



**UNIVERSIDAD DISTRITAL
FRANCISCO JOSÉ DE CALDAS**

PARCIAL FINAL - FISICA COMPUTACIONAL II

Albadan I., Jhousua S. 20221107049, Malagón P., Angela S.

20221107081

*Física computacional II, Programa académico de Física,
Universidad Distrital Francisco José de Caldas*

Junio 2025

Resumen

El presente documento expone las consideraciones teóricas y prácticas necesarias para la simulación del problema de N cuerpos, partiendo de la formulación clásica de la mecánica de Newton y complementando con el enfoque de las ecuaciones de Hamilton. Se aborda la determinación de las trayectorias y velocidades de cada cuerpo mediante la resolución numérica del sistema, empleando el método de Verlet con el fin de mejorar la estabilidad y precisión de las soluciones obtenidas. Asimismo, se detalla el algoritmo utilizado por el *solver* implementado, junto con un ejemplo ilustrativo que muestra un caso de estabilidad en el sistema simulado.

Palabras claves: Problema de N cuerpos, Mecánica de Newton, Ecuaciones de Hamilton, Método de Verlet, Simulación numérica, Estabilidad orbital, Algoritmos de dinámica, método de montecarlo, método de boltzmann.

Abstract

This document presents the theoretical and practical considerations necessary for the simulation of the N -body problem, starting from the classical formulation of Newtonian mechanics and complemented by the Hamiltonian equations approach. It addresses the determination of the trajectories and velocities of each body through the numerical resolution of the system, employing the Verlet method to enhance the stability and accuracy of the solutions obtained. Additionally, the algorithm followed by the implemented solver is described in detail, along with an illustrative example demonstrating a case of stability in the simulated system.

Keywords: N-body problem, Newtonian mechanics, Hamiltonian equations, Verlet method, Numerical simulation, Orbital stability, Dynamics algorithms.

1. Problema de N cargas

1.1. Introducción

El estudio de sistemas de múltiples partículas interactuando es un tema central en la física clásica y moderna, con aplicaciones que abarcan desde la dinámica planetaria hasta la física de plasmas y la formación de estructuras cósmicas. En particular, el problema de N-cuerpos cargados describe la evolución temporal de un conjunto de N partículas puntuales que interactúan exclusivamente a través de fuerzas electrostáticas, siguiendo la ley de Coulomb.

Cada partícula está caracterizada por su masa m_i , carga q_i , posición \mathbf{r}_i y velocidad \mathbf{v}_i . La fuerza que experimenta la partícula i debido al resto de partículas está dada por

Este sistema forma un conjunto de $3N$ ecuaciones diferenciales de segundo orden, altamente no lineales y acopladas, lo que hace que su resolución analítica sea, en general, imposible para $N > 2$.

El interés en el problema de N-cuerpos cargados no solo es teórico: se encuentra en el corazón de simulaciones de plasmas confinados, estudios de agregados moleculares, interacción de iones en trampas electromagnéticas y dinámicas colectivas en haces de partículas. Para abordar su solución, se recurre a métodos numéricos, como esquemas de integración de paso finito (por ejemplo, Runge-Kutta o Verlet), que permiten aproximar la evolución temporal y estudiar fenómenos como la estabilidad, la formación de estructuras ordenadas o el caos dinámico.

El presente trabajo (o proyecto, informe, etc.) se centra en la formulación y simulación numérica del problema de N-cuerpos cargados, analizando las trayectorias individuales y colectivas, así como la evolución de magnitudes conservadas como la energía total y el momento lineal, en un intento por comprender la rica dinámica que emerge de la interacción puramente electrostática entre múltiples partículas.

1.2. Marco Teórico

1.3. El modelo de los N-cuerpos

En este caso tenemos en cuenta que el problema de los N cuerpos está mayormente conocido por lo presentado por Newton en el siglo XVII. para nuestro caso realizamos una enunciación eléctrica este

teniendo diversas aplicaciones como la simulación molecular. El objetivo es hallar las trayectorias para cada cuerpo (\mathbf{r}_i), junto a sus velocidades ($\mathbf{v}_i = \dot{\mathbf{r}}_i$).

