

1. TÍTULO: *MODELACIÓN EN CIENCIAS QUÍMICAS*

Autor: CORTES, R. C.¹

¹Facultad Regional San Rafael, Universidad Tecnológica Nacional. San Rafael Mendoza. Argentina. Tel: 02627421078. E-mail kurtkarim@yahoo.com.ar

2. RESUMEN:

La sociedad en su conjunto, y en especial la comunidad científica y educativa aceptan la idea del conocimiento concebido como herramienta de acceso al mundo, como medio para otorgarle sentido, explicándolo y operando sobre el mismo. Los objetos y eventos del mundo conllevan el desafío de comprenderlos y manipularlos; ya sean fenómenos naturales, comportamientos sociales, procesos históricos, económicos, industriales, etc., se describen por medio de representaciones o modelos, que son fruto de la construcción humana, a partir del contacto del hombre con el mundo a través de su vida cotidiana.

En general, un modelo es más simple que lo que representa, describe la situación real de manera incompleta, aproximada e inexacta. El secreto, si es que en realidad lo hay, está en saber cuáles son los límites del modelo. Esas representaciones del sistema nos resultan simples y funcionales, lo que permite que podamos desenvolvernos en nuestro entorno. Por el contrario, los científicos y los ingenieros modelan las situaciones en estudio recorriendo un camino más sistemático, además de los modelos conceptuales propios de las ciencias básicas, se emplean modelos empíricos, simulaciones, y aún en ciertas ocasiones modelos idealizados.

En el cursado de las carreras de grado se accede a las herramientas básicas referidas al como modelar, pero en nuestra opinión falta desarrollo en lo referente a un marco teórico que sustente dicha acción. O bien los desarrollos teóricos están fragmentados, es decir, son específicos de cada área o disciplina. En éste trabajo se pretende por lo menos contribuir a un desarrollo teórico general de la modelización; que conste de elementos epistemológicos, conceptuales y metodológicos, estos últimos no son profundizados por lo dicho anteriormente.

Elaboramos un sustento teórico que reúne los elementos necesarios para la modelación y simulación en el área de la química, con los recursos que estén a nuestra disposición. Esto último tiene que ver con que hay una gran cantidad de simuladores en química, pero que no siempre están al alcance de un docente y mucho menos de un alumno de nivel universitario.

3. INTRODUCCIÓN:

La importancia de la modelación radica en que es una actividad inherente al ser humano, comienza con cualquier exploración que hacemos del mundo real y que nos permite aprehenderlo, creando representaciones internas del mismo. Tanto la modelación como la simulación han tenido un gran desarrollo en el campo de la informática y la electrónica, en la actualidad su uso se ha extendido a prácticamente todas las ramas de las ciencias y la ingeniería. La modelación por medio de

computadoras (simulación)¹ permite representar en el modelo todas las variables que alteran el comportamiento general del sistema y que generalmente se las deja de lado por problemas de complejidad. El investigador se concentra en la descripción del sistema que va a simular, y no en la definición del entorno. Es posible, una vez construido un modelo, obtener una amplia gama de resultados en un lapso de tiempo muy corto. La extensión del período a simular se define, en función de las necesidades y en el momento en que se quieren obtener los resultados.

Todas las actividades del ser humano están de una u otra manera relacionadas con diferentes disciplinas, las que se fundamentan en conceptos y desarrollos científicos o tecnológicos, que operan en constante accionar entre la abstracción y realización práctica. Al objeto actual de tal accionar lo llamaremos proceso, y a su abstracción sistema. A pesar de que la relación entre sistema y proceso es íntima, no es única, en efecto, para un proceso determinado existen diversas representaciones de sistemas dependiendo de los objetivos de la abstracción, incluso de la disciplina. En general un sistema puede definirse como una colección de objetos relacionados entre sí por algún tipo de interacción o interdependencia. A estos objetos podemos llamarlos unidades básicas o también elementos, y pueden ser sustancias, resistencias, condensadores, resortes, y cada reunión de ellos que presente propiedades definidas y características en relación con el análisis se los llama subsistemas (Duarte Mermoud, Manuel A., 2005). Un sistema es abierto cuando algunos de sus elementos interactúan con elementos externos a él, y cerrado si no ocurre tal cosa. En realidad, no existen sistemas cerrados salvo el Universo completo. En la práctica, las fronteras de un sistema, son establecidas de acuerdo a los objetivos pretendidos.

