

Predicción de la resistencia BZR a través de una RNA y un modelo polinomial en el estudio de corrosión en emulsiones Pickering encapsulando 8-HQ como inhibidor de corrosión.

L. Castillo-Santos¹, F.A. Alaffita-Hernández¹, B. Fouconnier², J.E. Terrazas-Rodríguez²

¹ Centro de Investigación en Recursos Energéticos y Sustentables, Campus Coatzacoalcos, Av. Universidad km. 7.5, Santa Isabel, 96538, Coatzacoalcos, Veracruz, México.

² Universidad Veracruzana, Facultad de Ciencias Químicas, Campus Coatzacoalcos, Av. Universidad km. 7.5, Santa Isabel, 96538, Coatzacoalcos, Veracruz, México.

* Correspondencia: letycastillosantos@gmail.com; Tel.: 9211967400

Resumen

Cita: L. Castillo-Santos, F.A. Alaffita-Hernández, B. Fouconnier, J.E. Terrazas-Rodríguez. Predicción de la resistencia BZR a través de una RNA y un modelo polinomial en el estudio de corrosión en emulsiones Pickering encapsulando 8-HQ como inhibidor de corrosión. Rev. INEMATD Science. 2026, 1, 2-13.
<https://doi.org/10.67158/453pg138>

Editor académico: Gómez Rodríguez Cristian

Recibido: 19 de marzo de 2026

Revisado: 7 de mayo de 2026

Aceptado: 14 de mayo de 2026

Publicado: 15 de mayo de 2026

Nota del editor: El comité editorial de Revista INEMATD SCIENCE se mantiene neutral con respecto a las reclamaciones jurisdiccionales en los mapas publicados y las afiliaciones institucionales.

Copyright: © 2026 por los autores. Esta obra se distribuye bajo los términos y condiciones de la licencia Creative Commons Atribución 4.0 Internacional (CC BY 4.0).
<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

Para combatir el proceso destructivo de la corrosión se han diseñado sistemas anticorrosivos inteligentes que aumenten la vida útil de los recubrimientos optimizando gastos económicos y que al mismo tiempo suponen alternativas amigables con el medio ambiente implementando inhibidores orgánicos. En este trabajo se obtuvieron datos de la formación de nanocápsulas poliestireno / sílice mediante polimerización en nanoemulsiones Pickering estabilizadas con sílice-8-hidroxi-quinoleína (8-HQ) que posteriormente se añadieron a diferentes concentraciones sobre superficies metálicas de acero al carbón analizando el comportamiento electroquímico de interfaces de electrodo-electrolito a través de Impedancia Electroquímica. A las resistencias obtenidas en un medio electrolítico se les aplicaron dos metodologías un modelo polinomial el cual permite obtener un predictor a través de la relación entre las variables independientes y la variable dependiente con un $R^2 = 0.9809$ y una red neuronal artificial (RNA) con un $R^2 = 0.9904$ partiendo con 4 neuronas en la capa oculta con el algoritmo Levenberg-Marquardt utilizando tansing, ambas evaluadas a través de un análisis residual con el objetivo de validar los modelos.

Palabras clave: Emulsiones Pickering; Red Neuronal Artificial; Inhibidores.

1. Introducción

Los inhibidores de corrosión son compuestos químicos que se añaden a los sistemas metálicos para reducir o prevenir la corrosión, funcionando de diversas maneras, formando una capa protectora en la superficie del metal e inhibiendo la reacción electroquímica o adsorbiéndose en la superficie del metal [1]. El mecanismo de protección que ejercen los inhibidores en superficies metálicas se puede estudiar utilizando técnicas electroquímicas, como la espectroscopía de impedancia electroquímica (EIE). La EIE es utilizada en el seguimiento de la formación de monocapas, esta técnica proporciona información sobre la distribución de defectos, cobertura, cinética y mecanismos de formación [2-4].

Para analizar los resultados de las medidas de EIE en presencia de un inhibidor de corrosión, se puede utilizar un modelo polinomial que relacione la impedancia con la concentración del inhibidor y los electrolitos utilizados resultando una herramienta útil para estudiar la eficacia de los inhibidores y predecir su rendimiento, dicho modelo se ajusta a los datos experimentales mediante la regresión polinomial, que encuentra los coeficientes del polinomio que mejor se ajusta a los datos las redes neuronales artificiales (RNA) también se han utilizado en el campo de la inhibición de corrosión para modelar y predecir el comportamiento de la corrosión en función de múltiples variables.

