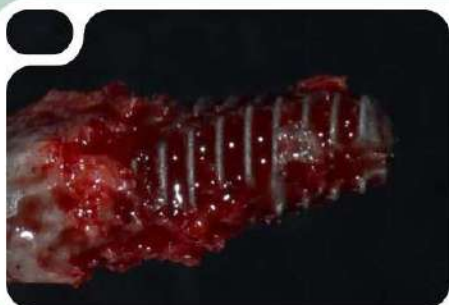




Análisis biomecánico de dos prototipos para implante trans-endodóntico de óxido de zirconia; estudio in sílico

González-Gurrola, E.R., Bermúdez-Jiménez, C.O., Gaitán-Fonseca, C.I., Baltazar-Hernández, V., Cepeda-Argüelles, O., Aguilera-Galaviz, L.A., Gaitán-Fonseca, C.I.



Validación de un Modelo TAM Extendido para la Adopción de Blockchain en el Reclutamiento de Capital Humano en Sistemas de Innovación Regional

Cruz-Manzo, J., Ortuño-Barba, L.C., Alvarez-Aros, E.L.



Web System for the Management and Administration of Neuropsychological Tests: Design and Development

Jarillo-Silva, A., García-Ramos, I.E., Muñoz-Ortiz, E., Cruz-Tolentino, J.A., Pérez-Meza, M.



Aplicaciones didácticas de redes neuronales mediante Excel® para Ingeniería Química y Bioquímica

Calderón-Ramírez, M., Gaitán-Vélez, V., Quemada-Villagómez, M.L., Martínez-González, G.M., Jiménez-Islas, H.



Compuestos bioactivos y composición mineral en fruto y subproductos de mango cv. Ataulfo

Serrano-Berumen, M.F., Sánchez-Chávez, E., Salas-Salazar, N.A., Soto-Caballero, M.C., Cruz-Álvarez, O., Flores-Córdova, M.A.

RIIT Científica

Bimestre: Noviembre - Diciembre 2025

Vol. 13, No. 77

Cintillo Legal

RIIT REVISTA INTERNACIONAL DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN TECNOLÓGICA, Vol. 13, No. 76. Noviembre - Diciembre 2025, es una publicación bimestral editada y publicada por Universidad Autónoma de Coahuila, boulevard Venustiano Carranza s/n colonia República Oriente, C.P. 25280, Saltillo, Coahuila, Tel. (844) 414 85 82, <https://riit.com.mx/>, correo electrónico: publicacionesriit@uadec.edu.mx. Editor responsable: Dra. Antonia Mtz. Reserva de Derechos al Uso Exclusivo No. 04-2022-021512364600-102, ISSN: 2007-9753, ambos otorgados por el Instituto Nacional del Derecho de Autor. Responsable de la última actualización de este número, Departamento de Divulgación y Comunicación Digital de la Dirección de Investigación y Posgrado de la UAdeC, Q.F.B. Fernando García, Edificio "D" planta alta, unidad Camporredondo, Saltillo, Coahuila, C.P. 25280, Tel. (844) 414 85 82, fecha de última modificación: 01 Noviembre 2025.

Las opiniones expresadas por los autores no necesariamente reflejan la postura del editor de la publicación.

Queda prohibida la reproducción total o parcial de los contenidos e imágenes de la publicación sin previa autorización de Universidad Autónoma de Coahuila.

Título artículo/ Autores	Páginas
Análisis biomecánico de dos prototipos para implante trans-endodóntico de óxido de zirconia; estudio in silico González-Gurrola, E.R., Bermúdez-Jiménez, C.O., Baltazar-Hernández, V., Cepeda-Argüelles, O., Aguilera-Galaviz, L.A., Gaitán-Fonseca, C.I.	1 - 8
Validación de un Modelo TAM Extendido para la Adopción de Blockchain en el Reclutamiento de Capital Humano en Sistemas de Innovación Regional Cruz-Manzo, J., Ortuño-Barba, L.C., Alvarez-Aros, E.L.	9 - 31
Web System for the Management and Administration of Neuropsychological Tests: Design and Development Jarillo-Silva, A., García-Ramos, I.E., Muñoz-Ortiz, E., Cruz-Tolentino, J.A., Pérez-Meza, M.	32 - 50
Aplicaciones didácticas de redes neuronales mediante Excel® para Ingeniería Química y Bioquímica Calderón-Ramírez, M., Gaitán-Vélez, V., Quemada-Villagómez, M.L., Martínez-González, G.M., Jiménez-Islas, H.	51 - 88
Compuestos bioactivos y composición mineral en fruto y subproductos de mango cv. Ataulfo Serrano-Berumen, M.F., Sánchez-Chávez, E., Salas-Salazar, N.A., Soto-Caballero, M.C., Cruz-Álvarez, O., Flores-Córdova, M.A.	89 - 104



Revista Internacional de Investigación e Innovación Tecnológica

Página principal: www.riit.com.mx

Análisis biomecánico de dos prototipos para implante trans-endodóntico de óxido de zirconia; estudio *in silico*

Biomechanical Analysis of Two Prototypes for a Zirconia-Oxide Trans-Endodontic Implant; an *In-silico* Study

González-Gurrola, E.R.¹, Bermúdez-Jiménez, C.O.², Baltazar-Hernández, V.³, Cepeda-Argüelles, O.², Aguilera-Galaviz, L.A.², Gaitán-Fonseca, C.I.^{2*}

¹ Maestría en Ciencias Biomédicas, Universidad Autónoma de Zacatecas “Francisco García Salinas”.

² Unidad Académica de Odontología, Universidad Autónoma de Zacatecas “Francisco García Salinas”.

³ Maestría en Ciencia e Ingeniería de los Materiales, Universidad Autónoma de Zacatecas “Francisco García Salinas”.

erubenodonto@gmail.com; carlosber8@uaz.edu.mx; victor.baltazar@uaz.edu.mx; oscarcepeda@uaz.edu.mx; luisgalaviz_65@uaz.edu.mx; cgaitan@uaz.edu.mx*

Innovación tecnológica: Prototipos de implantes trans-endodónticos.

Área de aplicación industrial: Odontología.

Recibido: 12 marzo 2025

Aceptado: 09 septiembre 2025

Abstract

INTRODUCTION: Trans-Endodontic Implants (TEI) are artificial extensions securely anchored through a tooth apex to healthy tissues. Recently, materials such as Titanium (Ti), Nickel-Titanium (Ni-Ti) alloys, Chromium-Cobalt (Cr-Co), and Chromium-Cobalt-Molybdenum (Cr-Co-Mo) have been employed; however, their use has been limited due to corrosion or poor technique and case selection. Recently, Zirconium Oxide (ZrO₂) has been utilized due to its mechanical and aesthetic properties; computer-aided design (CAD) software allows the design of complex 3D structures and analysis of their behavior. **OBJECTIVE:** To design and produce two zirconium TEI models for future application as a restorative material in the oral cavity. **METHODOLOGY:** A 3D model of the TEI was created using SOLIDWORKS software, considering the implant measurements, which will be determined by the average length of incisors established in the literature; for the diameter the last rotary instrument used previously in root canal treatment was considered. **RESULTS:** The biomechanical characteristics of the thread were established, considering those that favor the osseointegration process. The results showed that the implant demonstrated adequate biomechanical characteristics. **CONCLUSIONS:** The designed implant showed promising

biomechanical properties, making it a potential alternative for the treatment of anterior teeth with apical segment fractures or extremely short roots. This design could provide a viable solution for restoring teeth with compromised roots.

Keywords: Prototype, Zirconia, Trans-endodontic implant, Biomechanical.

Resumen

INTRODUCCIÓN: Los Implantes Trans-Endodónticos (TEI) son extensiones artificiales ancladas de forma segura a través de un ápice del diente a los tejidos sanos. Recientemente se han empleado materiales como el Titanio (Ti), aleaciones de Níquel-Titanio (Ni-Ti), Cromo-Cobalto (Cr-CO), Cromo-Cobalto-Molibdeno (Cr-Co-Mo); sin embargo, su desuso se debió a la corrosión que producían o a una mala técnica y mala elección del caso. Recientemente se ha utilizado el Óxido de Zirconia (ZrO_2) debido a sus propiedades mecánicas y estéticas; el sistema de software CAD permite el diseño de estructuras complejas en 3D y el análisis de su comportamiento. **OBJETIVO:** Diseñar y producir dos modelos TEI de zirconia, para su futura aplicación como material restaurador en la cavidad bucal. **METODOLOGÍA:** Se realizó un modelo 3D del TEI utilizando el software SOLIDWORKS, tomando en cuenta las medidas del implante, las cuales serán determinadas por la longitud promedio de los incisivos establecida en la literatura; para el diámetro se consideró el último instrumento rotatorio utilizado previamente en el tratamiento de conductos. **RESULTADOS:** Se establecieron las características biomecánicas de la rosca considerando aquellas que favorecen el proceso de osteointegración. **CONCLUSIONES:** El implante demostró tener características biomecánicas adecuadas en cuanto a los resultados obtenidos. Este diseño podría ser una alternativa para el tratamiento de dientes anteriores que sufran fracturas en el segmento apical o en dientes con raíces extremadamente cortas.

Palabras clave: Prototipo, Zirconia, Implante trans-endodóntico, Biomecánico.

1. INTRODUCCIÓN

Los implantes trans-endodóntico (TEI) de óxido de zirconia representan una alternativa para mantener un órgano dental previo a la extracción dental para aquellos casos clínicos que presentan fractura dental, movilidad dental por reabsorción de raíces o por una complicación endodóntica-periodontal, sin embargo no soluciona problemas periodontales. De acuerdo con la literatura un estabilizador endodóntico se define como una prolongación metálica de la raíz, que tiene la finalidad de brindar estabilidad ósea a la pieza dental al aumentar su proporción corono-radicular (Rivera M.A, Solano R., 2000).

El desarrollo de los implantes trans-endodónticos se ha descrito desde los años 40, reconociéndose como el primer caso el reportado por Strock y Strock 1943 (Strock & Strock, 1987), el cual se trataba de un elemento metálico compuesto por Cromo, Cobalto-Molibdeno (Cr-Co-Mo). Durante los siguientes años se establecieron nuevas alternativas cambiando su diseño y composición, como ejemplos tenemos la colocación del implante en forma de agujas de Scialom (Scialom, 1962) utilizando tantalio. Chercheve en 1962 (Rivas, 2015) desarrolló un implante de Cromo-Cobalto en forma de agujas alargadas; Ramonte en 1965 inventó un tornillo auto-filetante utilizando titanio, Heinrich en 1971 uso

tantalio; actualmente varios autores sugieren el uso de limas manuales de acero inoxidable y níquel-titanio como estabilizadores (Prasad k., 2010), (Yadaba R.k, y cols. 2014), (Valdivia J.E., y cols. 2012), (Barzuna U., 2019), recientemente Larios C, y cols describen la citotoxicidad que pueden ocasionar los diferentes materiales que han sido utilizados en los TEI.

La topografía específicamente la micro y nanotopografía de un implante pueden modificar la forma y la actividad de las células mesenquimales lo que llevará a desarrollar una diferenciación de estas células hacia un linaje osteogénico (Pellegrini et al., 2018).

Las consideraciones clave incluyen el diámetro, forma y patrón de la rosca; un diámetro más amplio y una rosca cuadrada aumenta la superficie de contacto (Albrektsson & Wennerberg, 2004).

El Óxido de Zirconia (ZrO_2) es un material cerámico que se ha utilizado en las últimas décadas, en diversas áreas incluyendo la biomédica desde 1969 (Velazquez C., 2012). En odontología es un material de gran importancia clínica ya que posee características tales como color blanco marfil similar al de los dientes, alta resistencia mecánica y de tenacidad, estabilidad química, resistencia a la corrosión; estas propiedades han permitido el uso en confección de prótesis dentales y de endopostes, además de estas propiedades presenta una adecuada topografía superficial que le permite una mayor rugosidad y en la lógica de los biomateriales y reportes científicos resultados aceptables de osteointegración (Hafezeqoran, A., Koodaryan, R., 2017).

Los avances en la tecnología informática y las aplicaciones de software son en gran medida parte de los cambios tecnológicos que han llevado a la impresión 3D a posicionarse en el área biomédica. El

software CAD (Diseño Asistido por Computadora) nos permite crear objetos desde cero, pero en odontología y cirugía también tenemos fácil acceso a datos volumétricos en forma de datos de tomografía computarizada (TC), datos de tomografía computarizada de haz cónico (CBCT) y datos de escaneo de superficie óptica intraoral o de laboratorio (Dawood, A. y cols., 2015).

Un aspecto de este campo, la biomecánica, se refiere a la respuesta de los tejidos biológicos a las cargas aplicadas. La biomecánica utiliza las herramientas y métodos de la ingeniería mecánica aplicada para buscar relaciones estructura-función en materiales vivos (Bidez, M., Misch, C. 2005).

Una aplicación de ello es el método de elementos finitos (FEA), ha adquirido una gran importancia en la solución de problemas ingenieriles, físicos, biomédicos, etc., ya que permite resolver casos que hasta hace poco tiempo eran prácticamente imposibles de resolver por métodos matemáticos tradicionales (Oñate, E., 2010). Por lo tanto, este estudio tuvo como objetivo diseñar, producir y evaluar dos modelos de implante trans-endodóntico de zirconia para su futura aplicación como material de restauración en cavidad bucal por métodos de simulación digital (*in silico*).

2. MATERIALES Y MÉTODOS

2.1 Diseño de los prototipos trans-endodónticos.

Se llevó a cabo un estudio *in silico* con el objetivo de realizar prototipos digitales y analizar la función biomecánica mediante el estudio de elementos finitos optimizando tiempo y material. Se desarrollaron dos prototipos tridimensionales (3D) de implante trans-endodóntico de zirconia, los cuales fueron creados utilizando el software SOLIDWORKS® (SolidWorks corp, Concord, Massachusetts, EE.UU.) a partir de una forma cilíndrica y detallando el

roscado con extrusiones. Para establecer los parámetros de longitud y diámetro para los prototipos se emplearon las medidas promedio reportadas en la literatura de la anatomía de incisivos superiores mismos que deberían tener el tratamiento de conductos estableciendo a la última lima con la que es posible instrumentar sin dañar o debilitar la estructura radicular (Ahlbrecht et al., 2017). Así mismo, las características mecánicas de la rosca como el paso, la profundidad y el ancho fueron aquellas que favorecían el proceso de osteointegración, esto hace referencia al proceso en el cual los osteocitos permiten integrarse a la superficie del implante generando una mejor estabilidad (Delgado-Ruiz et al., 2019).

2.2 Análisis de elementos finitos (FEA).

Una vez que se completó el procedimiento de modelado 3D de los prototipos, se exportó al software comercial ANSYS (Workbench, Swanson Analysis, Huston, PA, EE. UU.). Ambos prototipos fueron sometidos al análisis de elementos finitos considerando las propiedades de la Zirconia (Suárez-B, N. y cols, 2015) (Talmazov, G. y cols. 2020) y se estableció un vector de fuerza de 220 N el cual se considera como el de una fuerza de mordida normal a través del eje longitudinal a 0 grados de inclinación (Ferrario, V. F., 2004). Se revisó cuantitativamente la tensión de Von Mises y la distribución de la deformación equivalente a lo largo del implante.

3. RESULTADOS

3.1 Diseño de los implantes trans-endodónticos.

Se realizaron dos diseños de implante trans-endodóntico (P1-P2) mediante el Software “SOLIDWORKS” (SolidWorks Corporation, Concord, MA, EE. UU) considerando la longitud promedio de los incisivos superiores menos el tamaño de la corona de acuerdo a (Ash y Cols) que debe ser anclado al hueso de 4 a 6 mm posterior al ápice, por lo que la longitud de dicho implante es de 17 mm.

En cuanto a el diámetro del primer prototipo (P1), se estableció tomando en cuenta el último instrumento rotatorio que se utiliza en el tratamiento de conductos previo en los incisivos, considerado que deben ser instrumentados con una lima de acabado F3 con el sistema Protaper Universal identificado con un anillo azul en el mango la cual tiene una conicidad de 0.09 por cada milímetro de parte activa y una longitud activa de 16 mm, por lo que el diámetro final será de 3 mm (Figura 1a). En cuanto a el tamaño y forma de la rosca, se consideró en tipo V, con un paso de 1mm y una profundidad de 0.3 mm (Figura 1b y 1c).

En el prototipo 2 (P2) la longitud y un diámetro fue el mismo que en el prototipo 1 (Figura 1d), sin embargo, se consideró una rosca cuadrangular con un paso de 1mm y una profundidad de 0.3mm., así como un extremo apical redondeado (Figura 1e y 1f).

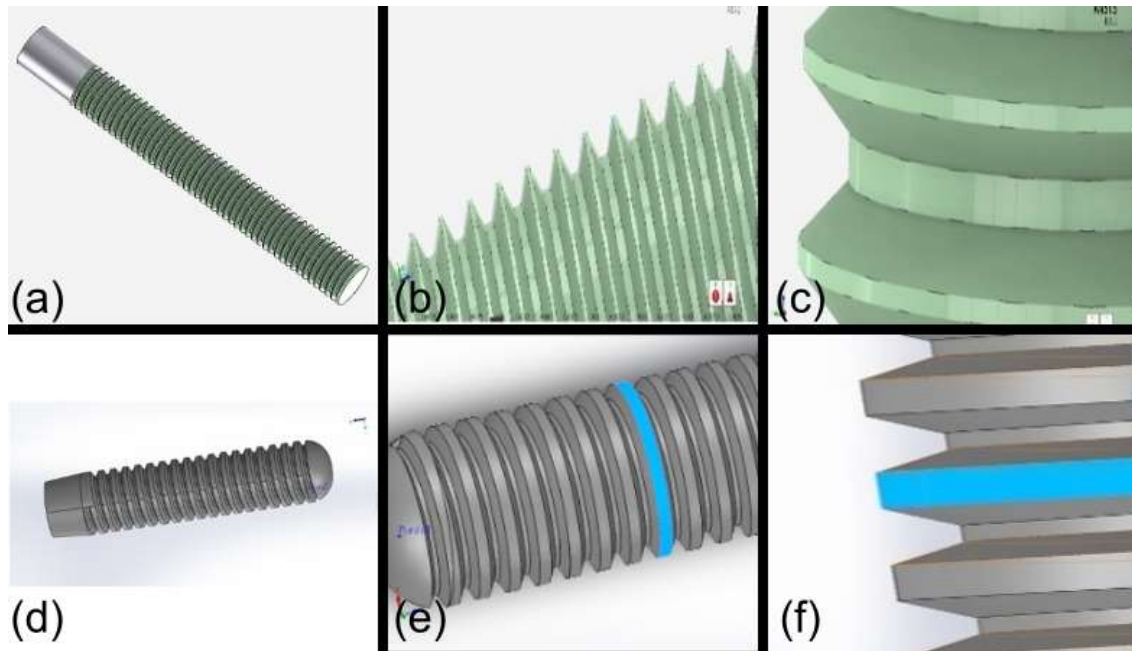


Figura 1. (a) Longitud final del P1 con un tamaño de 16 mm y un diámetro de 3 mm. (b) Rosca del P1. (c) Forma de la rosca de P1 en tipo V. (d) Longitud final del P2 con un tamaño de 16 mm y un diámetro de 3 mm. (e) Forma de la rosca del P2. (f) Forma de la rosca de P2 de tipo cuadrangular.

3.2 Análisis de elementos finitos (FEA).

El tipo de mallado fue de tipo rígido, se rectificó para evitar errores usando el software Meshmixer (Autodesk/Meshmixer 20017) y se describen las características de los elementos y nodos formados en el FEA (Tabla 1). Los colores en el FEA indican la tensión que se ejerce en la estructura del implante siguiendo una escala de rojo/naranja de mayor tensión, a una menor de verde/azul.

Las mediciones de datos a lo largo de las superficies del implante en las regiones designadas del FEA mostraron que, en general, P1 tienen una mayor tensión en la

parte superior observada con un color rojo/naranja donde comienza la fuerza, pero a su vez se va distribuyendo a lo largo del mismo en la parte externa de las roscas tomando un color verde y en la parte interna de la misma un color azul, se puede observar que la concentración mínima de Von Mises es 4.13001 N/m^2 y una máxima de Von Mises de $3.227 \times 10^2 \text{ N/m}^2$ (Figura 2a y 2b).

P2 disipa la tensión en toda la estructura con un patrón de color azul mismo que indica que no existe distorsión. Se obtuvieron las tensiones de Von Mises con una mínima de $4.48 \times 10^{-8} \text{ N/mm}^2$ (MPa) y una máxima 38.5 N/mm^2 (MPa) (Figura 2c y 2d).

Tabla 1. Características de la malla y número de elementos y nodos formados en ambos prototipos.

CARACTERÍSTICAS	P1	P2
Tipo de malla	Malla sólida	Malla solida
Mallador utilizado	Malla estándar	Malla estándar
Puntos jacobianos	4 Puntos	16 puntos
Tamaño de elementos	0.691442 mm	0.733609 mm
Tolerancia	0.0345721 mm	0.0366805 mm
Número total de nodos	8898	30275
Número total de elementos	4930	19903
Cociente máximo de aspecto	26.35	14.844
% de elementos cuyo cociente de aspecto es < 3	88.8	92
% de elementos cuyo cociente de aspecto es > 10	0.203	0.0502
% de elementos distorsionados (Jacobiana)	0	0

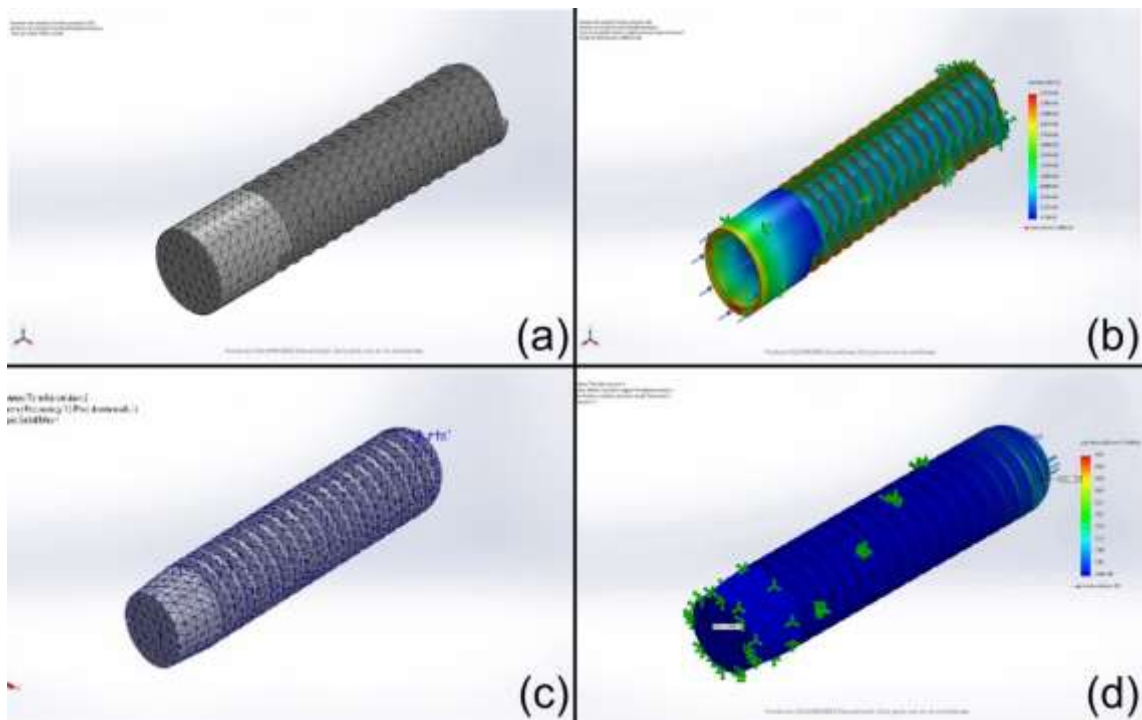


Figura 2. (a) Se observa el mallado rectificado del implante de P1. (b) Se aprecia el análisis de fuerzas mediante elementos finitos del mismo prototipo sometido a una carga de 220 N en el eje longitudinal, donde la tensión de Von Mises se encuentra en una escala de colores que va desde azul (menor tensión) hasta rojo (mayor tensión). (c) Se observa el mallado de la estructura con una rectificación del P2. (d) El análisis de fuerzas mediante elementos finitos sometido a una carga de 220 N en el eje longitudinal del mismo prototipo, donde la tensión de Von Mises se encuentra en una escala de colores que va desde azul (menor tensión) hasta rojo (mayor tensión).

4. DISCUSIÓN

Son muchos y conocidos los factores patológicos que obligan a la extracción dentaria entre los que podemos destacar fractura radicular, reabsorción ósea por movimientos ortodóntico o un proceso infeccioso o patológico, pero frecuentemente es posible prolongar la permanencia del diente mediante la aplicación de un implante trans-

endodóntico pasando a través del conducto radicular del mismo y anclándose al tejido óseo aproximadamente 4 milímetros después de la raíz, contribuyendo a aumentar la estabilidad del diente.

Los prototipos diseñados en este estudio *in silico* y sometidos al análisis de elementos finitos demuestran tener un comportamiento biomecánico aceptable

para soportar fuerzas de masticación que se ejercen en los incisivos superiores oscilando entre 150 a 200 N (Delgado R. y cols, 2019); la concentración de la tensión se distribuyó en la parte superior y a lo largo de las roscas en la parte externa de las mismas en P1, en cuanto a P2, la tensión se distribuye más uniforme y de una fuerza menor en la estructura, con esto se comprueba que la fuerza de tensión de Von Mises no sobrepasa el límite elástico del material en ambos prototipos por lo que no existe una deformación en su estructura. Esta estabilidad biomecánica es un factor importante para el éxito del implante en los primeros años después de la implantación, y la salud periodontal es la siguiente prioridad (Chang. y cols., 2019). Incluso después de la perfecta integración del implante y de proporcionar una adecuada interfaz implante-hueso, la carga intensa y sucesiva podría aumentar la probabilidad de falla del implante dental. Cuanto mayor sea la tensión en la interfaz implante-hueso, mayor será la posibilidad de reabsorción ósea y fallo del implante (Haiat. y cols., 2014) (Li. y cols., 2020).

Por lo tanto, la mayoría de los diseños de cuerpos de implantes actuales utilizan una forma de tipo tornillo, aprovechando el aumento del área de superficie por roscas, la capacidad de autorroscado, la estabilidad mecánica y la transferencia de carga. Las características de la rosca tienen la capacidad de convertir las cargas oclusales en cargas compresivas más favorables en la interfaz del hueso (Resnik., 2020). La tensión distribuida, transferida a través de diversos tipos de diseños de hilos, influye aún más en el comportamiento de las células y los tejidos hacia la curación ósea durante el proceso de osteointegración.

5. CONCLUSIONES

Estos diseños pueden ser una alternativa para el tratamiento de dientes anteriores superiores que sufren fracturas en el segmento apical o con raíces extremadamente cortas; en el análisis

biomecánico demuestran tener la resistencia necesaria para soportar las fuerzas de masticación y propiciar mejor comportamiento en la osteointegración.

La valoración *in silico* con relación a datos volumétricos de densidades óseas (relación ITE- hueso- diente) proporcionaría un panorama más amplio sobre la distribución de las fuerzas en dichas estructuras, al igual que los estudios *in vitro* e *in vivo* para el comportamiento de osteointegración.

6. REFERENCIAS

- Rivera Briones, M.A., y Solano Robles, R. (2000). Estabilizadores endodóncicos, casos clínicos, revisión bibliográfica. *Práctica odontológica*. vol. 21, no. 7. 12-16 pp.
- Strock, A., & Strock, M. J. T. J. o. o. i. (1987). Method of reinforcing pulpless anterior teeth. *13*(3), 527-530.
- Betancourt Rodríguez, E. (1991). Implantes de agujas con la técnica del Doctor Jacques Scialom. *Pract. Odontol*, 57-8.
- Rivas, A. S. (2015). Implante Transendodóntico De Cromo-Cobalto. *Revista Kiru*, 1(2).
- Barzuna Ulloa, Mayid. (2019). Implantes endodónticos - Vitalium vs. Titanio Caso clínico con un seguimiento de 18 años. *Odontología Vital*, (31), 67-77.
- Larios Cervantes, A., Aguilera Galaviz, A., Aceves, C. y Gaitan Fonseca, C. Diseño, fabricación y evaluación clínica de implantes trans-endodónticos de óxido de zirconio. *Revista Iberoamericana de Ciencias* ISSN 2334-2501, vol 3, número 1 Universidad Autónoma de Zacatecas, Zacatecas - México. RelbCi - Febrero 2016.
- Velázquez-Cayón, R., Vaquero-Aguilar, C., Torres-Lagares, D., Jiménez-Melendo, M., & Gutiérrez-Pérez, J. L. (2012). Mechanical resistance of zirconium implant abutments:

A review of the literature. *Medicina oral, patología oral y cirugía bucal*, 17(2), e246.

Hafezeqoran, A., & Koodaryan, R. (2017). Effect of zirconia dental implant surfaces on bone integration: a systematic review and meta-analysis. *BioMed research international*, 2017.

Bidez, M., & Misch, C. (2005). Clinical biomechanics in implant dentistry. *Dental Implant Prosthetics*, ed, 2, 95-106.

Dawood, A., Marti, B. M., Sauret-Jackson, V., & Darwood, A. (2015). 3D printing in dentistry. *British dental journal*, 219(11), 521-529.

OÑATE, E. Structural analysis with the finite element methods. Linear Statics. CIMNE, Barcelona: Springer Verlag, 2010, Vol.

Suárez-B, N. T., Escobar-Restrepo, J. C., Latorre-Correa, F., & Villarraga-Ossa, J. A. (2015). Comportamiento estático de un pilar de circonia sometido a envejecimiento artificial: método de elementos finitos. *Revista Facultad de Odontología Universidad de Antioquia*, 27(1), 30-62.

Talmazov, G., Veilleux, N., Abdulmajeed, A., & Bencharit, S. (2020). Finite element analysis of a one-piece zirconia implant in anterior single tooth implant applications. *PloS one*, 15(2), e0229360.

Ferrario, V. F., Sforza, C., Zanotti, G., & Tartaglia, G. M. (2004). Maximal bite forces in healthy young adults as predicted by surface electromyography. *Journal of dentistry*, 32(6), 451-457.

Delgado-Ruiz, R. A., Calvo-Guirado, J. L., & Romanos, G. E. (2019). Effects of occlusal forces on the peri-implant-bone interface stability. *Periodontology 2000*, 81(1), 179-193.

Haiat, G., Wang, H. L., & Brunski, J. (2014). Effects of biomechanical properties of the bone-implant interface on dental implant stability: from in silico approaches to the patient's mouth. *Annual review of biomedical engineering*, 16, 187-213.

Chang, J. Z. C., Tsai, P. I., Kuo, M. Y. P., Sun, J. S., Chen, S. Y., & Shen, H. H. (2019). Augmentation of DMLS biomimetic dental implants with weight-bearing strut to balance of biologic and mechanical demands: from bench to animal. *Materials*, 12(1), 164.

Resnik, R. (Ed.). (2020). *Misch. Implantología Contemporánea*. Elsevier.

Ahlbrecht, C. A., Ruellas, A. C. d. O., Paniagua, B., Schilling, J. A., McNamara, J. A., Jr., & Cevidanes, L. H. S. (2017). Three-dimensional characterization of root morphology for maxillary incisors. *PLOS ONE*, 12(6), e0178728. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0178728>

Albrektsson, T., & Wennerberg, A. (2004). Oral implant surfaces: Part 1--review focusing on topographic and chemical properties of different surfaces and in vivo responses to them. *Int J Prosthodont*, 17(5), 536-543.

Delgado-Ruiz, R. A., Calvo-Guirado, J. L., & Romanos, G. E. (2019). Effects of occlusal forces on the peri-implant-bone interface stability. *Periodontol 2000*, 81(1), 179-193. <https://doi.org/10.1111/prd.12291>

Pellegrini, G., Francetti, L., Barbaro, B., & Del Fabbro, M. (2018). Novel surfaces and osseointegration in implant dentistry. *J Investig Clin Dent*, 9(4), e12349. <https://doi.org/10.1111/jicd.12349>

Strock, A., & Strock, M. J. T. J. o. o. i. (1987). Method of reinforcing pulpless anterior teeth. 13(3), 527-530.



Revista Internacional de Investigación e Innovación Tecnológica

Página principal: www.riit.com.mx

Validación de un Modelo TAM Extendido para la Adopción de Blockchain en el Reclutamiento de Capital Humano en Sistemas de Innovación Regional

Validation of an Extended TAM Model for Blockchain Adoption in Human Capital Recruitment in Regional Innovation Systems

Cruz-Manzo, J.^{1*}, Ortuño-Barba, L.C.², Alvarez-Aros, E.L.³

¹ División de Estudios de Posgrados e Investigación Tecnológico Nacional de México/ Instituto Tecnológico de Tehuacán.

² Departamento de Ciencias Económico Administrativo Tecnológico Nacional de México/ Instituto Tecnológico de Tehuacán.

³ Universidad Católica de El Salvador, C.P. 02010, Santa Ana, El Salvador.

jessica.cm@tehuacan.tecnm.mx*; luisalos.ob@tehuacan.tecnm.mx; erick.alvarez@catolica.edu.sv

Innovación Tecnológica: Validación empírica de un modelo TAM extendido que explica la adopción de blockchain en recursos humanos en clústeres tecnológicos mexicanos.

Área de aplicación industrial: Clústeres tecnológicos del sector software con enfoque en innovación, desarrollo de soluciones digitales y gestión organizacional.

Recibido: 18 agosto 2025

Aceptado: 19 septiembre 2025

Abstract

This study validates an extended Technology Acceptance Model (TAM) applied to the context of blockchain technology adoption in recruitment and selection processes within Mexican technology clusters. Based on Davis' Technology Acceptance Model (TAM) theory, expanded with external constructs identified in the exploratory study (sustainability, labour inclusion, supervisor technological competence, risk assessment, and trained human capital), the general hypothesis that these factors, together with perceived usefulness and perceived ease of use, significantly influence the attitude, intention and effective use of blockchain technology in recruitment and selection processes was tested. These external variables were previously identified through a qualitative case study conducted in a technology cluster, allowing for their subsequent quantitative operationalization. The empirical validation of the model was carried out in four technology clusters in the sector in Mexico, comprising a total of 31 companies. The methodological design was quantitative, non-experimental, cross-sectional, and correlational, using a non-probabilistic

sample of 256 professionals. IBM SPSS Statistics software (version 29) was used to perform reliability analyses ($\alpha > .86$), Pearson correlations (r ranging from .709 to .883), Exploratory Factor Analysis (EFA) with Varimax rotation, and Multiple Linear Regression. Finally, the complete model was validated through Structural Equation Modeling (SEM) using IBM SPSS Amos (version 29), yielding satisfactory fit indicators (CFI = .951, RMSEA = .045, SRMR = .048). The findings indicate that perceived usefulness and attitude towards use are key mediating variables between the external constructs and the intention to use. Perceived risk showed a significant negative influence, whereas the supervisor technological competence, sustainability, and trained human capital had a positive impact on perceived usefulness and intention to use. It is concluded that the use of blockchain in recruitment and selection enhances the transparency, security, and efficiency of processes, and that its adoption—beyond perceived usefulness and ease of use—is driven by sustainability, labor inclusion, technological competence, risk management, and human capital training. The results not only deepen the theoretical understanding of the phenomenon but also provide practical guidelines for implementing this technology in organizational settings. This study represents an original and pioneering contribution in the Latin American context, as it is the first to validate an extended TAM model with empirical evidence on the use of blockchain in recruitment and selection processes.

Key words: Blockchain, TAM model, Recruitment, Technology adoption, Technology clusters.

Resumen

El presente estudio valida un modelo extendido del Modelo de Aceptación de Tecnología (TAM) aplicado al contexto de adopción de la tecnología blockchain en procesos de reclutamiento y selección dentro de clústeres tecnológicos mexicanos. Con base en la teoría del Modelo de Aceptación de la Tecnología (TAM) de Davis, ampliado con constructos externos identificados en el estudio exploratorio (sostenibilidad, inclusión laboral, competencia tecnológica del supervisor, evaluación del riesgo y capital humano capacitado), se contrastó la hipótesis general de que estos factores, junto con la utilidad percibida y la facilidad de uso percibida, influyen significativamente en la actitud, la intención y el uso efectivo de la tecnología blockchain en procesos de reclutamiento y selección. Estas variables externas fueron previamente identificadas mediante un estudio de caso cualitativo en un clúster tecnológico, permitiendo su posterior operacionalización cuantitativa. La validación empírica del modelo se llevó a cabo en cuatro clústeres tecnológicos del sector software en México, conformados por un total de 31 empresas. El diseño metodológico fue cuantitativo, no experimental, transeccional y correlacional, con una muestra no probabilística de 256 profesionales. Se utilizó el software IBM SPSS Statistics (versión 29) para realizar los análisis de confiabilidad ($\alpha > .86$), correlaciones de Pearson (r entre .709 y .883), Análisis Factorial Exploratorio (AFE) con rotación Varimax y Regresión Lineal Múltiple. Finalmente, se validó el modelo completo mediante Modelado de Ecuaciones Estructurales (SEM) utilizando IBM SPSS Amos (versión 29), con indicadores de ajuste absoluto, incremental, y parsimonia satisfactorios (CFI = .951, RMSEA = .045, SRMR = .048). Los hallazgos muestran que la utilidad percibida y la

actitud hacia el uso son variables mediadoras clave entre los constructos externos y la intención de uso. La percepción de riesgo demostró una influencia negativa significativa, mientras que la competencia tecnológica del supervisor, la sostenibilidad y el capital humano capacitado incidieron positivamente en la percepción de utilidad e intención de uso. Se concluye que el uso de blockchain en reclutamiento y selección mejora la transparencia, seguridad y eficiencia de los procesos, y que su adopción, además de la utilidad y facilidad de uso percibidas, se ve impulsada por la sostenibilidad, inclusión laboral, competencia tecnológica, gestión del riesgo y capacitación del capital humano. Los resultados permiten no solo profundizar en la comprensión teórica del fenómeno, sino también ofrecer lineamientos prácticos para la implementación de esta tecnología en entornos organizacionales. Este trabajo representa una contribución original y pionera en el contexto latinoamericano, al ser el primer estudio que valida un modelo TAM extendido con evidencia empírica en el uso de blockchain en procesos de reclutamiento y selección de personal.

