

Orbitas de Sistemas de Partículas No Interactivas Bajo un Buen Potencial a Pares Desde un Punto de Vista Algebraico

C. Barrón-Romero, A. Cueto-Hernández, F. Monroy-Pérez

Departamento de Ciencias Básicas, UAM-Azcapotzalco, México D.F.

Teléfono (55) 5318 9014 E-mail: cbarron@correo.azc.uam.mx

Resumen— El estudio de las orbitas de sistemas dinámicos y estáticos de pocas partículas bajo un buen potencial a pares es de gran interés en Física y Matemáticas, así como en Ciencia de Materiales, Química y Astrofísica. En este artículo, presentamos una metodología nueva algebraica para la determinación completa de las orbitas (puntos, curvas o superficies equipotenciales) alrededor de un sistema estático de dos partículas en posiciones arbitrarias bajo un potencial del tipo Van der Waals. Las orbitas corresponden a las raíces positivas de ecuaciones solubles por radicales que se determinan completamente por polinomios de grado a lo más 4, que son resueltos por procedimientos algebraicos estándares y derivados de los Métodos de Cardan y Ferrari. Nuestro método se generaliza para grupos de polinomios con grado múltiplos de 2, 3 y 4. Se incluye una comparación entre las orbitas verdaderas de nuestro método, con aproximaciones de orbitas calculadas por métodos numéricos y se incluyen gráficas en 2D y 3D del verdadero potencial de superficie.

Palabras Clave: órbitas, conjuntos de nivel, buen potencial a pares, Potencial de Van der Waals, solución por radicales, superficies de equipotencial

Keywords: orbits, level sets, pairwise good potential, Potential of Van der Waals, solubility by radicals, equipotential surfaces

I. INTRODUCCIÓN

El estudio de la formación y de la interacción de conglomerados de pocas partículas bajo un potencial se puede dividir en terminos generales en dos enfoques: estático y dinámico, siendo este último una formulación apropiada de las ecuaciones de Newton.

La primera sirve de base al estudio teórico y experimental de la formación de cristales, su plasticidad y el fenómeno de swarming. La formulación dinámica está relacionada con problemas de control, de mecánica celeste y de astrofísica. Otro tipo de investigación concerniente a un buen potencial a pares y control de caos es el análisis dinámico y el control de micro balcones (cantilevers) como una aproximación de un solo modo de interacciones bajo potencial de Van der Waals, por ejemplo (Ashhab *et al.*, 1999).

En el estudio del problema de N-cuerpos se han utilizado varios potenciales a pares para determinar las configuraciones de equilibrio relativo y sus coreografías respecto al centro de masa (Corbera *et al.*, 2004). Estos métodos incluyen desde los sistemas dinámicos clásicos hasta las técnicas de control no-lineal (Bonnard *et al.*, 2010). Recientemente, el

grupo de A. Mielke (Mielke, 2002), ha aplicado álgebras y grupos de Lie para el estudio de la elastoplasticidad finita asociando al tensor de plasticidad a un elemento apropiado de un grupo de Lie y la disipación plástica a una métrica de Finsler del mismo grupo. Siguiendo esta línea de investigación, D. Mittenhuber (Mittenhuber, 2002) ha resuelto el problema de un sistema de 4-hojas en el plano con hojas en direcciones ortogonales calculando la métrica de disipación como la solución de problemas de control óptimo. Es de nuestro conocimiento que gran parte de la literatura sobre clusters de partículas bajo un buen potencial a pares se ha enfocado hacia el problema de la búsqueda de clusters de potencial óptimo por métodos numéricos de optimización, véase por ejemplo (Maranas y Floudas, 1994), (Wolf y Landman, 1998), (Romero *et al.*, 1999), (Solov'yov *et al.*, June, 2003), (Xiang *et al.*, 2004) y las referencias de estos. En este artículo, damos un enfoque diferente, aunque incluimos estimaciones por métodos numéricos para efectos de comparación.

Nuestra investigación en sistemas bajo un buen potencial a pares se orienta en las líneas anteriores, particularmente, hacia problemas de control óptimo de la ruta óptima, navegación libre de colisiones (coreografías o navegación alrededor y al interior de un sistema de partículas), la formación de redes cristalinas y de pequeños clusters y en el estudio de sus zonas equipotenciales. En este artículo, presentamos una descripción completa de las zonas equipotenciales para un sistema de dos partículas no interactivas y en posiciones arbitrarias y fijas (partículas estáticas) por medio de una metodología algebraica.