Al entrenar una RNA con datos de corrosión previamente recopilados, puede ser útil para identificar patrones ocultos en los datos y proporcionar una herramienta de predicción más precisa en comparación con los modelos tradicionales [5-6].

Ambos modelos han ampliamente utilizado en matemáticas, estadística, física, ingeniería y otras áreas de la ciencia, debido a su simplicidad y flexibilidad en la representación de datos y funciones.

Algunos trabajos hacia el área de química es el realizado por N. Elhamdani y colaboradores [7] que estudia un modelo polinomial para analizar la eficacia de inhibidores de corrosión basados en Schiff en acero suave en solución de ácido clorhídrico. Los autores comparan los resultados del modelo polinomial con los modelos lineales y no lineales, y también con modelos basados en redes neuronales artificiales.

El objetivo del artículo es presentar una metodología para visualizar, mediante una ecuación, el comportamiento de la resistencia de un inhibidor de corrosión expuesto a cloruro de sodio ($NaCl$) bajo diferentes tiempos, con el fin de predecir el rendimiento del inhibidor en una concentración definida de moléculas orgánicas, así como un modelo empírico basado en RNA que utiliza las mismas variables del polinomio para predecir las curvas de EIE y el estudio de la adsorción de la 8-HQ, obteniendo un coeficiente de correlación satisfactorio.

2. Materiales y métodos

Datos experimentales

Los datos utilizados para ajustar el modelo se obtuvieron a través de la experimentación mediante la técnica de Espectroscopia de Impedancia Electroquímica (EIE).

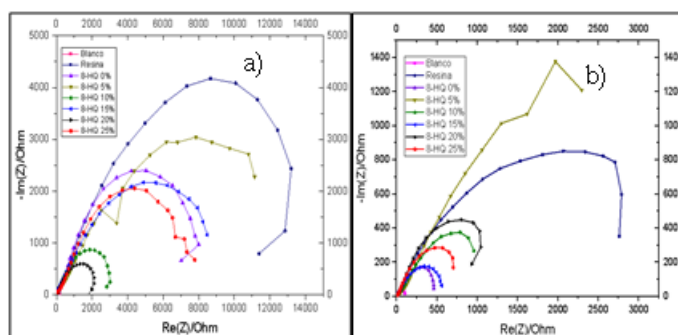


Figura 1. Curvas de Nyquist de acero recubiertos con los nano contenedores a diferentes concentraciones de 8-HQ a) día 0; b) día 30.

Las bases de datos utilizadas para el modelo se obtuvieron mediante experimentación que consiste en la incorporación de nanopartículas a diferentes concentraciones de 8-HQ a una resina alquídica las cuales se utilizaron para recubrir probetas de acero al carbono, estas fueron sometidas a una solución de *NaCl* al 5 % en peso.

Posteriormente, las muestras fueron analizadas en tiempos de 0 a 30 días por estudios de EIE. En las gráficas de la Figura 1 a) se muestra la impedancia a la corrosión del acero al carbón en el día 0, los bucles mostrados en este día se deben a las propiedades del recubrimiento mientras que en el día 30 (Figura 1b) los bucles están asociados a la corrosión bajo película ocasionada por la penetración del electrolito y el contacto de este con el sustrato metálico [2].

En el día 0 de análisis, el sistema con mayor resistencia a la transferencia de carga se tiene en los materiales conteniendo resina (línea azul oscuro), resina con nanocápsulas sin 8-HQ (línea morada) y con 5 % de 8-HQ (línea verde oliva) lo cual es debido a que el recubrimiento actúa como aislante eléctrico por la capa impermeable formada [8]. A concentraciones mayores de 10 % 8-HQ la resistencia disminuye conforme se agrega el inhibidor debido a la carga superficial que este transfiere cuando se mezcla con la resina alquídica [9].

Las curvas de Nyquist de las Figuras 5a) y 5b) muestran la evolución de la impedancia respecto al tiempo (del día 0 al 30) a las diferentes concentraciones de 8-HQ. En todos los casos la impedancia disminuye con respecto al tiempo. Si bien, esto indica que el material ha comenzado a corroerse, puede establecer que el desgaste no ha sido el mismo para todos. El material con resina disminuye la resistencia del orden 1.2×10^4 Ohm a 2.7×10^3 Ohm debido a la pérdida de recubrimiento y con ello se promueve la entrada de electrolito en los microporos del recubrimiento orgánico y las zonas corroídas actúan como áreas conductoras en el recubrimiento [10], disminuyendo la impedancia global.

