

# Algoritmo del árbol jerárquico para el cómputo de la interacción gravitatoria de muchos cuerpos.

Pablo Santamaría

Facultad de Ciencias Astronómicas y Geofísicas

Universidad Nacional de La Plata

email: pablo@fcaglp.unlp.edu.ar

Octubre 2009

En estas notas describimos un algoritmo computacionalmente eficiente (y con un planteo físico claro) para calcular, en un dado instante de tiempo, la interacción gravitatoria sobre cada partícula de un sistema debido a las restantes partículas del mismo.

## Cómputo numérico de las interacciones

La resolución numérica del problema de  $N$ -cuerpos requiere computar, sobre cada partícula  $i$  ( $i = 1, \dots, N$ ), la fuerza de interacción gravitatoria ejercida por las restantes  $N - 1$  partículas en un determinado instante de tiempo

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_i) = -G \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^N m_i m_j \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{r_{ij}^3},$$

donde  $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ , siendo  $\mathbf{r}_k$  y  $m_k$  la posición y masa de la  $k$ -ésima partícula, respectivamente. En las simulaciones numéricas de la evolución dinámica de sistemas compuestos por muchos cuerpos, es el cómputo de las interacciones entre los mismos lo que realmente limita al cálculo numérico y no el número total de pasos de integración que deben realizarse. De este modo, es fundamental considerar algoritmos numéricos que efectúen en forma eficiente dicho cómputo.

El primer procedimiento, denominado *algoritmo partícula-partícula* (PP), consiste simplemente en computar en forma directa todas las interacciones entre las partículas. Si la interacción de cada par de partículas es tomada en cuenta el cómputo directo requiere un total de  $O(N^2)$  operaciones, dado que para  $N$  partículas hay  $N(N - 1)$  interacciones. Este tipo de cómputo es razonable para sistemas que involucran unos pocos de cientos de partículas, pero como el tiempo de cómputo se incrementa tan rápidamente con el número de partículas, simulaciones numéricas con miles de partículas resultan computacionalmente costosas y aquellas con millones de partículas resultan inalcanzables. Es claro, pues, que para tales sistemas, debe considerarse un procedimiento alternativo al cómputo directo.

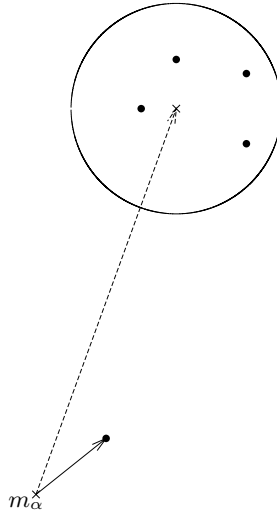
Un segundo procedimiento, denominado *algoritmo partícula-malla* (PM), determina el potencial gravitatorio  $\phi$ , generado por la distribución de  $N$  partículas, sobre los nodos de una malla regular que cubre la región a considerar. El cómputo es efectuado resolviendo numéricamente, sobre tal malla, la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 \phi = 4\pi G \rho,$$

donde

$$\rho = \sum_i^N m_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i),$$

es la densidad de masa del sistema. La fuerza sobre una determinada partícula es entonces computada interpolando el potencial en la malla a la posición de la partícula. Utilizando los procedimientos apropiados el número total de operaciones para el cómputo de las interacciones con éste método es del orden  $O(N + M \log M)$  donde  $M$  es el número de nodos en la malla. Puesto que en la práctica, debido a limitaciones de memoria en las computadoras



**Figura 1.** Interacción de una partícula con partículas vecinas y grupos de partículas lejanas.

disponibles,  $M \ll N$ , el costo computacional del método resulta proporcional a  $N$ . De este modo, el cálculo de las interacciones se realiza efectivamente con muchas menos operaciones que con el método PP.

El uso de una malla con un número de nodos pequeño respecto al número de partículas, provee una limitada resolución de la distribución de masa en la determinación del potencial gravitatorio, y, por consiguiente un error en el cómputo de las interacciones. Para aumentar la precisión, el *algoritmo partícula-partícula partícula-malla* ( $P^3M$ ), corrige el valor obtenido con la malla incluyendo el cálculo directo de la interacción que ejercen sobre una dada partícula los vecinos más próximos. La distinción entre interacciones cercanas y lejanas y la búsqueda de vecinos más próximos constituyen dos aspectos fundamentales en la implementación de este algoritmo.

Los métodos de malla han probado ser satisfactorios en tanto las partículas se encuentren distribuidas en forma aproximadamente uniforme sobre una región rectangular del espacio, pero resultan imprecisos cuando la distribución de partículas es altamente no uniforme y la geometría del sistema es compleja sin un borde impuesto. Para tales sistemas, si el esfuerzo computacional requerido en el método PP no limitara drásticamente el número de partículas del sistema, sería deseable no utilizar una malla y computar la interacción en forma directa. De hecho, existe una alternativa que efectúa el cálculo sin la utilización de mallas, y con un esfuerzo de computación menor que el método PP. Tal procedimiento es el llamado *algoritmo de árbol jerárquico octal*. Este algoritmo explota el hecho de que el potencial gravitatorio decae como  $1/r$ , con lo cual las partículas interactúan fuertemente con sus vecinos más próximos, pero menos información resulta necesaria para describir sus interacciones con partículas más distantes. Así mientras la interacción sobre una partícula debida a otras partículas cercanas es evaluada en forma directa como una interacción partícula-partícula, la interacción debida a las partículas más distantes puede considerarse como una interacción directa entre la partícula y dicho *conjunto* de partículas distantes, representado como una partícula cuya masa es la total del grupo colocada en el centro de masa del mismo, como se ilustra en la figura 1. Por supuesto, esto conduce a una pérdida de información acerca de la distribución espacial de masa dentro del grupo, lo cual, a su vez, introduce un error en el cómputo de la interacción. Sin embargo incluyendo los momentos multipolares del grupo, esta información puede ser recuperada en parte, obteniéndose así una muy buena precisión.

Para llevar a cabo esta idea en forma eficiente, el algoritmo construye una estructura jerárquica que recuerda a un *árbol* (de aquí el nombre) a partir de una división particular del espacio. Esta estructura de árbol provee una manera sistemática de determinar el grado de “cercanía” entre dos diferentes partículas sin calcular explícitamente la distancia entre cada par de partículas y permite calcular eficientemente los momentos multipolares. El resultado neto del método es reducir efectivamente el número total de operaciones en el cómputo de las interacciones a  $O(N \log N)$ .

## Desarrollo multipolar

Puesto que el código de árbol explota al máximo el desarrollo multipolar del campo gravitatorio de un sistema de partículas, deduciremos en esta sección tal desarrollo. Por claridad en las expresiones utilizaremos letras griegas

como  $\alpha$  para indicar que la cantidad rotulada con la misma corresponde a la partícula  $\alpha$ -ésima, mientras que reservaremos los índices latinos como  $i$ , para denotar una de las coordenadas cartesianas  $x_1 = x$ ,  $x_2 = y$ ,  $x_3 = z$ .

El potencial gravitatorio  $\phi$  en un punto  $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$  del espacio, respecto de cierto sistema de coordenadas, generado por un conjunto de  $N$  partículas de masas  $m_\alpha$ ,  $\alpha = 1, \dots, N$  ubicadas en posiciones  $\mathbf{r}_\alpha = (x_{\alpha,1}, x_{\alpha,2}, x_{\alpha,3})$ , está dado por

$$\phi(\mathbf{r}) = -G \sum_{\alpha=1}^N \frac{m_\alpha}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha|}. \quad (1)$$

La distribución de partículas se encuentra contenida por completo dentro de cierta esfera, cuyo centro tomaremos como origen de coordenadas. Nuestro problema consiste en determinar una expresión asintótica del potencial (1) en puntos  $\mathbf{r}$  fuera de tal esfera.

La distancia  $d_\alpha = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha|$  desde el punto de observación  $r$  hasta una partícula  $\alpha$ , cualquiera del sistema, es igual a

$$\begin{aligned} d_\alpha &= |\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha| \\ &= \sqrt{r^2 + r_\alpha^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_\alpha} \\ &= \sqrt{r^2 + r_\alpha^2 - 2rr_\alpha \cos \theta_\alpha}. \end{aligned}$$

donde  $\theta_\alpha$  es el ángulo formado entre los vectores  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{r}_\alpha$ , tal como se ilustra en la figura 2. De este modo,

$$\frac{1}{d_\alpha} = \frac{1}{r} \frac{1}{\sqrt{1 + t_\alpha^2 - 2t_\alpha \mu_\alpha}}, \quad t_\alpha = \frac{r_\alpha}{r}, \quad \mu_\alpha = \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_\alpha}{r r_\alpha} = \cos \theta_\alpha.$$

Nótese que  $|\mu_\alpha| \leq 1$  y, siendo  $r_\alpha < r$  para todas las partículas,  $t_\alpha < 1$ . Por lo tanto es válido el desarrollo

$$\frac{1}{d_\alpha} = \frac{1}{r} \sum_{n=0}^{\infty} t_\alpha^n P_n(\mu_\alpha), \quad (2)$$

donde  $P_n(x)$  es el polinomio de Legendre de  $n$ -ésimo grado.

