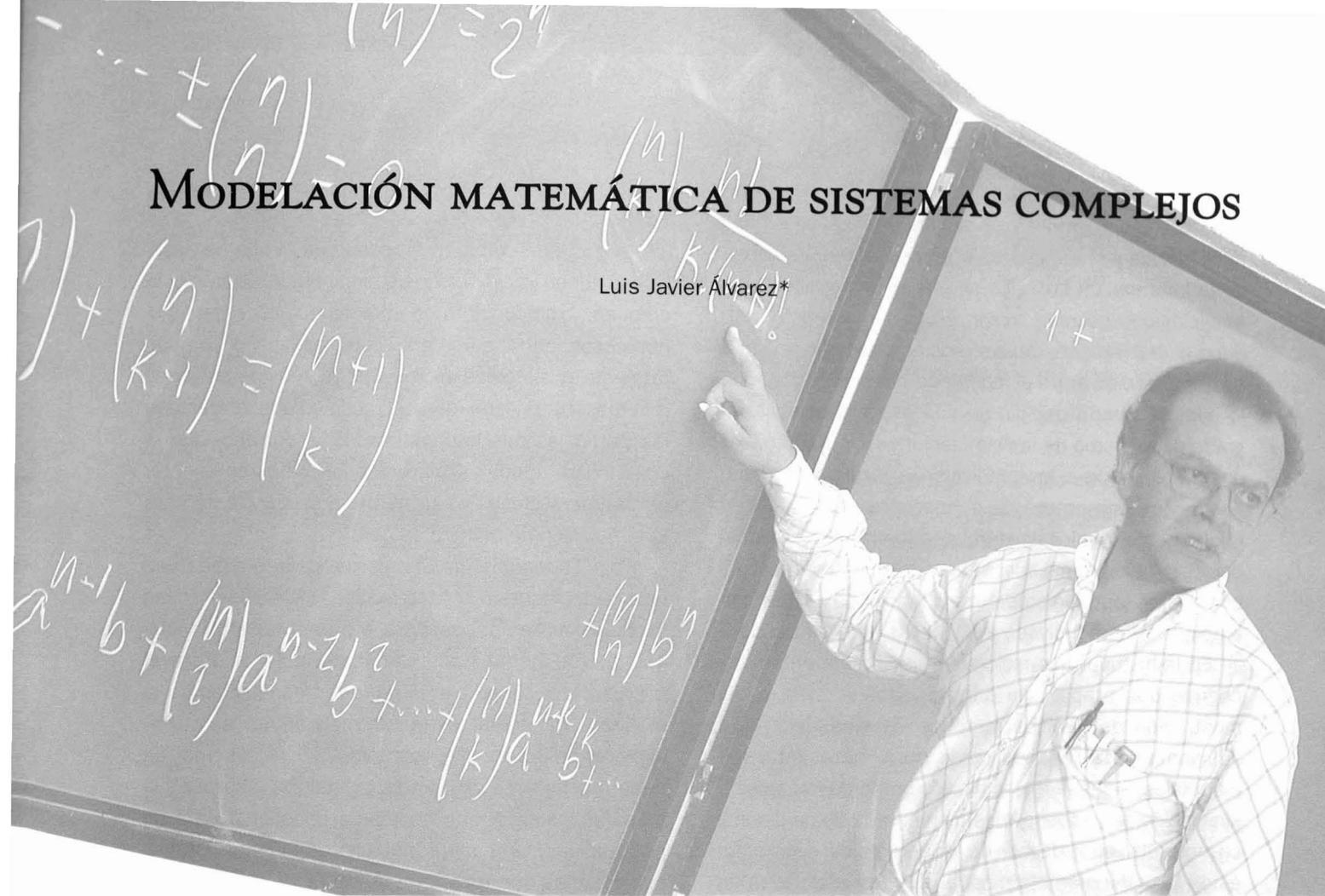


MODELACIÓN MATEMÁTICA DE SISTEMAS COMPLEJOS

Luis Javier Álvarez*



Con el advenimiento de las grandes computadoras digitales, en la segunda mitad del siglo xx ha surgido una nueva manera de hacer investigación vía la simulación numérica. Ésta constituye una manera de hacer investigación paralela a la experimentación y al desarrollo de teorías con valor de acuerdo con los fundamentos y métodos del conocimiento científico. Uno de los grandes problemas de la simulación numérica, en general, es la representación de problemas reales mediante modelos suficientemente exactos como para ser computables, es decir, para introducirlos como un sistema de cálculo en una computadora. En la ciencia de materiales hay una serie de características o comportamientos que no es posible estudiar mediante experimentos y que para las teorías físicas y químicas es imposible predecir o explicar su naturaleza. La simulación se ha utilizado desde la década de los cuarenta del siglo pasado, para explorar

esos aspectos de los materiales que no son posibles de abordar de otra manera.

