

## **VALIDACION DE MODELOS EN MECANICA COMPUTACIONAL**

**Luis A. Godoy**

Departamento de Estructuras, FCEfYN, Universidad Nacional de Córdoba y CONICET  
Casilla de Correo 916, Córdoba 5000, Argentina  
e-mail: lgodoy@com.uncor.edu

**Patricia M. Dardati**

Facultad Regional Córdoba  
Universidad Tecnológica Nacional, Córdoba, Argentina

### **RESUMEN**

La validación es uno de los problemas fundamentales que afronta el investigador en el proceso de desarrollo de un modelo numérico. En qué criterios basarse para determinar la aceptabilidad de los resultados, es una cuestión que muy frecuentemente preocupa al científico. En este trabajo se presenta un análisis y clasificación de los métodos de validación utilizados, y se consideran los artículos publicados en 12 ejemplares consecutivos de una reconocida revista científica en mecánica computacional. Los resultados obtenidos permiten reflexionar sobre las prácticas más utilizadas para la validación en mecánica computacional y pueden servir de ayuda a los investigadores para elegir los métodos con los cuales probar la aceptabilidad de sus trabajos, según los criterios más frecuentemente usados por la comunidad científica. Los resultados también ilustran que los investigadores de la mecánica computacional no confían demasiado en resultados experimentales como una forma de validación.

### **ABSTRACT**

Validation is one of the fundamental problems faced by a researcher working in the development of a numerical model. An important concern is the criteria to be used in the assessment of results. This work reports an analysis and classification of the papers published in twelve consecutive issues of an important journal in computational mechanics. The results obtained illustrate what are the practical ways in which validation is carried out in computational mechanics, and may help researchers in this field to select the methodology to validate their work according to the criteria most frequently accepted by members of the scientific community. The results also illustrate that researchers in computational mechanics do not heavily rely on experimental results as a way of validation.

### **INTRODUCCION**

Una de las preocupaciones recurrentes de los filósofos de la ciencia es la cuestión de la "verdad" del conocimiento científico. Existen varias teorías al respecto, entre ellas la de verdad como correspondencia y también aquellas que niegan la posibilidad de realizar aseveraciones acerca de la verdad del conocimiento. Dentro de esta última posición hay diferentes enfoques, en alguno de los cuales se sustituye el concepto de verdad por el de utilidad, el de progreso o de valores de los científicos (ver, por ejemplo, Refs. [1-3]). El tema general cae bajo el concepto de confiabilidad del conocimiento y cuales son las condiciones que deben darse para poder garantizar que algo es

confiable. Este tipo de discusiones suele presentarse a estudiantes doctorales de ingeniería, pero desde el punto de vista exclusivamente epistemológico, de manera que se aleja de las características más específicas de la práctica científica. Por otra parte, la práctica de investigación transcurre normalmente alejada de inquietudes filosóficas y emplea criterios de validación de conocimientos no explícitos (aunque en algunas ocasiones se hacen explícitos).

En este trabajo nos ocuparemos de cómo se validan conocimientos en la disciplina de la mecánica computacional y para ello evitaremos realizar declaraciones normativas (acerca de cómo deberían validarse conocimientos), restringiéndonos a describir la forma específica de validación empleada. Adicionalmente se tratará de explicar la evidencia empírica obtenida mediante consideraciones sobre la propia dinámica de la disciplina.

### LA MECANICA COMPUTACIONAL

La mecánica computacional puede caracterizarse como una disciplina de desarrollo de modelos generales que, mediante su implementación informática, son aplicables a la resolución de diversos problemas de la mecánica en el ámbito de la física y de la ingeniería. El objetivo final de la creación de estos modelos es el de representar "una realidad", de manera de simular o predecir su comportamiento. De manera que el conocimiento generado en la mecánica computacional es de tipo representativo, y se lleva a cabo mediante una representación con un fin determinado y dentro de ciertos límites más o menos establecidos.

En el estudio de un problema particular podemos identificar, por lo menos, los siguientes niveles de representación:

1. El problema que es necesario resolver.
2. El fenómeno físico que caracteriza el problema.
3. La teoría que explica el fenómeno.
4. La expresión matemática de la teoría.
5. La expresión matemática particularizada, correspondiente al caso en estudio.
6. La resolución de la expresión matemática particularizada mediante algoritmos.
7. La implementación computacional de los algoritmos.