Sustituyendo el desarrollo (2) en (1), obtenemos

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) &= -\frac{G}{r} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha t_\alpha^n P_n(\mu_\alpha) = \phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \dots \\ &= -\frac{G}{r} \sum_{\alpha} m_\alpha - \frac{G}{r^2} \sum_{\alpha} m_\alpha r_\alpha P_1(\mu_\alpha) - \frac{G}{r^3} \sum_{\alpha} m_\alpha r_\alpha^2 P_2(\mu_\alpha) + \dots \end{aligned} \quad (3)$$

El primer término en (3) es igual a

$$\phi_1 = -\frac{GM}{r}, \quad (4)$$

donde  $M = \sum_{\alpha} m_\alpha$  es la masa total del sistema de partículas. Este término del desarrollo es conocido como término *monopolar* y nos da la primera aproximación para el potencial en puntos  $\mathbf{r}$  suficientemente alejados de la configuración.

Para analizar el segundo término en (3), notemos que dentro de la suma

$$m_\alpha r_\alpha P_1(\mu_\alpha) = m_\alpha r_\alpha \mu_\alpha = m_\alpha \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_\alpha}{r} = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^3 m_\alpha x_{\alpha,i} x_i.$$

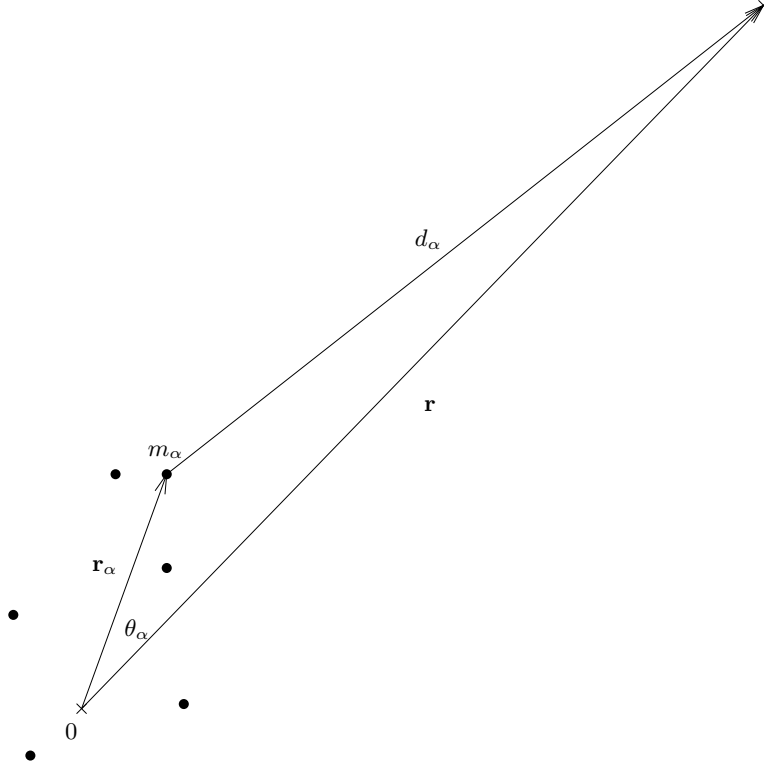
Luego

$$\phi_2 = -\frac{G}{r^3} \sum_{i=1}^3 D_i x_i = -\frac{GM}{r^3} \sum_{i=1}^3 x_i \bar{x}_i, \quad (5)$$

donde

$$D_i = \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha x_{\alpha,i} = M \bar{x}_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (6)$$

son los *momentos dipolares* del sistema de partículas, y  $\bar{\mathbf{r}} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3)$  las coordenadas de su centro de masa. Si el origen de coordenadas del sistema de referencia se sitúa en el centro de masa de la configuración ( $\bar{\mathbf{r}} = \mathbf{0}$ ),



**Figura 2.** Geometría para el desarrollo multipolar del potencial gravitatorio de un sistema de partículas.

entonces los momentos dipolares son nulos, y la contribución dipolar  $\phi_2$  al desarrollo asintótico del potencial es nula:

$$\phi_2 = 0. \quad (7)$$

Consideremos finalmente el tercer término del desarrollo (3). Su sumando es

$$m_\alpha r_\alpha^2 P_2(\mu_\alpha) = m_\alpha r_\alpha^2 \frac{3\mu_\alpha^2 - 1}{2} = \frac{m_\alpha}{2r^2} [3(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_\alpha)^2 - r_\alpha^2 r^2].$$

Escribiendo

$$r^2 = \sum_{i=1}^3 x_i^2 = \sum_{i,j} \delta_{ij} x_i x_j,$$

$$(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_\alpha)^2 = \left( \sum_{i=1}^3 x_i x_{\alpha,i} \right) \left( \sum_{j=1}^3 x_j x_{\alpha,j} \right) = \sum_{i,j} x_i x_j x_{\alpha,i} x_{\alpha,j},$$

tenemos que

$$m_\alpha r_\alpha^2 P_2(\mu_\alpha) = \frac{m_\alpha}{2r^2} \sum_{i,j} (3x_{\alpha,i} x_{\alpha,j} - r_\alpha^2 \delta_{ij}) x_i x_j,$$

con lo cual se obtiene la siguiente expresión para  $\phi_3$

$$\phi_3 = -\frac{G}{2r^5} \sum_{i,j} Q_{ij} x_i x_j,$$

donde

$$Q_{ij} = \sum_{\alpha} m_\alpha (3x_{\alpha,i} x_{\alpha,j} - r_\alpha^2 \delta_{ij}) \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (8)$$

son los *momentos cuadrupolares* de la distribución de partículas. Las nueve componentes  $Q_{ij}$  constituyen un tensor de segundo orden simétrico y de traza nula

$$Q_{ij} = Q_{ji}, \quad \sum_i Q_{ii} = 0.$$

De este modo sólo cinco de las nueve componentes son independientes, con lo que sólo se requiere computar cinco de ellas. Expresando  $Q_{33}$  en términos de las otras dos componentes diagonales

$$Q_{33} = -Q_{11} - Q_{22},$$

y utilizando la simetría del tensor para las componentes no diagonales, podemos escribir  $\phi_3$  en la forma

$$\phi_3 = -\frac{G}{2r^5} \left[ (x_1^2 - x_3^2) Q_{11} + (x_2^2 - x_3^2) Q_{22} + 2x_1x_2Q_{12} + 2x_1x_3Q_{13} + 2x_2x_3Q_{23} \right]. \quad (9)$$

En virtud de las ecuaciones (4), (7) y (9), la expresión asintótica del potencial (3), ubicando el origen de coordenadas en el centro de masa del sistema de partículas, está dada por

$$\phi(x_1, x_2, x_3) = -\frac{GM}{r} - \frac{G}{2r^5} \left[ (x_1^2 - x_3^2) Q_{11} + (x_2^2 - x_3^2) Q_{22} + 2x_1x_2Q_{12} + 2x_1x_3Q_{13} + 2x_2x_3Q_{23} \right], \quad (10)$$

$$M = \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha}, \quad Q_{ij} = \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} (3x_{\alpha,i}x_{\alpha,j} - r_{\alpha}^2 \delta_{ij}).$$

La fuerza por unidad de masa  $\mathbf{f} = (f_1, f_2, f_3)$  que experimenta una partícula ubicada en  $\mathbf{r}$  por la interacción con el sistema de partículas está dada por la derivada del potencial  $\phi$

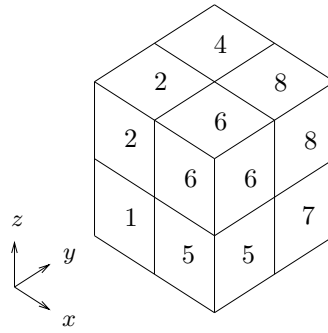
$$\mathbf{f}(\mathbf{r}) = -\nabla\phi(\mathbf{r}). \quad (11)$$

Utilizando la expresión asintótica (10) de  $\phi$ , obtenemos para las componentes del vector fuerza  $\mathbf{f}$  los desarrollos asintóticos

$$f_1(x_1, x_2, x_3) = G \left\{ -\frac{M}{r^3} x_1 - \frac{5}{2r^7} x_1 \left[ (x_1^2 - x_3^2) Q_{11} + (x_2^2 - x_3^2) Q_{22} + 2x_1x_2Q_{12} + 2x_1x_3Q_{13} + 2x_2x_3Q_{23} \right] + \frac{1}{r^5} \left[ x_1Q_{11} + x_2Q_{12} + x_3Q_{13} \right] \right\}, \quad (12a)$$

$$f_2(x_1, x_2, x_3) = G \left\{ -\frac{M}{r^3} x_2 - \frac{5}{2r^7} x_2 \left[ (x_1^2 - x_3^2) Q_{11} + (x_2^2 - x_3^2) Q_{22} + 2x_1x_2Q_{12} + 2x_1x_3Q_{13} + 2x_2x_3Q_{23} \right] + \frac{1}{r^5} \left[ x_1Q_{12} + x_2Q_{22} + x_3Q_{23} \right] \right\}, \quad (12b)$$

$$f_3(x_1, x_2, x_3) = G \left\{ -\frac{M}{r^3} x_3 - \frac{5}{2r^7} x_3 \left[ (x_1^2 - x_3^2) Q_{11} + (x_2^2 - x_3^2) Q_{22} + 2x_1x_2Q_{12} + 2x_1x_3Q_{13} + 2x_2x_3Q_{23} \right] + \frac{1}{r^5} \left[ x_1Q_{13} + x_2Q_{22} - x_3(Q_{11} + Q_{22}) \right] \right\}. \quad (12c)$$



