



UR

Derivas de complejidad
Ciencias sociales y tecnologías convergentes

**Derivas de complejidad
Ciencias sociales y tecnologías
convergentes**

Carlos E. Maldonado Castañeda
-Editor académico-



Colección Complejidad

© 2013 Editorial Universidad del Rosario
© 2013 Universidad del Rosario, Facultad de Administración
© 2013 Carlos E. Maldonado Castañeda, Eddy Herrera Daza,
Eduardo Forero Lloreda, Raúl Trujillo Cabezas

ISBN: 978-958-738-293-8

Primera edición: Bogotá D.C., febrero de 2013
Coordinación editorial: Editorial Universidad del Rosario
Corrección de estilo: Leonardo Holguín Rincón
Diseño de cubierta: Lucelly Anaconas
Diagramación: David Reyes
Impresión: Estrategikmente Ltda.
Editorial Universidad del Rosario
Carrera 7 N° 12B-41, oficina 501 • Teléfono 297 02 00
<http://editorial.urosario.edu.co>

Todos los derechos reservados. Esta obra no puede ser reproducida sin el permiso
previo por escrito del Editorial Universidad del Rosario

Fecha de recibido: 10 de octubre de 2010 | Fecha de aprobado: 13 de agosto de 2012

Derivas de complejidad. Ciencias sociales, y tecnologías convergentes / Carlos
E. Maldonado Castañeda, editor académico. —Bogotá: Editorial Universidad
del Rosario, 2012.

228 p. (Colección Complejidad)

ISBN: 978-958-738-293-8

Complejidad (Filosofía) / Filosofía de las ciencias sociales / Teoría del
conocimiento / Inteligencia artificial / I. Castañeda Maldonado, Carlos E. /
II. Universidad del Rosario, Facultad de Administración / III. Título. / IV. Serie.

501 SCDD 20

Catalogación en la fuente – Universidad del Rosario. Biblioteca

dcl

Noviembre 19 de 2012

Hecho el depósito legal que marca el Decreto 460 de 1995

Impreso y hecho en Colombia
Printed and made in Colombia

Contenido

Introducción	1
CARLOS EDUARDO MALDONADO CASTAÑEDA	
Capítulo 1. Ciencias de la complejidad y las nano-bio- info-cogno ciencias.....	7
RAÚL TRUJILLO CABEZAS	
Capítulo 2. Heurísticas de la complejidad	37
EDDY HERRERA DAZA	
Capítulo 3. Arqueología, Estado y complejidad: un acercamiento a los sistemas socio-naturales complejos	83
EDUARDO FORERO LLOREDA	
Capítulo 4. Prospectiva y teoría de la complejidad	167
RAÚL TRUJILLO CABEZAS	

Índice de figuras y tablas

Capítulo 1

Figura 1.	Tetraedro de las NBIC's.....	17
Figura 2.	Convergencia nanoescalar	19
Figura 3.	Pronóstico de tecnologías emergentes 2000-2030	25
Figura 4.	Análisis estratégico TechCast	26
Figura 5.	Interdisciplinariedad en NBIC's	31

Capítulo 2

Figura 1.	Óptimos, locales y globales	46
Figura 2.	Proporción de cada individuo en el <i>pool</i> genético	69
Figura 3.	Representación gráfica del operador de cruce.....	71
Figura 4.	Representación gráfica del operador de mutación	73

Capítulo 4

Figura 1.	Tres momentos relativos al triángulo griego.....	183
Figura 2.	Cuadrilátero de virtud prospectivo.....	184
Figura 3.	El circuito prospectivo	186
Figura 4.	Dinámica de un sistema inestable	203
Figura 5.	Relación entre un sistema real y un sistema formal	205
Figura 6.	Estado futuro del sistema.....	207

Tabla 1.	Comparación entre previsión y prospectiva.....	178
Tabla 2.	Condiciones para aplicación del <i>forecasting</i>	179
Tabla 3.	Mapa resumen del campo de los futuros	181
Tabla 4.	Relación de métodos prospectivos	193

Introducción

Carlos Eduardo Maldonado Castañeda*

El trabajo en complejidad implica interdisciplinariedad. Para las ciencias sociales, al decir de I. Wallerstein, equivale a una apertura hacia las ciencias llamadas naturales, positivas o exactas. Para este grupo de ciencias, se trata de reconocer que los sistemas de máxima complejidad, en toda la extensión de la palabra, no son precisamente los sistemas físicos, químicos, biológicos, matemáticos o computacionales, sino aquellos que tratan las así llamadas ciencias sociales y humanas. Como quiera que sea, la interdisciplinariedad implica el proceso real, físico, cotidiano de encuentro, diálogo, desavenencias, acuerdos, pactos y compromisos entre científicos de distintas formaciones, entre científicos e ingenieros, por ejemplo.

