

MATEMÁTICA SUPERIOR APLICADA

CAPÍTULO I

IMPORTANCIA DE LOS MÉTODOS NUMÉRICOS EN LA SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS

I.1 Introducción

Es sabido que el procedimiento metodológico fundamental para resolver un problema en ingeniería consiste en representarlo de una manera adecuada, de tal forma de lograr una sustitución del sistema real (equipo, proceso, etc.) por uno más adecuado para el tratamiento formal. Por lo general, las herramientas lógico-matemáticas nos brindan un marco útil para representar mediante un sistema de símbolos y reglas, el comportamiento de los sistemas reales.

Bajo el método científico, por ejemplo, se consolidan leyes y teorías en diversas ramas del conocimiento, las cuales son expresables por medio de sistemas de ecuaciones diferenciales. En otras palabras, se logra construir un nuevo sistema, del cual conocemos sus *reglas de juego* y símbolos, como un resultado de un proceso de abstracción de la realidad. Obviamente, dado la infinita complejidad de los fenómenos fisicoquímicos, estas construcciones abstractas, conocidas genéricamente como modelos, son sólo meras aproximaciones de la realidad. En efecto, no es otra cosa lo que se realiza cuando en física utilizamos ecuaciones para describir el movimiento de una partícula, o resolvemos los balances correspondientes aplicando las leyes de conservación de la materia, energía o cantidad de movimiento; o bien cuando nos enfrentamos al diseño de un equipo según los procedimientos que conocemos a partir del campo de las *operaciones unitarias*.

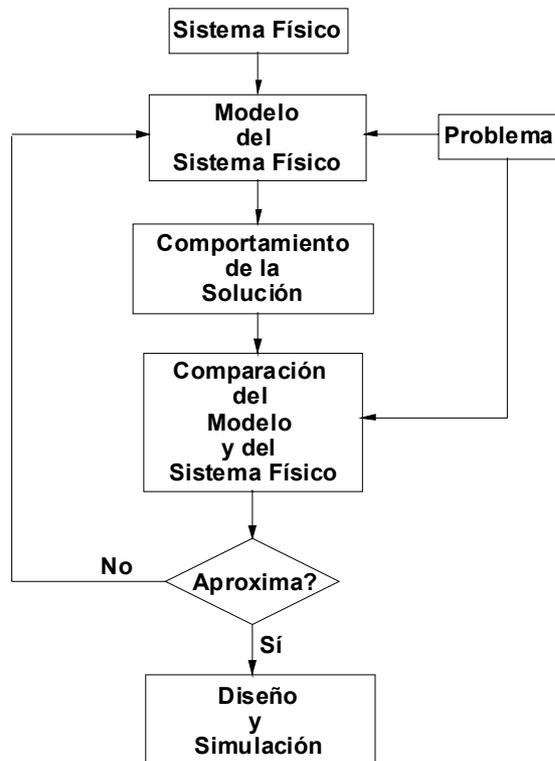
De aquí se desprende que si bien el sistema real a estudiar es único, puede existir un número muy grande de modelos asociados al mismo. En efecto, para obtener un modelo que pueda resolverse (es decir que sea útil), resulta necesario adoptar un conjunto de hipótesis. Por ejemplo, si consideramos la fricción, si es importante o no contemplar el intercambio de energía por radiación, si existen y se

consideran los efectos electromagnéticos, etc. Las necesidades de exactitud que el problema a resolver nos impone, determinan el conjunto de hipótesis a utilizar. Por ejemplo, el error de una milésima de grado en el cálculo de un ángulo puede no tener implicancias en el punto de impacto de un proyectil que recorre una distancia pequeña, pero no puede afirmarse lo mismo para una trayectoria intergaláctica. En síntesis, dado el sistema real y los objetivos tecnológicos perseguidos, existirá un conjunto de hipótesis adecuadas que determinarán las características del modelo, o sistema de ecuaciones a resolver. Lo expresado recientemente implica una relación entre modelo (conjunto de hipótesis asumidas) y objetivos del ingeniero.