Podemos interpretar que se tratan de diferentes niveles de traducciones, en los que se traduce y se especifica el problema utilizando lenguajes diferentes pero compatibles entre sí. Analizando los niveles mencionados resulta evidente que la coincidencia de los resultados de un estudio con la realidad depende de numerosos factores.

Lo anterior supone que la representación del problema sigue un esquema claro y separado. Sin embargo hay situaciones aun más complejas, en las que la expresión matemática particularizada introduce nuevas suposiciones a nivel teórico, como los elementos finitos de tipo Semiloof para cáscaras, las técnicas de integración reducida y tantos otros.

### METODOS Y CRITERIOS DE VALIDACIÓN DE MODELOS

La validación de un modelo de la mecánica computacional puede ser considerada desde dos puntos de vista distintos: validación interna o externa.

*Validación interna (o verificación):* Consiste en construir la representación de manera correcta ("resolver correctamente las ecuaciones"). Uno de los objetivos de la verificación es asegurar el acuerdo entre las especificaciones del sistema y lo que el sistema hace. Además, asegura que no hay errores introducidos por quien traduce la formulación matemática en un código computacional. Es muy importante y necesaria ya que implica la comprobación de la capacidad del modelo de arribar a un resultado único y correcto de acuerdo al planteo matemático representativo del modelo. En este

tipo de validación se comprueban aspectos tales como la convergencia de la solución y la satisfacción del equilibrio y el correcto funcionamiento matemático-computacional, pero no se asegura la capacidad predictiva del modelo.

*Validación externa:* Consiste en construir la representación correcta (“resolver las ecuaciones correctas”). Su objetivo es asegurar que los resultados del modelo son correctos con relación al comportamiento del sistema que se estudia. Es esta etapa la que interesa al epistemólogo, mientras que la verificación es de interés para el informático. “Suponiendo que una base de conocimientos ha sido verificada, la validación asegura que el conocimiento que contiene representa correctamente y simula un dominio de conocimientos.” [4]

La validación externa requiere establecer **criterios de validación**. En general, se puede decir que **todas** las representaciones son válidas con respecto a **algún** criterio, pero interesa considerar cuáles son los criterios que emplea una comunidad de científicos para validar modelos. Algunos criterios consisten en comparaciones con resultados disponibles, otros requieren de la generación de nuevos resultados para comparar, mientras que otros usan respuestas de expertos. Aquí nos limitaremos a criterios de comparación con resultados disponibles. Podemos distinguir por lo menos tres casos:

*Comparación con otras soluciones numéricas:* Se busca identificar la proximidad de las soluciones encontradas con respecto a las halladas con otro modelo. Frente a este tipo de validaciones surge la pregunta ¿porqué el investigador decide validar sus resultados aproximados con otros también aproximados, obtenidos por otros autores o por otros métodos? Este criterio de validación no implica en sí mismo la comprobación de que el modelo propuesto sea representativo de una realidad. En algunos casos se aspira a obtener los mismos resultados pero con una mayor eficiencia, es decir, con un mejor rendimiento de los recursos utilizados.

*Comparación con soluciones analíticas:* En este caso se debe suponer que el investigador está de acuerdo con la teoría que sustenta la formulación analítica y con el planteo matemático de la misma, y que el proceso de desarrollo de su modelo está motivado por su interés en dar un tratamiento computacional a algo que como caso particular admite una respuesta analítica. En este tipo de validación es importante tener en cuenta que, aún cuando sea posible resolver la expresión analítica, esto es sólo para casos extremadamente sencillos y en los que se hacen simplificaciones importantes, con lo cual, persiste el interrogante de cómo funcionará el modelo para casos más complejos.