Pues bien, este libro es exactamente eso: el resultado del estudio y el trabajo de un grupo de académicos, investigadores, ingenieros y teóricos en torno a las ciencias de la complejidad. Aquí se consignan contribuciones de filósofos, biólogos, ingenieros con distintas especialidades, matemáticos, antropólogos y administradores. Una experiencia de convivencia larga, cuyo primer resultado es esta obra.

Sin embargo, el sentido de responsabilidad sigue siendo, a falta de algo mejor, individual. Por ello mismo, los capítulos que componen este libro están firmados individualmente. Quisimos escribir una obra conjunta, integrada,

* Filósofo de la Universidad del Rosario. Ph.D. en Filosofía por la K.U. Leuven (Bélgica). Postdoctorado como Visiting Scholar en la Universidad de Pittsburgh (EE.UU). Postdoctorado como Visiting Research Professor en la Catholic University of America (Washington D.C.). Postdoctorado como Academic Visitor – Visiting Scholar, Facultad de Filosofía, Universidad de Cambridge (Inglaterra). Profesor titular de la Universidad del Rosario.

cruzada y común, no obstante, el hecho de que todos los autores trabajan en universidades e institutos diferentes, hizo difícil alcanzar este propósito. La interdisciplinariedad es tanto más valiosa cuando se trata del diálogo y el trabajo cruzado o integrado entre organizaciones e instituciones diferentes, como debe serlo. La comunidad y la sociedad misma así lo reconocen y lo valoran.

La interdisciplinariedad es fácil cuando se trata de dialogar, contribuir y trabajar entre formaciones disciplinares diferentes; es más difícil –y a ello debe conducir ulteriormente todo el trabajo en complejidad– cuando se refiere a la apuesta, al riesgo de que un investigador o académico trabaje en dominios disciplinados variados y distintos a los propios. En la historia de la ciencia son contados los casos en este sentido: un físico que escribe con suficiencia y autoridad sobre sociología y antropología; un químico que habla con propiedad y elocuencia sobre derecho o neurología; un ingeniero que publica acerca de temas relacionados con la economía y las matemáticas, son solo algunos ejemplos.

Derivas de la complejidad tiene una doble acepción. En sentido filosófico, se trata del error, el vagabundear, el caminar libremente, sin un horizonte predeterminado, abierto a las riquezas y sorpresas del mundo. Un cierto eco de la filosofía de M. Heidegger parece resonar en el fondo; en matemáticas, hacen referencia a la diferenciación que enriquece el cálculo, a extensiones que amplían y que por ello mismo contribuyen a precisar el análisis, el estudio.

El estudio de la complejidad ha sido –con buena fortuna– identificado como el proceso mediante el cual un fenómeno, sistema o comportamiento gana en grados de libertad; mejor aún: a mayores grados de libertad, mayor complejidad, con todo y el reconocimiento explícito de que los grados de libertad no deben ser, en absoluto, identificados –a la manera de la ciencia clásica o normal– como si la complejidad significara mayor número de variables. No solo los grados de libertad son radicalmente distintos de las variables; además, y más exactamente, la complejidad no se corresponde con un mayor número de variables. En numerosos casos incluso sucede lo contrario.

Pero la idea de que la complejidad implica la ganancia o la obtención de grados de libertad mayores nos hace pensar en la libertad del error libremente, de disfrutar el ocio, si se quiere, en fin, del sentido mismo de evolucionar, puesto que, como es sabido, la evolución no sucede de modo teleológico. Al mismo tiempo, a medida que avanzamos en el camino y ganamos libertad, logramos establecer diferencias, relacionar, cruzar e integrar.

Una comunidad interdisciplinaria es una experiencia singular en la que cada uno de los integrantes, con formaciones disciplinares propias, debe aprender de los demás, y con ello mismo aprende también a relativizar el saber propio. La capacidad de relativizar y un sano escepticismo han sido siempre principios fundacionales de comunidades abiertas, democráticas, libres.

