

Modelos y representación

Hernán Lucas Accorinti¹
Juan Camilo Martínez González²

Recibido: 28 de diciembre de 2015.

Aceptado: 26 de julio de 2016.

Resumen. Según la epistemología tradicional, los modelos devienen epistémicamente relevantes en la medida en que logren *representar* al fenómeno. Desde esta perspectiva se intentó justificar tal relación a partir de un *isomorfismo* o una *similitud* entre ambos dominios. En el presente trabajo evidenciaremos, a partir de ciertos tipos de modelos utilizados comúnmente en el ámbito científico, que una postura que pretenda naturalizar la representación excluyendo al agente como vínculo entre el modelo y el sistema será siempre inadecuada. A su vez, sobre la base del análisis de dos modelos incompatibles propios de la química cuántica como son el *Enlace de Valencia* y el *Orbital Molecular*, explicaremos en qué sentidos podemos afirmar que la potencialidad representativa no es una condición necesaria para la construcción del conocimiento científico. En efecto, en química cuántica el conocimiento se genera a partir de la capacidad de cálculo y predicción de los modelos; cálculos y predicciones no siempre susceptibles de ser comprendidos desde marcos epistemológicos representacionistas.

Palabras clave: modelos – representación – química cuántica – modelos moleculares.

Title: Models and representation.

Abstract. According to traditional philosophy of science, models become epistemically relevant insofar they are able to *represent* the phenomenon. From this perspective, it has been attempted to justify such a relation in terms of an *isomorphism* or *similarity* between both domains. The present work will show, on the basis of some kinds of models commonly used in science, that any stance that aims at naturalizing representation by excluding the agent as a mediator between model and target system will always be insufficient. In turn, by analyzing two incompatibles models of quantum chemistry such as *Valence Bond* and *Molecular Orbital*, we will show that representative potentiality is not a necessary condition for the construction of scientific knowledge. Indeed in quantum chemistry knowledge is the result of the computing and prediction power of the models themselves; computing and predictions that are not always susceptible to be understood from representationalist epistemological frameworks.

Keywords: models – representation – quantum chemistry – molecular models.

¹ Universidad de Buenos Aires

✉ hernanaccorinti@gmail.com

² CONICET – Universidad de Buenos Aires

✉ olimac62@hotmail.com

Accorinti, Hernán Lucas; Martínez González, Juan Camilo (2016). Modelos y representación. *Epistemología e Historia de la Ciencia*; 1(1); 21-34. ISSN: 2525-1198



1. Introducción

En el presente trabajo analizaremos el problema de la representación tal como se presenta en el contexto de algunos modelos que son utilizados en la actualidad por la práctica científica. La especificidad y particularidad del tema se debe a que la potencialidad representativa de los modelos en ciencia excede el ámbito del lenguaje, autonomizándose así del clásico problema en torno a la referencialidad de éste. En efecto, si interpretamos a los modelos como entidades no estrictamente lingüísticas, nos enfrentamos al particular dilema de saber cómo puede ser que un objeto, y no un artefacto lingüístico, represente a otro objeto.

La importancia de la pregunta por la capacidad representativa de los modelos se debe a que, según la posición tradicional, los mismos devienen epistémicamente relevantes en la medida en que *representan* al fenómeno. Esta perspectiva asume que los modelos nos dicen algo acerca de la realidad si los aspectos presentados en ellos encuentran su contrapartida en el objeto de estudio (Frigg & Hartmann, 2006). En otras palabras, se supone que los modelos y los *sistemas target* (esto es, aquella parte o aspecto del mundo del cual se ocupa el modelo)³ tienen una determinada relación, que en un principio pretendió ser no intencional, en virtud de la cual se fundamenta la potencialidad cognoscitiva de los modelos. Dicha relación es analizada o bien a partir de algún tipo de morfismo en términos de una relación matemática definida extensionalmente a partir de una correspondencia entre estructuras, o bien en términos de una similitud, en donde, estableciendo una relación más débil que las propuestas estructuralistas, remite a una mera semejanza respecto a algunos aspectos entre dos dominios.

Ahora bien, es evidente que los modelos no son idénticos al *sistema* ya que, en tanto pretenden ser *re-presentaciones* y no meras presentaciones, se instituyen como un sustituto y, por lo tanto, como algo diferente de aquello a representar. Este tipo de consideraciones refieren al hecho de que todo modelo se constituye, por un lado, como producto de un proceso de abstracción de aquellas variables no relevantes del *sistema* y, por el otro, como producto de un proceso de idealización de aquellos factores que, no encontrándose en el *sistema*, son fundamentales para la manipulabilidad y, con ello, para la eficacia del modelo. En este sentido, la crítica a la perspectiva representacionista no se debe a que se espere de ella una imagen especular. Aun la postura más rigurosa como el *isomorfismo*, que requiere que todos los elementos de un conjunto (modelo) tengan una y sólo una relación con los elementos de otro conjunto (*sistema*)⁴, considera tales aspectos.

Sin embargo, asumir que los modelos pueden decirnos *al menos algo* respecto de la realidad en términos representacionales, lejos de agotar la discusión, abre un campo de análisis sumamente fructífero respecto de lo que dicha postura implica.

En relación con ello, en primer lugar evaluaremos la perspectiva representacionista (tal como se la concibió originalmente en términos no intencionales) a partir del análisis de ciertos tipos de modelos comúnmente utilizados en ciencias. Es así que en el punto 2 analizaremos los modelos a escala; en el punto 3 los modelos de datos; en el punto 4 los modelos matemáticos y en el punto 5 el problema generado por

³ De aquí en adelante cuando hablemos de sistema nos referiremos a lo que en la literatura se conoce como “sistema target”.