*Comparación con resultados experimentales:* La concordancia de los resultados computacionales con aquellos obtenidos experimentalmente parecería ser la más deseada ya que, en principio, estaría manifestando la concordancia del modelo con una realidad que representa. Sin embargo se debe ser muy cauto y evitar extraer conclusiones optimistas muy rápidamente. En la mayoría de los casos la realización de los experimentos y la medición de las magnitudes son tareas sumamente complejas. También suele presentar dificultades la correcta consideración de las condiciones de contorno, la determinación de las solicitaciones y de las características de los materiales. Por lo tanto siempre existe el riesgo de que el modelo sólo funcione para un ensayo en particular y que no sea capaz de efectuar predicciones para cualquier situación o bien que sean las mediciones realizadas las que no representan fielmente la realidad.

*Comparación con benchmarks:* En el campo de la mecánica computacional hay posibilidades de validación que han sido institucionalizadas, lo cual muestra que se trata de una preocupación genuina y generalizada. La NAFEMS (*National Agency for Finite Element Methods and Standards*) [5] es una asociación internacional sin fines de lucro, fundada en 1983 con el objetivo de promover el uso correcto y confiable de los elementos finitos. Para llevar a cabo esa misión desarrolla *benchmarks* o estándares, cuyo objetivo es considerar la habilidad de un elemento o de un programa de elementos finitos de producir resultados aceptables. Normalmente los *benchmarks* son desarrollados, bajo contrato con NAFEMS, por expertos en el tema. En general están constituidos por conjuntos de

problemas que abarcan cada uno aspectos importantes y distintos del tema bajo análisis. La performance de un modelo numérico o de un programa es algo difícil de medir ya que depende no sólo del tipo de elemento y arquitectura del sistema, sino que también tienen influencia el tamaño del problema, la habilidad del analista para modelar, el software y hardware usados, junto con otros factores. Por estas razones los *benchmarks* se diseñan de manera de satisfacer ciertos requisitos [6-7].

### EVIDENCIA SOBRE CRITERIOS ACEPTABLES EN MECANICA COMPUTACIONAL

Con el objetivo de conocer cómo validan sus modelos los investigadores dedicados a la mecánica computacional, se clasificaron los 104 trabajos contenidos en 12 números consecutivos de la prestigiosa revista científica *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. Las revistas seleccionadas corresponden a los números 1 al 12 del volumen 38 del año 1995. La clasificación utilizada en el análisis sigue el esquema mostrado en la Figura 1.

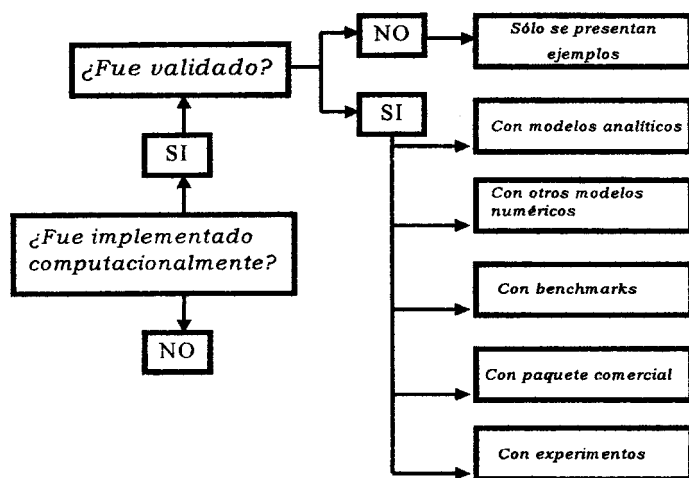


Figura 1. Criterio utilizado para la clasificación de los tipos de validación.

De la clasificación de los trabajos analizados, teniendo en cuenta el tipo de validación empleada en cada uno, resulta la Tabla I, en la que los artículos se identifican por el número de su primera página. Es importante aclarar que algunos artículos presentaban más de un tipo de validación y por eso aparecen en más de una categoría. Sólo se tienen en cuenta las validaciones de distinto tipo que se realizan en cada artículo y no cuántas veces se valida. En muchos trabajos se presentan más de un ejemplo y, normalmente, los ejemplos más sencillos son validados comparando con la solución analítica mientras que los más complejos no se validan o se validan comparando los resultados con los obtenidos por otros autores.

