

Redes Neuronales para la Predicción Inteligente de Costos de inversión en Procesos Químicos

Neural Networks for Intelligent Prediction of Investment Costs in Chemical Processes

Alan Rodolfo Rodríguez-Pérez¹, Giussepi Alf Jhonatan Mamani-Paco¹, Ricardo Morales-Rodriguez¹

¹ División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato, Guanajuato, GTO.
ricardo.morales@ugto.mx¹

Resumen

La estimación precisa de los costos de instalación de equipos en etapas tempranas del diseño de procesos químicos representa un desafío, especialmente cuando no se dispone de información detallada o bases de datos industriales completas. Ante esta limitación, el presente trabajo propone una estrategia basada en redes neuronales artificiales para predecir los costos de instalación de equipos de proceso a partir de variables de diseño y operación generadas mediante simulaciones en Aspen Plus y Aspen Process Economic Analyzer. Se desarrollaron modelos predictivos para bombas, compresores y separadores flash, empleando un muestreo con hipercubo latino para generar más de 1000 escenarios por equipo, con lo cual se garantizó una cobertura uniforme del espacio de entrada. Las redes neuronales fueron entrenadas en MATLAB usando configuraciones totalmente conectadas en secuencia, activaciones ReLU y técnicas de normalización, evaluando su desempeño mediante el coeficiente de determinación (R^2). Los resultados demostraron una alta capacidad predictiva del enfoque, alcanzando un R^2 de hasta 0.9955 para el compresor, lo que valida su aplicabilidad para la estimación económica preliminar en entornos con alta variabilidad de condiciones. Este enfoque ofrece una alternativa eficiente y flexible frente a los métodos tradicionales, con el potencial de acelerar la toma de decisiones en procesos químicos.

Palabras clave: Simulación de procesos; redes neuronales; estimación de costos; Aspen Plus; evaluación económica.

Introducción

Los modelos matemáticos tienen como objetivo el representar fenómenos físicos a través de ecuaciones. Si bien existen modelos matemáticos que describen la relación entre las entradas manipuladas y las salidas del proceso que son esenciales para construir sistemas de control o monitoreo, existen ciertas limitaciones en el desempeño de los modelos en aplicaciones industriales, la cual no hace una tarea sencilla encontrar un modelo preciso. Aquí la importancia del aprendizaje automatizado, como el caso de las redes neuronales (NN), la cuales han demostrado una capacidad para modelar con precisión la evolución dinámica y estacionaria de procesos químicos complejos y problemas no lineales en diversas aplicaciones dentro de ingeniería química [1].

El aprendizaje automático ha cobrado relevancia en las disciplinas de ingeniería en los últimos años, debido a la capacidad de analizar un gran volumen de datos [2]. En particular, la ingeniería química ha experimentado un creciente interés sobre la utilización de técnicas de inteligencia artificial como la implementación de técnicas de aprendizaje automático (ML, por sus siglas en inglés) en diferentes aplicaciones de los procesos químicos [1].

Entre las aplicaciones destacadas se encuentran las analíticas predictivas que permiten predecir parámetros de calidad del producto, rendimiento y emisiones, incluso horas antes de tener resultados de laboratorio. Por ejemplo, en una planta petroquímica se desarrolló un modelo que permite predecir el contenido de azufre con un 94% de precisión, lo que permitió ajustar la mezcla y evitar pérdidas por productos fuera de sus especificaciones [3]. Otra aplicación corresponde a un modelo NN de una columna de destilación binaria continua utilizando datos experimentales, se demostró que las predicciones del modelo NN pueden superar a las de un modelo de principios fundamentales para procesos de gran escala, complejos y no lineales, debido a su libertad para resolver problemas de regresión no lineal complejos utilizando el conjunto de datos del

proceso[1]. Adicionalmente, se tienen también aplicaciones en la predicción de emisiones y el monitoreo ambiental, prediciendo emisiones de NO_x , CO_2 , así como buscar beneficios económicos óptimos en procesos de manufactura. En general, estas tareas que comúnmente exceden las capacidades de los métodos clásicos encuentran en la inteligencia artificial una herramienta poderosa [3].

En ingeniería química, el diseño de los procesos debe incluir estimaciones de costos para evaluar tanto la inversión inicial (capital) como los gastos operativos, con el fin de garantizar la factibilidad económica del proyecto [4]. Existen 5 clasificaciones generalmente aceptadas para la estimación de costos de capital en una planta química: estimación de orden de magnitud, estimación de estudio, estimación de diseño preliminar, estimación definitiva y estimación detallada. Cada una requiere un nivel de detalle del proceso distinto, en consecuencia, una precisión de estimación diferente. Comúnmente las predicciones más generales se basan en la comparación de la planta química que se desea construir con alguna otra ya existente, donde no se requiere información detallada del proceso; por otro lado, las estimaciones más rigurosas exigen cálculos rigurosos del proceso, como las instalaciones externas y servicios auxiliares relacionados al equipo [5].