Este mismo efecto ocurre en todos los casos; sin embargo, para recubrimientos en concentraciones por encima de 10 % de 8-HQ los valores de resistencia se mantienen en el mismo orden de magnitud desde el inicio hasta el término del análisis.

Este fenómeno evidencia el efecto del inhibidor tras el inicio del proceso de corrosivo. Si bien esta acción no impide por completo la corrosión, el efecto de la 8-HQ es notable en pro de evitar la disminución abrupta de la resistencia [8].

Para el modelado a través de la regresión polinomial se decidió utilizar las curvas de Nyquist con una concentración del 15% de 8-HQ teniendo en cuenta el comportamiento de su resistencia frente a la corrosión, tomando en cuenta el tiempo de exposición y las dos variables (Z_{real} – Z_{imag}) que forman el diagrama de impedancia en ambas soluciones electrolíticas.

Diseño experimental

Se usó la técnica Espectroscopía de Impedancia Electroquímica (EIE) para evaluar el comportamiento electroquímico de las muestras acero al carbón y aluminio sin recubrir y cubiertas a diferentes concentraciones de 8-HQ en un tiempo de 30 días.

Con la finalidad de obtener variables de estudio que permitan determinar la eficiencia de los materiales sintetizados como anticorrosivos se utilizó el siguiente circuito equivalente para el ajuste de datos de EIE teóricos [11]. Donde R_1 es la resistencia a la solución, C_2 la capacitancia de la doble capa electroquímica que resulta de los iones y las moléculas de agua adsorbidas. (superficie permeabilidad) y R_2 la resistencia a la transferencia de carga.

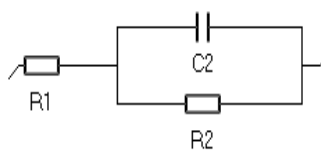


Figura 2. Circuito equivalente empleado para modelar los datos de EIE.

Se empleó la técnica de EIE utilizando el potenciostato BioLogic Science Instruments SP-150 mediante el software EC—Lab 11.01 por medio de 3 electrodos; el contraelectrodo de platino, electrodo de referencia de calomelanos y como electrodo de trabajo las muestras de acero al carbón previamente preparadas. Dichas probetas, con un área de exposición de 4 cm², fueron evaluadas comparando los recubrimientos base frente a aquellos adicionados con nanocápsulas cargadas de inhibidor.

El análisis de EIE se realizó a una amplitud de voltaje constante de 10 mV en un intervalo de frecuencia de Las pruebas electroquímicas se realizaron en periodos de 0, 1, 10, 20 y 30 días. Todos los análisis se llevaron a cabo en solución salina de NaCl y sal comercial (consumo humano) al 5% en peso.

Ajuste de datos experimentales

Una vez obtenido los datos experimentales mediante el modelo polinomial se predijeron los comportamientos que tendrá cada concentración de 8-HQ aplicada a un metal con sus resistencias a diferentes días con 5 entradas:

Entrada 1, tiempo de exposición; la primera entrada corresponde a los valores de tiempo de exposición de la muestra, para este proyecto se evaluaron tiempos desde el día 0, día 1, 10, 20 y 30 días.

Entrada 2, AZI; esta entrada corresponde a los valores de la parte imaginaria del diagrama de Nyquist obtenido de los ensayos de EIE, obtenidos de los resultados de evaluar un acero Cortaxis/Almetal Calibre: C24 en una solución electrolítica de sal comercial.

Entrada 3, AZR; parte real del diagrama de Nyquist, obtenida de los resultados de exponer un acero Cortaxis/Almetal Calibre: C24 en una solución electrolítica de sal comercial.

Entrada 4, BZI; valores de la parte imaginaria del diagrama de Nyquist obtenido de los ensayos de EIE, obtenidos de los resultados de evaluar un acero Cortaxis/Almetal Calibre: C24 en una solución electrolítica de NaCl al 5%.

Entrada 5, BZR; los datos de la entrada 5 corresponden a los valores de la parte real del diagrama de Nyquist, obtenida de los resultados de exponer un acero Cortaxis/Almetal Calibre: C24 en una solución electrolítica de NaCl al 5%.

Modelo polinomial

La construcción del modelo polinomial se relaciona con las variables de entrada anteriormente propuestas una forma general de poder visualizar la relación de estas con el coeficiente de rendimiento se presenta en la ecuación 1.

$$BZR = p(t, AZI, AZR, BZI, BZR) + \varepsilon \quad (1)$$

Donde p es una función polinomial desconocida y ε es el error aleatorio. Se supone que ε es una variable aleatoria con distribución gaussiana.

