

RAFAEL CAMARGO RODRIGUES DE LIMA

O MÉTODO DE PARTÍCULAS TESTE NA  
SIMULAÇÃO DE SISTEMAS NUCLEARES

Florianópolis

2008

RAFAEL CAMARGO RODRIGUES DE LIMA

# O MÉTODO DE PARTÍCULAS TESTE NA SIMULAÇÃO DE SISTEMAS NUCLEARES

Trabalho apresentado ao curso de Pós-Graduação em Física, como parte dos requisitos para obtenção do grau de Mestre em Física

Orientador:  
Sidney dos Santos Avancini

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA - UFSC  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Florianópolis

2008

# O MÉTODO DE PARTÍCULAS TESTE NA SIMULAÇÃO DE SISTEMAS NUCLEARES

RAFAEL CAMARGO RODRIGUES DE LIMA

Esta Dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de MESTRE EM FÍSICA, na área de concentração de FÍSICA NUCLEAR e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Física.

---

Prof. Dr. Sidney dos Santos Avancini  
FSC/UFSC - Orientador

---

Profa Dr. Débora Perez de Menezes  
FSC/UFSC - Coordenadora do Curso

---

Prof. Dr. Sidney dos Santos Avancini  
FSC/UFSC - Presidente

---

Profa. Dra. Débora Peres Menezes  
FSC/UFSC

---

Profa. Dra. Mirian Bracco  
UERJ

---

Prof. Dr. José Ricardo Marinelli  
FSC/UFSC

---

Prof. Dr. Luis Orlando E. dos Santos  
EMEC/UFSC

# RESUMO

Neste trabalho desenvolvemos algoritmos numéricos para a solução da equação de Vlasov que é largamente usada na simulação de sistemas nucleares. Como técnica computacional utilizamos o Método das Partículas-Teste. Por simplificação utilizamos o conceito de nucleons e não diferenciamos as partículas. Simulamos um núcleo com 64 nucleons no estado fundamental e analisamos a validade temporal da simulação. Também simulamos um gás de nucleons aprisionados em uma caixa com condição de contorno periódica. Este gás é perturbado levemente em sua densidade do estado fundamental por uma perturbação periódica. O sistema é acompanhado em sua evolução no tempo. A densidade retorna ao equilíbrio e são mostrados gráficos desta e da evolução do número de ocupação assim como da energia por nucleon.

# ABSTRACT

In this work we developed numerical algorithms for the solution of the Vlasov equation, which is widely used in the simulation of nuclear systems. The computational technique we have used is the test-particles method. In order to simplify the calculations we have used the concept of nucleons which do not distinguish between the neutrons and the protons. We simulated a nucleus with 64 nucleons at the ground state and analyzed the validity of the simulation time. We also have simulated a gas of nucleons trapped in a box with a periodic boundary condition, which is slightly disturbed from its ground state equilibrium density by a periodic perturbation. The temporal evolution of the system has been observed. The evolution of the perturbed system in its way to the equilibrium, the energy per nucleon and the occupation number are graphically shown.

# SUMÁRIO

1	Introdução	p. 7
2	Equação de Vlasov	p. 10
2.1	Sistema Fermiônico a $T = 0$	p. 14
2.2	Cálculo do Número de Ocupação na Aproximação de Thomas-Fermi	p. 15
2.2.1	Cálculo de $g(\epsilon)$ na aproximação de Thomas-Fermi ou Semi-Clássica	p. 17
3	O Método das partículas-teste	p. 19
3.1	Equações de movimento para as partículas-teste	p. 21
3.2	Assinalando as partículas-teste à uma rede	p. 24
3.3	Cálculo da Força	p. 28
3.4	Estabilidade Numérica	p. 29
3.5	Simulação de um Núcleo por partículas-teste	p. 35
3.5.1	A Escolha dos Parâmetros Numéricos $\sigma$ e $N_t$	p. 35
3.5.2	A Construção do Núcleo	p. 38
3.5.3	Medidas e Propriedades do Sistema	p. 40
4	Resultado para uma perturbação periódica na densidade nuclear	p. 46
4.1	Inicialização	p. 47

4.1.1	Sorteio das coordenadas das partículas-teste . . . . .	p. 48
4.1.2	Testando a coordenada $z$ . . . . .	p. 48
4.2	Resultados . . . . .	p. 49
5	Conclusão . . . . .	p. 54
	Apêndice A – A Equação de Poisson . . . . .	p. 56
	A.1 Representação Contínua . . . . .	p. 56
	A.2 Representação Discreta . . . . .	p. 57
	Apêndice B – Cálculo Numérico de Derivadas . . . . .	p. 59
	Apêndice C – Distribuição esféricamente simétrica . . . . .	p. 62
	Referências . . . . .	p. 64

# 1 INTRODUÇÃO

No presente trabalho buscamos estabelecer os conhecimentos teórico e técnico necessários pra se trabalhar com sistemas nucleares do ponto de vista de uma teoria de muitos corpos semiclássica. Como teoria principal estudamos a equação de Vlasov que é uma das mais usadas no tratamento deste tipo de problema, tanto na descrição da matéria nuclear como em núcleos finitos. Simulações de reações de íons pesados são baseadas na solução da equação de Vlasov com o termo de colisão [1]. A ferramenta computacional estudada aqui é o que vem sendo chamado de Método das Partículas-Teste (M.P.T.).

A equação de Vlasov em sua essência trata da evolução temporal de um corpo no espaço de fase. Por exemplo, um sistema com  $N$  partículas em um espaço tridimensional será tratado, do ponto de vista da equação de Vlasov, como um problema de um corpo em um espaço  $6N$  dimensional, ou seja, para cada partícula temos as 3 coordenadas espaciais mais as 3 coordenadas de momento. Esta equação foi desenvolvida por Vlasov no final dos anos 30 como uma base fenomenológica no estudo de plasmas. A equação de Vlasov descreve a dinâmica de um sistema composto de partículas que interagem fracamente entre si mas com forte comportamento coletivo, sistema esse que pode ser bem descrito com a utilização de um campo médio. Esta equação pode ser derivada como uma equação simples de transporte ou ainda derivada à partir de teorias de muitos corpos como a BBGKY [2], nesta teoria por exemplo, para densidades de distribuições assume-se que a função de distribuição para dois corpos pode ser reduzida ao produto de duas funções de distribuição de um corpo. A equação de Vlasov corresponde à redução clássica da teoria de campo médio quântica e dependente do tempo



chamada Hartree-Fock (TDHF) [3].

No capítulo 2 discutimos a equação de Vlasov e suas principais aplicações. A equação que trata de distribuições no espaço de fase é deduzida com base em uma analogia com a equação da continuidade. É encontrada a equação da continuidade para um espaço de seis dimensões e após algumas manipulações algébricas encontra-se a própria equação de Vlasov. É feita uma breve revisão sobre a distribuição de Fermi e a energia de Fermi. Na mesma seção é apresentada a aproximação semi-clássica de Thomas-Fermi para a obtenção do número de ocupação por partícula.

No capítulo 3 é introduzido o Método matemático e computacional chamado de Método das Partículas-Teste (M.P.T.). A idéia principal deste método é preencher o espaço de fase com um grande número de partículas-teste, as quais vão representar as partículas reais na simulação. Após isso são deduzidas as equações de movimento para as partículas-teste. Neste capítulo definimos qual será o potencial de interação entre as partículas e como será realizado o seu cálculo. O potencial escolhido é o potencial de Skyrme, na sua forma reduzida, dada a sua simplicidade na dependência com a densidade de partículas. Esta escolha também se deve ao grande número de publicações na área da física nuclear que se utilizam do potencial de Skyrme e obtêm excelentes resultados. No futuro pretendemos levar em conta a interação eletromagnética entre as partículas e introduzir a diferenciação entre prótons e nêutrons com o objetivo de descrever a matéria das estrelas de nêutrons, e para isso deveremos resolver equações para potenciais do tipo Poisson. É encontrada uma breve demonstração de como se trabalhar com esse tipo de potencial no apêndice A. Após a escolha do potencial demonstramos o modo de se trabalhar com este. Um dos desafios presentes na equação de Vlasov está em sua auto-consistência. Mais especificamente percebe-se que a função de distribuição depende do potencial, e este por sua vez depende da função de distribuição. Para se tratar com este problema é largamente usado o conceito de potencial médio. É introduzida uma rede discreta no espaço sendo que a densidade e o potencial médio são então calculados nos pontos desta rede. Trabalhar com uma rede é em si mesmo um problema que exige muitos cuidados. Neste capítulo apresentamos algumas soluções neste sentido e também as

várias possibilidades na escolha da rede a ser implementada. Após isto é discutido alguns cuidados numéricos no cálculo das forças que atuam sobre cada partícula-teste. No final do capítulo é apresentado um dos problemas de se trabalhar com partículas-teste, a inevitável termalização do sistema. A termalização consiste na constante caminhada que o sistema, inicialmente uma distribuição de Fermi, faz em direção a uma distribuição clássica. No entanto, é possível identificar quais os parâmetros numéricos fundamentais no momento de se escolher um sistema que termalize tão tardiamente quanto necessário.

No capítulo 4 aplicamos o M.P.T. na investigação de pequenas perturbações na densidade da matéria nuclear. A densidade do sistema escolhido é perturbada de sua densidade de equilíbrio de forma periódica no espaço. É escolhida a direção  $z$  para a perturbação como uma forma de simplificar o tratamento numérico. Por esta razão também é implementada uma rede assimétrica com um número de células maior na direção  $z$ . Após isso são apresentados os resultados na evolução temporal da matéria nuclear e o modo como a matéria oscila até atingir a densidade de equilíbrio. Isso é mostrado através de gráficos feitos em alguns momentos da oscilação e também por um gráfico da evolução do número de ocupação.

No capítulo 5 fazemos uma análise crítica do que foi apresentado e discutimos as perspectivas para trabalhos futuros.

## 2 EQUAÇÃO DE VLASOV

A equação de Vlasov é uma das equações mais usadas para descrever a dinâmica semiclássica de um sistema de muitos corpos. É uma alternativa à descrição quântica que é muito mais complexa. Também desempenha um papel central no tratamento de campos médios dependentes do tempo, tanto clássicos como semiclássicos. Originalmente foi proposta por Vlasov [4] no estudo fenomenológico da física dos plasmas. Mas desde então vem sendo usada em vários problemas físicos dos mais variados tipos, desde gravitação [5], passando por semicondutores [6] até física nuclear [1]. Para os nossos propósitos vamos derivar a equação de Vlasov a partir da conservação de massa; para uma discussão mais aprofundada no âmbito das teorias de muitos corpos, como a hierarquia BBGKY, pode-se consultar a referência [3].

No espaço de fase, a descrição completa de um sistema composto por  $N$  partículas pode ser atribuída à função  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ , que corresponde ao número de partículas cujas posições se encontram no volume  $d\mathbf{r}$  em torno de  $\mathbf{r}$  e as velocidades se encontram no volume  $d\mathbf{v}$  em torno de  $\mathbf{v}$ , no tempo  $t$ . Esta função é chamada de distribuição no espaço de fase. Vamos assumir aqui o caso mais simples onde colisões entre as partículas podem ser ignoradas. Como já foi dito, Vlasov buscou uma equação para aplicar à física dos plasmas. E plasmas são justamente gases altamente ionizados em que as partículas carregadas que o constituem são caracterizadas por um comportamento quase exclusivamente coletivo [7], onde as colisões podem ser desprezadas.

Num sistema clássico determinístico, uma vez que se conheçam as condições iniciais de um sistema, as equações de movimento nos permitem conhecer qualquer

estado deste sistema num dado tempo. Em se tratando da função de distribuição, precisamos conhecer a equação de evolução da  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ . Temos seis coordenadas no espaço de fase, três para a posição e três para a velocidade. Para facilitar nosso tratamento definimos um vetor ( $\mathbf{w}$ ) no espaço de fase com estas seis coordenadas

$$(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \equiv \mathbf{w} = (w_1, \dots, w_6). \quad (2.1)$$

Também definimos o vetor  $\dot{\mathbf{w}}$  que por analogia desempenha no espaço de fase o papel da velocidade no espaço de coordenadas

$$\dot{\mathbf{w}} = (\dot{\mathbf{r}}, \dot{\mathbf{v}}). \quad (2.2)$$

E definimos ainda um volume ( $\Gamma$ ) no espaço de fase onde

$$d\Gamma \equiv d\mathbf{r}d\mathbf{v}. \quad (2.3)$$

Usando as definições anteriores, e sendo  $m$  a massa de uma partícula, encontramos a massa de todas as partículas com a integral em todas as posições e velocidades

$$M = m \int_{\Gamma} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\Gamma. \quad (2.4)$$

Desejamos saber como esta massa de partículas evolui no tempo. Assim, derivando no tempo

$$\frac{dM}{dt} = m \int_{\Gamma} \frac{\partial f}{\partial t} d\Gamma. \quad (2.5)$$

Nota-se que ao passar a derivada para dentro do integrando, esta passa a ser uma derivada parcial pois  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  é uma função de seis outras variáveis além do tempo.

Vamos relacionar agora a taxa de variação da massa de partículas com o fluxo de  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ . Consideremos uma superfície fechada  $\Sigma$  no espaço de fase. O fluxo ( $\varphi$ ) de  $f$  através de  $\Sigma$  é dado por

$$\varphi = m \oint_{\Sigma} f \dot{\mathbf{w}} \cdot d\Sigma. \quad (2.6)$$

Por conservação de massa, o fluxo  $\varphi$  de partículas que saem do volume delimitado pela superfície deve corresponder à uma variação negativa na massa interna

$$\frac{dM}{dt} = -\varphi,$$

$$\frac{dM}{dt} = -m \oint_{\Sigma} f \dot{\mathbf{w}} \cdot d\Sigma. \quad (2.7)$$

Pelo teorema de Gauss reescrevemos a integral de superfície

$$\frac{dM}{dt} = -m \int_{\Gamma} \nabla(f \dot{\mathbf{w}}) d\Gamma, \quad (2.8)$$

onde o divergente é definido em seis dimensões

$$\nabla \equiv \sum_{\alpha=1}^6 \frac{\partial}{\partial w_{\alpha}}. \quad (2.9)$$

Combinando a Eq.(2.5) com a Eq.(2.8), ambas para a taxa de variação da massa, temos

$$\int_{\Gamma} \frac{\partial f}{\partial t} d\Gamma = - \int_{\Gamma} \nabla(f \dot{\mathbf{w}}) d\Gamma, \quad (2.10)$$

ou reescrevendo

$$\int_{\Gamma} \left[ \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla(f \dot{\mathbf{w}}) \right] d\Gamma = 0, \quad (2.11)$$

como o volume é arbitrário, temos

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla(f \dot{\mathbf{w}}) = 0, \quad (2.12)$$

esta é a equação da continuidade para a função  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ .

Podemos reescrever o termo que envolve o divergente, explicitando as coor-

denadas

$$\nabla(f\dot{\mathbf{w}}) = \sum_{\alpha=1}^6 \frac{\partial(f\dot{w}_\alpha)}{\partial w_\alpha} = \sum_{\alpha=1}^6 \left[ \dot{w}_\alpha \frac{\partial f}{\partial w_\alpha} + f \frac{\partial \dot{w}_\alpha}{\partial w_\alpha} \right], \quad (2.13)$$

o último termo à direita pode ser reescrito explicitando-se as coordenadas espaciais e de velocidades

$$\sum_{\alpha=1}^6 f \frac{\partial \dot{w}_\alpha}{\partial w_\alpha} = f \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} + f \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \dot{v}_i}{\partial v_i}, \quad (2.14)$$

que se anula porque as coordenadas e velocidades generalizadas são independentes e porque neste caso o potencial não depende das velocidades. O que resta então

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^6 \dot{w}_\alpha \frac{\partial f}{\partial w_\alpha} = 0, \quad (2.15)$$

ou usando a definição de derivada total temos

$$\frac{df}{dt} = 0, \quad (2.16)$$

que significa que para um sistema sem colisões a função de distribuição se conserva no espaço de fase. Explicitando as coordenadas generalizadas na Eq.(2.15) chegamos a

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = 0,$$

ou ainda

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\nabla U}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0, \quad (2.17)$$

que é conhecida como *equação de Boltzmann* para um sistema sem colisões, também chamada de *equação de Vlasov*. A força é definida através do potencial

$$\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla U. \quad (2.18)$$

É mais comum na literatura especializada que a equação de Vlasov venha como dependente do momento no lugar da velocidade, então

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \nabla U \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (2.19)$$

Em geral,  $U$  é tomado como sendo um potencial dependente da distribuição das partículas (por exemplo o potencial de Skyrme), ou seja, um campo médio.

## 2.1 SISTEMA FERMIÔNICO A $T = 0$

Para acompanhar a evolução no tempo da equação de Vlasov (2.19) devemos preencher o espaço de fase em  $t = 0$ , ou seja, fornecer uma  $f_0 = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, 0)$ . Como desejamos simular um sistema nuclear é evidente que a distribuição deve se referir a férmions, ou seja, partículas que obedecem ao princípio de exclusão de Pauli. O número de ocupação  $N(\epsilon_i)$  (número de partículas em um estado de energia  $i$ ) a uma temperatura  $T$  referente à distribuição de Fermi-Dirac é dado por

$$N(\epsilon_i) = \frac{g(\epsilon_i)}{\exp(\epsilon_i - \mu)/kT + 1}, \quad (2.20)$$

onde  $k$  é a constante de Boltzmann,  $\mu$  o potencial químico,  $\epsilon_i$  a energia do estado  $i$ , e  $g(\epsilon_i)$  é o peso estatístico do estado de energia  $i$  (este leva em conta a degenerescência do estado). Defini-se como  $n(\epsilon_i)$  o número de ocupação por partícula a quantidade  $N(\epsilon_i)/g(\epsilon_i)$ , portanto

$$n(\epsilon_i) = \frac{1}{\exp(\epsilon_i - \mu)/kT + 1}. \quad (2.21)$$

Neste trabalho vamos usar distribuições de Fermi onde a temperatura  $T = 0$ . Quando  $T \rightarrow 0$  o potencial químico  $\mu$  se iguala à energia denominada energia de Fermi  $\epsilon_F$ . Neste limite todos os níveis de energia abaixo de  $\epsilon_F$  estão preenchidos e todos os níveis acima estão vazios. Ou seja,  $n(\epsilon_i)$  é dado por uma função degrau

$$n(\epsilon_i) = \begin{cases} 1, & \epsilon_i < \epsilon_F \\ 0, & \epsilon_i > \epsilon_F \end{cases}$$

$$n(\epsilon_i) = \Theta(\epsilon_F - \epsilon_i). \quad (2.22)$$

Na Fig. 1 vemos a diferença entre a distribuição de Fermi e a distribuição de

Boltzmann.

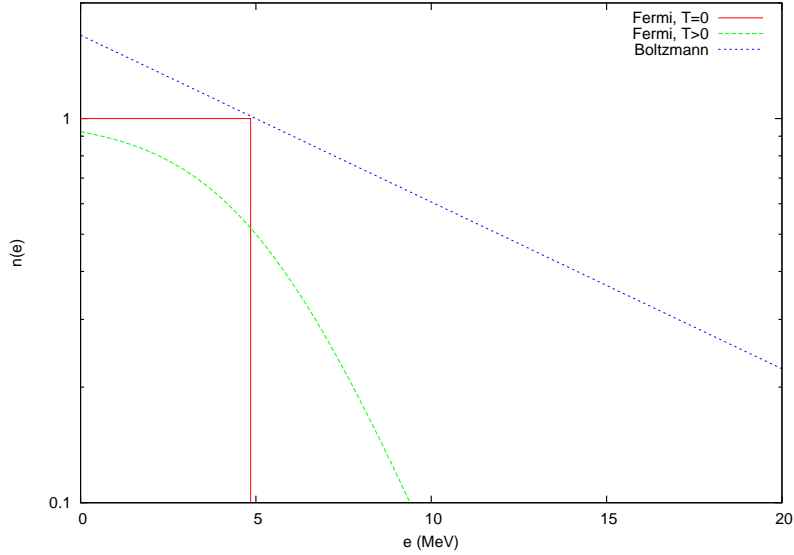


FIGURA 1: Gráfico comparativo entre as diferentes estatísticas para a distribuição de energia: A distribuição de Fermi e a distribuição de Boltzmann. Também é mostrado o gráfico para uma distribuição de Fermi para temperatura diferente de zero.

## 2.2 CÁLCULO DO NÚMERO DE OCUPAÇÃO NA APROXIMAÇÃO DE THOMAS-FERMI

Vamos a seguir calcular o número de ocupação na aproximação semi-clássica  $n(\epsilon_i)$  definido na Eq.(2.21). A noção de número de ocupação foi introduzida na seção anterior e é emprestada da mecânica quântica no caso do espectro discreto. No caso do formalismo semi-clássico de Vlasov o conceito de número de ocupação se transforma em densidade de ocupação contínua  $n(\epsilon)$  no espaço de fase clássico. A fim de obter  $n(\epsilon)$  vamos primeiro considerar a densidade de níveis de partícula independente,  $g(\epsilon)$ , ao qual  $n(\epsilon)$  está relacionado. Por definição

$$g(\epsilon) \equiv Tr[\delta(\epsilon - h)]. \quad (2.23)$$



A grandeza  $g(\epsilon)$  conta o número de níveis de energia de partícula independente por unidade de energia.

Usando uma base da hamiltoniana de partícula independente,  $h$ ,

$$h|i\rangle = \epsilon|i\rangle,$$

$$\begin{aligned} g(\epsilon) &= \sum_i \langle i|\delta(\epsilon - h)|i\rangle \\ &= \sum_i \delta(\epsilon - \epsilon_i). \end{aligned} \quad (2.24)$$

É óbvio que o número de estados (níveis) com energia menor ou igual a  $\epsilon$  é dado por

$$N(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\epsilon} g(\epsilon')d\epsilon'. \quad (2.25)$$

Assim, um incremento infinitesimal em  $N(\epsilon)$ , ou seja, o número de níveis com energia entre  $\epsilon$  e  $\epsilon + d\epsilon$  é dado por

$$dN(\epsilon) = \int_{\epsilon}^{\epsilon+d\epsilon} g(\epsilon')d\epsilon' \quad (2.26)$$

$$= g(\epsilon)d\epsilon. \quad (2.27)$$

No caso do formalismo de Vlasov, em qualquer instante  $t$  conhecemos a posição  $\mathbf{r}_i$  e o momento  $\mathbf{p}_i$  de cada partícula-teste e portanto também conhecemos a energia de cada partícula

$$\epsilon_i = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i). \quad (2.28)$$

Vamos definir  $D(\epsilon)$  como o número de partículas-teste com energia entre  $\epsilon$  e  $\epsilon + d\epsilon$ . Como  $g(\epsilon)$  nos dá o número de níveis de energia de partícula independente entre  $\epsilon$  e  $d\epsilon$  sabemos que

$$n(\epsilon)g(\epsilon) = D(\epsilon), \quad (2.29)$$

### 2.2.1 CÁLCULO DE $g(\epsilon)$ NA APROXIMAÇÃO DE THOMAS-FERMI OU SEMI-CLÁSSICA

Definindo o operador hamiltoniano de uma partícula independente como  $\hat{h}|n\rangle = \epsilon_n|n\rangle$  temos que

$$g(\epsilon) = Tr[\delta(\epsilon - \hat{h})] = \sum_n \langle n | \delta(\epsilon - \hat{h}) | n \rangle. \quad (2.30)$$

Na aproximação semiclássica

$$Tr \rightarrow 2 \int \frac{d^3r d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$\hat{h} \rightarrow h \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad (2.31)$$

Aplicando esta definição clássica em 2.30 temos

$$\begin{aligned} g(\epsilon) &\simeq 2 \int \frac{d^3r d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \delta(\epsilon - h) \\ &= 2 \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r \int d^3p \delta\left(\epsilon - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - U(\mathbf{r})\right), \end{aligned} \quad (2.32)$$

como

$$\begin{aligned} \delta\left(\epsilon - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - U(\mathbf{r})\right) &= \delta\left(\frac{1}{2m}(2m(\epsilon - U) - \mathbf{p}^2)\right) \\ &= \delta\left(\frac{1}{2m}(\sqrt{2m(\epsilon - U)} - p)(\sqrt{2m(\epsilon - U)} + p)\right), \end{aligned} \quad (2.33)$$

temos que a integral de  $\delta$  no espaço dos momentos

$$\begin{aligned} &\int d^3p \delta\left(\epsilon - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - U(\mathbf{r})\right) = \\ &= 4\pi \int_0^\infty p^2 dp \delta\left(\frac{1}{2m}(\sqrt{2m(\epsilon - U)} - p)(\sqrt{2m(\epsilon - U)} + p)\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 4\pi 2m \int_0^\infty p^2 dp \frac{1}{p + \sqrt{2m(\epsilon - U(\mathbf{r}))}} \delta\left(\sqrt{2m(\epsilon - U(\mathbf{r}))} - p\right) \\
&= 4\pi m \sqrt{2m} (\epsilon - U(\mathbf{r}))^{1/2}.
\end{aligned} \tag{2.34}$$

Substituindo este último resultado na Eq.(2.32)

$$\begin{aligned}
g(\epsilon) &= \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r 4\pi m \sqrt{2m} (\epsilon - U(\mathbf{r}))^{1/2} \\
&= \frac{2}{4\pi^2} \int d^3r \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} (\epsilon - U(\mathbf{r}))^{1/2},
\end{aligned} \tag{2.35}$$

como  $p \geq 0$  é equivalente escrever [3][8]

$$g(\epsilon) = \frac{2}{4\pi^2} \int d^3r \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \Theta(\epsilon - U(\mathbf{r})). \tag{2.36}$$

No capítulo 3 será mostrado a maneira prática de se resolver a Eq.(2.36) e após isso obter-se o número de ocupação por partícula  $n(\epsilon)$ .

### 3 O MÉTODO DAS PARTÍCULAS-TESTE

Como visto, devemos resolver a equação de Vlasov

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \nabla U \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0, \quad (3.1)$$

para a função de distribuição  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ . É difícil resolver a Eq(3.1) exatamente já que  $f$  é uma função no espaço de fase, ou seja, tem sete dimensões levando em consideração o tempo. Outra dificuldade está na auto-consistência presente na equação de Vlasov, pois o potencial depende da configuração no espaço de fase, ou seja, depende de  $f$ , porém para obtermos  $f$  precisamos do potencial  $U(\mathbf{r})$ .

Um dos métodos mais usados para se resolver a equação 3.1 é o chamado método das partículas-teste. Basicamente um número  $AN_t$  de partículas-teste é usado na simulação de eventos com  $A$  partículas reais (que no caso em estudo aqui são nucleons). Então, enquanto a equação de Vlasov aproxima por um método semiclassico o problema físico de muitos corpos pela evolução de uma distribuição de 1 corpo no espaço de fase, o M.P.T. (Método das partículas-teste) substitui a equação de Vlasov por um problema numérico que consiste em calcular a evolução temporal de um sistema de muitas partículas [9]. A principal vantagem do uso de muitas pseudo-partículas é que com isto a função de distribuição é suavizada tornando o cálculo numérico mais estável e preciso.

A função  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  é interpretada como uma função de distribuição clássica no espaço de fase e é representada por um grande número de partículas-teste. Cada partícula teste é representada por uma distribuição  $g_r(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)g_p(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i)$  no tempo  $t$ ,

onde  $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$  são as coordenadas da partícula-teste de rótulo  $i$  no espaço de fase e  $g_r$  e  $g_p$  são funções convenientes. A escolha natural para  $g_r g_p$  seriam funções  $\delta$  de Dirac. Porém, por razões de eficiência numérica como veremos na próxima seção, para obtermos o potencial médio  $U(\mathbf{r})$  devemos substituir o espaço por uma rede formada por pontos igualmente espaçados. Somente nesses pontos são obtidos o potencial e a própria  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ . Com a introdução desta rede não podemos mais ver as partículas como sendo pontuais. Dada a rede devemos especificar como as partículas são assinaladas nos pontos de rede [10].

Existem várias maneiras de se assinalar a partícula nos pontos de rede como por exemplo o método chamado NGP (Nearest Grid Point). Neste caso a partícula é associada ao ponto de rede mais próximo. O esquema mais popular e que vamos usar aqui é o chamado CIC (Cloud-in-Cell). Neste esquema cada partícula-teste é vista como uma distribuição suave de largura  $\sigma$  centrada em  $\mathbf{r}_i$ .

