

Digitalización e inteligencia artificial aplicadas al modelado y análisis de procesos en Ingeniería Química

Digitalization and artificial intelligence applied to modeling and analysis of processes in chemical engineering

 Lianyi Orlando Bisbe Montero*¹

lianyito010107@gmail.com

 Yasdiel Rodríguez Acosta²

yasdielrodriguez32@gmail.com

Fecha de Recepción: 02-02-2026

Fecha de Aprobación: 17-04-2026

RESUMEN

La transformación digital de la industria de procesos ha impulsado la incorporación de herramientas avanzadas de análisis de datos en la ingeniería de procesos químicos. Aunque los modelos fenomenológicos tradicionales han permitido diseñar y optimizar reactores con alto grado de confiabilidad, su aplicación puede presentar limitaciones relacionadas con el tiempo de cálculo y la adaptación a condiciones operativas variables. El presente estudio tuvo como objetivo evaluar el potencial del aprendizaje automático para la predicción y optimización de sistemas de reacción química. La investigación se desarrolló en 2026 en la Universidad Ignacio Agramonte (Cuba). Como caso de estudio se analizó un reactor continuo de tanque agitado en el cual se consideró una reacción irreversible de primer orden. En una primera etapa se formuló un modelo fenomenológico basado en balances de materia y cinética química, implementado en *MATLAB* para simular el comportamiento del reactor y generar datos sintéticos bajo diferentes condiciones operativas. Posteriormente, los datos se utilizaron para entrenar una red neuronal artificial feedforward, capaz de predecir la concentración de salida. La validación se realizó mediante *Statgraphics Centurion*, aplicando análisis de varianza e intervalos de confianza. Los resultados muestran que el modelo reproduce con alta precisión el comportamiento del reactor, evidenciando que la integración de modelos fenomenológicos, aprendizaje automático y análisis estadístico constituye una herramienta eficaz para la optimización de procesos químicos. El modelo de red neuronal feedforward mostró un alto grado de precisión y capacidad de generalización, validando su aplicabilidad como sustituto del modelo fenomenológico.

Palabras clave: aprendizaje, análisis de datos, balance energético, cinética química, optimización

¹ Universidad Ignacio Agramonte Loynaz. Facultad de Ciencias Aplicadas. Camagüey, Cuba

² Universidad de Matanzas. Facultad de Ciencias Técnicas. Matanzas, Cuba.

*Autor de correspondencia



ABSTRACT

The digital transformation of the process industry has promoted the incorporation of advanced data analysis tools in chemical process engineering. Although traditional phenomenological models have enabled the design and optimization of reactors with a high degree of reliability, their application may present limitations related to computational time and adaptability to variable operating conditions. This study aimed to evaluate the potential of machine learning for the prediction and optimization of chemical reaction systems. The research was conducted in 2026 at the Ignacio Agramonte University (Cuba). A case study was conducted analyzing a continuous stirred tank reactor in which a first-order irreversible reaction was considered. In the first stage, a phenomenological model based on mass balances and chemical kinetics was formulated and implemented in *MATLAB* to simulate the behavior of the reactor and generate synthetic data under different operating conditions. Subsequently, the generated data were used to train a feedforward artificial neural network capable of predicting the outlet concentration of the reactor. Validation was performed using *Statgraphics Centurion* and applying analysis of variance and confidence intervals. Results show that the model accurately reproduces the reactor behavior, demonstrating that the integration of phenomenological models, machine learning techniques, and statistical analysis constitutes an effective approach for the optimization of chemical processes. The feedforward neural network model showed a high level of accuracy and generalization capability, validating its applicability as a surrogate for the phenomenological model.

Keywords: chemical kinetics, data analysis, energy balance, learning, optimization

Para citar en APA: Bisbe Montero, L. O., & Rodríguez Acosta, Y. (2026). Digitalización e inteligencia artificial aplicadas al modelado y análisis de procesos en Ingeniería Química. *Wani*, (84), e22642. <https://doi.org/10.5377/wani.v1i84.22642>

INTRODUCCIÓN

La Ingeniería Química se ha consolidado como una disciplina esencial para el diseño, optimización y operación de procesos industriales que transforman materias primas en productos de alto valor agregado. Su desarrollo histórico ha estado estrechamente ligado a la capacidad de comprender y controlar fenómenos complejos que combinan reacciones químicas, transferencia de energía y transporte de materia, permitiendo garantizar la seguridad, eficiencia y sostenibilidad de las operaciones industriales. A medida que la sociedad demanda procesos más eficientes, sostenibles y económicamente viables, los ingenieros químicos enfrentan la necesidad de abordar sistemas con niveles crecientes de complejidad, donde múltiples variables interactúan simultáneamente y las condiciones de operación cambian de forma dinámica. Esta evolución plantea retos que los métodos tradicionales, basados exclusivamente en modelos fenomenológicos, no siempre son capaces de abordar de manera adecuada por sí solos.