Para la determinación de las órbitas o conjuntos de nivel, gran parte de la literatura refiere el uso de software matemático de dos tipos, algebraico o simbólico (MapleTM, MathematicaTM) o de métodos numéricos (MatlabTM, Octave) para dar aproximaciones gráficas de los contornos. El software de métodos numéricos usa matrices de dos dimensiones (plano) o de tres dimensiones (espacio) donde sus valores son agrupados por similitud (bajo la suposición de que la función es continua) para formar las zonas equipotenciales (puntos, curvas, planos o volúmenes). Esto es una forma de graficar o de aproximar en forma implícita a las zonas equipotenciales. El software de tipo simbólico también tiene este tipo de opción de graficación implícita,

pero además ofrece para ecuaciones sencillas, el poder de despejar algebraicamente, es decir, obtener una fórmula explícita. Sin embargo, nuestro conocimiento es de que no existen técnicas o métodos para la determinación de funciones explícitas de las órbitas o del potencial de la energía de superficie (PES, por sus siglas en inglés), aun para sistemas de pocas partículas. La novedad de nuestro método es el de resolver el problema de la función implícita de la ecuación de equipotencial para la determinación de los conjuntos de nivel usando métodos algebraicos para la resolución de polinomios por radicales. Con nuestro método la solución exacta de una órbita es una función. Para mostrar la diferencia con las técnicas de aproximación, mostramos una comparación de una buena y visualmente similar órbita con una verdadera órbita obtenida por nuestro método.

El artículo está organizado como sigue: en la sección II, se introduce la notación y descripción general del problema y de nuestra metodología, así como el principal resultado. La sección III contiene las descripciones de los procedimientos algebraicos y un resumen histórico de la resolución por radicales de polinomios de hasta de grado 4. En la sección IV, se presenta una comparación de estimaciones numéricas y nuestros resultados algebraicos. Finalmente en la sección V, presentamos conclusiones y describimos algunas de las futuras líneas de nuestra investigación.

II. NOTACIÓN Y PROBLEMAS

Sea d una métrica de \mathbb{R}^3 y $P : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ una función suave, P es un buen potencial a pares si satisface las siguientes condiciones:

1. Rechazo infinito que evita la destrucción o el colapso de partículas al acercarse, $\lim_{d \rightarrow 0} P(d) = \infty$.
2. Zona convexa negativa alrededor de la distancia óptima del potencial mínimo, $d^* = \arg \min_{d \in (0, \infty)} P(d)$.
3. Atracción asintótica, $\lim_{d \rightarrow \infty} P(d) = 0^-$.

Un ejemplo de una función de potencial del tipo Van der Waals que satisface las propiedades anteriores es la siguiente:

$$B(d) = \frac{1}{d^4} - \frac{2}{d^2}.$$

Esta función tiene su mínimo en $d^* = 1$ y $B(d^*) = -1$.

Para un sistema de tres partículas $p_i = (x_i, y_i, z_i) \in \mathbb{R}^3$, $i = 1, 2, 3$, bajo la métrica Euclidiana $\sqrt{d_{ij}}$ = $\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$, su potencial está dado por

$$B(p_1, p_2, p_3) = \sum_{1 \leq i < j \leq 3} \frac{1}{(d_{ij})^2} - \frac{2}{d_{ij}}.$$

El conocido potencial de Lennard-Jones, denotado por LJ (12-6), (que es también del tipo Van der Waals) es el siguiente:

$$J(d) = \frac{1}{d^{12}} - \frac{2}{d^6},$$

donde su mínimo es en $d^* = 1$ con $J(d^*) = -1$. Para tres partículas bajo la métrica Euclidiana se tiene

$$J_E(p_1, p_2, p_3) = \sum_{1 \leq i < j \leq 3} \frac{1}{(d_{ij})^6} - \frac{2}{(d_{ij})^3}.$$

Nótese que usando la métrica

$$\sqrt[6]{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$$

el potencial LJ(12-6) coincide con B , i.e.,

$$J_{\sqrt[6]{\cdot}}(p_1, p_2, p_3) = B(p_1, p_2, p_3).$$

En este artículo, nos enfocamos al problema de la determinación de las órbitas bajo el potencial B para un sistema de tres partículas, dos de las cuales tienen posiciones fijas y arbitrarias y la tercera es libre. Al potencial de este sistema lo denotaremos de aquí en adelante como B_2 .

Sin pérdida de generalidad, asumimos que las dos partículas p_1 y p_2 tienen respectivamente coordenadas $(-\frac{l}{2}, 0, 0)$ y $(\frac{l}{2}, 0, 0)$ donde la distancia $l > 0$ entre ellas es fija. La partícula libre p tiene coordenadas $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$. Se tiene entonces que B_2 (el potencial completo de este sistema) está dado por

$$B_2(x, y, z) = \frac{1}{((x + \frac{l}{2})^2 + y^2 + z^2)^2} - \frac{2}{(x + \frac{l}{2})^2 + y^2 + z^2} + \frac{1}{((x - \frac{l}{2})^2 + y^2 + z^2)^2} - \frac{2}{(x - \frac{l}{2})^2 + y^2 + z^2} + K_l.$$

donde $K_l = \frac{1}{l^4} - \frac{2}{l^2}$ corresponde al potencial constante entre p_1 y p_2 .