Un sistema está dotado de ciertos atributos que lo caracterizan, los cuales pueden ser medibles o no. El estudio del comportamiento de los atributos medibles de un sistema puede realizarse ya sea experimentando directamente con el sistema o sobre la base de un modelo. El modelo es una forma de identificar al fenómeno o proceso, y desde él podemos describir al sistema, identificar sus atributos medibles, y encontrar las relaciones entre éstos y el comportamiento del sistema. En la práctica se dan muchos casos en los cuales la experimentación directa no es posible, y el análisis mediante modelos es más conveniente, desde varios puntos de vista: tiempo, costos, recursos, etc. Resulta de interés, entonces, formularse algunas preguntas básicas destinadas a obtener un modelo de un determinado sistema.

Según el objetivo que se persigue con el análisis y según el medio en que se considera al sistema, sus atributos pueden distinguirse en relevantes e irrelevantes. Los atributos relevantes son aquellas variables que interesan según nuestro objetivo particular. Los atributos irrelevantes son aquellos que en nada influyen en lo que deseamos determinar². Por ejemplo, si se desea estudiar el comportamiento de un sistema mecánico masa-resorte sometido a una fuente de energía calórica, interesarán atributos como flujos calóricos, temperaturas, superficies, tipos de materiales.

¹ A menudo se denomina simulación al modelado por computadora, nosotros la entendemos como la iteración del modelo, manipulando las variables que intervienen.

² Aquí es donde el científico decide que atributos son relevantes y cuales no, es decir pone en juego sus esquemas conceptuales para modelar al sistema en estudio. Porque modelar no solo significa “entender” el sistema modelado sino decidir que se va a entender.

En este trabajo consideramos a los sistemas físicos o reales, como objeto de análisis, centrándonos principalmente en lo referente a los fenómenos o procesos químicos y fisicoquímicos. Estos sistemas pueden clasificarse de acuerdo a diversos criterios, como por ejemplo, la naturaleza de los parámetros, la naturaleza de las variables, el dominio de definición de las variables. Un sistema de este tipo presenta entonces varios modelos, los cuales difieren tanto en el rango de validez como en el grado de aproximación con que reflejan la realidad.

4. OBJETIVOS:

- Contribuir al desarrollo de un marco teórico sobre la modelización, para ser utilizada en nuestro medio.
- Demostrar la importancia de la modelación en las ciencias y en ingeniería.
- Desarrollar un modelo a modo de ejemplo utilizando las herramientas disponibles.

5. METODOLOGÍA:

Hemos utilizado un enfoque netamente exploratorio, y la herramienta fundamental ha sido la búsqueda de bibliografía relevante, actual, pertinente y aplicable.

La metodología de trabajo consiste en una primera parte netamente teórica que consistió en: la revisión de la literatura correspondiente: lo que implica explorar toda la bibliografía que trate la temática y la adopción de una teoría o desarrollo de una perspectiva teórica: posicionarse en una corriente teórica o un enfoque teórico (en nuestro caso creemos conveniente un enfoque desde el análisis de los sistemas).

Una segunda parte, donde se desarrollan y describen brevemente algunos modelos utilizados en ciencias químicas a modo de ilustración y ejemplificación. En esta etapa, se utilizan las herramientas de la primera parte, junto con la metodología para el diseño, desarrollo e implementación de un modelo. Lo que permite analizar el modelo y valorizarlo como una importante herramienta de investigación.

La parte que consideramos más relevante, sin duda es la primera donde se desarrolla un marco teórico, a partir de la visión de diversos autores de profesiones afines (científicos, educadores y profesionales).

6. RESULTADOS:

En cuanto a los aspectos epistemológicos de la modelación, se pudo establecer su relación con la noción de paradigma, por considerarlo fundamental y hasta incluso del término modelo, debido a que muchas veces ambos términos se refieren a lo mismo. Kuhn (1992) reagrupa los diversos usos del término paradigma en dos sentidos principales. Uno es global y comprende todos los compromisos compartidos por un grupo científico, la completa constelación de creencias, valores, técnicas y demás elementos compartidos por los miembros de una comunidad científica dada. Es lo que llama Matriz disciplinar. El segundo es concreto y denota un componente específico del

anterior, y lo denomina ejemplar. Entre los expertos el término se ha usado en el sentido global.