Como é usual na literatura usaremos gaussianas para representar as partículas-teste no espaço de fase, desta forma a distribuição fica

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{AN_t} g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, \mathbf{p} - \mathbf{p}_i), \quad (3.2)$$

onde  $N_t$  é o número de partículas-teste por nucleon e

$$g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, \mathbf{p} - \mathbf{p}_i) = g_r(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) g_p(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i). \quad (3.3)$$

E vamos assumir que  $g_r$  e  $g_p$  são gaussianas normalizadas

$$g_r(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}} \sigma^3} e^{-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t))^2}{2\sigma^2}},$$

$$g_p(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)) = \frac{\sigma^3}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{\sigma^2(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t))^2}{2}}. \quad (3.4)$$

### 3.1 EQUAÇÕES DE MOVIMENTO PARA AS PARTÍCULAS-TESTE

Vamos apresentar aqui as bases de uma implementação numérica no intuito de resolver a equação de Vlasov. Desejamos com isto descrever a evolução temporal de um sistema de partículas. Em qualquer momento a distribuição de partículas no espaço de fase é dada pela função  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ . Usaremos aqui uma notação simplificada

$$\begin{aligned}\delta_t &\equiv \frac{\delta}{\delta t}, \\ \delta_{\mathbf{r}} &\equiv \nabla_{\mathbf{r}}, \\ \delta_{\mathbf{p}} &\equiv \nabla_{\mathbf{p}}.\end{aligned}\tag{3.5}$$

Usando a notação (3.5) a equação de Vlasov pode ser escrita como

$$\partial_t f + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \partial_{\mathbf{r}} f - \partial_{\mathbf{r}} U \partial_{\mathbf{p}} f = 0.\tag{3.6}$$

Adotamos a normalização

$$\int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = A,\tag{3.7}$$

onde  $A$  é o número de partículas reais.

Como já dissemos vamos usar gaussianas para representar as partículas no espaço de fase. Usando  $N_t$  partículas-teste para cada partícula real a distribuição é dada pela Eq.(3.2). Agora substituindo a Eq.(3.2) na Eq.(3.6)

$$\sum_{i=1}^{AN_t} \left[ \partial_t g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, \mathbf{p} - \mathbf{p}_i) + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \partial_{\mathbf{r}} g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, \mathbf{p} - \mathbf{p}_i) - \partial_{\mathbf{r}} U \cdot \partial_{\mathbf{p}} g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, \mathbf{p} - \mathbf{p}_i) \right] = 0\tag{3.8}$$

Integrando em  $d^3\mathbf{p}$  obtemos

$$\sum_{i=1}^{AN_t} \int d^3\mathbf{p} \left[ \partial_t g + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \partial_{\mathbf{r}} g - \partial_{\mathbf{r}} U \cdot \partial_{\mathbf{p}} g \right] = 0$$

$$\sum_{i=1}^{AN_t} \left[ \partial_t \int d^3 \mathbf{p} g + \int d^3 \mathbf{p} \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \partial_{\mathbf{r}} g - \partial_{\mathbf{r}} U \cdot \int d^3 \mathbf{p} \partial_{\mathbf{p}} g \right] = 0 \quad (3.9)$$

Usando a forma dada pela Eq.(3.3) para  $g$  obtemos

$$\sum_{k=1}^{AN_t} \left[ \partial_t g_r \int d^3 \mathbf{p} g_p + \partial_{\mathbf{r}} g_r \cdot \int d^3 \mathbf{p} \frac{\mathbf{p}}{m} g_p - \partial_{\mathbf{r}} U \cdot \int d^3 \mathbf{p} \partial_{\mathbf{p}} g_r g_p \right] = 0 \quad (3.10)$$

Como dissemos, as gaussianas são normalizadas

$$\int d^3 \mathbf{p} g_p = 1. \quad (3.11)$$

Além disso

$$\int d^3 \mathbf{p} \partial_{\mathbf{p}} g_p = 0, \quad (3.12)$$

por paridade. Portanto

$$\sum_{i=1}^{AN_t} \left[ \partial_t g_r + \frac{1}{m} \int d^3 \mathbf{p} \mathbf{p} \cdot \partial_{\mathbf{r}} (g_r g_p) \right] = 0. \quad (3.13)$$

Pela Eq.(3.3)  $g_r$  não depende do momento, o que reduz a Eq.(3.13) a

$$\sum_{i=1}^{AN_t} \left[ \partial_t g_r + \frac{1}{m} \int d^3 \mathbf{p} g_p \mathbf{p} \cdot \partial_{\mathbf{r}} g_r \right] = 0. \quad (3.14)$$

Além disso usaremos as relações

$$\partial_t g_r(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k(t)) = -\partial_{\mathbf{r}} g_r \cdot \dot{\mathbf{r}}_k(t), \quad (3.15)$$

$$\int d\mathbf{p} g_p(\mathbf{p} - \mathbf{p}_k(t)) = \mathbf{p}_k(t) \int d\mathbf{p}' g_p(\mathbf{p}') = \mathbf{p}_k(t), \quad (3.16)$$

$$\mathbf{p}' \equiv \mathbf{p} - \mathbf{p}_k(t).$$

Substituindo (3.15) e (3.16) em (3.14) encontramos

$$\sum_{i=1}^{AN_t} \left[ -\partial_{\mathbf{r}} g_r \cdot \dot{\mathbf{r}}_i(t) + \frac{\mathbf{p}_i(t)}{m} \cdot \partial_{\mathbf{r}} g_r \right] = 0,$$

$$\sum_{i=1}^{AN_t} \partial_{\mathbf{r}} g_r \cdot \left[ -\dot{\mathbf{r}}_i(t) + \frac{\mathbf{p}_i(t)}{m} \right] = 0 . \quad (3.17)$$

Temos portanto a primeira equação de movimento de uma partícula-teste de índice  $i$

$$\dot{\mathbf{r}}_i(t) = \frac{\mathbf{p}_i(t)}{m} . \quad (3.18)$$

Seguindo o mesmo roteiro, mas desta vez integrando a Eq.(3.8) em  $d^3\mathbf{r}$

$$\sum_{k=1}^N \int d^3\mathbf{r} \left[ \partial_t g + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \partial_{\mathbf{r}} g - \partial_{\mathbf{r}} U \cdot \partial_{\mathbf{p}} g \right] = 0 , \quad (3.19)$$

$$\sum_{k=1}^N \left[ \partial_t \int d^3\mathbf{r} g + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \partial_{\mathbf{r}} \int d^3\mathbf{r} g - \int d^3\mathbf{r} \partial_{\mathbf{r}} U \cdot \partial_{\mathbf{p}} g \right] = 0 . \quad (3.20)$$

Usando a forma dada pela Eq.(3.3) para  $g$  obtemos

$$\sum_{k=1}^N \left[ \partial_t g_p \int d^3\mathbf{r} g_r + \int d^3\mathbf{r} \partial_{\mathbf{r}} U \cdot \partial_{\mathbf{p}} g_r g_p \right] = 0 . \quad (3.21)$$

Pela normalização de  $g_r$  simplifica-se para

$$\sum_{i=1}^{AN_t} \left[ \partial_t g_p - \int d^3\mathbf{r} g_r (\partial_{\mathbf{r}} U \cdot \partial_{\mathbf{p}} g_p) \right] = 0 . \quad (3.22)$$

Usando a relação

$$\partial_t g_p(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)) = -\partial_{\mathbf{p}} g_p \cdot \dot{\mathbf{p}}_i(t) , \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{AN_t} \left[ -\partial_{\mathbf{p}} g_p \cdot \dot{\mathbf{p}}_i(t) - \int d^3\mathbf{r} g_r (\partial_{\mathbf{r}} U \cdot \partial_{\mathbf{p}} g_p) \right] &= 0, \\ \sum_{i=1}^{AN_t} \partial_{\mathbf{p}} g_p \cdot \left[ \dot{\mathbf{p}}_i(t) + \int d^3\mathbf{r} g_r (\partial_{\mathbf{r}} U) \right] &= 0 . \end{aligned} \quad (3.24)$$

De forma semelhante obtemos a segunda equação de movimento para uma partícula-teste

$$\dot{\mathbf{p}}_i(t) = - \int d^3\mathbf{r} g_r \partial_{\mathbf{r}} U . \quad (3.25)$$



## 3.2 ASSINALANDO AS PARTÍCULAS-TESTE À UMA REDE

Como foi dito no capítulo anterior o potencial auto-consistente do problema físico é substituído por um potencial médio. Para calcular este potencial médio é necessário que abandonemos o espaço contínuo em favor de uma rede tridimensional em cujos pontos (intersecções) será calculado o potencial. Existe uma infinidade de tipos de potenciais. Não trabalharemos com potenciais que dependem do momento das partículas (como o potencial magnético). Como aproximação usaremos potenciais que dependem exclusivamente da densidade, ou seja

$$U(\mathbf{r}) = U(\rho(\mathbf{r})) , \quad (3.26)$$

sendo que a densidade em um tempo  $t$  é dada por

$$\rho(\mathbf{r}) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p} . \quad (3.27)$$

Como exemplo de potenciais que dependem da densidade citamos o **Potencial Elétrico** e o **Potencial de Skyrme** respectivamente

$$\nabla^2 U(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r}) , \quad (3.28)$$

$$U(\mathbf{r}) = t_0 \rho(\mathbf{r}) + t_3 \rho(\mathbf{r})^2 . \quad (3.29)$$

O potencial elétrico não será mais citado neste trabalho, para uma visão geral deste problema no caso das partículas-teste ver Apêndice [A](#). Vê-se então que nosso real problema aqui é calcular as densidades das partículas no espaço e então calcular o potencial. Introduzimos aqui a rede. Chamamos de célula cada setor desta rede.

Na figura [2](#) temos o exemplo de uma rede bidimensional de lados  $L_x$  e  $L_y$ . Todas as células desta rede são iguais e possuem dimensões  $l_x$  e  $l_y$ . Vemos ainda

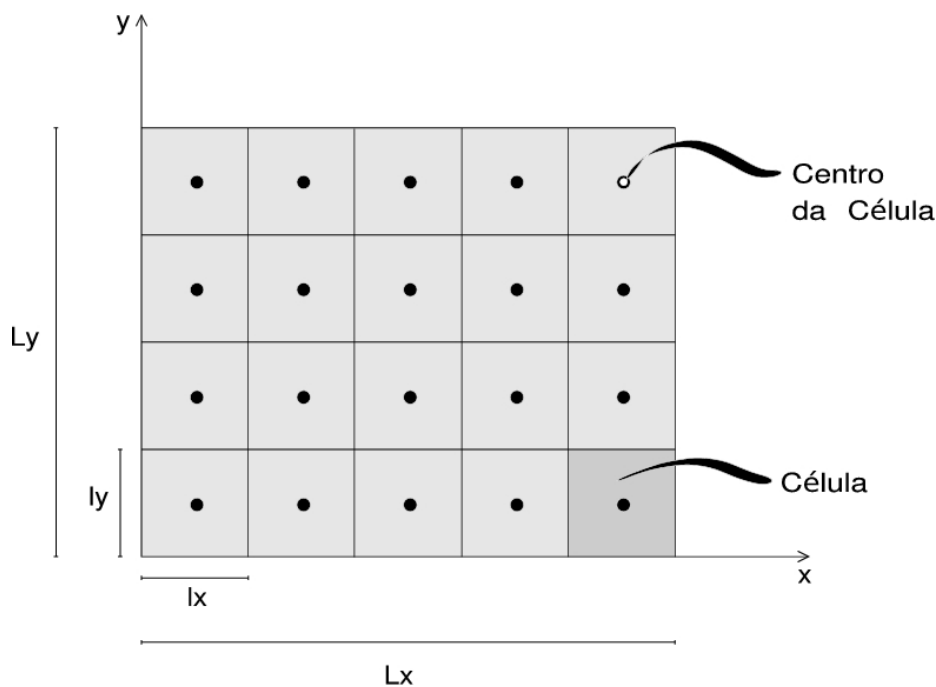


FIGURA 2: Esquema de uma rede bidimensional de dimensões  $(L_x, L_y)$  com células de dimensões  $(l_x, l_y)$ . Número de células  $N_g=20$ .

que neste caso o número de células é igual a 20. O centro de cada célula está indicado por um ponto. De fato, é nesses centros que serão calculadas as densidades e posteriormente o potencial. Pode-se fazer uma observação aqui, é possível criar redes de várias formas. Por exemplo, redes com células que variam de tamanho. Esse tipo pode ser útil para o caso onde se sabe que certas regiões possuem poucas ou nenhuma partícula, enquanto há outras regiões de grande concentração de partículas. Dessa forma teríamos mais células e portanto um potencial mais preciso nas regiões que realmente interessam. Outro tipo seria a rede onde as células são iguais porém as dimensões da rede é que são diferentes (ou seja  $L_x \neq L_y \neq L_z$ ). Este tipo de rede pode ser útil caso se deseje estudar melhor uma direção específica. Faremos isso no capítulo 4 quando introduzirmos uma perturbação na direção  $z$ .

Veremos agora como calcular as densidades das partículas em uma célula. Desenvolvendo a Eq.(3.27) usando a forma dada pela Eq.(3.3) em  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  temos

que a densidade numa célula  $g$  que está na posição  $\mathbf{r}_g$  é dada por

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{r}_g) &= \int f(\mathbf{r}_g, \mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p} , \\ \rho(\mathbf{r}_g) &= \int \left[ \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{AN_t} g_r(\mathbf{r}_g - \mathbf{r}_i) g_p(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i) \right] d^3\mathbf{p} , \\ \rho(\mathbf{r}_g) &= \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{AN_t} g_r(\mathbf{r}_g - \mathbf{r}_i) .\end{aligned}\tag{3.30}$$

Como a cada tempo é conhecida as posições das partículas-teste e da mesma forma é conhecida a posição dos centros das células é muito simples calcular a densidade através da Eq.(3.30). Porém, caso se tenha um número muito grande de partículas-teste (tipicamente maior que 200 partículas-teste por partícula-real) e uma rede com muitas células (uma rede mediana pode ser da ordem de  $40 \times 40$ ) o processo pode ser realmente muito lento.

Para tornar o processo mais rápido basta notar que na Eq.(3.30) estamos levando em conta todas as partículas no cálculo da densidade na célula  $g$ . Mas inspecionando a densidade de uma única partícula (figura 3) vemos que isto não é necessário.

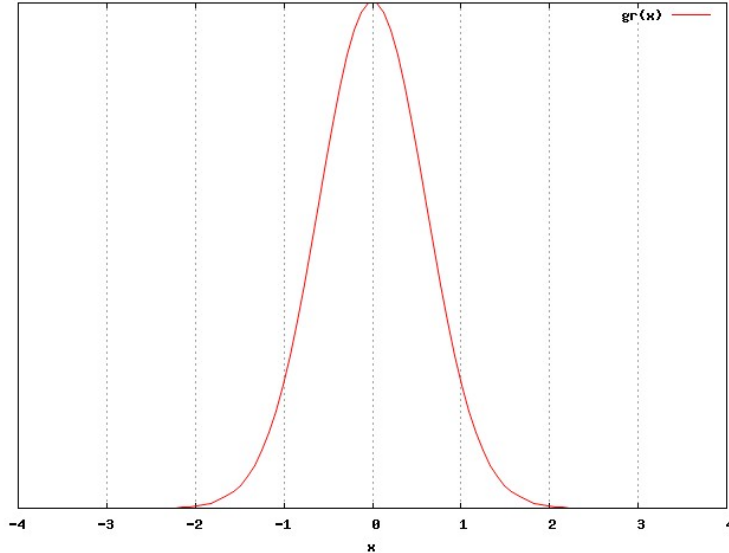


FIGURA 3: Densidade de uma partícula com largura  $\sigma = \sqrt{\frac{lx^2}{2\log 2}}$  comparada a uma rede com  $lx = 1$ .