Palabras clave: Blockchain, Modelo TAM, Reclutamiento, Adopción tecnológica, Clústeres tecnológicos.

Introducción

En la última década, el blockchain se ha consolidado como una de las tecnologías emergentes más disruptivas, caracterizada por su capacidad para garantizar la trazabilidad, seguridad y descentralización de datos mediante un sistema de registros inmutables y distribuidos. Originalmente concebido como la base tecnológica del Bitcoin, su aplicabilidad ha trascendido el ámbito financiero, extendiéndose a sectores como la logística, la salud, la educación, la industria alimentaria, la propiedad intelectual y el comercio internacional [1].

Particularmente, en el ámbito de los recursos humanos, el blockchain ha comenzado a utilizarse para validar antecedentes laborales, verificar certificaciones académicas y generar contratos digitales con mayor seguridad y rapidez. Estas funcionalidades tienen un impacto directo en los procesos de reclutamiento y selección, donde la confiabilidad de los datos y la eficiencia de los procedimientos resultan fundamentales. No obstante, la literatura sobre su adopción en esta área aún es escasa, especialmente en contextos latinoamericanos, donde los niveles de digitalización organizacional son

heterogéneos y donde persisten brechas en habilidades tecnológicas [2].

Ante este panorama, resulta necesario entender qué factores favorecen o inhiben la adopción del blockchain en funciones estratégicas del talento humano. Para ello, se recurre al Modelo de Aceptación de Tecnología (TAM), desarrollado por Davis [3], el cual ha sido ampliamente utilizado para explicar la intención de uso de nuevas tecnologías en entornos organizacionales. Este modelo plantea que la utilidad percibida y la facilidad de uso percibida son determinantes clave del comportamiento de adopción. Sin embargo, su aplicación en entornos complejos y tecnologías emergentes como el blockchain requiere ser complementada con factores contextuales que reflejen las condiciones organizacionales y sociales específicas [4].

En ese sentido, el presente estudio extiende el modelo TAM al integrar cinco constructos externos: sostenibilidad, inclusión laboral, competencia tecnológica del supervisor, evaluación del riesgo y capital humano capacitado. Estos constructos fueron identificados a partir de un estudio de caso

cualitativo desarrollado en un clúster tecnológico mexicano, el cual permitió detectar temáticas emergentes asociadas a la adopción de blockchain en procesos de reclutamiento y selección. Dicho estudio cualitativo reveló que, además de las percepciones individuales sobre facilidad y utilidad, factores como la conciencia ambiental [5], la automatización con enfoque humano [6], el liderazgo tecnológico [7], la percepción de riesgo [8] y la formación de capital humano [9] influyen significativamente en la disposición a utilizar blockchain en entornos organizacionales. La sistematización de este estudio cualitativo sentó las bases para el diseño de un instrumento de medición validado posteriormente de manera cuantitativa.

Este trabajo se basa en la Teoría de la Aceptación de la Tecnología (TAM) desarrollada por Davis [3], paradigma que explica la adopción tecnológica a partir de la utilidad percibida y la facilidad de uso percibida. Está sustentado principalmente en los trabajos de Venkatesh y Davis [4], quienes han ampliado el modelo original para incorporar variables externas que permitan contextualizarlo en entornos organizacionales específicos. En este estudio, dichas variables externas incluyen sostenibilidad, inclusión laboral, competencia tecnológica del supervisor, evaluación del riesgo y capital humano capacitado, identificadas como determinantes en la adopción de tecnologías disruptivas como blockchain en procesos de reclutamiento y selección. El uso del modelo TAM extendido se justificó por su capacidad para capturar tanto los aspectos individuales como organizacionales que inciden en la aceptación de una tecnología. Su flexibilidad para incorporar variables externas y su amplio reconocimiento en investigaciones previas lo convierten en una herramienta idónea para explorar fenómenos de adopción tecnológica en sectores específicos como los clústeres tecnológicos del software [10].

Este artículo presenta los resultados de la validación empírica del modelo TAM extendido aplicado al caso de la adopción de blockchain en procesos de reclutamiento y selección en México. El estudio se llevó a cabo en cuatro clústeres tecnológicos del sector software, que agrupan un total de 31 empresas. El diseño metodológico fue cuantitativo, no experimental, transeccional y correlacional, con una muestra no probabilística de 256 profesionales. Se utilizó el software IBM SPSS Statistics (versión 29) para los análisis de confiabilidad ($\alpha > .86$), correlaciones de Pearson, Análisis Factorial Exploratorio (AFE) con rotación Varimax y Regresión Lineal Múltiple. Finalmente, se validó el modelo completo mediante Modelado de Ecuaciones Estructurales (SEM) utilizando IBM SPSS Amos (versión 29), obteniéndose indicadores de ajuste satisfactorios (CFI = .951, RMSEA = .045, SRMR = .048).

Tecnología Blockchain: principios, usos y aplicaciones

La tecnología blockchain se basa en un sistema de registro distribuido, inmutable y transparente que permite el almacenamiento seguro y verificable de información sin la necesidad de intermediarios. Su estructura está compuesta por bloques de datos enlazados cronológicamente mediante funciones criptográficas, lo que garantiza la integridad de la información y la resistencia a manipulaciones externas. La descentralización es una de sus características más innovadoras, ya que elimina la dependencia de una autoridad central para validar las transacciones, y en su lugar recurre a un consenso distribuido entre los nodos participantes [11].

Estas propiedades han hecho del blockchain una herramienta versátil, con aplicaciones destacadas en sectores como las finanzas (por ejemplo, mediante criptomonedas y contratos

inteligentes), la logística (gestión de cadenas de suministro con trazabilidad en tiempo real), la salud (almacenamiento seguro de historiales médicos), la educación (certificación de títulos académicos) y la industria alimentaria (control de calidad y

trazabilidad de productos) [12][13]. Una síntesis de estas aplicaciones se presenta en la Tabla 1, donde se detallan los beneficios específicos en cada sector, evidenciando la transversalidad de la tecnología.

Tabla 1. Aplicaciones de Blockchain por Sector y Beneficios Esperados.

Sector	Aplicaciones clave	Beneficios esperados
Finanzas	Criptomonedas, contratos inteligentes	Reducción de costos, mayor seguridad
Logística	Trazabilidad de productos	Transparencia, eficiencia operativa
Salud	Registro inmutable de historiales médicos	Privacidad, integridad de datos
Educación	Certificación de grados académicos	Verificabilidad, antifraude
Recursos Humanos	Verificación de antecedentes, contratos digitales	Agilidad, confiabilidad, reducción de fraude

Fuente: Elaboración propia con base en [12][13][14].

En el ámbito de los recursos humanos, el blockchain ha comenzado a transformar los procesos tradicionales de reclutamiento y selección, permitiendo validar antecedentes laborales, verificar titulaciones académicas de manera automática, emitir contratos digitales y conservar la trazabilidad del expediente del candidato en un entorno seguro. Estas funcionalidades no solo aumentan la eficiencia del proceso, sino que también reducen significativamente los riesgos de fraude documental y mejoran la

experiencia del candidato y del empleador [15].

A modo ilustrativo, la Figura 1 representa la forma en que blockchain interviene en las distintas etapas del proceso de reclutamiento, desde la publicación de vacantes hasta la contratación y el seguimiento del desempeño. Este enfoque propone un modelo más ágil, confiable y descentralizado para la gestión del talento humano.



Figura 1. Procesos de reclutamiento.

Esta capacidad de automatización, validación y seguridad que brinda el blockchain es especialmente relevante en clústeres tecnológicos, donde la adopción de tecnologías emergentes es acelerada y donde los procesos de selección demandan eficiencia, transparencia y precisión [16]. No obstante, aún existen barreras para su implementación, entre las que se encuentran

el desconocimiento sobre la tecnología, la falta de infraestructura digital en algunas empresas, y la resistencia al cambio organizacional [17].

Estas consideraciones refuerzan la necesidad de estudiar no solo la factibilidad técnica del blockchain, sino también los factores que influyen en su adopción, especialmente en

funciones estratégicas del talento humano. De ahí la pertinencia de emplear modelos como el TAM extendido para evaluar la intención de uso de esta tecnología en contextos reales como los clústeres mexicanos del sector software.

Modelo de Aceptación de Tecnología (TAM): fundamentos y extensiones

El Modelo de Aceptación de Tecnología (TAM, por sus siglas en inglés) fue desarrollado por Fred D. Davis en 1989 como una adaptación del modelo de acción razonada de Fishbein y Ajzen, con el propósito de explicar y predecir la aceptación de tecnologías de información en contextos organizacionales [18]. En su formulación original, el TAM establece que dos variables —la utilidad percibida y la facilidad de uso percibida— son determinantes claves de la actitud hacia el uso de una tecnología, lo cual a su vez influye directamente sobre la intención de uso y el uso real del sistema [19].

La utilidad percibida se refiere al grado en que un individuo cree que el uso de una tecnología mejorará su desempeño laboral, mientras que la facilidad de uso hace referencia a la creencia de que emplear dicha tecnología no requerirá un esfuerzo significativo [20]. Estas relaciones han sido validadas en numerosos estudios empíricos a

lo largo de más de tres décadas, consolidando al TAM como uno de los modelos más robustos y replicados en el ámbito de los sistemas de información [21].

No obstante, el carácter general del TAM ha motivado la incorporación de variables externas que permitan adaptarlo a contextos específicos. Así, han surgido extensiones como el TAM2, propuesto por Venkatesh y Davis [22], que integra factores sociales y cognitivos, o el TAM3, que añade la influencia del entorno organizacional y la experiencia del usuario [23]. Estas ampliaciones han demostrado que el comportamiento de adopción tecnológica es multifactorial y que la inclusión de constructos contextuales mejora el poder explicativo del modelo.

En el presente estudio, se optó por extender el TAM clásico a partir de cinco constructos externos derivados de un estudio de caso cualitativo realizado en un clúster tecnológico del sector software. Estos constructos —sostenibilidad, inclusión laboral, competencia tecnológica del supervisor, evaluación del riesgo y capital humano capacitado— fueron seleccionados por su relevancia en la literatura y su aparición como temas emergentes durante el análisis cualitativo [24].

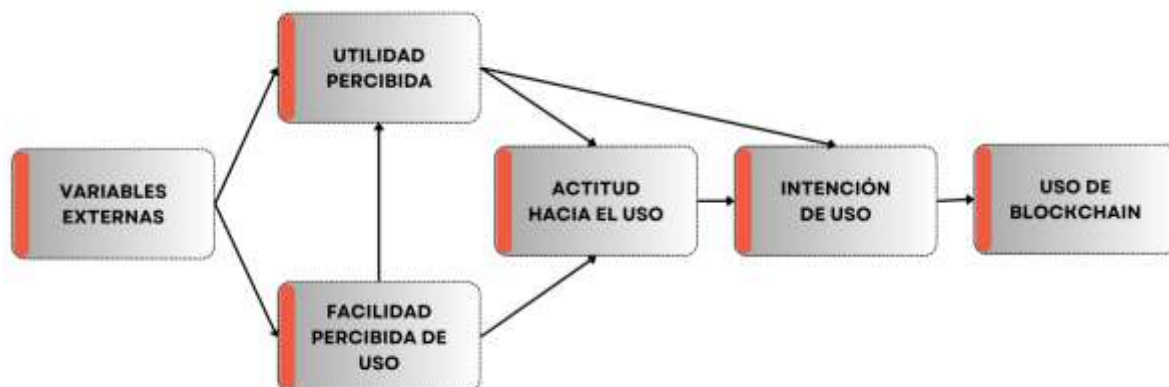


Figura 2. Modelo TAM Original.

Fuente: Elaboración propia a partir del modelo TAM [3].

Esta decisión responde a la necesidad de contextualizar el modelo a una tecnología emergente como el blockchain, la cual implica no solo desafíos técnicos, sino también barreras sociales, organizacionales y perceptuales. Tal como lo han señalado autores como Agarwal y Prasad [25], la adaptación del TAM a tecnologías disruptivas requiere una adecuada incorporación de variables que reflejen la complejidad del entorno en que se adopta.

Además, la elección del TAM como marco teórico se justificó por su capacidad predictiva y su flexibilidad metodológica. Su estructura modular permite aplicar modelos de ecuaciones estructurales para validar empíricamente las relaciones entre constructos, lo cual resulta especialmente útil en estudios con enfoques cuantitativos como el presente [26].

Por lo tanto, esta investigación no solo adapta el TAM al contexto latinoamericano, sino que

lo complementa con dimensiones teóricas relevantes para el ámbito de recursos humanos y el uso de blockchain, aportando así un modelo integrador, empíricamente validado y conceptualmente robusto.

Variables externas propuestas en el modelo TAM extendido

Con el objetivo de adaptar el Modelo de Aceptación de Tecnología (TAM) al contexto específico de la adopción de blockchain en procesos de reclutamiento y selección dentro de clústeres tecnológicos mexicanos, se integraron cinco variables externas que surgieron como temas emergentes a partir de un estudio de caso cualitativo previo. En la Figura 3 se muestra como estas variables reflejan factores contextuales de tipo organizacional, tecnológico y humano que influyen significativamente en la percepción y disposición al uso de esta tecnología emergente [24].

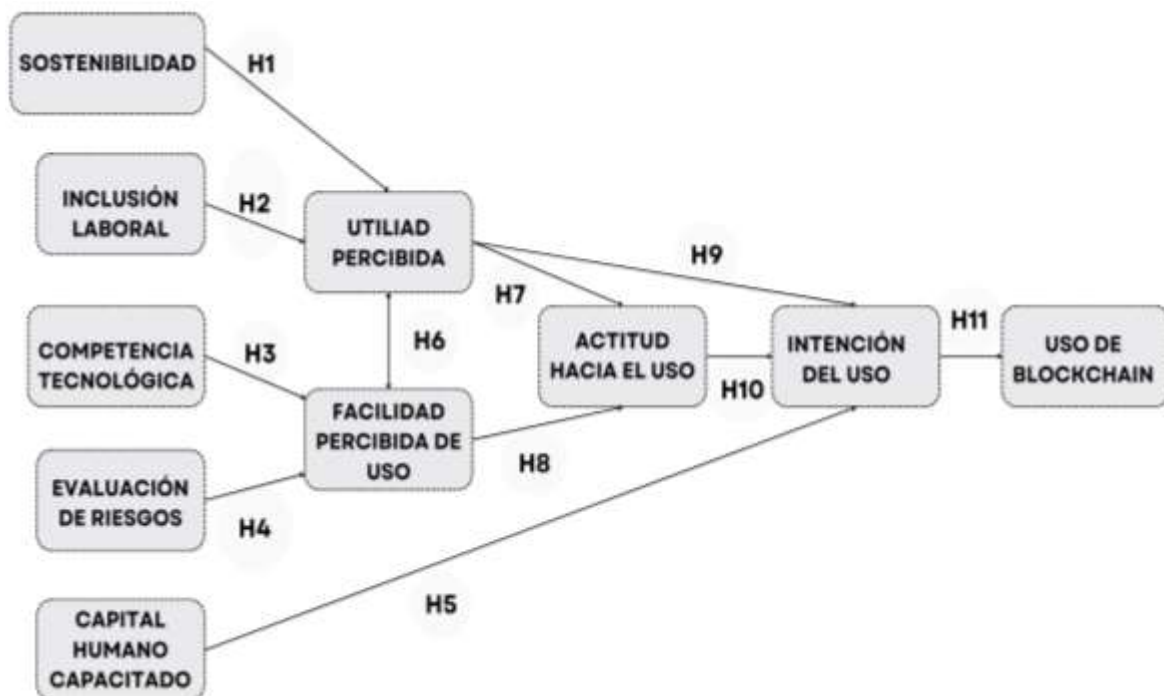


Figura 3. Modelo TAM Extendido.

Fuente: Elaboración propia.

Sostenibilidad. Esta variable se refiere a la conciencia ambiental que motiva la adopción de tecnologías más limpias, eficientes y responsables con el medio ambiente. En el contexto del blockchain, la sostenibilidad se relaciona con el interés organizacional por digitalizar procesos y reducir el uso de papel, mejorar la trazabilidad ética en las contrataciones y minimizar la huella ecológica de sus operaciones [27]. La literatura destaca que la sostenibilidad organizacional no solo responde a imperativos éticos, sino también estratégicos, al generar valor reputacional y eficiencia operativa [28].

Inclusión laboral. Este constructo aborda la dimensión humana en la automatización de procesos de talento. En particular, se enfoca en cómo las organizaciones perciben que el blockchain puede facilitar un reclutamiento más justo, transparente y sin sesgos, permitiendo mayor participación de perfiles diversos. Así mismo, contempla el equilibrio entre eficiencia tecnológica y enfoque humanista, esencial para preservar la equidad en la transformación digital [29]. Estudios recientes subrayan que la inclusión no solo mejora los resultados de negocio, sino que también incrementa la aceptación de tecnologías disruptivas cuando se perciben como socialmente justas [30].

Competencia tecnológica del supervisor. Esta variable evalúa el nivel de liderazgo digital y conocimiento técnico del personal directivo responsable de los procesos de reclutamiento. Se basa en la premisa de que la capacidad del supervisor para comprender e implementar soluciones tecnológicas influye directamente en la aceptación y el uso efectivo del blockchain por parte de sus equipos [31]. Tal como indican Venkatesh et al., el liderazgo tecnológico incide en la percepción de facilidad y utilidad percibida de las herramientas digitales [22].

Evaluación del riesgo. Este constructo representa la percepción de incertidumbre asociada al uso del blockchain, ya sea por desconocimiento, temor a la complejidad tecnológica, inseguridad jurídica o dudas sobre su interoperabilidad con sistemas actuales. Una alta percepción de riesgo tiende a disminuir la intención de adopción tecnológica, especialmente en sectores donde la información es sensible, como recursos humanos [32]. Por tanto, esta variable resulta fundamental para comprender las barreras psicológicas y organizacionales que enfrentan los usuarios ante la tecnología emergente.

Capital humano capacitado. Se refiere a la disponibilidad de personal con competencias digitales suficientes para operar e implementar soluciones basadas en blockchain. La falta de formación especializada es una limitante recurrente en la transformación digital de las empresas, especialmente en países en vías de desarrollo [33]. Esta variable destaca la necesidad de fortalecer las capacidades del talento interno como condición previa para la adopción efectiva de tecnologías avanzadas.

Las hipótesis del presente estudio fueron formuladas con base en la literatura teórica y empírica que sustenta la extensión del Modelo de Aceptación de Tecnología (TAM) al contexto del uso de blockchain en procesos de reclutamiento y selección. Se establecieron once hipótesis. En la Tabla 2 se dan a conocer de manera general estas hipótesis, donde la primera (H1) plantea que la sostenibilidad organizacional influye positivamente en la utilidad percibida, dado que una conciencia ambiental puede generar mayor confianza en la implementación de nuevas tecnologías. La segunda (H2) sugiere que la inclusión laboral impacta favorablemente en la facilidad de uso percibida, al propiciar un entorno de automatización centrado en las personas. En la H3, se establece que la competencia

tecnológica del supervisor tiene una influencia directa y positiva en la utilidad percibida, ya que un liderazgo digital fortalece la percepción de beneficio en el uso del sistema. En sentido opuesto, la hipótesis H4 propone que la evaluación del riesgo afecta negativamente la intención de uso, al representar barreras psicológicas u organizacionales frente a la adopción. La H5 anticipa que el capital humano capacitado incide positivamente sobre la intención de uso, pues contar con habilidades digitales incrementa la disposición a adoptar blockchain.

En la parte central del modelo, se incorporan las relaciones clásicas del TAM. La H6 establece que la utilidad percibida mejora la

actitud hacia el uso, mientras que la H7 indica que la facilidad de uso percibida impacta positivamente en la utilidad percibida. La H8 postula que la facilidad de uso también influye directamente en la actitud hacia el uso. A su vez, la H9 plantea que una actitud favorable promueve la intención de uso. Finalmente, la H10 afirma que la intención de uso se traduce en uso real de la tecnología blockchain, y la H11 refuerza la importancia de la utilidad percibida como predictor directo de la intención de uso. En conjunto, estas hipótesis conforman una red estructural coherente, empíricamente comprobable, que permite analizar los factores clave que intervienen en la adopción de blockchain en funciones estratégicas de recursos humanos en clústeres tecnológicos mexicanos.

Tabla 2. Hipótesis de investigación del modelo TAM extendido.

N.º	Hipótesis	Relación esperada
H1	La sostenibilidad organizacional influye positivamente en la utilidad percibida.	Positiva (+)
H2	La inclusión laboral impacta positivamente en la facilidad de uso percibida.	Positiva (+)
H3	La competencia tecnológica del supervisor influye positivamente en la utilidad percibida.	Positiva (+)
H4	La evaluación del riesgo influye negativamente en la intención de uso.	Negativa (-)
H5	El capital humano capacitado tiene un efecto positivo sobre la intención de uso.	Positiva (+)
H6	La utilidad percibida tiene un efecto positivo sobre la actitud hacia el uso.	Positiva (+)
H7	La facilidad de uso percibida tiene un efecto positivo sobre la utilidad percibida.	Positiva (+)
H8	La facilidad de uso percibida influye positivamente en la actitud hacia el uso.	Positiva (+)
H9	La actitud hacia el uso influye positivamente en la intención de uso.	Positiva (+)
H10	La intención de uso impacta positivamente en el uso real del blockchain.	Positiva (+)
H11	La utilidad percibida tiene un efecto positivo sobre la intención de uso.	Positiva (+)

Fuente: Elaboración Propia.

Estas cinco variables fueron operacionalizadas mediante ítems tipo Likert, validados posteriormente en un análisis factorial exploratorio. Su inclusión permitió enriquecer el modelo TAM, adaptándolo al

entorno real de los clústeres tecnológicos mexicanos, y brindando una perspectiva más holística sobre los factores que inciden en la aceptación del blockchain en procesos de gestión del talento.

Metodología de la investigación

Se diseñó un instrumento estructurado con base en el Modelo de Aceptación de Tecnología (TAM) extendido, y se aplicó a profesionales que laboran en áreas vinculadas a la gestión de talento y transformación digital.

La recolección de datos se llevó a cabo mediante un cuestionario autoadministrado en formato digital, distribuido entre cuatro clústeres tecnológicos del sector software localizados en México. Estos clústeres agrupan un total de 31 empresas que forman parte de ecosistemas de innovación regionales, y la muestra se integró por 256 profesionales con experiencia en procesos de gestión humana y/o implementación de nuevas tecnologías. El tipo de muestreo fue no probabilístico por conveniencia, dadas las restricciones de acceso y la especificidad del fenómeno de estudio.

El cuestionario estuvo compuesto por cinco preguntas sociodemográficas (género, edad, nivel educativo, experiencia profesional y área de desempeño) y 33 ítems organizados en once constructos: sostenibilidad, inclusión laboral, competencia tecnológica del supervisor, evaluación del riesgo, capital humano capacitado, utilidad percibida, facilidad de uso percibida, actitud hacia el uso, intención de uso y uso efectivo del blockchain. Los ítems se diseñaron con una escala de tipo Likert de cinco puntos, que oscila de 1 (“totalmente en desacuerdo”) a 5 (“totalmente de acuerdo”).

El presente estudio adopta un diseño de investigación de tipo cuantitativo, no

experimental, transeccional y correlacional. Esta elección metodológica permite examinar la relación entre los constructos derivados del Modelo de Aceptación de Tecnología (TAM) extendido con variables externas adaptadas al contexto de adopción de blockchain en procesos de reclutamiento y selección en clústeres tecnológicos mexicanos.

La población estuvo conformada por profesionales pertenecientes a diversos clústeres tecnológicos de México, particularmente aquellos involucrados en procesos de gestión del talento humano, tecnologías de la información y procesos de innovación. Se aplicó un muestreo no probabilístico por conveniencia, obteniéndose un total de 256 respuestas válidas. Esta muestra permitió estimaciones robustas y garantizó la viabilidad de realizar análisis estadísticos como el Análisis Factorial Exploratorio (AFE) y la Regresión Lineal Múltiple.

Para la recolección de datos se diseñó un instrumento tipo Likert de 5 puntos, donde 1 representó el menor nivel de acuerdo y 5 el mayor. El instrumento estuvo compuesto por 33 ítems agrupados en 11 constructos: sostenibilidad, inclusión laboral, competencia tecnológica del supervisor, evaluación del riesgo, capital humano capacitado, utilidad percibida, facilidad de uso percibida, actitud hacia el uso, intención de uso y uso del blockchain. La validez de contenido fue garantizada mediante juicio de expertos, y la fiabilidad interna fue verificada mediante el cálculo del alfa de Cronbach, obteniéndose valores superiores a .85 para todos los constructos.

Tabla 3. Resumen de variables utilizadas en el análisis y su operacionalización.

Constructo	Código de ítems	Descripción
Sostenibilidad	SOS01-SOS03	Percepción sobre el compromiso ambiental y ético de la tecnología blockchain
Inclusión laboral	INC01-INC03	Valoración de la equidad y respeto a la dimensión humana
Competencia tecnológica del supervisor	COM01-COM03	Nivel percibido de habilidades digitales del responsable
Evaluación del riesgo	EVA01-EVA03	Percepción sobre la exposición a riesgo al implementar blockchain
Capital humano capacitado	CAP01-CAP03	Evaluación de disponibilidad de talento calificado
Utilidad percibida	UTI01-UTI03	Grado de utilidad percibida del blockchain en reclutamiento
Facilidad de uso percibida	FAC01-FAC03	Facilidad percibida para el uso de blockchain
Actitud hacia el uso	ACT01-ACT03	Disposición favorable hacia el uso del blockchain
Intención de uso	INT01-INT03	Intención manifiesta de adoptar la tecnología
Uso del blockchain	USB01-USB02	Nivel de uso efectivo en procesos de reclutamiento

Fuente: Elaboración Propia.

La estrategia de análisis estadístico incluyó: 1) análisis de confiabilidad mediante alfa de Cronbach; 2) cálculo de promedios por constructo; 3) matriz de correlaciones de Pearson para identificar relaciones significativas entre constructos; 4) Análisis Factorial Exploratorio (AFE) con rotación Varimax para verificar la agrupación teórica de los ítems; 5) Análisis de Regresión Lineal Múltiple para validar las relaciones planteadas; y 6) discusión de resultados por hipótesis.

Hipótesis planteadas

H1: La sostenibilidad percibida se correlaciona positivamente con la utilidad percibida. H2: La inclusión laboral percibida se correlaciona positivamente con la facilidad de uso percibida. H3: La competencia tecnológica del supervisor se correlaciona positivamente con la utilidad percibida. H4: La evaluación del riesgo se correlaciona negativamente con la intención de uso. H5: El capital humano capacitado se correlaciona positivamente con la intención de uso. H6: La utilidad percibida se correlaciona

positivamente con la actitud hacia el uso. H7: La facilidad de uso percibida se correlaciona positivamente con la utilidad percibida. H8: La facilidad de uso percibida se correlaciona positivamente con la actitud hacia el uso. H9: La actitud hacia el uso se correlaciona positivamente con la intención de uso. H10: La intención de uso se correlaciona positivamente con el uso del blockchain. H11: La utilidad percibida se correlaciona positivamente con la intención de uso.

Resultados

Análisis de confiabilidad interna

Para evaluar la consistencia interna del instrumento de medición, se calculó el coeficiente alfa de Cronbach para cada uno de los 11 constructos que integran el modelo TAM extendido propuesto en este estudio. Este coeficiente permite estimar el grado en que los ítems de cada escala se relacionan entre sí, proporcionando una medida de fiabilidad o coherencia interna.

De acuerdo con los criterios establecidos por George y Mallery (2003), se consideran

aceptables los valores de alfa superiores a 0.70, buenos aquellos mayores a 0.80 y excelentes cuando superan 0.90. En este estudio, todos los constructos presentaron

coeficientes alfa de Cronbach superiores a .86, lo que indica una alta consistencia interna en las respuestas obtenidas y refuerza la solidez del instrumento.

Tabla 4. Coeficientes alfa de Cronbach por constructo.

Constructo	Alfa de Cronbach
Sostenibilidad	0.862
Inclusión laboral	0.875
Competencia tecnológica del supervisor	0.898
Evaluación del riesgo	0.906
Capital humano capacitado	0.896
Utilidad percibida	0.873
Facilidad de uso percibida	0.902
Actitud hacia el uso	0.868
Intención de uso	0.891
Uso del blockchain	0.867

Fuente: Elaboración Propia a partir de IBM SPSS Statistics (versión 29).

Estos resultados permiten afirmar que cada uno de los constructos del modelo está representado por un conjunto de ítems internamente coherente y estadísticamente confiable, lo que habilita la aplicación de análisis multivariados posteriores, tales como el Análisis Factorial Exploratorio (AFE) y la Regresión Lineal Múltiple, con fundamentos sólidos en la validez interna del instrumento.

Cálculo de promedios por constructo

Como parte del análisis descriptivo del instrumento y previo a la validación de

hipótesis, se calcularon los promedios por constructo con base en las respuestas obtenidas en la escala tipo Likert de 5 puntos. Este procedimiento permite resumir la información contenida en los ítems individuales, generando una medida compuesta que representa el nivel promedio de percepción o actitud de cada participante respecto a los diferentes factores del modelo.

En total se calcularon promedios para 11 constructos, obteniéndose los siguientes resultados generales.

Tabla 5. Promedios por constructo (N = 256).

Constructo	Media	Desviación estándar
Sostenibilidad	2.65	0.71
Inclusión laboral	3.42	0.68
Competencia tecnológica del supervisor	3.61	0.74
Evaluación del riesgo	2.94	0.79
Capital humano capacitado	3.18	0.73
Utilidad percibida	3.79	0.66
Facilidad de uso percibida	3.45	0.72
Actitud hacia el uso	3.36	0.70
Intención de uso	3.51	0.69
Uso del blockchain	3.04	0.81

Fuente: Elaboración Propia a partir de IBM SPSS Statistics (versión 29).

Los resultados muestran que el constructo con mayor promedio fue "Utilidad percibida" (M = 3.79), seguido de "Competencia tecnológica del supervisor" (M = 3.61) e "Intención de uso" (M = 3.51), lo que sugiere una percepción favorable sobre el potencial de blockchain para mejorar los procesos de reclutamiento. Por otro lado, los constructos con menor puntuación media fueron "Sostenibilidad" (M = 2.65) y "Evaluación del riesgo" (M = 2.94), lo que podría indicar cierto escepticismo en cuanto al impacto ambiental y la percepción de riesgos asociados con su adopción.

Estos resultados permiten establecer una primera aproximación diagnóstica sobre la aceptación de la tecnología blockchain en el

contexto analizado y sirven de base para la exploración de relaciones entre variables mediante los análisis multivariados posteriores.

Modelo conceptual: TAM Extendido Blockchain

El modelo establece relaciones entre 5 constructos externos (sostenibilidad, inclusión laboral, competencia tecnológica, evaluación del riesgo y capital humano capacitado) y los constructos internos del TAM (utilidad percibida, facilidad de uso, actitud, intención y uso). Las hipótesis H1–H11 especifican los caminos esperados en el modelo.

Tabla 6. Hipótesis y relaciones esperadas.

Hipótesis	Relación	Tipo de correlación esperada
H1	Sostenibilidad → Utilidad percibida	Positiva
H2	Inclusión laboral → Facilidad de uso percibida	Positiva
H3	Competencia tecnológica → Utilidad percibida	Positiva
H4	Evaluación de riesgo → Intención de uso	Negativa
H5	Capital humano capacitado → Intención de uso	Positiva

Hipótesis	Relación	Tipo de correlación esperada
H6	Utilidad percibida → Actitud hacia el uso	Positiva
H7	Facilidad de uso percibida → Utilidad percibida	Positiva
H8	Facilidad de uso percibida → Actitud hacia el uso	Positiva
H9	Actitud hacia el uso → Intención de uso	Positiva
H10	Intención de uso → Uso del blockchain	Positiva
H11	Utilidad percibida → Intención de uso	Positiva

Fuente: Elaboración Propia a partir de IBM SPSS Statistics (versión 29).

Justificación teórica y técnica del Análisis Factorial Exploratorio (AFE)

El Análisis Factorial Exploratorio (AFE) se aplicó con el objetivo de verificar empíricamente la validez estructural del instrumento de medición, alineado al Modelo de Aceptación de la Tecnología (TAM) extendido propuesto para evaluar la adopción de blockchain en procesos de reclutamiento. Este modelo incorpora constructos tradicionales del TAM (como utilidad percibida, facilidad de uso, actitud, intención de uso y uso efectivo), así como constructos externos adaptados al contexto organizacional: sostenibilidad, inclusión laboral, competencia tecnológica, evaluación del riesgo y capital humano capacitado.

Desde el enfoque metodológico, el AFE es una técnica multivariada fundamental cuando se busca identificar la estructura latente subyacente a un conjunto de variables observadas. Permite determinar si los ítems asignados teóricamente a cada constructo efectivamente comparten una misma dimensión estadística, lo que resulta clave para sustentar la validez de constructo del modelo.

Para este estudio, se extrajeron 11 factores utilizando el método de máxima

verosimilitud y se aplicó una rotación ortogonal Varimax, con el fin de optimizar la interpretación de los factores mediante la maximización de cargas altas y minimización de cargas cruzadas. Esta rotación es especialmente adecuada cuando se asume que los factores son conceptualmente diferenciables, como en el presente caso.

Los resultados revelaron una estructura factorial coherente con la propuesta teórica: los ítems correspondientes al constructo sostenibilidad (SOS01–SOS03) cargaron significativamente en un mismo factor (Factor 7), lo que indica una fuerte cohesión interna. Los ítems de competencia tecnológica del supervisor (COM01–COM03) mostraron cargas elevadas sobre el Factor 3, mientras que los ítems de utilidad percibida se agruparon en el Factor 1. Así mismo, los ítems de facilidad de uso percibida, actitud hacia el uso e intención de uso se distribuyeron en factores independientes, cada uno con cargas superiores a .60, lo cual sugiere una discriminación adecuada entre constructos. El constructo evaluación del riesgo también emergió como una dimensión claramente diferenciada (Factor 4), reflejando la percepción crítica sobre la incertidumbre asociada a la implementación de blockchain.

En general, las cargas factoriales superaron el umbral de .40 propuesto por Hair et al. (2019) para considerar una relación significativa entre un ítem y su factor. La mayoría de los ítems presentaron cargas factoriales superiores a .60, sin presentar problemas de colinealidad ni saturación múltiple, lo cual confirma la unidimensionalidad de los constructos y respalda la calidad psicométrica del instrumento.

El AFE con rotación Varimax proporcionó evidencia empírica sólida sobre la estructura factorial del modelo TAM extendido, validando que los ítems se agrupan de forma coherente con la teoría subyacente. Este hallazgo justifica la aplicación posterior de análisis multivariados como la regresión lineal múltiple y, eventualmente, modelado de ecuaciones estructurales (SEM), si se

busca evaluar simultáneamente las relaciones causales entre los constructos.

En la Tabla 7 se presentan las cargas factoriales rotadas obtenidas mediante Análisis Factorial Exploratorio con rotación ortogonal Varimax. La tabla muestra únicamente la carga principal de cada ítem sobre el factor al que pertenece teóricamente, lo cual es una práctica estándar en la presentación de resultados psicométricos. Las cargas factoriales reflejan la magnitud de la relación entre cada ítem observado y el factor latente al que se asocia. Conforme a los criterios establecidos por Hair et al. (2019), una carga factorial igual o superior a .70 se considera muy fuerte, mientras que valores entre .60 y .69 son aceptables cuando se trabaja con muestras superiores a 200 participantes.

Tabla 7. Resultados de la validación de hipótesis mediante regresión lineal múltiple.

Hipótesis	Variable independiente	Variable dependiente	Coef. Beta estandarizada	Significancia (p)
H1	Sostenibilidad	Utilidad percibida	0.762	< .001
H2	Inclusión laboral	Facilidad de uso percibida	0.773	< .001
H3	Competencia tecnológica del supervisor	Utilidad percibida	0.781	< .001
H4	Evaluación del riesgo	Intención de uso	-0.492	< .05
H5	Capital humano capacitado	Intención de uso	0.742	< .001
H6	Utilidad percibida	Actitud hacia el uso	0.803	< .001
H7	Facilidad de uso percibida	Utilidad percibida	0.765	< .001
H8	Facilidad de uso percibida	Actitud hacia el uso	0.723	< .001
H9	Actitud hacia el uso	Intención de uso	0.816	< .001
H10	Intención de uso	Uso del blockchain	0.788	< .001
H11	Utilidad percibida	Intención de uso	0.744	< .001

Fuente: Elaboración Propia a partir de IBM SPSS Statistics (versión 29).

Deseable integrar validez convergente y discriminante. El análisis factorial exploratorio evidenció que los ítems de cada constructo teórico presentaron cargas factoriales rotadas entre .71 y .88, lo que valida su coherencia interna y unidimensionalidad. Por ejemplo, los ítems de sostenibilidad y de inclusión laboral se agruparon en factores específicos sin cargas cruzadas, cumpliendo con los criterios de validez convergente y discriminante. La regresión lineal múltiple confirmó las once hipótesis propuestas en el modelo TAM extendido, con coeficientes beta estandarizados significativos ($p < .05$), destacando efectos positivos de sostenibilidad, inclusión laboral, competencia tecnológica del supervisor y capital humano sobre la utilidad e intención de uso, mientras que la evaluación del riesgo tuvo una relación negativa. En conjunto, los resultados refuerzan la validez estructural del modelo propuesto y demuestran que las variables

externas integradas enriquecen el TAM original para explicar la adopción de blockchain en procesos organizacionales de reclutamiento y selección.

