

EPISTEMOLOGÍA E HISTORIA DE LA CIENCIA

SELECCIÓN DE TRABAJOS DE LAS XIV JORNADAS

VOLUMEN 10 (2004), Nº10

Pío García

Patricia Morey

Editores



ÁREA LOGICO-EPISTEMOLÓGICA DE LA ESCUELA DE FILOSOFÍA
CENTRO DE INVESTIGACIONES DE LA FACULTAD DE FILOSOFÍA Y HUMANIDADES
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA



Esta obra está bajo una Licencia Creative Commons atribución NoComercial-SinDerivadas 2.5 Argentina



Una perspectiva sobre contextos en la investigación mediante códigos computacionales

Raúl A. Dean*

1. Introducción

Desde una perspectiva conceptual una cuestión crítica que surge en el ámbito computacional en física e ingeniería y planteada por Oberkampff *et al.* [1], es *¿Cómo debe ser evaluada críticamente la confianza en la modelación y simulación?* Aquí se sostiene que este tipo de cuestiones, que contienen aspectos metodológicos y epistemológicos, pueden ser analizadas dentro de contextos similares a los utilizados para analizar la práctica científica. Estos contextos, para la actividad de la investigación mediante simulaciones con códigos computacionales, se desarrollan a continuación en una forma no exhaustiva.

2. Los Contextos en la Actividad de Modelación y Simulación

Una propuesta que frecuentemente se realiza desde la epistemología es que los problemas del conocimiento científico pueden analizarse en tres contextos. Un *contexto de descubrimiento* que abarca todo lo relativo a la forma en que los científicos arriban a sus conjeturas, hipótesis o afirmaciones. Las cuestiones de este contexto generalmente fueron asociadas al campo de la psicología, la sociología y la historia. En la actualidad existe un movimiento de reivindicación del descubrimiento como una cuestión epistemológica legítima [2]. Un *contexto de justificación*, que abarca cuestiones relativas a la validación del conocimiento [3]. Y finalmente un *contexto de aplicación*, integrado por las cuestiones de la puesta en práctica del conocimiento adquirido.

La distinción entre contextos de descubrimiento y justificación ha sido mantenida por diferentes proponentes y distintas críticas a tal distinción fueron efectuadas. Una revisión de esta distinción se encuentra en [4]. Si bien actualmente es cuestionada, resulta útil para analizar instancias epistemológicas involucradas con la práctica científica. Considerando esta utilidad, en forma similar se pueden distinguir tres contextos en la práctica de la investigación mediante códigos computacionales. Un *contexto de modelación* involucrado con la propuesta e implementación de un modelo computacional (código) que se corresponda con el modelo conceptual teórico conjeturado para dar respuesta a la situación problemática presente en la entidad física objeto de investigación, un *contexto de justificación* que nos dé indicaciones que el modelo computacional (código) se corresponde con el modelo conceptual teórico y con el comportamiento de la entidad física, y un *contexto de aplicación del modelo* o código computacional. Sin entrar en el análisis de las distinciones conceptuales entre teorías y modelos [5], al proponer esta similitud de contextos, se supone que un modelo computacional (código) en su estructura es formalmente similar a una teoría científica. Por consiguiente, las pautas de justificación de un modelo computacional (código) serán discutidas en relación a las de una teoría científica.

* Universidad Nacional de Río Cuarto. rdean@ing.unrc.edu.ar
Epistemología e Historia de la Ciencia, Volumen 10 (2004), N° 10

