Naturaleza y TECNOLOGÍA
Número Especial "Pasado, presente y futuro del PSE y sus aplicaciones"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

EVOLUCIÓN DE LA INGENIERÍA DE SISTEMAS DE PROCESOS

Nadia R. Osornio-Rubio [a] y Vicente Rico-Ramírez [a,*]

[a] Tecnológico Nacional de México en Celaya, Grupo de Investigación OMEGA PB&S, Departamento de Ingeniería Química, Av. Tecnológico y García Cubas S/N, Celaya, Gto., México, 38010
vicente@iqcelaya.itc.mx

Resumen

La Ingeniería de Sistemas de Procesos (*Process Systems Engineering*, PSE) ha evolucionado desde un enfoque inicialmente centrado en el modelado, simulación y control de operaciones unitarias dentro de la ingeniería química, hasta consolidarse como una disciplina estratégica, interdisciplinaria y orientada a la solución de problemas complejos de relevancia global. Este artículo presenta una revisión histórica y conceptual de dicha evolución, destacando cómo el enfoque de sistemas ha permitido ampliar el alcance de PSE desde el diseño de procesos químicos convencionales hacia aplicaciones complejas en energía, medio ambiente, procesamiento y sostenibilidad. Se describe el desarrollo de las temáticas de interés (control de procesos, optimización dinámica, integración energética, análisis de ciclo de vida) y las herramientas fundamentales (programación matemática, teoría de control óptimo, programación estocástica, optimización multiobjetivo y técnicas metaheurísticas) durante las décadas de 1990 y 2000, las cuales ampliaron significativamente las capacidades analíticas y de diseño de la disciplina. Posteriormente, se analiza la transformación ocurrida desde 2010, impulsada por desafíos globales como el cambio climático, la escasez de agua, la transición energética, la seguridad alimentaria y la digitalización industrial (motivación para la creación de la agenda 2030 del desarrollo sostenible). En este contexto, emergen nuevas áreas de aplicación (como la intensificación de procesos, sistemas energéticos integrados, sistemas de captura de CO_2, gestión eficiente del agua, biocombustibles, nexo agua-energía-alimentos, solventes verdes, economía circular y la *enterprise-wide optimization*), y nuevas herramientas numéricas y conceptuales (teoría de juegos, optimización basada en datos y aprendizaje automático). El trabajo muestra que la evolución reciente de PSE refleja una transición desde la optimización de procesos individuales hacia el diseño de sistemas complejos, resilientes y sostenibles, integrando inteligencia artificial, ciencia de datos y herramientas computacionales avanzadas. Finalmente, se concluye que la PSE representa una plataforma metodológica esencial para enfrentar los retos contemporáneos del desarrollo sostenible, al proporcionar

un marco sistémico que permite analizar interacciones entre recursos, procesos y actores, y diseñar soluciones innovadoras orientadas a la sostenibilidad industrial y social.

Palabras clave: Ingeniería de Sistemas de Procesos, Modelado, Optimización, Simulación, Programación Matemática, Sostenibilidad, Inteligencia Artificial, Ciencia de Datos.

HISTORICAL DEVELOPMENT OF PROCESS SYSTEMS ENGINEERING

Abstract

Process Systems Engineering (PSE) has evolved from an approach initially focused on the modeling, simulation, and control of unit operations within chemical engineering to becoming a strategic, interdisciplinary discipline aimed at addressing complex problems of global relevance. This article presents a historical and conceptual review of this evolution, highlighting how the systems approach has expanded the scope of PSE from the design of conventional chemical processes to complex applications in energy, environmental systems, processing, and sustainability. The development of major research topics (including process control, dynamic optimization, energy integration, and life cycle assessment) as well as foundational methodological tools such as mathematical programming, optimal control theory, stochastic programming, multi-objective optimization, and metaheuristic techniques during the 1990s and 2000s is described, emphasizing how these advances significantly enhanced the analytical and design capabilities of the discipline. Subsequently, the transformation that has taken place since 2010 is examined, driven by global challenges such as climate change, water scarcity, energy transition, food security, and industrial digitalization, which also motivated the establishment of the 2030 Agenda for Sustainable Development. Within this context, new application areas have emerged, including process intensification, integrated energy systems, CO_2 capture systems, efficient water management, biofuels, the water-energy-food nexus, green solvents, circular economy, and enterprise-wide optimization, alongside new numerical and conceptual tools such as game theory, data-driven optimization, and machine learning. This work demonstrates that the recent evolution of PSE reflects a transition from the optimization of individual processes toward the design of complex, resilient, and sustainable systems, integrating artificial intelligence, data science, and advanced computational tools. Finally, it is concluded that PSE represents an essential methodological platform for addressing the contemporary challenges of sustainable development by providing a systemic framework capable of analyzing interactions among resources, processes, and

stakeholders, while enabling the design of innovative solutions oriented towards industrial and societal sustainability.

Keywords: Process Systems Engineering, Modeling, Optimization, Simulation, Mathematical Programming, Sustainability, Artificial Intelligence, Data Science.

1. Introducción. La Ingeniería de Sistemas de Procesos

El término de Ingeniería de Sistemas de Procesos proviene directamente de su nombre en inglés, Process Systems Engineering, PSE. Aunque diversas aplicaciones de esta área se remontan hasta los orígenes de la industria química de mediados del siglo XIX (Stephanopoulos y Reklaitis, 2011), dicho término se hizo oficial en 1982, en la primera Conferencia de Ingeniería de Sistemas de Procesos realizada en Tokyo en dicho año (Pistikopoulos y col., 2021).

1.1 La definición de PSE y sus inicios

De acuerdo con Sargent, uno de los líderes mundiales de esta área en el siglo XX, la ingeniería de sistemas de procesos es todo aquello relacionado con el modelado, la simulación y el control de procesos (Grossmann y Westerberg, 2000). Como se muestra en la Figura 1, Sargent distinguía el hecho de que, en estas actividades, una alternativa es usar modelos matemáticos complejos, cuya estructura puede utilizarse para encontrar la solución a los problemas en la práctica; pero, por otro lado, también se puede apelar a la intuición física que la experiencia puede aportar y aprovechar tal experiencia para obtener soluciones rápidas.

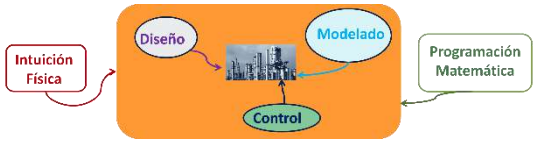


Figura 1. Concepción original de la Ingeniería de Procesos

A todas las herramientas matemáticas y de software involucradas en estas tareas se les comenzó a reconocer como herramientas de ingeniería de sistemas de procesos o PSE *techniques*.

A mediados del siglo XX, las aplicaciones de PSE se concentraban en el diseño y optimización de operaciones unitarias básicas, como separadores o reactores químicos, en los que para el diseño se aplicaban los conceptos fundamentales de la ingeniería química, como balances de

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

energía, fenómenos de transporte, cinética química o termodinámica. Sin embargo, los alcances del área de PSE comenzaron a extenderse de forma significativa en las dos últimas décadas del siglo pasado. Fue claro que otras áreas de la ingeniería, como la industria farmacéutica, la industria de los alimentos, la industria petroquímica, la industria minera, etc., utilizaban el mismo tipo de conceptos básicos, de forma que las mismas herramientas de PSE comenzaron a ser útiles en una diversidad de aplicaciones en las áreas mencionadas.

Dado lo anterior, en la actualidad, la definición de la ingeniería de sistemas de procesos se ha ampliado, al considerar, por ejemplo, a los i) sistemas de manufactura para la producción de bienes consumibles (como ropa, alimentos, etc., ii) procesos y productos de diagnóstico y terapéuticos para el tratamiento de enfermedades, iii) sistemas de producción, distribución y consumo de energía y iv) sistemas que aseguran la calidad del ambiente en que viven humanos y plantas (Pistikopoulos y col., 2021). Así, una definición más amplia de PSE establece que es una rama especializada de la Ingeniería Química enfocada en el análisis, diseño, modelado, optimización, control e integración de procesos físicos, químicos y biotecnológicos, mediante el empleo de fundamentos matemáticos, computacionales y termodinámicos (Seider y col., 2017; Smith, 2016).

1.2 PSE y su Impacto en el Diseño de Procesos

De acuerdo con Pistikopoulos y col. (2021), hay dos opciones básicas para sintetizar un producto y diseñar su proceso de fabricación. Dichas opciones se muestran en la Figura 2.

