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

LA INGENIERÍA DE SISTEMAS DE PROCESOS Y SUS APLICACIONES EN LAS INDUSTRIAS QUÍMICA Y PETROQUÍMICA

Fernando Israel Gómez Castro [a,*], Oscar Daniel Lara Montaño [b], Araceli Guadalupe Romero Izquierdo [b], Antioco López Molina [c], Mayra Margarita May Vázquez [d], Yulissa M. Espinoza Vázquez [e], Francisco López Villarreal [f]

[a] Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Ingeniería Química, Noria Alta S/N Col. Noria Alta, Guanajuato, Guanajuato, México 36050. fgomez@ugto.mx

[b] Universidad Autónoma de Querétaro, Campus Amealco, Facultad de Ingeniería, Carretera Amealco-Temascalcingo km 1 Col. Centro, Amealco de Bonfil, Querétaro, México 76850.

[c] Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, División Académica Multidisciplinaria de Jalpa de Méndez, Carretera Villahermosa-Comalcalco km 27, Jalpa de Méndez, Tabasco, México 86205.

[d] Universidad Autónoma de Yucatán, Dirección General de Desarrollo Académico, Unidad Académica de Educación Virtual, Calle 20 por 31 y 35 Col. Chuburná, Mérida, Yucatán, México 97210.

[e] Tecnológico Nacional de México/ITS Irapuato, División de Ingeniería Logística, Carretera Irapuato-Silao km 12.5, Irapuato, Guanajuato, México 36821.

[f] Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Villahermosa, Departamento de Ingeniería Química, Bioquímica y Ambiental, Carretera Villahermosa-Frontera km 3.5 Ciudad Industrial, Villahermosa, Tabasco, México 86010.

Resumen

La Ingeniería de Sistemas de Procesos (PSE por sus siglas en inglés) es una rama de la Ingeniería Química que involucra la comprensión e integración en distintas escalas de los procesos productivos, promoviendo el desarrollo de conocimiento científico y herramientas que permitan la solución de los principales desafíos

económicos, ambientales y sociales desde la perspectiva de la Ingeniería de Procesos. PSE contempla conocimientos y herramientas en análisis de datos, diseño, modelado, integración, intensificación, optimización y control de procesos. Las herramientas de PSE han sido ampliamente utilizadas para el análisis y mejora de procesos químicos y petroquímicos. En este trabajo se realiza una revisión de estas herramientas y sus aplicaciones a este tipo de procesos, así como los potenciales desarrollos que se visualizan en el futuro del PSE para la industria química y petroquímica.

Palabras clave: Ingeniería de Sistemas de Procesos; Industria Química; Industria Petroquímica.

PROCESS SYSTEMS ENGINEERING AND ITS APPLICATIONS IN CHEMICAL AND PETROCHEMICAL INDUSTRIES

Abstract

Process Systems Engineering (PSE) is a branch of Chemical Engineering involving the comprehension and integration of productive processes at different scales. It promotes the development of scientific knowledge and tools to solve the main economic, environmental and social challenges from the perspective of Process Engineering. PSE includes knowledge and tools associated with data analysis, process design, modelling, integration, intensification, optimization and control. PSE tools have been widely used for the analysis and enhancement of chemical and petrochemical processes. In this work, PSE tools and their relevance are described. Their applications for these processes are discussed, together with the potential developments expected in the future of PSE for the chemical and petrochemical industries.

Keywords: Process Systems Engineering; Chemical Industry; Petrochemical Industry.

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

1. Introducción

Una de las actividades fundamentales del ingeniero químico es el diseño y operación de procesos de conversión de materias primas en productos de valor para la sociedad. En los inicios de la ingeniería química como el conocido Curso X fundado por el Profesor Lewis Mill Norton, el objetivo principal de esta área era aplicar los conocimientos de ingeniería y química industrial para eficientizar los procesos y mejorar su rentabilidad económica (Van Antwerpen, 1980). En años recientes, sin embargo, la labor del ingeniero químico se enfoca no solo en el desarrollo y operación de procesos económicamente rentables, sino también en procesos con un bajo impacto ambiental, seguros, que generen beneficios sociales, entre otras características (Pereira, 1999; Marion y col., 2017).

El diseño y operación de procesos químicos ha evolucionado con el paso del tiempo. Es posible pensar en los primeros procesos de destilación, datados antes del año 800 a.C. (Muñoz de Cote Orozco, 2010). En esa época, la construcción y operación de los sistemas de procesamiento posiblemente requeriría de una estrategia de prueba y error, analizando diferentes configuraciones y modos de operación hasta encontrar uno que permitiera obtener el producto deseado con las características requeridas. Esta experiencia empírica acumulada se iría transmitiendo a las siguientes generaciones para dar continuidad a la producción. No fue sino hasta 1915 cuando se estableció una forma sistemática para el desarrollo y análisis de los procesos industriales, cuando Arthur D. Little estableció el concepto de operaciones unitarias. Asimismo, el entendimiento de las leyes fundamentales que dominan el comportamiento de estos sistemas se volvió un elemento primordial para todo Ingeniero Químico (Willis, 1966).

Con el paso de los años, los retos a los que se enfrenta el Ingeniero Químico en la industria son cada vez más complejos, involucrando el estudio de sistemas en multi-escala, bajo condiciones de incertidumbre, la necesidad de análisis en tiempo real, entre otras situaciones (Bernal Neira y col., 2025). Para afrontar estos retos, la Ingeniería de Sistemas de Procesos (PSE, por sus siglas en inglés) ofrece un conjunto de herramientas y procedimientos sistemáticos para el diseño y operación de sistemas de procesamiento en diferentes escalas, incluyendo el modelado matemático, análisis de datos, diseño, optimización y control (Grossmann y

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

Westerberg, 2000; Pistikopoulos y col., 2021). Dada la amplia variedad de operaciones unitarias involucradas en las industrias química y petroquímica, las herramientas de PSE han tenido su mayor aplicación en este tipo de procesos. En este trabajo se describirán las distintas herramientas que conforman la Ingeniería de Sistemas de Procesos, reportando aplicaciones relevantes en las industrias química y petroquímica. El análisis permitirá identificar el amplio espectro de aplicaciones que tiene el PSE en los procesos de estas industrias. Adicionalmente, se discuten los futuros desarrollos que serán relevantes en el área para afrontar los desafíos de la industria en las próximas décadas.

2. Herramientas tradicionales de PSE

2.1. Análisis de datos

2.1.1. Aspectos generales

El análisis de datos se ha consolidado como un eje transversal del PSE, al conectar la operación, el modelado, la optimización y el control de plantas químicas y petroquímicas. La creciente digitalización industrial ha generado grandes volúmenes de información con las características típicas del Big Data: volumen, variedad, velocidad, veracidad, valor y complejidad (Mohammadpoor y Torabi, 2020). Para aprovechar esta información de manera sistemática, es necesario integrar herramientas de ciencia de datos, aprendizaje automático e inteligencia artificial en el marco del PSE, operando en múltiples escalas: desde el diseño de moléculas hasta la gestión de cadenas de suministro (Daoutidis y col., 2024; Srinivasan y col., 2025).