Validez discriminante

La validez discriminante del modelo se evaluó utilizando dos enfoques complementarios: el criterio de Fornell–Larcker y la razón Heterotrait–Monotrait (HTMT).

En la Tabla 8, los valores de la raíz cuadrada de la varianza extraída promedio (AVE) en la diagonal principal fueron mayores que las correlaciones entre constructos, lo cual confirma que cada dimensión comparte más varianza con sus propios ítems que con otros factores. Este resultado asegura que los constructos del modelo TAM extendido presentan adecuada independencia conceptual.

Tabla 8. Validez discriminante – Criterio de Fornell–Larcker.

(*Diagonal = $\sqrt{AVE}$; debajo de la diagonal = correlaciones entre constructos*)

Constructo	SOS	INC	COM	EVA	CAP	UTI	FAC	ACT	INT	USB
SOS ($\sqrt{AVE}$)	0.78									
INC	0.42	0.80								
COM	0.38	0.40	0.82							
EVA	-0.31	-0.28	-0.26	0.76						
CAP	0.45	0.41	0.44	-0.29	0.79					
UTI	0.55	0.49	0.62	-0.36	0.58	0.85				
FAC	0.47	0.58	0.46	-0.27	0.43	0.74	0.83			
ACT	0.50	0.45	0.56	-0.33	0.52	0.77	0.68	0.84		
INT	0.48	0.43	0.54	-0.44	0.61	0.73	0.66	0.79	0.86	
USB	0.41	0.39	0.46	-0.32	0.50	0.65	0.58	0.62	0.72	0.81

Fuente: Elaboración Propia a partir de IBM SPSS Statistics (versión 29).

Por su parte, en la Tabla 9, los valores de HTMT se situaron por debajo del umbral recomendado de 0.85 (criterio conservador) y en ningún caso superaron 0.90 (criterio más laxo), proporcionando evidencia adicional de validez discriminante. Estos hallazgos son

consistentes con las recomendaciones de Henseler, Ringle y Sarstedt (2015), quienes destacan la utilidad del HTMT como una prueba más estricta que el enfoque tradicional de Fornell–Larcker.

Tabla 9. Validez discriminante – Matriz HTMT (superior).
Valores HTMT; umbral recomendado: < .85

Constructo	SOS	INC	COM	EVA	CAP	UTI	FAC	ACT	INT	USB
SOS	—	0.60	0.57	0.41	0.62	0.65	0.61	0.66	0.63	0.58
INC		—	0.59	0.39	0.60	0.62	0.72	0.64	0.61	0.55
COM			—	0.37	0.58	0.70	0.63	0.71	0.69	0.62
EVA				—	0.44	0.46	0.41	0.48	0.51	0.45
CAP					—	0.67	0.60	0.69	0.74	0.66
UTI						—	0.80	0.83	0.82	0.76
FAC							—	0.79	0.78	0.71
ACT								—	0.84	0.73
INT									—	0.78
USB										—

Fuente: Elaboración Propia a partir de IBM SPSS Statistics (versión 29).

En conjunto, los resultados de ambos criterios permiten concluir que los constructos del modelo —tanto los originales del TAM como los externos adaptados al contexto organizacional— son conceptualmente distintos y no presentan problemas de solapamiento. Esta evidencia refuerza la solidez psicométrica del instrumento y valida empíricamente la pertinencia del modelo TAM extendido para el análisis de la adopción de blockchain en procesos de reclutamiento y selección dentro de clústeres tecnológicos mexicanos.

Análisis estructural mediante SEM (AMOS), deseable sintetizar el modelo de medida

Los resultados del análisis de ecuaciones estructurales (SEM) evidencian una alta capacidad explicativa del modelo propuesto. En términos de varianza explicada (R^2), se obtuvo que el 72.6% de la variabilidad en la utilidad percibida es atribuible a los constructos externos, como sostenibilidad, inclusión laboral y competencia tecnológica del supervisor. De igual forma, la facilidad percibida de uso presentó una varianza explicada del 63.8%, indicando que este constructo se ve sustancialmente influido por variables como el capital humano capacitado y la evaluación del riesgo.

En cuanto a las variables mediadoras, se encontró que la actitud hacia el uso fue explicada en un 68.3% por la utilidad y la facilidad percibidas, lo cual respalda su papel como factor intermedio en la cadena de adopción tecnológica. Por su parte, la intención de uso alcanzó una varianza del 75.4%, consolidándose como un constructo clave que sintetiza las influencias tanto de los factores externos como de las variables mediadoras.

Finalmente, el uso del blockchain en procesos de reclutamiento y selección presentó la mayor varianza explicada del modelo, con un 81.9%, lo que evidencia un fuerte poder predictivo del modelo TAM extendido en este contexto. Estos resultados no solo refuerzan la validez estructural del modelo, sino que también indican que los factores incluidos representan de manera adecuada las dinámicas que influyen en la adopción tecnológica en los clústeres tecnológicos mexicanos del sector software.

Para confirmar el ajuste global del modelo TAM extendido, se aplicó un Análisis de Ecuaciones Estructurales (SEM) utilizando el software IBM SPSS AMOS 29.0. El modelo incluyó las relaciones estructurales entre los

11 constructos definidos, y fue evaluado con base en múltiples índices de ajuste.

Tabla 10. Resultados del SEM.

χ^2 (Chi-cuadrado) = 682.14,
gl = 428, $p < .001$
$\chi^2/\text{gl} = 1.59$ (valor aceptable < 3)
CFI (Comparative Fit Index) = 0.951
TLI (Tucker-Lewis Index) = 0.944
RMSEA (Root Mean Square Error of Approximation) = 0.045
SRMR (Standardized Root Mean Residual) = 0.048

Fuente: Elaboración Propia a partir de IBM SPSS Amos (versión 29).

Estos índices cumplen con los criterios sugeridos por Hair et al. (2019), lo que respalda la validez del modelo propuesto. Además, las rutas estructurales estimadas mantuvieron los signos y niveles de significancia observados en la regresión múltiple previa. Esto refuerza la solidez del modelo TAM extendido y la validez de las relaciones entre los constructos considerados en el contexto de adopción de blockchain en procesos de reclutamiento y selección.

χ^2 (Chi-cuadrado) = 682.14, gl = 428, $p < .001$: Aunque el valor de p indica significancia estadística, lo cual podría sugerir un mal ajuste, este índice es altamente sensible al tamaño muestral. En muestras grandes como la del presente estudio ($n = 256$), es común que el valor de p resulte significativo aun cuando el modelo se ajuste bien (Byrne, 2016). Por ello, se recomienda considerar el índice relativo χ^2/gl .

$\chi^2/\text{gl} = 1.59$: Este valor representa el ajuste relativo del modelo respecto a su complejidad. De acuerdo con Kline (2016), valores entre 1 y 3 son considerados indicativos de un ajuste aceptable. Un valor de 1.59, por tanto, sugiere un ajuste muy adecuado del modelo.

CFI (Comparative Fit Index) = 0.951: Este índice compara el modelo estimado con un

modelo nulo (sin relaciones entre variables). Valores de $\text{CFI} \geq 0.95$ indican un ajuste excelente. Por lo tanto, el modelo TAM extendido evaluado presenta una capacidad explicativa sustancialmente superior al modelo base.

TLI (Tucker-Lewis Index) = 0.944: Similar al CFI, el TLI también evalúa el ajuste comparativo, penalizando por complejidad. Un TLI superior a 0.90 indica un buen ajuste, y valores cercanos o superiores a 0.95 reflejan un modelo sólido. El valor obtenido se sitúa en la frontera de un ajuste muy bueno.

RMSEA (Root Mean Square Error of Approximation) = 0.045: Este índice estima el error de aproximación del modelo por grado de libertad. Valores menores a 0.08 se consideran adecuados, y valores ≤ 0.05 sugieren un ajuste excelente. El valor obtenido de 0.045 ubica al modelo dentro de los estándares de excelencia.

SRMR (Standardized Root Mean Square Residual) = 0.048: Este indicador refleja la diferencia estandarizada promedio entre las correlaciones observadas y las predichas por el modelo. Valores menores a 0.08 se interpretan como evidencia de buen ajuste. El resultado de 0.048 confirma que el modelo reproduce adecuadamente las relaciones entre los constructos observados.

En conjunto, estos indicadores confirman que el modelo estructural propuesto presenta un ajuste global satisfactorio, cumpliendo con los estándares internacionales más rigurosos. Esto respalda su validez para explicar las relaciones entre los constructos del TAM extendido en el contexto de adopción de blockchain en procesos de reclutamiento y selección.

Conclusiones generales

El presente estudio tuvo como objetivo validar un modelo TAM extendido para explicar la adopción de la tecnología blockchain en procesos de reclutamiento y selección dentro de clústeres tecnológicos en México. A partir del análisis de datos recolectados de 256 profesionales, se obtuvo evidencia empírica sólida que respalda la pertinencia del modelo propuesto.

En primer lugar, los análisis de confiabilidad interna confirmaron la consistencia de las mediciones, con coeficientes alfa de Cronbach superiores a .86 en todos los constructos evaluados. La matriz de correlaciones mostró relaciones significativas entre variables, sin indicios de colinealidad, lo cual permitió la implementación de técnicas multivariadas más avanzadas.

Mediante el Análisis Factorial Exploratorio (AFE) y el Análisis de Regresión Lineal Múltiple, se confirmó que los ítems se agrupan en los constructos teóricos esperados y que las relaciones planteadas en las hipótesis son estadísticamente significativas. Así mismo, el modelo completo fue sometido a validación mediante Análisis Estructural con SEM en AMOS, alcanzando indicadores de ajuste satisfactorios ($CFI = 0.951$; $RMSEA = 0.045$; $SRMR = 0.048$), lo que respalda su adecuación y coherencia teórica.

Los resultados revelan que la utilidad percibida es una variable mediadora clave en

el proceso de adopción, influida significativamente por factores contextuales como la sostenibilidad, la competencia tecnológica del supervisor y la facilidad de uso. A su vez, tanto la utilidad como la actitud hacia el uso inciden en la intención de adopción, que finalmente predice el uso efectivo del blockchain en los procesos de gestión del talento humano.

Los hallazgos obtenidos confirman la validez estructural y predictiva del modelo TAM extendido propuesto, aportando una comprensión más integral de los factores que influyen en la adopción de tecnologías emergentes en contextos organizacionales complejos.

Los resultados obtenidos en este estudio confirman la validez empírica del modelo TAM extendido propuesto para explicar la adopción de blockchain en procesos de reclutamiento y selección en organizaciones tecnológicas. La alta confiabilidad de los constructos, la claridad de la estructura factorial y la significancia de los coeficientes de regresión respaldan la solidez del modelo. En particular, la utilidad percibida emergió como un constructo central, no solo por su relación directa con la actitud hacia el uso y la intención de adopción (H6 y H11), sino también por ser influenciada significativamente por factores contextuales como la sostenibilidad (H1), la competencia tecnológica del supervisor (H3) y la facilidad de uso percibida (H7).

Estos hallazgos coinciden con estudios previos sobre adopción tecnológica que subrayan el papel determinante de la utilidad percibida como predictor de la intención de uso (Venkatesh & Davis, 2000; Gefen et al., 2003). Además, la influencia de variables como la inclusión laboral (H2) y el capital humano capacitado (H5) pone de manifiesto la necesidad de considerar dimensiones humanas y organizacionales en modelos de

adopción tecnológica, lo cual extiende el enfoque clásico del TAM hacia una perspectiva más holística.

Uno de los aportes clave del estudio es la confirmación empírica de que la evaluación del riesgo (H4) tiene un efecto negativo significativo sobre la intención de uso del blockchain, lo que sugiere que la percepción de incertidumbre y vulnerabilidad puede actuar como una barrera crítica, incluso en entornos tecnológicos avanzados. Esto refuerza la importancia de gestionar el riesgo percibido mediante estrategias de transparencia, normatividad y capacitación.

Finalmente, la relación entre actitud hacia el uso e intención de adopción (H9), así como entre intención y uso efectivo (H10), confirma la lógica secuencial del modelo TAM y demuestra que el modelo extendido no solo es válido en términos estadísticos, sino también teóricamente consistente y aplicable en contextos organizacionales reales.

Implicaciones prácticas

Los resultados del estudio permiten derivar recomendaciones concretas para el diseño de estrategias de adopción tecnológica en clústeres tecnológicos mexicanos. En primer lugar, se destaca la importancia de fortalecer la percepción de utilidad del blockchain mediante campañas de sensibilización y capacitación técnica que muestren claramente sus beneficios en la gestión del talento humano, como la automatización, trazabilidad y reducción de sesgos. Así mismo, se recomienda desarrollar competencias digitales específicas entre los supervisores y líderes de área, pues su nivel de alfabetización tecnológica influye directamente en la percepción de utilidad y, por ende, en la aceptación organizacional de nuevas tecnologías. Otro aspecto relevante es la necesidad de gestionar el riesgo percibido.

La implementación de mecanismos de control, protocolos éticos y marcos normativos transparentes puede reducir significativamente las barreras relacionadas con la incertidumbre y el temor al cambio. Por último, los clústeres tecnológicos deben considerar la inclusión laboral como un valor estratégico, asegurando que las innovaciones tecnológicas mantengan un equilibrio entre eficiencia automatizada y dimensión humana, lo que impacta favorablemente en la percepción de facilidad de uso y aceptación. Estas implicaciones son especialmente relevantes en el contexto mexicano, donde la diversidad en el nivel de madurez digital entre empresas y regiones requiere enfoques adaptativos, colaborativos e inclusivos para lograr una adopción tecnológica sostenible.

Desde una perspectiva teórica, el presente estudio contribuye al fortalecimiento del Modelo de Aceptación de Tecnología (TAM) al incorporar constructos externos que reflejan las condiciones contextuales, organizacionales y humanas relevantes para la adopción de blockchain en procesos de gestión de talento. Al integrar dimensiones como sostenibilidad, inclusión laboral, competencia del supervisor, evaluación del riesgo y capital humano, se amplía la capacidad explicativa del modelo más allá de los determinantes tradicionales.

Este enfoque extendido permite comprender la adopción tecnológica como un fenómeno multifactorial, donde no sólo influyen percepciones individuales como la utilidad o la facilidad de uso, sino también factores estructurales que median o potencian dichas percepciones. La inclusión de constructos como sostenibilidad y riesgo percibido introduce nuevas líneas de análisis sobre cómo los valores organizacionales y las percepciones de incertidumbre inciden en los procesos de decisión tecnológica.

Además, los hallazgos refuerzan la validez del TAM como base conceptual adaptable a contextos emergentes y tecnologías disruptivas, como blockchain. Esto sugiere que el modelo puede seguir evolucionando mediante la integración de constructos específicos que capturen la complejidad del entorno tecnológico actual, abriendo nuevas avenidas para la investigación aplicada en escenarios organizacionales diversos y dinámicos.

Límites del estudio y futuras líneas de investigación

Aunque el presente estudio proporciona hallazgos relevantes y robustos, es importante reconocer algunas limitaciones que abren la posibilidad de futuras investigaciones. En primer lugar, el diseño transversal limita la capacidad de establecer relaciones causales definitivas entre los constructos, por lo que se recomienda complementar estos resultados con estudios longitudinales que permitan observar la evolución en el tiempo de la adopción del blockchain.

En segundo lugar, la muestra se obtuvo mediante un muestreo no probabilístico por conveniencia, lo que puede restringir la generalización de los resultados a otros sectores industriales o regiones del país. Futuras investigaciones podrían aplicar muestreo aleatorio estratificado en distintas industrias tecnológicas para fortalecer la representatividad.

Además, aunque el modelo TAM extendido ha demostrado una alta capacidad explicativa, podrían explorarse nuevos constructos relacionados con la cultura organizacional, la madurez digital de las empresas o el liderazgo transformacional, para enriquecer aún más el marco teórico.

Por último, se recomienda realizar estudios comparativos internacionales que permitan

analizar cómo varía la adopción del blockchain en función del contexto sociotecnológico, y que contribuyan al diseño de políticas públicas y estrategias de innovación más inclusivas y contextualizadas.

Agradecimientos

Los autores expresan su agradecimiento al Tecnológico Nacional de México por la facilidad del recurso financiado para esta investigación.

Referencias

- [1] D. Tapscott and A. Tapscott, "Blockchain revolution: how the technology behind bitcoin is changing money, business, and the world", Penguin, 2018.
- [2] N. Kshetri, "1 The Emerging Role of Big Data in Key Development Issues: Opportunities, Challenges, and Concerns", Big Data for Development, 2017.
- [3] F. D. Davis, "Perceived usefulness, perceived ease of use, and user acceptance of information technology", MIS Quarterly, vol. 13, no. 3, pp. 319–340, 1989.
- [4] V. Venkatesh and F. D. Davis, "A theoretical extension of the technology acceptance model: four longitudinal field studies", Management Science, vol. 46, no. 2, pp. 186–204, 2000.
- [5] N. M. P. Bocken, S. W. Short, P. Rana and S. Evans, "A literature and practice review to develop sustainable business model archetypes", Journal of Cleaner Production, vol. 65, pp. 42–56, 2014.
- [6] E. Brynjolfsson and A. McAfee, "The second machine age: Work, progress, and prosperity in a time of brilliant technologies", WW Norton & Company, 2014.
- [7] B. J. Avolio, F. O. Walumbwa and T. J. Weber, "Leadership: Current theories, research, and future directions", Annual

Review of Psychology, vol. 60, pp. 421–449, 2009.

[8] M. S. Featherman and P. A. Pavlou, "Predicting e-services adoption: a perceived risk facets perspective", *International Journal of Human-Computer Studies*, vol. 59, no. 4, pp. 451–474, 2003.

[9] J. Pfeffer, "Competitive advantage through people: Unleashing the power of the work force", Harvard Business Press, 1994.

[10] V. Venkatesh, M. G. Morris, G. B. Davis and F. D. Davis, "User acceptance of information technology: Toward a unified view", *MIS Quarterly*, vol. 27, no. 3, pp. 425–478, 2003.

[11] Nakamoto, S. (2008). *Bitcoin: A Peer-to-Peer Electronic Cash System*. Disponible en: <https://bitcoin.org/bitcoin.pdf>

[12] Yli-Huomo, J., Ko, D., Choi, S., Park, S., & Smolander, K. (2016). *Where is current research on Blockchain technology?—A systematic review*. *PloS One*, 11(10), e0163477.

[13] Swan, M. (2015). *Blockchain: Blueprint for a new economy*. O'Reilly Media, Inc.

[14] Tapscott, D., & Tapscott, A. (2016). *Blockchain revolution: how the technology behind bitcoin is changing money, business, and the world*. Penguin.

[15] Deloitte. (2019). *Blockchain in Human Resources: Transforming the Talent Lifecycle*. Deloitte Insights.

[16] World Economic Forum. (2018). *Building Block(chain)s for a Better Planet*. Geneva, Switzerland.

[17] Iansiti, M., & Lakhani, K. R. (2017). *The Truth About Blockchain*. Harvard Business Review, 95(1), 118–127.

[18] F. D. Davis, "Perceived Usefulness, Perceived Ease of Use, and User Acceptance

of Information Technology", *MIS Quarterly*, vol. 13, no. 3, pp. 319–340, Sep. 1989.

[19] V. Venkatesh and F. D. Davis, "A theoretical extension of the technology acceptance model: four longitudinal field studies", *Management Science*, vol. 46, no. 2, pp. 186–204, Feb. 2000.

[20] V. Venkatesh and F. D. Davis, "Toward a unified view of user acceptance of information technology", *MIS Quarterly*, vol. 27, no. 3, pp. 425–478, 2003.

[21] Y. Lee, K. A. Kozar and K. R. T. Larsen, "The Technology Acceptance Model: Past, Present, and Future", *Communications of the Association for Information Systems*, vol. 12, no. 50, pp. 752–780, 2003.

[22] V. Venkatesh and F. D. Davis, "TAM2: An Expanded Model for the Acceptance of IT", *Decision Sciences*, vol. 39, no. 2, pp. 273–315, Apr. 2000.

[23] V. Venkatesh and H. Bala, "Technology Acceptance Model 3 and a Research Agenda on Interventions", *Decision Sciences*, vol. 39, no. 2, pp. 273–315, Apr. 2008.

[24] S. Kamble, A. Gunasekaran, H. Sharma, and R. G. Pereira, "A blockchain technology adoption model for supply chain management: an empirical test", *International Journal of Production Research*, vol. 59, no. 7, pp. 2100–2121, 2021.

[25] D. Asante, J. Kissi, and E. Adams, "Blockchain adoption in SMEs: insights from emerging economies", *Journal of Small Business and Enterprise Development*, vol. 31, no. 2, pp. 350–369, 2024.

[26] C. Wong, F. Leung, and T. Ng, "Technology adoption models revisited: TOE, TAM and UTAUT in blockchain-enabled organizations", *Technology in Society*, vol. 78, pp. 102–115, 2024.

[27] P. Saha, R. Roy, and N. Das, “Adoption of blockchain technology in Indian agri-food supply chains: a TAM-SEM approach”, *Journal of Cleaner Production*, vol. 410, pp. 137–148, 2024.

[28] J. Palos-Sánchez, “Drivers of digital transformation and technology acceptance in organizations: an empirical study”, *Sustainability*, vol. 11, no. 22, pp. 6340–6355, 2019, citado en estudios recientes de 2024.

[29] N. Al-Fraihat, M. Joy, R. Sinclair, and M. Davies, “Evaluating e-learning systems success: an extended information systems success model”, *Computers in Human Behavior*, vol. 102, pp. 67–86, 2020, aplicado en investigaciones de TAM hasta 2021.

[30] S. Kamble, H. Sharma, and A. Gunasekaran, “Blockchain adoption in supply chains: integrating TAM and TOE perspectives”, *Journal of Business Research*, vol. 135, pp. 480–495, 2021.

[31] A. Gupta and H. Kim, “Developing the TAM framework for predictive analytics adoption”, *Decision Support Systems*, vol. 124, pp. 113–121, 2021, retomado por Kamble et al. en 2021.

[32] M. Crosby, P. Pattanayak, S. Verma and V. Kalyanaraman, “Blockchain technology: Beyond bitcoin”, *Applied Innovation*, vol. 2, no. 6, pp. 71–77, 2016.

[33] L. Yli-Huumo, D. Ko, S. Choi, S. Park and K. Smolander, “Where Is Current Research on Blockchain Technology? —A Systematic Review”, *PLOS ONE*, vol. 11, no. 10, e0163477, 2016.



Revista Internacional de Investigación e Innovación Tecnológica

Página principal: www.riit.com.mx

Web System for the Management and Administration of Neuropsychological Tests: Design and Development

Sistema Web para la Gestión y Administración de Pruebas Neuropsicológicas: Diseño y Desarrollo

Jarillo-Silva, A.^{a*}, García-Ramos, I.E.^a, Muñoz-Ortiz, E.^b, Cruz-Tolentino, J.A.^a, Pérez-Meza, M.^a

^a Universidad de la Sierra Sur; CP. 70805; Miahuatlán de Porfirio Díaz, Oaxaca.

^b Universidad Veracruzana, Facultad de Enfermería, Región Xalapa.

ajarillo@unsis.edu.mx*; garciamosirvingefren08@gmail.com; elimunoz@uv.mx; jacruz@unsis.edu.mx; mperez@unsis.edu.mx

Technological Innovation: Software for the Management and Administration of Neuropsychological Tests.

Industrial Application Area: Health and Education, e-Health.

Received: march 31th, 2025

Accepted: august 31th, 2025

Resumen

Las evaluaciones neuropsicológicas son fundamentales en el diagnóstico de condiciones cognitivas y neurológicas. No obstante, los métodos tradicionales manuales presentan limitaciones significativas, como errores humanos en la captura de los datos, tiempos prolongados de evaluación y falta de estandarización en la administración de pruebas. Estas deficiencias pueden retrasar el diagnóstico y afectar la fiabilidad de los resultados. Para abordar estos desafíos, este estudio presenta el diseño y desarrollo de una aplicación web para la gestión y administración de pruebas neuropsicológicas, orientada a optimizar el proceso evaluativo en términos de eficiencia, precisión y estandarización. La aplicación web se enfoca específicamente en la batería BANFE-2, ampliamente utilizada en el contexto clínico.

El desarrollo del sistema se fundamentó en la metodología MPIu+a (Modelo de Proceso de Ingeniería de Usabilidad+Accesibilidad), que guió cada fase mediante principios de Diseño Centrado en el Usuario (DCU). Para la gestión del proyecto se incorporó el marco del trabajo ágil

Scrum, permitiendo ciclos iterativos con retroalimentación continua. Como resultado, se construyó una plataforma que permite a los especialistas administrar casos clínicos, aplicar pruebas digitalizadas, registrar resultados, consultar historiales, y generar reportes en formato PDF, contribuyendo a una mayor estandarización y control del proceso evaluativo.

La evaluación de usabilidad arrojó un puntaje del 86.1%, evidenciando una buena aceptación por parte de los usuarios. Aunque el sistema no incorpora actualmente técnicas de inteligencia artificial, su arquitectura está preparada para futuras integraciones que permitan análisis automatizados. Este trabajo contribuye al fortalecimiento de herramientas tecnológicas aplicadas a la neuropsicología, ofreciendo una solución escalable, accesible y adaptada a contextos clínicos locales. Los trabajos futuros se centrarán en optimizar las limitaciones identificadas para mejorar la usabilidad, ampliar la funcionalidad y aumentar la adaptabilidad del sistema a diversas necesidades clínicas y de investigación.

Palabras clave: Ingeniería de software, Pruebas neuropsicológicas, MPIu+a, Usabilidad, Aplicación web.

Abstract

Neuropsychological evaluations play a fundamental role in diagnosing cognitive and neurological conditions. However, traditional manual methods present significant limitations, such as human errors in data recording, prolonged evaluation times, and a lack of standardization in test administration. These deficiencies can delay diagnosis and compromise the reliability of results. To address these challenges, this study presents the design and development of a web-based application for the management and administration of neuropsychological tests, aimed at optimizing the evaluation process in terms of efficiency, accuracy, and standardization. The system focuses specifically on the BANFE-2 battery, which is widely used in clinical contexts. The development process was based on the MPIu+a methodology (Usability and Accessibility Engineering Process Model), which guided each phase through principles of User-Centered Design (UCD). For project management, the agile Scrum framework was incorporated, enabling iterative cycles with continuous user feedback. As a result, a platform was built that allows specialists to manage clinical cases, administer digitized tests, record results, consult patient histories, and generate PDF reports, contributing to greater standardization and control of the evaluation process. The usability evaluation yielded a score of 86.1%, indicating strong user acceptance. Although the system does not currently incorporate artificial intelligence (AI) techniques, its architecture is designed to support future integration of automated data analysis tools. This work contributes to the advancement of technological tools applied to neuropsychology, offering a scalable and accessible solution tailored for local clinical contexts. Future work will focus on addressing identified limitations to improve usability, expand functionality, and increase system adaptability to diverse clinical and research needs.

Keywords: Software engineering, Neuropsychological tests, MPIu+a, Usability, Web application.

1. Introduction

Neuropsychological evaluation is a fundamental tool for diagnosing and monitoring cognitive and neurological conditions, providing healthcare professionals with detailed insights into mental processes and their relationships with various pathologies. Despite its clinical importance, the administration of these evaluations faces challenges related to efficiency, information security, and timely access to results [1]. Traditionally, evaluations have relied on manual methods that, although effective, are prone to human error, delays in interpretation, and difficulties in standardizing and organizing clinical data.

Technological advancements have given rise to various tools that automate neuropsychological assessments, aiming to improve accuracy, consistency, and accessibility. However, many existing solutions face limitations when adapted to specific clinical contexts or when there is a need for open, flexible, and cost-effective platforms. This study focuses on the BANFE-2 battery, a validated instrument commonly used in Mexican clinical settings to evaluate executive functions such as working memory, cognitive flexibility, planning, and impulse control [6], [7], [8].

Given the complexity and operational burden of manually administering the BANFE-2—including risks of error and time constraints—there is a pressing need to leverage technology to centralize the evaluation process, reduce errors, and improve diagnostic efficiency. To address these challenges, this article presents the design and development of a web-based system intended to streamline patient management, digital test administration, and structured result reporting.

The system development followed the MPIu+a methodology (Usability and Accessibility Engineering Process Model), which emphasizes user-centered design through iterative development and continuous evaluation. Furthermore, the Scrum agile framework was employed to manage the project in short development cycles, allowing frequent feedback and rapid adaptation throughout the process.

2. Related Work and Benchmark Analysis

Over the past decade, multiple digital tools have emerged to automate neuropsychological evaluations, reducing human error, speeding processing, and increasing access to cognitive testing. One prominent example is the Cambridge Neuropsychological Test Automated Battery (CANTAB), a computerized suite of cognitive tests validated across diverse populations, including Mexicans [3]. While CANTAB demonstrates strong accuracy and scientific rigor, it is costly, narrowly focused, and limited adaptability to specialized clinical needs like BANFE-2.

Another example is PsicoTest, a proprietary commercial platform that enables clinicians to administer complete test batteries digitally and generate reports. Although functional, PsicoTest is closed-source, limiting customization and scalability, and its licensing may pose financial barriers for public institutions or resource-limited environments [2].

Innovative academic projects also exist, such as Chandler et al.'s mobile platform for neuropsychological monitoring in psychiatric populations using machine learning models to predict cognitive states [4]. Similarly, Gómez-Valadés et al. implemented a decision-support system employing Semantic Web Rule Language (SWRL) within an

ontology to automate test result interpretation [5]. However, such systems are often unavailable publicly, lack real-world clinical validation, or are not tailored to specific protocols like BANFE-2.

A common limitation among many tools is the lack of validated usability and accessibility principles, hindering clinician adoption and diminishing user experience. Few projects employ user-centered methodologies or conduct formal heuristic evaluations to refine interaction design.

The system proposed here addresses these gaps by combining several key features:

- Specific focus on BANFE-2, widely used and validated in Mexican neuropsychology.
- Development using open-source technologies, promoting scalability, flexibility, and affordability.
- Strong grounding in MPIu+a methodology, ensuring usability, accessibility, and user satisfaction.
- Comprehensive clinical functionality, including patient registration, test administration, results tracking, and PDF report generation.

This benchmark analysis highlights a significant gap in neuropsychological digital tools that combine local clinical relevance, open architecture, practical functionality, and validated usability/accessibility. The present work aims to fill that gap, contributing a valuable resource for applied neuropsychological assessment.

3. Tools and Technologies Used

The development of the APEN platform was grounded in a robust and well-structured technological approach, utilizing modern tools and frameworks to ensure functionality, usability, scalability, and security. The core backend of the system was built using the

Django framework, a powerful and versatile Python-based solution. Django's adherence to the Model-View-Controller (MVC) architectural pattern facilitates a clear separation of concerns among business logic, presentation, and data management [11], [12].

For frontend development, standard client-side technologies such as HTML and CSS were employed to define the platform's structure and visual styling. These were complemented with JavaScript to provide dynamic interactivity. Additionally, Bootstrap, a widely adopted responsive design framework, was integrated to deliver a consistent and visually appealing user experience across a variety of devices and screen sizes [21].

PostgreSQL was selected as the relational database management system due to its reliability, efficiency in handling large datasets, and compatibility with diverse technological ecosystems. Its support for complex transactions and advanced security features ensures data integrity and protection—critical factors when handling sensitive neuropsychological information [13].

In addition to PostgreSQL's security capabilities, the Django framework provides built-in mechanisms that significantly enhance platform security. These include automatic protection against common web vulnerabilities such as Cross-Site Request Forgery (CSRF) through token validation, and Cross-Site Scripting (XSS) prevention by escaping output in templates. Django's robust authentication and authorization system securely manages user sessions and supports fine-grained access control through permissions and groups. Furthermore, Django's ORM (Object-Relational Mapping) prevents SQL injection attacks by using parameterized queries. The framework also

facilitates secure cookie management, supports HTTPS configurations including HTTP Strict Transport Security (HSTS), and enables security-related HTTP headers through middleware to mitigate risks like clickjacking and content injection [20].

By integrating these technologies and security features, the system not only automates tasks related to BANFE-2 administration but also adheres to high standards of technological quality and data protection. Its scalable architecture supports future expansions, while its focus on accessibility, performance, and security guarantees an optimized and safe user experience. This approach effectively reduces development time and delivers a modern, reliable solution tailored to the evolving needs of the neuropsychology field.

4. Methodology and Method

Currently, the use of computer systems and applications has become widespread, significantly expanding and diversifying the

profile of users interacting with websites, desktop applications, and mobile applications. For a system to succeed, one of the key challenges is to develop applications that are not only useful and efficient but also provide a satisfying and accessible user experience.

With this objective in mind, this project developed a web application, APEN (Web Application for Neuropsychological Tests and Evaluations), aimed at automating neuropsychological assessments. The development process was structured using a hybrid approach that combined the MPIu+a model (Usability and Accessibility Engineering Process Model) [14] as the primary development methodology, with the agile framework Scrum for project management.

Below is an overview of the integration of User-Centered Design (UCD) activities within the interactive Scrum cycle (see Figure 1), which describes the key stages and their relationship with the employed methodology.

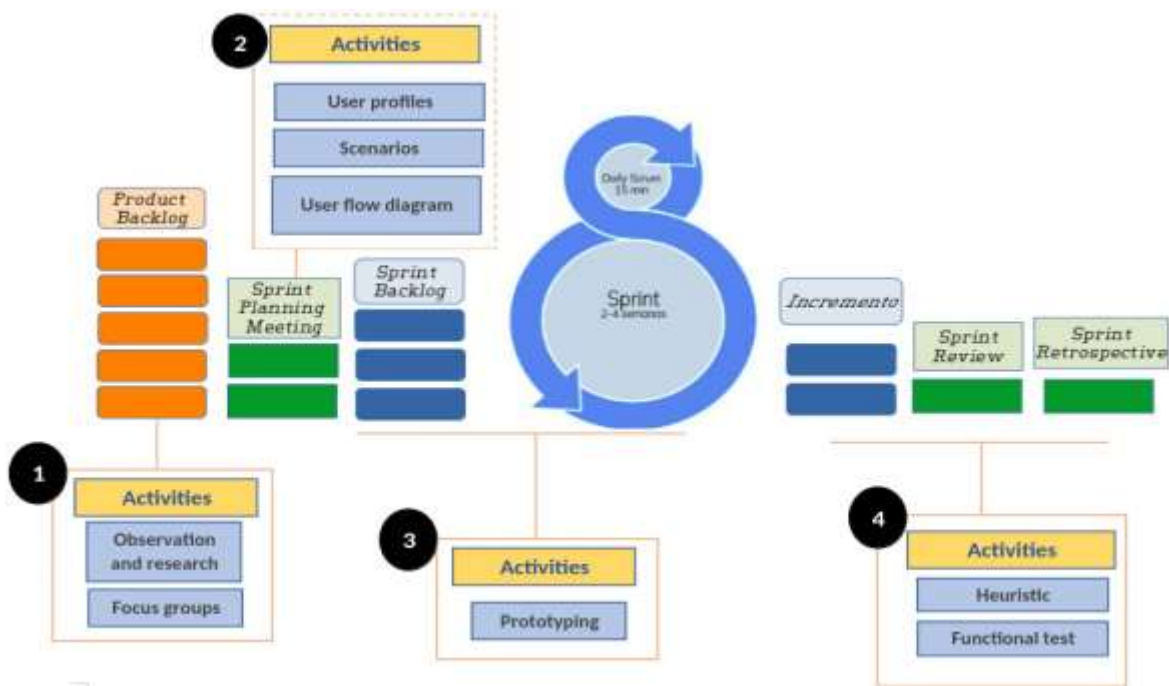


Figure 1. UCD Activities in Scrum.

Source: Own Elaboration.

MPIu+a Model as Development Methodology

The MPIu+a model was applied throughout all phases of the development cycle to ensure an optimal experience in terms of usability and accessibility. This model promotes an iterative user-centered process that integrates activities such as requirements gathering, prototype design, evaluation, and continuous validation of the interface.

The main activities performed during the development of APEN following MPIu+a included:

1. UX Backlog Storage: Consolidation of all planned activities addressing key user experience aspects throughout the Scrum lifecycle, focusing primarily on the needs of the clinical specialist.
2. Product Backlog Definition: Recording and prioritizing ideas and functionalities, applying a UCD approach to enhance usability and user satisfaction through intuitive and accessible interfaces.
3. Prototyping: Iterative development and refinement of interactive prototypes, with collaboration from the Scrum team and the Usability Owner to ensure compliance with standards.
4. Evaluation: Conducting continuous testing and assessments to validate that the system meets usability and accessibility criteria, enabling informed adjustments and ongoing improvements.

Scrum Framework for Project Management

Scrum was used exclusively as an agile framework to organize tasks, manage the product backlog, plan deliveries, and facilitate communication among the multidisciplinary team. It is important to clarify that Scrum was not applied as a software development methodology, but as a

management tool complementing the use of MPIu+a.

During development, two-week sprints were conducted, in which specific tasks such as user interface design, implementation of functional modules, and integration of automated tests were defined and prioritized. Trello was used to manage the backlog, and regular meetings were held to monitor progress and adjust plans.

Requirements Analysis

To ensure the APEN platform addresses the real needs of its users, a thorough requirements analysis phase was conducted as part of the UX Backlog definition. This stage involved both contextual inquiry and focus groups, following a user-centered approach to gather functional and non-functional requirements.

Contextual Inquiry

Field observations revealed critical limitations in the traditional application of the BANFE-2 battery. Key issues included:

- High error rates in manual data collection.
- Excessive paper usage and related inefficiencies.
- Tedious and error-prone manual transcription of results into analysis software.
- Inability to apply the test to multiple subjects simultaneously due to limited physical resources.
- Limited collaboration and data accessibility when working with paper-based results.

These findings highlighted the need for digital solutions that minimize errors, support simultaneous testing, and facilitate data reuse.

Focus Groups

A structured focus group session was conducted with stakeholders, including neuropsychologists and system designers, moderated by the Scrum Master. The goal was to define detailed requirements for the APEN system. The discussion covered:

- User roles and access control.
- Security requirements, including authentication and authorization.
- Data storage, structure, and confidentiality.
- Information presentation, emphasizing usability and accessibility.
- Test deployment, including interaction design and feedback mechanisms.
- Design standards to ensure consistency, validity, and clinical appropriateness.