3. El contexto de aplicación como contexto de descubrimiento

Al menos dos situaciones de aplicación de un código computacional pueden ser asociadas a un contexto de descubrimiento: aplicaciones con un fin fáctico y aplicaciones con un fin matemático. La contribución al descubrimiento cuando se aplica un código con un fin fáctico, se relaciona con la predicción. En el ámbito de la investigación computacional el concepto de predicción, en un sentido restringido, es definido por la *American Institute of Aeronautics and Astronautics* (AIAA) como: "uso de un modelo computacional para anticipar el estado de un sistema físico bajo condiciones para las cuales el modelo no ha sido validado."¹[1][6]. En el ámbito de la investigación científica el término *predicción* en su sentido amplio, epistemológico, de acuerdo a Klimovsky [7], es el de deducir de los principios de una teoría un enunciado observacional, ya se refiera éste al pasado, al presente o al futuro, y que hasta el momento no estaba verificado. En ambos casos se aplican resultados, deducidos de un modelo computacional o de una teoría, en condiciones en las cuales no se ha comprobado su validez, y esta forma de aplicación tiene connotaciones de una "puesta a prueba" con lo factual, y como tal, puede dar lugar al inicio de un descubrimiento.

La segunda situación está referida a la aplicación de los resultados de la simulación computacional con un fin matemático. Por ejemplo, si en determinados modelos conceptuales teóricos ocurre que la deducción formal de soluciones analíticas no puede efectuarse, entonces nos vemos imposibilitados de obtener por esta vía formal predicciones de "consecuencias observables". En esta situación, los códigos computacionales se constituyen en una herramienta útil para predecir estas "consecuencias observables", y aquí, en un sentido "débil", podemos asociar un contexto de descubrimiento al contexto de aplicación. Herbert Simon [8] propone a un modelo de simulación como fuente de nuevo conocimiento. Para Simon la cuestión crucial acerca de la simulación es. ¿cómo puede una simulación alguna vez decirnos algo que ya no conozcamos? y sostiene que existen dos formas relacionadas en las cuales la simulación puede proveer nuevo conocimiento. La forma obvia es que aún cuando conozcamos y estemos empleando las premisas correctas, puede resultar muy dificultoso descubrir deductivamente lo que estas premisas implican. Todo razonamiento correcto es un gran sistema de tautologías y sólo una mente infinitamente poderosa puede hacer uso directo de todas ellas. De esta manera la simulación puede venir en nuestro auxilio para investigar las diferentes consecuencias que deductivamente pueden resultar difíciles de obtener. Otra forma es cuando se realiza la simulación de sistemas pobremente comprendidos, esto es, cuando conocemos poco inicialmente acerca de las leyes naturales que gobiernan el comportamiento interno del sistema.

4. El contexto de modelación

Así como se denomina "contexto de descubrimiento" a la etapa donde los científicos proponen hipótesis para explicar inicialmente un conjunto de observaciones, y posteriormente predecir nuevas consecuencias observacionales, en forma similar aquí se denomina "contexto de modelación" la etapa donde, tanto científicos como ingenieros, proponen modelos conceptuales teóricos en un lenguaje matemático y sus correspondientes modelos computacionales implementados en códigos

para simular o replicar inicialmente el comportamiento de un proceso físico o sistema de ingeniería, y posteriormente predecir comportamientos bajo nuevas condiciones.

El contexto de modelación se entiende relacionado principalmente con lo factual. Esencialmente dada la entidad física del problema se establece un modelo de la misma, que se implementa en un código computacional. Uno de los usos del código es ejercitar simulaciones, dentro de un determinado espacio paramétrico de diseño, para producir resultados numéricos útiles que contribuyan al análisis del comportamiento de la entidad física. Por *simulación* se entiende el proceso de realizar y conducir experimentos numéricos con el modelo computacional (código) para construir, por una interpretación de la salida del mismo, un símil con el propósito de contribuir al análisis y a la resolución de un problema específico presente en la entidad física, objeto de investigación.

5. El contexto de justificación

Aquí se entiende como *contexto de justificación* aquel donde se abordan cuestiones asociadas al qué evaluar, cómo evaluar, cómo saber por ejemplo, si el modelo computacional realizado es confiable o no, si replica adecuadamente la entidad física que se está investigando, si los resultados experimentales apoyan las afirmaciones que podemos hacer a través de los resultados de las simulaciones, si efectivamente se ha incrementado el conocimiento disponible. El contexto de justificación se entiende involucrado con lo normativo.