Desde el punto de vista metodológico, el análisis de datos en la industria de procesos se apoya en tres grandes categorías de modelos. Los modelos puramente basados en datos (*data-driven*), como redes neuronales artificiales, bosques aleatorios y arquitecturas de aprendizaje profundo, son flexibles y capaces de capturar no linealidades complejas, aunque su naturaleza de "caja negra" limita la interpretabilidad y la extrapolación (Mousa y col., 2025). En el extremo opuesto, los modelos fenomenológicos, fundamentados en principios de conservación de masa, energía y cantidad de movimiento, ofrecen alta interpretabilidad, pero pueden ser computacionalmente costosos (Regufe y col., 2021). La tendencia dominante es el modelado híbrido (*Science-Guided Machine*

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

Learning, SGML), que combina una base física con un componente de aprendizaje automático para capturar las dinámicas no modeladas y las variaciones paramétricas del proceso real (Sansana y col., 2021; Sharma y Liu, 2022).

El trabajo con datos industriales reales plantea retos significativos: ruido, datos faltantes, información desbalanceada y escasa variabilidad de las variables del proceso (Daoutidis y col., 2024; Ahang y col., 2024). Estos aspectos obligan a combinar estrategias de ingeniería de datos con algoritmos robustos e incorporar criterios de Inteligencia Artificial Explicable (XAI), un requisito fundamental en entornos de alta criticidad donde los operadores necesitan comprender el razonamiento detrás de las recomendaciones del sistema antes de actuar sobre ellas. Una de las aplicaciones más consolidadas es el desarrollo de sensores blandos (*soft sensors*) o sensores inferenciales, que estiman en línea variables de calidad a partir de mediciones fácilmente disponibles, constituyendo un puente natural entre la analítica de datos y las tareas de control, optimización y supervisión (Chen y col., 2011; Cao y col., 2025).

2.1.2. Sensores blandos y monitoreo inteligente de procesos

Los sensores blandos se han utilizado ampliamente para estimar propiedades de producto que no pueden medirse en línea de forma directa, pero resultan esenciales para garantizar calidad, seguridad y cumplimiento normativo. Su evolución algorítmica ha transitado desde enfoques estadísticos clásicos, como la regresión por mínimos cuadrados parciales (PLS), hasta arquitecturas de aprendizaje profundo, como las redes de memoria a corto-largo plazo (LSTM) y transformadores, que capturan dependencias temporales complejas. En años recientes se han desarrollado plataformas que automatizan el flujo de trabajo completo: herramientas como *Soft Sensor Manager* integran en un mismo entorno el preprocesamiento, la selección de características, el ajuste de hiperparámetros y la evaluación de desempeño, reduciendo el tiempo y la especialización requeridos para desplegar modelos en planta (Cao y col., 2025).

El monitoreo inteligente de procesos constituye otra área donde el análisis de datos y el aprendizaje automático convergen para detectar patrones anómalos, identificar fallas incipientes y apoyar decisiones de

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

mantenimiento. En este contexto, el proceso Tennessee Eastman (TEP) (que simula una planta química industrial con cinco unidades principales: reactor, condensador, separador vapor-líquido, compresor de reciclo y *stripper*) se ha convertido en el estándar internacional para comparar y validar métodos de detección y diagnóstico de fallas en plantas químicas (Ahang y col., 2024; Melo y col., 2024).

2.2. Diseño de procesos

Una de las líneas fundamentales del PSE es el diseño de procesos, como herramienta para conceptualizar, estructurar, evaluar y especificar los flujos de materiales, las condiciones operativas y los tipos de equipos en un proceso químico o petroquímico. Esta herramienta se basa en la secuenciación de operaciones mecánicas (físicas), químicas e incluso biológicas, integrando áreas como la termodinámica, la economía de procesos, su construcción, la seguridad, el control y desde hace algunas décadas, la cuantificación del impacto ambiental (Sinnott y Towler, 2020a). Dentro del diseño de procesos se distinguen cuatro etapas fundamentales, las cuales se presentan en la Figura 1, describiéndose a continuación (Smith, 2005; Turton y col., 2012; Sinnott y Towler, 2020b): 1) síntesis de procesos, 2) diseño conceptual, 3) diseño básico, y 4) diseño de detalle.

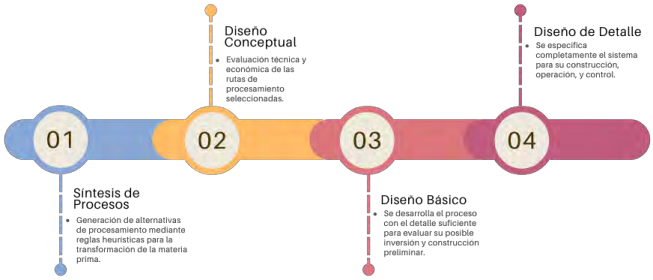


Figura 1. Etapas en el diseño de procesos.

1) Síntesis de procesos. Su propósito es la generación de alternativas de procesamiento mediante reglas heurísticas de diseño para la transformación de la materia prima. En esta etapa son elegidas las rutas de conversión, sus configuraciones, determinación de flujos e interconexiones de material.
2) Diseño conceptual. Su propósito es la evaluación técnica y económica de las rutas de procesamiento seleccionadas, empleando diagramas de bloques y balances de materia y energía. A partir de este diseño es posible realizar evaluaciones económicas de prefactibilidad de procesamiento y

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

análisis de sensibilidad de las principales variables de proceso.

3) Diseño básico. En esta etapa del diseño de procesos se desarrolla el proceso con el detalle suficiente para evaluar su posible inversión y construcción preliminar. Para ello se utilizan herramientas robustas como Aspen Plus, Aspen HYSYS y algunas otras de estimación económica y de análisis de riesgo.
4) Diseño de detalle. En esta etapa se especifica completamente el sistema para su construcción, operación, y control. Para ello se requieren diagramas de tubería e instrumentación, especificaciones técnicas de equipos e instrumentación, diseño de estrategias de control y automatización, así como protocolos específicos para la construcción, operación y arranque del proceso, en términos las normativas específicas de los países. Es importante señalar que la estimación económica de esta etapa requiere cotizaciones reales e impuestos añadidos.

Las etapas descritas previamente han servido como base para el diseño de los procesos que han sostenido a la industria en sus diversas vertientes, sin embargo, avances importantes se han generado a lo largo del tiempo para integrar nuevos conceptos que demanda la sociedad contemporánea.

