

# Secuencias de solución de modelos matemáticos

---

**Este trabajo constituyó parte del Seminario que sobre Simulación de Procesos Químicos ofreció el Grupo de Simulación de la Facultad de Ingeniería, en 1985.**

**En él se sintetizan los criterios desarrollados para establecer topologías de solución de modelos matemáticos y se ilustran algunas aplicaciones.**

---

**DANIEL BOGOYA MALDONADO**  
Ingeniero Químico, M.I.S.  
Profesor Asociado,  
Universidad Nacional de Colombia.

Concebida la simulación matemática, valiosa herramienta de la Investigación de Operaciones para la predicción del comportamiento de objetos reales o imaginados, como la acción de experimentar con un modelo matemático (confeccionado con base en la identificación del objeto real o imaginado y en el establecimiento de un amplio conjunto de analogías de índole diversa) mediante la asignación de valores a cada una de las variables definidas como variables de entrada y la obtención de valores para cada una de las variables definidas como variables de salida, es necesario deslindar dos entidades, asociadas a dos fases claramente definidas: modelo matemático y método o secuencia de solución. Y, así como anteriormente se ilustró la fase del modelamiento matemático (fase en la cual se confecciona el modelo matemático o ente representador del objeto), corresponde ahora ilustrar el establecimiento de un método o secuencia de solución del modelo mencionado.

Aquí debe distinguirse, por una parte, la secuencia de solución (o topología) y, por otra, los conjuntos de métodos numéricos como los de extracción de raíces de ecuaciones, de diferenciación e integración numérica y de resolución de sistemas de ecuaciones, métodos que no se abordan en este tratamiento.

Ahora bien, el establecimiento de una secuencia de solución de un modelo matemático requiere el cumplimiento de varias fases: la determinación del subconjunto de variables de entrada (y consecuentemente del sub-conjunto de variables de salida), la asignación variable-función (para ver qué función debe emplearse en la evaluación de qué variable), la detección de submodelos (o particiones) y la obtención de un orden de precedencia de los submodelos (aunque dichos submodelos se conformen con una sola función); aclarando que puede haber más de una secuencia para cada modelo matemático.

Así, en los próximos párrafos se pretende plantear una metodología que permita resolver modelos matemáticos, de manera sistemática, organizada

y segura (es decir, que garantice la obtención de alguna solución).

### Representación de modelos matemáticos

La forma, ya convencional, de representar conjuntos de funciones de diversas variables, consiste en establecer una matriz de ocurrencia o incidencia. Dicha matriz (aquí llamada **MIN**) es un arreglo de **M** filas (una para cada función) y **N** columnas (una para cada variable) tal que cada elemento del arreglo puede tomar solo el valor cero o uno, así:

$\min_{ij} = 0$ , lo cual significa que la  $j^{\text{a}}$  variable no incide en la  $i^{\text{a}}$  función; o

$\min_{ij} = 1$ , lo cual implica que la  $j^{\text{a}}$  variable incide en la  $i^{\text{a}}$  función.

Ejemplo: para el modelo matemático

$$f_1(X1, X2, X3, X7) = 0$$

$$f_2(X2, X3, X6, X8) = 0$$

$$f_3(X3, X4, X5, X6) = 0$$

se tiene la siguiente matriz de incidencia:

	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8
f <sub>1</sub>	1	1	1				1	
f <sub>2</sub>		1	1			1		1
f <sub>3</sub>			1	1	1	1		

### Subconjuntos de variables en el modelo matemático

Establecido un modelo matemático con **M** funciones, linealmente independientes, y **N** variables, pueden presentarse estas situaciones:

1.  $M = N$ , en cuyo caso hay suficiencia (o determinación) de funciones y cada variable puede tener un único valor que satisfaga al modelo; o
2.  $M < N$ , en cuyo caso (frecuente en la simulación de procesos químicos y en tantos otros campos del conocimiento) cada variable puede tener un número infinito de valores que satisfagan el modelo.

Se aclara que no puede darse el caso donde  $M > N$ , porque implicaría la presencia de funciones redundantes o linealmente dependientes, situación que debe impedirse.

Así, aparece el concepto de grados de libertad (aquí llamados **G**) de un modelo matemático, como el número de variables independientes —o, lo que es equivalente, el número de variables menos el número de funciones en el modelo:  $(N - M)$ —; y se establece que para obtener alguna solución (o conjunto de valores para las variables dependientes del modelo) es indispensable conocer valores para un número de variables independientes igual al número de grados de libertad. Es decir, hay dos subconjuntos de

variables en el modelo: el de las de entrada (o de las independientes) y el de las de salida (o de las dependientes).