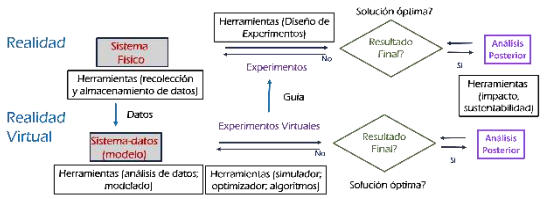


Figura 2. Dos opciones para el diseño de un proceso

Una de ellas está basada en el trabajo experimental, en el que se crea un prototipo que es un sistema físico real, con el cual se pueden realizar experimentos para determinar las condiciones que generan un resultado deseado en dichas actividades. Pero, por otra parte, en paralelo, está la oportunidad que brinda PSE, en la que, a través del modelado matemático y la simulación, se puede crear un prototipo virtual del modelo, con el cual se pueden simular diversos experimentos con la misma finalidad de establecer las condiciones

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

que llevan al producto deseado. No obstante, ambas opciones no tienen por qué estar separadas, sino por el contrario, deben ser complementarias. Los cientos de experimentos numéricos que se pueden realizar en un entorno computacional con el modelo pueden establecer las bases para definir de forma adecuada los experimentos físicos que lleven a la mejora del sistema físico. A la vez, los datos del sistema físico con cada corrida experimental pueden servir para mejorar sucesivamente el modelo. Tal situación ejemplifica claramente el apoyo que PSE como disciplina de la ingeniería química puede aportar a la solución práctica de problemas.

1.3 Los niveles de PSE

Conforme los retos dados por la no linealidad de los sistemas, la digitalización y los desafíos del desarrollo sostenible se han incrementado, el área de PSE ha tenido también que evolucionar con la finalidad de, como objetivo final, se pueda contribuir a resolver los problemas sociales.

La Figura 3 muestra los tres niveles de desarrollo que se tienen en PSE discutidos por Gani y col. (2020).

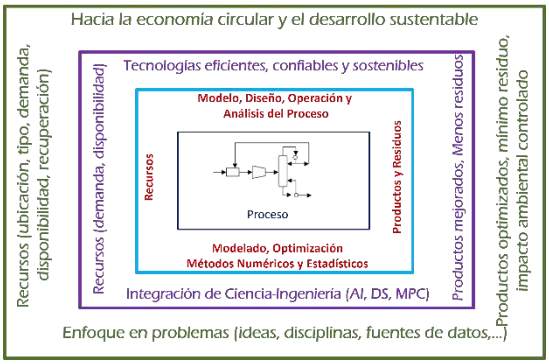


Figura 3. Los tres niveles de desarrollo de la ingeniería de sistemas de procesos.

El primer nivel es el nivel fundamental concebido por los primeros investigadores en esta área. En ese nivel, Se utilizan herramientas de modelado y optimización, así como métodos numéricos con la finalidad de diseñar y analizar operaciones unitarias o procesos de la industria química y de otras ramas. Para ello se consideró generalmente una disponibilidad suficiente de recursos, a fin de obtener los productos deseados.

Sin embargo, conforme se ha hecho más importante la disponibilidad limitada de recursos, así como la necesidad de productos de mayor calidad y con una menor generación de desechos y efluentes, las técnicas convencionales de PSE evolucionaron a un segundo nivel, en el que se combinaron con tecnología y herramientas cada más más robustas desde el punto de vista computacional. De esta forma, es cada vez

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

más común que se utilicen estrategias híbridas entre las técnicas PSE convencionales con inteligencia artificial, ciencia de datos o control predictivo basado en modelos. Ello con el objetivo de diseñar procesos cada vez más robustos, eficientes y sostenibles. En la actualidad, la mayoría de las aplicaciones reportadas de PSE en la literatura científica se encuentran en este nivel.

El tercer nivel, sin embargo, es el nivel más deseable, pues es el que finalmente conduce a la solución de problemas sociales, que guíen hacia la economía circular y los objetivos del desarrollo sostenible. Para ello, ante las restricciones más estrictas sobre la disponibilidad de los recursos, y las demandas cada vez mayores de los productos y servicios, y en un entorno que requiere productos y procesos con un mínimo de desechos y residuos, y un mínimo impacto ambiental, las técnicas y herramientas de PSE no serán suficientes. Se requiere de un enfoque multidisciplinario y multidimensional en el que participen diversos actores que generen ideas y las políticas públicas y criterios económicos que lleven a la solución de los problemas sociales.

En resumen, la ingeniería de sistemas de procesos desempeña un papel estratégico en el desarrollo de tecnologías para la industria química, alimentaria, farmacéutica, petroquímica, de materiales y energética, y contribuye de forma significativa a la transición hacia procesos industriales digitalizados, sostenibles y resilientes. Por otro lado, integra temas relacionados con la descarbonización industrial, la economía circular, la eficiencia energética, y el control avanzado, en línea con los retos de la competitividad tecnológica y la sostenibilidad.

1.4 El Enfoque de Sistemas

En el área de ingeniería de sistemas de procesos, un concepto que no debe de pasar percibido es el relacionado con la palabra sistemas. El enfoque de sistemas en ingeniería es una perspectiva interdisciplinaria y holística para analizar, diseñar y gestionar sistemas complejos, considerando integralmente sus componentes, interacciones, restricciones, ciclo de vida y objetivos globales, en lugar de abordar cada elemento de manera aislada (Fiskel, 1985; Grossmann y Westerberg, 2000).

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

Es dicho enfoque de sistemas lo que da a PSE la flexibilidad de abordar problemas de gran diversidad en términos de escalas y tipo de aplicación. En ese sentido, lo importante es definir las fronteras del sistema y los componentes principales que lo conforman. Así, el sistema puede ser el sistema circulatorio y los tejidos profundos de un órgano para estudiar la difusión de un medicamento en el organismo; pero también puede ser un sistema macroscópico, como un país entero en el que se estudien sus cadenas de suministro globales o la producción y distribución de energía eléctrica a través de las líneas de transmisión del país entero; o bien, incluso, el sistema puede ser un modelo compartimental del mundo, en el que modelos desarrollados por la teoría de sostenibilidad intenten estudiar las interacciones entre los componentes principales (un modelo ecológico que incluye compartimentos humanos, herbívoros, carnívoros, industria, energía, agua, etc.) así como el uso de los recursos y la disposición de los desechos.

Resumiendo, el enfoque de sistemas favorece el desarrollo de soluciones más eficientes, robustas e innovadoras, capaces de equilibrar criterios técnicos, económicos, ambientales y sociales (Grossmann y Harjunkoski, 2019). En un contexto donde la sostenibilidad y la transformación tecnológica son desafíos prioritarios para la ingeniería química, adoptar este enfoque no solo mejora la toma de decisiones y la capacidad de resolver problemas reales, sino que también impulsa la creación de procesos más inteligentes, resilientes y orientados al desarrollo sostenible.

2. La Evolución de la Ingeniería de Sistemas de Procesos

La Ingeniería de Sistemas de Procesos ha evolucionado desde un área enfocada en el diseño y análisis de equipos simples y operaciones unitarias fundamentales hasta una disciplina altamente integrada, digital, interdisciplinaria y estratégica. En esta sección se describirá lo que, desde la perspectiva de estos autores, ha sido la evolución de esta área de trabajo en las últimas décadas en México y en el mundo. Se mencionan no sólo los distintos tópicos generales que centraron la atención de la comunidad científica, sino también algunas herramientas teóricas o de modelado que dieron fundamento a muchos de los desarrollos que han surgido en la ingeniería de sistemas de procesos.

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

2.1 Década de 1990-2000

Luego del nacimiento formal del área de PSE con la Conferencia de Tokyo en 1982 y ante el rápido desarrollo de herramientas computacionales, en esta década se dejó de estudiar únicamente operaciones unitarias aisladas para analizar sistemas interconectados. Se consolidó el desarrollo de sistemas de simulación de procesos como Aspen Plus, HYSYS y CHEMCAD.

Con ello, la atención se centró en reproducir el comportamiento de plantas químicas completas. Asimismo, comenzó a desarrollarse de forma importante la programación matemática. Los temas preponderantes y las herramientas conceptuales y teóricas abordadas y utilizadas entre la comunidad de PSE se describen a continuación.