3	7
1	5

(a)  $z < 0$

4	8
2	6

(b)  $z > 0$

**Figura 3.** Rotulación de las subceldas descendientes de una celda.

## Construcción del árbol

La implementación del código de árbol requiere, en primer lugar, establecer una división jerárquica del espacio ocupado por el sistema de partículas que permita, posteriormente, discernir las próximas de las lejanas a una dada partícula. Siguiendo al trabajo original de Barnes & Hut (1986), comenzamos con una *celda* cúbica vacía suficientemente grande para contener todo el sistema de partículas. Las partículas son entonces colocadas (*cargadas*, en la jerga) en esta celda *raíz* (en inglés, *root*) una a la vez. Si dos partículas caen en la misma celda (lo que sucederá tan pronto como la segunda partícula sea cargada en la celda raíz), la celda se divide en subceldas teniendo éstas exactamente la mitad de largo, ancho y alto que la celda que las genera. Esto significa que, en tres dimensiones, la celda original es dividida en ocho subceldas (de aquí el calificativo de *octal* al árbol). Si dos partículas caen aún en una misma subcelda, ésta es dividida recursivamente hasta que las partículas estén ubicadas en diferentes compartimientos. Entonces, la siguiente partícula es cargada y el mismo procedimiento comienza nuevamente desde la celda raíz. Cuando las  $N$  partículas hayan sido cargadas, el espacio que ocupa el sistema habrá sido particionado en un determinado número de celdas cúbicas de diferentes tamaños, con al menos una partícula por celda. La estructura de árbol proviene de asignar, en un dado nivel del proceso de división, “hojas” y “ramas”: una hoja apunta a una partícula y una rama a una celda que ha sido subdividida. En cada paso de división la estructura del árbol es aumentada en un nivel de la jerarquía. Debería ser claro que, a diferencia de los métodos basados en mallas, la subdivisión del espacio obtenida por este algoritmo se ajusta automáticamente a la distribución espacial de las partículas.

El árbol puede ser descrito mediante un arreglo bidimensional (matriz) como sigue. En primer lugar cada nodo del árbol (“rama” y “hoja”) es rotulado con un cierto índice que identifica su naturaleza. En nuestra implementación, cada hoja del árbol, que es una partícula del sistema, es rotulada con un número entero positivo  $i = 1, \dots, N$ , donde  $N$  es el número total de partículas del sistema. De la misma manera, cada rama del árbol, que es una celda de un dado nivel de división, es rotulada con un número entero positivo  $i$  que comienza a contarse a partir del valor  $\text{INICELDAS} = \text{MAXCUERPOS} + 1$ , donde  $\text{MAXCUERPOS}$  es un número máximo de partículas del sistema fijado de antemano. De este modo, si  $i < \text{INICELDAS}$ , el  $i$ -ésimo nodo del árbol es una hoja (partícula); en caso contrario, es una celda. Ahora nótese que, en un dado nivel de construcción del árbol, cada celda que se subdivide, genera ocho posibles celdas del siguiente nivel de jerarquía, cada una de las cuales apuntará a un cuerpo, a otra celda, o quedará vacía. Esta información sobre la estructura del árbol es almacenada en la fila  $i$ -ésima del arreglo *subceldas* para *cada* celda  $i$  del árbol:

$$\text{subceldas}(i, j) \quad j = 1, \dots, 8$$

$i = \text{INICELDAS}, \text{INICELDAS} + 1, \dots$ . El índice  $j$ , que recorre los valores enteros de 1 a 8, indica la subcelda descendiente de la celda dada según el esquema de la figura 3. La elección de tal esquema de identificación será clara pronto.

Durante la carga de las partículas, la división del espacio y construcción del árbol llena el arreglo *subceldas*.

El proceso para un cuerpo dado, esquematizado en el diagrama de flujo de la figura 4, puede ser descrito como sigue.

Para cargar la partícula de índice  $p$  seguir los siguientes pasos.

PASO 1. Tomar como celda  $i$ -ésima la celda correspondiente a la raíz.

PASO 2. Determinar en qué subcelda descendiente de la celda  $i$  está ubicado el cuerpo  $p$ . Sea tal subcelda la  $j$ -ésima.

PASO 3. Determinar si tal subcelda está ocupada (ya sea por una partícula u otra celda).

PASO 4. Si no está ocupada continuar con el paso 4-a, de lo contrario, proceder al paso 4-b.

PASO 4-a. Se encontró un lugar en la estructura del árbol para la partícula  $p$  en la subcelda  $j$ -ésima de la celda  $i$ . Esto es,  $\text{subcelda}(i, j)=p$  y la partícula resulta cargada.

PASO 4-b. Determinar si la subcelda está ocupada por una partícula u otra celda. Si está ocupada por una partícula proceder con el paso 5. De lo contrario está ocupada por una celda y seguir con el paso 6.

PASO 5. Subdividir la subcelda  $j$  de la celda  $i$ , creando una nueva celda de índice  $l$ , y entonces:

- Almacenar la partícula  $q$  que está en la subcelda  $j$  de la celda  $i$  en la apropiada subcelda de la nueva celda. Para ello determinar cual es la subcelda de la nueva celda que ocupa. Si ésta es la  $k$ -ésima entonces  $\text{subcelda}(l, k)=q$
- Mantener vinculado el árbol almacenando en la subcelda  $j$  de la celda original el índice  $l$  correspondiente a la nueva celda:  $\text{subcelda}(i, j)=l$ .

Continuar ahora con el paso 6.

PASO 6. El nodo indexado por la subcelda  $j$  de la celda  $i$ , es una celda. Tomando como celda dicha rama:  $i=\text{subcelda}(i, j)$  avanzar al siguiente nivel de jerarquía volviendo al paso 2.

Estos pasos deben realizarse para *cada* una de las partículas del sistema. En el paso 5 el proceso de crear una nueva celda en el árbol consiste a su vez en un procedimiento, implementado, por ejemplo, como una función `crearcela`, que devuelve el siguiente índice  $l$  disponible para rotular celdas. Además inicializa a cero los contenidos de  $\text{subceldas}(l, j)$  de cada una de las subceldas  $j$  de la nueva celda\*. Con ésto, para determinar, en el paso 3, si la celda  $j$ -ésima de una celda  $i$  está ocupada, es suficiente preguntar si el contenido de  $\text{subceldas}(i, j)$  es distinto de cero. En tanto que, con nuestra convención sobre los índices de los nodos del árbol, para determinar en el paso 4-b si la subcelda  $j$ -ésima de la celda  $i$  está ocupada por una partícula u otra celda, se examina el contenido  $ij$  del arreglo `subceldas`. Si  $q=\text{subceldas}(i, j) < \text{INICELDAS}$  entonces el nodo de índice  $q$  es una partícula, en caso contrario es una celda. Finalmente, tanto en el paso 2 como el paso 5 se requiere contar con un procedimiento que permita determinar rápidamente en que subcelda descendiente de una celda dada se encuentra una partícula contenida en tal celda. Este procedimiento, implementado como una función `subindice` de dos argumentos: la partícula y la celda, procede como sigue\*\*.

Sean  $(x_{1,p}, x_{2,p}, x_{3,p})$  las coordenadas de la partícula  $p$ -ésima *respecto al centro geométrico* de la celda  $i$ -ésima que lo contiene. Para determinar el índice  $j$  de la subcelda descendiente de la celda  $i$ -ésima que ocupa la partícula seguir los siguientes pasos.

PASO 1. Tomar  $j = 1$

PASO 2. Para  $k = 1, 2, 3$

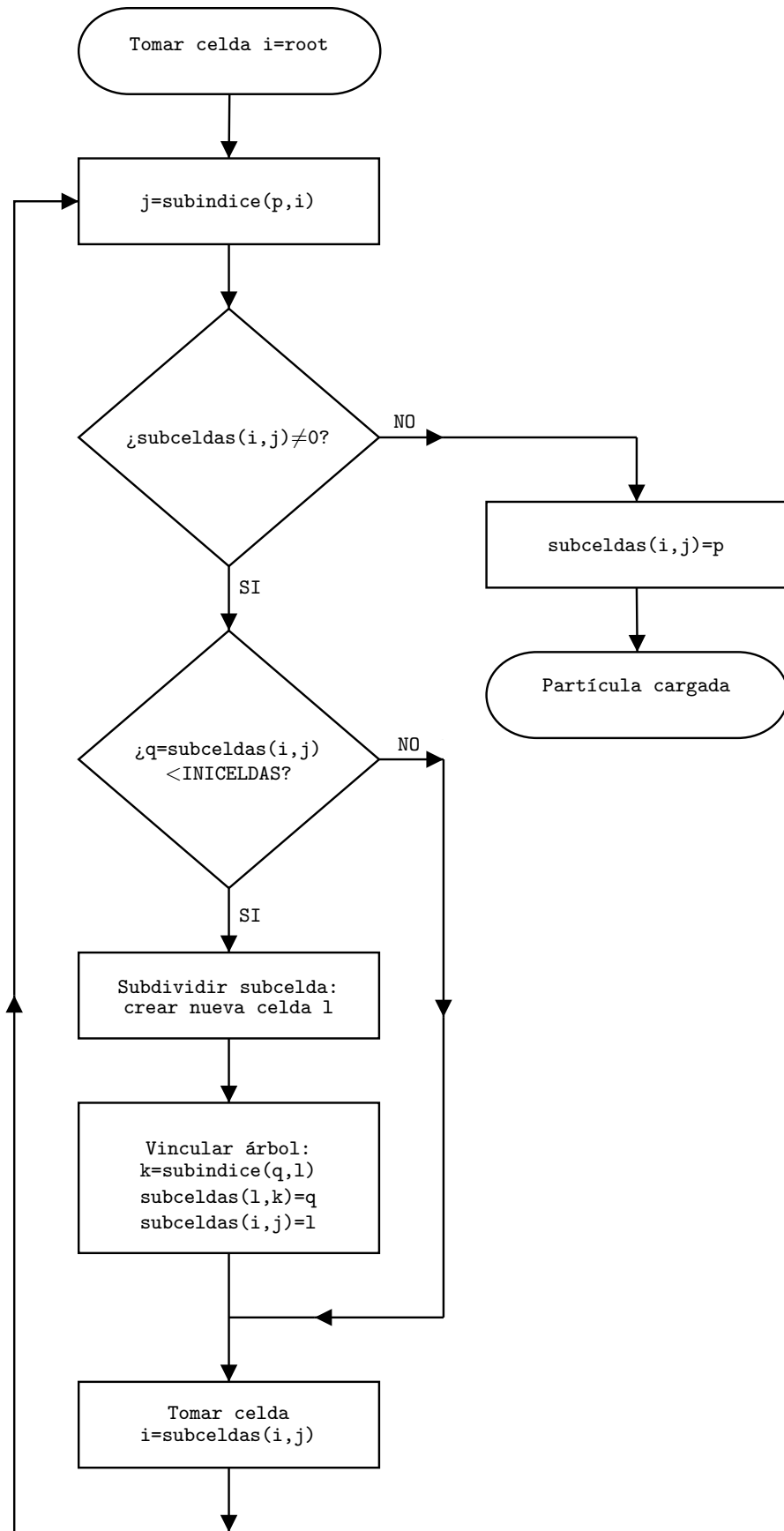
Si  $x_{k,p} > 0$  tomar  $j = j + 2^{3-k}$