Em algum momento a largura das gaussianas deverá ser escolhida e geralmente tem a dimensão de algumas células. Ou seja, deve-se verificar quais são as partículas que realmente contribuem para a densidade numa determinada célula. Aqui introduzimos uma maneira rápida de descobrir em qual célula está uma determinada partícula de rótulo  $i$ . Primeiro devemos especificar a maneira pela qual identificamos as células [11]. As células são numeradas iniciando-se pela célula próxima da origem em ordem crescente na direção positiva do eixo  $x$ . Assim que se chega à parede a numeração segue na próxima coluna de células em  $y$  e assim por diante. A numeração vai seguindo o mesmo esquema para os próximos níveis na direção  $z$  nos casos tridimensionais. O esquema é mostrado na figura 4. Teremos então no código do programa um array de tamanho  $Ng$  onde serão armazenadas as densidades de cada ponto da grade.

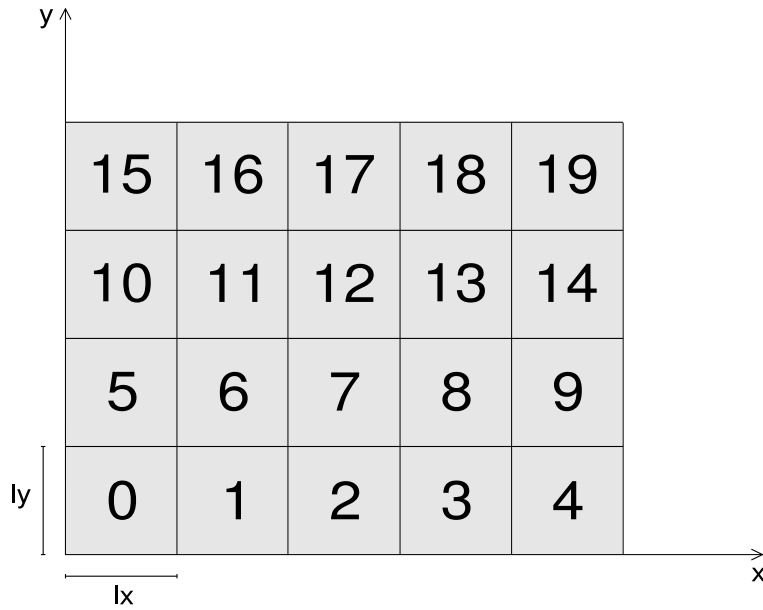


FIGURA 4: Esquema de numeração para uma rede bidimensional onde  $Ng=20$ .

Seja a posição de uma partícula  $i$  dada por  $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ . E seja a função  $\text{floor}(x)$  uma função que arredonda o valor de  $x$  para o maior inteiro não maior que  $x$ . A célula  $g$  na qual se encontra a partícula  $i$  é dada por

$$g = Nx \cdot Ny \cdot \text{floor}\left(\frac{z_i}{lz}\right) + Nx \cdot \text{floor}\left(\frac{y_i}{ly}\right) + \text{floor}\left(\frac{x_i}{lx}\right). \quad (3.31)$$

Desde que a numeração das células siga o critério da figura 4 a relação (3.31) fornece rapidamente a célula na qual se encontra a partícula  $i$ . A partir dessa informação pode-se calcular as densidades das partículas apenas nas células relevantes (a própria onde a partícula está e suas primeiras vizinhas).

### 3.3 CÁLCULO DA FORÇA

O processo de obter-se a força sentida por cada partícula inicia-se ao guardar na memória as densidades em cada célula do espaço discreto. Existe nesta etapa a chance de se melhorar a performance do programa e reduzir sensivelmente o tempo de cálculo.

Primeiramente notamos que a Eq.(3.25), cuja integral se dá sobre o espaço, deve ser reescrita na forma discreta já que nosso espaço foi substituído por uma rede. Então

$$\dot{\mathbf{p}}_i(t) = - \sum_{\nu=1}^{Ng} g_r(\mathbf{r}_\nu - \mathbf{r}_i) \partial_{\mathbf{r}_\nu} U(\mathbf{r}_\nu) , \quad (3.32)$$

onde  $Ng$  é o número de células na rede. Aqui percebemos que é necessário calcular a quantidade  $g_r(\mathbf{r}_\nu - \mathbf{r}_i)$  que não é nada além da densidade de uma única partícula na célula  $\nu$ . Essa quantidade já é calculada enquanto é obtida a densidade de partículas em cada célula na Eq.(3.27). Assim é interessante que a densidade individual de cada partícula ( $g_r$ ) também seja guardada na memória assim como a densidade total ( $\rho$ ). Deve-se usar de bom senso neste caso. Naturalmente quando o número de partículas for pequeno o cálculo de  $g_r$  não acarretará uma grande perda de tempo no cálculo geral. Deve-se ter em mente também a quantidade de memória que já está sendo usada pelo programa. Se o número de partículas for demasiadamente elevado (maior que  $5 \cdot 10^5$  para uma memória menor que 1Gb por exemplo) pode ser inviável guardar mais esta informação na memória RAM.

Agora vejamos o segundo termo na Eq.(3.32). Trata-se é claro de um gradiente aplicado ao potencial. Novamente cuidados devem ser tomados aqui já que não possuímos um espaço contínuo e obviamente o potencial foi calculado apenas nas células. Note que este termo é uma espécie de campo vetorial discreto, e definimos

como

$$\mathbf{F}_\nu \equiv - \partial_{\mathbf{r}_\nu} U(\mathbf{r}_\nu) , \quad (3.33)$$

já levando em conta o sinal negativo. Reescrevendo a Eq.(3.32)

$$\dot{\mathbf{p}}_i(t) = \sum_{\nu=1}^{Ng} g_r(\mathbf{r}_\nu - \mathbf{r}_i) \mathbf{F}_\nu . \quad (3.34)$$

Resolvemos este gradiente pelo método das diferenças finitas (ver Apêndice B). É reiterado aqui o cuidado com o número de células (Ng). A precisão no cálculo no gradiente da Eq.(3.33) não depende, é claro, diretamente do número de células mas sim da largura de cada célula. Esquemas similares [3] são resolvidos com uma largura de célula da ordem de 0.5 na unidade em que se está trabalhando. É óbvio que quanto menor a largura das células melhor será o cálculo do gradiente no espaço. Mas não se deve esquecer que reduzir a largura das células implica em ter de aumentar o número de células para que se possa abranger o espaço a ser estudado.

O esquema para encontrar a força sobre uma partícula é então:

- Encontrar nas células a densidade total  $\rho(\mathbf{r}_\nu)$  e as densidades individuais  $g_r(\mathbf{r}_\nu - \mathbf{r}_i)$ ;
- Calcular o potencial nas células:  $U(\mathbf{r}_\nu) = U(\rho(\mathbf{r}_\nu))$ ;
- Calcular  $\mathbf{F}_\nu$ ;
- Resolver a Eq.(3.34).

### 3.4 ESTABILIDADE NUMÉRICA

Como já dissemos, o método das partículas-teste (M.P.T.) substitui um problema de um corpo no espaço de fase pela evolução de um sistema de muitos corpos. Aqui devemos lembrar que estamos tratando com a equação de Vlasov e portanto não deveríamos perceber na evolução de nosso sistema a interação entre as partículas-teste de forma individual. A equação que trata da interação

partícula-partícula é a Equação de Boltzmann.

Um exemplo do modo como estas interações partícula-partícula levam a resultados errados é a chamada **termalização das partículas-teste** [3] [9]. É imposto inicialmente ao sistema nuclear o princípio de Pauli, ou seja, que em qualquer lugar do espaço de fase  $f \leq 4/h^3$ . Pela equação de Vlasov esta condição é preservada com o tempo de forma exata. No entanto, com o M.P.T. as partículas são levadas a uma distribuição de energia de Boltzmann (ou equilíbrio térmico clássico, daí o termo termalização) e a condição de Pauli se perde.

A termalização das partículas-teste precisa então ocorrer de forma tão tardia quanto se esteja interessado. Mas em algum momento na evolução temporal o M.P.T. irá falhar.

Para analisar a estabilidade do M.P.T. é proposta a distribuição uniforme de partículas dentro de uma caixa como segue [9]

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \delta(p - p_0)\Theta(\mathbf{r}), \quad (3.35)$$

onde  $p \equiv |\mathbf{p}|$ , e

$$\Theta(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \text{Dentro da caixa,} \\ 0, & \text{fora da caixa.} \end{cases} \quad (3.36)$$

Conforme a Eq.(3.35) todas as partículas têm em módulo o mesmo momento e a densidade dentro da caixa é uniforme como é demonstrado a seguir

$$\begin{aligned} \rho_0(\mathbf{r}) &= \int f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d^3\mathbf{p} \\ &= \int \delta(p - p_0)\Theta(\mathbf{r}) d^3\mathbf{p} \\ &= \Theta(\mathbf{r}) \int \delta(p - p_0) p^2 \sin\theta d\phi d\theta dp, \end{aligned}$$

$$\rho_0 = 4\pi p_0^2. \quad (3.37)$$

Portanto dentro da caixa a densidade é a mesma em qualquer ponto. Sendo assim, o potencial  $U(\mathbf{r})$  (Eq. 3.29) também é constante dentro da caixa e a força sobre as partículas é nula. Vê-se que a  $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  escolhida é uma solução estacionária da equação de Vlasov.

É claro que esta função de distribuição estacionária nos permite verificar resultados expúrios na evolução do sistema e identificar que parâmetros são essenciais na melhoria de um modelo em partículas-teste. Seguindo este raciocínio Jarzynski *et al.* [9] constroem o mesmo sistema usando partículas-teste. Ou seja,  $AN_t$  partículas com mesmo momento em módulo inicial são distribuídas dentro de uma caixa. Para garantir que a densidade inicial possua um perfil suave é feita uma escolha para a largura das gaussianas ( $\sigma$ ) de forma que  $V/(AN_t) \ll \sigma^3 \ll V$ , onde  $V$  é o volume da caixa escolhida.

No caso das partículas-teste podemos expressar a densidade a qualquer tempo como

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_0 + \delta\rho(\mathbf{r}, t), \quad (3.38)$$

onde  $\rho_0 = A/V$  é a densidade inicial que deveria permanecer inalterada ao longo do tempo, e  $\delta(\mathbf{r}, t)$  representa as flutuações devido ao número finito de partículas-teste usadas.

Para termos uma idéia do valor típico de  $\delta\rho$  basta percebermos como a densidade física ( $\rho$ ) a ser calculada num ponto depende da densidade de partículas-teste ( $d$ ) neste ponto

$$\rho_0 = \frac{A}{V} \propto d_0 = \frac{AN_t}{V},$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \propto d(\mathbf{r}, t) = \frac{n}{\sigma^3}, \quad (3.39)$$



onde  $n$  é o número de partículas-teste em  $\mathbf{r}$  no tempo  $t$  em um volume  $\sigma^3$ . É claro  $1/N_t$  nos serve como fator de conversão de densidade de partículas-teste para densidade física. Então

$$\rho(\mathbf{r}, t) \sim \frac{1}{N_t} \frac{n}{\sigma^3}. \quad (3.40)$$

Na média,  $n$  será dado por

$$n_0 = AN_t\sigma^3/V, \quad (3.41)$$

com flutuações da ordem de  $\sqrt{n_0}$  em torno da média [9]. Enfatizamos que esta flutuação se deve a uma flutuação no número de partículas-teste em um ponto da caixa. A partir desse valor e da Eq.(3.40) segue a flutuação típica na densidade física

$$\delta\rho_{rms} \sim \frac{1}{N_t} \frac{\sqrt{n_0}}{\sigma^3} = \frac{\rho_0}{\sqrt{n_0}}. \quad (3.42)$$

Sejam duas regiões  $\mathbf{r}_1$  e  $\mathbf{r}_2$  onde as densidades físicas estão variando. Estas regiões estão correlacionadas se  $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \sim \sigma$ . E seja  $t_c$  (tempo de correlação),  $t_c \sim \sigma/v$ , o tempo em que uma partícula-teste permanece no volume  $\sigma^3$ . Expandindo o potencial em torno da densidade  $\rho_0$

$$U(\rho(\mathbf{r}, t)) = U(\rho_0 + \delta\rho(\mathbf{r}, t)) \simeq U_0 + U'_0\delta\rho(\mathbf{r}, t), \quad (3.43)$$

onde  $U_0 \equiv U(\rho_0)$  e  $U'_0 \equiv \frac{dU}{d\rho}(\rho_0)$ .

A flutuação de  $U$  em torno de  $U_0$  é determinada pela flutuação  $\delta\rho$

$$\left| \frac{\partial}{\partial t} U(\mathbf{r}, t) \right| \sim U'_0 \frac{\delta\rho_{rms}}{t_c}. \quad (3.44)$$

A taxa de variação da energia total  $E_i$  de uma partícula movimentando-se sob o potencial  $U$  é o valor de  $\partial U/\partial t$  ao longo de sua trajetória

$$\dot{E}_i(t) = \frac{\partial U}{\partial t} d\mathbf{r}_i(t). \quad (3.45)$$

Integrando a Eq.(3.45) obtemos a variação  $\Delta E_i$  na energia. O valor de  $\Delta E_i$  flutua muito rapidamente em pequenas escalas de tempo (da ordem do tempo de correlação  $t_c$ ). Então antes de se realizar a integral num tempo  $\Delta t$  ( $\Delta t \gg t_c$ ), associamos o valor de  $\Delta E_i$  à uma constante de difusão ( $D_E$ ). Esta constante é dada pela aproximação na integral no tempo  $t_c$  como segue

$$D_E \sim |\dot{E}_i|^2 t_c$$

$$D_E \sim (U'_0 \delta \rho_{rms} / t_c)^2 t_c$$

$$D_E \sim (U'_0 \delta \rho_{rms})^2 v / \sigma, \quad (3.46)$$

usando (3.41) e (3.42) temos finalmente

$$D_E \sim \frac{(U'_0)^2 \rho_0 v}{N_t \sigma^4}. \quad (3.47)$$

Em um tempo  $\Delta t$  temos a variação na energia dada por

$$\Delta E \sim (D_E \Delta t)^{1/2}. \quad (3.48)$$

A relação (3.47) demonstra que o acúmulo de erros em uma simulação de partículas-teste é inversamente proporcional ao número de partículas-teste por nucleon ( $N_t$ ) e também inversamente proporcional à largura das gaussianas escolhidas ( $\sigma$ ), ou seja, dois parâmetros exclusivamente numéricos. Isto já havia sido percebido por Reinhardt *et al.* em simulações de modelos mais complexos [3]. Vemos que o acúmulo de erros se torna mais lento quanto mais partículas-teste usarmos. Isto já era esperado já que para simular uma função de distribuição

precisamos garantir que a densidade varie de forma suave no espaço e no tempo. Quanto ao valor da largura das gaussianas ( $\sigma$ ) também não deve ser surpresa que aumentando este os erros se acumularão de forma mais lenta. Aumentar a largura das gaussianas significa tornar as interações de cada partícula-teste menos individual (partícula-partícula) e fazer com que seu comportamento se torne mais coletivo. Porém, não podemos aumentar o valor de  $\sigma$  indefinidamente pois embora consigamos assim suprimir as interações indesejadas vamos perder os detalhes do potencial médio escolhido e assim a simulação também se distanciaria da equação de Vlasov.