De esta manera se utiliza el coeficiente de rendimiento experimental (COP) para encontrar el polinomio más simple que se ajuste a los datos utilizando la matriz de correlación de la Figura 3 para visualizar el grado de relación entre las variables.

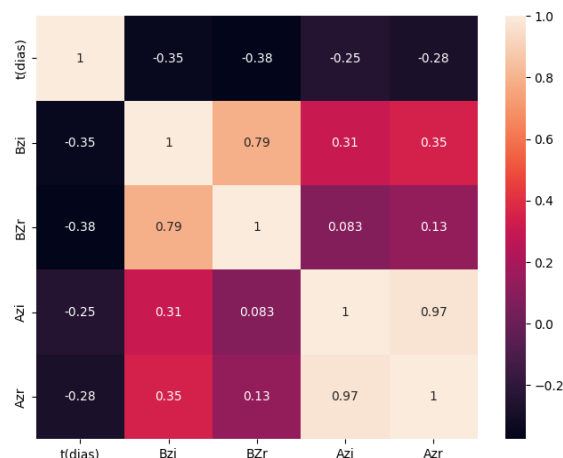


Figura 3. Matriz de correlación de las variables de entrada.

De los polinomios obtenidos se calcula el coeficiente de determinación R^2 y el que obtenga el valor más grande será seleccionado [12].

Red neuronal artificial (RNA)

Una Red Neuronal Artificial (ANN) es una combinación paralela de unidades de procesamiento, llamadas neuronas artificiales, que trabajan en conjunto para realizar tareas de procesamiento de información. Estas neuronas están interconectadas y se comunican entre sí mediante conexiones ponderadas.

Una RNA sencilla está dividida por tres capas, la capa de entrada en ella las neuronas de entrada reciben los datos de entrada (t, AZI, BZI, AZR), el tamaño de esta capa está determinado por el número de entradas de datos (n), asociado al valor de peso (W_i). Además, esta capa tiene un valor de compensación (sesgo (b_1)).

La segunda capa es la oculta y en ella están las neuronas ocultas (r) que son responsables de procesar la información recibida de las neuronas de entrada. Cada neurona oculta realiza una combinación lineal de las entradas ponderadas por los pesos sinápticos, seguido de la aplicación de una función de activación no lineal para este caso ocuparemos la función de activación TANSIG (ecuación 2).

$$TANSIG = \frac{2}{1 + e^{-2Resistencia}} - 1 \quad (2)$$

En la capa de salida hay pesos (W_o) asociados a la salida de la capa oculta y un segundo sesgo (b_2)).

Finalmente, la respuesta de la RNA es la resistencia (BZR) dada por la ecuación 3.

$$BZR = b_2 - \sum_{r=1}^r W_{o(r)} + \sum_{r=1}^r \frac{2W_{o(r)}}{1+e^{-2(W_{i,n} * Resistencias + b_{1(r)})}} \quad (3)$$

3. Resultados

Modelo polinomial

Al buscar el polinomio más simple es decir con menos variables finalmente se optó por la ecuación 4 con un coeficiente de determinación R^2 de 0.9809 lo que indica que el 98.09% de la variabilidad del coeficiente de desempeño podría explicarse a través de este modelo polinomial.

$$\begin{aligned} BZr = & [35.9773] + [-0.0020 * AZI] + [-2.4446 (2*t)] + [0.0750 * AZI.^2 + t.^2] + [-2.9119e-07 * BZI * AZI] + \\ & [-0.0750 * AZI.^2] + [0.0026 * AZR] + [0.7943 * BZI] + [3.9425e-05 * (t.^3) * AZR] + \\ & [-3.57081e-05 * AZI.^2 * t] + [-7.2771e-05 * BZI.^2] \end{aligned} \quad (4)$$

La ecuación (4) es el polinomio que mejor representa los datos para el modelado de la resistencia (BZR). Esta linealidad se puede observar en el Figura 4 donde los puntos de los consumos energéticos modelados se ajustan a los valores reales.