Una órbita de B_2 de valor G es el conjunto $O(l, G) = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid B_2(x, y, z) = G\}$, donde G toma valores en el rango de B_2 , i.e., $G \in [m_l, \infty)$ donde $l > 0$ es la distancia de las dos partículas y

$$m_l = \min_{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3} B_2(x, y, z).$$

La simetría de $B_2(x, y, z)$ respecto a la tercera coordenada permite reducir la dimensión del problema a \mathbb{R}^2 . Mas aún,

$$B_2(x, y) = B_2(x, -y) = B_2(-x, -y) = B_2(-x, y).$$

De lo anterior, solo es necesario considerar los conjuntos de nivel $O(l, G) = \{(x, y) \in \mathbb{R}^{+2} \mid B_2(x, y) = G\}$, donde $R^+ = [0, \infty)$, $l > 0$ la distancia de las partículas fijas y $G \in [m_l, \infty)$ el valor del nivel. El correspondiente modelo de $O(l, G)$ en 3D se construye por las rotaciones apropiadas.

Nuestra metodología se basa en:

- Los métodos algebraicos de Cardan y de Ferrari.
- Para un nivel dado $G = G_x$, de la ecuación $B_2(x, y) = G$ resulta un polinomio de grado tres o de grado cuatro con coeficientes en el anillo $\mathbb{R}[x]$, el cual se resuelve para obtener la raíz exacta $r(x, G, l)$.
- Si $r(x, G, l) \geq 0$ es una raíz, entonces $O(l, G) = \{(x, y) \mid x > 0, y = \sqrt{r(x, G, l)}\}$.

El resultado principal es el siguiente:

Proposición 1: Dado un sistema de dos partículas fijas y una libre, donde $p_1 = (-\frac{l}{2}, 0, 0), p_2 = (\frac{l}{2}, 0, 0)$ están a distancia $l > 0$. Las órbitas $O(l, G)$ of B_2 con $G \in [m_l, \infty)$, corresponden a las raíces positivas de los polinomios de tercero y cuarto grado obtenidos de la ecuación:

$$B_2(x, y) - G_l = 0. \quad (1)$$

Demostración 2.1: De (1) se tiene: $((x - \frac{l}{2})^2 + y^2)^2 - 2((x + \frac{l}{2})^2 + y^2)((x - \frac{l}{2})^2 + y^2)^2 + ((x + \frac{l}{2})^2 + y^2)^2 - 2((x - \frac{l}{2})^2 + y^2)((x + \frac{l}{2})^2 + y^2)^2 - (K_l + G)((x + \frac{l}{2})^2 + y^2)^2((x - \frac{l}{2})^2 + y^2)^2 = 0$,

que para x o y las potencias son 8, 6, 4, 2 cuando $(K_l + G) \neq 0$ y x o y tienen potencias 6, 4, 2 cuando $(K_l + G) = 0$.

Haciendo x la variable independiente, con el cambio de variable $u = y^2$, se obtienen las siguientes ecuaciones de tercero y cuarto grado:

$$\begin{aligned} (1024Gx^2 + 256G + 1280 + 1024x^2)u^3 + & \\ 352 + 256Gx^2 + 3328x^2 + & \\ 1536Gx^4 + 1536x^4 + 96G)u^2 + & \\ (-256Gx^4 + 1024Gx^6 - 576x^2 - 48 - & \\ 64Gx^2 + 2816x^4 + 16G + 1024x^6)u - & \\ 15 + G - 16Gx^2 + 96Gx^4 - & \\ 256Gx^6 + 256Gx^8 - & \\ 848x^2 - 672x^4 + 768x^6 + 256x^8 = & 0, \quad (2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (256G + 256K_l)u^4 + & \\ (1024Gx^2 + 256G + 1280 + 1024x^2)u^3 + & \\ 352 + 256Gx^2 + 3328x^2 + & \\ 1536Gx^4 + 1536x^4 + 96G)u^2 + & \\ (-256Gx^4 + 1024Gx^6 - 576x^2 - 48 - & \\ 64Gx^2 + 2816x^4 + 16G + 1024x^6)u - & \\ 15 + G - 16Gx^2 + 96Gx^4 - & \\ 256Gx^6 + 256Gx^8 - & \\ 848x^2 - 672x^4 + 768x^6 + 256x^8 = & 0. \quad (3) \end{aligned}$$

Sus raíces se construyen por medio de los métodos de Cardan y de Ferrari en los números complejos, \mathbb{C} . Por tanto, $O(l, G) = \{(x, y) | x > 0, y = \sqrt{r(x, G, l)}, r(x, G, l) \geq 0\}$. ■

Observación 2.2: La construcción de las raíces no se hace por medio de software matemático, sino por medio de un editor de textos, buscando y reemplazando los parámetros de las fórmulas de los métodos de Cardan y de Ferrari con los respectivos coeficientes de los polinomios de (2) y (3).

Proposición 2: Para el sistema de partículas de la proposición anterior, cuando $l = 1$, se tiene

1. $m_1 = -3$.
2. $O(1, -3) = \{(0, \frac{\sqrt{3}}{2})\}$, i.e., corresponde a un punto la raíz de cuarto grado de la ecuación para $G_1 = -3$.

3. Se tienen dos órbitas de las raíces de la ecuación de cuarto grado con $G_1 \in [m, -1)$.
4. Se tiene una órbita de las raíces de la ecuación de cuarto grado con $G_1 \in (-1, \infty)$.

