

Simulación computacional: de los algoritmos a los átomos

Daniel Coghlan Cárdenas^{1*}

¹ Facultad de Química, Universidad Autónoma de Querétaro

* Dirección para correspondencia: daniel.coghlan@uaq.mx

Cuando se habla de simulación computacional, nuestra imaginación suele llevarnos de paseo por el concepto que la televisión y el cine nos presentan. Vemos a un personaje sacar su computadora portátil, o entrar en un centro de datos, y en cuestión de segundos escribir comandos que ejecutan una serie de cálculos que resultan en un pronóstico de algún material, molécula, microorganismo u otra herramienta de la trama; está de más decir que se trata de una simplificación del proceso real, ya que el tiempo en pantalla no puede demorar lo que le lleva a dicho algoritmo ejecutar un cálculo así en la vida real y no es tan sencillo como abrir la terminal y escribir comandos.

Desde hace años, la tecnología es capaz de realizar cálculos complejos en cuestión de segundos; ejemplo de ello son los motores de física en los videojuegos que, en tiempo real, trazan trayectorias de proyectiles, calculan daños de colisiones, tensión de estructuras, e incluso generan entornos y mapas (Zhengqing e Iskander, 2015). Este tipo de simulación ha sido ampliamente estudiada, y se han encontrado maneras de optimizar los cálculos; las estrategias van desde refinar el uso de memoria y los canales del procesador, hasta el diseño específico de *hardware* que permite acelerar el cómputo (Mihalič *et al.*, 2022). Sin embargo, no todo funciona

así: cada sistema bajo estudio requiere adecuar líneas en el código de programación y no es viable fabricar componentes específicos para cada situación. Retomando el ejemplo anterior, dependiendo del juego, se mueven de cientos a miles de partículas y polígonos que dan esa experiencia de movimiento; puesto en otras palabras: se realizan al instante cálculos para cada elemento que se mueve en pantalla; en lo que un humano piensa el resultado de multiplicar 7 por 8, la máquina ya realizó las operaciones que calculan el movimiento de partículas y polígonos, sin mencionar cálculos secundarios como efectos de daño, interacción con el entorno, sonidos, telemetría, entre muchos otros.

Breve vistazo a la historia

La historia comienza en la década de 1940 en el laboratorio de Los Álamos en Nuevo México, EE.UU.; en ese lugar, un equipo de investigadores tenía la tarea de describir cómo es la difusión de neutrones durante la fisión nuclear. El problema comienza con el evento en sí, ya que sucede en una fracción de segundo a escala atómica liberando una gran cantidad de energía, lo cual imposibilita su observación directa; sin embargo, si se trata al núcleo del átomo como un fluido, considerando fuerzas de cohesión y repulsión, es posible reconstruir el comportamiento de los neutrones en ese lapso utilizando las expresiones matemáticas correspondientes (Hirsh, 2006). Para entonces, la aplicación de los modelos matemáticos conocidos implicaba resolver sistemas demasiado complejos para abordarlos únicamente con

lápiz y papel, pues no admitían una solución analítica. Ante una situación similar, los matemáticos ya habían recurrido a los métodos numéricos; la metodología consiste en diseñar y aplicar algoritmos que permiten solucionar problemas matemáticos utilizando operaciones aritméticas, siendo el principal objetivo encontrar soluciones aproximadas para problemas complejos (Araujo, 2017); para el caso presentado, se requería iniciar definiendo la posición y velocidad de cada átomo; con estas condiciones iniciales, es posible calcular la interacción de cada partícula y posteriormente definir trayectorias. Si bien lo descrito es un método válido, no resultaba del todo viable dada la cantidad colosal de operaciones que debían llevarse a cabo. Aquí entra en escena el cálculo computacional, que dota a los investigadores de una herramienta capaz de resolver este tipo de problemas mediante la programación de algoritmos. Uno de los primeros algoritmos fue el método Monte Carlo, desarrollado por Stanislaw Ulam y John von Neumann alrededor de 1947; consiste en la evaluación de expresiones matemáticas para aproximar con exactitud el resultado esperado; la particularidad de este método se encuentra en la generación de números pseudoaleatorios; la razón de llamarlos así parte del hecho de que una máquina es incapaz de generar esa aleatoriedad, por ello, se programa un algoritmo que evita un patrón estadístico en la generación de dichos números (Seck *et al.*, 2023). Ulam y Neumann partieron del razonamiento de que se puede probar cada escenario posible y analizar los resultados para establecer el escenario más probable contrastado con el resultado esperado. Años más tarde, en 1953, surgió un nuevo algoritmo llamado Metropolis-Hastings; en