PASO 3. Tomar  $\text{subindice}(p, i) = j$

---

\*Nótese que esta función debe ser llamada también *antes* de iniciar el proceso de cargado de los cuerpos para crear la celda raíz, la cual tendrá el índice `INICELDAS`.

\*\*Es este algoritmo el que origina la identificación de las subceldas de un celda según el esquema de la figura 3.



**Figura 4.** Diagrama de flujo del proceso de cargado de un cuerpo en la estructura del árbol.



nivel	celda	subceldas			
		1	2	3	4
0	11	17	12	10	13
1	12	0	1	0	2
	13	15	14	0	0
	17	0	7	9	8
2	14	4	0	0	3
	15	16	0	0	0
3	16	6	0	0	5

2	4
1	3

**Tabla 1.** Estructura del árbol correspondiente a la figura 6. Las subceldas descendientes de una celda son rotuladas como se indica en la figura.

Para ilustrar el proceso de construcción del árbol, consideremos un conjunto de diez partículas en el plano. El conjunto de figuras 5 y 6 muestran el proceso de división, en tanto que la tabla 1 da la estructura matricial final del árbol. Las celdas son rotuladas de la manera indicada anteriormente, tomando  $\text{MAXCUERPOS}=10$ , con lo que la celda raíz tiene a 11 por índice. Nótese, sin embargo, que en dos dimensiones una celda consta de cuatro subceldas y no ocho como en el caso tridimensional. Además, el índice que identifica una subcelda dentro de una celda toma, en dos dimensiones, uno de los valores enteros de 1 a 4, según el esquema de la figura en la tabla 1.

## Adornado del árbol

Con la estructura del árbol construida, cada índice de un nodo correspondiente a una partícula sirve de rótulo para las propiedades físicas de la misma, a saber, la masa y posición. De la misma manera es necesario que cantidades semejantes sean calculada y guardadas para cada nodo del árbol correspondiente a una celda (rama), debido a que tal información es requerida para el cálculo de las interacciones. Específicamente, se necesita conocer la masa, la posición del centro de masa y los momentos cuadrupolares de la distribución de partículas contenida dentro de cada celda\*. Este proceso de “adornar” el árbol puede realizarse eficientemente propagando la información conocida en las hojas (partículas) hacia la raíz del árbol. Así, comenzando desde el nivel de jerarquía más alto, la masa, posición del centro de masa y momentos cuadrupolares de una celda son obtenidos a partir del conocimiento de estas cantidades en sus subceldas descendientes. Este procedimiento recursivo mantiene el esfuerzo de cómputo al mínimo.

En un dado nivel de jerarquía, la masa  $M$  de una celda es obtenida simplemente sumando las masas  $M^s$  de sus subceldas descendientes:

$$M = \sum_s M^s \quad (13)$$

en tanto que la posición  $\bar{\mathbf{r}}$  de su centro de masa es obtenida por la suma pesada de las posiciones  $\bar{\mathbf{r}}_s$  de los centros de masa de sus subceldas:

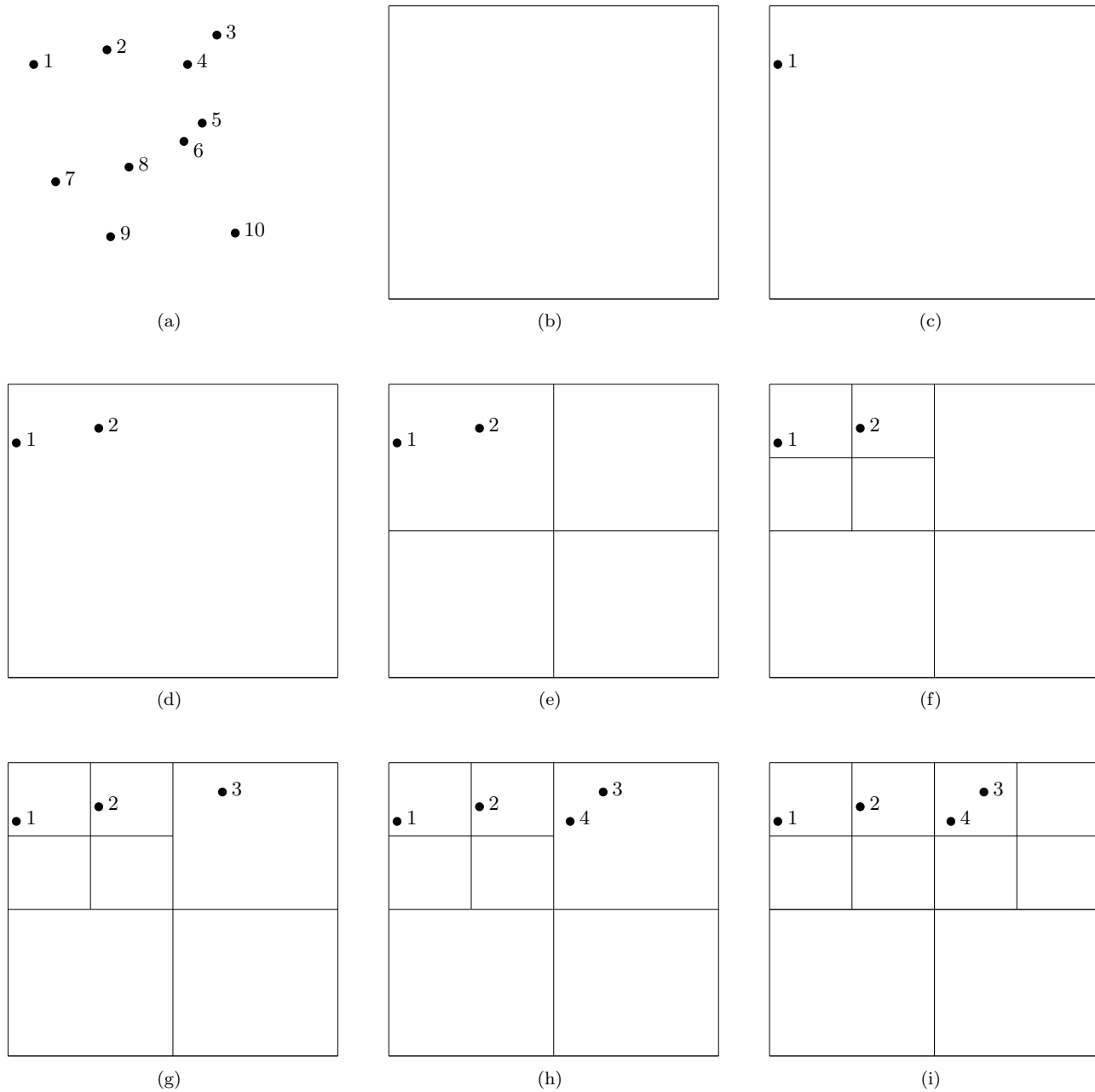
$$\bar{\mathbf{r}} = \frac{\sum_s M^s \bar{\mathbf{r}}_s}{\sum_s M^s} \quad (14)$$

El cálculo de los momentos cuadrupolares de una celda a partir de los momentos respectivos de sus subceldas descendientes no es tan simple, debido a que tales cantidades dependen de la elección del origen de coordenadas\*\*.

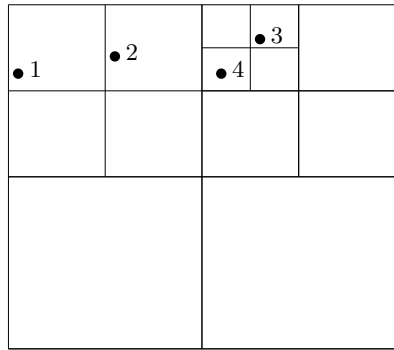
Para deducir la fórmula apropiada consideremos, como se ilustra en la figura 7, el cómputo de los momentos cuadrupolares  $Q_{ij}$  de un grupo de partículas a partir del conocimiento del valor de los mismos en diferentes

\*Dado que tratamos con fuerzas gravitatorias, los momentos dipolares se anulan al calcularlos relativos al centro de masa.