Ahora bien, para los modelos donde  $G = 0$  o su varianza es nula, se tiene un subconjunto de variables de entrada vacío; y para aquellos donde  $G > 0$ , o su varianza es no nula, se tienen numerosos subconjuntos de variables de entrada, pero limitados por la cantidad **N** combinado **G**. Se dice limitados, porque, si bien **N** combinado **G** es el número total de permutaciones de **G** elementos dentro de un grupo o conjunto de **N** de ellos, pueden aparecer algunos subconjuntos de variables dependientes: es decir, al considerar dichos subconjuntos se tendría una situación de insuficiencia y, posiblemente, de inconsistencia para las variables de entrada del modelo.

Por medio de un ejemplo puede ilustrarse lo anterior. Sea el modelo

$$f_1(X1, X2, X3, X4) = 0$$

$$f_2(X1, X5, X6) = 0$$

$$f_3(X7, X8, X9) = 0$$

$$f_4(X5, X6, X10) = 0$$

$$f_5(X6, X8, X9, X10) = 0$$

donde el número de funciones (linealmente independientes), **M** = 5; el número de variables (dependientes e independientes), **N** = 10; y el número de grados de libertad (o de variables independientes), **G** = 5. Igualmente, la matriz de incidencia asociada, **MIN**, sería:

	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9	X10
f <sub>1</sub>	1	1	1	1						
f <sub>2</sub>	1				1	1				
f <sub>3</sub>							1	1	1	
f <sub>4</sub>					1	1				1
f <sub>5</sub>						1		1	1	1

Y en este ejemplo, por ser  $G = 5 > 0$ , se tienen múltiples subconjuntos de variables de entrada, limitados por la cantidad.

$$\binom{N}{G} = \frac{N!}{(N - G)! G!} = \frac{10!}{(10 - 5)! 5!} = 252$$

Es decir, de los 252 subconjuntos posibles de cinco variables, tomadas del conjunto total de diez variables, puede haber algunos de variables dependientes, que no deben considerarse. En efecto, todos aquellos que, simultáneamente, contengan

X1, X2, X3 y X4 ;o

X1, X5 y X6 ;o

X7, X8 y X9 ;o

X5, X6 y X10 ;o

X6, X8, X9 y X10

serán conjuntos de variables dependientes (porque impedirán que alguna de las funciones del modelo se utilice para despejar el valor de variable alguna).

Además, tampoco deben considerarse otros subconjuntos que, sin ser visibles inmediatamente, presentan la misma situación de dependencia entre las variables. Un solo ejemplo: el subconjunto

$$\{X1, X5, X8, X9, X10\}$$

reúne variables dependientes; en él, el subconjunto **X5, X8, X9, X10** es redundante para el submodelo conformado por las funciones **f<sub>3</sub>, f<sub>4</sub> y f<sub>5</sub>** donde los grados de libertad son solo tres.

En realidad, para cualquier modelo matemático hay múltiples subconjuntos de variables dependientes y, por tanto, todo subconjunto de variables de entrada debe validarse, antes de intentar encontrar una secuencia de solución. Esta validación contempla dos aspectos: el de la consistencia estructural y el de la consistencia lógica.

### Asignación variable-función

Una vez definido el subconjunto de variables de entrada, se logra simplificar el modelo: ahora se dispone de **M** funciones con **M** variables (las del conjunto de salida). La asignación, entonces, consiste en establecer qué variable debe hallarse mediante la resolución de qué función. Este proceso puede llevarse a cabo mediante la aplicación del algoritmo de Steward.

En efecto, operando con la matriz de incidencia, el algoritmo establece que se examina la fila (o la columna) que posea el menor número de incidencias, lo cual implica que la función correspondiente, depende del menor número de variables (o que la variable correspondiente incide en el menor número de funciones), y de esa fila (o columna se elige el elemento que pertenezca a la columna (o a la fila) con el menor número de incidencias. Enseguida, se asigna la variable representada por dicha fila y se reduce la matriz de incidencia, eliminando la fila y la columna mencionadas. Luego, se repite el proceso de asignación hasta completar el subconjunto de variables de salida.

El algoritmo referido puede ilustrarse con el siguiente ejemplo.

Para el modelo matemático:

$$\begin{aligned} f_1(X1) &= 0 \\ f_2(X2, X3, X4) &= 0 \\ f_3(X1, X2, X4) &= 0 \\ f_4(X1, X3) &= 0 \\ f_5(X2, X3, X5) &= 0 \end{aligned}$$

la matriz de incidencia es:

	X1	X2	X3	X4	X5
f <sub>1</sub>	1				
f <sub>2</sub>		1	1	1	
f <sub>3</sub>	1	1		1	
f <sub>4</sub>	1		1		
f <sub>5</sub>		1	1		1

donde la primera fila es la que presenta el menor número de incidencias: una de la variable **X1**. En consecuencia, se asigna **X1** a **f<sub>1</sub>** y se eliminan la primera fila y la primera columna de la matriz de incidencia.