This phase served as the foundation for designing a system tailored to specialists' workflows, ensuring the proposed digital platform would be both usable and clinically effective.

Design

The design phase of APEN was developed in accordance with the second stage of the UX Backlog, where the structure of the system, the definition of user roles, and specification of interactions and requirements were established.

Two primary user types were identified through the contextual inquiry and focus group methods.

- **Evaluator User:** A standard user who is responsible for conducting neuropsychological assessment using APEN. This user can create and manage their own cases and test results but cannot access or modify data from other evaluators.

- **Administrator User:** A privileged role designed for overall system supervision. This user can access all case records and evaluator data, manage user accounts, and perform administrative tasks. However, they cannot generate reports for tests not administered by them.

Functional Requirements

The functional requirements were derived from the user scenarios and redefined through stakeholder meetings and focus groups. Each requirement specifies an action the user must be able to perform and is linked to the authorized roles (Administrator or Evaluator).

- **Authentication and Profile Management:** account creation, login, password reset, profile editing.
- **Subject and Case Management:** create, list, edit, delete subject cases.
- **Test administration:** test configuration, application, real-time feedback, and data storage.
- **Result management:** reviews scores, generate and export reports (PDF, CSV).
- **User and Data Access Control:** for Administrator users.

Non-Functional Requirements

The system must also meet a set of non-functional requirements that ensure robustness, user satisfaction, and legal compliance.

- **Security:** Robust authentication and role-based access control.
- **Usability:** Intuitive interface suitable for non-technical users.
- **Maintainability:** Modular architecture enabling future updates and feature expansions.

- **Cross-Platform Compatibility:** Usable on Windows, macOS, and Linux systems.
- **Data Privacy:** Strict compliance with data privacy standards, aligned with the ethical management of clinical information.

UML Use Case Diagrams

To ensure a structured understanding of how the system meets the needs of its primary user, a UML use case diagram was created to model the interactions of the Evaluator User with the APEN system.

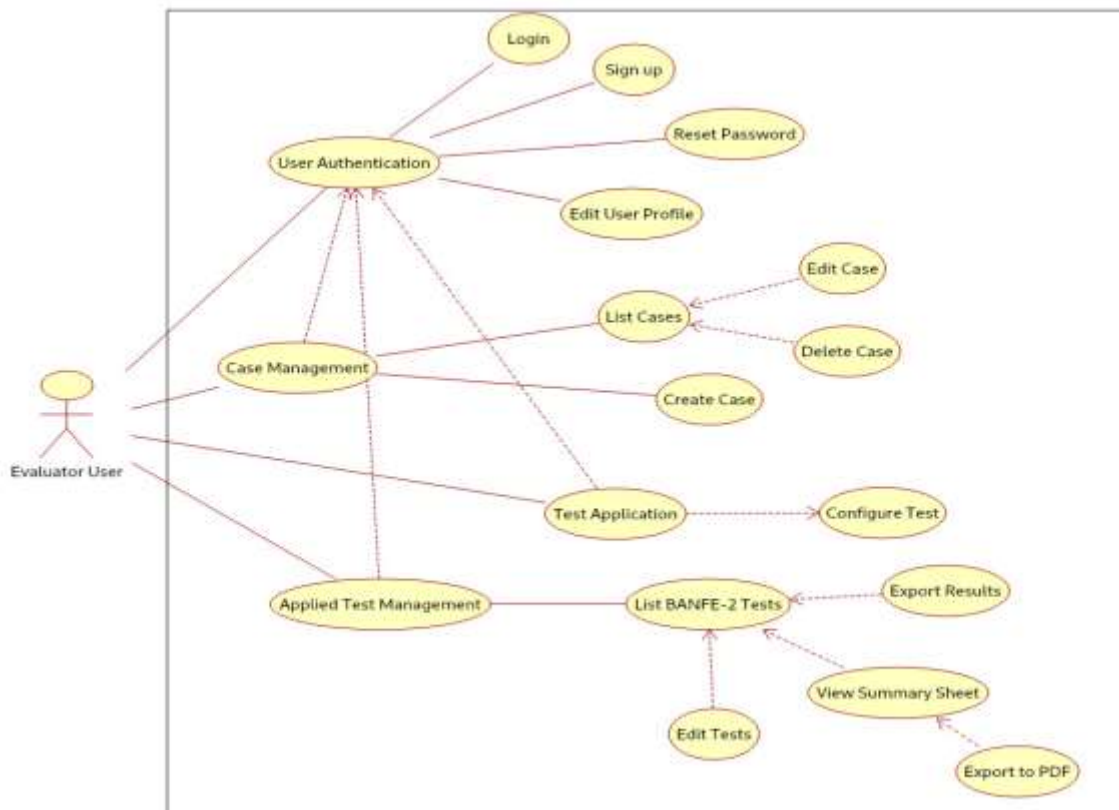


Figure 2. Use Case Diagram.

Source: Own Elaboration.

This user is responsible for managing subject records, administering neuropsychological tests, and consulting and exporting results, all within their authorized scope.

Diagram Elements:

1. Main Actor: Evaluator User: The "Evaluator User" actor represents the system's primary user, responsible for interacting with all functionalities. This user, likely an evaluator or test administrator, has direct access to all system modules, from authentication to results export.

2. Use Cases Grouped by Functionalities:

- **User Authentication:** This module ensures that evaluators can log in securely, register as new users, reset forgotten passwords, and update their user profiles. The associated use cases include: Login, Sign up, Reset Password and Edit User Profile.

- **Case Management:** This set of functionalities is designed to manage cases, understood as specific scenarios or evaluations. It allows users to create, list, edit, and delete cases. The associated use cases are: Create Case, List Cases, Edit Case and Delete Case.

◦ **Test Application and Management:** This is the system's core functionality, where tests are configured and managed, along with the tools required to process and present results. The use cases include: Configure Test: Initial setup of a test, List BANFE-2 Tests: Viewing and managing specific tests, Edit Tests: Modifying existing tests, Export Results: Generating results in exportable formats, View Summary Sheet: Viewing summary sheets of results and Export to PDF: Exporting reports and summaries to PDF format.

3. Relationships Between Use Cases:

The lines connecting the ovals (use cases) and the actor represent the user's direct interactions with the system. Some hierarchical relationships or dependencies between use cases, indicated by arrows, show how certain functionalities derive from or complement others. For example:

◦ List Cases is connected to Edit Case and Delete Case, indicating that editing or deleting requires listing the available cases first.

◦ View Summary Sheet and Export Results are linked to the applied test management module, demonstrating how the generate data can be viewed and exported.

The main goal of this system is to optimize the evaluation process, from case creation and test configuration to generating exportable reports. Its modular design allows evaluators to manage their activities efficiently and

maintain an organized workflow. The presented diagram not only facilitates stakeholders' understanding of the system but also serves as a solid foundation for software development and validation. With this model, it ensures that all key functionalities are considered, which is essential to meet the end user's needs.

Prototyping

As part of the user-centered design methodology, a series of low-fidelity prototypes were developed to define the initial structure, navigation, and functionality of the APEN system. These prototypes allowed the team to explore interface ideas, validate user workflows, and collect feedback before implementing functional modules.

Figure 3 present some of the **initial low-fidelity prototypes** created during the early stages of the project. These mockups were developed using simple tools such as Microsoft Paint and served to visualize core functionalities before actual implementation. **In the figure, some of the prototypes created can be observed**, representing the login and registration screen, the test selection and configuration interface, and the results summary sheet, respectively. These prototypes were used to validate workflows and gather feedback from future users, laying the foundation for the modules built in the final application.

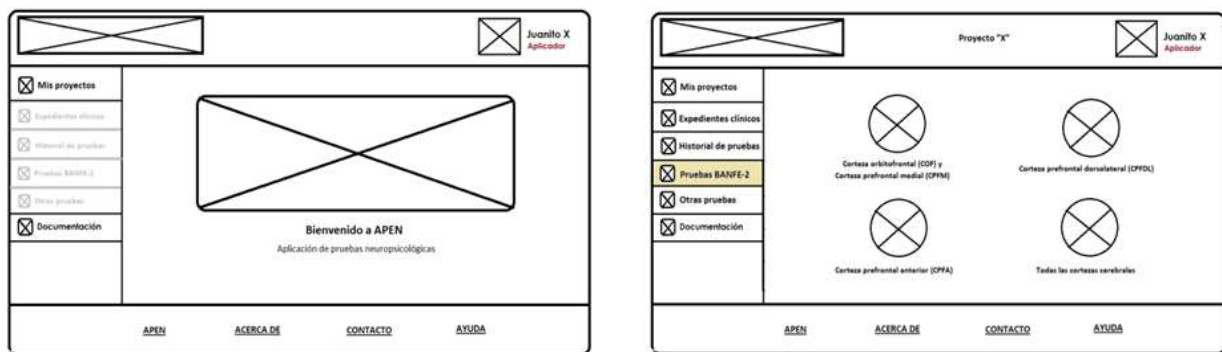


Figure 3. Interface displaying the list of records.

Source: Own Elaboration.

These visual designs were presented during focus group sessions and played a key role in defining system behavior and visual hierarchy. Feedback from users helped refine both the usability and relevance of the features.

Sprint Planning and Deliverables

The APEN development process was divided into six two-week sprints, each focused on delivering functional components aligned with user priorities identified during the UX Backlog phase. Below is a summary of the activities and deliverables for each sprint:

- **Sprint 1: Project Setup and Authentication**
 - Set up Django Backend, PostgreSQL database, and project repository.
 - Implemented user registration, login, and password reset functionality.
 - Defined user roles (Administrator and Evaluator).
- **Sprint 2: Case and Subject Management**
 - Developed modules for creating, editing, listing and deleting clinical records.
 - Integrated frontend forms and validation for subject data.
 - Conducted a sprint review with clinical advisors.
- **Sprint 3: BANFE-2 Test Modules**
 - This phase consisted of approximately 15 sub-sprints, each dedicated to the design and implementation of a specific BANFE-2 subtest.
 - Each sub-sprint included:
 - Interface layout for test.
 - Scoring logic and evaluation criteria.
 - Secure storage and validation of test results.
 - Each module was individually reviewed by clinical experts to ensure technical accuracy and adherence to the original battery structure.
 - Due to the complexity and level of detail required, this extended sprint

took approximately five months to complete.

- **Sprint 4: Test Configuration and Application**
 - Created test configuration interface, allowing selection of prefrontal areas.
 - Implemented core logic to administer BANFE-2 tests digitally.
 - Captured test responses and stored them securely.
- **Sprint 5: Results Visualization**
 - Developed result summary screens per subject and test.
 - Enabled export of summary reports in PDF format.
 - Added basic statistical summaries.
- **Sprint 6: Usability Improvements and Heuristic Evaluation**
 - Refactored UI components based on expert feedback.
 - Performed a full heuristic evaluation using Nielsen's principles.
 - Prioritized improvements to accessibility, error messages, and layout.

Heuristic Evaluation

Evaluation is a fundamental component to ensure that the system is usable and accessible, as well as to guarantee acceptance by end users. Following Nielsen's recommendations [16], the heuristic evaluation was conducted by a group of three to five experts in fields such as information systems, software engineering, databases, and programming.

Each evaluator analyzed the system's interface and functionalities applying the ten classic heuristic principles, aiming to identify usability issues and areas for improvement. Techniques employed included detailed inspection and systematic inquiry to cover as many potential interaction failures as possible.

The findings allowed prioritization of fixes and implementation of improvements aimed

at optimizing user experience and meeting required quality and accessibility standards.

Table 1. Heuristic Principles.

Id	Description
PH1	Visibility of the system's status
PH2	Correspondence between software product and the real world
PH3	User control and freedom
PH4	Consistency and adherence to standards
PH5	Recognition rather than recall-based interaction
PH6	Flexibility and efficiency of use
PH7	Help users recognize, diagnose, and recover from errors
PH8	Error Prevention
PH9	Aesthetic and minimalist design
PH10	Help and documentation

5. Results and discussion

The results obtained from the development and implementation of the APEN platform demonstrate the effectiveness of a modular, web-based system for the digital administration of the BANFE-2 neuropsychological battery. The process followed a user-centered methodology (MPIu+a) and was executed through iterative, agile sprints organized under the Scrum framework. This section presents the developed modules, functional validation, heuristic evaluation, and the implications of the system for clinical practice and future research.

Modules Developed in APEN

APEN is composed of several integrated modules designed to guide the neuropsychologist through all stages of the

evaluation process, from user authentication to test administration and result reporting. The system interface was iteratively refined to prioritize simplicity, clarity, and accessibility.

Figure 4 illustrates the user interfaces (UIs) designed for managing access to the application. These interfaces allow users to: **Iniciar Sesión:** If the user already has an active account and knows their password, they can authenticate by entering their credentials. **Registrarse:** For users without a prior account, the UI provides a registration flow that guides them through creating an account and setting up a personalized password. The interface is intuitively structured to facilitate both login and registration processes, ensuring a seamless and efficient user experience.

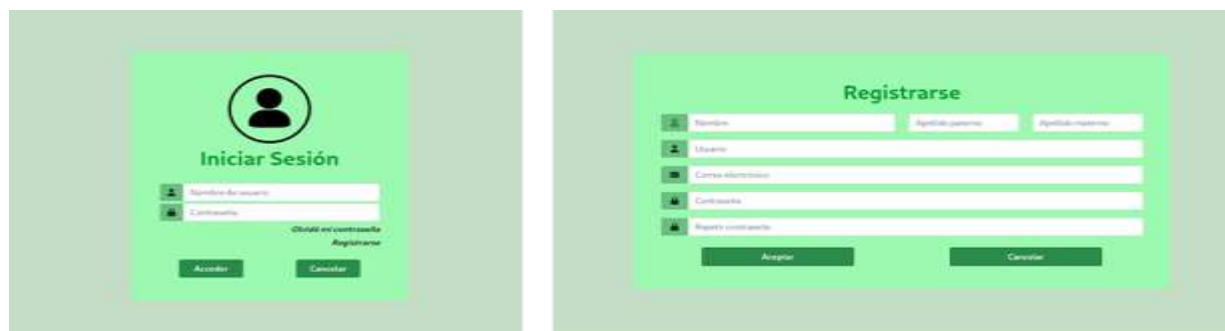


Figure 4. Login and Registration Interface.

Source: Own Elaboration.



Figure 5. Interface displaying the list of records.

Source: Own Elaboration.

In Figure 5, the user interface (UI) of the "Mis Proyectos" section is presented, designed to facilitate the management of patient-related information. Through this UI, the user has access to various key functionalities: Nuevo expediente: Allows quick registration of a new patient's information. Editar o eliminar expediente: Users can update or remove records as needed, ensuring data accuracy. Detailed information review: It is possible to access the complete record of each patient to review their history. Advanced search and filtering: The interface includes tools to search for specific patients or filter records based on criteria such as education, age, or gender, improving speed and efficiency in data management. This UI combines an intuitive and accessible design with functional tools that optimize the management of clinical records.

In Figure 6, the neuropsychological testing management module is illustrated, designed to streamline and organize the various stages of the evaluation process. This module offers the following features: Test Configuration: Allows the user to select the most suitable neuropsychological tests and customize them according to the specific needs of each evaluation, including setting parameters or application criteria. Test Administration: Facilitates the execution of the selected tests, guiding the user through the process to ensure efficient and consistent administration for the subjects being evaluated. Result Recording: Provides a secure and organized space for storing the results of the tests, allowing for further analysis and comparison.



Figure 6. Test Application Interface.

Source: Own Elaboration.

This module is designed to offer an intuitive and efficient experience, optimizing the evaluator's workflow and ensuring the structured management of both tests and results. In Figure 7, the interface of the Neuropsychological Test Management module is shown, designed to facilitate efficient management of administered tests for evaluators. Upon entering the module, users are initially presented with an organized list of administered tests, which serves as a starting point for various tasks, such as:

Export selected tests: Allows users to generate downloadable files with test results for use outside the system. Edit individual tests: Provides the option to modify the details of a specific patient's tests. View results: Enables detailed consultation of the results obtained in each test for in-depth analysis. Filter results: Includes filtering tools that assist in searching for specific tests based on established criteria, such as dates, test types, or patient characteristics.



Figure 7. Interface of the Results Visualization Module.

Source: Own Elaboration.

ÁREA	SUBPRUEBA	PUNTUACIÓN	
		NATURAL	CODIFICADA
ORBITOMEDIAL	Laboristas, Abstracción (codificada)	0	5
	Juego de cartas, Porcentaje de cartas de riesgo (codificado)	30.8	4
	Juego de cartas, Puntuación total (codificado)	46	4
	Strong forma "A", Errores tipo Strong (codificado)	4	3
	Strong forma "A", Tiempo (codificado)	76	5
	Strong forma "A", Aciertos	78	
	Strong forma "B", Errores tipo Strong (codificado)	3	3
	Strong forma "B", Tiempo (codificado)	79	5
	Strong forma "B", Aciertos	80	
	Clasificación de cartas, Errores de mantenimiento (codificado)	0	5
	SUBTOTAL		181
PREFRONTAL ANTERIOR	Clasificación semántica, Número de categorías abstractas (codificado)	3	2
	Selección de refranes, Tiempo (codificado)	37	5
	Selección de refranes, Aciertos	8-9	

Figure 8. Results Sheet Interface.

Source: Own Elaboration.

In Figure 8, the user interface corresponding to the Results Sheet is displayed, designed to provide a detailed breakdown of the data obtained from the test applied to a particular subject. This interface includes the following features. Detailed result display: Clearly and systematically presents the specific information from the performed test, facilitating analysis. Export options: Allows

the user to export the complete results sheet in PDF format, which is useful for saving records, generating reports, or sharing information with third parties in a professional manner.

These modules were developed in 18 sprints, including an extended phase of 15 sub-sprints (Sprint 3) dedicated to the design and

implementation of each BANFE-2 subtest. This modular approach enabled precise testing and validation of each functionality before integration.

Functional Validation

Tabla 2. *Approved Functional Requirements.*

Functionality Tested	Requirement	Result
User registration and authentication	RF1 - RF4	Passed
Subject record creation and editing	RF5 - RF8	Passed
BANFE-2 test configuration and application	RF9 - RF11	Passed
Real-time result capture and summary display	RF12, RF14	Passed
PDF and CSV export and visualize results	RF13, RF15 – RF17	Passed

All tested modules performed correctly under expected conditions, confirming that the system meets its operational requirements.

Heuristic Evaluation Results

A heuristic evaluation was conducted by a panel of three experts in areas such as HCI, databases, and web development. Based on Nielsen's 10 usability principles, each evaluator independently reviewed the system and scored each principle based on level of compliance.

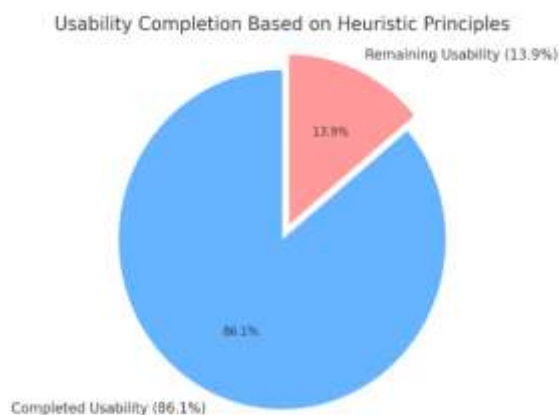


Figure 9. Heuristic Evaluation Results.
Source: Own Elaboration.

The overall score was **86.1%**, indicating a high level of usability and adherence to interface design standards. Key findings included:

- **Strengths:** Clear navigation, consistent layouts, intuitive

To ensure the system performed as intended, functional testing was conducted across all modules using predefined test cases. These cases were derived from the system's functional requirements and user stories, and they simulated real-world interactions.

interaction patterns, minimal cognitive load.

- **Areas for improvement:**
 - **PH10 – Help and Documentation:** Insufficient tooltips or contextual guides. User may need help accessing certain modules.
 - **PH11 – Error Prevention:** Error validation in forms could be improved with proactive alerts and inline messages.
 - **PH14 – Diagnosis and Recovery from Errors:** Some error messages lacked clarity or next-step instructions.
 - **PH15 – Accessibility and Flexibility:** Limited support for screen reader and keyboard-only navigation.

Corrective measures for these aspects have been documented for future development cycles to ensure full compliance with usability and accessibility standards.

Discussion

One of the main motivations for developing APEN was to address common problems in the traditional, manual administration of neuropsychological tests. Observations made during contextual inquiry confirmed the

following limitations in paper-based assessments:

- High risk of human error in data collection and scoring.
- Time-consuming processes for organizing and transcribing test data.
- Inability to apply tests concurrently to multiple subjects.
- High consumption of paper and physical resources.
- Limited accessibility for record sharing and collaborative analysis.

The implementation of APEN directly addresses these issues. Automation enables:

- **Time Efficiency:** Reduces total evaluation and reporting time.
- **Error Minimization:** Automated scoring improves reliability.
- **Scalability:** Allows for simultaneous administration of tests.
- **Ecological Benefit:** Replaces large amounts of printed materials.
- **Better Data Management:** Structured storage allows for quick retrieval and analysis.

The platform has the potential to transform how neuropsychological tests are applied in the clinical setting. Its design is especially relevant for public institutions and professionals in Latin America, where access to expensive commercial software is limited. Unlike tools such as **CANTAB** or **PsicoTest**, APEN is:

- Open-source
- Contextualized to Mexican clinical standards.
- Easily customizable.
- Designed with accessibility and usability in mind.

The ability to **generate structured reports** and **store patient records securely** makes it a reliable tool for longitudinal tracking of

executive function in various neurological and psychiatric conditions.

The development of the web application was based on a strategic selection of technologies and methodologies that ensure scalability, efficiency, and a high-quality user experience. Django, a Python-based web development framework, is well-known for its emphasis on speed and security. Django facilitated the development of APEN by providing built-in tools such as ORM (Object-Relational Mapping), authentication, and protection against common attacks like CSRF and SQL injection [17]. Bootstrap was used to ensure a responsive and consistent design across devices with different resolutions, significantly reducing development time by avoiding the need to build visual elements from scratch.

By implementing the MVC architecture pattern, the code was organized in a clear manner, separating presentation layers, business logic, and data access. This approach simplifies maintenance and scalability of the application, in line with Fowler's recommendations [19] for modular and reusable software design [18]. Prototyping was used as a crucial technique to ensure the application met user needs. As Nielsen points out, the use of prototypes in interactive system design greatly improves usability by allowing for rapid iterations based on real user feedback [16].

Although the system currently focuses on test administration and reporting, its modular design opens the door to future enhancements such as:

- Integration of **machine learning models** to detect cognitive deterioration patterns.
- Expansion to other neuropsychological batteries beyond BANFE-2.

- Implementation of **assistive technologies** (e.g., voice commands, screen reader compatibility) to improve accessibility.

In summary, the results demonstrate that APEN is a functional, usable, and clinically valuable tool that fulfills its intended objectives. It improves existing workflows in neuropsychological evaluation and offers a strong foundation for future digital innovations in the field.

6. Conclusiones

The development of the APEN web application represents a technically robust and functionally validated solution for the digital automation of neuropsychological assessments, specifically the BANFE-2 battery. The strategic use of technologies such as Django, Bootstrap, and the MVC pattern enabled the construction of a scalable, secure, and modular platform tailored to the needs of mental health professionals.

With a usability score of 86.1%, the system demonstrates strong alignment with user expectations. Iterative prototyping, guided by heuristic evaluation and user feedback, allowed the continuous refinement of both functionality and interface. Identified areas for improvement, particularly in documentation, error handling, and accessibility, provide a clear roadmap for future enhancements.

The hybrid methodology combining MPIu+a with Scrum fostered an agile and user-centered development process, ensuring that clinical relevance and usability were prioritized at every stage. As a result, APEN not only improves the efficiency and accuracy of neuropsychological evaluations but also serves as a replicable model for future digital health tools.

In conclusion, this project contributes a significant step forward in the digital transformation of neuropsychological testing in Latin America. With continued iteration and expansion, APEN holds the potential to become a comprehensive, accessible, and clinically impactful platform in neuropsychological practice and research.

7. Future Research

The development of this work revealed several opportunities for further exploration that could significantly enrich the system and its applicability. Although these proposals were not implemented due to time and technical constraints, they outline important directions for future research and development.

First, the optimization of the examiner's experience remains a central line of work. Enhancing the user interface and overall usability of the platform would allow for a more agile, intuitive, and efficient administration of tests, while also supporting ongoing professional training through online learning modules.

A second area of focus is the advancement of data management strategies. Building a more robust infrastructure for the collection, storage, and analysis of information would enable faster access to results and support the implementation of longitudinal or comparative analyses, thus strengthening the value of the system as a diagnostic and research tool.

Equally important is the reinforcement of data security and privacy. The integration of advanced encryption mechanisms and compliance with international standards would ensure the ethical and safe management of sensitive health information, an essential requirement in digital health environments.

Another promising direction involves the development of advanced analysis modules. The inclusion of interactive visualizations, dashboards, and statistical summaries could facilitate a clearer interpretation of results and enhance decision-making processes for professionals.

The expansion of neuropsychological assessments also represents a valuable line of inquiry. Incorporating additional batteries and tests within the same platform would not only broaden diagnostic coverage but also reduce the time required for administration and analysis.

Finally, further validation in diverse populations is necessary. Testing the application with individuals across different age groups and with specific clinical conditions would provide insights into its diagnostic accuracy and reveal areas for improvement, ensuring its reliability in real-world clinical contexts.

8. References

- [1] Cella, M., Okruszek, Ł., Lawrence, M., Zarlenga, V., He, Z., & Wykes, T. (2022). Web-Based Cognitive Testing in Psychiatric Research: Validation and Usability Study. *JMIR Mental Health*, 9(2), e30443. <https://doi.org/10.2196/30443>
- [2] PsicoTest. (s.f.). *Evaluación Neuropsicológica – Software Completo* [Software] Retrieved October 15, 2024 <https://psicotest.mitiendanube.com/productos/evaluacion-neuropsicologica-software-completo/>
- [3] Green, R., Till, C., Al-Hakeem, H., Cribbie, R., Téllez-Rojo, M. M., Osorio, E., ... Schnaas, L. (2018). "Assessment of neuropsychological performance in Mexico City youth using the Cambridge Neuropsychological Test Automated Battery (CANTAB)". *Journal of Clinical and Experimental Neuropsychology*, vol. 41, no 3, pp. 246–256. DOI: <https://doi.org/10.1080/13803395.2018.1529229>
- [4] Chandler, C., Foltz, P. W., Cohen, A. S., Holmlund, T. B., Cheng, J., Bernstein, J. C., ... & Elvevåg, B. (2020). "Machine learning for ambulatory applications of neuropsychological testing". *Intelligence-Based Medicine*, vol. 1, 100006. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ibmed.2020.100006>
- [5] Gómez-Valadés, A., Martínez-Tomás, R., García-Herranz, S., Bjørnerud, A., & Rincón, M. (2024). "Early detection of mild cognitive impairment through neuropsychological tests in population screenings: a decision support system integrating ontologies and machine learning". *Frontiers in Neuroinformatics*, vol. 18, no. 1. DOI: <https://doi.org/10.3389/fninf.2024.1378281>
- [6] Lezak, M. D., Howieson, D. B., Bigler, E. D., & Tranel, D. (2012). *Neuropsychological assessment* (5^a ed.). Oxford University Press.
- [7] Flores Lázaro, J., Ostrosky Shejet, F., y Lozano Gutiérrez, A. (2014). *Manual de la batería neuropsicológica banfe-2. El manual moderno*.
- [8] Robledo-Castro, C., Castillo-Ossa, L. F., & Hederich-Martínez, C. (2023). "Effects of a computational thinking intervention program on executive functions in children aged 10 to 11". *International Journal of Child-Computer Interaction*, vol. 35, 100563. <https://doi.org/10.1016/j.ijcci.2022.100563>
- [9] Valadez Sierra, M. D. L. D., Rodríguez Cervantes, C. J., Verche, E., & Panduro Espinoza, B. V. (2024). "Creativity and Decision Making in Giftedness". *Education Sciences*, vol. 14, no. 3, pp. 251. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijcci.2022.100563>

- [10] San-Juan, D., Mas, R. N. M., Gutiérrez, C., Morales, J., Díaz, A., Quiñones, G., ... & Anschel, D. (2022). "Effect of the anodal transcranial direct current electrical stimulation on cognition of medical residents with acute sleep deprivation". *Sleep Science*, vol. 15, no. (S 01), pp. 89-96. DOI: <https://doi.org/0.5935/1984-0063.20220007>
- [11] Giraldo Mejía, D. A., Vargas Agudelo, S. E., & Garzón Gil, J. C. (2021). Marco de trabajo para seleccionar un patrón arquitectónico en el desarrollo de software. *Revista Internacional de Investigación e Innovación Tecnológica*. URI: <https://dspace.tdea.edu.co/handle/tdea/2670>
- [12] Kaur, S., Anuranjana, & Roy, Y. (2023). "Website Development with Django Web Framework". *Explainable Machine Learning Models and Architectures*, pp. 141-154.
- [13] Ahmadzadeh, A., Adhyapak, R., Chaurasiya, K., Nagubandi, L. A., Aparna, V., Martens, P. C., ... & Seelamneni, S. H. (2024). "A dataset of manually annotated filaments from H-alpha observations". *Scientific Data*, vol. 11, no. 1, pp. 1031. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41597-024-03876-y>
- [14] Meusburgger Alzate, M. (2019). "Modelo de proceso centrado en el usuario (mpiu+a) como metodología Ágil aplicado a un proyecto de software" [tesis de maestría]. Universitat de Lleida. Descargado de <http://hdl.handle.net/10459.1/67982>
- [15] Hicks, M. (2024). *User-Centered Design: A Guide to Building Better Products*. Beyond the Backlog.
- [16] Nielsen, J. (2024). Ten usability heuristics. Nielsen Norman Group. Descargado de <https://www.nngroup.com/articles/ten-usability-heuristics/>
- [17] Sharma, M., Khan, M. S., & Singh, J. (2024). "Python & Django the Fastest Growing Web Development Technology". In 2024 IEEE 1st Karachi Section Humanitarian Technology Conference (KHI-HTC), vol. 1, no. 1, pp. 1-9. DOI: <https://doi.org/10.1109/KHI-HTC60760.2024.10482286>
- [18] Jorge, L. (2023). Understanding the MVC Architecture: Unleashing the Power of Modular Web Development. Medium. Recuperado de <https://medium.com/@livajorge7/understanding-the-mvc-architecture-unleashing-the-power-of-modular-web-development-87ec81a2d902>
- [19] Fowler, M. (2003). *Patterns of Enterprise Application Architecture*. Addison-Wesley.
- [20] Django Software Foundation. (2024). *Django documentation*. <https://www.djangoproject.com/>
- [21] Bootstrap. (2024). *The most popular HTML, CSS, and JS library*. <https://getbootstrap.com/>



Revista Internacional de Investigación e Innovación Tecnológica

Página principal: www.riit.com.mx

Aplicaciones didácticas de redes neuronales mediante Excel® para Ingeniería Química y Bioquímica

Educational applications of neural networks using Excel® for Chemical Engineering and Biochemistry

Calderón-Ramírez, M.^a, Gaitán-Vélez, V.^b, Quemada-Villagómez, M.L.^b, Martínez-González, G.M.^c, Jiménez-Islas, H.^{b*}

^a Departamento de Diseño y Desarrollo de Equipo, Tecnológico Nacional de México, CP:38020, CRODE Celaya, Gto.

^b Departamento de Ingeniería Bioquímica y Ambiental, Tecnológico Nacional de México, CP: 38010, Celaya, Gto.

^c Departamento de Ingeniería Química, Tecnológico Nacional de México, CP: 38010, Celaya, Gto.

mario.calderon@itcelaya.edu.mx; bvgv25@gmail.com; miriam.quemada@itcelaya.edu.mx;

gloriam@iqcelaya.itc.mx; hugo.jimenez@itcelaya.edu.mx*

Área de aplicación: Ingeniería Química y Bioquímica.

Innovación tecnológica: Uso de hoja electrónica para entrenamiento de redes neuronales.

Recibido: 12 junio 2024

Aceptado: 10 octubre 2025

Abstract

Currently, applications of artificial neural networks can be found in various fields due to the rapid development of information technology, ushering in a new era of System Identification (SI) that encompasses every aspect of our society. This paper aims to give students an overview of general methodologies to help them understand System Identification and its potential applications in chemical and biochemical engineering. So, it explains the basics of Artificial Neural Network algorithms using spreadsheet software (Microsoft Excel®). The handling of experimental results, the construction models with algebraic equations, use of mathematical minimization functions and models, and the use of the optimization tool (SOLVER™) were employed to convey the essential concepts. This procedure was applied in a didactic manner to various case studies using static-feedforward neural networks, dynamic-feedback neural networks, continuous differential dynamic neural networks (black box model), and complementary hybrid neural networks (grey box models).

These models require information through input data and generate an output that describes complex and nonlinear behaviors. This work introduces students to the use of basic artificial intelligence models applied to chemical and biochemical engineering.

Keywords: Applied Artificial Intelligence, Neural Network Models, Optimization in Engineering, Algebraic Models.

Resumen

Actualmente se pueden encontrar aplicaciones de redes neuronales artificiales en diversos campos debido al rápido desarrollo de la tecnología de la información, abriendo paso a una nueva era de la Identificación de Sistemas (IS) que abarca cada aspecto de nuestra sociedad. El objetivo del presente trabajo es proporcionar a la comunidad estudiantil una visión de las metodologías generales con el fin de proporcionar a los estudiantes un panorama de la Identificación de Sistemas y sus aplicaciones potenciales en ingeniería química y bioquímica. Por lo tanto, se expone el fundamento de los algoritmos de Redes Neuronales Artificiales utilizando un software de hoja de cálculo electrónica (Microsoft Excel®). El manejo de resultados experimentales, construcción de modelos con ecuaciones algebraicas, uso de funciones y modelos matemáticos de minimización, así como el manejo de la herramienta de optimización (SOLVER™) se utilizaron para expresar los conceptos esenciales. Este procedimiento se aplicó, de forma didáctica, a diferentes casos de estudio utilizando redes neuronales *feedforward*, redes neuronales *Dynamic-feedback*, redes neuronales dinámicas continuas diferenciales (modelos de caja negra) y redes neuronales híbridas complementarias (Cajas Gris o modelos híbridos). Estos modelos requieren información a través de datos de entrada y generan una salida que predice comportamientos complejos y no lineales. Este trabajo proporciona una introducción al estudiante para que pueda usar modelos básicos de inteligencia artificial aplicados a la ingeniería química y bioquímica.

Palabras clave: Inteligencia Artificial Aplicada, Modelos de Redes Neuronales, Optimización en Ingeniería, Modelos algebraicos.

I. Introducción

Desde sus primeros semestres los estudiantes de licenciatura realizan experimentos de laboratorio y obtienen numerosos datos que deben interpretar. Sin embargo, a menudo ellos no reconocen que estos datos pueden representarse mediante modelos matemáticos. La Identificación de Sistemas (IS) [1] es la interacción inicial con los fundamentos de la Inteligencia Artificial (IA), que se logra a través de modelos matemáticos adaptativos y que es esencial en procesos de ingeniería tanto académicos como industriales. Adaptar a los estudiantes a

esta era digital es crucial, lo que se logra mediante prácticas de laboratorio y el uso de herramientas computacionales como las Redes Neuronales Artificiales (RNA) [1].

El uso de RNA permite representar modelos no lineales de manera flexible, robusta al ruido experimental y con capacidad para describir fenómenos con fuerte carga aleatoria [2]. Estas redes proveen modelos empíricos útiles en aplicaciones como detección de errores, procesamiento de señales, modelado y control de procesos. Aunque requieren ser validadas y someterse a

un sobreajuste (*overfit*), las ventajas significativas son su menor tiempo de respuesta y su capacidad de mejora continua [3].

En ingeniería química y bioquímica, el uso de inteligencia artificial y aprendizaje automático ha crecido sustancialmente, con las redes neuronales desempeñando un papel importante [4]. Permiten analizar grandes cantidades de datos, aplicándose en tareas como modelado, clasificación y predicción, describiendo fenómenos complejos a partir de datos experimentales [5]. Algunos ejemplos incluyen el flujo turbulento en tuberías, curvas de adsorción y procesos de cristalización, ya que son excelentes ejemplos de modelos de alta complejidad no lineal [6].

Las RNA son útiles en sistemas no lineales multiparamétricos, donde los modelos fenomenológicos son complejos de desarrollar y a menudo imprecisos [7]. Son esenciales en el control de sistemas químicos y en bioprocesos, donde se necesitan evaluación en tiempo real y adaptabilidad a cambios ambientales [8]. Además, permiten el análisis estadístico multivariable y la construcción de superficies de respuesta complejas, superando las limitaciones de modelos polinomiales en sistemas altamente no lineales [9].

Las redes neuronales artificiales (RNA) representan una de las herramientas más poderosas en el ámbito del modelado y la optimización de procesos complejos, especialmente en disciplinas como la ingeniería química, donde los sistemas suelen ser altamente no lineales, multivariables y difíciles de describir mediante modelos deterministas. Entre las arquitecturas más relevantes se encuentran las redes neuronales feedforward, las redes neuronales dinámicas y las redes neuronales diferenciales, cada una con características particulares que las hacen útiles en distintos contextos.

Aunque las redes neuronales funcionan como una caja negra, se han desarrollado metodologías para identificar la predominancia de factores de peso, facilitando la interpretación de variables en la predicción de procesos [10]. Las redes feedforward, también conocidas como perceptrones multicapa, son las más básicas y utilizadas. Se caracterizan por un flujo de información unidireccional, desde la capa de entrada hasta la capa de salida, pasando por capas ocultas que transforman los datos mediante funciones de activación. Estas redes carecen de memoria o retroalimentación, lo que las hace más apropiadas para problemas estáticos. En ingeniería química se aplican ampliamente en la predicción de propiedades fisicoquímicas de compuestos y mezclas, en la estimación de parámetros de calidad de productos en procesos de destilación, polimerización o fermentación, y en la optimización de condiciones de operación, reduciendo la necesidad de experimentos costosos o simulaciones complejas.

