



FOTO: ESPAI GRÀFIC

EXPERIMENTS NUMÈRICS: UNA NOVA EINA PER A LA RECERCA

JOAN ÀNGEL PADRÓ I CÀRDENAS

LA REVOLUCIÓ INFORMÀTICA

Un dels fets més destacats del final del segle XX ha estat sens dubte l'aparició i ràpid desenvolupament de la informàtica. Els ordinadors estan avui dia a l'abast d'amples capes de població i sembla lògic pensar que molt aviat seran un element tan comú com ara ho són el telèfon, la nevera o la rentadora. Tot i que es pot discutir si això és bo o dolent, sembla que la irrupció de la informàtica a la nostra vida quotidiana és un procés imparable, que ha de produir canvis importants en els nostres hàbits. La utilització intensiva de la informàtica està íntimament lligada al progrés en àmbits molt diversos, com és el cas de la recerca científica. Hom podria pensar d'entrada que els ordinadors i la informàtica no poden aportar grans novetats conceptuals, ja que en realitat no ens permeten fer res que prèviament no sabéssim fer: operar amb números, ordenar, escriure, dibuixar... L'única capacitat pròpia dels ordinadors és que tot això ho poden fer molt ràpid i sense equivocar-se! Tanmateix, els computadors permeten proposar-nos projectes i assolir fites que d'altra forma ni tan sols podríem imaginar, alhora que ens obren camins per abordar els problemes des de noves perspectives i això acaba tenint repercussions molt més grans que les inicialment previsibles.

Els ordinadors s'utilitzen en la recerca amb finalitats molt diferents. En alguns casos la seva funció és tan sols la d'una màquina de calcular, això sí, extraordinàriament ràpida i potent, que

en breus minuts pot fer càlculs que d'altra forma potser requeririen mesos o anys i segurament ni tan sols ens plantejaríem. En aquesta mateixa línia, permeten resoldre problemes que no tenen solució analítica mitjançant l'anomenat càlcul numèric, el qual resulta pràcticament inaplicable si no es disposa de potents calculadores. Una altra de les qualitats dels ordinadors és la seva gran capacitat per guardar dades. Així, és habitual veure que, al costat dels aparells de mesura d'un laboratori, hi ha connectat un ordinador que està recollint les dades de l'experiment en marxa. En aquest cas, l'ordinador acumularà els resultats de les mesures en un disc o les enviarà a un altre ordinador des d'on podran ser còmodament processades. Fins fa pocs anys, la recollida de dades era poc més que manual, i per tant pesada i avorrida, mentre el seu tractament era molt limitat per la impossibilitat de fer càlculs amb prou rapidesa. Ara resulta fàcil agrupar les dades de diferents formes, fer gràfics amb diverses escales, assajar noves maneres de combinar els resultats... Els ordinadors són avui indispensables per analitzar científicament les llargues sèries de dades que generen les grans instal·lacions d'acceleradors de partícules, els observatoris astronòmics o les xarxes d'estacions meteorològiques. Tanmateix, i en els casos esmentats, l'ordinador s'ha emprat per fer molt millor les mateixes tasques que sempre havia comportat la recerca. Però l'ordinador també ens permet enfocar el treball científic d'altres maneres com, per exemple, fent simulacions per ordinador.

LA SIMULACIÓ PER ORDINADOR: EXPERIMENTS NUMÈRICS

El concepte de simulació és fàcil d'entendre. Es tracta de reproduir mitjançant un model i d'una forma senzilla cert sistema, procés o esdeveniment real que ens interessa observar i analitzar. L'ordinador és un element molt adient per simular. Sols cal disposar d'un model detallat de la realitat observable que volem analitzar. Mitjançant un programa adient, podrem simular el comportament d'un sistema i determinar-ne les propietats; tot això dins de la memòria d'un ordinador. Aleshores es fàcil veure com afectarà als resultats la introducció de petits canvis en el model o quina és la incidència en el resultat final d'alguna de les seves característiques específiques. És el que en podríem dir *experiments numèrics*, ja que ens poden proporcionar una informació semblant a la d'un experiment de laboratori, excepte que es refereix a un model i no a un sistema real.