La nueva matriz queda:

	X2	X3	X4	X5
f <sub>2</sub>	1	1	1	
f <sub>3</sub>	1		1	
f <sub>4</sub>		1		
f <sub>5</sub>	1	1		1

ahora al aplicar el algoritmo nuevamente, se asigna **X3** a **f<sub>4</sub>** y se eliminan la tercera fila y la segunda columna. La nueva matriz de incidencia es:

	X2	X4	X5
f <sub>2</sub>	1	1	
f <sub>3</sub>	1	1	
f <sub>5</sub>	1		1

aquí, todas las filas presentan el mismo número de incidencias: dos; pero la tercera columna, correspondiente a **X5**, presenta solo una.

En consecuencia, se asigna **X5** a **f<sub>5</sub>** y se eliminan la tercera fila y la tercera columna. La nueva matriz de incidencia es:

	X2	X4
f <sub>2</sub>	1	1
f <sub>3</sub>	1	1

en la cual se observa que **f<sub>2</sub>** y **f<sub>3</sub>** conforman un submodelo (o una partición) y así, la asignación de **X2** y **X4** a **f<sub>2</sub>** y **f<sub>3</sub>** es arbitraria.

### Orden de precedencia

En este punto corresponde determinar propiamente la secuencia de solución, mediante el establecimiento de cada una de las necesidades que tenga cada función, para resolverse y otorgar el valor de la variable que le ha sido asignada de manera previa. Aquí es también útil asociar gráficos, para apreciar mejor la exigencia de un determinado orden, como diagramas de flujo de información.

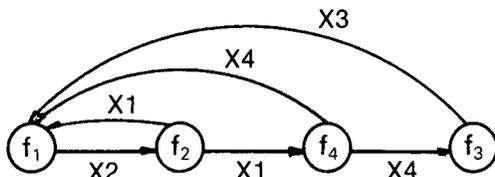
En efecto, se asocia un gráfico donde cada nodo

representa una función y cada arco una información sobre el valor de cada variable así: ingresa a un nodo, si el valor de tal variable debe alimentarse a dicha función; y egresa de un nodo, si el valor de tal variable debe hallarse mediante la resolución de la función correspondiente. En el ejemplo siguiente se ilustra esta situación.

Para el modelo matemático:

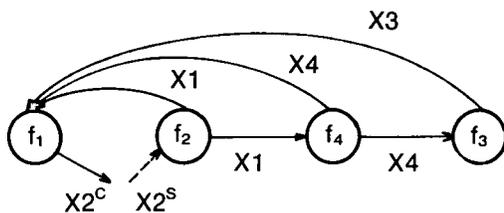
$$\begin{aligned} f_1(X1, X2, X3, X4) &= 0 \\ f_2(X1, X2) &= 0 \\ f_3(X3, X4) &= 0 \\ f_4(X1, X4) &= 0 \end{aligned}$$

al aplicar el algoritmo de asignación variable-función se obtiene que **X2** debe calcularse de **f1**, **X1** de **f2**, **X3** de **f3** y **X4** de **f4**. Así, el diagrama de flujo de información asociado queda:



donde se observan claramente tres ciclos y la necesidad de definir (al menos) una variable iteradora mediante la cual (por suposición y cálculo) se rasgan los ciclos y se establezca una secuencia de solución.

Para este ejemplo, si bien existen diferentes opciones para rasgar los ciclos, la variable iteradora más adecuada es **X2**, ya que con ella simultáneamente se rasgan los tres ciclos y, consecuentemente, no exige la presencia de ninguna otra variable iteradora. Definida **X2** como variable iteradora, el nuevo diagrama de flujo de información queda con **X2<sup>s</sup>** y **X2<sup>c</sup>** así:



Y aquí, una secuencia de solución implica una serie de iteraciones hasta acercar los valores de **X2<sup>s</sup>** (la estimación para **X2**) y de **X2<sup>c</sup>** (su valor calculado) a una vecindad de tamaño preestablecido. La secuencia sería:

Paso 1. Establecer una cota de error **E** y estimar un valor para **X2<sup>s</sup>**;

Paso 2. Resolver **f2**, **f4** y **f3**, para obtener los valores de **X1**, **X4** y **X3** respectivamente, que satisfagan el valor de **X2<sup>s</sup>**;