Por su parte, las redes neuronales dinámicas incorporan retroalimentación y permiten capturar la evolución temporal de los procesos, lo que resulta fundamental en sistemas que no son estáticos. Ejemplos de estas arquitecturas son las redes recurrentes (RNN) y sus variantes modernas como LSTM o GRU, que han demostrado gran eficacia para trabajar con series temporales. En ingeniería química se utilizan para el control predictivo de procesos donde la temperatura, la presión o la concentración cambian con el tiempo, en la predicción de comportamientos futuros de variables de operación a partir de datos históricos, y en la simulación de fenómenos transitorios como reacciones exotérmicas, donde predecir el comportamiento dinámico es crucial para la seguridad y eficiencia del sistema. Muchos procesos químicos y bioquímicos son dinámicos, requiriendo redes neuronales recursivas [11].

Las redes neuronales diferenciales, conocidas como *Neural ODEs*, constituyen un enfoque emergente que combina la flexibilidad del aprendizaje automático con la solidez del modelado matemático tradicional. En este caso, la evolución de un sistema se plantea como una ecuación diferencial ordinaria parametrizada por una red neuronal, lo que permite integrar el conocimiento basado en primeros principios con la capacidad predictiva de las RNA. Este enfoque ha demostrado ser especialmente valioso en la ingeniería química para el modelado híbrido de procesos complejos como la fermentación o la cristalización, donde los mecanismos físicos no siempre están completamente descritos; también para la identificación de cinéticas de reacción sin necesidad de suponer modelos mecanísticos *a priori*, y en la simulación de procesos continuos como el flujo en reactores tubulares o la difusión en sistemas de separación. Estas redes permiten describir fenómenos a través de ecuaciones diferenciales, siendo especialmente útiles en sistemas complejos [12].

En conjunto, estas tres arquitecturas muestran la versatilidad de las redes neuronales como herramientas aplicadas a la ingeniería química. Mientras que las feedforward resultan adecuadas para el modelado estático y la predicción de propiedades, las dinámicas ofrecen soluciones efectivas para el análisis de procesos transitorios, y las diferenciales establecen un puente entre la física tradicional y la inteligencia artificial. Gracias a ello, hoy en día las RNA contribuyen a diseñar procesos más seguros, eficientes y sostenibles, lo que las convierte en un recurso estratégico en el desarrollo de la industria química moderna y por lo tanto es esencial su comprensión y aprendizaje.

El uso de hojas de cálculo, como Excel®, para construir y entrenar RNA es una alternativa didáctica y asequible para introducir a los estudiantes a la IA. Esta

herramienta facilita la visualización del proceso de modelado neuronal, ajuste de datos y generación de respuestas, complementando la formación académica y desmitificando la aparente complejidad del uso de estos métodos [13-14]. La implementación de esta estrategia con Excel® ha demostrado ser viable, proporcionando resultados que respaldan su uso para la construcción de redes neuronales [15-16].

Excel® es una herramienta ampliamente utilizada en la enseñanza de la ingeniería, lo que permite a los estudiantes familiarizarse con el proceso de planteamiento de modelos neuronales, ajustando datos y generando respuestas de manera clara y didáctica [17]. Por lo tanto, el objetivo de este trabajo es emplear hojas de cálculo de Excel® como estrategia didáctica en la enseñanza de RNA en el aula, que se enfocará en el manejo de datos experimentales, la construcción de modelos con ecuaciones algebraicas, el uso de funciones y métodos matemáticos de minimización, y la utilización de herramientas de optimización (SOLVER™), para mostrar una visión didáctica del uso de esta herramienta en ingeniería química y bioquímica [18], aunque hay otras alternativas para hacer estimación de parámetros como MATLAB, MAPLE o códigos computacionales en lenguajes de alto nivel disponibles en Internet. Es importante mencionar que la aplicación de RNA se ha extendido en ciencia e ingeniería, por lo que se ha creado software especializado que esencialmente es una caja negra, a la cual se alimentan datos esperando una respuesta sin conocer los fundamentos matemáticos y metodológicos empleados [19]. En contraste, las hojas de Excel® permiten comprender estos fundamentos, facilitando su uso con conocimiento elemental que permite conocer los conceptos básicos del algoritmo que posteriormente podrá ser trasladado a plataformas multilenguaje (R *Statistical*

Computing, MATLAB + Simulink, Python, Symbolic Math Computing, entre otros).

En este trabajo se propone utilizar el fundamento de los algoritmos de Redes Neuronales Artificiales mediante el uso de una hoja de cálculo para manipular datos numéricos (Microsoft Excel® y la herramienta de optimización SOLVER™). El método se aplicará a diferentes casos de estudio que involucren redes neuronales estacionarias, redes neuronales recursivas, redes neuronales dinámicas continuas diferenciales y redes neuronales híbridas complementarias (Caja Gris, modelos híbridos), lo que presentará una visión general y didáctica del uso de esta herramienta para las ingenierías de química y bioquímica principalmente, aunque los conceptos teóricos y formas de resolución de los casos de estudio tratados son extrapolables a cualquier área de la ciencia.

II. Materiales y métodos

Las redes neuronales fueron establecidas para replicar el comportamiento del cerebro, una serie de neuronas (nodos) interrelacionados (parámetros de peso) que se interconectan entre sí de forma similar a la fuerza sináptica y que tienen una función de transferencia que envía una señal de salida (impulso nervioso). La construcción de una red neuronal comienza con la definición de la arquitectura, que incluye la cantidad de capas y el número de neuronas en cada capa. Las redes neuronales suelen estar compuestas por una capa de entrada, una o más capas ocultas y una capa de salida, como se describe en la Figura 1. Cada neurona en una capa recibe una señal de las neuronas de la capa anterior, la procesa mediante una función de activación y transmite la salida hacia las neuronas de la siguiente capa. La elección de la función de activación o de transferencia depende de su aplicación [5, 9].

El siguiente paso en la construcción de una red neuronal es la inicialización de los pesos y sesgos, que son los parámetros ajustables del modelo. Estos parámetros se inicializan con pequeños valores aleatorios. Posteriormente, la red se entrena utilizando un conjunto de datos experimentales, donde se ajustan los pesos y sesgos para minimizar la diferencia entre las predicciones de la red y los valores reales. Este proceso de ajuste se realiza mediante un algoritmo de optimización, usualmente el gradiente de máximo descenso, aunque puede utilizarse el método de Levenberg-Marquardt, método de Luus-Jaakola, entre diversos algoritmos de optimización, mediante una función de minimización que mide el error de las predicciones. Durante el entrenamiento, el algoritmo de retropropagación se utiliza para calcular los gradientes de la función de minimización con respecto a los pesos y sesgos, permitiendo que los parámetros se actualicen de manera eficiente, hasta alcanzar la tolerancia numérica establecida *a priori* para definir que se ha alcanzado convergencia. Esta estructura es la forma genérica de una red; a continuación, se mostrarán las formas matemáticas de las redes a utilizar en este trabajo.

Red estática (*Feedforward*)

La red estática es un sistema simple que consiste en: una capa de entrada, la cual incluye los datos de entrada que alimentan la red; una capa oculta, que permite las relaciones complejas entre la entrada y la salida; y la capa de salida, con la que obtiene los resultados y la salida de la red (Figura 1). Esta configuración, aun siendo simple, permite lograr resultados muy significativos [20]. Este tipo de red se conoce como red de retroalimentación (*Feedforward*).

El estado de cada neurona v en la primera capa oculta está definido como la suma de los productos de cada entrada x_j con su correspondiente factor w_j y la b que

corresponde al sesgo del proceso de aprendizaje de la red (bias), ver Ec. (1).

$$v = \sum_{j=1}^m w_j x_j + b = \sum_{j=0}^m w_j x_j \quad (\text{Ec. 1})$$

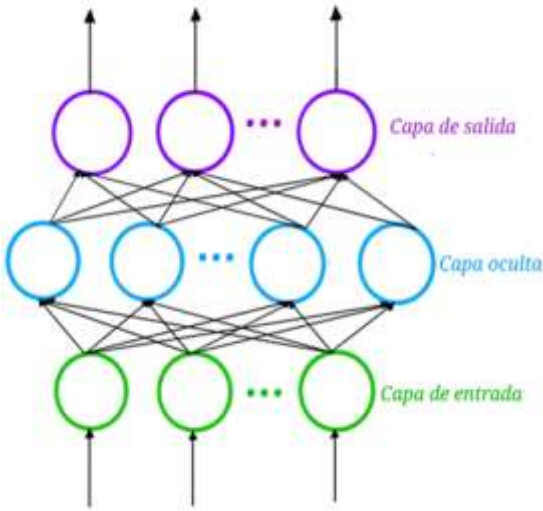


Figura 1. Construcción de una Red Neuronal Artificial simple [3].

En la ecuación 1 existen dos posibles escenarios para definir la ecuación, un caso donde se presente el sesgo (bias) por modelado representado por b o el caso que no se tenga este término, por lo que el índice de la sumatoria se ve modificada, en los casos de estudio empleados en este trabajo se utiliza por default las ecuaciones que incluyen los términos bias.

Adicionalmente a los factores de peso, las redes neuronales son determinadas por las funciones de activación por cada nodo, a excepción de los nodos de entrada. Hay diferentes funciones de activación o de transferencia según las aplicaciones, pero en general se tienen las funciones lineales, sigmoidea, tangente hiperbólica y muchas más que permiten definir el rango de salida que se busca (Ecs. (2-6)).

$$f(x) = cx \quad (\text{Ec. 2})$$

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (\text{Ec. 3})$$

$$f(x) = \frac{2}{1 + e^{-2x}} - 1 \quad (\text{Ec. 4})$$

$$f(x) = \frac{1}{2}(1 + \tanh(x)) \quad (\text{Ec. 5})$$

$$f(x) = \tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (\text{Ec. 6})$$

Una característica importante de las funciones de activación no lineales es que, independientemente de la magnitud de las entradas, la función entrega una salida en un rango pequeño de valores, lo que permite modular órdenes de magnitud grandes entre los valores de las neuronas de entrada. Por último, las neuronas de salida hacen la predicción de las variables de respuesta de la red en función de la información recibida en las neuronas de entrada. Una vez que se tiene la estructura general de la red neuronal, es

necesario entrenarla, es decir, a través de observaciones o datos experimentales se realiza un ajuste de parámetros, en donde los factores de peso van cambiando, disminuyendo el error relativo de la predicción por parte de la red neuronal y del dato experimental. Existen múltiples algoritmos de aprendizaje; la más común es la retropropagación (*backpropagation*), en la cual la diferencia entre el valor deseado y el obtenido se calcula por cada salida de la neurona. Esta técnica se considera un

aprendizaje supervisado donde a cada iteración en que se vayan ajustando los valores se le denomina época (*epoch*). Por cuestión didáctica, en el uso de esta herramienta, se utiliza SOLVER™ de Excel® para realizar este ajuste de parámetros (Técnica de regresión no lineal o mínimos cuadrados).

Una vez entrenada la red, ésta debe ser alimentada con nuevos datos para verificar, examinar y determinar si se obtiene una predicción fidedigna de la información. Este enfoque permite a las redes neuronales aprender patrones complejos y realizar predicciones precisas en una variedad de aplicaciones. La cuestión de decidir cuantas

neuronas o capas ocultas debe llevar la red es una tarea heurística y dependerá de la complejidad del problema a resolver y la disponibilidad de datos experimentales. En este trabajo, los casos de estudio se realizarán en Excel®, por lo tanto, no se usarán más de 10 neuronas, con una sola capa oculta. En algunos casos donde los factores de peso tienden a cero, se pueden eliminar estas conexiones. Los datos se suelen preprocesar en un rango de 0 a 1 debido a que las salidas de las funciones de transferencia, como la función logarítmica sigmoidea o la tangente hiperbólica, tienen la salida en ese rango y se suelen normalizar los datos según la Ec. (7) u (8).

$$A = \frac{V - V_{min}}{V_{max} - V_{min}} \quad (\text{Ec. 7})$$

$$A = \left(\left(\frac{0.8}{V_{max} - V_{min}} \right) V + \left(0.1 - \frac{0.8V_{min}}{V_{max} - V_{min}} \right) \right) \quad (\text{Ec. 8})$$

Donde A es el valor adimensional, V es la variable original y V_{max} , V_{min} son los valores máximo y mínimo de los datos. Generalmente, la Ec. (7) es una adimensionalización general con rango de 0 a 1 mientras que la Ec. (8) tiene un grado de amortiguamiento que se puede considerar según el valor numérico, en este caso, estaría entre los valores 0.1 y 0.8, la razón de estas formas de adimensionalización dependerá de las funciones de transferencia que se utilicen.

Red recursiva

La red recursiva tiene una estructura similar a la red estándar estática, con nodos conectados a través de conexiones de alimentación hacia adelante. Tiene la característica de tener conexiones añadidas recurrentes, que pueden tener un retraso en el tiempo como se muestra en la Figura 2 [8].

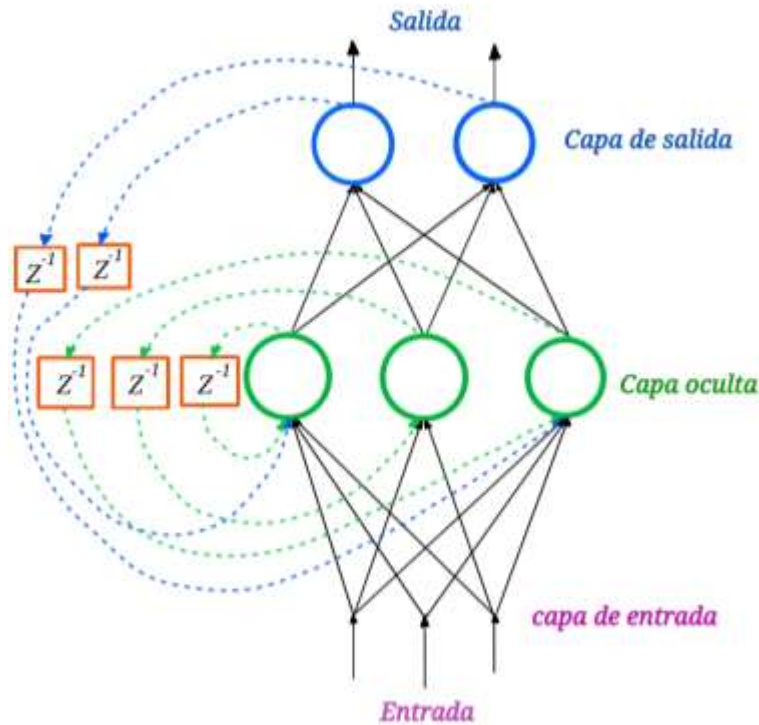


Figura 2. Estructura básica de una red recursiva con conexiones recurrentes [3].

Los modelos de redes neuronales recurrentes tienen la misma relación para realimentar la red como respuesta de impulso infinito autorregresivo. Los modelos tienen que ser modelos de respuesta de impulso finito de valores con respuesta promedio, lo que permite describir la evolución de las variables definidas del modelo en caso de presentar un cambio abrupto sin modificaciones de la trayectoria de la función. Lo anterior se permite por sus conexiones de retroalimentación, las variables recursivas pueden ser del orden que se requiera de acuerdo con las necesidades de las ventanas de datos de entradas retrasadas. Es una herramienta utilizada principalmente para describir sistemas dinámicos no periódicos. Este tipo de red neuronal presenta una validez en rangos con poca extrapolación.

Red dinámica diferencial

Las redes dinámicas surgieron como una necesidad de realizar descripciones temporales que puedan identificar

comportamientos en tiempos mayores que las redes recursivas. Las redes de dinámica diferencial han mostrado la capacidad de describir bifurcaciones. Las redes de dinámica diferencial son capaces de representar dinámicas completas, incluyendo bifurcaciones de estado estable, por lo que este tipo de configuración de red neuronal se le conoce como modelo de continuo en el tiempo [13].

La red dinámica diferencial es una herramienta para el análisis de series de tiempo (*Time Series Analysis*), que permite describir atractores en soluciones diferenciales de periodo cíclico en tiempo prolongado. La construcción de funciones diferenciales continuas implica usar la red neuronal en forma de una ecuación diferencial, tal como se muestra en la Ec. (9).

$$\frac{dy}{dt} = RNA(y, t, a) \quad (\text{Ec. 9})$$

El uso de esta función diferencial permite la construcción de atractores en espacio fase. El entrenamiento de este tipo de red se realiza con la formulación de una derivación numérica tipo Euler (Ec. (10)) o Runge-Kutta de 4° orden (Figura 3), método numérico utilizado para la solución de ecuaciones diferenciales, para obtener los datos deseados en el tiempo. El problema más evidente de esta aproximación de cálculo es la sensibilidad en la estimación de las derivadas numéricas, especialmente cuando se trate de derivadas de alto grado y con presencia de ruido.

$$y_{i+1} = y_i + h * RNA(y, t, a) \quad (\text{Ec. 10})$$

Como se observa en la Ec. (10) el integrador de Euler se utiliza para la obtención de datos, los cuales se comparan en el integrador hasta que el error disminuya, este tipo de aproximación es la que puede generar mayor error al ser un integrador de primer orden. Para los casos de estudio en Excel® se utilizará este método y se utilizará *Visual Basic for Applications* de Excel (VBA) para el integrador tipo Runge-Kutta de 4° orden que se muestra en la Figura 3. Este tipo de red neuronal puede ampliarse o ser la base de construcciones más complejas como ecuaciones diferenciales parciales, utilizando una ampliación de esta metodología de acuerdo con la bibliografía [21].

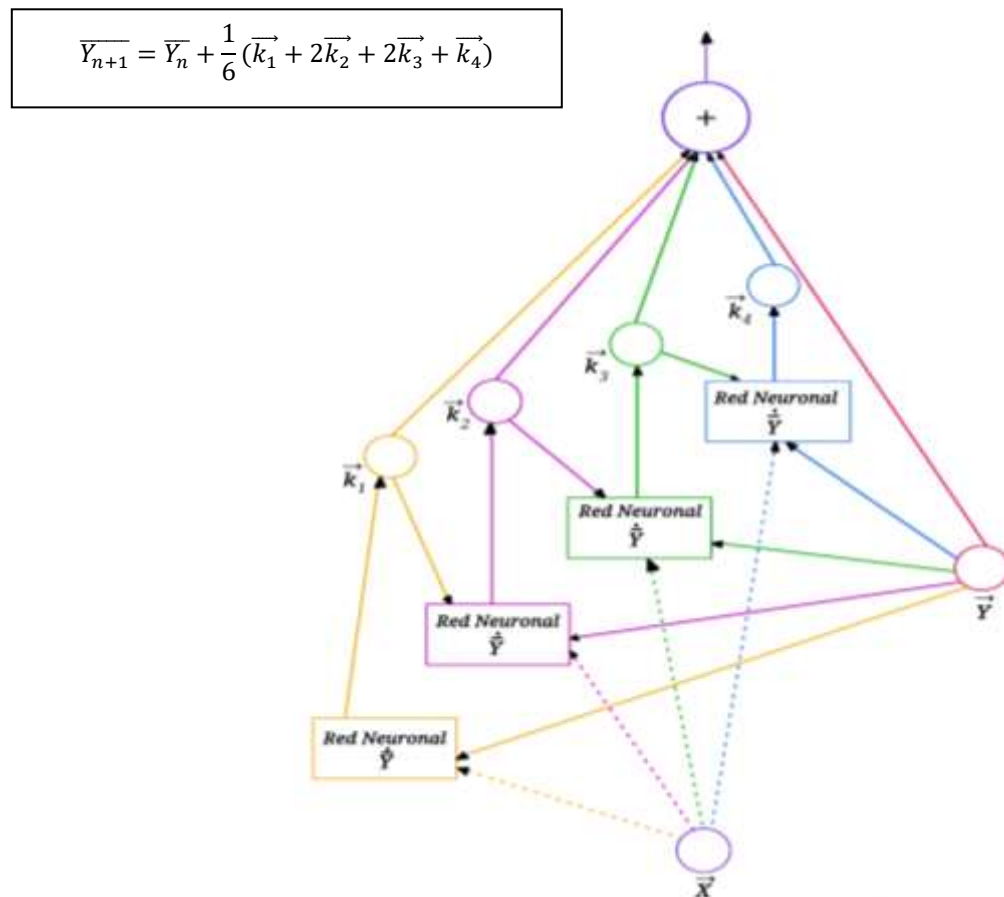


Figura 3. Representación esquemática de la implementación de un esquema de cuarto orden tipo Runge-Kutta [13].

Red híbrida (modelo de la caja gris)

Las redes neuronales pueden utilizarse acopladas a funciones que representen la fenomenología y las variaciones en parámetros que las ecuaciones fundamentales no son capaces de describir por completo en su comportamiento. Los modelos híbridos combinan el conocimiento parcial de un proceso con las redes neuronales para capturar la dinámica restante. Una característica que tiene este tipo de metodología es que permite reducir el tamaño de la red neuronal requerida para capturar la dinámica del problema [14].

Generalmente los modelos híbridos contienen un modelo fenomenológico básico que describe la parte bien conocida del proceso y una parte de la red que permite la corrección de errores que afectan la parte compleja o la parte desconocida del fenómeno. Los dos grandes beneficios de los modelos híbridos consisten en que el proceso se mantiene descrito fenomenológicamente y el carácter empírico de la red permite la flexibilidad en la precisión de los cálculos obtenidos [6].

La forma general de este tipo de funciones estacionarias tiene la estructura de la forma fenomenológica de un sistema representado por una función y un complemento de vector de probabilidades que se acopla algebraicamente en la ecuación, un ejemplo de este tipo de funciones se puede ver en la Ec. (11).

$$F(x) = g(x; p) + RNA(x; p) \quad (\text{Ec. 11})$$

En esta expresión $F(x)$ representa la función de salida, $g(x; p)$ representa la parte fenomenológica de la función, el término $RNA(x; p)$ representa la parte descrita por la red neuronal, x representa la variable independiente y p el parámetro. Es importante comentar que la red (RNA) podría estar dentro de la función como elemento

multiplicativo, un ejemplo de esto es la ecuación de cinética biológica representada por una red, en el caso de ser sistemas complejos y altamente no lineales.

La metodología para el análisis de modelos continuos en el tiempo, para la predicción de dinámicas prolongadas cíclicas de sistemas lineales, también puede describirse por modelos fenomenológicos acoplados a redes neuronales que permiten una descripción más completa. Esta metodología tiende a la caracterización parcial de la fenomenología fundamental conocida y complementada con la información de las redes neuronales [22].

En el caso de las aproximaciones de caja gris, se conoce parte del elemento fenomenológico de la ecuación, explícitamente calculado y la red neuronal, la cual aproxima solamente los elementos desconocidos con información probabilística, un ejemplo de este caso de estudio se presenta en la Ec. (12).

$$\frac{dy}{dt} = g(x, t; p) + RNA(x, t; p) \quad (\text{Ec. 12})$$

Donde $\frac{dy}{dt}$ representa la función diferencial, $g(x, t; p)$ es el elemento fenomenológico de la ecuación y $RNA(x, t; p)$ el elemento correspondiente a la red neuronal, que se considera como la forma general de la estructura del modelo híbrido para sistemas continuos.

Uso de hojas de cálculo (Excel®)

El uso de hojas de cálculo proporciona una alternativa popular y de costo asequible para enseñar técnicas de modelado y análisis en la toma de decisiones, por lo que es una alternativa que permite a los estudiantes comprender y aplicar los fundamentos numéricos y matemáticos de un sistema. En este trabajo se utilizan las hojas de cálculo para estructurar los modelos matemáticos y el procedimiento numérico paso a paso, con el

fin de que los estudiantes puedan disponer de una metodología didáctica de aplicación de las redes neuronales en diferentes casos de estudio.

Se estructuraron modelos de dos formas: la primera con fórmulas directas de la red aplicadas en las celdas, como un modelo matemático; la segunda forma utiliza una forma genérica de red con programación en VBA. La intención de manejar estas dos formas es plantear los modelos de manera que se pueda avanzar del modelo básico de la red hacia la construcción avanzada de modelos, tanto en la hoja de trabajo, como programados con VBA.

El siguiente paso es el uso de herramientas para el ajuste de parámetros (entrenamiento de la red neuronal), para lo cual se utilizó la herramienta SOLVER™ de Excel®, que permite la minimización de la función

objetivo (Figura 4). Existen múltiples metodologías para la minimización de funciones, como son los métodos de Levenberg-Marquardt, Gauss-Newton, gradiente del máximo descenso, etc., sin embargo, no se abordarán en este trabajo. SOLVER™ incorpora el uso de una herramienta GRG no lineal (*Generalized Reduced Gradient*) para la optimización de las funciones, de una forma didáctica y práctica, que facilita el entrenamiento de las redes neuronales.

Una práctica muy común al trabajar los datos de la red neuronal es el proceso de adimensionalización, que requiere el uso de una ecuación matemática que transforme las funciones en un rango de 0 a 1 para que la red pueda procesar la información más fácilmente, posteriormente la ecuación se regresará a sus variables originales.

Parámetros de Solver

Establecer objetivo: SAS1

Para: ☒ Máx ☐ Min ☐ Valor de: 0

Cambiando las celdas de variables:

Sujeto a las restricciones:

Convertir variables sin restricciones en no negativas

Método de resolución: GRG Nonlinear

Método de resolución

Seleccione el motor GRG Nonlinear para problemas de Solver no lineales suavizados. Seleccione el motor L.P Simplex para problemas de Solver lineales, y seleccione el motor Evolutionary para problemas de Solver no suavizados.

Ayuda Resolver Cerrar

Figura 4. Ventana ilustrativa de los parámetros que solicita SOLVER™ para el ajuste de parámetros [15].

En el Anexo A se describe la metodología para el entrenamiento de una red neuronal estática sencilla para el caso de la simulación del balance de materia estacionario en un tanque con dos corrientes de entrada y una corriente de salida.

III. Resultados

En esta sección se muestran ejemplos del uso de cada una de las configuraciones de las redes propuestas. Se utilizan datos de problemas de ingeniería química o bioquímica para mostrar su aplicación de forma didáctica.

Casos de estudio de red estática

Caso 1: Oxidación catalítica del 3-hexanol

Se presenta el caso de estudio de la oxidación catalítica del compuesto 3-hexanol con peróxido de hidrógeno presentado por Gallort y col. 1998. Los datos muestran el efecto del solvente (CH_3OH) en la conversión parcial del peróxido de hidrógeno usando una red neuronal donde la entrada de la red es el tiempo y la salida es la concentración del solvente [23].

La Tabla 1 muestra los datos de la oxidación del 3-hexanol respecto de la conversión parcial y su relación respecto de la concentración de solvente.

Tabla 1. Datos de la oxidación catalítica del 3-Hexanol, Gallort y col. 1998 [23].

Tiempo modificado de reacción (t) (h kg/kmol)	Conversión parcial (y)	
	0.75g de CH_3OH	1.3g de CH_3OH
3	0.055	0.040
6	0.090	0.070
13	0.120	0.100
18	0.150	0.130
26	0.165	0.150
28	0.175	0.160

Se utilizó una red hacia adelante de 5 neuronas ocultas programada de acuerdo con los conceptos básicos de las redes neuronales, este programa se muestra en el Anexo B. En dicha sección se muestran las diferentes etapas del código, el primer segmento es la definición de las variables y la lectura de factores de peso donde se usan valores aleatorios entre 0 y 1; el siguiente segmento se relaciona con los nodos de entrada de acuerdo con la Ec. (1). Posteriormente se conectan estos resultados con las funciones de transferencia que se pueden seleccionar de las ecuaciones 2 a 6. Estas funciones de transferencia tienen una aplicación dependiendo de los rangos de datos que se elijan. Finalmente, la función de salida, en este caso de estudio, se tiene solamente una salida, por lo que es una variable, en el caso

de que sean salidas múltiples, se requiere que sea una salida del tipo matriz.

Los datos de la red se ajustaron hasta una suma de errores al cuadrado de 0.004532 utilizando una red sin adimensionalizar, con un error porcentual aproximado de 19.2484% entre los datos experimentales y los datos de la red. El error absoluto medio (MAE) es de 0.01701, mientras que el error cuadrático medio (MSE) y su raíz (RMSE) son de 0.00038 y 0.01943, respectivamente. Finalmente, el coeficiente de determinación calculado fue de 0.80184, esto indica un buen ajuste de los datos de la red con una baja variabilidad. En la Figura 5 se muestran los resultados de una simulación usando la red con un parámetro de masa de solvente de 1 g de CH_3OH .

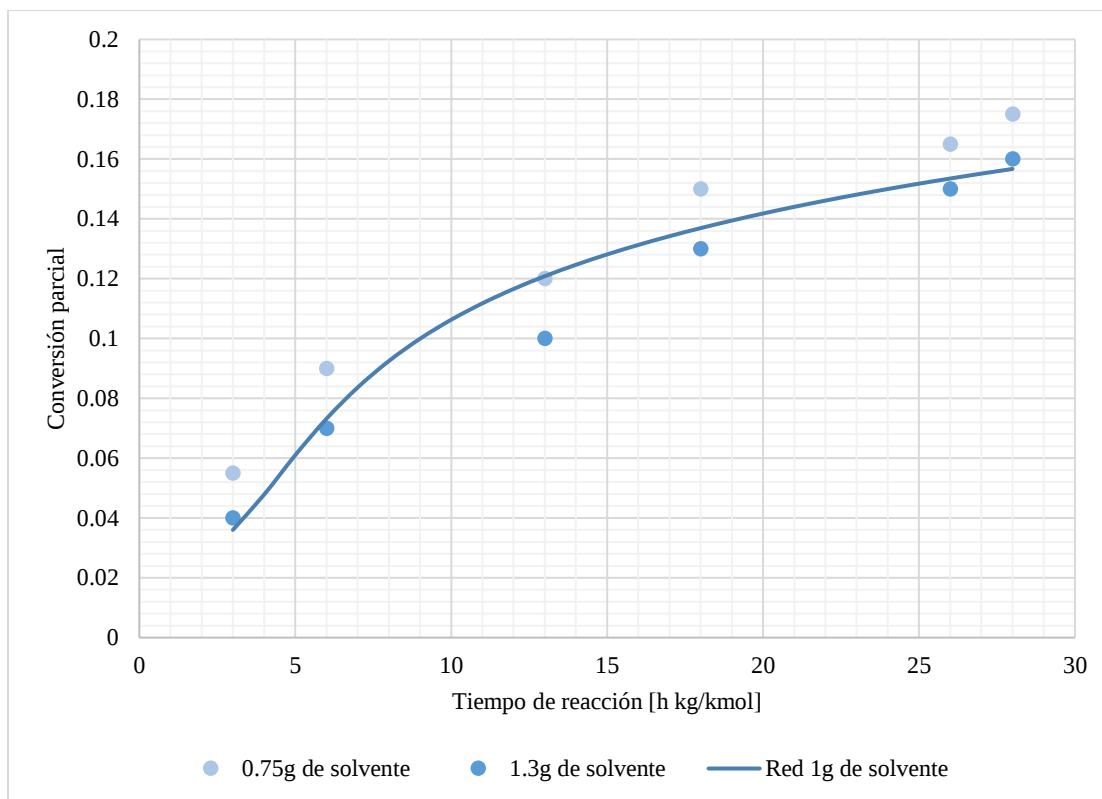


Figura 5. Conversión parcial de H_2O_2 a través de reacción de oxidación 3 hexanol, simulación usando la red con 1 g de solvente Gallort y col. 1998 [23].

En la simulación de la red generada se puede observar el comportamiento intermedio de los datos de validación y las diferentes características de interpolación que presentan las redes neuronales. Este tipo de modelos son excelentes en la predicción de datos intermedios y, aunque su capacidad para extrapolar es limitada, son muy útiles para la construcción de modelos de interpolación complejos no lineales y de múltiples variables.

Caso 2: Producción de Escleroglucano

En este caso de estudio se utilizó la producción fermentativa de escleroglucano,

los datos experimentales fueron tomados de Desai y col. 2008 [11], donde se tienen cuatro variables de entrada y una variable de salida. Las entradas corresponden a la sacarosa, el extracto de levadura, el K_2HPO_4 y el $MgSO_4$. La salida es la producción de escleroglucano, medido en g/L. Se utilizaron 21 datos experimentales de entrada y salida para el entrenamiento de la red y 9 datos de validación seleccionados de forma aleatoria, ver Tabla 2 y 3. También en este caso de estudio se utilizó una capa oculta con 5 neuronas.

Tabla 2. Datos para el entrenamiento de la red neuronal estática *feedforward*, Desai y col. 2008 [11].

NO	Entrada				Salida
	Sacarosa	Extracto de levadura	K ₂ HPO ₄	MgSO ₄	Escleroglucano
1	35	1.0	1.25	0.50	7.97
2	65	1.0	1.25	0.50	15.22
3	35	2.0	1.25	0.50	9.53
4	65	1.0	1.75	0.50	13.16
5	35	2.0	1.75	0.50	9.81
6	65	2.0	1.75	0.50	11.65
7	35	1.0	1.25	1.00	8.47
8	65	1.0	1.25	1.00	14.05
9	35	1.0	1.75	1.00	7.09
10	65	1.0	1.75	1.00	11.10
11	35	2.0	1.75	1.00	6.69
12	65	2.0	1.75	1.00	10.44
13	20	1.5	1.50	0.75	6.29
14	50	2.5	1.50	0.75	10.38
15	50	1.5	1.00	0.75	10.65
16	50	1.5	2.00	0.75	9.50
17	50	1.5	1.50	0.25	10.16
18	50	1.5	1.50	0.75	11.50
19	50	1.5	1.50	0.75	11.10
20	50	1.5	1.50	0.75	10.99
21	50	1.5	1.50	0.75	10.98

Los datos de validación se pueden utilizar para que se evite el sobreentrenamiento de la red. Este fenómeno se presenta cuando se trata de sobre ajustar los factores de peso a los datos, de tal forma que pierde capacidad de interpolación, por lo tanto, se pierde el control buscando el punto en el que el número de iteraciones proporcione un mínimo en el error

promedio de los datos de validación y un valor bajo en la función objetivo. En algunos programas comerciales se presenta una gráfica que muestra el mínimo error en los valores de validación, donde se determinan los mínimos conjuntos entre los valores de entrenamiento junto con los valores de validación.

Tabla 3. Datos usados para la validación, no usados en el entrenamiento, Desai y col. 2008 [11].

NO	Entrada			Salida	
	Sacarosa	Extracto de levadura	K_2HPO_4	$MgSO_4$	Escleroglucano
1	65	2.0	1.25	0.50	12.60
2	35	1.0	1.75	0.50	9.44
3	80	1.5	1.50	0.75	14.88
4	50	0.5	1.50	0.75	12.25
5	50	1.5	1.50	1.25	10.65
6	50	1.5	1.50	0.75	11.13
7	50	1.5	1.50	0.75	11.03
8	35	2.0	1.25	1.00	9.50
9	65	2.0	1.25	1.00	11.70

Los datos de las Tablas 2 y 3 se adimensionalizan utilizando las Ec. (7) y (8). Se utiliza cada conjunto de datos para que la red sea entrenada y converja más fácilmente. Todos los datos adimensionalizados quedan en el rango de 0 y 1 si se usa la Ec. (7); y entre 0.1 y 0.9 usando la Ec. (8), en este caso de estudio se utilizó la Ec. (8), tal como se muestra en la Tabla 4.

Con los datos del modelo generado por el macro de Excel® se realiza un ajuste de mínimos cuadrados para obtener los parámetros que mejor se adaptan a la red utilizando la herramienta SOLVER™. De los datos resultantes se obtiene el valor del error promedio en relación con los datos experimentales, tal como se muestra en la Tabla 5.

Tabla 4. Extracto de datos con los factores adimensionales, datos adimensionales y la salida de la red ya ajustada.

NO	Entrada			Salida	
	Sacarosa	Extracto de levadura	K_2HPO_4	$MgSO_4$	Escleroglucano
1	0.36666	0.10000	0.3	0.36666	0.25050
2	0.90000	0.10000	0.3	0.36666	0.90000
3	0.36666	0.63333	0.3	0.36666	0.39025
4	0.90000	0.10000	0.7	0.36666	0.71545
5	0.36666	0.63333	0.7	0.36666	0.41534
6	0.90000	0.63333	0.7	0.36666	0.58017
7	0.36666	0.10000	0.3	0.90000	0.29529
8	0.90000	0.10000	0.3	0.90000	0.79518
9	0.36666	0.10000	0.7	0.90000	0.17166
10	0.90000	0.10000	0.7	0.90000	0.53090

Fuente: Elaboración propia, basada en los datos de Desai y col. [11].

Al realizar este ejercicio se registraron datos cada 5 iteraciones y se observó el comportamiento de los errores. Se pudo observar que el error cuadrático de los datos de entrenamiento es 0.10008 y disminuye progresivamente, el error promedio

porcentual del valor de la red respecto del valor real de los datos de validación es de 15.66919 y también disminuye progresivamente. En un punto, las iteraciones empiezan a crecer, esto quiere decir que en este punto el modelo comienza a

sobreentrenarse, este ejemplo se puede utilizar para mostrar paso a paso el uso de la red neuronal y los detalles importantes a considerar. El error absoluto medio (MAE) es de 0.05805, mientras que el error cuadrático medio (MSE) y su raíz (RMSE) son de 0.00477 y 0.06903, respectivamente. Finalmente, el coeficiente de determinación calculado fue de 0.87745.

Este tipo de red neuronal es la más común y simple que se puede encontrar. Si se desea mayor precisión, se pueden incrementar el

número de neuronas y el número de capas, sin embargo, entre más complejo sea el modelo, se requerirá una capacidad computacional mayor. Para este trabajo se utilizarán redes pequeñas ya que para una red más robusta y grande se ocupa un software especializado como MATLAB, o bien, que ésta sea programada en FORTRAN, Python o algún otro lenguaje de alto nivel. También pueden usarse con algoritmos de ajuste y mayor enfoque en la velocidad, como es el caso de Levenberg-Marquardt o algoritmos híbridos.