Uno de estos conceptos es la incorporación de la sustentabilidad y los principios del diseño verde (Abubakar y col., 2024), a través de metodologías específicas de diseño de procesos sustentables (*Sustainable Process Design*) en donde se integran simultáneamente criterios técnicos, económicos, ambientales y de seguridad desde etapas tempranas de diseño (Aristizábal-Marulanda y Cardona Alzate, 2019). Algunas de ellas son los principios de la química verde (*Green Metrics and E-Factor*) (Sheldon, 2007), indicadores de evaluación de impacto ambiental (*Environmental Impact Asessment Indicators*, EIAI) (IAIA, 1999), el algoritmo de reducción de residuos (*Waste Reduction Algorithm*) (Young y Cabezas, 1999), así como el índice EHS (*Environment Health and Safety Indexing*) (IBM, 2025). Algunas otras que han sido ampliamente utilizadas son el análisis de ciclo de vida (Häussling Löwgren y col., 2025), indicadores de huella de carbono y la cuantificación de gases de

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

efecto invernadero (Jamaludin y col., 2023; Bouchouit y Elhamma, 2025).

2.3. Modelado de procesos

El modelado de procesos constituye la columna vertebral de la Ingeniería de Sistemas de Procesos (PSE), proveyendo la capacidad de crear una representación matemática y computacional confiable de cualquier proceso químico, petroquímico o de refinería. Esta herramienta se ha transformado de una ayuda para el diseño *offline* a ser un pilar central en la toma de decisiones en tiempo real en la era de la Industria 4.0, logrando una "maqueta virtual" de la planta que minimiza la experimentación física, mitiga riesgos operacionales y acelera la optimización del desempeño (Furda y col., 2020).

La disciplina abarca un espectro de enfoques de modelado. En un extremo se encuentran los rigurosos modelos fenomenológicos (*First-Principle Models*), fundamentados en las leyes inmutables de la conservación (materia, energía, momento) y las relaciones constitutivas (cinética de Arrhenius, ecuaciones de estado). Estos modelos, al estar anclados en principios físicos, ofrecen la mejor capacidad de extrapolación e interpretatividad. Sin embargo, su desarrollo exige un conocimiento profundo de los mecanismos subyacentes, como la hidrodinámica o las complejas redes de reacción, y a menudo sufren de una elevada carga computacional para su resolución (Regufe y col., 2021). En el extremo opuesto están los modelos empíricos (*Empirical Models* o *Data-Driven Models*), que utilizan el poder del *Machine Learning* (ML), con herramientas como las Redes Neuronales Artificiales (ANNs), para encontrar correlaciones directas en vastos volúmenes de datos operativos. Si bien son rápidos y flexibles para correlaciones no lineales, su naturaleza de "caja negra" y su limitación a extrapolar fuera del dominio de los datos de entrenamiento los hace inadecuados para tareas críticas de diseño o seguridad (Mousa y col., 2025).

Como se describe en la sección 2.1, la tendencia dominante en la aplicación industrial es el modelado híbrido (*Hybrid Models* o *Science-Guided Machine Learning* - SGML). Este enfoque estratégico utiliza los modelos fenomenológicos como base estructural del sistema (la parte interpretable y físicamente consistente) y emplea un modelo ML para capturar las incertidumbres,

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

las dinámicas no modeladas o las variaciones en los parámetros de planta, como la desactivación del catalizador (Sansana y col., 2021). Por ejemplo, una ANN puede modelar el "residual" o el error de predicción de un modelo de primer principio simplificado, produciendo así una herramienta que es altamente predictiva y, a la vez, físicamente plausible (Sharma y Liu, 2022). Esta combinación resulta crucial para aplicaciones con alta incertidumbre, como la simulación de procesos a escalas no probadas (Chau-Chyun y col., 2020).

2.4. Integración e intensificación de procesos

La integración de procesos surgió en la década de los 70´s como consecuencia de la escasez de recursos energéticos y la implementación de normativas ambientales más estrictas. Esta busca aprovechar la recuperación de calor y reducir el uso de materias primas y las emisiones mediante la conexión sinérgica de unidades de proceso, optimizando el flujo de energía y materiales entre los equipos. El objetivo principal es aumentar la eficiencia global del sistema (Baldea, 2015). Una definición representativa, propuesta por El-Halwagi (2006), describe la integración como "una manera de diseñar, mejorar y operar los procesos considerando todo como un conjunto". Esta integración se clasifica en dos tipos: Integración energética (aprovechamiento de calor) e integración de masa, enfocada en el uso eficiente de materiales.

Por otra parte, la Intensificación de Procesos (PI) es un área de gran importancia en el PSE que contribuye al modelado y simulación, a la síntesis de procesos, a la evaluación de operabilidad y control, así como a la optimización. Reay y col. (2013) presentan una definición clara y concisa de la (IP) como: "Cualquier avance tecnológico que resulte en procesos más pequeños, limpios, seguros y energéticamente eficientes". Baldea (2015) propone un enfoque que conecta la intensificación de procesos con la integración, enfocándose en la combinación efectiva de funciones y fenómenos para mejoras procesos químicos. El objetivo principal de la PI es aumentar la eficiencia de los procesos químicos mediante la reducción del consumo energético, de costos y del impacto ambiental, logrando esto a través de la reducción del tamaño de los equipos, la combinación de operaciones y la optimización de transporte de materia y energía. Está área ha tenido un crecimiento

significativo en los últimos años (Tian, et al. 2018).

Aunque conceptualmente son distintos, ambos enfoques son complementarios dentro del marco del PSE. La integración proporciona una visión sistémica para maximizar sinergias, mientras que la intensificación ofrece tecnologías que materializan esas sinergias (Figura 2).

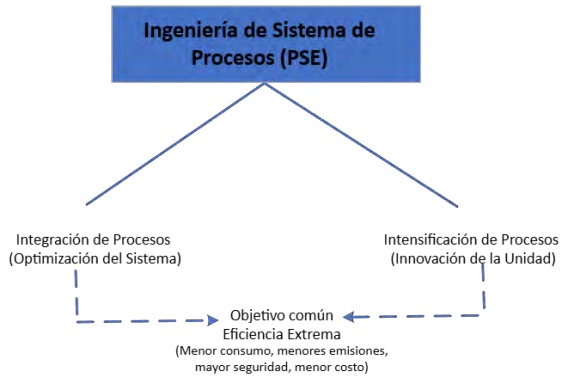


Figura 2. Relación conceptual entre la integración e intensificación de procesos.

2.5. Optimización de procesos

La optimización de procesos constituye uno de los pilares centrales de la Ingeniería de Sistemas de Procesos (PSE). Mientras que el modelado —descrito en la Sección 2.3— proporciona la representación matemática del comportamiento del sistema, la optimización actúa sobre estos modelos para identificar las condiciones operativas que ofrecen el mejor desempeño. Este proceso consiste en formular y resolver rigurosamente un problema matemático que maximiza o minimiza una función objetivo sujeto a restricciones físicas, termodinámicas, ambientales y económicas (Ponce-Ortega y Hernández-Pérez, 2019). De manera general, un problema de optimización se compone de:

1. Función objetivo: el índice de desempeño a optimizar: min C(x,y)
2. Variables de decisión: por ejemplo: flujos, temperaturas, presiones, etc.
3. Restricciones: pueden ser igualdades (por ejemplo, balances de masa) y desigualdades (límites de operación) que provienen del modelo.