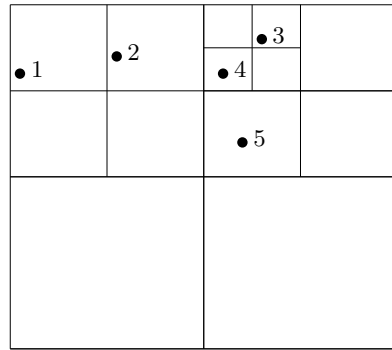
\*\*Un teorema general nos dice que en el desarrollo multipolar del potencial  $\phi$  para una distribución arbitraria de masa (o carga, en el caso de considerar interacciones electrostáticas) los valores del primer término multipolar no nulo son independientes de la elección del origen de coordenadas, en tanto que los valores de todos los términos multipolares superiores dependen en general de la elección del origen. Puesto que, para la interacción gravitatoria, la masa total del sistema es una cantidad siempre no nula, esto significa que sólo el término monopolar es independiente del origen. De hecho, esto es lo que nos permite obtener la masa total de la celda sumando simplemente las masas de las subceldas descendientes.



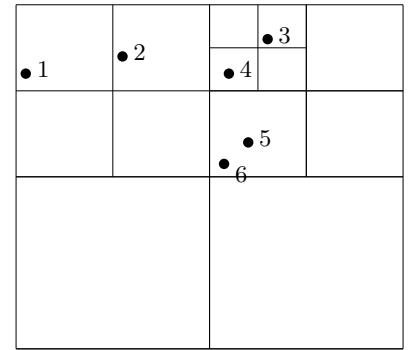
**Figura 5.** Construcción del árbol para un conjunto de diez cuerpos en la geometría bidimensional (*continuación*).



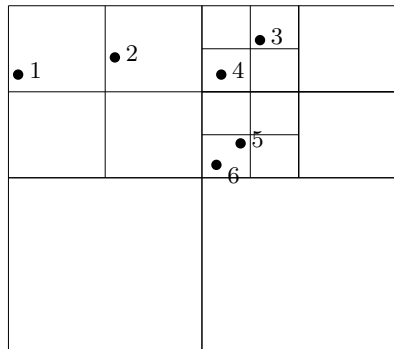
(j)



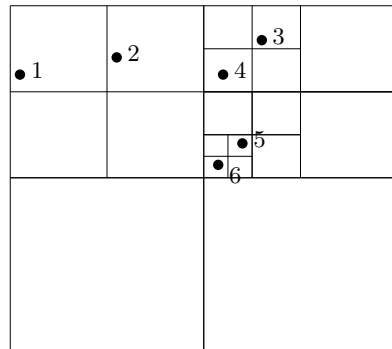
(k)



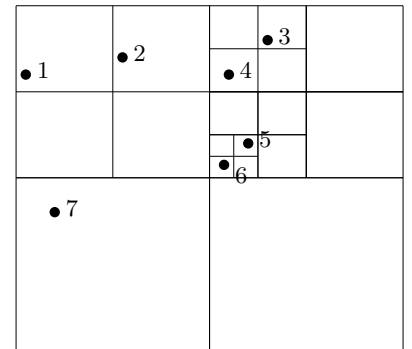
(l)



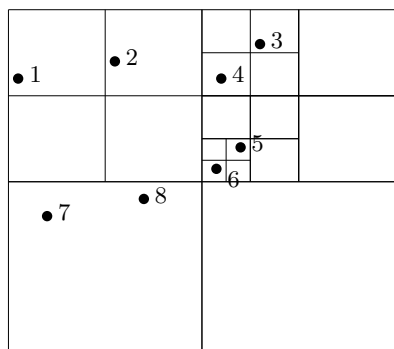
(m)



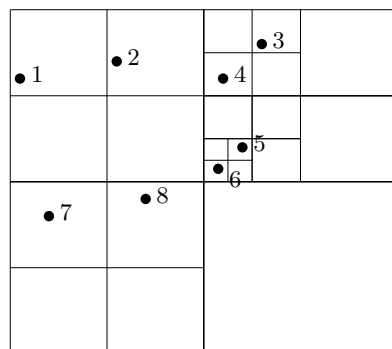
(n)



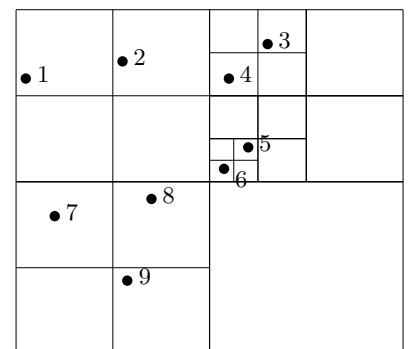
(ñ)



(o)

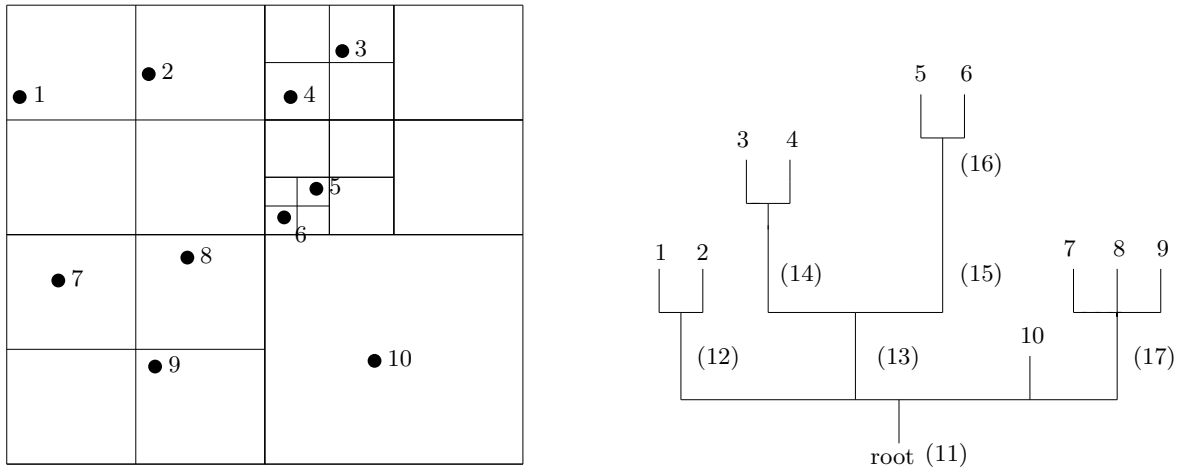


(p)

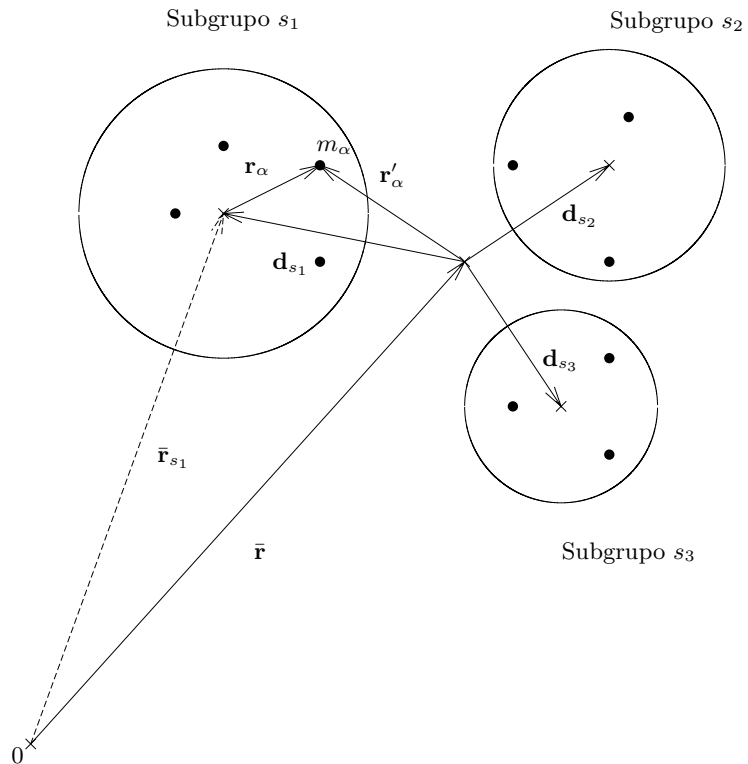


(q)

