

Desarrollo Experimental II
(2018-1)
Simulación Molecular

El contenido del presente documento tiene por objeto establecer la importancia que tiene, para los estudiantes de la Licenciatura en Física, la simulación molecular. Dado que en el programa de la asignatura de Física Estadística se contemplan los aspectos básicos que dan sustento a las diferentes técnicas de simulación molecular (Monte Carlo, Dinámica Browniana, Dinámica Molecular) sería interesante también que en el taller de dicha asignatura se contemplara una introducción a alguna de las técnicas básicas que permiten contrastar resultado entre teoría, simulación y experimento para un sistema específico.

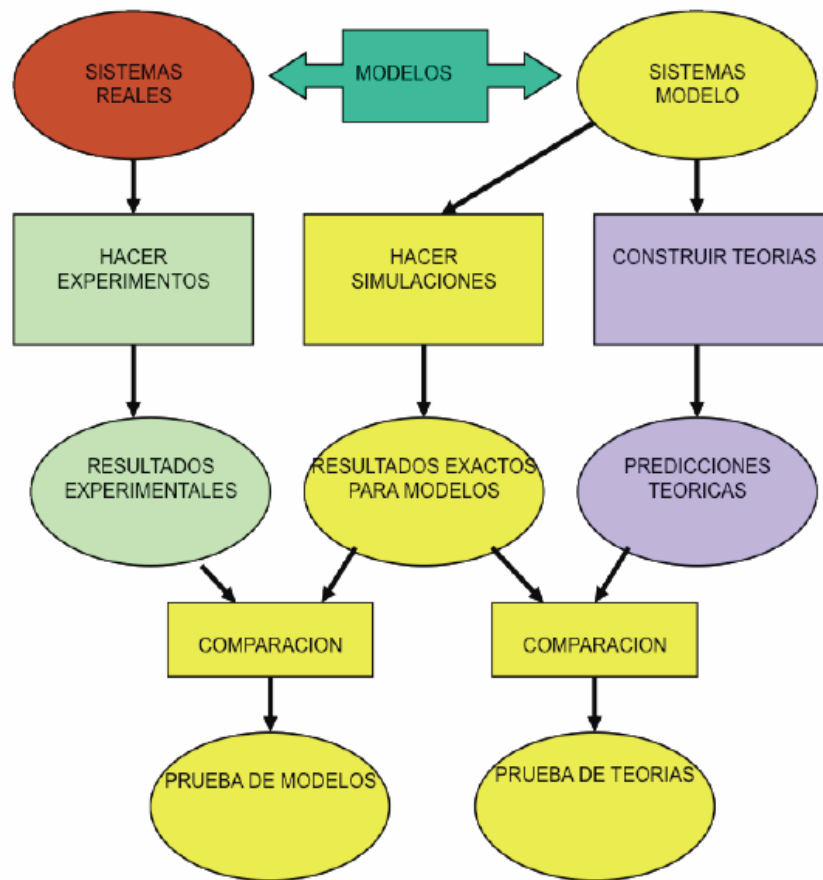
I

Contexto.- Hasta antes de la década de los años 50s, predecir las propiedades de materiales implicaba hacer uso de esquemas teóricos para obtener una descripción de sus características cuyos resultados eran contrastados directamente con el experimento. Esta forma de enfrentar el estudio de los sistemas de muchas partículas puede ser un tanto desafortunada, toda vez que salvo casos excepcionales y bien conocidos, las soluciones teóricas no son exactas y requieren de consideraciones y aproximaciones plausibles. Por otra parte los resultados obtenidos experimentalmente requieren del concurso de técnicas y herramientas que puedan estar limitadas para apropiarnos del comportamiento real de las sustancias en las condiciones de interés. Por lo anterior, si los resultados teóricos y experimentales no coinciden, nos coloca en el predicamento de poder saber a ciencia cierta si la teoría está mal planteada o si el experimento es inadecuado, o bien, la duda puede persistir sobre si ambos resultados son incorrectos.