Para resolver estos problemas, se emplean dos enfoques principales. El primero es la optimización determinista, que comúnmente emplea gradientes para localizar eficientemente un óptimo (Lin y col., 2012). Dentro de este grupo destacan técnicas para resolver problemas de Programación Lineal (LP), Programación No Lineal (NLP) y Programación Mixta Entera No Lineal (MINLP), esta última indispensable para integrar variables continuas y discretas en el

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

diseño de procesos (Liñán y Ricardez-Sandoval, 2025).

Por otro lado, cuando los sistemas presentan no convexidad o están representados por modelos tipo "caja negra" se utiliza la optimización metaheurística. Estos métodos —como algoritmos genéticos (Haldurai y col., 2016; Kramer, 2017), enjambre de partículas (Zhang y col., 2015) y evolución diferencial (Hu y col., 2022)— son robustos ante la búsqueda global y libres de derivadas, aunque suelen requerir mayor esfuerzo computacional (Peres y Castelli, 2021).

2.6. Control de procesos

El control de procesos es una de las disciplinas más importantes en la Ingeniería de Sistemas de Procesos (PSE). Su relevancia ha crecido por diversos factores estructurales y estratégicos en la industria química moderna: a) Alta integración entre unidades: en muchas plantas químicas, los procesos no operan de forma aislada, la salida de una unidad es a menudo la alimentación de otra, esta integración implica que una perturbación menor en una etapa puede propagarse y amplificarse, generando desviaciones en otras etapas, b) Exigencias normativas y de seguridad, con regulaciones ambientales cada vez más estrictas y criterios de seguridad de procesos (sobrepresiones, reacciones fuera de control, temperaturas extremas, acumulación de materiales peligrosos) que demandan un control muy robusto, Las plantas se deben ajustar de manera dinámica a cambios y riesgos sin sacrificar la eficiencia y cumplir con diversas normativas, c) Presiones económicas y de mercado, esto implica que las plantas deben operar de manera eficiente ante los cambios en costos de materias primas, cambios tecnológicos y demanda de productos cada vez más especializados, d) Rentabilidad, operando de manera óptima a pesar de cambios en materias primas y condiciones de operación, manteniendo las variables críticas en los niveles deseados, amortiguando perturbaciones y minimizando desviaciones.

Para poder abordar el control de procesos de manera adecuada es necesario conocer la complejidad dinámica del sistema, además de conocer los valores nominales de las variables, es necesario modelar cómo éstas evolucionan a lo largo del tiempo, afectándose entre sí y su variabilidad ante distintas perturbaciones. Para ello se requieren modelos matemáticos (ecuaciones diferenciales) que describan la dinámica del proceso, su linealización o su

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

comportamiento no lineal, y el uso de herramientas como la transformada de Laplace para obtener funciones de transferencia que relacionan variables de entrada con variables de salida. Además, existen estrategias de control clásico, como los lazos de control retroalimentado (*feedback*) y control anticipado (*feedforward*), los cuales son fundamentales para regular variables como temperatura, presión, nivel y caudal. Estas estrategias de control son robustas y fáciles de implementar para operaciones rutinarias. Sin embargo, en eventos como paros, arranques y fallos de la instrumentación estas estrategias pueden no ser suficientes, por ello es necesario diseñar estrategias más avanzadas que puedan adaptarse a condiciones extraordinarias.

3. Aplicaciones de las herramientas de PSE a las industrias química y petroquímica

Las herramientas presentadas de la Ingeniería de Sistemas de Procesos han sido ampliamente aplicadas para el análisis y mejora de procesos en las industrias química y petroquímica. En esta sección se presentan y discuten algunas de estas aplicaciones. Es importante resaltar que las herramientas de PSE regularmente se complementan, por lo que suelen aplicarse dos o más en forma conjunta, como es el caso del modelado y la optimización, o el diseño óptimo de procesos.

*Sensores blandos en refinación***.** Chen y col. (2011) desarrollaron un esquema de aprendizaje basado en núcleos adaptativos locales para sensores blandos en procesos no lineales, demostrando su aplicación en la estimación del punto final de un corte de crudo en destilación atmosférica con mejoras de desempeño respecto a enfoques globales. Más recientemente, la aplicación de un marco de aprendizaje automático para la predicción de la temperatura de destilación ASTM 95% de nafta pesada en una refinería industrial en Brasil logró mejorar el coeficiente de determinación R^2 en un 120% respecto al modelo previo en producción, resultado que se traduce en ganancias económicas significativas al ser desplegado en tiempo real (Vázquez y col., 2023). Cao y col. (2025) formalizaron este proceso mediante *Soft Sensor Manager*, una herramienta que automatiza el diseño, validación e implementación de sensores blandos en entornos industriales.

*Detección y diagnóstico de fallas***.** Xiao y col. (2023) propusieron un autocodificador profundo semi-supervisado aplicado al

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

proceso TEP, obteniendo mayor exactitud de predicción que los métodos tradicionales de PCA. Hartung y col. (2023) evaluaron de forma comprehensiva métodos modernos de detección de anomalías no supervisados sobre el mismo *benchmark*, concluyendo que los métodos basados en reconstrucción ofrecen el mejor compromiso entre precisión y generalización para datos de proceso en serie de tiempo. En la industria del petróleo y gas, Putri y col. (2024) analizaron 91 trabajos de analítica predictiva (2021-2023), identificando que los modelos de clasificación con bosques aleatorios y las técnicas híbridas K-Means+RF alcanzan precisiones del 92-98% en la identificación temprana de fallas en pozos de producción.

*Mantenimiento predictivo y digitalización en empresas líderes***.** Shell implementó un sistema de mantenimiento predictivo que monitorea más de 10,000 equipos en tiempo real, procesando más de 20,000 millones de filas de datos semanales. Su implementación en la refinería de los Países Bajos permitió identificar 65 válvulas de control que requerían reparación antes de que ocurrieran fallas, previniendo pérdidas de producción y riesgos ambientales (Energies Media, 2025). En el frente de la sostenibilidad, Hernández-Betancur y col. (2026) presentaron un método híbrido que integra ingeniería de datos y PSE para el análisis del flujo químico al final de la vida útil de los productos, identificando posibles liberaciones al medio ambiente como apoyo a la economía circular.

*Gemelos digitales***.** La convergencia del análisis de datos con los gemelos digitales representa la evolución más reciente en la industria de procesos. AGC Inc. reportó en 2023 el despliegue de un gemelo digital para su planta de fabricación de monómero de cloruro de vinilo (VCM) en Indonesia, obteniendo mejoras en eficiencia energética y estabilidad operativa (Global Market Insights, 2025). Pal y col. (2025) revisaron el estado del arte de los gemelos digitales en la industria química, identificando como componentes clave la integración de datos, el modelado híbrido y la analítica en tiempo real, así como los principales retos para su adopción: alta demanda computacional, integración con sistemas legados, ciberseguridad y falta de estandarización.