2.1.1 Control de Procesos

En la década de 1990, el control de procesos dentro de la ingeniería química experimentó una transformación importante, pasando de esquemas tradicionales centrados principalmente en controladores PID hacia metodologías más sofisticadas apoyadas en modelos matemáticos y técnicas de control multivariable. Este avance fue favorecido por el incremento en la capacidad de cómputo y el desarrollo de la teoría de control no lineal, así como por las crecientes demandas de la industria para operar procesos más complejos, integrados y eficientes, manteniendo altos estándares de seguridad y calidad. En este contexto, el control predictivo basado en modelos (*Model Predictive Control*, MPC) adquirió gran relevancia como una herramienta capaz de anticipar el comportamiento dinámico de los procesos y optimizar su operación. Paralelamente, cobró fuerza la visión de control integral de planta (*Plant-Wide control*), que reconocía la necesidad de considerar las interacciones entre distintas unidades del proceso para lograr un desempeño global óptimo. Aportes representativos incluyen el trabajo de Skogestad (1997) y el trabajo de Downs y Vogel (1993), quienes con el Tennessee Eastman Process, se convirtieron en referentes para el desarrollo y evaluación de estrategias avanzadas de control, influyendo de manera decisiva en la evolución de la ingeniería de sistemas de procesos.

2.1.2 Sistemas de Separación Térmicamente Acoplados

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

Los sistemas de destilación térmicamente acoplados cobraron un interés creciente dentro de la PSE como una alternativa innovadora para mejorar la eficiencia energética de los procesos de separación, tradicionalmente reconocidos por su alto consumo de energía. A partir de los fundamentos establecidos en décadas previas sobre configuraciones tipo Petlyuk y secuencias de destilación integradas, la investigación de este periodo se enfocó en el análisis sistemático, la síntesis y la optimización de configuraciones para separaciones multicomponente más complejas. A manera de ejemplo, el trabajo de Agrawal (1996) muestra el desarrollo conceptual al proponer metodologías estructuradas para generar configuraciones de columnas de destilación más eficientes, considerando la integración térmica y la reducción de irreversibilidades del proceso. Durante esta etapa también comenzaron a identificarse con mayor claridad los retos asociados a la implementación industrial de estos sistemas, especialmente en materia de control, operabilidad y complejidad de diseño, aspectos que posteriormente motivarían el desarrollo de configuraciones más viables, como las columnas con pared divisoria (*dividing wall columns*).

2.1.3 El Control Óptimo

La optimización de sistemas dinámicos, como los sistemas reacción por lotes, mediante teoría de control óptimo se convirtió en una herramienta fundamental en el área de PSE. El incremento en la capacidad computacional permitió la aplicación más efectiva de técnicas de optimización dinámica para determinar políticas operativas óptimas relacionadas con variables dependientes del tiempo. En este contexto, los aportes en el desarrollo de estrategias simultáneas para la optimización de sistemas diferenciales-algebraicos complejos, contribuyeron significativamente al avance metodológico del área durante esta década. Estas herramientas permitieron transitar de esquemas de operación predominantemente empíricos hacia enfoques sistemáticos basados en modelos matemáticos rigurosos, sentando las bases para el desarrollo posterior de la optimización en tiempo real y el control avanzado de procesos por lotes en industrias como la química y farmacéutica.

2.1.4 El Diseño de Redes de Intercambio de Calor

El diseño de redes de intercambio de calor cobró auge impulsado por la creciente necesidad de mejorar la eficiencia energética

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

y reducir costos operativos en los procesos industriales. Aunque los fundamentos del análisis de punto de pliegue habían sido establecidos en la década anterior, en los años noventa el enfoque se amplió hacia metodologías más rigurosas de optimización matemática que permitieron abordar simultáneamente decisiones estructurales y operativas en el diseño de redes térmicas más complejas. En este periodo, la integración de técnicas de programación mixta-entera no lineal facilitó la síntesis sistemática de redes de intercambio de calor con criterios económicos y energéticos más realistas. En esta temática, Yee y Grossmann (1990) propusieron una formulación basada en superestructuras para la optimización simultánea del diseño de redes de intercambio de calor, sentando una base metodológica ampliamente utilizada y desarrollada en investigaciones posteriores dentro de la ingeniería de sistemas de procesos.

2.1.5 Nace la Intensificación de Procesos: Sistemas de Destilación Reactiva

La intensificación de procesos comenzó a consolidarse como una estrategia orientada a integrar múltiples operaciones unitarias en un mismo sistema con el fin de mejorar la eficiencia energética, reducir costos y simplificar configuraciones de proceso. En este contexto, la destilación reactiva emergió como una de las tecnologías más representativas, al combinar simultáneamente reacción química y separación en una sola unidad de operación, permitiendo desplazar equilibrios químicos, incrementar conversiones y disminuir requerimientos energéticos frente a esquemas convencionales. Durante este periodo, la investigación se enfocó en comprender los fundamentos termodinámicos, cinéticos y de diseño de estos sistemas altamente acoplados, lo que permitió su transición desde aplicaciones industriales específicas hacia un área formal de investigación en ingeniería de sistemas de procesos. Un referente fundamental de esta etapa fue el trabajo de Doherty y Buzad (1992), que contribuyó significativamente al desarrollo conceptual y metodológico del diseño de columnas de destilación reactiva, sentando bases para el posterior crecimiento de la intensificación de procesos.

2.1.6 La Programación Mixta-Entera

Como parte de la programación matemática, la programación mixta-entera (*Mixed-Integer Programming*, MIP) evidentemente no es un

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

tópico particular que se haya explorado en PSE, sino que se trata de una herramienta matemática y de modelado. Sin embargo, se destaca en esta sección porque esa herramienta representó un cambio de paradigma de modelado que permitió la solución de un número importante de aplicaciones que involucraban la toma de decisiones en sistemas complejos. Esta herramienta permitió abordar problemas de optimización que combinaban variables continuas y discretas, como el diseño de procesos basado en superestructura, la síntesis de redes de intercambio de calor, la planeación de producción, la logística, la calendarización y la integración de procesos. Este crecimiento fue impulsado tanto por los avances en algoritmos computacionales como por el incremento en la capacidad de procesamiento, lo que permitió resolver problemas de mayor escala y complejidad con una precisión antes difícilmente alcanzable. En particular, la incorporación de formulaciones mixto-enteras no lineales (MINLP) amplió significativamente las posibilidades de modelar decisiones estructurales y operativas de manera simultánea, aspecto crucial en la ingeniería de sistemas de procesos. En este contexto, trabajos como los de Grossmann y Kravanja (1997) se convirtieron en referentes al sistematizar el uso de estas metodologías para el diseño y síntesis óptima de procesos, sentando bases metodológicas que marcaron el desarrollo posterior de la optimización de procesos químicos.

2.1.7 Los Sistemas de Cogeneración

Los sistemas de cogeneración y, en menor medida, de trigeneración, comenzaron a consolidarse como estrategias clave para mejorar la eficiencia energética en procesos industriales mediante el aprovechamiento simultáneo de diferentes formas de energía a partir de una misma fuente primaria. La cogeneración, orientada a la producción conjunta de electricidad y energía térmica útil, ganó especial relevancia en industrias de proceso debido a su capacidad para incrementar significativamente la eficiencia global de conversión energética frente a los esquemas convencionales de generación separada. Hacia finales de esta década, la evolución de estas tecnologías y la creciente preocupación por la eficiencia energética y la sostenibilidad impulsaron el desarrollo de configuraciones más integradas, dando paso al concepto de trigeneración, que incorporó además la producción de energía de enfriamiento mediante sistemas de

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

refrigeración por absorción. Como trabajo representativo, Horlock (1997) sistematizó los principios termodinámicos y el potencial de los sistemas de cogeneración, sentando bases conceptuales para el posterior desarrollo de sistemas energéticos integrados dentro de la ingeniería de procesos.

Los desarrollos anteriores de la Década de 1990-2000 comenzaban a sentar las bases para el desarrollo de procesos cada vez más robustos, integrados y preocupados por el ambiente y el uso eficiente de recursos. Dichas problemáticas se convirtieron en pilares para la década siguiente.

