# Metodología de la Investigación Científica para las Ciencias Técnicas

2da. Parte: Organización y Ejecución de la Investigación

## Roberto A. González Castellanos Mario YII Lavín Lilian D. Curiel Lorenzo

Universidad de Matanzas Diciembre de 2003

## **PRÓLOGO**

En la actualidad están disponibles en las Universidades cubanas varios textos de Metodología para la Investigación Científica, pero casi todos están dedicados a las Ciencias Sociales o a las Ciencias Médicas y Biológicas y no abundan los textos que tengan en cuenta las particularidades de las Ciencias Técnicas. Además muchos de los Textos existentes o bien abordan con demasiada extensión los fundamentos teóricos de la Investigación Científica o enfatizan solamente en algunos de los aspectos prácticos de la misma, especialmente en lo relacionado con el procesamiento estadístico de los datos.

Para tratar de llenar ese vacío, se ha confeccionado un texto especialmente dirigido a las Ciencias Técnicas, en el que se trata de lograr un balance entre los fundamentos teóricos imprescindibles y las aplicaciones prácticas y se incorpora el uso intensivo de las nuevas técnicas de la información y las comunicaciones, en todas las etapas del proceso de investigación. Ese texto se elaboró a partir de los materiales utilizados por los autores para las conferencias de la asignatura Metodología de la Investigación Científica, impartida en varias de las Maestrías que en las distintas especialidades de Ciencias Técnicas se desarrollan en la Universidad de Matanzas, y se han tenido en cuenta también experiencias de otras Universidades cubanas.

En la esta Monografía se presenta la segunda parte de ese texto, la relacionada con la organización y ejecución de la Investigación..El material presentado todavía requiere de una mayor elaboración, por lo cual solicitamos a todos los lectores sus criterios sobre cada una de las partes que conforman esta Monografía, para poder trabajar en su perfeccionamiento, lo que se les agradece de antemano.

#### Los autores.

Tabla de Contenido	
TEMA 4. SELECCIÓN DE LOS MÉTODOS DE INVESTIGACIÓN Y	
ORGANIZACIÓN DE LA INVESTIGACIÓNIntroducción	
4.1. Tipos de Investigación	
4.1.1 Investigación histórica.	
4.1.2 Investigación descriptiva.	
4.1.3 Investigación experimental	6
4.2. Diseño de la Investigación	
4.2.1 Diseños no experimentales de investigación.	
4.2.2 Diseño experimental	<i>1</i>
4.3. Errores en la Medición Experimental	
4.3.1 Tipos de errores	
4.4. Las técnicas instrumentales	
4.5. Recolección de datos.	
4.5.1. Los datos	
4.5.2. Formas de registro de los datos.	
4.5.3 Población y muestra	
4.6 Utilización de técnicas para optimizar el trabajo experimental	
4.7 Conceptos básicos del Diseño Estadístico de Experimentos	
4.7.1 Introducción al Diseño de Experimentos en las Ciencias Técnicas	
4.8. Planificación de las Actividades	
TEMA 5. EJECUCIÓN DE LA INVESTIGACIÓN	31
5.1 Problemas que surgen relacionados con el cambio de escala	
5.2 Modelos y prototipos	
5.3. Etapas a considerar en los trabajos de Investigación y Desarrollo.	
5.4 Definición ampliada del término "escalado"	
5.5 Alcance de las etapas de I+D.	
5.5.1 Criterios a considerar para los límites entre escalas (5)	
5.5.2 Escala de laboratorio.	
5.5 3 Escala de banco	44
5.5.4. Escala piloto	45
5.5.5 Escala semi-industrial	46
5.5.6 Escala industrial	
5.7 Utilización de la Modelación Matemática y el Diseño de Experimentos e	n el
Proceso de Escalado (5).	48
5.8 Aplicación durante la Ejecución de la Investigación de la Ingeniería de	
Procesos asistida por Computadoras (CAPE) (6).	
Uso de los software disponibles	
Uso de los Simuladores de Procesos	
Dinámica de los Fluidos Computacional (CFD)	56

## TEMA 4. SELECCIÓN DE LOS MÉTODOS DE INVESTIGACIÓN Y ORGANIZACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN.

#### **OBJETIVOS.**

- Explicar los diferentes tipos de investigación
- Explicar las técnicas instrumentales, experimentales y de recolección de datos y algunos elementos sobre la teoría de errores.
- Introducir las técnicas de Diseño Estadístico de Experimentos y ejemplificar con el uso del software Design Expert.
- Explicar la forma planificar las actividades de la investigación e introducir el uso del software Microsoft Project dentro del proceso de organización de la investigación.

\* \* \*

#### Introducción.

Toda investigación se realiza para satisfacer una necesidad, o sea para solucionar un problema. Después de ser aprobada la propuesta comienza la etapa de ejecución de la investigación que comprende la recolección de la información, el procesamiento de los datos, la presentación e interpretación de los resultados y la elaboración de las conclusiones.

Para toda investigación es de importancia planificar las acciones o tareas que se deben realizar con el fin de producir los resultados y por lo tanto contribuir al logro de los objetivos propuestos, no se debe incluir actividades que no conduzcan a producir los resultados específicamente buscados. Para su planificación se debe responder a la pregunta:

#### ¿Cómo se va a realizar la investigación?

Para su respuesta deberá tomarse en cuenta:

- •Tipo de estudio.
- Diseño de la investigación
- La determinación de la población y la muestra.

- Recolección de datos.
- •El procesamiento de los datos.

#### 4.1. Tipos de Investigación

Cuando se va a resolver un problema en forma científica es muy conveniente tener conocimientos detallado de los posibles tipos de investigación que se pueden seguir. Conviene anotar que los tipos de investigación difícilmente se presentan puros, generalmente se combinan entre sí y obedecen sistemáticamente a la aplicación de la investigación. No obstante, tradicionalmente se presentan tres tipos de investigaciones, para abarcar la amplia gama de investigaciones existentes (11):

- Histórica. Describe lo que era
- Descriptiva. Interpreta lo que es
- Experimental. Describe lo que será.

#### 4.1.1 Investigación histórica.

La investigación histórica trata de la experiencia pasada, se aplica no sólo a la Historia sino también a cualquier disciplina. En la actualidad, la investigación histórica se presenta como una búsqueda crítica de la verdad que sustenta los acontecimientos del pasado. Los datos generalmente son obtenidos de documentos primarios y secundarios. Por ejemplo: *Investigación sobre el desarrollo científico técnico de Matanzas en el siglo XIX*.

#### 4.1.2 Investigación descriptiva.

La investigación descriptiva comprende el registro, análisis e interpretación de la naturaleza actual, o sea trabaja sobre realidades de hecho presentes. Los datos son generalmente obtenidos por encuestas, entrevistas y observación de los fenómenos. Por ejemplo: Diagnóstico sobre la producción de tanques de gas licuado de la Empresa Conformadora de Metales de Matanzas..

#### 4.1.3 Investigación experimental.

La experimentación ha dado muy buenos resultados en las Ciencias Naturales y Técnicas, pero no ha sido así en las Ciencias Sociales donde experimentar presenta grandes dificultades, sobre todo en el vivir diario. Cuando se intenta experimentar en el hombre, éste se altera. Se influye sobre él y los resultados que se obtienen ya no corresponden a los hechos, porque el hombre cambia en la medida que se quiere experimentar con él. Los hechos estudiados y provocados por el investigador en forma planeada y controlada, permiten llevar a cabo la experimentación. Y como se ha señalado, en Ciencias Sociales no es conveniente que el investigador manipule los hechos o fenómenos.

Sin embargo, en el campo de las Ciencias Técnicas y Naturales los experimentos juegan un papel fundamental y por ello dentro del **Diseño de la Investigación**, jugará un papel importante el Diseño de los Experimentos a realizar.

#### 4.2. Diseño de la Investigación.

Una vez que se ha definido el tipo de estudio a realizar y establecidos los objetivos e hipótesis de la investigación, el investigador debe concebir la manera practica como ejecutar la investigación. Esto implica seleccionar un <u>Diseño de Investigación</u>. El término **Diseño de Investigación** se refiere al plan estratégico concebido para responder a las preguntas de investigación.

En la literatura sobre investigación se pueden encontrar diferentes clasificaciones de los tipos de Diseños existentes. Las clasificaciones van desde investigación experimental pura hasta investigación no experimental. Cabe aclarar que en términos generales los autores no consideran que un tipo de investigación sea mejor que el otro, en muchos casos en una misma investigación se aplican de ambos tipos.

#### 4.2.1 Diseños no experimentales de investigación.

La investigación no experimental es la que se realiza sin manipular deliberadamente las variables. Lo que se hace en la investigación no experimental es observar fenómenos tal y como se dan en su contexto natural, para después analizarlos.

En un estudio no experimental no se construye ninguna situación, sino que se observan situaciones ya existentes, no provocadas intencionalmente por el investigador. En la investigación no experimental las variables independientes ya han ocurrido o están ocurriendo y no pueden ser manipuladas, el investigador no tiene control directo sobre dichas variables, no puede influir sobre sus efectos.

#### Por ejemplo:

Un investigador desea analizar las insuficiencias que presentan los trabajos de curso de Proyectos de Ingeniería I, II, III y IV de la carrera de Ingeniería Mecánica. Si decidiera seguir un enfoque experimental, asignaría a uno o a varios grupos experimentales, o sea manipularía uno o varios grupos. Por el contrario, si desea seguir un enfoque no experimental, el investigador debe analizar naturalmente el desarrollo de los trabajos de curso. En ese caso no hay manipulación de los grupos, los datos se obtienen del proceso natural de enseñanza.

Sin embargo aquí es importante señalar que también existen los denominados **experimentos pasivos**, en los cuales no se manipula el proceso a investigar, pero se seleccionan diferentes parámetros de ese proceso, en la forma en que ocurren naturalmente, para buscar relaciones entre los mismos e investigar el efecto que producen determinadas variables y en esos casos se utiliza también el **Diseño de Experimentos**.

#### 4.2.2 Diseño experimental.

Los investigadores realizan experimentos virtualmente en todos los campos del

saber, por lo general para describir algo acerca de un proceso o un sistema. Literalmente, <u>un **experimento** es una prueba o ensayo</u>.

Un <u>experimento diseñado</u> es una prueba o serie de pruebas en las cuales se inducen cambios deliberados en una o más de las variables de entrada de un proceso o sistema, de manera que sea posible observar e identificar las causas en la respuesta de salida. Se manipulan deliberadamente una o más <u>variables</u> independientes (supuestas causas) para analizar las consecuencias de esa manipulación sobre una o más <u>variables dependientes</u> (supuestos efectos), dentro la situación de control de la investigación. Manipular las variables es sinónimo de hacer variar o dar distintos valores a la variable independiente.

#### Ejemplos:

- 1. En las actividades docentes se realizan investigaciones con varios grupos de estudiantes para determinar una nueva experiencia pedagógica. En este caso al grupo que se expone a la presencia de la variable independiente se le conoce como grupo experimental y al grupo en el cual está ausente dicha variable se le denomina grupo de control, aunque ambos grupos participan en el experimento.
- 2. Para la determinación de la relación que hay entre la dureza del acero y el contenido de manganeso se hace un experimento. La dureza es la variable dependiente y el contenido de acero es la variable independiente.

#### 4.3. Errores en la Medición Experimental

En el proceso investigativo, sobre todo en las Ciencias Técnicas, los experimentos van dirigidos a determinar el valor de una magnitud. En este procedimiento resulta de tanta importancia el cálculo del valor de interés, como la determinación del error con el cual se determina ese valor. Este error indica la **exactitud** y la **precisión** del valor calculado, así como la determinación de las **cifras significativas**. De esta manera es de interés precisar los elementos que intervienen en la medición directa o indirecta de una magnitud, así como en la

determinación de su error.