Integración energética en refinerías y complejos petroquímicos. Una de las primeras enfoques de la integración de procesos fue en el análisis de punto de pliegue (*pinch*), que permite diseñar procesos para minimizar el consumo de energía y

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

maximizar la recuperación de calor. García-Maza y col. (2025) propone la integración de una planta de hidroalquilación mediante la tecnología *pinch*, realizando simulaciones en HYSYS para optimizar el consumo y recuperación de energía, mejorando la eficiencia en la producción de productos derivados del gasóleo.

Columnas de Pared divisoria (DWC) para separación de mezclas complejas. Las columnas de pared divisoria son columnas de destilación que incorpora una pared vertical que permite separar mezclas ternarias o cuaternarias en una misma unidad, logrando importantes ahorros en costos y energía. Zhai y col. (2015) realizan un estudio sobre la optimización del sistema de destilación en la producción de cumeno usando DWC, simulando un proceso industrial real y demostrando una significativa reducción del costo anual (TAC). Pappas et al. (2023) desarrollan un modelo dinámico y estrategias de control para la separación de metacrilato de metilo en mezclas cuaternarias usando DWC, confirmando la efectividad de la operación propuesta.

Uso complementario de herramientas de modelado y simulación. Dentro del modelado y simulación de procesos existen distintas perspectivas acerca de la estrategia más adecuada para el análisis de procesos. Una combinación que permite comprender con un mayor nivel de detalle es el uso de simuladores de estado estacionario, como Aspen Plus, complementado con herramientas de dinámica computacional de fluidos. Los simuladores en estado estacionario permiten conocer la respuesta de un sistema y generar información respecto al diseño de proceso, incluso realizando optimización. Por otra parte, las herramientas de CFD permiten entender con mayor detalle los fenómenos de transferencia de momentum, calor y masa, con lo cual es posible realizar el diseño mecánico riguroso de los equipos, así como entender la hidrodinámica de los sistemas. Este tipo de estrategias ha sido aplicado en casos como el estudio de tecnologías de Captura de Carbono (CCUS) como la *Chemical Looping Combustion* (Banerjee y Agarwal, 2017), así como en el análisis de sistemas complejos para la separación de mezclas de hidrocarburos (Rodríguez-Ángeles y col., 2015).

4. Herramientas en desarrollo y perspectivas

La Ingeniería de Sistemas de Procesos se encuentra en constante evolución, adaptándose a los cambios en la capacidad de cómputo para desarrollar tecnologías avanzadas que permitan resolver problemas cada vez más complejos y en multiescalas. En estas secciones se discuten algunos avances recientes en el área, así como las perspectivas para los siguientes años.

El análisis de datos en PSE se encuentra en una fase de consolidación acelerada, impulsada por la proliferación de sensores IIoT, el incremento en capacidad computacional y la demanda de procesos más eficientes, seguros y sostenibles. En el corto plazo, los modelos híbridos SGML se consolidarán como estándar industrial para sensores blandos y modelos de optimización, permitiendo extrapolar con mayor confianza fuera del dominio de entrenamiento, un requisito crítico para el diseño de procesos y el control bajo condiciones extremas (Sansana y col., 2021). En el mediano plazo, la XAI emergerá como requisito regulatorio y operativo en entornos de alta criticidad, facilitando la certificación de sistemas de monitoreo bajo marcos normativos como IEC 61511 o ISO 31000. En paralelo, el aprendizaje por refuerzo (*Reinforcement Learning*) muestra potencial creciente para la optimización de políticas de operación y control en tiempo real (Gani y col., 2026).

Una evolución reciente en el modelado basado en datos es el Gemelo Digital (*Digital Twin* - DT), la arquitectura central de la digitalización en la industria de procesos. Un DT no es solo un modelo de simulación; es un ecosistema dinámico que integra un modelo híbrido de alta fidelidad con datos operativos en tiempo real provenientes de sensores (IIoT) y sistemas de control (DCS). Esta sincronización constante permite un monitoreo predictivo continuo, la simulación de escenarios "qué pasaría si" sin tocar la planta real, y, fundamentalmente, la provisión de analítica prescriptiva para guiar al operador en las mejores acciones de control. Los Gemelos Digitales están transformando la gestión de activos (mantenimiento predictivo) y la optimización energética en plantas de alto valor, a pesar de los desafíos inherentes como la complejidad de la integración de datos y la ciberseguridad (De Prada y col., 2022; Pal y col., 2025; Kongsberg Digital, 2025). Como se puede notar, el modelado ha evolucionado de una herramienta de diseño a un motor dinámico

para la excelencia operacional, garantizando que los procesos químicos sean más eficientes, seguros y sostenibles. Se espera que en los siguientes años estas herramientas continúen implementándose en las industrias química y petroquímica.

A largo plazo, la integración de los Modelos de Lenguaje de Gran Escala (LLMs) con las herramientas de PSE abre una frontera disruptiva: estos modelos podrían complementar las técnicas de PSE en modelado multiescala, generación de datos sintéticos y asistencia en la toma de decisiones de diseño (Gani y col., 2026). Esta tendencia, junto con la consolidación de los gemelos digitales como plataformas centrales de gestión del ciclo de vida del proceso, apunta a que el análisis de datos dejará de ser una herramienta de soporte para convertirse en el núcleo operacional de las plantas del futuro (Pal y col., 2025; Peterson y col., 2025). Para materializar este potencial, será necesario resolver desafíos persistentes como la ciberseguridad industrial, la estandarización de protocolos de integración de datos y la formación de ingenieros con competencias sólidas en ciencia de datos (Daoutidis y col., 2024; Torres y col., 2025).

Otro aspecto que ha encontrado aplicaciones recientes sobre las estrategias de diseño, motivado principalmente por las tendencias en los conceptos sobre la industria 4.0/5.0 ha sido la digitalización de procesos y el uso de la inteligencia artificial. En el caso de la digitalización, el uso de modelos subrogados basados en *machine learning* han reducido significativamente la inversión computacional para diseños de procesos (convencionales e intensificados) simulados rigurosamente, permitiendo la selección óptima de estructuras con los mejores comportamientos (técnicos, económicos, ambientales y de seguridad) desde etapas tempranas de diseño (Nele y col., 2024; Palotai y col., 2025). Asimismo, el desarrollo de gemelos digitales (*digital twins*) ha permitido el rediseño continuo, el ajuste y su respectiva optimización del proceso, dentro de un esquema de ciclo de vida (Zhang y col., 2024; Li y col., 2025). En el caso de la inteligencia artificial, ésta ha sido usada para predecir propiedades de las sustancias, sugerir alternativas de configuraciones de proceso, así como brindar elementos en la toma de decisiones sobre los diseños propuestos (Boy y col., 2025).