Siguiendo la dinámica de un cuerpo i -ésimo, su comportamiento se describe de la siguiente forma:

$$\mathbf{F}_i = m_i \ddot{\mathbf{r}}_i \quad (1)$$

Ahora teniendo en cuenta que las únicas interacciones que tendremos en cuenta son las eléctricas y para simplificar el modelo $m_i = 1$ entonces tenemos que:

$$\mathbf{F}_{i,j} = \frac{k q_i q_j}{\|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i\|^3} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \quad (2)$$

Ahora teniendo en cuenta a (2), la usamos en (1) que nos describe la dinámica de nuestra i -ésima partícula.

$$\mathbf{F}_i = \ddot{\mathbf{r}}_i = \sum_{j=1, i \neq j}^N \frac{k q_i q_j}{\|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i\|^3} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)$$

Consecuencia de que la fuerza eléctrica sea de tipo conservativa, podremos asociarle un potencial tal que:

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i}$$

donde

$$U = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{k q_i q_j}{\|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i\|} \quad (3)$$

Ahora creamos una representación matricial para nuestro sistema de ecuaciones diferenciales tal que:

$$I \ddot{\mathbf{r}} = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \quad (4)$$

con (4), no podemos deducir completamente las incógnitas posición y velocidad, por ello usaremos una ecuación de Hamilton teniendo en cuenta que el hamiltoniano clásico es:

$$H = T + U = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{1 \leq i < j}^N \frac{k q_i q_j}{\|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i\|}$$

y usaremos la siguiente ecuación de Hamilton:

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \quad (5)$$

Teniendo en cuenta lo desarrollado en 4 y 5, podemos resolver el problema de las 6N ecuaciones que en la práctica se emplean los métodos numéricos para resolverla.

1.4. Método de Verlet

Este es un método de corrección para el cálculo de una función que posee una dependencia fuertemente ligada con su derivada de segundo orden. En este caso, dicha dependencia se manifiesta a través de la segunda ley de Newton, lo cual nos conduce a la ecuación general (4).

$$dx = v_0 dt + \frac{1}{2} a dt^2 \quad (6)$$

La ecuación de Verlet (6) se inspira en la ecuación de un sistema en movimiento rectilíneo uniformemente acelerado, ya que comparte similitudes en la descripción de la trayectoria y el análisis del movimiento.

El uso del método de Verlet es fundamental para problemas que presentan una dependencia explícita de la segunda derivada. Aunque actualmente se puede generalizar mediante expansiones de orden N , su aplicación ha estado tradicionalmente muy vinculada al estudio de problemas en mecánica.

1.5. Algoritmo

En este punto, es claro que para la descripción de cualquier sistema mecánico se necesitan condiciones iniciales. Estas son definidas por el usuario y resultan ser las más intuitivas: la posición inicial de cada cuerpo (\mathbf{r}_{0i}), considerando que se encuentran en un sistema cartesiano y un espacio euclidiano.

Asimismo, se solicita al usuario la velocidad inicial de cada cuerpo ($\dot{\mathbf{r}}_{0i}$), junto con la descripción de la partícula, como su masa (m_i) y su radio (R_i), asumiendo que se tratan de esferas perfectas. Finalmente, se especifican los intervalos de tiempo empleados, tales como el tamaño del paso temporal (dt) y la duración total de la simulación (t_{\max}).

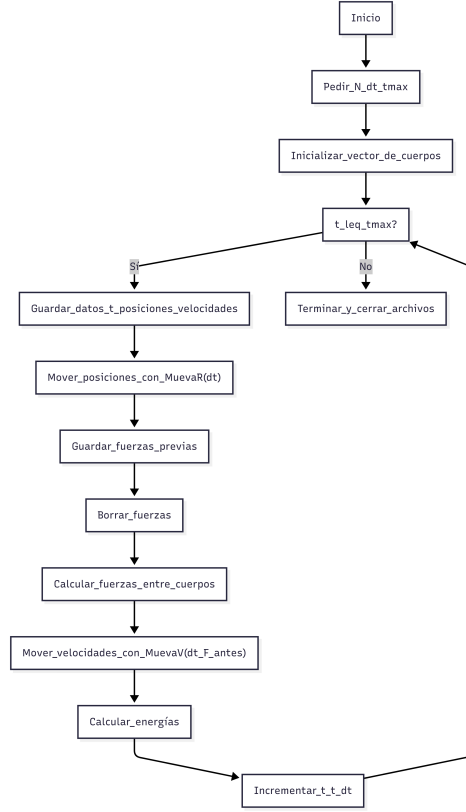


Figura 1: Diagrama de Flujo del software

En cuanto al algoritmo empleado para la solución, este se representa mediante el diagrama de flujo (véase la Fig. 1), el cual está conformado por varias partes que mencionamos a continuación:

