



Revista

# INEMATD SCIENCE

Ingeniería, Energía, Materiales, Tecnología y Desarrollo

ISSN 3122-4091

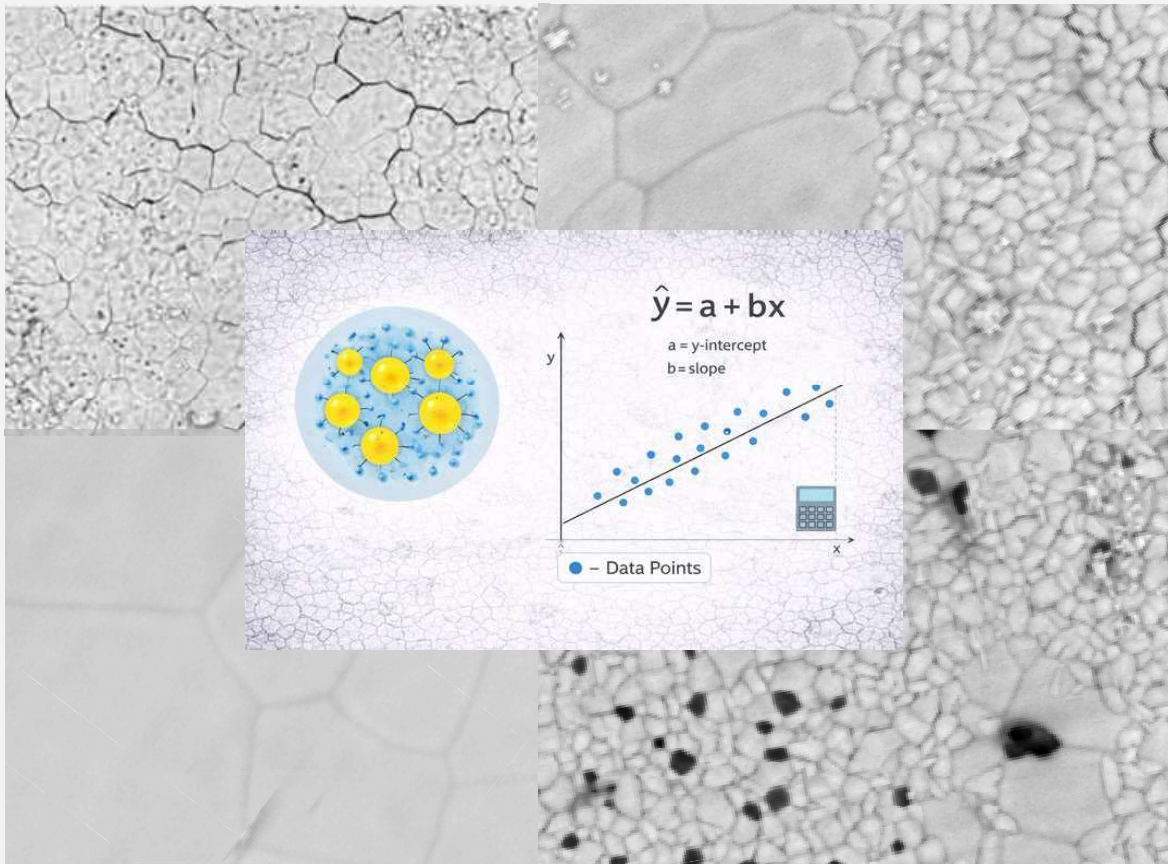


Foto de portada por Cristian Gómez-Rodríguez

**VOLUMEN 1, NÚMERO 1 | 2026**  
**PUBLICACIÓN SEMESTRAL**

**DIRECTORIO  
INEMATD SCIENCE**

Ingeniería, Energía, Materiales, Tecnología y Desarrollo

**Editor en Jefe**

Dr. Cristian Gómez Rodríguez  
Universidad Veracruzana

**CONSEJO EDITORIAL MÉXICO**

**Universidad Veracruzana**

**Editores asociados**

Dr. Linda Viviana García Quiñonez  
Dr. Jorge Uriel Sevilla Romero

**Mesa editorial**

Dr. Josept David Revuelta Acosta  
Dr. Roberto Agustín Conde Gutiérrez  
Dra. Beatris Adriana Escobedo Trujillo  
Dr. Gerardo Alcalá Perea  
Dr. Adolfo López Lievano  
Dra. Daybelis Fernández Valdés  
Dr. Arturo Ocampo Ramírez  
Dr. Javier Garrido Melendez  
Mtra. Lili Monserrat Toledo Paz  
Dr. José Vidal Herrera Romero  
Dra. Lizbeth Morales Salas  
Dr. Felipe Mendoza González  
Mtro. Carlos Alberto González Rodríguez  
Mtro. Fernando Chavarría Domínguez  
Mtro. Guillermo Miguel Martínez Rodríguez  
Mtro. Ernesto Raul Rodríguez García  
Mtra. Yanet Antonio Zarate  
Dr. José Eduardo Terrazas Rodríguez  
Dr. Benoit August Roger Fouconnier  
Dr. Edgar Sánchez Mejía  
Mtro. José David García Sarmiento

**Universidad Autónoma de Nuevo León  
(UANL)**

Dr. Guadalupe Alan Castillo Rodríguez  
Dra. Ana María Guzmán Hernández  
Dr. Edén Amaral Rodríguez Castellanos  
Dr. Josué Amílcar Aguilar Martínez  
Dr. Daniel Arturo Acuña Leal  
Mtro. Adolfo Collado Hernández

**Centro de Investigación en Materiales  
Avanzados (CIMAV)**

Dra. María Isabel Mendivil Palma  
Dr. Alonso Concha Balderrama

**Universidad de Guanajuato**

Dr. Ramón Merchán Villalba

**Centro Nacional de Control de Energía**

Dr. José Luis Sánchez Garduño

**Centro de Investigación Científica y de  
Educación Superior de Ensenada, Baja  
California, México**

Dr. Rubén López Villegas

**CONSEJO EDITORIAL INTERNACIONAL**

**Universidad de Oviedo, España**

Dr. Luis Felipe Verdeja González  
Dra. Cecilia Solís Díaz

**Centro de Investigación en Nanomateriales y  
Nanotecnología, España (CINN)**

Dr. Daniel Fernández González

**Electric Power Engineering Consulting**

Dr. Omar Yamil Vidal León Roma



**Revista**

**INEMATD SCIENCE**

Ingeniería, Energía, Materiales, Tecnología y Desarrollo

INEMATD SCIENCE: Ingeniería, Energía, Materiales, Tecnología y Desarrollo, Volumen 1, Número 1, junio de 2026, es una publicación semestral editada y distribuida por Cristian Gómez Rodríguez, Calle Monte Aconcagua 117, C.P. 66612, Apodaca, Nuevo León, México. Teléfono: +52 81 1623 5104. Editor responsable: Cristian Gómez Rodríguez. La publicación se encuentra adscrita al Cuerpo Académico UV-CA-601 “Innovación en Materiales y Tecnología Eléctrica” de la Universidad Veracruzana. Reservas de Derecho al Uso Exclusivo No. 04-2025-112610233900-102, ISSN: 3122-4091, ambos otorgados por el Instituto Nacional del Derecho de Autor. INEMATD SCIENCE es una publicación 100 % digital. © 2026 INEMATD SCIENCE: Ingeniería, Energía, Materiales, Tecnología y Desarrollo. Esta obra está bajo una Licencia Creative Commons Reconocimiento 4.0 Internacional <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/> . La publicación se realiza en formato electrónico a través del sitio web <https://inematdscience.com/index.php/hij/es> . Las opiniones expresadas por los autores no necesariamente reflejan la postura del editor. Se autoriza la reproducción total o parcial de los contenidos e imágenes sin previo aviso al editor, siempre que se cite la fuente.



## CONTENIDO

### 1 Carta editorial

*Cristian Gómez Rodríguez*

### 2-13 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-Santos, F.A. Alaffita-Hernández, B. Fouconnier, J.E. Terrazas-Rodríguez.*



**Revista  
INEMATD SCIENCE**

### 14-24 Predicción del arsénico remanente en la extracción con quitosano mediante un modelo polinomial basado en el método de superficie de respuesta (MSR).

*F. Guzmán-Recino, D. Colorado-Garrido, B. A. Escobedo-Trujillo, B. A. Roger-Fouconnier*

**Publicación semestral**

### 25-35 Estimación de la caída de presión en flujos bifásicos gas-líquido mediante un modelo de regresión polinomial.

*K.A. González-García, J. V. Herrera-Romero, F. A. Alaffita-Hernández, D. Colorado-Garrido*

## Carta editorial

Revista  
INEMATD SCIENCE  
Vol. 1, Número 1, junio 2026



**Facultad de Ingeniería  
Universidad  
Veracruzana  
Coatzacoalcos-Minatitlán**

Este Volumen 1, Número 1, correspondiente a junio 2026, marca el inicio de *INEMATD Science* y representa un hito significativo al tratarse de la primera edición de nuestra revista. Es un placer dar la bienvenida a este primer volumen, con el que iniciamos nuestra trayectoria como una revista semestral, completamente digital, dedicada a la difusión de avances científicos y tecnológicos en las áreas de Ingeniería, Energía, Materiales, Tecnología y Desarrollo. Este logro es el reflejo de un año de intenso trabajo, compromiso y pasión por la investigación.

Quisiera aprovechar esta oportunidad para expresar mi más sincero agradecimiento a los miembros del Comité Editorial, cuya dedicación y apoyo constante han sido fundamentales para establecer y mantener altos estándares de calidad en la publicación de artículos científicos.

Durante el último año, hemos fortalecido de manera significativa nuestro grupo de revisores expertos, con el objetivo de agilizar los tiempos de evaluación y elevar la calidad académica de los contenidos publicados. Gracias a esta base sólida de colaboradores, así como al compromiso de nuestros autores, *INEMATD Science* se encuentra en una posición favorable para continuar su crecimiento y consolidación.

Asimismo, hemos avanzado en la actualización de nuestra plataforma editorial mediante la implementación de Open Journal Systems (OJS), lo que permitirá una gestión más eficiente de los manuscritos y un mayor alcance de nuestros contenidos.

Nos complace constatar el creciente interés de autores nacionales e internacionales por publicar en *INEMATD Science*. Esta respuesta refleja el potencial de la revista para convertirse en un espacio de difusión científica que promueva el intercambio de conocimientos, enriquezca la diversidad de perspectivas y fortalezca la colaboración entre investigadores de Latinoamérica y otras regiones del mundo.

Esperamos seguir trabajando de manera conjunta con autores, revisores y lectores para consolidar a *INEMATD Science* como un referente en su ámbito. Agradecemos de antemano sus valiosas contribuciones, comentarios y sugerencias, que nos permiten mejorar continuamente y crecer como comunidad científica.

Me despido reiterando mi agradecimiento por la confianza depositada en esta revista y reafirmando mi compromiso de seguir impulsando la investigación de calidad en los campos de la ingeniería, la energía, los materiales, la tecnología y el desarrollo.

**¡Ciencia abierta, derecho universal de  
cualquier individuo!**

Cordialmente,

**Dr. Cristian Gómez Rodríguez**

Editor Responsable  
INEMATD Science

# 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-Santos<sup>1</sup>, F.A. Alaffita-Hernández<sup>1</sup>, B. Fouconnier<sup>2</sup>, J.E. Terrazas-Rodríguez<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup> 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-hidroxiquinoleína (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.