Respecto a la optimización de procesos, esta ha evolucionado para responder a las nuevas

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

demandas globales. La industria actual ya no busca solo rentabilidad, sino soluciones que integren criterios ambientales, operativos y de seguridad (Sharma y Kumar, 2022). Esto ha impulsado la optimización multiobjetivo, que permite visualizar a través de frentes de Pareto las compensaciones entre objetivos en conflicto (Kang y col., 2024).

Asimismo, un reto fundamental es la optimización bajo incertidumbre, donde se consideran variaciones en precios, disponibilidad de materias primas, demanda, degradación de catalizadores y otras variaciones del entorno. Los enfoques robustos y estocásticos permiten identificar soluciones que se mantienen viables en múltiples escenarios (Acar y col., 2021).

La creciente digitalización de las plantas químicas está impulsando la Optimización de Gran Escala a Nivel Empresarial *(Enterprise-Wide Optimization*, EWO). Este paradigma integra la optimización del proceso con la planificación, la logística y el control, extendiendo el alcance de la optimización desde la unidad de proceso hasta toda la cadena de suministro (Nikkhah y col., 2025).

Respecto al control de procesos, existen algunas tendencias que se deben seguir explorando: el control predictivo basado en modelos y la integración de esta estrategia con inteligencia artificial para la predicción de modelos con incertidumbre (Dutta y Upreti, 2021); sistemas de control digital y la integración de sistemas de control con modelos de planeación, calendarización y optimización en tiempo real; el uso de inteligencia artificial y *machine learning* para la identificación de patrones (Raven y col, 2024), análisis de datos, predicción de fallas y toma de decisiones automatizada y gemelos digitales (Peterson y col., 2025). Todas estas estrategias están dirigidas a proporcionar sistemas de control que hagan que los procesos químicos sean más seguros, eficientes y sostenibles.

5. Conclusiones

La Ingeniería de Sistemas de Procesos (PSE) aporta herramientas que se han convertido en fundamentales para el Ingeniero Químico moderno, dando un sólido conocimiento científico que contribuye a la mejora continua de los procesos productivos. El análisis presentado en este trabajo permite visualizar el gran impacto que ha tenido la aplicación de estas herramientas en las industrias químicas y petroquímicas. El uso de herramientas de modelado y simulación han permitido el

análisis y mejora de unidades de proceso o procesos completos; la implementación de tecnologías intensificadas y sistemas integrados, en conjunto con la aplicación de estrategias de optimización, han permitido la mejora de los indicadores económicos de los procesos, así como la reducción de su impacto ambiental. Por otra parte, se ha identificado que una de las áreas del PSE con mayor relevancia en la actualidad es el manejo de grandes cantidades de datos para el estudio de los procesos químicos, a través de herramientas de inteligencia artificial, modelos híbridos y gemelos digitales, dada la capacidad de estas estrategias para considerar interacciones complejas que los modelos tradicionales no logran capturar. Sin embargo, existen aún desafíos relacionados con la generación de datos adecuados para obtener modelos que aporten predicciones precisas, la seguridad de la información, así como la formación de especialistas en ciencia de datos. Por otra parte, es de gran importancia el desarrollo de herramientas para la resolución de problemas de diseño, optimización y control cada vez más complejos, que consideren el efecto de las incertidumbres, la toma de decisiones multicriterio, así como el análisis en multiescala. Esto, a su vez, implicará una demanda mayor de poder computacional.

Referencias bibliográficas

Abubakar, M.Y., Reuben, P., Adeshewa, T.O., y Adam, A.B. (2024). Recent advances in sustainable chemical process design in green chemistry- a review. *International Research Journal of Chemistry*, 44, 1782.

Acar, E., Bayrak, G., Jung, Y., Lee, I., Ramu, P., y Ravichandran, S. S. (2021). Modeling, analysis, and optimization under uncertainties: a review. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 64(5), 2909-2945. https://doi.org/10.1007/s00158-021-03026-7

Ahang, M., Charter, T., Abbasi, M., Khadivi, M., Ogunfowora, O., y Najjaran, H. (2024). Intelligent condition monitoring of industrial plants: An overview of methodologies and uncertainty management strategies. *arXiv preprint*.

https://doi.org/10.48550/arXiv.2401.10266

Aristizábal-Marulanda, V., y Cardona Alzate, C.A. (2019). Methods for designing and assessing biorefineries:

Review, *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, 13(3), 789–808. https://doi.org/10.1002/bbb.1961

Baldea, M. (2015). From process integration to process intensification. *Computers & Chemical Engineering*, 81, 104-114. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2015.03.011

Banerjee, S., y Agarwal, R.K. (2017). Review of recent advances in process modeling and computational fluid dynamics simulation of chemical-looping combustion. *International Journal of Energy for a Clean Environment*, 18, 1-37. https://doi.org/10.1615/InterJEnerCleanEnv.2017019433

Bernal Neira, D.E., Gómez-Castro, F.I., del-Río-Chanona, E.A. y Rico-Ramírez, V. (2025). Future insights for optimization in chemical engineering. En F.I. Gómez-Castro, V. Rico-Ramírez (Eds.). *Optimization in Chemical Engineering: Deterministic, Meta-Heuristic and Data-Driven Techniques* (pp. 425-444). De Gruyter.

Bouchouit, K., y Elhamma, A. (2025). The carbon footprint as a key indicator for environmental management controllers: Towards environmental performance – A literature review. *European Scientific Journal*, 21(4), 109-132. https://doi.org/10.19044/esj.2025.v21n4p109

Boy, O.C., Nogueira, I.B.R., Di Caprio, U., y Leblebici, M.E. (2025). AI-aided process intensification of structures. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 216, 110406. doi: https://doi.org/10.1016/j.cep.2025.110406

Cao, L., Su, J., Conde, E., Siang, L.C., Cao, Y., Gopaluni, B. (2025). A novel automated soft sensor design tool for industrial applications based on machine learning. *Control Engineering Practice*, 160, 106322. https://doi.org/10.1016/j.conengprac.2025.106322

Chau-Chyun, C., Gorensek, M.B., Scott, J.K. y Palou-Rivera, I. (2020). Process Modeling of Intensified Chemical Processes. *Chemical Engineering Progress*, March 2020. https://www.aiche.org/resources/publications/cep/2020/march/process-modeling-intensified-chemical-processes

Chen, K., Ji, J., Wang, H., Liu, Y., Song, Z. (2011). Adaptive local kernel-based learning for soft sensor modeling of nonlinear processes. *Chemical Engineering Research and Design*, 89(11), 2117–2124. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2011.01.032

Daoutidis, P., Lee, J.H., Rangarajan, S., Chiang, L., Gopaluni, B., Schweidtmann, A.M., Harjunkoski, I., Mercangöz, M., Mesbah, A., Boukouvala, F., Lima, F.V., del Río Chanona, A., y Georgakis, C. (2024). Machine learning in process systems engineering: Challenges and opportunities. *Computers & Chemical Engineering*, 181, 108523. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2023.108523

De Prada, C., Galán-Casado, S., Pitarch, J.L., Sarabia, D., Galán, A. y Gutiérrez, G. (2022). Gemelos Digitales en la Industria de Procesos. *Revista Iberoamericana de Automática e Informática Industrial*, 19(3), 285–296. https://doi.org/10.4995/riai.2022.16901

Dutta, D., y Upreti, S.R. (2021). Artificial intelligence-based process control in chemical, biochemical, and biomedical engineering. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 99 (11), 2467-2504. https://doi.org/10.1002/cjce.24246

El-Halwagi, M.M. (2006). *Process Integration, Vol. 7*. Academic Press.

