
1. PREÀMBUL: INTRODUCCIÓ A LA MODELITZACIÓ

Enric Casassas* i Miquel Esteban*

L'home sempre ha tingut necessitat d'esquemes mentals senzills, potser moltes vegades volgudament massa esquemàtics, que li permetessin algun grau de comprensió de les múltiples varietats de comportament dels components del món que l'envolta. Ja des de l'antiguitat, aquest grau de comprensió i les amples zones de misteri al voltant sotmeses a l'imperi dels déus o dels esperits menors que solen ésser els amos de les coses més immediates, permeteren a l'home de sobreviure en un món en principi hostil. Seria exagerat dir-ne models, d'aquells esquemes mentals, però ja en temps molt remots l'home començà a sistematitzar i relacionar observacions —pensem en la metallúrgia i en l'astronomia, per exemple—, i hom matisà l'empirisme amb algun conjunt d'idees. De quina manera s'anaren desenvolupant les ciències a partir d'aquells conjunts, de quina manera la ciència, així, en general, esdevingué la ciència moderna, són temes que han d'ésser presos com diversos cap torçuts de fils molt llargs i embullats, amb els quals han estat cosits grossos volums que tracten de la història cultural de la humanitat, però en el present capítol no són aquests els objectes d'estudi, sinó, per començar, un de molt més concret, el de com han anat variant al llarg de l'evolució històrica de la ciència les relacions entre experiment i teoria fins a fer necessari el model, i el de com modelització i simulació han arribat a esdevenir en l'actualitat eines de primer ordre per a la recerca científica, és a dir, per al progrés científic.

* Departament de Química Analítica. Universitat de Barcelona.

No voldríem dedicar gaire atenció aquí a la ciència de l'edat antiga, quan els pensadors grecs s'esmerçaven en exercicis de lògica sofisticats que aplicaven al desenvolupament de totes les intuïcions. Aquella era una mena de saviesa, agressiva i desconixedora de límits, diferent de la que avui dia acceptaríem, si és que fóssim capaços d'acceptar-ne alguna, iconoclastes com som i rebels enfront de tota autoritat. Alguns en parlen com si aquells exercicis constituïssin la veritable ciència; per a acceptar-ho ens hem de situar a l'època i hem de cercar una altra definició de la paraula *ciència*. Aristòtil ho sistematitzà tot, fixà per a la lògica un reglament estricte i deixà una herència important que durant segles ha estat motor de pensament per al nostre món occidental, segons els uns; o que durant segles han feta pesar com una llosa que ofegava els presumptes lliures, els esperits inquietes, una llosa que impedia el progrés, segons els altres.

De les escoles del renaixement carolingi al trivi i al quadrivi i al desenvolupament de tot el sistema de coneixement escolàstic (fruit de l'assimilació també del nou material aristotèlic, l'autèntic i l'apòcrif, que s'havia rebut a través de les traduccions de l'àrab durant els segles XI i XII, sistema que reconeix i consagra allò que anomena les arts lliberals i rebutja i repudia les anomenades arts mecàniques, com l'alquímia i la medicina [en principi, encara que aquesta segona acabà essent acceptada, com veurem], perquè tota la ciència veritable que no és filosofia s'ha de desenvolupar per *subalternatio* de la filosofia, per deducció lògica a partir de principis que derivin directament dels de la filosofia, aquí tractem de la filosofia natural), tot el barbullir cultural de l'alta i de la baixa edat mitjana no fou capaç de perfeccionar cap dels esquemes mentals que en el terreny d'allò que ara en diríem les ciències de la natura havien anat prenent forma, bé que amb límits imprecisos, en la ment dels homes.