Demostración 2.3: El resultado se obtiene por sustitución directa de $l = 1$ en las expresiones de las raíces de la proposición anterior. ■

Observación 2.4: Para $l = 1$, la figura 3 algunas órbitas verdaderas: $O(1, -3)$, $O(1, -2, 75)$, $O(1, -2, 43755)$, $O(1, -2)$, $O(1, -1)$, $O(1, 0)$ y $O(1, 100)$. Se tiene que la partícula libre y las otras dos forman un triángulo equilátero de longitud de lado 1 y el potencial mínimo correspondiente es $B_2(0, \frac{\sqrt{3}}{2}) = -3 = m_1$. Se tiene una sola órbita de las raíces de la ecuación de tercer grado con $G_1 = -1$. Más detalles se dan en la sección IV.

Además, se tiene el siguiente resultado:

Proposición 3: Los polinomios $Ax^{2k} + Bx^k + C$, $Ax^{3k} + Bx^{2k} + Cx^k + D$ y $Ax^{4k} + Bx^{3k} + Cx^{2k} + Dx^k + E$ $k > 1$ son solubles por radicales.

Demostración 2.5: Es inmediato, con el cambio de variable $u = x^k$. ■

III. RESOLUCIÓN DE POLINOMIOS POR RADICALES

La Teoría de Galois es el marco algebraico para el estudio de las raíces de polinomios. Ésta no se aboca a la estimación numérica de las raíces sino a la construcción de fórmulas para calcularlas por medio de radicales. Para su estimación numérica se tiene por ejemplo el conocido método de Newton–Raphson. Más aún, la Teoría de Galois trata de la estructura y características de los grupos de polinomios que pueden ser resueltos por formulas usando radicales. En este trabajo, aplicamos métodos conocidos para la resolución de polinomios que son solubles por radicales, i.e., para polinomios con coeficientes en \mathbb{R} de grado a lo mas cuatro, cuyas raíces se obtienen de formulas que involucran sus coeficientes, operaciones aritméticas y radicales. Esto no se puede generalizar, ya que se sabe que no hay un método general o formulas que permita encontrar las raíces de polinomios de grado $n \geq 5$.

Los Babilonios en 1600 AC resolvían el polinomio cuadrático completando sus cuadrados, i.e., $f(x) = (x + p)^2 + q - p^2$, sus raíces son $-p \pm \sqrt{p^2 - q}$.

El polinomio cúbico $f(x) = x^3 + ax^2 + bx + c$, fue resuelto en el Siglo XVI por una fórmula más complicada, que encontraron simultáneamente Ferro y Tartaglia. Para el polinomio de cuarto grado $f(x) = x^4 + ax^3 + bx^2 + cx + d$, Ferrari dio un procedimiento. Estos métodos fueron publicados por Cardano en el *Ars Magna* en 1545. En el siglo XVIII, Lagrange unificó estos métodos para polinomios con grado $n \leq 4$ con lo que ahora se conoce como el resolvente de Lagrange.

Galois en 1832 mostró cómo asociar a cada polinomio $f(x)$ un subgrupo ($Gal(f)$) del grupo simétrico, llamado el grupo de Galois de $f(x)$, y estableció el siguiente resultado, para más detalles, véase por ejemplo (Rotman, 1998).

Theorem 3.1: (Galois) Un polinomio f es resoluble por radicales sí y solo si su grupo $Gal(f)$ es soluble.

Como una aplicación de estas técnicas algebraicas tenemos el siguiente resultado.

Proposición 4: Dado un sistema de tres partículas, dos fijas y una libre, donde $p_1 = (-\frac{l}{2}, 0, 0)$ y $p_2 = (\frac{l}{2}, 0, 0)$ están a una distancia $l > 0$. Entonces los puntos críticos de $B_2(x, y)$ son los siguientes:

1. $(0, 0) \forall l \geq 0$.
2. $(\pm x^*, 0)$, x^* es una raíz positiva del polinomio obtenido de sustituir $y = 0$ en $\frac{\partial}{\partial x} B_2(x, y)$ con $l > 2$. Los puntos $(\pm x^*, 0)$ son colineales con p_1 y p_2 .
3. $(0, \pm y^*)$ donde y^* es una raíz positiva del polinomio obtenido de sustituir $x = 0$ en $\frac{\partial}{\partial y} B_2(x, y)$. Los puntos $(0, \pm y^*)$ corresponden al vértice opuesto de un triángulo isósceles con un lado formado por los vértices p_1 y p_2 .

Demostración 3.2: Los polinomios a resolver se obtienen de la primera condición de optimalidad: $\frac{\partial}{\partial x} B_2(x, y) = 0$ y $\frac{\partial}{\partial y} B_2(x, y) = 0$, donde

$$\frac{\partial}{\partial x} B_2(x, y) = -4 \frac{(x \pm \frac{l}{2})}{((x \pm \frac{l}{2})^2 + y^2)^3} + \frac{4(x \pm \frac{l}{2})}{((x \pm \frac{l}{2})^2 + y^2)^2}$$

y

$$\frac{\partial}{\partial y} B_2(x, y) = -4 \frac{y}{((x \pm \frac{l}{2})^2 + y^2)^3} + \frac{4y}{((x \pm \frac{l}{2})^2 + y^2)^2}.$$

De las ecuaciones anteriores se tiene que $\nabla B_2(0, 0) = 0$, para $l > 0$.