⁴ Adoptaremos, así, la definición brindada por Suárez según el cual el isomorfismo es una función de uno a uno que vincula todos los elementos de un dominio con los elementos de otro dominio y viceversa (Suárez, 2003, p. 228).

los procesos de idealización. Cada uno de estos apartados contribuirá a evidenciar que el lazo establecido por el imaginario cultural entre conocimiento y representación, a pesar de ser vital para cualquier tradición realista, no siempre encuentra suficiente fundamentación filosófica frente a la multiplicidad de modelos existentes en la práctica científica. En efecto, como explicaremos ulteriormente, el principal problema de la perspectiva representacionista fue que en un principio se pretendió fundamentar tal relación en términos no intencionales en virtud a ciertas características *propias* compartidas entre modelo y sistema.

En continuidad con tales propósitos, en segundo lugar, sobre la base del análisis de un caso específico de la química cuántica, en particular, el caso de los modelos de *Enlace de Valencia* y de *Orbital Molecular*, radicalizaremos las críticas afirmando que existen buenas razones para pensar que los modelos, tal como se desarrollan en algunas disciplinas científicas, pueden brindar información respecto al mundo aun cuando ésta no pueda ser evaluada en términos representativos.

Por último, en tercer lugar, analizaremos la posibilidad de revalidar las perspectivas representacionistas desde una postura pragmatista que no naturalice el proceso de la representación. En este sentido afirmaremos que, a pesar de que el giro pragmático se instituye como francamente superador en tanto que introduce el papel del agente, ello lo hace a costa de deflacionar radicalmente el concepto mismo de representación.

2. Modelos a escala

Comenzaremos analizando los modelos a escala intentando caracterizar los parámetros bajo los cuales los mismos pueden constituirse como instancias representativas. La relevancia de este tipo específico de modelos es que han sido uno de los primeros modelos utilizados y, si bien han perdido cierto peso a partir de los modelos computacionales, aún siguen siendo utilizados en áreas como la ingeniería o la arquitectura.

Los modelos a escala se caracterizan por ser entidades u objetos físicos concretos, útiles para predecir, describir e investigar el comportamiento de otros sistemas físicos. En este sentido, estos modelos se constituirían a partir de una analogía entre dos sistemas físicos. Un caso paradigmático de los modelos a escala es el del “túnel de viento”. En él se intenta simular los efectos del aire en objetos como aviones, automóviles o misiles a partir de un conducto en el que se propulsa aire en forma constante. Como es de suponer, una de las dificultades iniciales, aunque relativamente menores, en este tipo de modelos es considerar las cuestiones relativas al tamaño y la proporción de los elementos empleados, como también a los materiales utilizados, ya que éstos pueden alterar el proceso experimental. Para el caso del “túnel del viento”, por ejemplo, no es menor mantener una proporción adecuada entre el tamaño y la velocidad del viento. En este sentido, la expectativa de construir modelos a escala lo más realista posibles supone desafíos técnicos y económicos que otro tipo de modelo carece.

Ahora bien, si pensamos que los modelos brindan conocimiento *porque* representan al fenómeno en cuestión, parecería natural suponer que, en tanto el modelo a escala es una *réplica* del original, lo que legitimaría el conocimiento establecido sería la *similitud* relativa a algunos aspectos existentes entre ambos dominios. Como afirma Mauricio Suárez (2003, p. 15), debido a que los dominios relacionados son entidades físicas concretas que establecen la relación a partir de su ser objeto, y no a partir de la

estructura que ejemplifican, no parecería intuitivo atribuir de un modo directo al *isomorfismo* (entendido como relación matemática biyectiva entre dos dominios) la potencialidad representativa.

Aparentemente, el isomorfismo cuenta con una ventaja sobre la similitud, ventaja que deriva del supuesto de que la representación se constituye en virtud de una relación natural no ambigua entre la estructura del modelo y la estructura del mundo. Sin embargo, esta ventaja se desvanece si se considera que entre un modelo y su sistema pueden establecerse diferentes tipos de relaciones estructurales. En este sentido, la estructura del fenómeno de estudio no está “allí” aguardando a ser descubierta, sino que depende de los intereses del científico, quien puede destacar diferentes relaciones que se establecen entre los diferentes elementos que componen al sistema. Por otro lado, otra desventaja del isomorfismo es que, a diferencia de la similitud, es incapaz de tomar en cuenta significativamente la diferencia de diversos modelos a escala del mismo sistema, debido a que, en tanto isomórficos, todos los modelos serían equivalentes.

Ahora bien, lo que el análisis pone de manifiesto es que, aun cuando la similitud aplica más adecuadamente para el caso de los modelos a escala, dista de ser una explicación completamente satisfactoria. En tanto que un objeto puede ser similar a otro en un campo infinito de aspectos no relevantes, la relación entre el modelo y el sistema no puede establecerse exclusivamente, como supone la versión naturalista de la representación, a partir de las propiedades intrínsecas a ellos. El modelo, incapaz por sí mismo de seleccionar el rasgo respecto del cual se dice similar al sistema, requiere un aditamento que consigne la propiedad compartida que determina la representación. Uno de los problemas que emergen de tal consideración es que, si la representación depende de la similitud relevante o elegida, y ésta, a su vez, es tal en función a que permite la representación, la caracterización buscada es indefectiblemente circular ya que estaríamos determinando la representación en función de una similitud que se torna preeminente por el hecho de ser representativa (Suárez, 2003, p. 26). A su vez, considerando que, estrictamente, un objeto siempre es similar en algún aspecto a otro objeto, la similitud se podría establecer tanto como condición de la representación como de la no representación.

