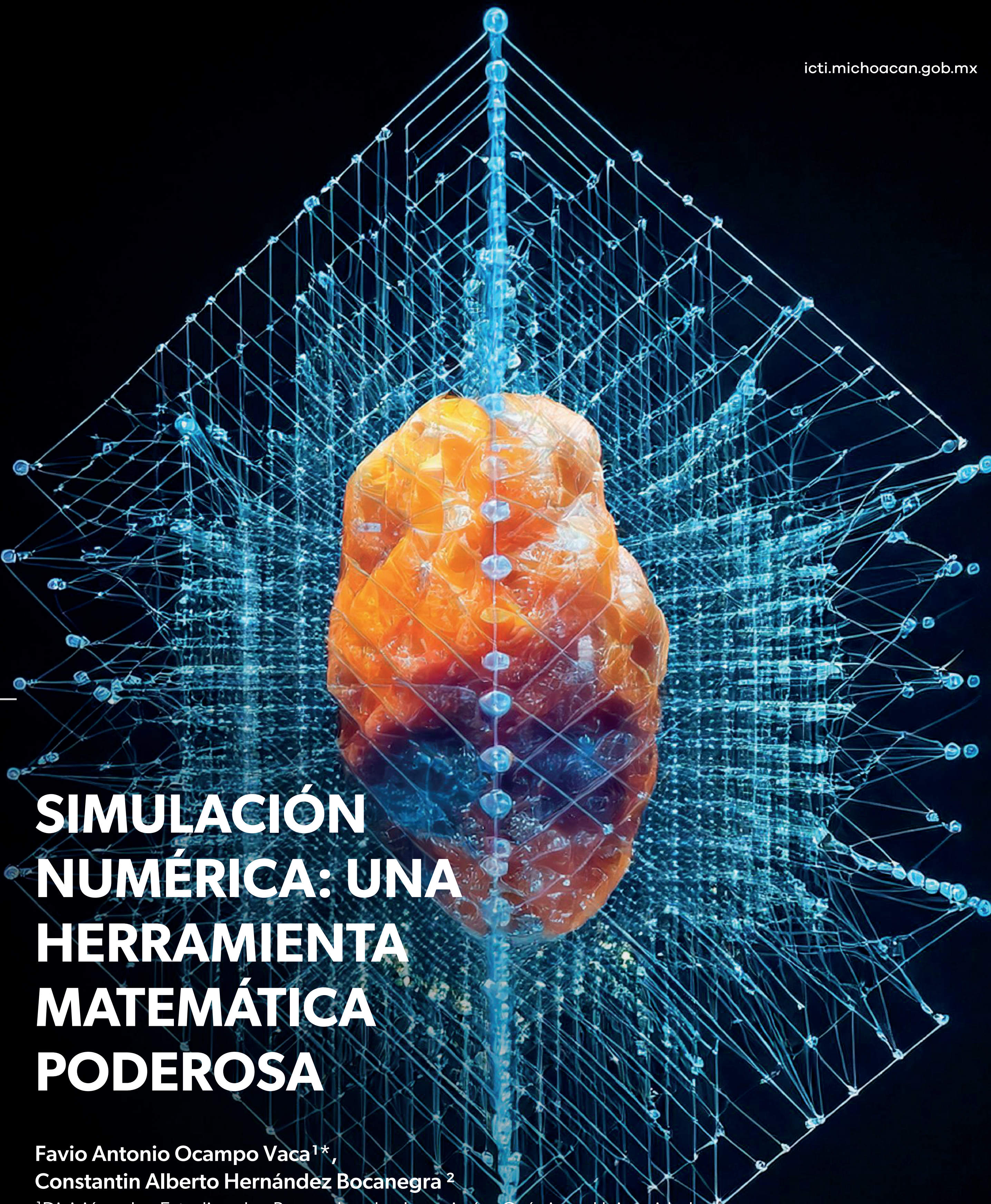


SIMULACIÓN NUMÉRICA: UNA HERRAMIENTA MATEMÁTICA PODEROSA

Favio Antonio Ocampo Vaca[1]*,
Constantin Alberto Hernández Bocanegra [2]
[1]División de Estudio de Posgrado de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo
[2]División de Estudios de Posgrado del Instituto Tecnológico de Morelia
*Contacto: ocampo.ing90@gmail.com