Voltemos agora ao problema exposto no início desta seção com relação à termalização das partículas-teste. Como foi abordado desejamos saber quando acontecerá esta termalização no sistema estudado. Ou melhor, desejamos poder escolher os parâmetros numéricos de tal forma que a termalização aconteça tão tardiamente quanto for necessário. Isto deve acontecer em um tempo  $\tau$  tal em que cada uma das partículas tenha a oportunidade de mudar a sua energia de um valor comparável com a energia média por partícula,  $mv^2/2$  [9]. Então

$$(D_E\tau)^{1/2} \sim mv^2. \quad (3.49)$$

Manipulando então a Eq.(3.47) chegamos a

$$\tau \sim \frac{m^2v^3}{(U_0')^2\rho_0}\sigma^4N_t. \quad (3.50)$$

Novamente, a dependência de  $\tau$  com os parâmetros  $N_t$  e  $\sigma$  foi corretamente prevista por Reinhardt. Explicitamente percebemos que a termalização é tão mais tardia quanto maiores forem os valores de  $\sigma$  e  $N_t$ .

### 3.5 SIMULAÇÃO DE UM NÚCLEO POR PARTÍCULAS-TESTE

Usamos aqui os conceitos abordados nas seções anteriores para simular a evolução no tempo de um núcleo isolado. Simulamos um núcleo com  $A = 64$  nucleons onde não fazemos a distinção entre prótons e neutrons. O espaço onde o núcleo é simulado é um cubo de lado  $L = 20$  fm. Esse espaço não é contínuo mas é formado de células cúbicas de lado  $lr = 0.5$  fm. Ou seja, o espaço possui  $Ng = 40 \times 40 \times 40 = 64000$  células. Nestas células são calculados as densidades e o potencial. As condições de contorno deste espaço são abertas, ou seja, uma vez que uma partícula-teste esteja fora desta região cúbica não será mais levada em conta nos cálculos. Foi escolhido este tipo de condição de contorno por ser o centro da caixa (onde se encontra o núcleo) a nossa região de interesse. Cada partícula-teste é dada por uma gaussiana no espaço de fase. Antes de escolher o número de partículas-teste ( $N_t$ ) e a largura das gaussianas ( $\sigma$ ) das partículas vamos fazer algumas considerações a respeito da relação (3.50).

#### 3.5.1 A ESCOLHA DOS PARÂMETROS NUMÉRICOS $\sigma$ E $N_t$

Vimos que em (3.50) com excessão de  $N_t$  e  $\sigma$  todos os outros parâmetros são físicos e podemos calculá-los. Para isso escolhemos o potencial de Skyrme como segue [3]

$$U(\mathbf{r}) = -926\rho(\mathbf{r}) + 4118.9\rho(\mathbf{r})^2. \quad (3.51)$$

É fácil encontrar a densidade de equilíbrio como sendo  $\rho_0 \simeq 0.112 \text{ fm}^{-3}$ . Também encontra-se  $U'_0$  com

$$U'_0(\mathbf{r}) = [-926\rho(\mathbf{r}) + 2 \cdot 4118.9\rho(\mathbf{r})]_{\rho=\rho_0} = -3.3664. \quad (3.52)$$

Para encontrar a quantidade  $m^2v^3$  torna-se conveniente colocá-la em termos

do momento,  $p^3/m$ . Aqui, o momento  $p$  refere-se ao momento que foi dado para todas as partículas-teste no modelo descrito na seção anterior para encontrar-se a relação (3.50). Naquele modelo todas as partículas possuíam a mesma energia. Não será o caso aqui, cada partícula terá seu momento escolhido considerando o momento de Fermi local. No entanto, queremos apenas uma estimativa do tempo de termalização. Para este fim podemos escolher o momento de Fermi para a densidade de equilíbrio, ou seja

$$p_0 = \left( \frac{3\pi}{2} \rho_0 \right)^{\frac{1}{3}},$$

$$p_0 \simeq 0.808. \quad (3.53)$$

Com esse valor e com a massa do nucleon ( $m = 938.3$  MeV) encontramos  $p^3/m = 5.6 \cdot 10^{-4}$  MeV<sup>2</sup>. Substituindo esses valores em (3.50) temos

$$\tau \sim 4.43 \cdot 10^{-4} \sigma^4 N_t. \quad (3.54)$$

Estamos prontos então para escolher os valores de  $\sigma$  e  $N_t$ . Precisamos aqui estipular em quanto tempo desejamos que ocorra a termalização do sistema. Uma escolha razoável é que esta ocorra depois de 500 fm/c. Com esta escolha encontramos a relação

$$\sigma^4 N_t > \frac{500}{4.43 \cdot 10^{-4}} = 1128668. \quad (3.55)$$

Chegamos então a uma escolha que depende de um equilíbrio complicado entre tempo de processamento, capacidade de armazenamento e precisão numérica. Por um lado quanto maior for o valor de  $\sigma$  menos partículas-teste serão necessárias, porém como foi visto, menos preciso seria o cálculo do potencial. Por outro lado um grande número de partículas-teste permitiria que  $\sigma$  fosse tão pequeno quanto se quisesse mas assim o tempo de cálculo cresceria absurdamente. Assim, para termos algum critério a mais nesta escolha, vamos nos ater a uma

outra questão levantada na seção (3.2).

Vimos que no cálculo das densidades das partículas na rede não é necessário realizar o cálculo em toda a rede. Isto é assim porque escolhemos gaussianas para representar as partículas-teste e a partir de uma certa distância a contribuição da gaussiana torna-se irrelevante. Desta forma podemos calcular a contribuição de uma determina partícula apenas em algumas células: a célula onde a partícula se encontra e um determinado número de células vizinhas a esta. Chamemos de  $n_v$  o número de células vizinhas contadas a partir da célula central (onde a partícula se encontra). Assim, se  $n_v = 1$  contaremos todas as primeiras vizinhas, ou seja, a primeira à esquerda, a primeira à direita, acima, abaixo e assim por diante como é esquematizado na figura 5.

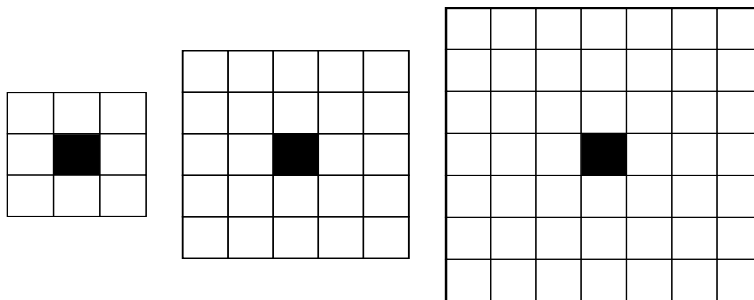


FIGURA 5: Três esquemas mostrando as células vizinhas à célula onde se encontra a partícula em estudo. Respectivamente  $n_v = 1$ ,  $n_v = 2$  e  $n_v = 3$ .

Então o número de células onde serão calculadas as densidades é dado por  $(2n_v + 1)^3$ .

É evidente que quanto maior o número de células vizinhas incluídas no cálculo maior será o tempo de simulação. Por critério de otimização numérica escolhemos trabalhar com três células vizinhas, ou seja, cada partícula terá sua densidade calculada em três vizinhas para cada lado da célula na qual ela se encontra, o que dá 343 células no caso tridimensional. Esta escolha implica numa escolha para  $\sigma$  como sendo igual a  $3lr$ , em que  $lr = 0.5\text{fm}$  é o lado das células. Portanto  $\sigma = 1.5\text{fm}$ . Agora temos o número de partículas-teste mínimo para que o sistema termalize após  $500\text{fm}/c$

$$N_t > 223000. \quad (3.56)$$

Como se vê, o número é alto, principalmente tendo-se em conta que  $N_t$  é o número de partículas-teste por nucleon, sendo então o número total de partículas-teste igual a  $AN_t$ . Ainda não dispomos de métodos que simulem tal número de partículas em um tempo apreciável. A seguir apresentaremos uma simulação com um número bastante modesto de partículas-teste por nucleon ( $N_t = 200$ ) mas muito encontrado na literatura [3][9][12]. Iremos mostrar que a termalização já começa a ocorrer antes de 500fm/c, o que está de acordo com o que foi encontrado nesta seção.

### 3.5.2 A CONSTRUÇÃO DO NÚCLEO

A distribuição no espaço de fase é dada pelas equações (3.2, 3.3 e 3.4). Agora precisamos inicializar a simulação escolhendo as posições dos centros de cada gaussiana (partícula) e seu respectivo momento. Após isso as densidades são calculadas na rede e o sistema é posto para evoluir segundo as equações de movimento (3.18 e 3.25). A partir da densidade da matéria nuclear encontramos o raio do núcleo; aqui vamos usar a densidade de equilíbrio já calculada em (3.53). Logo

$$\rho_0 = \frac{A}{\frac{4}{3}\pi R^3},$$

$$R = \left( \frac{3A}{4\pi\rho_0} \right)^{1/3}, \quad (3.57)$$

onde  $A$  é o número de nucleons.

As posições das partículas-teste são então sorteadas dentro de uma esfera de raio  $R$  (o procedimento numérico para uma distribuição esféricamente simétrica encontra-se no Apêndice C).

Na tabela 1 encontram-se os parâmetros desta simulação.

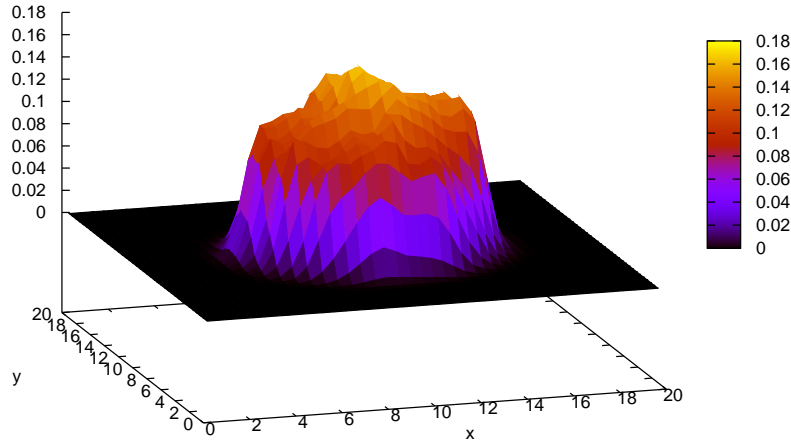


FIGURA 6: Densidade do núcleo com  $A = 64$ , simulado com  $Nt = 200$  em uma caixa de lado  $L = 20$  fm. A densidade é mostrada em  $z = 10$  (para que se veja o centro do núcleo). Note que o número baixo de partículas-teste e a largura das células da rede (0.5 fm) torna a densidade pouco homogênea.

A escolha dos momentos das partículas-teste se dá de forma similar. Primeiramente encontra-se o momento de Fermi para a densidade de equilíbrio

$$p_f = \left( \frac{3\pi^2}{2} \rho_0 \right)^{1/3}, \quad (3.58)$$

e, após isso, para cada partícula-teste é sorteado um momento dentro de uma esfera de raio  $p_f$ . Ou seja, é feita uma distribuição esféricamente simétrica no espaço dos momentos. Esperaríamos que dentro deste núcleo a densidade fosse homogênea mas devido ao número de partículas-teste ser finito a densidade não é perfeitamente homogênea, veja figura 6. Por esta razão é recomendável calcular  $p_f$  em (3.58) levando-se em conta a densidade no local onde a partícula se encontra ao invés do  $\rho_0$  teórico [13]. Essa densidade local pode ser calculada logo após a escolha das posições das gaussianas.



Parâmetro	Valor
$\rho$ (fm <sup>-3</sup> )	0.112
$N_t$	200
$A$	64
$L$ (fm)	20.0
$N_x$	40
$N_y$	40
$N_z$	40
$\Delta\mathbf{r}$	0.5
$\delta t$ (fm/c)	0.05
$\sigma_x$ (fm)	0.64
$\sigma_y$ (fm)	0.64
$\sigma_z$ (fm)	0.64

TABELA 1: Parâmetros usados na simulação.

### 3.5.3 MEDIDAS E PROPRIEDADES DO SISTEMA

Até aqui mostramos como prever a validade de uma simulação com partículas-teste. Como foi mostrado, o sistema nuclear deve ser iniciado como uma distribuição de Fermi porém em algum momento esta propriedade irá se perder, é a chamada termalização. Esta acontece então quando o sistema deixa de ter uma distribuição de Fermi e passa a possuir uma distribuição clássica, ou seja, uma distribuição de Boltzmann. Para acompanhar a evolução da distribuição até a termalização calcula-se os números de ocupação  $n(\epsilon)$  a cada iteração desejada. Em qualquer tempo sabe-se a posição  $\mathbf{r}_i$  de cada partícula-teste e também seu momento  $\mathbf{p}_i$ . Assim podemos obter a qualquer tempo a energia de qualquer partícula

$$\epsilon_i = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U_i, \quad (3.59)$$

onde  $U_i$  é o potencial médio sentido pela partícula-teste  $i$ . Este potencial  $U_i$  pode ser calculado usando-se  $g_r$  (3.3) como segue

$$U_i = \int g_r(\mathbf{r}_i - \mathbf{r})U(\mathbf{r})d^3r,$$

$$U_i = \sum_{\nu}^{N_{cel}} g_r(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{\nu})U(\mathbf{r}_{\nu}). \quad (3.60)$$

Na Fig. 7 é mostrada a evolução no tempo de alguns observáveis como a energia por nucleon, o raio quadrático médio e o momento de quadrupólo para  $N_t = 200$ . Apesar do pequeno número de partículas-teste a energia apresenta uma considerável conservação no tempo. O momento de quadrupólo é dado por

$$Q(t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)(2z^2 + x^2 + y^2)d^3rd^3p =$$

$$= \frac{1}{Nt} \sum_{i=1}^{ANt} (2z^2 + x^2 + y^2). \quad (3.61)$$

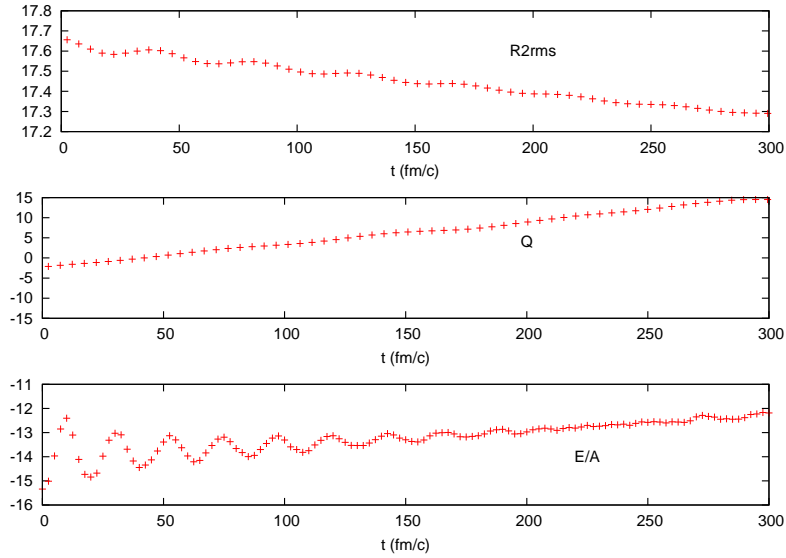


FIGURA 7: Evolução dos observáveis de um sistema  $^{64}X$ : o raio médio quadrático  $r_{rms}^2$ , o momento de quadrupólo e a energia por nucleon  $E/A$ .

