

Capítulo 1

Introducción

Simulación y Optimización

Cuando alguien tiene la responsabilidad de conducir un sistema dado, como por ejemplo: un banco, una ciudad, y en especial una planta química, debe tomar continuamente decisiones acerca de las acciones que ejecutará sobre el sistema. Estas decisiones deben ser tales que la conducta resultante del sistema satisfaga de la mejor manera posible los objetivos planteados.

Para valorar la importancia de lo planteado, analice el siguiente problema. El gobierno de un país debe decidir la distribución del presupuesto anual, ¿cuánto debe asignar a educación?, ¿cuánto a salud?, ¿cuánto a subsidios?. Es algo difícil de decidir si no se conoce perfectamente la forma en que el país será afectado por cada alternativa analizada. Sin esta información es imposible defender alguna alternativa; si se favorece la educación a costa de la salud, el peligro es evidente a corto plazo; si se procede en el sentido opuesto, el peligro será evidente a largo plazo. Peor aún, tomada la decisión, y pasado el año de aplicación del presupuesto, tanto los ciudadanos como el gobierno no podrán determinar cuán adecuado fue el presupuesto del año anterior porque no sabrán si existía una mejor alternativa posible para las condiciones que presentaba el país en el momento en que se tomó la decisión. Aparentemente, no queda más remedio que experimentar con cada una de las alternativas a riesgo de hacer desaparecer el país.

Para poder decidir correctamente es necesario saber cómo responderá el sistema ante una determinada acción. Esto podría hacerse por experimentación con el sistema mismo; pero, como quedó de manifiesto en el ejemplo anterior, factores de costos, seguridad y otros hacen que esta opción generalmente no sea viable. A fin de superar estos inconvenientes, se reemplaza el sistema original por otro sistema que, en la mayoría de los casos, es una versión simplificada. Este último sistema, denominado *modelo*, es utilizado para llevar a cabo las experiencias necesarias sin los inconvenientes planteados anteriormente. Al proceso de experimentar con un modelo se denomina *simulación*. Al dispositivo completo utilizado, modelo y accesorios (sensores, registradores, indicadores, etc.), se llama *simulador*. Por ejemplo, cuando se diseña un puente es común realizar estudios sobre una maqueta del mismo a fin de determinar la frecuencia de resonancia, y evitar así que se destruya por acción del viento. Es también práctica generalizada utilizar maquetas de aviones o de autos para realizar estudios en túneles de vientos a fin de determinar características aerodinámicas. En la industria química, las plantas piloto son utilizadas para ensayar nuevos procesos antes de implementarlos en las plantas reales.

Si el simulador puede reemplazar al sistema real, entonces se denomina *emulador*. Ejemplos de emulación se presentan en el área informática. En efecto, los programas que emulan Windows para computadoras Apple se comportan exactamente igual que el programa original para PC, los programas que simulan consolas de juegos hacen que la computadora sea totalmente equivalente a las consolas emuladas.

Por otra parte, determinar la acción que debe realizarse sobre el sistema para que este cumpla de la mejor manera posible con los objetivos deseados es misión de la *optimización*. Generalmente, los sistemas en estudio son tan complejos que la solución analítica de este problema no es posible. Por lo tanto, la optimización debe llevarse a cabo a partir de resultados experimentales. Es aquí donde la simulación encuentra su primera aplicación ya que es capaz de proveer los datos necesarios a un mínimo costo y sin riesgo. Las técnicas o métodos de optimización están diseñados para tomar la mejor decisión requiriendo la menor cantidad de experimentos.

La Figura 1 muestra cómo se vinculan generalmente la optimización con la simulación. Para un sistema dado, por ejemplo un reactor, durante el proceso de optimización el método de optimización elegido propone una determinada acción, por ejemplo ajustar el *set point* del controlador de temperatura a 70 °C. La posible respuesta del sistema a la acción propuesta es obtenida por simulación. Dicha respuesta es evaluada de acuerdo a un determinado criterio, por ejemplo ¿mejoró la producción del reactor?. Si la respuesta no es lo suficientemente buena, se propone una nueva acción, por ejemplo llevar la temperatura a 80 °C. Este ciclo se repite hasta encontrar la acción que produce una respuesta que satisface de la mejor forma posible el criterio de evaluación, para este caso: la producción del reactor. Esta acción y la correspondiente respuesta es el producto final de un estudio de optimización; por ejemplo: se debe llevar la temperatura a 75 °C para obtener la máxima producción que será igual a 100 kg/hr.

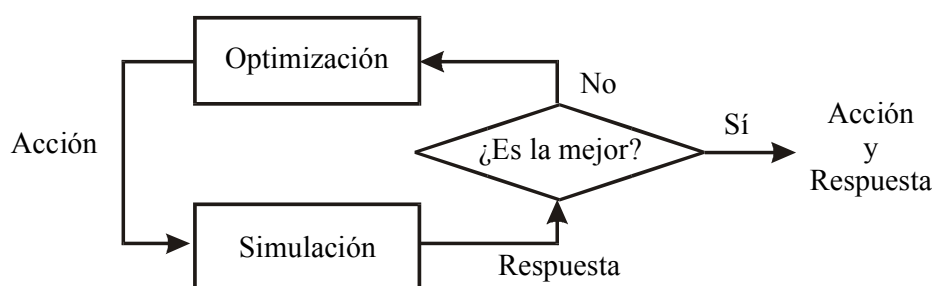


Figura 1: Relación entre optimización y simulación.

Otra aplicación común de la simulación es el *entrenamiento* o *capacitación*. Nuevamente, son sus características de bajo costo y falta de riesgo las que hacen que la simulación sea una herramienta ideal para esta tarea. En esta área se puede citar la capacitación de pilotos de aviones en simuladores constituidos por réplicas de cabinas reales instaladas sobre sistemas neumáticos que reproducen los movimientos de los aviones en vuelo. Un dispositivo similar se utiliza para entrenar a los astronautas para practicar el aterrizaje de los transbordadores. Una de las ventajas más importantes de los simuladores para el campo de la capacitación es su capacidad de reproducir situaciones poco probables y de alto riesgo; como por ejemplo: la rotura de un motor de un avión, fuertes tormentas, fallas de los sistemas eléctricos, etc. Esta característica brinda la oportunidad de desarrollar un plan de capacitación completo que permita adquirir experiencia para enfrentar situaciones extremas de baja probabilidad pero sumamente críticas.

Aplicaciones de la simulación

A pesar de las numerosas ventajas que tiene la simulación, no siempre es la herramienta más adecuada. Para decidir si conviene o no emplearla, se deben analizar sus ventajas y desventajas. La simulación es de utilidad en las siguientes situaciones:

- **No existe una formulación matemática:** Muchos sistemas reales no pueden ser modelados matemáticamente con las herramientas actualmente disponibles; por ejemplo, la conducta de un cliente de un banco.
- **Existe una formulación matemática pero es difícil obtener una solución analítica:** Los modelos matemáticos utilizados para modelar un reactor nuclear o una planta química son imposibles de resolver en forma analítica sin realizar serias simplificaciones.
- **No existe el sistema real:** Es el problema del ingeniero que tiene que diseñar un equipo nuevo o una nueva planta. El diseño del sistema mejorará notablemente si se cuenta con un modelo adecuado para realizar experimentos.
- **Los experimentos son imposibles debido a impedimentos económicos, de seguridad, de calidad o éticos:** En este caso, el sistema real está disponible para realizar experimentos, pero la dificultad de los mismos hace que se descarte esta opción. Un ejemplo de esto es la imposibilidad de provocar fallas en un avión real para evaluar la conducta del piloto.
- **El sistema evoluciona muy lentamente o muy rápidamente:** Un ejemplo de dinámica lenta es el problema de los científicos que estudian la evolución del clima. Ellos deben predecir la conducta futura del clima dadas las condiciones actuales, no pueden esperar que un tornado arrase una ciudad para luego dar el mensaje de alerta. Por el contrario, existen fenómenos muy rápidos que deben ser simulados para poder observarlos en detalles, por ejemplo una explosión.

Entre las posibles desventajas de la simulación se pueden citar:

- **El desarrollo de un modelo puede ser costoso, laborioso y lento:** El desarrollo de un simulador implica tiempo, esfuerzo y dinero. Cuando el sistema a simular existe, siempre está presente la tentación de experimentar directamente con él en lugar de enfrentar el desarrollo de un simulador.
- **Existe la posibilidad de cometer errores:** Nunca se debe olvidar que la experimentación se lleva a cabo con un modelo y no con el sistema real; entonces, si el modelo está mal o se cometen errores en su manejo, los resultados también serán incorrectos.
- **No se puede conocer el grado de imprecisión de los resultados:** Por lo general, el modelo se utiliza para experimentar situaciones nunca planteadas en el sistema real; por lo tanto, no existe información previa para estimar el grado de correspondencia entre la respuesta del modelo y la del sistema real. Este problema se puede atenuar de diversas formas. Cuando el sistema a simular no existe se puede recurrir a sistemas similares existentes para comparar su conducta con la predicha por el simulador. Cuando el sistema a simular existe pero nunca fue expuesto a las condiciones que se desean simular, se puede evaluar la conducta del simulador estudiando condiciones históricas del sistema para las cuales sí se conoce cómo respondió el sistema.

Actualmente la simulación presta un invaluable servicio en casi todas las áreas posibles, algunas de ellas son:

- **Procesos de manufacturas:** Ayuda a detectar cuellos de botellas, a distribuir personal, determinar la política de producción.
- **Plantas industriales:** Brinda información para establecer las condiciones óptimas de operación, y para la elaboración de procedimientos de operación y de emergencias.
- **Sistemas públicos:** Predice la demanda de energía durante las diferentes épocas del año, anticipa el comportamiento del clima, predice la forma de propagación de enfermedades.