2.2 Década de 2000-2010

En esta etapa comienzan a utilizarse de forma extensiva herramientas teóricas, como la optimización multiobjetivo y la programación estocástica, que incrementan de forma importante los alcances de PSE. Asimismo, la preocupación creciente por los objetivos ambientales y la sostenibilidad comienzan a generar aplicaciones como el análisis de ciclo de vida y las cadenas de suministro. Por otra parte, se consolidan herramientas de software de optimización como GAMS (con los resolvedores CONOPT, BARON, SBB), y de modelado como gPROMS y Matlab, mientras que el simulador AspenPlus adquiere un grado importante de desarrollo. El resumen de las temáticas y herramientas significativas en este atapa se describen a continuación.

2.2.1 Análisis de Ciclo de Vida (Life Cycle Analysis, LCA)

En este periodo, el LCA cambió de ser una metodología predominantemente enfocada en evaluación ambiental hacia una herramienta estratégica para el diseño sostenible de procesos, integrándose con la optimización de procesos, el ecodiseño y la toma de decisiones en ingeniería. La formalización metodológica impulsada por las normas ISO 14040 y 14044 favoreció su adopción más amplia tanto en la academia como en la industria, mientras que el desarrollo de bases de datos especializadas y software de simulación facilitó aplicaciones más robustas y comparativas. Finnveden y col. (2009) discutieron el estado del arte, los avances metodológicos y los principales desafíos del análisis de ciclo de vida en las áreas de ingeniería.

2.2.2 Seguridad de Procesos

En el área de seguridad de procesos, en este periodo se migró hacia una visión basada en la gestión sistemática de riesgos, el diseño

inherentemente seguro y la prevención de eventos catastróficos. En este periodo cobraron mayor relevancia metodologías como el análisis de capas de protección (*Layer Of Protection Analysis*, LOPA), el análisis cuantitativo de riesgos y la incorporación de factores humanos y organizacionales en la prevención de accidentes mayores. Eventos industriales de alto impacto, como la explosión de la refinería de Texas City en 2005, reforzaron la necesidad de fortalecer la cultura de seguridad y la gestión de riesgos operacionales en la industria química. Como una ilustración, Khan y Amyotte (2003) impulsaron el enfoque de diseño inherentemente seguro como una estrategia proactiva para reducir riesgos desde las etapas tempranas del diseño de procesos.

2.2.3 Integración de Redes de Agua

Si bien los fundamentos del reúso y reciclaje de agua habían surgido en la década previa mediante enfoques del punto de pliegue y análisis fuente-sumidero, en este periodo el área de integración de redes de agua involucró metodologías más rigurosas basadas en programación matemática, integración por propiedades y síntesis de redes complejas que consideraban simultáneamente restricciones de calidad, costo, tratamiento e incertidumbre operativa. Por ejemplo, El-Halwagi y col. (2003) desarrollaron metodologías rigurosas para el diseño de redes de reciclaje y reúso de materiales, aportando bases conceptuales que influyeron directamente en el desarrollo de redes de agua dentro de la ingeniería de procesos sostenibles.

2.2.4 Planeación y Calendarización

Las áreas de planeación y calendarización en ingeniería química experimentaron una expansión significativa hacia modelos integrados de planeación táctica y estratégica que incorporaban producción, inventarios, distribución y coordinación con la cadena de suministro (Biegler y col., 1997). En este periodo, la investigación se enfocó en integrar decisiones de distintos horizontes temporales y niveles jerárquicos, fortaleciendo la conexión entre planeación, calendarización y optimización empresarial (Méndez y col., 2006).

2.2.5 Cadenas de Suministro

Impulsada por la globalización de mercados, la creciente complejidad logística y la necesidad de integrar decisiones de sostenibilidad dentro de un mismo marco de

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

análisis, el diseño de cadenas de suministro se convirtió en un tópico importante en el área de PSE. Se desarrollaron formulaciones basadas en programación matemática, capaces de considerar incertidumbre, múltiples periodos de planeación, localización de instalaciones, integración energética y objetivos ambientales. Este desarrollo permitió extender la optimización más allá de los límites de la planta individual para abarcar cadenas completas de valor, incluyendo biorefinerías, cadenas de suministro energéticas y redes de manufactura sustentable (Bowling, y col., 2010).

Por otra parte, en esta década se favoreció el desarrollo de técnicas numéricas y matemáticas que incrementaron de manera notable las capacidades de PSE en la ingeniería química. Las más importantes se *describen a continuación.*

2.2.6 Programación Estocástica

La programación estocástica es un área de la programación matemática diseñada para apoyar la toma de decisiones cuando existen parámetros inciertos (por ejemplo, demanda, precios, disponibilidad de materias primas o fallas operativas), modelando dicha incertidumbre mediante variables aleatorias y escenarios probabilísticos. A diferencia de la optimización determinista, donde se asume el conocimiento de los datos, la programación estocástica busca soluciones que sean factibles y eficientes frente a múltiples realizaciones posibles de la incertidumbre, típicamente mediante formulaciones de dos etapas, multietapa o restricciones probabilísticas (*chance constraint*).

En la década de 2000-2010, sobresalieron los modelos de programación estocástica de dos etapas con recurso, útiles para decisiones estratégicas seguidas de acciones correctivas una vez revelada la incertidumbre. Estas herramientas impactaron significativamente aplicaciones como la planeación de capacidad y optimización de sistemas integrados de energía, marcando la transición desde enfoques deterministas hacia metodologías explícitamente orientadas al manejo del riesgo y la incertidumbre (Sahinidis, 2004; Shapiro, 2007). Múltiples problemas de planeación, como aquellas orientadas a la explotación y producción en campos petroleros, fueron abordados con esta metodología.

2.2.7 Optimización Multiobjetivo

La optimización multiobjetivo facilita la toma de decisiones cuando deben satisfacerse

simultáneamente dos o más objetivos que, con frecuencia, son conflictivos entre sí, como minimizar costos, maximizar rendimiento, reducir emisiones ambientales o mejorar seguridad operativa. En lugar de producir una única solución óptima, este enfoque genera un conjunto de soluciones eficientes o óptimos de Pareto, en los cuales no es posible mejorar un objetivo sin deteriorar al menos otro. En PSE, esta metodología resulta especialmente valiosa porque los sistemas de procesos suelen requerir balances entre desempeño económico, técnico, energético y ambiental (Bhaskar y col., 2000). Se fortalecieron enfoques matemáticos deterministas como los métodos de *ε-constraint* y las sumas ponderadas, ampliamente utilizados cuando se buscaban soluciones estructuradas con mayor rigor analítico. Asimismo, la integración de criterios de sostenibilidad impulsó aplicaciones multiobjetivo en diseño con ecoindicadores, análisis energético y minimización de impacto ambiental, marcando una transición desde la optimización centrada exclusivamente en costos hacia enfoques de decisión más integrales y sustentables (Masuduzzaman y Rangaiah, 2009).

2.2.8 Técnicas Metaheurísticas

Las técnicas metaheurísticas son estrategias algorítmicas generales de optimización diseñadas para encontrar soluciones óptimas a problemas complejos, particularmente aquellos no lineales, no convexos, multimodales o de gran escala, donde los métodos exactos tradicionales no resultan computacionalmente viables. A diferencia de los algoritmos deterministas, las metaheurísticas incorporan mecanismos probabilísticos o inspirados en fenómenos naturales para explorar eficientemente el espacio de búsqueda y equilibrar la exploración global con la explotación local. Con ello es posible aproximare a soluciones de alta calidad sin garantizar necesariamente el óptimo global. Entre las técnicas metaheurísticas más utilizadas en el área de PSE se pueden mencionar a la programación genética, la evolución diferencial, las búsquedas Tabú, la técnica basada en las colonias de hormigas y, mejor conocidas por sus nombres en inglés, las técnicas de *simulated annealing* y *particle swarm optimization* (Blum y Roli, 2003).

En los últimos años de esta década y a principios de la siguiente, la preocupación cada vez mayor por factores como el cambio

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

climático, la carencia de agua, la seguridad alimentaria y la demanda energética fueron los principales impulsores de las investigaciones entre la comunidad científica de PSE. En los años más recientes, el desarrollo sostenible y los nexos agua-energía-alimentos-salud se convirtieron en los pilares para el desarrollo de PSE en el mundo.

2.3 Década 2010-Presente

Fue en este periodo cuando se definió la agenda 2030 del desarrollo sostenible y se tuvo el auge de métricas de optimización no sólo económicas, sino también ecológicas y sociales, como los ecoindicadores, tendientes a considerar las distintas dimensiones de la sostenibilidad. De la misma manera, comenzaron a predominar herramientas computacionales de uso libre de mucho poder y confiabilidad, como los entornos JUMP, Julia y el resolvedor IPOpt (aunque el desarrollo de este último data de la década de 1990 con la referencia de Biegler (1990)), además de todas las librerías y funciones disponibles en el lenguaje Python. Se describen a continuación las temáticas y herramientas teóricas de mayor interés. Al igual que en la década pasada, se discuten primero las distintas aplicaciones, y se cierra con las herramientas matemáticas o numéricas que hicieron posible su solución.