Estas estimaciones son importantes para determinar las mejores alternativas en evaluación de proyectos u optimización del proceso. La inversión de capital fijo es el costo total para diseñar, construir e instalar una planta y se compone de lo siguiente: 1.- inversión dentro de los límites de batería (ISBL); 2.-Modificaciones y mejoras a realizar en la infraestructura del sitio, conocido como inversión fuera de los límites de batería (OSBL); 3.-Costos de ingeniería y construcción; 4.-Cargos por contingencia [4].

Por tanto, es importante estimar correctamente el ISBL, puesto que, otros costos del proyecto pueden estimarse a partir de este. El ISBL incluye todos los costos de adquisición e instalación de todo el equipo de proceso que conforma la planta, así como los costos por construcción, gastos y servicios de campo, artículos de granel, como tuberías, cableado, instrumentos, disolventes, etc. Si se tiene una mala estimación del ISBL obtendremos cálculos incorrectos en las partes restantes de la planta. En ese sentido, existen diversos métodos para la estimación del ISBL, la mejor fuente es la información reciente sobre los costos de equipos con características similares. Algunos ingenieros que trabajan en empresas de ingeniería, adquisición y construcción (EPC) tienen acceso a grandes cantidades de datos de alta calidad. Sin embargo, no todos tienen acceso a dicha información, por lo que es necesario la búsqueda de alternativas, una es el software de estimación de costos como el *Aspen Capital Cost Estimator* (ACCE), con licencia de *Aspen Technology, Inc.* o *Cleopatra Enterprise* que permiten tener buenas estimaciones de los costos de los equipos del proceso [4].

En este proyecto, se plantea implementar un modelo de redes neuronales para estimar los costos de inversión de equipos para los procesos químicos, integrando información obtenida en Aspen plus (AP) con modelos de inteligencia artificial y analizando la relación entre las variables de diseño de los equipos y su costo haciendo uso del software *Aspen Process Economic Analyzer* (APEA) en bombas, compresores y separador flash. Además, se comparará el desempeño de diferentes arquitecturas de redes neuronales para la predicción de costos y se evaluará mediante un tratamiento estadístico la precisión del modelo y su aplicabilidad en la estimación económica de procesos.

Metodología

La metodología propuesta y empleada en este proyecto incluye dos pasos principales. El primer paso es la colección de datos empleado el simulador de procesos *Aspen plus* (AP). En la segunda etapa de lleva a cabo la construcción de la red neuronal empleando la herramienta computacional MATLAB.

Recolección de datos económicos

La Figura 1 muestra el procedimiento que se llevó a cabo con 3 equipos generando diversas simulaciones en el software AP, para esto se determinaron las variables de entrada que se requerirían para la estimación de costos en cada uno de los equipos, se hizo una revisión bibliográfica de la estimación de costos, así como el manual de AP que provee algunas variables que el programa utiliza para generar sus estimaciones. Como resultado se obtuvieron las variables que posteriormente se utilizaron para generar distintos escenarios en cada equipo, cada uno con sus respectivos valores de entrada y, por consiguiente, el software generó los valores de salida de cada equipo, la información colectada fue empleada para el entrenamiento de la red neuronal.