- **Sistemas de transportes:** Detecta zonas de posible congestionamiento, zonas con mayor riesgo de accidentes, predice la demanda para cada hora del día.
- **Construcción:** Predice el efecto de los vientos y temblores sobre la estabilidad de los edificios, provee información sobre las condiciones de iluminación y condiciones ambientales en el interior de los mismos, detecta las partes de las estructuras que deben ser reforzadas.
- **Diseño:** Permite la selección adecuada de materiales y formas. Posibilita estudiar la sensibilidad del diseño con respecto a parámetros no controlables.
- **Educación:** Es una excelente herramienta para ayudar a comprender un sistema real debido a que puede expandir, comprimir o detener el tiempo, y además es capaz de brindar información sobre variables que no pueden ser medidas en el sistema real.
- **Capacitación:** Dado que el riesgo y los costos son casi nulos, una persona puede utilizar el simulador para aprender por sí misma utilizando el método más natural para aprender: el de prueba y error.

La importancia de la simulación es evidente al considerar algunas aplicaciones que hicieron historia:

- **El regreso del Apolo 13:** La simulación jugó un rol fundamental en la determinación del plan de emergencia. La nave retornó con éxito a pesar de las graves averías.
- **Los Voyagers:** Gracias a la simulación se pudieron establecer los itinerarios óptimos para estas naves con un mínimo consumo de energía aprovechando la atracción gravitacional de los planetas.
- **Proyecto Monte Carlo:** Von Newman y Ulam (1945) emplearon simulación para estudiar reacciones nucleares.
- **Capacitación de tropas:** En el operativo “Tormenta del desierto” llevado a cabo en la guerra contra Irak, las tropas de todas las fuerzas estadounidenses que participaron (fuerza aérea, marina y ejército) fueron entrenadas con simuladores.

Simulación por computadora

Este libro se centrará en la simulación por computadoras. Un programa de simulación por computadora está compuesto por las siguientes partes:

- **Un modelo:** Es un modelo simbólico. Puede ser un conjunto de ecuaciones, reglas lógicas o un modelo estadístico.
- **El evaluador:** Es el responsable de procesar el modelo para obtener los resultados de la simulación. Puede contener rutinas para la resolución de sistemas de ecuaciones, generadores de números aleatorios, rutinas estadísticas, etc.
- **La interfaz:** Es la parte dedicada a interactuar con el usuario, recibe las acciones del mismo y presenta los resultados de la simulación en una forma adecuada. Por lo general, será una interfaz gráfica, como la mayoría de los programas Windows, donde se presentarán gráficos, tablas, botones, cursores, etc.; es decir, todos los elementos necesarios para facilitar al usuario el ingreso de datos y el acceso a los resultados. Más aún, a fin de aumentar el realismo, la interfaz puede llegar a ser física como es el caso de la cabina utilizada en los simuladores de vuelos profesionales.

Por simplicidad, a lo largo de este libro la simulación por computadora y el programa de simulación por computadora se llamarán simplemente simulación y simulador, respectivamente.

Resolución analítica vs. simulación

Como se planteó en la sección anterior, una parte fundamental de un simulador es un modelo simbólico. Algunos modelos simbólicos pueden resolverse analíticamente haciendo innecesaria o poco conveniente la simulación. En efecto, una solución analítica es preferible a una simulación porque da una visión integral sobre la conducta del sistema. Variando sus parámetros es posible identificar fácilmente cambios importantes en el comportamiento, detectar puntos críticos y sacar conclusiones generales para el tipo de sistema analizado. Por ejemplo, la solución analítica del movimiento pendular permite concluir que el periodo (T) de cualquier péndulo es independiente de la posición inicial, pero depende de la longitud (l) del mismo:

$$T = \pi \sqrt{\frac{l}{g}} \quad (1)$$

En el caso del movimiento de un resorte horizontal en el piso (Figura 2), variando el coeficiente de fricción se puede identificar dos tipos de respuestas características: la oscilatoria (con fricción nula) y la oscilatoria amortiguada (con fricción no nula).

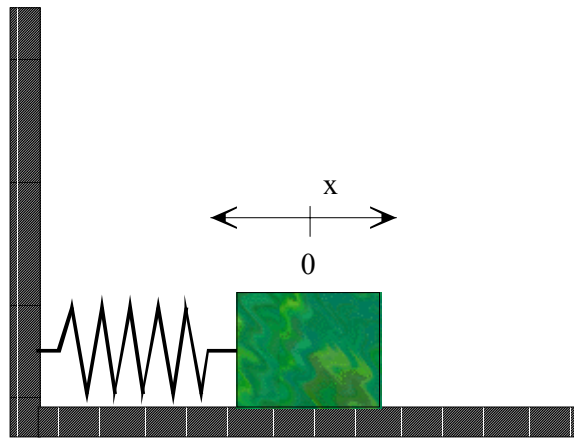


Figura 2: Resorte con fricción.

Cuando se desea calcular las raíces del polinomio cuadrático:

$$P(x) = ax^2 + bx + c \quad (2)$$

se dispone de la siguiente solución analítica:

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (3)$$

Esta solución analítica permite calcular fácilmente las nuevas raíces cuando se varían los coeficientes del polinomio. También, es claro que habrá problemas cuando el argumento de la raíz cuadrada se haga negativo.

Sin embargo, no siempre es posible obtener una solución analítica, ya sea por la naturaleza del modelo o de los experimentos que se desean realizar; en este caso, el modelo deberá ser tratado por algún tipo de método numérico; es decir, se debe recurrir a la simulación. En ese estudio, el modelo será resuelto para un caso particular; y la solución será un número, un vector o una matriz, pero no se tendrá una función analítica. Debido a esto, el análisis de los resultados es más complejo que el requerido por una solución analítica.

Etapas de una simulación

En el desarrollo de una simulación se pueden distinguir las siguientes etapas (Banks *et al.*, 1996):

- **Formulación del problema:** En este paso debe quedar perfectamente establecido el objetivo de la simulación. El cliente y el desarrollador deben acordar lo más detalladamente posible los siguientes factores: los resultados que se esperan del simulador, el plan de experimentación, el tiempo disponible, las variables de interés, el tipo de perturbaciones a estudiar, el tratamiento estadístico de los resultados, la complejidad de la interfaz del simulador, etc. Se debe establecer si el simulador será operado por el usuario o si el usuario sólo recibirá los resultados. Finalmente, se debe establecer si el usuario solicita un trabajo de simulación o un trabajo de optimización. Esto es muy importante porque el usuario puede no conocer, y no tiene por qué hacerlo, la diferencia entre simular y optimizar. Por ejemplo, si el estudio es sobre los efectos causados por cambios de calidad de la materia prima sobre la producción de una planta, es necesario establecer claramente si se desean determinar los posibles efectos causados por estos cambios de calidad, o si se desean determinar las nuevas condiciones de operación para que la planta responda de la mejor manera posible ante estos cambios. En el primer caso se plantea un estudio de simulación mientras que el segundo se plantea un estudio de optimización.
- **Definición del sistema:** El sistema a simular debe estar perfectamente definido. El cliente y el desarrollador deben acordar dónde estará la frontera del sistema a estudiar y las interacciones con el medio ambiente que serán consideradas.
- **Formulación del modelo:** Esta etapa es un arte y será discutida más adelante. La misma comienza con el desarrollo de un modelo simple que captura los aspectos relevantes del sistema real. La formulación del problema condicionará fuertemente esta etapa; para un ingeniero de seguridad los aspectos relevantes de un automóvil son diferentes de los aspectos considerados por un ingeniero mecánico para el mismo sistema. Este modelo simple se irá enriqueciendo como resultado de varias iteraciones.
- **Colección de datos:** La naturaleza y cantidad de datos necesarios están determinadas por la formulación del problema y del modelo. Los datos pueden ser provistos por registros históricos, experimentos de laboratorios o mediciones realizadas en el sistema real. Los mismos deberán ser procesados adecuadamente para darles el formato exigido por el modelo.
- **Implementación del modelo en la computadora:** El modelo es implementado utilizando algún lenguaje de computación. Existen lenguajes específicos de simulación que facilitan esta tarea; también, existen programas que ya cuentan con modelos implementados para casos especiales.
- **Verificación:** En esta etapa se comprueba que no se hayan cometido errores durante la implementación del modelo. Para ello, se utilizan las herramientas de *debugging* provistas por el entorno de programación.
- **Validación:** En esta etapa se comprueba la exactitud del modelo desarrollado. Esto se lleva a cabo comparando las predicciones del modelo con: mediciones realizadas en el sistema real, datos históricos o datos de sistemas similares. Como resultado de esta etapa puede surgir la necesidad de modificar el modelo o recolectar datos adicionales.
- **Diseño de experimentos:** En esta etapa se decide las características de los experimentos a realizar: el tiempo de arranque, el tiempo de simulación y el número de simulaciones. No se debe incluir aquí la elaboración del conjunto de alternativas a

probar para seleccionar la mejor, la elaboración de esta lista y su manejo es tarea de la optimización y no de la simulación. Por este motivo, debe quedar claro cuando se formula el problema si el cliente desea en realidad un estudio de simulación o uno de optimización.

- **Experimentación:** En esta etapa se realizan las simulaciones de acuerdo al diseño previo. Los resultados obtenidos son debidamente recolectados y procesados.
- **Interpretación:** Se analiza la sensibilidad del modelo con respecto a los parámetros que tienen asociados la mayor incertidumbre. El modelo será sensible a determinados parámetros si para pequeños cambios en los valores de los mismos las respuestas varían notablemente. Si es así, se deberán recolectar datos adicionales para refinar la estimación de los parámetros críticos. Por ejemplo, si los resultados de la simulación de una reacción química son muy sensibles a la energía de activación de la misma; entonces, se deberá regresar a la etapa de recolección de datos para mejorar la precisión de dicho parámetro, y desde allí repetir todo el proceso.
- **Implementación:** Conviene acompañar al cliente en la etapa de implementación para evitar el mal manejo del simulador o el mal empleo de los resultados del mismo. Este es un peligro potencial originado en el desconocimiento del cliente sobre las limitaciones y alcances del simulador utilizado; por lo tanto, se deberá evitar que los resultados se utilicen más allá del rango de aplicación considerado en el estudio.
- **Documentación:** Incluye la elaboración de la documentación técnica y manuales de uso. La documentación técnica debe contar con una descripción detallada del modelo y de los datos; también, se debe incluir la evolución histórica de las distintas etapas del desarrollo. Esta documentación será de utilidad para el posterior perfeccionamiento del simulador.