2.3.1 Auge de la Intensificación de Procesos

A partir de su concepción a inicios de este siglo, la intensificación de procesos evolucionó desde un enfoque centrado principalmente en la miniaturización y la integración de operaciones unitarias hacia un alcance más amplio, orientado a la sostenibilidad, electrificación, digitalización y diseño de procesos altamente integrados. Mientras que en etapas tempranas la intensificación se enfocaba en equipos como columnas de destilación reactivas, reactores multifuncionales, en la última década el campo se ha expandido hacia tecnologías como reactores continuos de flujo, membranas reactivas, electrificación de procesos, así como integración con herramientas de modelado avanzado, optimización y control digital. Este cambio ha sido impulsado por la necesidad de reducir consumo energético, emisiones de carbono, huella ambiental y aumentar flexibilidad operativa frente a los retos de transición energética y manufactura sostenible. En particular, revisiones recientes destacan que la intensificación de procesos ha dejado de verse únicamente como innovación en

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

equipos para consolidarse como una estrategia integral de rediseño de sistemas químicos completos, fuertemente vinculada con la economía circular y la industria 4.0 (Tian y col., 2018)

2.3.2 Sistemas Energéticos

Esta área es una de las que se reporta un mayor desarrollo en los últimos años, con miles de publicaciones científicas en el área. Los tópicos de interés cambian de la eficiencia de procesos individuales hacia metodologías que modelan y optimizan simultáneamente interacciones entre procesos, redes energéticas, recursos renovables, almacenamiento de energía, la electrificación industrial, las cadenas de suministro y objetivos ambientales. Este desarrollo ha sido impulsado por la transición energética y la descarbonización industrial, ampliando el alcance desde problemas clásicos de integración térmica y cogeneración hacia sistemas híbridos complejos que incorporan energías renovables, hidrógeno, captura y utilización de carbono, electrificación de procesos y operación bajo incertidumbre. Se ha mencionado incluso que estos desarrollos han generado la consolidación de la ingeniería de sistemas energéticos como una extensión natural de la ingeniería de sistemas de procesos, orientada no solo a eficiencia económica, sino a resiliencia, sostenibilidad y flexibilidad operativa en escenarios energéticos altamente dinámicos (Liu y col., 2011; Demirhan y col., 2019).

2.3.3 Sistemas Captura de CO_2

Aunque esta área tiene muchos años de desarrollo con los procesos convencionales de absorción con aminas, la comunidad científica del área de PSE amplió los alcances hacia otras aplicaciones como adsorción, membranas, combustión indirecta (*chemical looping* y su variación, *calcium looping)*, uso de solventes avanzados, líquidos iónicos y captura directa del aire. Más recientemente, el enfoque se ha orientado en la integración de captura con utilización de CO_2 (CCU), electrificación industrial, intensificación de procesos y sistemas energéticos descarbonizados, reflejando una transición desde la optimización de unidades aisladas hacia el diseño de ecosistemas industriales bajos en carbono (MacDowell y col., 2010).

2.3.4 Gestión del Agua

El problema de la gestión del agua (*water management*) ha cambiado también de forma significativa. Se tuvo la evolución desde

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

trabajos centrados en la minimización del consumo de agua dentro de plantas individuales hasta estrategias globales que consideran simultáneamente el uso eficiente del agua, consumo energético, tratamiento de efluentes, recuperación de recursos, sostenibilidad ambiental y resiliencia operativa (Ponce-Ortega y col., 2012). Este cambio ha sido impulsado por la creciente presión derivada de la escasez hídrica, regulaciones ambientales más estrictas y la aplicación del nexo agua-energía-alimentos. De igual forma, en los años más recientes, el interés principal se ha desplazado hacia la gestión circular del agua, integrando recuperación de materiales y la digitalización para monitoreo y optimización en tiempo real.

2.3.5 Biocombustibles

Como es ampliamente conocido, Los biocombustibles son combustibles obtenidos a partir de biomasa renovable (como residuos agrícolas, aceites vegetales, grasas residuales, microalgas o desechos lignocelulósicos). Así, la biomasa se transforma en portadores energéticos líquidos, gaseosos o sólidos, tales como bioetanol, biodiésel, biogás, bioturbosina e hidrógeno de origen biológico, con el objetivo de sustituir parcial o totalmente a los combustibles fósiles y reducir emisiones netas de gases de efecto invernadero (Daoutidis y col., 2013). En esta área, los primeros trabajos se orientaban a los combustibles de primera generación, pero los años recientes marca una tendencia hacia el desarrollo de biorrefinerías integradas, flexibles y multiproducto, capaces de valorizar diversas materias primas mediante rutas bioquímicas, termoquímicas e híbridas.

2.3.6 Nexo Agua-Energía-Alimentos

El nexo agua–energía–alimentos (*water–energy–food nexus, WEF*) es un concepto que reconoce la interdependencia entre los recursos hídricos, energéticos y alimentarios, entendiendo que las decisiones o restricciones en uno de estos sectores afectan directa o indirectamente a los otros; por ejemplo, la producción de energía requiere agua, la gestión y tratamiento del agua consumen energía, y la producción de alimentos depende simultáneamente de agua y energía (García y You, 2016).

En la actualidad, el enfoque ha incorporado sostenibilidad, resiliencia climática, economía circular y digitalización, ampliando el alcance desde escalas de proceso o planta

hacia sistemas territoriales e industriales integrados.

2.3.7 Nuevos Materiales (solventes)

Los solventes verdes son medios de disolución diseñados para minimizar los impactos ambientales y riesgos para la salud asociados con los solventes orgánicos convencionales; poseen características como baja toxicidad, reducida volatilidad, biodegradabilidad, origen renovable, menor inflamabilidad y alta eficiencia de recuperación o reutilización. Entre ellos se destacan los líquidos iónicos y, más recientemente, los solventes eutécticos profundos (*DES, deep eutectic solvents*) (Zhang y col., 2012).

En un principio, este tipo de solventes se usaron principalmente como sustitutos benignos para medios de reacción y separación, pero recientemente la investigación se ha orientados hacia el desarrollo de solventes optimizados molecularmente para aplicaciones específicas en captura de CO_2, extracción, catálisis, biorefinerías, separaciones avanzadas y electroquímica.

2.3.8 *Enterprise Wide Optimization*

La *Enterprise-Wide Optimization* (EWO) u optimización a escala empresarial es un enfoque de ingeniería de sistemas de procesos que busca la optimización coordinada e integrada de todas las decisiones operativas y estratégicas de una empresa, abarcando desde abastecimiento de materias primas, diseño de procesos, manufactura, planeación, programación de producción, logística, distribución e incluso interacción con mercados energéticos y cadenas de suministro, en lugar de optimizar cada nivel de manera aislada (Grossmann, 2012). Los trabajos más recientes involucran la programación y operación de procesos en plataformas de decisión complejas que incorporan incertidumbre, sostenibilidad, resiliencia, digitalización, análisis en tiempo real e inteligencia artificial.

2.3.9 Economía Circular

La economía circular es un modelo de producción y consumo que busca reemplazar el esquema lineal tradicional de extraer–producir–usar–desechar por sistemas regenerativos. En los sistemas regenerativos, los materiales, energía y recursos se mantienen en uso el mayor tiempo posible mediante estrategias como reducción,

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

reutilización, reciclaje, recuperación, remanufactura y valorización de residuos, minimizando tanto el consumo de recursos vírgenes como la generación de emisiones y desechos (Ghisellini y col., 2016).

En la actualidad, esta área no sólo se enfoca en reciclaje y recuperación de materiales sino también en el diseño al de sistemas circulares complejos, incluyendo redes de valorización de residuos, cadenas de suministro cerradas (*closed-loop supply chains*), reciclaje químico, recuperación de agua, carbono y energía, así como integración con análisis de ciclo de vida y sostenibilidad (Avraamidou y col., 2019).

Los problemas y temáticas descritas en este periodo pudieron abordarse gracias a la implementación de nuevas técnicas PSE y al desarrollo de tecnología computacional que ha derivado en la era de la digitalización y la inteligencia artificial. Los desarrollos matemáticos y computacionales se describen a continuación.