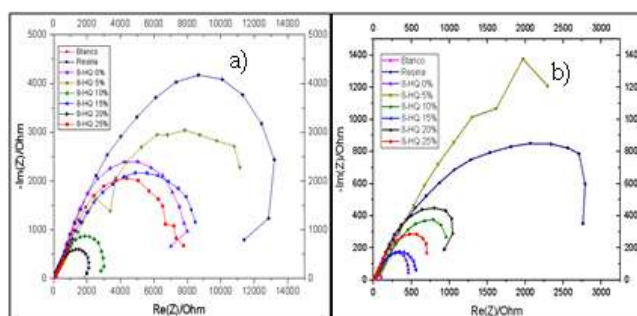
Algunos trabajos hacia el área de química es el realizado por N. Elhamdani y colaboradores [7] que estudia un modelo polinomial para analizar la eficacia de inhibidores de corrosión basados en Schiff en acero suave en solución de ácido clorhídrico. Los autores comparan los resultados del modelo polinomial 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  $1.2 \times 10^4$  Ohm a  $2.7 \times 10^3$  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].

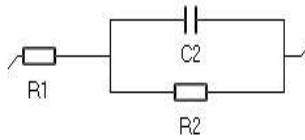
Para el modelado a través de la regresión polinomial se decidió utilizar las curvas de Nyquist con una concentración del 15% de 8-HQ teniendo en cuenta el comportamiento de su resistencia frente a la corrosión, tomando en cuenta el tiempo de exposición y las dos variables ( $Z_{real} - Z_{imag}$ ) que 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 cm<sup>2</sup>, 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  $\varepsilon$  es el error aleatorio. Se supone que  $\varepsilon$  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.

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

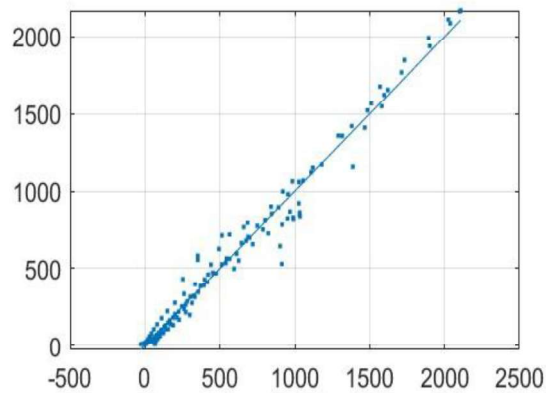
### 3. Resultados

#### 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.

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

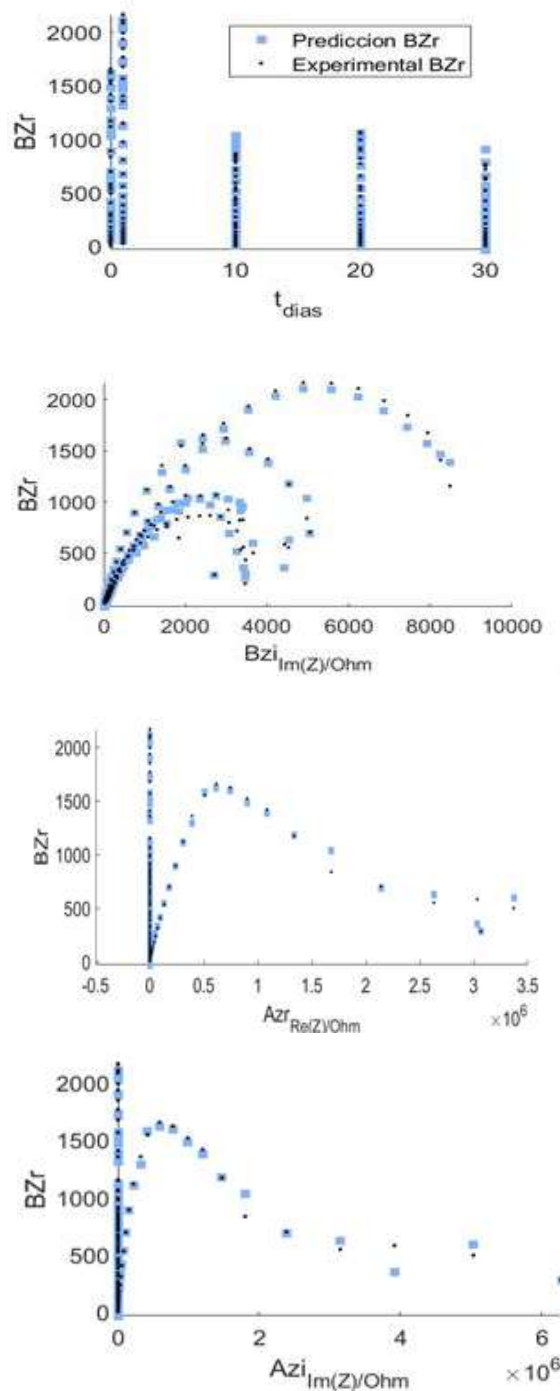
La ecuación (4) es el polinomio que mejor representa los datos para el modelado de la resistencia (BZR). Esta linealidad se puede observar en el Figura 4 donde los puntos de los consumos energéticos modelados se ajustan a los valores reales.



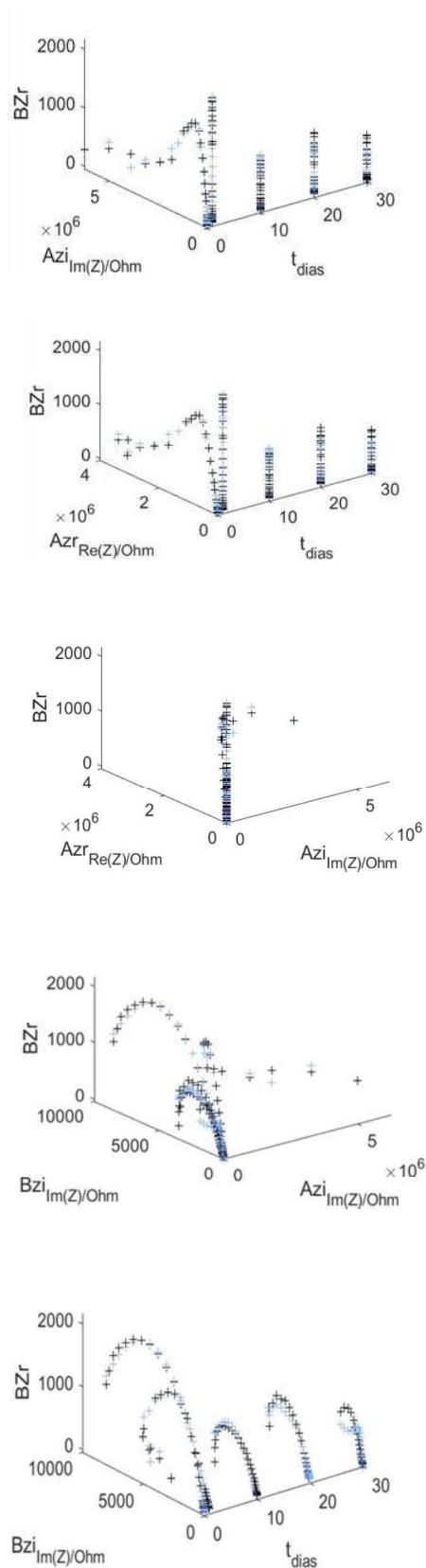
**Figura 4.** Coeficiente de rendimiento experimental versus previsto para la base de datos.

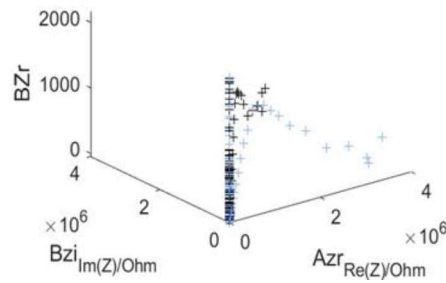
### Análisis residual

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.



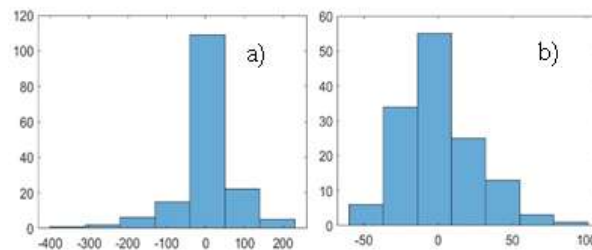


**Figura 6.** Superficies de nivel. Comparación del coeficiente de rendimiento experimental y predicho para cada dos variables significativas en el modelo polinomial.

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  $\varepsilon$  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.

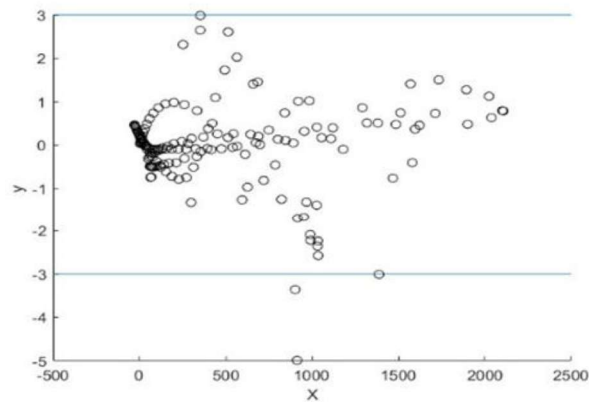


Figura 8. Intervalos de confianza de los residuos, a) con outliers, b) sin outliers.

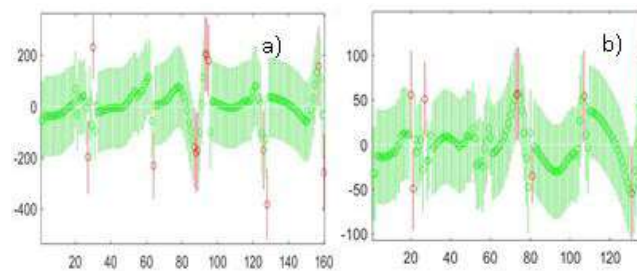


Figura 9. BZR previsto frente a residuos estandarizados.

### Red neuronal artificial (RNA)

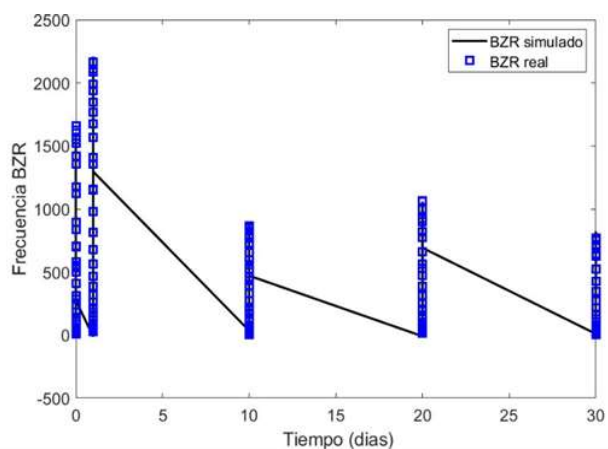
Se inicio el ajuste de los coeficientes de pesos y bias partiendo con 4 neuronas en la capa oculta con el algoritmo Levenberg-Marquardt utilizando tansing con un numero de épocas de 400 y una división de parámetros de 80/10/10 obteniendo un  $R^2=0.9904$  y un error porcentual (MAPE) de 38.4384 y RMSE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

# Predicción del arsénico remanente en la extracción con quitosano mediante un modelo polinomial basado en el método de superficie de respuesta (MSR).

