

vuelo
volar
ala avión
aire pluma



Simulación y modelos matemáticos

DANIEL BOGOYA MALDONADO

Introducción

Los modelos matemáticos se han convertido en una herramienta valiosa para explorar el estado y la fenomenología de diversos mundos, desde aquellos infinitamente pequeños –como es el caso de las partículas subatómicas– hasta otros extraordinariamente gigantes –como serían los conjuntos de galaxias–, o desde los mundos que se caracterizan por ser sólo materia –como un puñado de moléculas de agua y metano– hasta otros que constituyen una organización conceptual que tiene lugar y sentido sólo en la mente de la especie humana.

Escribir en lenguaje matemático, mediante variables y sistemas de ecuaciones, lo que pueda ser concebido, aunque todavía no exista o quizás nunca pueda llegar a ser, es una actividad propia únicamente de la razón, que se debate entre ejercicios pragmáticos, en los que se usa lo que ya ha sido desarrollado por otros hombres, y nuevos recorridos del intelecto que

La representación permite fabricar una realidad artificial, con los hechos que el modelo debe protagonizar, antes de una instalación en la realidad física de los fenómenos de la naturaleza.

se encaminan a pensar y construir formas y modos de representar un objeto cualquiera bajo consideración¹.

La representación permite fabricar una realidad artificial, con los hechos que el modelo debe protagonizar, antes de una instalación en la realidad física de los fenómenos de la naturaleza, para efectos de poder *jugar* en borrador, con distintas hipótesis, a manera de prueba, antes de *jugar* en serio con la toma de decisiones para el diseño de un sistema.

El modelo

Fabricar un modelo, es decir, postular un conjunto de variables y las formas como ellas se relacionan, implica realizar una labor muy cercana a la que ocurre en el mundo de la *poe-*

sía, donde el poeta imagina y crea versos y los une o los separa, siguiendo su lógica para comunicar su sentido de la estética y todo lo que siente, en una travesía fascinante en la que despliega y muestra su sabiduría sobre aquello que quiere contar y que sueña y anhela que los demás puedan entender.

Pensar en las variables que podrían mostrar el estado de cada aspecto nodal y básico de un objeto a representar, concebir el tipo de ecuaciones para fijar la relación entre los valores de las variables, en cada estado, establecer un número de grados de libertad para marcar la distancia entre el número de variables y el de ecuaciones, configuran las tareas centrales de los poetas de la matemática, que desde la sabiduría de un campo se dedican al arte de crear modelos.

Para escribir modelos matemáticos fieles al objeto que se pretende representar, mediante analogías suficientes y precisas entre aspectos observados y variables atadas a ecuaciones, se sugiere contemplar un conjunto de parámetros de ajuste, encaminados a relativizar el movimiento de cada variable, en un ejercicio de sintonización permanente entre las dos formas de la realidad que ahora se obligan a dialogar: la primera, la artificial, que nace con el modelo; y la segunda, la natural, que es inherente al objeto, a cuya imagen y semejanza se inspiró y fabricó el modelo.

¹ En la perspectiva de Theißen se proponen dos niveles en la representación: *The level of detail refers to the amount of information captured, whereas the level of formalization refers to the representation of this information.* (Cfr. Theißen et al., 2011; pp. 679).

La simulación

El modelo fabricado debe entrar en escena, en el espacio donde se construye una realidad artificial, para que este modelo pueda actuar, sujeto a distintas condiciones, y demuestre qué tan parecido lo hace, respecto de un patrón de *verdad*: las actuaciones espontáneas y auténticas del objeto que habita en la realidad natural.

Desde luego, las observaciones sobre los movimientos del modelo, dentro de la realidad artificial construida, corresponderán tan sólo a una aproximación de lo que probablemente ocurriría en el universo fáctico del objeto modelado, porque este objeto suele ser esquivo para dejar ver y comprender claramente sus entrañas y su fenomenología, y porque también suelen ser opacas las condiciones que gobiernan las actuaciones de la realidad natural². Aparece así la simulación matemática, como el ejercicio de aplicar una

► Abajo - Las galaxias, como mundos gigantes, son parte de la fenomenología que se puede explorar mediante los modelos matemáticos.