REVISTA C+Tec
Divulgar para Transformar

Simulación numérica: Una herramienta matemática poderosa

RESUMEN

La modelación numérica, permite entender y predecir fenómenos sin recrearlos físicamente. Desde las civilizaciones antiguas hasta la actualidad, las matemáticas han evolucionado de tal manera que nos permiten modelar fenómenos complejos, como el flujo de fluidos, fenómenos electromagnéticos, termodinámicos, entre otros. Con la invención de las computadoras, surgieron herramientas como la dinámica de fluidos computacional, que han permitido desarrollar simulaciones numéricas complejas, estas herramientas ofrecen precisión, reducción de costos y la posibilidad de analizar fenómenos en condiciones extremas, aunque para ello se requieren computadoras avanzadas. El panorama a futuro en este sentido es prometedor ya que con el desarrollo de la computación cuántica las simulaciones numéricas alcanzarían una precisión y rapidez sin precedentes.

Palabras claves:
SIMULACIÓN NUMÉRICA, MÉTODOS COMPUTACIONALES, DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL, MODELOS MATEMÁTICOS.

La conciencia que el ser humano tiene es quizá el mayor regalo que la naturaleza nos ha brindado, puesto que ella es la razón de que sepamos que estamos vivos, experimentemos fenómenos naturales y nos percatemos de mucho de lo que sucede en el universo. De cierta manera es también la causa de la curiosidad que caracteriza a nuestra especie, porque al ser consciente de los acontecimientos que suceden a nuestro alrededor es imposible no querer saber cómo es que funcionan. Con la observación como principal aliada, el ser humano ha buscado entender el mecanismo escondido que mueve al universo. La modelación numérica nace justamente de esta necesidad de entender y explicar cómo funcionan los fenómenos naturales. En términos simples se puede decir que una simulación numérica consiste en usar las matemáticas para resolver un problema teórico o práctico y obtener resultados que nos ayuden a predecir el comportamiento de algún fenómeno, sin la necesidad de recrearlo físicamente.

Los primeros modelos matemáticos de los que se tiene registro, datan de los orígenes de la civilización humana, específicamente de las civilizaciones babilónica (aprox. 2000-538 a.C.) y egipcia (3200-300 a.C.). Los babilonios utilizaron tablas numéricas, relaciones matemáticas y ecuaciones de primer grado para resolver problemas prácticos relacionados principalmente con la agricultura y la astronomía [1], específicamente estos modelos matemáticos fueron usados para calcular áreas y volúmenes. De manera similar, los egipcios desarrollaron sus conocimientos matemáticos para medir superficies de tierra y para realizar cálculos ingenieriles necesarios en la construcción de sus pirámides, evidencias de ello se muestran en los papiros de Rhind [2] y de Moscú [3]. Más adelante en la historia aparecen los griegos (600 a.C. - 300 d.C.) quienes desarrollan notablemente los conocimientos matemáticos de la época, con personajes tan importantes como Euclides, quien en su obra *Elementos* [4] establece un modelo axiomático para la geometría, dicho modelo se convirtió en pilar fundamental para el desarrollo de esta rama de las matemáticas; Pitágoras con su famoso teorema sentó las bases de la trigonometría [5]; Arquímedes fue otro brillante matemático griego que desarrolló varios modelos matemáticos, entre los más importantes encontramos el modelo para calcular el volumen de una esfera, la Ley de la Palanca, el Principio de Arquímedes [5], entre otros. Estos primeros avances en el estudio de las matemáticas sirvieron de base para el desarrollo de las ciencias modernas, colocando a las matemáticas como una herramienta fundamental para entender, modelar y predecir los fenómenos que ocurren en el universo.

Figura 1. Tabla numérica babilónica Plimpton 322 [6].

En la segunda mitad del siglo XVII Isaac Newton y Gottfried Wilhelm Leibniz construyeron los cimientos de las matemáticas modernas con el desarrollo del cálculo. En la antigüedad las matemáticas fundamentalmente se usaron para resolver problemas prácticos, sobre todo relacionados con la agricultura y astronomía, sin embargo, a partir del siglo XVII se encontró que los fenómenos naturales (eléctricos, magnéticos, químicos, etc.) pueden ser descritos por medio de modelos matemáticos y esto revolucionó completamente la historia de la humanidad puesto que ahora las matemáticas no sólo son usadas para resolver problemas prácticos sino también problemas teóricos, de manera que en la actualidad muchos de los fenómenos observados en el universo pueden ser descritos por medio de ecuaciones o modelos matemáticos.