Resulta evidente que no todo sistema de ecuaciones puede resolverse fácilmente, al menos desde el punto de vista analítico. Esto impuso a lo largo de la historia limitaciones importantes al tipo de modelos que podían resolverse, o de otra forma, la necesidad de recurrir a hipótesis inadecuadas o restrictivas (simplificaciones) para al menos poder tratar el problema. Es por ello también que en los orígenes de las ciencias tecnológicas los modelos podían ser considerados en gran medida como empíricos, esto es, con parámetros incorporados que surgían de experiencias, y no a partir de los primeros principios o leyes fundamentales. No debe extrañar que aún hoy, pese a todos nuestros avances, exista la necesidad de utilizar permanentemente parámetros en nuestros modelos, que no son otra cosa que la medida de nuestra ignorancia, y por lo tanto, implican la necesidad de reemplazar las leyes básicas por aproximaciones causales obtenidas de datos experimentales. Este es el caso por ejemplo de la estimación de las propiedades de equilibrio de mezclas de comportamiento altamente no ideal.

A medida que evolucionaron las diversas ramas de las matemáticas y con el advenimiento de la ciencia de la computación, poderosa herramienta complementaria al análisis numérico y simbólico, se abrieron caminos revolucionarios. Contar con herramientas más potentes para resolver sistemas de ecuaciones, o lo que es lo mismo, relativizar la necesidad de adoptar hipótesis inadecuadas al plantear modelos para resolver problemas complejos, resultó un gran paso adelante. Más aún, la velocidad de cálculo provocó que la dimensión abordable se incrementara rápidamente. En efecto, si bien el grado de complejidad conceptual para resolver la inversa

de una matriz de dimensión tres es equivalente al de una de cinco mil, resulta obvio que la complejidad operativa o fáctica no resulta comparable. La computación ha barrido literalmente con dicha limitación, haciendo ahora tratables problemas cuya dimensión es tal, que décadas atrás ni siquiera era pensable plantearlos.



I.2 Modelado y Simulación de Procesos Químicos

La simulación es el acto de representar algunos aspectos del mundo real por números o símbolos que pueden manipularse fácilmente para facilitar su estudio

La simulación digital por computadora constituye una poderosa herramienta para la resolución de las ecuaciones (modelos matemáticos) que describen a los sistemas en ingeniería química. Las principales dificultades que se plantean en la simulación numérica de procesos químicos son dos, a saber:

1. Encontrar la solución de un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales (que usualmente se efectúa mediante un método iterativo).

2. Efectuar la integración numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias y en derivadas parciales (mediante ecuaciones discretizadas en diferencias finitas que aproximan a las ecuaciones diferenciales continuas). Siempre se debe tener presente que la ecuación diferencial discretizada utilizada (algoritmo de integración) afecta la exactitud y estabilidad de la solución numérica.

En la literatura específica se han propuesto muchos algoritmos (procedimientos) de cálculo. Algunos de ellos funcionan mejor que otros sobre determinados problemas (esto es, son más rápidos y por consiguiente demandan menos tiempo de cómputo para alcanzar la solución con un grado especificado de exactitud). Desafortunadamente no existe un algoritmo que funcione en forma óptima para todos los problemas que se plantean.

En los últimos tiempos se han desarrollado paquetes para simulación digital. En teoría, estos paquetes relevan al ingeniero de adquirir conocimientos acerca de los métodos de integración numérica. Automáticamente monitorean los errores y la estabilidad del método ajustando el paso o intervalo de integración para satisfacer un criterio de exactitud. En teoría, estos paquetes facilitan al ingeniero la formulación y resolución de los problemas que se le plantean. En la práctica, estos lenguajes de simulación tienen una utilidad limitada; en su puja por generalizar, usualmente, se vuelven ineficientes.

