



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

---

FACULTAD DE CIENCIAS

USO DEL ALGORITMO DE VERLET  
PARA ESTUDIAR LÍNEAS DE  
CAMPO Y EQUIPOTENCIALES CON  
CONDENSADORES ESFÉRICOS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:  
FÍSICO

PRESENTA:  
RUBÉN ALFARO QUIZA



DIRECTOR DE TESIS:  
DR. ALIPIO GUSTAVO CALLES MARTÍNEZ

2011



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## DEDICATORIA

Este trabajo lo dedico con mucho amor a mis papás Virginia y Rubén a mis hermanos Virginia y David

## AGRADECIMIENTOS

Mi infinito agradecimiento para el Dr. Alipio Gustavo Calles Martínez, quien me motivó a trabajar con él en este proyecto como director de tesis y siempre estuvo conmigo durante todo este tiempo. Mi admiración al Dr. Jorge Ramón Soto Mercado por sus enseñanzas durante los seminarios y su gran paciencia para conmigo. Igualmente, al Dr. Jordi Iñaki Austrich Senosiain, quien colabora en este extraordinario grupo interdisciplinario de investigación. Al M. en C. Raúl Arturo Espejel Morales, quien sin su gran apoyo no se hubieran podido lograr las visualizaciones.

A todos ellos por su invaluable apoyo como codirectores de tesis, y por mostrarme el camino de la física a través de las simulaciones computacionales.

A mi jurado de tesis: Dra. Marcela Regina Beltrán Sánchez, Dra. Ana Cecilia Noguéz Garrido, Dr. Enrique Cabrera Bravo, quienes con todo y sus ocupaciones como investigadores tienen tiempo de revisar y dedicarle tiempo a este trabajo.



# USO DEL ALGORITMO DE VERLET PARA ESTUDIAR LÍNEAS DE CAMPO Y EQUIPOTENCIALES CON CONDENSADORES ESFÉRICOS

## Índice

<b>1. INTRODUCCIÓN</b>	<b>5</b>
<b>2. ALGORITMOS DE SOLUCIÓN PARA ECUACIONES TIPO NEWTON.</b>	<b>6</b>
2.1. EL ALGORITMO DE VERLET . . . . .	6
2.2. MÉTODO DE EULER . . . . .	7
2.3. MÉTODO DE RUNGE-KUTTA . . . . .	8
<b>3. ALGORITMO DE VERLET PARA ECUACIONES DE TRAYECTORIAS</b>	<b>9</b>
<b>4. FORMA PARAMÉTRICA DEL ALGORITMO DE VERLET PARA LÍNEAS DE CAMPO</b>	<b>11</b>
<b>5. APLICACIONES PARA LAS LÍNEAS DE CAMPO ELÉCTRICO Y EQUIPOTENCIALES EN CONDENSADORES ESFÉRICOS.</b>	<b>13</b>
5.1. PARA UN NÚMERO ARBITRARIO DE CARGAS. . . . .	13
5.1.1. CAMPO Y POTENCIAL PRODUCIDO POR LA SUCESIÓN DE CARGAS . .	13
5.1.2. CÁLCULO DE $\frac{d^2\vec{r}}{ds^2} = \frac{d}{ds} \left( \frac{\vec{E}}{E} \right)$ . . . . .	14
5.1.3. SUPERFICIES EQUIPOTENCIALES . . . . .	16
5.2. MÉTODO DE IMÁGENES . . . . .	17
5.2.1. EL POTENCIAL . . . . .	18
5.2.2. COMPONENTE RADIAL DEL CAMPO . . . . .	19
5.2.3. DOS ESFERAS CONDUCTORAS UNA DE LAS CUALES ESTÁ A POTENCIAL CERO . . . . .	19
5.2.4. RELACIONES RECURSIVAS . . . . .	23
5.3. CONDENSADORES ESFÉRICOS . . . . .	23
<b>6. RESULTADOS Y VISUALIZACIONES</b>	<b>25</b>
6.1. COMPARACIÓN CON OTROS MÉTODOS . . . . .	26
<b>7. CONCLUSIONES</b>	<b>28</b>
<b>8. Apéndice A</b>	<b>29</b>

# 1. INTRODUCCIÓN

El desarrollo de las computadoras y métodos numéricos para la solución de ecuaciones diferenciales ha ido de la mano con la simulación de problemas que serían muy difíciles o imposibles de resolver analíticamente. Esto incluye desde problemas teóricos en física, química, ingeniería y matemáticas hasta problemas que se presentan en economía. Hoy en día, en particular la Física se ha apoyado de las computadoras para simular experimentos que difícilmente se podrían llevar a cabo en un laboratorio, lo anterior, debido al alto costo del material, el control de las variables del entorno, y a la posible falta de las herramientas necesarias para realizarlos; además, muchas veces, la complejidad y las dimensiones de los experimentos impiden la evaluación de los fenómenos a estudiar. También, el uso de las computadoras simplifica y acelera, en gran medida, los cálculos que se requieren para llegar a los resultados deseados; cabe destacar el empleo de las mismas como un “laboratorio virtual” en donde el “experimentador” puede establecer los parámetros y las condiciones iniciales del problema a tratar. Asimismo, se hace uso de su capacidad gráfica para visualizar dichos eventos; la simulación por computadora es de gran utilidad cuando es posible realizar el experimento real, ya que ello nos permite comparar los resultados obtenidos. El objetivo principal de esta tesis es emplear las ideas básicas en el algoritmo de Verlet para estudiar las líneas de campo y las equipotenciales que se generan al tener un arreglo lineal de condensadores esféricos; dicho algoritmo es uno de los empleados en Dinámica Molecular para el estudio del movimiento de partículas a nivel molecular sujetas a interacciones entre sí (fuerzas coulombianas, dipolares, de van der Waals, etc.) y a campos externos (eléctricos, magnéticos, . . .).

En la presente tesis se expondrán brevemente otros métodos numéricos como el de Euler y el de Runge-Kutta, mismos que se emplean para comparar y aproximar numéricamente los resultados de las ecuaciones diferenciales que se desprenden de los problemas a evaluar. La utilización de las ideas de Verlet para obtener líneas de campo creemos es completamente original, más rápida y cómoda de programar.

## 2. ALGORITMOS DE SOLUCIÓN PARA ECUACIONES TIPO NEWTON.

### 2.1. EL ALGORITMO DE VERLET

El algoritmo de Verlet [1] se desarrolla en 1967 para calcular la dinámica de partículas que satisfacen ecuaciones tipo Newton. No es sino hasta los años 80 que el método empieza a adquirir gran popularidad en el medio de la Dinámica Molecular imponiéndose como el algoritmo a usarse en este tipo de problemas, por ejemplo: dinámica de partículas, fractura de materiales, estudio de cristales líquidos, dinámica de fluidos, etc. En el instituto de Física de la UNAM, hay un grupo que trabaja intensamente usando el algoritmo de Verlet en diversos problemas encabezado por el Dr. Ignacio Garzón.

El algoritmo de Verlet se deduce a partir de la expansión de serie de Taylor de la función de posición  $x(t)$  en  $x(t + \Delta t)$ :

$$x(t + \Delta t) = x(t) + x'(t)\Delta t + x''(x, t)\frac{\Delta t^2}{2} + x'''(x, t)\frac{\Delta t^3}{6} + \dots \quad (1)$$

y en  $x(t - \Delta t)$ :

$$x(t - \Delta t) = x(t) - x'(t)\Delta t + x''(x, t)\frac{\Delta t^2}{2} - x'''(x, t)\frac{\Delta t^3}{6} + \dots \quad (2)$$

sumando las ecuaciones (1) y (2) y despreciando términos a partir de tercer orden, obtenemos:

$$x(t + h) \approx 2x(t) - x(t - h) + h^2 x''(x, t), \quad (3)$$

donde hemos representado el incremento de tiempo  $\Delta t$  por el tamaño del paso  $h$ .