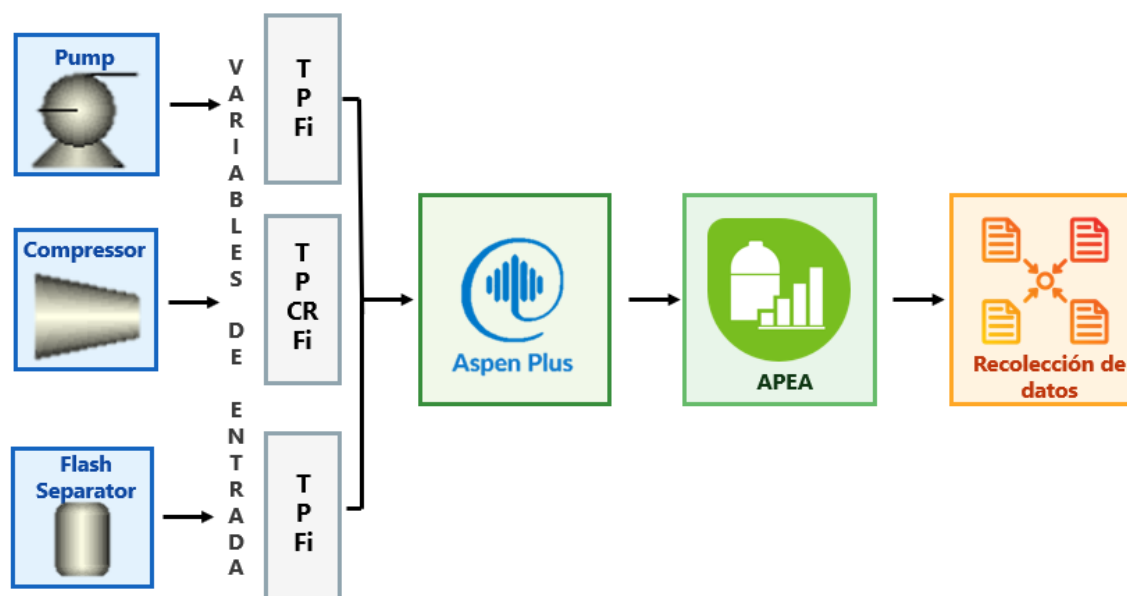


Figura 1. Diagrama de bloques del procedimiento.
Nota: Temperatura (T); Presión (P); flujo molar por componente (Fi); razón de compresión (CR).

Para el caso de la bomba y el separador flash, se usaron las variables de entrada de temperatura, presión y flujo molar de cada componente, mientras que, para el compresor se agregó la razón de compresión. Esta información fue útil para obtener variables de salida como lo son los flujos molares totales, los flujos volumétricos totales, temperaturas y presiones dependiendo del tipo de equipo.

Se utilizaron compuestos comunes en las simulaciones y de distintas características, desde compuestos muy ligeros como el hidrógeno (0.0899 kg/m^3), hasta hidrocarburos más pesados como el dodecano (749.5 kg/m^3), esto para generar resultados útiles para una amplia gama de sustancias y tener datos completos con los que podremos entrenar a la red neuronal.

Se utilizaron 2 modelos termodinámicos en el simulador AP, para el caso de las bombas se seleccionó UNIQUAC, por otro lado, para el caso de los compresores y separadores flash se utilizó un modelo Peng-Robinson, es importante cuidar la selección correcta del modelo a utilizar, puesto que los resultados pueden ser distintos o errados. Una vez se seleccionaron los compuestos a utilizar y el correspondiente modelo termodinámico, se creó el equipo en el simulador y se le dieron valores de entrada para correr la primera simulación y revisar resultados.

Posteriormente, se realizó la vinculación de la simulación en AP con el Aspen Process Economic Analyzer (APEA), el cual nos generó una estimación en los costos de los equipos y su instalación, datos que varían dependiendo de los datos de entrada que se le proporcionen al simulador, es por ello por lo que se probaron cerca de 1000 escenarios aleatorios obtenidos mediante el método de hipercubo latino para cada uno de los equipos donde se ingresaron distintos valores de entrada en cada escenario.

Una vez se corrieron todos los escenarios se hizo una recopilación de la información obtenida utilizando tablas de datos en Excel, en el cual se registró una estimación de costos por cada escenario en los diferentes equipos. Se llevó a cabo el análisis y la selección de los resultados filtrando los que arrojaron estimaciones correctas y se tomaron para posteriormente ser utilizados en el entrenamiento de la NN, si los datos generados por las simulaciones no fueron precisos o correctos, se generaron más escenarios hasta obtener una cantidad suficiente (cerca a 1000 escenarios) para alimentar a la NN.

Construcción de la red neuronal

Con el objetivo de estimar la variable de salida a partir de un conjunto de predictores, se construyó un modelo de red neuronal empleando una arquitectura completamente conectada. El proceso se realizó en MATLAB utilizando entrenamiento supervisado y paralelización para mejorar la eficiencia computacional.

Se definió un total de 20 configuraciones de red a entrenar de forma independiente, con el propósito de explorar distintas combinaciones aleatorias de datos de entrenamiento, validación y prueba. Para cada iteración, se realizó una permutación aleatoria de las observaciones disponibles, y posteriormente se organizó la información en una tabla con las variables predictoras y la variable objetivo. Esta tabla fue dividida en distintos subconjuntos de datos de entrenamiento con 100, 200, 400, 600, 700, y 800 elementos de entrenamiento con distintos elementos de datos para validación y para prueba.

La arquitectura de la red constó de una capa de entrada con normalización tipo z-score, seguida por dos capas ocultas densamente conectadas con 100 y 50 neuronas, respectivamente. Se incorporaron capas de normalización por lotes (batch normalization) y activación ReLU, además de una capa dropout para reducir el sobreajuste. La salida fue una única neurona lineal, adecuada para un problema de regresión.