Usando $y = 0$ se tiene que $\frac{\partial}{\partial y} B_2(x, 0) = 0$. Con $x = u^2$, la ecuación anterior es $\frac{\partial}{\partial x} B_2(u^2, 0) = 0$ y se obtiene

$$-64u^3 + (64 - 16l^2)u^2 + (20l^4 + 160l^2)u + (20l^4 - 3l^6) = 0. \quad (4)$$

Las raíces positivas de (4) son puntos críticos.

En forma similar, con $x = 0$ se obtiene $\frac{\partial}{\partial x} B_2(0, y) = 0$ y con $y = u^2$ se tiene $\frac{\partial}{\partial x} B_2(0, u^2) = 0$ de donde resulta:

$$4u^2 + l^2 - 4 = 0. \quad (5)$$

Las raíces reales de la ecuación de segundo grado anterior son puntos críticos cuando $l \in [2, 0)$, donde el intervalo de restricción de l es para que el discriminante de (5) sea positivo. ■

Las siguientes secciones resumen los métodos de solubilidad de polinomios por radicales en que se basan nuestros resultados.

Para la ecuación de grado 2, $Ax^2 + Bx + C = 0$ con $A \neq 0$, sus raíces son $x_1 = (-B + \sqrt{B^2 - 4AC})(2A)^{-1}$ y $x_2 = (-B - \sqrt{B^2 - 4AC})(2A)^{-1}$. Es inmediato verificar que son sus raíces, ya que $(x - x_1)(x - x_2) = x^2 + (-x_1 - x_2)x + x_1x_2$. Y se tiene que $(-x_1 - x_2) = BA^{-1}$ y $x_1x_2 = CA^{-1}$.

Por ejemplo, para (5) las raíces son $y_1 = \frac{1}{2}\sqrt{2^2 - l^2}$ y $y_2 = -\frac{1}{2}\sqrt{2^2 - l^2}$, con la restricción $2^2 - l^2 > 0$, o sea, $l \in (0, 2]$.

Para el polinomio cúbico $x^3 + ax^2 + bx + c = 0$, se elimina el término cuadrático reescribiendo $x = y - \frac{a}{3}$, para obtener $y^3 + py + q = 0$, donde $p = b - \frac{a^2}{3}$ y $q = c - \frac{ba}{3} + \frac{2a^3}{27}$.

Introduciendo nuevas variables u y v tal que $y = u + v$ y $3uv = -p$ se obtiene $u^3 + v^3 = -q$. Entonces se tiene que u^3 y v^3 son las raíces de $(t - u^3)(t - v^3) = 0$, que es equivalente a $t^2 + qt - \frac{p^3}{27} = 0$. Para estas ecuaciones las raíces son

$$A, B = \frac{-q}{2} \pm \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{4p^3}{27}}.$$

Haciendo $u^3 = A$ y $v^3 = B$ se extraen las raíces cúbicas para obtener $u = \sqrt[3]{A}$, $\omega \sqrt[3]{A}$, $\omega^2 \sqrt[3]{A}$ donde $1, \omega, \omega^2$ son las raíces cúbicas de la unidad. Seleccionamos $\sqrt[3]{B}$ de forma que $\sqrt[3]{A}\sqrt[3]{B} = uv = -\frac{p}{3}$ para obtener la siguiente solución para y

$$\begin{aligned} y_1 &= \sqrt[3]{A} + \sqrt[3]{B} \\ y_2 &= \omega \sqrt[3]{A} + \omega^2 \sqrt[3]{B} \\ y_3 &= \omega^2 \sqrt[3]{A} + \omega \sqrt[3]{B} \end{aligned}$$

Finalmente, con $x_i = y_i - \frac{a}{3}$ se encuentran las soluciones correspondientes x_1, x_2 y x_3 .

La ecuación cúbica general $Ax^3 + Bx^2 + Cx + D = 0$, $A \neq 0$ se transforma en $x^3 + a_1x^2 + a_2x + a_3 = 0$ con $a_1 = BA^{-1}$, $a_2 = CA^{-1}$, y $a_3 = DA^{-1}$, las expresiones anteriores se aplican.

Por ejemplo, para (4), se tiene $-64u^3 + (64 - 16l^2)u^2 + (20l^4 + 160l^2)u + (20l^4 - 3l^6) = 0$. Los coeficientes para las formulas de Cardan son $A = -64$, $B = (64 - 16l^2)$, $C = (20l^4 + 160l^2)$, y $D = (20l^4 - 3l^6)$.