Por lo tanto, en lo que respecta a los modelos a escala, la similitud, que se constituiría como la propiedad principal en virtud de la cual este tipo de modelos podrían llegar a ser representativos, no logra establecer las bases fundamentales como para legitimar la pretendida capacidad representativa.

3. Modelos de datos

Los modelos de datos cobran relevancia respecto del problema de la representación debido a que constituyen la primera instancia en el proceso representacional. Como afirmara Patrick Suppes (1962), las teorías no se contrastan con lo que suele denominarse “datos crudos”, obtenidos de la experimentación directa, sino con modelos de datos. Considerando esto el análisis de este tipo de modelos deviene imprescindible para el tema que nos convoca.

En este sentido, la base empírica de la teoría viene conformada por datos ya modelizados que, producto de las consideraciones pragmáticas y teóricas de los investigadores, no pueden considerarse como una mera copia de la realidad. A su vez, las partes del mundo que se pretenden representar no están estructuradas en un sentido obvio e inmediato. Suponiendo por un momento que es posible adscribir estructura a lo

real, el mundo no sería capturado inmediatamente sino que se presentaría modelizado de algún modo; y, por lo tanto, estrictamente hablando, el isomorfismo requerido por algunas posturas representacionistas se convertiría en una relación entre un modelo teórico y un modelo empírico (Knuuttila, 2005).

Evidentemente, el problema surge porque los modelos de datos, entendidos como rectificaciones, correcciones o selecciones de los datos provenientes de la experimentación, exigen algún tipo de manipulación e involucran supuestos en el proceso de su interpretación. Dependiendo de los elementos relegados y destacados, y del lazo establecido entre ellos, se producen diferentes modelos de datos. En efecto, la estrategia usual es introducir cambios en los conjuntos de datos, ya sea al eliminar los elementos presuntamente irrelevantes o los que resultan de errores de medición, o al establecer la relación entre los puntos seleccionados para la conformación del diagrama. Dependiendo de los cambios introducidos, se constituirán diferentes modelos. Cómo decidir respecto de los datos a tener en cuenta, y qué curva o lazo elegir dado un conjunto de datos, está condicionado por los objetivos teóricos y pragmáticos de la investigación. Esto pone en cuestión la capacidad representativa de los modelos de datos en términos de propiedades “naturales” de los dominios involucrados. A su vez la determinación de los denominados “datos crudos” supone un contexto interpretativo particular, que se constituye como parte del dominio de decisiones parciales que los científicos deben tomar (Harris, 2003).

Podría considerarse como ejemplo de un modelo de datos el resultado de la línea imaginaria trazada a partir de ciertos puntos pertenecientes a la trayectoria planetaria. Ahora bien, para obtener tal trayectoria se introdujeron cambios debido tanto a los datos que fueron descartados como a la configuración de un continuo a partir de una secuencia discreta de puntos. Por ello, podríamos preguntarnos por las entidades básicas que constituyen el dominio de la estructura, puesto que la estructura del sistema a representar varía en función de los objetos seleccionados como tales y al recorte parcial del todo compacto que tal selección impone. Consecuentemente, el mundo no tendría una estructura en estado bruto y, por lo tanto, el isomorfismo no podría establecerse como criterio natural y objetivo de representación. Desde esta perspectiva, la mentada trayectoria planetaria no contendría una estructura *per se* que permitiera hablar en términos de isomorfismo. Para ilustrar lo antedicho, Roman Frigg (2006) apela al ejemplo de la molécula de metano donde, según los objetos que constituyan el dominio (ya sea que se considere como objetos a los vértices o a las líneas que conforman la figura geométrica), se vislumbrarán diferentes estructuras que, aun teniendo el mismo sistema geométrico como base, no son isomórficas. Esto se debe a que tales estructuras poseen distinta cardinalidad: en virtud de la elección varían tanto el número de objetos como la cantidad de relaciones.

Por lo tanto, el modelo de datos, si bien es la instancia sobre la que se fundamenta toda pretensión representativa, lejos de ser aporofémico, resulta incapaz para justificar una concepción naturalista de la representación. En este sentido si se quisiera justificar la representación en términos estructuralistas mediante el modelo de datos habría primeramente que considerar que la mentada relación entre modelo y sistema no se produce de un modo inmediato sino que la estructura del sistema es, como analizaremos posteriormente, siempre deudora de consideraciones pragmáticas.

4. Modelos matemáticos

Una herramienta usual y predominante en las ciencias naturales o las llamadas “ciencias duras” son las ecuaciones matemáticas diseñadas con el fin de describir determinadas propiedades o comportamientos del mundo. Considerando la preeminencia de esta estrategia cognoscitiva se hace imperioso analizar este tipo de modelos para tratar de entender sobre la base de qué los mismos pueden constituirse como representativos.

Resulta intuitivo pensar que la representatividad que podría poseer un modelo matemático no puede ser explicada en términos de similitud, debido a que no puede considerarse que una ecuación, tal como se presenta en su forma escrita, tenga alguna semejanza con el fenómeno que pretende describir. Vale mencionar que no sería correcto interpretar “similar” como “similar forma o estructura”, ya que el criterio de la similitud se instituye como un criterio débil o laxo precisamente a fin de evitar los problemas que surgen al entender la representación bajo la rigidez de los parámetros del isomorfismo.