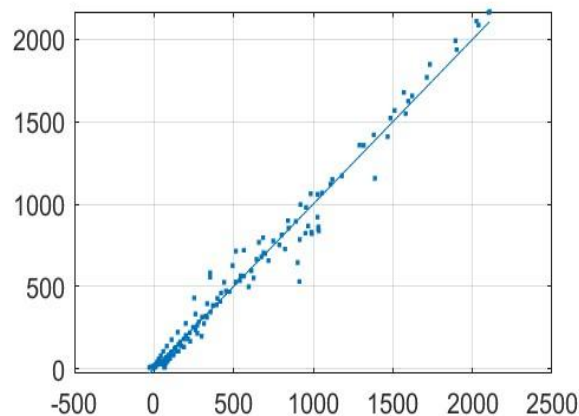


Figura 4. Coeficiente de rendimiento experimental versus previsto para la base de datos.

Análisis residual

Teniendo en cuenta que las variables que intervienen en el polinomio (2) son t , $AZ-I$, $AZ-R$ y $BZ-I$, dada estas entradas se grafica el comportamiento del predictor polinomial con los coeficientes de desempeño experimentales contra los predichos (Figura 4), dado que el polinomio tiene 4 variables diferentes se grafican las curvas de nivel para cada una de las variables en dos y tres dimensiones (Figura 5 y 6 respectivamente).

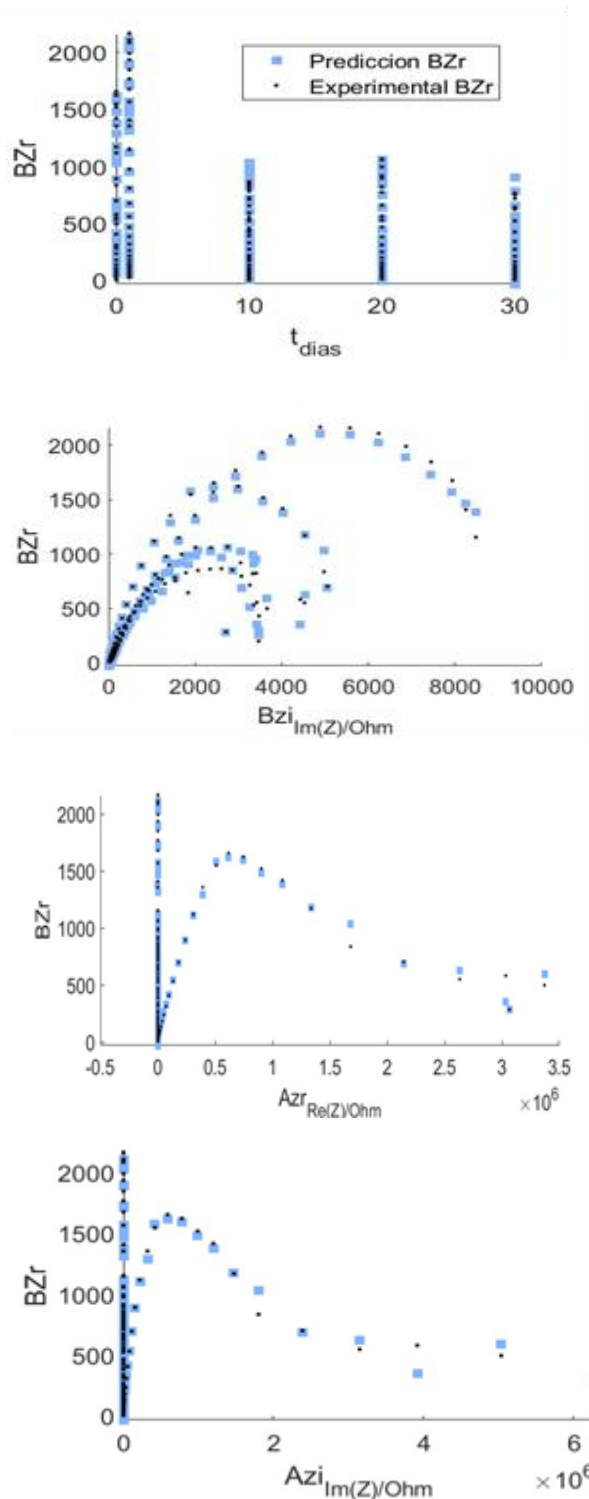
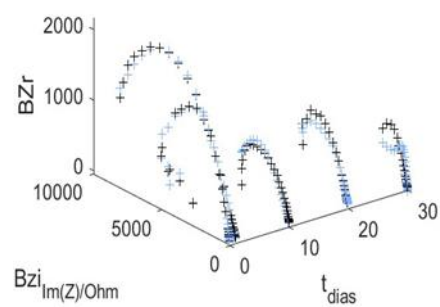
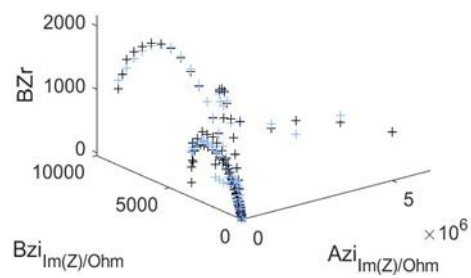
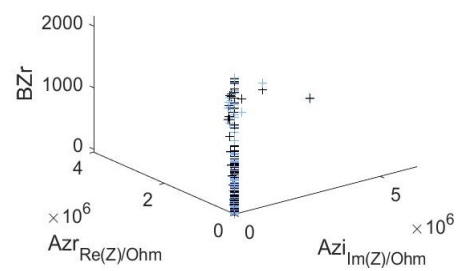
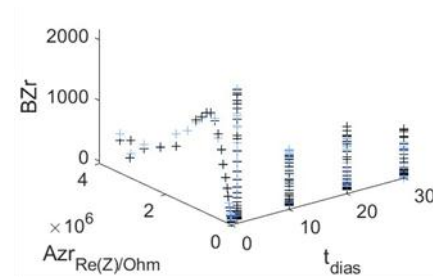
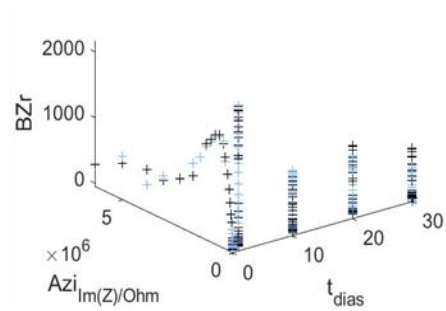