primer lugar se tiene la aportación de Nicholas Metropolis; el método guarda parecido con el algoritmo Monte Carlo, con la notable diferencia de que ahora existe un criterio de selección; este se trata de una probabilidad de aceptación: cuando se realiza un cambio en la configuración inicial, si la energía del sistema disminuye, el cambio se acepta; por el contrario, si la energía aumenta, se evalúa la probabilidad de aceptar o rechazar el cambio. El problema con esto es que el criterio de selección es simétrico, es decir, la tasa de aceptación o rechazo de los casos cuando la energía aumenta es similar; bajo este razonamiento, Wilfred Keith Hastings propuso corregir este criterio según sea el sistema estudiado; de esta manera se vuelve más probable la aceptación o rechazo del caso cuando la energía aumenta; en otras palabras, el criterio se vuelve asimétrico (Frenkel, 2002).

Hagamos una simulación de partículas

Pensemos en un sistema hipotético: un reservorio cuadrado con 30 átomos del mismo elemento; queremos conocer cómo es su estructura relajada, es decir, qué posiciones adoptan los átomos al minimizar la energía del sistema (desestimando gradientes de temperatura, presión, gravedad o presencia de otras estructuras). En el reservorio, por simplicidad, a cada átomo le nombraremos partícula; el criterio de selección evalúa la energía del sistema; por su parte, la energía se calculará a través de un potencial de interacción en función únicamente de la distancia entre partículas.

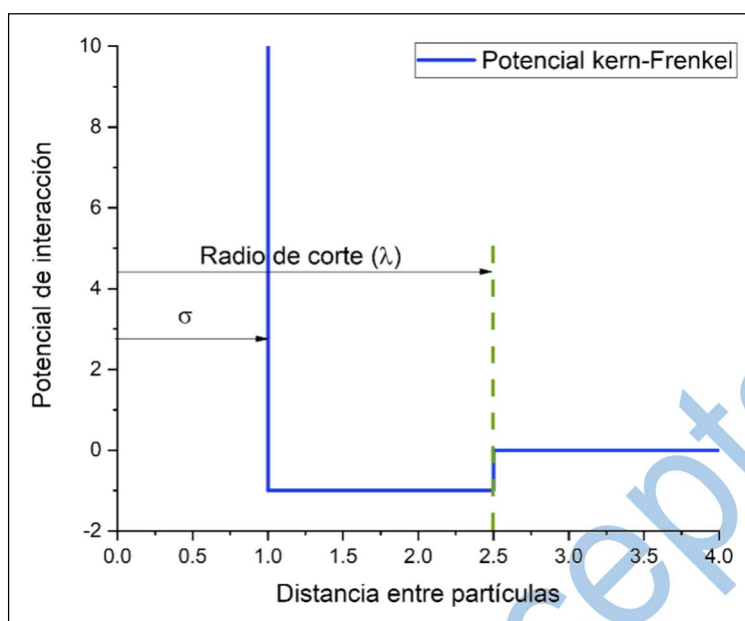


Figura 1. Forma del potencial Kern-Frenkel, también conocido como potencial de pozo. En este, σ es el diámetro de cada partícula y λ el radio de corte, que corresponde a la distancia máxima en que interactúan dos partículas.