2 Investigadores como Moodley confieren un peso importante a la forma como ocurre el experimento, en el caso de la simulación del equilibrio liquid-líquido-vapor de mezclas petroquímicas ternarias: *The good agreement between the simulated and experimental data is partially due to the high degree of mutual insolubility amongst the three components at the conditions simulated.* (Cfr. Moodley et al., 2010; pp. 26).

Galaxias Antennae (NASA).



técnica numérica para resolver modelos (también de naturaleza matemática), sujetos a unas condiciones con las que se emula el entorno donde se localiza y desenvuelve el objeto representado.

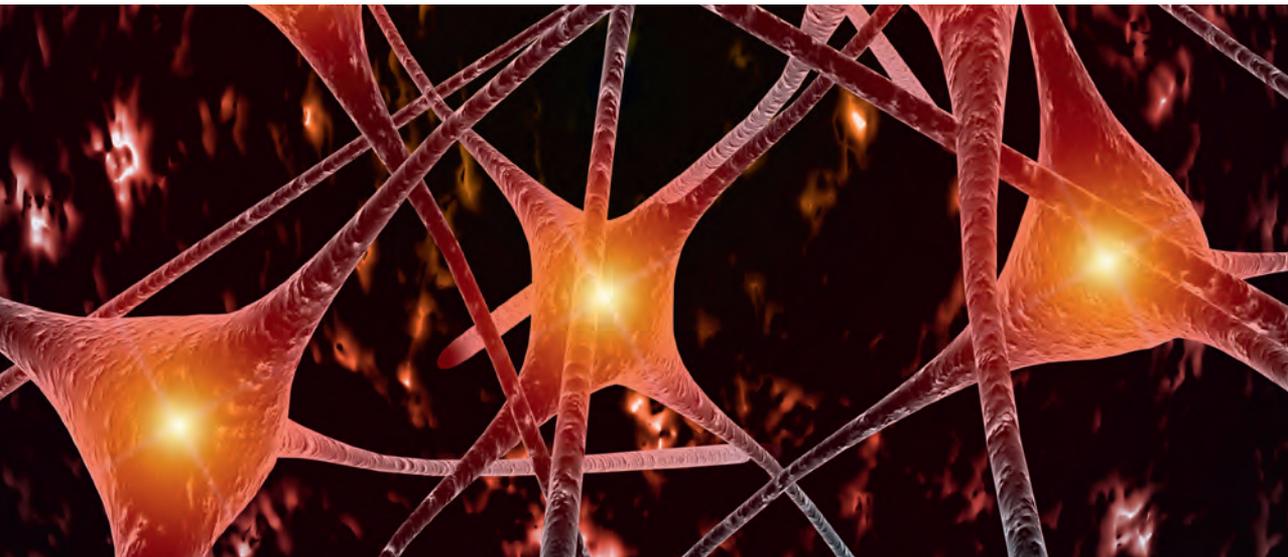
La lógica de la simulación (distinta a la del modelado), se acerca más al mundo de la *historia*, porque sigue juiciosamente un protocolo riguroso y previamente dado por la comunidad científica que ostenta el campo respectivo, y cuyos procedimientos cuida con esmero, porque, además, si no se recorre el camino del modo previamente acordado, los resultados no serán reconocidos como científicos. Las licencias que se permiten a quien crea un modelo, en tanto constituyen las herramientas básicas de los trazados pioneros, son negadas a quien se dedica a simular, pues aquí corresponde dominar y utilizar una técnica, con fidelidad a los mandatos de su creador.

Una primera advertencia en este punto: aunque quien crea técnicas (de solución de modelos matemáticos) también tiene los atributos de un pionero, es claro que la creación de la técnica no sería un acto de simulación sino justo una labor de modelado.

Modelado y simulación, aunque constituyen conceptos hermanos que dialogan permanentemente, corresponden a dos momentos cronológicos distintos y a dos lógicas de elaboración diferentes.

Para escribir modelos matemáticos fieles al objeto que se pretende representar, se sugiere contemplar un conjunto de parámetros de ajuste, encaminados a relativizar el movimiento de cada variable.

Neuronas (Central Lacer Facility, Reino Unido).