Análogamente, al hacer la diferencia de ambas ecuaciones (1) y (2) obtenemos el resultado para la velocidad que podemos expresar de la siguiente manera,

$$v(t) \approx \frac{x(t + h) - x(t - h)}{2h}. \quad (4)$$

Como puede verse de la ecuación 3, el esquema del algoritmo requiere de los dos puntos anteriores, por lo que para su inicialización, además de la condición inicial  $x_0 = x(t_0)$ , es necesario calcular el valor de  $x(-h)$ , lo cual se puede obtener del desarrollo en serie de Taylor “hacia atrás” con  $t = 0$ :

$$x(-h) = x_0 - x'_0 h + \frac{h^2}{2} x''(x_0, t_0) \quad (5)$$

## 2.2. MÉTODO DE EULER

Un método sencillo, aunque menos preciso, para la solución de ecuaciones diferenciales de primer orden es el método de Euler [2] que está dado por diferencias de la derivada:

$$y' \approx \frac{y(t+h) - y(t)}{h}, \quad (6)$$

entonces,

$$y(t+h) = y(t) + h f'(x(t), y(t)) + O(h^2). \quad (7)$$

Donde  $f(x_n, y_n)$  es la primera derivada de  $y$  evaluada en  $x_n$  y  $y_n$ . Se predice un nuevo valor de  $y$  por medio de la pendiente (igual a la primera derivada en el valor original de  $x$ ) que habrá de extrapolarse en forma lineal sobre el tamaño de paso  $h$ .

Para resolver la ecuación de movimiento tipo Newton  $x'' = f(x, v, t)$  la separamos en un sistema de dos ecuaciones diferenciales de primer orden.

$$\begin{aligned} x' &= v \\ v' &= f(x, v, t) \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} v(t+h) &= v(t) + hf(x(t), v(t), t) \\ x(t+h) &= x(t) + hv(t+h) \end{aligned} \quad (9)$$

## 2.3. MÉTODO DE RUNGE-KUTTA

Los métodos de Runge-Kutta [2] han gozado de gran prestigio y popularidad para la solución de ecuaciones diferenciales de primer orden. Existen dentro de esta familia varias opciones a usar que van mejorando en su aproximación y obviamente aumentando su complejidad en las expresiones a usar. En esta sección mostraremos el desarrollo para el método de Runge-Kutta de 2° orden. Tal vez el más usado sea el de 4° orden pues representa un balance adecuado de aproximación y complejidad.

Partiendo de la ecuación diferencial ordinaria  $y' = f(x, y)$  e integrando por la regla del trapecio en un intervalo de  $[t_n, t_{n+1}]$  obtenemos:

$$y(t+h) = y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(y, t) dt \approx y_n + \frac{h}{2} [f(y_n, t_n) + f(y_{n+1}, t_{n+1})] \quad (10)$$

Aproximando por el método de Euler obtenemos que:

$$\begin{aligned} \tilde{y}_{n+1} &= y_n + hf(y_n, t_n) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{2} [f(y_n, t_n) + f(\tilde{y}_{n+1}, t_{n+1})] \end{aligned} \quad (11)$$

Donde  $\tilde{y}_{n+1}$  es la aproximación a  $y_{n+1}$  por el método de Euler; obteniendo así el método general de segundo orden:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(y_n, t_n) \\ k_2 &= hf(y_n + k_1, t_{n+1}) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2} [k_1 + k_2] \end{aligned} \quad (12)$$

la ecuación de movimiento tipo Newton  $x''=f(x,v,t)$  puede descomponerse en un sistema de dos ecuaciones simultáneas de primer orden que se pueden resolver por el método de Runge-Kutta de segundo orden de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} x' &= v \\ v' &= f(x, v, t) \end{aligned} \quad (13)$$

como:

$$\begin{aligned} k_1 &= hv(x_n, t_n) \\ l_1 &= hf(x_n, v_n, t_n) \\ k_2 &= h(v_n, l_1) \\ l_2 &= hf(x_n + k_1, v_n + l_1, t_{n+1}) \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{2}(k_1, k_2) \\ v_{n+1} &= v_n + \frac{1}{2}(l_1, l_2) \end{aligned} \quad (14)$$

### 3. ALGORITMO DE VERLET PARA ECUACIONES DE TRAYECTORIAS

Esta sección constituye la parte original de la tesis porque vamos a aplicar las ideas de Verlet para resolver ecuaciones diferenciales del tipo  $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$  para  $y = y(x)$ , en lugar de ecuaciones tipo Newton que dependen del tiempo.

Podemos escribir un algoritmo que resuelva el problema de las líneas de campo en el plano, planteando una ecuación diferencial para resolver numéricamente el problema de trayectoria con condiciones iniciales  $(x_0, y_0)$ .

La pendiente  $m = \frac{E_y}{E_x}$  de la recta tangente a la línea de campo en el punto  $(x, y)$  nos permite conocer la dirección de  $\vec{E}(x, y)$  con componentes  $E_x = E \cos \theta$  y  $E_y = E \sin \theta$ , de este modo, podemos representar la solución de

$$\frac{dy}{dx} = \frac{E_y}{E_x} \quad (15)$$

como una curva para  $E_x \neq 0$  (ya que en este caso la pendiente es infinita).

Se propone el siguiente desarrollo dado un punto de arranque  $(x_0, y_0)$ :

$$y(x+h) = y(x) + h \frac{d}{dx} y(x) + \frac{h^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} y(x) + \frac{h^3}{6} \frac{d^3}{dx^3} y(x) + \dots \quad (16)$$

$$y(x-h) = y(x) - h \frac{d}{dx} y(x) + \frac{h^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} y(x) - \frac{h^3}{6} \frac{d^3}{dx^3} y(x) + \dots \quad (17)$$

sumando las ecuaciones (16) y (17) obtenemos las ecuaciones de Verlet para trayectorias:

$$y(x+h) + y(x-h) \approx 2y(x) + \frac{d^2 y}{dx^2} h^2, \quad (18)$$

entonces

$$y(x+h) = 2y(x) - y(x-h) + \frac{d^2 y}{dx^2} h^2. \quad (19)$$

Aplicaremos este último resultado al cálculo de las líneas de campo y las equipotenciales. Calculando la ecuación diferencial:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{dy}{dx} \left( \frac{dy}{dx} \right), \quad (20)$$

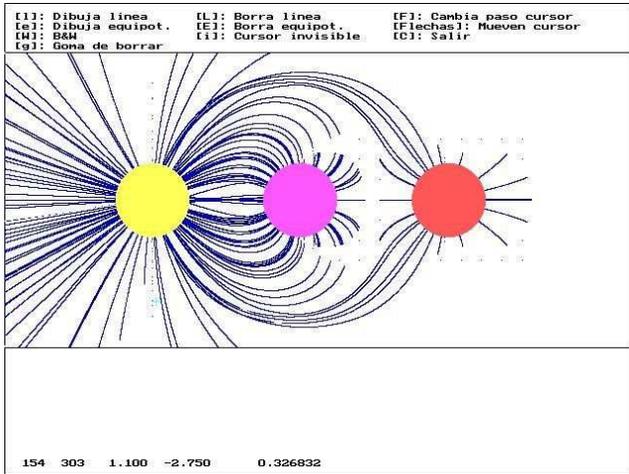
y sustituyendo la ecuación 15:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{dy}{dx} \left( \frac{E_y}{E_x} \right) = \frac{\frac{dE_y}{dx} E_x - E_y \frac{dE_x}{dx}}{E_x^2} \quad (21)$$

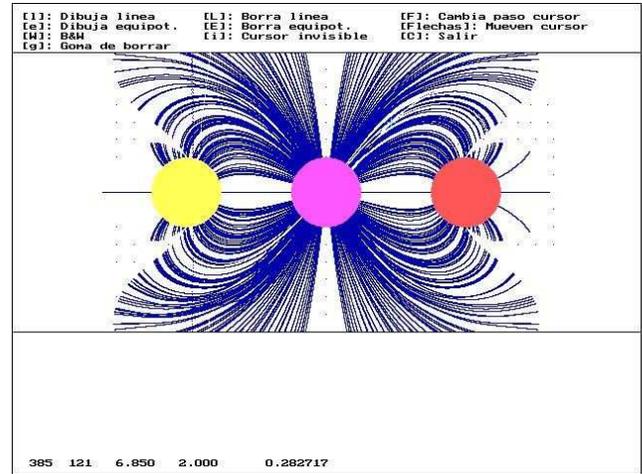
Como una ilustración del método desarrollado, en la figura 1 se dibujan las líneas de campo eléctrico para un sistema de tres esferas, una cargada y dos aterrizadas, simulando un condensador modelado por una serie de cargas puntuales [8].

Se puede observar que no se muestran las líneas de campo correspondientes a los puntos donde  $E_x = 0$ .

En el primer caso, la esfera cargada es la de la izquierda y en el segundo, la esfera cargada es la de en medio.



(a) Líneas de campo para tres esferas conductoras. La esfera del lado izquierdo está cargada y el resto están aterrizadas.



(b) Líneas de campo para tres esferas conductoras. La esfera central está cargada y el resto están aterrizadas.

Figura 1: Primera implementación del algoritmo.