En las mediciones existen muchas fuentes de errores que deben ser analizadas; estos errores pueden ser en general disminuidos si se conocen sus fuentes, pero nunca pueden ser totalmente anulados, e incluso muchos de ellos no pueden disminuir por debajo de cierto valor debido a las imprecisiones propias de la técnica y del montaje experimental.

El análisis de errores es un paso imprescindible al diseñar un experimento, esto evitará la búsqueda de instrumentos que no son necesarios y que pudieran resultar poco disponibles y caros, a la vez que permite evaluar la precisión y exactitud dentro de la cual hay que evaluar los resultados.

El **error** es la <u>diferencia entre el resultado equivocado de una acción y el resultado correcto</u>. Cuando se realiza una evaluación o medición experimental se cometen múltiples errores, siendo éstos la causa de las diferencias entre el valor de la propiedad que se quiere evaluar y el medido.

#### 4.3.1 Tipos de errores

La teoría de errores de los equipos y mediciones, es una de las partes más estudiadas de la teoría de la técnica de medición. Producto de que la ocurrencia de los errores de los equipos y de las mediciones se presenta de formas diferentes, es por ello que los errores se clasifican en diferentes tipos, de los cuales se verán los fundamentales.

❖ Errores aleatorios. Los errores aleatorios o accidentales son el resultado de causas muy diferentes: variación de la temperatura, movimiento del aire, limitada apreciación de los aparatos de medición, etc. Todas estas causas conducen de hecho a que las mediciones repetidas de la misma magnitud den distintos resultados.

- Los errores accidentales no pueden eliminarse, y es inevitable su aparición en el proceso de medición, pero sin embargo, es posible hacer un estimado de los mismos. Estos errores obedecen a las leyes de la probabilidad. El error aleatorio que afecta a la medición se disminuye según aumente el número de veces que se realice la medición.
- ❖ Errores sistemáticos. Los errores sistemáticos surgen sistemáticamente durante las mediciones repetidas, se deben a una causa permanente, por ejemplo a la imperfección de la formula aplicada, a los equipos de medición, etc. Estos errores siempre son de la misma índole.

Los errores sistemáticos son aquellos cuyo origen se puede conocer. Tiene la característica de que el valor no fluctúa, es siempre el mismo para cada lectura, siempre por exceso o siempre por defecto, por lo que la enmienda a realizar en la medición es completamente evaluable.

Ejemplo de este tipo de error es el caso de una cinta metálica milimetrada, preparada para trabajar a  $20^{\circ}$  C pero que en determinado experimento se usó a  $35^{\circ}$  C; en este caso se puede buscar el coeficiente de dilatación del metal de la cinta y calcular que longitud  $\Delta L$  se ha dilatado cada milímetro debido al exceso de temperatura, conocida esa dilatación se puede hacer la corrección de cada lectura.

La localización y eliminación de los errores sistemáticos, frecuentemente resulta difíciles y exige del análisis minucioso del método de medición y la verificación de todos los equipos.

Error absoluto y relativo. Existen muchas y muy diversas causas que originan imprecisiones y errores al efectuar cualquier medición. Todos los diversos errores que se analizan en el presente trabajo se resumen bajo un denominador común: el error absoluto. El error absoluto es la diferencia entre el valor exacto A y su valor aproximado B, o sea:

$$e_a = |A - B|$$
.

En la práctica no se conoce el valor de A sino el valor medido B al cual se le asigna un error absoluto máximo  $e_a$  de acuerdo con las características del instrumento utilizado para efectuar la medición, y es común utilizar la expresión  $M=B\pm e_a$ .

En la teoría de errores en las mediciones resulta más significativo el concepto de error relativo, este se define como el cociente del error absoluto por el valor exacto de la magnitud de la medida, o sea  $e_r = (A-B)/A$ .

El error relativo caracteriza la calidad de una medición puesto que el error relativo mide la precisión de una medición Es más precisa una medida cuyo error relativo es de 0,1 % que otra con un error de 10 %, aún cuando esta última puede ser más exacta que la primera. El error relativo es adimensional lo que permite comparar el grado de mediciones diferentes.

Otros conceptos importante son los de **exactitud y precisión**:

- La exactitud en el análisis es la aproximación del resultado obtenido al valor verdadero. Mientras menor sea el error absoluto mayor será la exactitud.
- La precisión del resultado es la reproducibilidad que se caracteriza por la dispersión de varias mediciones individuales efectuadas por el mismo método.
  Mientras menor sea la dispersión de los datos mayor será la precisión.

Por lo tanto el error relativo da una medida de la precisión de la medición y el error absoluto de su exactitud.

#### 4.4. Las técnicas instrumentales

Desde las etapas de selección y profundización del tema de elección del

problema, se requiere el uso frecuente de las técnicas e instrumentos de recolección de datos, para tomar decisiones acerca de si es conveniente la ejecución de una investigación determinada.

Se debe aclarar que, en este caso se denomina:

- **Técnica** al medio a través del cual se establece la relación entre el investigador y el consultado para la recolección de datos, por ejemplo las entrevistas, la observación y el cuestionario.
- **Instrumento** es <u>el mecanismo que utiliza el investigador para recolectar y</u> registrar la información, por ejemplo <u>los formularios</u>, <u>las listas</u>, etc.

Las técnicas instrumentales son variadas, por lo que en este trabajo se presentarán solamente las que son más relevantes por su uso en el campo de las Ciencias Técnicas:

Observación. Se afirma que la ciencia comienza con la observación y finalmente tiene que volver a ella para encontrar su validación final, de aquí la importancia que tiene la observación en la actividad científica. La observación es el registro visual de lo que ocurre en una situación real, clasificando y consignado los acontecimientos pertinentes de acuerdo con algún esquema previsto y según el problema que se estudia.

La realización de observaciones requiere de una preparación previa que garantice su eficacia y para ello se debe elaborar un plan en el cual se precisen los aspectos esenciales motivos de estudio, como son:

- Objeto de la observación
- Objetivo de la observación
- Tiempo total y frecuencia de las observaciones
- Cantidad de observaciones
- Tipo o tipos de observación que se utilizarán

 Definición o aspectos que han de observarse y los indicadores cualitativos para la valoración de los distintos aspectos.

La ventaja fundamental de la observación radica que el fenómeno se investiga directamente y se puede apreciar el proceso de su desarrollo.

➤ La entrevista. La entrevista es la técnica de comunicación interpersonal establecida entre el investigador y el sujeto de estudio a fin de obtener respuestas verbales a las interrogantes planteadas sobre el problema propuesto. Son encuestas con estructura más libre, contempla los asuntos que el entrevistador debe averiguar con sus instrucciones. Esta técnica es útil en distintos momentos de la investigación, fundamentalmente al inicio, cuando el investigador realiza entrevistas para efectuar una exploración preliminar del fenómeno estudiado.

La realización de la entrevista supone la elaboración de un plan determinado en el que se incluyen los aspectos que habrán de tratarse, así como una guía de preguntas ajustadas al plan.

Encuesta. La encuesta es la técnica que utiliza como instrumento un cuestionario impreso, destinado a obtener respuestas sobre el problema en estudio y que el investigador o consultado llena por sí mismo. Es un instrumento consistente en una serie de preguntas a las que contesta el mismo encuestado, por l o que este documento escrito es realizado sin la intervención del investigador.

El cuestionario puede aplicarse a grupos o individuos, pudiendo estar o no presente el investigador o el responsable de recoger la información, ya que ésta puede enviarse por correo a los destinatarios seleccionados en la muestra (2).

#### Ventajas de la entrevista:

- Permite el contacto con personas que no saben leer ni escribir.
- Facilita la labor de persuasión
- Precisa y aclara preguntas
- Verifica las respuestas y capta el ambiente natural
- Se observan actitudes y opiniones.

#### Ventajas de la encuesta:

- Alcanza un mayor número de consultados
- Permite guardar el anonimato
- Elimina la presencia del entrevistador
- Deja en absoluta libertad de expresión permitiendo al informante consultar datos si lo requiere el instrumento
- Puede ser contestado al mismo tiempo por todos los interrogantes.
- Codificación. Es el procedimiento técnico mediante el cual los datos son categorizados. A través de la codificación, los datos sin elaborar son transformados en símbolos, ordinariamente numéricos, que pueden ser tabulados y contados. Sin embargo, la transformación no es automática; supone un juicio por parte del codificador.

#### 4.5. Recolección de datos.

El adecuado diseño de las técnicas instrumentales y experimentales nos garantiza una buena recolección de datos.

#### 4.5.1. Los datos.

¿ Qué es un dato? Es el elemento de información recogido durante la investigación para llegar al conocimiento exacto de lo que se busca. La recolección de los datos está entre las tareas más difíciles e importantes de cualquier investigación.

Los datos pueden obtenerse de dos fuentes:

- ➤ <u>Los datos primarios</u> o información primaria, que son los datos obtenidos mediante técnicas instrumentales y experimentales.
  - ✓ Las <u>técnicas instrumentales</u> son muy utilizadas en investigaciones de carácter social, las más utilizadas son las entrevistas y los cuestionarios.
  - ✓ Las <u>técnicas experimentales</u> son más aplicadas en las Ciencias Técnicas y éstas consisten en las determinaciones de una o más variables medidas directamente con instrumentos de medición.
- Los datos secundarios o información secundaria, son aquellos obtenidos mediante aquella información que se integran con toda la información escrita del tema, o sea la obtenida de los trabajos relacionados directamente con la temática que han sido resueltos anteriormente, y que se obtienen por lo tanto mediante documentos primarios y secundarios.

Los <u>datos primarios y secundarios</u> están encadenados indisolublemente: todo dato secundario ha sido primario en sus orígenes y todo dato primario, a partir del momento en que el investigador concluye su trabajo se convierte en dato secundario para los demás.

#### 4.5.2. Formas de registro de los datos.

Los datos se pueden recolectar de diferentes formas:

- Manual. Es la forma más primitiva, pero su aplicación es recomendable cuando el volumen de datos a recoger es pobre.
  - ✓ Óptico. Los instrumentos nos indican el valor de medición en forma óptica y el registro en el documento se realiza de forma manual.
  - ✓ <u>Digital.</u> Los instrumentos nos indican el valor de medición en forma digital y el registro en el documento se realiza manual.
  - ✓ <u>Analógico</u>. Los instrumentos nos indican el valor de medición en forma analógica y el registro en el documento se realiza manual.
- Registradores mecánicos. Los valores de medición son registrados en un papel

y después son procesados.

• Registradores que utilizan microprocesadores. El registro se puede guardar en archivos y después ser procesados por las técnicas estadísticas.

#### 4.5.3 Población y muestra.

El primer paso en la ejecución de la investigación es <u>la selección del objeto de estudio</u>, o sea establecer la **población** y la **muestra**. Por **población** o universo se entiende <u>la totalidad del fenómeno a estudiar</u>. Los componentes (unidades) de población poseen una característica común, la cual se estudia y da origen a los datos de la investigación. Por ejemplo, si se analizan todos los tornillos fabricados en determinada empresa.

La muestra es <u>cualquier subconjunto de una población que se realiza para</u> <u>estudiar las características en la totalidad de la población, partiendo de la observación de una fracción de la población</u>. Por ejemplo, si analiza las características del 10 % de los tornillos fabricados (El 10% es la muestra y el 100 % la población).

### Tipos de muestras

Las muestras se clasifican de acuerdo a la forma en que se realiza el proceso de obtención de la muestra (muestreo), Los muestreos pueden ser probabilísticos o no probabilísticos y en cada uno de esos tipos se consideran variantes (4). En general, la clasificación más común es la siguiente:

#### Muestreo probabilístico

- Muestreo aleatorio simple o al azar. El procedimiento más común para obtener una muestra representativa es la selección al azar y esto es lo que constituye el muestreo aleatorio simple.
  - Para que esto se cumpla, cada uno de los individuos de una población tiene que tener la misma posibilidad de ser elegido. Si eso no se cumple, se dice que la muestra es <u>viciada</u>.

