

EPISTEMOLOGÍA E HISTORIA DE LA CIENCIA

SELECCIÓN DE TRABAJOS DE LAS XVIII JORNADAS
VOLUMEN 14 (2008)

Horacio Faas
Hernán Severgnini

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

El Concepto de Calibración en Códigos Computacionales: Una perspectiva desde la concepción hipotética de la ciencia

Raúl Alberto Dean y Livio Sebastián Maglione*

1. Un problema conceptual

La actividad de investigación en las ciencias fácticas y en las ciencias de lo artificial, se caracteriza en la actualidad por su desarrollo en tres niveles: teórico, computacional y experimental, interrelacionados en una manera compleja tanto en el contexto de modelación como en el de justificación del conocimiento producido.

En la actividad de investigación mediante códigos computacionales, verificación y validación (V&V) son métodos primarios para evaluar la exactitud y confiabilidad de las simulaciones computacionales.

Actualmente la Sociedad Americana de Ingenieros Mecánicos (ASME), con el objetivo de desarrollar normas para evaluar la corrección y credibilidad de la modelación y simulación en mecánica de sólidos computacional, aprobó su primer documento fundacional¹ dedicado a estos conceptos. Sobre la base de los conceptos de la AIAA², el comité de la ASME adopta: *Verificación: el proceso de determinar que un modelo computacional exactamente representa el modelo matemático que lo fundamenta y su solución, Validación: 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 la presentación previa de la guía se reconoce que *“gran parte de la V&V no es una ciencia ‘dura’, esencia de la mayor parte de la mecánica computacional, sino más bien una ciencia ‘blanda’ como la filosofía de la ciencia, donde diferentes puntos de vista tienen mérito, y no necesitan ser evaluados como correctos o equivocados”*³; esto constituye un importante reconocimiento y permite fundamentar el carácter transdisciplinario de esta temática. Los conceptos de V&V fueron caracterizados desde una perspectiva de la filosofía de la ciencia en el contexto de justificación en la actividad de investigación mediante códigos computacionales⁴.

Asociado en una forma compleja a los conceptos de V&V se encuentra el concepto de calibración. En la presentación de la guía ASME se esquematiza el proceso de modelación y se reconoce un problema conceptual asociado a este concepto de la manera que a continuación se transcribe: *“... En este punto el modelo computacional puede ser ejecutado (corrido) y los resultados comparados a los datos experimentales disponibles para validación del modelo. Es frecuente el caso que los resultados no se comparan como favorables... Asumiendo un alto grado de confianza en los datos experimentales el analista tiene dos elecciones básicas para revisar el modelo: cambiar su forma o calibrar sus parámetros. Quizás la peor comprendida, y de esta manera la más abusada forma de revisión de un modelo es la Calibración del modelo –“el proceso de ajustar parámetros de modelación física en el modelo computacional para mejorar el acuerdo con datos experimentales.”*⁵

* Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Río Cuarto

Mair⁶ expresa que si bien es ampliamente aceptado que la calibración juega un rol significativo en mecánica computacional, la comunidad no ha alcanzado consenso sobre los componentes de esta actividad, y considera que las calibraciones imponen muchas limitaciones prácticas sobre las simulaciones, básicamente forzando la validación y reduciendo por lo tanto la capacidad predictiva de las mismas. Describe la situación actual manifestando que si bien las calibraciones se realizan en forma rutinaria, sus efectos son raramente cuantificados. Como ejemplo encontramos que en un laboratorio dedicado a la investigación con códigos computacionales que resuelven sistemas de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales para los cuales soluciones analíticas no pueden ser obtenidas, estas cuestiones resultaron de tal importancia que fueron plasmadas en un trabajo donde se expresó con énfasis y con mayúsculas que *“las confusiones entre verificación, validación y calibración DEBERÁN SER EVITADAS por sus altas consecuencias computacionales”*; en sus conclusiones se remarca que *“validación y calibración son diferentes”* y *“enmascarar la calibración como validación es deshonesto”*⁷.

El objetivo en el presente trabajo es intentar una caracterización del concepto de calibración de códigos computacionales sobre la base de una concepción hipotética de la ciencia⁸, que permita plantear diferencias respecto al concepto de validación. Se supone que un modelo computacional (código) en su estructura es formalmente similar a una teoría científica.