Aquello que parece justificar la representación obedece a la relación existente entre la estructura matemática del modelo y la estructura física del fenómeno de estudio. El problema surge cuando se recuerda que la ecuación matemática es un objeto formal y no un sistema físico determinado. En este sentido resultaría inapropiado confundir entidades matemáticas con entidades físicas, e inferir, por ejemplo, de las propiedades del círculo propiedades de la Tierra (Fahmi, 2010). Como afirma Frigg (2002, p. 13), los modelos matemáticos involucran una especie de *realización múltiple*, debido a que una misma ecuación matemática puede ser usada en diferentes contextos modelando distintos sistemas.

Ahora bien, una ecuación puede ser isomorfa a diferentes sistemas, ¿pero será modelo de todas ellas? Si es esencial a la representación el ser representación de algo en particular, el representar exigiría una relación de “uno a uno” no compatible con la realización múltiple que suponen los modelos matemáticos. La estructura supuestamente descrita por la ecuación no refiere por sí misma a nada en particular y, por lo tanto, no puede instituirse como condición suficiente de la representación. Las matemáticas, en y por sí mismas, nada nos dicen de la realidad.

Por otro lado, como analizaremos con mayor detenimiento en el siguiente apartado, en el contexto de discusión de los “falsos” modelos, los problemas propios a las idealizaciones inherentes a los modelos físicos tridimensionales tienen su paralelismo en el ámbito de las matemáticas. Las ecuaciones que pretenden describir la dinámica de algún sistema son siempre *aproximaciones*. Como sostiene Suárez (2003, p. 27): “Podría decirse que la mecánica newtoniana no describe ningún movimiento planetario actual de un modo cuantitativamente preciso”. Aun cuando los inconvenientes acarreados por las aproximaciones son menos apremiantes que los derivados de las idealizaciones, ya que una aproximación es una inexactitud y no una distorsión de lo que sucede, no por ello deja de ser intrigante la inadecuación empírica de los modelos matemáticos. Mientras que una ecuación específica cuantitativamente cierta propiedad, el objeto correspondiente del sistema siempre tendrá un valor diferente.

5. Modelos idealizados

Todos los modelos se construyen sobre la base de la abstracción de aquellas propiedades, entidades o relaciones que se consideran irrelevantes a la luz de los

elementos de interés. La simplificación, al mitigar las complejas interacciones del mundo real, facilita la manipulación, el cálculo y el análisis del objeto de estudio. Tal procedimiento es de vital importancia a la hora de considerar las potencialidades cognoscitivas de los modelos (Kennedy, 2010). En este sentido, tematizar, aunque sea brevemente, en torno al problema suscitado por las idealizaciones se vuelve crucial

Quienes fundamentan el valor epistémico de los modelos en la capacidad representativa, pueden solventar con relativo éxito el proceso de *abstracción* debido a que, en tales casos, el elemento abstraído se mantiene indeterminado (Contessa, 2006). Sin embargo, la *idealización*, entendida en términos de una deliberada distorsión al adscribir una propiedad no correspondida en el sistema, genera serios inconvenientes.

La perspectiva representacionista sustentada sobre las bases de la similitud puede darnos algún tipo de explicación de los inexactos, inadecuados o incluso “falsos” modelos que encarnan las idealizaciones, en tanto que lo único que exige es que ambos dominios sólo compartan *algunas* propiedades (Giere, 2011). En cambio, el isomorfismo es incapaz de dar cuenta en sus propios términos de las representaciones “inadecuadas” o *misrepresentations*: su formalismo, al suponer una biyección entre el modelo y el sistema, conduce a que o bien el modelo es una descripción estructuralmente adecuada del fenómeno en cuestión, o bien no es una representación en absoluto. La explicación vía isomorfismo, en contraposición a lo que sucede en la práctica científica, no puede identificar la “falsa” representación como representación. Las versiones debilitadas que, apelando a diferentes tipos de morfismos como el homomorfismo o el isomorfismo parcial, pretenden dar cuenta de tales circunstancias instituyen débiles e inútiles condiciones para la representación. Como afirma Gabriele Contessa (2006, p. 375), cualesquiera dos estructuras parciales son trivialmente isomórficas siempre que los aspectos discordantes se mantengan indeterminados en los respectivos sistemas. En este sentido, el isomorfismo parcial es insuficiente, ya que con él cualquier modelo representa cualquier sistema. Por lo tanto, ante los problemas suscitados por los estrictos criterios impuestos por el isomorfismo, modificar el “morfismo” por algún homomorfismo o isomorfismo parcial no pareciera ser una buena estrategia pues, debilitando el tipo de relación entre los dominios, el estructuralismo contrae los mismo problemas que los que abogaban por un criterio no formal como el de la similitud. En efecto, tal como se desprende de lo que afirma Contessa, así como la similitud, el isomorfismo parcial o el homomorfismo, en tanto triviales, se instituyen como condiciones tanto de la representación como de la no representación.

En el siguiente apartado analizaremos el problema generado ante la existencia de modelos exitosos pero incompatibles. El caso a presentar no será desarrollado en detalle pues este trabajo ya ha sido realizado en “Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué refiere la química cuántica?” por Olimpia Lombardi y Juan Camilo Martínez González. Sin embargo creemos que brindaremos los elementos necesarios para comprender en qué sentido la existencia de modelos incompatibles pone en cuestión cualquier postura representacionista.