La primera raíz $x_1(l) = \frac{((-\frac{1}{2}(\frac{2}{27}(((64 - 16l^2))(-64)^{-1})^3 - \frac{1}{3}(((64 - 16l^2))(-64)^{-1})((20l^4 + 160l^2))(-64)^{-1}) + \frac{1}{27}(((20l^4 + 160l^2))(-64)^{-1}) - \frac{1}{3}(((64 - 16l^2))(-64)^{-1})^2)^3 + \frac{1}{4}(\frac{2}{27}(((64 - 16l^2))(-64)^{-1})^3 - \frac{1}{3}(((64 - 16l^2))(-64)^{-1})((20l^4 + 160l^2))(-64)^{-1}) + \frac{1}{3}(((20l^4 - 3l^6))(-64)^{-1})^{\frac{1}{2}})^{\frac{1}{3}} + ((-\frac{1}{2}(\frac{2}{27}(((64 - 16l^2))(-64)^{-1})^3 - \frac{1}{3}(((64 - 16l^2))(-64)^{-1})((20l^4 + 160l^2))(-64)^{-1}) + \frac{1}{27}(((20l^4 + 160l^2))(-64)^{-1}) - \frac{1}{3}(((64 - 16l^2))(-64)^{-1})^2)^3 + \frac{1}{4}(\frac{2}{27}(((64 - 16l^2))(-64)^{-1})^3 - \frac{1}{3}(((64 - 16l^2))(-64)^{-1})((20l^4 + 160l^2))(-64)^{-1}) + \frac{1}{3}(((20l^4 - 3l^6))(-64)^{-1})^{\frac{1}{2}})^{\frac{1}{3}} - \frac{1}{3}(((64 - 16l^2))(-64)^{-1})$.

Por ejemplo, para (2) se tiene $1024u^3 + (3072x^2 + 256)u^2 + (3072x^4 - 512x^2 - 64)u + 1024x^6 - 768x^4 - 832x^2 - 16 = 0$ y se tiene $B_2(x, \sqrt{r(x, -1, l)}) = -1$.

Para la ecuación de grado 4, $x^4 + ax^3 + bx^2 + cx + d = 0$, se elimina el término cuadrático con $x = y - \frac{a}{4}$, para obtener $y^4 + py^2 + qy + r = 0$, donde $p = b - \frac{3a^2}{2}$, $q = c + \frac{a^3 - ba}{2}$, y $r = d - \frac{3a^4 + 64ac}{256}$. Con la ecuación $y^4 + py^2 = -qy - r$ y sumando $py^2 + p^2$ en ambos lados, se obtiene $(y^2 + p)^2 = -qy - r + py^2 + p^2$. Ahora, se introduce una nueva variable para completar el cuadrado $(y^2 + p + z)^2 = (p + 2z)y^2 - qy + (p^2 - r + 2pz + z^2)$, se tiene que el lado derecho es un cuadrado perfecto en y si y solo si z satisface $q^2 = 8z^3 + 20pz^2 + (16p^2 - 8r)z + (4p^3 - 4pr)$, que es una ecuación cúbica que puede ser resuelta por el método de Cardan.

La ecuación de cuarto grado general $Ax^4 + Bx^3 + Cx^2 + Dx + E = 0$, $A \neq 0$, se transforma en $x^4 + \frac{B}{A}x^3 + \frac{C}{A}x^2 + \frac{D}{A}x + \frac{E}{A} = 0$. Las formulas de Ferrari son:

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{3B^2}{8A^2} + \frac{C}{A} \\ \beta &= \frac{B^3}{8A^3} - \frac{BC}{2A^2} + \frac{D}{A} \\ \gamma &= -\frac{3B^4}{256A^4} + \frac{CB^2}{16A^3} - \frac{BD}{4A^2} + \frac{E}{A} \\ P &= -\frac{\alpha^2}{12} - \gamma \\ Q &= -\frac{\alpha^3}{108} + \frac{\alpha\gamma}{3} - \frac{\beta^2}{8} \\ R &= -\frac{Q}{2} + \sqrt{\frac{Q^2}{4} + \frac{P^3}{27}} \\ U &= \sqrt[3]{R}, \quad y = -\frac{5}{6}\alpha + U - \frac{P}{3U}, \quad y \\ W &= (\alpha + 2y)^{\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

las raíces están dadas por

$$\begin{aligned} x_1 &= -\frac{B}{4A} + \frac{W - \sqrt{-(3\alpha + 2y + \frac{2\beta}{W})}}{2} \\ x_2 &= -\frac{B}{4A} + \frac{W + \sqrt{-(3\alpha + 2y + \frac{2\beta}{W})}}{2} \\ x_3 &= -\frac{B}{4A} + \frac{-W - \sqrt{-(3\alpha + 2y - \frac{2\beta}{W})}}{2} \\ x_4 &= -\frac{B}{4A} + \frac{-W + \sqrt{-(3\alpha + 2y - \frac{2\beta}{W})}}{2}. \end{aligned}$$

Por ejemplo, para (3), las formulas resultantes de las cuatro raíces tienen una extensión de cuatro páginas cada una. Dichas fórmulas son sintácticamente correctas y fueron evaluadas para el cálculo de las órbitas por el software simbólico matemático, MAPLE™. Esto no es eficiente si se compara con un programa ejecutable numérico, sin embargo las órbitas exactas se visualizan en pocos minutos.

La siguiente sección muestra los resultados para las órbitas de la proposición 1.

