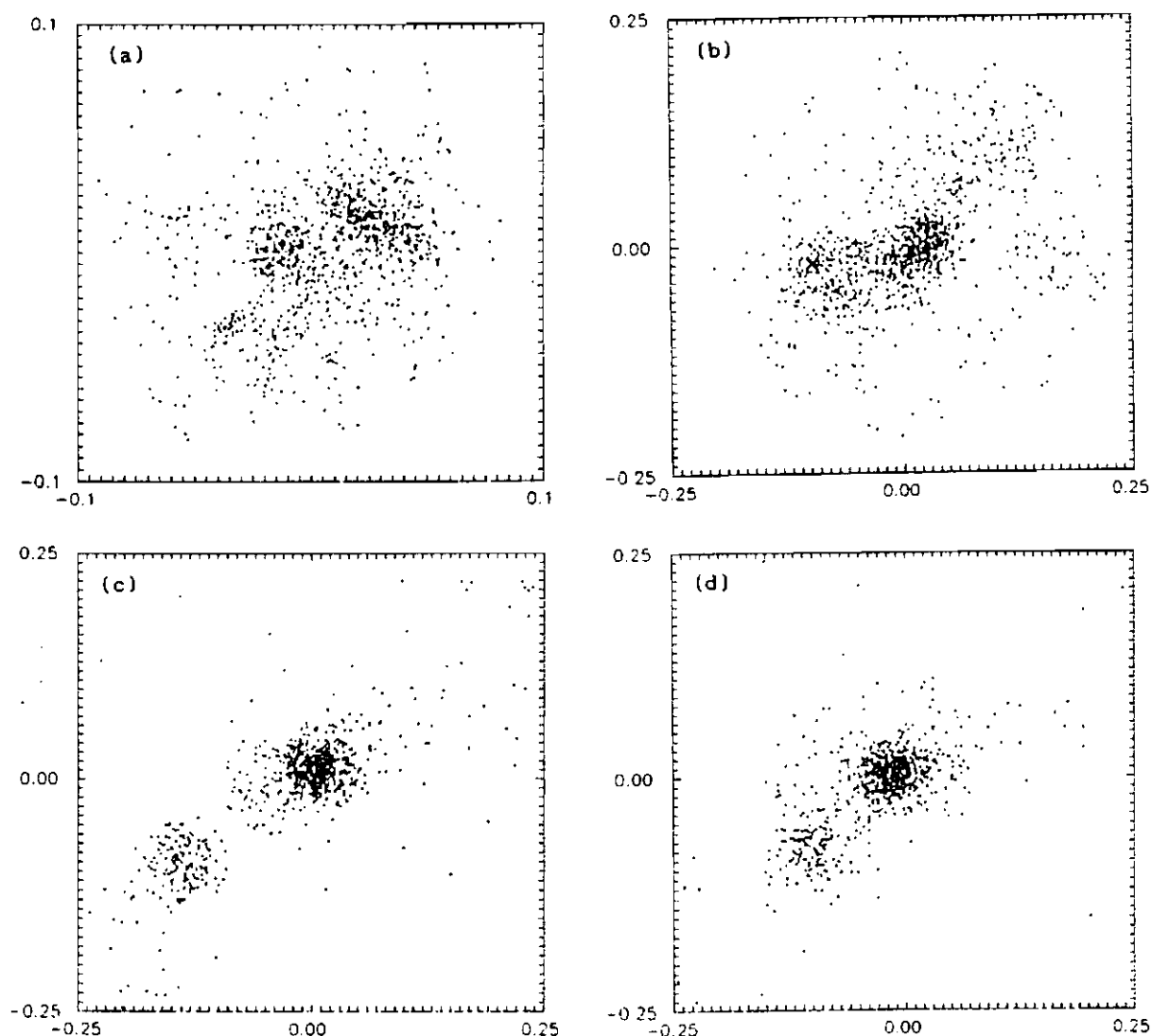


Fig. 4.5 - Ampliação dos quadros correspondentes a (a) $62,88 \cdot 10^6$, (b) $83,84 \cdot 10^6$, (c) $136,2 \cdot 10^6$ e (d) $167,7 \cdot 10^6$ anos, respectivamente, da Figura 4.4.

As duas porções recém-formadas colapsam individualmente, à medida que vão se reaproximando para uma coalescência. Isto caracteriza uma hierarquia de colapsos: do mais significativo (fusão das duas porções) para o menos significativo (colapso individual de cada porção).

Na situação correspondente a $t = 199 \cdot 10^6$ anos ($\approx 4,5 t_c$) (Figura 4.4b), ambos pedaços já estão coalescendo, e isto manifesta, em termos globais, o

segundo colapso do sistema. Este último é evidenciado na Figura 4.6, no segundo pico da energia cinética, por volta de $t = 0,8 [t]$ ($\equiv 200 \cdot 10^6$ anos $\approx 4,5 t_c$). No primeiro colapso, ocorre a maior perda de partículas. Cerca de 15 % da massa do sistema consegue escapar. Já o segundo é bem menos energético e efetivamente nenhuma partícula escapa. Ainda na Figura 4.4b, no quadro seguinte, em $t = 230,5 \cdot 10^6$ anos ($\approx 5,2 t_c$), as duas porções já estão fundidas numa só. Enquanto isto, a parte mais extensa do sistema, que irá formar o halo, sofre um processo mais lento de relaxação.

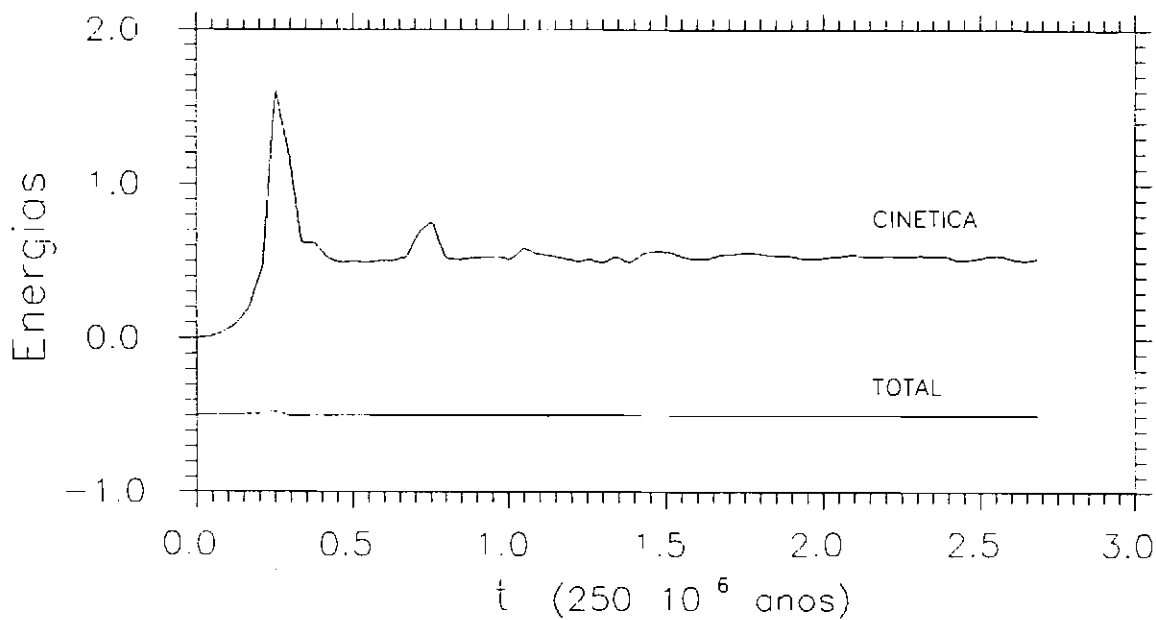
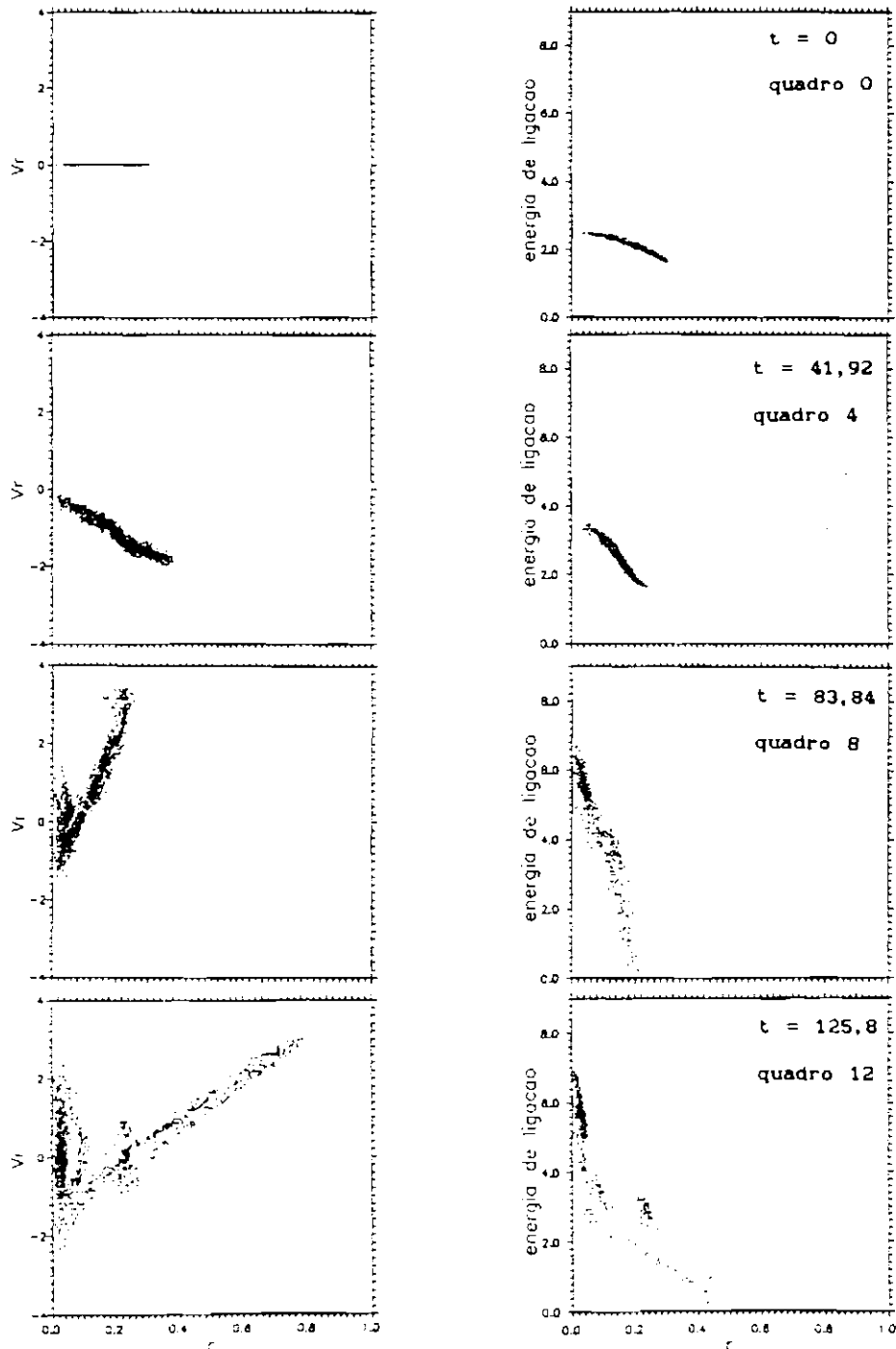


Fig. 4.6 - Evolução das energias internas total, E , e cinética, T , da etapa correspondente aos primeiros $670 \cdot 10^6$ anos do sistema. A energia total é muito aproximadamente constante, enquanto a energia cinética acusa as etapas de relaxação do sistema. O primeiro pico de energia cinética coincide com o ponto de menor configuração do sistema, enquanto o segundo pico (menor) coincide com o segundo colapso.