El tiempo computacional de ejecución para resolver un problema real de ingeniería con uno de estos simuladores o paquetes de simulación es usualmente más largo que con un programa computacional *ad-hoc* (hecho para un propósito determinado) escrito en lenguaje FORTRAN, BASIC O PASCAL. Sin embargo, quienes promueven la utilización de estos paquetes arguyen que el tiempo de formulación y de resolución se reduce. Esta afirmación proviene de aquellos que no conocen el arte de la programación y utilizan a la computadora ocasionalmente y únicamente en simulaciones dinámicas.

La utilización de un paquete de simulación requiere que el ingeniero aprenda un nuevo lenguaje y un nuevo sistema. Por consiguiente, dado que en general se conoce algún lenguaje de programación y que las técnicas numéricas sencillamente

programadas funcionan bien, la experiencia demuestra que es mucho mejor para el estudiante o ingeniero desarrollar un programa específico para el problema que se desea resolver. No sólo es computacionalmente más eficiente sino que además garantiza al estudiante o ingeniero el conocimiento de cómo funciona el programa y cuáles son las hipótesis realizadas y las técnicas utilizadas. Esta metodología permite la supervisión del programa cuando éste no funciona y su modificación para manejar mucho más fácilmente nuevas situaciones que se planteen.

Por otro lado, es altamente recomendable el uso de subrutinas especiales para efectuar cálculos específicos. En muchos lugares (universidades, institutos de investigación, etc.) se dispone de bibliotecas de subrutinas de cálculo como las IMSL, IBM, Numerical Recipes, etc.

1.2.1 Propósitos de la simulación digital

- Diseño de nuevas unidades y de nuevos procesos.
- Adaptación de equipos en uso a otras alternativas de procesos (RE-VAMP).
- En operación:
 - Identificación de cuellos de botella.
 - Estudios de conservación energéticos.
 - Revisión para nuevas especificaciones o distintas alimentaciones.
 - Optimización y ajustes.

1.2.2 ¿Qué es un simulador de procesos?

Es una *herramienta de ingeniería*, que permite realizar en forma automática cálculos sobre balances de materia, balances de energía y propiedades físicas y químicas.

¡No es un ingeniero de procesos!

1.2.3 Ventajas que ofrece un simulador

- Los cálculos son rápidos (velocidad de cálculo).

- Se pueden explorar muchas soluciones.
- Exactitud y resultados consistentes.
- Cálculos sofisticados (termodinámicos y operaciones unitarias).
- Estandarización de organizaciones internas.
- La experiencia es menos costosa que cualquier ensayo en planta.

1.2.4 Situaciones (estados) y/o regímenes de operación/diseño de procesos en los que se aplica la simulación de procesos

1. Situaciones de operación y/o diseño:

- 1.a) Análisis en estado estacionario.
- 1.b) Análisis dinámico.
- 1.c) Análisis de eventos discretos.

2. Regímenes de operaciones y/o diseño de procesos:

2.a) Régimen seguro => operación segura, diseño seguro.

- Análisis de parada y arranque.
- Condiciones de emergencia. Fallas de los sistemas.
- Fugas.
- Sistemas de control.
- Entrenamiento de operadores.

2.b) Operación/diseño en estado estacionario.

- Diseño de planta (balances, costos, análisis económicos).
- Estudio de la capacidad de una planta (rediseño o retrofitting).
- Reconciliación de datos:
 - Planificación.
 - Procedimientos de medición.

- Detección de fallas, inconsistencias.
 - Estimación:
 - Propiedades físicas.
 - Parámetros cinéticos.
 - Parámetros de modelo.
- 2.c) Operación/diseño óptimo.
- Optimización de plantas off-line (fuera de línea).
 - Optimización en línea (en tiempo real).
 - Operaciones batch.
 - Políticas de cambios de la alimentación.
 - Diseño flexible óptimo.