Estas gráficas, se retomarán con más detalle en el capítulo 6, generalizando las ideas ya presentadas y desarrolladas a lo largo del presente trabajo que involucra un algoritmo de Verlet parametrizado.

## 4. FORMA PARAMÉTRICA DEL ALGORITMO DE VERLET PARA LÍNEAS DE CAMPO

En el desarrollo anterior, en virtud de que la pendiente de la curva puede ser infinita, existe la posibilidad de replantear la ecuación (20) en forma paramétrica para la trayectoria. Elegimos como parámetro a la longitud del camino seguido por la línea de campo desde  $\vec{r}_0(x_0, y_0)$  hasta  $\vec{r}(x, y)$ . Esta longitud  $s$  la podemos aproximar como una suma de pequeños segmentos de recta,

$$s = \sum_{n=0}^N [(X_{n+1} - X_n)^2 + (Y_{n+1} - Y_n)^2]^{\frac{1}{2}}, \quad (22)$$

donde  $N$  es el número de segmentos en que dividimos la curva; haciendo los segmentos de recta infinitamente pequeños obtenemos la siguiente integral:

$$s = \int_{\sigma} [(dx)^2 + (dy)^2]^{\frac{1}{2}}. \quad (23)$$

donde  $\sigma$  es la trayectoria sobre la línea de campo, misma que está dada por  $\vec{r} = \vec{r}(s) = (x(s), y(s))$

Por otro lado, los triángulos de las figuras 2a y 2b son semejantes, ya que sus ángulos del cateto opuesto son iguales, por lo que podemos escribir las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} \text{sen } \theta &= \frac{dy}{ds} = \frac{E_y}{E} \\ \text{cos } \theta &= \frac{dx}{ds} = \frac{E_x}{E} \end{aligned} \quad (24)$$

donde  $E = |\vec{E}|$ .

Por lo que la ecuación diferencial a resolver en forma vectorial es la siguiente:

$$\frac{d\vec{r}}{ds} = \left( \frac{dx}{ds}, \frac{dy}{ds} \right) = \frac{1}{E} (E_x, E_y) = \frac{\vec{E}}{E} \quad (25)$$

con condición inicial  $\vec{r}(s_0) = \vec{r}_0(x_0, y_0)$ .

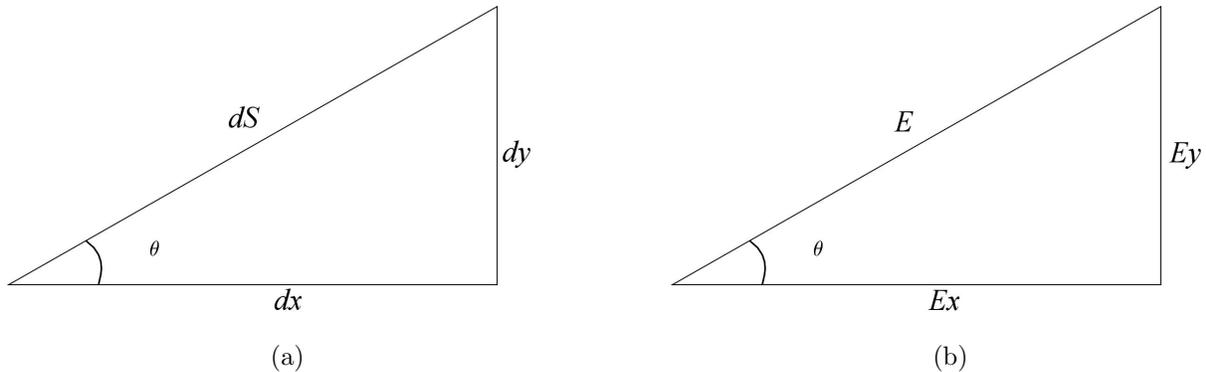


Figura 2: Triángulos semejantes.

Para obtener el equivalente algoritmo de Verlet hacemos un desarrollo de Taylor de la ecuación 25, donde  $h = s_{n+1} - s_n$ . Así,

$$\vec{r}(s_0 + h) = \vec{r}(s_0) + \left. \frac{d\vec{r}}{ds} \right|_{s_0} h + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\vec{r}}{ds^2} \right|_{s_0} h^2 + \frac{1}{3!} \left. \frac{d^3\vec{r}}{ds^3} \right|_{s_0} h^3 + O(h^4) \quad (26)$$

Sustituyendo h por -h

$$\vec{r}(s_0 - h) = \vec{r}(s_0) - \left. \frac{d\vec{r}}{ds} \right|_{s_0} h + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\vec{r}}{ds^2} \right|_{s_0} h^2 - \frac{1}{3!} \left. \frac{d^3\vec{r}}{ds^3} \right|_{s_0} h^3 + O(h^4) \quad (27)$$

Sumando (26) y (27) tenemos:

$$\vec{r}(s_0 + h) + \vec{r}(s_0 - h) = 2\vec{r}(s_0) + \left. \frac{d^2\vec{r}}{ds^2} \right|_{s_0} h^2 + O(h^4) \quad (28)$$

Vemos que para el problema específico de las líneas de fuerza es necesario calcular la segunda derivada

$$\frac{d^2\vec{r}}{ds^2} = \frac{d}{ds} \left( \frac{d\vec{r}}{ds} \right), \quad (29)$$

la cual, sustituyendo de (25) es:

$$\frac{d^2\vec{r}}{ds^2} = \frac{d}{ds} \begin{pmatrix} \vec{E} \\ E \end{pmatrix}, \quad (30)$$

misma que se obtendrá en la sección 5.2.

## 5. APLICACIONES PARA LAS LÍNEAS DE CAMPO ELÉCTRICO Y EQUIPOTENCIALES EN CONDENSADORES ESFÉRICOS.

En esta sección se plantea el álgebra para calcular las componentes de campo eléctrico y equipotenciales para un número arbitrario de cargas eléctricas, primero para dos y luego para N. En las siguientes subsecciones se desarrolla el método de imágenes para obtener un sistema equivalente a uno formado por esferas conductoras, empleando cargas puntuales. Para trabajar algunos problemas de transporte electrónico a nivel nanométrico se suponen esferas metálicas a manera de islas dentro de aislantes por donde pasan los electrones. De tal forma que el desarrollo de estos problemas de esferas tiene aplicaciones en la conductividad a nivel nanométrico que aprovechará el Laboratorio Interdisciplinario donde se está desarrollando la presente tesis.

### 5.1. PARA UN NÚMERO ARBITRARIO DE CARGAS.

#### 5.1.1. CAMPO Y POTENCIAL PRODUCIDO POR LA SUCESIÓN DE CARGAS

Calculamos el campo y el potencial producido en el punto P ( $x, y$ ) por el par de cargas  $q_i$  situada en el punto  $x_i$  y  $Q_i$  en la posición  $d - X_i$

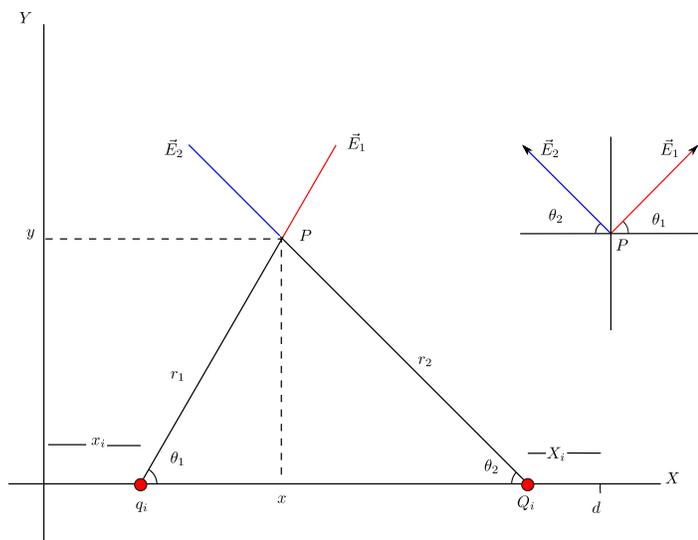


Figura 3

El campo  $E_1$  producido por la carga  $q_i$  es

$$E_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i}{(x - x_i)^2 + y^2} \quad (31)$$

El campo  $E_2$  producido por la carga  $Q_i$  es

$$E_2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_i}{(d - x - X_i)^2 + y^2} \quad (32)$$

Las componentes del campo total  $E_i$  son

$$\begin{aligned} E_{ix} &= E_1 \cos \theta_1 - E_2 \cos \theta_2 \\ E_{iy} &= E_1 \sin \theta_1 + E_2 \sin \theta_2 \end{aligned} \quad (33)$$

$$E_{ix} = \frac{q_i}{4\pi\epsilon_0} \frac{x - x_i}{((x - x_i)^2 + y^2)^{3/2}} - \frac{Q_i}{4\pi\epsilon_0} \frac{d - x - X_i}{((d - x - X_i)^2 + y^2)^{3/2}} \quad (34)$$

$$E_{iy} = \frac{q_i}{4\pi\epsilon_0} \frac{y}{((x - x_i)^2 + y^2)^{3/2}} - \frac{Q_i}{4\pi\epsilon_0} \frac{y}{((d - x - X_i)^2 + y^2)^{3/2}} \quad (35)$$

El potencial  $V_i$  en el punto P debido a las dos cargas es

$$V_i = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i}{\sqrt{(x - x_i)^2 + y^2}} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_i}{\sqrt{(d - x - X_i)^2 + y^2}} \quad (36)$$

El campo y el potencial total es la suma de todos los campos y potenciales producidos por los pares de cargas dispuestas simétricamente al plano.