Utilizando a definição da seção (2.2.1) para  $D(\epsilon)d\epsilon$  como o número de estados

entre  $\epsilon$  e  $\epsilon + d\epsilon$  vimos que o número de ocupação é dado por

$$n(\epsilon) = \frac{D(\epsilon)}{g(\epsilon)}, \quad (3.62)$$

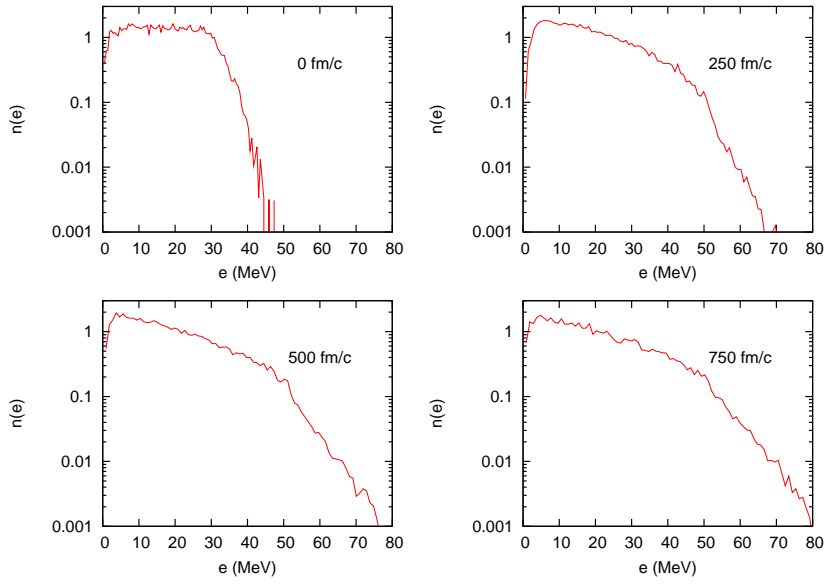
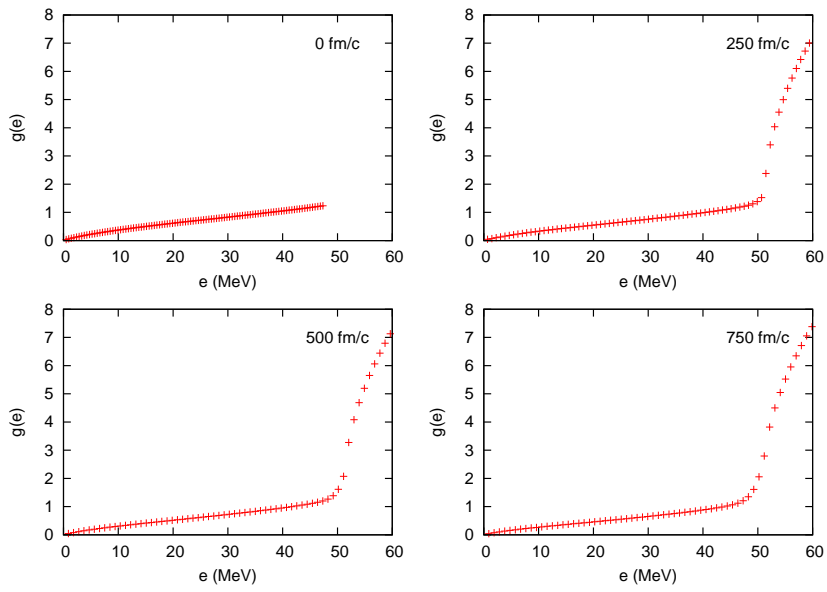
onde  $g(\epsilon)$  é a densidade de níveis de energia dada pela Eq.(3.64). O modo prático de se obter  $D(\epsilon)$  consiste em guardar o número de partículas que ocupa cada estado de energia. O cálculo da energia média por nucleon é feito no espaço de energias obtidas

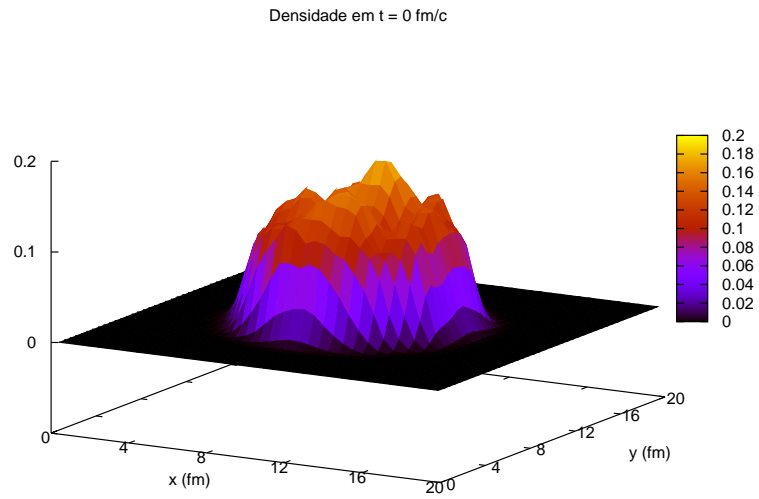
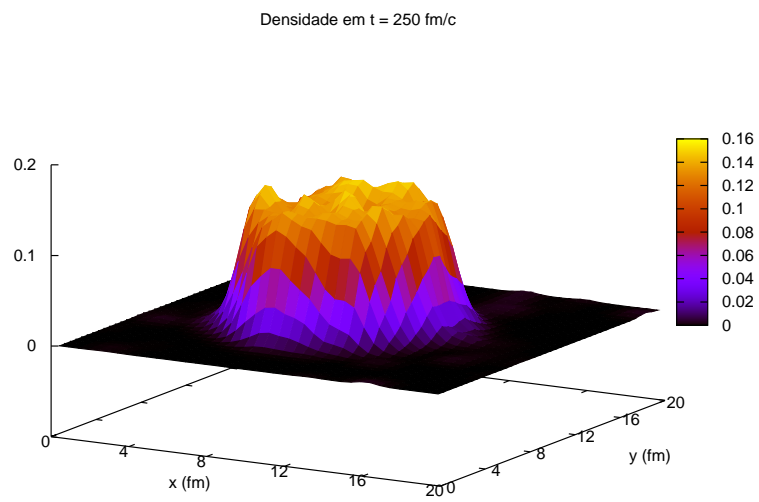
$$E = \frac{1}{ANt} \sum_i^{N_E} \epsilon_i D(\epsilon_i), \quad (3.63)$$

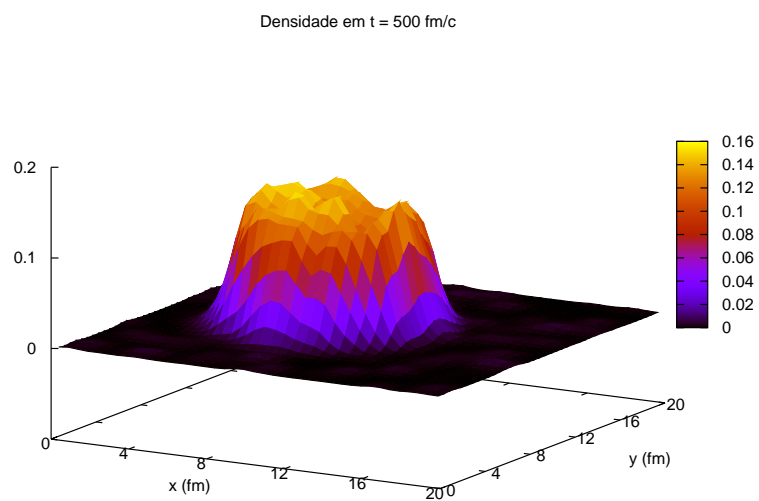
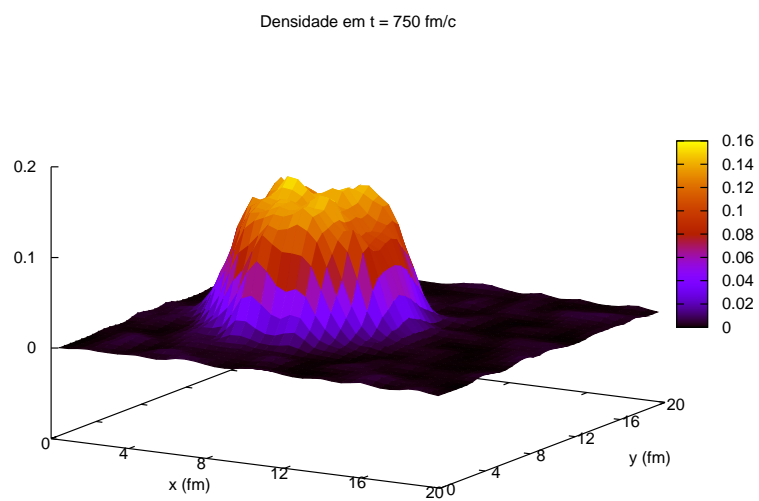
onde  $N_E$  é o número de estados.

$$g(\epsilon) = \frac{1}{4\pi^2} \int d^3r \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right) (\epsilon - U(\mathbf{r}))^{1/2}. \quad (3.64)$$

Na Fig. 9 é apresentado o cálculo de  $g(\epsilon)$  para alguns instantes. Da Fig. 10 até a Fig. 13 pode ser acompanhado o comportamento da densidade tomada na metade da caixa. É possível notar comportamentos anômalos como o decréscimo na densidade central e até mesmo a migração do núcleo. Dependendo do objetivo de estudo para o qual a simulação se destina pode-se impor que a caixa tenha as dimensões nucleares, ou aproximadamente. Neste caso também deve-se impor condição de contorno periódica [9].

FIGURA 8: Evolução de  $n(\epsilon)$ .FIGURA 9: Evolução de  $g(\epsilon)$ .

FIGURA 10: Densidade em  $0 \text{ fm}/c$ .FIGURA 11: Densidade em  $250 \text{ fm}/c$ .

FIGURA 12: Densidade em  $500 \text{ fm}/c$ .FIGURA 13: Densidade em  $750 \text{ fm}/c$ .

## 4 RESULTADO PARA UMA PERTURBAÇÃO PERIÓDICA NA DENSIDADE NUCLEAR

Como uma outra aplicação, tendo como inspiração o trabalho de Baldo *et al* [14], vamos acompanhar a evolução da matéria nuclear levemente perturbada em sua densidade. O espaço estudado consiste em uma caixa cúbica de lado  $L$  com condições periódicas de contorno. Aqui também escolhemos gaussianas para representar as partículas no espaço de fase. A densidade será perturbada a partir de sua densidade de equilíbrio. Vamos supor uma perturbação periódica na densidade da forma

$$\delta\rho = A_P \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = A_P \sin(kz); \quad \mathbf{k} = k\hat{z}, \quad (4.1)$$

onde  $A_P$  é a amplitude da perturbação na densidade. Note que escolhemos a direção  $z$  como direção da perturbação. Como a caixa que contém o sistema tem lado  $L$

$$k = \frac{2\pi}{L}n, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (4.2)$$

com esta imposição nos asseguramos de que o número de partículas dentro da caixa é conservado, ou seja

$$\delta\rho(\mathbf{z}) = \delta\rho(\mathbf{z} + \mathbf{L}). \quad (4.3)$$

O procedimento numérico consiste em escolher de modo aleatório as posições

das partículas-teste ( $\mathbf{r}_i$ ) de acordo com a distribuição espacial

$$\delta\rho = \rho_0(1 + A_P \sin(kz)). \quad (4.4)$$

E para cada partícula ( $i$ ) sorteamos  $\mathbf{p}_i$ , de modo que o sorteio aconteça dentro de uma esfera cujo raio seja o momento de Fermi dado pela densidade local [17]. A função de distribuição torna-se portanto uma função perturbada do equilíbrio

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t_0) &= f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t_0) + \delta f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t_0) , \\ f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t_0) &= \frac{2}{(2\pi)^3} (1 + A_P \sin kz) \Theta(p_0 - p) . \end{aligned} \quad (4.5)$$

Demonstra-se facilmente que a integração da função de distribuição no momento deve retornar a densidade escolhida

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t_0) &= \int d^3p f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t_0) = \frac{2}{(2\pi)^3} (1 + A_P \sin kz) \int d^3p \Theta(p_0 - p) \\ &= \frac{2}{(2\pi)^3} (1 + A_P \sin kz) \int \Theta(p_0 - p) p^2 \sin\theta d\phi d\theta dp \\ &= \frac{2}{(2\pi)^3} (1 + A_P \sin kz) \frac{4\pi}{3} p_0^3 , \\ &= \frac{p_0^3}{3\pi^2} (1 + A_P \sin kz) , \end{aligned}$$

ou seja,

$$\rho(\mathbf{r}, t_0) = \rho_0(1 + A_P \sin kz) , \quad \rho_0 \equiv \frac{p_0^3}{3\pi^2}. \quad (4.6)$$

Onde  $\rho_0$  é a densidade de equilíbrio.