Supongamos que el sistema está sometido a un potencial de Kern-Frenkel (Lenhard *et al.*, 2024; Korbelt *et al.*, 2021) (Figura 1) donde, si dos átomos se encuentran a una distancia mayor a λ , el potencial añade un valor de 0 a la energía del sistema; esto responde a que, si dos partículas están lo suficientemente lejanas una de la otra, la fuerza electrostática es lo suficientemente débil para considerarla despreciable; cuando los dos átomos se aproximan entre sí ($\sigma < \text{distancia} \leq \lambda$), aparece una fuerza atractiva, el potencial añade un valor de -1 al sistema, lo que liga a estas dos partículas restringiendo parcialmente su libertad de movimiento; esto simula una fuerza atractiva electrostática, donde la carga parcial de cada partícula hace que se sientan atraídas. Por último, si los átomos se aproximan

demasiado (distancia $\leq \sigma$; dicho de otra forma: las partículas se empalman), el potencial añade un valor grande a la energía del sistema (un valor que tiende a infinito), siendo así una posición rechazada por el sistema (Figura 2); en esta última parte, si dos partículas se aproximan demasiado, la fuerza electrostática provocada por los núcleos ocasiona repulsión; además de ello, cuando se fuerza la proximidad entre dos átomos, sus distribuciones electrónicas comienzan a solaparse.

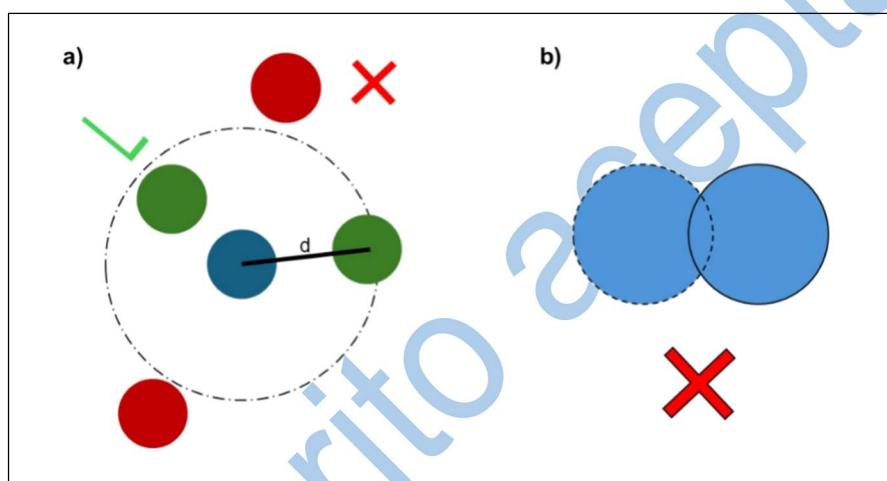


Figura 2. Casos del potencial. a) Partículas dentro del radio de corte (verde) experimentan un potencial de atracción (valor de -1 al sistema); partículas fuera del radio (rojo) se consideran lejanas (valor de 0 al sistema). b) Está prohibido que las partículas se traslapen (valor de ∞ al sistema).

Dado que los electrones son fermiones (una de las dos clases fundamentales de partícula subatómica), deben cumplir el principio de exclusión de Pauli, según el cual dos electrones idénticos no pueden ocupar el mismo estado cuántico. En consecuencia, la función de onda electrónica del sistema debe reorganizarse para respetar este principio, lo que contribuye al aumento de la energía de interacción a distancias muy cortas. Lo primero que hacemos es definir la posición de cada

partícula elemento; esto se realiza generando números aleatorios para cada componente de la posición; posteriormente calculamos la energía inicial del sistema de cada interacción única empleando el potencial; esto es, calcular la distancia entre cada partícula y añadir el valor según el potencial descrito. Es importante eliminar la doble interacción, es decir, la interacción entre la partícula 1 y 2 es la misma que entre 2 y 1 (Figura 3), por lo que es necesario multiplicar por $1/2$; eso implica $n \cdot (n-1) / 2$ interacciones únicas, donde n es el número de partículas (435 en total para el ejercicio).