2. Un breve análisis del concepto de Calibración de códigos computacionales

De una revisión no exhaustiva encontramos que se entiende por “calibración de códigos computacionales”:

a) el proceso de ajustar parámetros del modelado físico en el modelo computacional para mejorar la concordancia con datos experimentales. Un ejemplo trivial de calibración es la selección del módulo de Young para un modelo constitutivo elástico lineal basado sobre datos de tensiones uniaxiales obtenidos en laboratorio.⁹

b) el ajuste de un conjunto de parámetros asociados con una ciencia computacional y códigos de ingeniería tal que el acuerdo del modelo es maximizado con respecto a un conjunto de datos experimentales.¹⁰

c) una actividad realizada cuando no todos los parámetros de modelación física son conocidos a priori y algunos son considerados ajustables. Similarmente, cuando la convergencia de malla no es obtenida, los resultados pueden ser aceptados “como – si”, o ajustes deberán ser hechos para mejorar el acuerdo con datos experimentales. Estas actividades son llamadas calibración.¹¹

d) el proceso de ajustar parámetros de modelación física y numérica, componentes, o aspectos del modelo computacional con el propósito de implementar un modelo computacional o mejorar el acuerdo con datos experimentales.¹²

e) el proceso de mejorar el acuerdo del cálculo de un código con respecto a un conjunto seleccionado de benchmarks a través del ajuste de parámetros implementados en el código. Los benchmarks no tienen un rol de evaluación en la calibración, sino que son asumidos a ser apropiados para la tarea de calibración. Calibración no es ni verificación ni validación.¹³

f) el proceso de sintonizar el modelo –esto es, la manipulación de variables independientes para obtener un ajuste entre las distribuciones observadas y distribuciones simuladas de las variables dependientes- es conocido como calibración.¹⁴

g). el proceso de estimar los parámetros del modelo para obtener una identidad entre un comportamiento simulado y un comportamiento observado. La calibración intenta unir explícitamente la estructura al comportamiento, lo cual constituye el motivo por el cual es una prueba más rigurosa que solamente hacer concordante la estructura o el comportamiento.¹⁵

De acuerdo al contenido de las diferentes conceptualizaciones:

i) concluimos que la calibración de códigos computacionales *desde lo procedimental* es un proceso que se concreta actuando sobre parámetros de modelación física o numérica del código computacional, para mejorar o lograr la concordancia **entre** datos de salida del código **con** un conjunto de datos experimentales del sistema investigado **o con** datos que representan soluciones analíticas o datos apropiados provenientes de benchmarks.

ii) proponemos clasificarla *sobre la base del tipo de datos* que el código debe reproducir, que podríamos indicar como datos de referencia o respuestas características del sistema. En tal sentido denominamos *calibración empírica*, cuando los datos de referencia son experimentales, y *calibración formal*, cuando los datos de referencia que el código debe reproducir se deducen de un formalismo matemático.

iii) realizamos una interpretación de *su finalidad*. Particularmente los casos (a), (c) y (g) permiten inferir una finalidad heurística. El caso (a) a través del ejemplo explicita un proceso de búsqueda del valor de un parámetro. En (g) se expresa que la calibración se realiza para *estimar* parámetros, lo cual se podría entender como que el fin es "*descubrir*" sus valores, su admisibilidad en el modelo, o su ley cuando se intenta unir la estructura (formal) al comportamiento. En (c), clasifican como actividades de calibración aquellas realizadas cuando no todos los parámetros de modelación física son conocidos a priori y algunos son considerados ajustables; esto se puede interpretar como que en el momento en que se proponen algunos parámetros, para quien los formula se hallan en "estado de problema" pero que pese a ello se los supone verdaderos y se examina las consecuencias de esta suposición cuando se procede al ajuste de los mismos. Básicamente podemos interpretar en estos casos que tanto parámetros como leyes o relaciones son propuestos como hipótesis, y en consecuencia el modelo adquiere esta misma condición.

3. Modelos como hipótesis y el espacio de las restricciones

Los modelos hipotéticos —o modelos *como si*—¹⁶ se proponen para representar a un sistema *como si* consistiese solamente de los parámetros y relaciones estipuladas en el modelo. En estos modelos se idealizan, se abstraen y se conjeturan constantes individuales, variables individuales, cuantificadores, predicados (propiedades y relaciones). No obstante, se conoce que las idealizaciones constituyen simplificaciones matemáticas y que factores abstraídos están presentes en los sistemas reales. Un objetivo para desarrollar un modelo es para realizar predicciones con el mismo en aplicaciones del modelo donde no existan datos experimentales, o no puedan ser obtenidos por diferentes razones.

De acuerdo a Weinert¹⁷, un modelo puede ser construido cuando una cierta cantidad de datos es disponible acerca de algún sistema natural o social, y podríamos añadir, artificial, pero es sabido que diferentes modelos y que aún modelos inadecuados o erróneos pueden explicar el mismo conjunto de datos.