As Figuras 4.7a a 4.7e mostram a evolução das fases radiais e das energias de ligação das partículas do sistema. Nos quadros correspondentes a $t = 125,8 \cdot 10^6$ anos ($\approx 2,8 t_c$), fica evidente a existência de dois subsistemas, separados aproximadamente de uma distância de $0,24 [l]$ ($\approx 79,6$ kpc), vide a correspondente situação na Figura 4.4a. A partir de $t = 419,2 \cdot 10^6$ anos

($\approx 9,5 \tau_c$), a configuração de energia apresenta uma certa regularidade. Contudo, no espaço de fase, ainda é evidente o processo de mistura de fase em andamento, só indo assumir uma configuração grosseiramente regular a partir de $t \approx 600 \cdot 10^6$ anos ($\approx 3,6 \tau_c$). Um breve exame dos quatro últimos quadros da Figura 4.4b revela uma temporária³ elipticidade, cujo eixo maior tende a se alinhar na direção do eixo horizontal dos gráficos.

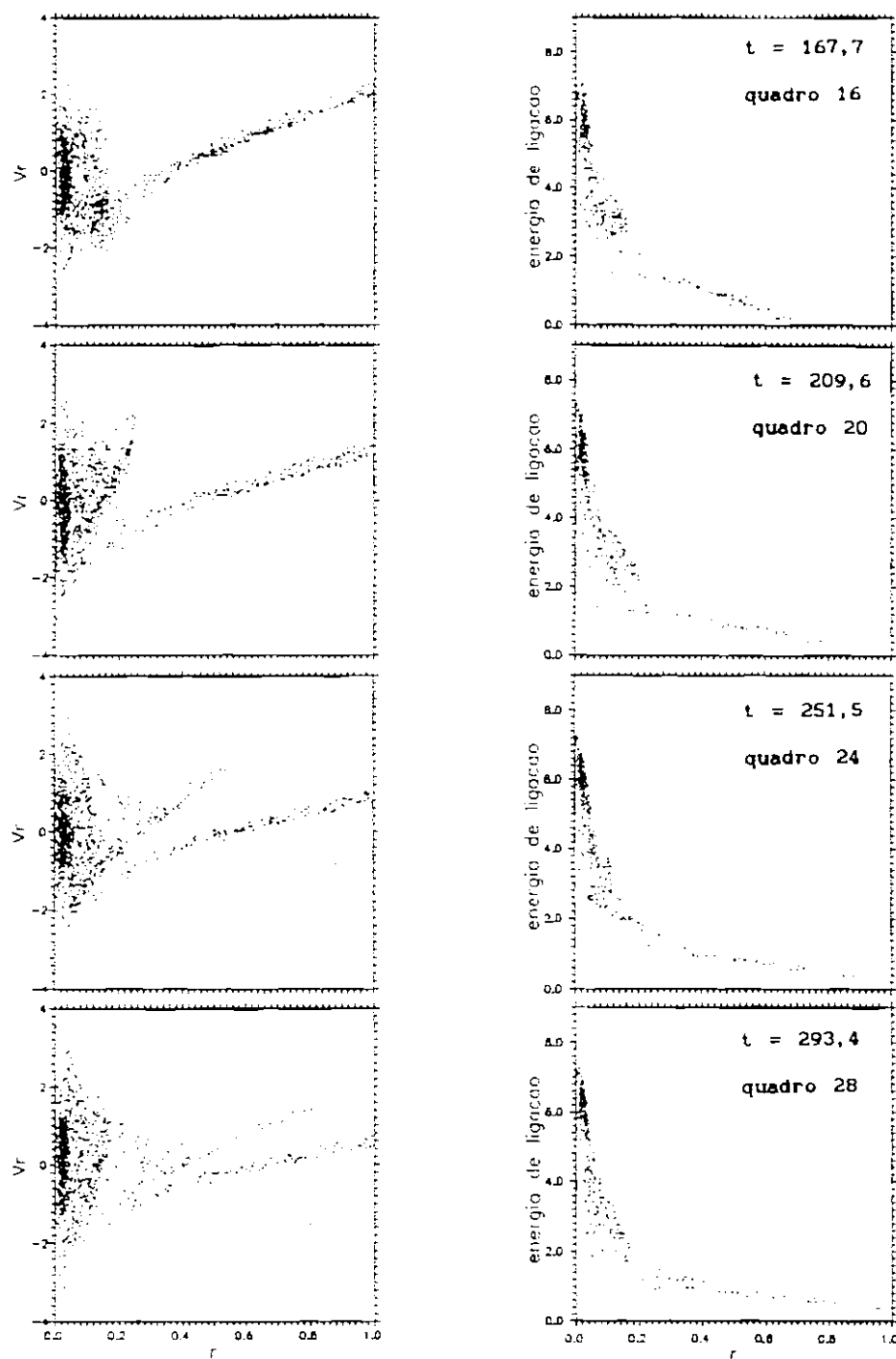
³ Esta elipticidade diminui consideravelmente por volta de $t = 2 \cdot 10^9$ anos, de forma que o objeto conserva-se aproximadamente esférico por todo o resto da simulação.



(a)

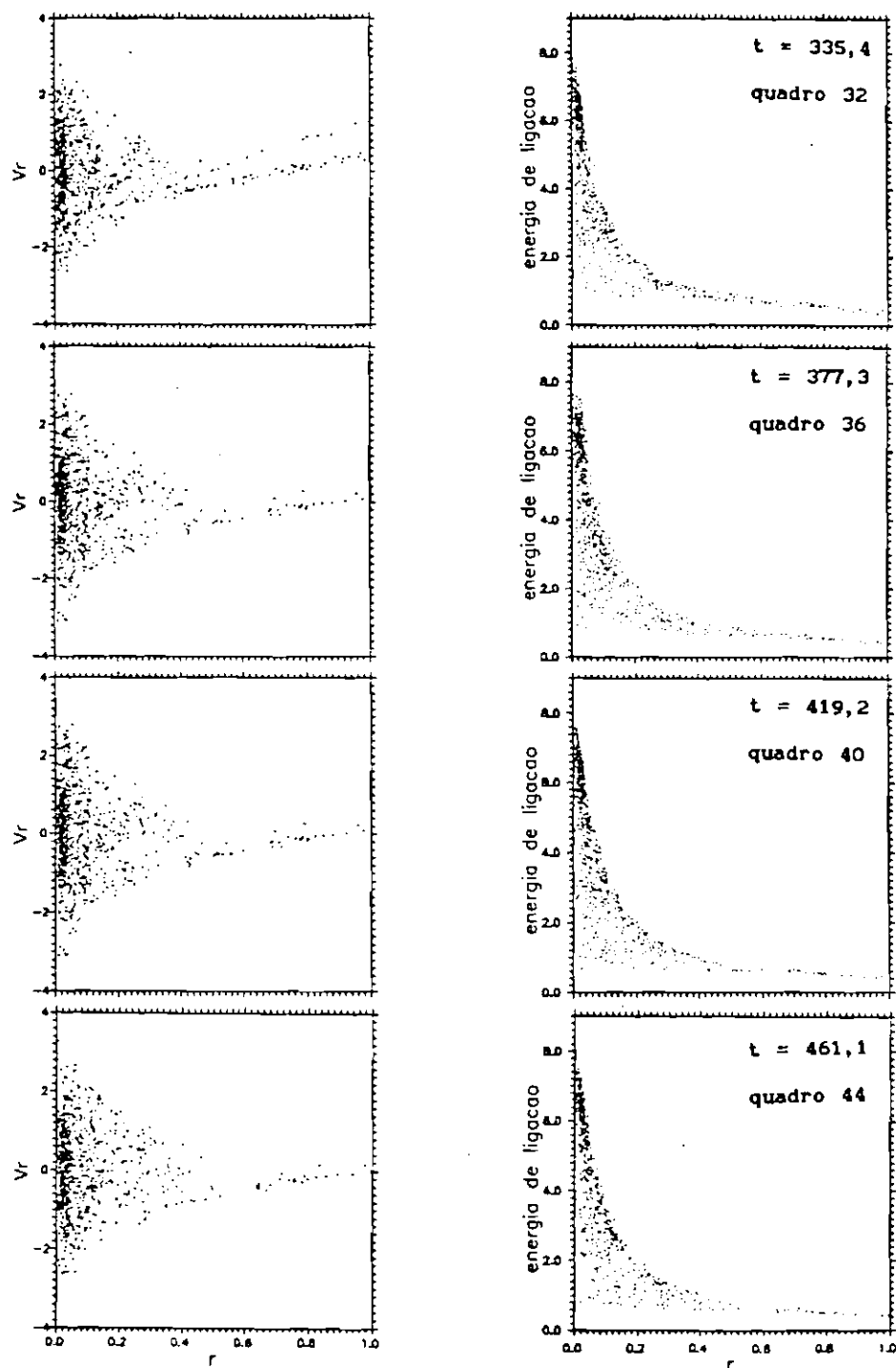
Fig. 4.7 - De (a) a (e), etapas da evolução do sistema nos primeiros $670,7 \cdot 10^6$ anos ($\approx 15,2 \text{ } t_c$). O intervalo entre quadros é de $41,92 \cdot 10^6$ anos ($\approx 0,95 \text{ } t_c$).

(continua)



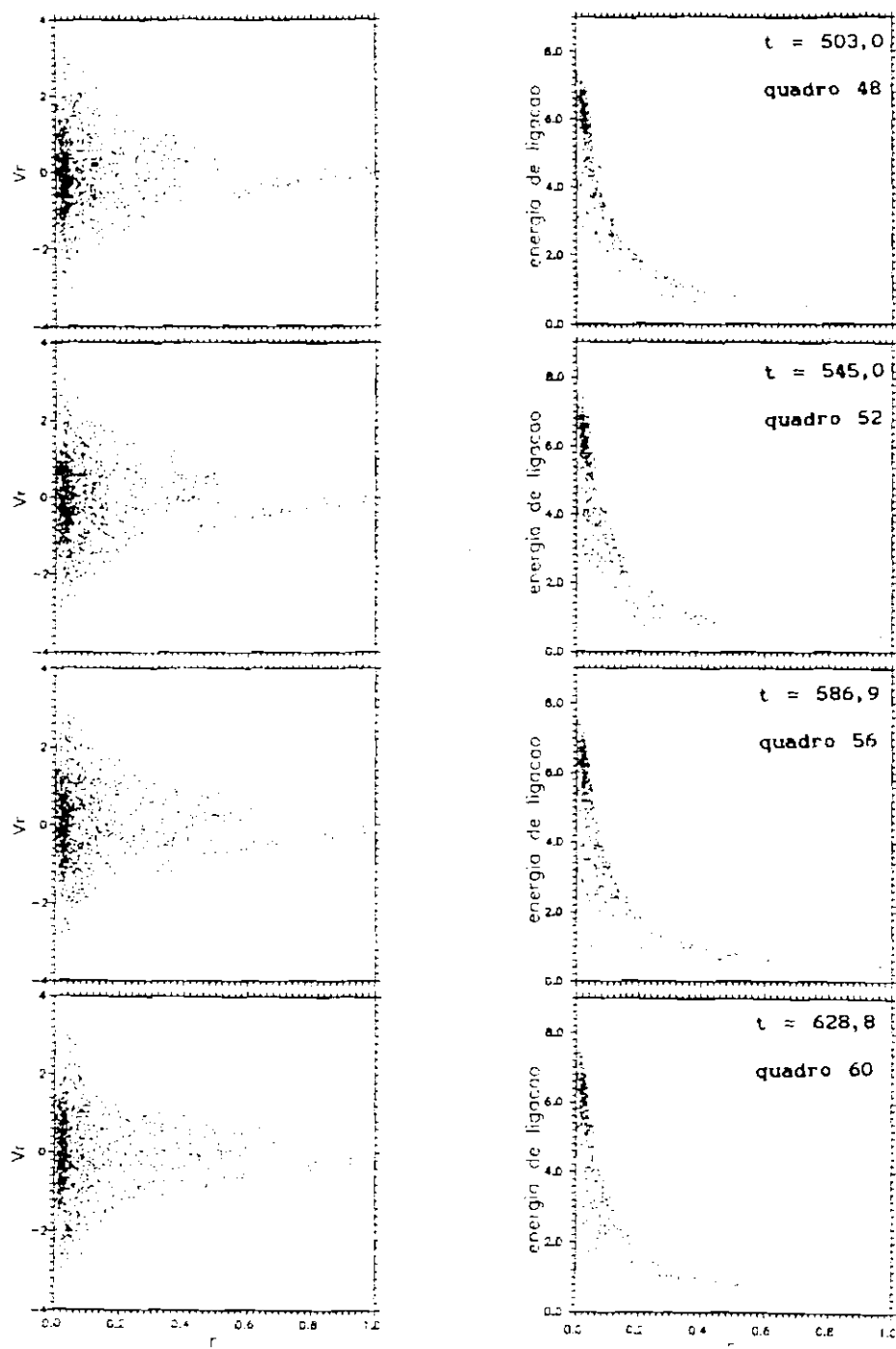
(b)

Fig. 4.7 - Continuação.