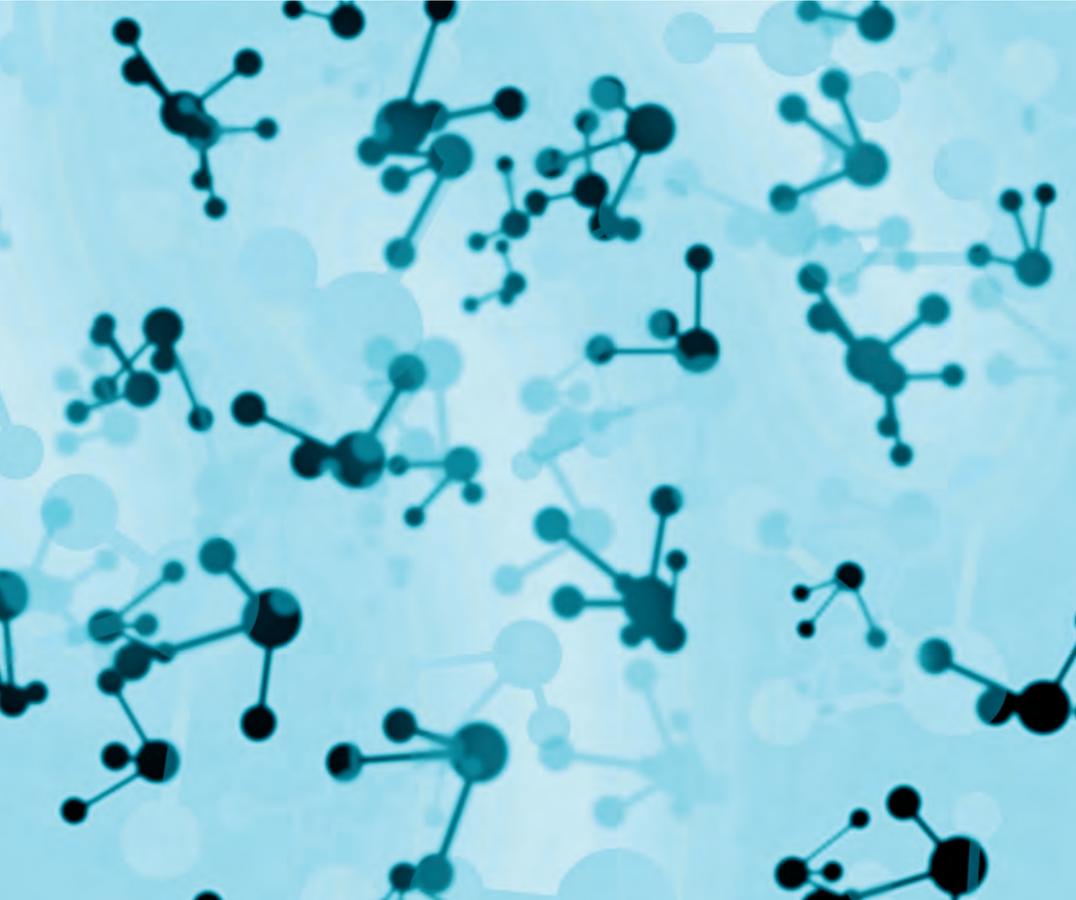




Grados de libertad

El número de grados de libertad de un modelo matemático se define como el número de variables menos número de ecuaciones linealmente independientes. A la luz de esta característica, los modelos pueden clasificarse en tres grandes tipos: primero, el de los *determinados*, cuando el número de grados de libertad es igual a cero (porque el número de variables es igual al número de ecuaciones), lo cual significa que hay una única solución válida o un único valor para cada variable, tal que puedan satisfacerse en forma simultánea todas las ecuaciones; segundo, el de los *sobre-determinados*, que presentan un número de grados de libertad negativo (ya que el número de ecuaciones es mayor que el número de variables), es decir, pre-

► Izquierda - El acto de fabricar un modelo matemático requiere de la interacción genuina entre la razón y la lógica humana.



Grupo de moléculas (Central Lacer Facility, Reino Unido).

sentan una redundancia evidente en las relaciones detectadas, que dan origen a una dependencia lineal entre sub conjuntos de ecuaciones o a una situación de contradicción; y tercero, el de los *sub determinados*, que comprende el caso más interesante para las labores de exploración de la realidad natural, pues para resolver tal tipo de modelos –con un conjunto único de valores para las variables seleccionadas como variables de salida– es necesario fijar el valor de las variables elegidas como variables de entrada o de diseño, siguiendo un criterio, que será la imagen y semejanza de la mente del explorador.