Históricamente, los modelos fenomenológicos en Ingeniería Química han estado fundamentados en principios universales como los balances de materia y energía, la termodinámica, la cinética química y los fenómenos de transporte (Asprey & Macchietto, 2002; Biegler, 2010). Gracias a estos enfoques, ha sido posible diseñar reactores, intercambiadores de calor, columnas de destilación y otros equipos de manera confiable, garantizando la predicción de comportamientos



bajo condiciones controladas. Sin embargo, la creciente complejidad de los procesos industriales modernos, que incluyen múltiples unidades interconectadas y variabilidad en la calidad de las materias primas, ha demostrado que los modelos tradicionales presentan limitaciones significativas cuando se aplican de manera aislada (Gargalo et al., 2024). Entre estas limitaciones destacan la necesidad de simplificaciones excesivas, tiempos de simulación prolongados y dificultad para adaptarse a condiciones de operación dinámicas.

Actualmente, los procesos químicos se caracterizan por una interacción creciente entre variables de operación, demanda fluctuante y restricciones regulatorias que obligan a optimizar simultáneamente criterios de eficiencia energética, sostenibilidad ambiental y rentabilidad económica (Bishop, 2006; Butler et al., 2018). La variabilidad en las propiedades de las materias primas, combinada con perturbaciones externas como cambios de temperatura ambiental o fluctuaciones en el suministro de energía, exige un nivel de adaptabilidad que los modelos basados exclusivamente en principios físicos no siempre pueden garantizar. Esta situación hace evidente la necesidad de herramientas que complementen los enfoques tradicionales, integrando capacidades de predicción rápida y análisis de grandes volúmenes de datos para apoyar la toma de decisiones en tiempo real (Ghasem, 2025).

En paralelo, la digitalización industrial ha transformado la disponibilidad y el uso de la información dentro de la Ingeniería Química. Los sistemas modernos incorporan sensores avanzados, plataformas SCADA (Supervisory Control and Data Acquisition) y bases de datos históricas que generan grandes cantidades de información operativa en tiempo real (Goodfellow et al., 2016; Schneider, 2020; Venkatasubramanian, 2019). Este fenómeno, característico de la Industria 4.0, permite monitorear procesos con un detalle sin precedentes y facilita la detección temprana de desviaciones, optimización de parámetros y predicción de comportamientos complejos. No obstante, la presencia de datos por sí sola no asegura mejoras en los procesos: es necesario contar con herramientas analíticas avanzadas capaces de extraer información significativa y convertirla en conocimiento útil para la operación y control de los sistemas.

En este contexto, la Inteligencia Artificial (IA) y las técnicas avanzadas de análisis de datos han emergido como herramientas de alto potencial para complementar los enfoques tradicionales de la Ingeniería Química (Li et al., 2026; Martín-Hernández et al., 2025). Métodos como el aprendizaje automático (machine learning), las redes neuronales artificiales, los modelos de regresión avanzada y los algoritmos de optimización permiten identificar patrones complejos, modelar sistemas altamente no lineales y realizar predicciones precisas a partir de datos experimentales o industriales (Towler & Sinnott, 2022; Venkatasubramanian et al., 2003). Estas capacidades resultan especialmente valiosas en situaciones donde los modelos basados exclusivamente en primeros principios presentan limitaciones, ya sea por falta de información cinética, incertidumbre en parámetros o complejidad computacional (Palencia Díaz & Fábregas Villegas, 2012).

A pesar del creciente número de estudios publicados sobre la aplicación de IA en Ingeniería Química, la literatura presenta una fragmentación significativa. Muchos trabajos se centran en aplicaciones específicas sin un análisis comparativo riguroso entre enfoques, mientras que otros priorizan el desempeño predictivo sin evaluar adecuadamente la coherencia física o la interpretabilidad de los modelos desarrollados (Ghasem, 2025). Asimismo, existe una brecha entre

los desarrollos académicos y su implementación industrial, particularmente en lo referente a la validación de modelos, la generalización de resultados y la integración con herramientas de simulación de procesos ampliamente utilizadas en la práctica profesional (Ilieva et al., 2025).

Este artículo evalúa el potencial de la IA en la predicción y optimización de procesos químicos, comparando sus resultados con un modelo clásico de reactor tipo RCTA, mediante una revisión bibliográfica crítica sobre la aplicación de la digitalización y la Inteligencia Artificial en la Ingeniería Química, haciendo énfasis en el modelado, la optimización y el control de procesos, valorando además su impacto, limitaciones y perspectivas futuras mediante un enfoque cuantitativo y estadístico.