Parametrizando las ecuaciones para el campo eléctrico y descomponiéndola en sus dos componentes tenemos que:

$$E = \sqrt{E_x^2 + E_y^2} \quad (37)$$

$$E_x = \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x - x_i)}{[(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2]^{3/2}} \quad (38)$$

$$E_y = \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y - y_i)}{[(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2]^{3/2}} \quad (39)$$

### 5.1.2. CÁLCULO DE $\frac{d^2\vec{r}}{ds^2} = \frac{d}{ds} \left( \frac{\vec{E}}{E} \right)$ .

Ahora obtenemos la segunda derivada necesaria para escribir el algoritmo de Verlet para las líneas de campo.

$$\frac{d^2\vec{r}}{ds^2} = \frac{d}{ds} \left( \frac{\vec{E}}{E} \right) \quad (40)$$

$$\frac{d^2(x, y)}{ds^2} = \frac{d}{ds} \left( \frac{(E_x, E_y)}{E} \right) \quad (41)$$

la que se resolverá componente a componente. Para la componente  $x$  tenemos:

$$\frac{d^2x}{ds^2} = \frac{d}{ds} \left( \frac{E_x}{E} \right) \quad (42)$$

Donde

$$\frac{d}{ds} \left( \frac{E_x}{E} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{E_x}{E} \right) \left( \frac{dx}{ds} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{E_x}{E} \right) \left( \frac{dy}{ds} \right) \quad (43)$$

y usando la ecuación 24:

$$\frac{d}{ds} \left( \frac{E_x}{E} \right) = \left( \frac{E_x}{E} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{E_x}{E} \right) + \left( \frac{E_y}{E} \right) \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{E_x}{E} \right) \quad (44)$$

Así, sustituyendo tenemos

$$\begin{aligned}
\frac{d}{ds} \left( \frac{E_x}{E} \right) &= \left\{ \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) \left[ \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 \right. \right. \\
&\times \sum_{i=1}^n -\frac{3q_i(x-x_i)(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} + \left. \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) \right. \\
&\times \left\{ \sum_{i=1}^n \left( \frac{q_i}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} - \frac{3q_i(y-y_i)^2}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} \right) \right. \\
&+ \left. \left. \sum_{i=1}^n \left( \frac{q_i}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} - \frac{3q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} \right) \right\} \right. \\
&\times \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \\
&- \left. \left. \left( \sum_{i=1}^n -\frac{3q_i(x-x_i)(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} \right) \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 \right] \right\} \\
&\times \left\{ \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 + \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 \right\}^{-2} \quad (45)
\end{aligned}$$

Análogamente para  $y$ ,  $\frac{d^2y}{ds^2} = \frac{d}{ds} \left( \frac{E_y}{E} \right)$

$$\frac{d}{ds} \left( \frac{E_y}{E} \right) = \left( \frac{E_x}{E} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{E_y}{E} \right) + \left( \frac{E_y}{E} \right) \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{E_y}{E} \right) \quad (46)$$

Tenemos que

$$\begin{aligned}
\frac{d}{ds} \left( \frac{E_y}{E} \right) &= \left\{ \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) \left[ - \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 \right. \right. \\
&\times \sum_{i=1}^n -\frac{3q_i(x-x_i)(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} + \left. \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) \right. \\
&\times \left\{ \sum_{i=1}^n \left( \frac{q_i}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} - \frac{3q_i(y-y_i)^2}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} \right) \right. \\
&- \left. \left. \sum_{i=1}^n \left( \frac{q_i}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} - \frac{3q_i(x-x_i)^2}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} \right) \right\} \right. \\
&\times \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \\
&+ \left. \left. \left( \sum_{i=1}^n -\frac{3q_i(x-x_i)(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} \right) \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 \right] \right\} \\
&\times \left\{ \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 + \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 \right\}^{-2} \quad (47)
\end{aligned}$$

### 5.1.3. SUPERFICIES EQUIPOTENCIALES

Se puede demostrar que las superficies equipotenciales cortan perpendicularmente a las líneas de campo. Usaremos este hecho para dibujar las curvas de nivel (en  $z = 0$ ) de las superficies equipotenciales mediante el vector perpendicular:

$$\left( \frac{dx}{ds}, \frac{dy}{ds} \right) = \frac{1}{E}(-E_y, E_x) \quad (48)$$

entonces:

$$\frac{dx}{ds} = \frac{-E_y}{E}, \quad \frac{dy}{ds} = \frac{E_x}{E}. \quad (49)$$

Así, se puede proceder de forma análoga, modificando las ecuaciones 44 y 83 de la siguiente manera:

$$\frac{d}{ds} \left( \frac{E_x}{E} \right) = \left( \frac{-E_y}{E} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{E_x}{E} \right) + \left( \frac{E_x}{E} \right) \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{E_x}{E} \right) \quad (50)$$

$$\frac{d}{ds} \left( \frac{E_y}{E} \right) = \left( \frac{-E_y}{E} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{E_y}{E} \right) + \left( \frac{E_x}{E} \right) \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{E_y}{E} \right) \quad (51)$$

El desarrollo de estas derivadas puede verse en el Apéndice A.

## 5.2. MÉTODO DE IMÁGENES

El cálculo del campo eléctrico producido por algunos sistemas de cargas en presencia de conductores o dieléctricos, puede simplificarse, en algunos casos, construyendo un sistema equivalente formado únicamente por cargas puntuales cumpliendo las mismas condiciones de frontera que el sistema original. El caso más sencillo es el de una carga  $q$  situada a una distancia  $d$  de una placa conductora conectada a tierra. En este caso, la placa puede reemplazarse por una carga imagen  $-q$  a la misma distancia del otro lado de la placa.

El teorema de Gauss nos dice como es el campo eléctrico en las proximidades de un conductor cuando conocemos la distribución de la carga en su superficie. La situación inversa es la de preguntarnos cómo se distribuye la carga en un conductor cuando sobre él actúa un determinado campo.

Supongamos un sistema formado por una carga puntual  $Q$  en las proximidades de una esfera conductora a potencial cero a una distancia  $d$  de su centro. El método de las imágenes nos permite sustituir el conductor por una carga “imagen”  $q$  que anulará el potencial sobre la superficie esférica de radio  $R$ .

El potencial en el punto  $P_1$  de la superficie esférica deberá ser cero

$$\frac{Q}{d+R} + \frac{q}{b+R} = 0 \quad (52)$$

El potencial en el punto  $P_3$  diametralmente opuesto deberá ser cero.

$$\frac{Q}{d-R} + \frac{q}{b-R} = 0 \quad (53)$$

Tenemos un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas de las que despejamos  $q$  y  $b$ .

$$q = -\frac{R}{d}Q, \quad b = \frac{R^2}{d}$$

Podemos demostrar haciendo algunas operaciones que estos valores de  $q$  y  $b$  hacen que el potencial en cualquier punto  $P_2$  de la superficie esférica, sea también cero.