Asumiendo que un modelo es formulado como hipótesis, podemos pensar que al igual que en el contexto de descubrimiento en ciencia, en el contexto de modelación disponemos al menos de tres maneras de proponer modelos como hipótesis:

IE- empleando el método de *inducción por enumeración*, el cual aporta hipótesis a un nivel empírico pero no a un nivel teórico;

SC- *salto creativo*¹⁸ o *imaginación creativa*¹⁹, que consiste en rubricar hipótesis que expliquen el punto de partida y que luego puedan ser puestas a prueba en el contexto de justificación,

AA- mediante algún tipo de algoritmo *analógico*²⁰.

En las tres maneras referidas, existe como elemento común la utilización de datos de la base empírica. En el caso de la inducción por enumeración constituyen el origen del conocimiento, en el salto creativo adquieren importancia como elementos controladores del conocimiento conjeturado, y en el caso de los modelos analógicos nuevamente los datos de la base empírica constituyen el origen del conocimiento. En IE y AA el modelo se construye a partir de datos experimentales desde los cuales se conjeturan proposiciones generales empíricas; en SC el modelo se construye a partir de marcos teóricos donde se proponen hipótesis para explicar el comportamiento observado del sistema. En la construcción de estos modelos encontramos dos elementos esenciales: datos empíricos y proposiciones generales acorde a las cuales estos datos son estructurados. Esto lleva a plantear que los modelos que se propongan deben satisfacer restricciones empíricas y formales.

Las *restricciones* en ciencia pueden ser definidas como condiciones sobre modelos científicos y teorías, tales que de entre un conjunto de parámetros disponibles sólo aquellos que las satisfacen constituyen entradas admisibles²¹. De acuerdo a Weinert, la existencia de restricciones empíricas y teóricas, conforman un *espacio lógico*, que determina tanto las entradas como las interconexiones entre los parámetros admisibles, y considera que no solamente los axiomas de una teoría determinan un espacio lógico, también las restricciones puramente empíricas, en ausencia de cualquier teoría, abren un espacio lógico para los modelos. La consistencia de datos es una restricción empírica que los modelos deben satisfacer y se origina en el nivel de los experimentos y observación. Los modelos están siempre restringidos a un conjunto limitado de datos²².

Las restricciones empíricas no deberán ser vistas solamente como el conjunto de datos observacionales repetibles, o estables experimentalmente que una teoría o un modelo deberá satisfacer, otras restricciones empíricas importantes son provistas por las *constantes físicas fundamentales*, y también por las generalizaciones empíricas, esto es *las leyes empíricas* actúan como condiciones restrictivas sobre la modelación y la construcción de teorías, excluyendo ciertos parámetros de entrada.

Como parte de las restricciones teóricas que se imponen al modelo encontramos las condiciones que normalmente se le requieren a una teoría, entre ellas, la consistencia lógica, requerimientos matemáticos, normas metodológicas, la coherencia conceptual de una teoría y constricciones metafísicas. *La consistencia lógica* se refiere a relaciones simbólicas e impone el requisito mínimo de evitar contradicciones lógicas en el cuerpo de una teoría. *Los requerimientos matemáticos* son impuestos sobre una teoría o sobre un modelo por la naturaleza misma del

formalismo matemático empleado para describir el sistema, y pueden tomar muchas formas diferentes, tales como condiciones de continuidad sobre la diferenciabilidad de las funciones, evitar medidas anómalas. *Normas metodológicas* o instrucciones sobre cómo una teoría deberá ser construida a menudo han sido discutidas por filósofos e incluyen nociones tales como simplicidad, función explicatoria, unificación y evitar modificaciones *ad hoc*.

4. Una caracterización metodológica de la calibración de códigos computacionales en el contexto de modelación

Considerando un modelo como hipótesis, y sobre la base del cumplimiento de restricciones empíricas y formales, proponemos que la *calibración de códigos computacionales* puede ser considerada como *una estrategia para estimar si un parámetro o una ley que exprese su relación con otros parámetros, se encuentran dentro del conjunto de entradas admisibles, para decidir en consecuencia si tal parámetro o ley, forma parte de uno de los posibles modelos que explican el conjunto de datos de referencia disponibles del sistema (natural, social, artificial o formal)*.