IV. CONJUNTOS DE NIVEL DE B_2

La configuración de las partículas fijas corresponde a $l = 1$. Para $G = -1,9305$, la figura 1 muestra con puntos una estimación numérica de la órbita $O(1, -1,9305)$. La figura 2 ilustra que los correspondientes valores de potencial de la estimación numérica no son constantes, la gráfica debería ser una línea constante en $G = -1,9305$.

La Proposición 4 da resultados similares para B_2 en lugar de LJ(6-12) para las coreografías triangulares y colineales del problema de 3-cuerpos estudiado en (Corbera

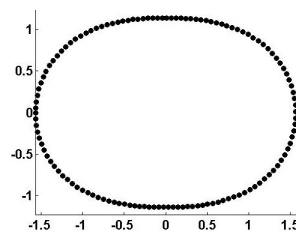


Figura 1. Estimación numérica de $O(1, -1,9305)$

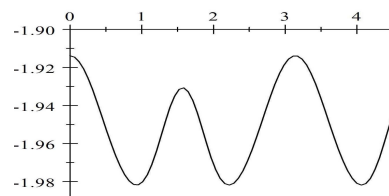


Figura 2. Potencial de la estimación numérica de $O(1, -1,9305)$

et al., 2004). Nótese que nuestro enfoque se realiza mediante un análisis básico y técnicas algebraicas para el caso estático.

La proposición siguiente muestra un comportamiento asintótico interesante sobre las configuraciones de triángulos isósceles.

Proposición 5: Dado el sistema de la proposición 4 con $l \in (2, 0)$. Si la partícula libre está en $(0, y)$, donde $y = \pm \frac{1}{2}\sqrt{2^2 - l^2}$. Entonces la partícula libre está en un punto mínimo local. Más aún, desde el punto de vista de la partícula libre, las otras dos partículas actúan como una partícula virtual de doble efecto de potencial B cuando $l \rightarrow 0$.

Demostración 4.1: Sin pérdida de generalidad, sea $y_1 = \frac{1}{2}\sqrt{2^2 - l^2}$. La partícula está en una posición perpendicular sobre el punto medio del lado formado por los vértices p_1 y p_2 . El resultado se obtiene inmediatamente de la proposición 4 y de (5), que corresponde a la primera condición de optimalidad $\nabla B_2(0, y_1) = 0$. Nótese que la partícula libre tiende a $(0, 2)$ cuando $l \rightarrow 0$, que es el doble de la distancia óptima ($d^* = 1$) de B . ■

Proposición 6: Dado el sistema de la proposición 4 con $l = 1$. Entonces los puntos mínimos de la partícula libre caen en $(0, y)$, donde $y = \pm \frac{\sqrt{3}}{2}$ y las tres partículas forman un triángulo equilátero de lado 1.

Demostración 4.2: Sin pérdida de generalidad, sea $y_1 = \frac{1}{2}\sqrt{3}$, se tiene que la distancia entre las tres partículas es 1. El determinante de la matriz Hessiana del sistema en $(0, y_1)$ es

$$\left| \nabla^2 B_2\left(0, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \right| = -64(-3).$$

La optimalidad se tiene de la proposición 4 y de que $|\nabla^2 B_2(0, y_1)| > 0$. ■

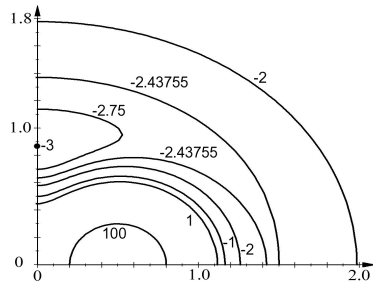


Figura 3. Ejemplos de órbitas verdaderas

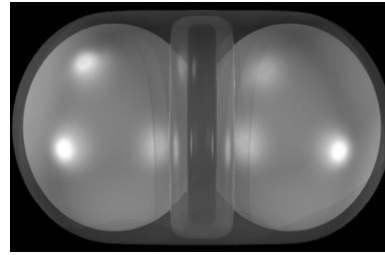


Figura 4. Modelo 3D de $O(1, G)$ con $G \in [-3, \infty)$

Proposición 7: Dado el sistema de la proposición 4 con $l \in (2, 0)$. Entonces la órbita de valor $G_y = B_2(0, y)$ es el conjunto de un punto $O(l, G_y) = \{(0, y) \in \mathbb{R}^{+2}\}$ donde $y = \frac{1}{2}\sqrt{2^2 - l^2}$.