El conocimiento es un dominio de debate permanente, de enriquecimiento y revaluación, de ampliación y relativización. Lejos, muy lejos queda la idea de sociedades secretas, de sociedades discretas que resguardan el conocimiento al margen del resto de la sociedad. Las ciencias de la sociedad nacen como un enriquecimiento común, público y abierto, y en marcado contraste con la historia de la ciencia en general, hacen de estos rasgos su característica diferenciadora principal.

Asistimos, manifiestamente, a una revolución del conocimiento, una revolución intelectual, una revolución cultural, por decir lo menos. Mientras que la ciencia clásica en general se dividió en dos campos distintos, claramente delimitados, a saber: la ciencia empírica y la ciencia racional o (hipotético)-deductiva, asistimos a la emergencia de un nuevo tipo de racionalidad científica: la ciencia por medio del modelamiento y la simulación. Si ello es así, la integración entre científicos de toda índole e ingenieros es tanto más necesaria y deseable. Solo que la ingeniería ya no es de tipo clásico, ni siquiera la ingeniería reversible; ahora se trata de la ingeniería de sistemas complejos; un campo novedoso y promisorio que también tiene su propia voz y parlamento en el texto que ha emergido y que aquí presentamos a la comunidad científica y académica tanto como a la sociedad en general.

La interdisciplinariedad es un proceso –no un resultado– que se alcanza, por trivial que parezca, en encuentros regulares –físicos y/o virtuales (usualmente ambos) combinados. Al mismo tiempo supone una apertura de mente, una relativización del propio saber y de las propias competencias, y un deseo de avanzar en los propios campos, objetos y problemas de estudio y de trabajo gracias a la colaboración de otras disciplinas y ciencias. Sin embargo, lo verdaderamente significativo estriba en el hecho de que mediante estos encuentros descubrimos que lo que nos interesa no es enteramente ajeno a otras formaciones y habilidades.

Como es sabido, los problemas constitutivos de la interdisciplinariedad son de frontera; es decir, problemas imposibles de abordar y tanto menos resolver en función de una formación unidisciplinar. Precisamente por ello

tanto investigadores como la dinámica de encuentros y trabajo conjunto coinciden en el hecho de que cada quien aporta a la mesa de trabajo –por así decirlo– una excelente formación (avalada por fenómenos como su pertenencia a grupos de investigación, a prestigiosas universidades e institutos de investigación, a la obtención de títulos diversos de maestría, doctorado y otros, al prestigio que otorgan determinadas publicaciones de calidad, y demás) que, sin embargo, se enriquece con el diálogo, la empatía preexistente o que se va construyendo, en fin, con la discusión abierta, sincera y rigurosa de los avances de la producción que, queda dicho, se adelanta en función de una mirada común, abierta, pública que supone un acto de confianza sin igual.

Las ciencias de la complejidad nacen como el ejercicio, la *mise en oeuvre* de la interdisciplinariedad. No elaboran el discurso sobre la interdisciplinariedad y se interesan aún menos en las discusiones sobre las relaciones de distinto tipo sobre inter, trans y multidisciplinariedad. Tal es la historia de los diferentes institutos y centros de investigación en el mundo, y tal es también la dinámica de los diversos grupos interinstitucionales e interdisciplinarios sobre complejidad.

Hemos logrado constituir un grupo de trabajo ad hoc sobre complejidad que avanza ya en un trabajo continuado por más de un lustro. El núcleo de este grupo lo constituyen quienes participan en este libro. Una muestra de su historia como grupo es la realización exitosa de cuatro seminarios de profundidad denominados “Encuentros Interuniversitarios sobre Complejidad”, que han producido diversas publicaciones con trabajos de autores de Cuba, México, España y Brasil, así como de otras universidades del país.

Se trata, en todos los casos, de procesos eminentemente autoorganizativos, *bottom-up*, que no terminan de ser formalizados institucional, mejor, interinstitucionalmente. Aquí radica, con toda seguridad, el principal valor de estas dinámicas.

Derivas de complejidad quiere ser un libro honesto y exigente; formativo y provocador. Originalmente estuvo pensado para ser un libro de trabajo al nivel de posgrados –para *graduate students*, como se dice en el contexto anglosajón. Esto significa que puede ser tomado como texto introductorio para aquellos que de alguna manera han comenzado el estudio y el trabajo con sistemas de complejidad creciente. Está pensado, deliberadamente, como un mapa tridimensional en el que se aprecian valles y montañas, rugosidades y vecindarios.