Poco después de la Segunda Guerra Mundial los constructores de armas nucleares idearon una manera de investigar sobre problemas muy difíciles para la teoría y demasiado lejanos de los materiales y de las técnicas experimentales. Inventaron el método de Monte Carlo para simular procesos estocásticos que resultan demasiado complejos como para resolverlos analíticamente. Éste y otros métodos de simulación, como la dinámica molecular y los métodos de la química cuántica, se han constituido, con el tiempo, en maneras de “experimentar” sobre una realidad alternativa. Frecuentemente, aunque los cálculos numéricos no representen ciento por ciento a los sistemas reales, se puede aprender de los experimentos numéricos. Sin embargo, con la existencia de computadoras más rápidas y con mayor capacidad de almacenamiento de información, la metáfora que constituye la simulación se puede perfeccionar para acceder a la simulación realista de sistemas complejos.

* Investigador del Instituto de Matemáticas de la UNAM, Unidad Cuernavaca

El establecimiento de nuevas formas de representación de los materiales y sistemas biológicos en química teórica y el establecimiento de representaciones de la información cuántica en formalismos clásicos o semiclásicos permite trazar, de una manera formal, aunque dependiente del sistema bajo estudio, la línea de demarcación entre el modelado y la simulación, con lo cual se puede decidir, de una manera objetiva, el grado de realismo de las simulaciones y, por tanto, dar sustento teórico a las predicciones surgidas de este tipo de "experimentos". En consecuencia, también, se puede conferir valor epistémico a los resultados inesperados de las simulaciones, con lo cual se deja atrás el carácter tautológico del modelado y se validan las propiedades predictivas y explicativas de la simulación.

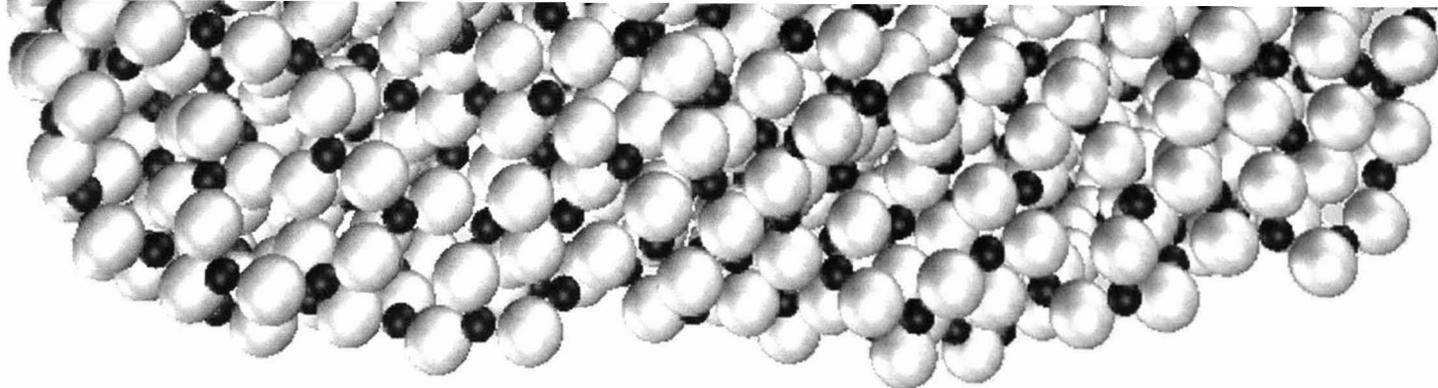
En la historia más reciente de la simulación se distinguen dos etapas. La primera consistió en la demostración de que los métodos de simulación son suficientemente buenos como para representar los materiales reales. Por ejemplo, los primeros trabajos de simulación de gases ideales, con el método de dinámica molecular, en la década de los setenta del siglo xx. En éstos la pretensión era mostrar que las cualidades de los sistemas reales se podían reproducir con gran exactitud mediante la simulación. No fue hasta principios de la década de los noventa que se comenzaron a simular materiales y sistemas biológicos realísticamente gracias a los avances en las metodologías de representación en mecánica cuántica y de simulación de dinámica molecular y Monte Carlo, lo cual constituyó la segunda etapa. Es precisamente esta nueva capacidad la que permite aplicar los métodos de la química teórica y de la simulación a problemas de interés no solamente desde el punto de vista de la ciencia básica, sino también con impacto económico.

A partir de simulaciones de sistemas de partículas que representan átomos, iones o moléculas, se encuentran propiedades estadísticas del sistema y se pueden conocer, entonces, las causas de que estas propiedades existan. Por ejemplo, a partir de la estadística de las velocidades de las moléculas de agua en un recipiente se puede saber su temperatura, o a partir de las posiciones promedio de los átomos de un material dado se puede conocer cuál sería su respuesta en experimentos de difracción de rayos X.

En el mundo microscópico las interacciones entre átomos, iones o moléculas no son tan sencillas como las que se presentan en el mundo en el que se desarrollan nuestras actividades cotidianas. Por ejemplo, la creación y rompimiento de enlaces químicos, en algunos casos, entraña una gran complejidad y el comportamiento de sistemas microscópicos y sus propiedades macroscópicas dependen del modo en que interactúan las partículas que lo constituyen. Es por esto que la creación de modelos matemáticos para representar estas interacciones es un tema muy importante para la simulación de materiales.