2.3.10 Teoría de Juegos

La teoría de juegos es un concepto matemático que data de mediados del siglo pasado, pero en el área de PSE se ha utilizado de forma extensiva en años recientes para analizar situaciones de decisión estratégica en las que el resultado para cada participante depende no solo de sus propias decisiones, sino también de las decisiones de otros actores con objetivos potencialmente cooperativos o conflictivos; algunos conceptos, como equilibrio de Nash, juegos de Stackelberg, juegos cooperativos y mecanismos de negociación permiten modelar interacciones entre agentes racionales en contextos de competencia, coordinación o reparto de beneficios (Sánchez-Soriano, 2013).

La teoría de juegos ha permitido representar de forma más realista conflictos entre actores independientes (empresas, productores, consumidores) incorporando criterios de cooperación, competencia, incentivos y equidad. Su aplicación reciente se ha extendido hacia microredes energéticas, sistemas multiagente, mercados de carbono y problemas de resiliencia y sostenibilidad (Marousi y Charitopoulos, 2023).

2.3.11 Optimización Basada en Datos

La optimización basada en datos (*data-driven optimization*) es una herramienta conceptual en el que los modelos de optimización se construyen total o parcialmente a partir de datos experimentales o históricos, en lugar de

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

depender exclusivamente de modelos basados en primeros principios; por otro lado, emplea herramientas del aprendizaje automático, modelos subrogados (*surrogate models*) y modelos híbridos físico/basados-en-datos para identificar patrones, predecir comportamientos y encontrar condiciones óptimas en sistemas complejos (van de Berg y col., 2022).

En PSE, esta herramienta posee un sin número de aplicaciones, como optimización en tiempo real, diseño molecular, planificación de producción, mantenimiento predictivo, descubrimiento de materiales, diseño de experimentos y *enterprise-wide optimization* (Müller y col., 2023).

2.3.12 Aprendizaje Automático

El aprendizaje automático (*machine learning*) es una rama de la inteligencia artificial que desarrolla algoritmos capaces de aprender patrones, relaciones y comportamientos a partir de datos, sin necesidad de programar explícitamente todas las reglas físicas o lógicas del sistema, permitiendo tareas como predicción, clasificación, agrupamiento y toma de decisiones (Lee y col., 2018).

En la actualidad esta herramienta juega un rol estratégico dentro de PSE, impulsado por la digitalización industrial y la disponibilidad masiva de datos operativos. En esta transición, el aprendizaje automático ha sido aplicado a obtener modelos subrogados para simulación y optimización, control predictivo, optimización en tiempo real, diseño molecular y de materiales, descubrimiento de catalizadores, mantenimiento predictivo, análisis de cadenas de suministro y operación de sistemas energéticos complejos. Más recientemente, la integración de enfoques híbridos que combinan modelos teóricos fundamentales con aprendizaje profundo y aprendizaje por refuerzo ha permitido abordar problemas altamente no lineales, inciertos y multiescala con mayor eficiencia computacional (Daoutidis y col., 2024).

Hasta aquí se ha descrito cuál ha sido la evolución histórica de PSE, pero ¿qué se espera de PSE en los años siguientes ante el desarrollo tecnológico y la digitalización industrial? La siguiente sección intenta responder dicha pregunta.

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

3. El futuro de PSE en un contexto tecnológico dinámico y en creciente desarrollo

La Ingeniería de Sistemas de Procesos se encuentra en el inicio de un cambio de enfoque impulsado por la convergencia de la IAG, las tecnologías digitales como los Gemelos Digitales y el Internet de las Cosas (IoT), y la necesidad de una transición energética sostenible. Tradicionalmente, el diseño conceptual de procesos se ha basado en reglas heurísticas para la síntesis de diagramas de flujo y la programación matemática (MINLP) para resolver superestructuras. La incorporación de la IAG revolucionará este enfoque, permitiendo proponer múltiples configuraciones de plantas completas en tiempos cortos, considerando simultáneamente el análisis de ciclo de vida, la seguridad inherente, la huella de carbono y el impacto ambiental. Esta capacidad transformará el rol del ingeniero químico, quien dejará las tareas de modelado intensivo para enfocarse en el análisis de datos, el pensamiento holísitico, el planteamiento de problemas, la validación de hipótesis y la aplicación de criterios éticos y sostenibles.

En el ámbito del modelado, el futuro reside en una fusión jerárquica que da lugar al modelado de caja gris estructurado e informado por la física. Fundamental en esta evolución es el desarrollo de Redes Neuronales Informadas por la Física (*Physical Informed Neural Networks*, *PINNs*), las cuales, junto con la IAG, generarán automáticamente modelos subrogados (*surrogate models*) cuando los modelos rigurosos sean lentos o los datos empíricos incompletos. Estos modelos garantizan el cumplimiento estricto de los balances de masa y energía, computando soluciones eficientes y precisas. Además, la IAG monitoreará continuamente la planta real, ajustando los modelos conforme varíen las condiciones operativas. Este enfoque no desplaza el rigor conceptual de la ingeniería química; al contrario, revaloriza los principios fundamentales, ya que un modelo basado puramente en datos es frágil ante perturbaciones. La capacidad de representar las leyes de la física dentro de los entornos de IA definirá el futuro de PSE, logrando sistemas capaces de extrapolar con seguridad e interpretar fenómenos complejos bajo un alto grado de incertidumbre. La Figura 4 intenta representar las interacciones de PSE y

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

sus objetivos sostenible con la ciencia de datos y la IA.



Figura 4. PSE y su interacción con la Ciencia de Datos, la IA, y la sostenibilidad

Sin embargo, el uso intensivo de la IAG introduce vulnerabilidades críticas que deben gestionarse con rigor. Técnicamente, existe el riesgo de que ocurran las denominadas alucinaciones técnicas, donde la IAG propone topologías erróneas o reactivos incompatibles que parecen viables, pero que no pueden ocurrir industrialmente. Éticamente, el mayor desafío es garantizar que los modelos respeten estrictamente las leyes físicas inviolables, evitando predicciones operativamente eficientes, pero físicamente imposibles, como transferencias de calor inversas o violaciones del equilibrio químico. Asimismo, la dependencia de datos históricos presenta limitaciones, ya que rara vez contienen información sobre eventos anómalos, o fallas en los equipos; esto puede llevar a errores impredecibles en zonas de operación no consideradas en los modelos. Existe también el riesgo de la generalización de una falta del juicio humano, donde la automatización lleve a que las nuevas generaciones de ingenieros pierdan la intuición y la capacidad crítica para cuestionar los resultados de la IAG.

Por ello, la transformación tecnológica debe alinearse con una visión socialmente consciente de la ingeniería. Se requiere un diseño de procesos integrados con el ambiente, donde las plantas no sólo no dañen el ambiente, sino sean restauradoras del mismo mediante la síntesis de redes simbióticas territoriales. La IAG, al analizar datos ecológicos y cadenas de suministro locales, facilitará el diseño de plantas integradas con la ecología regional, generando superestructuras donde los efluentes sirven como nutrientes para la restauración de suelos, captura de carbono o enriquecimiento de acuíferos. Con seguridad se podrán desarrollar Gemelos Digitales Socio-Ecológicos que ajustarán dinámicamente la operación según la capacidad del ecosistema. Además, el marco de justicia de Sistemas de Procesos obliga a

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

repensar la disciplina, integrando variables socioambientales (niveles de contaminación, densidad demográfica, salud comunitaria) en los modelos de optimización de localización para evitar que plantas de alto impacto se ubiquen sistemáticamente en comunidades marginadas.

Para habilitar este futuro, la formación académica debe evolucionar radicalmente de un esquema de asignaturas aisladas hacia un rediseño curricular transversal y orientado al modelado híbrido. Las universidades deben incorporar herramientas de programación abierta y PINNs directamente en materias clave como Fenómenos de Transporte y Cinética Química, enseñando a combinar las leyes de conservación con la capacidad predictiva de la IA. Es necesario migrar hacia el Aprendizaje Basado en Proyectos o Retos, donde los estudiantes utilicen IAG para generar códigos y diagramas, desplazando la evaluación hacia la capacidad crítica, para detectar alucinaciones físicas y analizar la viabilidad técnica. La enseñanza debe expandirse más allá de los límites de la planta, utilizando proyectos integradores de impacto neto positivo para evaluar métricas socio-ecológicas y de restitución de cuencas en tiempo real. Este enfoque renovado busca potenciar el perfil esencial del ingeniero químico como un creador y evaluador de procesos fundamentado en el rigor físico, capaz de liderar la optimización de sistemas industriales integrados mediante la inteligencia artificial.