Sistemas

De todo lo planteado, es evidente que la definición del sistema a analizar, y de sus características, es de gran importancia para realizar exitosamente un estudio de simulación. Un *sistema* es una sección de la realidad que es el foco primario de un estudio y está compuesto de *componentes* que interactúan con otros de acuerdo a ciertas reglas dentro de una *frontera* identificada para el propósito del estudio. Un sistema puede realizar una función que no es realizable por sus componentes individuales. El conjunto de actividades que se llevan a cabo dentro de un sistema se denomina *proceso*. Un sistema puede ser o físico o simbólico, sólo uno de los dos. Las ciencias matemáticas y lógicas trabajan con estos últimos.

Los objetos o componentes que forman parte del sistema se denominan *entidades*, por ejemplo: un auto está compuesto por un motor, ruedas, carrocería, etc. Estas entidades poseen propiedades denominadas *atributos*, por ejemplo: la potencia del motor, y se relacionan entre sí a través de *relaciones* o *funciones*. Estas relaciones pueden ser:

- **Estáticas o estructurales:** un auto posee cuatro ruedas.
- **Dinámicas o funcionales:** un auto consume nafta si se enciende el motor.

Los valores asumidos por los atributos de las entidades en un momento dado determinan el *estado* del sistema. El estado puede ser *estático* o *estacionario* si se mantiene constante en el tiempo; o por el contrario, puede ser *dinámico* o *transitorio* si evoluciona con el tiempo. Un sistema puede presentar los dos tipos de conductas; generalmente, cuando inicia su funcionamiento pasa por un estado dinámico y luego alcanza un estado estacionario o de régimen.

Un estado estacionario es *estable* si el sistema retorna a él luego de una perturbación. Por el contrario, un estado estacionario es *inestable* si el sistema se aleja de él luego de una perturbación. Este alejamiento puede dar lugar a una respuesta *acumulativa* (crece o decrece continuamente, o alcanza otro estado estacionario) o a una respuesta *oscilatoria* (crece y decrece continuamente). Un ejemplo de estado estable, es un péndulo en su posición de reposo; en cambio, el péndulo invertido es un ejemplo de estado inestable. Si el péndulo no tiene fricción, la respuesta a una perturbación será oscilatoria; en cambio, si existe fricción la respuesta será amortiguada. En una planta química de operación continua, se deberá hacer todo lo necesario para que los reactores estén operando en estados estacionarios estables; de lo contrario, ante cualquier perturbación, los mismos se apagarían o explotarían.

Los atributos también se denominan variables o parámetros (Figura 3). Los *parámetros* (P) son atributos que se fijaron durante el diseño del sistema ya sea por el diseñador o por la naturaleza, por ejemplo: la cilindrada del motor, la aceleración de la gravedad. Las variables se clasifican a su vez en:

- **Variables de entrada o exógenas (U y D):** Son fijadas por el medio ambiente del sistema. Pueden ser manipulables si se fijan a voluntad, o no manipulables en caso contrario. Un ejemplo del primer caso es la posición del pedal del acelerador, y del segundo caso es la velocidad del viento. Una variable de entrada no manipulable se denomina perturbación. Las variables manipulables se representan con el vector U , y las perturbaciones se representan con el vector D .
- **Variables de salida (Y):** Son las variables de estado, o combinación de ellas, que son medidas o traspasan la frontera del sistema; por ejemplo, la concentración de los gases de escape del automóvil. Las variables de salida se representan con el vector Y .
- **Variables internas:** Son las variables del sistema que no son variables de entrada, variables de salida, ni parámetros.
- **Variables de estado (X):** Conforman el conjunto *mínimo* de variables internas del sistema necesarias para describir completamente su estado interno en un momento dado. Mientras las otras variables internas pueden ser determinadas a partir de los parámetros y de las variables de entrada, para determinar el valor de las variables de estado es necesario recurrir a la historia del sistema. Por ejemplo, la cantidad de dinero dentro de un cajero automático en un dado momento; es imposible determinar esta cantidad a partir de tan sólo los valores de otras variables para dicho momento porque además se deberían conocer cuánto fue la cantidad inicial de dinero, cuántos clientes llegaron, cuánto retiraron o depositaron, etc. Las variables de estado se representan con el vector X .

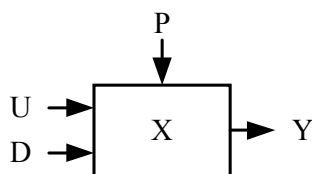


Figura 3: Variables de un sistema.

A continuación se analiza un calentador eléctrico de agua mostrado en la Figura 4, se supone que la potencia del mismo no es suficiente para llegar al punto de ebullición. La clasificación correspondiente es:

- **Parámetros:** el voltaje V , la resistencia R_c , las dimensiones del recipiente, el coeficiente global de transferencia de calor U , la capacidad calorífica del agua C_p , el espesor del cable, etc.
- **Variables de entrada manipulables:** la posición del interruptor p , el caudal de la corriente de entrada F_e y su temperatura T_e , el caudal de la corriente de salida F_s .
- **Perturbaciones:** la temperatura ambiente T_a .
- **Variables de salida:** la temperatura T_m indicada por el termómetro, la potencia disipada W_d , la temperatura de la corriente de salida T_s .
- **Variables internas:** La intensidad I y la potencia de calentamiento W .
- **Variables de estado:** la masa de agua M , la temperatura del líquido T . Note que la intensidad I y la potencia de calentamiento W son variables internas del sistema; pero no son de estado porque pueden calcularse a partir de los parámetros y de las variables de entrada. Entonces, ellas no pertenecen al conjunto mínimo de variables que deben ser especificado y, por lo tanto, no son variables de estado. Por el contrario, para un momento dado, es imposible determinar los valores de M y T a partir del resto de las variables porque dichos valores dependen de la historia del sistema y no tan sólo del estado actual. De esta forma, es necesario especificar dichos valores para algún momento; por lo tanto, son variables de estado.

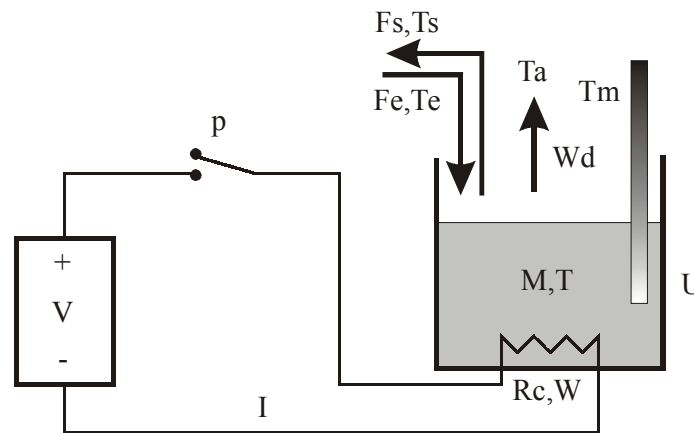


Figura 4: Calentador eléctrico.

Durante la operación del sistema se podrán observar los siguientes estados:

- **Estado inicial:** El interruptor está abierto, el recipiente vacío, no entra ni sale líquido. El estado del sistema no varía durante esta etapa. Es un estado estacionario.
- **Carga de agua:** Se hace $F_e > 0$, el recipiente recibe agua y M aumenta continuamente durante esta etapa. Es un estado dinámico.
- **Recipiente lleno:** Cuando el nivel del agua es el deseado se interrumpe la alimentación. Nuevamente el sistema está en un estado estacionario.
- **Calentamiento:** Una vez alcanzado el nivel de agua deseado, se cierra el interruptor. La temperatura T del agua aumenta continuamente. Es un estado dinámico.
- **Régimen:** a medida que aumenta la temperatura del sistema, la potencia disipada hacia el exterior W_d también aumenta. Esta potencia además depende de T_a , de las dimensiones del recipiente y de U . Cuando la potencia disipada iguala a la potencia W de calentamiento, la temperatura del sistema adopta también un valor constante. De este modo, el sistema alcanza un nuevo estado estacionario.

- **Apagado:** Alcanzada la temperatura deseada y mantenida durante el tiempo requerido, se abre el interruptor. La temperatura descenderá debido a la potencia disipada. Es un estado dinámico.
- **Descarga de agua:** Finalmente, sistema se descarga haciendo $F_s > 0$. M disminuye continuamente hasta valer cero. La temperatura continua descendiendo. Se trata de un estado dinámico que culmina cuando el sistema está completamente vacío y a temperatura ambiente.

La definición de la frontera del sistema juega un rol determinante en la clasificación de las variables. En efecto, la Figura 5 muestra un equipo desgasificador adiabático utilizado para separar los incondensables de una corriente de agua liberándolos a la atmósfera. Este equipo es comúnmente utilizado para retirar oxígeno del agua de alimentación de calderas para evitar sus efectos corrosivos. Para este equipo, se clasificarán los atributos del sistema de acuerdo a dos fronteras distintas. La primera encierra toda la figura, mientras la segunda está marcada con línea de trazos. Para la primera frontera, la clasificación de los atributos es:

- **Parámetros:** los coeficientes de las válvulas Cv_1 , Cv_2 y Cv_3 .
- **Variables de entrada manipulables:** las presiones de entrada y descarga de agua: P_1 y P_3 ; y las aperturas de las válvulas: X_1 , X_2 y X_3 .
- **Perturbaciones:** la presión atmosférica P_2 .
- **Variables de salida:** F_2 y F_3 .
- **Variables internas:** F_1 .
- **Variables de estado:** la masa de agua Ml y la masa de gas Mg .