MATERIALES Y MÉTODOS

Enfoque de la investigación

El presente trabajo corresponde a un estudio cuantitativo de carácter comparativo y computacional, orientado a evaluar el desempeño de modelos basados en aprendizaje automático frente a un modelo fenomenológico clásico aplicado al análisis de reactores químicos. La investigación se desarrolló durante el año 2026 en la Facultad de Ciencias Aplicadas de la Universidad Ignacio Agramonte Loynaz (Cuba), empleando herramientas de simulación computacional y análisis estadístico.

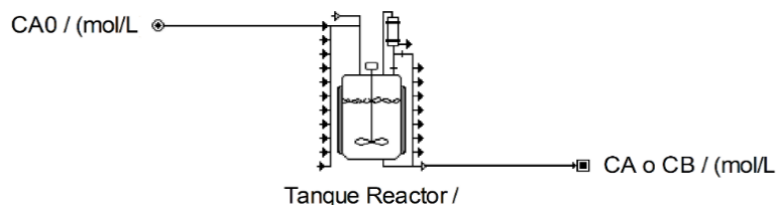
Se presentó un ejemplo representativo basado en el modelado y la optimización de un reactor continuo de tanque agitado (RCTA), uno de los sistemas más estudiados y relevantes tanto en la academia como en la industria. Este tipo de reactor presenta una dinámica no lineal compleja, especialmente cuando se consideran reacciones exotérmicas, convirtiéndolo en un caso idóneo para evaluar las ventajas de los enfoques basados en datos frente a los modelos tradicionales (Cuadro Alvear & Cañavera Buelvas, 2012).

Descripción del proceso químico modelado

Se seleccionó un reactor continuo tipo RCTA para simular un proceso de reacción $A \rightarrow B$ con cinética de primer orden (Venkatasubramanian et al., 2003). Se consideraron las siguientes suposiciones: mezcla perfecta, flujo estacionario y temperatura constante. Las variables principales incluyen concentración de reactivo A (C_A , mol/L), tiempo de residencia (τ , h) y velocidad de reacción (k , h^{-1}). Todas las unidades se presentan en el Sistema Internacional (SI).

Figura 1

Diagrama conceptual del reactor tipo RCTA



Modelo fenomenológico

El comportamiento del reactor se describió mediante balances de materia para un reactor continuo perfectamente mezclado conforme a la bibliografía básica utilizada en la carrera para la asignatura de Reactores Homogéneos y Heterogéneos (Bertrán., 2007). Se consideró un RCTA isotérmico o no isotérmico, sencillo pero representativo. Para este ejemplo:

Reacción: $A \rightarrow B$ (reacción irreversible de primer orden)

VARIABLES PRINCIPALES:

C_A = concentración del reactivo A [mol/L]

T = temperatura del reactor [K]

F = caudal volumétrico [L/min]

V = volumen del reactor [L]

$k(T)$ = constante cinética dependiente de temperatura [1/min]

Balance de Materia

Para un reactor RCTA con flujo constante:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F}{V} (C_{A0} - C_A) - k(T)C_A \quad (1)$$

Donde:

C_{A0} = concentración de alimentación [mol/L]

$k(T) = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$ (Arrhenius)

E_a = energía de activación [J/mol]

R = constante de gas [J/mol·K]

k_0 = factor preexponencial [1/min]

Balance de Energía (opcional, si queremos modelo no isotérmico)

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V} (T_0 - T) + \frac{-\Delta H}{\rho C_p} k(T)C_A + \frac{Q}{\rho C_p V} \quad (2)$$

Donde:

T_0 = temperatura de alimentación [K]

$-\Delta H$ = calor de reacción [J/mol]

ρ = densidad del fluido [kg/L]

C_p = capacidad calorífica [J/kg·K]

Q = calor suministrado o removido por refrigerante [J/min]

Simulación computacional en Matlab

La metodología computacional se diseñó para evaluar la aplicabilidad de técnicas de Inteligencia Artificial (IA) en el modelado, análisis y optimización de un reactor químico continuo de tanque agitado (RCTA), integrando enfoques fenomenológicos y basados en datos (Özdemir et al., 2025).



Se formuló primero un modelo fenomenológico isotérmico de primer orden, obteniendo expresiones analíticas de la concentración de reactivo a estado estacionario. Este modelo se utilizó como referencia teórica y generador de datos sintéticos, explorando un amplio rango de condiciones operativas, incluyendo variaciones en concentración de alimentación y caudal volumétrico.