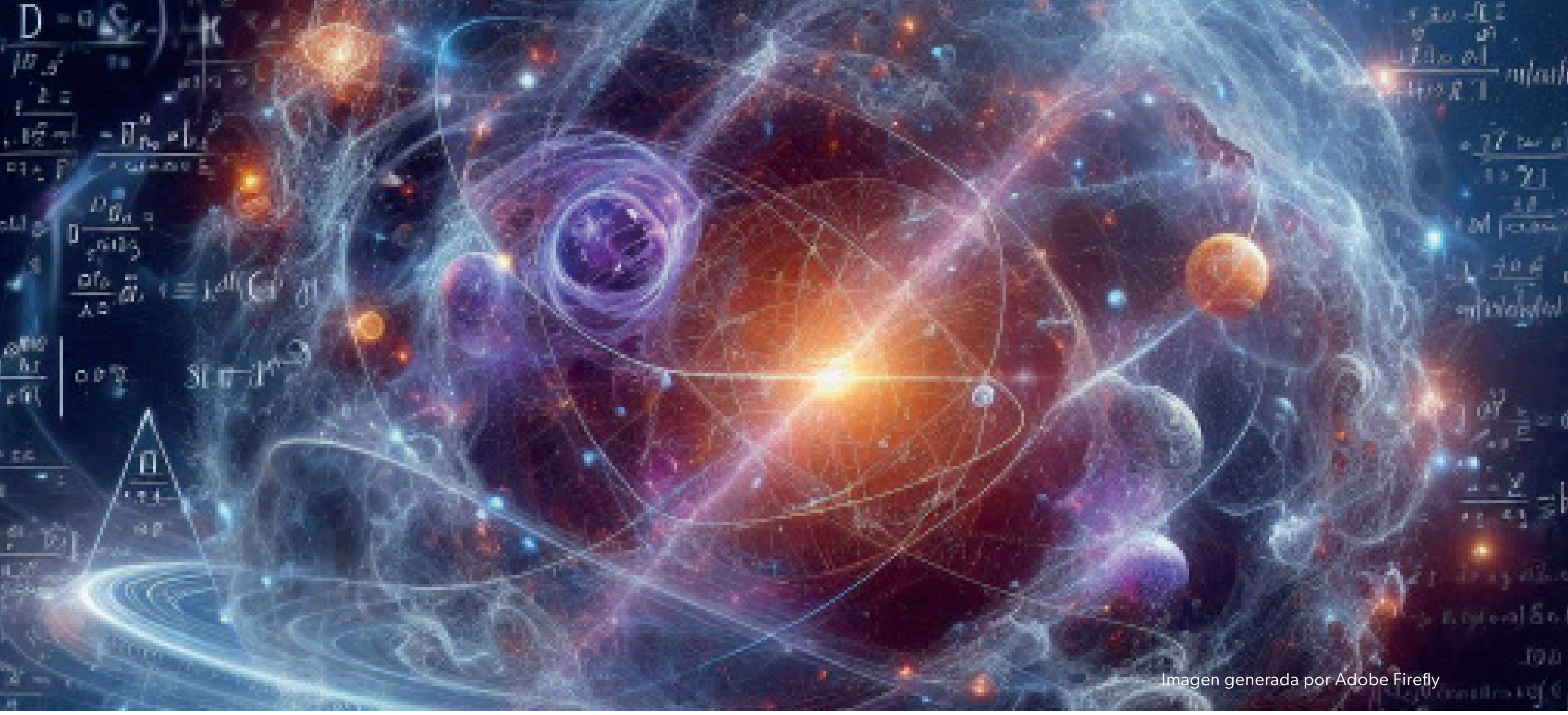
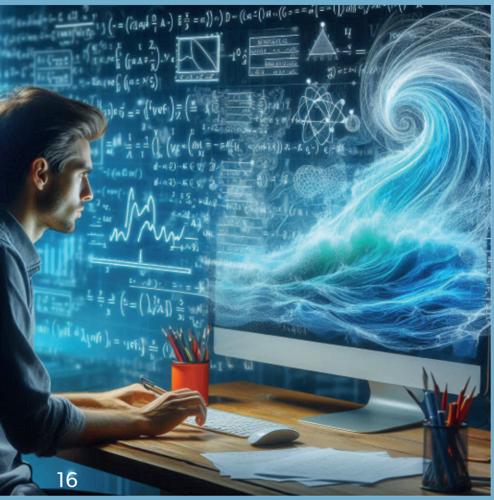