El entrenamiento se llevó a cabo utilizando el optimizador Adam y un máximo de 200 épocas. Se empleó validación cruzada en cada época con una frecuencia de validación cada 10 iteraciones. El criterio de evaluación principal fue el error cuadrático medio (MSE), mientras que el desempeño final se comparó utilizando el coeficiente de determinación (R^2) sobre el conjunto de prueba.

Cada red entrenada fue evaluada y almacenada junto con sus predicciones y valores reales. Finalmente, se seleccionó el modelo con el mayor valor de R^2 en la etapa de prueba, considerándolo como la mejor configuración. Este modelo se utilizó para realizar las visualizaciones de desempeño predictivo, incluyendo la gráfica de dispersión de valores reales vs. predichos y un histograma bidimensional de densidad de predicción. Los resultados fueron almacenados para su posterior análisis.

Resultados y Discusión

Análisis estadístico de las variables de entrada

A continuación, se muestran los resultados obtenidos para los equipos analizados: bombas, compresores y unidad flash.

Bombas

El método de muestreo por hipercubo latino permite generar datos de entrada uniformemente distribuidos, lo que se traduce en una cobertura más completa y equilibrada del espacio. Dicha propiedad resulta esencial para entrenar redes neuronales sin sesgos y mejorando su capacidad de generalización. A diferencia del muestreo aleatorio convencional, este enfoque garantiza que cada variable sea representada en todo su rango, en consecuencia, se maximiza la diversidad de escenarios simulados.

En la Figura 2 se aprecia la distribución homogénea en todo el espacio de las variables de entrada de la red neuronal para el caso particular de bombas, reflejando un diseño estructurado que favorece el rendimiento de los modelos predictivos.

Es fundamental hacer un análisis estadístico de los datos que se utilizaron para el entrenamiento de la NN, dado que es entrenada utilizando de un rango específico de valores por cada una de nuestras variables de entrada. Dichos rangos pueden consultarse en las columnas de máximos y mínimos, donde se establecen los límites correspondientes a cada variable.

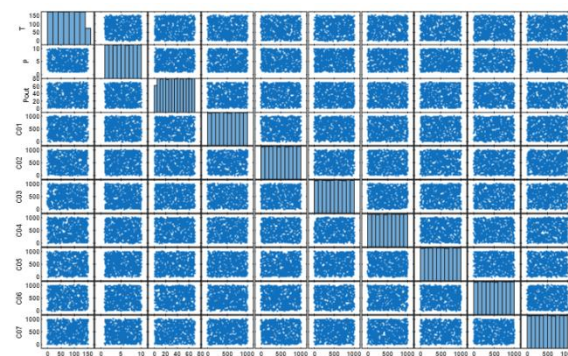


Figura 2. Variables de impacto para la simulación del proceso con 1000 escenarios.

Debe señalarse que si se introducen datos de entrada en la NN que excedan el rango considerado durante el entrenamiento, la red podría generar resultados incorrectos. En consecuencia, es indispensable tener presente el intervalo de validez de la NN al momento de realizar predicciones.

Tabla 1. Análisis estadístico de las variables de entrada y salida de la red neuronal para 943 variables en bombas.

		Máximo	Mínimo	Promedio	Desviación estándar
	Temperatura entrada (K)	423.15	273.22	348.15	43.32
	Presión entrada (bar)	9.99	1.01	5.50	2.60
	Presión de descarga bomba (bar)	69.95	1.02	35.50	19.93
	Flujo molar de agua (kmol/h)	999.00	1.66	500.51	288.54
	Flujo molar de metanol (kmol/h)	1000.00	1.79	500.48	288.55
	Flujo molar de etanol (kmol/h)	999.00	1.21	500.51	288.54
	Flujo molar de benceno (kmol/h)	999.08	1.54	500.50	288.53
	Flujo molar de glicerol (kmol/h)	999.21	1.93	500.50	288.53
	Flujo molar de etilenglicol (kmol/h)	999.50	1.65	500.51	288.52
Entradas	Flujo molar de dodecano (kmol/h)	999.00	1.29	500.49	288.54
	Flujo volumétrico (l/min)	1170033.53	1105.05	50409.64	142562.52
	NPSH disponible (m*kgf/kg)	117.23	-77.29	42.59	40.31
	Cabezal (m*kgf/kg)	175023.46	-2030.41	4474.32	15927.52
	Eficiencia	0.86	0.66	0.80	0.03
	Presión de salida (bar)	69.95	1.02	35.55	19.92
	Temperatura de Salida (K)	1038.47	273.7	366.76	83.04
	Cambio de presión (bar)	67.38	-7.49	30.05	20.10
	Potencia eléctrica (kW)	122617.35	-990.96	3398.67	11707.52
Salidas	Costo de instalación del equipo (USD)	698100.00	72700.00	346241.50	158309.65

Compresor

De manera similar para los compresores, se utilizó el mismo método de hipercubo latino para obtener un muestreo de datos homogéneo y con ello tener resultados de salida para distintos escenarios, por consiguiente, la red neuronal fue capaz de generar un mejor entrenamiento.