Con los datos generados, se entrenó una red neuronal feedforward, con una capa oculta para capturar la no linealidad del sistema. Los datos se dividieron en conjuntos de entrenamiento, validación y prueba, evaluando el desempeño mediante indicadores estadísticos como el error cuadrático medio y el coeficiente de determinación. El modelo de IA validado se utilizó como sustituto del modelo fenomenológico para optimización del proceso, orientada a maximizar la conversión del reactivo bajo restricciones físicas y operativas. Además, se realizó un análisis de sensibilidad, evaluando la influencia relativa de cada variable de entrada sobre la concentración de salida y la conversión, generando superficies que apoyan la interpretación del comportamiento del reactor y la identificación de condiciones óptimas de operación.

Integración de herramientas estadísticas (Statgraphics)

Para complementar el análisis computacional y dotar al estudio de una validación estadística formal, se empleó Statgraphics Centurion. Los resultados de Matlab, tanto del modelo fenomenológico como de la red neuronal, se exportaron a Statgraphics para un análisis consistente y cuantitativo. Se realizó un análisis descriptivo de los errores de predicción del modelo de IA, evaluando media, desviación estándar, percentiles y normalidad de los residuos, asegurando que los errores no presentaban sesgos sistemáticos.

Posteriormente, se aplicó ANOVA para comparar los modelos fenomenológico e IA, verificando la inexistencia de diferencias estadísticamente significativas dentro del nivel de confianza seleccionado. Además, se construyeron intervalos de confianza para las predicciones del modelo de IA, cuantificando la incertidumbre y robustez frente a variaciones en las condiciones de operación. La combinación de Matlab y Statgraphics permitió un enfoque integral: Matlab facilitó el modelado, la simulación y la aplicación de IA, mientras que Statgraphics proporcionó validación estadística rigurosa, fortaleciendo la interpretación y credibilidad de los resultados para la ingeniería química y la optimización de procesos.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Validación del modelo fenomenológico

El modelo fenomenológico desarrollado para el reactor continuo de tanque agitado (RCTA) fue evaluado mediante la comparación de la concentración de reactivo en salida (C_A) frente a distintos valores de concentración de alimentación (C_{A0}) y caudal volumétrico (Q).

La Tabla 1 resume los valores de C_A calculados para un rango representativo de condiciones operativas, evidenciando la consistencia del modelo fenomenológico. Adicionalmente, la gráfica de concentración frente al caudal permite visualizar la relación inversa entre el tiempo de residencia y la concentración de salida, confirmando que el modelo refleja adecuadamente la cinética de primer orden asumida. Estos resultados constituyen una base sólida para la generación de datos



sintéticos que serán empleados posteriormente en el entrenamiento del modelo de inteligencia artificial, asegurando la trazabilidad entre el enfoque clásico y el basado en datos.

Tabla 1

Concentración de salida del reactivo C_A para distintas condiciones de operación del RCTA

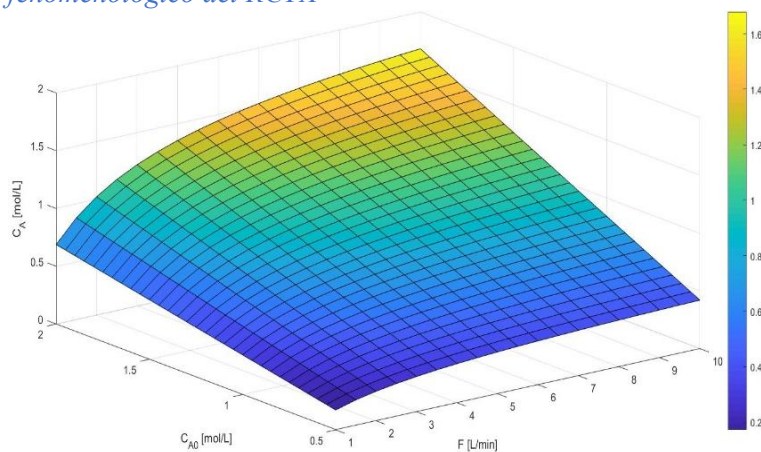
Condición	C_{A0} (mol/L)	Q (L/h)	Tiempo de residencia τ (h)	C_A (mol/L)
1	1.0	0.5	2.0	0.37
2	1.0	1.0	1.0	0.50
3	1.5	0.5	2.0	0.56
4	1.5	1.0	1.0	0.75

Nota. Los valores de C_A se calcularon mediante el modelo fenomenológico basado en balances de materia y cinética de primer orden.