El mundo que estamos viviendo y el que viviremos en un futuro relativamente previsible exige del trabajo mancomunado y cruzado, a la vez que la puesta manifiesta de su no-linealidad, el cruce de dimensiones aparentemente inconmensurables, de lenguajes y herramientas que necesariamente tienen que ver con la existencia de fenómenos y comportamientos abiertos, y por ello mismo cargados de incertidumbres, turbulencias e inestabilidades.

No hemos perdido las certezas y las verdades ganadas por la historia de la humanidad, la historia de la ciencia, la historia de la civilización y de las culturas. Adicionalmente, hemos aprendido la incertidumbre, la no-linealidad, las emergencias y la sorpresa, entre otros rasgos, elementos y características. Andar a la deriva, estar a la deriva, no es en absoluto –y ciertamente no de manera necesaria– un estado negativo. Pensábamos decir “crítico”, pero es que, en rigor, los sistemas, fenómenos y comportamientos complejos siempre están en situación crítica, y la existencia de puntos críticos y de estados críticos es la condición misma de la complejidad. En nuestro caso, andar a la deriva significa reconocer que nos encontramos en estado de investigación, que es, con seguridad, la mejor de las condiciones de quienes pertenecemos a la comunidad científica y a la comunidad académica. El título grueso de aquello que investigamos es precisamente ese: la complejidad del mundo, la complejidad de la naturaleza, la complejidad de la sociedad, en fin, la complejidad misma del conocimiento. Sin embargo, ¿qué es complejidad? es justamente el tema, el hilo conductor de los capítulos que integran este libro.

Capítulo 1

Ciencias de la complejidad y las nano-bio-info-cogno ciencias*

Raúl Trujillo Cabezas**

*El reto actual, aceptado por el mundo científico y tecnológico,
es el de desarrollar nuevas aproximaciones científicas,
modificar paradigmas y asumir posiciones novedosas responsables,
para poder enfrentar con herramientas adecuadas el estudio e intentos
de comprensión de dicha complejidad*

Leonardo R. Lareo

Introducción

La complejidad dedica su atención a comprender los sistemas adaptativos complejos. En este sentido, la idea clave es constatar cómo las estructuras simples que integran estos sistemas producen un comportamiento complicado (de manera predecible, eficaz y flexible) que representa alto rendimiento en entornos dinámicos (Prigogine, Stengers & Pagels, 1985), y que se alcanza

* Este capítulo se basa en el escrito realizado por Leonardo R. Lareo, profesor del Departamento de Nutrición y Bioquímica-Bioquímica Computacional y Estructural y Bioinformática, Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Javeriana, cuyo estado de salud, en el momento de la preparación de la presente publicación, se encontraba resquebrajado.

** Ingeniero de sistemas. Especialista en Pensamiento Estratégico y Prospectiva. Magíster en Administración de Negocios. Docente, investigador y consultor asociado al Centro de Pensamiento Estratégico y Prospectiva de la Universidad Externado de Colombia.

gracias al equilibrio entre orden y desorden, lo que permite la eficiencia y la flexibilidad de los sistemas (Gumerman & Gell-Mann, 1994). Se ha demostrado que el cambio –por pequeño que sea– en una condición inicial dentro de un sistema puede ocasionar una variación enorme del resultado inicial esperado. Desde el punto de vista de la física moderna, resulta fundamental comprender la naturaleza de los sistemas dinámicos, más aún si dicha exploración implica reconocer la naturaleza propia de sistemas cuánticos, en tanto los resultados probables y posibles del sistema, además de estar demarcados por las condiciones iniciales, también están regidos por momentos o posiciones que pueden ser calculadas como expectativas estadísticas (Mainzer, 2007).