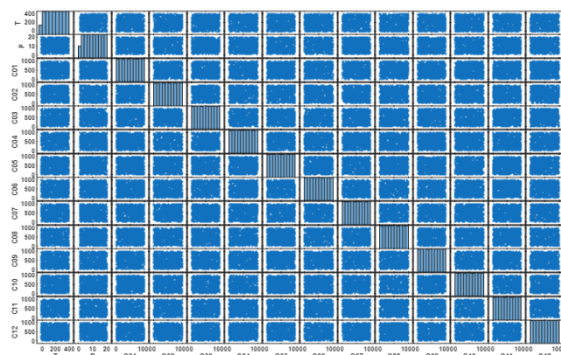


Figura 3. Variables de impacto para la simulación del proceso con 1000 escenarios.

Tabla 2. Análisis estadístico de las variables de entrada y salida de la red neuronal para 998 variables en el compresor.

		Máximo	Mínimo	Promedio	Desviación Estándar
	Temperatura del flash (K)	366.40	263.18	314.74	29.83
	Presión del flash (bar)	9.99	1.01	5.50	2.59
	Razón de compresión	4.00	1.01	2.50	0.87
	Flujo molar de hidrógeno (kmol/h)	999.43	1.12	500.39	288.94
	Flujo molar de nitrógeno (kmol/h)	999.58	1.90	499.38	288.88
	Flujo molar de metano (kmol/h)	999.12	1.71	500.14	288.38
	Flujo molar de etano (kmol/h)	999.74	1.92	501.43	287.72
	Flujo molar de propano (kmol/h)	999.68	1.56	500.38	288.86
	Flujo molar de amoníaco (kmol/h)	999.11	1.36	500.48	288.71
	Flujo molar de butano (kmol/h)	999.03	1.37	499.95	289.06
	Flujo molar de benceno (kmol/h)	999.40	1.22	500.57	288.78
Entradas	Flujo molar de tolueno (kmol/h)	999.88	1.55	501.11	288.86
	Trabajo Neto Requerido (KW)	10438.84	17.10	3074.63	1823.15
	Presión de salida (bar)	39.64	1.25	13.72	8.24
	Temperatura de Salida (K)	478.68	265.82	377.55	39.80
	Temperatura de salida isentrópica (K)	449.47	265.45	362.18	35.65
	Flujo molar Total (kmol/h)	6740.20	666.20	3367.15	958.08
	Flujo volumétrico total (l/min)	2781584.22	35342.94	393419.68	370961.69
Salidas	Costo de instalación del equipo (USD)	26420900.00	1201000.00	4298637.24	2906932.83

En la Tabla 2 se muestra el rango de valores que dispone la NN para las variables de entrada en el compresor con los cuales fue entrenada. Al igual que en el caso de las bombas, la NN será capaz de estimar costos dentro de los límites establecidos como máximos y mínimos.

Separador flash

Finalmente, se realizó un análisis similar para el caso del separador flash, la Figura 4 muestra la homogeneidad en los datos con los que se generaron de los distintos escenarios.

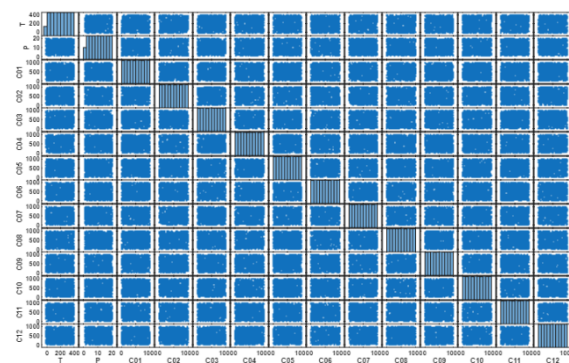


Figura 4. Variables de impacto para la simulación del proceso con 1000 escenarios.

De forma análoga, en la Tabla 3 se muestra el rango de las variables que se utilizaron para el separador flash, donde se muestran los límites de aplicabilidad de la NN para cada una de las variables de entrada.

Tabla 3. Análisis estadístico de las variables de entrada y salida de la red neuronal para 1000 variables en separador flash.