Imagen generada por Adobe Firefly

Formalmente una simulación numérica consiste en representar un fenómeno real mediante ecuaciones o modelos matemáticos con la finalidad de analizar y predecir el comportamiento de dicho fenómeno [7]. Podemos decir, en términos generales, que existen dos tipos de experimentaciones: una denominada experimentación física y la otra experimentación numérica. La primera consiste en recrear el fenómeno que se desea estudiar en condiciones controladas, por ejemplo, en un laboratorio; el controlar las variables del sistema nos permite analizar el fenómeno, obtener datos y finalmente predecir el comportamiento del mismo. La segunda consiste en resolver las ecuaciones que gobiernan al fenómeno, y con ello podemos predecir el comportamiento del mismo sin la necesidad de tener que recrearlo físicamente en un laboratorio. Por ejemplo, imaginemos el conocido experimento de Galileo Galilei, según la historia entre 1589 y 1592, Galileo quería saber si dos objetos de diferentes masas caían o no al mismo tiempo cuando se dejaban en caída libre [8], para llevar a cabo este experimento subió a la torre de Pisa y dejo caer dos objetos de distintas masas. En ese entonces no existía otra forma de corroborarlo sino haciendo el experimento físicamente. Hoy en día, derivado justamente de los experimentos de Galileo, se conocen las ecuaciones que describen el comportamiento de los cuerpos en caída libre y no es necesario realizar ningún experimento para saber cuánto tiempo tarda un objeto en caer desde cualquier altura conocida, solo basta contar con una hoja de papel y un lápiz para resolver la ecuación de caída libre. A partir del siglo XIX el desarrollo de las ciencias ha sido exponencial y los modelos matemáticos que se han desarrollado para describir fenómenos complejos como el flujo de fluidos, el electromagnetismo o la termodinámica, por mencionar algunos, se han vuelto bastante complicados de resolver, al grado de llegar incluso a no tener solución analítica hasta hoy en día, tal es el caso de las ecuaciones que rigen el comportamiento de los fluidos. Para hacer frente a este problema se desarrollaron métodos numéricos como: el volumen finito, las diferencias finitas o el elemento finito, estos métodos iterativos proveen una aproximación a la solución de las ecuaciones diferenciales parciales no lineales que gobiernan al flujo de fluidos, sin embargo estos métodos implican la realización de una cantidad ingente de cálculos. A mediados del siglo XX M. Kawaguti resolvió las ecuaciones para flujo alrededor de un cilindro, la integración numérica de este estudio precisó de un año y medio, dedicando 20 horas a la semana para realizar cálculos [9], en la actualidad con la ayuda de super computadoras, una simulación de este tipo tardaría fracciones de segundo.

Con la incursión de las computadoras nace una nueva rama de la mecánica de fluidos llamada "dinámica de fluidos computacional", con la ayuda de las computadoras se logra encontrar aproximaciones a las soluciones de las ecuaciones de gobierno de los fluidos mediante técnicas numéricas iterativas (volumen finito, elemento finito o diferencias finitas) en mucho menor tiempo. Hoy en día existen softwares especializados (Ansys, COMSOL, OpenFOAM, entre otros) para simular flujo de fluidos, transferencia de calor, análisis estructural, fenómenos electromagnéticos, fenómenos químicos, etc. Estos programas utilizan algoritmos que dictan a la computadora una serie de pasos que debe de ejecutar para encontrar una solución aproximada. En forma general estos algoritmos siguen la siguiente estructura [9]:



1. Preparación del modelo. Consiste en desarrollar la geometría virtual, ésta delimita el dominio matemático donde la computadora resolverá las ecuaciones correspondientes del fenómeno a simular.
2. Discretización del dominio matemático. Consiste en dividir en pequeñas partes el dominio matemático para posteriormente utilizar algún método numérico, como los antes mencionados.
3. Solución del sistema. Se linealizan las ecuaciones diferenciales formando sistemas algebraicos que la computadora resuelve mediante métodos matriciales.
4. Post-procesamiento. Permite al usuario analizar todos los datos que se generaron durante la solución del sistema, mediante herramientas visuales como gráficas, contornos, animaciones etc.