En el cas de la medicina hom assolí el reconeixement dels escolàstics, i la medicina ingressà a les universitats en formació ja des del primer moment: hom havia sabut dotar aquella gran quantitat d'empirisme que constituïa —i que encara constitueix— la medicina d'una bastida lògica que feia derivar els comportaments, les funcions i les disfuncions dels quatre elements dels antics, de les propietats inherents i, sobretot, d'uns humors en els quals aquestes propietats es transformaven per influx dels principis vitals. Era tot plegat un model? Podem afirmar que en tenia algun element, com temps després en tenien també els esquemes de Paracels. No po-

dem, però, admetre'ls com a models pròpiament dits perquè estaven bastits a l'inrevés, tots ells penjant dels fils dels postulats d'una filosofia apriorística i lligats per cadenes de sil·logismes pertinents o impertinents a una realitat mal coneguda per mal explorada, si no inexplorada. Són Roger Bacon, Albert Magne, també Arnau de Vilanova, els qui comencen a tocar amb les mans la realitat tal com és, però això els condueix a tocar l'alquímia, i amb el toc de l'alquímia se senten cremar, perquè la matèria era tabú, i el perfeccionament de la matèria i el del seu artífex, que és el veritable filòsof, era utopia, mite, pecat d'orgull, blasfèmia: acabar l'obra començada amb la creació i continuada amb la redempció! S'hi senten cremar i se'n desvien, o s'hi cremen del tot, és a dir, van a parar a les planures desertes emboirades de més enllà de la filosofia natural escolàstica de rel aristotèlica, on els adeptes esdevenen conreadors d'unes ciències que no tenen altre remei que ésser ocultes. L'alquímia, més que elements de protoquímica, conté uns elements misticoscètics que es van tornant preponderants amb el temps, gairebé exclusius quan es produeix la florida de la química ciència nova, que són els elements que han fet sobreviure les reminiscències d'aquestes ciències ocultes fins als nostres dies. L'alquímia, malgrat esforços notables, com els continguts en molts dels textos que constitueixen el corpus pseudolul·lià, no aconseguí desenvolupar cap construcció mental que tingués cap característica d'allò que anomenem model.

Al Renaixement foren establertes les relacions entre la natura i el coneixement de la natura que configurarien la ciència moderna. De l'observació hom passà a l'experimentació, que és l'observació provocada en condicions controlades; de l'observació de qualitats hom passà a la mesura de quantitats; hom defugí el tractament directe de les coses reals convertint-les en abstraccions; dels nombres obtinguts en els mesuraments hom en deduí les lleis empíriques que expliquen els comportaments, almenys aquells que foren anomenats «comportaments ideals». És l'assaig d'interpretació de la llei empírica allò que constitueix primer una hipòtesi, després una teoria; d'aquesta, si és correcta, que vol dir fecunda, hom n'ha de poder deduir nous aspectes de les lleis, o noves lleis, que regulen comportaments nous dels objectes reals, imprevistos abans. És un joc inductiu-deductiu que ha estat vàlid per al desenvolupament de les ciències experimentals durant els darrers segles, durant els quals, cal dir, no s'ha parlat mai de modelització ni de simulació. La

ciència buscava el coneixement de la veritat; era considerada una recerca de la veritat amagada en les coses: quan nous descobriments posaven de manifest contradiccions o insuficiències en una teoria considerada certa fins aleshores, aquesta passava a la consideració de falsa, era arraconada i se'n construïa una altra. El científic creia que les coses són com són i que ell havia d'ésser capaç de treure'n l'entrellat, d'arribar fins al centre de la veritat de les coses i de llurs comportaments. Fou la revolució científica que tingué lloc en el trànsit del segle XIX al segle XX, o en els primers decennis del segle XX, la que provocà canvis en els punts de vista i, de fet, la que posà de manifest la conveniència de situar entre la teoria i l'experiment una mena de pont, el model. Aquesta revolució, que introduïa un principi com el de complementarietat, que acceptava una doble natura per a l'electró, la particulada i l'ondulatòria, doble natura que generalitzava a qualsevol partícula en moviment, ja no permetia de dir que les coses són com són. Si en un moment donat semblà que podríem dir de les coses que es comporten com es comporten, i que només és això el que en podem saber, resultà que tampoc, perquè la nostra observació de les coses en modifica el comportament, en alguns nivells, certament, però amb efectes epistemològics prou ressonants. Hom comença el segle amb la relativitat i la indeterminació, i la quàntica i les lleis dels grans nombres canvien el sentit de la ciència; hom perd la fe en allò que semblava més sòlid: la ciència i la seva seqüela, el progrés material sense límits; totes les avantguardes esdevenen possibles, tots els criticismes, tots els revisionismes.