En los últimos doce años se han propuesto por lo menos dos nuevas aproximaciones a esta comprensión integral de “una sola imagen” de la materia y sus procesos, como resultado de un esfuerzo por reducir las diferencias entre la mecánica cuántica y la física clásica, diferencias que residen en el concepto de estados cuánticos que utilizan operadores para observar parámetros a cambio de emplear la noción tradicional de vectores con posición y movimiento (Mainzer, 2002). Una de ellas es el modelaje y simulación multiescala (MSMS), producido en el Center for Integrative Multiscale Modeling and Simulation (CIMMS) del California Institute of Technology (CalTech) bajo la orientación de William A. Goddard, III (Goddard et ál., 2001). Esta visión de la materia, inerte y viva, pretende generar modelos teóricos –con gran participación de las ciencias computacionales– para explicar la materia y sus procesos desde los primeros principios mecánico-cuánticos, mediante el análisis de procesos complejos que involucran múltiples tiempos y múltiples escalas. El concepto multiescala comprende tanto la dimensión temporal como la espacial, desde procesos que ocurren en períodos de tiempo del orden de femto segundos (10^{-15} s) y longitudes de diezmillonésimas de metro (10^{-10} m) hasta períodos de años y longitudes del orden de metros (Lareo, 2007). Tal aproximación requiere una nueva teoría que permita acercarse a la solución de problemas no resueltos y no solucionables con los paradigmas científicos y tecnologías actuales, de tal manera que abra un espacio de oportunidad para el desarrollo de aplicaciones que con la articulación de un enfoque sistémico multiescalar haga posible responder a innumerables retos científicos y de ingeniería. Por ejemplo, a nivel molecular, se debería producir teoría básica que permitiera obtener nuevos modelos y algoritmos que relacionaran las explicaciones a nivel subatómico con las propiedades macromoleculares.

Otro nivel sería la comprensión y predicción del comportamiento humano con base en resultados neurofisiológicos.

Una de las nuevas áreas de conocimiento que ha derivado mayores beneficios es la nanotecnología, en la que a partir de fullerenos y nanotubos se plantean soluciones terapéuticas para diversas patologías, entre ellas el cáncer. Otra aproximación contemporánea son las denominadas ciencias nano-bio-info-cogno o NBIC's (Roco & Bainbridge, 2002), a las que se ha sumado el aspecto social, por lo cual han sido llamadas ciencias nano-bio-info-cogno-socio (NBICS's). Estas aproximaciones persiguen un objetivo principal: unificar las ciencias y la tecnología con base en cuatro principios básicos: 1. La unidad de la material a nivel nanoescalar; 2. El desarrollo de herramientas para las NBIC's; 3. El estudio de sistemas jerárquicos, y 4. El mejoramiento del bienestar de los seres vivos. Algunos, por cierto, toman este enfoque contemporáneo para desarrollar propuestas futuristas. Es el caso de Ray Kurzweil, quien luego de escribir su reconocida obra titulada *The Age of Spiritual Machines*, presenta en *The Singularity is Near*, de manera más clara e ilustrativa, cómo con el advenimiento de este nuevo enfoque los seres humanos serán capaces de trascender su propia biología (Kurzweil, 2005).

Para que un sistema complejo adquiera las propiedades que lo caracterizan no necesita tener un tamaño determinado o que trascorra una escala de tiempo determinada. Un átomo tan pequeño como el de hidrógeno (Gaeta & Stroud, 1990), con un solo protón en su núcleo y un electrón, presenta tanta complejidad como un sistema macromolecular, por ejemplo una cadena de ADN, base del proyecto Genoma Humano (Frazier et ál., 2003), en la que se fundamenta y almacena la información genética para que un organismo sea lo que es y no otra cosa; o el sistema fotosintético (Bogard & Vasil, 1991), mayoritariamente de las plantas, sobre el cual se fundamenta la vida tal como la conocemos, pues es el transductor fundamental de nuestra única fuente de energía: el sol; o el receptor ionotrópico de glutamato activado por N-metil-D-aspartato del sistema nervioso central, molécula clave de la vida consciente (Lareo & Corredor, 2004), al ser esencial en los procesos fisiológicos en los que se fundamenta la formación de la conciencia neurológica de los organismos superiores.

Una evidencia de esta complejidad –posiblemente circunstancial, pero real– es que ninguno de los sistemas mencionados tiene una solución exacta ni un modo único de alcanzarla. En el caso del átomo de hidrógeno, ejemplo

“de juguete” en los cursos de mecánica cuántica, todas sus soluciones se alcanzan por medio de aproximaciones, con claras diferencias entre ellas, como las obtenidas por el método de perturbaciones de Heitler-London (Sachse & Kleinekathöfer, 2002) y el método variacional (Aquino & Castaño, 2005). Ni que decir de los otros sistemas macromoleculares multiheteroméricos mencionados, de los cuales no se conoce al detalle ni sus estructuras ni las actividades químicas que desencadenan en funciones biológicas.