Evidentment, la utilització d'un model representa una gran simplificació de la realitat, però si el model inclou les característiques essencials del sistema o fenomen que es vol estudiar, els experiments numèrics poden ser de gran utilitat. La simulació per ordinador és un mètode ideal, i molts cops l'únic, per analitzar la relació entre les propietats globals d'un sistema i el comportament detallat dels seus elements. Aquesta informació serà de gran importància per identificar, i en el seu cas modificar, els mecanismes elementals que determinen els comportaments dels sistemes reals. Destacarem que models molt simples pels elements d'un cert sistema poden produir, com a resultat de fenòmens cooperatius entre els constituents, comportaments molt interessants des d'un punt de vista científic.

La simulació numèrica es pot aplicar a disciplines molt diverses. Es pot simular un ecosistema si es defineixen les regles que regulen les activitats dels individus de diferents espècies: moviment, alimentació, reproducció, mort, interacció entre

individus, etc. Aleshores es poden fer experiments per veure, per exemple, com afecta el canvi en alguna d'aquestes regles o l'extinció d'una de les espècies al comportament global de l'ecosistema. Actualment s'està començant a treballar en un projecte europeu amb la finalitat de simular un reactor nuclear que permeti estudiar-ne amb detall el funcionament, els danys que la radiació produeix en els materials que el formen i com es poden minimitzar... També són molt interessants les simulacions en economia, que fan possible experimentar les conseqüències que podrien derivar-se de l'aplicació de determinades mesures polítiques o econòmiques. O les simulacions del trànsit de cotxes que circulen per una zona de la ciutat a fi d'analitzar les possibles formes de millorar-lo. Evidentment, tots aquests experiments es basen en models que no reproduïxen exactament la realitat, però que tenen dos grans avantatges. D'una banda, es tracta d'experiments virtuals, que ens permeten analitzar les conseqüències de certs canvis i manipulacions sense afectar el món real. D'altra banda, amb la simulació es poden estudiar els efectes dels diferents factors per separat. Això és important, ja que en els experiments reals normalment se superposen diferents fenòmens i resulta difícil saber quina ha estat la contribució de cadascun al resultat final.

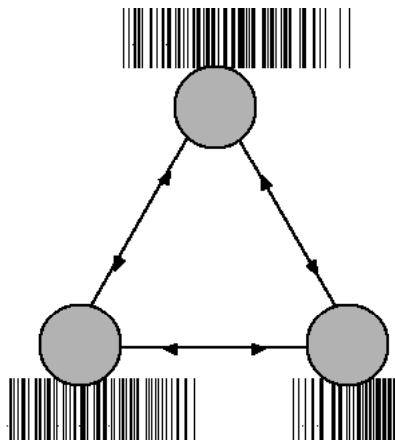
TEORIA - EXPERIÈNCIA - SIMULACIÓ

Des dels seus inicis amb Galileu, el progrés científic ha estat basat en la interrelació ("feedback") entre l'experiència i la teoria. Els experiments suggereixen teories el desenvolupament de les quals comporta prediccions que s'han de comparar amb la realitat a partir de nous experiments. El procés també es pot iniciar en una teoria abstracta que naturalment ha de comportar conseqüències comprovables experimentalment. L'acord teoria-experiència és, doncs, el fonament de l'anomenat mètode científic. La incorporació

de la simulació per ordinador és vist per molts com una tercera via, de forma que l'avenç científic haurà de fonamentar-se en una interrelació a tres bandes teoria-simulació-experiència. En els darrers anys, s'ha comprovat que la col·laboració entre experimentals, teòrics i simuladors resulta molt valuosa i ja és força habitual veure que les tres vies apareixen en els programes dels congressos científics en què que s'estimulen les discussions i debats d'un mateix problema des de les tres perspectives.

Atesa la tradicional divisió dels científics entre teòrics i experimentals, és lògic preguntar-se on se situen els simuladors. La resposta més habitual no és del tot clara. Molts cops els simuladors són vistos com a teòrics pels experimentals i com a experimentals pels teòrics. Segurament el més assenyat és admetre que són una figura intermèdia, amb trets propis de cadascuna de les dues categories.