F. Guzmán-Recino<sup>1,\*</sup>, D. Colorado-Garrido<sup>2</sup>, B. A. Escobedo-Trujillo<sup>2</sup>, B. A. Roger-Fouconnier<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Veracruzana, Avenida Universidad, Col. Santa Isabel, Coatzacoalcos, Veracruz, C. P. 96538, México.

<sup>2</sup> Centro de Investigación en Recursos Energéticos y Sustentables, Universidad Veracruzana, Av. Universidad Km 7.5 Col. Santa Isabel, Coatzacoalcos Veracruz, CP 96538, México

<sup>3</sup> Facultad de Ingeniería, Universidad Veracruzana, Campus Coatzacoalcos, C.P. 96535, Coatzacoalcos, Veracruz, México.

\* Correspondencia: feguzman@uv.mx

**Cita:** F. Guzmán-Recino, D. Colorado-Garrido, B. A. Escobedo-Trujillo, B. A. Roger-Fouconnier. Predicción del arsénico remanente en la extracción con quitosano mediante un modelo polinomial basado en el método de superficie de respuesta (MSR). Rev. INEMATD Science. 2026, 1, 14-24. <https://doi.org/10.67158/2dtrz624>

Editor académico: **Gómez Rodríguez Cristian**

Recibido: 24 de marzo de 2026

Revisado: 8 de junio de 2026

Aceptado: 21 de junio de 2026

Publicado: 22 de junio 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/>

## Resumen

Se propone un modelo polinomial, expresado en variables codificadas y naturales, para predecir la cantidad de arsénico remanente tras la extracción de dicho contaminante en medio acuoso, empleando quitosano como adsorbente. Se aplica el Método de Superficie de Respuesta (MSR) considerando las condiciones de pH, tiempo de contacto, concentración de arsénico y concentración del adsorbente (quitosano) para proponer las condiciones óptimas que maximicen la remoción de arsénico. El modelo polinomial propuesto presenta una buena aproximación, ya que el coeficiente de determinación obtenido es de 0.9983. Se presentan las curvas de nivel y los análisis residuales para la validación del modelo. Este trabajo pretende ayudar a predecir el arsénico remanente y, así, disminuir la cantidad de experimentos necesarios en el análisis de la extracción de arsénico mediante quitosano.

**Palabras clave:** Diseño de experimentos, modelado predictivo, optimización, tratamiento de agua, adsorción.

---

## 1. Introducción

El arsénico es un metal pesado que se puede encontrar de manera natural en rocas y sedimentos; sin embargo, las concentraciones de este tienden a aumentar en el medio natural debido a las actividades humanas, tales como la quema de carbón, que suele realizarse en centrales eléctricas, en industrias de fundición de cobre y en el procesamiento de minerales [1]. En algunas ocasiones, este compuesto inorgánico es difícil de extraer del medio en el que se encuentra debido a diversas condiciones, como el pH [2]. Por otro lado, el arsénico es tóxico, al igual que los demás metales pesados, por lo que merece atención especial debido a su volatilidad, a su capacidad de bioacumularse en el ambiente y a que es potencialmente cancerígeno [3].

Debido a ello, se ha estado estudiando la implementación de diversos materiales y métodos que ayuden a su extracción, siendo el quitosano uno de los más empleados para

dicha extracción, el cual suele obtenerse del caparazón de mariscos. Esto se debe a que, aunque existen diversos métodos que pueden emplearse para remover el arsénico, como: oxidación/precipitación, coagulación, intercambio iónico y tecnología de membranas, el quitosano presenta bajo costo, se puede conseguir fácilmente, es biodegradable, no es tóxico y posee propiedades estructurales que favorecen la extracción del arsénico, ya que se lleva a cabo mediante el método de adsorción, el cual es uno de los métodos más simples y efectivos en remoción de contaminantes [4].

Generalmente, este tipo de análisis de extracción de contaminantes suele modelarse mediante el Método de Superficie de Respuesta (MSR), ya que se emplea en el análisis de procesos químicos. No obstante, también puede utilizarse a nivel ingeniería, ya que analiza los efectos de diversos parámetros de entrada ( $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ ) que puedan influir en una respuesta de salida, lo cual ayuda a reducir el número de experimentos realizados para el análisis de remoción de contaminantes mediante predicciones, tal como se ha hecho para el análisis de remoción de contaminantes como amoníaco [5], azul de metileno [6], plomo [7], entre otros. En este método se utilizan variables codificadas ( $x_1, x_2, \dots, x_k$ ) en lugar de las variables naturales, las cuales son las variables que se encuentran en las unidades en las que se realizaron las mediciones [8]. En este caso, en unidades de concentración (mg/L), pH y tiempo (min). Las variables codificadas son variables adimensionales que facilitan analizar qué variables tienen mayor impacto en la respuesta del proceso, ya que permiten estimar los términos del modelo de forma independiente.

En el presente trabajo se busca proponer un polinomio en variables codificadas y otro en variables naturales que sea capaz de predecir la cantidad de arsénico remanente al aplicar quitosano como medio adsorbente en un medio acuoso, tomando en cuenta la variación de pH, tiempo de contacto, concentraciones de arsénico y concentraciones de adsorbente, y, al mismo tiempo, analizar la relación que presenta el tiempo de contacto con la cantidad de adsorbato inicial presente en el proceso de remoción.

## 2. Materiales y métodos

Se obtuvieron datos experimentales de Dehghani y colaboradores [9], quienes aplicaron el Diseño Compuesto Central (DCC) para determinar el número de ensayos y el rango de variación de los factores. Esto permitió analizar el efecto de la cantidad inicial de arsénico (200-400 mg/L), la cantidad de adsorbente (quitosano, 2-4 mg/L), el pH (4-6) y el tiempo de contacto (30-90 min) en un proceso de extracción de arsénico. Los datos se presentan en el Apéndice A.

Se utilizó el software RStudio 2021.09.1 con el Método de Superficie de Respuesta, el cual relaciona condiciones de entrada con la variable de salida analizada; en este caso, la variable de salida es el arsénico remanente (Ecuación 1), donde  $\varepsilon$  incluye los efectos de errores de medición y efectos externos que no pueden controlarse, como los niveles de humedad, cambio de las propiedades y envejecimiento del material [8] y se espera que presente una distribución normal con varianza constante y media cero.

$$y = f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k) + \varepsilon \quad (1)$$

Sin embargo, el MSR analiza las variables codificadas ( $x_1, x_2, \dots, x_k$ ) en lugar de las variables naturales ( $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ ). Esto se debe a que la codificación permite analizar variables con diferentes unidades y órdenes de magnitud sin distorsionar su influencia,

asegurando que contribuyan de manera comparable a la respuesta del sistema [10]. Para realizar la transformación de variables se utiliza la Ecuación 2, en la cual se consideran los valores máximos, mínimos y centrales de los datos experimentales:

$$x_i = \frac{\xi_i - [\max(\xi_i) + \min(\xi_i)]/2}{[\max(\xi_i) - \min(\xi_i)]/2} \quad (2)$$

Una vez efectuado el cambio de variables, la aproximación se representa con la Ecuación 3:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_k) + \varepsilon \quad (3)$$

En este contexto, el MSR se basa en el ajuste de un modelo polinomial de segundo orden (Ecuación 4) en términos de variables codificadas para representar el arsénico remanente ( $y$ ), el cual permite describir la respuesta del sistema considerando tanto los efectos individuales como las interacciones entre las variables, además de incorporar el error experimental [7]. Sin embargo, este no permite describir el mecanismo de adsorción que se lleva a cabo [11].

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{1 \leq i < j}^k \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad (4)$$

Donde  $x_i$  y  $x_j$  son variables independientes codificadas,  $k$  indica el número de variables,  $\beta_0$  es un término constante,  $\beta_i$ ,  $\beta_{ii}$  y  $\beta_{ij}$  son los coeficientes asociados a los términos lineales, cuadráticos y de interacción, respectivamente [6, 7].

Para facilitar el análisis estadístico y el modelado, se asignaron factores a las variables experimentales estudiadas (Tabla 1). Los niveles de las variables de operación (A, B, C y D) se establecieron en tres niveles: -1 (mínimo), 0 (centro) y 1 (máximo). Para validar el modelo polinomial, se realizaron análisis de residuos mediante métodos analíticos y gráficos. Por otro lado, se empleó el MSR para analizar la interacción entre la cantidad inicial de arsénico y el tiempo de contacto durante la adsorción de arsénico sobre quitosano.

**Tabla 1.** Rango experimental y codificado de las variables de operación

| Variable              | Factor | Rango y niveles |       |     |
|-----------------------|--------|-----------------|-------|-----|
|                       |        | -1              | 0     | 1   |
| Cantidad de arsénico  | A      | 194             | 295.5 | 397 |
| Cantidad de quitosano | B      | 2               | 3     | 4   |
| pH                    | C      | 4               | 5     | 6   |
| Tiempo de contacto    | D      | 45              | 65    | 75  |

### 3. Resultados

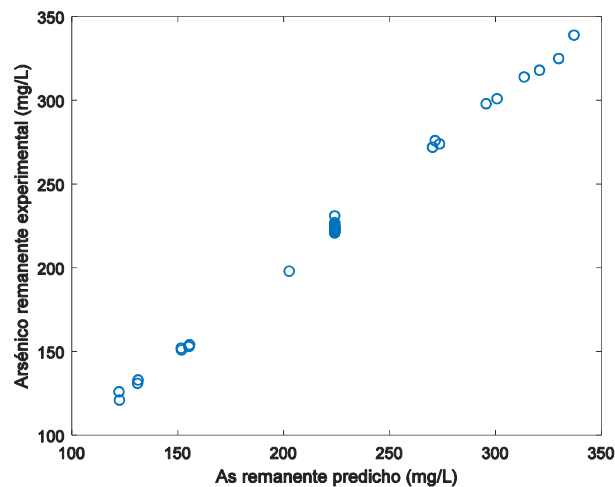
#### 3.1. Modelo polinomial

Se presenta el modelo polinomial de segundo orden (Ecuación 5) propuesto en variables codificadas, el cual presenta unidades de concentración en mg/L:

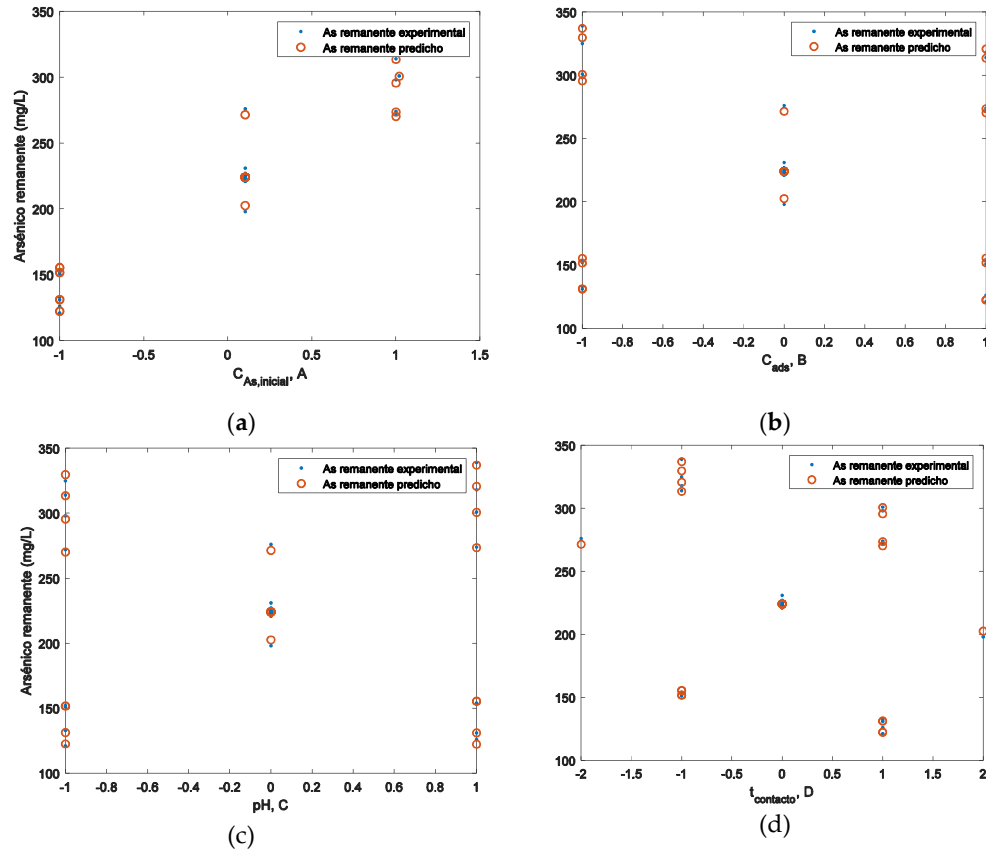
$$As_{remanente} = 215.51 + 82.389A - 6.2633B + 1.7633C - 16.871D - 4.1386AB - 3.4787AD - 2.2633BD + 3.7744A^2 + 3.232D^2 \quad (5)$$