Pues bien, una de las aportaciones importantes de las simulaciones moleculares reside en la posibilidad de aportar a los esquemas teóricos de resultados prácticamente exactos con los cuales establecer un escenario comparativo que permita dar sustento o limitar el alcance de las aproximaciones involucradas en la misma. Por otra parte las simulaciones moleculares permiten dar veracidad a los modelos utilizados para describir resultados experimentales toda vez que el cálculo de propiedades de los materiales mediante simulaciones es ajeno a las metodologías experimentales específicas utilizadas durante la realización de los experimentos. Aportaciones como esta ha llevado a considerar a la simulación molecular como una herramienta de investigación científica, adicional a la teoría y experimento, que por sí misma también es capaz de predecir y explicar fenómenos físicos de relevancia en el campo de los materiales. Como muestra se puede mencionar⁽¹⁾ el impacto que tuvo los cálculos de simulación realizados por Alder y Wainwright y Wood y Jacobson en los 50s

para asegurar que era posible formar un cristal de partículas con interacciones exclusivamente repulsivas (canicas moleculares), tomando en consideración que en aquellos tiempos era difícil entender un orden de largo alcance sin el concierto de fuerzas atractivas.

En resumen, actualmente se cuenta básicamente con tres metodologías para resolver problemas científicos en cualquier área de la ciencia básica. Por una parte el establecimiento de modelos teóricos que pretenden explicar fenómenos que se presentan en los sistemas de interés, por otra parte la determinación, a través de la medición directa o indirecta, de las propiedades que manifiesta experimentalmente el sistema de interés y la tercera posibilidad consiste en realizar simulaciones computacionales (en cualquier escala espacio-temporal) que implica conjuntar el uso de computadora, programas y análisis que permitan una comparación por un lado con las predicciones teóricas y por otra con resultados experimentales. El esquema de la siguiente figura ilustra lo señalado anteriormente.



En cuanto a la metodología seguida para implementar simulaciones, podemos señalar que se asemeja a la metodología seguida en los desarrollos experimentales. Esto ha llevado a establecer una analogía metodológica entre ambas herramientas, de forma tal que las simulaciones son referidas por algunos autores como experimentos de simulación.

En la tabla ilustrada de la siguiente figura se presenta un esquema que nos refiere a la analogía entre experimentos y simulaciones que nos puede ayudar a entender el protocolo al que se enfrenta una persona que desea simular en relación a la persona que desarrolla un experimento.

Experimento	Vs	Simulación
Preparación de la Muestra		Construcción del Modelo
Laboratorio		Computadora
Equipo experimental		Programa de cómputo
Calibrar equipo		Probar programa
Medir propiedades		Calcular propiedades

El primer aspecto de la analogía refiere a la similitud entre la preparación de una muestra experimental y la construcción del modelo del sistema en la simulación. Así como en el trabajo experimental se dedica tiempo y esfuerzo para preparar muestras con las características adecuadas para conocer de ellas sus propiedades, en las simulaciones moleculares habremos de dedicarnos a diseñar con cuidado las características del modelo del sistema que deseamos retome las condiciones del sistema que deseamos simular. Este aspecto puede tener diferentes aristas, por ejemplo, si las simulaciones están enfocadas a establecer un escenario comparativo con alguna propuesta teórica, quién simula deberá respetar el modelo de interacción entre las partículas que sustentan los resultados teóricos, así como también seleccionar las propiedades del sistema con las cuales se establecerá la comparación teoría simulación. En el caso de simulaciones enfocadas a establecer comparaciones con experimentos, se deberá obtener del experimental la mayor información posible sobre las condiciones y características de las muestras, de forma tal que pueda aproximarse lo más posible con las condiciones de observación y medición experimental.

Por supuesto que quién simula puede tener sus propias preguntas legítimas sobre el comportamiento del sistema y para ello será quien defina el modelo de interacción entre las partículas, la presencia o no de potenciales externos, la pertinencia o no de estudiar el comportamiento del sistema en condiciones de equilibrio, entre muchas otras. Esta etapa es de las partes más creativas y suele ser exitosa si se ancla la creatividad a preguntas muy claras en relación a lo que se desea estudiar del sistema. En ocasiones puede ser una etapa corta, al igual que la preparación de muestras sencillas en el trabajo experimental. En otras ocasiones llegar a un modelo específico adecuado que retome de un sistema real lo más relevante puede llevar meses de investigación y discusión con colegas del campo de interés.