**Figura 5.** Construcción del árbol para un conjunto de diez cuerpos en la geometría bidimensional (*continuación*).



**Figura 6.** Construcción final del árbol para un conjunto de diez cuerpos en la geometría bidimensional.



**Figura 7.** Geometría en el cómputo de los momentos cuadrupolares de un grupo de pseudo-partículas.

subgrupos. Inicialmente, los momentos  $Q_{ij}^s$  de un subgrupo  $s$  son calculados respecto de su correspondiente centro de masa

$$Q_{ij}^s = \sum_{\alpha} m_{\alpha} (3x_{\alpha,i}x_{\alpha,j} - r_{\alpha}^2 \delta_{ij}),$$

donde la suma corre sobre las partículas del subgrupo  $s$ . La posición  $\bar{\mathbf{r}}_s$  del centro de masa del subgrupo  $s$  difiere de la posición  $\bar{\mathbf{r}}$  del centro de masa de todo el grupo en el vector

$$\mathbf{d}_s = \bar{\mathbf{r}}_s - \bar{\mathbf{r}}. \quad (15)$$

De este modo, para computar los momentos cuadrupolares  $Q'_{ij}^s$  del subgrupo  $s$  respecto al centro de masa del grupo debemos considerar una traslación de origen, desplazando las coordenadas de las partículas en  $\mathbf{d}_s = (x_{s,1}, x_{s,2}, x_{s,3})$

$$\mathbf{r}'_{\alpha} = \mathbf{r}_{\alpha} + \mathbf{d}_s.$$

Tal traslación conduce a

$$\begin{aligned} Q'_{ij}^s &= \sum_{\alpha} m_{\alpha} \left[ 3(x_{\alpha,i} + x_{s,i})(x_{\alpha,j} + x_{s,j}) - \delta_{ij} \sum_k (x_{\alpha,k} + x_{s,k})^2 \right] \\ &= \sum_{\alpha} m_{\alpha} [3x_{\alpha,i}x_{\alpha,j} - r_{\alpha}^2 \delta_{ij}] + 3x_{s,i}x_{s,j} \sum_{\alpha} m_{\alpha} - \delta_{ij} d_s^2 \sum_{\alpha} m_{\alpha} \\ &\quad + 3x_{s,j} \sum_{\alpha} m_{\alpha} x_{\alpha,i} + 3x_{s,i} \sum_{\alpha} m_{\alpha} x_{\alpha,j} - 2\delta_{ij} \sum_k x_{s,k} \sum_{\alpha} m_{\alpha} x_{\alpha,k} \end{aligned}$$

y puesto que los momentos dipolares del subgrupo respecto a su centro de masa son nulos, obtenemos

$$Q'_{ij}^s = Q_{ij}^s + 3x_{s,i}x_{s,j}M^s - \delta_{ij}d_s^2M^s.$$

Ahora, con los momentos de los subgrupos computados respecto al centro de masa del grupo, los momentos cuadrupolares del mismo son obtenidos sumando sobre los valores de los subgrupos:

$$Q_{ij} = \sum_s \left( Q_{ij}^s + 3x_{s,i}x_{s,j}M^s - \delta_{ij}d_s^2M^s \right). \quad (16)$$

Las ecuaciones 15 y 16 nos permiten computar los momentos cuadrupolares de una celda a partir del conocimiento de los momentos de sus subceldas descendientes y los vectores de desplazamiento  $\mathbf{d}_s$ . Junto con la masa total y el centro de masa, dados por las ecuaciones 13 y 14, estas cantidades describen (a segundo orden) la distribución de masa de las partículas contenidas en la celda, definiendo lo que podemos llamar una “pseudo-partícula”.

Para la implementación, en el código de árbol, del cálculo de los momentos almacenamos para cada nodo  $i$  del árbol (partículas y celdas) la masa y posición del mismo en las componentes `masa(i)` y `r(i)` de sendos arreglos. De este modo, mientras que para un nodo correspondiente a una partícula ( $i < \text{INICELDAS}$ ), estos arreglos guardan su masa y posición, para un nodo correspondiente a una celda ( $i \geq \text{INICELDAS}$ ) guardan la masa total y posición del centro de masa de las partículas contenidas en tal celda. Por otra parte, los cinco términos cuadrupolares de una celda son almacenados en las componentes

$$\text{mquad}(i, k) \quad k = 1, \dots, 5,$$

del arreglo bidimensional `mquad`, para cada celda  $i = \text{INICELDAS}, \text{INICELDAS} + 1, \dots$ , de manera tal que

$$\text{mquad}(i, k) = Q_{mn} \quad \text{siendo } k = (m - 1)(3 - 1) + n.$$

Explícitamente,

$$\begin{aligned} \text{mquad}(i, 1) &= Q_{11}, \\ \text{mquad}(i, 2) &= Q_{12}, \\ \text{mquad}(i, 3) &= Q_{13}, \\ \text{mquad}(i, 4) &= Q_{22}, \\ \text{mquad}(i, 5) &= Q_{23}. \end{aligned}$$

El proceso de cálculo de los términos monopulares y cuadrupolares de las celdas del árbol puede, entonces, ser descrito como sigue.

Para computar los términos monopulares de las celdas del árbol seguir los siguientes pasos.

PASO 1. Para cada nivel  $l$  de jerarquía del árbol, comenzando desde el nivel más alto seguir los pasos 1–5.

PASO 2. Para cada celda  $i$  del nivel  $l$  seguir los pasos 2–5.

PASO 3. Inicializar acumuladores:

$$\begin{aligned} \text{masa}(\mathbf{i}) &= 0 \\ \mathbf{r}(\mathbf{i}) &= \mathbf{0} \end{aligned}$$

PASO 4. Para cada subcelda  $j$  no vacía de la celda  $i$  tomar

$$\begin{aligned} \text{masa}(\mathbf{i}) &= \text{masa}(\mathbf{i}) + \text{masa}(\mathbf{j}) \\ \mathbf{r}(\mathbf{i}) &= \mathbf{r}(\mathbf{i}) + \mathbf{r}(\mathbf{j}) \end{aligned}$$

PASO 5. Tomar  $\mathbf{r}(\mathbf{i}) = \mathbf{r}(\mathbf{i})/\text{masa}(\mathbf{i})$ .

Para computar los términos cuadrupolares de las celdas del árbol seguir los siguientes pasos.

PASO 1. Para cada nivel  $l$  de jerarquía del árbol, comenzando desde el nivel más alto seguir el paso 2.

PASO 2. Para cada celda  $i$  del nivel  $l$  seguir los pasos 3–4.

PASO 3. Inicializar acumuladores:

$$\text{mquad}(\mathbf{i}, \mathbf{k}) = 0 \quad k = 1, \dots, 5$$

PASO 4. Para cada subcelda  $j$  no vacía de la celda  $i$  seguir los pasos 5–6.

PASO 5. Calcular  $\mathbf{d}_s = (x_{s,1}, x_{s,2}, x_{s,3}) = \mathbf{r}(\mathbf{j}) - \mathbf{r}(\mathbf{i})$

PASO 6. Para  $m = 1, \dots, 4$  y  $n = m, \dots, 5$

Tomar  $k = 2(m - 1) + n$

$$\text{mquad}(\mathbf{i}, \mathbf{k}) = \text{mquad}(\mathbf{i}, \mathbf{k}) +$$

$$3x_{s,m}x_{s,n}\text{masa}(\mathbf{j}) - \delta_{mn}\mathbf{d}_s^2\text{masa}(\mathbf{j})$$

Si la subcelda  $j$  es una celda agregar su momento:

$$\text{mquad}(\mathbf{i}, \mathbf{k}) = \text{mquad}(\mathbf{i}, \mathbf{k}) + \text{mquad}(\mathbf{j}, \mathbf{k})$$

Los procedimientos anteriores presuponen el conocimiento de cuales son las celdas correspondientes a un nivel de jerarquía del árbol. Sin embargo, ésto puede reemplazarse por un simple bucle sobre las celdas si éstas son ordenadas por tamaño *creciente* en base a la longitud de sus lados (información disponible en nuestra implementación del código, ya que es requerida para el cómputo de las interacciones).

La figura 8 ilustra gráficamente los resultados del primer procedimiento en el cálculo de la masa total (denotada por el tamaño del símbolo) y centro de masa de las pseudo-partículas en las celdas de los distintos niveles del árbol de nuestro ejemplo bidimensional de la tabla 1.

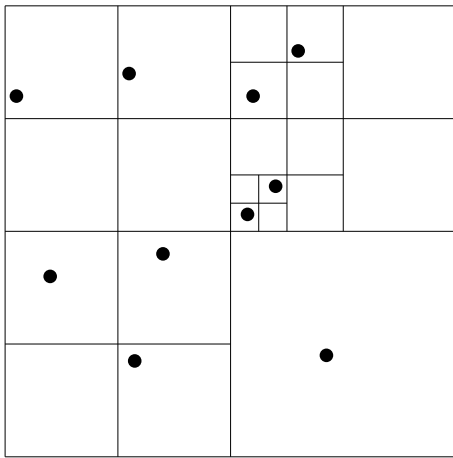
## Cómputo de las interacciones

Una vez que el árbol ha sido construido y “adornado”, esta estructura es ahora utilizada para computar la interacción gravitatoria sobre cada partícula del sistema. La idea subyacente es incluir las contribuciones de las partículas cercanas como una interacción directa partícula–partícula, mientras que las contribuciones de partículas lejanas es tomada en cuenta a través de las celdas que las incluyen, esto es, como un grupo de partículas (pseudo-partículas). Este esquema tiene la ventaja de retener el concepto de interacción partícula–objeto (donde objeto es otra partícula o una pseudo-partícula), pero el tiempo de cálculo es reducido significativamente respecto del cómputo directo de una partícula con todas.