## 4.1 INICIALIZAÇÃO

O lado do espaço cúbico do sistema escolhido é de  $L = 10\text{fm}$ . Como vimos, para se calcular a densidade e o potencial médio é necessário discretizar o espaço. Apesar do espaço ser cúbico escolhemos criar uma rede assimétrica de dimensões (em número de células)  $3 \times 3 \times 30$  de modo a garantir a suavidade do potencial na direção  $z$  que é a direção escolhida para a perturbação. Portanto as dimensões



de uma célula são (3.33 fm)x(3.33 fm)x(0.33 fm). As gaussianas da Eq.(3.4) que vão representar as partículas-teste nesta simulação devem levar em conta esta assimetria da rede em suas larguras ( $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$ ). Por exemplo, na direção  $x$

$$g_x(x - x_i(t)) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}\sigma_x} e^{-\frac{(x-x_i(t))^2}{2\sigma_x^2}}. \quad (4.7)$$

#### 4.1.1 SORTEIO DAS COORDENADAS DAS PARTÍCULAS-TESTE

Nossa distribuição possui uma perturbação apenas na direção  $z$ , portanto para as coordenadas  $x$  e  $y$  basta escolher posições aleatórios no intervalo  $[0, L]$ . A aleatoriedade da escolha deve garantir uma densidade uniforme nestas coordenadas (desde que o número de partículas-teste seja grande o suficiente). Quanto à coordenada  $z$  escolhe-se um número  $z_0$  aleatório no intervalo  $[0, L]$ . Este número será testado a seguir.

#### 4.1.2 TESTANDO A COORDENADA Z

Sejam as funções  $h(z)$  e  $C$  definidas a seguir [15]

$$h(z) = 1 + A_P \sin kz$$

$$C = (1 + A_P)r, \quad 0 \leq r \leq 1. \quad (4.8)$$

Calcula-se  $h(z_0)$  e sorteia-se o valor do número  $r$  no intervalo  $[0, 1]$ . O número  $z_0$  é testado da seguinte forma

$$\text{se } C < h(z_0) \text{ aceita - se } z_0, \quad (4.9)$$

$$\text{se } C > h(z_0) \text{ rejeita - se } z_0. \quad (4.10)$$

Para cada  $z_0$  que é aceito sorteamos os momentos de acordo com a distribuição  $\Theta(p_0 - p)$ , ou seja, uma distribuição esfericamente simétrica (ver Apêndice C).

## 4.2 RESULTADOS

A seguir temos os resultados para esta simulação. Na tabela 2 estão os valores dos parâmetros usados na simulação. Na figura 14 é mostrada a evolução da

Parâmetro	Valor
$\rho$ (fm <sup>-3</sup> )	0.112
$N_t$	2000
$A$	112
$A_P$	0.1
$L$ (fm)	10.0
$N_x$	3
$N_y$	3
$N_z$	30
$\sigma_x$ (fm)	4.29
$\sigma_y$ (fm)	4.29
$\sigma_z$ (fm)	0.429

TABELA 2: Parâmetros usados na simulação.

energia por nucleon durante a simulação. É evidente uma falta de conservação da energia no início da simulação. Nas simulações com partículas-teste a conservação da energia está ligada ao tamanho das células da rede (Veja a Fig. 1 da referência [16]). Portanto a conservação da energia será melhor tanto quanto menores forem as células da rede, ou seja, devemos aumentar o número de células se o lado da caixa for fixado em determinado tamanho, como é o caso aqui.

Ainda que a energia sofra uma sensível variação não é o que acontece com o número de ocupação por nucleon  $n(\epsilon)$  como pode ser visto na figura 15. Como foi discutido no capítulo anterior isto se deve ao fato de estarmos usando um grande número de partículas-teste (2000), isto aumenta o tempo necessário para que o sistema termalize.

Nas figuras a seguir é mostrada a evolução da densidade com o tempo. A densidade é mostrada no plano z-y para  $x = 5.0\text{fm}$ , ou seja, um corte na metade da caixa mostrando a perturbação na direção  $z$ . Aqui mostramos justamente o período de tempo ( $0 - 10.0\text{fm}/c$ ) em que a densidade mais está variando. Este é

o período em que surge o erro na energia por nucleon como foi mostrado.

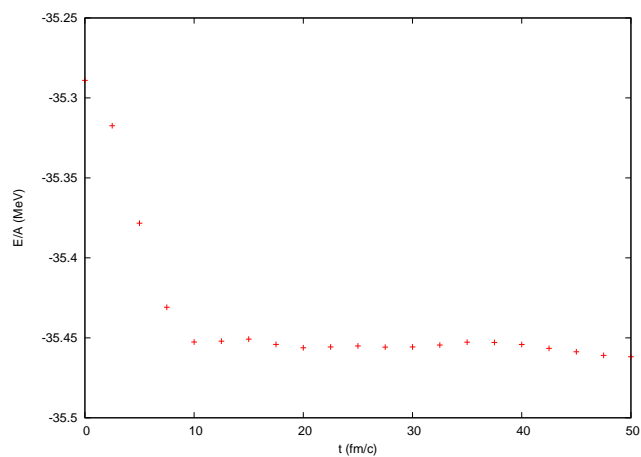


FIGURA 14: Evolução da Energia por nucleon com o tempo.

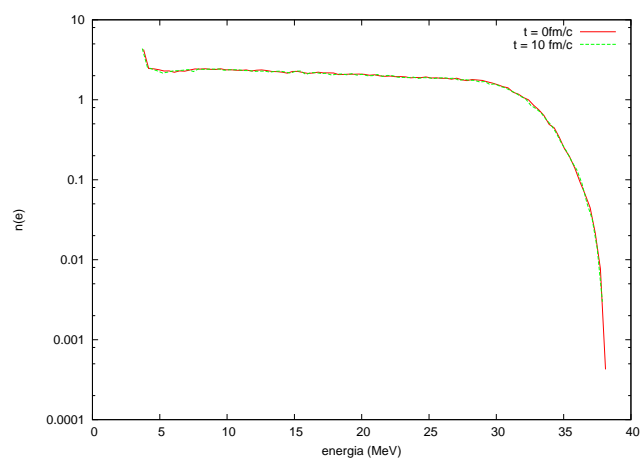
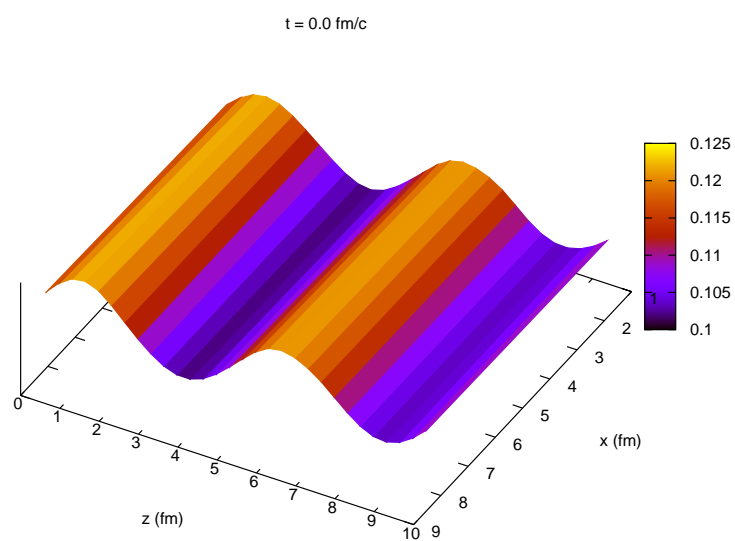
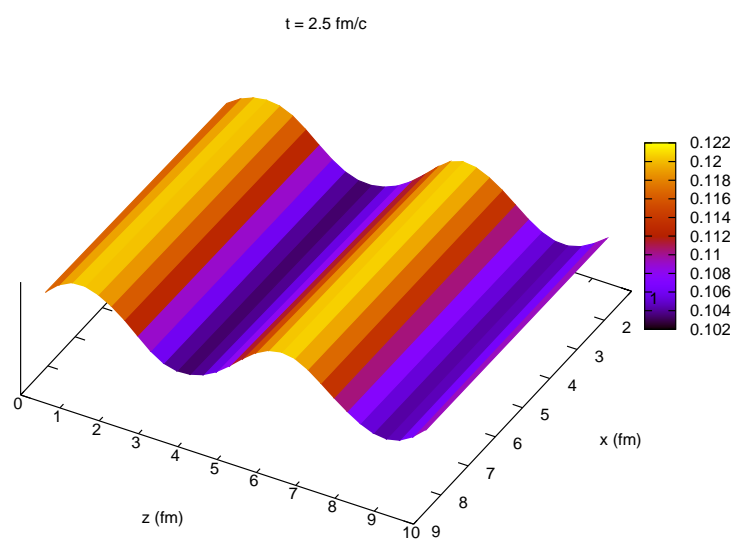
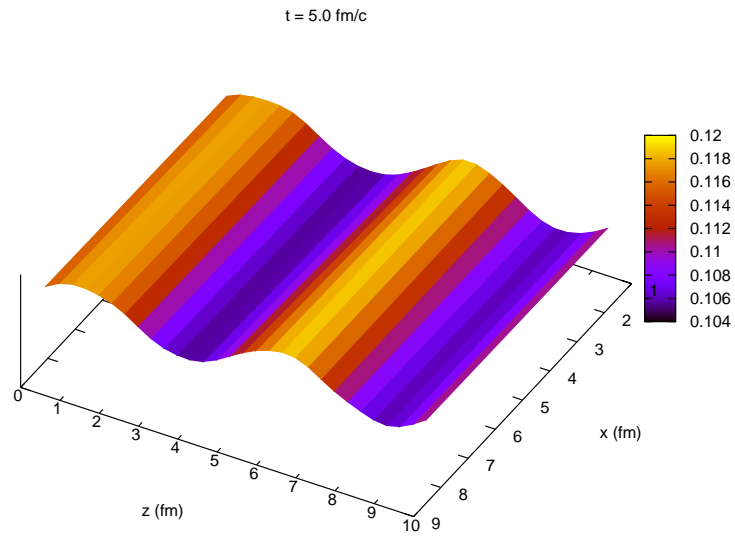
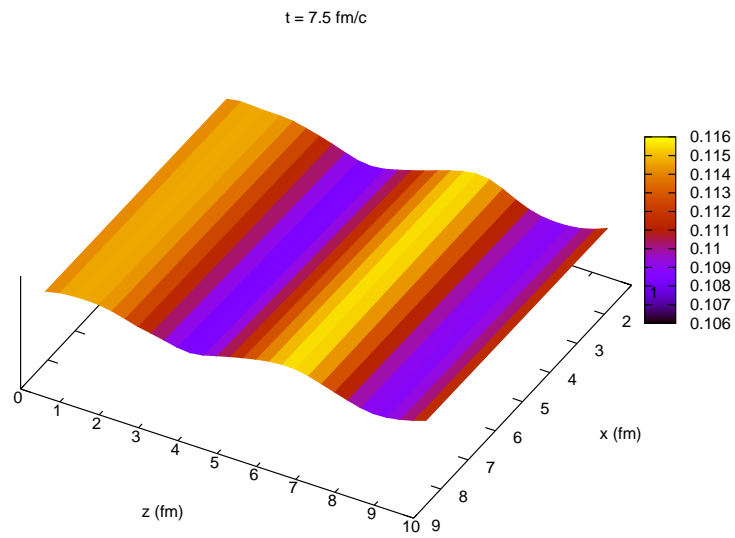


FIGURA 15: Evolução do número de ocupação de  $t = 0$  fm/c até  $t = 10.0$  fm/c.

FIGURA 16: Densidade em  $0.0 \text{ fm}/c$ .FIGURA 17: Densidade em  $2.5 \text{ fm}/c$ .

FIGURA 18: Densidade em  $5.0 \text{ fm}/c$ .FIGURA 19: Densidade em  $7.5 \text{ fm}/c$ .

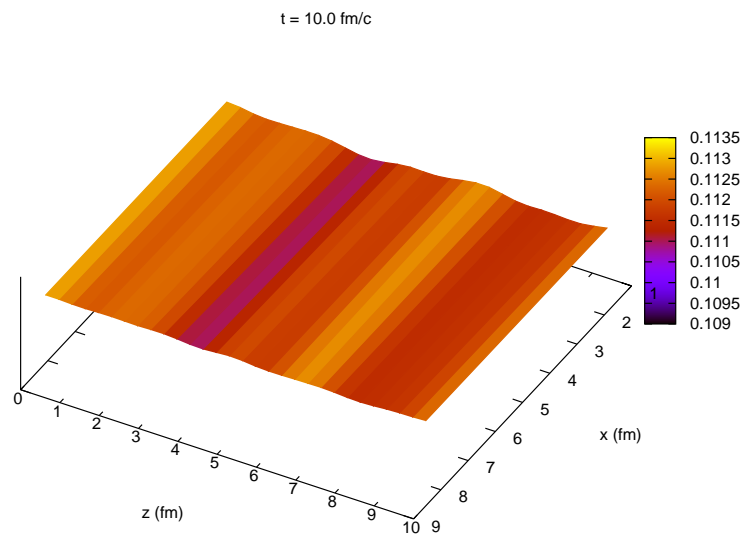


FIGURA 20: Densidade em  $10.0 \text{ fm}/c$ .

## 5 CONCLUSÃO

Neste trabalho tivemos como principais objetivos entender o comportamento da Equação de Vlasov, como base de simulação em física nuclear, e atingir o nível técnico e computacional necessários para levar à frente um projeto que envolve em sua prática um problema de muitos corpos. Nossa meta principal é atingir a capacidade técnica para simular a interação entre diferentes tipos de partículas como elétrons, prótons e nêutrons. Ainda não alcançamos tal objetivo mas hoje compreendemos melhor as dificuldades que envolvem tal tipo de programação como por exemplo os tipos de parâmetros essenciais no momento de determinar o ponto no tempo a partir do qual a simulação deixa de ter relevância física. Também entendemos melhor os desafios de se trabalhar com potenciais médios. Para o cálculo do potencial médio é necessário a introdução de uma rede discreta no espaço. Tal procedimento traz consigo problemas computacionais próprios como por exemplo uma atenção especial para a capacidade de armazenamento de dados do computador em que se está trabalhando. Como foi dito, nosso objetivo é trazer para a simulação partículas que interagem via Potencial Coulombiano como os elétrons. Isto leva a uma dificuldade própria com as redes pois o tipo de rede necessária para um potencial elétrico é essencialmente diferente do caso do potencial nuclear. O potencial elétrico é um potencial de longo alcance comparado ao nuclear e por esta razão necessita de parâmetros próprios como por exemplo células maiores [17]. Isto equivale a dizer que na introdução de partículas de tipos diferentes precisaremos, na maioria dos casos, de uma rede para cada tipo de interação. Este é um exemplo de como um problema físico leva a novos desafios computacionais. Uma das possíveis soluções pode se encontrar no que é chamado de paralelização. Este método consiste em coordenar uma

ação conjunta de diferentes processadores em um único computador ou em um cluster de computadores para se conseguir um rendimento de cálculo até quatro vezes maior que no modo mais comum de programação. Ao tornar os processos mais rápidos não precisaremos sobrecarregar a memória de um computador com dados, procedimento que foi adotado para que o tempo de cálculo fosse menor. Desta forma poderemos trabalhar com redes maiores ou, no caso de partículas diferentes, mais de uma rede. Como resultado deste trabalho obtivemos algoritmos adequados à descrição de sistemas finitos (núcleos atômicos) e infinitos como a matéria nuclear. A extensão dos nossos algoritmos para sistemas contendo partículas diferentes é trivial. Neste trabalho não fizemos isto uma vez que estávamos interessados em validar os nossos programas e com isto um sistema mais complexo em nada ajudaria. O estudo da evolução de sistemas infinitos em que a densidade inicial foi perturbada é importante no estudo da matéria de estrelas de neutrons que em geral é estudada no limite de pequenas oscilações [18][19], isto é, linearizando-se a equação de movimento de Vlasov. Na simulação computacional não precisamos impor o limite de pequenas oscilações e efeitos de não-linearidade podem ser estudados, o que deve influenciar o comportamento da matéria estelar em particular as zonas de instabilidade que levam à formação de estruturas exóticas chamadas de pasta [20].