En relación a la analogía entre el laboratorio como espacio de trabajo experimental y la computadora como recinto del trabajo para llevar a cabo simulaciones es prácticamente directa. Así como hay laboratorios con diferentes recursos e infraestructura, también existen diferentes tipos de equipo de cómputo donde se puede trabajar con las simulaciones. Hoy en día las capacidades disponibles en equipo de cómputo son muy diversas y el acceso a equipo que permita implementar simulaciones es más sencillo. Baste señalar que con computadoras personales (de escritorio o portátiles) es posible desarrollar trabajo de simulación relativamente modesto pero no por ello menos importante, esto dependerá de las preguntas científicas a responder y de complejidad del modelo del sistema. Por otra parte y con los recursos que nos proporcionan las redes de cómputo y los protocolos de transferencia y conexión remota es posible tener acceso a equipos de cómputo robustos que nos permiten incrementar la complejidad de los sistemas de estudio.

El equipo experimental es el recurso tecnológico concreto con el cual se interacciona con la muestra para extraer de ella las propiedades de interés (temperatura, presión, conductividad, resistividad, factor de estructura, forma, etc.). El instrumento con el cual se determinan las propiedades de un sistema mediante simulaciones es el código o programa de cómputo que habremos de ejecutar en el equipo de cómputo disponible. Con dicho objeto moveremos a las partículas del sistema acorde con las condiciones y modelos de potenciales de interacción diseñados durante la construcción del modelo. En el código residirá el núcleo de la simulación, el algoritmo, que llevará a que las configuraciones posibles de las partículas no se construyan sin sentido sino respetando las reglas físicas y matemáticas que lo sustentan y que harán que los resultados reflejen la esencia misma del sistema. Es por ello que quien desee embarcarse en el terreno de la simulación molecular deberá ser proclive a la construcción de códigos de programación y deberá tener bases en lenguajes de programación adecuados para el cálculo numérico. Actualmente existen gran cantidad de materiales disponibles de software libre y sitios de organizaciones dedicadas a la simulación, que comparten códigos, subrutinas y diferentes recursos para simulación de diversos sistemas, modelos, algoritmos en su gran mayoría en lenguaje FORTRAN y/o C. Una de los proyectos más destacados en simulación computacional de materia condensada es el *Collaborative*

Computational Project (CCP5) lanzado en 1980 por el Consejo de Investigación de Ingeniería y Ciencias Física del Reino Unido (EPSRC por sus siglas en inglés).

La calibración de equipo experimental es una rutina que se practica en los laboratorios previo a la medición de propiedades de las muestras. Generalmente esta calibración se implementa haciendo uso de sistemas de referencia o estándares y en muchas ocasiones el mismo proveedor del equipo incluye la metodología para llevarla a cabo. Calibrado adecuadamente un equipo tendremos la certeza de que la medición de propiedades en la muestra sujeta a investigación será correcta, en tanto a que dicho procedimiento nos da certidumbre sobre la buena marcha del equipo. Similarmente, en las simulaciones moleculares se procede a probar el código del programa para el caso de algún sistema modelo de referencia para el cual se cuente con resultados conocidos y reportados en la literatura o bien que se hayan obtenido previamente mediante algún otro código, o si es posible, con algún otro método de simulación complementario. Con este protocolo se afinan detalles no previstos en la elaboración del programa, se extraen tiempos aproximados de ejecución de la simulación, de ser necesario se optimizan partes del código, entre otras, de forma tal que nos permita estar seguros que la simulación procederá correctamente para el modelo del sistema de interés. En esta etapa es común que entre simuladores se realicen corridas de prueba independientes para validar los programas de cómputo con los que se explorarán las propiedades del sistema. Es común también que en esta etapa lo que se haga es adaptar algún código de dominio público. Esta etapa, casi final, puede ser relativamente corta dependiendo de la complejidad del programa, de la experiencia que posea quien simula, o bien y altamente recomendable, de la asesoría y/o colaboración de colegas con más experiencia en el campo.

En el caso de los experimentos se procede a medir las propiedades de la muestra en cuestión y en el caso de la simulación se procede, equivalentemente, a calcular las propiedades del sistema modelo que generamos para dar respuesta a nuestras inquietudes sobre el comportamiento de algún sistema real y que por diferentes razones, pudiera o no estar en nuestra agenda la posibilidad de explorarlas teórica o experimentalmente.