6. Un problema insoslayable: modelos incompatibles

La existencia de modelos pragmáticamente exitosos que, refiriéndose al mismo sistema, son incompatibles entre sí no sólo anula la inferencia que extiende tesis realistas a partir del éxito predictivo, sino que consecuentemente cuestiona el valor epistémico de los modelos en términos de representación. Como afirma Margaret Morrison (2011) los

casos en consideración no comportan los mismos problemas epistémicos que suscitan los “falsos” modelos. Diferentes estrategias aproximativas o des-idealizantes contribuyen a acortar las distancias entre éstos y el sistema, generando versiones más realistas respecto del fenómeno descrito. Por el contrario, ante modelos incompatibles resulta muy difícil esgrimir salvoconductos que nos permitan determinar cómo es que ambos modelos nos dicen algo de la realidad en términos de representación. Tanto el isomorfismo como la similitud se manifiestan impotentes: en tanto incompatibles, los modelos no pueden ser ni isomorfos ni similares entre sí (al menos en el aspecto relevante que hace a la mentada incompatibilidad) y, consecuentemente, tampoco pueden ser ambos isomorfos o similares respecto del sistema.

Un ejemplo sumamente interesante que puede ser ilustrativo para el caso de modelos incompatibles utilizados ampliamente en la práctica científica es el que se da en el ámbito de la química cuántica, donde se utilizan modelos que incorporan elementos provenientes tanto de la física clásica como de la mecánica cuántica. Esta peculiaridad torna conflictiva la búsqueda de los referentes de la disciplina (Labarca & Lombardi, 2010; Lombardi & Martínez González, 2012).

En química cuántica se formularon dos enfoques irreductibles para dar cuenta de la naturaleza del enlace químico en una molécula. El concepto de enlace químico, que refiere al fenómeno que mantiene unidos y estabilizados los componentes de las moléculas, constituye un concepto fundamental en química estructural debido a que, al determinar la estructura de las moléculas a partir de los enlaces atómicos, organiza el conocimiento acerca de las sustancias. Fue Gilbert Lewis (1916) quien desarrolló la primera teoría del enlace químico en el marco de la regla del octeto. Esta regla señalaba la tendencia de los átomos a completar sus últimos niveles de energía con ocho electrones. Desde esta perspectiva, el enlace químico se definía en términos de los electrones compartidos por dos núcleos atómicos a fin de satisfacer, en la capa de valencia, lo que la regla prescribía (para el desarrollo histórico del concepto de enlace químico, ver Sutcliffe, 1996).

Frente a algunas dificultades de la teoría de Lewis, y con el advenimiento de la mecánica cuántica en la década de 1920, surge la química cuántica intentando explicar los resultados de la química estructural en términos de la nueva teoría (Woody, 2000). Es precisamente en el marco de la química cuántica que se inscriben las “teorías” del *Enlace de Valencia* (EV) y del *Orbital Molecular* (OM). Estos enfoques, cuya connotación *teórica* no tiene más que la norma consuetudinaria del nombrarlos como ‘teorías’, deberían ser interpretados más bien como modelos. Como afirman Olimpia Lombardi y Juan Camilo Martínez González (2012), ni EV ni OM pueden constituirse como teorías autónomas ya que ambas incorporan el mismo constructo teórico, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, proveniente de la mecánica cuántica. En tanto co-dependientes de la mecánica cuántica, no puede decirse que posean un marco teórico propio e independiente. En esta dirección, ya en 1939, Slater propuso interpretarlos al modo de modelos, como métodos de aproximación que difieren “no en sus fundamentos sino en la naturaleza precisa de los pasos analíticos utilizados” (Slater, 1939, p. 368). Por lo tanto, EV y OM, en tanto que comparten los mismos insumos teóricos, serían modelos que describen de un modo distinto la estructura interna de la molécula.

Lo particularmente relevante, y por lo cual la apelación al caso se vuelve pertinente, es que tales modelos describen de un modo diferente e incompatible la estructura molecular. En efecto, EV y OM, compartiendo el mismo formalismo matemático, se constituyen como dos métodos de búsqueda alternativos para resolver la

ecuación de Schrödinger. Esta ecuación sólo provee a la química del formalismo de la mecánica cuántica, pero sin ninguna instrucción para modelar moléculas desde esta nueva perspectiva (cf. Woody, 2000). En este sentido, los diferentes métodos de búsqueda dependieron de ciertas *decisiones* conceptuales respecto del sistema molecular, decisiones que justificaban el algoritmo particular para cada uno de los modelos. Mientras que para EV la molécula es una entidad compuesta, donde es posible continuar identificando los átomos componentes, para OM la molécula es un todo no susceptible de ser analizado a partir de componentes atómicos, ya que en esta “nueva” entidad ni los átomos pueden ser identificados, ni los electrones se ubican en torno a un núcleo particular. EV permite representar las posiciones de los electrones en las moléculas, describiendo el compuesto molecular como un conjunto de átomos donde los electrones son localizables y se encuentran orbitando átomos particulares. En este sentido, EV no se aparta radicalmente de la química estructural, sino que se considera como una herramienta que, siguiendo la manera estructural de pensar los problemas químicos, utiliza el formalismo de la mecánica cuántica (Pauling & Wilson, 1935; Park, 1999; Hendry, 2006). En cambio, OM, se aleja de la química estructural ya que presupone una especie de holismo molecular, implicando, con ello, una nueva entidad conceptual donde los electrones no están localizados en orbitales atómicos sino en orbitales moleculares deslocalizados alrededor de la molécula entera.