No fue implementado computacionalmente	717-2101	2 art.
Sólo se presentan ejemplos de aplicación	27-99-119-183-299-335-451-535-549-583-631-667-775-809-823-841-861-943-1171-1243-1327-1399-1507-1535-1555-1721-1901-1951-1967-2017-2083-2115	32 art.
Se compara con resultados experimentales	259-489-685-735-969-1021-1123-1307-1611	9 art.
Se compara con resultados analíticos	1-37-63-81-171-199-231-283-357-371-399-	33 art.

	421-509-607-735-887-969-1031-1073-1087-1341-1361-1475-1579-1635-1655-1757-1783-1809-1885-1917-2033-2055	
Se compara con resultados de otros autores u otros métodos	1-37-81-137-259-283-315-371-489-649-685-797-927-955-1001-1031-1073-1087-1123-1149-1201-1215-1259-1287-1307-1361-1431-1475-1579-1597-1611-1655-1681-1739-1757-1783-1809-1855-1885-1917	40 art.
Se compara con resultados de paquetes comerciales	137-1635-1917-1985-2033	5 art.
Se realizan <i>benchmarks</i> (NAFEMS)	1757	1 art.
Se presentan mejoras de algoritmos y se comparan eficiencias	245-433-469-565-755-905-989-1057-1327-1507-1535-1597-1703	13 art.

Tabla I.

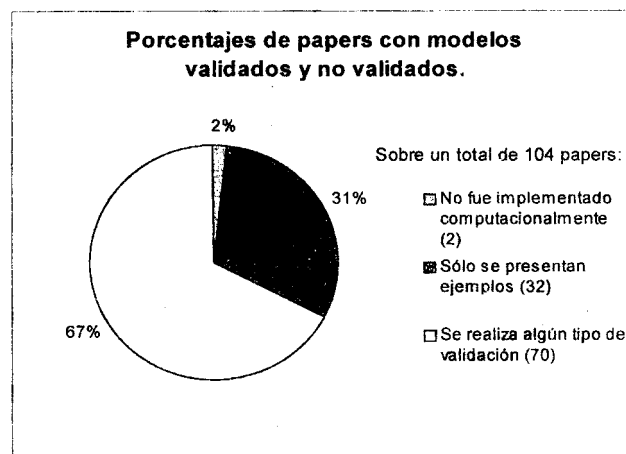


Figura 2.

En la Figura 2 puede verse cuántos trabajos presentan algún tipo de validación, cuántos sólo presentan ejemplos y en cuántos los modelos propuestos no han sido implementados computacionalmente. De los 70 artículos en los que se presenta algún tipo de validación, en 41 se lleva a cabo sólo una forma de validación, en 27 se llevan a cabo dos tipos distintos de validación y sólo en dos trabajos hay tres tipos de validaciones (ver Figura 3 y Tabla II). El porcentaje de cada tipo de validación con respecto al total registrado se muestra en el gráfico de la Figura 4.

En cuanto a los trabajos en los que se presentan comparaciones con los resultados obtenidos por otros autores, resultaría de gran interés la realización de un estudio más profundo, en el que se analizaran los artículos referenciados de manera de poder determinar de qué manera se realizaron en ellos las validaciones ya que podría ocurrir que presentaran resultados validados analíticamente o experimentalmente, lo cual implicaría un cambio en la clasificación realizada en el presente trabajo.