 Para tener la seguridad de que la muestra al azar no es viciada debe emplearse para su constitución una tabla de números aleatorios. <u>El</u> muestreo al azar o aleatorio simple es la base fundamental del muestreo probabilístico.

Sin embargo en muchas ocasiones no resulta práctico utilizar este método y se deben aplicar otros diseños muestrales probabilísticos, como los siguientes:

Muestreo estratificado. Cuando la característica investigada presenta una gran dispersión, el muestreo estratificado aporta mejores muestras y por lo tanto mejores resultados. En este tipo de muestreo, el universo se divide en un número de subuniversos paralelamente ordenados, que se denominan estratos. Estos estratos pueden tener la misma o diferente extensión. Entonces de los estratos tomados independientemente se sacan los elementos de la muestra, usando un muestreo aleatorio. Mediante la formación de estratos debe lograrse que la varianza de la característica sea pequeña en cada estrato, para reducir así el error de los muestreos.

Se dice entonces que una muestra <u>es estratificada cuando los elementos de la muestra son proporcionales a su presencia en la población</u>. La presencia de un elemento en un estrato excluye su presencia en otro, lo que constituye un requisito fundamental de este tipo de muestreo. En la muestra estratificada <u>la representación de los elementos en los estratos es proporcional a su representación en la población.</u>

Otros muestreos probabilísticos: Se tienen además los muestreos multietápicos y de conglomerados.

#### Muestreos no probabilísticos:

- ❖ Muestreo casual. La técnica consiste en tomar elementos en forma casual, por ejemplo: uno de cada diez individuos que pasen por una calle.
- ❖ Muestro intencional. El investigador selecciona los elementos que a su juicio

- son representativos, lo cual exige del investigador un conocimiento previo de la población. Por ejemplo: los dueños de determinado automóvil.
- Muestreo por cuotas. El investigador selecciona a su juicio los elementos representativos. La muestra ha de ser proporcional a la población y en ella deberán tenerse en cuenta las diferentes categorías. Por ejemplo, una encuesta es aplicada para determinar la opinión de los estudiantes acerca del componente investigativo de la carrera de Ingeniería Industrial.

### Errores en la muestra.

Para que una muestra proporcione datos confiables, éstos deben ser representativos de la población, es decir, los errores del muestreo deben ser relativamente pequeños para que éste no pierda validez. Ninguna muestra da garantía absoluta en relación con la población de donde ha sido extraída, de ahí, la importancia de poder determinar el posible margen de error y la frecuencia de los mismos dentro del conjunto. Generalmente, se presentan dos tipos de errores: sistemáticos y de muestreo.

- Error sistemático. El error sistemático se presenta por diferentes causas ajenas a la muestra:
  - ➤ <u>Situaciones inadecuadas</u>. Se presentan cuando el investigador tiene dificultades para obtener la información y la sustituye por la que más fácilmente está a su alcance, no siempre la más confiable.
  - Insuficiencia en la recolección de datos. Hay distorsión por falta de respuestas, o respuestas inadecuadas, ya sea por ignorancia o falta de datos relativos a los elementos incluidos.
  - Errores de cobertura. Cuando no se han incluido elementos importantes y significativos para la investigación que se realiza.
- ❖ Errores de muestreo. Cualquiera que sea el procedimiento utilizado y la perfección del método, empleado, la muestra diferirá de la población. A esta diferencia entre la población o universo y la muestra, se le denomina error de

<u>muestreo</u>. El error de la muestra es la diferencia entre  $\sigma$  y **X**. Donde  $\sigma$  es el parámetro de la media para la población y *X* es la estimación de la media para la muestra (1, 4, 8).

#### 4.6 Utilización de técnicas para optimizar el trabajo experimental.

El proceso completo de Investigación y Desarrollo, desde el laboratorio hasta la industria, resulta generalmente largo y costoso, por lo cual resulta conveniente optimizar dicho proceso para llevarlo a su mínima duración y costo. Para realizar esa optimización resulta muy valioso aplicar las técnicas del <u>Diseño Estadístico de</u> Experimentos (13, 14).

El aplicar el <u>Diseño Estadístico de Experimentos</u> a escala industrial resulta difícil por las afectaciones que puede hacerle a la producción. No obstante, el <u>Diseño Estadístico de Experimentos</u> es una de las principales herramientas de que dispone el investigador para aumentar la eficacia de la investigación, y hoy en día se aplica ampliamente a escala de laboratorio, banco y piloto. No es necesario ser un estadístico o un matemático; la experiencia ha demostrado que los químicos e ingenieros pueden fácilmente aprender los principios fundamentales de este tipo de diseños (16).

Una simple observación experimental en un laboratorio, en una instalación a escala piloto o a nivel industrial puede costar cientos o miles de dólares, luego siendo el objetivo de la investigación obtener información, puede definirse la eficiencia de la investigación como la cantidad de información útil obtenida por unidad de costo. Por consiguiente, es extremadamente importante para una investigación utilizar métodos experimentales que le brinden la máxima cantidad de información con el menor costo y esfuerzo. El uso del Diseño Estadístico de Experimentos facilita un incremento apreciable en la productividad de los investigadores, así como en la confiabilidad de los resultados obtenidos, siendo estos métodos, por su naturaleza universal, adaptables a la mayoría de los campos actuales de investigación.

Con el <u>Diseño Estadístico de Experimentos</u> se pueden reducir al mínimo imprescindible las experiencias que se deben realizar a Escala de Laboratorio y planificar adecuadamente las corridas en las escalas de banco y piloto, de forma tal de obtener la mayor cantidad posible de información en el menor intervalo de tiempo. Con la <u>Modelación Matemática</u> se pueden reducir las corridas necesarias en las instalaciones de banco y piloto ya que se pueden realizar sólo las corridas necesarias para obtener la información que se requiere para poner a punto los modelos matemáticos del proceso y el resto de las investigaciones se pueden realizar mediante simulaciones en computadora, con la excepción de un mínimo de corridas experimentales que se realicen al final para corroborar los resultados de los modelos.

Aquí hay que señalar también que resulta evidente que el tipo de diseño a utilizar en cada caso, depende del objetivo del experimento y del tipo de modelo que se desea obtener. Sobre la base de estas consideraciones, se puede establecer una clasificación de las investigaciones experimentales según Box (5):

- Experimentos de tamizado: Cuando a partir de un gran número de variables hay que identificar cuáles afectan el rendimiento.
- 2. **Construcción de modelos empíricos**: Para obtener una descripción aproximada de la relación entre X e Y, en función de parámetros B.
- 3. **Construcción de modelos determinísticos**: Para determinar la verdadera relación funcional que existe entre X e Y.
- Ajuste del modelo determinístico: Para encontrar los mejores estimados de los parámetros desconocidos en el modelo propuesto.

Los experimentos de tamizado deben hacerse al comienzo de un estudio experimental, cuando hay numerosas variables que potencialmente pueden incluir en la respuesta. Es necesario discriminar entre ellas las verdaderamente importante. Esta es la esencia de este tipo de experimentos los que deben ser

bien diseñados estadísticamente para poder determinar también las interacciones entre las variables.

La construcción de *modelos empíricos* se hace necesario en aquellas situaciones en que no es factible la obtención de un *modelo determinístico*. En esas situaciones resulta útil, un modelo aproximado que representa adecuadamente el comportamiento del proceso bajo estudio en a región de interés. Los *modelos determinísticos*, por otra parte, casi siempre son no lineales y la estimación de los parámetros de los mismos puede resultar difícil.

Por lo tanto, el objetivo de las investigaciones generalmente es establecer un modelo matemático del proceso y puede haber dos casos:

- 1. El modelo se puede desarrollar teóricamente y por ello en el trabajo experimental sólo se necesita comprobar el modelo y determinar los coeficientes desconocidos del mismo.
- Con el nivel de conocimientos presentes no se puede deducir un modelo justificado en forma teórica y por ella la dependencia entre las variables tiene que determinarse experimentalmente, escogiendo previamente las variables significativas del proceso.

Generalmente no se conoce la forma del modelo a ajustar; en ese caso es recomendable comenzar con un modelo lo más simple posible. La información acerca del modelo del proceso debe ser, por supuesto, muy precisa, pero esto puede lograrse haciendo un número de corridas experimentales lo suficientemente grande. Sin embargo esta solución, por supuesto, es cara, y una forma de lograr los mismos objetivos con menos recursos es localizando los valores de las variables independientes estratégicamente para cada corrida experimental. Por tanto, si los experimentos se planifican adecuadamente, se obtiene la información deseada en una forma eficiente.

Un plan experimental bien diseñado y su posterior ejecución ayuda en la selección de un mejor modelo, dentro de un conjunto de modelos posibles y la estimación eficiente de los parámetros en el modelo seleccionado. Ambos objetivos se investigan simultáneamente y casi siempre en forma secuencial, porque el experimentador generalmente no conoce qué variables deben medirse, cuál es el rango en que las variables se deben medir ni qué series de experimentos deben hacerse hasta que el programa experimental esté al menos parcialmente ejecutado. Generalmente un plan experimental comienza con una hipótesis expresada en forma de un modelo matemático.

Para probar la hipótesis se lleva a cabo un experimento, el cual, para obtener la información, se debe diseñar adecuadamente. Los datos obtenidos del experimento tienen que analizarse para evaluar la hipótesis original. Los resultados experimentales pueden conducir a modificar la hipótesis, en cuyo caso una nueva hipótesis se formula o se confirma. En el primer caso, la nueva hipótesis debe ser probada, para lo cual debe efectuarse otro plan experimental, y así se continúa hasta obtener resultados satisfactorios. Un experimento es, por tanto, sólo una etapa que ayuda a la comprensión del proceso bajo estudio. El investigador debe analizar cuidadosamente los resultados de sus experimentos, para determinar las direcciones en que los cambios son realmente sustanciales.

Este proceso iterativo que caracteriza la investigación científica se muestra de forma esquemática en la siguiente Figura 4.1. En esa figura se muestran los dos papeles distintos que la Estadística puede desempeñar: diseño y análisis. De ellas, el más importante es el primero, el diseño: poca información útil puede sacarse de los datos obtenidos en un experimento que no se ha planificado cuidadosamente. Sin embargo, con un diseño adecuado, se puede obtener una clara visión de la situación con métodos de análisis simples.

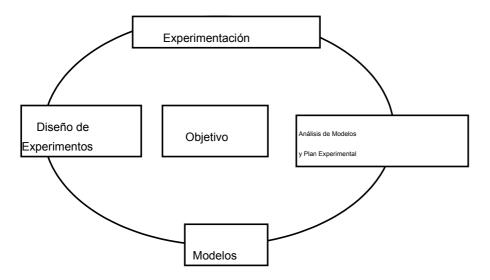


FIGURA 4.1. Proceso Iterativo de la Investigación Científica. Tomado de (7).

#### 4.7 Conceptos básicos del Diseño Estadístico de Experimentos.

El Diseño de un Experimento consiste en planificar los experimentos de la forma más racional posible, de manera que los datos obtenidos puedan ser procesados adecuadamente y que mediante un análisis objetivo conduzcan a deducciones aceptables del problema planteado, para lo cual se sobreentiende que la persona que formula el diseño conozca los objetivos de la investigación propuesta.

Antes de comenzar el trabajo experimental se debe, por lo tanto, tener la información requerida del sistema que permita contestar a las interrogantes siguientes:

- 1. ¿Cuáles son las propiedades de sistema que se van a estudiar?, o sea los llamados *rendimientos* o *variables dependientes*.
- 2. ¿Qué factores afectan a estos rendimientos?, es decir qué parámetros o variables independientes que determinarán los rendimientos y si se podrán controlar o medir adecuadamente.
- 3. ¿Qué factores se estudiarán y cuáles permanecerán constantes?
- 4. ¿Cuántas veces se deben repetir los experimentos?