Si bien EV y OM presentan descripciones moleculares diferentes e incluso incompatibles, coexisten al interior de la química cuántica. En efecto, actualmente no existe una instancia inapelable de decisión entre ambos enfoques. En los orígenes de la química cuántica predominó el enfoque EV, debido a que su familiaridad con la química estructural permitía una representación visual que garantizaba un marco de aplicabilidad (Brush, 1999). Actualmente el enfoque OM tiene preeminencia en el ámbito de la química cuántica computacional (Shaik & Hiberty, 2008). No obstante, ello no significa un debilitamiento de EV, puesto que su aplicación continúa vigente en los ámbitos de la fotoquímica y de la química del estado sólido (Shaik & Hiberty, 2008).

La existencia de estos modelos incompatibles, en tanto que plantean modos de concebir la molécula diametralmente diferentes e irreductibles, pone en cuestión no sólo la posibilidad de encontrar una propiedad que legitime la representación, sino, y fundamentalmente, la concepción según la cual la riqueza epistémica de la producción científica descansa en sus capacidades representativas. En efecto, el uso fructífero y el éxito pragmático de ambos modelos, en conjunción con el hecho de que el sistema descrito por los modelos no puede tener al mismo tiempo las características por ellos descritas, obliga a preguntarnos por cómo es el sistema que, en definitiva, la química cuántica, a través de EV y OM, pretende conocer.

Quizás podría decirse que, ante tales situaciones, sería legítimo preguntarse por cuál de las dos perspectivas, de los dos modelos, representa más adecuadamente al sistema. El sentido de tal pregunta encubre la creencia, absolutamente irrefutable en tanto creencia, que uno y sólo uno puede ser el correcto (también, bajo la misma creencia, podría suponerse que los dos son incorrectos). Es claro que, al ser incompatibles entre sí, no pueden ser verdades parciales que se complementan para dar cuenta del fenómeno en términos de una explicación totalizadora que comprenda todos los escorzos. Por lo tanto, el realista se encuentra obligado a tomar la decisión de considerar, a lo sumo, uno de ellos como el modelo objetivo. En este sentido, uno sería un modelo realista, el otro, en el mejor de los casos, un modelo instrumentalista.

El problema de tal interpretación radica en que no hay motivos internos suficientes para legitimar tal decisión. En efecto, lo perturbador de la situación planteada para analizar el estatus epistémico de los modelos, es que ambos casos satisfacen los criterios necesarios que toda concepción representacionista y realista pareciera exigir para la aceptación de los modelos propuestos en ciencia: ambos son empíricamente adecuados; ambos establecen predicciones exitosas; y ambos permiten realizar inferencias sobre el sistema. Es en este sentido que las motivaciones para preferir uno de los modelos por sobre el otro no están legitimadas por los criterios de corrección estándar que la ciencia utiliza para la aceptación de una teoría, sino que emergen como consecuencia de ciertos supuestos no justificados.

7. El giro pragmático

En los apartados precedentes se ha intentado poner de manifiesto las limitaciones de los intentos de dar cuenta de la representación en términos de una propiedad compartida entre los modelos y el mundo. El derrotero a través de los diferentes tipos de modelos expuso las dificultades de toda versión que naturalice la representación e intente explicarla exclusivamente a partir de una relación diádica entre ambos dominios. La pretensión de fundamentar el vehículo de la representación en el isomorfismo o la similitud no logra abarcar todos los tipos de modelos, ni establecer las condiciones necesarias y suficientes del representar. En efecto, ambas versiones, revelando su incapacidad para establecerse como fuentes en y por sí mismas del representar, carecen de la direccionalidad que supone el ser representación de algo en particular. Por un lado, en tanto que cualesquiera dos cosas son similares en algún aspecto, bajo este criterio o bien todo representa a todo, o nada representa nada. Por otro lado, el isomorfismo, en primer lugar, supone incorrectamente que o bien el mundo ya se encuentra *per se* estructurado, o bien puede estructurárselo de un modo definido. En segundo lugar, el isomorfismo tampoco contiene una direccionalidad de modo inherente a la estructura ya que ésta, como dijimos precedentemente, puede ejemplificarse en diferentes sistemas.

Ante tales dificultades, Giere propone una concepción pragmatista respecto de los modelos científicos pensando la lógica de la representación a partir de cuatro elementos: un *agente* que usa un *modelo* para representar un sistema para algún *propósito* determinado (Giere, 2004; 2010). Desnaturalizando la fuente de la representación, el pragmatismo adopta una relación triádica al sumar al binomio mundo-modelo al agente que, constituyéndose como elemento vinculante, garantiza la direccionalidad del modelo hacia el sistema a través de su propia intencionalidad. De este modo se desvanecería la crítica respecto de la insuficiencia de la similaridad o del isomorfismo para vincular modelo y mundo ya que, precisamente, sería el científico quien, determinando los caracteres relevantes para la representación, establecería tal conexión (Giere, 2011).

Ahora bien, bajo la concepción pragmatista la potencialidad representativa del modelo radicaría, en desmedro de cualquier rasgo intrínseco de éste, en la actividad desarrollada por el agente. En este sentido, parece que la noción de representación basada en la intencionalidad es demasiado liberal como para caracterizar a la representación científica. Por un lado, un hablante competente y coherente no puede pretender adscribir potencialidad representativa a dos modelos incompatibles. Por otro lado, si bien la versión pragmatista tiene el mérito de incorporar a la discusión al sujeto de la acción del representar, a partir de ella no es muy claro qué puede decirse respecto de la representación. Si consideramos que la utilidad de la pregunta por la representación

estriba en que es una de las formas de explicar la capacidad epistémica de los modelos, el pragmatismo no puede decir demasiado respecto a que los modelos brindan conocimiento *porque* representan al sistema. El conocimiento obtenido no sería producto de que el modelo *represente* al sistema, sino de que el sujeto *utilice* al modelo con fines representativos. Reduciendo el poder representativo a la intencionalidad, el pragmatismo no nos informa respecto a los fundamentos que justifican la representación, ni cómo es que los modelos nos brindan conocimiento vía representación. Como afirma Frigg (2002, p. 19):

Cuando nos preguntamos cómo funciona la representación, lo que nos gustaría saber es qué hace exactamente el científico cuando usa *S* para representar *T*. Si decimos que intenta representar *T* por medio de *S*, meramente parafraseamos el problema y no lo respondemos, porque lo que queremos saber es qué involucra dicha intención.