$$\frac{Q}{r_1} + \frac{q}{r_2} = 0 \quad (54)$$

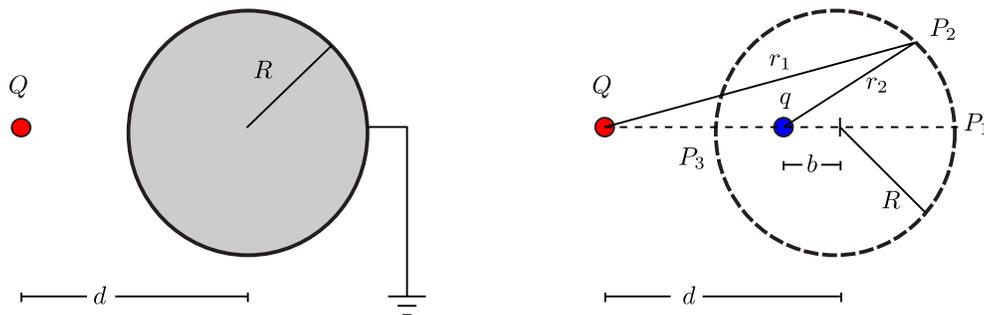


Figura 4

### 5.2.1. EL POTENCIAL

Vamos a calcular el campo en cualquier punto  $P$  exterior a la esfera conductora. Primero calculamos el potencial

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{Q}{r_1} + \frac{q}{r_2} \right) = 0 \quad (55)$$

Se expresa  $r_1$  y  $r_2$  en coordenadas polares en función de la distancia radial  $r$  del centro de la esfera al punto  $P$  y del ángulo  $\theta$ .

$$\begin{aligned} r_1 &= \sqrt{d^2 + r^2 + 2dr \cos \theta} \\ r_2 &= \sqrt{b^2 + r^2 + 2br \cos \theta} \end{aligned} \quad (56)$$

De este modo  $V$  es una función de  $r$  y  $\theta$

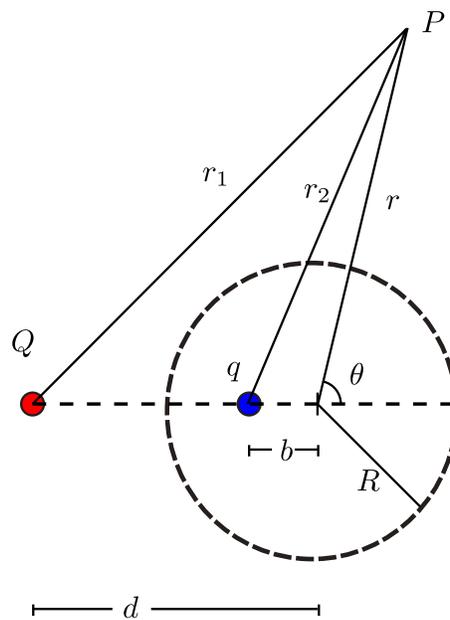


Figura 5

### 5.2.2. COMPONENTE RADIAL DEL CAMPO

Para calcular el vector campo  $E$  se halla el gradiente del potencial cambiado de signo. El valor de la componente radial del campo es

$$E_r = -\frac{\partial V}{\partial r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{r + d \cos \theta}{r_1^3} Q + \frac{r + b \cos \theta}{r_2^3} q \right) \quad (57)$$

### 5.2.3. DOS ESFERAS CONDUCTORAS UNA DE LAS CUALES ESTÁ A POTENCIAL CERO

Consideremos el caso de dos esferas de radios  $r$  y  $R$  cuyos centros están separados una distancia  $d > r + R$ . La primera esfera tiene un potencial  $V$  y la segunda esfera está conectada a tierra,  $V=0$ .

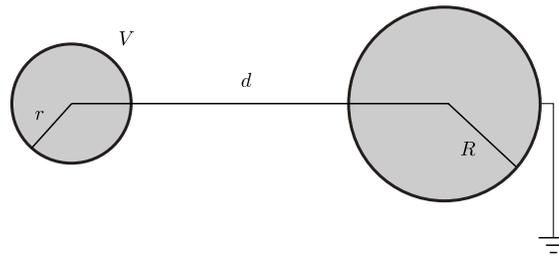


Figura 6

Sustituiremos las dos esferas por dos sucesiones de cargas puntuales que hacen que las dos superficies esféricas sean equipotenciales hasta una tolerancia dada.

Los pasos para aplicar el método de las imágenes son los siguientes:

1. Colocamos en el centro de la primera esfera de radio  $r$  una carga  $q_0$ , de modo que el potencial de la esfera sea  $V$ .

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{q_0}{r} \right) \quad (58)$$

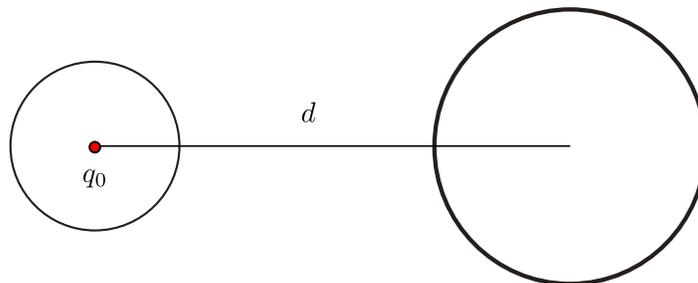


Figura 7

2. La superficie esférica de radio  $R$  deja de ser equipotencial, por eso colocamos una carga  $Q_1$  en el interior de la segunda esfera a una distancia  $X_1$  de su centro

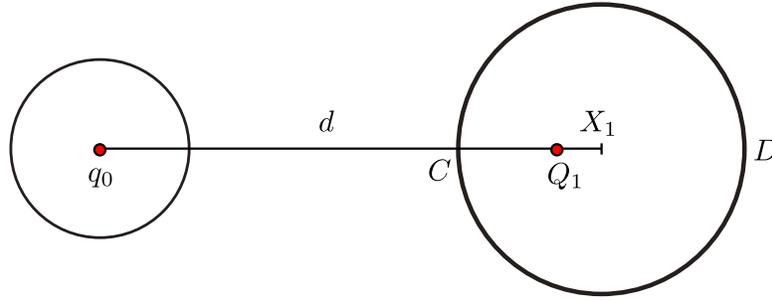


Figura 8

Calculamos el valor de  $Q_1$  y su posición  $X_1$  para que la segunda esfera de radio  $R$  sea una superficie equipotencial, aunque deje de serlo la primera esfera de radio  $r$ .

El potencial en C ( $d - R, 0$ ) debido a las cargas  $q_0$  y  $Q_1$  lo hacemos cero

$$\frac{q_0}{d - R} + \frac{Q_1}{R - X_1} = 0 \quad (59)$$

El potencial en B ( $d + R, 0$ ) debido a las cargas  $q_0$  y  $Q_1$  lo tomamos como cero

$$\frac{q_0}{d + R} + \frac{Q_1}{R + X_1} = 0 \quad (60)$$

Despejamos  $Q_1$  y  $X_1$  de este sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas

$$X_1 = \frac{R^2}{d}, \quad Q_1 = -q_0 \frac{R}{d} \quad (61)$$

3. La superficie esférica de radio  $r$  deja de ser equipotencial, por lo que ubicamos una carga  $q_1$  en el interior de la primera esfera a una distancia  $x_1$  de su centro

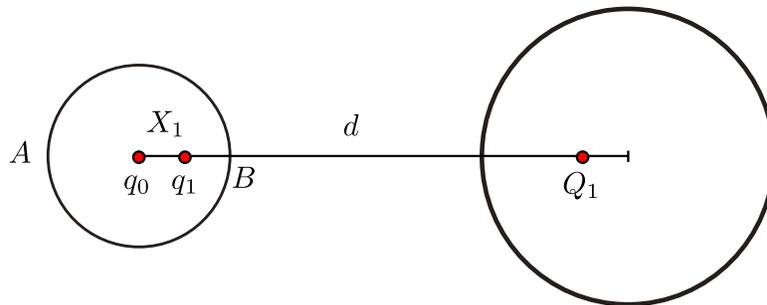


Figura 9

Calculamos el valor de  $q_1$  y su posición  $x_1$  para que la primera esfera de radio  $r$  sea una superficie equipotencial, aunque deje de serlo la segunda esfera de radio  $R$ .