En el polinomio se utilizaron las cuatro variables de investigación (pH, tiempo de contacto, concentración de adsorbente y adsorbato), y se obtuvo un coeficiente de determinación de 0.9983, donde un valor de 1 representa el mejor ajuste posible, lo cual indica una buena correlación [12, 13]. Para verificar la consistencia del modelo, se compararon los datos predichos contra los valores experimentales [14, 15], como se muestra en la Figura 1. Los datos utilizados se encuentran en el Apéndice A. En dicha comparación se observó que los valores predichos coinciden con la mayoría de los valores objetivos experimentales (arsénico remanente), aproximándose a la recta identidad, con pendiente 1 e intercepto 0. Por lo tanto, según la gráfica, se puede suponer que el modelo presenta una buena correlación [15].

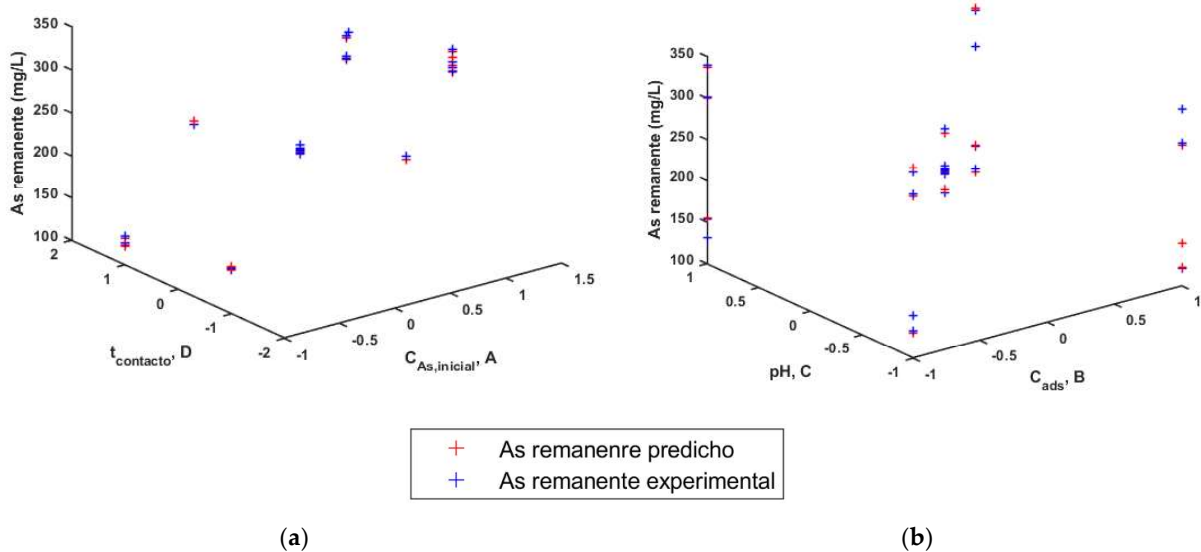
La comparación entre el arsénico remanente experimental y el predicho con respecto a cada variable de análisis se muestra en la Figura 2, en la cual se aprecia que la mayoría de los valores aproximados coinciden con los experimentales, lo que constituye otro indicio de que el modelo polinomial propuesto presenta una buena aproximación. Dicha figura se obtiene a partir de un seccionamiento de superficies de nivel en 3 dimensiones (Figura 3).



**Figura 1.** Arsénico remanente predicho contra el arsénico remanente experimental.



**Figura 2.** Curvas de nivel. Comparación entre el arsénico remanente experimental y el arsénico predicho para cada variable utilizada en el polinomio: (a) concentración inicial de arsénico; (b) concentración del adsorbente; (c) pH; (d) tiempo de contacto.

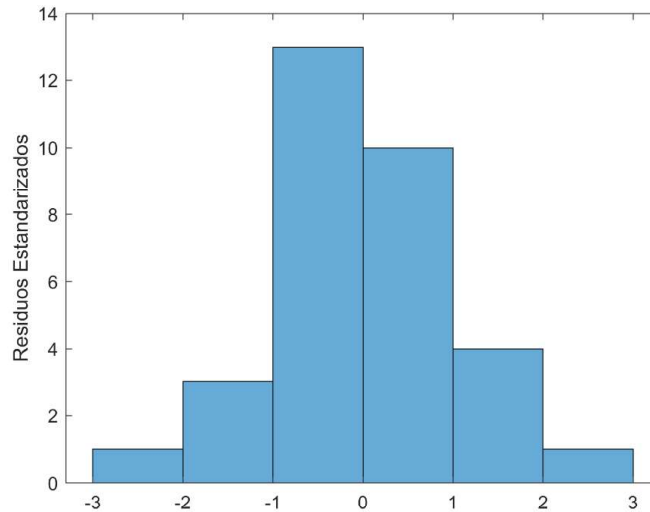


**Figura 3.** Superficies de nivel. Comparación entre el arsénico remanente experimental y el arsénico remanente predicho para las variables significativas del modelo polinomial:

(a) tiempo de contacto y concentración inicial de arsénico; (b) pH del medio y concentración del adsorbente.

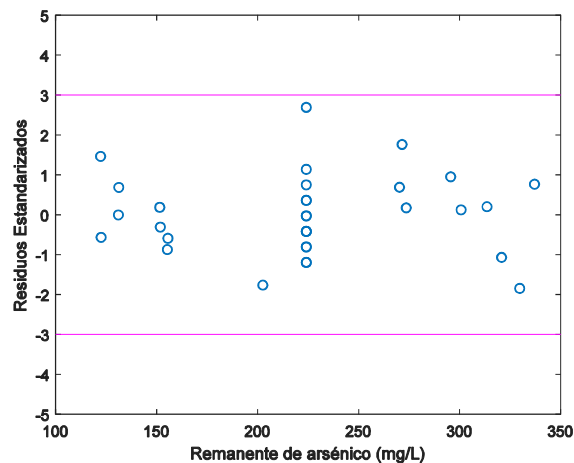
### 3.2. Análisis estadístico

Al obtener el histograma de residuos estandarizados (Figura 4), se observa una distribución similar a la campana de Gauss, caracterizada por una distribución normal con media cero y varianza constante.



**Figura 4.** Histograma de residuos estandarizados.

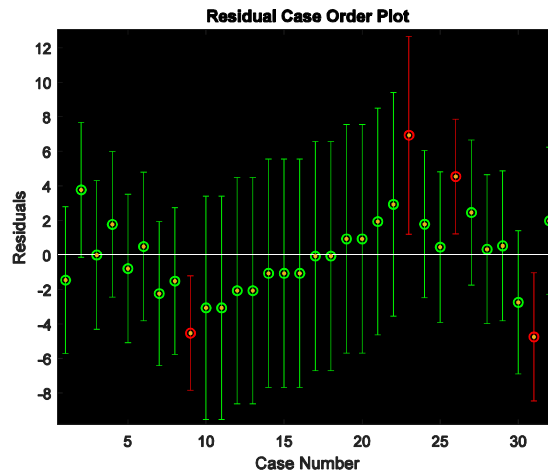
Se empleó el método 3-sigma, utilizando líneas horizontales a 3 y -3 (Figura 5), para identificar posibles *outliers* que parecen estar presentes según el histograma de residuos estandarizados (Figura 4), ya que este no presenta una simetría perfecta. Sin embargo, no se pudo identificar ningún valor atípico, ya que el 100% de datos se encuentra dentro del intervalo comprendido entre 3 y -3. Asimismo, se puede observar que la distribución de los valores es aleatoria, lo cual permite suponer que el modelo es confiable debido a una varianza constante [7].



**Figura 5.** Residuos estandarizados de arsénico remanente, predicho y experimental.



Por otro lado, se obtuvieron los intervalos de confianza de los residuos con un nivel de confianza del 95 % (Figura 6), en la que los residuos se representan con puntos amarillos y los intervalos de confianza con líneas verdes. En dicha figura se aprecian 4 valores atípicos, que también pueden observarse en el histograma de residuos estandarizados. Al mismo tiempo, se observa que los residuos ( $\epsilon$ ) presentan media cero y varianza constante, lo que se traduce en un “efecto espejo” en los intervalos de confianza, debido a su anchura similar, lo cual indica que el valor es consistente y aleatorio en todo el rango de datos observados. Por consiguiente, los valores obtenidos indican que el modelo es viable [14].



**Figura 6.** Intervalos de confianza en los residuos con un nivel de confianza del 95%.

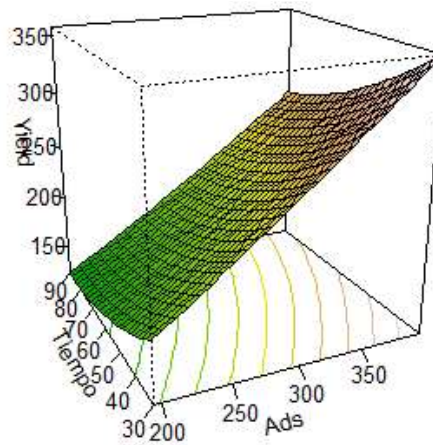
El aporte de cada variable en el modelo se analizó mediante el Análisis de Varianza (ANOVA), Tabla 2. Cabe destacar que el *P-value* ayuda a distinguir entre resultados producto del azar del muestreo y aquellos estadísticamente significativos, lo cual contribuye a evaluar la validez del modelo [6, 14]. Para ello, se considera que un factor es altamente importante cuando  $P\text{-value} < 0.001$ , importante cuando  $0.001 \leq P\text{-value} \leq 0.05$  y no importante cuando  $P\text{-value} > 0.05$  [7]. Por tanto, en la Tabla 2 se observa que, con base en el *P-value*, todas las variables incluidas en el modelo polinomial son importantes y altamente importantes para lograr una buena aproximación.

