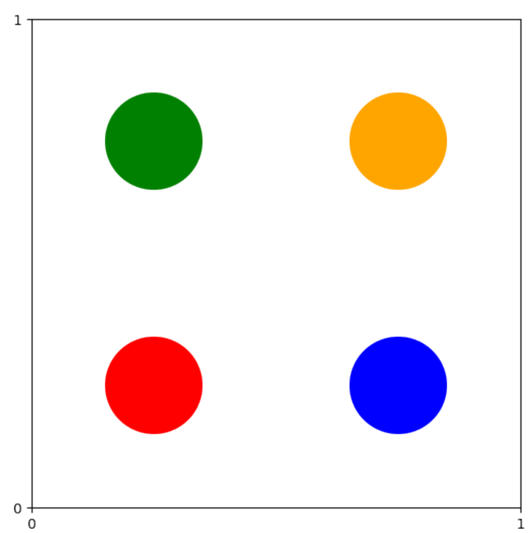
EMPAQUETAMIENTO DE ESFERAS Y DINÁMICA MOLECULAR

Carpa de Melquiades, Octubre 2022.

Krystifer Campos Muñoz - Programa de Física.

Los gases ideales, o la estructura atómica de la materia condensada, se pueden modelar en una primera aproximación desde un punto de vista clásico. Consideremos esferas sólidas finitas en el interior de un cubo, como las bolas de un billar, (generalmente se le llaman discos si están en dos dimensiones). Podemos identificar a cada partícula mediante un sistema de coordenadas cartesianas, para el caso tridimensional cada partícula tiene asociadas las 3 coordenadas espaciales, si hay N partículas el número total de parámetros requeridos para describir completamente el sistema es 3N, la dimensión del problema es entonces 3N. Podemos modelar la dinámica del sistema mediante las ecuaciones de la cinemática y la conservación del momento lineal. Por simplicidad, solo consideramos dos tipos de interacción: colisión de una partícula con la pared del contenedor, y colisión entre pares (se ignoran interacciones simultaneas entre 3 o más partículas). La evolución del sistema se da en pasos discretos en donde solo ocurre uno de los dos eventos mencionados, este modelo recibe el nombre de *dinámica molecular impulsada por eventos*. Uno de los primeros de este tipo fue propuesto en 1957 por B.J. Alder y T.E. Wainwright [1]. Dado que se solucionan ecuaciones analíticas, el error solo depende de las aproximaciones en el cálculo de las ecuaciones, la precisión finita del computador y la capacidad de procesamiento.

Los discos duros conforman un sistema de muchas partículas, por lo que también podemos aproximarnos a la dinámica desde un punto de vista estadístico. El siguiente modelo se basa en el juego de las piedras, consideremos una cancha grande de forma cuadrada, supongamos que lanzamos una piedra con los ojos cerramos y en una dirección aleatoria, existen dos posibilidades, la primera es que la piedra caiga en el interior de la cancha, en ese caso, nos desplazamos a esa posición, sacamos una piedra nueva y la lanzamos. La segunda posibilidad es que la piedra caiga fuera de la cancha, en ese caso nos quedamos en la posición actual, pedimos a alguien que nos traiga la piedra, la apilamos en ese lugar (junto con la piedra que ya se encuentra en esas coordenadas) y tiramos otra piedra diferente. Después de cierto tiempo, si llevamos un registro de nuestra trayectoria, observaríamos una cadena de segmentos unidos por piedras o cúmulos de ellas. Estas mismas reglas se puede aplicar a los discos duros. Como las posiciones son elegidas de forma aleatoria, (Esto se lleva a cabo computacionalmente mediante la selección de números aleatorios en un intervalo acotado, y para el cual la distribución de probabilidad es uniforme), el muestreo se basa en el método de Montecarlo, y dado que cada lanzamiento depende del lanzamiento anterior (la posición de aterrizaje), la trayectoria recorrida forma una Cadena de Markov. A esta dinámica se le conoce como MCMC de sus siglas en inglés (Markov Chain Monte Carlo). La implementación del algoritmo se muestra en el caso bidimensional, tomado de [2], (para ver animación abrir el documento en Adobe Acrobat Reader).



Si aumentamos el número de discos, manteniendo el volumen de la caja fijo, se aumenta la densidad. El estudio de la variación de las densidades, muestra que a densidades bajas, el sistema se comporta como un líquido y al aumentar la densidad, se pierden las propiedades de líquido y predominan las de un sólido. El cambio de fase en estos sistemas no está bien definido, sin embargo; es claro que al aumentar la densidad ocurre el fenómeno de empaquetamiento, este consiste en la apilación o confinamiento de sólidos, en este caso de esferas, y la forma en que ocurre depende del algoritmo utilizado.