En la actividad de investigación mediante códigos computacionales, verificación y validación (V&V) son métodos primarios de evaluación. Brevemente, verificación está asociada con la evaluación de la exactitud de resultados del modelo computacional por comparación con resultados obtenidos de soluciones conocidas del modelo conceptual matemático; y validación con la evaluación de la exactitud de resultados del modelo computacional por comparación con datos experimentales.

En la revisión de los conceptos de V&V, se encuentra una amplia variedad de significados en varias disciplinas [1]. Una interpretación de esta situación es la complejidad involucrada con estos conceptos, que van desde cuestiones teóricas, computacionales, observacionales y diferentes perspectivas desde la filosofía de la ciencia [9]. La comunidad de la AIAA utiliza conceptos de V&V adecuados al ámbito computacional en física e ingeniería. En particular la Comisión de Normas para la Dinámica Computacional de Fluidos elaboró la "Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations" (AIAA G-077-1998), donde los conceptos de V&V propugnados por esta Comisión son:

Verificación: el proceso de determinar que una implementación de un modelo representa exactamente la descripción conceptual del autor del modelo y la solución del modelo.

Validación: es el proceso de determinar el grado al cual un modelo es una representación exacta del mundo real desde la perspectiva de los usos pretendidos del modelo.

En un sentido lato ambos significan actividades de evaluación, referidas a la modelación y simulación de procesos físicos y sistemas de ingeniería. Dos características importantes de estos conceptos son, por un lado, que V&V se presentan

como "procesos de determinar", esto es, como actividades que no tienen un punto claro de culminación, la otra característica es que enfatizan sobre la *representación exacta*, y con esto se asume que una *medida* puede ser establecida en las estrategias que se recomiendan para V&V. Como desde una perspectiva científica la representación exacta es primordial en la investigación de procesos físicos, los conceptos de V&V aquí adoptados para el análisis provienen de esta comunidad [1] [6][10]. El lugar ocupado por V&V en el contexto de justificación y la interrelación entre los tres niveles de investigación, experimental, teórico y computacional, que actualmente coexisten en la práctica de la investigación científica y tecnológica, se representan en la Fig. 1 [11].

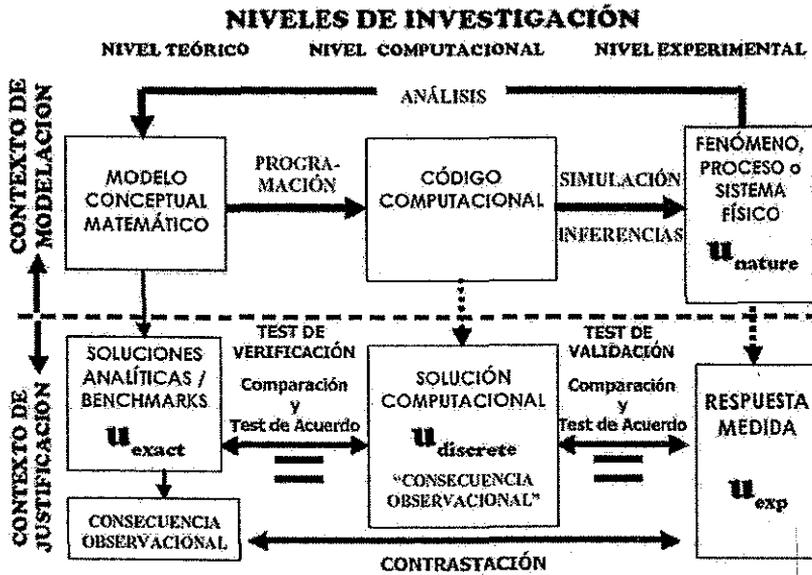


Fig. 1. Diagrama conceptual de los contextos de modelación y justificación

La Fig. 1 trata de expresar que: 1) V&V tienen un rol fundamental en el proceso de obtención de conocimientos, principalmente como elementos de control y como métodos que ponen a prueba los resultados, 2) si no hay sistema físico observable no hay validación. La división con líneas de trazos entre contextos representa un límite difuso, puesto que modelación y justificación son procesos interrelacionados en una forma colaborativa. En la Fig. 1 se representan con "u" las distintas salidas, esto es, la respuesta "natural" del sistema, la respuesta del sistema medida experimentalmente, la solución exacta del modelo conceptual matemático y la solución aproximada o discreta del código computacional. En función de ellas se definen y clasifican los distintos errores [6] [11].