1.2.5 Beneficios que otorga la simulación

1. Análisis en estado estacionario.
 - 1.a) Base para toma de decisiones económicas.
 - 1.b) Base para optimización del proceso.
 - 1.c) Para análisis de rutina *on-line*.
 - 1.d) Conduce a diseños *más ajustados* o *a medida* con flexibilidad.
 - 1.e) Mejora de sistemas de administración o gestión de procesos.
2. Análisis dinámico en el diseño.
 - 2.a) Suministra visión dinámica del sistema. Diseño de Sistemas de Control.
 - 2.b) Mejoramiento de la calidad a través de un control más adecuado.
 - 2.c) Mejora de las políticas de arranque y parada.
 - 2.d) Mejor seguridad. Detección de riesgos.
3. Análisis dinámico en operaciones.

- 3.a) Mejora calidad:
 - Entrenamientos de operadores.
 - Control *más ajustado*.
- 3.b) Operación más segura:
 - Investigación de incidentes.
 - Procedimientos de emergencia.

1.2.6 Para una correcta simulación se requiere:

- Modelos de operaciones unitarias apropiados.
- Datos de componentes apropiados.
- Modelos termodinámicos apropiados.
- Datos de constantes de alimentación apropiados.
- Datos de operaciones unitarias apropiados.

1.2.7 Dificultades que presenta la simulación

- Encontrar modelos adecuados.
- Rigurosidad.
- Calidad de la información termodinámica y fisicoquímica
- Disponibilidad de correlaciones adecuadas.
- Interpretación.
- Implementación.

1.2.8 Principales tópicos a considerar para el funcionamiento de un simulador:

- Modelado.
- Flowsheeting, Particionado, Rasgado, Ordenamiento.
- Simulación en estado estacionario/dinámico.
- Métodos de solución.

- Estrategias de simulación

1.2.9 ¿Por qué los modelos?

Para ganar una mayor comprensión de un proceso o parte de él.

1.2.10 Áreas de aplicación:

- Investigación y desarrollo.
- Diseño.
- Operaciones.

1.2.11 Principios usados en el desarrollo de modelos matemáticos de un sistema de ingeniería química

1. Base

- 1.a) Leyes físicas y químicas fundamentales.
- 1.b) Conservación de materia, energía y momento.
- 1.c) Ecuaciones de transporte.
- 1.d) Relaciones de equilibrio de fases.
- 1.e) Ecuaciones de estado.
- 1.f) Ecuaciones de reacciones químicas.

2. Hipótesis a adoptar en el modelo

3. Consistencias matemáticas

- 3.a) Verificación de unidades.
- 3.b) Verificación de grados de libertad.

4. Solución de las ecuaciones del modelo

- 4.a) Métodos numéricos (implementación en computadora).
- 4.b) Métodos analíticos.

5. Verificación

- 5.a) ¿Éste describe o aproxima en el grado deseado la realidad?

1.2.12 Implementación del modelo

La síntesis de un algoritmo comprende:

- a) Formulación del modelo (sistemas de ecuaciones y variables).
- b) Elección del método de solución.
- c) Elección del método numérico (algoritmo).
- d) Generación de la estimación inicial de las variables.
- e) Diseño de la arquitectura del programa.
- f) Programación.
- g) Ensayos del programa.

Modelado y Simulación de Procesos Químicos

	Simulación Estado Estacionario	Optimización	Simulación Dinámica
Modelos Matemáticos	Grandes sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales	Encontrar el máximo o mínimo de una función sujeto a restricciones	Grandes sistemas de ecuaciones algebraicas y diferenciales no lineales
Algoritmos	Sustitución directa Newton Wegstein Quasi-Newton	Programación lineal y no lineal Métodos complejos	Euler Runge-Kutta Gear Otros
Herramientas Computacionales	PROCESS ASPEN HYSIS CHEMCAD Otros	LINDO GINO MINOS GAMS Otros	SPEEDUP DYFLO HYSIS CHEMCAD Otros

1.3 Los Métodos Numéricos como Herramienta para el Modelado de Procesos en Ingeniería Química

Los métodos numéricos son una clase de métodos para resolver una amplia variedad de problemas matemáticos. Estos problemas se plantean a partir de la modelización matemática de fenómenos o procesos fisicoquímicos. Esta clase de métodos

todos utilizan únicamente operaciones lógicas y aritméticas; por consiguiente, pueden implementarse sobre computadoras digitales.