Figure 5. Curvas de nivel. Comparación del coeficiente de rendimiento experimental y predicho para cada variable significativa en el modelo polinomial.



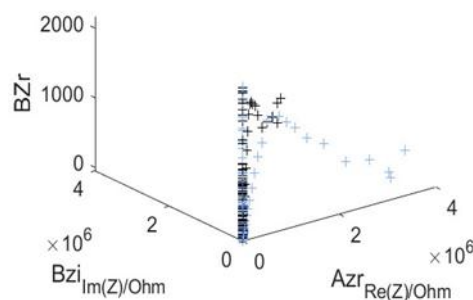


Figura 6. Superficies de nivel. Comparación del coeficiente de rendimiento experimental y predicho para cada dos variables significativas en el modelo polinomial.

Para probar la hipótesis acerca de la pendiente y la ordenada al origen del polinomio seleccionado (ecuación 1) se realizó una suposición adicional donde el termino error ε tiene una distribución normal con variables aleatorias con media cero ($-5.0321e-06$) y varianza constante ($5.9011e+03$). El histograma (Figura 7b)) permite comprobar gráficamente la hipótesis de normalidad; en este caso se observa una distribución campaniforme de tal manera que los residuos del modelo están distribuidos.

El histograma no muestra totalmente uniformidad entre los datos que se puede comparar con la Figura 8 que muestra los intervalos de confianza aplicando la regla 3 sigma teniendo una certeza del 95% donde 5 valores atípicos solo se encuentran fuera del rango concluyendo que estos no impactan de gran manera al polinomio obteniendo con outliers (8 a)) un $R^2 = 0.9809$ y sin outliers (8 b)) un coeficiente de determinación $R^2 = 0.9948$ dando a notar que los residuos estandarizados siguen una distribución gaussiana en cero y una varianza constante.

La Figura 9 termina de complementar este análisis confirmando que los residuos son independientes, de la tal manera que la gráfica muestra los intervalos de confianza (líneas en verde) los datos estandarizados para cada residuo (puntos en el medio) y los outliers (líneas rojas) mostrando que el promedio de residuos es cero y una varianza contante (banda verde) asegurando la bondad del modelo polinomial.

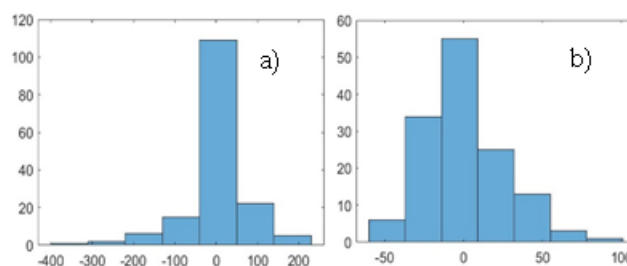


Figura 7. Histograma de los residuos estandarizados a) sin outliers, b) con outliers.