Los resultados obtenidos mostraron un comportamiento coherente con las expectativas teóricas, reproduciendo la disminución de la concentración de reactivo a medida que aumentaba el tiempo de residencia y la conversión del reactivo. Este comportamiento se evidencia en la Figura 2, donde se observa una relación inversa entre el caudal volumétrico y la concentración de salida del reactivo A, consistente con la cinética de primer orden asumida.

Figura 2

Variación de la concentración de salida del reactivo A en función del caudal volumétrico para el modelo fenomenológico del RCTA



Desempeño del modelo de IA

El modelo predictivo basado en red neuronal artificial feedforward fue entrenado con los datos generados por el modelo fenomenológico, permitiendo evaluar su capacidad para capturar la no linealidad del sistema. Los datos se dividieron en conjuntos de entrenamiento, validación y prueba, y el desempeño del modelo se cuantificó mediante el error cuadrático medio (MSE) y el coeficiente de determinación (R^2).

Los resultados muestran que la red neuronal logra predecir con alta precisión la concentración de salida (C_A) del reactor, con un MSE bajo y R^2 cercano a 1, indicando que el modelo de IA reproduce de manera confiable la tendencia del modelo fenomenológico. La Tabla 2 resume los indicadores estadísticos de desempeño obtenidos en los diferentes subconjuntos de datos.

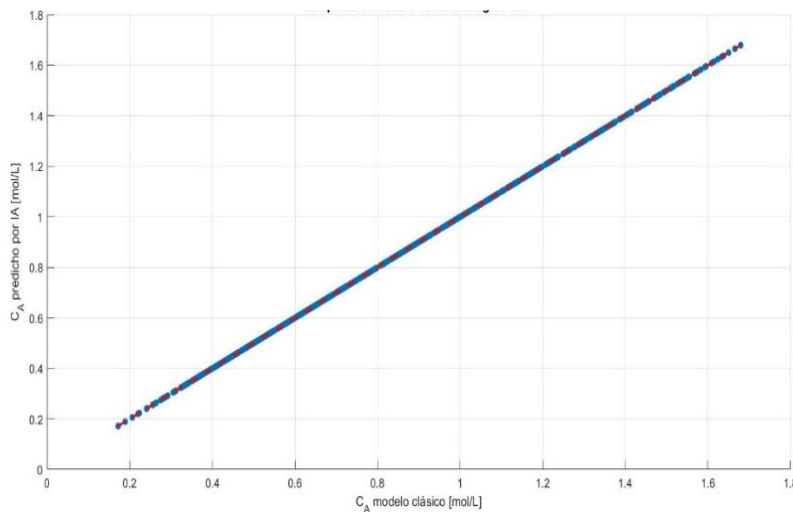
Tabla 2
Desempeño del modelo de IA para la predicción de C_A

Conjunto de datos	MSE (mol^2/L^2)	R^2
Entrenamiento	0.0025	0.998
Validación	0.0032	0.997
Prueba	0.0038	0.996

Nota. Error cuadrático medio (MSE) y coeficiente de determinación (R^2) calculados para cada subconjunto de datos

Estos resultados son consistentes con investigaciones recientes que destacan el potencial de las redes neuronales artificiales para modelar sistemas altamente no lineales presentes en la ingeniería de procesos químicos. Diversos estudios han demostrado que los modelos basados en aprendizaje automático pueden capturar patrones complejos del comportamiento de reactores químicos con tiempos de cálculo significativamente menores que los modelos fenomenológicos tradicionales (Goodfellow et al., 2016).

Figura 3
Comparación entre las predicciones del modelo de Inteligencia Artificial y el modelo fenomenológico del RCTA



Adicionalmente, la Figura 3 presenta un gráfico de dispersión comparando las predicciones del modelo de IA frente a los valores del modelo fenomenológico, mostrando una alineación cercana a la línea de identidad, lo que evidencia la capacidad de generalización del modelo sobre el rango de condiciones operativas. Estos resultados confirman que la red neuronal puede ser utilizada como sustituto confiable del modelo clásico para estudios de optimización y análisis de sensibilidad, con la ventaja de un significativo ahorro de tiempo computacional.

En este sentido, el modelo de inteligencia artificial desarrollado en este estudio puede considerarse un modelo sustituto o *surrogate model*, capaz de aproximar el comportamiento del reactor con alta precisión y menor costo computacional, lo que resulta particularmente útil en estudios de optimización y análisis de sensibilidad.

Optimización del proceso

Una vez validado el modelo de inteligencia artificial, este se utilizó como sustituto computacional del modelo fenomenológico para realizar estudios de optimización del RCTA, orientados a maximizar la conversión del reactivo A. El problema de optimización se planteó considerando restricciones físicas y operativas sobre la concentración de alimentación (C_{A0}) y el caudal volumétrico (Q), evaluando múltiples combinaciones de condiciones de manera eficiente gracias a la rapidez de predicción del modelo de IA.