- 5. ¿Qué cantidad de experiencias se deben efectuar?
- 6. ¿Cómo se deben realizar las experiencias?

Algunas de estas preguntas sólo se pueden responder por el conocimiento científico-técnico del sistema, como por ejemplo las tres primeras, mientras que las restantes requieren del conocimiento científico-técnico, del diseño estadístico de experimentos y de la lógica para su contestación.

El proceso de investigación en general, independientemente de le escala en que se halle (laboratorio, banco o piloto), se desarrolla a través de una serie de etapas bien definidas: *familiarización*, *tamizado de variables* y *optimización*.

En la *etapa de familiarización*, el investigador se familiariza con el nuevo sistema estudiar. Por ejemplo, en la etapa de laboratorio (15) esto puede ser el tratar de reproducir resultados descritos en las patentes o en experimentos de estudios anteriores, o aprender a trabajar con un equipamiento nuevo. En una planta piloto (5), esta etapa se refiere a la serie de corridas preliminares que deben realizarse para poder probar todos los componentes de la planta, incluyendo los equipos de medición y control. Además es necesario determinar el tiempo de transiente entre dos estados estacionarios del proceso, o sea el tiempo que se requiere para que se alcance el estado estacionario, después de una variación en las condiciones del proceso.

En esa etapa inicial de *familiarización* no resulta de utilidad el Diseño Estadístico de Experimentos, ya que la mayoría de las experiencias se realiza de una forma intuitiva. Sin embargo, en todo el proceso posterior, comenzando con el *Tamizado de Variables*, resulta imprescindible la utilización del Diseño Estadístico de Experimentos y por ello *no se debe comenzar ningún trabajo experimental sin hacer previamente algún tipo de diseño* pues puede ocurrir, si esto no se hace, que al final los datos obtenidos no sean capaces de permitir el análisis de los efectos buscados.

Desafortunadamente muchas veces se trata de llevar el enfoque de la etapa inicial de familiarización al resto de los trabajos y todavía persisten en muchos investigadores la costumbre de iniciar sus trabajos sobre un sistema nuevo y, por lo tanto poco conocido, mediante métodos de tanteo intuitivos con el pretexto de no poder aplicar las herramientas estadísticas hasta que no se tenga un conocimiento más amplio del sistema (13, 14).

Este proceder erróneo provoca la realización de un gran número de experiencias preliminares antes de que se logre obtener de verdad información orientadora. En realidad es *precisamente* al comenzar el estudio de un sistema nuevo, cuando es más recomendable iniciar la investigación aplicando técnicas de *Diseño Estadístico de Experimentos*, especialmente de aquellas con las cuales se puede estudiar el efecto de algunas variables en conjunto y definir sobre una base sólida, cuáles de éstas son significativas (*Tamizado de Variables*).

En general se puede decir que hay tres principios básicos del *Diseño Experimental*:

- ❖ Reproducción : Es la repetición del experimento básico para estimar el error puro o aleatorio, que permitirá determinar si las diferencias observadas son significativas o no.
- Aleatorización: En la mayoría de las pruebas estadísticas se supone que las muestras son independientes unas de otras y que sólo están afectadas por los parámetros que se controlan. Para garantizar esto se requiere tomar las muestras al azar o aleatoriamente de la población investigada.
- ❖ Control local: Se refiere implícitamente, en primer lugar, al tipo de diseño experimental que se haya realizado y en segundo lugar a las medidas que se tomar para controlar el proceso experimental como por ejemplo:
  - 1- Utilizar material o bloqueo experimental homogéneo para la estratificación cuidadosa del material disponible.

- 2- Dirigir el experimento cuidadosamente.
- 3- Considerar las posibles variantes aleatorias
- 4- Emplear las técnicas analíticas y los equipos de control más adecuados.

Por último se debe señalar que es conveniente discernir dos grandes campos del Diseño Estadístico Experimental, por una parte las Ciencias Biológicas y Agrícolas, en las que se utilizan principalmente los diseños completamente al azar, bloques al azar y los cuadrados latinos y por otra parte las Ciencias Técnicas, Química, Física y Farmacéuticas y algunos campos de las Ciencias Biológicas como la Microbiología y la Genética Microbiana, en las cuales existe la posibilidad de controlar un número finito de variables, en cuyo caso se emplean principalmente los Diseños Factoriales.

En este Curso se verá con más detalles el Diseño Experimental aplicable a las Ciencias Técnicas, Física, Química y Farmacéutica y la Microbiología, haciendo énfasis en su aplicación práctica mediante la utilización de los paquetes de programas estadísticos especializados. Para un estudio del Diseño Experimental en el campo de la Biología y la Agronomía se deben consultar textos especializados como "La Experimentación en las Ciencias Biológicas y Agrícolas", (10).

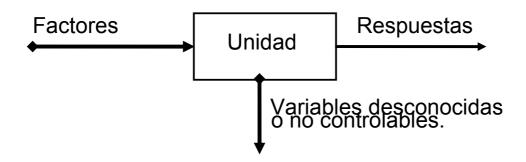
#### 4.7.1 Introducción al Diseño de Experimentos en las Ciencias Técnicas.

En este campo de trabajo es usual trabajar con pocas variables, conocidas y casi siempre controlables, por lo que se planifican los experimentos con vistas a obtener *modelos matemáticos*, *empíricos*, o *mecanicísticos*, que describan el sistema estudiado. Aquí es importante destacar que este tipo de situaciones no se observa sólo en estas ciencias, sino que se observa también en algunos campos de las Ciencias Biológicas, como por ejemplo en la *Microbiología* y en la *Genética Microbiana*.

En este punto resulta conveniente definir la palabra experimento, puesto que puede resultar ambigua, al igual que otros términos utilizados en un diseño estadístico. En este tipo de problemas, una corrida experimental (o simplemente una corrida como se nombra usualmente), es simplemente un experimento único, mientras que un grupo de corridas, dirigidas hacia la obtención de algún objetivo, se denomina Diseño Experimental o simplemente diseño.

La anatomía de una corrida se representa en la Figura 4.2 (15). El resultado de la corrida es una respuesta obtenida o observación hecha en una unidad experimental. El valor de la respuesta para cualquier corrida, dependerá de los ajustes de una o más variables experimentales o factores, los cuales están bajo el control directo del investigador.

Desafortunadamente para los experimentadores, este cuadro de una corrida experimental incluye además muchas variables no controladas y a veces incluso desconocidas, que también influyen en la respuesta y que tienden a provocar variaciones tanto sistemáticas como aleatorias que tienden a enmascarar los efectos verdaderos de los factores en la respuesta. Como ejemplo de dichas variables están el efecto sistemático de las condiciones ambientes y las diferencias en el equipamiento, material de arrancada y técnicas empleadas en los experimentos. Variaciones aleatorias se pueden producir también por errores en las pesadas, en la transferencia de materiales y en la lectura de instrumentos. Por todo esto, un buen Diseño Experimental debe considerar las posibilidades de impacto de ese tipo de variables, en la posibilidad de sacar conclusiones adecuadas de los experimentos y poder alcanzar los objetivos experimentales.



#### Figura 4.2 Representación de una Corrida experimental. Tomado de (15).

Los principales elementos en general, que se deben considerar en un Diseño Estadístico de Experimentos, se presentan en la Tabla 4.2. El primero resulta obvio, no obstante es sorprendente como en muchos casos no se llegan a resultados adecuados por defectos en el planteamiento inicial del problema. La relación de variables de respuesta también resulta de vital importancia y ya no resulta obvia. Las respuestas pueden ser *cuantitativas* (continuas), *cualitativas* (discontinuas) y *binarias*. De ellas las de más fácil manejo son las continuas y para las discontinuas una buena solución es evaluarlas en una escala numérica, por ejemplo de 5 a 10, convirtiendo así la respuesta a una variable semi-cuantitativa. En el caso de las *binarias*, puede tratarse también de llevar a formas discontinuas, pero muy frecuentemente se necesitan emplear técnicas especiales para su manejo.

Los factores o variables independientes experimentales, son controladas por el experimentador y el nivel de un factor es el valor fijado para el factor durante una corrida experimental. Al igual que las respuestas, los factores pueden ser clasificados de acuerdo con la escala de medición, como continuos o cuantitativos como el tiempo y la temperatura y cualitativos, discontinuos o categóricos como el tipo de catalizador o solvente empleado. También en este caso son más difíciles de manejar los discontinuos y la solución común es emplear dos niveles en el experimento, definiendo con (+1) o simplemente con el signo (+) la presencia o el carácter positivo del factor y con (-1) o con el signo (-), lo contrario.

#### 4.8. Planificación de las Actividades

Las **actividades** son las acciones o tareas que se deben realizar con el fin de producir los resultados y por lo tanto, contribuir al logro de los objetivos propuestos. En cada actividad deben citarse, por los menos de forma general, las técnicas, y equipos que se proponen utilizar y el lugar donde se piensa realizar. El cronograma de actividades se puede representar mediante diagramas de Gantt o de Pert. Para la confección del cronograma puede auxiliarse de programas de

computación como el Microsoft Project (12).

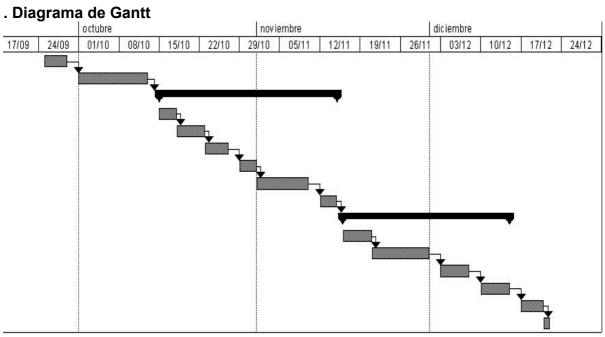
El cronograma trabajo o calendario de actividades es un instrumento que permite prever, controlar y relacionar las actividades que tiene que realizar el investigador en concordancia con el tiempo que dispone. En la tabla se muestra un ejemplo hipotético de un cronograma de trabajo.

La relación actividades – tiempo del proceso de investigación debe ser coherente y sistemática. Por lo tanto el cronograma de trabajo no debe ser tomado como una camisa de fuerza a la que usted tenga que someterse de forma inexorable, pero tampoco debe quedar sólo en el papel por cumplir un requisito, haciendo caso omiso de lo que allí se prevé.

Su confección debe responder la siguiente pregunta: ¿Cuánto tiempo va a emplear en hacer el estudio propuesto. Para la confección y presentación de estos cronogramas resulta una práctica común emplear el software Microsoft Project, por lo cual en esta asignatura se incluye una clase Práctica para familiarizar al estudiante con el uso de dicho software. A manera de ejemplo, a continuación se muestra el Calendario de Actividades o Cronograma de Trabajo de un Proyecto y su Diagrama de Gannt, obtenidos ambos con el Microsoft Project.