Un aspecte que cal clarificar és la diferència entre el conceptes de *model* i de *teoria*. Un *model*

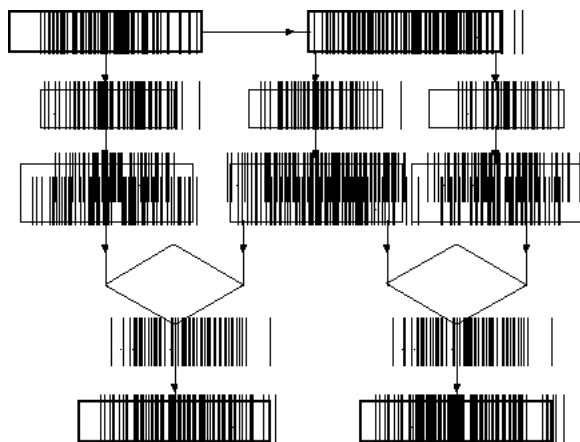


és el conjunt de característiques concretes dels elements, individus o partícules que hom pretén simular, així com de les regles que regulen les seves interaccions. En canvi, una *teoria* és un conjunt de postulats o regles molt generals que ha de complir qualsevol sistema amb uns mínims requisits. En posarem exemples. En el *model* de gas ideal, se suposa que les molècules que el formen són

masses puntuals que no interaccionen i es mouen a una velocitat constant que depèn de la temperatura. Un gas perfectament ideal no existeix, però el seu comportament seria semblant al dels gasos diluïts a altes temperatures. Es tracta d'un *model* extremament senzill, però que resulta força útil en determinats casos. La *teoria* de la gravitació preveu que totes les masses s'atreuen segons una llei de forces perfectament determinada. Això val per a tots els cossos i situacions: és una bona *teoria*.

La comparació de les prediccions teòriques amb els resultats experimentals té l'inconvenient que els experiments es fan sobre un sistema molt concret, de tal manera que molts cops, per aplicar-hi la teoria, cal fer-ho a partir d'un model aproximat del sistema. Aleshores no sabem si les possibles discrepàncies entre les prediccions de la teoria i els resultats obtinguts en els experiments han d'atribuir-se a un error de la teoria o a la utilització d'un model defectuós per caracteritzar el sistema. L'ordinador, en canvi, ens permet fer un experiment amb el mateix model assumit per la teoria, i per tant la comparació teoria-simulació ens donarà informació sobre la validesa de les prediccions teòriques.

Malgrat que, com hem vist, el simulador no treballa en un laboratori pròpiament dit —en tot cas ho fa en un dels anomenats laboratoris



de càlcul—, sí que es dedica a fer experiments amb ordinador. Per tant la seva feina té moltes semblances amb les d'un experimental, sobretot en qüestions com el disseny i plantejament de l'experiment a realitzar o la forma d'analitzar els resultats dels experiments. A més, els experiments amb ordinador permeten obtenir informació sobre el comportament i propietats dels sistemes en condicions ideals o en situacions extremes que serien molt difícils i costoses —a vegades pràcticament impossibles d'obtenir— en un laboratori. Un dels objectius habituals del simulador és analitzar els efectes que pot tenir sobre les propietats d'un sistema una lleugera variació del model o dels paràmetres que en caracteritzen l'entorn. Els objectius d'un experimental són semblants molt sovint, però hi ha una diferència essencial que és que estudien directament la realitat, que és l'objectiu bàsic de la ciència. En els experiments reals, els canvis induïts per agents externs al sistema o per les modificacions en el seu entorn són en realitat respostes de la mateixa Natura. Cal tenir això molt present, ja que en general resulta molt més fàcil i barat fer experiments amb ordinador que no pas experiments amb sistemes reals, però s'ha de remarcar que els primers mai no podran substituir els segons, sinó que s'han de considerar com una eina de gran vàlua i utilitat, complementària de la "veritable" experimentació. Mai no s'ha d'oblidar que la realitat és molt més rica i diversa que un model que cal inventar per poder donar a l'ordinador les regles necessàries per fer una simulació.

La comparació dels resultats de simulació amb els resultats experimentals ens dona informació sobre el grau de realisme del model en què s'ha basat la simulació. És a dir, que en aquest cas el simulador jugaria el paper de teòric. L'avantatge que proporciona la simulació és que permet assumir models que no han de ser forçosament tan senzills com normalment ho requereix un tractament analític. El caràcter parcialment teòric del simulador també es manifesta amb els mitjans que utilitza, que són bàsicament la programació i els

computadors. En canvi, la recerca experimental està molt lligada a la manipulació en el laboratori i al disseny de nous dispositius que requereixen, no sols una bona base científica, sinó també un bon coneixement de les característiques, preus i existències al mercat dels diferents instruments de laboratori i aparells de mesura.