**Tabla 2.** Coeficientes estimados del modelo polinomial de segundo grado y resultados de ANOVA.

| Modelo cuadrático |                       |                |                |
|-------------------|-----------------------|----------------|----------------|
| Factor            | Coefficiente estimado | Error estándar | <i>P-value</i> |
| A                 | 82.3887               | 0.8136         | <0.0001        |
| B                 | -6.2633               | 0.8149         | <0.0001        |
| C                 | 1.7633                | 0.8149         | 0.041593       |
| D                 | -16.8712              | 0.6659         | <0.0001        |
| AB                | -4.1386               | 0.8139         | <0.0002        |
| AD                | -3.4787               | 0.8124         | <0.0003        |
| BD                | -2.2633               | 0.8149         | 0.01098        |

|                |        |        |          |
|----------------|--------|--------|----------|
| A <sup>2</sup> | 3.7744 | 1.2052 | 0.004852 |
| D <sup>2</sup> | 3.232  | 0.6160 | <0.0001  |

El análisis de la interacción entre el tiempo de contacto y la concentración inicial de arsénico durante el proceso de adsorción se presenta en la Figura 7. En dicho análisis se empleó una concentración de adsorbente de 3 mg/L y un pH de 5. Con base en ello, se observa que la mayor cantidad de arsénico remanente se obtiene cuando el tiempo de contacto se sitúa entre 30 y 40 min y la concentración inicial de arsénico es alta. En contraste, la menor cantidad de arsénico remanente se alcanza con tiempos de contacto entre 60 y 90 min y concentraciones iniciales de arsénico entre 200 y 250 mg/L, condiciones en las que se favorece una mayor eficiencia de adsorción.



**Figura 7.** Respuesta de superficie de la interacción entre el tiempo de contacto y la concentración de arsénico inicial.

El modelo polinomial en términos de variables naturales (Ecuación 6) es el siguiente:

$$\begin{aligned}
 AS_{remanente} = & 32.99 + 0.85461(C_{As,inicial}) + 14.839(C_{ads}) + 1.7633(pH) - 1.7206(t) \\
 & - 0.040775(C_{As,inicial} * C_{ads}) - 0.0022849(C_{As,inicial} * t) - 0.15089(C_{ads} * t) \\
 & + 0.00036636(C_{As,inicial}^2) + 0.014364(t^2)
 \end{aligned} \quad (6)$$

Donde:  $C_{As,inicial}$  es la concentración inicial de arsénico (194–397 mg/L);  $C_{ads}$  es la concentración de adsorbente empleado (2–4 mg/L);  $pH$  corresponde al medio de adsorción (4–6); y  $t$  es el tiempo de contacto (45–75 min). Dado que el modelo es de naturaleza polinomial, las variables independientes se consideran continuas, lo que permite interpolar valores reales dentro del dominio experimental definido. Los valores de arsénico predichos por este modelo polinomial se presentan en el Apéndice A.

#### 4. Conclusiones

Se obtuvo un polinomio con un coeficiente de determinación de 0.9983. Con base en el análisis residual realizado, se puede decir que el modelo polinomial con cuatro variables puede predecir correctamente el arsénico remanente dentro de los siguientes rangos:

pH de 4 a 6, tiempo de contacto de 45 a 75 min, concentración inicial de arsénico de 194 a 397 mg/L y concentración de adsorbente de 2 a 4 mg/L. Asimismo, se determinó que la concentración inicial de arsénico y el tiempo de contacto tienen un efecto significativo en el proceso de adsorción, pues cuanto mayor sea el tiempo de contacto, menor será la cantidad de arsénico remanente. En este sentido, se identificó como rango óptimo de operación un tiempo de contacto de 60 a 90 min y una concentración inicial de arsénico de 200 a 250 mg/L. Este trabajo sirve como herramienta para el diseño y la optimización de sistemas de tratamiento de agua, contribuyendo a la remoción eficiente del arsénico en condiciones controladas.

**Contribución de los autores:** Manejo de variables para análisis estadístico, metodología, validación, interpretación de resultados, investigación, escritura, visualización: Fernanda Guzmán Recino Conceptualización: Benoit Auguste Roger Fouconnier, Darío Colorado Garrido y Beatriz Adriana Escobedo Trujillo.

**Financiamiento:** La autora agradece a la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) el otorgamiento de la beca de doctorado No. (579982).

**Declaración del Comité de Ética:** No aplicable.

**Declaración de Disponibilidad de Datos:** Las contribuciones originales de este estudio están incluidas en el artículo; cualquier consulta adicional puede dirigirse a los autores de correspondencia.

**Conflictos de Interés:** Los autores declaran no tener conflictos de interés.

#### Abreviaciones

|                          |                                   |
|--------------------------|-----------------------------------|
| MSR                      | Método de Superficie de Respuesta |
| As                       | Arsénico                          |
| $t_{\text{contacto}}$    | Tiempo de contacto                |
| $C_{\text{ads}}$         | Concentración adsorbida           |
| $C_{\text{As, inicial}}$ | Concentración inicial de arsénico |

#### Apéndice A

**Tabla A.** Datos utilizados para la obtención del modelo polinomial.

| Corrida* | $C_{\text{As, inicial}}^*$<br>(mg/L) | $C_{\text{ads}}^*$<br>(mg/L) | pH* | Tiempo*<br>(min) | As remo-<br>vido*<br>(mg/L) | As remo-<br>vido* (%) | As remanente*<br>(experimental) | As remanente<br>(predicho) |
|----------|--------------------------------------|------------------------------|-----|------------------|-----------------------------|-----------------------|---------------------------------|----------------------------|
| 1        | 306                                  | 3                            | 5   | 60               | 75                          | 24.51                 | 231                             | 224.07                     |
| 2        | 397                                  | 4                            | 6   | 75               | 123                         | 30.98                 | 274                             | 273.65                     |
| 3        | 397                                  | 4                            | 6   | 45               | 79                          | 19.9                  | 318                             | 318.88                     |
| 4        | 397                                  | 2                            | 4   | 75               | 99                          | 24.94                 | 298                             | 295.45                     |
| 5        | 194                                  | 4                            | 6   | 75               | 68                          | 35.05                 | 126                             | 124.11                     |
| 6        | 306                                  | 3                            | 5   | 60               | 85                          | 27.78                 | 221                             | 224.07                     |
| 7        | 306                                  | 3                            | 5   | 60               | 81                          | 26.47                 | 225                             | 224.07                     |
| 8        | 306                                  | 3                            | 5   | 60               | 83                          | 27.12                 | 223                             | 224.07                     |
| 9        | 194                                  | 4                            | 4   | 75               | 73                          | 37.63                 | 121                             | 120.58                     |

|    |     |   |   |    |     |       |     |        |
|----|-----|---|---|----|-----|-------|-----|--------|
| 10 | 397 | 4 | 4 | 45 | 83  | 20.91 | 314 | 315.35 |
| 11 | 194 | 4 | 6 | 45 | 40  | 20.62 | 154 | 155.42 |
| 12 | 399 | 2 | 6 | 75 | 98  | 24.56 | 301 | 300.77 |
| 13 | 306 | 3 | 5 | 60 | 79  | 25.82 | 227 | 224.07 |
| 14 | 194 | 2 | 6 | 75 | 63  | 32.47 | 131 | 132.88 |
| 15 | 194 | 2 | 4 | 45 | 42  | 21.65 | 152 | 151.62 |
| 16 | 397 | 4 | 4 | 75 | 125 | 31.49 | 272 | 270.12 |
| 17 | 397 | 2 | 4 | 45 | 72  | 18.14 | 325 | 331.63 |
| 18 | 306 | 3 | 5 | 60 | 82  | 26.8  | 224 | 224.07 |
| 19 | 194 | 4 | 4 | 45 | 43  | 22.16 | 151 | 151.89 |
| 20 | 397 | 2 | 6 | 45 | 58  | 14.61 | 339 | 335.15 |
| 21 | 306 | 3 | 5 | 60 | 84  | 27.45 | 222 | 224.07 |
| 22 | 194 | 2 | 4 | 75 | 61  | 31.44 | 133 | 129.36 |
| 23 | 194 | 2 | 6 | 45 | 41  | 21.13 | 153 | 155.14 |
| 24 | 306 | 3 | 5 | 60 | 80  | 26.14 | 226 | 224.07 |
| 25 | 306 | 3 | 5 | 30 | 30  | 9.8   | 276 | 271.46 |
| 26 | 306 | 3 | 5 | 90 | 93  | 35.29 | 198 | 202.54 |
| 27 | 306 | 3 | 5 | 60 | 83  | 27.12 | 223 | 224.07 |
| 28 | 306 | 3 | 5 | 60 | 81  | 26.47 | 225 | 224.07 |

Las columnas marcadas con asterisco (\*) corresponden a datos obtenidos de: Experimental dataset on adsorption of Arsenic from aqueous solution using Chitosan extracted from shrimp waste; optimization by response surface methodology with central composite design. Dehghani, M. H., Maroosi, M., & Heidarinejad, Z. (2018). *Data in Brief*, 20, 1415-1421. El As remanente (predicho) fue obtenido por el modelo propuesto en este trabajo.

## Referencias

- [1] H. Choi, S.-K. Park, D.-S. Kim, and M. Kim, "Determination of 6 arsenic species present in seaweed by solvent extraction, clean-up, and LC-ICP/MS," *Food Sci. Biotechnol.*, vol. 20, no. 1, pp. 39–44, Feb. 2011, doi: 10.1007/s10068-011-0006-9.
- [2] K. C. M. Kwok, L. F. Koong, G. Chen, and G. McKay, "Mechanism of arsenic removal using chitosan and nanochitosan," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 416, pp. 1–10, Feb. 2014, doi: 10.1016/j.jcis.2013.10.031.
- [3] C. Wang, H. Liu, Y. Zhang, C. Zou, and E. J. Anthony, "Review of arsenic behavior during coal combustion: Volatilization, transformation, emission and removal technologies," *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 68, pp. 1–28, Sep. 2018, doi: 10.1016/j.pecs.2018.04.001.
- [4] N. Horzum, M. M. Demir, M. Nairat, and T. Shahwan, "Chitosan fiber-supported zero-valent iron nanoparticles as a novel sorbent for sequestration of inorganic arsenic," *RSC Adv.*, vol. 3, no. 21, p. 7828, 2013, doi: 10.1039/c3ra23454a.
- [5] M. Moradi, M. Fazlzadehdavil, M. Pirsaeheb, Y. Mansouri, T. Khosravi, and K. Sharafi, "Response surface methodology (RSM) and its application for optimization of ammonium ions removal from aqueous solutions by pumice as a natural and low cost adsorbent," *Archives of Environmental Protection*, vol. 42, no. 2, pp. 33–43, Jun. 2016, doi: 10.1515/aep-2016-0018.