El escenario comparativo anterior es parte de lo que motiva que las simulaciones sean referidas como experimentos de simulación y además refleja un procedimiento metodológico que se aproxima bastante bien a lo que se hace al aproximarse a un problema de investigación.

Como nota final debemos aclarar que nuestra experiencia es en simulación molecular, esto restringe la escala espacial de los sistemas de interés señalados anteriormente. Además el enfoque con física clásica es con el que se tiene más experiencia, para describir sistemas atómicos, moleculares y macromoleculares. Finalmente, en la mayor parte de la experiencia fue adquirida realizando simulaciones para sistemas en equilibrio termodinámico.

II

Para poder implementar de forma completa el programa de la asignatura es necesario primeramente poner las bases que permitan conocer los elementos necesarios para implementar la simulación molecular. Lo anterior se pretende cubrir abordando los aspectos esenciales para programar los algoritmos básicos que permitirán evaluar propiedades estructurales, y dinámicas en sistemas atómicos y/o coloidales haciendo uso de al menos dos de los tres métodos de simulación molecular siguientes:

- a) Monte Carlo
- b) Dinámica Browniana
- c) Dinámica Molecular

En cada uno de estos temas la dinámica en este curso será primeramente la exposición del profesor, quien establecerá las bases para entender el método general, los sistemas físicos, las condiciones en las que se encuentran y las propiedades que pueden ser evaluadas. El profesor proporcionará lecturas adicionales para tener sesiones de discusión con los estudiantes.

Se asume que los estudiantes tengan cubierto las asignaturas de Programación, Mecánica Teórica y Termodinámica Clásica. Si se tiene acreditada el curso de Física Estadística será mucho mejor. Los elementos de Física Estadística Clásica necesarias serán cubiertas por lecturas y/o por el profesor.

III

Publicaciones representativas en las cuales se incluyen simulaciones moleculares de diferentes sistemas.

- *Density-Temperature-Softness Scaling of the Dynamics of Glass- Forming Soft-Sphere Liquids*, Ramirez-Gonzalez, Pedro E, Lopez- Flores, Leticia, Acuna-Campa, Heriberto, Medina-Noyola, Magdaleno. PHYSICAL REVIEW LETTERS, Volume: 107, Issue: 15 Article Number: 155701 (Published: OCT 3 2011).
- *Self-consistent theory of collective Brownian dynamics: Theory versus simulation*, Yeomans-Reyna, L, Acuna-Campa, Guevara-Rodriguez, Medina-Noyola, M. PHYSICAL REVIEW E Volume: 67 Issue: 2 Article Number: 021108 (Published: FEB 2003).
- *Collective dynamics in quasibidimensional colloidal suspensions*, Acuna-Campa, H., Carbajal-Tinoco, M.D., Arauz-Lara, J.L., Medina- Noyola, M. PHYSICAL REVIEW LETTERS Volume: 80 Issue: 26 Pages: 5802-5805 (Published: JUN 29 1998).

La información sobre la infraestructura disponible para llevar a cabo el curso es:

Herramientas:

Computadoras personales; Centro de cómputo de estudiantes (3F-DF); Ocotillo (ACARUS)

Lenguaje de programación: De preferencia para mejor orientación FORTRAN, sin embargo, esto no debería ser una limitación.

Bibliografía:

- *Computer Simulation of Liquids*. M. P. Allen and D. J. Tildesley. Oxford Science Publication. (1987)
- *Understanding Molecular Simulation, from algorithms to applications*. Daan Frenkel, Berend Smit., Academic Press (1996)
- *An Introduction to Computer Simulation Methods, applications to physical systems*. Harvey Gould, Jan Tobochnik y Wolfgang Christian Addison and Wesley.

(Se proporcionara a los estudiantes estas referencias y otras complementarias en versión electrónica)

Lugar de trabajo: Laboratorio de Termodinámica Clásica, edificio 3E.

Complemento: Familiaridad en algún graficador, editor y compilador.

*Heriberto Acuña C. y Laura Yeomans R.
(lyeomans/revisión 2018-1)*