Desde el punto de vista de los organismos, es tan compleja la más pequeña bacteria (Cavalier-Smith, 1987) como el más grande de los mamíferos (Wilson, 1992). Si se toma en consideración a las sociedades, aceptadas –en forma por demás incorrecta– como la agrupación de individuos, son tan complejas las integradas por microorganismos (Handelsman & Wackett, 2002) como las conformadas por hormigas (Holldobler & Wilson, 1995) o por los seres humanos (Tainter, 1996). Los sistemas inorgánicos (Prigogine, 1980) comparten niveles similares, iguales o superiores de complejidad, como lo demostró exhaustivamente Ilya Prigogine, Premio Nobel de Química y uno de los fundadores de la Ciencia de la Complejidad. Lo mismo ocurre con los sistemas creados por el hombre, por ejemplo los económicos (Anderson, 1998) y los políticos (Jervis, 1998), que también expresan en toda su extensión esta propiedad emergente.

Una definición derivada de los múltiples trabajos de Robert Rosen muestra cómo podemos aproximarnos a este concepto en forma operativa. Según el autor:

Complejidad es la propiedad de los sistemas del mundo real que se manifiesta en la inhabilidad de cualquier formalismo existente para capturar todas sus características. Se requiere encontrar formas diferentes de interactuar con estos sistemas. Formas diferentes en el sentido que cuando se construyen modelos exitosos los sistemas formales requieren que las descripciones de cada aspecto no sea derivable de otro. (Rosen, 1991)

Esta definición, formalmente aceptada y promulgada por Mikulecky (Mikulecky & Rosen, 2000; Mikulecky, 2001) y por otros, presenta algunos aspectos formales que, aunque pueden no satisfacer a muchos, resulta muy útil en aras de comprender el concepto.

Un aspecto interesante de la definición propuesta por Rosen radica en la “inhabilidad de cualquier formalismo existente para capturar todas sus características”, que resulta ser muy similar al teorema de incompletitud de Kurt Gödel (1931). Según Jesús Mosterín, traductor y editor de las obras completas de Kurt Gödel en español, “Kurt Gödel ha sido el más grande lógico del siglo xx y uno de los más grandes pensadores de todos los tiempos”. Básicamente, con su teorema “demostró que no todo se puede demostrar” (Lareo, 1999).

Los resultados de Gödel demostraron la imposibilidad de efectuar la formalización propuesta y perseguida por Hilbert (1901). El denominado programa de Hilbert consideraba que una prueba satisfactoria es aquella cuyas técnicas pueden especificarse completamente en un número finito de pasos, y que los símbolos matemáticos no deben tener un sentido. Las matemáticas son un juego de símbolos desarrollado sobre el papel de acuerdo con ciertas reglas fijas. Para Hilbert la formalización es sinónimo de axiomatización. Gödel probó que todos los sistemas formales de la matemática clásica son incompletos; esto es, que para cada uno de ellos es posible construir una sentencia indecible. Cada sentencia tiene la característica de que ni ella ni su negación son deducibles dentro del sistema. Esta incompletud es irremediable: no es suficiente con incrementar el número de axiomas básicos del sistema para solucionar su incompletud. Además, Gödel demostró que es imposible probar la consistencia de un sistema formal dentro de sí mismo.

Desde la perspectiva de Rosen sobre la complejidad –como característica para la cual ninguno de los sistemas formales actuales es capaz de explicar ni demostrar–, estamos ante la presencia de un “indecible de la naturaleza”. Según Gregory Chaitin (2002), en la naturaleza hay menos procesos al azar de los que aceptamos. Así, se reconoce que muchos de estos procesos se dicen al azar por falta de conocimiento respecto a ellos y no porque realmente lo sean. Si se descuenta este “azar por ignorancia”, quedan los procesos verdaderamente al azar; por tanto, “el azar es un derecho intrínseco de la naturaleza” (Lareo, 1998). Como lo demostró el propio Chaitin (1997), ese azar existe aun en la matemática de los números naturales.