Un altre caràcter que la ciència del segle XX adquireix, que cal assenyalar per la seva relació amb el tema que tractem, i que per a entendre l'evolució recent de la ciència és tan essencial com aquests canvis de concepte que acabem d'esmentar, és la massificació del gremi dels científics, la proletarització de l'ofici de científic. Aquest ha passat a ésser un home que fa experiments, que en fa més i més, sense parar mai; un home que fa mesuraments, de tot i a totes hores, sota tots els conjunts de condicions; un home que recull dades numèriques cada dia que passa en més quantitat. Cal inventar els ordinadors on conservar tots aquests innombrables nombres, on tractar-los i on, principalment, buscar-hi correlacions i determinar-ne coeficients que expressin els graus de confiança que hom hi pot dipositar.

És en aquestes condicions que esdevenen necessàries la modelització i la simulació, ponts, com ja hem dit, entre l'experiment i la

teoria. La simulació, en certa mesura, pot actuar suplint la teoria: suggereix models, suggereix experiments. La simulació, en certa mesura, substitueix l'experiment real, en la mateixa mesura que el model substitueix la realitat. Moltes vegades la simulació com a substitut d'experiments reals és justificada per raons econòmiques: substitueix experiències cares, com en el cas de simulació de vols en determinades condicions, o que poden ésser-ho, com en el disseny de determinades peces mecàniques o de determinades estructures, o que poden ésser difícils o impossibles de fer al laboratori, com per exemple les d'estudi de l'evolució de les galàxies.

El model és construït sobre hipòtesis, sobre corollaris de teories que hom té a mà i, d'una manera cada dia més important, sobre la base de les correlacions que sorgeixen de l'ús dels ordinadors, tal com hem esmentat ja, sobre la base, doncs, d'allò que en dèiem abans lleis empíriques. Un model, en general, és un conjunt d'equacions matemàtiques amb les quals descriure un comportament d'un recinte específic de la realitat que ens envolta. Tindrà, doncs, uns límits o condicions de contorn; dins d'aquests límits serà un procediment abstracte per a obtenir uns resultats que s'acostin als que mesuraríem en el sistema real si això fos possible. Si s'hi acosten prou direm que el model és prou vàlid —prou proximitat, prou validesa són conceptes vagues que especialistes en lògica difusa s'esforcen a quantificar per poder saber què volen dir, però que al comú dels científics els permet el marge d'escepticisme que els caracteritza. Però moltes vegades els resultats de la modelització són inclosos en dossiers que van a parar a mans dels polítics, i aquests, tan imprecisos i circumstancials en les seves coses, prendran aquests resultats com a veritats absolutes perquè no solen estar preparats per a llegir un dossier procedent d'assessors científics, per a saber avaluar fins a quin punt la validesa dels resultats finals és condicionada per la dels postulats sobre els quals fou bastit el model i per les condicions de contorn que s'hi adoptaren. Aquí rau una de les responsabilitats crucials del científic actual, la de no desentendre's de l'ús que hom faci dels seus resultats, la de saber comunicar-ne el veritable valor. Sempre ha estat dit que l'etapa final de la recerca que fa el científic és la comunicació de resultats; si en el passat això ha volgut dir comunicació a la resta de la comunitat científica internacional, en el temps actual vol dir a més comunicació intel·ligible si no al públic en general sí almenys als responsables de les accions, cada dia més nombroses, que repercuteixen, cada dia amb

impacte més fort, sobre el benestar de la societat, cada dia més insegura.