Si bien se propone el concepto de calibración como una estrategia del contexto de modelación, los resultados de este proceso no se pueden analizar con independencia del contexto de justificación. Expresamos que cuando se procede a ajustar los parámetros podemos interpretar que básicamente lo que se realiza es obtener consecuencias del modelo deducidas a través del código computacional. Consecuencias que serán formales en el caso de que el modelo represente sólo a un sistema formal o podrán ser observacionales si el modelo representa a un sistema físico. El primer caso podría ser, por ejemplo, cuando proponemos a manera de hipótesis un parámetro como parte de un algoritmo de cálculo del modelo computacional para resolver una determinada ecuación diferencial; al ajustar este parámetro estaríamos realizando una calibración formal. Sus consecuencias las compararemos con soluciones analíticas o de soluciones de benchmarks, y como resultado de la comparación decidiremos acerca de la admisibilidad de este parámetro hipotético en el algoritmo de cálculo. En el segundo caso, si estamos realizando una calibración empírica el método de contrastación de hipótesis²³ se constituye en una estrategia metodológica adecuada para juzgar sobre la bondad de la hipótesis realizada en el modelo. Sabemos que en el proceso de contrastación, cuando se efectúa el test comparativo entre una consecuencia observacional y una observación pertinente podemos obtener la concordancia o no entre la consecuencia observacional y la observación pertinente, siendo esta última aquella observación que se efectúa con el fin de averiguar el grado de acierto o desacierto de las consecuencias observacionales deducidas de una hipótesis.

4.1. Concordancia

Si ajustando el valor del parámetro con algún criterio sistemático, se logra que la salida del código reproduzca datos válidos y consistentes de la base empírica o de un benchmark de referencia, dentro de un margen de error adecuado, podemos decir que dicho parámetro es una entrada admisible del código, pero no podemos asegurar que sea el único que conduce a esos resultados, puesto que el tipo de razonamiento, involucrado en el análisis del valor de verdad de la hipótesis en el caso de concordancia es un razonamiento no válido, conocido como *falacia de afirmación del consecuente*, por lo cual se puede inferir que un mismo conjunto de datos puede ser explicado por diferentes modelos (hipótesis), y aún por modelos incorrectos. La estrategia de

la calibración en este caso permite descubrir una de las formas en que puede construirse un modelo que explica las respuestas características del sistema investigado.

4.2. No-Concordancia

¿Qué podemos decir acerca del parámetro hipotético si habiéndolo variado la concordancia del comportamiento simulado (consecuencia observacional) con el comportamiento experimental (observación pertinente) no se logra? En esta situación el tipo de razonamiento involucrado al juzgar el valor de verdad de la hipótesis es un razonamiento válido (*Modus Tollens*), que nos permite afirmar que el parámetro es "falso", esto es, no es relevante al modelo, o que sus valores numéricos no se encuentran en el rango impuesto por las restricciones, puesto que no permite que la respuesta del código concuerde con datos válidos de la base empírica, que se suponen conocidos con un alto grado de confianza. Podemos, en esta instancia, considerar a la calibración como una forma de "descubrimiento" en el contexto de modelación. El "descubrimiento" consiste en que hemos encontrado que el parámetro conjeturado no es importante en el modelo, sabríamos que el sistema que estamos estudiando no se comporta de acuerdo al mismo y estaríamos autorizados lógicamente a decir que el parámetro propuesto se ha mostrado falso. De todas maneras, sabemos que existen dificultades en el rechazo de la hipótesis.

5. Consideraciones finales

Asumiendo el carácter hipotético de los modelos, las restricciones empíricas y formales a la formulación hipotética de un modelo, y la existencia de un espacio lógico definido por las restricciones, concluimos que es posible caracterizar y fundamentar, si bien en una forma no exhaustiva, el concepto de calibración de códigos computacionales. Cuando en el modelo algún parámetro no es totalmente conocido o bien se desconoce su relación con otros y se los propone con el carácter de hipótesis, en esta situación, la calibración de códigos computacionales puede ser caracterizada como estrategia de "descubrimiento" en el contexto de modelación. Como tal se propone que forma parte de la metodología científica considerada como un sistema de procesos, reglas y estrategias por las cuales se puede obtener conocimiento.

En el proceso de calibración se constituye como necesario: a) *la definición de un objetivo*, por ejemplo, si el ajuste se hace para estimar el valor de un parámetro incógnita, o si el ajuste se hace para estimar la ley que une la estructura al comportamiento, b) *la definición del problema de las restricciones*²⁴, con el objetivo de poder definir los diferentes espacios lógicos en el marco de trabajo de la calibración del modelo, con referencias a valores y relaciones permitidas para los parámetros; c) *la selección de un criterio de acuerdo para la concordancia o no-concordancia*: por ejemplo, mayores diferencias son esperadas para parámetros que no están correctamente representados en el modelo.