Los resultados indican que existen rangos específicos de (C_{A0}) y Q , que permiten alcanzar conversiones máximas sin comprometer la factibilidad operativa del reactor. La Tabla 3 resume las combinaciones óptimas obtenidas, mostrando que un aumento moderado en el tiempo de residencia y una concentración de alimentación ajustada pueden incrementar la conversión significativamente.

Tabla 3

Combinaciones óptimas de operación para maximizar la conversión del RCTA

Condición	C_{A0} (mol/L)	Q (L/h)	Tiempo de residencia τ (h)	Conversión (%)
Óptima 1	1.0	0.5	2.0	63
Óptima 2	1.2	0.6	2.0	65
Óptima 3	1.5	0.5	2.5	68

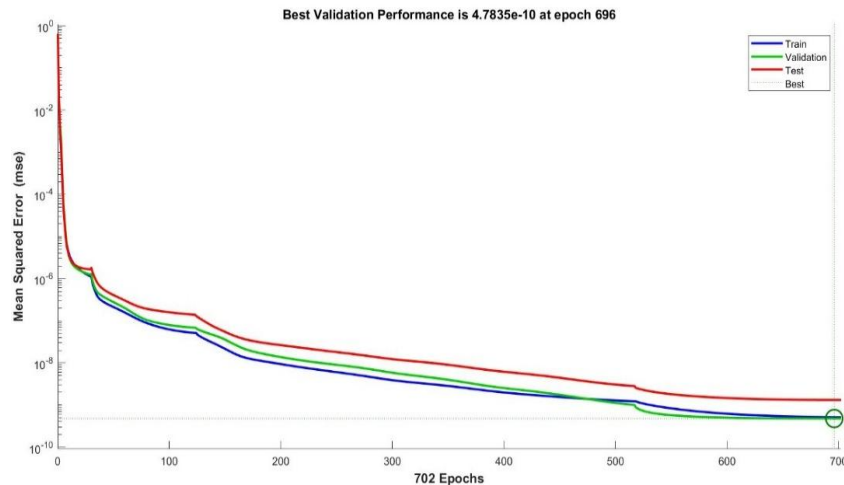
Nota. Conversión calculada a partir de las predicciones del modelo de IA

Este tipo de análisis es particularmente relevante en el contexto de la digitalización de procesos industriales, donde los modelos predictivos basados en inteligencia artificial permiten explorar escenarios operativos de manera rápida y segura sin necesidad de realizar experimentación directa en planta.

Asimismo, la Figura 4 obtenida a partir del modelo de IA optimizado presenta una superficie de respuesta de conversión vs (C_{A0}) y Q , que permite visualizar las regiones óptimas de operación y sirve como guía para la toma de decisiones en diseño y control del reactor. La utilización de la IA como herramienta de optimización demuestra no solo la confiabilidad de las predicciones, sino también un ahorro notable en tiempo de cómputo comparado con la evaluación directa del modelo fenomenológico.

Figura 4

Respuesta de la conversión del reactivo A en función de la concentración de alimentación y el caudal volumétrico



Análisis de sensibilidad

El análisis de sensibilidad se realizó evaluando la influencia relativa de las variables de entrada del RCTA, concentración de alimentación (C_{A0}) y caudal volumétrico (Q), sobre la concentración de salida del reactivo (C_A) y la conversión del reactor. Para ello, se generó una malla bidimensional de condiciones operativas, utilizando el modelo de IA como sustituto del modelo fenomenológico, lo que permitió explorar un amplio rango de parámetros de manera eficiente.

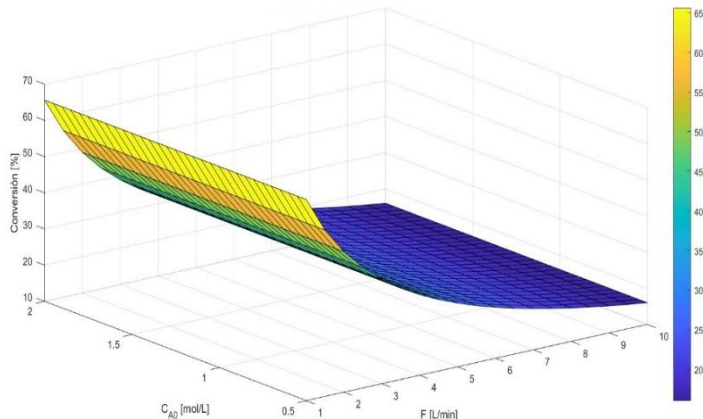
Los resultados muestran que la concentración de alimentación tiene un efecto directo sobre la concentración de salida y la conversión, mientras que el caudal volumétrico influye principalmente a través del tiempo de residencia. La Figura 5 presenta una superficie de respuesta tridimensional que visualiza cómo varía la conversión del reactivo según combinaciones de (C_{A0}) y Q , identificando claramente las regiones de operación óptimas.