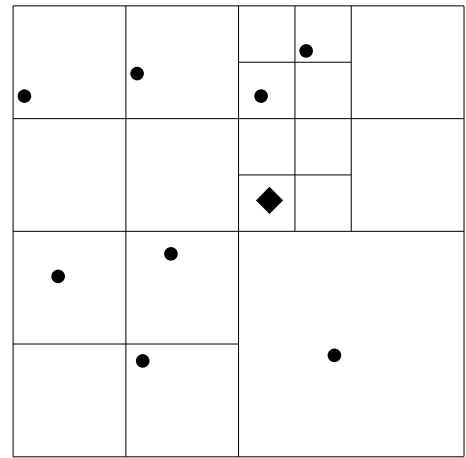
Por supuesto, se plantea el problema de decidir cuando agrupar las partículas. El criterio más simple, introducido originalmente por Barnes y Hut, procede como sigue. Para cada partícula el cálculo de la interacción comienza en la raíz del árbol. El tamaño,  $s$ , de la celda a la que apunta una rama dada del árbol es comparado con la distancia  $d$  de la partícula bajo consideración al centro de masa de la celda. Si la relación

$$s/d < \theta \tag{17}$$

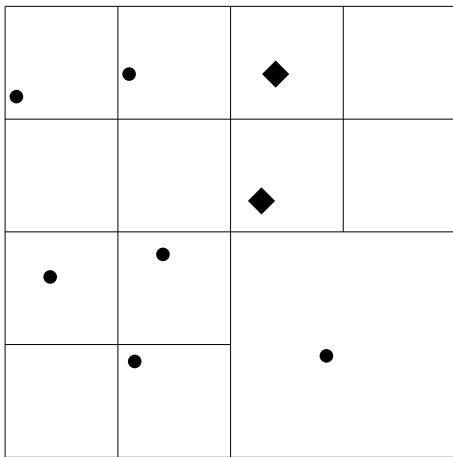
se satisface, donde  $\theta$  es un parámetro de tolerancia prefijado, entonces la estructura interna de la celda es ignorada y su contribución a la interacción (a través de los términos monopulares y cuadrupolares ya calculados) es agregada a la interacción total sobre la partícula. Por el contrario, si el criterio no se satisface, la celda es



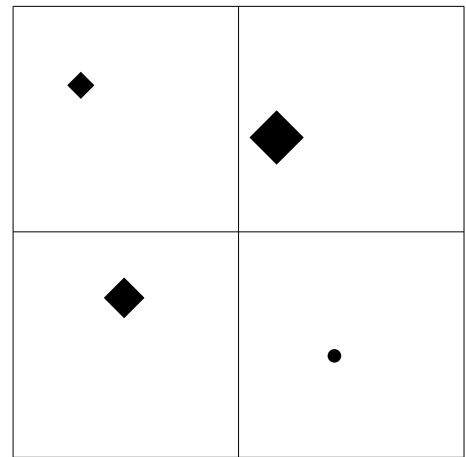
(a)



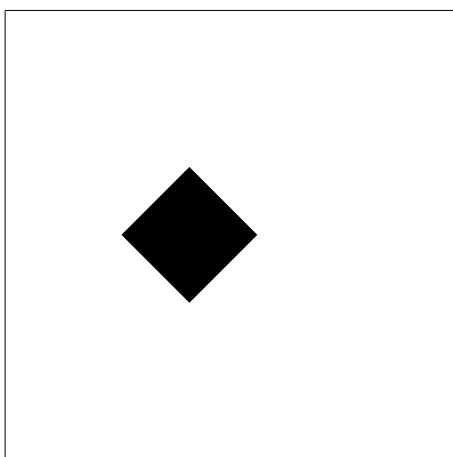
(b) nivel  $l = 3$



(c) nivel  $l = 2$

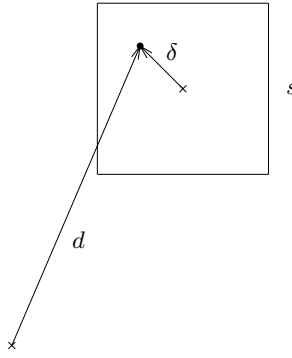


(d) nivel  $l = 1$

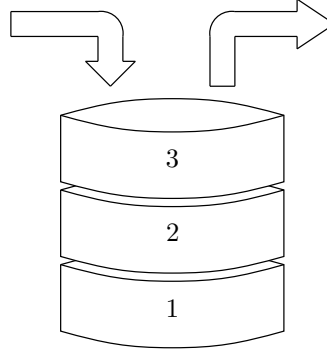


(e) nivel  $l = 0$

**Figura 8.** Masa total y centro masa para las pseudo-partículas (rombos) a partir de las partículas (círculos) en diferentes niveles de la jerarquía del árbol de la figura 6. El tamaño del símbolo es proporcional a la masa de la pseudo-partícula.



**Figura 9.** Criterio de aceptación de pseudo-partículas.



**Figura 10.** Representación gráfica de una pila.

resuelta en sus descendientes, cada una de los cuales es recursivamente examinada de acuerdo al criterio y, si es necesario, se vuelve a examinar más profundo en su estructura. Así, este procedimiento asciende a través del árbol, hasta que, ya sea el criterio se satisface o bien una hoja (esto es, una partícula) es alcanzada. En este último caso se computa la interacción partícula-partícula en forma directa. Dado que el valor de  $\theta$  determina cuan profundo se explora la estructura del árbol, lo podemos denominar *parámetro de expansión* del árbol.

El criterio original (17), no distingue la distribución de las partículas dentro de la celda, de modo que la contribución de una configuración donde una gran concentración de masa se localice en una de las esquinas será computada erróneamente. Para reducir este inconveniente, una alternativa, que implementamos en nuestro código, computa además la distancia  $\delta$  entre el centro geométrico y el centro de masa de la celda, y considera entonces como criterio para *no* expandir la celda la relación (Barnes, 1993,1994).

$$s/\theta + \delta < d \quad (18)$$

La geometría de este criterio es ilustrada en la figura 9.

El procedimiento del cómputo de la interacción sobre un cuerpo dado del sistema es ilustrado en el diagrama de flujo de la figura 11 y puede ser descrito como sigue. Los índices de los nodos del árbol a examinar durante el proceso son guardados en un arreglo unidimensional que sirve como *pila*. Esto es, los índices de los nodos conforme se explora el árbol desde la celda raíz son puestos uno “encima” del otro y extraídos para su examen comenzando por la posición superior, como se ilustra gráficamente en la figura 10.

Para computar la interacción gravitatoria sobre el cuerpo  $p$ -ésimo seguir los siguientes pasos:

PASO 1. Poner la celda raíz en la pila a examinar:

```
indice=1
pila(indice)=root
```

PASO 2. Mientras haya nodos en la pila seguir los pasos 3-5. De lo contrario terminar.

PASO 3. Extraer el nodo superior de la pila:

```
i=pila(indice)
indice=indice-1
```



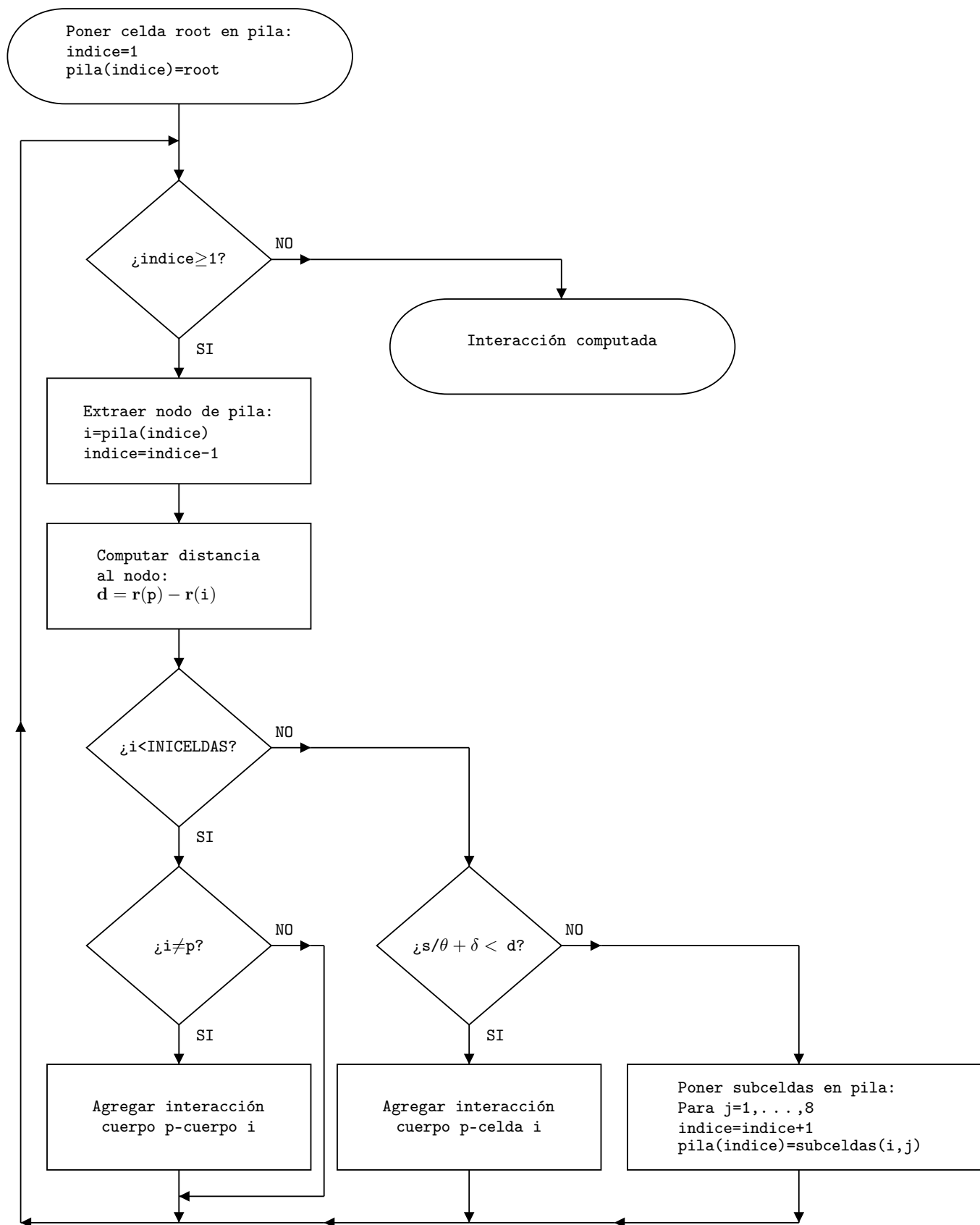


Figura 11. Diagrama de flujo del proceso de cómputo de la interacción sobre un cuerpo  $p$  con la estructura del árbol.