El potencial en A  $(-r, 0)$  debido a las cargas  $q_1$  y  $Q_1$  lo hacemos cero

$$\frac{q_1}{r + x_1} + \frac{Q_1}{d + r - X_1} = 0 \quad (62)$$

El potencial en B  $(r, 0)$  debido a las cargas  $q_1$  y  $Q_1$  lo tomamos como cero

$$\frac{q_1}{r - x_1} + \frac{Q_1}{d - r - X_1} = 0 \quad (63)$$

Despejamos  $Q_1$  y  $X_1$  en este sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas

$$x_1 = \frac{r^2}{d - X_1} \quad (64)$$

$$q_1 = -Q_1 \frac{r}{d - X_1} = q_0 \frac{rR}{d^2 - R^2} \quad (65)$$

4. La superficie esférica de radio  $R$  deja de ser equipotencial, por lo que ubicamos una carga  $Q_2$  en el interior de la segunda esfera a una distancia  $X_2$  de su centro

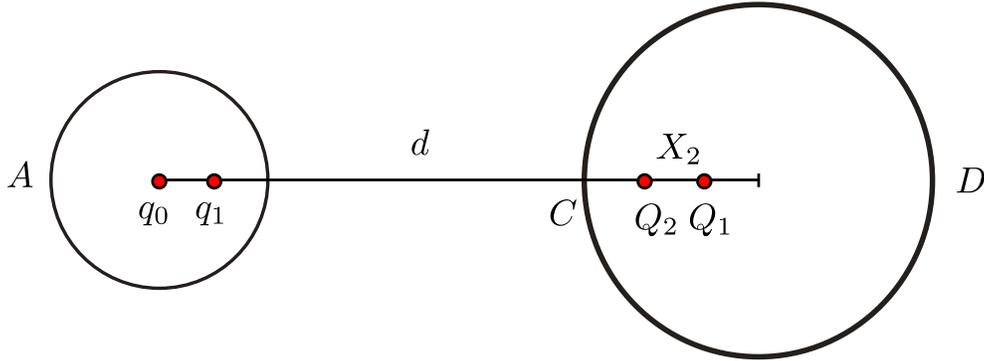


Figura 10

Calculamos el valor de  $Q_2$  y su posición  $X_2$  para que la segunda esfera de radio  $R$  sea una superficie equipotencial, aunque deje de serlo la primera esfera de radio  $r$ .

El potencial en C  $(d - r, 0)$  debido a las cargas  $Q_2$  y  $q_1$  lo igualamos a cero

$$\frac{Q_2}{R - X_2} + \frac{q_1}{d - r - X_1} = 0 \quad (66)$$

El potencial en D  $(d + r, 0)$  debido a las cargas  $Q_2$  y  $q_1$  lo hacemos cero

$$\frac{Q_2}{R + X_2} + \frac{q_1}{d + r - X_1} = 0 \quad (67)$$

Despejamos  $Q_2$  y  $X_2$  en este sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas

$$X_2 = \frac{R^2}{d + x_1} \quad (68)$$

$$Q_2 = -q_1 \frac{R}{d + x_1} = -q_0 \frac{rR^2}{d^3 - dR^2 - dr^2} \quad (69)$$

5. La superficie esférica de radio  $r$  deja de ser equipotencial, por lo que situamos una carga  $q_2$  en el interior de la primera esfera a una distancia  $x_2$  de su centro.

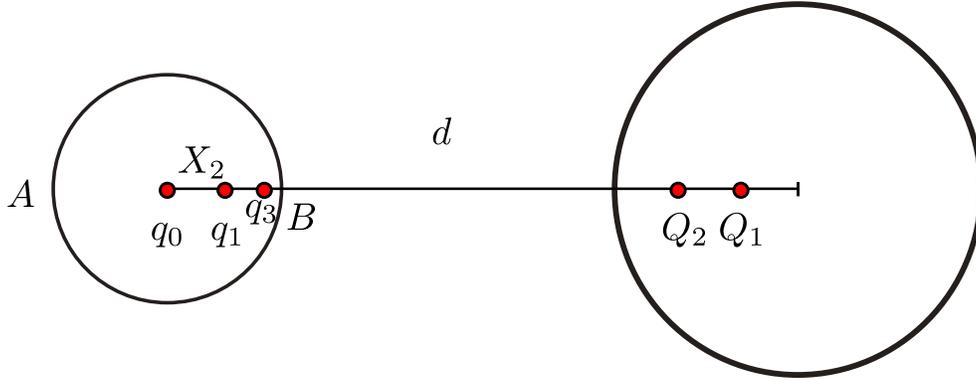


Figura 11

Calculamos el valor de  $q_2$  y su posición  $x_2$  para que la primera esfera de radio  $r$  sea una superficie equipotencial, aunque deje de serlo la segunda esfera de radio  $R$ .

El potencial en A  $(-r, 0)$  debido a las cargas  $q_2$  y  $Q_2$  lo tomamos como cero

$$\frac{q_2}{r + x_2} + \frac{Q_2}{d + r - X_2} = 0 \quad (70)$$

El potencial en B  $(r, 0)$  debido a las cargas  $q_2$  y  $Q_2$  lo igualamos a cero

$$\frac{q_2}{r - x_2} + \frac{Q_2}{d - r - X_2} = 0 \quad (71)$$

Despejamos  $Q_2$  y  $X_2$  en este sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas

$$x_2 = \frac{r^2}{d - X_2} \quad (72)$$

$$q_2 = -Q_2 \frac{r}{d - X_2} = -q_0 \frac{r^2 R^2}{d^4 - 2R^2 d^2 - r^2 d^2 + R^4} \quad (73)$$

y así, sucesivamente.

### 5.2.4. RELACIONES RECURSIVAS

Podemos calcular la sucesión de cargas  $q_i$ ,  $Q_i$  y sus posiciones  $x_i$ ,  $X_i$  mediante las relaciones recursivas

$$X_{i+1} = \frac{R^2}{d+x_i}, \quad Q_{i+1} = -q_i \frac{R}{d+x_i}, \quad i = 1, 1, 2 \dots \quad (74)$$

$$X_{i+1} = \frac{r^2}{d-x_{i+1}}, \quad q_{i+1} = -Q_{i+1} \frac{r}{d-X_{i+1}} \quad (75)$$

$$x_0 = 0, \quad X_0 = 0, \quad Q_0 = 0$$

### 5.3. CONDENSADORES ESFÉRICOS

Haciendo una extensión del método de imágenes para más de dos esferas y haciendo uso de lo anteriormente explicado, calculamos las primeras imágenes de  $q_0^{(m)}$  en las esferas con centro en  $X^{(i)}$  con  $i \neq m$ , donde  $m$  es el número de esfera referenciada.

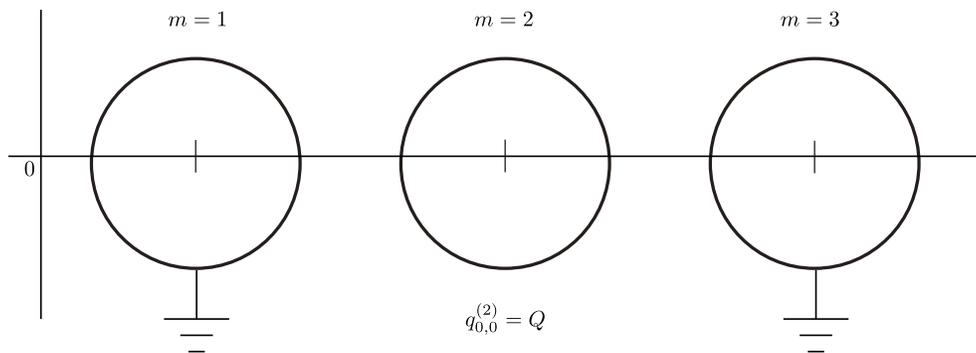


Figura 12

Para explicar cualitativamente el algoritmo de generación de cargas imagen, utilizaremos el ejemplo de tres esferas, con una de ellas, (la central) cargada y las demás a tierra. El algoritmo genera en cada iteración una nueva generación de cargas imagen, las primeras generaciones son las siguientes.

- **Generación cero:** del diagrama que se muestra a continuación podemos observar que aquí solamente tenemos a la esfera central con  $m=2$  que contiene una carga  $q_{0,0}^{(2)}$ .
- **Generación uno:** La carga en la esfera central  $q^{(2)}$  genera dos cargas imagen, una en la esfera de la izquierda  $q_{1,0}^{(1)}$  y la otra en la esfera de la derecha  $q_{1,1}^{(3)}$ ; teniendo así una carga en cada esfera.
- **Generación dos:** debido a las dos cargas generadas anteriormente en las esferas  $q^{(1)}$  y  $q^{(3)}$ , cada una de ellas vuelve a generar una carga imagen sobre la esfera  $q^{(2)}$ ; es decir, ahora la esfera  $q^{(2)}$  admite dos nuevas cargas.
- **Generación tres:** la esfera  $q^{(2)}$  a su vez vuelve a generar cuatro cargas imagen debido a las dos cargas admitidas, dos en la esfera  $q^{(1)}$  y otras dos en la esfera  $q^{(3)}$ . Hay que agregar a ello las dos cargas imagen que aparecieron en la generación uno; teniendo así un total de seis nuevas cargas en el sistema.