Demostración 4.3: Por la simetría el espacio se puede restringir a \mathbb{R}^{+2} . El determinante de la matriz Hessiana del sistema en $(0, y)$ es

$$\left| \nabla^2 B_2(0, \frac{1}{2}\sqrt{2^2 - l^2}) \right| = -64l^2 (l^2 - 4).$$

El polinomio $-64l^2 (l^2 - 4)$ es estrictamente positivo para $l \in (0, 2)$. Por tanto la raíz positiva de (5) corresponde a las condiciones de optimalidad $\nabla B_2(0, y) = 0$ y $|\nabla^2 B_2(0, y)| > 0$. Por tanto, $O(l, G_y)$ consiste del punto mínimo $(0, y)$. ■

Para $G = -3$ las cuatro raíces de la ecuación de cuarto grado (3) con $l = 1$ son

$$\begin{aligned} r_1(x) &= \frac{1}{4} - x^2 - \frac{1}{2}\sqrt{4x^2 - 4ix + 1} \\ r_2(x) &= \frac{1}{2}\sqrt{4x^2 - 4ix + 1} - x^2 + \frac{1}{4} \\ r_3(x) &= \frac{1}{4} - x^2 - \frac{1}{2}\sqrt{4x^2 + 4ix + 1} \\ r_4(x) &= \frac{1}{2}\sqrt{4x^2 + 4ix + 1} - x^2 + \frac{1}{4}. \end{aligned}$$

Solamente para $x = 0$, se tiene que $r_2(0) = \frac{3}{4} > 0$. Por tanto, la órbita de $O(1, -3)$ es el punto $\{(0, \sqrt{\frac{3}{4}})\}$, el cual corresponde a la configuración óptima que forma un triángulo equilátero de lado de tamaño 1. Note que nuestro método algebraico (proposición 1) da el mismo resultado sin usar las condiciones de optimalidad, a diferencia de la proposición 6 y de la proposición 7.

La figura 3 muestra algunas de las órbitas que corresponden con las afirmaciones de la proposición 1 con $l = 1$ y la figura 4 muestra un modelo en 3D del PES para B_2 con $l = 1$ y $G \in [-3, \infty)$.

V. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

Hasta donde conocemos de la literatura, este es la primera descripción total y completa de los conjuntos de nivel del sistema de tres partículas, dos fijas y una libre bajo el potencial de Van der Waals B . Consideramos que la aplicación de los resultados de la investigación sobre polinomios solubles por radicales es prometedora (Ward-Smith, 1999).

Presentamos un nuevo enfoque algebraico para la determinación y el estudio de las órbitas de sistemas de partículas

no interactivas que reduce el análisis de las zonas de potencial a la de encontrar las raíces de ciertos polinomios. La estructura de estos polinomios nos permitió el uso de métodos algebraicos sobre la base de la solubilidad de polinomios de grado no mayor a 4. Nuestro método es constructivo para obtener funciones explícitas de $B_2(x, \sqrt{r(x, G, l)})$. Tales funciones se obtienen de los métodos de Cardano y Ferrari y permiten analizar completamente las zonas de equipotencial. Comparamos nuestros resultados con rutinas estándar de estimación numérica de curvas de nivel del software numérico MATLAB™. Consideramos que el estudio de las órbitas proporciona un buen conocimiento para que en el futuro enfrentemos los problemas de control óptimo, como el de la planificación de la ruta óptima, de la navegación libre de colisiones y de la formación de cristales.

REFERENCIAS

- Ashhab, M., M. V. Salapaka, M. Dahleh y I. Mezić (1999). Melnikov-based dynamical analysis of microcantilevers in scanning probe microscopy. *Nonlinear Dynam.* **20**(3), 197–220.
- Bonnard, B., J.-B. Caillaud y G. Picot (2010). Geometric and numerical techniques in optimal control of two and three-body problems. *Commun. Inf. Syst.* **10**(4), 239–278.
- Corbera, Montserrat, Jaume Llibre y Ernesto Pérez-Chavela (2004). Equilibrium points and central configurations for the Lennard-Jones 2- and 3-body problems. *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy* **89**, 235–266.
- Maranas, Costas D. y Christodoulos A. Floudas (1994). Global minimum Potential Energy Conformations of Small Molecules. *Journal of Global Optimization* **4**(2), 135–170.
- Mielke, Alexander (2002). Finite elastoplasticity Lie groups and geodesics on $SL(d)$. En: *Geometry, mechanics, and dynamics*. pp. 61–90. Springer. New York.
- Mittenhuber, D. (2002). The dissipation distance for a 2D single crystal with two symmetric slip systems. *ArXiv Mathematics e-prints*.
- Romero, David, Carlos Barrón y Susana Gómez (1999). The optimal geometry of Lennard-Jones clusters: 148-309. *Computer Physics Communications* **123**, 87–96.
- Rotman, J. (1998). *Galois Theory*. Springer-Verlag, NY.
- Solov'yov, Ilia A., Andrey V. Solov'yov y Walter Greiner (June, 2003). Fusion process of Lennard-Jones clusters: global minima and magic numbers formation. *ArXiv Physics e-prints*.
- Ward-Smith, G. (1999). Some polynomials over $\mathbb{Q}(t)$ and their Galois Groups. *Mathematics of Computation* **69**(230), 775–796.
- Wolf, M.D. y U. Landman (1998). Genetic Algorithms for Structural Cluster Optimization. *Journal of Physical Chemistry A* **102**(30), 6129–6137.
- Xiang, Yuhong, Haiyan Jiang, Wensheng Cai y Xueguang Shao (2004). An Efficient Method Based on Lattice Construction and the Genetic Algorithm for Optimization of Large Lennard-Jones Clusters. *Journal of Physical Chemistry A* **108**(16), 3586–92.