Energies Media. (2025). AI in oil and gas: preventing equipment failures before they cost millions. https://energiesmedia.com

Furda, P., Variny, M., Labovská, Z., y Cibulka, T. (2020). Process drive sizing methodology and multi-level modeling linking MATLAB® and Aspen Plus® environment. *Processes*, 8(11), 1495. https://doi.org/10.3390/pr8111495

Gani, R., Bernal Neira, D.E., Pistikopoulos, E.N., y Georgakis, C. (2026). Data, models, algorithms, AI and the role of PSE – the generation next. *Computers & Chemical Engineering*. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2026.109564

García-Maza, S., Acosta-Esalas, L. J., y González-Delgado, A. D. (2025). Mass integration of a large-scale gas oil hydrocracking process using pinch analysis. *Chemical Engineering Transactions*, 119, 421-426. https://doi.org/10.3303/CET25119071

Global Market Insights. (2025). Digital Twin Market Size & Share, Growth Analysis 2025-2034. https://www.gminsights.com

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

Haldurai, L., Madhubala, T., y Rajalakshmi, R. (2016). A study on genetic algorithm and its applications. *International Journal of Computer Sciences and Engineering*, 4(10), 139-143.

Hartung, T., Franks, B.J., Michels, T. Wagner, D., Liznerski, P., Reithermann, S., Fellenz, S., Jirasek, F., Rudolph, M., Neider, D., Leitte, H., Song, C., Kloepper, B., Mandt, S., Bortz, M., Burger, J., Hasse, H., y Kloft, M. (2023). Deep anomaly detection on Tennessee Eastman process data. *Chemie Ingenieur Technik*, 95(7), 1077-1082. https://doi.org/10.1002/cite.202200238

Häussling Löwgren, B., Hoffmann, C., Vijver, M.G., Steubing, B., y Cardellini, G. (2025). Towards sustainable chemical process design: Revisiting the integration of life cycle assessment. *Journal of Cleaner Production*, 491, 144831. https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2025.144831

Hernández-Betancur, J. D., Chea, J.D., Perez, D., y Ruiz-Mercado, G.J. (2026). Integrating data engineering and process systems engineering for end-of-life chemical flow analysis. *Computers & Chemical Engineering*, *204*, 109414. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2025.109414

Hu, Z., Li, P., y Liu, Y. (2022). Enhancing the performance of evolutionary algorithm by differential evolution for optimizing distillation sequence. *Molecules*, 27(12), 3802. https://doi.org/10.3390/molecules27123802

IAIA (1999). *Principles of environmental impact assessment best practice*. https://iaia.org/wp-content/uploads/2025/02/BEST-PRACTICE-Principles-of-EIA.pdf

IBM (2025). *What is environment, health and safety (EHS)?*

https://www.ibm.com/think/topics/environmental-health-safety

Jamaludin, N.F., Shuhaimi, N.A., Mohamed, O.Y., y Hadipornama, M.F. (2023). Quantification of carbon footprint in petroleum refinery process. *Chemical Engineering Transactions*, 106, 97-102. https://doi.org/10.3303/CET23106017

Kang, S., Li, K., y Wang, R. (2024). A survey on Pareto front learning for multi-objective optimization. *Journal of Membrane Computing*, 7, 128-134. https://doi.org/10.1007/s41965-024-00170-z

Kongsberg Digital (2025). *12 Game-Changing Ways Digital Twins Can Boost the Chemical. Industry*. https://kongsbergdigital.com/blog/12-game-changing-ways-digital-twins-can-boost-the-chemical-industry

Kramer, O. (2017). *Genetic Algorithm Essentials*. Springer.

Li, Y., Li, Z., Ren, J., Du, W., y Shen, W. (2025). A high-accuracy deep learning framework for digital twin model development of actual chemical processes. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 159, 111780. https://doi.org/10.1016/j.engappai.2025.111780

Lin, M. H., Tsai, J. F., y Yu, C. S. (2012). A review of deterministic optimization methods in engineering and management. *Mathematical Problems in Engineering*, 2012(1), 756023. https://doi.org/10.1155/2012/756023

Liñán, D. A., y Ricardez-Sandoval, L. A. (2025). Trends and perspectives in deterministic MINLP optimization for integrated planning, scheduling, control, and design of chemical processes. *Reviews in Chemical Engineering*, 41(5), 451-472. https://doi.org/10.1515/revce-2024-0064

Melo, A., Câmara, M.M., y Pinto, J.C. (2024). Data-driven process monitoring and fault diagnosis: A comprehensive survey. Processes, 12(2), 251. https://doi.org/10.3390/pr12020251

Muñoz de Cote Orozco, J. (2010). Las bebidas alcohólicas en la historia de la humanidad. *AAPAUNAM Academia, Ciencia y Cultura*, Febrero 2010, 42-52.

Marion, P., Bernela, B., Piccirilli, A., Estrine, B., Patouillard, N., Guilbot, J. y Jérôme, F. (2017). Sustainable chemistry: how to produce better and more from less?

Green Chemistry, 19, 4973-4989. https://doi.org/10.1039/C7GC02006F

Mohammadpoor, M., y Torabi, F. (2020). Big Data analytics in oil and gas industry: An emerging trend. *Petroleum*, 6(4), 321–328. https://doi.org/10.1016/j.petlm.2018.11.001

Mousa, J., Negny, S. y Ouaret, R. (2025). Hybrid neural networks for improved chemical process modeling: Bridging data-driven insights with physical consistency. *Digital Chemical Engineering*, 16, 100256. https://doi.org/10.1016/j.dche.2025.100256

Nele, L., Mattera, G., Yap, E.W., Vozza, M., y Vespoli, S. (2024). Towards the application of machine learning in digital twin technology: a multi-scale review. *Discover Applied Sciences*, 6(10), 502. https://doi.org/10.1007/s42452-024-06206-4

Nikkhah, H., Aghayev, Z., Shahbazi, A., Charitopoulos, V. M., Avraamidou, S., y Beykal, B. (2025). Bi-level data-driven enterprise-wide optimization with mixed-integer nonlinear scheduling problems. *Digital Chemical Engineering*, 14, 100218. https://doi.org/10.1016/j.dche.2025.100218