En este sitio es imperativo hacer una segunda advertencia: si bien la mente que elige las variables de diseño y les asigna valores (para resolver un modelo matemático) también tiene los atributos de un pionero, es claro que el diseño que surge de plantear hipótesis no sería un acto de simulación sino justo otra labor de modelado.

► Arriba - El comportamiento de los gases ideales sirve como ejemplo de modelo canónico, en el marco de la simulación y los modelos matemáticos.

Un ejemplo

Un modelo canónico corresponde al que representa el comportamiento de los gases ideales, que comprende una ecuación y tres variables de propiedades termodinámicas: presión absoluta, P ; volumen específico, v ; y temperatura absoluta, T . Se trata de la ecuación $P \cdot v = R \cdot T$, donde R es la constante universal de los gases, que permite asegurar la validez del análisis dimensional. El modelo, que posee dos grados de libertad (tres variables menos una ecuación), arroja por sí mismo un número infinito de soluciones.

Para usar el modelo, con el fin de obtener un conjunto único de valores para las variables que caracterizan un estado de un determinado sistema, en fase gaseosa, será necesario entonces elegir dos de las variables (que se denominarán variables de entrada), asignar luego un valor único para ellas y al final utilizar la ecuación para despejar el valor de la tercera variable del modelo (que operará como variable de salida). Con este modelo es posible hallar, por ejemplo, respuesta a la pregunta: ¿cuál es la presión absoluta que ejerce un gas, que se encuentra confinado en un recipiente rígido, cuando su volumen específico es α metros cúbicos por mol y su temperatura absoluta es β grados kelvin?

El resultado encontrado a partir del modelo es apenas una estimación que tiene validez, certeza y sentido en la realidad artificial construida, y que sólo reflejará cabalmente la realidad natural que pretende modelarse, en los estados donde el comportamiento del gas señalado se ajusta exactamente a dos presupuestos básicos del modelo: *las moléculas del gas no ocupan espacio y las interacciones entre ellas son nulas.*

Aunque las condiciones de la realidad natural acerquen el comportamiento del gas al de un estado donde se cumplen los dos presupuestos indicados, se trata de un ejercicio de simulación en el que a lo sumo puede inferirse, con algún grado de precisión, lo que ocurriría en la realidad natural de un proceso físico en el que intervenga el gas de la pregunta. En la realidad natural, la materia en fase gas suele tomar distancia de los dos presupuestos referidos, pues incluso en la región de muy baja densidad las moléculas ocuparán un espacio (así sea diminuto e imperceptible frente al espacio

La lógica de la simulación –distinta a la del modelado– se acerca más al mundo de la *historia*, porque sigue juiciosamente un protocolo riguroso y previamente dado por la comunidad científica que ostenta el campo respectivo.

ocupado por el gas) y podrán ejercer alguna fuerza neta de interacción entre ellas, bien sea de atracción o de repulsión³.