Una matriz disciplinar es por lo tanto compartido por una comunidad científica, lo que guía en un momento dado su investigación normal. Y sus principales componentes son: generalizaciones simbólicas, modelos, valores, ejemplares. Para los fines de este trabajo los dos primeros componentes y el cuarto son los más adecuados, no por ser menos importante el tercer componente (valores), sino por considerarlas más pertinentes a los demás.

Generalizaciones simbólicas: Es el componente formal o fácilmente formalizable de la matriz disciplinar y comprende, aproximadamente, las tradicionales leyes. A menudo se encuentran ya en forma simbólica, como $f = m \cdot a$; pero también pueden venir expresadas en palabras, como “la acción es igual a la reacción”. Estas generalizaciones simbólicas, consideradas aisladamente, funcionan como expresiones de un sistema matemático puro de uso compartido por los miembros de una comunidad científica; como mero formalismo abstracto, son expresiones vacías de significado o aplicación empírica.

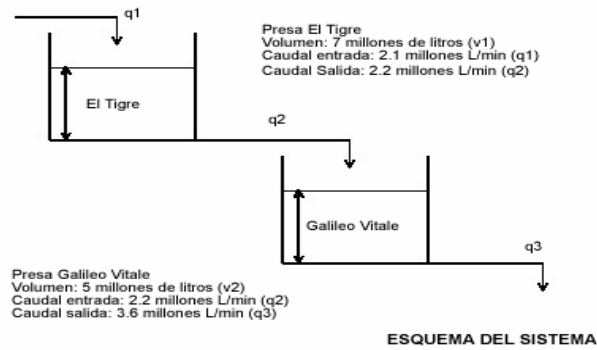
Modelos: Kuhn usa el término “modelo” en el sentido de imagen, algo a lo que se puede asimilar otra cosa, por ejemplo cuando decimos que una computadora es un modelo de mente o bien la asimilación del comportamiento de un gas con el de un conjunto de pequeñas bolas en movimiento.

Ejemplares: este es el componente más importante, junto con las generalizaciones simbólicas, de la matriz. Los ahora llamados ejemplares son paradigmas en sentido etimológico: casos que hacen de modelo, ejemplos modélicos. Los ejemplares son aplicaciones empíricas específicas del aparato formal que sirven de modelo o guía para el trabajo de resolución de rompecabezas, para otras aplicaciones; son las “partes de la realidad” a las que típicamente se aplica el formalismo. Pueden ser logros especialmente importantes de la teoría, como la aplicación al sistema solar de la mecánica newtoniana, o la aplicación al perihelio de Mercurio de la mecánica relativista, etc. Mediante los ejemplares se ven situaciones nuevas como semejantes a otras anteriores bien establecidas. Se ven fenómenos diferentes de modo similar, como casos de aplicación de una misma ley; por ejemplo se puede ver el movimiento de un péndulo como semejante, con ciertas idealizaciones, al de una bola moviéndose en un doble plano inclinado.

6.1. Ejemplo de modelación utilizando Mathematica®.

Tomaremos dos presas; una (Presa El Tigre), que está ubicada aguas arriba de la otra (Presa Galileo Vitale) y consideramos un contaminante, por ejemplo Uranio y tomamos como cantidad de contaminante volcado el valor máximo permitido para consumo humano 100 microgramos por litro ($\mu\text{g}/L$) de agua. También tomamos en cuenta los valores permitidos para algunos otros fines, para vida acuática: 20 microgramos por litro de agua, para consumo de ganado: 200 microgramos por litro de agua, para irrigación 10 microgramos por litro de agua ($\mu\text{g}/L$). El sistema que modelamos consta de la Presa Compensadora El Tigre y la Presa de Derivación Galileo Vitale (que también podría ser la Presa de Derivación Vidalino) como dos recipientes que abastecen luego a respectivos canales matrices, canales primarios, ramas o canales secundarios y ramos o hijuelas. La razón por la que elegimos este sistema es debido a la gran polémica

que ha surgido en nuestra zona por la posible reapertura de la mina de Sierra Pintada, que por su ubicación hipotéticamente contaminaría los afluentes del río Diamante.



Planteamos una ecuación para el subsistema: Presa Compensadora El Tigre (1) y también una ecuación para el subsistema: Presa de Derivación Galileo Vitale (2).

$$u'[t] == c_1 q_1 - \frac{q_2 u[t]}{v_1} \quad (1)$$

$$w'[t] == \frac{q_2 u[t]}{v_1} - \frac{q_3 w[t]}{v_2} \quad (2)$$

En este paso se hace una adecuación del sistema original al modelo del sistema. Hemos decidido que analizaremos la concentración del contaminante en la presa El Tigre, descartando posibles interacciones entre éste y cualquier otro elemento presente en el sistema. En estas condiciones la única variable que nos interesa analizar es la contaminación, en relación con el tiempo, básicamente en cuanto tiempo el agua estará dentro de los límites de cantidades de contaminante.