	Variables	Máximo	Mínimo	Promedio	Desviación Estándar
	Temperatura del flash (K)	572.96	266.43	418.15	89.53
	Presión del flash (bar)	20.00	1.01	10.50	5.49
	Flujo molar de hidrógeno (kmol/hr)	999.44	1.87	500.51	288.54
	Flujo molar de nitrógeno (kmol/hr)	999.21	1.14	500.49	288.54
	Flujo molar de metano (kmol/hr)	999.70	1.85	500.49	288.53
	Flujo molar de etano (kmol/hr)	999.68	1.81	500.50	288.53
	Flujo molar de propano (kmol/hr)	999.68	1.73	500.51	288.52
	Flujo molar de amoníaco (kmol/hr)	999.74	1.97	500.48	288.54
	Flujo molar de butano (kmol/hr)	999.02	1.10	500.51	288.55
	Flujo molar de benceno (kmol/hr)	999.93	1.07	500.51	288.54
	Flujo molar de tolueno (kmol/hr)	999.67	1.98	500.50	288.53
	Flujo molar de agua (kmol/hr)	999.32	1.95	500.50	288.54
	Flujo molar de decano (kmol/hr)	999.37	1.16	500.51	288.54
	Flujo molar de octano (kmol/hr)	999.24	1.84	500.50	288.54
	Flujo molar de gas (kmol/hr)	8827.81	421.53	4520.33	1771.38
	Flujo volumétrico gas (l/min)	3.993E+06	13015.82	447440.42	5.73E+05
	Flujo molar líquido (kmol/hr)	6561.63	0.00	1485.69	1627.41
Entradas	Flujo volumétrico del líquido (l/min)	11694.91	37.77	4927.69	2309.16
	Diámetro del tanque (m)	7.01	1.68	3.23	0.88
	Altura de tanque (m)	9.75	3.66	6.39	1.67
Salidas	Costo de instalación del equipo (USD)	973500.00	1.98E+05	424322.60	1.24E+05

Resultados del entramiento de la red neuronal

Se realizaron 20 iteraciones utilizando distintos subconjuntos de muestras de entrenamiento, con el objetivo de identificar la configuración óptima de la red. Este procedimiento permitió analizar la cantidad mínima de datos requerida por el modelo para realizar una estimación adecuada, considerando tanto el coeficiente de correlación como la dispersión entre los valores estimados y los datos reales.

Bombas

Para el caso de las bombas se tuvieron muestras de hasta 600 datos donde es posible observar que a partir de los 400 datos de muestreo se obtienen valores de predicción muy similares, sin embargo, el valor de 0.8929 de R^2 en 600 muestras no muestra la confiabilidad que se espera. En su defecto, podemos inferir que se necesitan de una mayor cantidad de muestras para tener una aproximación más certera.

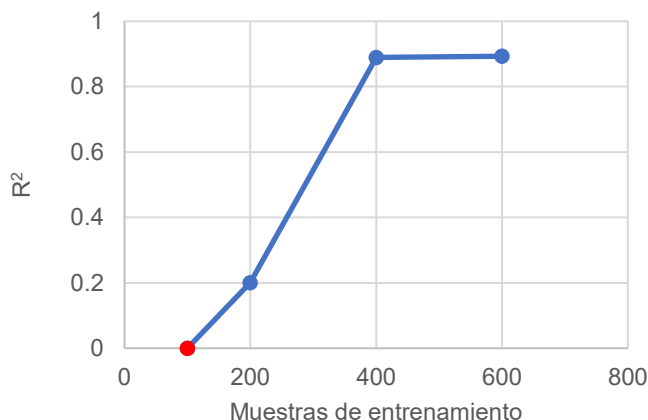


Figura 5. Gráfico de muestras de entrenamiento contra R^2 para una bomba.

La Figura 6 muestra la comparación entre los valores reales y los obtenidos mediante el modelo predictivo de 600 muestras. Aunque se logró un coeficiente de determinación de 0.8929, se observa una dispersión significativa en algunos puntos, lo que indica que el modelo presenta limitaciones en su capacidad de estimación. Idealmente, las predicciones deberían alinearse con la diagonal $y = x$, que representa una correspondencia perfecta entre los valores estimados y los reales. Estos resultados sugieren la necesidad de refinar el modelo para mejorar su ajuste.

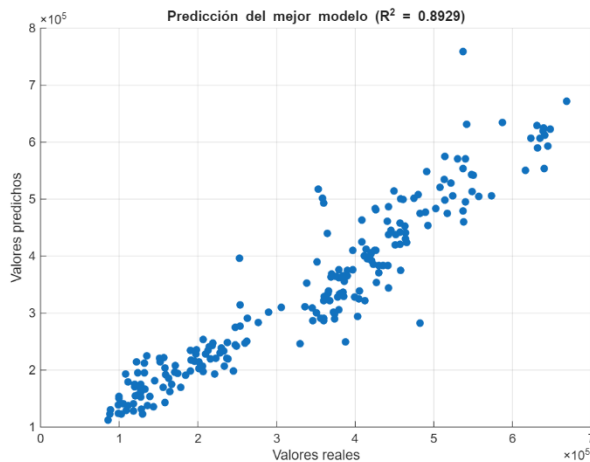


Figura 6. Comparación entre el valor real y el valor obtenido de la bomba.