La estrategia fundamental del proceso de *verificación* es identificar, cuantificar, y reducir errores en el modelo computacional o código y su solución numérica [6]. Se concreta en una comparación y test de acuerdo entre la solución de un c-

digo con soluciones analíticas o altamente exactas con el objetivo de determinar que las ecuaciones del modelo teórico son resueltas correctamente, comprobándose que no se hayan cometido errores durante la implementación del modelo. Para la *validación* la estrategia fundamental involucra identificar y cuantificar errores e incertidumbre en los modelos conceptual y computacional, cuantificar el error numérico en la solución computacional, estimar la incertidumbre experimental, y finalmente, se comparan los resultados computacionales con datos experimentales, en relación a los cuales se mide la exactitud. Esta estrategia no asume que las mediciones experimentales sean más exactas que los resultados computacionales, sólo defiende que las mediciones experimentales constituyen la representación más fiel de la realidad [6]. Diagramas conceptuales del proceso de verificación y del proceso de validación se encuentran en [6][1].

Es importante señalar que el nivel experimental, en su relación colaborativa con los niveles teórico y computacional, requiere de un análisis particular desde una perspectiva epistemológica. Si bien aquí no se efectúa, merece analizarse en forma particular la propuesta de Oberkampf, Trucano, Hirsch (2002) [1] sobre el nuevo tipo de experimento que surge de la simulación y modelización computacional, y que denominan *experimento de validación*² para el propósito de determinar la validez o exactitud predictiva de un modelo computacional y su capacidad de simulación de un proceso físico bien caracterizado. En el nivel experimental identifican los siguientes tipos de experimentos³: a) de exploración del fenómeno, b) de desarrollo del modelo matemático, c) de calibración (actualización del modelo), d) de validación, e) pruebas o ensayos de componentes y sistemas, y pruebas de certificación. Un análisis epistemológico de este espectro evolutivo de experimentos explicitaría la incidencia de la experimentación en el contexto de descubrimiento así como también la influencia en el desarrollo y crecimiento de la confianza en los códigos y sus aplicaciones.

6. El problema de la validación en la modelación y simulación

En el contexto de justificación, en ciencia, es el momento de preguntar: ¿cómo se conoce que una teoría describe adecuadamente la realidad?, y esto comprende toda cuestión relativa a la validación del conocimiento. Desde la epistemología, cuando se discute la estructura y validación de las teorías científicas se entiende que *"lo fundamental es indicar criterios para reconocer "buen conocimiento" y separarlo del deficiente, ya que eso es todo lo que se necesita presuponer para guiar nuestra actividad práctica..."*. [3]

Cuestiones similares se plantean en el contexto de justificación de la modelación y simulación. La suposición efectuada que un código es formalmente similar a una teoría científica, de acuerdo a Kleindorfer *et al.* [9] conduce al problema de la validación: *"El problema de la validación en simulación es un reconocimiento explícito que los modelos de simulación son como teorías científicas en miniatura... Como tal, las garantías que podamos dar por estos modelos pueden ser discutidas en los mismos términos que utilizamos en la teorización científica en general."* Stevenson [12], también se refiere al problema de la validación, expresándolo de una forma diferente: *el problema de la validación es exteriorizar las condiciones bajo las cuales acordamos (1) que las observaciones y cálculos están en suficiente acuerdo y (2) que lo teórico producirá este acuerdo en futuros cálculos.* Estas cuestiones están relacionadas con un problema

fundamental de la epistemología o, al menos, del contexto de justificación, que es el saber si las proposiciones, afirmaciones o enunciados son verdaderos o no.