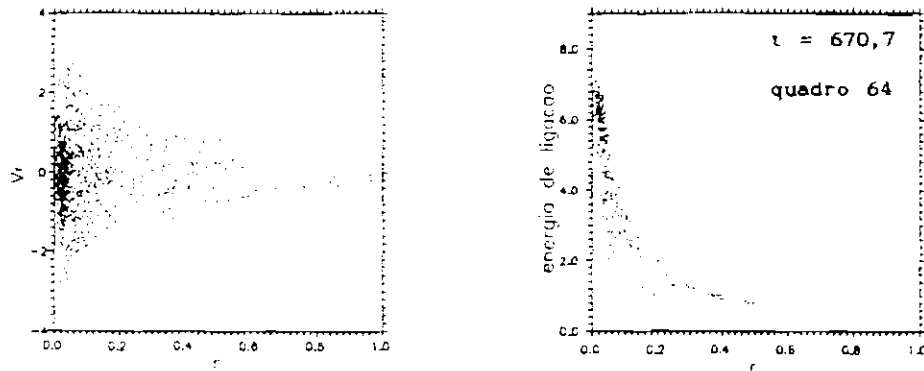
(c)

Fig. 4.7 - Continuação.



(d)

Fig. 4.7 - Continuação.



(e)

Fig. 4.7 - Conclusão.

A Figura 4.8 mostra quatro configurações correspondentes aos instantes $t = 2.24 \cdot 10^9$, $3.14 \cdot 10^9$, $3.84 \cdot 10^9$, $4.90 \cdot 10^9$ anos, respectivamente. Comparando os quadros (Figura 4.8) nota-se uma certa regularidade morfológica. Esta regularidade é confirmada na Figura 4.4, que mostra os pontos de fase radial nos mesmos instantes da Figura 4.7. As partes externas são mais ruidosas em virtude do reduzido número de partículas nestas regiões.

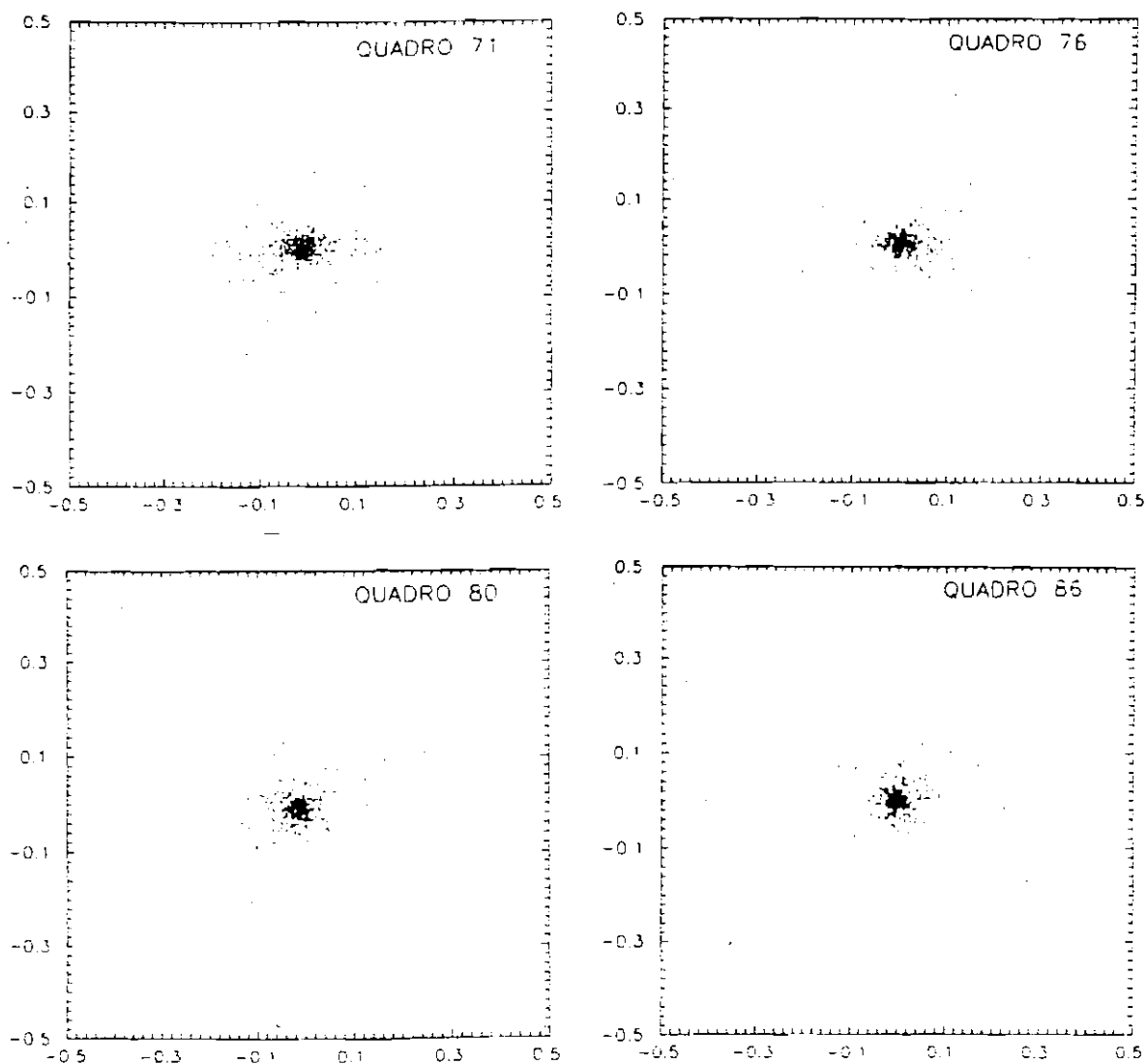


Fig. 4.8 - Quatro configurações do sistema, tomadas nos instantes (a) $2,3 \cdot 10^9$, (b) $3,1 \cdot 10^9$, (c) $3,8 \cdot 10^9$ e (d) $4,9 \cdot 10^9$, respectivamente. Observe-se como os quatro sistemas apresentam regularidade morfológica, a menos de flutuações de densidade.

As densidades espacial e superficial, para as situações correspondentes à Figura 4.8, são mostradas nas Figuras 4.9 e 4.10, respectivamente. Os gráficos estão superpostos e apresentam uma notável regularidade. A partir de aproximadamente $r = 0,03$ ($\approx 1,2$ kpc), a densidade espacial segue uma lei de potência com ligeiramente menos declive que $\rho \sim r^{-4}$.

Na Figura 4.10 verifica-se que ocorre um excesso de densidade superficial, na região que corresponde, aproximadamente, à faixa $0 \leq r^{1/4} \leq 0,5$ ($0 \leq r \leq 0,06$). Já a parte externa, $r^{1/4} > 0,5$ ($r \geq 0,06 \approx 2,4$ kpc), concorda com a lei fotométrica de de Vaucouleurs.

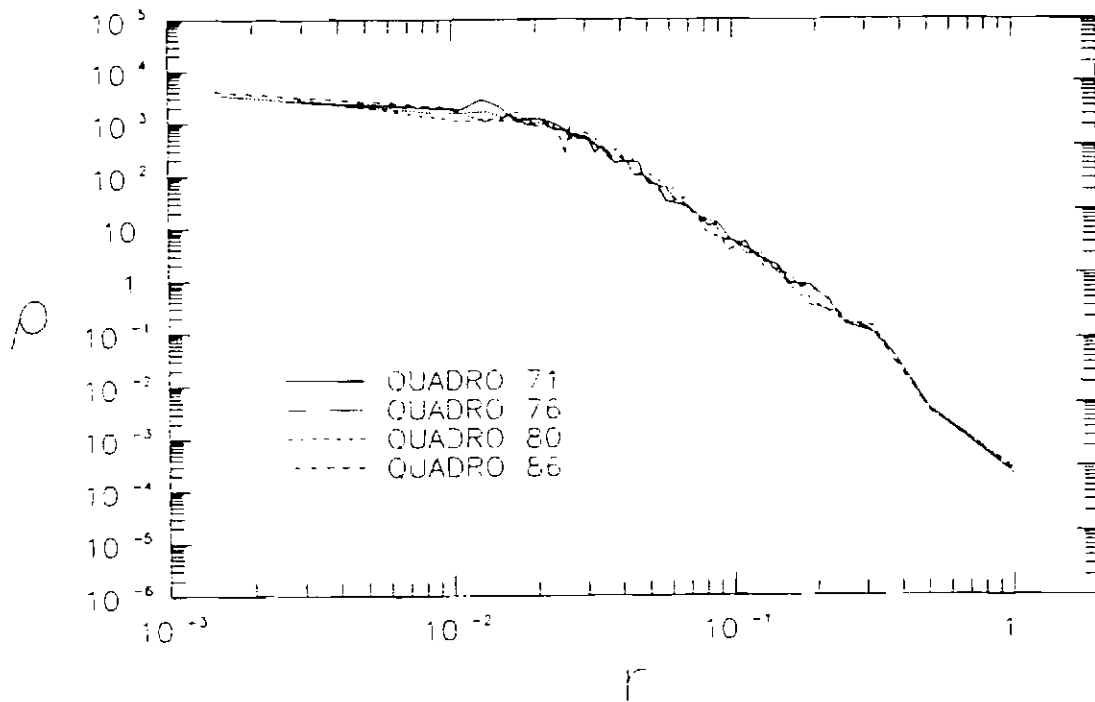


Fig. 4.9 - Superposição de quatro gráficos $\rho(r) \times r$, correspondentes aos instantes da figura anterior. É notável a semelhança entre as quatro curvas, sugerindo que o sistema já esteja em um estado de quase-equilíbrio.

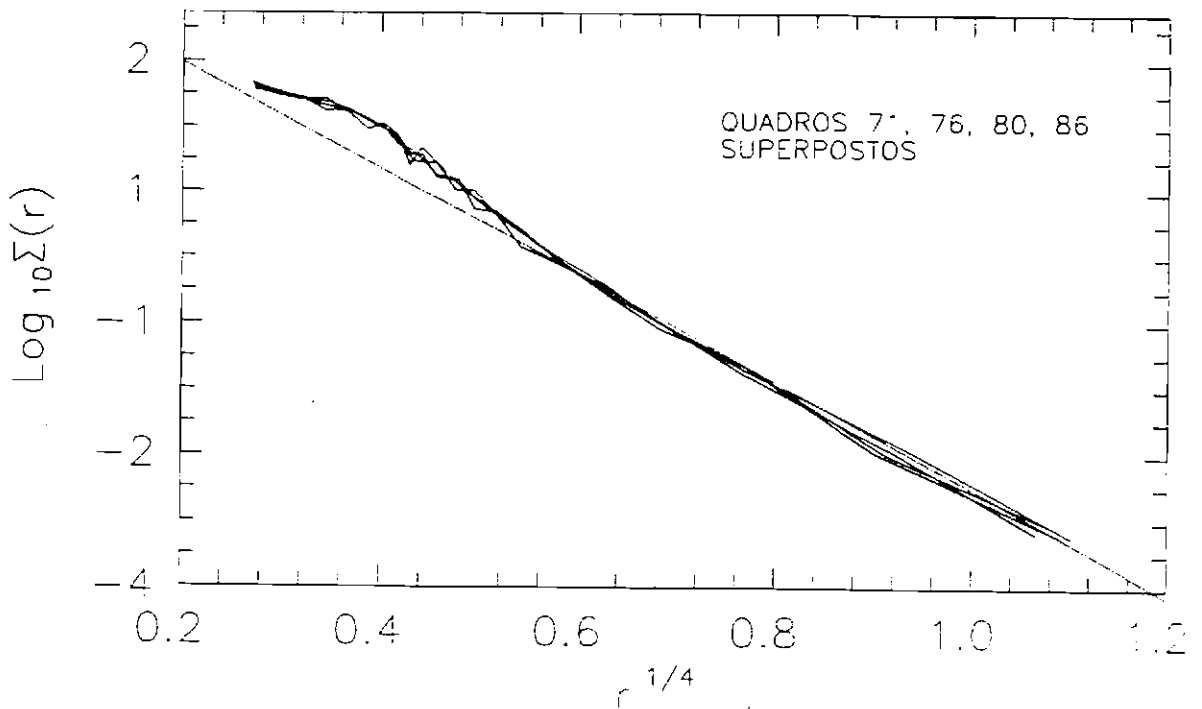


Fig. 4.10 - Superposição de quatro *perfis de densidade superficial*, correspondentes aos mesmos instantes da figura anterior. Observe-se o excesso de "brilho" na parte central, finalizando nas proximidades de $r = 0,06$ ($\approx r^{1/4} = 0,5$), correspondendo a 2,4 Kpc. A linha pontilhada é um ajuste linear na parte mais achatada ("flat") das curvas.