PASO 4. Computar distancia al nodo:  $\mathbf{d} = \mathbf{r}(p) - \mathbf{r}(i)$

PASO 5. Si el nodo es un cuerpo ( $i < \text{INICELDAS}$ ), seguir con el paso 5-a. De lo contrario es una celda y seguir con el paso 5-b.

PASO 5-a. Si  $i \neq p$  (evitar auto-interacción) computar la interacción entre las partículas  $i$  y  $p$  y agregarla a la interacción total.

PASO 5-b. Si la celda verifica el criterio de no expansión proseguir con el paso 6-a, de lo contrario, seguir con el paso 6-b.

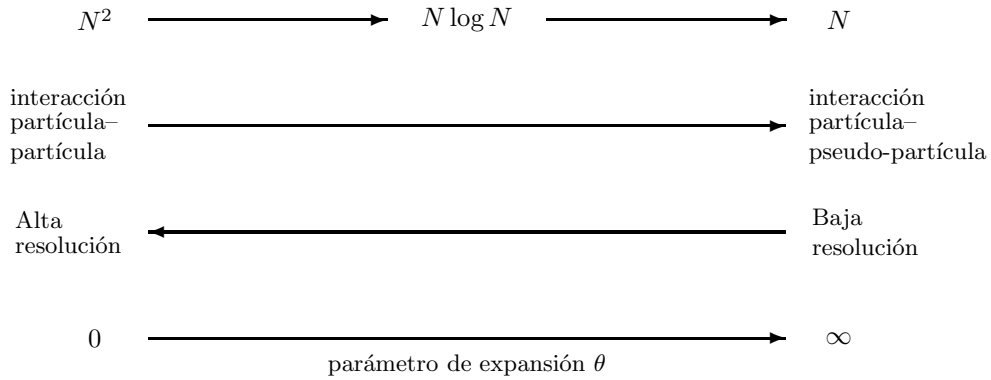
PASO 6-a. Computar la interacción entre la celda  $i$  y la partícula  $p$  y agregarla a la interacción total.

PASO 6-b. Poner las subceldas descendientes de la celda  $i$  en la pila para examinarlas:

```
Para  $j = 1, \dots, 8$  si  $\text{subceldas}(i, j) \neq 0$  tomar
    indice=indice+1
    pila(indice)=subceldas(i, j)
```

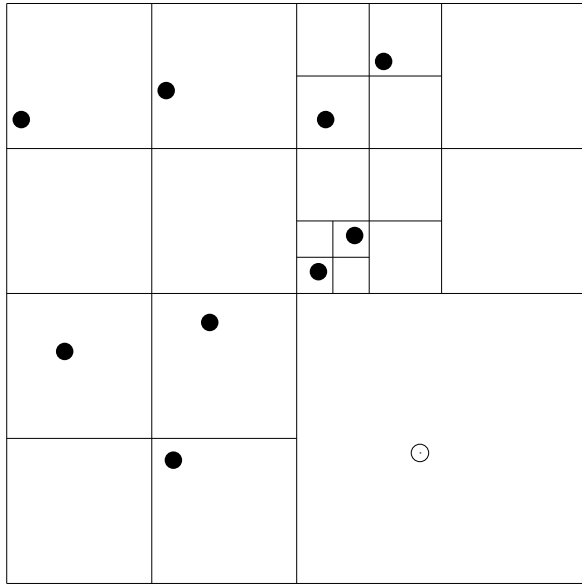
Este procedimiento debe realizarse para cada partícula del sistema. El cómputo de la interacción entre partículas del paso 5-a es realizado en forma directa, mientras que la interacción entre partícula-celda (pseudo-partícula) es efectuada de acuerdo a los desarrollos asintóticos (12) y el conocimiento de los términos monopoles y cuadrupolares de la celda.

Para un valor no nulo de  $\theta$  el esfuerzo computacional en el cálculo de las interacciones de las  $N$  partículas de un sistema resulta ser efectivamente del mismo orden que el requerido para la construcción del árbol, esto es,  $O(N \log N)$ . Así el tiempo de cálculo se reduce significativamente para sistemas con un gran número de partículas respecto del tiempo correspondiente si se aplicara el método PP. Por otra parte, nótese también que el esfuerzo computacional no es sólo una función del número de partículas del sistema bajo estudio, sino que también depende fuertemente de la elección del parámetro de expansión  $\theta$ . Es claro, del criterio (17) que la situación extrema  $\theta = 0$  es equivalente a calcular todas las interacciones en forma directa, partícula a partícula, requiriendo pues un esfuerzo de cómputo  $O(N^2)$ . La otra situación extrema,  $\theta \rightarrow \infty$ , produce, por otro lado, una muy baja resolución espacial, con la interacción calculada solamente entre partículas y grandes grupos de partículas, lo cual aunque es muy rápido, es extremadamente impreciso. Este conflicto en la elección del valor de  $\theta$  puede ser esquematizado como sigue.

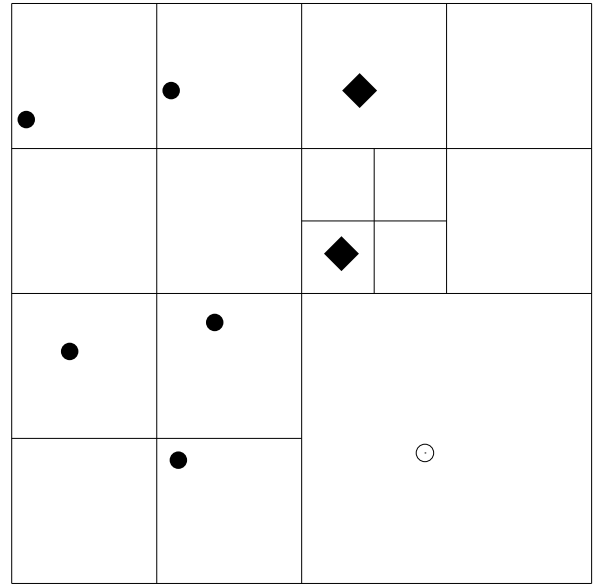


Ciertamente el valor óptimo del parámetro  $\theta$  debería ser aquel que dé un rápido cálculo de la interacción y alta precisión. En la práctica, para sistemas sin bordes impuestos, valores de  $\theta$  entre 0.3 y 1, dependiendo del problema, han demostrado ser valores adecuados.

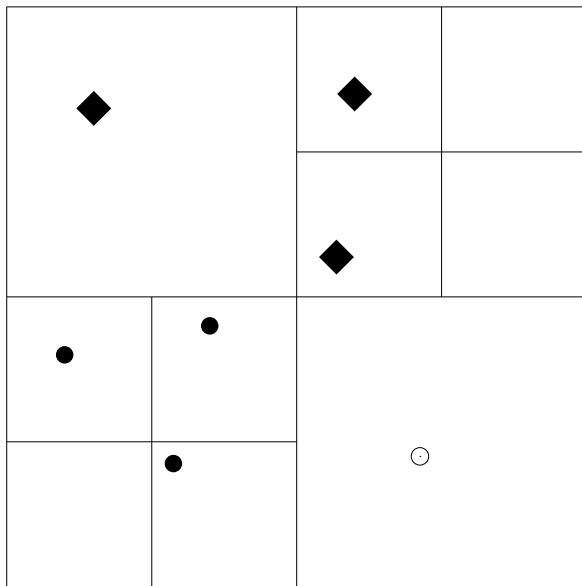
La figura 12 ilustra la interacción de una dada partícula con las restantes partículas o pseudo-partículas para diferentes valores del parámetro de expansión  $\theta$  del árbol de la figura 6, considerando para expandir o no una celda el criterio original (17) de Barnes y Hut.



(a)  $\theta = 0.0$



(b)  $\theta = 0.5$



(c)  $\theta = 1.0$

**Figura 12.** Interacción para una dada partícula (círculo vacío) con otras partículas (círculos llenos) o pseudo-partículas (rombos llenos) para diferentes valores del parámetro de expansión  $\theta$  del árbol de la figura 6.

## Bibliografía

- Barnes, J.E. 1994, Computational Astrophysics, Eds. J. Barnes et al., Berlin: Springer-Verlag.
- Barnes, J.E. 1995, The Formation of Galaxies, Eds. C. Muñoz-Tuñón & F. Sánchez, Cambridge University Press, 399.
- Barnes, J.E. & Hut, P. 1986, Nat, 324, 446.
- Barnes, J.E. & Hut, P. 1989, ApJS, 70, 389.
- Pfalzner, Susanne & Gibbon, Paul. Many-Body tree methods in physics, 1991, Cambridge University Press.
- Santamaría, Pablo. Un código de árbol para la dinámica de planetesimales, 2004, Tesis de Licenciatura.