## Calendario de actividades de un proyecto.

	0	Nombre de tarea	Duración	Comienzo	Fin	Pr
1	=	Travel to Gießen and accomodat	4 días	mar 25/09/01	vie 28/09/01	
2		Bibliographic Research Stage	10 días	lun 01/10/01	vie 12/10/01	1
3		☐ Developing Research Stage	23 días	lun 15/10/01	mié 14/11/01	2
4	-	Processing information obtain	3 días	lun 15/10/01	mié 17/10/01	
5	==	Planning experimental runs	3 días	jue 18/10/01	lun 22/10/01	4
6	-	Processing data obtained	4 días	mar 23/10/01	vie 26/10/01	5
7	-	Selection control hardware	3 días	lun 29/10/01	mié 31/10/01	6
8	111	Develop mathematical model	7 días	jue 01/11/01	vie 09/11/01	7
9	-	Desing computer aided contr	3 días	lun 12/11/01	mié 14/11/01	8
10		☐ Implementation of Results	21 días	vie 16/11/01	vie 14/12/01	9
11	==	Installation of the control equ	3 días	vie 16/11/01	mar 20/11/01	
12	-	Installation of control process	8 días	mié 21/11/01	vie 30/11/01	11
13	-	Implementation of Process C	5 días	lun 03/12/01	vie 07/12/01	12
14		Evaluation of obtained results	5 días	lun 10/12/01	vie 14/12/01	13
15	1	Final Report	4 días	lun 17/12/01	jue 20/12/01	14
16		Travel Giessen-Havana	1 día	vie 21/12/01	vie 21/12/01	15



#### TEMA 5. EJECUCIÓN DE LA INVESTIGACIÓN.

#### **Objetivos:**

- ✓ Conocer las etapas en que se divide el proceso de Investigación y Desarrollo
- ✓ Introducir el concepto de escalado y presentar de forma adecuada sus fundamentos
- √ Introducir el concepto de ingeniería concurrente
- ✓ Introducir el concepto de Ingeniería de Procesos Asistida por Computadora
- ✓ Introducir el uso de los simuladores comerciales de procesos

#### Introducción:

En este capítulo se tratará específicamente la ejecución de las Investigaciones Tecnológicas, y en especial las de Investigación Desarrollo, aunque casi todos los conceptos resultan válidos también para la Innovación Tecnológica, ya que siempre se ha tenido en cuenta que el objetivo final de la investigación es llegar a una escala comercial de producción (3). Además se hará un énfasis especial en los problemas relacionados con el cambio de escala (escalado, scale-up), por la importancia que tienen estos problemas en este tipo de investigaciones y por las complicaciones que se presentan durante el proceso de I+D cuando no se tiene en cuenta este vital aspecto (5).

#### 5.1 Problemas que surgen relacionados con el cambio de escala.

En el escenario de la investigación y el desarrollo de nuevas tecnologías está presente siempre la problemática de cómo convertir en una estructura económica de producción los conocimientos logrados en el laboratorio, concatenándolos con otros conocimientos ya establecidos, para poder llegar de esa forma a una escala comercial de producción.

En este proceso de cambio de escala surgen problemas que en muchas ocasiones son ignorados completa o parcialmente y esa ha sido la causa de no pocos fracasos. Estos problemas pueden ser agrupados en dos tipos fundamentales: los que se relacionan exclusivamente con la necesidad de manejar

grandes volúmenes de material y aquellos en que la naturaleza misma del problema se ve afectada por el tamaño de la escala de operación.

En el primer caso se tienen los problemas relacionados con los sistemas de enfriamiento, calentamiento y tratamiento de residuales, los cuales se llevan a cabo con relativa facilidad a nivel de laboratorio y requieren generalmente de equipos costosos y complejos cuando se realizan en la escala industrial. También son de este tipo de problemas los relacionados con la necesidad de utilizar diferentes materiales al paso a una escala mayor, como ocurre al emplear reactivos químicos comerciales en lugar de los de grado analítico o la utilización de recipientes metálicos en lugar de los de vidrio, lo que puede introducir problemas de contaminación.

Los problemas del segundo tipo surgen cuando los distinto parámetros del proceso se ven afectados de manera diferente por el tamaño de la unidad. Un ejemplo sencillo puede ser el efecto que sobre la superficie específica de un recipiente tiene el cambio de escala. Una serie de recipientes de proporciones geométricamente similares, pero de diferentes volúmenes, tienen un volumen que es proporcional al cubo del diámetro del recipiente, pero la superficie de la pared es proporcional al cuadrado del diámetro del recipiente, de manera que la superficie específica, que afecta a la transferencia de calor en las camisas refrigerantes, es proporcional al inverso del diámetro del recipiente.

Los microorganismos proporcionan otro ejemplo muy espectacular de este principio, ya que una de las características de su eficiencia como sistemas reaccionantes microscópicos es su gran superficie con respecto a su volumen. Una bacteria tiene un volumen de aproximadamente 5 x 10<sup>-19</sup> m³ y una superficie de alrededor de 6 x 10<sup>-12</sup>, por lo que la superficie específica es de alrededor de 3 x 10 <sup>6</sup>, mientras que un m³ de agua se puede encerrar en un tanque con una superficie de 6 m², lo que hace una superficie específica de 6, o sea un millón de veces menor que la de las bacterias.

En los procesos químicos se tiene que durante la **Investigación Desarrollo** de un nuevo producto, uno de los problemas que requiere una atención más estrecha y que en ocasiones llega a ser problemático, es el escalado del reactor. Es aceptado prácticamente por todos que el diseño de un reactor químico a escala comercial, el cual es el corazón de una planta química, no puede llevarse a cabo con un enfoque solamente teórico, por lo cual resulta imprescindible contar con datos de las reacciones involucradas obtenidos a nivel de laboratorio, banco o planta piloto.

Aunque básicamente la velocidad de una reacción química resulta independiente del tamaño y estructura de un reactor (Tabla 5-1), la misma es influenciada por los procesos físicos, por ejemplo la transferencia de masa y calor, las cuales son controladas por el tamaño y estructura del reactor (5).

Tabla 5-1. Influencia del tamaño en un número de mecanismos claves en los procesos químicos, tomado de (5).

Mecanismo	Variables importantes	Influencia del tamaño			
Cinética Química	T, C, P	Ninguna			
Termodinámica	T, C, P	Ninguna			
Transferencia de calor	Velocidades locales, P, C	Indirecto			
Transf. de masa en unaT, C, Turbulencia Indirecto					
fase fluida					
Transferencia de masaVelocidades relativas de fases,Indirecto					
entre fases	C, T				
Convección forzada	Rapidez de flujo, Geometría	Importante			
Convección natural	P, C, T, Geometría	Determinante			

Por esa causa la reacción química se afecta por el tipo de reactor y el efecto del incremento de escala resulta normalmente impredecible de forma cuantitativa, lo que resulta más complejo aún cuando en la reacción participan diferentes

fases, a causa de que los fenómenos no son todos afectados en la misma forma por las dimensiones de una planta (Tabla 5-2).

Tabla 5.2. Efecto de las dimensiones geométricas en lo fenómenos principales que ocurren en un reactor con fases múltiples (5).

DIMENSIONES GEOMÉTRICAS							
MECANISMO	Volumen (~ DL <sup>2</sup> )	razón L/D	Sup. lateral /volumen(~ D <sup>-1</sup> )				
Reacción química	Fuerte, práctic. determinante	Débil e indirecto	Sin influencia directa				
	No determinante. Indirecto	Fuerte	Sin influencia directa				
Transf. de calor	Débil e indirecto	Fuerte	Fuerte y directo				

#### 5.2 Modelos y prototipos

Para cumplir con el objetivo del escalado, o sea obtener un procedimiento industrial exitoso, se necesita aplicar un conjunto de técnicas, metodologías y procedimientos que permitan transferir a la escala industrial, los datos obtenidos en los experimentos a escala reducida. Lo ideal sería que este estudio se pudiera realizar de manera teórica, sin necesidad de experimentos, aplicando las leyes generales de la física y la química y resolviendo las ecuaciones, por lo común diferenciales, que describen por completo los procesos.

En la práctica esto sólo es posible en muy contados casos, ya que si bien en muchas ocasiones se conocen las ecuaciones diferenciales que describen los procesos de interés, en la mayoría de ellas no es posible realizar su integración y por ello no queda otra vía que recurrir a la investigación experimental, es decir a los ensayos y pruebas. A su vez, en la mayoría de los casos resulta difícil y costoso, cuando no imposible, experimentar directamente con los procesos de interés y no queda otra alternativa que recurrir al empleo de

modelos que permitan reproducir, en los laboratorios, los procesos que se quieren estudiar.

El empleo de los modelos hace necesario la aplicación de la Teoría de los Modelos y para ello es fundamental tener en cuenta que en la misma se utilizan un grupo de términos que o bien no son utilizados normalmente o lo que es peor aún, se utilizan con un sentido diferente al que se les da en esta Teoría. De todos esos conceptos, los primarios resultan los de modelo y prototipo, los cuales se definen de la forma siguiente (5, 9):

"Un modelo es un dispositivo o medio que está concebido de tal manera que puede ser usado para predecir el rendimiento de un prototipo. El prototipo, a su vez, es el sistema físico a escala completa, que va a ser modelado.

El prototipo no tiene necesariamente que existir materialmente antes que su modelo. Lo determinante en el trabajo con modelos y prototipos es la relación que existe entre el comportamiento de las unidades de pequeña y gran escala, con independencia de cual de ellas exista primero en el tiempo.

Lo que sí resulta indispensable, cuando se concibe el modelo de un prototipo aún inexistente, es que esa concepción se haga teniendo en mente el tipo y forma de la unidad a gran escala que se pretende obtener, para lo cual se utilizará la información obtenida antes de comenzar las etapas de escalado. Esta consideración hace que en la mayoría de los casos el escalado de un producto o proceso desde el nivel de laboratorio hasta el nivel industrial (scale-up), sea realmente precedido por el proceso de escalado desde el equipo industrial supuesto hasta el laboratorio (scale-down), lo que demuestra que estos dos procesos no son más que etapas de un único e integral proceso de escalado.

Un procedimiento de escalado satisfactorio puede requerir un enfoque empírico paso a paso, en el cual el tamaño del reactor se va incrementando

paulatinamente, para poder conocer en detalle el efecto del cambio de escala en la velocidad y rendimiento de la reacción. Este procedimiento es largo y costoso y por ello se han desarrollado un número de métodos semi empíricos alternativos para aliviar esta situación.

Para la realización del proceso de escalado se utilizan fundamentalmente los métodos basados en el Principio de Semejanza, la modelación matemática y el uso de modelos a gran escala (mockups), aunque en muchas ocasiones los mejores resultados se logran con el uso combinado de los mismos. El Principio de Semejanza se aplica a los sistemas en los cuales se emplean modelos homólogos, o sea aquellos modelos que sólo se diferencian del prototipo en el tamaño o escala. La modelación matemática se aplica tanto a modelos homólogos como a los analógicos, ya sea como método único de escalado en los casos en que existe suficiente información para ello, o en unión con el Principio de Semejanza, en la mayoría de los casos. No obstante, todos esos métodos requieren de los datos cinéticos y termodinámicos básicos, los cuales deben de obtenerse de la literatura si están disponibles o de la experimentación.

#### 5.3. Etapas a considerar en los trabajos de Investigación y Desarrollo.

El proceso de **Investigación y Desarrollo** puede considerarse dividido en 5 etapas, niveles o escalas:

- . Laboratorio
- . Banco
- . Piloto
- . Semi-industrial
- . Industrial

Esta división es convencional y por ello, como veremos más adelante, no son muy precisos los límites entre una escala y otra, ni tienen que considerarse

siempre necesariamente todas las escalas, siendo bastante común, por ejemplo, obviar la escala semi-industrial. También hay casos, cuando el proceso es suficientemente conocido y sus características lo permiten, en que puede pasarse directamente de la escala de laboratorio a la escala industrial.

En su concepción más simple, el concepto de escalado se refiere al paso de una escala a otra, durante el proceso de desarrollo de un nuevo producto o tecnología. En ese caso se acostumbra a utilizar el término escalado ascendente (scale-up) al proceso que va desde la escala de laboratorio hasta la escala industrial y escalado descendente (scale-down) al proceso inverso aunque conceptualmente son un mismo y único proceso de escalado y la definición del concepto escalado es un poco más compleja que el simple tránsito de una escala a otra.