A dispersão de velocidades, $\sigma(r)$, para as situações da Figura 4.8, é apresentada nos gráficos superpostos da Figura 4.11. Observa-se que as partes centrais dos quatro sistemas são aproximadamente isotérmicas. Como os gráficos são bastante ruidosos, é difícil determinar uma fronteira para o regime isotérmico. Contudo, mais adiante, é usada uma forma alternativa de se determinar a dispersão de velocidades com mais resolução espacial (radial).

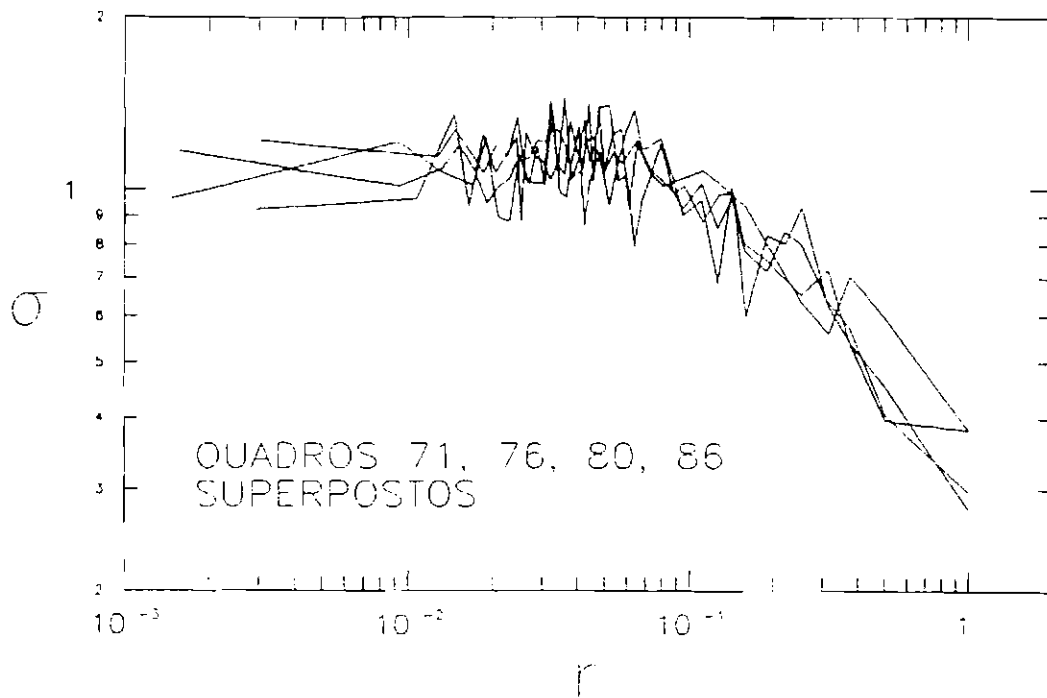


Fig. 4.11 - Gráficos superpostos de dispersão de velocidades, correspondentes às respectivas situações das Figs. 4.9 e 4.10. Observa-se que as partes centrais são aproximadamente isotérmicas. Contudo é difícil localizar a partir de onde esta isotermia é perceptível.

A idéia de que existe uma regularidade dinâmica para os quatro sistemas da Figura 4.8 é também sugerida pela Figura 4.12, que representa a energia de ligação média para cada camada radial. De maneira análoga à curva $\rho = \rho(r)$, o perfil da energia de ligação acusa duas regiões: uma é a região central que é bastante achatada, a outra região apresenta uma lei de potência do tipo $r^{-0.85}$. A separação entre estes dois comportamentos se dá por volta de $r \approx 0,4$ [1] ($E \approx 5$).

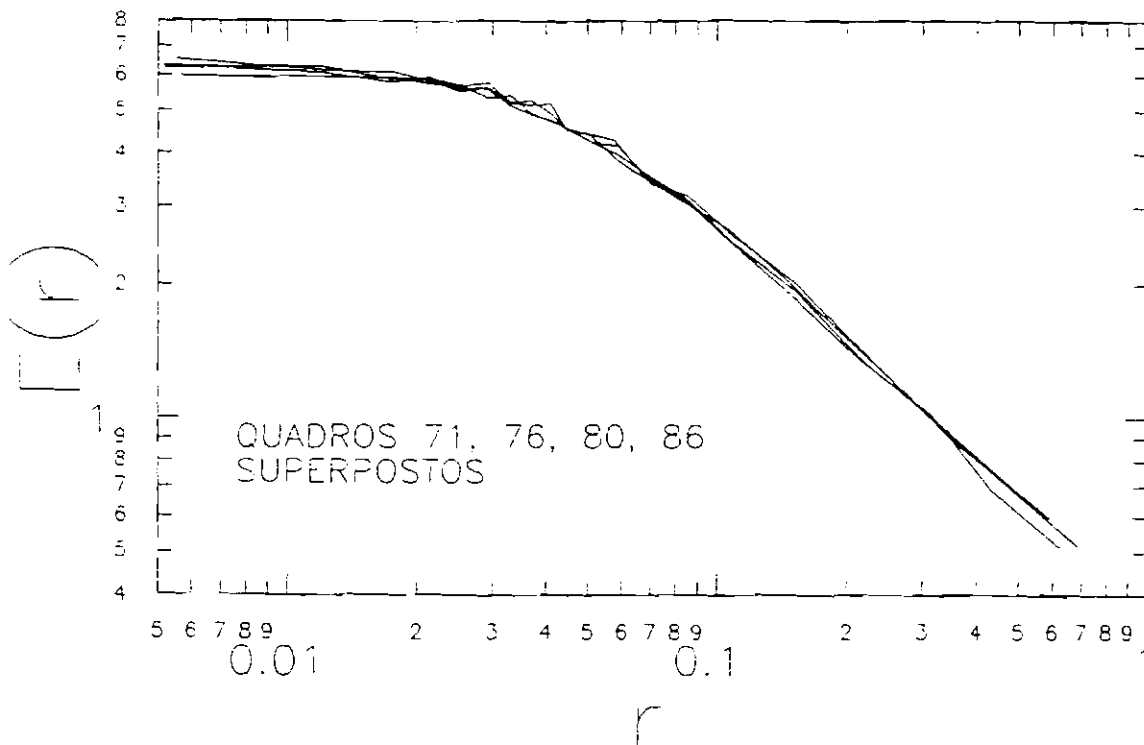
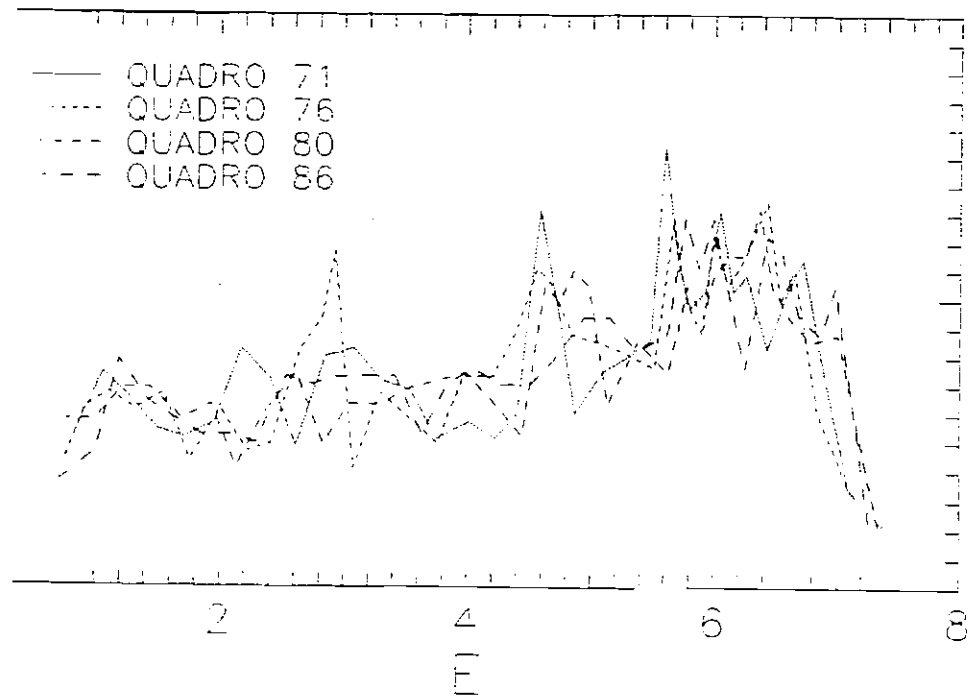


Fig. 4.12 - *Energia de ligação média por camada radial*, para os estados mostrados na Figura 4.8. De novo, é sensível a semelhança entre os quatro gráficos.

Examinando a Figura 4.13, que é composta pela superposição dos gráficos da função distribuição de energias de ligação, para os mesmos instantes da figura anterior, tem-se que esta fronteira ($E \approx 5$) ocorre em torno de um vazio, que aproximadamente coincide nos quatro gráficos. Isto sugere que o sistema tenha sofrido um processo seletivo de relaxação, privilegiando certas camadas de energia de ligação.



gráficos superpostos da *função distribuição de energia de ligação* por *massa unitária*, para os mesmos instantes das Figs. 4.8 - 4.12.

Para reforçar a idéia de que os estados do sistema, em todos os instantes da Figura 4.8, sugerem o equilíbrio, é interessante analisar a evolução da entropia do sistema.

A entropia do sistema (vide, *e.g.*, Morse 1969, Cap. 17, p. 248), é dada por

$$-k_B \int \int \mathbf{x}, \mathbf{v} \ln f(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{v}, \quad (4.23)$$

é constante.

Como o sistema possui simetria aproximadamente esférica, e não há rotação significativa, a função distribuição pode ser escrita em termos do movimento E , onde E é a energia de ligação das partículas do sistema por unidade de massa. Assim, substitui-se $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{v}$ por $f(E) dE$, e

a Equação (4.23) fica reescrita por

$$S = - \int f(E) \ln f(E) dE \quad (4.24)$$

A partir da malha recursiva de pontos da função distribuição de energias de ligação calcula-se facilmente a entropia do sistema via Eq. (4.24).

A Figura 4.14a mostra a evolução da entropia do sistema, na fase inicial de relaxação. Note-se como rapidamente o sistema atinge uma configuração aproximadamente estável. Na Figura 4.14b, é mostrada a evolução da entropia do para os dezesseis últimos quadros da simulação (vide Tabela 4.2). Uma ampliação de 4.14b é mostrada na Figura 4.14c, que evidencia que as flutuações estão dentro das barras de erro.