Compresor

En el caso del compresor observamos en la figura muy buenos resultados a partir de 800 muestras, donde el valor de R^2 es de 0.9955, lo que garantiza buenas estimaciones en la NN para el rango de aplicabilidad establecido. Por lo anterior, a partir de 800 muestras se obtiene una buena predicción en el modelo.

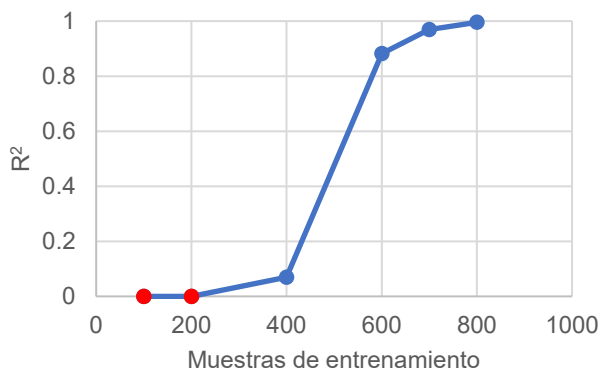


Figura 7. Gráfico de muestras de entrenamiento contra R^2 para un compresor

La Figura 8 presenta la comparación entre los valores reales y los obtenidos mediante el modelo predictivo utilizando un conjunto de 800 muestras. Con un coeficiente de determinación de $R^2=0.9955$, los datos predichos se alinean estrechamente con la diagonal $y = x$, lo que evidencia una alta precisión del modelo. Esta correspondencia sugiere que el enfoque empleado es capaz de reproducir con fidelidad el comportamiento del sistema bajo las condiciones evaluadas.

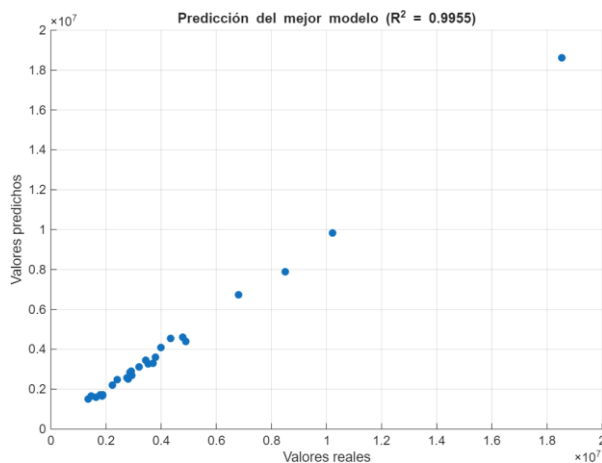


Figura 8. Comparación entre el valor real y el valor obtenido del compresor.

Separador flash

La Figura 7 muestra que el desempeño del separador flash mejora conforme aumenta el número de datos de entrenamiento. Con 800 muestras, se alcanza un R^2 de **0.9360**, lo que indica una buena capacidad predictiva, aunque aún existe margen para mejorar con más datos.

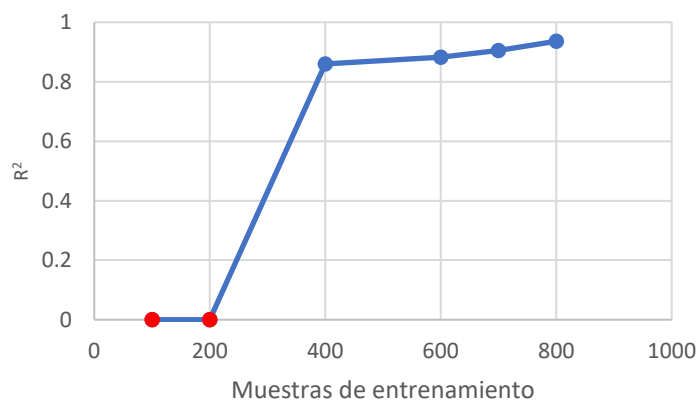


Figura 9. Gráfico de muestras de entrenamiento contra R^2 para un separador.