La dinámica de fluidos computacional y en general la simulación numérica se ha consolidado como una herramienta poderosa para el estudio y análisis de fenómenos muy complejos, que sin las computadoras son imposibles de modelar de forma realista, como la turbulencia por ejemplo. El uso de la turbulencia en dinámica de fluidos es crucial dado que afecta significativamente el comportamiento real de los mismos, pues tiene efectos directos sobre el transporte de cantidad de movimiento, calor y masa; no usar modelos de turbulencia puede llevar a obtener resultados erróneos cuando se desea simular un fluido plenamente turbulento. Sin embargo, debido a su naturaleza caótica es muy difícil de predecir e imposible modelarla completamente sin el uso de computadoras potentes, principalmente por el costo computacional pues se requiere resolver los modelos turbulentos en macroescala y microescala. En la actualidad las simulaciones matemáticas tienen un amplio campo de aplicación: industria automovilística, aeroespacial, mecánica, metalúrgica, química, farmacéutica, etc. Esto se debe principalmente a las ventajas que ella ofrece [9]:

1. Posibilidad de analizar sistemas en condiciones difíciles de reproducir experimentalmente.
2. Capacidad de estudiar sistemas en condiciones peligrosas.
3. Nivel de detalle prácticamente ilimitado.
4. Reducción de costos, ya que no se ocupa de la infraestructura de un laboratorio para realizar experimentaciones.

También podemos encontrar algunas desventajas inherentes a la simulación numérica, por ejemplo:

1. Se necesitan computadoras de gran capacidad que normalmente no son baratas.
2. No siempre es posible obtener resultados suficientemente precisos.
3. Limitación de algunos modelos matemáticos.