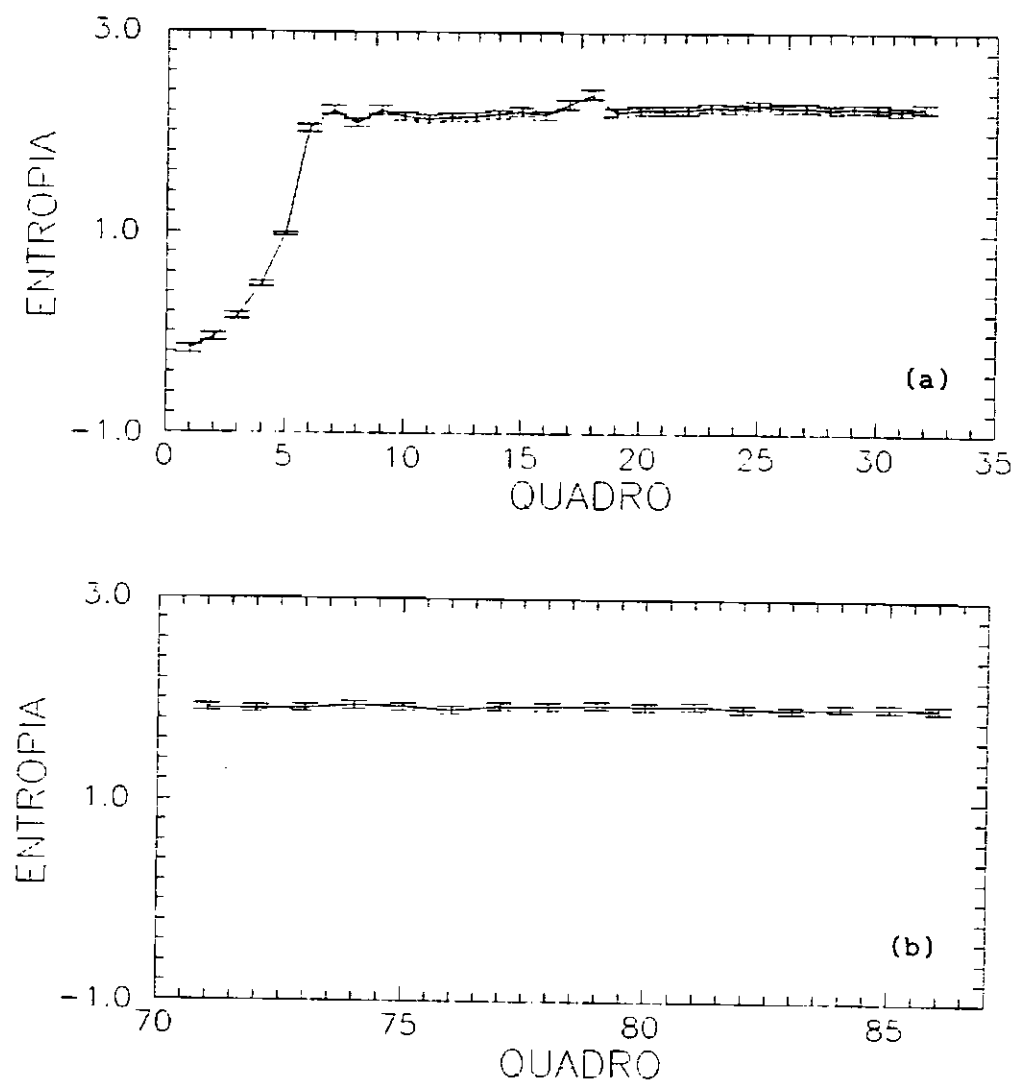


Fig. 4.14 - (a) Evolução da entropia do sistema (vide Texto), nos primeiros 32 quadros da Figura 4.4. (b) Na mesma escala que em (a), mas tomando-se a entropia para os quadros 71 a 86. Note-se que, neste último, a entropia é ligeiramente menor que a em (a). Isto se deve ao fato de não se contabilizar as partículas não-ligadas ao sistema. Em (c) é apresentada uma ampliação vertical, do gráfico mostrado em (b), mostrando o carácter aleatório das flutuações.

(continua)

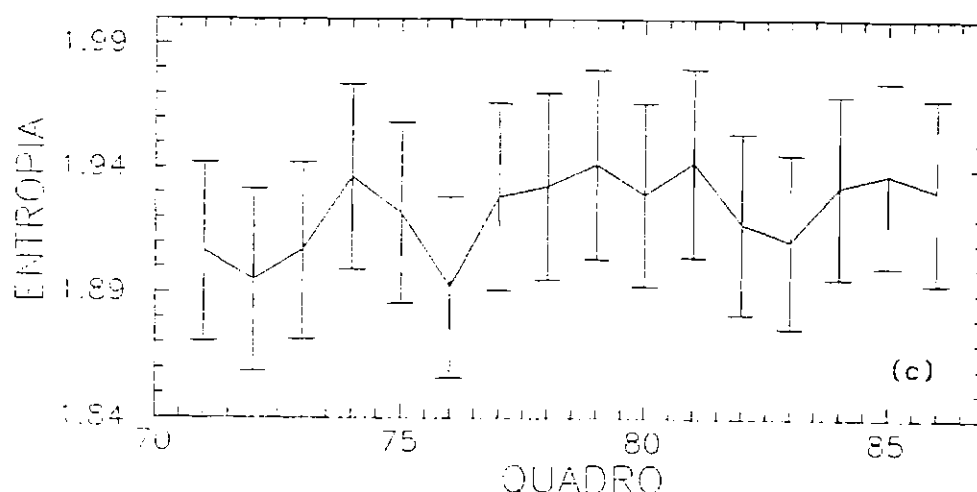


Fig. 4.14 - Conclusão.

Os valores finais da entropia, nas Figuras 4.14a e 4.14b, não coincidem em virtude de o experimento, a partir do QUADRO 65, possuir apenas 85 % das partículas do modelo inicial. Obviamente, as partículas escapantes dão uma grande contribuição à entropia, por constituírem as regiões menos densas do sistema.

Nos parágrafos acima, a palavra regularidade foi mencionada insistentemente com o propósito de sugerir a idéia de que as quatro situações, tomadas aleatoriamente, representam estados de equilíbrio do sistema, a menos de flutuações temporais. Este comportamento temporalmente aleatório, expresso nas variáveis dinâmicas do sistema (e.g., ρ , σ^2 , β), é consequência imediata do número de órbitas com frequências independentes (*i.e.* incomensuráveis), valendo então o *teorema sobre a média* (Arnold 1987, p. 285), que estabelece a equivalência entre as médias temporal e as médias no espaço de fase, das variáveis dinâmicas do sistema. Teoremas deste tipo são tidos como teoremas ergóticos e entende-se por ergoticidade a propriedade das órbitas se adensarem no espaço de fase (tanto no espaço Γ quanto no espaço μ), segundo uma função distribuição característica do sistema.

Admitindo então a hipótese ergótica, podemos afirmar que uma dada sequência de estados, que apresenta uma sequência temporal aleatória (*i.e.* que

não exista uma maneira de se determinar uma seqüência cronológica com as propriedades observadas para cada estado), muito seguramente constitui um subconjunto de um "*ensemble*" de sistemas idênticos, todos numa situação de equilíbrio, a menos das suas posições exatas no espaço de fase. Com efeito, as médias tomadas sobre um conjunto de estados supostamente em equilíbrio, devem tornar as estimativas mais próximas dos valores esperados, quanto maior for o número de sistemas.

Assim, assumindo que tais estados representam situações de equilíbrio gravitacional, tem-se que uma avaliação das variáveis dinâmicas do sistema, através de médias tomadas sobre um certo número de configurações, é mais confiável do que realizar medições de apenas uma única configuração.

Por conseguinte, os gráficos discutidos acima foram refeitos para uma superposição de 16 sistemas (QUADRO 71 ao QUADRO 86) dinamicamente isolados (não-perturbados), acarretando num total de 13888 partículas⁴.

Convém enfatizar que as variáveis dinâmicas de cada sistema são calculadas internamente, ou seja, partículas do QUADRO 71 não interagem com as partículas do QUADRO 72 e assim sucessivamente.

O resultado deste artifício se encontra nos gráficos das Figuras 4.15 até 4.19. Percebe-se nestes, em comparação com os correspondentes gráficos de situações individuais, uma relativa redução de flutuações nas grandezas relacionadas.

⁴ Após o colapso, das 1024 iniciais, restaram 868 partículas ligadas ao sistema.

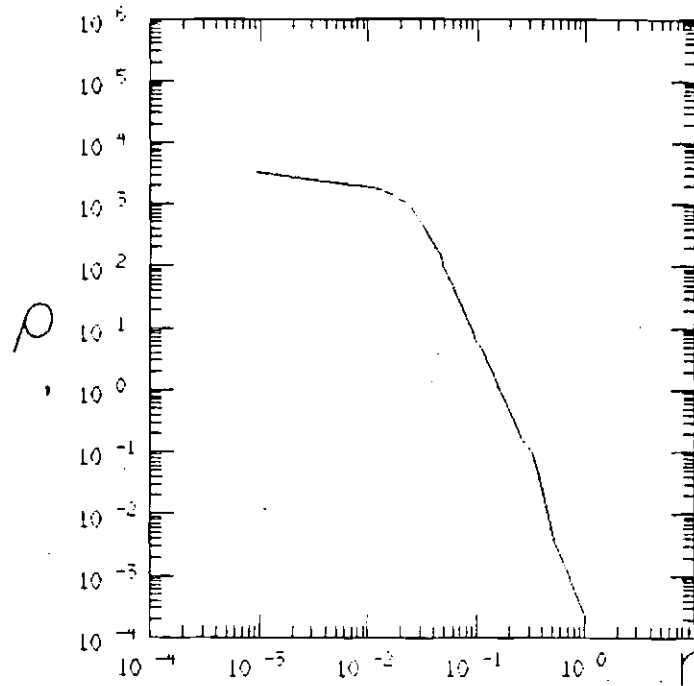


Fig. 4.15 - Densidade espacial $\rho(r)$ versus r avaliada do "ensemble" com os 16 últimos quadros da simulação.

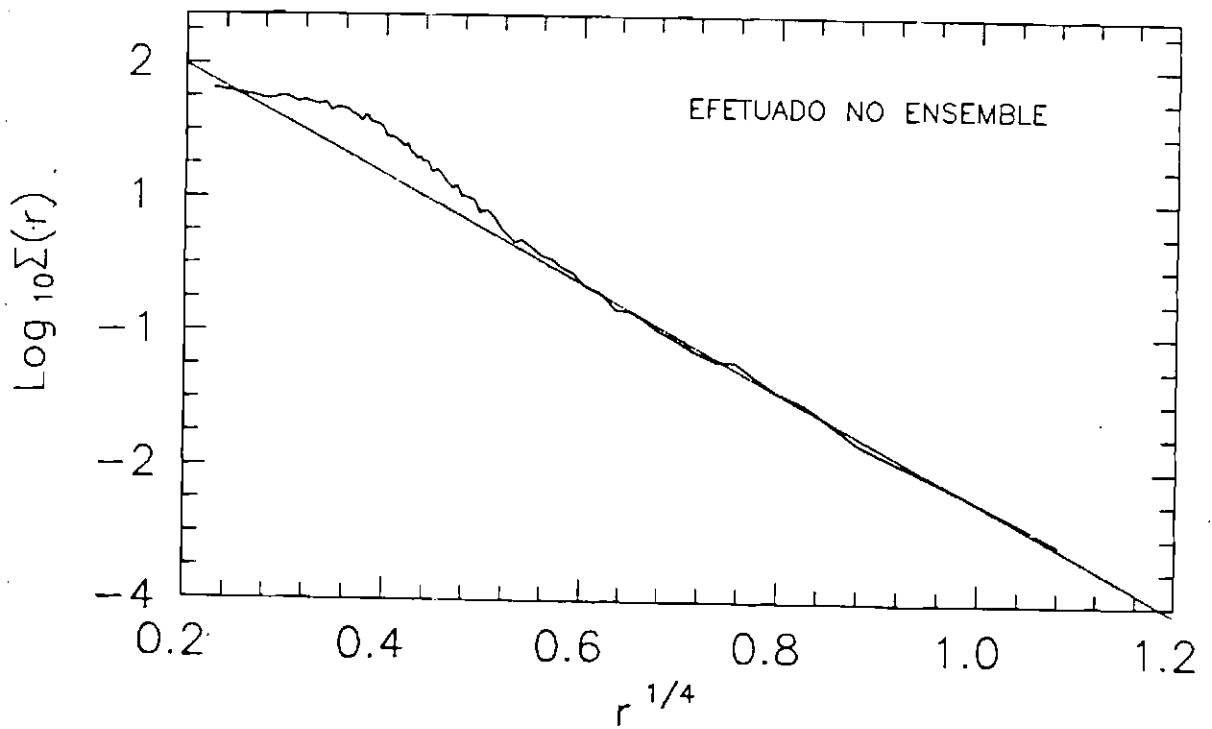


Fig. 4.16 - $\text{Log}_{10} \Sigma(r)$ contra $r^{1/4}$ avaliado no "ensemble".