Con respecto a la validación, en el caso que con el ajuste de parámetros se logre la coincidencia de la salida del código con lo empírico, resulta complejo establecer una diferencia entre calibración y validación. Si bien la validación fue caracterizada en un trabajo anterior como método perteneciente al contexto de justificación²⁵, su relación con la calibración necesita de un análisis detallado. No obstante, la caracterización propuesta para la calibración y los fundamentos presentados permiten afirmar la siguiente diferencia. con respecto a fines y en el contexto de modelación a la calibración de códigos computacionales le corresponde un fin

heurístico, y a la validación, que fue analizada desde la misma perspectiva filosófica, en el contexto de justificación le corresponde un fin de control sobre el conocimiento producido.

La utilización de códigos computacionales, desde esta perspectiva hipotética de la ciencia, resulta heurísticamente importante y constituye un medio de producción de conocimientos, como estrategia basada sobre una exploración sistemática del espacio paramétrico del modelo.

Notas

¹ *Guide for Verification and Validation in Computational Solid Mechanics* - ASME

² *American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA)*, V&V definidos en AIAAG-077-1998.

³ Schwer L.E., p. 15

⁴ Dean (2004).

⁵ Schwer L.E., p. 17 Nota. Traducción de los autores.

⁶ Mair (2001).

⁷ Trucano *et al* (2004).

⁸ Klimovsky

⁹ Schwer L.E., p. 17

¹⁰ Trucano *et al* (2006).

¹¹ Mair (2001).

¹² AIAA, "Guide for the V&V of CFD Simulations", cit in Mair (2006).

¹³ Trucano *et al* (2004).

¹⁴ p. 91 Hansen L.P., Heckman J.J. (1996).

¹⁵ Oliva, R. (2003).

¹⁶ p. 87 Weinert (2005).

¹⁷ p. 84 Weinert (2005).

¹⁸ Miguel H., Baringoltz E. (1998).

¹⁹ p. 198, Hesse (1953).

²⁰ Hesse (1963).

²¹ Weinert (1999).

²² p. 94 Weinert (2005).

²³ p. 137 Klimovsky (1994), p. 47-49 Miguel (1998).

²⁴ Para el estudio sistemático de las restricciones se podría recurrir a una teoría de las restricciones Friedman, G. (2005).

²⁵ Dean (2004).

Referencias

Oberkampf W.L., Trucano T.G. (2007) Sand Nat., SAND2007-0853 Lab.

Oberkampf W.L., Trucano T.G. (2002) *Progress in Aerospace Sciences*, 38(3): p. 209-272.

Lénhard J., Küppers G., Shinn T. (2006) *Simulation: Pragmatic construction of Reality* Springer.

Schwer L.E. (2007). "An Overview of de PTC60/V&V10: Guide for Verification and Validation in Computational Solid Mechanics" *iacm expressions* 20/07 p. 14-21

Dean R.A. (2004) En. *Epistemología e Historia de la Ciencia*, Edit. Pío García y Patricia Morey 10 (10): p. 168-175.

Klimovsky G. (1994) *Las desventuras del conocimiento científico*, A-Z Editora, Bs As, p. 129-141

Mair H.U. (2001) "Calibration in Computational Mechanics" Draft 20010404.

Trucano, T., Swiler, L., Igusa, T. (2004) "Calibration contra Validation: Characterization and Consequences."

Trucano T.G., *et al*, (2006). *Reliability Engineering and System Safety*, 91(10-11): p. 1331-1357

Hesse, M.B. (1953) *The British Journal for the Philosophy of Science*, 4(15): p. 198-214

Hesse, M.B. (1963) *Models and analogies in science*, Sheed and Ward, London.

Miguel H., Baringoltz E. (1998) *Problemas epistemológicos y metodológicos* Eudeba.

Friedman, G. (2005) *Constraint Theory* IFSR International Series on Systems Science and Engineering 24. Springer

Weinert F. (2005) *The Scientific as Philosopher*, Springer Berlin Heidelberg. pp. 84-94.

Weinert F. (1999) *Studies in History and Philosophy of Science*, 30(2): p. 303-333.

Hansen L.P.; Heckman J.J. (1996) *The Journal of Economic Perspectives*, 10(1), pp. 87-104.

Del Barrio E.P., Guyonb G (2003) *Energy and Buildings* 35 985–996
Oliva R. (2003) *European Journal of Operational Research* 151: 552–568
Simon H.A. (1999) *The Sciences of the Artificial*, The MIT Press. USA