Pero entonces, ¿qué involucra dicha intención? En su trabajo *Scientific Representation: Against Similarity and Isomorphism*, Suárez propone una concepción inferencial de la representación, según la cual *A* representa *B* sólo si (i) la fuerza representacional de *A* nos orienta o apunta a *B* (o sea, si *A* es capaz de guiar a un usuario competente e informado para poner en consideración al sistema *B*), y (ii) *A* permite hacer inferencias científicas sobre *B*. La propuesta de Suárez es una concepción deflacionaria, diseñada en vistas a desentenderse de los detalles en los debates entre los partidarios del isomorfismo y la similitud. Con ello se intenta evitar la identificación de alguna propiedad en particular que caracterice la representación. Para tal fin, meramente revaloriza la capacidad de establecer inferencias desde el modelo al sistema.

En concordancia con Suárez, podríamos afirmar que la potencialidad epistémica de los modelos reside en su capacidad de establecer inferencias respecto del sistema. Ahora bien, sobre la base de las dificultades expuestas en las secciones anteriores, queda de manifiesto que la propiedad inferencial de los modelos no puede ser entendida como una propiedad intrínseca y natural de los mismos, sino que depende de ciertos criterios pragmáticos de selección de variables y de supuestos que condicionan y legitiman el proceso de modelado. Por ejemplo, cuando analizamos el caso de EV y OM descubrimos que cada uno de estos métodos contiene un algoritmo particular para generar funciones de onda, y la justificación para elegir ese algoritmo descansa en supuestos conceptuales y cualitativos acerca de la forma que debería tener la función de onda molecular. Cuando Walter Heitler y Fritz London (1927) formularon el enfoque EV al intentar resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, partieron de una función de onda electrónica construida para representar la molécula de hidrógeno H_2 . Pero para encontrar dicha función de onda tuvieron que suponer al sistema como compuesto de dos núcleos y dos electrones completamente separados, y sólo sobre esta base pudieron construir la función de onda correspondiente. A su vez, también el éxito del enfoque OM descansa sobre dos supuestos fundamentales. El primer supuesto, llamado campo autoconsistente (SCF por sus siglas en inglés), considera que, para un electrón cualquiera, su distribución de carga media es exactamente igual a la que se obtiene cuando se resuelve la ecuación de Schrödinger con un campo potencial debido a las cargas del núcleo y al promedio de las cargas de los otros electrones. El segundo supuesto afirma que cuando un electrón está cerca de un núcleo particular en un sistema molecular, todas las fuerzas que actúan sobre él son debidas a ese núcleo y a los electrones cercanos al

mismo. Como fue señalado, a pesar de la profunda diferencia en las imágenes que los dos modelos brindan de la molécula, ambos se utilizan de un modo exitoso en la práctica de la química cuántica.

La peculiaridad del caso analizado de modelos incompatibles pone de manifiesto que, si bien la capacidad inferencial puede constituirse como requisito necesario para la potencialidad representativa, no constituye una condición suficiente para ella. En efecto, en tanto que ambos modelos adscriben propiedades incompatibles al mismo sistema, resulta difícil atribuir capacidad representativa a los modelos a partir de su éxito pragmático: puesto que ambos modelos son incompatibles entre sí, aun estableciendo las inferencias exitosas, no podemos decir cómo es el sistema. Por lo tanto, parece más acertado adoptar una posición más prudente que la de Suárez, afirmando que en algunos contextos la capacidad inferencial juega un papel representativo y en otros casos cumple un papel eminentemente instrumental. En este sentido la química cuántica nos brinda la posibilidad de pensar de un modo distinto la forma en que la ciencia produce conocimiento. En efecto, en tal disciplina el conocimiento se genera a partir de la capacidad de cálculo y predicción de los modelos; cálculos y predicciones no siempre susceptibles de ser comprendidos desde marcos epistemológicos representacionistas.

8. Conclusiones

En el presente trabajo se intentó pensar de qué modo ciertas versiones tradicionales de la representación, como lo son la postura estructuralista pensada desde un isomorfismo o isomorfismo parcial y la similitud, podrían explicar el proceso representativo considerando la multiplicidad de los modelos existentes en la práctica científica. Como se pretendió poner de manifiesto, desde una perspectiva naturalista del representar, se presentan serias dificultades filosóficas cuando intentamos justificar su pertinencia pensándola a partir de aquellos modelos en donde apretantemente se aplicarían. Asimismo ninguna de ellas puede afrontar exitosamente todas las circunstancias específicas que plantean las particularidades de cada tipo de modelo. A su vez, el giro pragmatista, si bien constituye un avance en la medida en que desnaturaliza la relación de representación al considerar el papel que cumple el agente, se enfrenta a serios problemas ya sea, en primer lugar, por deflacionar el concepto de representación limitándolo a la capacidad inferencial del modelo, o, en segundo lugar, cuando se trata de explicar la representatividad de modelos exitosos pero incompatibles. En relación a estas consideraciones hemos evaluado la posibilidad de reducir el alcance de la propuesta de Suárez afirmando que la capacidad inferencial no puede constituirse en una condición suficiente del representar ya que en algunas situaciones la capacidad inferencial de algunos modelos cumple solamente funciones instrumentales.