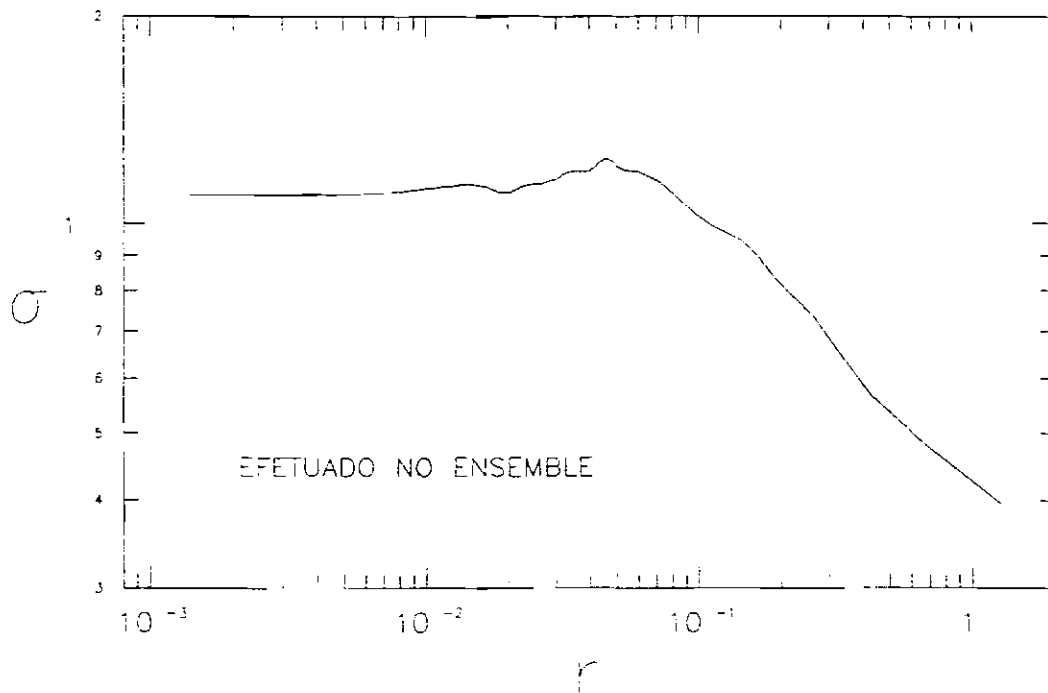


Fig. 4.17 - *Dispersão de velocidades $\sigma(r)$ contra posição radial r avaliada no "ensemble".* Note-se como agora é bem visível a região isotérmica. Contudo esta região plana ocorre dentro de uma escala ligeiramente inferior ao comprimento de amolecimento ϵ . Um pequeno aumento em σ é perceptível entre $r = 0,02$ e $r = 0,07$.

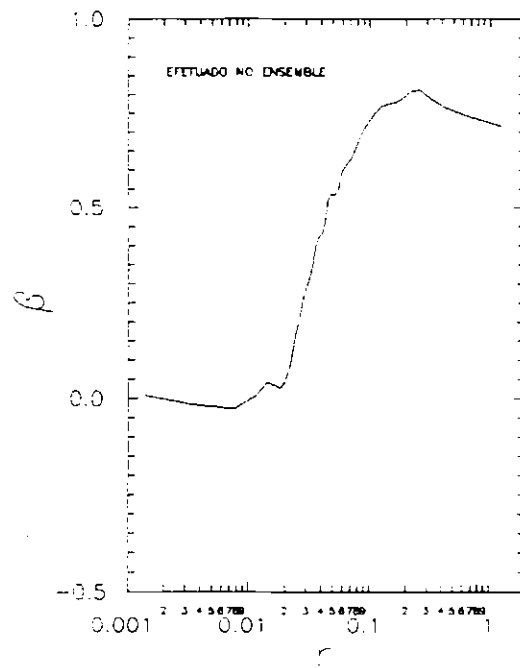


Fig. 4.18 - Fator ou grau de *anisotropia* $\beta(r)$, tomado do "*ensemble*", revelando a segregação de órbitas ao longo do raio do sistema. O sistema é centralmente isotrópico e vai se tornando gradativamente anisotrópico para as regiões mais externas. A parte achatada em $r \lesssim 0,02$, corresponde a uma escala menor que o comprimento de amolecimento.

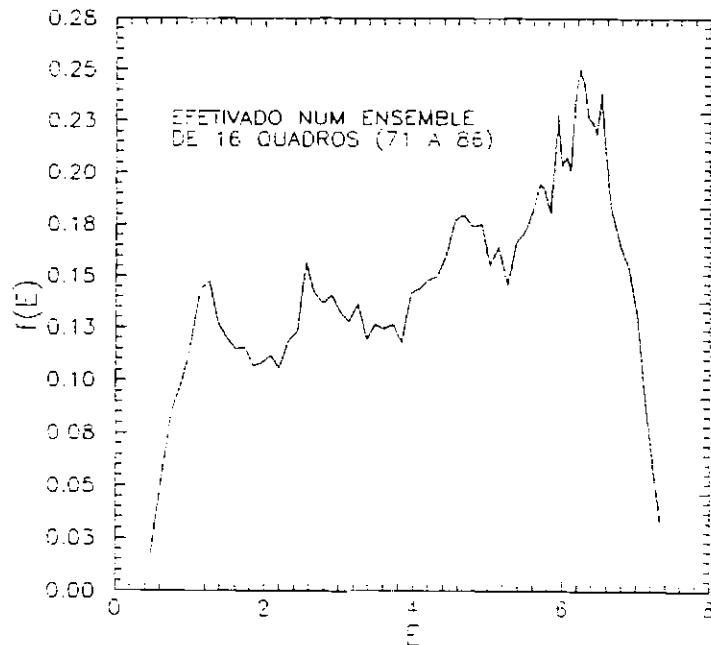


Fig. 4.19 - *Função distribuição de energias de ligação por unidade de massa, avaliada sobre o "ensemble". É perceptível que o gráfico possui uma mudança acentuada em sua derivada média por volta de $E = 5$, como foi comentado na Figura 4.13. Contudo, percebe-se também outras três estruturas no envelope.*

4.5.3 - INTERPRETAÇÃO DOS RESULTADOS

As flutuações iniciais de densidade são relevantes na evolução do colapso (vide Figuras 4.4a e 4.20), produzindo instabilidades não-radiais. Estas instabilidades promovem subaglomerações, que, na fase de configuração mínima, decidem fortemente na morfologia do objeto pós-colapso. De fato, os primeiros quadros da Figura 4.4a, que antecedem a fase crítica, e a Figura 4.20 mostram que colapsos internos estão ocorrendo.

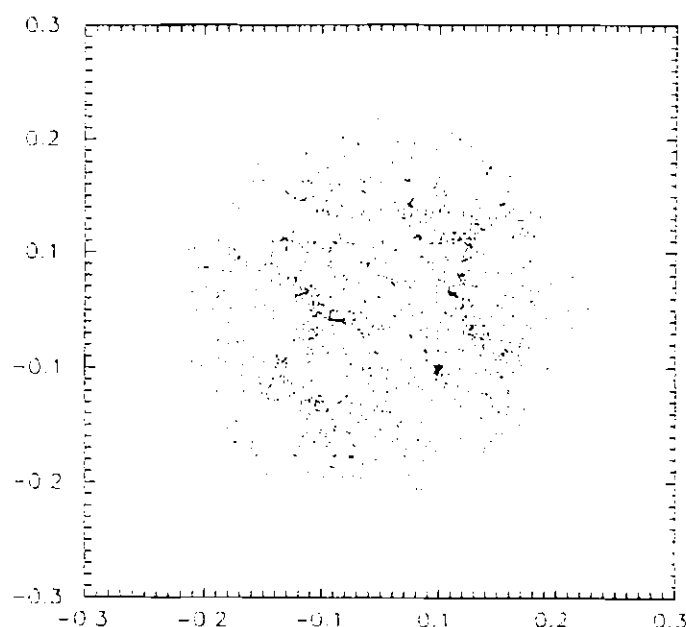


Fig. 4.20 - Ampliação do quadro, correspondente a $t = 52,40 \cdot 10^6$ anos da Figura 4.4a, mostrando uma fase evoluída das flutuações iniciais de densidade.

Em $t = 52,40 \cdot 10^6$ anos, a configuração do sistema é cheia de subestruturas, destacando-se grandes aglomerações (regiões mais escuras, em forma de filamentos, na Figura 4.20), que irão resultar nos três objetos pós-colapso em $t = 83,84 \cdot 10^6$ anos: um mais massivo, centralmente dominante, e os outros dois, com menos massa, dispostos em lobos diametralmente opostos. Destes últimos, um é ejetado mais eficientemente que o outro, mais massivo, que não recebe energia suficiente para se libertar da porção dominante. Os dois pedaços maiores colapsam individualmente à medida que vão se reaproximando. Ambos se fundem rapidamente em $150 \cdot 10^6$ anos. O que é muito interessante deste processo é que a parte central é formada por "*merging*" de dois objetos já razoavelmente individualizados (vide Figuras 4.4a e 4.4b). Este "*merging*" justifica a alta concentração de matéria na parte central do objeto recém formado⁵. Provavelmente, esta região só não é mais compacta em virtude do comprimento de amolecimento adotado (vide Seção 3.5).

⁵ Navarro (1989), por exemplo, mostrou que encontros de baixa energia orbital favorecem a formação de objetos, via merger, centralmente mais brilhantes que seus progenitores.

A parte central, recém formada, logo adquire robustez dinâmica com respeito às partes externas, que, posteriormente, constituirão o envelope. Daí o fato de se ter, essencialmente, dois objetos distintos, com escalas dinâmicas de tempo bem diferentes. Este objeto central assume uma postura decisiva, como regente do potencial coletivo, modelando o envelope em formação (relaxação). Esta característica fica evidente na Figura 4.7b, nos quadros correspondentes a $t = 209,6 \cdot 10^6$ até $335,4 \cdot 10^6$ anos, onde ocorre a formação de conchas (tanto no espaço de fase como nas energias de ligação). Conchas se formam naturalmente em relaxação de halos submetidos a um potencial robusto, produzido por uma parte central massiva e compacta (vide simulações realizadas por Hernquist e Quinn 1988). Toma-se isto como evidência observacional de canibalismo de galáxias menores por elípticas gigantes (Fort *et al.* 1986; Pence 1986).

Analizando os resultados discutidos anteriormente (Sec. 4.5.2), conclui-se que a parte central do sistema (dentro do intervalo $0 < r < 0,04$) possui um baixo gradiente de dispersão de velocidades. Portanto, o caroço central é aproximadamente isotérmico, o que lembra alguns dados espectroscópicos de alta resolução, das partes centrais de algumas galáxias elípticas (Kormendy 1987). O valor médio de σ , na parte achatada do gráfico de dispersão de velocidades (Figura 4.17), é aproximadamente $\langle \sigma_{iso} \rangle = 1,4$ ($\equiv 217 \text{ km s}^{-1}$).

A densidade espacial, ρ , também apresenta um achatamento na região isotérmica. Para esta mesma região, ocorre um excesso de densidade superficial, com respeito a um ajuste do perfil de de Vaucouleurs, na parte plana do gráfico $\Sigma(r) \times r^{1/4}$. Contudo, como foi visto no Capítulo 3 (Sec. 3.5), o comprimento de amolecimento pode alargar o poço de potencial, em virtude da perda de resolução espacial. Portanto, é interessante, no futuro, repetir o experimento, com condições iniciais semelhantes, mas usando um maior número de partículas e adotando maior resolução angular das células da árvore (provavelmente $\theta = 0,7$), a fim de verificar a possibilidade do surgimento de um caroço central.

O envelope apresenta características que aproximam-se das observadas em galáxias elípticas. A densidade superficial projetada Σ obedece o perfil de de Vaucouleurs. A densidade espacial ρ segue a lei de potência $\rho \propto r^{-(4-\epsilon)}$, $0 < \epsilon \ll 1$, que comprova a consistência do modelo com as observações

existentes de envelopes de galáxias elípticas (Mihalas e Binney 1981, Sec. 5-2).

A distribuição de velocidades é fortemente anisotrópica no envelope ($r > 0.04 \approx 1,6$ kpc) e essencialmente isotrópica na parte central, correspondente à parte isotérmica. O índice de anisotropia β mostra esta característica na Figura 4.18.

O fator de anisotropia, β , de certo modo, representa a "memória" do sistema com respeito às condições iniciais do colapso. Quanto mais eficiente a relaxação, menos "recordações" o sistema deve guardar das suas condições iniciais. Portanto, em colapsos violentos, a mistura de fase é incompleta e se processa preferencialmente na direção radial, que é justamente a direção inicial das órbitas do sistema. A parte central é a única que "esqueceu", quase que completamente, o passado do sistema.