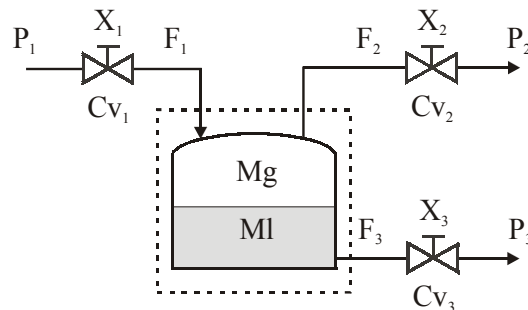


Figura 5: Equipo desgasificador.

Para la segunda frontera (línea de trazos) la clasificación es:

- **Parámetros:** ausentes en la figura.
- **Variables de entrada manipulables:** F_1 y F_3 .
- **Perturbaciones:** F_2 . Este variable es manipulable si se considera que puede ser gobernada por la válvula de descarga de gas; entonces se puede fijar a voluntad su valor. Sin embargo, F_2 también depende de la presión atmosférica que es no manipulable, y entonces variará independientemente de lo que desee el operador de la válvula, desde ese punto de vista el caudal es no manipulable. La clasificación final depende de si se actuará constantemente sobre la válvula para fijar el caudal en el valor deseado, o si se dejará la válvula en una apertura constante dejando que la presión gobierne el caudal.
- **Variables de salida:** ausentes en la figura.
- **Variables internas:** ausentes en la figura.
- **Variables de estado:** la masa de agua Ml y la masa de gas Mg .

Es importante determinar cuáles son las variables de entradas manipulables y las no manipulables. Las primeras serán utilizadas para actuar sobre el sistema, tal como lo hace un lazo de control o un operador. Las segundas deben ser tenidas en cuenta durante el diseño y la operación del sistema. Al ser no manipulables, se debe determinar cómo evolucionan para que el sistema esté preparado para enfrentar estas variaciones. Por ejemplo, se desea diseñar una torre de enfriamiento que sea capaz de enfriar el agua de refrigeración utilizada en una planta para permitir su reutilización (Figura 6). El caudal y temperatura de agua a tratar están dados por F_{w_1} y T_{w_1} , respectivamente; mientras las condiciones de salida están dadas por F_{w_2} y T_{w_2} . Se utiliza aire a temperatura ambiente para enfriar el agua, las condiciones de entrada y salida del aire están dadas por F_{a_1} , T_{a_1} , F_{a_2} y T_{a_2} . M es la acumulación de líquido dentro de la torre. En este caso, sería un gravísimo error ignorar que la temperatura ambiente T_{a_1} es una variable no manipulable, y que la misma tiene valores extremos tanto en invierno como en verano. Si la torre se diseña para condiciones invernales, fallará rotundamente en verano. Si el error se subsana, y se diseña la torre para las condiciones imperantes en el verano, la torre enfriará tan bien que durante una cruda noche de invierno las tuberías y los intercambiadores de calor reventarán debido a la congelación del agua en su interior. Si se descarta la alternativa de pedirle a las autoridades de la planta que no operen la misma durante la temporada otoño-invierno, se deberá identificar y actuar sobre alguna variable manipulable para que en invierno el agua no sea enfriada por debajo de la temperatura deseada, y menos que llegue al punto de congelación. Las variables manipulables que podrían ser útiles para este caso son el caudal de aire F_{a_1} y de agua F_{w_1} que se permiten entrar en la torre.

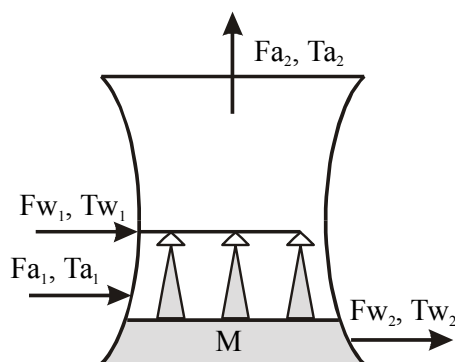


Figura 6: Torre de enfriamiento.

Clasificación de sistemas

Un sistema puede ser clasificado de acuerdo a lo predecible que sea su conducta en (Law and Kelton, 1991):

- **Determinístico:** Si el sistema no contiene ningún elemento aleatorio, es un sistema determinístico. Es decir, las relaciones funcionales entre las variables del sistema están perfectamente definidas. En este tipo de sistema, las variables de salidas e internas quedan determinadas al especificar las variables de entrada, los parámetros y las variables de estado. El calentador eléctrico estudiado es un sistema determinístico.
- **Estocástico:** En este caso, algún elemento del sistema tiene una conducta aleatoria. Entonces, para entradas y estado conocidas no es posible determinar con seguridad los valores de salida. Un ejemplo de sistema estocástico es una máquina tragamonedas en la cual una misma acción (tirar la palanca) genera un resultado incierto (ganar o perder). En el mundo real, los sistemas siempre tienen elementos estocásticos ya sea por su propia naturaleza o porque son fenómenos no comprendidos actualmente; por

ejemplo, a un cavernícola le podía parecer que los eclipses eran fenómenos aleatorios, hoy ellos son predichos. Sin embargo, se puede considerar a un sistema real con un sistema determinístico si su incertidumbre es menor que un valor aceptado. Las personas son sistemas estocásticos; por lo tanto, todo sistema que involucre personas es estocástico también. Por ejemplo: un banco, un hospital, etc.

De acuerdo a su evolución temporal:

- **Continuo:** Se tiene un sistema continuo cuando las relaciones funcionales entre las variables del sistema sólo permiten que el estado evolucione en el tiempo en forma continua (basta que una variable evolucione continuamente). Matemáticamente, el estado cambia en infinitos puntos de tiempo. El recipiente del calentador es un subsistema continuo porque tanto M como T evolucionan en forma continua durante la operación del sistema.
- **Discreto:** Se tiene un sistema discreto cuando las relaciones funcionales del sistema sólo permiten que el estado *varíe* en un conjunto finito (contable) de puntos temporales. Las causas instantáneas de los cambios de estados se denominan *eventos*. El interruptor del calentador es un subsistema discreto porque la intensidad I sólo puede variar en los instantes que se abre o se cierra el interruptor. La apertura y el cierre del interruptor son eventos. Los sistemas reales son combinaciones de continuos y discretos. La forma de tratarlos se adopta de acuerdo a la característica dominante. Algunos autores prefieren crear una nueva categoría para estos sistemas combinados, la categoría: *sistemas mixtos*.

De acuerdo a la distribución espacial de sus atributos:

- **Parámetros concentrados:** Los atributos del sistema son independientes de la posición. Por ejemplo, el tanque agitado calentado por vapor mostrado en la Figura 7 es un sistema de este tipo porque la temperatura es homogénea en todo su interior si se supone que está bien agitado.
- **Parámetros distribuidos:** Los atributos dependen de la posición. Por ejemplo, la distribución de temperatura a lo largo del tubo interno de un intercambiador de calor de doble tubo (Figura 8). La temperatura tendrá un valor a la entrada, otra a la salida, y valores intermedios en el interior de los tubos; es decir, es una función de la coordenada espacial x .

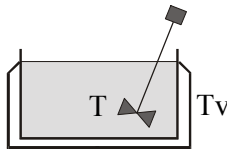


Figura 7: Tanque agitado calentado con vapor.

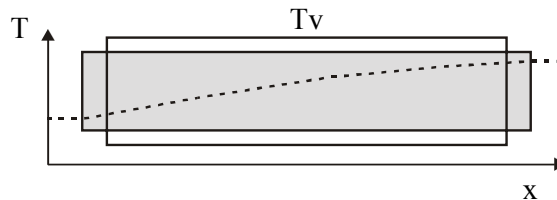


Figura 8: Intercambiador de calor de doble tubo.

Clasificación de modelos

Como ya fue planteado, un modelo es también un sistema; por lo tanto, valen todas las definiciones y clasificaciones que se establecieron anteriormente. Debido a que un modelo es una simplificación o abstracción de un sistema real, no es necesario, salvo en los aspectos relevantes, que el modelo guarde una total correspondencia con el sistema real. Entonces, habrá casos en que será conveniente utilizar un modelo discreto para modelar un sistema continuo (por ejemplo, la integración numérica de una función utilizando la regla del trapecio), o utilizar un modelo estocástico para modelar un sistema determinístico (por ejemplo, la integración numérica por simulación de Monte Carlo), y todas las combinaciones posibles.

Modos de simulación

Como ya se planteó anteriormente, cuando se simula se experimenta con un modelo para obtener ciertos resultados. Un modelo es también un sistema por derecho propio, y de acuerdo a sus variables de salida el modo de simulación será (Figura 9):

- **Análisis:** Es el modo más empleado, en él las variables de salida del modelo representan a las variables de salida del sistema real. Este modo se utiliza para estimar la respuesta del sistema real ante entradas y parámetros especificados. Debido a que imita un sistema que realmente funciona, el modelo es matemáticamente más estable y se asegura la existencia de una solución. Por ejemplo, dado un intercambiador de calor (esto es, se conoce el área, la cantidad de pasos por tubos y coraza, los materiales, etc.) y conocidas las condiciones de las corrientes de entrada, se determinarán las condiciones de las corrientes de salida.
- **Diseño:** En este modo las salidas del modelo representan a los parámetros del sistema real. Se utiliza en la etapa de diseño de un equipo donde el problema es determinar los parámetros para los cuales el sistema producirá las salidas deseadas para las entradas especificadas. Por ejemplo, para el intercambiador de calor, se determinarán las dimensiones y tipo de intercambiador para que, conocidas las corrientes de entrada, las corrientes de salida alcancen las condiciones deseadas.
- **Control:** Las variables de salida del modelo representan a las variables de entrada del sistema real. Este modo sirve para determinar los valores que deberán adoptar las entradas del sistema para producir los resultados deseados. Se utiliza cuando se desea determinar las condiciones de operación de un sistema para obtener determinada conducta. Por ejemplo, se determinarán las condiciones de las corrientes de entrada de un intercambiador de calor dado para que las corrientes de salidas alcancen las condiciones deseadas.