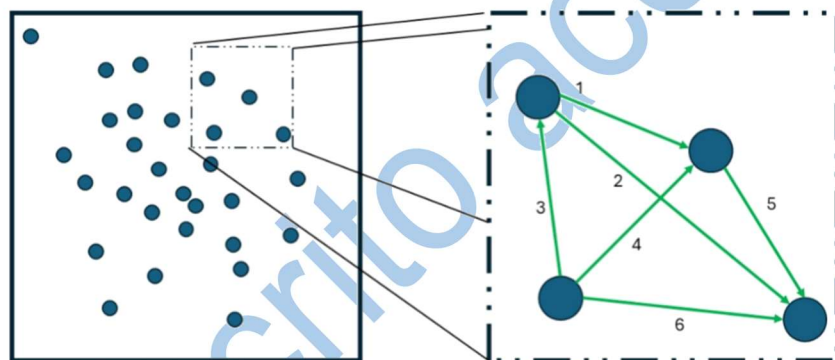


Figura 3. Esquema de un reservorio con partículas. En la imagen aumentada se puede apreciar un subsistema de $n=4$ partículas; calculando el número de interacciones únicas, el resultado es 6.

Hasta este punto no se ha modificado nada del sistema, solo se planteó la condición inicial de la simulación; ahora se permite que las partículas se muevan y, en consecuencia, que se computen nuevos valores de la energía del sistema; este movimiento es conocido como “paso” y ejecuta todos los cálculos mencionados aplicando un movimiento aleatorio para una partícula escogida al azar. En el mismo sentido, tenemos que permitir a la simulación mover todas las partículas por lo

menos una vez; ahora estamos hablando de 30×435 operaciones, suponiendo que en cada paso se hayan modificado las posiciones de cada átomo una vez, de tal forma que se alcanzó la mínima energía del sistema. Por el contrario, no es posible aseverar que el sistema ha llegado al mínimo de energía con el mínimo de pasos necesarios y nos vemos obligados a realizar más. Tomemos 700 pasos como propuesta; esto permitiría al sistema una mayor variación en sus posiciones que le permita aproximarse al punto de mínima energía del sistema y, por ende, declarar las posiciones de los átomos relajadas en el reservorio (Figura 4). Ahora tenemos un cómputo aproximado de $435 \times 700 = 304,500$ operaciones; si una persona pudiera realizar al menos una operación cada 10 segundos, le tomaría poco más de 35 días sin descanso terminar el experimento, mientras que a la máquina probablemente le demore unos cuantos minutos.

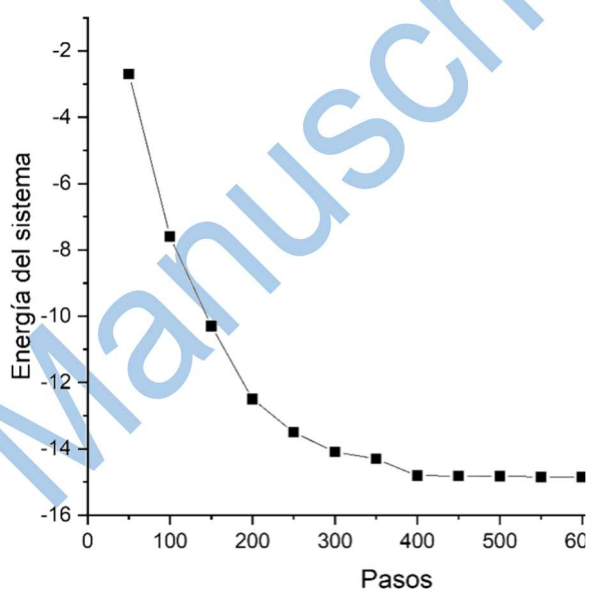


Figura 4. Energía del sistema en función de los pasos. La energía del sistema ha disminuido más con 700 pasos que con 30.