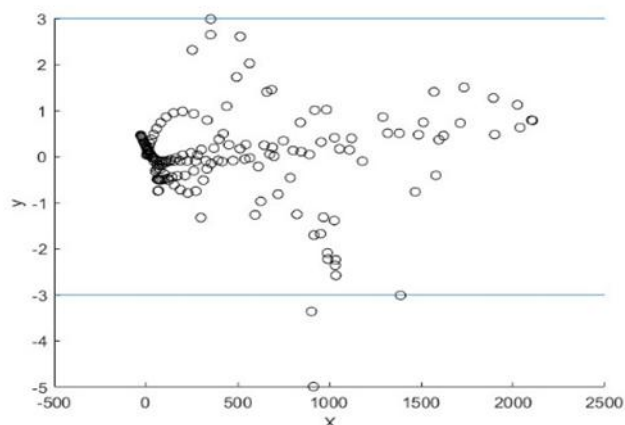


Figura 8. Intervalos de confianza de los residuos, a) con outliers, b) sin outliers.

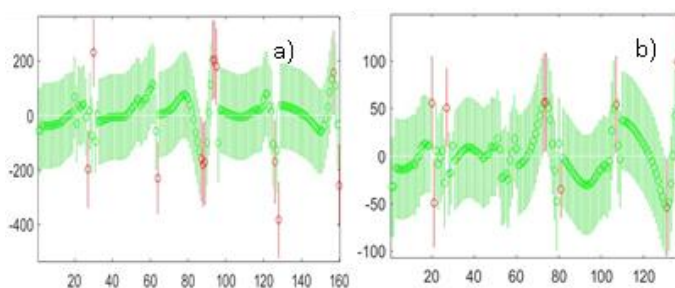


Figura 9. BZR previsto frente a residuos estandarizados.

Red neuronal artificial (RNA)

Se inicio el ajuste de los coeficientes de pesos y bias partiendo con 4 neuronas en la capa oculta con el algoritmo Levenberg-Marquardt utilizando tansing con un numero de épocas de 400 y una división de parámetros de 80/10/10 obteniendo un $R^2=0.9904$ y un error porcentual (MAPE) de 38.4384 y RMSE de 54.2146.

La RNA puede modelar perfectamente el comportamiento y predecir la salida (BZR) de manera adecuada y esto debido a la linealidad de los datos con un coeficiente de determinación de 0.9904. Los pesos y bias de la red se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Pesos y bias de la RNA.

IW			
-0.1604	0.9528	2.1499	-0.8125
-1.75577	-2.4567	3.8528	1.0771
0.1142	0.03029	2.4434	-0.633
-0.9788	-2.6562	-4.9218	0.7891
LW			
-8.6704	4.3937	12.49	2.5009
B1			
2.1195	-0.3858	2.5336	-6.5395
B2			
-6.164			

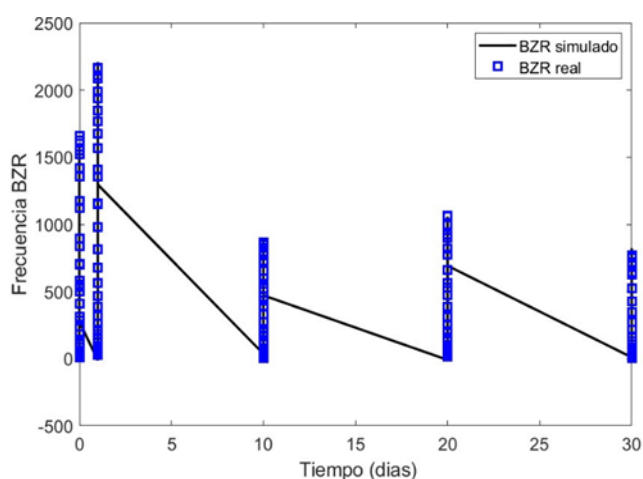


Figura 10. BZR contra el tiempo de exposición del agua de mar, datos reales y simulados por la RNA.

4. Conclusiones

Se desarrolló con éxito un modelo polinomial con 4 variables de operación de entrada para predecir BZR del estudio de corrosión en emulsiones Pickering encapsulando 8-HQ como inhibidor de corrosión. Los resultados obtenidos con el ajuste mostraron alta precisión con los datos experimentales > 0.9809 , así como una red neuronal (RNA) con un coeficiente de determinación de 0.9904 demostrando su capacidad para aprender patrones y características intrincadas a partir de los datos lo que la hace más adecuada para este trabajo.