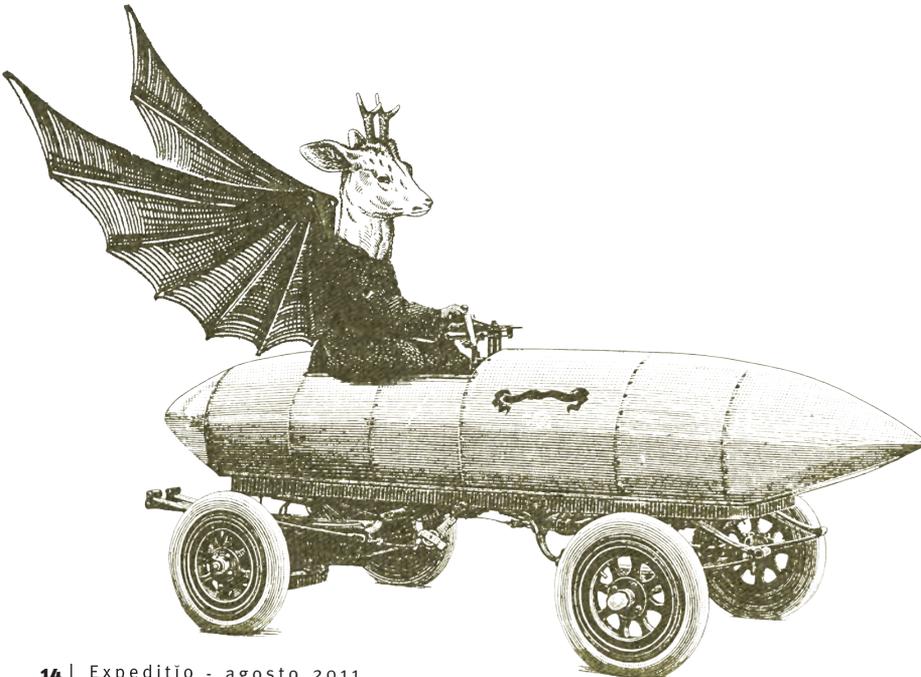
Fronteras del ejercicio

El modelado y la simulación constituyen una estrategia para calcular el valor de variables que representan propiedades de un objeto bajo consideración, lo cual permite explorar y conocer sistemas que habitan en la realidad natural, para diseñar, transformar o controlar procesos que están sujetos a las condiciones que han sido utilizadas para agotar los grados de libertad del modelo⁴.

Con frecuencia, los resultados ciertos de una simulación matemática van seguidos de una señal incierta para la propiedad de la realidad natural representada: por ejemplo, la presión absoluta del sistema es igual a $\delta \pm \epsilon$ bar, donde ϵ indica el tamaño del error de la estimación, es decir, qué

3 A manera de ejemplo, en uno de tantos ejercicios de modelado del comportamiento de mezclas metano-agua, se encontró para la fase gas: *For temperatures below 273K the assumption of ideal behavior proved to be sufficient for the system CH₄/H₂O, whereas for temperatures above 273K calculations with the two-parameters corresponding state principle in combination with the fugacity correction turned out to be the best* (Cfr. Bogoya et al., 1993; pp. 54).

4 Dentro de la enorme variedad de ejemplos de aplicación, se sugiere estudiar la simulación y el modelo complejo propuesto por Touloupides para representar un reactor de polimerización. (Cfr. Touloupides et al., 2010; pp. 3215).



tan distante está localizada la abstracción (ya cristalizada en el modelo) del objeto, que se mantiene ajeno e inmóvil ante quien lo observa. La verdad sigue atrapada en el mundo de la vida, en el terreno de lo fáctico⁵, mientras que los modelos se esfuerzan por mostrar su verosimilitud, gracias a la lógica como se relacionan las variables establecidas, en el amplio universo de la abstracción, la razón y la argumentación.

DANIEL BOGOYA MALDONADO es Ingeniero Químico, Magíster en Ingeniería de Sistemas, profesor titular y docente de la Universidad Nacional de Colombia. Ha sido director de proyectos de investigación en el área de simulación de procesos químicos y consultor internacional en los temas de evaluación de la calidad de la educación y exploración de factores asociados al aprendizaje de los estudiantes. Actualmente, es Decano de la Facultad de Ciencias Naturales e Ingeniería de la Universidad de Bogotá Jorge Tadeo Lozano.

Referencias

- BOGOYA, D. MÜLLER, C. OELLRICH, L. (1993). Taupunkts- und wassergehaltsbestimmungen von stickstoff-wasser- und methan-wasser-gemischen. En *Wissenschaftliche Abschlussberichte 28. Internationales Seminar* (pp. 54-63). Karlsruhe: Universität Karlsruhe.
- EINSTEIN, A. (1954). *Ideas and opinions*. New York: Wings Books.
- MOODLEY, S., BOLTONB, K., RAMJUGERNATH, D. (2010). Monte Carlo simulations of vapor-liquid-liquid equilibrium of some ternary petrochemical mixtures. *Fluid Phase Equilibria*, 299, 24-31.
- THEIßEN, M., HAI, R., MARQUARDT, W. (2011). A framework for work process modeling in the chemical industries. *Computers and Chemical Engineering*, 35, 679-691.
- TOULOUPIDES, V., KANELLOPOULOS, V., PLADIS, P., KIPARISSIDES C. MIGNON, D. Van-GRAMBEZEN, P. (2010). Modeling and simulation of an industrial slurry-phase catalytic olefin polymerization reactor series. *Chemical Engineering Science*, 65, 3208-3222.

⁵ En contraste, el concepto de verdad es relativo en el planteamiento de Einstein: *Thus the meaning of the word "truth" varies according to whether we deal with a fact of experience, a mathematical proposition, or a scientific theory* (Cfr. Einstein, 1954; pp. 261).