Hemos interpretado al sistema como del tipo dinámico, las otras variables que tendremos en cuenta son los caudales de entrada en cada uno de los subsistemas (presas) y los caudales de salida. Cada una de las presas tienen una capacidad de retención de agua, también la debemos tener en cuenta, la expresaremos en litros.

Ingresamos los datos al modelo matemático obtenido, lo que nos permite obtener las ecuaciones generales para los dos compartimentos (El Tigre, Vidalino).

$$u'[t] == 0.21 - 0.314286 u[t] \quad (3)$$

$$w'[t] == 0.314286 u[t] - 0.72 w[t] \quad (4)$$

Es fundamental conocer las condiciones iniciales del sistema modelado, es este caso hemos considerado, el máximo permitido por la legislación ambiental, una concentración inicial de Uranio de $100000 \mu\text{g} / L$ o $100 \text{ mg} / L$

$$\{u[0] == 100, w[0] == 0\} \quad (5)$$

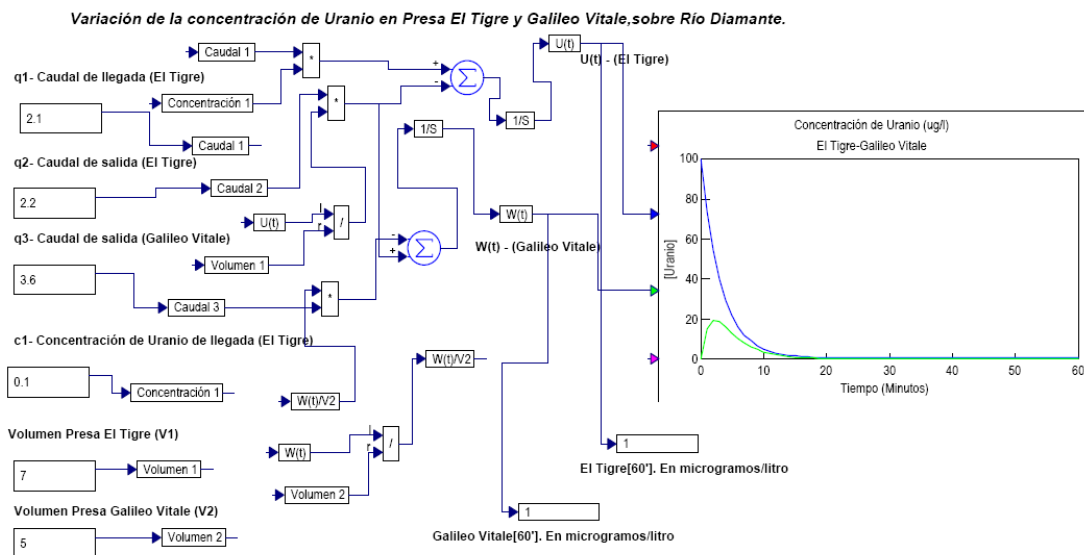
$$\left\{ u'[t] == c_1 q_1 - \frac{q_2 u[t]}{v_1}, w'[t] == \frac{q_2 u[t]}{v_1} - \frac{q_3 w[t]}{v_2}, \{u[0] == 100, w[0] == 0\} \right\} \quad (6)$$

Con las condiciones iniciales ingresadas a los modelos, debemos ahora obtener un modelo que relacione ambos sistemas, como ocurre con el sistema real que estamos modelando ecuaciones (7) y (8).

$$\begin{cases} u'[t] == 0.21 - 0.314286 u[t], \\ w'[t] == 0.314286 u[t] - 0.72 w[t], \{u[0] == 100, w[0] == 0\} \end{cases} \quad (7)$$

$$\begin{cases} u[t] \rightarrow 0.668182 \cdot 2.71828^{-0.314286 t} (148.66 + 1.271828 \cdot 0.314286 t), \\ w[t] \rightarrow 76.9472 \cdot 2.71828^{-1.75429 t} (-1.00379 \cdot 2.71828^{1.03429 t} + 1.44284 \times 10^{-18} \cdot 2.71828^{1.34857 t} + 1.271828^{1.44 t} + 0.00379048 \cdot 2.71828^{1.75429 t}) \end{cases} \quad (8)$$

En la Presa El Tigre y en Galileo Vitale la cantidad de uranio nunca llegará a ser cero, ya que consideramos una contaminación constante. Hay que tener en cuenta que no consideramos índices de contaminación con concentraciones mayores en forma intermitente, la simulación nos permite modificar las variables y analizar el comportamiento a medida que cambiamos los valores de las variables intervinientes.