- [6] I. K. Basha, E. M. Abd El-Monaem, R. E. Khalifa, A. M. Omer, and A. S. Eltaweil, "Sulfonated graphene oxide impregnated cellulose acetate floated beads for adsorption of methylene blue dye: optimization using response surface methodology," *Sci. Rep.*, vol. 12, no. 1, p. 9339, Jun. 2022, doi: 10.1038/s41598-022-13105-4.
- [7] M. O. Ani, M. C. Menkiti, and L. N. Emembolu, "Characterizations of a functionalized disused plastic-derived membrane and investigation of the effects of process variables on its adsorptive uptake of Pb<sup>2+</sup> from simulated effluent using response surface methodology," *Waste Management Bulletin*, vol. 2, no. 2, pp. 66–82, Jun. 2024, doi: 10.1016/j.wmb.2024.03.005.
- [8] R. H. . Myers, D. C. . Montgomery, and C. M. . Anderson-Cook, *Response surface methodology : process and product optimization using designed experiments*, 3rd ed. Wiley, 2009.
- [9] M. H. Dehghani, M. Maroosi, and Z. Heidarinejad, "Experimental dataset on adsorption of Arsenic from aqueous solution using Chitosan extracted from shrimp waste; optimization by response surface methodology with central composite design," *Data Brief*, vol. 20, pp. 1415–1421, Oct. 2018, doi: 10.1016/j.dib.2018.09.003.
- [10] A. Weremfo, S. Abassah-Oppong, F. Adulley, K. Dabie, and S. Seidu-Larry, "Response surface methodology as a tool to optimize the extraction of bioactive compounds from plant sources," *J. Sci. Food Agric.*, vol. 103, no. 1, pp. 26–36, Jan. 2023, doi: 10.1002/jsfa.12121.
- [11] Y. Yang *et al.*, "Adsorption property of fluoride in water by metal organic framework: Optimization of the process by response surface methodology technique," *Surfaces and Interfaces*, vol. 28, p. 101649, Feb. 2022, doi: 10.1016/j.surfin.2021.101649.
- [12] J. Du, Y. Li, G. Jin, J. Wang, and L. Chen, "Determination and correlation of solubility of 2,4,6,8,10,12-Hexacyclopropyl-2,4,6,8,10,12-hexaazaisowurtzitane in 12 pure solvents at temperatures ranging from 278.15K to 318.15K," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 70, no. 10, pp. 4302–4314, Oct. 2025, doi: 10.1021/acs.jced.5c00434.
- [13] S. Imame *et al.*, "Utilization of maize pith powder as a cost-effective adsorbent for the removal and analysis of Crystal Violet from aqueous solutions before determination by UV-Vis spectrophotometry," *Analytical Methods in Environmental Chemistry Journal*, vol. 8, no. 2, pp. 5–25, Jun. 2025, doi: 10.24200/amecj.v8.i02.1010.
- [14] S. H. Alrefaee *et al.*, "Adsorption and effective removal of organophosphorus pesticides from aqueous solution via novel metal-organic framework: Adsorption isotherms, kinetics, and optimization via Box-Behnken design," *J. Mol. Liq.*, vol. 384, p. 122206, Aug. 2023, doi: 10.1016/j.molliq.2023.122206.
- [15] N. P. Sibiya, G. Amo-Duodu, E. K. Tetteh, and S. Rathilal, "Model prediction of coagulation by magnetised rice starch for wastewater treatment using response surface methodology (RSM) with artificial neural network (ANN)," *Sci. Afr.*, vol. 17, p. e01282, Sep. 2022, doi: 10.1016/j.sciaf.2022.e01282.

# Estimación de la caída de presión en flujos bifásicos gas-líquido mediante un modelo de regresión polinomial.

K.A. González-García <sup>1</sup>, J. V. Herrera-Romero <sup>1</sup>, F. A. Alaffita-Hernández <sup>2</sup>, D. Colorado-Garrido <sup>2</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ingeniería, Universidad Veracruzana, Av. Universidad Km. 7.5 Col. Santa Isabel, 96535, Coatzacoalcos, Veracruz, México.

<sup>2</sup> Centro de Investigación en Recursos Energéticos y Sustentables, Universidad Veracruzana, Av. Universidad Km. 7.5 Col. Santa Isabel, 96538, Coatzacoalcos Veracruz, México

\* Correspondencia: zS22017163@estudiantes.uv.mx

## Resumen

La caída de presión en flujos bifásicos gas-líquido constituye un parámetro fundamental para el diseño, operación y optimización de sistemas de transporte en tuberías, debido a su influencia directa en el consumo energético y el desempeño hidráulico. En este trabajo se propone un modelo de regresión polinomial para estimar la caída de presión en una tubería horizontal de 9.15 m de longitud y 0.0254 m de diámetro, utilizando una base de datos experimental compuesta por 751 registros correspondientes a sistemas Aire-Agua, Aire-Glicerina, Aire-Surfactante, Aire-CaBr<sub>2</sub> y Aire-Surfactante puro. Como variables de entrada se emplearon el tipo de sistema, densidad, viscosidad, tensión superficial, velocidad superficial del líquido y velocidad superficial del gas. A diferencia de métodos basados en redes neuronales y algoritmos de aprendizaje automático, el modelo propuesto presenta una menor complejidad computacional y una interpretación directa de las variables involucradas. Los coeficientes fueron ajustados mediante regresión por mínimos cuadrados, obteniéndose un coeficiente de determinación  $R^2 = 0.9608$  y un RMSE de 0.2425, lo que evidencia una adecuada capacidad para reproducir el comportamiento experimental de la caída de presión en los sistemas analizados. Los resultados muestran que la regresión polinomial constituye una alternativa práctica para la predicción de parámetros hidráulicos en flujos bifásicos.

**Palabras clave:** Flujos bifásicos; Caída de presión; Modelo polinomial; Tubería horizontal; Regresión lineal.

**Cita:** K.A. González-García, J. V. Herrera-Romero, F. A. Alaffita-Hernández, D. Colorado-Garrido. Estimación de la caída de presión en flujos bifásicos gas-líquido mediante un modelo de regresión polinomial. INEMATD Science. 2026, 1, 25-35. <https://doi.org/10.67158/jmvqv806>

Editor académico: Gómez Rodríguez Cristian

Recibido: 19 de marzo de 2026

Revisado: 17 de junio de 2026

Aceptado: 25 de junio de 2026

Publicado: 28 de junio 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/>

## 1. Introducción

Se han realizado diversos modelos experimentales y teóricos, así como análisis numéricos para predecir la caída de presión de flujos bifásicos [1], donde la caída de presión se define como un parámetro crítico para flujos de gas-líquido sumando su importancia para el diseño y operación de tuberías [2].

Las complejas interacciones de las diferentes fases dan lugar a regímenes diferentes de flujo, esenciales para el desarrollo de modelos computacionales para la caída de presión [3]. No obstante, existen diferentes formas que se están desarrollando para lograr una predicción de la caída de presión en sistemas bifásicos como lo son las redes neuronales artificiales en donde se predice la caída de presión bifásica gas-líquido en un sistema de tuberías, obteniendo una opción diferente y precisa, tomando en cuenta el cumplimiento de todos los parámetros [4].

Otro método es el mencionado en el artículo [5] donde se muestran las comparaciones de modelos predictivos para flujos multifásicos en estado estacionario donde el primer modelo predice el valor de una retención de líquidos en el segmento, el segundo determina el patrón de flujo y el tercero estima el gradiente de presión donde los métodos a utilizar son los siguientes: Random Forest, Gradient Boosting Decision Trees, Support Vector Machine, redes neuronales artificiales comparando sus capacidades de predicción y llegando a la conclusión de que el método para calcular la distribución de la presión podría arrojar puntuaciones comparables o incluso superiores en datos de campo, en comparación con las correlaciones y los modelos mecanicistas.

Tomando en cuenta los anteriores trabajos mencionados, que exponen diferentes métodos de predicción para los sistemas bifásicos en tuberías no podemos dejar de lado el análisis de predicción que mencionan otros autores como lo son las regresiones polinomiales utilizadas en este trabajo donde igualmente este modelo puede entrar en diferentes campos de trabajo como lo presenta [6] en donde realizan una predicción para la caída de presión en ventiladores de recuperación de energía aire-aire basado en membranas y donde se basaron en el tamaño del núcleo, tasa de flujo de aire y relación de apertura del núcleo para su predicción.

Otro autor que igualmente propone un sistema predictivo en regresión polinomial son Denis Jankovič, Miha Pipan, Marko Šimic y Niko Herakovič [7] para la mejora del rendimiento de una presa hidráulica en una red 5G, ya que estas presas de manera industrial tienen que mantener las cargas de trabajo controladas y estas necesitan tener una compensación por las perturbaciones externas como los procesos de conformado y la dinámica de fricción, en donde facilita la integración de algoritmos inteligentes, por lo tanto, se puede decir que este método es factible y da buenos resultados ya que obtuvieron un valor  $R^2$  de 0.948 a 0.999.

En consecuencia, el método de regresión polinomial empleado en este artículo tiene como finalidad facilitar la predicción de la caída de presión en sistemas bifásicos con técnicas de modelado estadístico utilizadas para ajustar las curvas que se forman de los valores dados por nuestra base de datos y sin necesidad de programas con mayor capacidad que la requerida para la comparación de los datos experimentales y predictivos, contribuyendo así con otra opción viable en la predicción de estos sistemas bifásicos presentados en diferentes ramas de la mecánica principalmente en la mecánica de fluidos.

## 2. Equipo

El sistema utilizado para recabar datos de manera experimental consiste en un circuito de flujo horizontal con sistemas bifásicos de aire/líquido, flujo de líquido constante y con variación del gas donde pasan sistemas compuestos: Aire-Agua (8.33 ppg, 1 Cp, 70 mN/m), Aire-0.5% Surfactante (8.33 ppg, 1 Cp, 32.4 mN/m), Glicerina al 30% en aire (9.04 ppg, 3.1 Cp, 55.4 mN/m), Aire-25% CaBr<sub>2</sub> - 0.004% Surfactante (10.01 ppg, 1.44 Cp, 61.6 mN/m), Aire - 75% CaBr<sub>2</sub> - 0.02% Surfactante (12.57 ppg, 2.95 Cp, 56.3 mN/m) con las características de los flujos tomadas como variables en nuestra metodología para la producción del método estadístico de predicción (ver Tabla 1).

**Tabla 1.** Variables de entrada en el polinomio y sus características.

| Variab | Nombre de variable   | Rango | Unidades | Significado físico          |
|--------|----------------------|-------|----------|-----------------------------|
| V1     | Tipo de Sistema      | 1:5   | -        |                             |
| V2     | Densidad del líquido | 1:1.5 | ppg      | Relación entre la masa y el |

|    |                                   |                |        |                                                                |
|----|-----------------------------------|----------------|--------|----------------------------------------------------------------|
| V3 | Viscosidad del líquido            | 1:3.1          | Cp     | volumen del fluido<br>Resistencia interna del líquido al fluir |
| V4 | Tensión superficial               | 32:70          | mN/m   | Fuerza de cohesión entre las moléculas de la superficie        |
| V5 | Velocidad superficial del líquido | 0:3.048, 0:10  | ft/sec | Flujo del líquido dividido entre el área de la tubería         |
| V6 | Velocidad superficial del gas     | 0:18.288, 0:60 | ft/sec | Flujo del gas dividido entre el área de la tubería             |

Los datos adquiridos cubren las propiedades de flujos bifásicos donde los flujos difieren ampliamente del agua y el aire, la instrumentación utilizada para la obtención de nuestras variables son los siguientes equipos: bomba centrífuga, compresor de aire, transductores de presión (omega DPG 110, precisión del 0.08%), dos caudalímetros para líquido en donde el primero trabaja con 1.5 - 15 (1/min) y el segundo 15 - 100 (1/min) utilizando Omega-FLR6750D con precisión del 2% FS, para el caudal de gas medido se utilizó un caudalímetro de gas de bajo rango 0.35 - 7 (scf/min) con precisión  $\pm 0.5$  FS (siargo MFS700) y otro caudalímetro de gas que trabaja con caudales altos (2-7) SCF/min utilizando FLR9710D – BSPP y precisión del 2% FS.

### 3. Metodología de la base de datos

El origen de la base de datos con 751 valores que se describe en el apéndice A, recopilados mediante un circuito de flujos horizontales de 9.15 m (30 ft) de longitud de tubería y 0.0254 m (1 in) de diámetro donde se ejecuta un experimento de flujo a una velocidad de líquido, tasa de gas y propiedades del fluido específicas.