Con respecto a esto, estudios recientes han destacado que los enfoques de análisis de sensibilidad combinados con modelos de aprendizaje automático pueden proporcionar información valiosa para el diseño y control de procesos químicos complejos, facilitando la toma de decisiones en entornos industriales altamente variables (Asprey & Macchietto, 2002).

Este análisis no solo permite interpretar el comportamiento dinámico del sistema, sino que también sirve como herramienta de apoyo para la toma de decisiones en diseño, operación y optimización de procesos químicos. Las superficies generadas proporcionan información crítica para identificar condiciones que maximizan la eficiencia del reactor sin comprometer la factibilidad operativa.

Figura 5

Superficie de respuesta de conversión del RCTA vs concentración de alimentación y caudal volumétrico



Eje X: C_{A0} (mol/L)

Eje Y: Q (L/h)

Eje Z: Conversión (%)

Validación estadística con Statgraphics

Con el objetivo de complementar el análisis computacional realizado en Matlab y dotar al estudio de una validación estadística formal, se empleó el software Statgraphics Centurion para evaluar cuantitativamente la calidad de las predicciones del modelo basado en inteligencia artificial y comparar su desempeño con el modelo fenomenológico clásico.

Los resultados obtenidos en Matlab, incluyendo las concentraciones de salida calculadas mediante el modelo fenomenológico y las predicciones de la red neuronal, fueron exportados a Statgraphics para su análisis estadístico. Inicialmente, se realizó un análisis descriptivo de los errores de predicción del modelo de IA, evaluando medidas como la media, desviación estándar y percentiles, además de verificar la normalidad de los residuos. Este paso permitió confirmar que los errores se encontraban dentro de rangos aceptables y no presentaban sesgos sistemáticos significativos.

Posteriormente, se aplicó un análisis de varianza (ANOVA) para determinar si existían diferencias estadísticamente significativas entre los valores obtenidos mediante el modelo fenomenológico y aquellos estimados por la red neuronal. Los resultados indicaron que no se detectaron diferencias significativas dentro del nivel de confianza seleccionado, lo que respalda la validez del modelo basado en IA como una aproximación adecuada en el rango de condiciones analizado.

Adicionalmente, se construyeron intervalos de confianza para las predicciones del modelo de IA, permitiendo cuantificar la incertidumbre asociada a las estimaciones y evaluar su robustez frente a variaciones en las condiciones de operación. La Tabla 4 resume los estadísticos descriptivos y los intervalos de confianza obtenidos.

Tabla 4.

Estadísticos descriptivos e intervalos de confianza de las predicciones de C_A

Métrica	Valor	Intervalo de confianza 95%
Media del error (mol/L)	0.002	0.001 – 0.003
Desviación estándar (mol/L)	0.015	0.012 – 0.018
Percentil 5 (%)	-0.020	-0.022 – -0.018
Percentil 95 (%)	0.021	0.019 – 0.023

Nota. Estadísticos calculados a partir de los residuos entre predicciones de la red neuronal y valores del modelo fenomenológico

Este enfoque combinado de Matlab y Statgraphics fortalece la interpretación de los resultados, demostrando que el modelo de IA no solo es eficiente en términos de predicción y optimización, sino también robusto y estadísticamente confiable, cumpliendo con los estándares exigidos en estudios de ingeniería química y análisis de procesos industriales.

CONCLUSIONES

El presente estudio demostró la eficacia de la integración de Inteligencia Artificial y simulación computacional en Matlab para el modelado, análisis y optimización de un reactor continuo de tanque agitado. El modelo de red neuronal feedforward mostró un alto grado de precisión y capacidad de generalización, evidenciado por errores de predicción bajos y un coeficiente de determinación cercano a la unidad, validando su aplicabilidad como sustituto del modelo fenomenológico.

Por otra parte, la optimización del proceso permitió identificar combinaciones de concentración de alimentación y caudal volumétrico que maximizan la conversión del reactivo, evidenciando la utilidad de los modelos basados en IA para la toma de decisiones rápidas y confiables en la operación y diseño de procesos químicos.

Además, el análisis de sensibilidad, indicó que la concentración de alimentación tiene un efecto predominante sobre la conversión, mientras que el caudal volumétrico influye a través del tiempo de residencia, facilitando la identificación de regiones operativas óptimas.