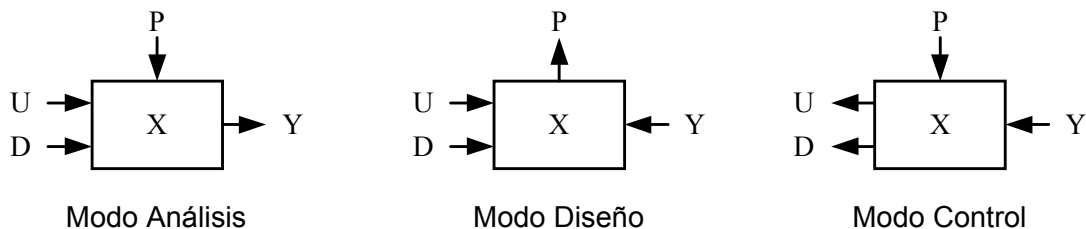


Figura 9: Modos de simulación.

Emulación de modos

Por lo general, los simuladores se operan en modo análisis dejando al usuario la tarea de iterar para obtener los resultados provistos por los otros modos. El modo diseño puede ser emulado iterando con los parámetros hasta conseguir las salidas deseadas (Figura 10). Por ejemplo, para determinar el área de un intercambiador de calor conocidas las corrientes de entradas y especificadas las condiciones de las corrientes de salida (modo diseño), se pueden realizar varias simulaciones en modo análisis para un conjunto de valores de área, y se seleccionará el área que produzca las condiciones deseadas para las corrientes de salida. De esta manera, se emuló una simulación modo diseño a través de varias simulaciones en modo análisis.

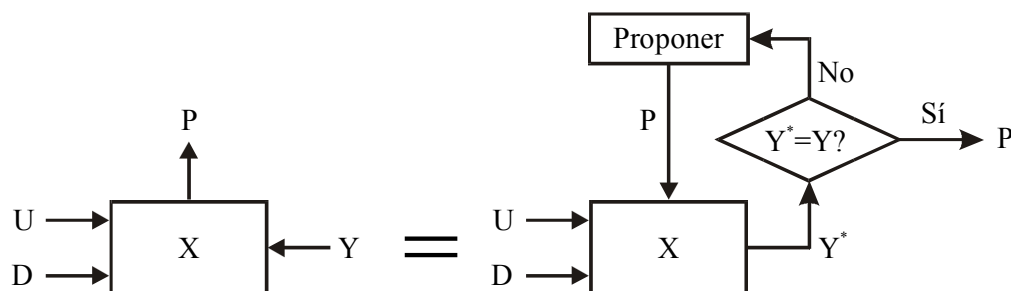


Figura 10: Emulación del modo diseño.

En forma similar, si lo que se desea es emular una simulación en modo control, entonces se deberá iterar variando las condiciones de entrada hasta comprobar que las condiciones de las salidas sean las deseadas (Figura 11). Para el caso del intercambiador de calor, el problema de control es determinar a qué temperatura debe ingresar la corriente fría para que el intercambiador de calor considerado sea capaz de producir la temperatura de salida deseada. Para ello se iterará variando la temperatura de entrada, para cada valor se realizará una simulación en modo análisis; si la temperatura de salida no es la deseada, se probará con otro valor de temperatura de entrada. Este ciclo se repetirá hasta encontrar el valor de la temperatura de entrada que produce la temperatura de salida requerida.

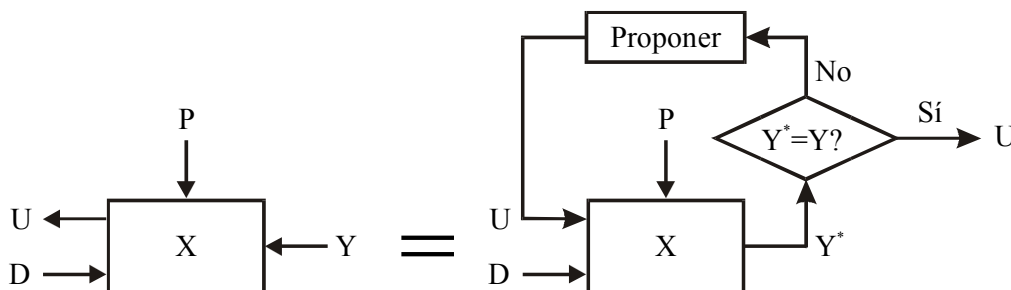


Figura 11: Emulación del modo control.

Modelado

Modelado es el proceso de construcción de un modelo. Un modelo es una representación de un objeto, sistema, o idea. Usualmente, su propósito es ayudar explicar, entender o mejorar un sistema (Shannon, 1988). Los modelos son útiles para:

- El pensamiento: Al construir un modelo necesariamente se debe ordenar y completar el conocimiento que del sistema real se posee.

- La comunicación: Un modelo elimina la ambigüedad del lenguaje para comunicarse con expertos.
- La predicción: Un modelo sirve para predecir la conducta del sistema real. El modelo de la teoría de la relatividad predice, sin hacer una simulación, que no es posible superar la velocidad de la luz.

El modelado es un arte. Cualquier conjunto de reglas para desarrollar modelos tiene una utilidad limitada y sólo puede servir como una guía sugerida. El arte de modelar consiste en la habilidad para analizar un problema, resumir sus características esenciales, seleccionar y modificar las suposiciones básicas que caracterizan al sistema, y luego enriquecer y elaborar el modelo hasta obtener una aproximación útil. Los pasos sugeridos para este proceso son:

1. Establecer una definición clara de los objetivos.
2. Analizar el sistema real.
3. Dividir el problema del sistema en problemas simples.
4. Buscar analogías.
5. Considerar un ejemplo numérico específico del problema.
6. Determinar las variables de interés.
7. Escribir los datos obvios.
8. Escribir las ecuaciones teóricas o empíricas que describen los fenómenos presentes y relacionan las variables de interés.
9. Si se tiene un modelo manejable, enriquecerlo. De otra manera, simplificarlo.

Generalmente, simplificar un modelo implica:

- Convertir variables en constantes.
- Eliminar o combinar variables.
- Suponer linealidad.
- Agregar suposiciones más potentes y restricciones.
- Restringir los límites del sistema.

Para enriquecerlo se procede de la forma contraria. Durante el proceso de modelado se debe alcanzar un equilibrio entre el grado de detalle y el riesgo de falta de exactitud. El mejor modelo es el modelo más simple que puede resolver el problema planteado con el grado de exactitud requerido.

A fin de ejemplificar las etapas de modelado citadas, considere que se desea construir un modelo para determinar el tiempo y la velocidad de contacto con el suelo de un paracaidista (Figura 12). El objetivo ya está planteado. El sistema será el paracaidista. Las características esenciales serán la velocidad de descenso, la altura, el tiempo, etc.

El próximo paso es comprender los fenómenos involucrados en el sistema. Es indiscutible que el principal fenómeno a tener en cuenta es la atracción gravitacional que tenderá a hacer caer al paracaidista. Sin embargo, no es el único fenómeno involucrado. Una persona no conocedora del sistema podría realizar las siguientes preguntas inquietantes: si es cierto que la tierra rota, ¿el paracaidista no será despedido hacia la estratosfera por la fuerza centrífuga?, o si es cierto que la tierra se traslada, ¿quién asegura que el paracaidista no terminará de nuevo en la estratosfera debido a que la tierra no se quedó en su lugar?, si la fricción con el aire genera calor, ¿el pobre diablo no se incinerará completamente antes de llegar a tierra?. Afortunadamente, los paracaidistas no suelen hacerse estas preguntas, y continúan, ingenuamente, arrojándose al vacío, demostrando de algún modo que los fenómenos físicos citados no son relevantes para el caso en cuestión. Entonces, dada la evidencia empírica, se

puede concluir que los fenómenos de rotación, traslación y fricción no tienen mayores efectos para el caso que se está estudiando. Así planteado, el problema es completamente análogo a un inocente problema de caída libre.

Si se trata de un problema de caída libre, la velocidad final de contacto con la tierra será:

$$v_f = \sqrt{2gh_0} \quad (4)$$

Para una altura inicial $h_0 = 1000$ m, la velocidad final será $v_f = 140$ m/s o 504 km/h. Este ejemplo numérico sugiere que sería muy conveniente exigir el pago del trabajo de simulación al paracaidista mientras está todavía en el avión (con vida), o revisar todo el análisis anterior.

Debido a que se sabe que los paracaidistas por lo general sobreviven a su primer salto, entonces es evidente que se cometió un error en el modelado. En efecto, el error fue descartar la fricción. La misma fue descartada porque los efectos térmicos por ella generados eran despreciables. Sin embargo, no se puede despreciar el efecto de frenado representado por la fuerza de fricción Fr .

Como se pudo apreciar, el error cometido tuvo un gran impacto en el resultado. El riesgo de cometer errores de este tipo aumenta con la complejidad del sistema analizado. Es por eso siempre recomendable plantear algún ejemplo numérico para ser juzgado junto a personas que conocen profundamente el sistema en estudio.

Se podría pensar que sería recomendable considerar todos los fenómenos involucrados a fin de no cometer el error de descartar algún fenómeno importante. Sin embargo, esto complicaría innecesariamente el modelo, aumentando el riesgo de cometer errores en la siguiente etapa: la resolución del modelo.

Para terminar, se determinarán las variables que representan a las características esenciales: v , Fr , h_0 , etc. y se formularán las ecuaciones que vinculan dichas variables, como por ejemplo:

$$\begin{aligned} \frac{dv}{dt} &= -g + \frac{Fr}{m} \\ \frac{dh}{dt} &= v \\ Fr &= Crv^2 \end{aligned} \quad (5)$$

donde g es la aceleración de la gravedad, h es la altura, m es la masa del paracaidista, t es el tiempo, y Cr es el coeficiente de fricción. Estos atributos se pueden clasificar como:

- **Variable de entrada no manipulable:** t .
- **Parámetros:** g , m y Cr .
- **Variable interna:** Fr .
- **Variables de estado:** v y h .

