

- 3 J. Elguero, R. Phan Tan Luu,
«Estrategia, investigación e informática», en Prisma, *La Vanguardia*, Domingo 20 Marzo
1983.

HAN pasado muchos años desde que don Santiago Ramón y Cajal escribiese sus «Reglas y Consejos sobre la investigación científica». Desde entonces la reflexión metodológica en este campo ha hecho grandes progresos debido a una escuela de pensamiento que se inicia con sir Ronald Fischer y William S. Gosset (más conocido por «Student») y se continúa en nuestros días con G. E. P. Box, N. R. Draper y J. S. y W. G. Hunter. Estos estadísticos tuvieron la idea de unir estrechamente la reflexión matemática y las tareas prácticas de la investigación en las ciencias experimentales. Una tercera componente se está añadiendo en este momento al diseño y planificación experimental. Nos referimos a la accesibilidad y difusión masiva de la microinformática. Con las técnicas matemáticas ya conocidas, la extraordinaria capacidad de trabajo y bajo precio de los microordenadores y la formación en informática de profesionales de todas las ramas del saber, ninguna empresa, laboratorio universitario o centro del CSIC, por pequeño que sea, debería prescindir de estas posibilidades.

Para ilustrar la riqueza de estos métodos, vamos a citar algunos ejemplos sacados de nuestra experiencia. Esperamos con ello demostrar lo fecundo que resulta la colaboración entre estadísticos y experimentadores. El papel del estadístico moderno no se debe limitar a ofrecer un útil matemático o a sacar conclusiones correctas de un conjunto de datos. Su papel esencial es el de preparar el desarrollo lógico del trabajo experimental, consciente de que lo importante son las *condiciones experimentales* y no el *resultado del experimento*. Muchos investigadores continúan confundiendo precisión y exactitud. El estadístico ayudará a establecer un plan de experimentos que prevenga de conclusiones sesgadas y que se acerque lo más posible a la «verdad».

Un tipo de problemas para el que se dispone de una teoría perfectamente elaborada es el que concierne a las mezclas. Estos problemas aparecen cuando se intenta mejorar las cualidades de una mezcla de composición definida variando únicamente las proporciones relativas de los componentes. Consideremos, por ejemplo, el caso del vino de una pequeña región, producido con uvas de distintas cepas. Si hacemos la hipótesis de que las cualidades organolépticas del vino resultante dependen principalmente del origen de la uva, la conclusión lógica será que para conseguir optimizar sus cualidades hay que hacer mezclas en diferentes proporciones de las uvas de diferentes cepas. Esto obliga a efectuar vendimias separadas por encepamientos. Tal solución es difícilmente aceptable por los viticultores si se pretenden realizar la mayoría de las innumerables mezclas posibles. Pero hoy día es posible limitarse a un número muy reducido de mezclas para obtener la respuesta deseada. En el ejemplo concreto estudiado se encontraron tres composiciones que conducían a vinos de mejor calidad que la habitualmente producida.

Un ejemplo más trivial lo constituye el problema de las pistas de tenis. Una pista de tenis se construye añadiendo sobre un zócalo de cemento un revestimiento constituido de varias emulsiones de naturaleza diferente, Aquí el problema se complica, ya que no queremos limitarnos a mejorar una propiedad única, como era la calidad del vino, sino una serie de propiedades no necesariamente compatibles. Por ejemplo, las propiedades mecánicas de la pista, su resistencia a la lluvia, un tiempo de secado conveniente del polímero, etc. También es este caso se dispone de la metodología adecuada, las llamadas superficies de respuesta. Una vez más, con un número muy reducido de experimentos bien diseñados se alcanzó el objetivo propuesto: la construcción de pistas de tenis con un compromiso de calidades (definido por el constructor) óptimo.

La evolución de las farmacopeas lleva inevitablemente a la disociación galénica de los principios activos, salvo si se potencian los unos a los otros. El estudio de las posibles

interacciones, positivas (sinergia) o negativas (antagonismo) entre varios principios activos se puede abordar como un problema de mezclas. Un estudio del comportamiento de tres antibióticos fue diseñado en colaboración con un grupo de microbiólogos con el fin de determinar la composición óptima. Los resultados actualmente obtenidos permiten pensar que esta estrategia se podría aplicar en medio hospitalario, por ejemplo, en oncología, donde la terapia combinada es de uso corriente.

Otro tipo de problemas en los que la metodología de la investigación constituye una ayuda inapreciable son aquellos en los que se dispone de un modelo empírico que relacione una propiedad con otras. Por ejemplo, la actividad biológica con la estructura molecular del compuesto. Como ya hemos dicho, la calidad de la información no va a depender tanto de la precisión en la respuesta biológica como de la elección de las moléculas a estudiar. Una estrategia eficaz consistirá en resolver el problema con el menor número posible de moléculas o, mejor aún, con el coste mínimo. Métodos como el NEMROD permiten reemplazar la información que aporta una molécula «cara» por la de otras moléculas más «baratas» sin perder en calidad de la información. Aquí podemos señalar que estos métodos están estrechamente relacionados con la teoría de la información de Shannon. Así, el objetivo de un diseño experimental se podría definir como la transformación de un estado desordenado (todos los experimentos posibles) en un estado ordenado (el conjunto de experimentos del diseño óptimo).

Creemos que los ejemplos que venimos de comentar dan una idea de las posibles colaboraciones entre experimentadores y «diseñadores», pero muchos otros casos podrían haber sido citados, tales como el estudio de la fijación de enzimas en el suelo, la valorización de residuos agrícolas, los procedimientos de fermentación, el estudio de los mecanismos de reacción en química, la optimización de los procesos de fabricación, etc.

Aunque formalmente sencillos, todos estos métodos implican cálculos laboriosos, que suponían un costo elevado dado el precio de los ordenadores. Con la revolución de la microinformática, este freno económico ha desaparecido. Los microordenadores actuales tienen una capacidad de trabajo comparable a la de los grandes ordenadores de hace diez años. Hoy día, *en trabajos de investigación como los que hemos descrito, el coste del cálculo es marginal*. Los microordenadores son más lentos que sus hermanos mayores, lo cual se suele usar como argumento para considerar ventajoso la instalación de un terminal del ordenador central sobre la adquisición de un microordenador. Es indudable que hay ramas de la investigación (mecánica cuántica, radiocristalografía, física nuclear...) que exigen ordenadores potentes y rápidos. Pero en numerosos casos, como los aquí expuestos, el *tiempo de cálculo es despreciable* frente al tiempo del trabajo experimental. En todos estos casos, la independencia, la autonomía, por no insistir más en el bajo coste, hacen aconsejable el equipar en microordenadores la mayoría de los centros de investigación. La existencia de una colección de programas fácilmente accesibles, convierte en una tarea sencilla la aplicación de las nuevas metodologías a la investigación científica. No es difícil profetizar un espectacular desarrollo de los métodos modernos de diseño de experimentos, basados en el uso de la microinformática, en la investigación en las ciencias experimentales.

José ELGUERO
Investigador del CSIC (Madrid)
Roger PHAN TAN LUU
Profesor de la Universidad de Marsella