En rigor de verdad, el dedo de una mano sobre un ábaco puede considerarse una computadora digital. Sin embargo, esta expresión la utilizaremos aquí para indicar dispositivos electrónicos que poseen unidad aritmética de cálculo, que pueden almacenar programas y cuyo uso ha ido en creciente aumento desde mediados de la década de los años 50.

En realidad, los métodos numéricos fueron desarrollados muchos años antes del advenimiento de las computadoras electrónicas digitales. En efecto, un gran número de los métodos numéricos usualmente utilizados datan de los comienzos de las matemáticas modernas. Sin embargo, el uso de tales métodos estuvo restringido hasta el advenimiento de las computadoras personales (PC's), incrementándose dramáticamente con la introducción de las computadoras electrónicas digitales.

La combinación de métodos numéricos y computadoras digitales constituye una poderosa herramienta para el análisis matemático. Por ejemplo, los métodos numéricos son capaces de manejar no linealidades, geometrías complejas y sistemas de ecuaciones acopladas que son necesarias para la simulación segura de muchos sistemas fisicoquímicos que se presentan en ingeniería. La matemática clásica, aún en manos de los más ingeniosos matemáticos aplicados no puede resolver estos problemas con el nivel requerido por la tecnología actual. Como consecuencia de ello, los métodos numéricos han desplazado al análisis matemático clásico en diversas industrias y aplicaciones en investigación. Los enfoques analíticos rara vez son considerados, aún en problemas en donde podrían obtenerse soluciones analíticas, dado que los métodos numéricos son baratos, fáciles de emplear y con frecuencia se dispone de ellos en programas comerciales.

1.3.1 Capacidad de Cálculo de los Métodos Numéricos

La primera pregunta que uno se formula es si existe algún límite a la capacidad de cálculo de los métodos numéricos. La respuesta es afirmativa. Según la opinión de un gran número de científicos e ingenieros, si un problema no puede resolverse analíticamente, lo mejor es *ponerlo en una computadora* (mediante un algorit-

mo adecuado). Este punto de vista se debe, sin lugar a dudas, al enorme poder de cálculo de los métodos numéricos. Sin embargo es desafortunadamente cierto que existen muchos problemas imposibles de resolver utilizando métodos numéricos. Para algunos de estos problemas no se ha encontrado todavía un modelo matemático completo y seguro, de manera que resulta obvio que es imposible encontrarles una solución numérica. La dimensión de otros problemas es tan grande que su solución está más allá de los límites prácticos en términos de la tecnología computacional disponible. Por ejemplo, se ha estimado que para obtener una solución dependiente del tiempo en problemas de flujo turbulento, incluyendo el efecto de los vórtices más pequeños, se requerirían alrededor de 30 años de tiempo computacional. Esta estimación fue efectuada con la tecnología computacional disponible a fines de la década de los años 60. Probablemente, con la tecnología hoy disponible ese tiempo puede haberse reducido en un factor 5 o 10. Por supuesto que la cuestión es fuertemente dependiente de cuánto uno está dispuesto a pagar para obtener una respuesta. Algunos problemas son tan importantes que las industrias y los gobiernos están dispuestos a invertir millones de pesos para obtener la solución de ciertos problemas de valor estratégico. En conclusión, todavía restan muchos problemas que resolver, tanto desde el punto de vista de la modelización de los sistemas fisicoquímicos como de la capacidad computacional.

I.4 Justificación del Estudio de los Métodos Numéricos

Parecería extraño en razón del amplio uso de los métodos numéricos en los diversos campos de las ciencias y de la tecnología, que se deba tratar de justificar el estudio de los mismos. Ciertamente que la justificación no es necesaria en el caso de los analistas de sistemas actuales y futuros así como en los científicos computacionales. Sin embargo, esta justificación no resulta tan clara entre los ingenieros, tecnólogos y científicos.