El modelo es manejable, pero se puede simplificar si es que se determina que la velocidad terminal (la que equilibra el peso con la fuerza de fricción) se alcanza pronto. Si esto es así, se podrá utilizar un modelo más simple considerando que la velocidad es constante. Por otra parte, el modelo se puede enriquecer si se incorpora otra fuerza. En efecto, el paracaídas no sólo es frenado por la fricción, sino que también es frenado por la fuerza generada por el cambio de cantidad de movimiento relativo que experimenta el aire al toparse con el paracaídas. Esta fuerza puede ser más importante aún que la fricción.

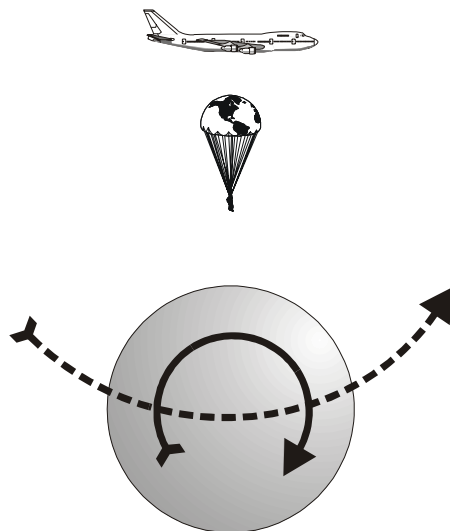


Figura 12: Lanzamiento de un paracaidista.

Debido a que se trata de un sistema determinístico continuo, el modelo está constituido por un conjunto de ecuaciones diferenciales y un conjunto de ecuaciones algebraicas. Las variables de estado, v y h , figuran en el miembro izquierdo de las ecuaciones diferenciales. Para poder resolver este modelo es necesario especificar el valor de v y h en algún momento. Si las variables se especifican en para $t = 0$, se tiene un problema de valores iniciales. Este tipo de modelos y de problemas serán objetos de estudio de los siguientes capítulos.

Modelos teóricos vs. experimentales

Si el modelo que se construye sólo se orienta a reproducir las salidas del sistema real sin intentar modelar su comportamiento interno; entonces, será un *modelo experimental* o de *caja negra*. En cambio, si el modelo también intenta reproducir las relaciones funcionales del sistema será un *modelo con base teórica*. Un modelo experimental requiere una gran cantidad de datos para poder calibrarlo o ajustarlo correctamente, y su rango de validez está limitado a ese conjunto de datos; esto es, sirve para interpolar pero no para extrapolar. En contraposición, un modelo teórico requiere una cantidad menor de datos y puede ser utilizado fuera del rango de los mismos ya que el rango de validez del modelo está dado por la teoría utilizada y no por los datos.

Un ejemplo simple se presenta cuando se desea determinar el espacio recorrido por un cuerpo móvil a velocidad constante en función del tiempo. Para una velocidad dada, se puede construir una gráfica de espacio vs. tiempo a partir de medidas experimentales. Esta gráfica sólo podrá emplearse para el caso en que la velocidad del móvil sea idéntica a aquella que se utilizó en los experimentos. Además, sólo proveerá información para los tiempos que pertenezcan al intervalo de experimentación. Estos problemas no se presentan si se utiliza un modelo teórico simple: $e = v.t$; en este caso, sólo es necesario determinar la velocidad a partir de sólo dos datos disponibles, y la fórmula podrá luego ser utilizada más allá del rango de tiempo medido.

Para el calentador de agua se puede construir un modelo experimental que permita estimar el tiempo de calentamiento requerido para calentar una cantidad dada de agua hasta una temperatura deseada. Para ello será necesario medir la temperatura Tm_i en N determinados

instantes t_i . Esta tabla de datos experimentales puede ser utilizada directamente para estimar por interpolación el tiempo requerido para alcanzar una temperatura dada.

Una alternativa más avanzada es ajustar gráficamente una curva t vs. Tm , o ajustar matemáticamente con el criterio de mínimos cuadrados los coeficientes a de un polinomio $P(a,t)$ resolviendo el siguiente problema de optimización:

$$\text{Min}_a \sum_{i=1}^N (P(a, Tm_i) - t_i)^2 \quad (6)$$

Luego, el tiempo requerido para alcanzar una temperatura especificada será dado por este polinomio ya ajustado.

Un problema del modelo anterior es que se torna totalmente inútil cuando se cambia la cantidad de agua en el recipiente. Este problema puede ser resuelto incorporando la variable M al modelo; pero se requerirán nuevos datos experimentales para distintos valores de M . La incorporación de más variables puede llegar a hacer necesario que se reemplace el polinomio por un modelo más potente como por ejemplo una red neuronal. Otro problema es que el modelo no puede ser utilizado para temperaturas que estén fuera del intervalo de las temperaturas de los datos experimentales. Un modelo con base teórica requeriría mucho menos experimentos, o quizás ninguno, y el rango de temperatura posibles sería mayor.

Modelos de caja negra

Las limitaciones del conocimiento actual o la complejidad involucrada, hacen que todo modelo con base teórica siempre contenga una parte con base empírica. En efecto, debido a que no existe una teoría apropiada, o su implementación es demasiada compleja, siempre es necesario recurrir a experimentos para determinar el valor de algún parámetro o definir alguna relación entre las variables.

En el caso del calentador de agua, se puede desarrollar un modelo con base teórica que considere la ley de Ohm, las leyes de Kirchhoff, el efecto Joule, etc. Sin embargo, la capacidad calorífica Cp del agua generalmente es estimada utilizando un polinomio que es función de la temperatura T . Los coeficientes del polinomio pueden obtenerse de bibliografía (tablas de coeficientes para distintas sustancias) o a partir del procesamiento de datos experimentales (tablas de Cp vs. T para el agua). El polinomio así definido es un modelo de caja negra ya que sólo define la relación existente entre la entrada T y la salida Cp sin intentar contemplar los mecanismos internos del agua responsables de dicha relación.

Todos los modelos de caja negra se plantean a partir de datos experimentales. Si los errores de los datos experimentales son despreciables y si se pueden despreciar también los errores de una interpolación lineal o cuadrática dentro de los intervalos de la muestra; entonces, es posible utilizar como modelo directamente la tabla de datos experimentales. El error de los datos se puede despreciar cuando se emplearon técnicas experimentales precisas y exactas, y fueron procesados estadísticamente. Si además, el intervalo entre datos es pequeño o la relación entre las variables es lineal (determinada ésta a partir de un gráfico), se puede asumir que el error de la interpolación lineal será despreciable. Entonces, si la tabla contiene datos del tipo (x, y) , para un x dado que no figure en la tabla pero que esté dentro del rango de la misma se estimará el correspondiente y utilizando una interpolación lineal o cuadrática.

En la interpolación lineal se utiliza la línea recta que pasa por los dos puntos más cercanos al punto que se desea evaluar. Por ejemplo, si dichos puntos son (x_a, y_a) y (x_b, y_b) . La línea recta

Simulación de Sistemas Químicos. Introducción. Enrique E. Tarifa.

a utilizar para determinar el valor y correspondiente a un valor x del intervalo $[x_a, x_b]$ será $y = a x + b$. Los coeficientes a y b se obtienen de resolver el siguiente sistema de ecuaciones que plantea que la recta debe pasar por los puntos datos:

$$\begin{aligned} y_a &= a x_a + b \\ y_b &= a x_b + b \end{aligned} \quad (7)$$

En la interpolación cuadrática se utiliza la parábola que pasa por los tres puntos más cercanos al que se desea evaluar. Por ejemplo, si dichos puntos son (x_a, y_a) , (x_b, y_b) y (x_c, y_c) . La parábola a utilizar para determinar el valor y correspondiente a un valor x del intervalo $[x_a, x_c]$ será $y = a x^2 + b x + c$. Los coeficientes a , b y c se obtienen de resolver el siguiente sistema de ecuaciones que plantea que la parábola debe pasar por los puntos datos:

$$\begin{aligned} y_a &= a x_a^2 + b x_a + c \\ y_b &= a x_b^2 + b x_b + c \\ y_c &= a x_c^2 + b x_c + c \end{aligned} \quad (8)$$

Cuando no es posible ignorar los errores contenidos en la tabla, la regresión es preferible a la interpolación. En la regresión se ajustará una función para que represente los datos experimentales de la mejor manera posible, no es necesario que pase por ellos como en interpolación. El polinomio es el tipo de función más simple utilizado en regresión. Si el orden del mismo ya está fijado, el problema se reduce a determinar los valores de los coeficientes que minimicen la sumatoria de los cuadrados de los errores, tal como se planteó en la sección anterior. Si el orden del polinomio debe también ser determinado, entonces el orden óptimo y los coeficientes surgen de minimizar la varianza de los errores de la muestra, es decir de resolver el siguiente problema de optimización más general:

$$\begin{aligned} & \underset{M, a}{\text{Min}} S^2 \\ & \text{s.a. :} \\ S^2 &= \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - P(M, a, x_i))^2}{N - M - 1} \end{aligned} \quad (9)$$

donde se desea ajustar los coeficientes a y el orden M del polinomio P que es función de x para que los valores devueltos minimicen la varianza de los errores de una muestra con N puntos experimentales (x_i, y_i) .

Este problema puede ser resuelto con la utilidad Solver de la planilla de cálculo Excel. Por ejemplo, dada la siguiente tabla de datos:

Tabla 1: Tabla de datos.

x_i	y_i
0	8
1	14
4	80
9	385
10	485
14	945
15	1095

El primer paso es ingresar la misma en la planilla. Luego se deben escribir las fórmulas apropiadas para la función que se desea ajustar y para el cálculo del error. La Figura 13 muestra estos pasos cuando se desea ajustar la línea recta $y = a x + b$. Note la utilización del signo \$ (referencia absoluta) para referirse a las celdas de los coeficientes. De este modo se asegura que cuando se copien las fórmulas, siempre se referirán a las celdas correctas.