Desde la perspectiva de un método de evaluación, como las afirmaciones de una teoría científica tienen fundamentalmente el carácter de hipótesis a ser testeadas por la experiencia, se puede afirmar que la instancia de un test de validación - que de acuerdo a la AIAA se debe ejecutar en el proceso de evaluación de un modelo computacional - es coherente con el método de contrastación de hipótesis en ciencia. Diagramas conceptuales del método de contrastación de hipótesis se encuentran en [13] [14]. Asimilar el test de validación con este método permite concluir que si encontramos acuerdo en la comparación del resultado computacional ("consecuencia observacional") con resultados experimentales obtenidos en el sistema físico, aplicando las mismas condiciones que se impusieron en el código computacional, entonces hemos verificado la "consecuencia observacional". Es pertinente señalar que para el término *verificación* deben distinguirse dos instancias de utilización, una se refiere a la concordancia del resultado computacional con lo fáctico; la otra a la concordancia del resultado computacional con lo formal, siendo una cuestión matemática.

Sobre la base conceptual adoptada, puede ser discutida parte de la siguiente afirmación realizada por Oberkampff y Trucano: "... la validación puede sólo ser evaluada o juzgada por realizaciones individuales de la naturaleza. Resultados computacionales individuales de un modelo son validados; los códigos no son validados"⁴ [6]. De esta afirmación podemos estar de acuerdo en que la validación puede sólo ser evaluada o juzgada por realizaciones individuales de la naturaleza, ya que en el contexto de justificación, tanto la posición inductivista, como la hipotético-deductivista o la falsacionista, en lo que respecta a la puesta a prueba todas acuerdan que debe hacerse lo mismo: extraer las consecuencias observacionales de las teorías y comparárlas con datos obtenidos en la experimentación, por lo tanto la validación sólo puede ser evaluada o juzgada por realizaciones individuales. La parte necesaria de un análisis conceptual crítico es donde se expresa que "*Resultados computacionales individuales de un modelo son validados, los códigos no son validados*". Es más adecuado afirmar: "Resultados computacionales individuales de un modelo son verificados (en un caso ideal); los códigos en cierto grado son validados (pero nunca en una forma completa)". El fundamento es el siguiente: si ejecutamos el test de validación y encontramos "igualdad" de resultados (computacional y experimental), de acuerdo al concepto de verdad mantenido, se *verifica* una consecuencia. Desde una perspectiva falsacionista es una instancia de corroboración para el modelo y desde un punto de vista inductivista es una confirmación para el modelo, brindándole apoyo empírico en ambos casos, lo cual puede ser visto como un cierto grado de validación al modelo, estando esto de acuerdo con la definición mantenida por la AIAA, esto es, que validación es el proceso de determinar el grado al cual un modelo es una representación exacta del mundo real desde la perspectiva de los usos pretendidos del modelo.

Debido a que la instancia de acuerdo favorable en el test de validación no tiene fundamento lógico para fundamentar el origen del conocimiento, no estamos autorizados lógicamente para hablar de una validación completa, el código a través de su "consecuencia observacional" sólo ha pasado una prueba que lo hace

merecedor de confianza por parte del usuario. Una contrastación favorable no tiene fundamento lógico (falacia de afirmación del consecuente) para garantizar la verdad de la hipótesis desde la cual se dedujo la consecuencia observacional contrastada. Para los falsacionistas, el origen del conocimiento está en las hipótesis que formulan y que ponen a prueba con la base empírica.

7. Consideraciones finales

En el contexto de justificación siempre hay que recurrir a un método que ponga a prueba los resultados. Verificación y validación son los utilizados en la actividad de investigación mediante códigos computacionales. El problema de la validación en este ámbito de investigación es un tema que requiere de un análisis crítico. Aspectos relacionados al método de contrastación de hipótesis pueden contribuir al análisis.