- Se parte del hecho de que, al ejecutarse el código, este solicita los datos de tiempo, posición, velocidad y propiedades físicas de cada cuerpo del sistema.
- Luego, se inicializan los vectores correspondientes para proceder con el proceso de recurrencia.
- A continuación, se validan los datos, siendo el más fundamental el relacionado con el tiempo, para garantizar la continuidad del procedimiento.
- Dependiendo de si se ha alcanzado el umbral de iteraciones, se guardan los datos. En caso contrario, se procede a actualizar los vectores privados de cada objeto. En este punto se añaden los efectos de la interacción gravitacional, la cual modifica la posición y velocidad de cada cuerpo, de tal forma que, con la posición

en el instante i -ésimo, se calcula la energía, la cual es invariante en este sistema.

- Finalmente, se actualiza el instante i -ésimo para verificar si se ha alcanzado el tiempo máximo de simulación.

1.6. Resultados y análisis

Para este caso solicitamos a la inteligencia artificial *ChatGPT*, alguno datos recomendados para la búsqueda de algunas orbitas estable durante algunos intervalos de tiempo, en este caso los datos ingresados fueron para modelar el átomo de Hidrogeno tal que:

$$\mathbf{r}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r}_2 = \begin{bmatrix} 5,3 \times 10^{-11} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (7)$$

$$q_1 = 1,6 \times 10^{-19}; \quad q_2 = -1,6 \times 10^{-19}; \quad dt = 10^{-3} \quad (8)$$

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = 1,56 \times 10^6 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (9)$$

En este caso, se emplean las gráficas de posición y de los valores energéticos a lo largo de la simulación. Aquí se comparan para el caso en que $t_{\max} = 20$.

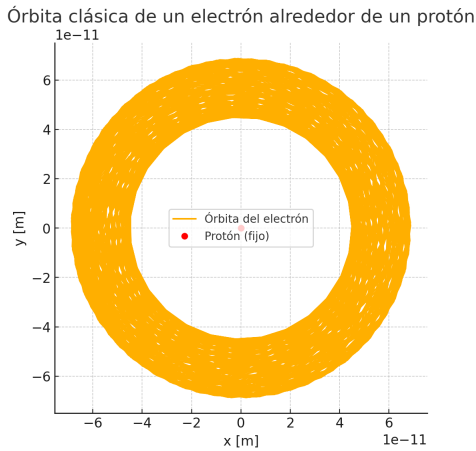


Figura 2: Gráfica (x, y) con $t_{\max} = 20$.

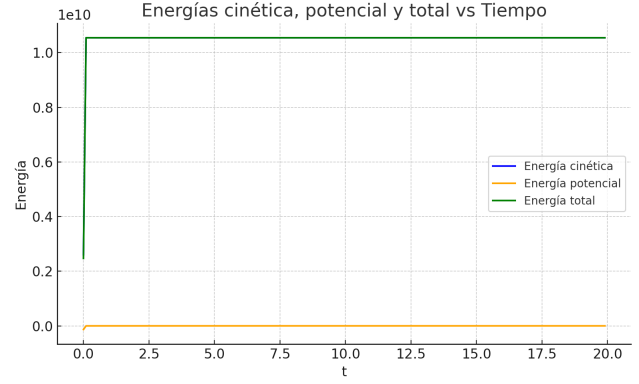


Figura 3: Gráfica (E, t) con $t_{\max} = 20$

En la Figura 3, se cumple el principio de conservación de la energía, donde $E = \text{constante}$, principalmente debido al intercambio entre energía potencial eléctrica y energía cinética aunque para este caso la mayor contribución es consecuencia de interacción eléctrica que propia del movimiento del electrón. En el caso de la Figura 2, se presentan órbitas en las que aún existen ligaduras electricas y podemos ver como se produce una "superficie" por la que el electrón a pasado, evidenciadas por su trayectoria convergente.

2. Caminata Aleatoria Normalizada

2.1. Introducción

Los procesos de la naturaleza son determinados, en el sentido de que existen leyes físicas que los gobiernan. Sin embargo, para nosotros como seres humanos, comprender completamente nuestro entorno no siempre es sencillo. Esto se debe a que solemos temer lo desconocido o aquello que se sale de nuestra rutina, lo que ha motivado históricamente la creación de mitologías, disciplinas y, finalmente, de las ciencias.