Una resistencia (BZR) con alta precisión, con un coeficiente de determinación de 0.9809 y 0.9899 respectivamente con los datos experimentales, indica que el modelo es capaz de predecir con precisión el comportamiento de corrosión en las emulsiones. Esta alta precisión sugiere que el modelo polinomial captura las relaciones complejas entre las variables de operación y el coeficiente de desempeño.

Estos resultados son prometedores y tienen implicaciones importantes para el estudio de la corrosión y el uso de emulsiones Pickering con 8-HQ como inhibidor de corrosión. El modelo puede proporcionar una herramienta valiosa para predecir el desempeño de las emulsiones y optimizar las condiciones de operación para minimizar la corrosión.

Abreviaciones

8-HQ	8-hidroxiquinoleína
COP	Coeficiente de rendimiento experimental
RNA	Red neuronal artificial
IW	Pesos de entrada
LW	Pesos de capa

Referencias

- [1] L. Godinez, Y. Meas, R. Ortega y A. Corona, «Los inhibidores de corrosión,» *Revista de Metalurgia*, vol. 39, pp. 140-158, 2003.
- [2] A. Amirudin y D. Thieny, «Application of electrochemical impedance spectroscopy to study the degradation of polymer-coated metals,» *Progress in Organic Coatings*, vol. 26, pp. 1-28, 1995.
- [3] B. Appleman y L. Gray, «EIS electrochemical impedance spectroscopy,» *Journal of Protective Coatings and Linings*, vol. 20, pp. 66-74, 2003.
- [4] T. Trinh Anh , T. Thai Thu , O. Vu Ke , H. Para Thi Xuan , N. Anh Son , N. Caussé y N. Pébère, «8-hydroxyquinoline-modified clay incorporated in an epoxy coating for the corrosion protection of carbon steel,» *Surfaces and Interfaces*, vol. 14, p. 26-33, 2019.
- [5] S. Akbarzadeh, K. Akbarzadeh, R. Naderi, M. Mahdavian y M. G. Olivier, «Corrosion resistance enhancement of a sol-gel coating by incorporation of modified carbon nanotubes: Artificial neural network (ANN) modeling and experimental explorations,» *Progress in Organic Coatings*, vol. 174, 2023.
- [6] D. Millán-Ocampo , A. Parrales-Bahena , J. González-Rodríguez, S. Silva-Martínez, J. Porcayo-Calderón y J. A. Hernández-Pérez, «Modelling of Behavior for Inhibition Corrosion of Bronze Using Artificial Neural Network (ANN),» *Entropy*, vol. 20, 2018.
- [7] S. Ashassi, S. Habib y S. Behrouz, «Modeling of corrosion inhibition efficiency of some new Schiff bases on mild steel in hydrochloric acid solution: A comparative study using linear, non-linear and ANN models,» vol. 239, pp. 154-164, 2004.
- [8] M. Haase, D. Grigoriev y H. Möh, «Development of Nanoparticle Stabilized Polymer Nanocontainers with High Content of the Encapsulated Active Agent and Their Application in Water-Borne Anticorrosive Coatings,» *Advanced materials*, vol. 24, pp. 2429-2435, 2012.
- [9] B. Binks y S. Lumsdon, «Influence of Particle Wettability on the Type and Stability of Surfactant-Free Emulsions,» *American Chemical Society*, vol. 16, pp. 8622-8631, 2000.
- [10] Mišković-Stanković, Zotović, Kačarević-Popović y Maksimović, «Corrosion behaviour of epoxy coatings electrodeposited on steel electrochemically modified by Zn-Ni alloy,» *Electrochimica Acta*, vol. 44, nº 24, pp. 4269-4277, 1999.
- [11] M. Morales, C. Cordoba , M. Mejia Escobar, J. Calderon y F. Echeverria, «Evaluación de sistemas anticorrosivos poliméricos base acuosa con incorporación de partículas cementicias para estructuras enterradas,» *Revista Latinoamericana de Metalurgia y Materiales*, vol. 4, pp. 1531-1541, 13 Julio 2009.
- [12] B. A. Escobedo-Trujillo, D. Colorado y F. A. Alaffita Hernadez, «Coefficient of performance prediction by a polynomial model of absorption heat transformer prediccion del coeficiente de desempe ' no por un modelo polinomial para un transformador termico,» *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, vol. 13, nº 3, pp. 907-917, 2014.