#### 5.4 Definición ampliada del término "escalado".

Para comprender mejor la evolución que han tenido los conceptos relativos al uso de modelos y a las escalas, se debe partir de una de las expresiones más antiguas al respecto, escrita por Leonardo da Vinci en sus "Notas", aproximadamente en el año 1500 y citada por Johnstone y Thring:

"Dice Vitruvio que los pequeños modelos no son útiles para conocer los efectos de los grandes y yo aquí propongo probar que esa conclusión es falsa". (El Vitruvio a que se refería da Vinci era Marco Vitruvio Polión, arquitecto romano del siglo primero de nuestra era, autor de un tratado **De architectura**, dedicado a Augusto).

Ya a inicios de siglo, en el primer manual de Ingeniería Química que se conoce, su autor, George E. Davis afirmaba: "A small experiment made upon a few grammes of material in the laboratory will not be much use in guiding to the erection of a large scale works, but there is no doubt that an experiment based on a few kilograms will give nearly all the data required

... ". (Un experimento pequeño, realizado en el laboratorio con pocos gramos de material no será muy útil como guía para la construcción de una planta a gran escala, pero no hay duda de que un experimento basado en unos pocos kilogramos nos dará casi todos los datos requeridos ....)

Y en 1916, *L. H. Baekeland*, escribe una de las frases más famosas al respecto y que mejor aclara el propósito final de los experimentos relacionados con los modelos y las plantas piloto: *"Commit your blunders on a small scale and make your profits on a large scale".* (Cometa sus errores en una escala pequeña y obtenga sus ganancias en una escala grande).

En todas estas expresiones se habla de modelos y escalas, grandes y pequeñas y esos conceptos se unen con el de escalado. Ahora bien. ¿Qué entendemos en la actualidad por escalado?

En la práctica existen muchas definiciones del término escalado. Una de las clásicas lo limita al estudio de los problemas asociados a la transferencia de datos del laboratorio y la planta piloto a la producción industrial. Una definición más reciente plantea que el escalado hace uso de los datos del laboratorio y/o planta piloto, complementados con modelos a gran escala (mockups) y modelación matemática, para determinar las dimensiones y el tamaño de una unidad industrial. Otra definición señala que éste consiste en el complejo de técnicas y metodologías que se utilizan para transferir un proceso desarrollado en una escala menor, a la escala de producción. y esta última se ajusta bastante a la concepción actual y por ello tomaremos, como definición de escalado, una variante de la anterior:

Escalado es el proceso mediante el cual se logra la exitosa puesta en marcha y la operación económica de una unidad a escala comercial basándose, al menos en parte, en resultados de investigaciones realizada a una escala más pequeña.

De esta definición de escalado quedan excluidos los casos de diseño de unidades industriales realizados con procedimientos de cálculos tradicionales, para los cuales sólo se necesitan los datos de las propiedades físico-químicas de las sustancias en proceso y las cantidades a procesar para obtener los valores de diseño requeridos.

Para que el concepto de escalado sea aplicado, es imprescindible que el diseño se realice sobre la base de investigaciones que se tengan que realizar con ese fin específico, a una escala inferior a la industrial, pero no se requiere que se transite por todas las etapas convencionales en que se dividen los procesos de I+D.

El proceso completo, desde la escala de laboratorio hasta la comercial, pasando por trabajos de banco, planta piloto y escala semi-industrial, es largo y costoso y debe ser reducido en todo lo posible, con el fin de acortar el tiempo que media entre la concepción de un producto y su introducción en el mercado.

No existe duda alguna que es técnicamente posible transferir casi cualquier proceso desarrollado a nivel de laboratorio, directamente a la producción industrial a gran escala, si se dispone de suficiente tiempo y dinero, de forma que los diseñadores consideren factores de seguridad suficientemente amplios y que se esté dispuesto a un largo período de puesta en marcha, que permita adiestrar al personal y descubrir las diferentes causas de interrupciones y problemas de operación y afrontar los riesgos inevitables en la operación de nuevos procesos no suficientemente estudiados.

Tampoco existe duda que los datos obtenidos en plantas de pequeña escala, correctamente diseñadas y operadas, son mucho más seguros para el diseño que los obtenidos directamente del laboratorio, con lo cual se pueden reducir considerablemente los factores de seguridad en el diseño y reducir

apreciablemente el período y los riesgos de la puesta en marcha de las unidades comerciales, pero para obtener dichos datos se requiere a su vez de tiempo y empleo de recursos materiales y humanos.

Por todo lo anterior, en todos los casos resulta imprescindible el análisis detallado de las características del proceso que se pretende desarrollar y del nivel de conocimientos que se tiene sobre el mismo, para poder decidir las etapas que hay que acometer y planificarlas adecuadamente, de forma tal que se emplee el mínimo de recursos y se culmine en el menor tiempo posible.

Las técnicas de escalado se han desarrollado precisamente con el objetivo de reducir al mínimo indispensable ese tiempo de I+D y en ellas juegan un papel determinante las consideraciones técnico económicas.

Finalmente se debe considerar otro objetivo ligado al concepto de escalado y que es el estudio del comportamiento de una planta en producción existente, a partir de una unidad pequeña que reproduce, en lo fundamental, el funcionamiento de la unidad comercial. Este objetivo cae dentro de la esfera del estudio de los procesos pero en principio no se diferencia del objetivo relacionado con el desarrollo de nuevos procesos, siendo la única diferencia práctica el hecho de que para el estudio de los procesos se requiere, casi siempre, solamente de la etapa equivalente a la planta piloto.

# 5.5 Alcance de las etapas de I+D.

# 5.5.1 Criterios a considerar para los límites entre escalas (5).

Para la definición de los límites entre una escala y otra existe una gran diversidad de criterios y en muchos casos se ha utilizado el volumen de los equipos como el criterio fundamental, particularmente en lo relacionado con la industria Biotecnológica, aunque en ese caso en realidad lo que se trata es de un significado particular del concepto de escalado, bastante más restringido que el concepto de escalado adoptado modernamente.

En la industria Biotecnológica resulta de particular significación el incremento paulatino del volumen en el que se desarrollan los microorganismos, de forma tal de asegurar un crecimiento adecuado, con las condiciones requeridas de asepsia y en un tiempo dado. Normalmente este incremento se regula de manera tal que cada nueva etapa se realice con una carga inicial (inóculo) entre un 5 y un 10 % del volumen efectivo total del equipo en cuestión y esto se efectúa siempre, con independencia de si el proceso es uno ya establecido o un proceso en desarrollo.

Este llamado "escalado" de las producciones Biotecnológicas no tiene realmente nada que ver con el escalado que se estudia en el presente texto, pero ha sido causa de confusión y una de los motivos por los cuales se utiliza mucho el volumen de los equipos como criterio de definición entre las etapas de los procesos de I+D.

También se han utilizado como criterios las relaciones entre las dimensiones lineales de los equipos (factores de escala geométricos), a partir de consideraciones de criterios de semejanza. En ocasiones se toma como valor aproximado que los factores de escala geométricos (lineales) deben estar en el rango de 5 a 15. De esa forma una columna de 2 m de diámetro puede ser escalada por una de 250 mm, lo que representa un factor de escala de 8. No obstante, en la práctica no es raro hallar factores tan bajos como 3 o tan altos como 100.

Una columna de 250 mm normalmente puede ser considerada demasiado grande para una instalación a escala pequeña, incluso para una planta piloto, a menos que se desee procesar una cantidad muy grande de producto y por ello se debe considerar un factor de escalado mayor, por ejemplo 13 y considerar entonces una columna de 150 mm, mucho más adecuada y aún dentro del rango recomendado. Si anteriormente se realizó el trabajo en la escala de banco con una

columna de 25 mm de diámetro, los factores de escala empleados han sido 6 y 13, o sea se ha ido avanzando de un diámetro de 25 mm a 150 mm y finalmente a 2000 mm.

Por otra parte, cuando se escalan reactores la tendencia es a considerar el factor de escala por el volumen y esto lleva en ocasiones a considerar factores más elevados que el rango recomendado. Por ejemplo, si una reacción a escala de banco se ha realizado en un recipiente de l2 L y el tamaño final del reactor industrial se estima en unos 11500 L, se puede pensar que serán necesarias dos etapas intermedias, una de 100 L y otra de 1140 L, lo que daría factores de escala de 8, 12 y 10 respectivamente.

Sin embargo, se puede considerar mejor un valor intermedio de 400 L y en ese caso los factores de escala obtenidos (33 y 29) aunque superiores al rango recomendado, son también aceptables y esta opción constituye un buen compromiso, evitando tener que construir dos plantas piloto. Además si se considera la relación de escala con respecto a la dimensión lineal en lugar del volumen, lo que es realmente lo recomendado para el escalado, el cuadro cambia totalmente, ya que:

$$\left(\frac{400}{12}\right)^{\frac{1}{3}} = 3.2 \quad y \quad \left(\frac{11500}{400}\right)^{\frac{1}{3}} = 3.1$$

o sea factores de escala modestos, incluso por debajo del rango recomendado.

No obstante, en realidad el mejor criterio de definición de los límites entre las distintas escalas es la de los objetivos que se persiguen con cada una de ellas y los resultados que se esperan. Con ese criterio más amplio se pueden considerar la realización de etapas, por ejemplo de banco y piloto, con equipos de pequeño volumen, normalmente considerados de laboratorio, en los casos en que el nivel de precisión y automatización sea tan elevado y la necesidad de obtener productos de muestra tan pequeña, que se puedan cubrir entonces los objetivos señalados para esas etapas, con un considerable ahorro económico.

#### 5.5.2 Escala de laboratorio.

El laboratorio constituye la unidad primaria de investigación en la que quedan determinadas las metódicas de síntesis o procesamiento y se establecen las condiciones bajo las cuales se obtienen los mejores resultados.

El laboratorio confirma o rechaza las hipótesis obtenidas del conocimiento previo y de la literatura y se obtienen datos que contribuyen a enriquecer la información sistematizada, que constituye la base para el trabajo a escala de banco y/o planta piloto. Además se obtiene información para la realización de evaluaciones económicas preliminares y se determinan diversas propiedades físico-químicas, necesarias para los cálculos ingenieriles y la formulación y comprobación de modelos matemáticos.

Los objetivos Principales de esta etapa son la obtención, recuperación y purificación de los productos de interés, así como el análisis y caracterización de los mismos. Además, en el caso de la Síntesis Química se definen otros objetivos como:

- Conocer la influencia de las variables macroscópicas (composición, temperatura, pH, etc.) en el rendimiento u otro parámetro que caracterice la eficiencia del sistema.
- Optimización de la síntesis a ese nivel.
- Conocimiento de la cinética, incluyendo la construcción de modelos matemáticos.
- Propiedades físicas y químicas del nuevo producto.
- Influencia de los reactivos empleados en los cambios de escala.
- Caracterización de los subproductos y residuales.
- Evaluación económica preliminar.

En el caso de los procesos biotecnológicos, se tienen como objetivos:

Selección y evaluación de cepas.

- Optimización del medio y de otras variables experimentales y de proceso.
- Información en cortos plazos de tiempo a muy bajo costo.

#### 5.5 3 Escala de banco.

En esta etapa la investigación comienza a adquirir un carácter tecnológico y posee sus particularidades que la distinguen:

- Se orienta a la configuración de las unidades experimentales con características geométricas y operacionales similares a los equipos de planta piloto o industriales disponibles o recomendables, a diferencia de la etapa de laboratorio, donde el equipamiento utilizado difiere considerablemente del industrial.
- Conlleva un mayor nivel de instrumentación y automatización .
- El trabajo experimental se orienta hacia el completamiento y precisión de la información de laboratorio.
- Los estudios de banco constituyen un paso de gran importancia y pueden contribuir a reducir considerablemente los costos de la investigación y obviar, en algunos casos, la necesidad de los trabajos a escala piloto.