En los últimos años se han desarrollado grandes programas computacionales para simular el comportamiento de sistemas fisicoquímicos complejos. Usualmente, estos programas se diseñan para ser utilizados por aquellos profesionales de la in-

geniería e investigadores científicos sin un conocimiento extensivo de su funcionamiento interno. Por otra parte, existen bibliotecas en continua expansión de subrutinas que utilizan sofisticados métodos numéricos para realizar una amplia variedad de tareas matemáticas. De cara a estos hechos uno podría verdaderamente maravillarse si existiese la necesidad de los científicos e ingenieros de adquirir un conocimiento funcional de los métodos numéricos. Sin embargo, el ingeniero o científico que espera utilizar un programa empaquetado o una subrutina de una biblioteca para resolver un problema matemático determinado se desengañará. En efecto, la selección y aplicación de un método numérico en una situación específica es más una actividad propia de un arte que de una ciencia. Por consiguiente, el usuario de computadora que no tenga la habilidad ni el conocimiento para seleccionar y utilizar un método numérico para aplicar a un problema específico y efectuar la programación del método, encontrará una severa restricción en el rango de problemas que puede manejar. Por supuesto que cuando se disponga de programas empaquetados o subprogramas que han sido probados y que se ha demostrado su buen funcionamiento, lo más razonable es utilizarlos sin hesitación. Aún en estos casos, es altamente valorado el conocimiento del funcionamiento de los métodos numéricos dado que por lo general el usuario de tales programas o subrutinas encontrará dificultades en su utilización. Estas dificultades pueden provenir de múltiples causas, entre ellas:

- a) Una situación física no compleja puede ser simulada exactamente por un modelo matemático.
- b) El método numérico no está completamente libre de dificultades en todas las situaciones en las que se lo utilice.
- c) El método numérico no está completamente libre de errores.
- d) El método numérico no es óptimo en todas las situaciones en las que se lo utilice.

En general puede existir superposición entre las situaciones (b), (c) y (d). Las dificultades con los métodos numéricos pueden aparecer en los programas empaquetados o en las subrutinas suministrando resultados erróneos, o bien no aparecer en absoluto. Además, el usuario en búsqueda de un subprograma de una biblioteca

para realizar una determinada tarea, puede encontrar una agobiante variedad y número de subprogramas que pueden ser aplicables, pero el material descriptivo rara vez dará una indicación sobre la eficiencia de la subrutina para resolver un problema específico. El usuario con algunos de estos problemas pero sin un conocimiento cabal de los métodos numéricos deberá buscar a alguien con la información necesaria, si es que existe alguien a quien consultar. Sin embargo, ante una situación de esta naturaleza puede ser dificultoso para el usuario formular las pregunta correctas y para el consultor dar las respuestas adecuadas, dado que el background de los dos puede ser muy diferente.

Se concluye entonces que existe una fuerte justificación para que el ingeniero o científico adquiera conocimiento acerca del funcionamiento de los métodos numéricos. Este conocimiento permitiría al usuario de computadora, seleccionar, modificar y programar un método adecuado para cualquier tarea específica, ayudarse en la selección y uso de programas empaquetados y en subrutinas de bibliotecas y posibilitar la comunicación con un especialista en una forma inteligente y eficiente toda vez que busque ayuda para resolver un problema particularmente difícil.

Finalmente, no se debe dejar de reconocer que el desarrollo de métodos numéricos es efectuado por ingenieros y científicos y no por analistas de sistemas.

I.5 Lenguajes de Computación

La mayoría de los estudiantes avanzados de ciencias exactas e ingeniería así como de los profesionales de estas disciplinas tienen alguna experiencia en el uso de lenguajes de alto nivel tales como FORTRAN, PASCAL, ALGOL o BASIC. Estos lenguajes permiten al usuario escribir programas en una forma que incluye fórmulas algebraicas, sentencias lógicas en inglés así como sentencias de entrada y salida. Los lenguajes de alto nivel son virtualmente independientes de la computadora sobre la cual se corre el programa. A través del uso de un programa de computadora llamado *compilador* (o trasladador) los programas de alto nivel pueden convertirse a lenguaje de máquina (código de máquina) sobre el que el realmente el programa se ejecutará.