Como conclusión parcial podría afirmarse que prescindir del agente intentando estipular un criterio plenamente naturalista de la representación a partir exclusivamente de las propiedades del modelo parece tan imprudente como pretender captar un único criterio para la representación ante semejante diversidad de tipos de modelos. Es necesario estudiar cada modelo en particular para determinar en cada caso su potencialidad representativa y en virtud a qué propiedad tal representación se instituye. Los criterios generales acerca de la representatividad de los modelos siempre encontrarán limitaciones a la luz de las múltiples y disímiles maneras en que los modelos son utilizados de manera fecunda en ciencias.

9. Agradecimientos

Agradecemos al Grupo de Filosofía de las Ciencias dirigido por Olimpia Lombardi en la Universidad de Buenos Aires al cual pertenecemos, por su constante respaldo. Este trabajo ha sido posible gracias al apoyo económico del subsidio N.º 57919 otorgado por la John Templeton Foundation.

10. Referencias

- Brush, S. (1999). Dynamics of theory change in chemistry: Part 2. Benzene and molecular orbitals, 1945-1980. *Studies in History and Philosophy of Science*, 30 (2), 263-302.
- Contessa, G. (2006). Scientific models, partial structures and the new received view of theories. *Studies in History and Philosophy of Science*, 37 (2), 370-77.
- Fahmi, M. (2007). Mathematical models in science: a debate about ontology. *Conference Models and Simulations 2*, Tilburg 11.10.2007 - 13.10.2007. Recuperado de <http://philsci-archive.pitt.edu/3904/>.
- Frigg, R. (2002). Models and representation: why structures are not enough. En P. Dietsch (Ed.), *Measurement in Physics and Economics. Discussion Papers*. London, UK: The London School of Economics and Political Science.
- Frigg, R. (2006). Scientific representation and the semantic view of theories. *Theoria*, 21 (1), 49-65.
- Frigg, R. & Hartmann, S. (2006). Models in science. En E. N. Zalta (Ed.), *Stanford Encyclopedia of Philosophy*. Stanford, USA: Stanford University. Recuperado de <http://plato.stanford.edu/entries/models-science/>.
- Giere, R. (2004). How models are used to represent physical reality. *Philosophy of Science*, 71 (5), 742-52.
- Giere, R. (2010). An agent-based conception of models and scientific representation. *Synthese*, 172 (2), 269-81.
- Giere, R. (2011). Representing with physical models. En P. Humphreys y C. Imbert (Eds.), *Models, Simulations and Representations*. New York, USA: Routledge.
- Harris, T. (2003). Data Models and the Acquisition and Manipulation of Data, *Philosophy of Science*, 70 (5), 1508-17
- Heitler, W. & London, F. (1927). Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, 44, 455-72.
- Hendry, R. F. (2006). Two conceptions of the chemical bond. *Philosophy of Science*, 75 (5), 909-20.
- Kennedy, A. G. (2010). Models and Scientific Explanation. *Philosophy of Science Association. 22nd Biennial Meeting, Montreal*. Recuperado de <http://philsci-archive.pitt.edu/id/eprint/8374>.
- Knuuttila, T. (2005). Models, representation and mediation. *Philosophy of Science*, 72 (5), 1260-71.

- Knuuttila, T. (2009). Representation, idealization, and fiction in economics. From the assumptions issue to the epistemology of modeling. En M. Suárez (Ed.), *Fictions in Science: Philosophical Essays on Modeling and Idealization*. London, UK: Routledge.
- Labarca, M. & Lombardi, O. (2010). Acerca del status ontológico de las entidades químicas: el caso de los orbitales atómicos. *Principia*, 14 (3), 309-33.
- Lewis, G. N. (1916). The atom and the molecule. *Journal of the American Chemical Society*, 38 (4), 762-85.
- Lombardi, O. & Martínez González, J. C. (2012). Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué refiere la química cuántica?. *Scientiae Studia*, 10 (4), 649-70.
- Morrison, M. (2011). One phenomenon, many models: Inconsistency and complementarity. *Studies in History and Philosophy of Science*, 42 (2), 342-51.
- Park, B. S. (1999). Chemical translators: Pauling, Wheland and their strategies for teaching the theory of resonance. *The British Journal for the History of Science*, 32 (1), 21-46.
- Pauling, L. & Wilson, E. B. (1935). *Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry*. New York, USA: McGraw-Hill.
- Shaik, S. & Hiberty, P. (2008). *A Chemist's Guide to Valence Bond Theory*. New York, USA: Wiley.
- Slater, J. C. (1939). *Introduction to Chemical Physics*. London, UK: McGraw-Hill.
- Suárez, M. (2003). Scientific representation: Against similarity and isomorphism. *International Studies in the Philosophy of Science*, 17 (3), 225-244.
- Suppes, P. (1962). Models of data. En E. Nagel, P. Suppes y A. Tarsky (Eds.), *Logic, Methodology and Philosophy of Science: Proceeding of the 1960 International Congress*. Stanford, USA: Stanford University Press.
- Sutcliffe, B. T. (1996). The development of the idea of a chemical bond. *International Journal of Quantum Chemistry*, 58 (6), 645-55.
- Woody, A. I. (2000). Putting quantum mechanics to work in chemistry: the power of diagrammatic representation. *Philosophy of Science*, 67 (3), S612-27.