- **Generación cuatro:** nuevamente, debido a la presencia de las nuevas cargas imagen generadas en  $q^{(1)}$  y  $q^{(3)}$ , cada una de ellas vuelve a generar tres nuevas cargas imagen que aparecen sobre la esfera  $q^{(2)}$ , teniendo así seis nuevas cargas.

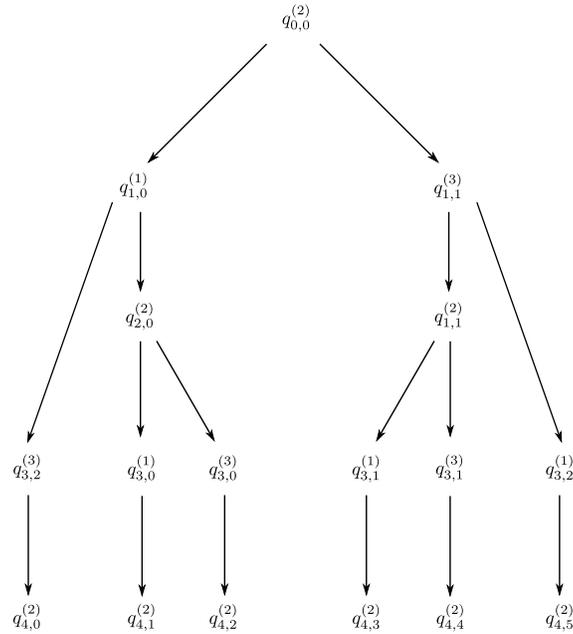


Figura 13: Generaciones

Así, sucesivamente se continúan creando las generaciones que podemos ver como pares e impares, las pares corresponden a la esfera central y las impares al resto. La forma en que va creciendo la población de cargas imagen se describe en la siguiente tabla. [6]

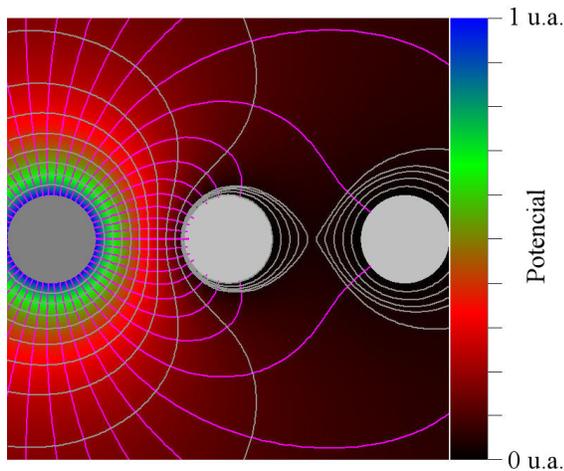
Generación	0	1	2	3	4	5	6	7
No. de Cargas	1	2	2	6	6	18	18	54

Para iteraciones impares tendremos  $N_{2i+1}=3n_{2i}$  cargas imagen (con  $i=1,2,3,\dots$ ) y para las iteraciones pares,  $N_{2i}=n_{2i-1}$  con  $i=1,2,3,\dots$

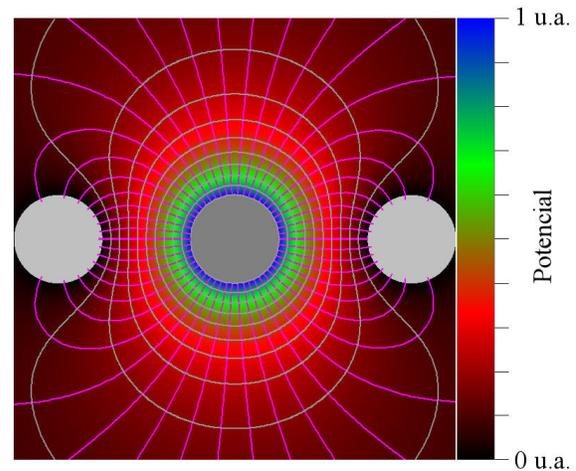
Las generaciones no crecen al infinito sino que se impone una carga mínima de corte. Cuando se alcanza esta carga ya no se generan nuevas cargas imagen y el proceso converge a un número finito de cargas.

## 6. RESULTADOS Y VISUALIZACIONES

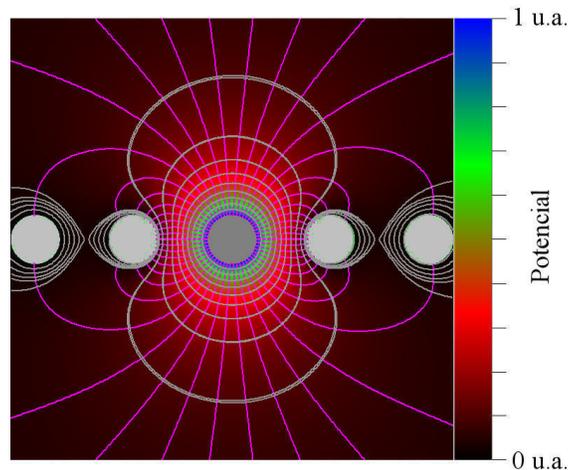
A continuación se muestran las visualizaciones de la simulación computacional, resultado del empleo del algoritmo de Verlet para 3 y 5 esferas conductoras de 1 nm de radio. Las condiciones iniciales son puntos alrededor de la esfera central para las líneas de campo y puntos equidistantes sobre el eje X fuera de las esferas para las superficies equipotenciales.



(a) Líneas de campo para tres esferas conductoras. La esfera del lado izquierdo está cargada y el resto están aterrizadas.



(b) Líneas de campo para tres esferas conductoras. La esfera central está cargada y el resto están aterrizadas.



(c) Líneas de campo para cinco esferas conductoras. La esfera central está cargada y el resto están aterrizadas.

Figura 14: Implementación del algoritmo con el método de Verlet. Las condiciones iniciales son puntos alrededor de la esfera central para las líneas de campo y puntos equidistantes sobre el eje X fuera de las esferas para las superficies equipotenciales.

Claramente se puede observar en las figuras anteriores que en esta simulación se resuelve el problema de los infinitos que impedían graficar continuamente las líneas de campo, los casos que se muestran son los discutidos anteriormente. Asimismo, la figura 14c es el resultado de una simulación que requiere de mucho más tiempo de cálculo computacional, ya que se trata de un conjunto de cinco esferas, de las cuales, la central es la que se encuentra cargada con respecto a las demás.

## 6.1. COMPARACIÓN CON OTROS MÉTODOS

A partir de la ecuación 24 se tiene:

$$\frac{dx}{ds} = \frac{E_x}{E}, \quad \frac{dy}{ds} = \frac{E_y}{E}, \quad (76)$$

Es posible aplicar el método de Euler para estas ecuaciones y dibujar las líneas de campo eléctrico:

$$x_{n+1} = x_n + h \frac{E_x}{E}, \quad (77)$$

$$y_{n+1} = y_n + h \frac{E_y}{E}, \quad (78)$$

a partir de un punto arbitrario  $(x_0, y_0)$ .

Se puede demostrar que las superficies equipotenciales cortan perpendicularmente a las líneas de campo. Usaremos este hecho para dibujar las curvas de nivel (en  $z = 0$ ) de las superficies equipotenciales mediante el vector perpendicular:

$$\left( \frac{dx}{ds}, \frac{dy}{ds} \right) = \frac{1}{E} (-E_y, E_x) \quad (79)$$

entonces, el esquema del método de Euler para las curvas de nivel de las superficies equipotenciales queda:

$$x_{n+1} = x_n + h \frac{E_y}{E}, \quad (80)$$

$$y_{n+1} = y_n - h \frac{E_x}{E}, \quad (81)$$

A continuación se aplica este método para el caso de tres esferas conductoras de 1 nm de radio; la central con carga y el resto a tierra. Las condiciones iniciales son puntos alrededor de la esfera central para las líneas de campo y puntos equidistantes sobre el eje X fuera de las esferas para las superficies equipotenciales.

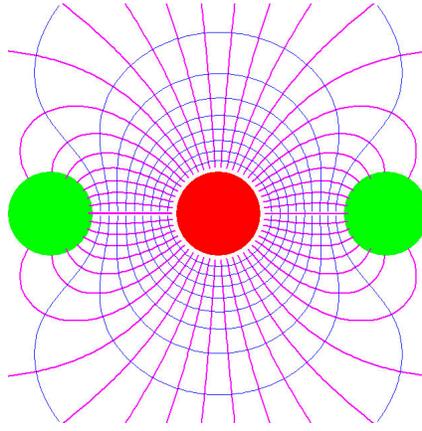


Figura 15: Tres esferas conductoras de 1 nm de radio; la central con carga y el resto a tierra. Las condiciones iniciales son puntos alrededor de la esfera central para las líneas de campo y puntos equidistantes sobre el eje X fuera de las esferas para las superficies equipotenciales.