- La tasa de líquido es fijada mediante un variador (VDS).
- La válvula de derivación y la tasa de gas se regulan mediante un regulador de presión y válvulas de aguja colocadas entre el regulador de presión.

La tasa de gas es registrada mediante un medidor de flujo después del reconocimiento del estado estacionario, obteniendo una oscilación entre baja y alta, y de alta a baja, las propiedades físicas de los sistemas bifásicos considerados se presentan en la Tabla 2.

**Tabla 2.** Sistemas bifásicos considerados y propiedades físicas de los fluidos utilizados.

| V1                      | V2   | V3   | V4     | V5     | V6    |
|-------------------------|------|------|--------|--------|-------|
| Aire-Agua               | 8.33 | 1    | 70.5   | 0.161  | 1.079 |
| Aire-0.02% Tensioactivo | 8.33 | 1    | 59.7   | 0.161  | 0.179 |
| Aire-0.05% Tensioactivo | 8.33 | 1    | 54.8   | 0.161  | 0.179 |
| Aire-0.1% Tensioactivo  | 8.33 | 1    | 46.5   | 0.161  | 0.179 |
| Aire-0.5% Tensioactivo  | 8.33 | 1    | 32.4   | 0.161  | 0.179 |
| Aire-5% Glicerina       | 9.05 | 1.26 | 66.5   | 0.161  | 0.179 |
| Aire-10% Glicerina      | 8.55 | 1.41 | 63.97  | 0.161  | 0.179 |
| Aire-20% Glicerina      | 8.76 | 1.87 | 57.3   | 0.1619 | 0.179 |
| Aire-30% Glicerina      | 9.04 | 3.10 | 55.425 | 0.161  | 0.179 |



|                                      |       |       |      |       |       |
|--------------------------------------|-------|-------|------|-------|-------|
| Aire-25%CaBr2-0.004%<br>Tensioactivo | 10.01 | 1.44  | 61.6 | 0.161 | 0.179 |
| Aire-75%CaBr2-0.02%<br>Tensioactivo  | 12.57 | 2.952 | 56.3 | 0.161 | 0.179 |

La Tabla 3 presenta valores representativos de las variables utilizadas en el modelo, incluyendo las propiedades físicas de los fluidos y la caída de presión medida experimentalmente (V7), tomada a través de transductores distribuidos a lo largo de la tubería y dos manómetros, uno en la entrada y otro en la salida, para la medición a lo largo de la tubería con el sistema en forma de bucle de flujo donde la caída de presión está en función del caudal del flujo.

**Tabla 3.** Valores representativos de las variables empleadas en el modelo para los diferentes sistemas bifásicos estudiados.

| V1                                    | V2    | V3   | V4    | V5    | V6    | V7    |
|---------------------------------------|-------|------|-------|-------|-------|-------|
| Aire-Agua                             | 8.33  | 1    | 70.5  | 0.485 | 9.717 | 0.035 |
| Aire-0.005% Tensioactivo              | 8.33  | 1    | 32.4  | 0.485 | 9.717 | 0.405 |
| Aire-30% Glicerina                    | 9.04  | 3.10 | 55.42 | 0.485 | 9.717 | 0.18  |
| Aire-25% CaBr2-0.004%<br>Tensioactivo | 10.01 | 1.44 | 61.6  | 0.485 | 9.717 | 0.135 |
| Aire-75% CaBr2-0.02%<br>Tensioactivo  | 12.57 | 2.95 | 56.3  | 0.485 | 9.717 | 0.315 |

La recolección de datos se llevó a cabo en el circuito de flujo horizontal preparando las soluciones líquidas deseadas que se bombean a través del circuito con una bomba centrífuga junto a una inyección de aire mediante el compresor, fijando la velocidad del líquido y variando el caudal del gas de bajo a alto, poco a poco y en sentido inverso, siempre observando cada etapa del cambio del caudal y la caída de presión para alcanzar el estado estacionario y llegando al final del procedimiento (véase el artículo Ala S. AL-Dogail [8]).

#### 4. Metodología

Los datos utilizados en el presente estudio provienen del análisis experimental de flujo bifásico [4] resaltando que la base de datos fue revisada para identificar valores faltantes y posibles valores atípicos. La consistencia de los registros fue verificada mediante análisis estadístico y evaluación de residuos estandarizados, garantizando la calidad de la información utilizada en el ajuste del modelo.

Representadas en la Tabla 1, estas variables corresponden a parámetros operativos del sistema y son consideradas como variables independientes (V1, V2, V3, V4, V5, V6) utilizadas en el polinomio que predice la caída de presión como variable dependiente o de respuesta siguiendo el diseño de la Ec. (1) (ver Escobedo-Trujillo et al. [9]).

$$COP = P(V1, V2, V3, \dots, Vn) + \varepsilon \quad \text{Ec. (1)}$$

Se plantea un modelo predictivo de tipo polinomial, cuya estructura se define en la Ec. (1), donde la variable de salida es el resultado de las combinaciones algebraicas de las variables independientes obtenidas.

El modelo polinomial considera términos lineales, cuadráticos y combinaciones cruzadas entre variables con el objetivo de observar el comportamiento del fenómeno

físico analizado. Las diferentes combinaciones de coeficientes y potencias de las variables independientes fueron evaluadas mediante el coeficiente de determinación ( $R^2$ ), seleccionándose el modelo que presentó el mejor desempeño estadístico y un valor de  $R^2$  superior a 0.96, mostrando la utilidad de la aproximación a la caída de presión o COP.

Este proceso se representa en la Ec. (2) donde A representa las combinaciones posibles de las variables predictoras.

$$A = [V_1, \dots, V_6, V_i V_j, V_i V_j V_k, V_i V_j V_k V_n], \quad \text{Ec. (2)}$$

$$\{i = 1, \dots, 6; j = i, \dots, 6; k = j, \dots, 6; n = j, \dots, 6\}$$

Como se muestra en Ec. (3), los coeficientes fueron ajustados mediante técnicas de regresión, para evaluar el desempeño de cada modelo generado utilizando el  $R^2$ , el cual tiene como finalidad medir la proporción de la variabilidad de la variable dependiente, siguiendo este criterio, la selección del modelo final se realiza considerando el criterio de un valor mayor o igual a 0.96.

El coeficiente de determinación ( $R^2$ ) reportado en este estudio fue calculado utilizando la misma base de datos empleada para el ajuste de los coeficientes del modelo polinomial, integrada por 751 registros experimentales. Por tanto, el valor obtenido representa la capacidad de ajuste del modelo sobre los datos disponibles y permite evaluar la relación entre las variables predictoras y la caída de presión.

$$COP_p = -0.2320(V_1^5 V_5^4) + 7.6459E - 14 (V_2^2 V_6) + 7.2179E - 05 (V_3 V_4^2) + 0.0073 + 0.0254 + 0.0015(V_6^3 V_4) \quad \text{Ec. (3)}$$

#### 4.1. Aplicación de la herramienta computacional

El ajuste del modelo polinomial se realiza mediante el software MATLAB, utilizando las funciones de regresión basadas en el método de mínimos cuadrados. La construcción del modelo se llevó a cabo mediante la generación de una matriz de diseño que incluye términos no lineales y combinaciones entre las variables.

Asimismo, se emplearon herramientas gráficas para la visualización de los resultados, incluyendo gráficas de comparación entre valores experimentales y predichos, análisis de residuos y representación tridimensional del comportamiento del sistema.

## 5. Resultados

### 5.1. Polinomio

El modelo polinomial que se propone en Ec. (4) corresponde a una regresión multivariable no lineal, donde las variables predichas se expresan mediante combinaciones algebraicas de las variables independientes en distinto orden e interacciones, utilizando como herramienta de trabajo un código donde se implementa el procedimiento aplicado en el apartado de metodología (véase el Apéndice B). El modelo final incluye términos de hasta quinto grado en algunas variables, como también el producto entre variables, teniendo como criterio principal de selección maximizar el  $R^2$  con un valor mínimo de 0.96 permitiendo capturar los efectos del sistema que se analiza.

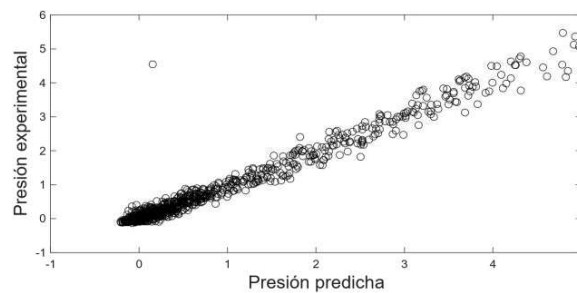
$$COP_p = -0.2320(V_1^5 V_5^4) + 7.6459E - 14 (V_2^2 V_6) + 7.2179E - 05 (V_3 V_4^2) + 0.0073 + 0.0254 + 0.0015(V_6^3 V_4) \quad \text{Ec. (4)}$$

La Ec. (4) corresponde al modelo polinomial final del procedimiento computacional empleado descrito en el apéndice B. Adicionalmente, se busca mantener un balance entre complejidad del modelo y su capacidad predictiva, seleccionando aquel que presentó el mejor desempeño estadístico como el menor número de términos posible.

Además del  $R^2$ , se incorporan métricas adicionales de evaluación del error como la (RMSE) de 0.2425, describiendo este valor como la evaluación de los errores entre los valores predichos con respecto a los valores experimentales, siendo un método sensible a los errores con valores grandes a fin de obtener resultados del desempeño en esta metodología proporcionando una medida más robusta de la capacidad predictiva.

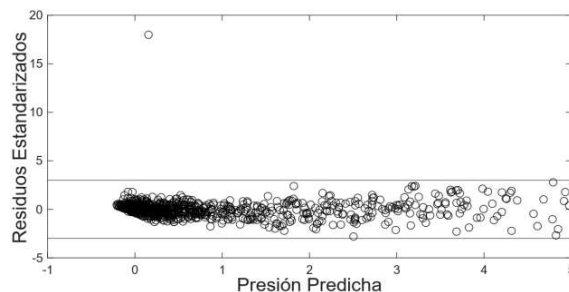
En la Fig. 1 se presenta la comparación entre los valores experimentales de la caída de presión y los valores estimados mediante el modelo polinomial propuesto. Se observa una alta concordancia entre ambos conjuntos de datos, lo que evidencia que el modelo reproduce adecuadamente la tendencia general del comportamiento del flujo bifásico. Las desviaciones puntuales respecto a la tendencia principal corresponden a un error relativo aproximado del 3.97%.

**Fig. 1.** Comparación entre los valores experimentales y los valores predichos de caída de presión obtenidos mediante el modelo polinomial.



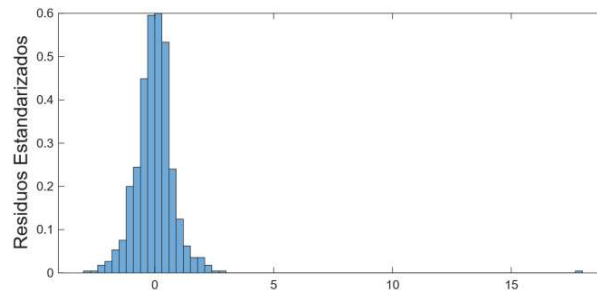
En la Fig. 2 se muestran los residuos estandarizados obtenidos mediante la regresión, como se aprecia, en el rango  $\pm 3$  desviaciones estándar de la media, el  $R^2$  indica que el 96.4 % de los datos predichos se encuentran dentro del rango establecido, donde se presenta una varianza de 0.06 y una media de 0.244.