Tabla 5. Ajuste de mínimos cuadrados y el cálculo del error promedio de los datos experimentales.

Experimental adimensional	ANN adimensional	Mínimos Cuadrados	Resultados ANN			
Escleroglucano	Escleroglucano		Escleroglucano	Error %		
0.25050	0.33594	0.00729	8.92371	11.96637		
0.90000	0.80036	0.00992	14.10780	7.30742		
0.39025	0.37546	0.00021	9.36485	1.73288		
0.71545	0.68926	0.00068	12.86765	2.22143		
0.41534	0.27937	0.01848	8.29222	15.47176		
0.58017	0.61016	0.00089	11.98474	2.87337		
0.29529	0.26715	0.00079	8.15585	3.70885		
0.79518	0.71984	0.00567	13.20906	5.98526		
0.17166	0.15922	0.00015	6.95109	1.95913		
0.53090	0.61067	0.00636	11.99036	8.02134		
0.13583	0.20960	0.00544	7.51350	12.30953		
0.47178	0.52844	0.00321	11.07255	6.05893		
0.10000	0.06413	0.00128	5.88966	6.36467		
0.46640	0.40118	0.00425	9.65194	7.01400		
0.49059	0.59856	0.01165	11.8552	11.31665		
0.38756	0.39191	1.88E-05	9.54846	0.51012		
0.44669	0.57190	0.01567	11.55767	13.75663		
0.56674	0.49413	0.00527	10.68948	7.04794		
0.53090	0.49413	0.00135	10.68948	3.69832		
0.52105	0.49413	0.00072	Suma	10.68948	2.73443	Error promedio
0.52015	0.49413	0.00067	0.10007	10.68948	2.64584	6.41452 %

Fuente: Elaboración propia, basada en los datos de Desai y col. [11].

Caso 3: Catálisis lipídica de tensioactivos en esteramidas

Para este caso de estudio se utilizó el diseño experimental para la optimización de una

reacción enzimática en la preparación de tensioactivos basados en esteramidas. Se emplearon cinco variables de proceso: cantidad de enzima, tiempo de reacción, temperatura de reacción, relación molar de

substratos y velocidad de agitación. Este problema es reportado por Masoumi y col. 2014 [24].

Para implementar la red neuronal en Excel® se adimensionalizaron los datos de entrada y el dato de salida utilizando la Ec. (7), se utilizó el mismo código mostrado en el Anexo B con una red neuronal de 5 neuronas ocultas; los datos para entrenarla fueron 30, con un error real promedio del 7.87%. Posteriormente se tomaron datos para validación con un error del 6.6% de error real. Se realizaron iteraciones individuales para observar el comportamiento de los errores, se pudo observar que, después de la iteración 35, comienza un cambio en la relación del error y el ajuste del error de los datos de validación comienza a subir proporcionalmente. Mientras tanto, el error de los datos usados en el ajuste disminuye, esto demuestra el efecto de la divergencia, por lo que, en cuanto al entrenamiento de la red neuronal, se debe evitar la divergencia. En la Tabla 6 se muestra un segmento de los datos adimensionalizados

utilizados en el entrenamiento de la red. Se realizó un análisis estadístico donde se pudo observar que el error cuadrático de los datos experimentales con los datos de red es 661.06769 y disminuye progresivamente. El error promedio porcentual del valor de la red respecto del valor real de los datos de validación es de 7.87522 mientras que el error absoluto medio (MAE) es de 3.72744. Por otro lado, el error cuadrático medio (MSE) y su raíz (RMSE) son de 22.03559 y 4.69421, respectivamente. Finalmente, el coeficiente de determinación calculado fue de 0.83660.

Con los resultados generados por la red se regresaron los valores adimensionales a sus valores de variables originales. Con estos valores se realizaron unas gráficas de ajuste entre el valor de conversión real (experimental) contra el valor de conversión predicho por la red (Figura 6), gráficas similares se encuentran reportadas en la bibliografía de referencia, Masoumi y col. 2014 [24].

Tabla 6. Segmento de datos adimensionales usados en el modelo de la red neuronal.

Cantidad de enzima (w/w%)	Tiempo de reacción (h)	Temperatura de reacción (°C)	Tasa molar de sustratos (moles)	Velocidad de agitación (r.p.m)	conversión (%)
0.50000	0.50000	0.63636	0.36363	0.50000	0.67860
0.50000	0.50000	0.636363	0.36363	0.00000	0.49169
0.21428	0.78571	0.272727	0.00000	0.78571	0.50118
0.214285	0.78571	1.00000	0.00000	0.78571	0.83229
0.50000	0.50000	0.00000	0.36363	0.50000	0.31426
0.50000	0.50000	0.63636	0.36363	0.50000	0.56356
0.21428	0.21428	0.27272	0.00000	0.21428	0.41959
0.50000	1.00000	0.63636	0.36363	0.50000	0.75545
0.78571	0.21428	0.27272	0.72727	0.21428	0.00000
0.21428	0.21428	0.27272	0.72727	0.21428	0.01208
0.50000	0.50000	0.63636	0.36363	1.00000	0.45801
0.78571	0.78571	1.00000	0.00000	0.21428	0.82732
0.78571	0.21428	0.27272	0.72727	0.78571	0.18951
1.00000	0.50000	0.63636	0.36363	0.50000	0.50593
0.50000	0.50000	0.63636	1.00000	0.50000	0.28059
0.78571	0.78571	0.27272	0.72727	0.21428	0.22296
0.50000	0.50000	0.63636	0.36363	0.50000	0.80811

0.50000	0.50000	0.63636	0.363636	0.50000	0.71228
0.50000	0.50000	0.63636	0.363636	0.50000	0.65465
0.21428	0.21428	1.00000	0.727272	0.78571	0.42931

Fuente: Elaboración propia, basada en los datos de Masoumi y col. [24].

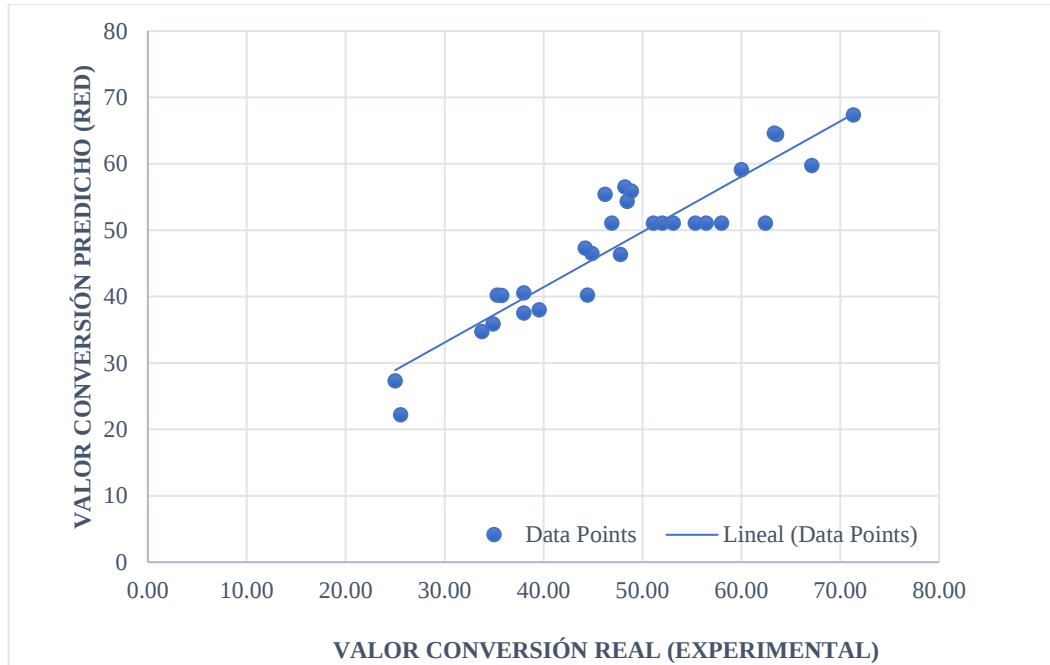


Figura 6. Relación lineal de los valores de conversión reales contra los valores predichos por la red, de los datos entrenados, Masoumi y col. 2014 [24].

Se puede observar un ajuste admisible empleando la red, además, se muestra que la red es la mejor opción para la construcción de modelos no lineales con parámetros múltiples utilizados en la optimización de procesos. En este caso de estudio se demuestra que este tipo de herramientas es susceptible al sobreentrenamiento y, por lo tanto, es necesario tener una metodología para evitarlo.

Caso de estudio de red recursiva

Caso 4: Modelo diferencial de reacción química

Para este caso de estudio con una red recursiva se utilizó una ecuación diferencial con solución conocida, Dua, 2011 [25], el modelo matemático propuesto es descrito por la Ec. (13a) y (13b). Este es un modelo general de dos ecuaciones diferenciales con

dos incógnitas, z_1 y z_2 , respecto de la variable t , de tal forma que dispongan de una solución analítica.

$$\frac{dz_1}{dt} = -5z_1 \quad (\text{Ec. 13a})$$

$$\frac{dz_2}{dt} = 5z_1 - z_2 \quad (\text{Ec. 13b})$$

Este modelo tiene condiciones iniciales $z(t = 0) = [1, 0]$ y una solución analítica mostrada en la Ec. (14a) y (14b).

$$z_1(t) = e^{-5t} \quad (\text{Ec. 14a})$$

$$z_2(t) = \frac{5}{4} e^{-5t} (-1 + e^{4t}) \quad (\text{Ec. 14b})$$

Un ejemplo en la ingeniería química de modelos con comportamiento dinámico y no cíclico son los fenómenos de cinética oxidativa, los cuales son susceptibles para el

uso de este tipo de redes. Éstas se han desarrollado para analizar series de tiempo basadas en información obtenida con anterioridad para predecir o especular los datos en el tiempo futuro. Para este caso de estudio se presentan datos puntuales representados por puntos y la simulación de la red neuronal recurrente representada como una línea continua, ver Figura 7. La red se estructuró con la lectura de dos datos

anteriores de cada una de las variables utilizadas, es decir, con cuatro datos de entrada a la red. Estos datos se ajustaron usando mínimos cuadrados, para hacer más fácil el entrenamiento, lo ideal es usar un rango de valores que se encuentre entre 0 y 1. En el Anexo C se muestra la modificación que se hizo para que se obtengan 2 variables de salida de la red generada.

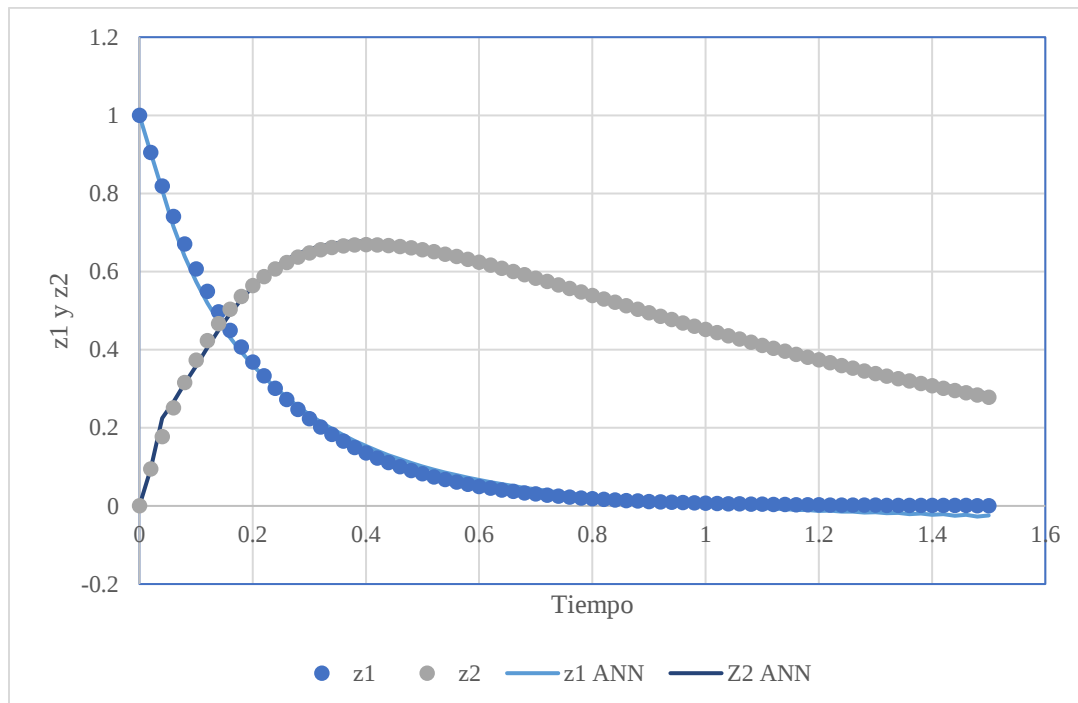


Figura 7. Representación gráfica de los resultados analíticos y la simulación de la red neuronal recursiva, Dua, 2011 [25].

En la Tabla 7 se muestran los datos introducidos en Excel® que utiliza la función de la red neuronal como función recurrente retroalimentada, para predecir el comportamiento en el tiempo del sistema de reacción. Esta estrategia es muy útil para el control de reactores y para el seguimiento de comportamientos secuenciales, o bien, para describir sistemas espacio-estado no lineales o con perturbaciones, temas muy amplios que no se abordarán en los ejemplos mostrados en este estudio.

En este caso de estudio se utiliza una red de 5 neuronas por cuestión didáctica, sin embargo, para problemas de mayor complejidad se puede incrementar el número de nodos hasta lograr la descripción de sistemas más complejos. Además, debido a las características de este tipo de red, se observa que es dependiente de la secuencia previa de datos y, por lo tanto, muy susceptible a generar distorsiones de la dinámica. Este tipo de dificultades se resuelve con redes diferenciales continuas, las cuales se presentarán a continuación.

Tabla 7. Datos de Excel® con la red recurrente y el ajuste por mínimos cuadrados.

t	z1	z2	t	z1 ANN	z2 ANN	Mínimos Cuadrados			z1 ANN	z2 ANN
0	1	0	0	1	0				1	
0.02	0.90483	0.09420	0.02	0.90483	0.09420			<u>Sumatoria</u>	0.90483	0.09420
0.04	0.81873	0.17757	0.04	0.80838	0.22484	0.00010	0.00223	<u>0.02437</u>	0.80838	0.22484
0.06	0.74081	0.25118	0.06	0.71567	0.26534	0.00063	0.00020		0.71567	0.26534
0.08	0.67032	0.31599	0.08	0.63889	0.31293	0.00098	9.38E-06		0.63889	0.31293
0.1	0.60653	0.37288	0.1	0.57443	0.35854	0.00103	0.00020		0.57443	0.35854
0.12	0.54881	0.42263	0.12	0.51975	0.40506	0.00084	0.00030		0.51975	0.40506
0.14	0.49658	0.46596	0.14	0.47259	0.44985	0.00057	0.00025		0.47259	0.44985
0.16	0.44932	0.50351	0.16	0.43111	0.49154	0.00033	0.00014		0.43111	0.49154
0.18	0.40656	0.53587	0.18	0.39420	0.52896	0.00015	4.70E-05		0.39420	0.52896
0.2	0.36787	0.56356	0.2	0.36084	0.56156	4.94E-05	3.97E-06		0.36084	0.56156
0.22	0.33287	0.58705	0.22	0.33064	0.58923	4.93E-06	4.72E-06		0.33064	0.58923
0.24	0.30119	0.60679	0.24	0.30303	0.61218	3.38E-06	2.91E-05		0.30303	0.61218
0.26	0.27253	0.62314	0.26	0.27792	0.63082	2.90E-05	5.89E-05		0.27792	0.63082
0.28	0.24659	0.63648	0.28	0.25487	0.64562	6.85E-05	8.36E-05		0.25487	0.64562
0.3	0.22313	0.64711	0.3	0.23394	0.65706	0.00011	9.90E-05		0.23394	0.65706
0.32	0.20189	0.65531	0.32	0.21470	0.66556	0.00016	0.00010		0.21470	0.66556
0.34	0.18268	0.66135	0.34	0.19726	0.67153	0.00021	0.00010		0.19726	0.67153
0.36	0.16529	0.66547	0.36	0.18119	0.67530	0.00025	9.66E-05		0.18119	0.67530
0.38	0.14956	0.66786	0.38	0.16665	0.67714	0.00029	8.61E-05		0.16665	0.67714
0.4	0.13533	0.66873	0.4	0.15319	0.67733	0.00031	7.39E-05		0.15319	0.67733

Fuente: Elaboración propia, basada en los datos de Dua, [25].

En el análisis estadístico se pudo observar que el error cuadrático de los datos de entrenamiento es 0.01033 mientras que el error promedio porcentual del valor de la red respecto del valor real de los datos de validación es de 3.69596. El error absoluto medio (MAE) es de 0.01220, mientras que el error cuadrático medio (MSE) y su raíz (RMSE) son de 0.00025 y 0.01561, respectivamente. Finalmente, el coeficiente de determinación calculado fue de 0.99531.

Caso de estudio de red dinámica diferencial

Caso 5: Modelo FitzHugh-Nagumo

Para el caso de red dinámica se utilizó el modelo *FitzHugh-Nagumo*, el cual describe un prototipo excitable, siendo este un modelo bidimensional simplificado del modelo Hodgkin-Huxley de generación de impulsos eléctricos en el cerebro de calamares gigantes (*Architeuthis*). Esta formulación matemática

representa un oscilador excitable donde, si un estímulo externo (I_{ext}) sobrepasa cierto valor, el sistema presentará características de espacio fase. Este modelo se eligió por presentar comportamientos cíclicos que permiten mostrar las capacidades de simulación de las redes neuronales dinámicas.

Las ecuaciones de este modelo se muestran en la Ec. (15a) y (15b):

$$\frac{dv}{dt} = v - \frac{v^3}{3} - w + I_{ext} \quad (\text{Ec. 15a})$$

$$\tau \frac{dw}{dt} = v + a - bw \quad (\text{Ec. 15b})$$

Donde los términos v representarían el potencial de la membrana, w es la variable de recuperación $a = 0.7$, $b = 0.8$, $\tau = 0.08$,

$I_{ext} = 0.5$ son constantes y generan una función con características oscilatorias.

La red dinámica utilizada en este caso de estudio está basada en un modelo tipo Euler de primer orden, para que su uso en el software Excel® se pueda mostrar de forma sencilla y didáctica, lo cual es adecuado para explicar este tipo de configuración de red neuronal. Para la descripción diferencial con mayor precisión se recomienda utilizar órdenes superiores como el propuesto por la bibliografía [13]. Se realizó una red de doble capa oculta con 3 neuronas ocultas, 2 neuronas de entrada y 2 de salida. Este tipo de sistemas tienen una estructura más compleja, por lo tanto, la red se programa en ciclos, tal

como se presenta en el Anexo D, y la estructura utilizada corresponde la forma de la ecuación 9 donde la red se acopla a una formulación diferencial, esto significa que la red está embebida en la parte diferencial de la ecuación diferencial.

El procedimiento para encontrar la solución del problema es similar a lo que se ha realizado en el uso de las redes anteriores. Sin embargo, a diferencia de las redes anteriores, se adimensionalizan las ecuaciones, no los datos, esto con el fin de facilitar la convergencia (Ec. 16). Adicionalmente, para este caso, se usan más datos para lograr una mejor definición. Debido a ello, tiene la desventaja de aumentar el tiempo de procesamiento computacional.

$$\begin{aligned} \frac{\tau}{a_w} \frac{d\bar{w}}{dt} &= \left(\frac{\bar{v} - b_v}{a_v} \right) + a - b \left(\frac{\bar{w} - b_w}{a_w} \right) \\ \frac{d\bar{w}}{dt} &= \frac{a_w}{a_v \tau} (\bar{v} - b_v) + \frac{a}{\tau} a_w - \frac{b}{\tau} (\bar{w} - b_w) \end{aligned} \quad (\text{Ec. 16})$$

En este caso de estudio didáctico se usaron 21 datos en un tiempo de simulación de 100 segundos con pasos de intervalos de 0.5 segundos. Posteriormente, se realizó una

suma de cuadrados en la cual se utilizó SOLVER™ para ajustar los factores de peso de la red, ver Tabla 8.

Tabla 8. Datos de Excel® con la red dinámica y el ajuste por mínimos cuadrados.

	Datos Experimentales		Datos de Modelo		Mínimos Cuadrados		Sumatoria
1	0.63430	0.25203	0.57035	0.26995	0.00408	0.00032	0.04642
5	0.84114	0.55439	0.81498	0.53378	0.00068	0.00042	
10	0.74853	0.82078	0.77267	0.80183	0.00058	0.00035	
15	0.39498	0.88562	0.34852	0.88392	0.00215	2.91E-06	
20	0.16214	0.52216	0.19568	0.55336	0.00112	0.00097	
25	0.21747	0.27522	0.19809	0.27435	0.00037	7.60E-07	
30	0.27327	0.14396	0.24851	0.12889	0.00061	0.00022	
35	0.34144	0.10007	0.34235	0.10278	8.25E-07	7.36E-06	
40	0.62126	0.16675	0.53971	0.24181	0.00665	0.00563	
45	0.83790	0.56877	0.83846	0.56634	3.11E-07	5.91E-06	
50	0.74363	0.82795	0.74758	0.82257	1.56E-05	2.90E-05	
55	0.34278	0.87893	0.32135	0.87124	0.00045	5.90E-05	
60	0.16440	0.50945	0.19270	0.52683	0.00080	0.00030	
65	0.21968	0.26794	0.20069	0.25850	0.00036	8.91E-05	

70	0.27562	0.14062	0.25384	0.12233	0.00047	0.00033
75	0.34509	0.10000	0.35307	0.10670	6.37E-05	4.50E-05
80	0.66090	0.17603	0.56176	0.26176	0.00982	0.00734
85	0.83467	0.58270	0.85797	0.59524	0.00054	0.00015
90	0.73860	0.83478	0.72642	0.84264	0.00014	6.17E-05
95	0.28469	0.87050	0.30162	0.86040	0.00028	0.00010
100	0.16669	0.49686	0.19071	0.50686	0.00057	1.00E-04

Fuente: Elaboración propia, basada en los datos de Rico-Martínez y col. [13].

En este caso de estudio se genera un error de desviación debido a la acumulación del error cuadrático medio mínimo (MSE) obtenido por la formulación en el transcurso del tiempo. Esto se debe a que, al discretizar las derivadas, una pequeña variación en los datos experimentales genera una gran distorsión con mínimos cambios en las variables. En la Figura 8 se muestra la gráfica comparativa de los datos experimentales con respecto a la simulación, así como una extrapolación de la simulación.

En cuanto al análisis estadístico, se observa que el error cuadrático de los datos de entrenamiento es 0.04642 y el error promedio porcentual del valor de la red respecto del valor real de los datos de validación es de 7.55269. El error absoluto medio (MAE) es de 0.02326, mientras que el error cuadrático medio (MSE) y su raíz (RMSE) son de 0.00111 y 0.03290, respectivamente. Finalmente, el coeficiente de determinación calculado fue de 0.98358.

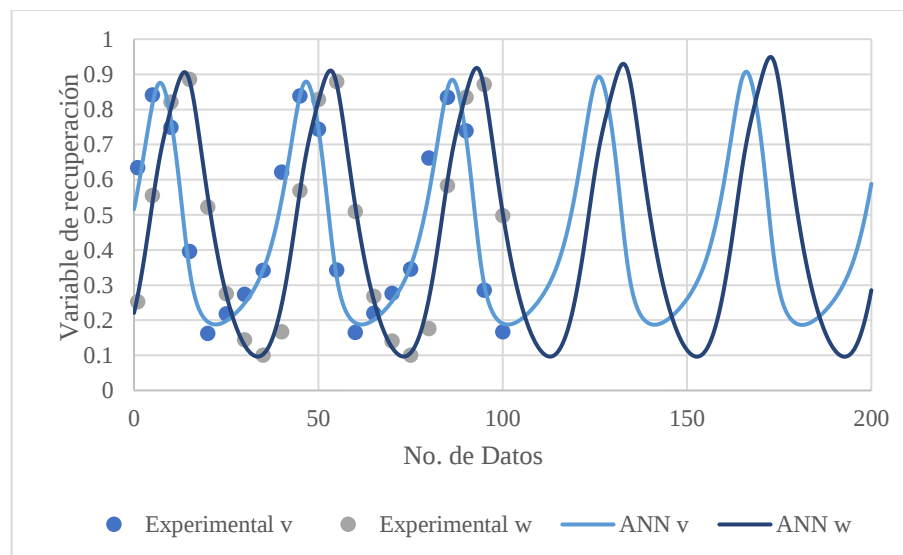


Figura 8. Representación gráfica de los resultados analíticos y la simulación de la red neuronal dinámica.

Fuente: Elaboración propia.

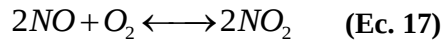
Las redes neuronales generalmente se utilizan para predicciones de datos en tiempos cortos, sin embargo, las redes neuronales dinámicas tienen la capacidad de realizar extrapolaciones en el futuro (*forecasting*) y su uso radica en casos de comportamiento

complejo periódico y de modelado de funciones continuas.

Caso de estudio de red híbrida (modelo de caja gris)

Caso 6: Modelo de reacción gaseosa Bodenstein-Linder

En este caso de estudio se utilizó el modelo de una reacción en fase gaseosa de NO con O_2 , basado en el modelo Bodenstein-Linder publicado por Bellman y col. 1967 [26]. La reacción se muestra en la Ec. (17).



El comportamiento de este sistema de reacción se describe por la Ec. (18).

$$\frac{dx}{dt} = k_1(\alpha - x)(\beta - x)^2 - k_2x^2 \quad (\text{Ec. 18})$$

Donde x representa la concentración de NO_2 , $\alpha = 126.2$ y $\beta = 91.9$. Se realizó un ajuste del modelo con datos obtenidos de la bibliografía [26], se puede observar que al usar SOLVER™ los datos k_1 y k_2 son parámetros condicionados. Esto quiere decir que su relación es muy distante, por lo que, para ajustar correctamente el parámetro k_1 , se requirió un escalado del factor. Se construyó un sistema híbrido, con el fin de comprobar el buen funcionamiento de la estrategia híbrida de caja gris para el ajuste de la primera

sección de la Ec. (18). Esto se puede ver en la Ec. (19), la cual es una red que complementa la ecuación fenomenológica, esta característica intrínseca de un modelo de caja gris.

$$\frac{dx}{dt} = RNA(x) - k_2x^2 \quad (\text{Ec. 19})$$

En la Tabla 9 se muestran los datos obtenidos en el procedimiento ejecutado en una hoja de cálculo de Excel®. En una parte se tiene el ajuste del parámetro k_1 y k_2 de forma tradicional con un factor de escala para poder resolverlo; además, se muestra el uso de un modelo híbrido para el ajuste de la Ec. (19). En el análisis estadístico se observó que el error cuadrático de los datos es 4.45501 y el error promedio porcentual del valor de la red respecto del valor real de los datos es de 3.36618. El error absoluto medio (MAE) es de 0.47974, mientras que el error cuadrático medio (MSE) y su raíz (RMSE) son de 0.29700 y 0.54498, respectivamente. Finalmente, el coeficiente de determinación calculado fue de 0.99851.

Tabla 9. Datos de Excel® y el ajuste por mínimos cuadrados de la ecuación 18 y el modelo híbrido de caja gris.

t	Concentración NO_2	Modelo	Mínimos cuadrados		Modelo híbrido	Mínimos cuadrados	
0	0	0	0	Sumatoria	0	0	Sumatoria
1	1.4	4.58090	10.11813	19.02716	3.97627	6.63721	10.13555
2	6.3	8.20115	3.61437		7.47011	1.36915	
3	10.5	11.76261	1.59419		11.02948	0.28035	
4	14.2	14.91743	0.51471		14.27480	0.00559	
5	17.6	17.99372	0.15502		17.51200	0.00774	
6	21.4	20.48636	0.83473		20.17818	1.49282	
7	23	22.73082	0.07245		22.60364	0.15709	
9	27	26.59966	0.16026		26.81286	0.03501	
11	30.5	29.79987	0.49017		30.28598	0.04580	
14	34.4	33.64598	0.56854		34.38207	0.00032	
19	38.8	38.25388	0.29824		39.02686	0.05146	
24	41.6	41.31227	0.08278		41.81871	0.04783	
29	43.5	43.46760	0.00104		43.56222	0.00387	
39	45.3	46.02282	0.52246		45.26464	0.00124	

Fuente: Elaboración propia, basada en los datos de Bellman y col. [26].

El modelo híbrido aplicado utilizó una red neuronal programada en VBA, en dicho programa se pueden incrementar el número

de neuronas ocultas, ver Anexo E. Los resultados obtenidos de la red híbrida se graficaron en la Figura 9.

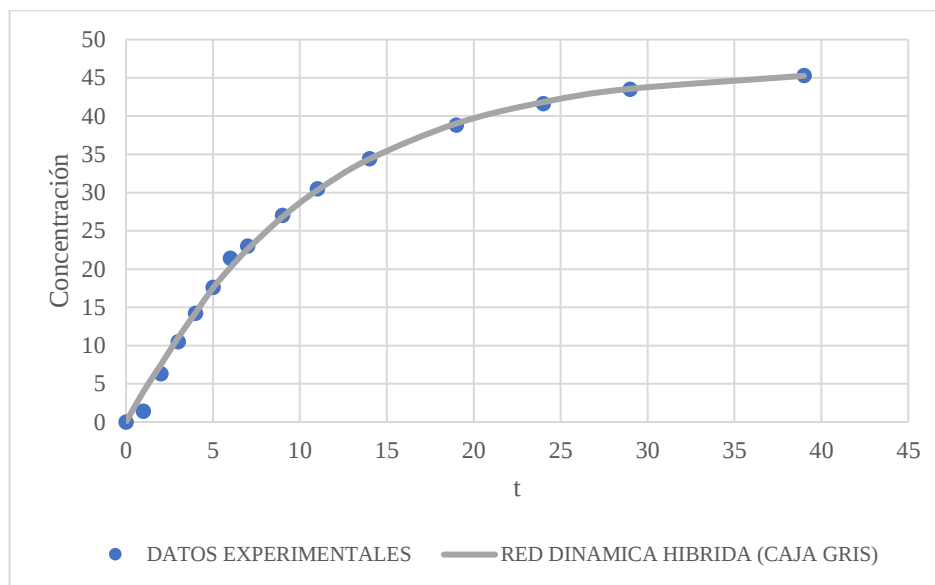


Figura 9. Representación gráfica de los resultados experimentales y la simulación de la red neuronal híbrida (caja gris).

Fuente: Elaboración propia.

IV. Discusión

Los casos de estudio tratados son una representación general de las metodologías más comúnmente usadas en ingeniería química que se relacionan con el uso de redes neuronales, las redes utilizadas en estos casos de estudio engloban las redes neuronales *feedforward*, las más comúnmente utilizadas para la descripción de fenómenos no lineales en estado estacionario, en este tipo de redes se presentan algunos ejemplos de aplicación en ingeniería química-bioquímica, estas redes se utilizan para descripción de sistemas, construcción de modelos empíricos que tienen múltiples interacciones que son difíciles de identificar. Las redes recursivas, explicadas también en este estudio permiten la descripción en periodos cortos de tiempo de sistemas dinámicos que tienen una relación directa con los datos anteriores, este tipo de redes se utiliza mucho para sistemas de reacciones y sistemas de comportamiento dinámico. La red neuronal de dinámica

diferencial es un tipo especial de red neuronal que representa comportamientos dinámicos más complejos y es especialmente útil en sistemas cíclicos; en este caso la función de la ecuación diferencial se sustituye por una red neuronal, la cual al realizar el ajuste de datos permite capturar el comportamiento global del sistema. Finalmente, las redes híbridas que combinan el comportamiento dinámico empírico con una función fenomenológica conocida, la parte de la red neuronal captura la información que modifique el comportamiento fenomenológico con una función empírica.

V. Conclusiones

El propósito principal de este trabajo fue mostrar de manera concisa y ejemplificada las estructuras y metodologías del uso de redes neuronales utilizando un software que facilite la comprensión didáctica de la estructura de una red neuronal y sus diferentes aplicaciones. Las formas

analizadas en este trabajo se centran en redes estáticas, redes recursivas, redes dinámicas y redes híbridas (caja gris), permitiendo observar claramente la pedagogía en el uso de las redes neuronales. Este artículo introduce los conceptos básicos para el uso de redes programadas con métodos más avanzados, y con base en este conocimiento, amplía su aplicación a redes dinámicas para describir modelos de ecuaciones diferenciales parciales, con discretizaciones de diferencias finitas o métodos de colocación ortogonal.

Se concluye que, con ejercicios simples y programación en VBA, es posible programar redes neuronales didácticas usando herramientas de hoja de cálculo. Además, se observa que las diferentes metodologías de redes neuronales tienen aplicaciones específicas que permiten el análisis de diversos problemas en ingeniería química y bioquímica. Por ejemplo, las redes estáticas son excelentes para describir fenómenos en estado estacionario o ecuaciones algebraicas con una fuerte influencia de ruido. Las redes recursivas son útiles para modelos en estado dinámico con comportamiento monotónico y predicciones en rangos específicos. Por otro lado, las redes dinámicas recrean modelos continuos y cíclicos, permitiendo un rango de extrapolación y capturando comportamientos de bifurcación que otros modelos de redes no pueden realizar. Finalmente, los modelos híbridos combinan redes neuronales con ecuaciones fenomenológicas para mejorar la predicción de los datos. Se espera que las herramientas presentadas en este artículo permitan mejorar la comprensión en el uso de redes neuronales para los ingenieros químicos y bioquímicos interesados en la caracterización de modelos complejos o con la presencia de ruido, haciendo hincapié en que las metodologías planteadas son extrapolables fácilmente a otras ramas de la ciencia e ingeniería.

VI. Agradecimientos

Los autores agradecen al Tecnológico Nacional de México su agenda para fomentar la investigación científica y tecnológica.

VII. Conflictos de intereses

Los autores manifiestan que no existen conflictos de interés.

VIII. Referencias

- [1] E. Esche, J. Weigert, G. Brand Rihm, J. Göbel, and J.-U. Repke, "Architectures for neural networks as surrogates for dynamic systems in chemical engineering", *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 177, pp. 184–199, Jan. 2022, doi: 10.1016/j.cherd.2021.10.042.
- [2] M. Mowbray *et al.*, "Machine learning for biochemical engineering: A review", *Biochem Eng J*, vol. 172, no. May, p. 108054, 2021, doi: 10.1016/j.bej.2021.108054.
- [3] D. M. Himmelblau, "Applications of artificial neural networks in chemical engineering". *Korean Journal of Chemical Engineering*, vol. 17, no. 4, pp. 373–392, Jul. 2000, doi: 10.1007/BF02706848.
- [4] J. Panerati, M. A. Schnellmann, C. Patience, G. Beltrame, and G. S. Patience, "Experimental methods in chemical engineering: Artificial neural networks-ANNs", *Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 97, no. 9, pp. 2372–2382, 2019, doi: 10.1002/cjce.23507.
- [5] A. Sato, Z. Sha, and S. Palosaari, "Neural networks for chemical engineering unit operations", *Chem Eng Technol*, vol. 22, no. 9, pp. 732–739, 1999, doi: 10.1002/(SICI)1521-4125(199909)22:9<732::AID-CEAT732>3.0.CO;2-1.
- [6] M. Pirdashti, S. Curteanu, M. H. Kamangar, M. H. Hassim, and M. A.