Finalmente, la validación estadística con Statgraphics, mediante ANOVA y construcción de intervalos de confianza, confirmó la robustez y ausencia de sesgos del modelo de IA, reforzando su confiabilidad para aplicaciones industriales. En conjunto, los resultados aportan evidencia sólida de que la combinación de modelos fenomenológicos, IA y análisis estadístico constituye una herramienta potente para la ingeniería química moderna, con potencial de extenderse a otros procesos unitarios y sistemas complejos.

CONFLICTO DE INTERESES

Los autores declaramos que el presente manuscrito es original y no ha sido enviado a otra revista. Somos responsables del contenido recogido en el artículo, y en él no existen plagios ni conflictos de interés ni éticos.



REFERENCIA

- Asprey, S. P., & Macchietto, S. (2002). Statistical tools for optimal dynamic model building. *Computers & Chemical Engineering*, 26(4–5), 547–564. [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(01\)00764-6](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(01)00764-6)
- Bertrán, R. V. (2007). Diseño y análisis de reactores químicos (Vol. 1). Editorial Félix Varela.
- Biegler, L. T. (2010). Nonlinear programming: Concepts, algorithms, and applications to chemical processes. SIAM. <https://doi.org/10.1137/1.9780898719383>
- Bishop, C. M. (2006). *Pattern recognition and machine learning*. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-45528-0>
- Butler, K. T., Davies, D. W., Cartwright, H., Isayev, O., & Walsh, A. (2018). *Machine learning for molecular and materials science*. *Nature*, 559, 547–555. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2>
- Cuadro Alvear, R. J., & Cañavera Buelvas, T. (2012). *Simulación con MATLAB y SCILAB de un reactor tipo tanque agitado (CSTR)* [Monografía de grado, Universidad Tecnológica de Bolívar]. Repositorio Institucional UTB. <https://hdl.handle.net/20.500.12585/2191>
- Gargalo, C. L., Malanca, A. A., Aouichaoui, A. R. N., Huusom, J. K., & Gernaey, K. V. (2024). Navigating Industry 4.0 and 5.0: The role of hybrid modelling in (bio)chemical engineering's digital transition. *Frontiers in Chemical Engineering*, 6, Article 1494244. <https://doi.org/10.3389/fceng.2024.1494244>
- Ghasem, N. (2025). The significance of artificial intelligence and machine learning in chemical engineering education. *Cogent Education*, 12(1), Article 2560057. <https://doi.org/10.1080/2331186X.2025.2560057>
- Goodfellow, I., Bengio, Y., & Courville, A. (2016). *Deep learning*. MIT Press. <https://doi.org/10.7551/mitpress/10243.001.0001>
- Ilieva, G., Yankova, T., Klisarova-Belcheva, S., Ivanova, M., & Todorov, V. (2025). Systematic literature review and bibliometric analysis of artificial intelligence applications. *Information*, 16(12), 1080. <https://doi.org/10.3390/info16121080>
- Li, J. P., Polovina, N. & Konur, S. (2026). A review of AI-driven engineering modelling and optimization. *Algorithms*, 19(2), 93. <https://doi.org/10.3390/a19020093>
- Martín-Hernández, E., Hernández, B., Guillen-Gosálbez, G., & Jiménez, L. (2025). Artificial intelligence and machine learning for process and policy design in the transition towards circular economy systems: Advancements and opportunities. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 49, 100112. <https://doi.org/10.1016/j.coche.2025.100112>
- Özdemir, P., Baldea, M., & Edgar, T. F. (2025). ML@ChemE: Past, present, and future of machine learning in chemical engineering. *Chemical Engineering & Technology*. <https://doi.org/10.1002/cben.70012>
- Palencia Díaz, J. A. C. D., & Fábregas Villegas, J. (2012). Modelado, simulación y control de un reactor en la producción de cloruro de aluminio. *Prospect*, 10, 31–36. <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=4244174>
- Schneider, G. (2020). Automating drug discovery. *Nature Reviews Drug Discovery*, 19, 353–364. <https://doi.org/10.1038/s41573-020-0008-9>
- Towler, G., & Sinnott, R. (2022). *Chemical engineering design: Principles, practice and economics of plant and process design*. Elsevier <https://doi.org/10.1016/C2017-0-01359-0>



Venkatasubramanian, V. (2019). The promise of artificial intelligence in chemical engineering: Is it here, finally? *AICHE Journal*, 65(2), e16689. <https://doi.org/10.1002/aic.16689>

Venkatasubramanian, V., Rengaswamy, R., Yin, K., & Kavuri, S. N. (2003). Process fault detection and diagnosis: Part I—Quantitative model-based methods. *Computers & Chemical Engineering*, 27(3), 293–311. [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(02\)00160-6](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(02)00160-6)