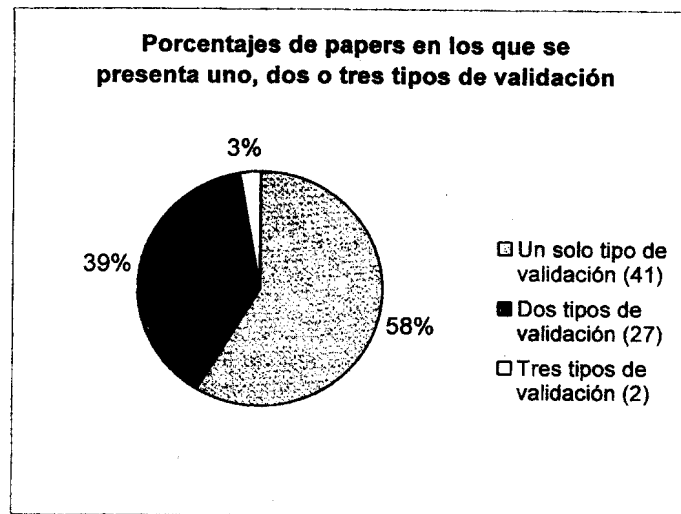


Figura 3

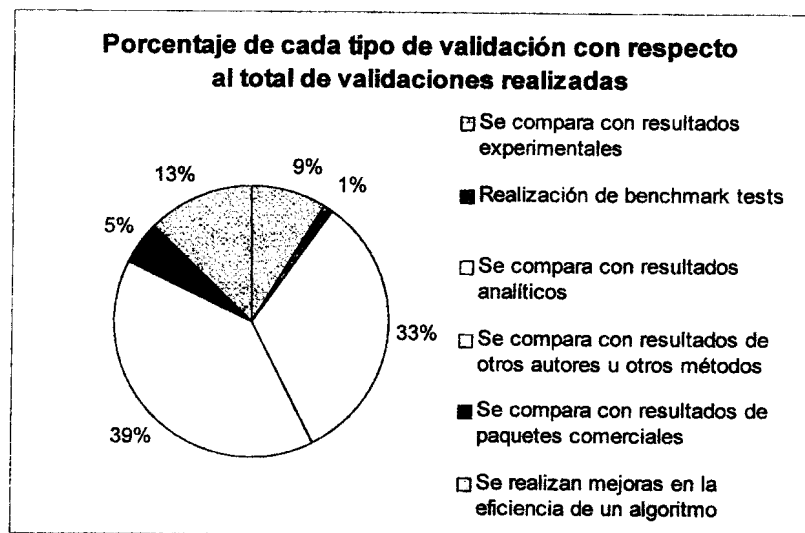


Figura 4.

## DISCUSION

Del total de 104 artículos analizados, dos no presentan ninguna implementación computacional; de los 102 restantes sólo en 70 de ellos se realiza algún tipo de validación del modelo presentado. En 29 artículos se lleva a cabo más de un tipo de validación. Los tipos de validación que con mayor frecuencia realizan los autores consisten en la comparación de sus resultados con aquellos obtenidos por otros investigadores o bien por resolución analítica.

En las versiones clásicas del empirismo, el científico valida las hipótesis propuestas o modelos desarrollados mediante comparaciones con resultados de experimentos. Pero la evidencia encontrada en este estudio muestra de manera concluyente que los investigadores en la mecánica computacional

no recuren a este tipo de validación, a pesar de lo cual sus colegas revisores aceptan los artículos sin considerar que no han producido evidencia empírica adecuada. De modo que este estudio muestra cual es el estándar de aceptación de modelos por parte de quienes investigan.

Sólo un tipo de validación	Comparación con resultados experimentales	1 art.
	Comparación con resultados analíticos	10 art.
	Comparación con resultados de otros autores y otros métodos	15 art.
	Comparación con resultados de paquetes comerciales	2 art.
	Mejoras de algoritmos	13 art.
Dos tipos de validación	Comp. con result. experimentales y result. analíticos	2 art.
	Comp. con result. experimentales y result. de otros autores	6 art.
	Comp. con result. analíticos y result. de otros autores	17 art.
	Comp. con result. analíticos y result. de paquetes comerciales	2 art.
Tres tipos de validación	Comp. con result. analíticos, de otros autores y benchmark	1 art.
	Comp. con result. analíticos, de otros autores y paq. Comercial	1 art.

Tabla II. Cantidad de artículos con una, dos y tres tipos de validaciones.

¿Cuál es la causa de aceptar modelos sin un respaldo empírico? Para comprender la situación planteada, debemos recurrir a la historia misma de la mecánica computacional.