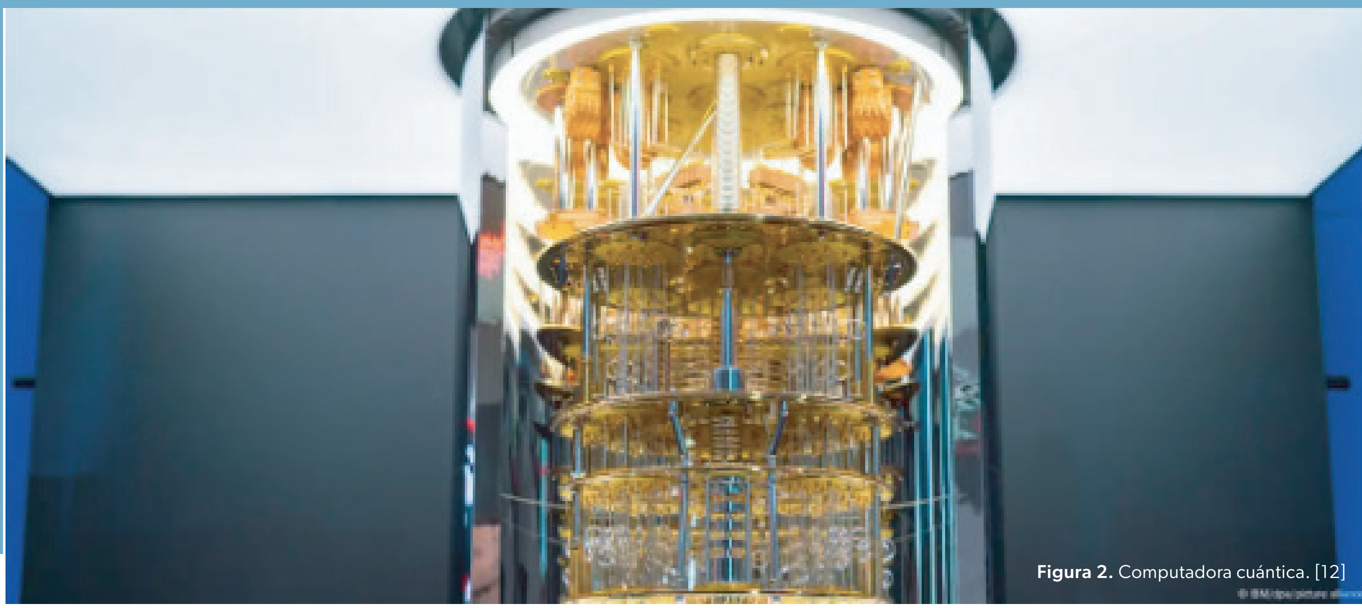


Figura 2. Computadora cuántica. [12]

En el ámbito nacional, México cuenta con una Red Nacional de Computo Científico de Alto Rendimiento (Redato) que es una articulación de infraestructuras nacionales para brindar servicios, dirigida a la comunidad científica y académica, dependencias públicas y la industria a través del procesamiento y almacenamiento de la información en sistemas mexicanos, permitiendo la colaboración en proyectos de investigación en áreas como la dinámica de fluidos, la inteligencia artificial y la simulación de sistemas complejos. En su fase inicial, Redato proporciona servicios de cómputo científico de alto rendimiento, almacenamiento de datos y virtualización en la nube para proyectos financiados por el Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCyT) [10]. A nivel global el futuro de las simulaciones es muy prometedor, sobre todo considerando los avances en materia de computación que permitirían realizar simulaciones cada vez más complejas. Con el desarrollo de la computación cuántica las simulaciones numéricas escalarían a otro nivel de detalle y expandirían su uso a casi cualquier área del conocimiento. Sin embargo, a pesar de los avances, la computación cuántica aún está en etapas tempranas, y muchos de los sistemas cuánticos actuales están limitados por la decoherencia y las tasas de error, lo que dificulta su uso en simulaciones matemáticas a gran escala. En el futuro, con el desarrollo de corrección de errores cuánticos y la mejora en la fidelidad de los cúbits, estas limitaciones podrían superarse, abriendo nuevas posibilidades para las simulaciones matemáticas con una precisión y rapidez sin precedentes [11].

Referencias bibliográficas

[1] Rubio, I. J. C. (2008). Matemáticas y astronomía en Mesopotamia. *Suma*. Obtenido de: https://revistasuma.fespm.es/sites/revistasuma.fespm.es/IMG/pdf/58/049-061.pdf

[2] Spalinger, A. (1990). The Rhind mathematical Papyrus as a historical document. *Studien zur altägyptischen Kultur,* 295-337. Obtenido de: https://www.jstor.org/stable/25150159

[3] Karpinski, L. C. (1923). An Egyptian mathematical papyrus in Moscow. *Science*, 57(1479), 528-529. DOI: 10.1126/science.57.1479.528.b

[4] Euclid, S. T. L. H. (1908). The thirteen books of Euclid's Elements, Vol 1 Books 1-2. Obtenido de: https://libarch.nmu.org.ua/discover

[5] Heath, T. L. (2003). A manual of Greek mathematics. Mineloa, N.Y. Dover Publication.

[6] Villatoro F. R. (2017), Tabla numérica babilónica Plimpton *322*. [Fotografía]. Obtenido de: https://francis.naukas.com/2017/09/07/el-significado-matematico-de-la-tablilla-babilonica-plimpton-322/

[7] Banks, J. (2005). Discrete event system simulation. Pearson Education India.

[8] Drake, S. (2003). Galileo at work: His scientific biography. Mineloa, N.Y. Dover Publication.

[9] Fernández-Oro, J. M. (2012). Técnicas numéricas en ingeniería de fluidos. Barcelona, España. Ed. Reverté,

[10] G. d. México (2024), Redato. Obtenido de: https://redato.crip.conacyt.mx/?section=section-1.

[11] WIRED (2022), Las computadoras cuánticas están desentrañando los misterios de la naturaleza". Obtenido de: https://es.wired.com/articulos/computadoras-cuanticas-misterios-de-la-naturaleza.

[12] IBM (2020), Computadora cuántica. [Fotografía]. Obtenido de: https://www.dw.com/es/ibm-crea-el-ordenador-cu%C3%A1ntico-superconductor-m%C3%A1s-potente-de-la-historia/a-59837328