En el Laboratorio de Simulación de la Unidad Cuernavaca del Instituto de Matemáticas (LS) se desarrollan modelos matemáticos para representar interacciones átomo-átomo y simular materiales en el nivel microscópico. El problema de la representación de la realidad, en general, es que la realidad que se quiere explorar no se conoce; por tanto, su representación tiene que lograrse de manera indirecta o a partir de lo más fundamental que se puede conocer acerca de esa realidad. La manera indirecta es intentar establecer modelos que reproduzcan los fenómenos que se observan, es decir, mediante un método descriptivo, llamado fenomenológico. La mejor aproximación en la representación de fenómenos fisicoquímicos en el nivel microscópico consiste en utilizar la información de "primeros principios" que da la química cuántica para establecer los modelos de interacción átomo-átomo; sin embargo, los modelos matemáticos que se pueden establecer no siempre incluyen en su totalidad la complejidad de las interacciones. Además de los métodos tradicionales de parametrizar funciones analíticas a partir de cálculos de "primeros principios" para representar las interacciones de dos o tres cuerpos o de utilizar potenciales numéricos, en el LS se trabaja en la adaptación al cálculo clásico del método de interpolación de elemento finito para resolver de manera local y altamente eficiente las ecuaciones de la química cuántica.

Dos de las más sorprendentes características de la simulación numérica de materiales es la existencia de propiedades emergentes y el surgimiento de resultados inesperados. Las propiedades emergentes son propiedades que surgen espontáneamente como resultado



Resultado de la simulación por dinámica molecular de una partícula de $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ formada por 11520 átomos. El tamaño simulado es el tamaño real del sistema.

de fenómenos colectivos y los resultados inesperados tienen la misma naturaleza que sus correspondientes en el laboratorio.

La simulación en fisicoquímica se lleva a cabo básicamente con los métodos de dinámica molecular y Monte Carlo. En el primero se integran numéricamente, y en función del tiempo, las $3N$ ecuaciones diferenciales de segundo orden que constituyen las ecuaciones clásicas del movimiento de las N partículas que componen el sistema y se obtienen sus posiciones y velocidades $\{r(t), v(t)\}$. Esto constituye la historia del estado dinámico del sistema y a partir de él se pueden calcular una serie de propiedades como promedios estadísticos en el tiempo que tienen sus contrapartes experimentales. Así, se pueden determinar propiedades de sistemas bajo condiciones termodinámicas extremas que no se pueden establecer en el laboratorio experimental y predecir su existencia y explicar su naturaleza; se pueden “observar” fenómenos en escalas de tiempo y tamaño que no son asequibles experimentalmente. En el método de Monte Carlo se “muestra” al azar un conjunto restringido de estados del sistema en equilibrio termodinámico y se obtienen promedios sobre estados equivalentes para obtener esencialmente las mismas propiedades estadísticas que se obtienen mediante el método de dinámica molecular.

Para aclarar estas ideas se puede pensar en que el método de dinámica molecular es equivalente a tener los cuadros de una película del sistema y los promedios se hacen en función del tiempo. En cambio, en el método de Monte Carlo se eligen cuadros de la película al azar y se hacen promedios sobre los cuadros elegidos.

Para probar y aplicar las metodologías que se desarrollan en el LS se han estudiado materiales que sirven como catalizadores o soportes de catalizadores y adsorbentes basados en compuestos de óxido de silicio,

como son las zeolitas, y óxido de aluminio, como las alúminas, con el objeto de entender mejor cuáles son los mecanismos de adsorción, desorción y catálisis. Estos mecanismos dependen de la localización y abundancia de los llamados sitios ácidos que son los responsables de una serie de procesos tales como el soporte de fármacos, el rompimiento de moléculas de hidrocarburos y la oxidación de productos residuales de procesos de combustión.

Un ejemplo de los resultados obtenidos a partir de simulaciones numéricas es la explicación de la estructura y composición de los espectros experimentales de resonancia magnética nuclear de ^{29}Si de compuestos cristalinos de dióxido de silicio. Estos resultados se han obtenido haciendo simulaciones en las que las cargas eléctricas que portan los átomos de oxígeno se obtienen como resultado de la simulación. Las distribuciones de cargas representan el entorno electrónico de los átomos de silicio que determina su desplazamiento químico. Los resultados experimentales no permitían discernir entre diferentes entornos de los átomos de silicio y con estas simulaciones se han podido establecer claramente.

Para llevar a cabo este tipo de simulaciones son necesarios, además de los modelos matemáticos adecuados, grandes recursos de cómputo, tales como los que ofrece una supercomputadora paralela, pues se necesitan resolver decenas o cientos de miles de ecuaciones diferenciales, para lo cual, además de grandes cantidades de memoria, es necesario un buen número de procesadores. Los modelos matemáticos determinan los algoritmos de solución y éstos se tienen que programar para utilizar simultáneamente un gran número de procesadores y lograr que los tiempos de cálculo sean razonablemente cortos, es decir, que no excedan tiempos que vayan de días a unas cuantas semanas. ☼