- Khatami, "Artificial neural networks: Applications in chemical engineering", *Reviews in Chemical Engineering*, vol. 29, no. 4, pp. 205–239, 2013, doi: 10.1515/revce-2013-0013.
- [7] J. S. Almeida, "Predictive non-linear modeling of complex data by artificial neural networks", *Curr Opin Biotechnol*, vol. 13, no. 1, pp. 72–76, 2002, doi: 10.1016/S0958-1669(02)00288-4.
- [8] D. M. Himmelblau, "Accounts of experiences in the application of artificial neural networks in chemical engineering", *Ind Eng Chem Res*, vol. 47, no. 16, pp. 5782–5796, 2008, doi: 10.1021/ie800076s.
- [9] A. Aglodiya, "Application of Artificial Neural Network (ANN) in Chemical Engineering: A Review", *International Journal of Advance Research and Innovative Ideas in Education*, vol. 3, no. 2, pp. 5322–5328, 2017, [Online]. Available: http://ijariie.com/AdminUploadPdf/Application_of_Artificial_Neural_Network__ANN__in_Chemical_Engineering_A_Review_ijariie5013.pdf
- [10] M. N. Karim and S. L. Rivera, "Artificial neural networks in bioprocess state estimation". *Adv Biochem Eng Biotechnol*, vol. 46, pp. 1–33, 1992, doi: 10.1007/bfb0000703.
- [11] K. M. Desai, S. A. Survase, P. S. Saudagar, S. S. Lele, and R. S. Singhal, "Comparison of artificial neural network (ANN) and response surface methodology (RSM) in fermentation media optimization: Case study of fermentative production of scleroglucan". *Biochem Eng J*, vol. 41, no. 3, pp. 266–273, 2008, doi: 10.1016/j.bej.2008.05.009.
- [12] J. D. Olden and D. A. Jackson, "Illuminating the 'black box': a randomization approach for understanding variable contributions in artificial neural networks", *Ecol Modell*, vol. 154, no. 1–2, pp. 135–150, Aug. 2002, doi: 10.1016/S0304-3800(02)00064-9.
- [13] R. Rico-Martínez, K. Krischer, I. G. Kevrekidis, M. C. Kube, and J. L. Hudson, "Discrete- vs. Continuous-time nonlinear signal processing of Cu electrodisolution data", *Chem Eng Commun*, vol. 118, no. 1, pp. 25–48, Nov. 1992, doi: 10.1080/00986449208936084.
- [14] Q. Xiong and A. Jutan, "Grey-box modelling and control of chemical processes", *Chem Eng Sci*, vol. 57, no. 6, pp. 1027–1039, 2002, doi: 10.1016/S0009-2509(01)00439-0.
- [15] T. Muneer and S. Ivanova, "Excel-VBA", in *Springer Nature*, vol. 4, no. 1, Cham: Springer International Publishing, 2022, pp. 143–160. doi: 10.1007/978-3-030-94085-0.
- [16] W. Fone, "Using a familiar package to demonstrate a difficult concept", *ACM SIGCSE Bulletin*, vol. 33, no. 3, pp. 165–168, Sep. 2001, doi: 10.1145/507758.377675.
- [17] B. E. Segee and M. D. Amos, "Artificial Neural Networks using Microsoft Excel for Windows 95", *ASEE Annual Conference Proceedings*, 1997, doi: 10.18260/1-2-6424.
- [18] S. Demir, N. M. Demir, A. Karadeniz, and H. C. Yörüklü, "Implementation of an MS Excel Tool for Backpropagation Neural Network Algorithm in Environmental Engineering Education". *Sigma: Journal of Engineering & Natural Sciences / Mühendislik ve Fen Bilimleri Dergisi*, vol. 36, no. 1, pp. 251–260, 2018, [Online]. Available: <https://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&db=a9h&AN=133819222&site=ehost-live&scope=site>

- [19] J. García *et al.*, “Hojas de cálculo para la simulación de redes neuronales artificiales (RNA)”, *Qüestió: Quaderns d’Estadística i Investigació Operativa*, vol. 26, no. 1–2, pp. 289–305, 2002, [Online]. Available: <https://idus.us.es/handle/11441/41001>
- [20] T. Muneer and S. Ivanova, “Artificial Neural Networks in Excel”, in *Excel-VBA*, Cham: Springer International Publishing, 2022, pp. 143–162. doi: 10.1007/978-3-030-94085-0_9.
- [21] R. González-García, R. Rico-Martínez, and I. G. Kevrekidis, “Identification of distributed parameter systems: A neural net based approach”, *Comput Chem Eng*, vol. 22, pp. S965–S968, Mar. 1998, doi: 10.1016/S0098-1354(98)00191-4.
- [22] R. Rico-Martinez, J. S. Anderson, and I. G. Kevrekidis, “Continuous-time nonlinear signal processing: a neural network based approach for gray box identification”, in *Proceedings of IEEE Workshop on Neural Networks for Signal Processing*, IEEE, 1994, pp. 596–605. doi: 10.1109/NNSP.1994.366006.
- [23] J. E. Gallot, M. P. Kapoor, and S. Kaliaguine, “Kinetics of 2-hexanol and 3-hexanol oxidation reaction over TS-1 catalysts”, *AIChE Journal*, vol. 44, no. 6, pp. 1438–1454, Jun. 1998, doi: 10.1002/aic.690440621.
- [24] Fard Masoumi, H. R., Basri, M., Kassim, A., Abdullah, D. K., Abdollahi, Y., Gani, S. S. A., & Rezaee, M., “Optimization of process parameters for lipase-catalyzed synthesis of esteramines-based esterquats using wavelet neural network (WNN) in 2-liter bioreactor”, *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, vol. 20, no. 4, pp. 1973–1976, Jul. 2014, doi: 10.1016/j.jiec.2013.09.019.
- [25] V. Dua, “An Artificial Neural Network approximation based decomposition approach for parameter estimation of system of ordinary differential equations”, *Comput Chem Eng*, vol. 35, no. 3, pp. 545–553, Mar. 2011, doi: 10.1016/j.compchemeng.2010.06.005.
- [26] R. Bellman, J. Jacquez, R. Kalaba, and S. Schwimmer, “Quasilinearization and the estimation of chemical rate constants from raw kinetic data”, *Math Biosci*, vol. 1, no. 1, pp. 71–76, Mar. 1967, doi: 10.1016/0025-5564(67)90027-2.

ANEXO A

Se tiene un tanque agitado perfectamente en estado estacionario como se ilustra en la Figura 1A, para demostrar la robustez de las redes neuronales en la predicción en ingeniería.

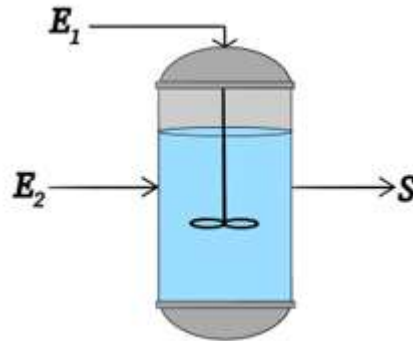


Figura 1A. Esquema del balance de masa en un tanque agitado.

El balance de masa total en estado estacionario es $E_1 + E_2 = S$, se va a construir una red neuronal simple con 2 neuronas de entrada E_1 y E_2 , una capa con 5 neuronas ocultas (O) y una neurona de salida S , cuya estructura se muestra en la Figura 2A.

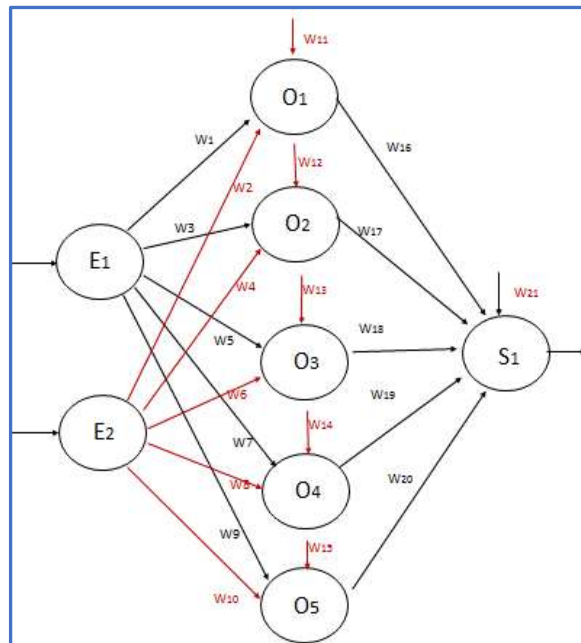


Figura 2A. Esquema de la red neuronal estática para simular el balance de masa en el tanque agitado.

Las ecuaciones de la red neuronal de la Figura 2A se muestran en la Tabla A1, donde se han separado las ecuaciones para cada neurona oculta (O), la posterior activación (A) con la función *Tanh* y la suma de activaciones para construir la salida de la red neuronal. Los factores de peso (w_1 - w_{10} ; w_{16} - w_{20}) y los factores de sesgo (bias) (w_{11} - w_{15} ; w_{21}), son los parámetros indeterminados del sistema a modelar.

Tabla A1. Ecuaciones algebraicas para la formación del modelo matemático.

Neuronas ocultas	Activación	Salida red neuronal
$O_1 = w_1 * E_1 + w_2 * E_2 + w_{11}$ $O_2 = w_3 * E_1 + w_4 * E_2 + w_{12}$ $O_3 = w_5 * E_1 + w_6 * E_2 + w_{13}$ $O_4 = w_7 * E_1 + w_8 * E_2 + w_{14}$ $O_5 = w_9 * E_1 + w_{10} * E_2 + w_{15}$	$A_1 = Tanh(O_1)$ $A_2 = Tanh(O_2)$ $A_3 = Tanh(O_3)$ $A_4 = Tanh(O_4)$ $A_5 = Tanh(O_5)$	$S = w_{16} * A_1 + w_{17} * A_2 +$ $w_{18} * A_3 + w_{19} * A_4 +$ $w_{20} * A_5 + w_{21}$

La ecuación completa que representa la red neuronal que va a representar el balance de masa en el tanque agitado es:

$$S = w_{16} * (Tanh(w_1 * E_1 + w_2 * E_2 + w_{11})) + w_{17} * (Tanh(w_3 * E_1 + w_4 * E_2 + w_{12})) + w_{18} * (Tanh(w_5 * E_1 + w_6 * E_2 + w_{13})) + w_{19} * (Tanh(w_7 * E_1 + w_8 * E_2 + w_{14})) + w_{20} * (Tanh(w_9 * E_1 + w_{10} * E_2 + w_{15})) + w_{21} \quad \text{Ec. A1}$$

El siguiente paso es entrenar la red neuronal, para lo cual se manufacturaron 30 datos (E_1 , E_2 y S que están en la Tabla A2), teniendo en mente que, entre más datos experimentales se dispongan, se pueden construir redes neuronales más complejas que van a tener una mejor capacidad predictiva. A continuación, se construye un esquema de mínimos cuadrados, proporcionando valores aleatorios entre 0 y 1 al vector de pesos y sesgos (w_1 - w_{21}). Mediante la herramienta SOLVERTM de EXCEL[®], se minimiza la suma cuadrática de residuos, cambiando los valores del vector w_i . Cuando se logra convergencia, el vector w_1 - w_{21} adquiere los valores reales de los factores de peso y sesgo, que se muestran en la Tabla A3. Cabe mencionar que pueden existir varios vectores solución para w_i , por ser ecuaciones no lineales, situación que debe discutirse en cursos avanzados. La Tabla A2 también muestra los valores de salida S predichos por la red neuronal y el correspondiente error relativo, donde se aprecia la excelente capacidad de predicción de las redes neuronales, lo que es crucial cuando se simulan fenómenos complejos.

Tabla A2. Ecuaciones algebraicas para la formación del modelo matemático.

E_1	E_2	S	Red neuronal (ec. A1)	Residuos cuadráticos	Error relativo (%)
0.6	0.2	0.8	0.80004	0.00000	0.0053
0.5	0.3	0.8	0.80004	0.00000	0.0055
0.4	0.4	0.8	0.80005	0.00000	0.0057
0.5	0.1	0.6	0.59999	0.00000	0.0009
0.6	0.3	0.9	0.90004	0.00000	0.0046
0.3	0.55	0.85	0.85005	0.00000	0.0063
0.7	0.3	1	0.99998	0.00000	0.0017
0.3	0.33	0.66	0.63000	0.00090	4.7619
0.45	0.25	0.7	0.70002	0.00000	0.0027
0.5	0.2	0.7	0.70002	0.00000	0.0026
0.2	0.4	0.6	0.59999	0.00000	0.0010
0.3	0.31	0.61	0.61000	0.00000	0.0007
0.4	0.6	1	0.99999	0.00000	0.0006

E ₁	E ₂	S	Red neuronal (ec. A1)	Residuos cuadráticos	Error relativo (%)
0.5	0.45	0.95	0.95003	0.00000	0.0027
0.3	0.7	1	1.00000	0.00000	0.0003
0.4	0.23	0.63	0.63000	0.00000	0.0000
0.25	0.25	0.5	0.50000	0.00000	0.0005
0.6	0.12	0.72	0.72002	0.00000	0.0032
0.4	0.12	0.52	0.51999	0.00000	0.0010
0.45	0.12	0.57	0.56999	0.00000	0.0014
0.8	0.13	0.93	0.93003	0.00000	0.0027
1	0.1	1.1	1.09983	0.00000	0.0154
0.9	0.1	1	0.99997	0.00000	0.0025
0.5	0.6	1.1	1.09986	0.00000	0.0132
0.5	0.23	0.78	0.73003	0.00250	6.8453
0.4	0.12	0.52	0.51999	0.00000	0.0010
0.05	0.9	0.95	0.95004	0.00000	0.0040
0.14	0.15	0.29	0.29022	0.00000	0.0765
0.76	0.14	0.9	0.90004	0.00000	0.0041
0.33	0.67	1	1.00000	0.00000	0.0004
Suma de Residuos cuadráticos					0.3925
				0.0033974	

Tabla A3. Valores de los factores de peso y sesgo al concluir el entrenamiento.

W _i	1	2	3	4	5	6	7
valor	0.3044415	0.5275673	0.1188476	0.1191174	0.1188042	0.1120577	0.1201172
W _i	8	9	10	11	12	13	14
valor	0.1327205	0.1259825	0.1256501	0.1915595	-0.1647334	0.0797581	0.0817723
W _i	15	16	17	18	19	20	21
valor	0.0238920	-0.0010635	5.4016611	1.2049950	0.5784136	1.2521969	0.7104792

Al tener la red entrenada, se debe valorar la capacidad predictiva de la Ec. A1, algunos ejemplos se muestran en la Tabla A4, donde se aprecia la excelente capacidad de predicción, que es importante como paso para el control y diseño de procesos en ingeniería. Inclusive, algunos datos están fuera del rango de valores de E₁, E₂ que se utilizaron en el entrenamiento, obteniéndose errores relativos aceptables. Esta capacidad predictiva depende del sistema a modelar, de la red elegida, de la cantidad de datos experimentales disponibles y del entrenamiento de la red, por lo que debe valorarse para cada situación en particular.

Tabla A4. Capacidad predictiva de la red neuronal.

E ₁	E ₂	Experimental	Predicción de la red entrenada	Error Relativo (%)
0.22	0.11	0.33	0.33015	0.04546
0.51	0.22	0.73	0.73003	0.00371
0.22	0.1	0.32	0.32017	0.05222
1.34	0.78	2.12	2.10738	0.59547
2.11	0.44	2.55	2.52178	1.10670
3.47	0.99	4.46	4.23263	5.09802
1.43	1.65	3.08	3.02034	1.93716
0.02	0.05	0.07	0.07100	1.43341

Repetiendo el proceso de entrenamiento para 3 neuronas ocultas (que producen 13 factores de peso) y utilizando los mismos datos de la Tabla A4, la capacidad predictiva de la red neuronal disminuye, dando un error relativo promedio de 12.39096%. También se puede observar que la capacidad de extrapolación de la red disminuye significativamente, como es de esperarse.

Tabla A5. Capacidad predictiva de la red neuronal con 3 neuronas ocultas.

E ₁	E ₂	Experimental	Predicción de la red entrenada	Error Relativo (%)
0.22	0.11	0.33	0.32846	0.46653
0.51	0.22	0.73	0.73492	0.67363
0.22	0.1	0.32	0.31803	0.61584
1.34	0.78	2.12	1.92130	9.37279
2.11	0.44	2.55	2.17959	14.52599
3.47	0.99	4.46	2.73314	38.71893
1.43	1.65	3.08	2.39122	22.36299
0.02	0.05	0.07	0.06541	6.56112
Promedio				12.39096

Ahora se evalúa con 7 neuronas ocultas (que producen 29 factores de peso) y se vuelve a entrenar la red con los 30 datos de la Tabla A2. La capacidad predictiva de la red se muestra en la Tabla A6, donde se observa una ligera disminución del error relativo promedio, que se explica dado que los factores de peso son casi iguales al número de datos para entrenamiento, lo que produce un ajuste deficiente.

Tabla A6. Capacidad predictiva de la red neuronal con 7 neuronas ocultas.

E ₁	E ₂	Experimental	Predicción de la red entrenada	Error Relativo (%)
0.22	0.11	0.33	0.32805	0.59049
0.51	0.22	0.73	0.73509	0.69737
0.22	0.1	0.32	0.31760	0.75001
1.34	0.78	2.12	1.92359	9.26468
2.11	0.44	2.55	2.17785	14.59409
3.47	0.99	4.46	2.78756	37.49856
1.43	1.65	3.08	2.41753	21.50866
0.02	0.05	0.07	0.06314	9.80589
Promedio				12.12912

Por último, si se entrena la red neuronal con las 7 neuronas ocultas y empleando 100 datos experimentales (incluidos los 30 datos originales), los resultados se muestran en la Tabla A7.

Tabla A7. Capacidad predictiva de la red neuronal con 7 neuronas ocultas y 100 datos de entrada.

E_1	E_2	Experimental	Predicción de la red entrenada	Error Relativo (%)
0.22	0.11	0.33	0.32998	0.00653
0.51	0.22	0.73	0.73003	0.00401
0.22	0.1	0.32	0.31998	0.00735
1.34	0.78	2.12	2.11908	0.04326
2.11	0.44	2.55	2.54334	0.26110
3.47	0.99	4.46	4.14008	7.17299
1.43	1.65	3.08	3.04955	0.98876
0.02	0.05	0.07	0.07004	0.06069
			Promedio	1.21200

Donde se ha recuperado la capacidad predictiva de la red neuronal, aunque la red más eficiente para este caso de estudio sería la de 5 neuronas ocultas. Análisis similares deberán hacerse para cada problema en particular para diseñar una red neuronal óptima.

ANEXO B

Option Explicit

Option Base 1

Public Const aa As Integer = 31 'número de pesos

Function redsim(xp1 As Double, xp2 As Double, xp3 As Double, xp4 As Double)

Application.Volatile

Dim k As Integer

Dim A(aa) As Double

Dim O(10) As Double

Dim T(10) As Double

'Lectura de parámetros

For k = 1 To aa

A(k) = Cells(k, 1)

Next k

'Operaciones de la red

'Operaciones de interconexión en la entrada

O(1) = xp1 * A(1) + xp2 * A(2) + xp3 * A(3) + xp4 * A(4) + A(5)

O(2) = xp1 * A(6) + xp2 * A(7) + xp3 * A(8) + xp4 * A(9) + A(10)

O(3) = xp1 * A(11) + xp2 * A(12) + xp3 * A(13) + xp4 * A(14) + A(15)

O(4) = xp1 * A(16) + xp2 * A(17) + xp3 * A(18) + xp4 * A(19) + A(20)

O(5) = xp1 * A(21) + xp2 * A(22) + xp3 * A(23) + xp4 * A(24) + A(25)

'Operaciones con la función de transferencia

T(1) = 1 / (1 + Exp(-O(1)))

T(2) = 1 / (1 + Exp(-O(2)))

T(3) = 1 / (1 + Exp(-O(3)))

T(4) = 1 / (1 + Exp(-O(4)))

T(5) = 1 / (1 + Exp(-O(5)))

'Función de salida

redsim = T(1) * A(26) + T(2) * A(27) + T(3) * A(28) + T(4) * A(29) + T(5) * A(30) + A(31)

End Function

ANEXO C

$$S(1) = T(1) * A(26) + T(2) * A(27) + T(3) * A(28) + T(4) * A(29) + T(5) * A(30) + A(31)$$

$$S(2) = T(1) * A(32) + T(2) * A(33) + T(3) * A(34) + T(4) * A(35) + T(5) * A(36) + A(37)$$

redsim = S 'REGRESO DE LA RED COMO UN ARREGLO USAR SELECCIONAR, F2 Y
CONTRO+SHIFT+ENTER (COMO LA MATRIZ).

ANEXO D

Option Explicit 'DECLARAR TODAS LAS VARIABLES

Option Base 1 'EL INDICE INICIA EN 1

Public Const no As Integer = 2 'NUMERO DE NEURONAS DE SALIDA

Public Const nn As Integer = 3 'NUMERO DE NEURONAS EN LAS CAPAS OCULTAS

Public Const ni As Integer = 2 'NUMERO DE NEURONAS DE ENTRADA

Function REDNE2(xp1 As Double, xp2 As Double, tipo As Integer)

Application.Volatile 'INSTRUCCION IMPORTANTE PARA ACTUALIZAR

Dim t(3, nn, nn) As Double

Dim teta(3, nn) As Double

Dim xp(4, nn) As Double

Dim anet(3, nn) As Double

Dim xi(1, ni) As Double

Dim i, j, k, jp, lp, l, kp, cont, ncg As Integer

Dim HTan, temp As Double

$$ncg = 2 * nn + no + ((ni + nn + no) * nn)$$

'LECTURA DE LOS FACTORES DE PESO

cont = 0

For i = 1 To 3

If (i = 3) Then

jp = no

Else

jp = nn

End If

For j = 1 To jp

If (i = 1) Then

kp = ni

Else

kp = nn

End If

For k = 1 To kp

cont = cont + 1

temp = Cells(cont, 1)

temp = Range("A" + Trim(Str(cont))).Value

t(i, j, k) = temp

Next k

cont = cont + 1

temp = Cells(cont, 1)

teta(i, j) = Range("A" + Trim(Str(cont))).Value

teta(i, j) = temp

Next j

Next i

'BLOQUE DE LA RED NEURONAL'

xp(1, 1) = xp1 'LECTURA DE LA ENTRADA

xp(1, 2) = xp2

For k = 2 To 4

 If (k = 4) Then

 jp = no

 Else

 jp = nn

 End If

 For j = 1 To jp

 If (k = 2) Then

 lp = ni

 Else

 lp = nn

 End If

 xp(k, j) = teta((k - 1), j)

 For l = 1 To lp

 xp(k, j) = xp(k, j) + t((k - 1), j, l) * xp((k - 1), l)

 Next l

 If (k <> 4) Then

 anet((k - 1), j) = xp(k, j)

 'FUNCION EMPLEADA EN ESTE CASO TANGENTE HIPERBÓLICA

HTan = (Exp(anet((k - 1), j)) - Exp(-anet((k - 1), j))) / (Exp(anet((k - 1), j)) + Exp(-anet((k - 1), j)))

 'HTan = 1 / (1 + Exp(-anet((k - 1), j)))

 xp(k, j) = HTan

 End If

 Next j

Next k

'REGRESO DEL VALOR OBTENIDO POR LA RED

If (tipo = 1) Then

 REDNE2 = xp(4, 1)

 ElseIf (tipo = 2) Then

 REDNE2 = xp(4, 2)

 Else

 REDNE2 = 0

End If

End Function

ANEXO E

Option Explicit

Option Base 1

Public Const aa As Integer = 31 'numero de pesos $NI*NN + NN*NS + NN + NS$

Public Const nn As Integer = 10 'numero de nodos de la red

Public Const ni As Integer = 1 'numero de nodos de entrada

Public Const ns As Integer = 1 'numero de nodos salida

Function redsim(xp1 As Double)

Application.Volatile

Dim k, i, j As Integer

Dim A(aa) As Double

Dim O(nn) As Double

Dim T(nn) As Double

Dim cont As Integer

Dim suma1 As Double

Dim ymodel(ns) As Double

Dim x(ni) As Double

'Lectura de parámetros

For k = 1 To aa

A(k) = Cells(k, 1)

Next k

'Neuronas de entrada igual al número ni

x(1) = xp1

'Operaciones de la red

cont = 1

For i = 1 To nn

suma1 = 0

For j = 1 To ni

suma1 = suma1 + x(j) * A(cont)

cont = cont + 1

Next j

O(i) = suma1

Next i

For i = 1 To nn

O(i) = O(i) + A(cont)

'T(i) = 1 / (1 + Exp(-O(i)))

'T(i) = 2 / (1 + Exp(-2 * O(i))) - 1

T(i) = (Exp(O(i)) - Exp(-O(i))) / (Exp(O(i)) + Exp(-O(i)))

cont = cont + 1

Next i

suma1 = 0

```
For i = 1 To ns
    For j = 1 To nn
        suma1 = suma1 + T(j) * A(cont)
        cont = cont + 1
    Next j
    ymodel(i) = suma1
Next i
```

```
For i = 1 To ns
    ymodel(i) = ymodel(i) + A(cont)
    cont = cont + 1
Next i
```

```
'Función de salida
redsim = ymodel(1)
End Function
```



Revista Internacional de Investigación e Innovación Tecnológica

Página principal: www.riit.com.mx

Compuestos bioactivos y composición mineral en fruto y subproductos de mango cv. Ataulfo

Bioactive compounds and mineral composition in fruit and by-products of mango cv. Ataulfo

Serrano-Berumen, M.F.¹, Sánchez-Chávez, E.², Salas-Salazar, N.A.¹, Soto-Caballero, M.C.¹, Cruz-Álvarez, O.¹, Flores-Córdova, M.A.^{1*}

¹ Facultad de Ciencias Agrotecnológicas: Universidad Autónoma de Chihuahua. Escorza 910, C.P. 31000 Chihuahua, México.

² Centro de Investigación en Alimentación y Desarrollo, A.C. CIAD. Av. Cuarta Sur No. 3820 Fracc. Vencedores del Desierto. C.P. 33088. Delicias, Chihuahua, México.

6251156262f@gmail.com; esteban@ciad.mx; nsalas@uach.mx; masotoc@uach.mx; ocruz@uach.mx; mafloresc@uach.mx*

Innovación tecnológica: Valorización de los subproductos de mango sobre su composición nutricional.

Área de aplicación industrial: Tecnología alimentaria, medicinal, agrícola, industrial.

Recibido: 30 enero 2025

Aceptado: 02 octubre 2025

Abstract

Mango (*Mangifera indica* L.) is an agro-industrial fruit that generates up to 60% of by-products, which when discarded decompose and produce gases and microbial proliferation. However, some authors have reported high levels of bioactive compounds and antioxidant activity in these by-products. This study focused on analysing the bioactive compounds and antioxidant potential present in fresh and dehydrated mango, and their by-products (peel and seed). The fruit was obtained from the local market in Chihuahua, Mexico. The parameters of weight, color, soluble solids, titratable acidity, phenolic content, flavonoids, antioxidant capacity, and mineral elements were determined in fresh mango, dehydrated pulp, and by-products. The results showed that the pulp accounted for 54.97% of the total yield, while the peel and seed represented 31.56% and 13.47%, respectively. Fresh fruit and dehydrated pulp exhibited the highest values of soluble solids and SS/TA ratio, while fresh pulp showed the highest Fe and Cu content. The seed presented the highest levels of phenolics, flavonoids, antioxidant activity, and minerals such as K, Ca, Mg, and

P, followed by the peel. Therefore, mango peel and seed could be considered as alternative sources for the extraction of natural bioactive molecules, with potential applications in industrial and agricultural processes, or in the development of new products.

Keywords: *Mangifera indica* L. Antioxidant capacity, Dehydrated pulp, Soluble solids, Quality.

Resumen

El mango (*Mangifera indica* L.) es un fruto agroindustrial que genera subproductos hasta en un 60% los cuales al desecharse se descomponen produciendo gases y proliferación de microorganismos. Sin embargo, algunos autores han reportado altas cantidades de compuestos bioactivos y actividad antioxidante en estos subproductos. La investigación se centró en analizar los compuestos bioactivos y el potencial antioxidante presentes en mango fresco, deshidratado y subproductos (cáscara y semilla). El fruto fue obtenido del mercado de la ciudad de Chihuahua, México. Se determinaron los parámetros de peso, color, sólidos solubles, acidez titulable, fenoles, flavonoides, capacidad antioxidante y elementos minerales, en el mango fresco, deshidratado y subproductos. Los datos obtenidos mostraron un rendimiento del 54.97% de la pulpa, la cáscara el 31.56% y la semilla un 13.47%. La fruta fresca y pulpa deshidratada presentaron los valores más altos de sólidos solubles, y relación SS/AT. La pulpa fresca presentó mayor contenido de Fe y Cu. La semilla presentó los valores más elevados de fenoles, flavonoides, actividad antioxidante y minerales (K, Ca, Mg y P), mientras que la cáscara ocupó el segundo lugar. Por lo tanto, la cáscara y semilla de mango pudieran ser una alternativa para la obtención de moléculas naturales de interés y ser aprovechados en procesos industriales y agrícolas, o en la generación de nuevos productos.

Palabras clave: *Mangifera indica* L. Capacidad antioxidante, Pulpa deshidratada, Sólidos solubles, Calidad.

Introducción

El mango (*Mangifera indica* L.) se cultiva en más de 90 países alrededor del mundo, con un incremento en su exportación del 86.48% entre 1994 y 2020, posicionándose como la séptima fruta más comercializada a nivel global, con una producción de 60.65 millones de toneladas [1]. México ocupa el sexto lugar en la producción mundial de este fruto, siendo el cultivar 'Ataulfo' el más destacado, al representar el 29.4% de la producción nacional [2]. Su importancia radica no solo en el impacto económico, sino también en su elevado valor nutricional debido a su contenido de ácidos orgánicos, aromas, pigmentos, fibra, vitaminas (A, E, C), minerales (hierro, magnesio, potasio, fósforo)

[3]. Además, contiene ácido ascórbico, carotenoides y polifenoles como ácidos gálicos, protocatéico clorogénico y vinílico que le confieren capacidad antioxidante y lo hacen atractivo para todo tipo de consumidor [4]. El mango ha sido estudiado en función de su capacidad antioxidante, ya que genera actividad gastro protectora, analgésica, antibacterial, citoprotectora, antitumoral, previenen diferentes enfermedades crónico-degenerativas como la diabetes, Alzheimer, colesterol y cáncer [5]. Por su parte Pacheco-Jiménez et al. [6] mencionan que se puede reducir el nivel de glucosa en la sangre, así como del colesterol y triglicéridos en el plasma.

La industria procesadora de mango genera grandes cantidades de cáscara y semilla, que en conjunto representan cerca del 80% del fruto y se catalogan como subproductos, mismos que no tienen valor comercial, lo cual ocasiona problemas de contaminación ambiental debido a la generación de residuos sólidos difíciles de manejar, la emisión de gases durante su descomposición y el riesgo de proliferación de plagas [6]. Algunos autores [7], mencionan que, en un mango, la cáscara equivale al 15–20% y la semilla al 35–60% del peso total del fruto. Además, para las empresas, desechar este subproducto representa un gasto económico adicional debido a la falta de colectores adecuados para su aprovechamiento. En este sentido, diversos estudios han evaluado el uso de la cáscara y la semilla de mango como fuentes de compuestos de interés. Por ejemplo, se ha reportado que la cáscara contiene ácido oleanólico y que, tras su fermentación, puede actuar como prebiótico al favorecer el crecimiento de bacterias beneficiosas como *Bifidobacterium* a las 24 h de incubación [8]. Autores como Sáyago-Ayerdi et al. [9], utilizaron el extracto de semilla de mango y probaron una disminución del crecimiento microbiano en el mango fresco cortado. También se han propuesto como una alternativa a los antioxidantes sintéticos ya que estos subproductos presentan compuestos carotenoides con propiedades antioxidantes [10]. Por su parte Wall-Medrano et al. [11], mencionan que la cáscara es una importante fuente de compuestos fenólicos, que benefician la prevención de enfermedades crónico-degenerativas. Por otra parte, la deshidratación constituye un proceso fundamental en diversas industrias, ya que permite preservar las propiedades químicas y sensoriales de los productos [12].

Por lo tanto, la caracterización de los compuestos presentes en el mango y sus subproductos busca valorizar estos desechos

agroindustriales para su aprovechamiento en distintas aplicaciones industriales, cosméticas, farmacéuticas y alimentarias, gracias a sus beneficios para la salud [13].

No obstante, aún son escasos los estudios que analizan los compuestos bioactivos y minerales de pulpa, cáscara y semilla de mango tras procesos de deshidratación. En este contexto, la presente investigación se centró en analizar los compuestos bioactivos, su potencial antioxidante y contenido mineral en mango fresco, deshidratado y en sus subproductos.

Materiales y Métodos

Material vegetal

El trabajo se llevó a cabo en las instalaciones de FACIATEC, UACH, en el laboratorio de fisiología Poscosecha, para ello se adquirieron en un mercado local de Chihuahua, México, frutos de mango cv Ataulfo en estado de madurez fisiológica, libres de daños y deformaciones. Los frutos fueron lavados con hipoclorito de sodio utilizando 25 ppm durante 3 min, fueron expuestas al ambiente para su secado. Las muestras se almacenaron en refrigeración a 4 °C, permaneciendo en estas condiciones hasta la realización de los análisis correspondientes

Preparación de las muestras

El fruto fue seccionado con un cuchillo de acero inoxidable cuidadosamente para separar sus tres componentes principales: la cáscara, la pulpa y la semilla. Tanto la pulpa como la cáscara y la semilla se sometieron a un proceso de deshidratación en un horno de secado TE-H45DM, Terlab, México) a 60 °C durante 24 h. La pulpa fue previamente cortada en rodajas para facilitar el secado. Una vez deshidratadas, todas las muestras se molieron en un molino IKA Universal Mill M 20, Alemania.

Hasta obtener un polvo de granulometría fina, el cual se almacenó en bolsas de polietileno a

4 °C hasta su análisis. El procedimiento se realizó con tres réplicas biológicas independientes.

Parámetros fisicoquímicos

Peso. El peso del fruto se registró en gramos utilizando una balanza analítica digital (± 0.01 g, OHAUS, modelo PA214, Parsippany, NJ, USA). Las mediciones se realizaron por triplicado [14].

Color. El color de la pulpa se determinó mediante un colorímetro portátil *Chroma Meter CR-400/410* (Konica Minolta, Osaka, Japón), calibrado previamente con una placa estándar blanca. Se registraron los parámetros de luminosidad (L^*), componente rojo-verde (a^*) y componente amarillo-azul (b^*), expresando los resultados como promedio de tres lecturas por muestra AOAC [15].

pH. Se midió con un potenciómetro digital (*pH meter*, modelo HI2211, Hanna Instruments, Woonsocket, RI, USA), calibrado con soluciones buffer pH 4.0, 7.0 y 10.0 antes de cada serie de mediciones AOAC [15].

Acidez titulable. La determinación se realizó de acuerdo con el método oficial de la AOAC [15], titulando con NaOH 0.1 N hasta alcanzar el punto final (pH 8.2) en presencia de fenolftaleína como indicador. Los resultados se expresaron en g de ácido cítrico equivalente por 100 g de muestra fresca.

Sólidos solubles totales (°Brix). Se cuantificaron utilizando un refractómetro digital (ATAGO, modelo PAL-1, Tokio, Japón), con rango de 0–53 °Brix. Las lecturas se realizaron a 25 °C y los resultados se expresaron como °Brix promediado AOAC [15].

Índice de madurez. Se calculó a partir de la relación entre el contenido de azúcares

(°Brix) y la acidez titulable (g ácido cítrico/100 g de muestra) AOAC [15].

Compuestos bioactivos

Preparación del extracto

Se tomó 1g de pulpa fresca, deshidratada, cáscara y semilla cada una por separado, se homogenizaron con 20 mL de metanol al 80% y se sonicaron durante una hora. Posteriormente se colocaron en la centrifuga Thermo Scientific Sorvall ST 16R EE. UU. a 4000 rpm durante 20 minutos a 10 °C, se separó el sobrenadante y se extrajo el residuo, se repitió el proceso nuevamente. Los sobrenadantes obtenidos se combinaron y la muestra resultante se almacenó a 20 °C para su posterior análisis. Este procedimiento se realizó por triplicado.

Fenoles Totales

El contenido de fenoles totales (FT) se determinó utilizando la metodología previamente descrita por Singleton y Ross [16] realizada con ligeras modificaciones. Brevemente se mezclaron 0.5 mL de la muestra, 0.5 mL de reactivo de Folin-Ciocalteu, 1.5 mL de Na_2CO_3 al 2% (p,v) y 2.75 mL de H_2O desionizada. La solución se incubó en un área oscura por 60 minutos. Posteriormente, se midió la absorbancia a 725 nm en un equipo espectrofotométrico UV-Vis (Thermo Scientific G, EE. UU.). Los resultados se expresaron en miligramos de equivalentes de ácido gálico por gramo de muestra seca (mg EAG g^{-1}).

Flavonoides Totales

El contenido de flavonoides totales (TFI) fue determinado con el método publicado por Zhishen et al. [17]. Se tomaron 250 μL de extracto y se mezclaron con 75 μL de una solución al 5% p/v de nitrito de sodio (NaNO_2); la mezcla se agitó en vortex durante 10 min. Posteriormente, se dejó reaccionar durante 5 min, tras lo cual se añadieron 150 μL de una solución al 10% p/v de cloruro de

aluminio (AlCl_3) y 500 μL de NaOH 1 M. Finalmente, la mezcla se diluyó con agua destilada hasta un volumen final de 3 mL. La absorbancia se midió a 510 nm, y los resultados se expresaron como miligramos de equivalentes de catequina por gramo de muestra (mg EC g^{-1}).

Capacidad antioxidante

Esta metodología se realizó con el radical DPPH (2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl) [18]. Fueron macerados 5g del fruto utilizando metanol al 80%, luego se centrifugará a 4000 g por 10 min. Se tomó 0,5 mL del extracto obtenido y se combinan con 2,5 mL de una solución del reactivo de 2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl al 0,1 mM, por espacio de 1 h la solución obtenida se dejó reposar. La absorbancia fue medida por espectrofotometría a 515 nm.

Nutrientes minerales

La extracción de K^+ , Ca^{2+} , Fe^{2+} , Mn^{2+} , Cu^{2+} y Ni^{2+} se determinó utilizando HNO_3 (ácido nítrico), HClO_4 (ácido perclórico) y H_2SO_4 (ácido sulfúrico). Se utilizó 1 g de muestra (almendra interna) y se realizó una mezcla de 25 mL en una relación de 10:10:2, esta mezcla ácida se colocó a ebullición en una placa calefactora bajo campana extractora. La cuantificación fue realizada con un equipo de absorción atómica marca Analyst 100® (PerkinElmer®, EE.UU). Los valores obtenidos en macronutrientes se mencionan en g kg^{-1} y los micronutrientes en g kg^{-1} .

Análisis estadístico

Se realizó un diseño experimental completamente al azar con tres repeticiones. Los resultados fueron sometidos a un análisis de varianza (ANOVA) y, en caso de diferencias significativas se aplicó la prueba de comparación de medias Tukey, utilizando un nivel de significancia de $p < 0.05$. En todos los casos se utilizó el programa de análisis

estadístico SAS versión 9.3 (SAS Institute Inc., Carolina del Norte USA) [19].

Resultados y Discusión

Peso del fruto

La madurez es un factor importante asociado a la calidad y evaluada mediante atributos físicos y químicos, tales como el peso, color, firmeza, tamaño, humedad, azúcar, almidón y ácidos [20]. De acuerdo con los resultados obtenidos para la variable peso del fruto de mango, el rendimiento se expresó como el porcentaje de cada componente en relación con el peso total del fruto: la pulpa representó el 54.97%, la cáscara el 31.56% y la semilla el 13.47%. Siendo la pulpa la que obtuvo el mayor porcentaje de peso. Se ha reportado que el mango de acuerdo con su variedad puede generar un porcentaje de pulpa del 33 al 85 %, la cáscara de un 7 al 24 % y la semilla del 9 al 40 %, de acuerdo con lo que se pretenda procesar industrialmente [21]. Por lo que la proporción obtenida en este estudio sitúa al mango Ataúlfo en un rango medio de aprovechamiento de pulpa, lo que es ventajoso para su procesamiento como fruta fresca y en la industria de jugos. Sin embargo, el contenido relativamente alto de cáscara y semilla (44.6% en conjunto) sugiere un potencial importante para su valorización como fuente de compuestos bioactivos y minerales, en lugar de considerarse como mero subproducto. Este hallazgo es consistente con tendencias actuales de economía circular en la agroindustria [22], donde los residuos de mango se revalorizan en la obtención de antioxidantes y fibras funcionales [23].