#### Los objetivos principales de esta etapa son:

- 1. Revelar la esencia de los fenómenos que ocurren en los procesos.
- 2. Revelar los pasos controlantes o críticos en las operaciones.
- 3. Verificar hipótesis de modelos matemáticos.
- 4. Aportar información para cálculos y diseños de ingeniería.

### Además en el caso de la Síntesis Orgánica, hay otros objetivos como:

 Realizar estudios fundamentales de ingeniería de procesos como los fenónemos de superficie, fenómenos reológicos, equilibrio de fases, separaciones complejas, estudios de materiales, etc.

- 2. Determinar propiedades y características físico-químicas de las sustancias como la densidad, viscosidad, tensión superficial, tamaño de partículas, porosidad, calor específico, etc.
- 3. Conocer la Termoquímica (calores de reacción) y Termofísica (capacidad calorífica de las mezclas, etc.).

# <u>En el caso de los procesos biotecnológicos se consideran también los siguientes objetivos:</u>

- Selección del procedimiento de desarrollo de inóculos, esterilización del medio, aireación, agitación y operaciones de purificación.
- Ajuste de variables como razón de transferencia de oxígeno, evolución de dióxido de carbono, producción de biomasa, biosíntesis de metabolitos y efectos del pH.
- 3. Estudio del régimen de alimentación continua o incrementada.
- 4. Selección de alternativas de control e instrumentación.
- 5. Evaluación económica preliminar y estimado de viabilidad del proceso.

Esta etapa permite un enfoque científico a relativo bajo costo.

#### 5.5.4. Escala piloto.

Los estudios de escala piloto resultan de especial importancia para el cambio de escala en muchos procesos, pero poseen un alto costo y la decisión de su realización debe estar subordinada a un conjunto de factores entre los cuales se destacan:

- Tipo de proceso
- Nivel de información disponible
- Tamaño propuesto para la unidad industrial

La planta piloto debe montarse y operarse de manera que permita satisfacer al menos uno de los siguientes **objetivos principales**:

- 1. Evaluar la factibilidad de un proceso tecnológico.
- 2. Obtener la información para el diseño de una planta comercial.
- 3. Obtener cantidades de productos con fines de ensayo o promoción.

# Además de estos, **en el caso de la Síntesis Orgánica** se tienen los siguientes objetivos específicos:

- 1. Obtener "know-how" del proceso.
- 2. Corroborar teorías sobre mecanismos de los procesos.
- 3. Obtener información para el tratamiento de residuales.
- 4. Ensayar materiales de construcción.
- 5. Probar métodos de análisis de procesos y control de calidad.
- 6. Estudiar sistemas para el control de procesos.
- 7. Evaluar nuevos equipos y sistemas tecnológicos.
- 8. Entrenar al personal.

# En el caso de los **procesos biotecnológicos**, se tienen los siguientes objetivos específicos:

- Confirmar los datos obtenidos a nivel de banco y verificar los criterios de escalado.
- Seleccionar las estrategias de esterilización del medio y de concentración y purificación de productos.
- Obtener cantidades de productos para pruebas de caracterización, toxicológicas, promoción de mercado y verificación de la viabilidad del proceso.
- 4. Ofrecer una información de validación a un costo relativamente alto.

#### 5.5.5 Escala semi-industrial...

Esta es una etapa cara del proceso de escalado que puede prolongar excesivamente la introducción de una nueva tecnología en el mercado y sólo

se realiza para aquellas tecnologías de una gran complejidad y que representan un salto apreciable en el nivel de desarrollo existente.

En ocasiones, a las plantas de este tipo se le han denominado plantas demostrativas, aunque otros autores prefieren el término de plantas prototipo. Estas plantas se construyen de igual forma que una planta de escala completa, pero a una capacidad de producción menor, usualmente un décimo de la proyectada para la escala definitiva, que permite el acopio de experiencias durante su funcionamiento y sirve de modelo a las futuras plantas industriales que se construyan .

En la mayoría de las ocasiones esta etapa del escalado puede omitirse, lo que representa una considerable reducción en el periodo de desarrollo de una tecnología.

#### 5.5.6 Escala industrial.

Normalmente esta escala no se considera una parte del proceso de investigación y desarrollo y esto constituye un error conceptual con fuertes implicaciones de índole práctica.

Realmente la industria constituye, no sólo una prueba de validación de las experiencias precedentes, sino que enriquece la información ingenieril disponible y los modelos matemáticos formulados y brinda información de gran valor para el perfeccionamiento de equipos y para la optimización del propio proceso productivo.

Además en la mayoría de los casos las instalaciones a escala de banco y/o piloto se diseñan a partir de un "scale-down" de la instalación industrial existente o supuesta, en base a la experiencia acumulada con la operación de otras industrias. Por todo lo anterior, la escala industrial debe ser considerada una etapa importante en el conjunto de las tareas de I+D.

# 5.7 Utilización de la Modelación Matemática y el Diseño de Experimentos en el Proceso de Escalado (5).

El proceso completo de Escalado, desde el laboratorio hasta la industria, resulta generalmente largo y costoso, por lo cual resulta conveniente optimizar dicho proceso para llevarlo a su mínima duración y costo. Para realizar esa optimización resulta muy valioso aplicar las técnicas del Diseño Estadístico de Experimentos y la Modelación Matemática.

El aplicar el Diseño de Experimentos a escala industrial resulta difícil por las afectaciones que puede hacerle a la producción. No obstante, el Diseño Estadístico de Experimentos es una de las principales herramientas de que dispone el investigador para aumentar la eficacia de la investigación, y hoy en día se aplica ampliamente a escala de laboratorio, banco y piloto. No es necesario ser un estadístico o un matemático; la experiencia ha demostrado que los químicos e ingenieros pueden fácilmente aprender los principios fundamentales de este tipo de diseños (7).

Una simple observación experimental en un laboratorio, en una instalación a escala piloto o a nivel industrial puede costar cientos o miles de dólares, luego siendo el objetivo de la investigación obtener información, puede definirse la eficiencia de la investigación como la cantidad de información útil obtenida por unidad de costo. Por consiguiente, es extremadamente importante para una investigación utilizar métodos experimentales que le brinden la máxima cantidad de información con el menor costo y esfuerzo.

El uso del *Diseño Estadístico de Experimentos* facilita un incremento apreciable en la productividad de los investigadores, así como en la confiabilidad de los resultados obtenidos, siendo estos métodos, por su naturaleza universal, adaptables a la mayoría de los campos actuales de investigación (7, 8, 13, 14). Con el Diseño Estadístico de Experimentos se pueden reducir al mínimo imprescindible las experiencias que se deben realizar a Escala de Laboratorio y

planificar adecuadamente las corridas en las escalas de banco y piloto, de forma tal de obtener la mayor cantidad posible de información en el menor intervalo de tiempo (El Diseño Estadístico de Experimentos se trató con más detalles en el Tema 4).

Con la Modelación Matemática por su parte se pueden reducir las corridas necesarias en las instalaciones de banco y piloto ya que se pueden realizar sólo las corridas necesarias para obtener la información que se requiere para poner a punto los modelos matemáticos del proceso y el resto de las investigaciones se pueden realizar mediante simulaciones en computadora, con la excepción de un mínimo de corridas experimentales que se realicen al final para corroborar los resultados de los modelos.

Con relación a la simulación matemática y la modelación se deben realizar varias precisiones conceptuales. Por ejemplo es importante definir el concepto de **sistema**, como un conjunto de elementos en el cual todos se encuentran tan estrechamente vinculados entre sí, que en relación con las condiciones circundantes se presentan como un todo único. Existen muchos tipos de sistemas, pero aqui se considerarán solamente los sistemas de los Procesos Industriales., definidos éstos como el conjunto de procesos físicos, químicos, bioquímicos y microbiológicos y energéticos relacionados con la obtención de un producto o un grupo de productos dados.

Para el estudio de los sistemas resultan fundamentales los conceptos de **modelo** y **simulación**. Por **modelo** se define la representación (imagen) de una realidad objetiva, a una escala igual o diferente a la original y, los mismos pueden ser de diferentes tipos: analógicos, físicos, matemáticos, siendo en este caso de especial interés los modelos matemáticos. Por **simulación** se entiende el estudio de un sistema mediante uno o más modelos, y si los modelos a emplear son matemáticos, se tiene entonces una simulación matemática.

Otra definición de **simulación**, es la que plantea que *la simulación es un procedimiento para la realización de experimentos por medio de una computadora digital y con la ayuda de modelos matemáticos, con el fin de obtener información sobre el comportamiento del sistema.* En general, mediante las técnicas de simulación se pueden analizar el efecto de las interrelaciones de un sistema o proceso dado, determinar las recirculaciones (de materiales, energía o información), hacer estudios de capacidad, detectar cuellos de botella, definir las condiciones límites de operación y otras aplicaciones más.

Por ello, la realización previa de los modelos que definen el comportamiento individual de cada elemento de un sistema o proceso, permite el estudio integral de dichos procesos, mediante su simulación matemática y se llega por lo tanto al concepto de Análisis de Procesos, que es la habilidad de convertir un problema de Ingeniería en una formulación matemática, para obtener la información final del problema, mediante la aplicación de las técnicas de computación.

Teniendo en cuenta estos elementos, no se puede considerar a la **Modelación Matemática** como un fin en si mismo, sino como un paso hacia la **simulación** y a su vez la **simulación** se debe considerar como una herramienta a utilizar en el Análisis de Procesos en general y en este caso, en los Procesos Industriales. No obstante la modelación matemática constituye una primera etapa obligada para realizar la simulación y el análisis de procesos.

# 5.8 Aplicación durante la Ejecución de la Investigación de la Ingeniería de Procesos asistida por Computadoras (CAPE) (6).

En la Ingeniería de los Procesos Químicos y Energéticos, el énfasis se hace en los procesos y por ello, para diferenciarlo del Diseño Mecánico, se ha utilizado el término CAPE (*Computer Aided Process Engineer*). El CAPE abarca otras tareas además del diseño, como son la *evaluación*, *optimización*, *solución de problemas*, *seguridad*, etc. Una de las herramientas más importantes del CAPE son los

<u>Simuladores de Procesos</u>. Se emplean además un gran número de software generales y de propósito específico.

Los software utilizados en el CAPE se dividen en: Software estadísticos, Software matemáticos, Simuladores numéricos orientados a ecuaciones, Simuladores numéricos con ambiente gráfico, Simuladores de procesos y Software de carácter general.

Los estadísticos se dividen en Generales (Ej: Statgraphics) y Específicos (Ej: DesignExpert). Entre los matemáticos se tiene el MatLab; MathCAD; TK Solver; y Mathematica. Entre los Simuladores numéricos orientados a ecuaciones se tiene el Polymath y el Madonna. Entre los Simuladores numéricos con ambiente gráfico se tiene el Simulink; Ithink; Stella y el ModelMaker.

Entre los software de carácter general están principalmente las Hojas de cálculo (*Spredsheets*) como Microsoft Excel y los software más utilizados en el CAPE son los Simuladores de proceso, los que se dividen en <u>Simuladores para Estado estacionario</u>, los cuales a su vez pueden ser Generales como el AspenPlus, ProII, HYSIM, Chemcad y el DesignII y Especializados como el PROSIM, TSWEET, SuperProDesigner (dinámica la parte batch), PD Plus y ChemEng.

También están los Simuladores para estado transitorio (Dinámicos) como el Speedup. Además el HYSYS tiene las dos posibilidades (estacionario y dinámico) y el Chemcad 5.0 incluye algunos módulos dinámicos que le permiten realizar también simulaciones en esas condiciones. Otro tipo de software utilizado en el CAPE es la Dinámica de los Fluídos Computacional (CFD por sus siglas en inglés), entre los que se cuentan el Fluent; FIDAP y el PHOENIX (6).