A mistura de fase foi mais eficiente nas partes centrais, em virtude do "*merging*" dos dois maiores fragmentos pós-colapso. Isto confirma que o sistema é composto de dois subsistemas com histórias bem diferentes: (i) o primeiro subsistema consiste na parte central, dinamicamente precoce, que é formada quase exclusivamente pela coalescência de fragmentos de baixa energia orbital, resultantes do primeiro colapso; (ii) a segunda é o envelope, formado tardiamente pela relaxação do material ejetado do primeiro colapso.

A função distribuição de energias de ligação, Figura 4.19, apresenta quatro estruturas bem definidas. Contudo, somente a estrutura mais ligada (correspondendo a $E > 5$) é persistente nos quatro gráficos da Figura 4.13. Devido a esta coerência, em torno de $E = 5$, pode-se deduzir que há uma separação em torno deste valor. Esta separação sugere que o sistema é a superposição de dois subsistemas com propriedades dinâmicas distintas. Esta conclusão concorda com os resultados de Burkert (1990).

Da análise-feita dos gráficos obtidos da média sobre o "*ensemble*", conclui-se que:

- 1) o objeto possui uma parte central, morfologicamente distinta do resto do sistema, que foge do perfil de de Vaucouleurs, na faixa de

$$0 < r \leq 3 \text{ kpc};$$

- 2) o envelope ($r \geq 3 \text{ kpc}$) obedece fielmente o perfil de de Vaucouleurs e sua densidade espacial segue uma lei de potência com uma declividade ligeiramente mais suave que a de r^{-4} ;
- 3) abaixo de $r \approx 2 \text{ kpc}$, o sistema apresenta-se essencialmente como uma esfera isotérmica;
- 4) até um raio de aproximadamente 800 pc , o sistema é essencialmente isotrópico e, acima deste valor, há uma subida acentuada para órbitas predominantemente radiais;
- 5) as partículas distribuem-se de forma seletiva, nas energias de ligação, destacando-se pelo menos duas regiões, separadas em torno de $E \approx 5$, o que corresponde a um raio de aproximadamente $1,6 \text{ kpc}$. A região mais ligada ($E \geq 5$) coincide com a parte central, isotérmica, enquanto a mais externa representa o envelope. As partes menos ligadas, que constituem o envelope, distribuem-se em três estruturas (três ondulações que aparecem em $E \leq 5$, na Figura 4.19).

Esta última conclusão reafirma que o processo de mistura de fase foi de baixa eficiência, e que o sistema tem pelo menos duas partes distintas, com histórias bem diferentes.

O processo de formação de conchas decorre dos sucessivos colapsos do envelope em relaxação. Conseqüentemente, energia de ligação por unidade de massa é dosada intermitentemente entre as partículas do sistema em formação.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Este trabalho teve como principal propósito o desenvolvimento de uma eficiente ferramenta computacional de pesquisa em dinâmica de sistemas estelares. A construção do código (bem como de todos os programas de redução dos dados) procedeu de forma original. Uma consequência positiva desta postura adotada é que outras versões de nossa autoria, otimizadas para supercomputadores, já se encontram em vias de conclusão.

As discussões preliminares dos Capítulos 2 e 3 forneceram subsídios, essenciais para a determinação do passo de integração e do comprimento de amolecimento.

O problema de degenerescência de nós, apontado no Capítulo 2, torna-se relevante quando surgem aglomerações muito compactas, em algum momento da simulação. Em compiladores que não dispõem de variáveis dinâmicas (*e.g.*, FORTRAN 77), este problema pode ser fatal em virtude do limitado dimensionamento dos "arrays".

Tanto os erros de truncamento quanto o emprego do comprimento de amolecimento limitam o modelo numérico em resolução espacial. No caso do "*leap-frog*" (ou em técnicas análogas) os erros acumulam-se progressivamente sobre o modelo, em virtude da função distribuição de erros variar de ponto a ponto no sistema.

A técnica de árvore octal, para a aproximação de monopolo, produz erros na conservação de momentos linear e angular. Contudo, estes erros, na pior das hipóteses, são duas ordens de magnitude maiores que os erros inerentes à soma direta. Portanto, para fins práticos, não há relevância na propagação destes, quando confrontados com os erros de integração.

A substituição de um grupo de partículas, no interior de uma célula, por um único termo de fonte do campo, produz efeitos perturbativos sobre

as órbitas das partículas. Em experimentos onde o traçado de órbitas é relevante, deve-se implementar o código com termos de quadrupolo nas células da árvore, ou, alternativamente, adota-se um valor relativamente pequeno para θ , o que é indesejável, visto que esta alternativa torna o experimento computacionalmente dispendioso.

O comprimento de amolecimento é bastante eficiente na suavização dos encontros de partículas. Contudo, os efeitos de flutuações estatísticas, na densidade de fontes, típicas do código de árvore, não são eficientemente reduzidos, quanto o seriam na soma direta.

O esforço computacional do tipo $\mathcal{O}(N \log N)$ foi confirmado experimentalmente, para sistemas com um acentuado gradiente de densidades (a despeito da estimativa teórica, feita no Capítulo 2, para sistemas homogêneos) e para um parâmetro de tolerância menor que a unidade ($\theta = 0,7$). Para $\theta = 1$, o desempenho do código foi melhor que $\mathcal{O}(N \log N)$. O tempo de construção da árvore, em todos os testes realizados, foi desprezível se comparado com o tempo gasto no cálculo das forças.

Ao longo do aprimoramento do código, foram feitos diversos experimentos. Contudo, o que mais chamou a atenção, pelo surpreendente resultado, nas primeiras fase da evolução do sistema, é o que foi adotado neste trabalho.

Outros experimentos, envolvendo situações bem diferentes, mas com praticamente os mesmos parâmetros adotados aqui (e.g., Marinho e Capelato 1990), apresentaram objetos resultantes, obedecendo o perfil fotométrico de de Vaucouleurs em toda a extensão radial. Contudo, o experimento realizado aqui teve como peculiaridade as condições iniciais, que favoreceram um colapso violento, gerando como resultado um objeto, que obedece parcialmente o perfil de de Vaucouleurs, mas com um excesso de *brilho* na parte central. Isto sugere que a formação da parte central não é unicamente um artifício do amolecimento, mas, principalmente, da natureza do colapso.

Os resultados apresentados aqui concordam, em alguns aspectos, com o experimento de Burkert (1990), feito com maior resolução espacial. Contudo, o

experimento realizado aqui teve sua consistência limitada, essencialmente, pelo número de partículas. A eficiência do código, dentro das limitações do integrador numérico, foi confirmada tanto pelos testes quanto pelo gráfico de energia total, que se mostrou essencialmente constante, a menos de perturbações relativamente desprezíveis.

A partir do "know-how" obtido, o próximo passo é o de repetir esta simulação (*i.e.*, com as mesmas condições iniciais), com maior resolução espacial. Com a recente aquisição de "workstations", será possível realizar experimentos com mais de 10^4 partículas, em um tempo comparável ao do experimento deste trabalho, realizado num VAX 11/780.

Para um futuro trabalho, provavelmente no doutoramento, pretende-se inserir processos dissipativos, no contexto das simulações de colapso. Para tanto, existe uma técnica, que começou a ser desenvolvida no final da década de 70, e é um forte candidato para a metodologia adotada nos futuros trabalhos. Trata-se da *Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas* (SPH, do inglês: "*smoothed particle hydrodynamics*"), introduzida por Lucy (1977) e Gingold - Monaghan (1977).

A técnica SPH consiste basicamente em substituir elementos do fluido por partículas, representando as propriedades intensivas do sistema (*e.g.*, pressão, temperatura, densidade *etc.*), e as equações dinâmicas são obtidas da forma lagrangiana das leis de conservação da hidrodinâmica.

Devido à natureza particular, a técnica não depende, *a priori*, de grades e, portanto, não é limitada em geometria nem em resolução espacial. Em síntese, o método transforma as equações de movimento, do fluido, em um problema de muitos corpos (com abordagem diferente).

As densidades, e outras grandezas intrínsecas, são avaliadas por métodos interpolativos, via núcleo de amaciamento ("*smoothing kernel*"). Originalmente, o método consistia em fazer uma convolução da grandeza amaciada com o núcleo de amaciamento. Contudo, recentemente, tem-se adotado um núcleo variável (*e.g.*, Hernquist e Katz 1989) e a própria árvore de dados subsidia o mapeamento de densidades, fornecendo naturalmente o comprimento de suavização

(uma generalização do comprimento de amolecimento). A vantagem de se usar um núcleo de amaciamento variável é que altas frequências espaciais não são filtradas indiscriminadamente. Desta forma, a perda em resolução espacial é mínima.

Acredita-se que o domínio da nova técnica (SPH) viabilizará a realização de experimentos, com resultados mais realistas. Tais resultados podem verificar hipóteses de que processos dissipativos são relevantes em todas as escalas do universo. Por exemplo, acredita-se que dissipação é um importante ingrediente na formação de galáxias e de grandes estruturas no universo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Aarseth, S. J. Dynamical evolution of clusters of galaxies, I. **Mon. Not. R. Astr. Soc.**, 126:223-255, Oct. 1963.
- Ahmad, A.; Cohen, L. A numerical integration scheme for the N-body gravitational problem. **J. Comput. Phys.**, 12(3):389-402, 1973.
- Ambrosiano, J.; Greengard, L.; Rokhlin, V. The fast multipole method for gridless particle simulation. **Comput. Phys. Comm.**, 48:117-125, Jan. 1988.
- Appel, A. W. **An investigation of galaxy clustering using an asymptotically fast N-body algorithm.** (Undergraduate Thesis) - Princeton University Press, Princeton, NJ, Apr. 1981. 123 p.
- _____ An efficient program for many body simulation. **SIAM J. Sci. Stat. Comput. Phys.**, 6:85-103, Jan. 1985.
- Arnold, V. I. **Métodos matemáticos da mecânica clássica.** 2. ed. Moscou, URSS, Editora Mir, 1987.
- Barnes, J. E. Encounters of disk-halo galaxies. **Ap. J.**, 331:699-717, Aug. 1988.
- _____ Evolution of compact groups of galaxies and the formation of elliptical galaxies. **Nature**, 338:123-130, Mar. 1989.
- _____ A modified tree code: don't laugh; it runs. **J. Comput. Phys.**, 87:161-170, Dec. 1990.
- Barnes, J.; Goodman, J.; Hut, P. Dynamical instabilities in spherical stellar systems. **Ap. J.**, 300:112-131, Jan. 1986.
- Barnes, J.; Hut, P. A hierarchical $\mathcal{O}(N \log N)$ force-calculation algorithm. **Nature**, 324:446-449, Dec. 1986.

- _____ Error analysis of a tree code. **Ap. J. Suppl.**, 70:389-417, June 1989.
- Bentley, J. L.; Friedman, J. H. Data structure for range searching. **Comput. Surv.**, 11:397-409, Dec. 1979.
- Binney, J.; Tremaine, S. **Galactic dynamics**. Princeton, NJ, Princeton University Press, 1987. 733 p.
- Burkert, A. The dissipationless evolution of elliptical galaxies. **Mon. Not. R. Astr. Soc.**, 247:152-165, Nov. 1990.
- Carrier, J.; Gureggard, L.; Rokhlin, V. A fast adaptive multipole algorithm for particle simulations. **SIAM J. of Sci. Stat. Comput. Phys.**, 9:669-686, July 1988.
- Chandrasekhar, S. **An introduction to the theory of stellar structure**. New York, NY, Dover, 1957.
- Efstathiou, G.; Eastwood, J. W. On the clustering of particles in an expanding universe. **Mon. Not. R. Astr. Soc.**, 194:503-526, Feb. 1981.
- Farouki, R. T.; Salpeter, E. E. Mass segregation, relaxation, and the Coulomb logarithm in N-body systems. **Ap. J.**, 253:512-519, Feb. 1982.
- Finkel, R. A.; Bentley, J. L. Quad trees: a data structure for retrieval on composite keys. **Acta Informatica**, 4:1-9, Jan. 1974.
- Fort, B. P.; Prieur, J. L.; Carter, D.; Meatheringham, S. J.; Vigieux, L. Surface photometry of shell galaxies. **Ap. J.**, 306:110-121, July 1986.
- Frenk, C. S. N-body simulations of galaxy formation. In: J. Audouze, Pelletan, M.-C.; Szalay, A. eds. **Large scale structure of the universe**. Dordrecht, D. Reidel, 1988. p. 259-271 (IAU Symposium, 130). Proceedings of a symposium held in Balatonfüred, Hungary, June 1987.