Determinación de parámetros químicos

Los parámetros químicos obtenidos en pulpa fresca y deshidratada de mango ataúlfo, se muestran en la Tabla 1. Los cuales presentan diferencias significativas tanto en pH como en acidez titulable, siendo la pulpa deshidratada la que tiene un pH más ácido y

por consiguiente mayor acidez titulable, este comportamiento puede atribuirse a la concentración de ácidos orgánicos durante el proceso de deshidratación, mismo que varía según método y condiciones de secado; algunos trabajos reportan pH ligeramente mayor en mango seco frente a fresco [24]. Por su parte Dereje y Abera [25], reportaron que en cultivares como *Keitt* el pH de las rebanadas de mango deshidratadas se redujo en comparación con el fruto fresco (3.86), lo cual se asocia con la concentración de ácidos orgánicos tras la remoción de agua.

La acidez titulable (AT) constituye una variable clave en la determinación de las características organolépticas del fruto, ya que refleja el porcentaje de ácidos orgánicos, principales responsables de su sabor [26]. Asimismo, diversos estudios han señalado que los niveles de sólidos solubles totales (SST) en mangos de un mismo cultivar pueden variar de forma considerable según el sitio de cultivo y el ciclo productivo [27]. Por su parte Siller-Cepeda et al. [28] señalan que los mangos Tommy Atkins, Haden y Kent al momento de corte y para fines de exportación deben presentar valores mínimos de SST de 7.3° Brix. Por tanto y de acuerdo con Carrera

et al. [29], los SST se deben tomar en cuenta de acuerdo con el corte y uso final del fruto, así como a las preferencias sensoriales del gusto del cliente.

Un factor relevante en la determinación la calidad del mango es la correlación entre sólidos solubles y acidez titulable (SS/AT), el cual se emplea como índice de madurez. Ya que durante la maduración los azúcares se incrementan mientras que los ácidos disminuyen. En la tabla 1 se observa que la pulpa deshidratada no presentó variaciones significativas en comparación con la pulpa fresca, lo que sugiere que el proceso de deshidratación permitió conservar el perfil de sabor característico de la fruta fresca. Resultados similares han sido reportados en mango cv. *Tommy Atkins*, donde la relación SS/AT ha demostrado ser un parámetro confiable para evaluar el estado de madurez y la calidad del fruto bajo diferentes condiciones de almacenamiento. Esta concordancia refuerza la importancia del índice SS/AT como criterio robusto para interpretar cambios de calidad, aun cuando el fruto es sometido a procesos de conservación como la deshidratación [30].

Tabla 1. Determinación de parámetros químicos en pulpa fresca y deshidratada de mango ataulfo.

	pH	SST (°Brix)	AT (%)	Relacion SST/AT
P. fresca	2.80±0.10 ^{1b*}	7.36 ± 0.06 a	0.368 ± 0.01b	19.98 ± 0.50 a
P. deshidratada	3.91± 0.13a	8.06 ± 0.47a	0.395 ± 0.01a	20.43 ± 1.88 a

*Los valores con letras distintas dentro de columnas, de acuerdo con la prueba de Tukey, presentan diferencias significativas ($P \leq 0.05$). ¹El valor representa la media de tres repeticiones ± desviación estándar.

Color

Un parámetro importante de calidad es el color, el cual va de la mano con las propiedades químicas del mango [31]. En la Tabla 2 se observan los resultados de color evaluados en cáscara, pulpa fresca y deshidratada de mango ataulfo, con diferencias significativas $p \geq 0.05$. La pulpa fresca presentó mayores valores de

luminosidad y saturación en comparación con la pulpa deshidratada, lo que refleja la pérdida de intensidad cromática durante el secado. Esta disminución podría deberse a la degradación de carotenoides, principalmente β -caroteno, como reportaron Fratianni et al. [32]. Además, el oscurecimiento observado en mango cultivar Tommy Atkins, cv. *Kent* podría estar mediado por reacciones de

pardeamiento enzimático catalizadas por la polifenol oxidasa, como han demostrado Ismail et al. [33] quienes hallaron una fuerte correlación entre actividad enzimática y pérdida de compuestos fenólicos [34]. De acuerdo con lo señalado por Zuluaga et al. [35] quienes mencionan que utilizaron secado con aire caliente a 60 °C durante 24 h para la variedad Tommy Atkins obtuvieron una $L = 67.68$, $a^* = 19.42$ y $b^* = 65.97$ y secado a 80 °C por 120 min, reportaron una $L = 52.97$; $a^* = 8.2$ y $b^* = 42.18$, las variaciones en los parámetros de color (L^* , a^* y b^*) obtenidos bajo diferentes condiciones de secado se explican principalmente por la influencia de

la temperatura y el tiempo de exposición, así como por las características propias de cada variedad de mango. En particular, los autores discuten que temperaturas más elevadas y procesos más intensos favorecen el pardeamiento y la degradación de pigmentos naturales, lo cual reduce los valores de luminosidad (L^*) y modifica los tonos rojos y amarillos (a^* y b^*). Estos hallazgos respaldan lo observado en nuestro estudio, donde las condiciones de secado también determinaron cambios en el color, sugiriendo que el control preciso de las variables de proceso es fundamental para preservar las propiedades visuales del producto.

Tabla 2. Parámetro de color evaluado en cáscara, pulpa fresca y deshidratada de mango Ataúlfo.

	L^*	a^*	b^*	Croma	Hue
Cáscara	$37.99 \pm 2.07^1 c^*$	$10.77 \pm 1.07 b$	$6.48 \pm 0.21 c$	$12.57 \pm 0.99 c$	$31.13 \pm 2.08 c$
P. fresca	$73.30 \pm 0.72 a$	$20.70 \pm 0.24 a$	$69.36 \pm 2.17 a$	$72.41 \pm 2.14 a$	$73.32 \pm 0.36 b$
P. desh.	$61.19 \pm 1.01 b$	$4.78 \pm 0.29 c$	$29.30 \pm 0.46 b$	$29.69 \pm 0.48 b$	$80.74 \pm 0.50 a$

*Los valores con letras distintas dentro de columnas, de acuerdo con la prueba de Tukey, presentan diferencias significativas ($P \leq 0.05$). ¹El valor representa la media de tres repeticiones $\pm$ desviación estándar.

Compuestos bioactivos

Fenoles totales, Flavonoides totales y capacidad antioxidante

Se han realizado diversas investigaciones en mango, debido a la variedad de polifenoles y su potencial antioxidante [36]. El contenido de compuestos fenólicos en el mango y subproductos se observan en la Figura 1, la semilla presentó el mayor contenido de polifenoles con $90.06 \text{ mg EAG/g}^{-1}$, en comparación con la pulpa y la cáscara. Este hallazgo refuerza la idea de que la semilla es una fracción poco aprovechada, pero con gran potencial como fuente de antioxidantes naturales. Dichos datos coinciden con lo reportado en otros cultivares de mango como Sumaya-Martínez et al. [37] quienes realizaron un trabajo en mango ataulfo y obtuvieron valores de 37 mg EAG/g^{-1} de fenoles en pulpa a diferencia del contenido obtenido en este trabajo con 20.41 mg/g^{-1} un

poco más bajo. Calva et al. [38] en mango criollo obtuvieron $52.64 \text{ g EAG/100 g}^{-1}$ de fenoles en semillas y $104.31 \text{ g EAG/100 g}^{-1}$ en cáscara. De la misma manera Ribeiro et al. [39] en mango 'Ubá' la cáscara presentó un contenido fenólico total de 57.24 mg/kg^{-1} y 82.54 mg/kg^{-1} en la semilla. Estas diferencias reflejan la influencia del cultivar, las condiciones de crecimiento y el procesamiento, aunque en todos los casos se confirma la misma tendencia: la semilla y la cáscara concentran mayor contenido fenólico que la pulpa. lo que refuerza la idea de que estos tejidos representan una fuente destacada de contenido de fenoles. Minatel et al. [40] menciona la importancia de los fenoles al ceder un átomo de hidrógeno o electrón al radical libre, el cual al ser estabilizado no genera daño oxidativo a las células y con ello evitar las enfermedades crónico-degenerativas.

En cuanto al contenido de flavonoides obtenidos en mango y sus subproductos se observaron diferencias significativas $p \geq 0.05$. con valores más altos en la semilla y menores en la pulpa fresca. La elevada concentración en la semilla puede atribuirse a su función de reserva metabólica y a la acumulación de compuestos fenólicos con actividad defensiva [41]. En contraste, la menor concentración en la pulpa fresca podría relacionarse con procesos de dilución durante la maduración y con su papel fisiológico orientado a la atracción de dispersores, donde predominan azúcares y pigmentos [42].

Estos resultados concuerdan con lo reportado por Corrales-Bernal et al. [43] quienes encontró en la pulpa fresca un contenido de flavonoides de 56.2 mg/g^{-1} catequina/100 g en pulpa de mango fresco maduro. Por su parte Kuskoski et al. y Min et al. [44] [30], en la determinación de flavonoides en mango ataulfo, obtuvieron valores de 19.3 mg/g^{-1} E. quercetina/g en pulpa más baja a la obtenida en este estudio con 75.44 mg/g^{-1} . Maldonado-Celis et al. [3] comentan que 100 g de fruta contienen antocianidinas como la cianidina con 0.10 mg; la delphinidina con 0.02 mg/g^{-1} ; y la pelargonidina con 0.02 mg/g^{-1} , los flavonoles como la miricetina con 0.06 mg/g^{-1} y el kaempferol con 0.05 mg/g^{-1} . Así mismo, estos autores mencionan que la cáscara contiene una mayor cantidad de mangiferina.

La actividad antioxidante determinada en mango por el método de DPPH•, arrojo

resultados estadísticamente significados, en los cuales se puede observar en la Figura 1. Se muestra la comparación entre las cuatro variables a analizar dando como resultado que la semilla presenta la mayor capacidad de atrapar el radical libre DPPH•, casi con un 50% más que la pulpa. La fuerte correlación entre el contenido fenólico y la actividad antioxidante observada mediante el ensayo DPPH• confirma el papel clave de estos metabolitos en la capacidad de neutralización de radicales libres. Desde un punto de vista nutracéutico, este resultado sugiere que los extractos de semilla podrían emplearse como ingredientes funcionales en la prevención de enfermedades crónico-degenerativas. Por su parte, Sumaya-Martínez et al. [37] determinaron la actividad antioxidante de mango ataulfo y obtuvieron $244 \text{ } \mu\text{mol ET/g}^{-1}$ en pulpa, mientras que en este trabajo se obtuvo 12.51 mg/g^{-1} . Un trabajo en pulpas congeladas de 11 frutas consumidas en el sur de Brasil, entre ellas el mango, encontraron que este fue la segunda fruta que presentó la mayor concentración de actividad antioxidante equivalente a trolox con $13,7 \text{ } \mu\text{mol ET/100 g}^{-1}$ de la muestra [44]. Se ha mencionado que los residuos de mango presentan mayor actividad antioxidante a diferencia de otros frutos. Sin embargo, la capacidad antioxidante depende del microambiente en el que se encuentra el compuesto, lo que le permite una interacción mutua, originando sinergia o inhibición [12].

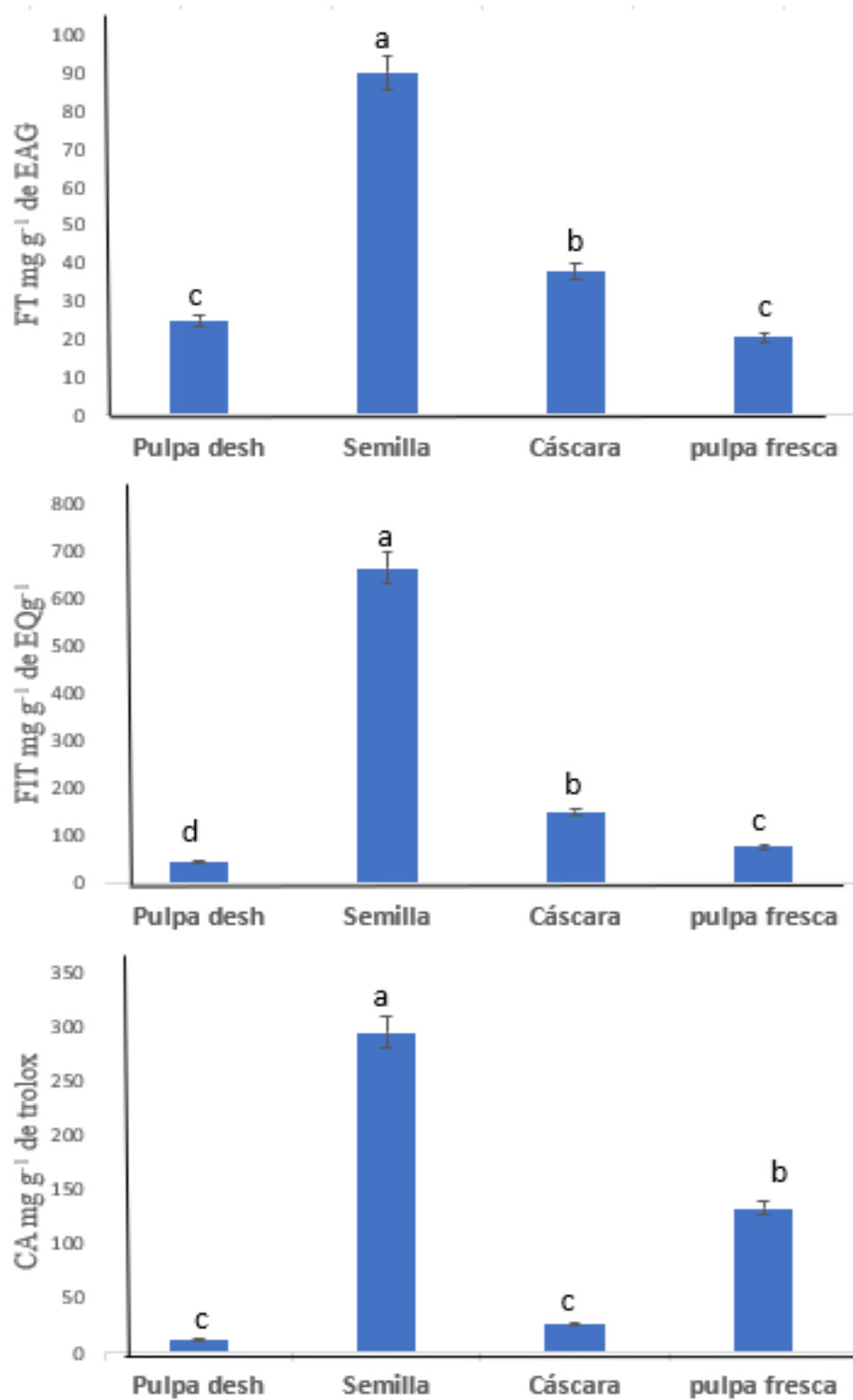


Figura 1. Contenido de fenoles totales, flavonoides totales y capacidad antioxidante en pulpa deshidratada, semilla, cáscara y pulpa fresca de mango cv ataulfo. FT: fenoles totales; FIT: Flavonoides totales; CA: capacidad antioxidante. Las barras representan el error estándar (n=3).

Composición mineral

La evaluación de macro y microelementos, realizada en la cáscara, pulpa fresca, deshidratada y semilla, se observa en la Tabla 3. Donde se presentaron diferencias significativas $p \geq 0.05$, siendo la semilla la que obtuvo los valores más altos en los elementos de K, Ca, Mg, P. Por su parte, la cáscara obtuvo los valores más altos en Mg, Na, Zn y Mn. En cambio, la pulpa tuvo el valor más alto en Fe y Cu. Como se mencionó anteriormente la cáscara y semilla aportan un 58% del total del fruto, por lo que estos subproductos pueden ser considerados como fuentes de macro y microelementos. Estos perfiles son consistentes con lo reportado por Velderrain et al. [45], quienes señalaron en residuos de mango contenidos de calcio de 60.63 mg/100 g en la cáscara y 111.30 mg/100 g en la semilla. Asimismo, informaron valores de magnesio de 94.80 mg/100 g en la semilla, hierro de 12.78 mg/100 g en la cáscara y 11.90 mg/100 g en la semilla, y finalmente zinc de 0.66 mg/100 g en la cáscara y 1.10 mg/100 g en la semilla. Destacando que la semilla puede considerarse una fuente relevante de calcio y magnesio, mientras que la cáscara aporta cantidades importantes de hierro y zinc. En nuestro estudio se observó la misma tendencia, lo que refuerza la idea de que estos subproductos representan una fracción valiosa desde el punto de vista nutricional. Por lo que los subproductos del mango representan una fuente alternativa de minerales esenciales para la dieta humana. Además, la variabilidad entre fracciones confirma que cada tejido vegetal cumple funciones fisiológicas diferenciadas en el fruto, con concentraciones específicas de compuestos y minerales [46]. La valorización de estas fracciones podría contribuir tanto a la reducción de residuos en la industria del mango como a la generación de suplementos minerales o ingredientes fortificantes en alimentos procesados [47].

Por otra parte, la disminución observada en algunos elementos puede atribuirse a procesos de lixiviación durante el escaldado o lavado previo, en donde ciertos minerales solubles pueden perderse en el agua de proceso [48]. Además, la forma química de ciertos minerales puede modificarse durante el calentamiento, afectando su recuperación analítica [49]. Es relevante aclarar que, para los análisis de minerales en semilla, se utilizó únicamente la almendra interna, separada manualmente de la testa y el endocarpio, dado que esta es la fracción con potencial de aprovechamiento alimentario e industrial, como se ha reportado en estudios de caracterización de subproductos de frutos tropicales [50]. Además, Maldonado-Celis et al. [3], mencionan que la fruta de mango provee a la salud humana un importante contenido de elementos esenciales como Mg, Fe, Ca, K, Na, Zn, F, Se y Mn.

No obstante, la concentración de elementos minerales puede variar entre frutos y cultivares, por lo que conocer su composición nutricional resulta esencial para promover una inclusión dietética adecuada. En este sentido, los subproductos del mango, como la cáscara y la semilla, no solo representan una fuente importante de minerales como Ca, Mg, Fe y Zn, sino que también ofrecen un valor añadido al poder aprovecharse en la formulación de alimentos funcionales, suplementos nutricionales y en aplicaciones industriales. Por ejemplo, Mandha et al. [51], encontraron que la incorporación de subproductos de mango mejoró significativamente el contenido mineral y los compuestos bioactivos en productos alimentarios fortificados. De esta manera, su utilización contribuye tanto al mejoramiento de la salud como a la reducción de problemas ambientales y económicos asociados con su desecho.

Tabla 3. Análisis de nutrientes minerales en cáscara, pulpa fresca, deshidratada y semilla de mango cv. Ataulfo.

Análisis	Pulpa desh.	Cáscara	Semilla	Pulpa fresca
	g kg ⁻¹			
P	1.2 0.235± d	2.3 ±0.034 b	7.8 ± 0.173a	1.6 0.035± c
K⁺	20.8 ±0.63 d	25.8 ± 0.306 b	27.4 0.287± a	21.6 ±0.360 c
Ca²⁺	2.6 ± 0.153 c	12.2 ±0.886 b	20.3 ±0.43 a	8.8 ± 0.216 d
Mg²⁺	40 ± 0.261 b	46.00 ± 0.036 b	48.00 ± 0.002 a	40 ± 0.046 b
	mg/kg ⁻¹			
Fe²⁺	0.86 ± 0.554 a	0.76 ± 0.226 b	0.46 ± 0.109c	0.88 ± 0.554 a
Cu²⁺	0.11 ± 1.114 d	0.14 ± 0.106 c	0.15 ±0.0215 b	0.33 ± 1.114 a
Mn²⁺	0.16 ± 0.016 c	0.65 ± 0.228 a	0.36 ± 0.046 b	0.20 ± 0.005 c
Zn²⁺	0.14 ± 0.167 d	0.34 ± 0.104 a	0.17 ± 0.167 b	0.15 ± 0.216 c
Na⁺	1.68 ± 0.341c	3.02 ± 0.034 a	1.09 ± 0.341c	1.09 ± 0.632 b

*Los valores con letras distintas dentro de columnas, de acuerdo con la prueba de Tukey presentan diferencias significativas ($P \leq 0.05$). ¹El valor representa la media de tres repeticiones ± desviación estándar.

Conclusiones

Los resultados obtenidos en el presente estudio indicaron que el fruto presentó un rendimiento del 54.97% de la pulpa, la cáscara el 31.56% y la semilla un 13.47%. La fruta fresca y pulpa deshidratada presentaron los valores más altos en sólidos solubles y en la relación SS/AT. En cuanto al contenido mineral, la pulpa fresca presentó las mayores concentraciones de Fe y Cu, mientras que la semilla destacó por su elevado contenido de fenoles, flavonoides, actividad antioxidante, así como de K, Ca, Mg y P, seguida de la cáscara. La valorización de estas fracciones representa una estrategia dual: por un lado, contribuye a reducir los residuos generados por la industria del mango, y por otro, abre la posibilidad de desarrollar suplementos minerales e ingredientes fortificantes para alimentos procesados. Este enfoque se alinea con las tendencias actuales de economía circular en la agroindustria, donde los subproductos de mango han sido revalorizados en la obtención de antioxidantes y fibras funcionales. Los resultados aquí obtenidos, por tanto, aportan información relevante con potencial para generar valor agregado en productos

alimentarios y fortalecer la sostenibilidad del sector.

Referencias

1. FAOSTAT. (2022). Datos sobre alimentación y agricultura. Cultivos y productos de ganadería. <https://www.fao.org/faostat/es/#data/QCL>
2. SIAP. (2021). Cierre de la producción agrícola por cultivo. Servicio de Información Agroalimentaria y Pesquera (SIAP), CDM, México. Disponible en <https://www.gob.mx/siap/acciones-y-programas/produccion-agricola-33119>
3. Maldonado-Celis, M.E., Yahia, E.M., Bedoya, R., Landázum P., Loango, N., Aulón, J., Restrep, B., & Guerrero J.C. (2019). Chemical composition of mango (*Mangifera indica* L.) Fruit: Nutritional and phytochemical compounds. *Frontiers in plant science* 10, 1073. <http://doi.org/10.3389/fpls.2019.01073>
4. Manthey, J. A., & Perkins-Veazie, P. (2009). Influences of harvest date and location on the levels of beta-carotene, ascorbic acid, total phenols, in vitro antioxidant capacity, and phenolic profiles of

five commercial varieties of mango (*Mangifera indica* L.). *Journal Agriculture Food Chemistry*, 57, 10825-30. <http://doi.org/10.1021/jf902606h>

5. Ferreira, F. R., Valentim, I. B., Ramonesa, E. L. C., Trevisan, M. T-S., Olea-Azar, B., Pérez-Cruz, F., Abreu, F. C., & Goulart, M.O. F. (2013). Antioxidant activity of the mangiferin inclusion complex with b-cyclodextrin. *Food Science and Technology*, 1-2 <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2012.09.032>

6. Pacheco-Jiménez, A. A., Heredia, J. B., Gutiérrez-Grijalva, E. P., Quintana-Obregón, E. A., & Muy-Rangel, M. D. (2022). Potencial industrial de la cáscara de mango (*Mangifera indica* L.) para la obtención de pectina en México. *TIP. Revista especializada en ciencias químico-biológicas*, 25, e419. <https://doi.org/10.22201/fesz.23958723e.2022.419>

7. Rubiano-Charry, K. D., Ciro-Velásquez, H. J., & Aristizabal-Torres, I. D. (2019). Aprovechamiento de los subproductos del mango, como fuente de compuestos bioactivos, para la elaboración de rollos comestibles. *Rev. U.D.C.A Actualidad & Divulgación Científica*, 22(2), e1078. <http://doi.org/10.31910/rudca.v22.n2.2019.1078>

8. Sáyago-Ayerdi, S. G., Zamora-Gasga, V. M. & Venema, K. (2019). Prebiotic effect of predigested mango peel on gut microbiota assessed in a dynamic in vitro model of the human colon (TIM-2). *Food Research International*, 118, 89-95. <http://doi.org/10.1016/j.foodres.2017.12.024>

9. Vega-Vega, V., Silva-Espinoza, B. A., Cruz-Valenzuela, M. R., Bernal-Mercado, A. T., González-Aguilar, G. A., Vargas-Arispuro, I., Corrales-Maldonado, C. G., & Ayala-Zavala, J. F. (2013). Antioxidant

enrichment and antimicrobial protection of fresh-cut mango applying bioactive extracts from their seeds by-products. *Food and Nutrition Sciences*, 4, 197-203. <http://doi.org/10.4236/fns.2013.48A024>

10. Ayala-Zavala, J., Vega-Vega, V., Rosas-Domínguez, C., Palafox-Carlos, H., Villa-Rodríguez, J., Siddiqui, M. W., Dávila-Aviña, J., & González-Aguilar, G. (2011). Agro-industrial potential of exotic fruit byproducts as a source of food additives. *Food Research International*, 44(7), 1866-1874. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2011.02.021>

11. Wall-Medrano, Abraham, Olivas-Aguirre, Francisco J., Velderrain-Rodríguez, Gustavo R., González-Aguilar, A., Rosa, Laura A. de la, López-Díaz, José A., & Álvarez-Parrilla, Emilio. (2015). El mango: aspectos agroindustriales, valor nutricional/funcional y efectos en la salud. *Nutrición Hospitalaria*, 31(1), 67-75. <https://dx.doi.org/10.3305/nh.2015.31.1.7701>

12. Zavala, L, Castro de la Cruz, Y., Calva A. F., Morales C. A., Sánchez M. M., & Chávez R. Y. (2020). Optimización de deshidratación de la semilla de mango con microondas y conservación de los compuestos fenólicos. *Revista Mexicana de Agroecosistemas*, 7(1), 10-29. ISSN: 2007-9559.

13. Febres B. N., Mora-Medina M., & Figueroa J.G. (2022). Optimización de la deshidratación y extracción de compuestos fenólicos de piel de mango. *Quim. Nova*. 45(5), 621-629. <http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20170842>

14. Aguirre-Santos, E. A., & Gómez-Aldapa, C. A. (2010). Evaluación de las características fisicoquímicas en la especie de

frijol *Phaseolus vulgaris* de las variedades; Pinto Saltillo, Bayo Victoria y Negro San Luis. XII Congreso nacional de ciencia y tecnología de alimentos. 1101-1108.

15. Association of Official Analytical Chemist (AOAC) (2000). Official Methods of Analysis (17th). Ed. AOAC International. Guithersbur, MD, EE, UU

16. Singleton, F. B., & Ross, C. W. (1994). Colorimetric of total phenolics with phosphomolybdic-phosphotungstic acid reagents. *American Journal Enology Viticulture* 16, 144-158. <https://doi.org/10.5344/ajev.1965.16.3.144>

17. Zhishen, J., Mengcheng, T., & Jianming, W. (1999). The determination of flavonoid contents in mulberry and their scavenging effects on superoxide radicals. *Food Chemistry*, 64, 555-559. [https://doi.org/10.1016/S0308-8146\(98\)00102-2](https://doi.org/10.1016/S0308-8146(98)00102-2)

18. Meir, S., Kanner, J., Akiri, B., & Philosoph-Hadas, S. (1995). Determination and involvement of aqueous reducing compounds in oxidative defense systems of various senescing leaves. *Journal Agriculture Food Chemistry*, 43, 1813-1819. <http://dx.doi.org/10.1021/jf00055a012>

19. SAS (2002). SAS/STAT users guide: Statics, Ver. 9.00. SAS Institute, Inc. Cary, NC, USA. 1503 pp.

20. Villamizar-Vargas, R., Quiceno-Gómez, C., & Giraldo-Giraldo, G. (2019). Cambios fisicoquímicos durante la maduración del mango Tommy Atkin en la Poscosecha. *Revista U.D. C. A. Actualidad & Divulgación Científica*, 22(1), e1159. <https://doi.org/10.31910/rudca.v22.n1.2019.1159>

21. Berardini, N., Knödler, M., Schieber, A., & Carle, R. (2005). Utilization of mango

peels as a source of pectin and polyphenolics. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, 6(4), 442-452. <https://doi.org/10.1016/j.ifset.2005.06.004>

22. Albaayit, S. F. A., Amartani, K., Ali, A. M., Hasddin, S. S., Shah, S. S., & Aslam, H. K. W. (2024). Mango waste (peel and kernel) enhances food dietary fiber and antioxidant properties. *Journal of Global Innovations in Agricultural Sciences*, 12(4), 1043–1049. <https://doi.org/10.22194/JGIAS/24.1567>

23. Ligarda-Samanez CA, Huamán-Carrión M.L., Calsina-Ponce W. C., Cruz G, Calderón Huamaní D. F., Cabel-Moscoso D. J., Garcia-Espinoza A.J., Sucari-León R, Aroquipa-Durán Y, Muñoz-Saenz J. C., Muñoz-Melgarejo M, Jilaja-Carita E. E. Technological Innovations and Circular Economy in the Valorization of Agri-Food By-Products: Advances, Challenges and Perspectives. *Foods*. 2025 May 30;14(11):1950. doi: 10.3390/foods14111950. PMID

24. Ampah, J., Acquah, C., Aidoo, R., Antwi, E., & Djaagbletey, G. (2022). Drying kinetics and chemical properties of mango (*Mangifera indica* L.) slices under different drying conditions. *International Journal of Food Science*, 2022, Article 6243228. <https://doi.org/10.1155/2022/6243228>

25. Dereje, B., & Abera, A. (2020). Effect of pretreatments and drying methods on the quality of dried mango (*Mangifera indica* L.) slices. *Cogent Food & Agriculture*, 6, 1747961.

<https://doi.org/10.1080/23311932.2020.1747961>

26. De Souza, B. S., Durigan., J. F. Donadon, J. R. & De Souza, P. S. (2006). Mangas mínimamente procesadas asmadurecidas naturalmente ou com etileno e armazenadas

em diferentes embalagens. *Revista Brasileira de Fruticultura*, 28(2), 271-275. <https://doi.org/10.1590/S0100-29452006000200026>

27. Medina, J. C. (1981). Variedades. In: Medina, J. C., Bleinroth, E. W., Martin, Z. J., Quast, D. G., Hashizume, T., Figueiredo, N. M. S., Moretti, V. A., Canto, W. L., Bicudo Neto, L. C. *Manga: da Cultura ao Processamento e Comercialização*. Capítulo 8 (Parte 1). Instituto de Tecnología de Alimentos. Campinas - SP. 1981. p. 60-98. (Série Frutas Tropicais no 8).

28. Siller-Cepeda, J., Muy-Rangel, D., Báez-Sañudo, M., Araiza-Lizarde, E., & Ireta-Ojeda, A. (2009). Calidad poscosecha de cultivares de mango de maduración temprana, intermedia y tardía. *Revista fitotecnica mexicana*, 32(1), 45-52.

29. Carrera, A., Mark, D. & Gil, R. (2008). Algunas características físicas y químicas de frutos de cinco variedades de mango en condiciones de sabana del estado Monagas. *Agronomía Tropical*, 58(1), 27-30.

30. Morais, Patrícia & Assis, J. S. (2004). Quality and conservation of mango cv. 'Tommy Atkins' as affected by maturity stage and storage temperature. *Acta Horticulturae*. 645. 639-643. [10.17660/ActaHortic.2004.645.84](https://doi.org/10.17660/ActaHortic.2004.645.84).

31. Mim, F., Galib, S., Hasan, M. & Jerin, S. (2018). Automatic detection of mango ripening stages an application of information technology to botany. *Scientia Horticulturae*, 237, 156-163. <https://doi.org/10.1016/j.scienta.2018.03.057>

32. Fratianni, A., Giuseppina, A., Di. M., Panfili, N., Gentile, C., Farina, L., Cinquanta, Corona, O. (2020). Evolution of carotenoid compounds, antioxidant activity and sensory quality in two mango cultivars dried at 50, 60

and 70 °C. *Foods*, 9(10), 1424. doi: 10.3390/foods9101424. PMID: 33050135

33. Ismail, H. A., Richard, I., Ramaiya, S. D., Zakaria, M. H., & Lee, S. Y. (2023). Browning in Relation to Enzymatic Activities and Phytochemical Contents in *A. odoratissimus*. *Plants*, 9(1), 57. <https://doi.org/10.3390/horticulturae9010057>

34. Lee, J.H., Schwartz, S.J. (2006). Pigments in plant foods. En: Hui, Y.J. (ed.). *Handbook of Science, Technology and Engineering*. Boca Raton. F.L: Taylor & Francis. 14(1), 14.13.

35. Zuluaga, J. D., Cortes-Rodríguez, M., & Rodríguez-Sandoval, E. (2010). Evaluación de las características físicas de mango deshidratado aplicando secado por aire caliente y deshidratación osmótica. *Revista de la Facultad de Ingeniería Universidad Central de Venezuela*, 25(4), 127-135.

36. Tirado-Kulieva, V., Atoche-Dioses, Sh., & Hernández-Martínez, E. (2021). Phenolic compounds of mango (*Mangifera indica*) by-products: Antioxidant and antimicrobial potential, use in disease prevention and food industry, methods of extraction and microencapsulation. *Scientia Agropecuaria*, 12(2), 283-293. <https://dx.doi.org/10.17268/sci.agropecu.2021.031>

37. Sumaya-Martínez, M., Sánchez Herrera, L., Torres García, G., & García Paredes, D. (2012). Red de valor del mango y sus desechos con base en las propiedades nutricionales y funcionales. *Revista Mexicana de Agronegocios*, vol. 30, 826-833.

38. Calva, F., Zavala, L., Muñoz, R., Vélez, M., Morales, F., & Chávez, Y. (2020). Comparación de fenoles y capacidad antioxidante de cáscara, semilla de mango

criollo deshidratado con microondas. *Revista Mexicana de Agroecosistemas*, 7, 10-18.

39. Ribeiro, A. M., Estevinho, B. N., & Rocha, F. (2020). Microencapsulation of polyphenols – The specific case of the microencapsulation of *Sambucus Nigra* L. extracts - A review. *Trends in Food Science & Technology*, 105, 454-467. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2019.03.011>

40. Minatel, I. O, Borges, C. V., Gomez, H. A. G., Chen, C. Y. O., & Lima, G.P. P. (2017). Phenolic compounds: functional properties, impact of processing and bioavailability. In: Soto-Hernández, M.; Palma-Tenango, M. & García-Mateos, R. (Ed.). *Phenolic Compounds: Biological Activity*. Intech Open. Londres. Pp. 1-24

41. Berardini, N., Knödler, M., Schieber, A., & Carle, R. (2005). Utilization of mango peels as a source of pectin and polyphenolics. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, 6(4), 442–452. <https://doi.org/10.1016/j.ifset.2005.06.004>.

42. Spencer, J. P. (2010). The impact of fruit flavonoids on memory and cognition. *British Journal of Nutrition*, 104(S3), S40–S47 doi: 10.1017/S0007114510003934. PMID: 20955649

43. Corrales-Bernal, A., Maldonado, M., Urango, L., Franco, M., & Rojano, B. (2014). Mango de Azúcar (*Mangifera indica*), variedad de Colombia: características antioxidantes, nutricionales y sensoriales. *Revista Chilena de Nutrición*, 41(3), 312-318. <https://dx.doi.org/10.4067/S0717-75182014000300013>

44. Kuskoski, E. M. Asuero, A. G., Troncoso, A. M., García-Padilla, M. C., & Fell, R. (2004). Actividad antioxidante de pigmentos antiocianicos. *Revista Brasileira de Ciencia y Tecnología de Alimentos*, 24(4) 691-693.

<https://doi.org/10.1590/S0101-20612004000400036>

45. Velderrain, R.G.R., Pacheco O. R., & González A.G.A., (2018). Cáscara de mango in Alimentos vegetales autóctonos iberoamericanos subutilizados, Editorial CYTED, Primera Edición, ISBN: 978-1-938038-10-5, 120 p.

46. López-Cobo, A., Verardo, V., Díaz-de-Cerio, E., Segura-Carretero, A., Fernández-Gutiérrez, A., & Gómez-Caravaca, A. M. (2017). Use of HPLC–MS/MS to determine phenolic compounds and their metabolites in different tissues of mango fruit. *Food Research International*, 100, 435–444. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2017.07.038>

47. Torres-León, C., Rojas, R., Contreras-Esquivel, J. C., Serna-Cock, L., Belmares-Cerda, R. E., & Aguilar, C. N. (2016). Mango seed: Functional and nutritional properties. *Trends in Food Science & Technology*, 55, 109–117. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2016.07.009>

48. Ratti, C. (2001). Hot air and freeze-drying of high-value foods: A review. *Journal of Food Engineering*, 49(4), 311–319. [https://doi.org/10.1016/S0260-8774\(00\)00228-4](https://doi.org/10.1016/S0260-8774(00)00228-4)

49. Rickman, J. C., Barrett, D. M., & Bruhn, C. M. (2007). Nutritional comparison of fresh, frozen and canned fruits and vegetables. Part 1. Vitamins C and B and phenolic compounds. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 87(6), 930–944. <https://doi.org/10.1002/jsfa.2825>

50. Sogi, D. S., Siddiq, M., Greiby, I., & Dolan, K. D. (2013). Total phenolics, antioxidant activity, and functional properties of ‘Tommy Atkins’ mango peel and kernel as affected by drying methods. *Food Chemistry*,

141(3), 2649–2655.
<https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2013.05.053>

51. Mandha, J., Shumoy, H., Matemu, A. O., & Raes, K. (2021). Valorization of Mango

By-Products to Enhance the Nutritional Content of Maize Complementary Porridges. *Foods*, 10(7), 1635.
<https://doi.org/10.3390/foods10071635>