Pal, P. K., Hens, A., Behera, N. y Lahiri, S. K. (2025). Digital twins: Transforming the chemical process industry—A review. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 103(8), 3611-3636. https://doi.org/10.1002/cjce.25611

Palotai, B., Kis, G., Abonyi, J., y Bárkányi, A. (2025). Surrogate-based flowsheet model maintenance for Digital Twins. *Digital Chemical Engineering*, 15, 100228. https://doi.org/10.1016/j.dche.2025.100228

Pappas, I., Bindlish, R., Ali, M., y Pistikopoulos, E.N. (2023). Optimal operation of an industrial dividing wall column through multiparametric programming. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 62(37), 15029–15035. https://doi.org/10.1021/acs.iecr.3c00836

Pereira, C.J. (1999). Environmentally friendly processes. *Chemical Engineering Science*, 54, 1959-1973. https://doi.org/10.1016/S0009-2509(98)00504-1

Peres, F., y Castelli, M. (2021). Combinatorial optimization problems and

metaheuristics: Review, challenges, design, and development. *Applied Sciences*, 11(14), 6449. https://doi.org/10.3390/app11146449

Peterson, L., Gosea, I.V., Benner, P., y Sundmacher, Kai. (2025). Digital twins in process engineering.: An overview on computational and numerical methods. *Computers & Chemical Engineering*. 193, 108917. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2024.108917

Pistikopoulos, E.N., Barbosa-Povoa, A., Lee, J.H., Misener, R., Mitsos, A., Reklaitis, G.V., Venkatasubramanian, V., You, F. y Gani, R. (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., y Hernández-Pérez, L. G. (2019). *Optimization of Process Flowsheets through Metaheuristic Techniques*. Springer.

Putri, A.R., Yusoff, M., y Sallehud-din, M.T.M. (2024). A review of predictive analytics models in the oil and gas industries. *Sensors*, 24(12), 4013. Raven, D.B., Chikkula, Y., Patel, K.M., Al-Ghazal, A.H., Salloum, H.S., Bakhurji, A.S., y Patwardhan, R.S. (2024). Machine learning & conventional approaches to process control & optimization: Industrial applications & perspectives. *Computers & Chemical Engineering*, 189, 108789. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2024.108789

Reay, D., Ramshaw, C., y Harvey, A. (2013). *Process intensification: Engineering for Efficiency, Sustainability and Flexibility (2ª ed.)*. Butterworth-Heinemann.

Regufe, M.J., Santana, V.V., Ferreira, A.F., Ribeiro, A.M., Loureiro, J.M. y Nogueira, I.B. (2021). A hybrid modeling framework for membrane separation processes: Application to lithium-ion recovery from batteries. *Processes*, 9(11), 1939. https://doi.org/10.3390/pr9111939

Rodríguez-Ángeles, M.A., Gómez-Castro, F.I., Segovia-Hernández, J.G., y Uribe-Ramírez, A.R. (2015). Mechanical design and hydrodynamic analysis of sieve trays in a dividing wall column for a hydrocarbon mixture. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 97, 55-65. https://doi.org/10.1016/j.cep.2015.09.002

Sansana, J., Joswiak, M.N., Castillo, I., Wang, Z., Rendall, R., Chiang, L.H. y Reis, M.S. (2021). Recent trends on hybrid modeling for Industry 4.0. *Computers & Chemical Engineering*, 151, 107365. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2021.107365

Sharma, S., y Kumar, V. (2022). A comprehensive review on multi-objective optimization techniques: Past, present and future. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 29(7), 5605-5633. https://doi.org/10.1007/s11831-022-09778-9

Sharma, N. y Liu, Y.A. (2022). A hybrid science-guided machine learning approach for modeling chemical processes: A review. *AIChE Journal*, 68(5), e17609. https://doi.org/10.1002/aic.17609

Sheldon, R.A. (2007). The E Factor: fifteen years on. *Green Chemistry*, 9(12), 1273–1283. https://doi.org/10.1039/B713736M

Sinnott, R., y Towler, G. (2020a). Introduction to Design. En R. Sinnott, G. Towler (Eds.). *Chemical Engineering Design* (1–45). Butterworth-Heinemann.

Sinnott, R., y Towler, G. (2020b). *Chemical Engineering Design*. Elsevier.

Smith, R. (2005). *Chemical Process Design and Integration*. John Wiley & Sons Ltd.

Srinivasan, K., Puliyanda, A., Thosar, D., Bhakte, A., Singh, K., Addo, P., Srinivasan, R., y Prasad, V. (2025). Artificial intelligence and machine learning at various stages and scales of process systems engineering. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 103(3), 1004-1035. https://doi.org/10.1002/cjce.25525

Tian, Y., Demirel, S.E., Hasan, M.M.F., y 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

Torres, A. I., Ferreira, J., y Pedemonte, M. (2025). Machine learning and process systems engineering for sustainable chemical processes – A short review. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry*, 51, 100982.

Turton, R., Bailie, R.C., Whiting, W.B., Shaeiwitz, J.A., y Bhattacharyya, D. (2012) *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. Prentice Hall.

Van Antwerpen, F.J. (1980). The origins of Chemical Engineering. En W.F. Furter (Ed.). *History of Chemical Engineering* (pp. 1-14). American Chemical Society.

Vázquez, F.J., Abreu, M., y Lemos, J.M. (2023). A framework for enhancing industrial soft sensor learning models. *Digital Chemical Engineering*, 7, 100093.

Willis, M.S. (1966). Unit operations to transport phenomena. *Chemical Engineering Education*, Abril 1966, 46-51.

Xiao, Z., Kordon, A., y Sen, S. (2023). Fault detection and diagnosis in Tennessee Eastman process with deep autoencoder. *Annual Conference of the PHM Society*, 15(1). https://doi.org/10.36001/phmconf.2023.v15i1.3578

Young, D.M., y Cabezas, H. (1999) Designing sustainable processes with simulation: the waste reduction (WAR) algorithm. *Computers & Chemical Engineering*, 23, 1477–1491. https://doi.org/10.1016/S0098-1354(99)00306-3

Zhai, J., Liu, Y., Li, L., Zhu, Y., Zhong, W., y Sun, L. (2015). Applications of dividing wall column technology to industrial-scale cumene production. *Chemical Engineering Research and Design*, 102, 138–149. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2015.06.020

Zhang, Y., Wang, S., y Ji, G. (2015). A comprehensive survey on particle swarm optimization algorithm and its applications. *Mathematical Problems in Engineering*, 2015(1), 931256. https://doi.org/10.1155/2015/931256

Zhang, Y., Wang, W., Yang, Q., Tang, X., Ruan, W., Li, Y., Daoerji, S., Zhang, X., Ye, Y., Huang, J., Li, J., Yang, Y., Wu, X., Yang, H., y Cao, T. (2024). Promoting digital twin technology application for process industry: A novel generation modelling platform and its implementations. *Digital Twins and Applications*, 1(1), 51–74. https://doi.org/10.1049/dgt2.12010