Entorno al empaquetamiento surgen pregungas interesantes, por ejemplo; ¿Cuál es la forma más densa de empaquetar esferas del mismo tamaño?. Es una de las pre-

Figura 1: Tomas Hales, 1998. Créditos: Bob Kalmbach / University of Michigan.

guntas del problema número 18 de la lista de 23 problemas compilados por el matemático alemán David Hilbert, una de las más influyentes en la historia de las matemáticas. La conjetura de Kepler, es que el mejor empaquetamiento es el hexagonal (fig.1). Después de 400 años el matemático estadounidense Thomas Hales, demostró computacionalmente en 1998 que la forma más densa de empaquetar esferas en tres dimensiones es efectivamente mediante un patrón hexagonal, llenando aproximadamente el 74 % del espacio total. Esta es la forma usual en que se apilan las naranjas en el supermercado.

De la misma forma, en un plano el mejor empaquetamiento de discos es el hexagonal, (cada disco está en contacto con 6 discos vecinos), y en una dimensión el mejor empaquetamiento es trivial. La pregunta permanece formulada para más de 3 dimensiones. Por definición, una esfera está conformada por el conjunto de puntos que están a la misma distancia de un punto fijo, su centro, podemos entonces considerar esferas en n dimensiones (hiperesferas), en donde las coordenadas de cada punto contienen n entradas, $(x_1, x_2, ..., x_n)$ y su ecuación estaría dada por $x_1^2 + x_2^2 + ... + x_n^2 = r^2$, con r el radio de la esfera. A partir de la cuarta dimensión no es imposible imaginar una hiperesfera, así como un ser bidimensional no puede concebir una esfera tridimensional. Aún así, podemos usar la métrica euclidiana y calcular distancias entre ellas, o el número máximo de n-esferas que puede tocar simultaneamente una n-esfera, siendo todas del mismo tamaño, entre muchas otras características.

La prueba de Hales para el caso tridimensional, requirió del orden de 50000 lineas de código y su artículo contenía 250 páginas. La demostración del empaquetamiento óptimo en tres dimensiones resulta ser más complicada, y es que en las dimensiones ocho y veinticuatro existen simetrías que simplifican el problema, Maryna Viazovska en mayo del 2016, obtuvo la función que describe el empaquetamiento más denso en ocho dimensiones, y más tarde, en colaboración con otros matemáticos lo demostró para veinticuatro dimensiones en publicaciones de 23 y de 12 páginas respectivamente, Maryna Viazovska obtuvo la medalla Fields en 2022, siendo la segunda mujer en obtener este reconocimiento.

Las hiperesferas son objetos simples pero extraños, por ejemplo; aunque son esféricas, también son punteagudas. Para ilustrar lo anterior, considere un cuadrado y el máximo disco que puede contener, este ocuparía el 79 % del área del cuadrado. Si consideramos un cubo, la esfera más grande que cabe en este ocupa el 52 % del volumen del cubo, a medida que aumenta la dimensión el volumen que ocupa la hiperesfera más grande que cabe en el hipercubo tiende a cero. En nueve dimensiones es como si una de las piedras en el juego de las piedras, siendo mucho más pequeña que la cancha cuadrada, pudiese tocar las cuatro paredes simultáneamente y seguir siendo esférica. Es esta extrañeza y la imposibilidad de imaginarlas lo que las hacen tan misteriosas, se encuentran pues en espacios abstractos que solo las matemáticas pueden describir.

Entender el empaquetamiento nos permite explicar la formación de estructuras, optimizar procesos industriales y arquitectónicos, entender los cambios de fase en la dinámica molecular o mejorar la precisión en la transmisión de datos a través de satélites y fibra óptica [3]. Sin embargo; el problema es interesante por sí mismo desde el punto de vista matemático, es un problema antiguo, contiene preguntas muy simples de formular, pero muy difíciles de responder, y ahora más que nunca, con la evolución de los computadores y el trabajo de cientos de personas alrededor del mundo tenemos la oportunidad de explorar mejor sus propiedades.

[1] B. J. Alder and T. E. Wainwright , Phase Transition for a Hard Sphere System.

[2] Werner Krauth , Statistical Mechanics: Algorithms and Computations. Oxford University Press. ISBN 0–19–851536–7 (Pbk).

[3] Evelyn Lamb on July 29, 2016. Why You Should Care about High-Dimensional Sphere Packing. Scientific American.