En les ciències fisicoquímiques, l'estudi de la realitat pot ésser enfocat a dos nivells o escales diferents, un *nivell macroscòpic*, en què els sistemes són estudiats en llur globalitat, i són sistemes amb propietats susceptibles d'ésser mesurades directament mitjançant instruments de mesura adequats, com és el cas del nivell on se situa la termodinàmica clàssica; i un *nivell microscòpic*, en què l'objecte d'estudi és la partícula elemental, l'àtom, la molècula; en principi, no individualment, sinó en llur munió innumerable, munió que requereix tractaments estadístics, dels quals es poden deduir en casos favorables els valors de les propietats observables, com és el cas de la termodinàmica estadística, el del moviment brownià, el de la difusió... L'estudi de l'equilibri químic forma part de la termodinàmica: és, doncs, un estudi que es realitza a nivell macroscòpic; l'estudi de la cinètica químic implica l'establiment dels mecanismes de reacció: això ens inclinarà vers el nivell microscòpic.

De la mateixa manera existeixen aquestes dues escales de treball en la modelització, on haurem de parlar de *models macroscòpics* o *models continus* i de *models microscòpics* o *discrets*; d'aquests darrers distingirem els *determinístics* (en els quals la connexió entre les variables és expressada per relacions funcionals exactes) i els *estocàstics* (en els quals hi ha una o més variables que tenen probabilitats de prendre diferents valors numèrics).

En els *models continus* se sol disposar d'un enfocament teòric dels fenòmens o dels sistemes en estudi, que ens forneix la base ideològica a partir de la qual es construeix el model matemàtic, és a dir, la descripció matemàtica simbòlica del fenomen o sistema en qüestió. Un mateix fenomen real, enfocat segons diferents criteris teòrics, pot ésser estudiat mitjançant models matemàtics diferents: cadascun d'ells és una representació simplificada del mateix fragment de la realitat, encara que de vegades aquesta simplificació no deixa d'implicar un aparell matemàtic d'una certa solemnitat. En casos com aquests, hom pot tractar de simplificar el model, encara que això només té sentit amb relació a les preguntes a què hom pretén respondre, a la problemàtica que hom considera rellevant. Només una teoria que englobi el model pot suggerir-ne i justificar-ne la simplificació. No hi ha cap model independent; tot model és subsidiari d'una problemàtica i d'una teoria.

Un cop establert el model matemàtic, cal recórrer a la seva veri-

ficació i validació, cal comprovar que s'adequa a la realitat observada. Algorismes i programes de càlcul per a la simulació del fenomen solen ésser les eines emprades. Aquest és el tipus de treball que hom realitza, per exemple, en mecànica de fluids. És el tipus de treball que cal fer per a l'especiació química dels sistemes naturals o pollucionats.

En els *models discrets* hom descendeix al nivell atòmic o molecular. No es pot pensar que a partir del model sigui possible descriure el comportament de cada partícula individual; això seria com voler basar els estudis sociològics en descripcions detallades de la biografia de cada persona. Cal recórrer, doncs, a procediments derivats de la teoria de la probabilitat i de l'estadística matemàtica, i d'aquests extreure'n algun tipus de mitjanes o d'altres paràmetres estadístics convenients. Un dels tractaments possibles és el *mètode de Montecarlo*, que parteix d'una presa de mostra artificial, amb utilització de successions de xifres aleatòries; és un mètode especialment indicat per a evitar la comptabilització de totes les dades reals i simplificar el tractament de poblacions molt nombroses; encara que és, en conjunt, un tractament simplificat, exigeix disposar d'ordinadors potents. Un altre dels tractaments possibles dels models discrets és l'anomenat de la *dinàmica molecular*.

Els problemes plantejats per l'ús de models, les tècniques emprades avui dia per a la modelització de fenòmens i de sistemes rellevants en camps com els de la química ambiental, la bioquímica i l'electroquímica, els tipus de contribucions positives a l'avanç dels coneixements que l'ús dels models ha fet possible, així com alguns aspectes quimiomètrics plantejats per la necessitat de sotmetre a validació aquests models, constituïren la temàtica tractada en un seminari desenvolupat per la Universitat de Barcelona dins el marc de la 24a edició de la Universitat Catalana d'Estiu, a Prada de Conflent, l'agost de 1992. Dels temes discutits en aquest seminari n'és rendit compte a les pàgines següents.