Paso 3. Resolver **f1**, para obtener el valor de **X2<sup>c</sup>**;

Paso 4. Si  $|X2^c - X2^s| > E$ , debe estimarse un nuevo valor para **X2<sup>s</sup>** (con la ayuda de algún método numérico) y retornar al paso 2; en caso

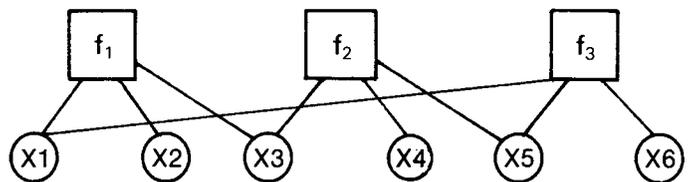
contrario, debe considerarse concluido el proceso iterativo.

De otra parte, la elección de un determinado subconjunto de variables de entrada influye directamente en la secuencia (y en el grado de simplicidad) de la solución del modelo. Así, apoyados en el siguiente ejemplo, y en un gráfico asociado, se ilustra dicho efecto.

Para el modelo:

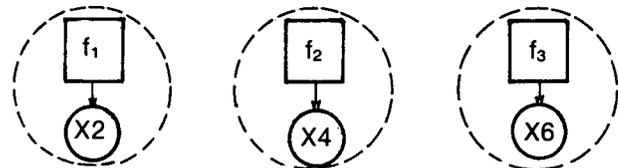
$$\begin{aligned} f_1(X1, X2, X3) &= 0 \\ f_2(X3, X4, X5) &= 0 \\ f_3(X5, X6, X1) &= 0 \end{aligned}$$

su gráfico asociado es:



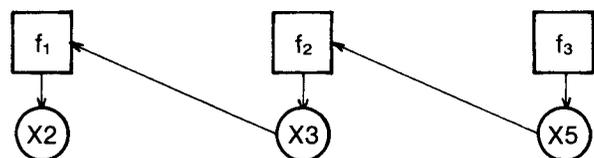
donde aparecen dos tipos de nodos: uno para representar las funciones y el otro para representar las variables; y líneas que indican la incidencia de cada variable en cada función.

Primer subejemplo: el subconjunto de variables de entrada está formado por **X1**, **X3** y **X5**. Así, del gráfico asociado pueden eliminarse los nodos correspondientes a esas variables y las líneas que los unen con los nodos de las funciones, quedando el gráfico:



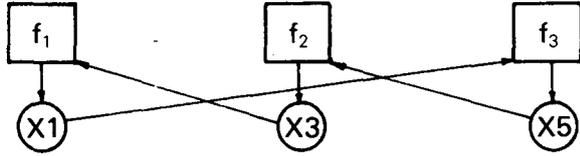
en el que aparecen tres pseudonodos disjuntos, indicando que la solución de cada función puede hallarse de forma independiente, sin precedencia obligatoria. Igualmente, se indica que el valor de **X2** se obtiene de resolver la función **f1**, el de **X4** de **f2** y el de **X6** de **f3**.

Segundo subejemplo: el subconjunto de variables de entrada está formado por **X1**, **X4** y **X6**. Luego de la eliminación de los nodos y líneas pertinentes se obtiene este gráfico:



el cual indica que las funciones del modelo pueden resolverse una por una, pero en una sola secuencia. El valor de **X5** se obtiene por resolución de **f3**, en seguida el de **X3** de **f2** y, por último, el de **X2** de **f1**.

Tercer subejemplo: el subconjunto de variables de entrada está formado por **X2**, **X4** y **X6**. Después de eliminar los nudos y las líneas que corresponden se llega a este gráfico:



en él se observa la necesidad de una solución simultánea, o mediante métodos numéricos iterativos, para obtener el valor de **X1** de la función **f<sub>1</sub>**, el de **X3** de **f<sub>2</sub>** y el de **X5** de **f<sub>3</sub>**.

Los tres anteriores subejemplos permiten concluir que el grado de simplicidad, y la secuencia, para la solución de un modelo matemático depende sensiblemente del subconjunto de variables de entrada que se elija.

## BIBLIOGRAFIA

1. AMUNDSON, N. R. **Mathematical methods in chemical engineering matrices and their applications**. Prentice Hall, 1966.
2. ARRI, L. E. **Resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas**. INTEC, 1978.
3. DAHLQUIST, G. **Numerical methods**. Prentice Hall, 1974.
4. DANTZIG, G. B. **Linear programming and extensions**. Princeton, 1963.
5. KOBAYASHI, H. **Modeling and analysis**. Addison Wesley, 1981.