Según Leibniz, “(...) entre más compleja es la regla (matemática) esta pasa a formar parte de los procesos al azar (...)” (1686). Entonces ¿existe una estrecha relación, inamovible, entre la complejidad como “indecible de

la naturaleza” y el azar como “derecho intrínseco de la naturaleza”? O interpretando la complejidad intrínseca de la naturaleza desde la teoría de complejidad computacional (Davis, 1973) en la que los problemas se clasifican como problemas P –es decir, aquellos que se pueden solucionar por medio de un proceso determinístico secuencial en un período de tiempo que crece exponencialmente con el tamaño de la pregunta, entrada o “complejidad” del problema– y como problemas NP –esto es, aquellos cuyas soluciones se pueden encontrar en un tiempo polinómico por medio de procesos no-deterministas– ¿se puede argumentar que la complejidad es un problema P o NP en los cuales el “tamaño” de la pregunta es tal (complejidad) que el tiempo necesario para encontrar la respuesta mediante procesos deterministas o no-deterministas sobrepasa cualquier escala factible de tiempo en lo que es la historia de la materia misma? En términos reales, ¿la complejidad no es solucionable en el contexto del mundo como lo conocemos y con los recursos actuales? O, simplemente, ¿estamos ante la inminente necesidad de renovar los paradigmas actuales de la investigación para poder alcanzar una comprensión real de la naturaleza o materia real que en el contexto global es intrínsecamente compleja?

Las actuales tendencias de pensamiento científico han optado por aceptar la segunda opción. Se proponen entonces nuevas aproximaciones, nuevos paradigmas de una visión reduccionista integradora que permitan pasar de una escala a otra en la propuesta de la simulación y modelaje multiescala (MSMS o MS²) o de integrar diferentes aproximaciones de un contexto total en las ciencias nano-info-bio-cogno (NBIC's).

Modelaje y simulación multiescala

En el mundo real, la materia se distribuye en muchas escalas espacio-temporales (Goddard, et ál., 2000) en las que los procesos ocurren en tiempos que van desde femto segundos (10^{-15} s) hasta años ($\approx 10^7$ s) en el caso de la materia viva, y niveles de tiempo superiores ($>10^{15}$ s) para la materia inerte. En cuanto a la escala espacial, se tienen dimensiones de ángström ($\text{\AA}$, 10^{-10} m) hasta el nivel de metros (m) para la materia viva y niveles superiores de longitud ($> 10^3$ m) para la materia inerte. Estas escalas denominadas nanoescala, mesoescala y macroescala, o materia continua, están regidas aparentemente por diferentes leyes físicas, muchas de ellas aún desconocidas.

El componente de modelaje tiene dos partes básicas: la descripción del proceso, o propiedad de la materia que se va a modelar, y el objetivo del modelo. Los objetivos de modelar se describen verbalmente y se refinan durante el proceso mismo del modelado. Estos objetivos son considerados durante el desarrollo del modelado como restricciones o relaciones entre los elementos, parámetros o variables del proceso que se modela.

Aquí se encuentra la primera barrera a superar para generar nuevos paradigmas, pues para que las descripciones sean nuevas y novedosas se deben independizar de la forma tradicional de aproximarse a la investigación. Es decir, se está ante el hecho concreto de una situación en la que las aproximaciones actuales no son suficientes, y constituyen un limitante para avanzar en la descripción misma de cómo aproximarse a solucionar un problema complejo.

Los procesos de modelamiento multiescala son un sistema que se puede organizar a diferentes escalas, dependiendo del proceso o sistema que se desee modelar. En ellos se diferencian la escala espacial y la escala temporal, a las que se suma la escala del nivel de detalle al que se quiere modelar o describir ya sea la materia o el proceso material.

Una vez definido el modelo en la escala o escalas respectivas se procede con las simulaciones, que conllevan otro cambio de paradigma en el tipo de herramientas que se deben emplear para que el modelo sea coherente con la novedad del modelo mismo.

Considerando el problema de describir un proceso material se puede iniciar en la escala nano pasando por la meso hasta llegar al continuo. En la escala nano se puede iniciar el estudio, descripción y comprensión del sistema a partir de los denominados primeros principios, o *ab initio*, que incluyen solucionar la ecuación de Schrödinger que no es derivable de ningún otro principio pero que constituye un primer principio en sí misma. Esta ecuación describe la función de onda que representa alguna partícula material:

$$i\hbar \frac{\partial \square}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \square}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \square}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \square}{\partial z^2} \right) + V\square \quad (1)$$

Para complementar la descripción, se aceptan y emplean en la solución los restantes primeros principios, como la existencia de la carga, el principio

de incertidumbre de Heisenberg (1975), el principio de exclusión de Pauli (1925) y el principio de complementariedad de Bohr (1937), que tendrá gran importancia en la transparencia de las soluciones de una escala nano a una macroescala, entre otros.