La ciencia, en particular la física, ha permitido identificar patrones que se expresan mediante *leyes naturales*. No obstante, uno de los mayores retos es que estos modelos suelen describir idealmente un solo objeto o sistema. Por ejemplo, las ecuaciones de Hamilton funcionan bien en sistemas simples, pero en el contexto de la mecánica estadística no siempre pueden resolverse exactamente. En su lugar, se recurre a descripciones estadísticas que generan

distribuciones de estados, relacionando así fenómenos macroscópicos que, aunque determinados en un nivel fundamental, aparecen como aleatorios desde nuestra perspectiva.

Es en este contexto donde los procesos estocásticos adquieren gran importancia. Estos modelos incorporan el 'azar' para representar la complejidad que excede nuestra capacidad de resolución analítica. Son fundamentales en diversas aplicaciones, como reacciones nucleares (bombas, reactores), teoría de control (sistemas hidráulicos, gasoductos), y mecánica de fluidos, entre otros.

Uno de los modelos estocásticos más sencillos y ampliamente estudiados es la *Caminata Aleatoria Normalizada* (NRW). Este modelo ha sido empleado para describir desde patrones biométricos, como la maduración de la marcha en humanos, hasta aproximaciones de primer orden de la interacción del receptor nicotínico de acetilcolina, fundamental para interpretar la evolución de la adicción a la nicotina.

2.2. Marco teórico

La NRW es un modelo matemático utilizado para describir el movimiento de una partícula que, en cada paso, elige aleatoriamente una dirección y una distancia para desplazarse. En particular, la caminata aleatoria en dos dimensiones (2D) se puede visualizar como un punto que parte del origen (0,0) y que, en cada paso, se mueve en alguna dirección en el plano. En el caso de la NRW, la magnitud del paso es constante, lo que permite estudiar el comportamiento puramente geométrico y estadístico del trayecto sin verse afectado por variaciones en el tamaño de los pasos.

Después de N pasos, la posición final del caminante está dada por (x_N, y_N) , y la distancia al origen se define como

$$R^2 = x_N^2 + y_N^2.$$

Una cantidad de interés es el valor promedio del cuadrado de la distancia al origen, denotado como $\langle R^2 \rangle$, el cual se obtiene promediando sobre un gran número de caminatas:

$$\langle R^2 \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M R_i^2,$$

donde M es el número total de realizaciones simuladas.

Una propiedad fundamental de la caminata aleatoria es que el desplazamiento cuadrático medio crece linealmente con el número de pasos:

$$\langle R^2 \rangle \propto N.$$

Al tomar logaritmos, se obtiene:

$$\ln \langle R^2 \rangle = \ln(\alpha N) = \ln \alpha + \ln N,$$

donde α es una constante que depende del tamaño del paso y la dimensionalidad del espacio.

Por lo tanto, al graficar $\ln \langle R^2 \rangle$ frente a $\ln N$, se espera obtener una relación lineal con pendiente teórica $a \approx 1$. Para cuantificar esta relación, se ajusta la expresión:

$$y = a \ln N + b,$$

donde a corresponde a la pendiente y $b = \ln \alpha$ al intercepto. La pendiente confirma la relación lineal esperada entre el número de pasos y la extensión promedio alcanzada por el caminante.

El estudio de la NRW resulta fundamental para comprender fenómenos difusivos y procesos de dispersión, y sirve como base para fenómenos más complejos como el movimiento browniano (la ecuación de difusión).

2.3. Resultados y análisis

Para este caso solo se busca que la generación de trayectorias aleatorias en un sistema con dos grados de libertad con diferentes parámetros tal que estos presenten trayectorias que se comporten "eráticamente".

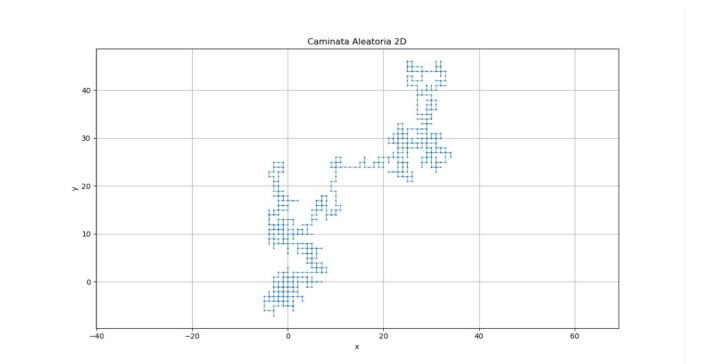


Figura 4: N=1000.