	A	B	C	D	E	F
1	x_i	y_i	$P(x_i)$	$(y_i - P(x_i))^2$	Coeficientes	
2	0	8	=F\$2*A2+F\$3	=(B2-C2)^2	a =	1
3	1	14			b =	1
4	4	80				
5	9	385				
6	10	485				
7	14	945				
8	15	1095				
9			Suma =	=Suma(D2..D8)		

Figura 13: Ingreso de fórmulas para el ajuste de $P(x_i) = a x_i + b$.

Ingresadas los datos y las fórmulas, el siguiente paso es copiar las fórmulas y dar valores iniciales a los coeficientes. Para ello es conveniente construir un gráfico que muestre tanto los datos experimentales como los correspondientes al polinomio. Se debe variar manualmente los coeficientes hasta obtener un ajuste aceptable (Figura 14). Esta etapa puede obviarse, pero se corre el riesgo de incrementar los cálculos necesarios que posteriormente deberá realizar Solver para llegar a la solución, o incluso existirá el riesgo de no arribar a la solución correcta.

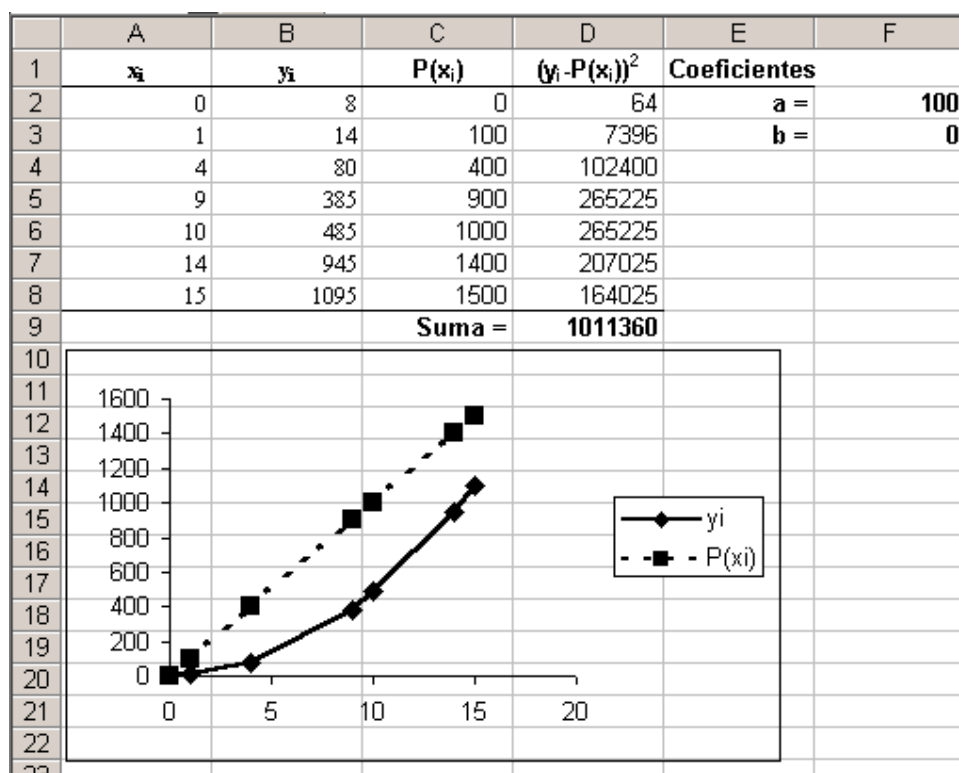


Figura 14: Inicialización de los coeficientes.

Finalmente, se activa Solver (menú Herramientas). Si esta opción no está disponible, se deberá activarla con la opción Complementos (menú Herramientas). En el formulario de Solver (Figura 15), se deberá seleccionar como celda objetivo la celda que contiene la suma de los errores al cuadrado; en este caso, \$D\$9. Se selecciona también la opción Mínimo para minimizar dicha suma cambiando las celdas correspondientes a los coeficientes para este ejemplo: \$F\$2:\$F\$3.

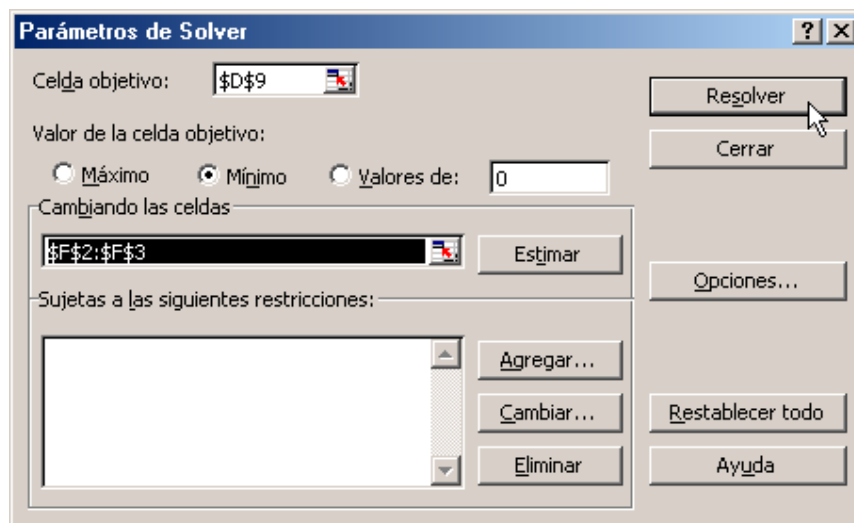


Figura 15: Formulario de Solver.

Luego de aceptar los valores propuesto por Solver, en las celdas de los coeficientes quedarán los valores que minimizan el error; mientras el gráfico mostrará el grado de concordancia entre las figuras correspondientes a los datos de la tabla y al polinomio (Figura 16). Para el caso en estudio, la línea recta determinada es: $P(x) = 71.2x - 108.7$.

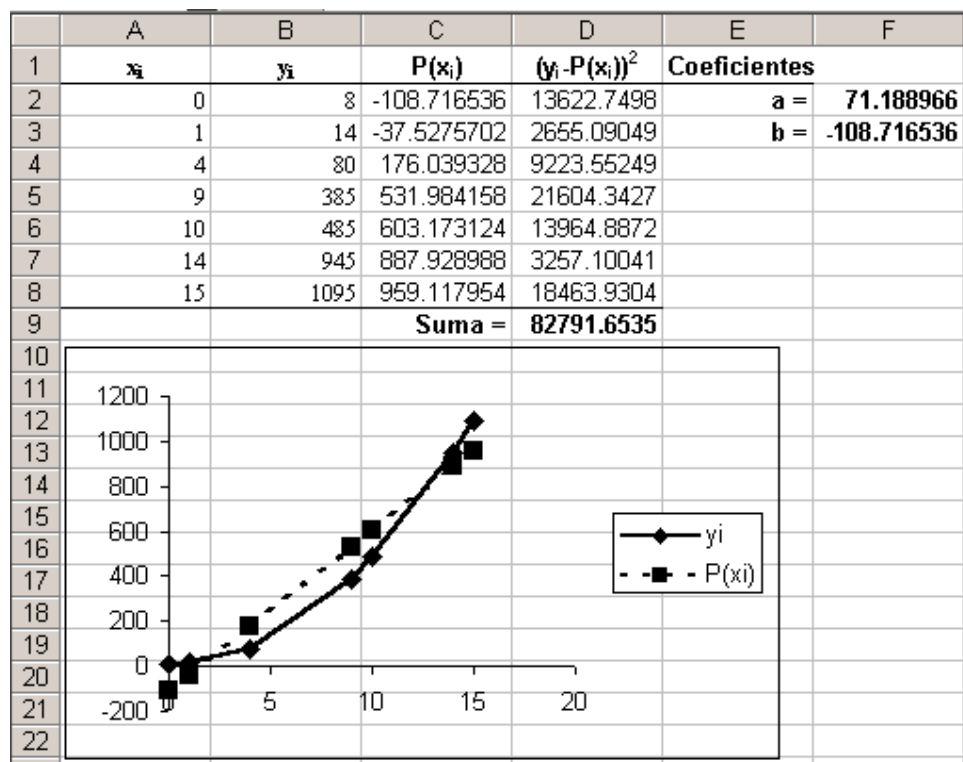


Figura 16: Solución del ajuste lineal.

El procedimiento descrito no se limita a ajuste de polinomios, sino que puede ser aplicado en forma directa para ajustar cualquier tipo de función, y puede ser extendido con ligeras modificaciones al ajuste de funciones con múltiples variables. Cuando la función que se desea ajustar es un polinomio o una función exponencial, y sólo existe una sola variable independiente, es más cómodo trabajar con la utilidad línea de tendencia de Excel. Para ello basta con ubicar el cursor sobre la curva de datos y seleccionar “Agregar línea de tendencia” del menú contextual (se habilita con el botón derecho del *mouse*). Si se selecciona la opción “Presentar ecuación en el gráfico”, la ecuación correspondiente será incluida en el gráfico.

Las siguientes tablas muestran los resultados obtenidos cuando se ajustaron polinomios de orden 0 a 4. El orden 4 se realizó sólo como verificación. Como puede apreciarse, el mejor ajuste se obtiene con el polinomio de orden 2. La Figura 17 muestra el ajuste lineal y cuadrático realizado para estos datos.