7. CONCLUSIONES:

Cuando realizamos un modelo, no hay nada que nosotros, el modelador, no pongamos en él. Es decir, el modelo es obra de un sujeto, y a ese sujeto se refiere, con todo lo que ello implica; y no importa que tan elevada sea la creatividad del sujeto, la complejidad del modelo construido siempre estará por debajo de la cosa modelada, será más simple. El modelo construido es un modelo real del objeto, que incluye hipótesis acerca de su naturaleza, las cuales deben estar claramente explicitadas al formular las bases del modelo, para establecer su rango de validez. Un modelo puede estar perfectamente formulado y resuelto matemáticamente, pero no corresponderse con el sistema real, ya que las conclusiones que se pueden extraer del modelo para el sistema original podrían ser derivadas a partir de las propiedades que son exclusivas del modelo y no del sistema modelado. Entonces nunca debemos dar a un modelo un valor que vaya mas allá de las hipótesis que dieron origen a su formulación.

Consideramos que los hechos, fenómenos y procesos, en definitiva los sistemas pueden ser siempre explicados por hipótesis teóricas radicalmente diversas (varios modelos), es decir ya no perseguimos una verdad absolutamente objetiva, sino una verdad condicionalmente objetiva.

Es posible realizar modelaciones y simulaciones válidas con recursos que están al alcance de cualquier estudiante universitario y contrastarlas con datos reales, esto permitiría no solamente explicar y describir fenómenos sino también predecir comportamientos.

8. BIBLIOGRAFÍA:

- Buch, Tomás (1999). Sistemas Tecnológicos. Contribuciones a una Teoría General de la Artificialidad. Aique Grupo Editor. Cap.7, pp. 227-269.
- Duarte Mermoud, Manuel A. (2005). Introducción a la Modelación y el Análisis de Sistemas. Departamento de Ingeniería Eléctrica. Universidad de Chile. [Disponible: www.cipes.cec.uchile.cl]
- Ferrari, Héctor R. (2005). Ciencia, complejidad y caos. Congreso Nacional Enseñanza de Ciencia y Tecnología en el nuevo milenio. Mayo 2005. San Rafael. Mendoza.
- Giorgi S.; Concari S. (2005). Los Modelos Didácticos en Carreras de Ingeniería. Marzo 2005. Congreso Latinoamericano de Ingeniería y Ciencias Aplicadas. San Rafael, Mendoza.
- Hillier, F. S. y Lieberman, G. J. (2000). Introduction to Operations Research. Ed. Mc Graw Hill. México D.F. 7ª Edición.
- Klimovsky, G. (1997). Las desventuras del conocimiento científico. Una introducción a la epistemología. AZ editora. 3ª Edición. Buenos Aires.
- Kuhn, T.S. (1992). La estructura de las revoluciones científicas. México - Buenos Aires, Breviarios del Fondo de Cultura Económica.
- Levenspiel, O. (2003). Ingeniería de las reacciones químicas. Título original: Chemical Reaction Engineering. Ed. Reverté. México
- Monk, S. (1992). "Students' understanding of a function given by a physical model". In The concept of Function Aspects of Epistemology and Pedagogy, Harel g. & Dubinsky E. (eds.), Mathematical Association of America, USA.
- Pazos Arias, J.J., Suárez González, A., y Díaz Redondo, R.P.(2003). Teoría de Colas y simulación de Eventos Discretos. Pearson Educación S.A. Madrid.
- Planchart O. (2002). La visualización y modelación en al adquisición del concepto de función. Tesis doctoral. Instituto de Ciencias de la Educación. Unidad de Matemática Educativa. Cuernavaca, México.
- Samaja J. (1999). Epistemología y Metodología. Elementos para una teoría de investigación científica. 3ª Edición. Ed. Eudeba. Buenos Aires.
- Wainer, Gabriel A. (2003). Metodologías de modelización y simulación de eventos discretos. Ed. Nueva Librería S.R.L. Buenos Aires.