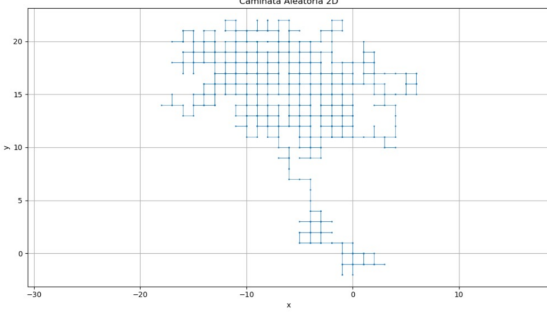


Figura 5: N=1000.

Con lo visto en las figuras 4 y 5, son trayectorias generadas por poseer 1000 divisiones de paso y como se puede contemplar son plenamente diferentes, aunque inician en el origen del plano.

3. Estimación de la Función de partición para dos niveles

3.1. Introducción

El estudio de sistemas termodinámicos mediante simulaciones computacionales es una herramienta poderosa en la física moderna. En este trabajo se presenta una implementación del método de Monte Carlo aplicado a un sistema de dos niveles energéticos, en el contexto del ensamble canónico.

El objetivo principal es estimar la función de partición y la energía media de un sistema compuesto por dos estados: un estado fundamental con energía $E_0 = 0$ y un estado excitado con energía $E_1 = \epsilon$. A través de un muestreo estocástico basado en la distribución de Boltzmann, se busca comparar las estimaciones numéricas con las expresiones analíticas derivadas de la mecánica estadística.

Este problema, aunque simple, permite validar conceptos clave como el muestreo de estados, la acumulación de estadísticas, y el cálculo de propiedades termodinámicas a partir de simulaciones Monte Carlo.

4. Marco Teórico

4.1. Mecánica Estadística y Ensamble Canónico

En el ensamble canónico, un sistema está en contacto térmico con un baño a temperatura constante T . La probabilidad de que el sistema se encuentre en un estado con energía E_i viene dada por la distribución de Boltzmann:

$$P_i = \frac{e^{-E_i/k_B T}}{Z}$$

donde k_B es la constante de Boltzmann y Z es la función de partición, definida como:

$$Z = \sum_i e^{-E_i/k_B T}$$

A partir de Z , es posible calcular propiedades termodinámicas macroscópicas como la energía media:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_i E_i e^{-E_i/k_B T}}{Z}$$

4.2. Sistema de Dos Niveles

El sistema de dos niveles está compuesto por un estado fundamental con energía $E_0 = 0$ y un estado excitado con energía $E_1 = \epsilon$. La función de partición para este sistema se calcula como:

$$Z = 1 + e^{-\epsilon/k_B T}$$

La energía media teórica es:

$$\langle E \rangle = \frac{\epsilon e^{-\epsilon/k_B T}}{1 + e^{-\epsilon/k_B T}}$$

4.3. Método de Monte Carlo

El método de Monte Carlo es un enfoque numérico basado en muestreo aleatorio. En este caso, se simula la ocupación de los niveles energéticos de acuerdo con la distribución de Boltzmann.

En cada paso de la simulación:

- Se genera un número aleatorio $r \in [0, 1]$

- Se calcula la probabilidad de ocupación del nivel excitado:

$$P_1 = \frac{e^{-\epsilon/k_B T}}{1 + e^{-\epsilon/k_B T}}$$

- Si $r < P_1$, se escoge el estado $E_1 = \epsilon$; de lo contrario, $E_0 = 0$

Tras un número grande de repeticiones N , se estiman:

- Energía media estimada:

$$\langle E \rangle_{MC} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_i$$

- Estimación de la función de partición a partir de la frecuencia del estado base:

$$Z_{MC} = \frac{1}{P_0^{MC}} = \frac{N}{\# \text{ ocurrencias en } E_0}$$

5. Resultados y Análisis

Se realizaron simulaciones de Monte Carlo para un sistema de dos niveles, variando la temperatura reducida $k_B T/\epsilon$ en el intervalo de 3.0 a 4.0. En cada punto se ejecutaron múltiples pasos para estimar dos cantidades fundamentales: la energía media $\langle E \rangle$ y la función de partición Z .