Otros aspectos importantes merecen ser analizados desde la perspectiva de la epistemología. Entre ellos, la propuesta de Oberkampf *et al.* sobre el nuevo tipo de experimento que surge de la simulación y modelización computacional, el cual se presenta con implicancias epistemológicas en relación a la capacidad predictiva de un modelo computacional. También es necesario un análisis epistemológico del espectro evolutivo de experimentos y su relación con el contexto de descubrimiento o modelización.

Si bien se ha considerado únicamente aspectos relacionados con simulaciones digitales de eventos físicos, requiere de un análisis las implicancias entre simulaciones analógicas y digitales para los contextos de explicación, donde por ejemplo, dos simulaciones pueden ser iguales en términos de entrada-salida pero una representar los mecanismos causales del proceso físico y la otra no.

Aunque la relación conceptual involucrada con V&V es compleja, es útil pensar en función de contextos en el ámbito de la investigación mediante códigos computacionales, puesto que el análisis epistemológico se ve favorecido por un amplio marco conceptual ya desarrollado desde la filosofía de la ciencia.

Referencias

- [1] OBERKAMPF W.L. Y TRUCANO T.G., HIRSCH, CH. Verification, Validation, and Predictive Capability in Computational Engineering and Physics. (2002)
http://www.usacm.org/vnyesm/PDF_Documents/Oberkampf-Trucano-Hirsch.pdf
- [2] KLIMOVSKY, G. y SHUSTER F. G. (comp.) *Descubrimiento y creatividad en ciencia*. Bs. As. Eudeba. (2000)
- [3] KLIMOVSKY, G. "Estructura y Validez de las Teorías Científicas". En: GAETA, R., ROBLES, N. *Noiones de Epistemología*, Eudeba, Bs.As. (1986)151-176.
- [4] PAUL HOYNINGEN-HUENE. Context of discovery and context of justification, *Studies In History and Philosophy of Science Part A*, 18. (1987), 501-515
- [5] WEINERT F. "Theories, Models and Constraints", *Studies in History and Philosophy of Science*, 30 (1999) 303-333.
- [6] OBERKAMPF W. L., AND TRUCANO T. G. *Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics*. Sandia National Laboratories, SAND2002-0529. (2002)
<http://infoserve.sandia.gov/cgi-bin/techlib/access-control.pl/2002/020529.pdf>
- [7] KLIMOVSKY, G. *Las desventajas del conocimiento científico*, A-Z Editora, Bs As, (1994) 163-4, 245
- [8] SIMON, H. A., *The sciences of the artificial*, E.U.A, The MIT Press. 3° Edic. (1999) 13-17

- [9] KLEINDORFER G. B., O'NEILL L., GANESHAN R. Validation in simulation: various positions in the philosophy of science. *Management Science*, 44 (1998).
- [10] RAYMOND R. COSNER, CHRISTOPHER P. RAHAIM. The AIAA Committee on Standards for CFD. *QNET-CFD Conference Athens, Greece* (2001) En: www.qnet-cfd.net/workshop/1st/pdf/02_in-1_aiaa.pdf
- [11] DEAN, R.A., BRITO H., ELASKAR A.S. Conceptos de verificación y validación aplicados a la investigación de la ablación del teflón en un propulsor de plasma de propelente sólido. *Actas Congreso Argentino de Tecnología Espacial*. (2003). Ausp. AIAA. www.aate.org
- [12] STEVENSON, D.E. (??) *A Critical Look at Design, Verification, and Validation of Large Scale Simulations*. Clemson University, Clemson, SC 29634-1906.
- [13] MIGUEL H., BARINGOLTZ E. *Problemas epistemológicos y metodológicos*. Bs.As, Eudeba (1998).
- [14] FLICHMAN, E., MIGUEL H., PARUELO, J., PISSINIS, G., *Las raíces y los frutos*, Bs As, Eudeba. (1998) 65-82,159-165

Notas

- 1 p. 56, [6]; p. 13[1];
2 P 37
3 [1] p. 46
4 p. 56