Por lejos, el lenguaje algebraico más utilizado para propósitos científicos es el FORTRAN o modificaciones menores de éste. Con pocas excepciones, el ALGOL es raramente utilizado por los científicos computacionales de la actualidad, pero es ampliamente utilizado como lenguaje universal de algoritmos descriptivos. BASIC es bastante popular como lenguaje en sistemas de tiempo compartido, utilizándose para tareas de programación relativamente simples.

Otros lenguajes de alto nivel que el usuario científico puede encontrar son los APL (ampliamente utilizados en sistemas de tiempo compartido y adecuados para tareas que van de relativamente simples a altamente sofisticadas); MAD (un lenguaje obsoleto parecido al ALGOL) y PL-1 (un lenguaje poderoso de interés de los científicos computacionales).

La aparición de cada nuevo lenguaje de computación es recibido con algún recelo por el usuario promedio, dado que ello significa un nuevo conjunto de reglas que debe aprender y una posible confusión con otros lenguajes. No obstante, cualquier persona razonablemente flexible encontrará pocas dificultades en adaptarse a un nuevo lenguaje de programación si fuese necesario. Un aspecto mucho más importante es el económico, dado que el desarrollo de programas de computación extensos es muy caro y la conversión de grandes programas de un lenguaje de programación a otro puede convertirse en una tarea más compleja involucrando muchos meses de trabajo. Esta es una de las principales razones de porqué el FORTRAN es el lenguaje científico estándar siendo poco probable que sea desplazado como tal en un futuro cercano.

I.6 El Problema de la Verificación

Una de las tareas más difíciles que debe efectuarse al obtenerse una solución numérica de un problema de ingeniería es verificar si el programa computacional y la solución final son correctos. El proceso de verificación se lleva a cabo en dos etapas:

- Determinar si el programa funciona como el programador desea (por ejemplo, si la codificación es correcta).

Alejandro S. M. Santa Cruz

Matemática Superior Aplicada - 3er. Año Ing. Qca.

UTN - FRRO

- Determinar si el algoritmo empleado suministrará la solución correcta.

El primer aspecto se cumplimenta imprimiendo resultados intermedios y si es necesario, efectuando manualmente verificaciones puntuales o mediante calculadoras de escritorio.

La verificación del segundo aspecto, dado que la solución del problema no se conoce de antemano (si no, uno no se molestaría en hallar una solución numérica), usualmente, es indirecta. Esta verificación indirecta podría consistir, por ejemplo, en analizar los casos límites del problema para los cuales muchas veces pueden encontrarse soluciones analíticas. Estos casos límites podrían simularse con el programa bajo consideración haciendo iguales a cero algunos términos de las ecuaciones discretizadas, permitiendo que algunas constantes o ciertas condiciones se vuelvan muy grandes o muy pequeñas u omitiendo temporalmente algunas secciones del programa y/o insertando otras. En muchas ocasiones el procedimiento de verificación puede ser más caro y consumir más tiempo que obtener la respuesta final deseada. Sin embargo, la confianza que uno pueda depositar en el resultado final está directamente relacionada con el cuidado y el tiempo invertido en el proceso de verificación.

En el caso de programas o subrutinas de bibliotecas, el proceso de verificación, por lo general, se realiza en forma similar pero de una manera más extensiva y cuidadosa. Este procedimiento debería incluir una serie de pruebas que involucren los *peores casos* para comprobar la capacidad del programa para hacer frente a problemas que presentan dificultades conocidas.

I.7 ¿Cometen Errores las Computadoras?