4. Conclusiones

Los retos sociales, como el cambio climático, el crecimiento poblacional, que conlleva la necesidad cada vez más creciente de recursos, y la digitalización de la información en la era moderna han generado nuevos retos matemáticos y conceptuales que afectan a todas las áreas del conocimiento, incluyendo a la ingeniería de sistemas de procesos. Entre estos retos numéricos y matemáticos se incluye a la optimización en tiempo real, la incertidumbre y no linealidad de sistemas complejos y la parametrización de los modelos de optimización basada en datos. De igual manera, los problemas en áreas como la PSE se han convertidos en sistemas cada vez más grandes, a gran escala, como los sistemas macroscópicos o problemas de *enterprise-wide-optimization,* que imponen retos adicionales en términos de eficiencia numérica y computacional. Ante dichos retos, las técnicas tradicionales de PSE como la optimización metaheurística, la programación matemática (LP, NLP, MILP,

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

MINLP, la programación multiobjetivo, la programación estocástica, etc.) se han tenido que integrar a las tecnologías computacionales más recientes. Ello ha impulsado a la comunidad científica al desarrollo de aplicaciones híbridas de PSE que incluyen a la inteligencia artificial, los cálculos en la nube, el internet de las cosas y la ciencia de datos y el uso de modelos subrogados.

En ese contexto, como lo señalan Gani y col. (2022), PSE es una disciplina que puede ayudar a generar soluciones innovadoras que no sólo detengan las tendencias indeseables de problemas como el cambio climático, sino también proporcionan guías para lograr los objetivos del desarrollo sostenible. En ese contexto, el enfoque de sistemas de PSE tiene los alcances para identificar que los impactos negativos que afectan al planeta en la actualidad no están aislados, por lo que, mediante enfoques como los Nexos (agua-energía-alimentos; agua-energía-alimentos-ambiente-salud), las técnicas PSE permiten considerar de forma holística los componentes importantes del sistema en cuestión, y con ello se pueden abordar todo tipo de problemas complejos con la finalidad encontrar las soluciones que demanda la sociedad actual.

4.1 *Nuestra visión sobre el futuro de PSE*

De cara a la próxima década, creemos que la PSE vivirá una transformación impulsada por la convergencia entre la inteligencia artificial, la descarbonización y la sostenibilidad ambiental. Las siguientes son 6 áreas clave que creemos dominarán la disciplina:

a. Modelado Híbrido y Redes Neuronales Informadas por la Física (PINNs). El modelado pasará de ser predominantemente riguroso o puramente basado en datos hacia estrategias de caja gris.

b. Uso de Gemelos Digitales Socio-Ecológicos e IoT. La PSE dejará de analizar la planta química de forma aislada para conectar sus modelos digitales con el entorno natural en tiempo real.

c. Síntesis Autónoma de Procesos e IAG Generativa. El diseño conceptual de plantas evolucionará desde la resolución manual de superestructuras (MINLP) hacia sistemas generativos impulsados por IA. La IA analizará cadenas de suministro y datos ecológicos regionales para diseñar superestructuras donde los efluentes de una planta funcionen automáticamente como insumos para otra planta o como nutrientes para el ecosistema.

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

d. Métricas Ecológicas Absolutas. Se superará la idea tradicional de reducir un impacto ambiental relativo para formular modelos de optimización basados en restitución ambiental.

e. Justicia de Sistemas de Procesos *(Process Systems Justice*). Se tendrá la integración explícita de dimensiones socioambientales y de equidad en la toma de decisiones metodológicas de la ingeniería.

f. Descubrimiento de Materiales y Moléculas Integrado al Diseño de Procesos. Tradicionalmente, la síntesis de un nuevo material y el diseño de la planta química ocurrían por separado. La PSE del futuro unificará la escala molecular con la escala de proceso. Se espera que los algoritmos de IA diseñarán simultáneamente la molécula (por ejemplo, un nuevo solvente o un líquido iónico) y la configuración del equipo o proceso (por ejemplo, una columna de absorción, asegurando que las propiedades moleculares óptimas coincidan con la máxima eficiencia del equipo a escala industrial).

4.*2 Nuestra visión sobre el papel de México y América Latina en el desarrollo de PSE*

América Latina y México tienen la oportunidad de liderar la industria sostenible y la ingeniería regenerativa mediante el uso de inteligencia artificial y código abierto, logrando un desarrollo tecnológico accesible que promueva la justicia social y ambiental. Consideramos que los países latinoamericanos ofrecen las condiciones idóneas para convertirse en ejemplos globales para la ingeniería regenerativa, impulsados por su vasta biodiversidad, sus recursos hídricos y de biomasa, y la urgente necesidad de gestionar transiciones socio-ecológicas equitativas.

En el contexto regional, la PSE guiada por la IAG encuentra una oportunidad para el desarrollo de la Justicia de Sistemas de Procesos. Históricamente, la región ha sufrido las consecuencias de decisiones de localización industrial basadas únicamente en la minimización de costos, derivando en la creación de zonas de sacrificio ambiental y desigualdad social. La integración de variables socioeconómicas en los modelos de optimización (MILP/MINLP) permite que América Latina encabece el diseño de cadenas de valor y redes industriales que

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

distribuyan equitativamente los beneficios económicos, maximicen la resiliencia hídrica e incorporen indicadores de salud poblacional en la toma de decisiones. Asimismo, la alta disponibilidad de biomasa y fuentes renovables en países como Brasil, Chile o Colombia ofrece el marco idóneo para formular funciones objetivo basadas en límites ecológicos absolutos, evaluando la restitución de nutrientes y la captura real de carbono.

Por su parte, México ocupa un papel importante debido a su posición geopolítica y a la reconfiguración de las cadenas globales de suministro mediante el *nearshoring*. Para consolidar su atractivo como centro manufacturero, la industria mexicana enfrenta el reto de acelerar su digitalización. En este sentido, México se perfila como un centro regional para la implementación práctica de Gemelos Digitales Socio-Ecológicos e infraestructura IoT. La modernización de su base industrial (desde el sector petroquímico tradicional hasta las emergentes plantas de manufactura de baterías, hidrógeno verde y biorefinerías) requiere de una integración entre los modelos mecánicos tradicionales y los modelos derivados de redes neuronales informados por la física (PINNs).

Finalmente, esta convergencia tecnológica abre una oportunidad para la democratización académica y tecnológica en la región. El costo del software comercial de simulación ha sido una barrera para el desarrollo de la PSE en las universidades latinoamericanas. La transición hacia el modelado de caja gris impulsado por IAG y el código abierto (*open-source*) permitirá que los investigadores e ingenieros de la región diseñen, optimicen y evalúen sistemas complejos sin depender exclusivamente de licencias de software.

Referencias

Agrawal, R. (1996). Synthesis of distillation column configurations for multicomponent separation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, *35*(4), 1059–1071. https://doi.org/10.1021/ie950323h

Avraamidou, S., Baratsas, S. G., Tian, Y., Pistikopoulos, E. N. (2019). Circular Economy – A challenge and an opportunity for Process Systems Engineering. *Computers & Chemical Engineering*, 133, 106629. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.106629

Bhaskar, V., Gupta, S. K., Ray, A. K. (2000). Applications of multiobjective optimization

in chemical engineering. *Reviews in Chemical Engineering*, 16(1), 1–54. https://doi.org/10.1515/REVCE.2000.16.1.1

Biegler, L. T. (1990). Simultaneous strategies for optimization of differential-algebraic systems with enforcement of error criteria. *Computers & Chemical Engineering*, 14(10), https://doi.org/10.1016/0098-1354(90)85005-U

Biegler, L. T., Grossmann, I. E., Westerberg, A. W. (1997). Systematic Methods of Chemical Process Design. Prentice Hall. 1st Edition.