La anterior, en realidad, es una comparación ilustrativa, pues la carga aritmética no es explícitamente 304,500 operaciones; de la misma forma, la computadora demorará más o menos dependiendo del tipo de algoritmo programado. Esta breve descripción desestima una enorme cantidad de cosas, porque además de realizar operaciones hay que definir el tamaño del paso (qué tanto le permitimos a la partícula moverse); es necesario también cotejar los datos obtenidos y darles el formato deseado para su posterior análisis, entre otros cálculos que solo abonan a la complejidad de la tarea. Es por ello que la simulación computacional se ganó un lugar en la investigación científica, pues además de ser una herramienta robusta, provee una óptica distinta en el entendimiento de fenómenos que, experimentalmente, son difíciles o imposibles de seguir.

Conclusión

La máxima en la simulación es representar correctamente la realidad. En primer lugar, es imperativo replicar el comportamiento observado con el fin de validar los modelos propuestos durante el estudio de algún sistema. En segundo lugar, con los modelos previamente probados y descritos, se realizan variaciones de sus condiciones para pronosticar características o propiedades que aún no se han reportado y disminuir la carga experimental del grupo de investigación; esto con su respectivo cuidado: modificar virtualmente el resultado es posible si los parámetros utilizados no concuerdan con la realidad. Es por eso que muchas veces el trabajo

del científico computacional dista de esa apariencia utópica: durante el experimento surgen problemas que provocan imperfecciones en el sistema bajo estudio, desviando el pronóstico a valores distintos; entonces el científico debe ajustar su modelo implementando consideraciones extra que solo añaden capas de complejidad a los algoritmos.

La simulación ha cambiado mucho desde sus albores, pero mantiene la misma idea en sus cimientos. Puede ser tomada como una herramienta meramente exploratoria, pero, al mismo tiempo, no se le puede negar su capacidad predictiva, que siempre debe estar sujeta al escrutinio científico. Al final, la naturaleza puede explicarse mejor mediante la conjunción del experimento, la teoría y la simulación.

Referencias

Araujo E (2017). Métodos numéricos para simulación en ingeniería. Recuperado de: <https://www.esss.com/es/blog/metodos-numericos-para-simulacion-en-la-ingenieria/>.

Frenkel D (2002). Molecular dynamics simulation. In Frenkel D and Smit B, *Understanding molecular simulation: from algorithms to application* (pp. 63-107). Academic Press.

Hirsh J (2006). Introducción a la física nuclear. Recuperado de: <https://nucleares.unam.mx/~bijker/emfn/Hirsch.pdf>.

Korbel J, Lindner SD, Hanel R and Thurner S (2021). Thermodynamics of structure-forming systems. *Nature Communications* 12:1127. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-021-21272-7>.

Lenhard J, Simon S and Hasse H (2024). On the History of the Lennard-Jones Potential. *Annalen der Physik* 536:2400115. DOI: <https://doi.org/10.1002/andp.202400115>.

Mihalič F, Truntič M and Truntič M (2022). Hardware-in-the-Loop Simulations: A Historical Overview of Engineering Challenges. *Electronics* 11(15):2462. DOI: <https://doi.org/10.3390/electronics11152462>.

Seck J, Hernández N y Medina J (2023). Números pseudoaleatorios. Recuperado de: <https://dspace.uaeh.edu.mx/server/api/core/bitstreams/c224e3b9-497d-447c-93e2-6ff622a7f813/content>.

Zhengqing Y and Iskander MF (2015). Ray Tracing for Radio Propagation Modeling: Principles and applications. *IEEE Access* 3:1089-1100. DOI: <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2015.2453991>.

Manuscrito aceptado