**Fig. 2.** Distribución de los residuos estandarizados obtenidos del modelo de regresión polinomial.



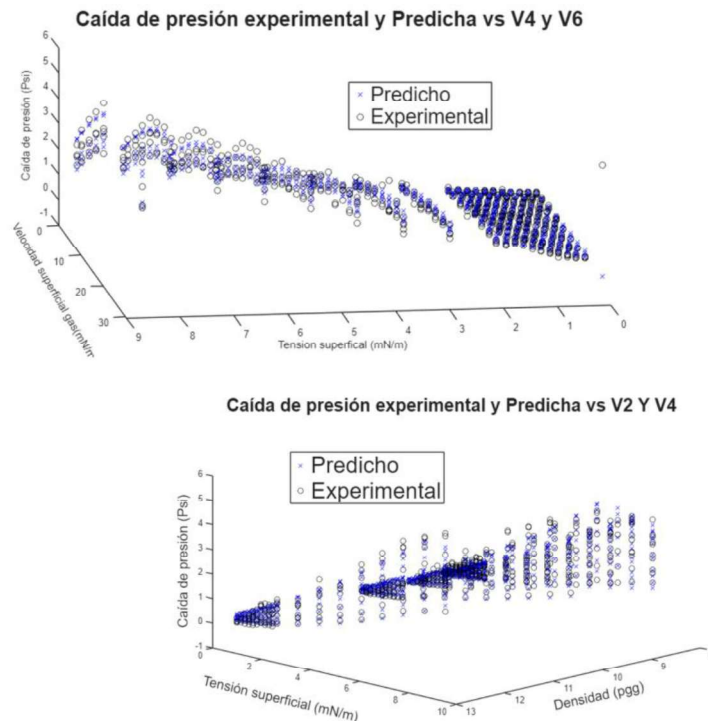
El análisis de residuos mostró un comportamiento aleatorio y una distribución aproximadamente normal, lo que sugiere la ausencia de sesgos sistemáticos en el modelo. Las desviaciones observadas en algunos puntos se atribuyen a la incertidumbre de los datos experimentales y las limitaciones propias del sistema de medición, mostrada en la Fig. 3.

**Fig. 3.** Histograma de residuos con ajuste a una distribución normal para evaluar el comportamiento estadístico del modelo.



En la Fig. 4 se muestra la combinación de las variables de viscosidad, tensión superficial y velocidad superficial del gas contra la caída de presión experimental y predicha, mediante superficies de nivel, evidenciando la complejidad del fenómeno que se analiza.

**Fig. 4.** Superficies de nivel que muestran la relación entre viscosidad, tensión superficial, velocidad del gas y caída de presión para los datos experimentales y predichos.



## 6. Discusión

Los resultados obtenidos muestran que la regresión polinomial permite describir adecuadamente el comportamiento de la caída de presión en flujos bifásicos gas-líquido en tuberías horizontales, considerando las propiedades físicas del fluido y variables operativas.

El alto grado de ajuste entre los valores experimentales y predichos hace consistente la correlación que se tiene con investigaciones previas que señalan la dificultad de modelar flujos bifásicos, debido a la presencia de múltiples regímenes de flujo y a las interacciones no lineales entre fases [1,3]. En comparación con modelos basados en inteligencia artificial, como redes neuronales o métodos de aprendizaje automático [4,5],

el enfoque polinomial propuesto presenta la ventaja de una menor complejidad computacional y una interpretación más directa de las variables involucradas, lo cual coincide con lo reportado en la literatura especializada sobre modelos de regresión estadística [10–12], donde se destaca su interpretabilidad y simplicidad computacional, aunque también se reconocen limitaciones relacionadas con la capacidad de extrapolación fuera del rango de datos utilizado para el ajuste.

Finalmente, aunque el modelo mostró un desempeño satisfactorio dentro del rango experimental evaluado, su aplicación se encuentra condicionada a las propiedades de los fluidos y a las condiciones de operación consideradas. Por ello, resulta importante ampliar el estudio a otros sistemas bifásicos y configuraciones geométricas de tuberías, a fin de evaluar su aplicabilidad en escenarios industriales más diversos.

## 7. Conclusiones

En este artículo se propone un modelo polinomial para la predicción de la caída de presión de flujos bifásicos en una tubería horizontal en donde se cambian las composiciones del líquido, pero su velocidad se mantiene fija y el caudal del gas se vuelve variable. Los datos utilizados como variables de entrada están representados en la Tabla 1 ocupados en el modelo polinomial donde se buscan ser mínimas para obtener un modelo sencillo y práctico utilizando la Ec. (2) como referencia y variando las variables y/o potencias teniendo así el modelo final representado en los resultados.

Se desarrolla una correlación de la hipótesis planteada en la metodología donde se logra una predicción relativamente adecuada y asertiva con un error mínimo de datos predichos obteniendo un 0.9608 de  $R^2$  con una varianza y una media definida gráficamente en los resultados tomando en cuenta como se observa en los residuos estandarizados y un histograma con distribución normal.

Este método ayuda al estudio de nuevos experimentos con respecto a flujos bifásicos llegando a ser una alternativa más práctica para su réplica en otras sustancias diferentes como lo puede ser petróleo, etc. No obstante, se tuvo limitaciones con la exactitud gracias a la calidad de los datos recabados de manera experimental, no dejando de lado la invitación a realizar el método con otros flujos bifásicos alternativos, ampliar la base de datos y mejorar la instrumentación para una mayor amplitud en trabajos posteriores.

Se recomienda para la evaluación de la capacidad de generalización del modelo realizar una validación independiente mediante la división del conjunto de datos en subconjuntos de entrenamiento y validación. Este procedimiento permite verificar que el modelo no solo ajusta adecuadamente los datos utilizados en su construcción, sino que es capaz de predecir correctamente nuevos datos.

## Referencias

1. Yaqop, B.N. Gas-liquid two-phase flow pressure drop in flattened tubes: An experimental and numerical study. *J. Therm. Eng.* \*2024, \*10, 196–206.
2. Li, N.-L.; Chen, B. Evaluation of frictional pressure drop correlations for air-water and air-oil two-phase flow in pipeline-riser system. *Pet. Sci.* \*2024, \*21, 1305–1319.
3. Motil, B. Microgravity liquid–gas two-phase flow: Review of pressure drop and heat transfer correlations and guidelines for equipment operability. *Int. J. Multiph. Flow* \*2022, \*148, 103967.
4. Zhang, Y.; Liu, Y.; Wang, L.; Zhao, J. Experimental investigation of gas–liquid two-phase flow pressure drop characteristics in horizontal pipes. *Energies* \*2023, \*16, 1686.

5. Kanin, E.A.; Osiptsov, A.A.; Vainshtein, A.L.; Burnaev, E.V. A predictive model for steady-state multiphase pipe flow: Machine learning on lab data. arXiv \*2019\*, arXiv:1905.09746.
6. Song, H.-E.; Kang, Y.-H.; Yang, S.-K.; Ahn, Y.-C. Prediction of pressure drop from multivariate polynomial regression for membrane-based air-to-air energy recovery ventilator cores. *Sci. Technol. Built Environ.* \*2023\*, \*29\*, 339–346.
7. Jankovič, D.; Pipan, M.; Šimic, M.; Herakovič, N. Polynomial regression-based predictive expert system for enhancing hydraulic press performance over a 5G network. *Appl. Sci.* \*2024\*, \*14\*, 12016.
8. Al-Dogail, A.S.; Gajbhiye, R.N. Dataset of flow experiment: Effects of density, viscosity and surface tension on flow regimes and pressure drop of two-phase flow in horizontal pipes. *Data Brief* \*2021\*, \*38\*, 107396.
9. Escobedo-Trujillo, B.A.; Valdés-Parada, F.; Ochoa-Tapia, J.A. Polynomial prediction of coefficients of performance for an absorption heat transformer integrated with water purification and energy recovery processes. *Rev. Mex. Ing. Quím.* \*2014\*, \*13\*, 907–917.
10. Hastie, T.; Tibshirani, R.; Friedman, J. *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction*, 2nd ed.; Springer: New York, NY, USA, 2009. Available online: [<https://hastie.su.domains/ElemStatLearn/>] (<https://hastie.su.domains/ElemStatLearn/>) (accessed on 8 June 2026).
11. Bishop, C.M. *Pattern Recognition and Machine Learning*; Springer: New York, NY, USA, 2006. Available online: [<https://link.springer.com/book/10.1007/978-0-387-45528-0>] (<https://link.springer.com/book/10.1007/978-0-387-45528-0>) (accessed on 8 June 2026).
12. James, G.; Witten, D.; Hastie, T.; Tibshirani, R. *An Introduction to Statistical Learning: With Applications in R*, 2nd ed.; Springer: New York, NY, USA, 2021. Available online: (<https://www.statlearning.com/>) (<https://www.statlearning.com/>) (accessed on 8 June 2026).

## **Apéndice A**

### *Descripción de la base de datos*

Este apéndice presenta la base de datos empleada para el desarrollo y validación del modelo de regresión polinomial utilizado en la estimación de la caída de presión en flujos bifásicos gas-líquido.

La base de datos está compuesta por registros experimentales que incluyen propiedades físicas del líquido y condiciones de operación del sistema bifásico. Las variables consideradas son la densidad del líquido, la viscosidad del líquido, la tensión superficial, la velocidad superficial del líquido, la velocidad superficial del gas y la caída de presión experimental.

Los datos fueron revisados para identificar valores faltantes y valores atípicos mediante el análisis de residuos estandarizados. No se realizó normalización adicional, ya que el modelo de regresión se formuló directamente a partir de las variables originales.

### *Apéndice A. Ubicación de la base de datos*

La base de datos se encuentra almacenada en formato Excel y fue utilizada exclusivamente con fines académicos. Los datos completos se encuentran disponibles en el siguiente enlace.

<https://drive.google.com/drive/folders/1VkkSUn-m0x1lflkSxPJCOQtoQrV8zJQf>

## Apéndice B

*Código en MATLAB para la estimación de la caída de presión en flujo bifásico gas-líquido.*

Este apéndice describe el código desarrollado en MATLAB para estimar la caída de presión en sistemas de flujo bifásico gas-líquido mediante un modelo de regresión polinomial, de acuerdo con la metodología presentada anteriormente.

### *Descripción del código*

El código exporta una base de datos experimental en formato Excel que contiene propiedades físicas del fluido y condiciones de operación. A partir de estas variables, se construye un modelo de regresión polinomial mediante combinaciones no lineales e interacciones entre las variables de entrada. Los coeficientes del modelo se estiman usando el método de mínimos cuadrados.

El desempeño del modelo se evalúa mediante el coeficiente de determinación ( $R^2$ ). Los valores que no siguen la tendencia normal se identifican utilizando un criterio de  $\pm 3$  desviaciones estándar. Asimismo, se generan gráficos bidimensionales y tridimensionales para comparar resultados experimentales y predichos y analizar la influencia de las variables del sistema.

### *Apéndice B. Código de MATLAB*

**Nota:** El código MATLAB utilizado para la construcción y evaluación del modelo se encuentra disponible como material suplementario proporcionado en el siguiente enlace.  
<https://drive.google.com/drive/folders/1VkkSUn-m0x1lflkSxPJCCOQtoQrV8zJQf>



Revista

# **INEMATD SCIENCE**

Ingeniería, Energía, Materiales, Tecnología y Desarrollo

**VOLUMEN 1, NÚMERO 1**  
**PUBLICACIÓN SEMESTRAL**