Una vez alcanzada esta solución, que en el estado actual del conocimiento es teóricamente factible, pero que en la realidad no se logra hacer más que para un número limitado de átomos (menos de mil), implica una limitación en los sistemas “solucionables” o en la calidad de la solución cuando para crecer en la escala espacial se acude a asumir aproximaciones. Este es el caso del conocimiento actual, que para incrementar la escala espacial se sale del nivel cuántico y asume las restricciones propias de emplear métodos aproximados, como los llamados semiempíricos (Gubbins & Santiso, 2004) y los métodos clásicos (Machida, 1999). Estos últimos asumen la materia como si estuviera conformada por pequeñas partículas rígidas cargadas que cumplen estrictamente las leyes de Newton de la mecánica clásica, y se generan campos de fuerza o funciones de energía usualmente empíricos, como la mayoría de los empleados por los programas clásicos de modelaje. El ejemplo que se ilustra a continuación obedece a la expresión del denominado modelo de campos de fuerza universal (UFF) (Ogawa et ál., 2003).

$$\begin{aligned}
 E_t = \sum_{r_{ij}} \frac{K_r}{2} (r_{ij}^0 - r_{ij})^2 + & \frac{K_{\square}}{4} (1 - \cos(2\frac{\square}{\gamma\delta})) + \frac{K_{\square}}{9} (1 - \cos(3\frac{\square}{\gamma\delta})) + \frac{K_{\square}}{16} (1 - \cos(4\frac{\square}{\gamma\delta})) \\
 & K_{\square} \frac{1}{4\text{sen}^2\frac{\square}{\gamma}} (2\cos^2\frac{\square}{\gamma} + 1) - \frac{\cos\frac{\square}{\gamma}}{\text{sen}^2\frac{\square}{\gamma}} (8\cos^3\frac{\square}{\gamma} + 4\cos\frac{\square}{\gamma}) + \frac{\cos\frac{\square}{\gamma}}{4\text{sen}^2\frac{\square}{\gamma}} \\
 & \sum_{\square} \frac{K_{\square}}{2} (1 - \cos(n\frac{\square}{\gamma}) \cos(m\frac{\square}{\gamma\delta})) + \sum_{\square} (K_{\square} (C_0^I + C_1^I \cos\frac{\square}{\gamma\delta} + C_2^I \cos 2\frac{\square}{\gamma\delta})) + \\
 & \sum_{r_{ij}} K_r - 2 \frac{r_{ij}^6}{r_0} + \frac{r_{ij}^{12}}{r_0} + \sum_{r_{ij}} \frac{q_i q_j}{\square_{ij}}
 \end{aligned} \tag{2}$$

A nivel de la mesoescala, hoy en día no existen muchos ejemplos que permitan ilustrar el propósito. El ejemplo tradicional y mejor estudiado es la ecuación de Navier-Stokes (Masud & Khurram, 2006) para la descripción de fluidos incompresibles basada en la conservación de la masa y el momento. Una posible representación de esta ecuación es:

$$\begin{aligned}
 F_i &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \cdot u \\
 &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \cdot u + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \cdot u
 \end{aligned} \tag{3}$$

A nivel continuo, se puede citar el ejemplo de la ecuación para el módulo de comprensión de Young (Meijer & Govaert, 2003) para materiales elásticos, que se expresa como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial}{\partial t} \right) - \dot{f}(t) f(t) \frac{\partial}{\partial e} \left(\frac{\partial}{\partial e} \right) = 0 \tag{4}$$

La escala de longitudes o tamaños de los sistemas para describir procesos y propiedades de la materia se ha ilustrado con diferentes modelos y aproximaciones. Pero ¿cuál es propósito fundamental de la aproximación del modelaje y la simulación multiescala? Precisamente, evitar la fragmentación de las descripciones empleando modelos que tienen validez en única escala y generar un multimodelo que cubra todas las escalas, además que sea transparente cuando se pase de una escala a otra, aunque se pueda emplear, con los parámetros adecuados, para describir procesos en una escala en particular. Para lograrlo, se plantean dos perspectivas: una puramente matemática (Liu et ál., 2000), generando conjuntos de ecuaciones diferenciales que sean “transparentes” al nivel por ajustes de los parámetros, y otra a por medio de aproximaciones de tipo físico desde modelos multifísica (Michopoulos, 2003) o desde modelos basados en primeros principios (Goddard, 2005).