En un sentido o en otro, las computadoras pueden cometer errores. Sin embargo, debe notarse que la gran mayoría de los errores encontrados en computación provienen de los usuarios. A veces resulta difícil de aceptar que un error que se resiste a ser detectado provenga de uno mismo. Por consiguiente, el procedimiento más eficiente que debe seguirse para descubrir errores es suponer que invariable-

mente éstos provienen del usuario hasta que esa posibilidad sea esencialmente eliminada.

En el caso en que sean detectados errores de computación, éstos pueden deberse a:

- 1) Errores de hardware (máquina).
- 2) Errores de software (programa de computación).
- 3) Una combinación de ambos.

Los errores de hardware son relativamente raros y en esta presentación de métodos numéricos no se está en condición de discutirlos. Los errores de software son más comunes e incluyen típicamente errores en el sistema operativo de la computadora, errores en la computadora que resulta en códigos incorrectos del programa objeto (programa de máquina) y errores en las subrutinas de las bibliotecas.

Los errores en el sistema administrador de la computadora (también llamado sistema operativo, sistema supervisor, etc.) pueden confundir al usuario. Los sistemas modernos de computación incorporan la capacidad de manejar simultáneamente diversos programas (multiprocesamiento) en razón de hacer más efectiva la utilización del hardware. En otros casos es posible que múltiples usuarios de computadoras *conversen* con el sistema desde terminales remotas (sistema de tiempo compartido). Algunos sistemas combinan ambas capacidades. La mayoría de las dificultades que el usuario encuentra provienen del sistema operativo a partir de interacciones imprevistas de un programa con otro. Estas interacciones pueden devenir en una falla completa del sistema o bien en un comportamiento errático y en resultados erróneos de los programas específicos del usuario. Estos errores rara vez se repiten, por consiguiente, si se vuelve a ejecutar el programa éstos se corregirán.

Particularmente frustrantes para el usuario son los errores de compilación, dado que un programa escrito en un lenguaje de alto nivel puede generar códigos incorrectos en el lenguaje de máquina y por consiguiente resultados erróneos. Afortunadamente, debido a una verificación extensiva que se hace de los mismos, usualmente, no se encuentran errores serios de compilación. Sin embargo, en aque-

llos programas que incorporan métodos de optimización pueden ocurrir serios e impredecibles errores. En este contexto, la optimización se interpreta como la forma más eficiente de generar código de máquina a partir de un programa escrito en un lenguaje de alto nivel. Este lenguaje de optimización implica, en algunos casos, modificar el orden de las operaciones especificadas en el lenguaje de alto nivel con el propósito de obtener las mismas respuestas con menor tiempo de cálculo. En muchos casos, el proceso de optimización se traduce en un considerable ahorro del tiempo computacional. Sin embargo, cuanto mejor sea el optimizador (en el sentido de la eficiencia) es más probable que genere código de máquina incorrecto. En otros casos, es posible desactivar la facilidad de optimización del compilador o encontrar un compilador similar sin optimización o con optimización relativamente simple y libre de errores. En principio, se recomienda que en las corridas iniciales un programa sea seguido en modo supervisión (*debugger*), mientras que un compilador con un elevado grado de optimización sea utilizado sólo para producir programas donde la eficiencia sea decididamente importante. La versión altamente optimizada debería, por supuesto, verificarse con los resultados obtenidos sin optimización.

Los errores en las subrutinas de las bibliotecas son, en general, producto de procedimientos de verificación no efectivos y usualmente no pueden ser tratados por el usuario excepto informando de la falla de la subrutina al personal responsable de los sistemas de cómputo.

I.8 Consideraciones Acerca del Uso de los Métodos Numéricos

En este punto crucial se hace necesario afirmar que para comprender a los métodos numéricos no basta con estudiarlos sino que los mismos deben ser utilizados en la resolución de problemas prácticos. Por consiguiente, resulta de vital importancia que el estudiante resuelva los problemas matemáticos que se generan en la modelización de los sistemas fisicoquímicos que se plantean en las industrias de procesos mediante la utilización de métodos numéricos que se describen en los próximos capítulos.