- Gingold, R. A.; Monaghan, J. J. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. **Mon. Not. R. Astr. Soc.**, 181:375-389, Nov. 1977.
- Gott, J. R.; Turner, R. The mean luminosity and mass densities of the universe. **Ap. J.**, 209:1-5, Oct. 1976.
- Greengard, L. **The rapid evaluation of potential fields in particle systems**, Cambridge, MA, MIT Press, 1988.
- Greengard, L.; Rokhlin, V. A fast algorithm for particle simulations. **J. Comput. Phys.**, 73:325-348, Dec. 1987.
- Gunn, J. E.; Gott, J. R. On the infall of matter into clusters of galaxies and some effects on their evolution. **Ap. J.**, 176:1-19, Aug. 1972.
- Hernquist, L. Performance characteristics of tree codes. **Ap. J. Suppl.**, 64:715-734, Aug. 1987.
- _____. Hierarchical N-body methods. **Comput. Phys. Comm.**, 48(1):107-115, 1988.
- _____. Vectorization of tree traversals. **J. Comput. Phys.**, 87(2):137-147, 1990.
- Hernquist, L.; Barnes, J.E. Are some N-body algorithm intrinsically less collisional than others? **Ap. J.**, 349:562-569, Feb. 1990.
- Hernquist, L.; Katz, N. TREESPH: a unification of SPH with the hierarchical tree method. **Ap. J. Suppl.**, 70:419-446, June 1989.
- Hockney, R. W.; Eastwood, J. W. **Computer simulations using particles**. New York, NY, McGraw-Hill, 1981.
- Jeans, J. H. **Cosmogony and stellar dynamics**. Cambridge, UK, Cambridge University Press, 1919.

- Jensen, K.; Wirth, N. **PASCAL user manual and report**. New York, NY, Springer - Verlag, 1974.
- Jernigan, J. G.; Porter, D. H. A tree code with logarithm reduction of force terms, hierarchical regularization of all variables, and explicit accuracy controls. **Ap. J. Supp.**, 71:871-893, Dec. 1989.
- Kormendy, J. Cores of early-type galaxies. In: de Zeeuw, T. ed. **Struture an Dynamics of elliptical Galaxies**. Dordrecht, D. Reidel, 1986, p. 17-36. (IAU Symposium, 127). Proceedings of a symposium held in Princeton, USA, May 27-31 1986.
- _____ Are some elliptical galaxies formed by dissipative collapse? **Ap. J.**, 342:L63-L66, July 1989.
- Kandrup, H. E. Statistical mechanics in astrophysics and cosmology. **Comm. Astr.**, 13(6):325-342, 1989.
- Larson, R. B.; Tinsley, B. M.; Caldwell, C. N. The evolution of disk galaxies and the origin of S0 galaxies. **Ap. J.**, 237:692-707, May 1980.
- Lima, E. L. **Elementos de topologia geral**. Rio de Janeiro, Ao Livro Técnico; Editora da USP. 1970.
- Lucy, L. A numerical approach to the testing of the fission hipotesys. **Astr. J.**, 82:1013-1024, Dec. 1977.
- Makino, J. Vectorization of a tree code. **J. Comput. Phys.**, 87:148-160, 1990a.
- _____ Comparison of two different tree algorithms. **J. Comput. Phys.**, 88:161-172, 1990b.
- Makino, J.; Hut, P. Gravitational N-body algorithms: a comparison between supercomputers and high parallel computers. **Comput. Phys. Rep.**, 9:199-246, June 1989.

- Marinho, E. P.; Capelato, H. V. Encontros de galáxias elípticas usando um algoritmo $\mathcal{O}(N \log N)$. **Boletim da SAB**, 12(1):64-65, 1990.
- Merrit, D.; Aguilar, L. A. A numerical study of the stability of spherical galaxies. **Mon. Not. R. Astr. Soc.**, 217:787-804, Dec. 1985.
- Mihalas, D.; Binney, J. **Galactic astronomy: structure and kinematics**. 2. ed. New York, NY, W. H. Freeman, 1981. 431 p.
- Min, K. W.; Choi, S. C. Cold collapse of a spherical stellar system. **Mon. Not. R. Astr. Soc.**, 238:253-259, May 1989.
- Morse, P. M. **Thermal physics**. 2. ed. Reading, MA., The Benjamin/Cummings, 1969. 431 p.
- Navarro, J. Merging encounters of equal-mass non-rotating galaxies. **Mon. Not. R. Astr. Soc.**, 239:257-272, July 1989.
- Pence, W. D. Spectrophotometry of shell galaxies. **Ap. J.**, 310:597-604, Nov. 1986.
- Sandage, A. R.; Freeman, K. C.; Stokes, N. R. The intrinsic flattening of E, S0, and spiral galaxies as related to galaxy formation and evolution. **Ap. J.**, 160:831-844, June 1970.
- Saslaw, W. **Gravitational physics of stellar and galactic systems**. Cambridge, UK, Cambridge University Press, 1985. 491 p.
- Sellwood, J. A. The art of N-body building. In: **Ann. Rev. Astron. Astrophys.** Palo Alto, CA, Annual Reviews, 1987. V. 25, p. 151-186.
- Sobol, I. **O Método de Monte Carlo**. Moscou, URSS, Editora Mir, 1983.
- Tijonov, A. N.; Samarsky, A. A. **Equaciones de la Física Matematica**. 2. ed. Moscu, URSS, Editorial Mir, 1980.

- Toomre, A. Mergers and some consequences. In: **The evolution of galaxies and stellar populations**. Tinsley, B. M.; Larson, R. B. eds. Yale, NH, Yale University Press Observatory, 1977. p. 401.
- Wand, M. **Induction, recursion, and programming**. New York, NY, North Holland, 1984.
- White, S. D. M. Dynamical friction in spherical cluster. **Mon. Not. R. Astr. Soc.**, 174:19-28, Jan. 1976.

APÊNDICE A

OBTENÇÃO DE DISTRIBUIÇÕES ESFÉRICAS

As posições das partículas nos modelos iniciais foram obtidas transformando variáveis aleatórias μ , v , ξ , igualmente prováveis no intervalo $(0,1)$, em coordenadas esféricas, r , θ , φ , de maneira a preservar o número de partículas do elemento de volume $d\mu dv d\xi$ do cubo unitário para o elemento de volume $r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$ na distribuição esférica. No cubo unitário, se $N \gg 1$ é o número total de partículas, a densidade numérica, em qualquer ponto do cubo, é igual ao próprio N . Enquanto na distribuição esférica, a densidade numérica é $\rho(r)$. Portanto,

$$N d\mu dv d\xi = \rho(r) r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \quad (\text{A.1})$$

ou, em termos de função distribuição de probabilidade $f(r)$ de se encontrar uma partícula em um volume $r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$ é

$$d\mu dv d\xi = f(r) r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi. \quad (\text{A.2})$$

Deseja-se encontrar a transformação de coordenadas $(\mu, v, \xi) \longleftrightarrow (r, \theta, \varphi)$. A relação entre os volumes é dada por

$$d\mu dv d\xi = \left| \det \frac{\partial(\mu, v, \xi)}{\partial(r, \theta, \varphi)} \right| dr d\theta d\varphi \quad (\text{A.3})$$

onde $\partial(\mu, v, \xi)/\partial(r, \theta, \varphi)$ é a matriz Jacobiana, que expressa a transformação de contato infinitesimal do espaço $\{(r, \theta, \varphi)\}$ para o cubo unitário $(0,1)^3$. Na equação (A.2) vê-se que as funções são reparáveis com as variáveis r , θ , φ de forma que a matriz Jacobiana desta transformação é diagonal, o que equivale a $\mu = \mu(r)$, $v = v(\theta)$, $\xi = \xi(\varphi)$. Assim (A.3) fica escrita como

$$d\mu dv d\xi = \frac{d\mu}{dr} \frac{dv}{d\theta} \frac{d\xi}{d\varphi} dr d\theta d\varphi \quad (\text{A.4})$$

e comparando esta última com a equação (A.2) escrevemos convenientemente

$$d\mu = 4\pi f(r) r^2 dr, \quad (\text{A.5a})$$

$$dv = \frac{1}{2} \sin \theta d\theta, \quad (\text{A.5b})$$

$$d\xi = \frac{1}{2\pi} d\varphi, \quad (\text{A.5c})$$

que integrando estas equações, ficamos com

$$\mu(r) = 4\pi \int_0^r f(u) u^2 du \quad (\text{A.6a})$$

$$v(\theta) = \frac{1}{2\pi} (1 - \cos \theta) \quad (\text{A.6b})$$

$$\xi(\varphi) = \frac{\varphi}{2\pi} \quad (\text{A.6c})$$

A primeira das soluções, Equação (A.6a), dá, pelo menos teoricamente, r em função de μ . As demais soluções, Equações (A.7) e (A.8), fornecem θ e φ segundo

$$\theta = \arccos (1 - 2v), \quad (\text{A.7a})$$

$$\varphi = 2\pi \xi \quad (\text{A.7b})$$

A partir destes resultados obtém-se as coordenadas cartesianas x , y , z por

$$\begin{aligned} x(\mu, v, \xi) &= 2 r(\mu) [v(1 - v)]^{1/2} \cos (2\pi\xi), \\ y(\mu, v, \xi) &= 2 r(\mu) [v(1 - v)]^{1/2} \sin (2\pi\xi), \\ z(\mu, v, \xi) &= r(\mu) (1 - 2v), \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

lembrando que $0 < \mu, v, \xi < 1$.

APÊNCICE BUTILIZAÇÃO DE ÁRVORE PARA A OBTENÇÃO DE
FUNÇÕES DISTRIBUIÇÃO

Como foi mencionados nos Cap. 2 e 3, a árvore de células recursivas é completamente lagrangiana. Isto significa que as células se ajustam automaticamente à distribuição, de forma que o tamanho de cada célula-folha é da ordem da separação média local das partículas, isto é, $a \approx \rho^{-1/3}$.

De uma maneira geral, se o número de partículas em uma distribuição é grande, pode-se obter células com um certo número de partículas, distribuídas de forma quase homogênea. Assim, pode-se levantar pontos de densidade, $\rho(x)$, segundo uma certa granulação.

Um perfil com granulação fina é aquele que é levantado por células com poucas partículas. Já uma granulação grossa é obtida quando as células são relativamente grandes, contendo muitas partículas.

Admitindo que as células usadas no mapeamento de densidade são relativamente pequenas, se comparadas ao sistema inteiro, o erro esperado na determinação do número n de pontos em cada célula é, aproximadamente, $n^{1/2}$. Assim, a densidade numérica estimada é igual a $v(r) \approx (n/a^3) (1 \pm 1/n^{1/2})$. Uma consequência imediata da forma adaptativa das células à distribuição é que, em regiões com vazios descontínuos (*i.e.*, onde a densidade cai bruscamente para zero), surge fatalmente um mascaramento do perfil de densidade em virtude de células vazias serem ignoradas. Uma alternativa, que reduz este efeito, é a adoção de uma grade-raiz, onde de cada célula deriva uma árvore, que determina os refinamentos internos da grade. Este método é comumente chamado de grade (ou malha) autorrefinada.

**PUBLICAÇÕES TÉCNICO-CIENTÍFICAS
EDITADAS PELO INPE**

RELATÓRIOS DE PESQUISA

- Reportam resultados de pesquisa tanto de natureza técnica quanto científica.

NOTAS TÉCNICO-CIENTÍFICAS

- Incluem resultados preliminares de pesquisa, descrição de equipamentos, software, sistemas e experimentos, apresentação de testes, dados e atlas, e documentação de projetos de engenharia.

MANUAIS TÉCNICOS

- Descrevem normas, procedimentos, instruções e orientações.

PUBLICAÇÕES DIDÁTICAS

- Apostilas, notas de aula e manuais didáticos.

TESES E DISSERTAÇÕES

- Teses e Dissertações apresentadas nos Cursos de Pós-Graduação do INPE.

PUBLICAÇÕES SERIADAS

- Periódicos Técnico-científicos: Boletim de Sensoriamento Remoto, Climanálise: Boletim de Monitoramento e Análise Climática.
- Anais de Eventos