A continuación se presentan dos imágenes donde se comparan, para el caso anterior, ambos métodos (Euler y Verlet) para un paso  $h = 0.1$ . Se calcularon los pasos suficientes para dibujar diez veces la misma equipotencial, con lo que puede apreciarse la estabilidad del método de Verlet (Fig. 16b) al dibujar las líneas sobre sí mismas, a diferencia de Euler (Fig. 16a), donde las líneas se dibujan “en espiral”.

Para tener una precisión equivalente a la que se obtiene con Verlet, sería necesario emplear el método de Runge-Kutta de tercer orden, ya que éste tiene un error de truncamiento local de  $h^4$ , con la ventaja de que, tratándose de un problema bidimensional, Verlet reduce las llamadas a la función de 6 a sólo 2.

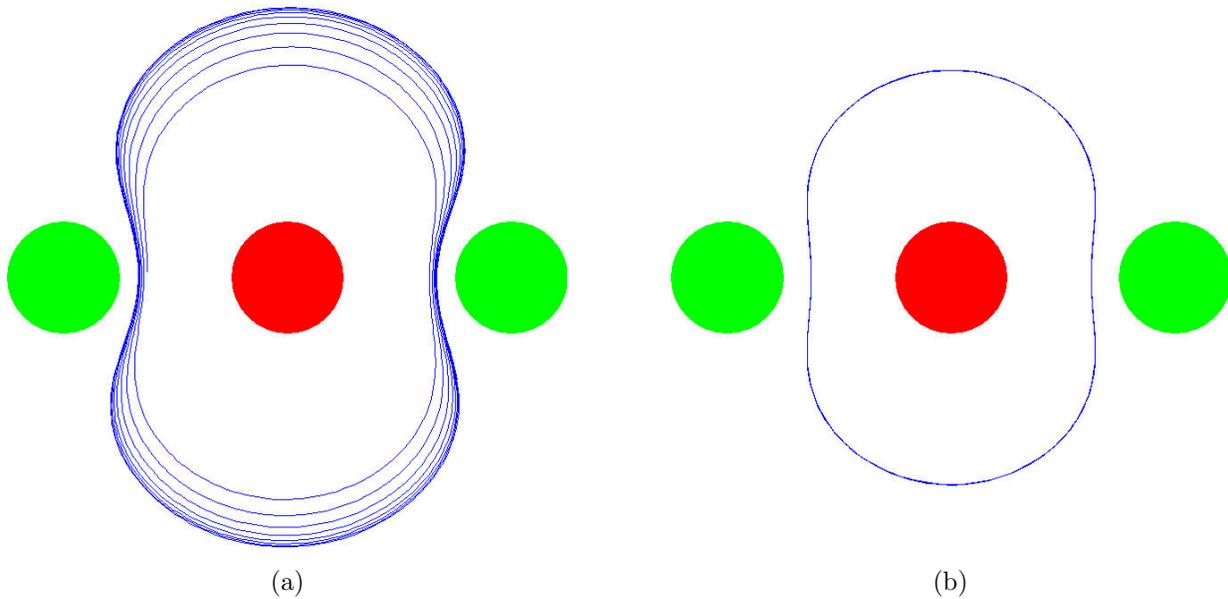


Figura 16: Comparación de ambos métodos (Euler y Verlet) para un paso  $h = 0.1$ . Se calcularon los pasos suficientes para dibujar diez veces la misma equipotencial, con lo que puede apreciarse la estabilidad del método de Verlet (Fig. 16b) al dibujar las líneas sobre sí mismas, a diferencia de Euler (Fig. 16a), donde las líneas se dibujan “en espiral”.

## 7. CONCLUSIONES

En esta tesis se muestra el empleo y cómo se ha adaptado el algoritmo de Verlet para calcular líneas de campo y equipotenciales con condensadores esféricos; asimismo, se mencionan otros métodos numéricos clásicos como el método de Euler y el de Runge-Kutta mismos que se han empleado para hacer estos mismos cálculos, sin embargo, lo novedoso de este trabajo es el demostrar que el algoritmo de Verlet es un procedimiento más rápido, eficiente y con menos error numérico al realizar los cálculos computacionales para ecuaciones de tipo Newton. Las bondades y ventajas del método de Verlet en Dinámica Molecular creemos que prevalecen en esta aplicación permitiendo escribir algoritmos más eficientes y rápidos en problemas que son sumamente complejos como la representación y visualización de las líneas de campo y superficies equipotenciales de capacitores formados por  $N$  esferas conductoras en presencia de campos eléctricos constantes que implican considerar varios miles de cargas eléctricas imágenes.

La filosofía detrás del algoritmo de Verlet, nuevamente demuestra ser un desarrollo cómodo, rápido y flexible. Desde luego, las segundas derivadas no se pueden identificar con una fuerza, lo cual implica un desarrollo de los campos un poco más laborioso, sin embargo, prevalecen las ventajas del algoritmo.

De la comparación entre los métodos de Euler y Verlet, para un mismo tamaño de paso  $h$ , se puede decir que la estabilidad del algoritmo de Verlet supera al método de Euler, lo cual permite trabajar con valores suficientemente grandes de  $h$ , que logra cálculos más rápidos y precisos. Un método equivalente en precisión al que se desarrolla en esta tesis, sería el método de Runge-Kutta de tercer orden, con la desventaja de hacer el triple de llamadas a la función, con el costo computacional que esto implica.

## 8. Apéndice A

Realizando las derivadas correspondientes, se obtienen las siguientes expresiones para trazar las curvas de nivel ( $z = 0$ ) de las superficies equipotenciales:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{ds} \left( \frac{E_x}{E} \right) = & - \left\{ \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) \left[ \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 \right. \right. \\
& \times \sum_{i=1}^n \left( -\frac{3q_i(x-x_i)^2}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} + \frac{q_i}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) \\
& - 2 \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) \left( \sum_{i=1}^n -\frac{3q_i(x-x_i)(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} \right) \\
& \times \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) + \sum_{i=1}^n \left( -\frac{3q_i(y-y_i)^2}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} \right. \\
& \left. \left. + \frac{q_i}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 \right] \\
& \times \left\{ \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 + \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 \right\}^{-2} \quad (82)
\end{aligned}$$

Análogamente para  $y$ ,  $\frac{d^2 y}{ds^2} = \frac{d}{ds} \left( \frac{E_y}{E} \right)$

$$\frac{d}{ds} \left( \frac{E_y}{E} \right) = \left( \frac{E_x}{E} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{E_y}{E} \right) + \left( \frac{E_y}{E} \right) \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{E_y}{E} \right) \quad (83)$$

Tenemos que

$$\begin{aligned}
\frac{d}{ds} \left( \frac{E_x}{E} \right) = & \left\{ \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) \left[ \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 \right. \right. \\
& \times \sum_{i=1}^n \left( -\frac{3q_i(x-x_i)^2}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} + \frac{q_i}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) \\
& - 2 \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) \left( \sum_{i=1}^n -\frac{3q_i(x-x_i)(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} \right) \\
& \times \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) + \sum_{i=1}^n \left( -\frac{3q_i(y-y_i)^2}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{5/2}} \right. \\
& \left. \left. + \frac{q_i}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right) \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 \right] \\
& \times \left\{ \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(y-y_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 + \left( \sum_{i=1}^n \frac{q_i(x-x_i)}{[(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2]^{3/2}} \right)^2 \right\}^{-2} \quad (84)
\end{aligned}$$

## BIBLIOGRAFÍA

1. L. Verlet, *Physical Review*, **159** (1967) 98.
2. S.C. Chapra, Raymond P. Canale, *Métodos Numéricos*, Ed. McGraw Hill
3. A. Góngora-T. and E. Ley-Koo, *Rev. Mex. Fis.* **42**, 663 (1996).
4. E. Ley-Koo, *Rev. Mex. Fis.* **48**, 579 (2002).
5. J. Sliško, *Am. J. Phys.* **66**, 352 (1998).
6. Christoph Wasshuber, “Dissertation about single-Electron Devices and Circuits”,  
<http://www.iue.tuwien.ac.at/diss/wasshuber/diss/node78.html>
7. J.R. Reitz, F.J. Milford, R.W. Christy, *Fundamentos de la Teoría Electromagnética*, Ed. Addison-Wesley Iberoamericana.
8. A. Calles *et al*, “Programa para modelar capacitores de esferas conductoras a partir de cargas puntuales”, en proceso de edición.