Desde o começo deste trabalho foi de nosso interesse atingir um nível técnico suficiente para levar em conta também colisões entre as partículas, ou seja, interações partícula-partícula. Deve-se lembrar que a equação de Vlasov não trata deste tipo de interação. A equação para este fim é a equação de Boltzmann. A equação de Boltzmann possui um termo íntegro-diferencial complicado de se resolver e para o qual existem diferentes tipos de técnicas próprias para cada problema físico. A partir da base alcançada neste trabalho pretendemos em um próximo trabalho incluir também estas interações diretas entre as partículas e desta forma aumentar nossa capacidade em simulações de problemas reais.



## APÊNDICE A – A EQUAÇÃO DE POISSON

Para trabalharmos com o campo elétrico devemos solucionar a chamada Equação de Poisson vista aqui em uma dimensão

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi = -\rho(x), \quad (\text{A.1})$$

onde  $\Phi$  é o potencial elétrico e  $\delta$  é a densidade de carga em  $x$ . Vamos fazer a análise em 1D embora a generalização para 3D seja imediata.

### A.1 REPRESENTAÇÃO CONTÍNUA

Vamos aplicar agora transformada de Fourier apenas ao lado esquerdo da equação de Poisson

$$\begin{aligned} \mathcal{F} \left[ \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi(x) \right) \right] &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi(x) e^{-2\pi i k x} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \Phi(x) \right] e^{-2\pi i k x} dx \\ &= \left[ \frac{\partial \Phi}{\partial x} e^{-2\pi i k x} \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (e^{-2\pi i k x}) dx \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Phi}{\partial x} [-2\pi i k e^{-2\pi i k x}] dx = 2\pi i k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Phi}{\partial x} e^{-2\pi i k x} dx \\ &= 2\pi i k \left[ \Phi e^{-2\pi i k x} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Phi \frac{\partial}{\partial x} e^{-2\pi i k x} dx \right]. \end{aligned}$$

Finalmente obtemos

$$\mathcal{F} \left[ \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi(x) \right) \right] = (2\pi ik)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Phi e^{-2\pi ikx} dx, \quad (\text{A.2})$$

onde as integrais foram resolvidas por parte assumiu-se que o potencial é bem comportado e que portanto é nulo no infinito. Portanto,

$$\mathcal{F} \left[ \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi(x) \right) \right] = -(2\pi k)^2 \hat{\Phi}. \quad (\text{A.3})$$

Aplicando-se a transformada de fourier à equação de Poisson e usando o resultado anterior temos

$$(2\pi k)^2 \hat{\Phi} = \hat{\rho}(k),$$

$$\hat{\Phi} = \frac{\hat{\rho}(k)}{(2\pi k)^2}, \quad (\text{A.4})$$

aqui utilizou-se o símbolo  $\hat{\phantom{x}}$  para a transformada.

Vemos então que no espaço dos momentos a solução é muito mais simples. A equação de Poisson transformada não possui derivadas mas apenas uma relação algébrica simples. Depois da manipulação efetuada encontra-se então o potencial transformado  $\hat{\Phi}$ . Para se encontrar o potencial  $\Phi$  basta realizar a transformada inversa na solução. Esta solução no entanto é correta apenas no espaço contínuo e nos serve apenas como ilustração para o espaço discreto utilizado no Método das Partículas Teste.

## A.2 REPRESENTAÇÃO DISCRETA

A forma numérica usual de trabalhar esta equação consiste em aplicar uma transformada de Fourier discreta à densidade (como a FFT por exemplo [15]) e manipular a equação no espaço dos momentos. Após isso é feita a transformada inversa para então se obter o potencial. Vamos incluir aqui apenas as relações necessárias para esta manipulação. A transformada de Fourier discreta e sua

inversa podem ser definidas como segue [10]

$$\mathcal{F}[f](k_l) = \Delta x \sum_{g=0}^{N_g-1} f(x_g) e^{-ik_l x_g} \quad (\text{A.5})$$

$$f(x_g) = \frac{1}{L} \sum_{l=0}^{N_g-1} \mathcal{F}[f](k_l) e^{ik_l x_g}, \quad (\text{A.6})$$

onde  $L$  é o tamanho da rede e  $k_l = 2\pi l/L$ . A equação de Poisson unidimensional por diferenças finitas fica

$$\frac{\Phi_{g+1} - 2\Phi_g + \Phi_{g-1}}{\Delta x^2} = -\rho_g. \quad (\text{A.7})$$

Após aplicar a transformada de Fourier à Eq.(A.7) obtemos o potencial transformado

$$\hat{\Phi} = \frac{\hat{\rho}(k_l)}{K_l}, \quad (\text{A.8})$$

onde o  $K_l$  é o operador de segunda derivada transformado e é dado por

$$K_l = k_l^2 \left( \frac{\text{sen}(\frac{1}{2}k_l \Delta x)}{\frac{1}{2}k_l \Delta x} \right)^2. \quad (\text{A.9})$$

## APÊNDICE B – CÁLCULO NÚMÉRICO DE DERIVADAS

Vamos utilizar as seguintes expressões

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \dots + \frac{h^n}{n!}f^n(x) + \dots, \quad (\text{B.1})$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \dots + \frac{(-1)^n h^n}{n!}f^n(x) + \dots \quad (\text{B.2})$$

Somando as duas expressões anteriores e isolando a primeira derivada obtemos

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{2}{2h} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{h^{2j+1}}{(2j+1)!} f^{(2j+1)}(x),$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{h^{2j} f^{(2j+1)}(x)}{(2j+1)!}. \quad (\text{B.3})$$

Do mesmo modo obtêm-se a segunda derivada

$$f''(x) = \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2} - \frac{2}{h^2} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{h^{2j+2} f^{(2j+2)}(x)}{(2j+2)!}. \quad (\text{B.4})$$

Abrindo a Eq.(B.3)

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(x) - \frac{h^4}{120} f^{(5)}(x) + \dots \quad (\text{B.5})$$

e substituindo  $h$  por  $rh$  na Eq.(B.3) obtemos

$$f'(x) = \frac{f(x+rh) - f(x-rh)}{2rh} - \frac{r^2 h^2}{6} f^{(3)}(x) - \frac{r^4 h^4}{120} f^{(5)}(x) + \dots \quad (\text{B.6})$$

Multiplicando a Eq(B.5) por  $r^2$  e subtraindo a Eq.(B.6) obtemos

$$\begin{aligned} (r^2 - 1)f'(x) &= r^2 \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{r^2 h^2}{6} f^{(3)}(x) - \frac{r^2 h^4}{120} f^{(5)}(x) + \dots - \\ &\quad - \frac{f(x+rh) - f(x-rh)}{2rh} - \frac{r^2 h^2}{6} f^{(3)}(x) - \frac{r^4 h^4}{120} f^{(5)}(x) + \dots \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{1}{2hr(r^2 - 1)} [r^3 f(x+h) - r^3 f(x-h) - (f(x+rh) - f(x-rh))] + \\ &\quad + \frac{1}{r^2 - 1} \frac{r^2(r^2 - 1)}{120} h^4 f^{(5)}(x). \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Para  $r = 2$  temos

$$f'(x) = \frac{1}{12h} [8(f(x+h) - f(x-h)) - (f(x+2h) - f(x-2h))] + \frac{4h^4}{120} f^{(5)}(x). \quad (\text{B.9})$$

Para  $r = 3$  temos

$$f'(x) = \frac{1}{48h} [27(f(x+h) - f(x-h)) - (f(x+3h) - f(x-3h))] + \frac{9h^4}{120} f^{(5)}(x). \quad (\text{B.10})$$

Calculando agora  $9 \times \text{Eq. (B.9)} - 4 \times \text{Eq. (B.10)}$  chegamos a

$$9f'(x) - 4f'(x) = \frac{9}{12h} [8(f(x+h) - f(x-h)) - (f(x+2h) - f(x-2h))] -$$

$$-\frac{4}{48h} [27(f(x+h) - f(x-h)) - (f(x+3h) - f(x-3h))] + O(h^6). \quad (\text{B.11})$$

Finalmente

$$f'(x) = \frac{1}{h} \left[ \frac{3}{4}(f(x+h) - f(x-h)) - \frac{3}{20}(f(x+2h) - f(x-2h)) + \frac{1}{60}(f(x+3h) - f(x-3h)) \right]. \quad (\text{B.12})$$

## APÊNDICE C – DISTRIBUIÇÃO ESFÉRICAMENTE SIMÉTRICA

Seja  $\bar{P}(x)dx$  a probabilidade de gerar-se um número aleatório entre  $x$  e  $x+dx$ . E assumamos que a distribuição seja uniforme:

$$\bar{P}(x)dx = \begin{cases} dx, & 0 < x < 1; \\ 0, & \text{qualquer outro.} \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

onde  $x$  é uma variável aleatória.

Agora vamos supor uma dada função  $y(x)$  que depende da variável aleatória  $x$ . Pela "Lei fundamental de Transformação de Probabilidades":

$$\begin{aligned} |\bar{P}(y)dy| &= |\bar{P}(x)dx| \\ \bar{P}(y) &= \bar{P}(x) \left| \frac{dx}{dy} \right| \\ \bar{P}(\mathbf{y}) &= \bar{P}(\mathbf{x}) |J(\mathbf{x}, \mathbf{y})| \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Supondo que queremos obter uma distribuição de  $y$ 's com  $\bar{P}(y) = f(y)$  para uma dada função  $f(y)$  com integral igual a 1. Sendo que  $x$  é uma distribuição uniforme:  $\bar{P}(x) = 1$ . Usando a equação (C.2) obtemos:

$$f(y) = \left| \frac{dx}{dy} \right| \quad (\text{C.3})$$

Utilizemos agora a equação (C.2) para o caso esférico. Temos 3 variáveis aleatórias

para as quais a distribuição de probabilidade é uniforme:

$$\bar{P}(x, y, z) = 1, \quad (\text{C.4})$$

Pela transformação das probabilidades, nas coordenadas esféricas temos:

$$\bar{P}(r, \theta, \phi) = \bar{P}(x, y, z) |J(\mathbf{x}, \mathbf{r})|.$$

como neste caso  $|J(\mathbf{x}, \mathbf{r})| = r^2 \text{sen}\theta$ , segue que

$$\begin{aligned} \bar{P}(r) &\propto r^2 \\ \bar{P}(\theta) &= \text{sen}\theta \\ \bar{P}(\phi) &= 1. \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Assim para termos uma distribuição esférica uniforme usamos a prescrição:

$$\begin{aligned} P &= x_1^{\frac{1}{3}} R \\ \cos(\theta) &= 1 - 2x_2 \\ \phi &= 2\pi x_3. \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

onde  $x_1, x_2, x_3$  são números aleatórios homogêneos entre  $[0, 1]$ .



## REFERÊNCIAS

- [1] G. F. Bertsch and S. Das Gupta, Phys. Rep. **160** 190 (1988).
- [2] L. P. Kadanoff and G. Baym, Quantum Statistical Mechanics, Benjamin, New York (1962).
- [3] P. G. Reinhard and E. Suraud, Ann. Phys. **239** 193-215 (1995).
- [4] A. A. Vlasov, Many-Particle Theory and Its Applications to Plasma Physics, Gordon and Breach, New York (1950).
- [5] P. J. E. Peebles, The Large Scale Structure of the Universe, Princeton Univ. Press., Princeton, NJ (1980).
- [6] R. Brout and P. Carruthers, Lectures on the Many-Electron Problem, Wiley, New York (1963).
- [7] A. R. Choudhuri, The Physics of Fluids and Plasmas, Cambridge University Press, United Kingdom (1998).
- [8] P. Ring and P. Schuck, The Nuclear Many-Body Problem, Springer-Verlag, New York/Berlin (1980).
- [9] C. Jarzynski and G.F. Bertsch, Phys. Rev. C **53** 2 (1995).
- [10] P. MacNeice, Particle Mesh Techniques, Goddard Space Flight Center, NASA (1996).
- [11] C. Scherer, Métodos Computacionais da Física, Ed. Livraria da Física, São Paulo (2005).
- [12] G.F. Bertsch, P. G. Reinhardt and Suraud, Phys. Rev. C **53** 3 (1996).
- [13] Cai Yanhuang, A. Smerzi and M. Di Toro, Phys. Rev. C **50** 6 (1994).
- [14] M. Baldo, G. F. Burgio and A. Rapisarda, Phys. Rev. C **51**, 198 (1995).
- [15] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press (2007).

- [16] P. G. Reinhard and E. Suraud, *Ann. Phys.* **239** 216-242 (1995).
- [17] R. W. Hockney and J. W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles*, Taylor & Francis Group, (1988).
- [18] C. Providência, L. Brito, A. M. S. Santos, D. P. Menezes and S. S. Avancini, *Phys. Rev. C* **74** 045801 (2006).
- [19] C. Providência, L. Brito, A. M. S. Santos, D. P. Menezes and S. S. Avancini, *Phys. Rev. C* **74** 045802 (2006).
- [20] T. Maruyama, T. Tatsumi, D. N. Voskresensky, T. Tanigawa and S. Chiba<sup>1</sup>, *Phys. Rev. C* **72** 015802 (2005)
- [21] A. Chodos, R. L. Jaffe, K. Johnson, C. B. Thorne, and V. F. Weisskopf, *Phys. Rev. D* **9** 3471 (1974).