5.1. Energía Media

En la Figura 6, se muestra la comparación entre la energía media exacta, obtenida mediante la fórmula analítica de la mecánica estadística, y la energía media estimada por el método de Monte Carlo.

Se observa que para temperaturas reducidas altas ($k_B T/\epsilon \geq 3,2$), las estimaciones por Monte Carlo coinciden estrechamente con los valores exactos. Sin embargo, para $k_B T/\epsilon = 3,0$, hay una desviación significativa, lo que puede atribuirse a insuficiente número de muestras o a una pobre representación estocástica del estado fundamental en ese régimen. A medida que la temperatura aumenta, la ocupación de ambos niveles tiende a ser más equitativa, facilitando un muestreo más uniforme.

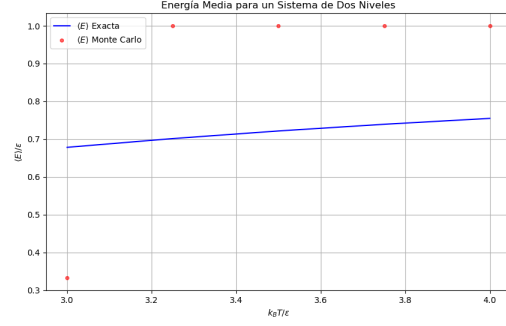


Figura 6: Comparación entre la energía media exacta y la estimada por Monte Carlo para un sistema de dos niveles.

5.2. Función de Partición

En la Figura 7, se presenta la comparación entre los valores exactos de la función de partición y los estimados mediante muestreo Monte Carlo a partir de la ocupación del estado fundamental.

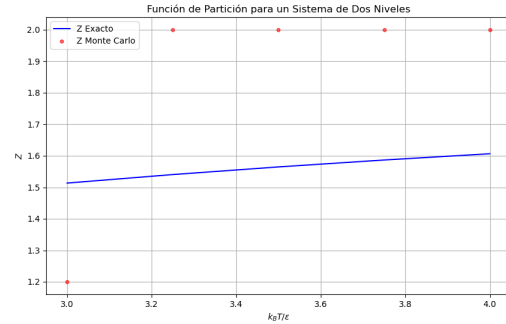


Figura 7: Comparación entre la función de partición exacta y la estimada por Monte Carlo.

Del mismo modo que con la energía, se aprecia un excelente acuerdo para temperaturas moderadas y altas, mientras que para $k_B T/\epsilon = 3,0$, la estimación de Z se aleja del valor teórico. Esta sobreestimación indica una subestimación de la probabilidad del estado base, causada posiblemente por una mala resolución estadística.

5.3. Discusión

Los resultados validan la implementación del método de Monte Carlo para sistemas simples en el régimen canónico. Las desviaciones observadas en los extremos más bajos del rango de temperatura sugieren que, aunque el sistema tiene solo dos niveles,

una adecuada convergencia requiere un número suficiente de muestras, especialmente cuando la distribución de Boltzmann favorece fuertemente un solo estado.

Este experimento demuestra cómo los métodos estocásticos pueden reproducir resultados exactos cuando se implementan correctamente y se aplican con suficiente estadística.

Bibliografía

Mosquera, A. (2020). *Estudio de la Dinámica y Organización del Receptor de Acetilcolina Nicotínico Mediante Análisis de Imágenes de Superresolución y Técnicas Avanzadas de Microscopía de Fluorescencia*. Universidad de Buenos Aires.

Muñoz, A., Angulo, F., & del Río, J. (2004). *Una Descripción de la Maduración del Caminado de los Niños Mediante Parámetros del Análisis Multifractal*. Revista Mexicana de Ingeniería Biomédica.

Ramirez, J. (2016). *Estudio Teórico de Caminatas Aleatorias en Presencia de Campos Externos Débiles*. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.

Blanco López, A. (2019). El problema de los n-cuerpos y su paralelización.

Pons Ferrer, M. (2024, July 4). Problema de los N cuerpos (Treball Final de Grau). UPC, Facultat de Matemàtiques i Estadística, Departament de Matemàtiques. Retrieved from <http://hdl.handle.net/2117/415486>

Río Cristóbal, M. D. (2023). El método de Störmer-Verlet. Propiedades y aplicaciones.

Simó, C. (1976). El problema de n cuerpos. Publicacions de la Secció de Matemàtiques, (2), 38-68.