Tabla 2: Ajuste de promedio $P(x) = a$.

x_i	y_i	$P(x_i)$	$(P(x_i) - y_i)^2$	
0	8	430.285713	178325.223	a = 430.29
1	14	430.285713	173293.794	
4	80	430.285713	122700.08	
9	385	430.285713	2050.79576	
10	485	430.285713	2993.65325	
14	945	430.285713	264930.798	
15	1095	430.285713	441845.084	
$\Sigma(P(x_i) - y_i)^2 =$			1186139.43	
$S^2 =$			197689.90	

Tabla 3: Ajuste lineal $P(x) = a x + b$.

x_i	y_i	$P(x_i)$	$(P(x_i)-y_i)^2$
0	8	-108.716392	13622.7163
1	14	-37.5274306	2655.0761
4	80	176.039455	9223.57691
9	385	531.984264	21604.3739
10	485	603.173226	13964.9114
14	945	887.929073	3257.09065
15	1095	959.118035	18463.9083
$\Sigma (P(x_i)-y_i)^2 =$			82791.6535
$S^2 =$			16558.33

$a =$
 $b =$

Tabla 4: Ajuste cuadrático $P(x) = a x^2 + b x + c$.

x_i	y_i	$P(x_i)$	$(P(x_i)-y_i)^2$
0	8	10.0872009	4.35640772
1	14	12.2130497	3.19319146
4	80	78.5633996	2.06382077
9	385	389.056662	16.4565037
10	485	481.141716	14.8863562
14	945	949.436606	19.6834699
15	1095	1091.499	12.2570268
$\Sigma (P(x_i)-y_i)^2 =$			72.8967766
$S^2 =$			18.22

$a =$
 $b =$
 $c =$

Tabla 5: Ajuste cúbico $P(x) = a x^3 + b x^2 + c x + d$.

x_i	y_i	$P(x_i)$	$(P(x_i)-y_i)^2$
0	8	8.74519553	0.55531638
1	14	12.6470264	1.83053753
4	80	80.8057072	0.64916416
9	385	388.397437	11.5425803
10	485	479.887368	26.1390075
14	945	948.983835	15.8709448
15	1095	1092.52686	6.11643007
$\Sigma (P(x_i)-y_i)^2 =$			62.7039808
$S^2 =$			20.90

$a =$
 $b =$
 $c =$
 $d =$

Tabla 6: Ajuste de orden 4 $P(x) = a x^4 + b x^3 + c x^2 + d x + e$.

x_i	y_i	$P(x_i)$	$(P(x_i)-y_i)^2$
0	8	9.03207003	1.06516856
1	14	12.2682245	2.99904626
4	80	80.8087961	0.6541512
9	385	388.71443	13.796989
10	485	479.816645	26.8671729
14	945	948.395223	11.5275423
15	1095	1092.95794	4.17000636
$\Sigma (P(x_i)-y_i)^2 =$			61.0800766
$S^2 =$			30.54

a =	0.00
b =	-0.03
c =	5.01
d =	-1.75
e =	9.03

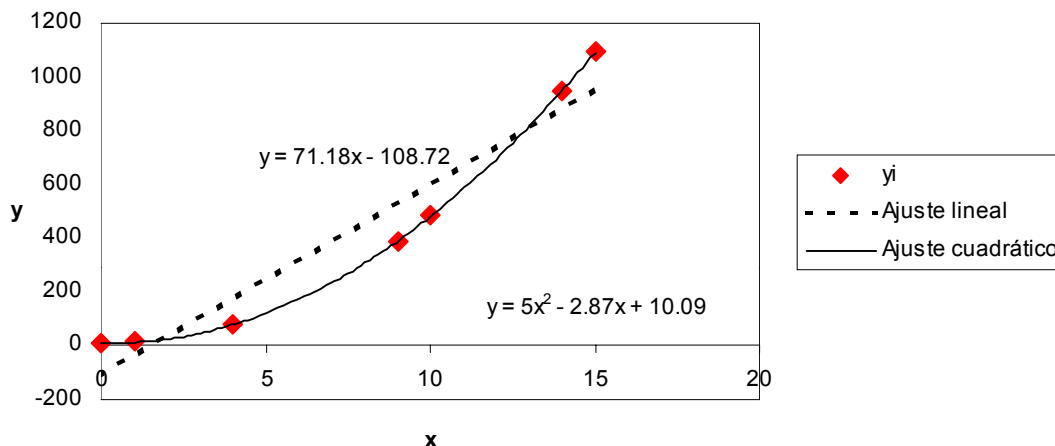


Figura 17: Ajuste polinomial.

Cuando el problema involucra más de una variable independiente se suele dejar de lado el polinomio a favor de una función que tenga alguna base teórica o empírica. Por ejemplo, cuando se determinan las constantes de la ecuación de van der Waals para un dado gas.

Si no es posible ajustar los datos experimentales utilizando un polinomio, una función o una tabla; entonces, puede ser conveniente recurrir a un modelo más complejo como es el caso de una red neuronal. Las mismas son utilizadas para modelar sistemas con múltiples variables y fuertemente no lineales.

Para terminar, se presenta a continuación la determinación de una curva de ajuste para el agua pura y para la salmuera de agua de mar. Para la primera, se utiliza la correlación de Andrade:

$$\mu_w = e^{\frac{a}{T+b}+c} \quad (10)$$

donde las constantes a , b y c se determinan realizando un ajuste con los datos experimentales. La Tabla 7 muestra los datos experimentales (μ_w) y los valores de la función de ajuste con sus constantes ajustadas. A fin de obtener la mayor precisión posible, luego de un primer ajuste se repite el proceso; pero esta vez, los valores iniciales de los coeficientes son los recomendados

por el primer ajuste, y la función objetivo es la celda que contiene la suma de los errores al cuadrado multiplicada por un número grande, por ejemplo: 1000.

Tabla 7: Viscosidad del agua pura [cP].

T[C°]	μ_w [cP]	$\mu_w(T)$	Error ²	
10	1.30	1.31	0.00	a = 534.15
20	1.00	0.99	0.00	b = 127.22
30	0.80	0.78	0.00	c = -3.63
40	0.65	0.64	0.00	
50	0.54	0.54	0.00	
60	0.46	0.47	0.00	
70	0.40	0.41	0.00	
80	0.35	0.37	0.00	
90	0.31	0.33	0.00	
			0.00	

Para la salmuera se utilizará la siguiente correlación:

$$\mu_b(X, T) = fm(X, T) \mu_w(T) \quad (11)$$

donde fm es un factor de corrección que considera el efecto de la temperatura y la fracción masa de sal (X). Este factor se estima con la siguiente correlación:

$$fm(X, T) = 1 + X(dT + e) \quad (12)$$

La Figura 18 muestra la planilla de Excel con los datos experimentales (fm) y las fórmulas que se utilizaron para realizar el ajuste ($fm(X, T)$). Para ello se utilizó el Solver de una forma similar a la explicada anteriormente. El único cambio realizado es la disposición de los datos y de los valores estimados por la función de ajuste; en lugar de estar en columnas, están en tablas debido a que ahora son dos las variables independientes (X y T). Este cambio se tiene en cuenta también cuando se realiza la suma de los errores al cuadrado, ahora la suma se realiza tomando a todos los elementos de la tabla de errores al cuadrado. Note de nuevo la utilización del signo \$ para realizar referencia absolutas hacia los coeficientes y hacia los valores de las variables independientes. La Tabla 8 contiene los datos experimentales y los valores de la función de ajuste con sus constantes d y e ya ajustadas.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	
1				fm						
2	T[C°]/X[m/m]	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07			
3	20	1.04	1.06	1.09	1.11	1.14	1.17			
4	30	1.04	1.07	1.09	1.12	1.15	1.17			
5	40	1.05	1.07	1.10	1.12	1.15	1.18			
6	50	1.05	1.07	1.10	1.13	1.16	1.18			
7	60	1.05	1.08	1.10	1.13	1.16	1.19			
8	70	1.05	1.08	1.11	1.14	1.16	1.19			
9	80	1.06	1.08	1.11	1.14	1.17	1.20			
10	90	1.06	1.08	1.11	1.14	1.17	1.20			
11										
12		fm(X,T)								
13	T[C°]/X[m/m]	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07			
14	20	=B\$13*((\$14*\$A14+\$15)+1							a=	7.52E-03
15	30							b=	2.18	
16	40									
17	50									
18	60									
19	70									
20	80									
21	90									
22										
23		Errores²								
24	T[C°]/X[m/m]	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07			
25	20	=(B3-B14)^2								
26	30									
27	40									
28	50									
29	60									
30	70									
31	80									
32	90									
33								Suma =	=SUMA(B25:G32)	
34										

Figura 18: Ingreso de fórmulas para el ajuste de $fm(X,T) = X(aT + b) + 1$.

Tabla 8: Factor de corrección para la viscosidad de la salmuera.

fm T[C°]/X	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	
20	1.04	1.06	1.09	1.11	1.14	1.17	
30	1.04	1.07	1.09	1.12	1.15	1.17	
40	1.05	1.07	1.10	1.12	1.15	1.18	
50	1.05	1.07	1.10	1.13	1.16	1.18	
60	1.05	1.08	1.10	1.13	1.16	1.19	
70	1.05	1.08	1.11	1.14	1.16	1.19	
80	1.06	1.08	1.11	1.14	1.17	1.20	
90	1.06	1.08	1.11	1.14	1.17	1.20	

fm(X,T) T[C°]/X	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	
20	1.05	1.07	1.09	1.12	1.14	1.16	d = 7.52E-03
30	1.05	1.07	1.10	1.12	1.14	1.17	e = 2.18
40	1.05	1.07	1.10	1.12	1.15	1.17	
50	1.05	1.08	1.10	1.13	1.15	1.18	
60	1.05	1.08	1.11	1.13	1.16	1.18	
70	1.05	1.08	1.11	1.14	1.16	1.19	
80	1.06	1.08	1.11	1.14	1.17	1.19	
90	1.06	1.09	1.11	1.14	1.17	1.20	

Errore² T[C°]/X	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	
20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
30	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
40	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
50	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
60	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
70	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
80	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
90	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	

Suma= 0.00

Bibliografía

- Banks J., Carson J.S., Nelson B.L., 1996, "Discrete-Event System Simulation. Second Edition.", Prentice-Hall, New Jersey.
- Shannon R.E., 1988, "Simulación de Sistemas. Diseño, desarrollo e implementación", Trillas, México.
- Law A.M., Kelton W.D., 1991, "Simulation Modeling & Analysis", Second Edition, McGraw-Hill, New York.