La mecánica computacional se posicionó de manera antagónica frente a la mecánica experimental desde la década de 1970. Por ejemplo, Chapman *et al.* [8] afirmaron que la CFD (dinámica de fluidos computacional) sería capaz de resolver todos los problemas importantes de la dinámica de fluidos hacia mediados de los 80, y se eliminaría la necesidad de llevar a cabo experimentos en túnel de viento. De allí surgió la afirmación que los laboratorios sólo servirían como depósitos para almacenar salidas de computadoras. Esto “contribuyó a polarizar a los fluido-dinamicistas computacionales y experimentales en dos grupos adversarios, a veces en amarga competencia. ... Malos sentimientos y falta de confianza son aun la regla más que la excepción. Algunas organizaciones parecerían tener aun grupos separados de CFD y experimentalistas quienes prefieren no hablarse, y cuando ocurre alguna cooperación parecería ser debido a grupos pequeños formados voluntariamente.” [4]

Esta situación, dramática en el caso de CFD, no es la excepción sino que se repite en muchas áreas de la mecánica computacional. De modo que no es extraño que esta cultura se refleje en los criterios de aceptación de trabajos en las revistas especializadas. Lo anterior se refuerza generalmente a través del sistema educativo universitario y especialmente en los centros de investigación dedicados exclusivamente a los métodos computacionales, en los cuales los investigadores carecen de facilidades experimentales y no pueden apreciar la complejidad del mundo real, que no se presenta en la forma de teorías esperando ser discretizadas.

Las dificultades que se presentan son múltiples, y mencionaremos aquí sólo algunas:

(a) La afirmación de la mecánica computacional surgió como contraposición con la experimental, intentando mostrarse como un sustituto válido. Eso ha hecho que las fuentes de validación de modelos sean internas a la disciplina y no se busquen alternativas provenientes del laboratorio experimental.

(b) En muchos casos los resultados experimentales que se encuentran en la literatura no son adecuados directamente para validar un modelo computacional, dado que fueron llevados a cabo con otros propósitos. Puede que los datos reportados por los experimentalistas en un artículo no sean completos. Adicionalmente, pueden presentarse muchas dificultades prácticas en los experimentos, como dificultades para mantener los sensores en las posiciones adecuadas, oscilaciones en los registros, incertidumbres en la medición de parámetros, que hacen que quien sólo desarrolla modelos computacionales considere que el experimento no refleja las condiciones ideales que su modelo requiere.

La integración de criterios de validación basados en experimentos surge de una manera natural cuando se trata de resolver un problema, en lugar de desarrollar un modelo. Si se trata de un problema significativo existe la posibilidad de plantear la validación de un código mediante experimentos expresamente diseñados para ese problema, en la mejor tradición del empirismo del Siglo XX. Los trabajos de modelado y de experimento deben ser llevados a cabo en conjunto, para permitir aprovechar las fortalezas de cada uno de los enfoques. Esto permitiría no ajustar parámetros del modelo para calibrarlo, sino desarrollarlo de tal manera que pueda modelar las particularidades que se advierten en el experimento. Una propuesta detallada en este sentido se encuentra en Aeschliman *et al.* [4] para CFD.

#### AGRADECIMIENTOS

Este trabajo es parte de un proyecto subsidiado por la Agencia Córdoba Ciencia, el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET). Patricia Dardati agradece la beca recibida de la Universidad Tecnológica.

#### REFERENCIAS

- [1] Chalmers, A., *¿Qué es esa cosa llamada ciencia?*, Tercera edición, Siglo XXI, México, 2000.
- [2] Brown, H., *La nueva filosofía de la ciencia*, Tecnos, Madrid, 1984.
- [3] Hacking, I., *Representar e intervenir*, Paidós, México, 1996.
- [4] Aeschliman, D. P., Oberkampff, W. L., Blottner, F. G., *A proposed methodology for computational fluid dynamics code verification, calibration and validation*, International Congress on Instrumentation in Aerospace Simulation Facilities, 1995. ICIASF '95, IEEE, 1995, pp. 27/1 -27/13.
- [5] NAFEMS, [www.nafems.org](http://www.nafems.org).
- [6] Kamoulakos A., Hitchings D., Davies G., *Benchmark Tests for Thin Shell Assemblies*, Report, NAFEMS, East Kilbride (Scotland), 1986.
- [7] Prinja N.K., Clegg R.A., *Assembly Benchmark Tests for 3D Beams and Shells Exhibiting Geometric Nonlinear Behaviour*, Report, NAFEMS, East Kilbride (Scotland), 1993.
- [8] Chapman, D. R., Mark, H., Pirtle, M. W., *Computers versus wind tunnels for aerodynamic flow simulation*, Aerospace America, 1975, Abril, pp. 22-35.