Blum, C., Roli, A. (2003). Metaheuristics in combinatorial optimization: Overview and conceptual comparison. *ACM Computing Surveys*, 35(3), 268–308. https://doi.org/10.1145/937503.937505

Bowling, I. M., Ponce-Ortega, J. M., El-Halwagi, M. M., Grossmann, I. E. (2010). Facility location and supply chain optimization for a biorefinery. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, *50*(10), 6276–6286. https://doi.org/10.1021/ie101921y

Daoutidis, P., Kelloway, A., Marvin, W. A., Rangarajan, S., Torres, A. I. (2013). Process systems engineering for biorefineries. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 2(4), 442–447. https://doi.org/10.1016/j.coche.2013.09.006

Daoutidis, P., Baldea, M., Bogle, I., et al. (2024). Machine learning in process systems engineering: Challenges and opportunities. *Computers & Chemical Engineering*, 181, 108523. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2023.108523

Demirhan, C., Tso, W., Ogumerem, G. et al. (2019). Energy systems engineering - a guided tour. BMC Chem Eng 1, 11. https://doi.org/10.1186/s42480-019-0009-5

Doherty, M. F., Buzad, G. (1992). Reactive distillation by design. *Chemical Engineering Research and Design*, 70(A5), 448–458.

Downs, J. J., Vogel, E. F. (1993). A plant-wide industrial process control problem. *Computers & Chemical Engineering*, 17(3), 245–255. https://doi.org/10.1016/0098-1354(93)80018-I

El-Halwagi, M. M., Gabriel, F., Harell, D. (2003). Rigorous graphical targeting for resource conservation via material

recycle/reuse networks. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 42(19), 4319–4328. https://doi.org/10.1021/ie0340102

Fiksel, J. (1985). Engineering design: A systems approach. *Design Studies*, 6(4), 222–235. https://doi.org/10.1016/0142-694X(85)90007-4

Finnveden, G., Hauschild, M. Z., Ekvall, T., Guinée, J., Heijungs, R., Hellweg, S., Koehler, A., Pennington, D., Suh, S. (2009). Recent developments in life cycle assessment. *Journal of Environmental Management*, *91*(1), 1–21. https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2009.06.018

Gani, R., Baldyga, J., Biscans, B., Brunazzi, E., Charpentier, J. C., Drioli, E., 2020. A multi-layered view of chemical and biochemical engineering. *Chemical Engineering Research and Design* 155, 133–145. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2020.01.008

Gani et al. (2022). Challenges and Opportunities for Process Systems Engineering in a Changed World. Challenges and Opportunities for Process Systems Engineering in a Changed World. *Computer Aided Chemical Engineering*, 49, 7–20. https://doi.org/10.1016/B978-0-323-85159-6.50002-6

Garcia, D. J., You, F. (2016). The water-energy-food nexus and process systems engineering: A new focus. *Computers & Chemical Engineering*, 91, 49–67. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2016.03.003

Ghisellini, P., Cialani, C., & Ulgiati, S. (2016). A review of the circular economy: The expected transition to a balanced interplay of environmental and economic systems. *Journal of Cleaner Production*, 114, 11–32. https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2015.09.007

Grossmann, I. E. (2012). Advances in mathematical programming models for enterprise-wide optimization. *Computers & Chemical Engineering*, 47, 2–18. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2012.06.038

Grossmann, I. E., Harjunkoski, I. (2019). Process Systems Engineering: Academic and industrial perspectives. *Computers & Chemical Engineering*, 126, 474–484. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.04.028

Grossmann, I.E., Kravanja, Z. (1997). Mixed-Integer Nonlinear Programming: A Survey of Algorithms and Applications. In: Biegler, L.T., Coleman, T.F., Conn, A.R., Santosa, F.N. (eds) Large-Scale Optimization with Applications. The IMA Volumes in Mathematics and its Applications, vol 93. Springer, New York, NY. https://doi.org/10.1007/978-1-4612-1960-6_5

Grossmann, I. E., Westerberg, A. W. (2000). Research challenges in process systems engineering, *AIChE Journal*, 46(9), 1700–1703. https://doi.org/10.1002/aic.690460902

Horlock, J. H. (1997). Cogeneration-Combined heat and power (CHP): Thermodynamics and economics. Krieger Publishing Company.

Khan, F. I., Amyotte, P. R. (2003). How to make inherent safety practice a reality. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 81(1), 2–16. https://doi.org/10.1002/cjce.5450810101

Lee, J. H., Shin, J., Realff, M. J. (2018). Machine Learning: Overview of the Recent Progresses and Implications for the Process Systems Engineering Field. *Computers & Chemical Engineering*, 114, 111–121. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2017.10.008

Liu, P., Georgiadis, M. C., Pistikopoulos, E. N. (2011). Advances in Energy Systems Engineering. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 50(6), 3467–3476. https://doi.org/10.1021/ie101383h

Masuduzzaman, M., Rangaiah, G. P. (2009). Multi-objective optimization applications in chemical engineering. In G. P. Rangaiah (Ed.), *Multi-Objective Optimization: Techniques and Applications in Chemical Engineering*, 29–80, World Scientific. https://doi.org/10.1002/9781118341704.ch3

Mac Dowell, N., Florin, N., Buchard, A., et al. (2010). An overview of CO_2 capture technologies. *Energy & Environmental Science*, 3, 1645–1669. https://doi.org/10.1039/c004106h

Marousi, A., Charitopoulos, V. M. (2023). Game theoretic optimisation in process and energy systems engineering: current landscape and future directions. *Frontiers in Chemical Engineering*, 5, 1130568. https://doi.org/10.3389/fceng.2023.1130568

Méndez, C. A., Cerdá, J., Grossmann, I. E., Harjunkoski, I., Fahl, M. (2006). State-of-the-art review of optimization methods for short-

term scheduling of batch processes. *Computers & Chemical Engineering*, 30(6–7), 913–946. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2006.02.008

Müller, J., von Stryk, O., Venkatasubramanian, V. (2023). Data-driven optimization in chemical engineering. *Computers & Chemical Engineering*, 174, 108224 https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2023.108224

Pistikopoulos et al. (2021). Process systems engineering –The generation next?. *Computers and Chemical Engineering*, 147, 107252. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2021.107252

Ponce-Ortega, J. M., Nápoles-Rivera, F., El-Halwagi, M. M. (2012). An optimization approach for the synthesis of recycle and reuse water integration networks. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 14, 133–151 (2012). https://doi.org/10.1007/s10098-011-0370-4

Sahinidis, N. V. (2004). Optimization under uncertainty: state-of-the-art and opportunities. *Computers & Chemical Engineering*, 28(6–7), 971–983. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2003.09.017

Sánchez-Soriano, J. (2013). An overview on game theory applications to engineering. *International Game Theory Review*, 15(3). https://doi.org/10.1142/S0219198913400197

Shapiro, A. (2007). Stochastic programming approach to optimization under uncertainty. *Mathematical Programming*, 112, 183–220. https://doi.org/10.1007/s10107-006-0090-4

Smith, R. (2016). Chemical Process Design and Integration, Wiley, 2da Edición.

Seider, W. D., Seader, J. D., Lewin, D. R., Widagdo, S., Gani, R., Ng, M. K. (2017). Product and Process Design Principles, Wiley, 4ta, Edición.

Skogestad, S. (1997). Dynamics and control of distillation columns—A critical survey. *Modeling, Identification and Control, 18*(3), 177–217. https://doi.org/10.4173/mic.1997.3.1

Stephanopoulos, G., Reklaitis, G. V. (2011). Process systems engineering: From Solvay to modern bio- and nanotechnology. A history of development, successes and prospects for the future, *Chemical Engineering Science*,

66, 4272–4306. https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.05.049

Tian, Y., Demirel, S. E., Hasan, M. M. F., Pistikopoulos, E. N. (2018). An overview of process systems engineering approaches for process intensification: State of the art. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 133, 160–210. https://doi.org/10.1016/j.cep.2018.07.014

van de Berg, D., Savage, T., Petsagkourakis, P., Zhang, D., Shah, N., del Rio-Chanona, E. A. (2022). Data-driven optimization for process systems engineering applications. *Chemical Engineering Science*, 248, 117135. https://doi.org/10.1016/j.ces.2021.117135

Yee, T. F., Grossmann, I. E. (1990). Simultaneous optimization models for heat integration—II. Heat exchanger network synthesis. *Computers & Chemical Engineering*, 14(10), 1165-1184. https://doi.org/10.1016/0098-1354(90)85010-8

Zhang, Q., De Oliveira Vigier, K., Royer, S., Jérôme, F. (2012). Deep eutectic solvents: syntheses, properties and applications. *Chemical Society Reviews*, 41, 7108–7146. https://doi.org/10.1039/C2CS35178A