La Figura 10 ilustra la dispersión observada en los valores estimados sobre un conjunto de 800 muestras. Si bien el modelo presenta un desempeño aceptable, se identifica un margen claro de mejora en términos de correlación y ajuste. Por ello, se propone incrementar el número de muestras para evaluar si una mayor cantidad de datos contribuye a reducir la dispersión y mejorar el coeficiente de correlación.

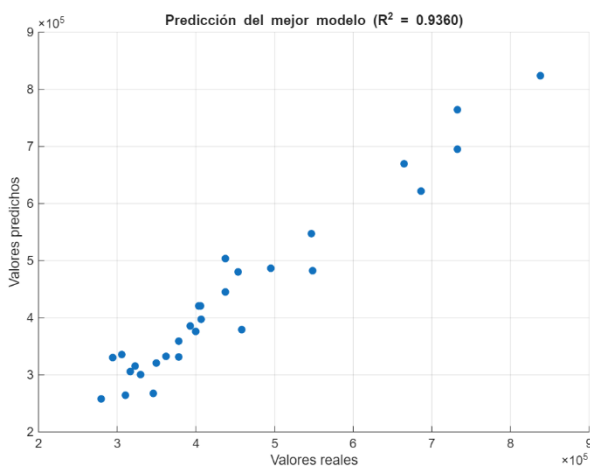


Figura 10. Comparación entre el valor real y el valor obtenido del separador.

Conclusión

Este trabajo demostró la factibilidad de utilizar redes neuronales artificiales como herramienta predictiva para estimar los costos de instalación de equipos de procesos químicos, a partir de variables operativas y de diseño generadas mediante simulaciones en AP y APEA. Este enfoque representa una alternativa moderna frente a los métodos tradicionales de estimación, especialmente en etapas tempranas de diseño donde no se dispone de información detallada.

Los resultados obtenidos indican que la calidad de las predicciones está fuertemente influenciada por la cantidad y diversidad de los datos de entrenamiento. En particular, el modelo aplicado al compresor mostró una alta precisión con un coeficiente de determinación (R^2) de 0.9955 utilizando 800 muestras, superando ampliamente los resultados obtenidos para bombas y separadores flash. Este comportamiento confirma que el enfoque de muestreo mediante hipercubo latino proporciona una cobertura adecuada del espacio de entrada, favoreciendo el entrenamiento robusto de la red.

Asimismo, se evidenció que el desempeño del modelo puede variar significativamente según el tipo de equipo, debido a la complejidad de las variables involucradas y la sensibilidad del modelo económico a los parámetros de entrada. En el caso de las bombas, si bien se alcanzó un R^2 de 0.8929, el nivel de dispersión en las predicciones sugiere que se requieren más muestras o una posible reconfiguración de la arquitectura para mejorar su desempeño. Para el separador flash, el modelo presentó un buen ajuste ($R^2 = 0.9360$), aunque se identificó un margen de mejora ampliando el conjunto de datos.

El análisis estadístico de las variables utilizadas permitió establecer claramente los rangos de aplicabilidad de cada modelo entrenado. Se concluye que las redes neuronales ofrecen una herramienta eficiente para la estimación de costos en función de parámetros de proceso, respetando los límites y se garantiza la calidad de los datos utilizados para el entrenamiento.

Por tanto, este estudio evidencia el potencial de integrar inteligencia artificial con simuladores de procesos para mejorar la toma de decisiones en ingeniería de procesos, especialmente cuando se requiere evaluar económicamente múltiples configuraciones de diseño. Como trabajo futuro, se considera ampliar el número de muestras, evaluar otras arquitecturas de redes, y explorar técnicas de optimización automática para robustecer más la capacidad predictiva del modelo de la red neuronal.

Referencias/Bibliografías

- [1] Alhajeri, M. S., Luo, J., Wu, Z., Albalawi, F., & Christofides, P. D. (2022). Process structure-based recurrent neural network modeling for predictive control: A comparative study. *Chemical Engineering Research and Design*, 179, 77–89. doi: 10.1016/j.cherd.2021.12.046.
- [2] Wu, Z., Luo, J., Rincon, D., & Christofides, P. D. (2021). Machine learning-based predictive control using noisy data: evaluating performance and robustness via a large-scale process simulator. *Chemical Engineering Research and Design*, 168, 275–287. doi: 10.1016/j.cherd.2021.02.011.
- [3] Jonathan Alexander (2025). Use of AI in Chemical Manufacturing. *Chemical Engineering*, 23–29.
- [4] Towler, G., & Sinnott, R. (2022). Capital cost estimating. *Chemical Engineering Design*, Elsevier, 239–278. doi: 10.1016/B978-0-12-821179-3.00007-8.
- [5] Turton, R., & Shaeiwitz, J. A. (2018). Estimation of capital costs. *Analysis synthesis and design of chemical processes*, 5th ed., 206–208.