### Uso de los software disponibles.

Los <u>software estadísticos</u> son de utilidad general en la Ingeniería de Procesos y se pueden utilizar cualquiera de los disponibles, siendo uno de los más usados el <u>Statgraphics</u>. Para la solución de problemas pueden emplearse prácticamente

cualquiera de los software matemáticos disponible. La selección específica depende mucho del entrenamiento que tenga el usuario. Es más fácil desarrollar un problema con un software conocido, que intentarlo con otro más eficiente pero desconocido.

Sin embargo, los software más utilizados en Ing. de Procesos son los <u>simuladores</u>. Los simuladores pueden dividirse, de acuerdo con sus posibilidades de uso, en Simuladores\_*De uso general*, válidos para casi todo tipo de procesos, los que son generalmente mucho más caros que los específicos. Como ejhemplo se tienen el *AspenPlus, H ysiys, ChemCAD, DesignII y ProII*.

Por su parte los Específicos son válidos para un proceso o tipo de procesos y son generalmente más baratos. Ejemplo PROSIM y el TSWEET son específicos para la industria del petróleo. Por su parte el SuperProDesigner, dirigido especialmente al sector de la Biotecnología, los Residuales, la Farmacia y la Química Fina, tiene un uso creciente en la actualidad y se basa en la programación por objetos y cuenta con módulos discontinuos dinámicos. Por otra parte, un simulador comercial de mediana complejidad es el UNIOPT, el cual ha tenido un amplio uso docente, de conjunto con otros software de la firma inglesa Chemeng.

Por el tipo de sistemas a que se aplican se dividen en Simuladores para estado estacionario y Simuladores para Estado Transitorio. Los Simuladores para estado estacionario son los que son los más utilizados en la práctica, y que cuentan con una mayor experiencia de aplicación. Entre ellos los 5 más utilizados son el AspenPlus, Hysys, Pro-II, DesignII yel Chemcad y de ellos los dos que controlan la mayor parte del mercado son el Aspen Plus y el Hysys.

Para estado no estacionario o transitorio son los **co**nocidos como "<u>Simuladores</u> dinámicos", aunque esa denominación no es totalmente correcta, ya que un <u>sistema estacionario es un sistema dinámico en equilibrio</u> y los simuladores

dinámicos tratan con sistemas dinámicos que no están en equilibrio o sea <u>que</u> <u>cambian con el tiempo</u>. Como ejemplo se tienen el Hysys y el SpeedUp.

### Uso de los Simuladores de Procesos

Los simuladores se dividen también por la forma en que resuelven los modelos y en ese caso se tienen los que son **Modulares secuenciales**, **Orientados a ecuaciones** y **Modulares no secuenciales** 

#### Simuladores Secuenciales Modulares:

Casi todos los grandes simuladores comerciales se originaron con este enfoque, aunque muchos de ellos han incorporado en la actualidad, en mayor o menor grado, elementos del enfoque modular no secuencial y algunos se han reelaborado con el enfoque de la programación orientada a objeto y han eliminado o reducido considerablemente la necesidad de secuencialidad, aunque si han mantenido el enfoque modular.

El concepto de simuladores modulares se basa en el desarrollo de módulos de las Operaciones Unitarias (columnas, reactores, bombas, intercambiadores, mezcladores, etc), los que se desarrollan de forma independiente por expertos, que les incorporan todo el conocimiento matemático y de ingeniería que resulte necesario. Para el usuario final, el módulo es como una "caja negra", al que sólo hay que darle datos para obtener resultados, sin que haya que conocer la forma en que se alcanzan esos resultados.

La Ventaja de este enfoque es que puede ser utilizado por la mayoría de los ingenieros, sin que tengan que dedicarle tiempo a su desarrollo ni necesitar una elevada preparación teórica. Como desventaja se tiene que carece de la flexibilidad requerida para tratar equipos o necesidades de modelación diferentes de los que fueron concebidos en los módulos disponibles.

Eo concepto de secuencialidad es que para resolver los módulos se necesita conocer los datos de entrada a los mismo y esto es lo que caracteriza a los Simuladores Secuenciales Modulares.

Cuando existen reciclos en el proceso que se quiere calcular, hay entradas que no se conocen, por lo que se requiere asumir valores para esas entradas, y comprobar posteriormente si lo asumido es correcto. En caso contrario hay que asumir otro valor, hasta que se obtenga la convergencia.

Para acelerar el proceso de obtención de convergencia se utilizan diversos procedimientos (E.G: el método de Wegstein).

### Simuladores Orientados a Ecuaciones

Una unidad del modelo es el conjunto de ecuaciones que describen esa unidad. Para resolver un proceso completo se combinan las ecuaciones de todos los módulos y se resuelven simultáneamente. Esto produce grandes sistemas de ecuaciones no lineales, bastante complejos de resolver, pero elimina el problema de los reciclos, por lo que resultan teóricamente más eficientes y su utilización facilita resolver los sistemas en estado no estacionario.

Ahora bien, muchos simuladores orientados a ecuaciones son simplemente resolvedores de sistemas de ecuaciones, a los cuales hay que darles como entrada todas las ecuaciones que componen el sistema (Ejemplo Polymath, PSI, Madonna, etc.). Otros simuladores de este tipo incorporan también módulos pre elaborados, de forma similar a los simuladores modulares, lo que facilita su uso, y se dedican específicamente al estado no estacionario. Ej: Speedup

### Simuladores modulares no secuenciales

Tienen características de los dos tipos antes mencionados. Se basan en módulos, pero los datos se pueden dar mezclados (entradas y salidas), siempre y cuanto el número de datos sea suficiente para resolver el sistema de ecuaciones resultante.

Por ejemplo, si hay dos entradas y dos salidas, puede darse datos de una entrada y una salida y el simulador calcula entonces las faltantes.

Uno de los pocos simuladores comerciales que desde un principio tuvo esa característica fue el <u>Hysim</u> de Hyprotech, y por ello su continuador, el HYSYS es el único que es completamente secuencial no modular y puede trabajar tanto en forma estacionaria como dinámica. Sin embargo en la actualidad muchos de los simuladores comerciales han introducido en mayor o menor medida ciertas características no secuenciales y de simulación dinámica, como es el caso de la versión 5.0 del Chemcad que tiene un grupo de módulos dinámicos y que puede usar la mayoría de los módulos de estado estacionario para simulaciones en estado dinámico.

# Características de los simuladores comerciales para estado estacionario

Todos los grandes simuladores comerciales permiten obtener un diagrama de flujos del proceso (**PFD**), sin embargo los simuladores más económicos carecen de la posibilidad de construir el PDF y esto no limita en modo alguno su pleno uso. Como ejemplo se tiene el caso del **UNIOPT**, el cual no construye el **PDF**, pero éste puede hacerse con cualquier software gráfico o simplemente a mano.

Sin embargo esto no es decisivo y en muchas ocasiones incluso en los simuladores que construyen el **PDF** se prefiere trabajar con otro tipo de interfase, como es en el caso del **Hysys** se emplea mucho el formato de hoja de trabajo (**worksheet**). También existe el caso de simuladores como el **Chemcad 5.0** que solamente se pueden trabajar en la forma gráfica, o sea construyendo el PDF y no tienen posibilidades de acceso por hojas de trabajo ni por comandos. Otros como el Design II, tienen posibilidades gráficas y por comandos, pero no tienen entrada por hoja de cálculo como el Hysys.

En muchas Universidades se han utilizado versiones académicas de los simuladores comerciales más extendidos, principalmente AspenPlus y Hysys. En este curso se dará información sobre Hysys, el Chemcad, el UNIOPT y el Super Pro Designer, y se utilizarán fundamentalmente el SuperProDesigner y el Chemcad 5.0.

### Dinámica de los Fluidos Computacional (CFD)

Esta técnica se ha utilizado para analizar el flujo y el rendimiento de equipos de procesos como reactores, tanques agitados, cama empacada, ciclones, sistemas de combustión, etc., pero hasta hace poco estaba limitaba a las grandes computadoras (mainframe). En la actualidad el aumento del rendimiento de las PC ha hecho que esta técnica esté disponible para el Ingeniero de Procesos, para el análisis de equipos muy complejos

Con la CFD se resuelven problemas de mecánica de los fluidos y similares mediante la solución numérica de las ecuaciones diferenciales parciales que gobiernan dichos procesos. Para ello se divide la geometría de interés en un gran número de celdas computacionales y las ecuaciones diferenciales parciales se aproximan (discretizan) por un sistema de ecuaciones algebraicas para las variables el conjunto de locaciones discretas en el espacio y en el tiempo (las celdas computacionales). Esas locaciones discretas se denominan **rejillas** (*grid* o *mesh*)

Con CFD una sección de tubería se representa como un conjunto de celdas computacionales. Las celdas pueden ser de muchas formas (Cuadriláteras y triangulares para problemas de dos dimensiones, hexaédricas, piramidales, tetrahédricas y prismáticas para 3 dimensiones).

Esta técnica se aplica con éxito para obtener perfiles (velocidad, concentración, temp., etc.). Como ejemplo se tienen la obtención de los perfiles velocidad en el precalcinador de una gran planta de cemento, con cuya simulación en CFD se ayudó a mejorar la eficiencia del proceso de dicha planta. También se han realizado con CFD tareas tan complejas como la modelación de un estanque de combustible en llamas, se logra con éxito con estas técnicas.

# Bibliografía:

- 1. Autores Cd. 1988. *Libro de Trabajo del Sociologo*. Moscu: Editorial de Ciencias Sociales. 349 pp.
- 2. Canales FHD, Albarazo ELD, Pineda EB. 1986. *Metodología de la investigación*. Mexico: Editorial Limusa
- 3. Diaz-Balart FC. 2001. *Ciencia, Innovacion y Futuro*. La Habana: Ediciones Especiales Instituto del Libro. 507 pp.
- 4. Friedrich W. 1988. *Metodos de la Investigacion Social Marxista Leninista*. La Habana: Editorial de Ciencias Sociales. 325 pp.
- 5. Gonzalez RA. 2000. *Principios Basicos de Escalado*. Matanzas: Centro de de Documentacion e Informacion Científico Tecnica, Universidad de Matanzas
- 6. González RA, Curiel L. 2001. *Procesos de Separación aplicados a la Ingeniería de Procesos*, Universidad de Matanzas, Matanzas
- 7. Guerra J, Sevilla E. 1987. *Metodos Estadisticos para Ingenieria de Procesos*. La Habana: Editorial Pueblo y Educacion
- 8. Hernández R, Fernández C, Baptista P. 1994. *Metodología de la investigación*. Mexico: Mc Graw Hill Book Inc.
- 9. Johnstone RE, Thring MW. 1957. *Pilot Plants, Models, and Scale-up Methods in Chemical Engineering*. New York: McGraw Hill Book Co. 307 pp.
- 10. Lerch. 1977. *La Experimentacion en las Ciencias Agricolas*. La Habana: Editorial Academia
- 11. Martin WF, Lopez E, Rodriguez CM, Cogollo J. 2001. Metodologia de la Investigacion Folleto Docente. Cienfuegos: Universidad de Cienfuegos
- 12. Microsoft. 2000. Microsoft Project. Richmond: Microsoft Co.
- 13. Montgomery DC. 1991. *Diseño y análisis de experimentos*. Mexico: Grupo Editorial Iberoamérica S. A.
- 14. Montgomery DC. 1997. *Design and Analysis of Experiments*. New York: John Wiley and Sons Inc.
- 15. Murphy TD. 1977. Design and Analysis of Industrial Experiments. *Chemical Engineering*: 168 82
- 16. Vining GG. 1998. Statistical Methods for Engineers. Los Angeles: Brooks/Cole Publishing Co.