SIMULACIÓ DEL COMPORTAMENT ATÒMIC

Un tipus de simulació que s'utilitza amb gran èxit, i que presenta unes perspectives molt engrescadores per les seves possibles aplicacions a la recerca científica, és la simulació per ordinador del comportament atòmic de la matèria. Com és ben conegut, la matèria no és contínua, sinó que està constituïda per àtoms i molècules, i les seves propietats depenen de com aquests àtoms s'estructuren, de com es mouen, de la forma en què varia el seu moviment i estructura quan el sistema és pertorbat, etc. Per tant, un coneixement en detall del comportament dels àtoms d'un cert sistema ens donarà una informació molt valuosa sobre els orígens de les seves propietats.

El principal problema per simular un conjunt d'àtoms és que interaccionen entre ells simultàniament. Per tant, cal resoldre l'anomenat "problema dels N cossos". Aquest problema no té solució analítica ni en el marc de la mecànica clàssica i l'única forma en què es pot tractar és mitjançant càlcul numèric, és a dir, fent simulacions per ordinador. La simulació basada en la resolució numèrica de les equacions de Newton per a un conjunt de N-partícules s'anomena *dinàmica molecular*. Aquest mètode ens permet reproduir en la memòria de l'ordinador les trajectòries d'un conjunt d'àtoms si suposem un cert model per a les seves interaccions (potencial interatòmic). Aquest és un mètode molt potent perquè subministra una informació molt detallada del comportament atòmic. El grau de realisme de la imatge a nivell microscòpic que ens donarà la simulació dependrà bàsicament del

fet que disposem d'un model adient per al potencial inter-atòmic. Tanmateix, les limitacions més importants d'aquest mètode estan associades al fet que sols es pot tractar un nombre limitat de partícules durant un curt interval de temps. Per donar-ne una idea, actualment es poden simular uns quants milers de partícules durant períodes inferiors als microsegons. Anar més enllà requereix temps de càlcul excessius fins i tot per als ordinadors més potents avui existents.

La primera simulació per dinàmica molecular la varen fer B. J. Alder i T. E. Wainwright a Livermore (Califòrnia) l'any 1957, amb un sistema de només 32 partícules i un potencial molt senzill d'esfera dura (les interaccions es redueixen a xocs elàstics). D'aleshores ençà, el desenvolupament de la dinàmica molecular ha estat directament lligat al dels ordinadors, sobretot als augments en velocitat de càlcul i memòria. Aquest tipus de simulació ha estat decisiva per poder avançar en l'estudi dels líquids a nivell microscòpic. Aquests sistemes es caracteritzen per un alt grau de desordre que no permet aplicar els mètodes propis de l'estat sòlid, que es fonamenten en la periodicitat pròpia de les xarxes cristal·lines. De tota manera, la simulació per ordinador és avui d'us comú en molts camps de la recerca científica, i resulta pràcticament indispensable per tractar certs fenòmens en diferents branques de la física estadística, la química física, la física de l'estat sòlid, la ciència de materials, i darrerament, de forma creixent, de la bioquímica i la biofísica.

Si volem aprendre a fabricar nous materials amb unes característiques determinades, serà molt important poder realitzar experiments numèrics que ens permetin assajar les repercussions que, en les propietats d'un material, tenen petits canvis en la seva composició o en les interaccions interatòmiques. Una altra aplicació de la simulació atòmica es troba en la recerca sobre els mecanismes moleculars bàsics que tenen lloc en els processos químics. Els avenços en un camp de recerca tan punter com la biologia molecular estan

fortament lligats a la simulació numèrica. Si hom vol entendre els processos microscòpics que donen lloc a la formació de les triples hèlixs d'ADN o els plegaments i desplegaments de les proteïnes globulars, no té pràcticament cap altra via que la simulació per ordinador.

Cal esmentar, però, que la majoria de simulacions atòmiques que actualment es realitzen es basen a admetre que el moviment atòmic és regit per les lleis de la mecànica clàssica. Aquesta aproximació resulta vàlida en alguns casos però no en altres, que requeririen emprar forçosament les lleis de la mecànica quàntica. Tot i que ja es treballa en el seu desenvolupament, els mètodes de simulació quàntics són encara molt costosos i no permeten arribar a resultats molt acurats per falta de l'estadística suficient. La realització d'experiments numèrics quàntics amb bona precisió és, per tant, un dels reptes de la ciència per als inicis del segle XXI.

JOAN ÀNGEL PADRÓ I CÀRDENAS (Igualada, 1948) és doctor en Ciències Físiques, catedràtic de Física de la Matèria Condensada i professor del departament de Física Fonamental de la Universitat de Barcelona. Ha publicat més de 80 articles en revistes internacionals especialitzades. La seva actual línia de recerca és la física de l'estat líquid per simulació atòmica.