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

INGENIERÍA DE SISTEMAS DE PROCESOS E INTELIGENCIA ARTIFICIAL: CUANDO LA TECNOLOGÍA AMPLÍA LA INTELIGENCIA HUMANA

Juan Gabriel Segovia-Hernández [a,*], Enrique Cossío-Vargas [b], Salvador Hernández [a]

[a] Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Guanajuato, Noria Alta S/N, Noria Alta,36000, Guanajuato, Gto., México. gsegovia@ugto.mx

[b] Universidad Tecnológica del Suroeste de Guanajuato, Carretera Valle-Huanímaro km 1.2, 38400, Valle de Santiago, Guanajuato, México.

Resumen

Este trabajo analiza de manera crítica y estructurada la convergencia entre la Ingeniería de Sistemas de Procesos (PSE) y la Inteligencia Artificial (IA), destacando no solo sus aplicaciones, sino su integración metodológica dentro de marcos formales de modelado, optimización y control. A diferencia de enfoques generales que presentan la IA como una herramienta aislada, el artículo muestra cómo su incorporación modifica la formulación y resolución de problemas clásicos de PSE, incluyendo superestructuras de proceso, optimización multiobjetivo, modelos subrogados, control predictivo y análisis bajo incertidumbre. Se presentan ejemplos en energía y descarbonización, industria química y de materiales, economía circular y gemelos digitales, detallando en cada caso el tipo específico de herramienta de IA empleada (modelado basado en datos, modelos híbridos, aprendizaje activo, control adaptativo) y las decisiones ingenieriles que apoyan, tales como selección tecnológica, diseño conceptual, definición de condiciones operativas y estrategias de mantenimiento predictivo. El trabajo también aborda retos fundamentales para la consolidación de esta convergencia, incluyendo la calidad y trazabilidad de datos, la interpretabilidad de modelos, la capacidad de extrapolación, las garantías físicas de las predicciones y la integración efectiva con *solvers* de optimización. Se distingue entre desafíos metodológicos generales del campo y aquellos dependientes del contexto industrial o académico. Se concluye que la IA no sustituye los fundamentos físico-matemáticos de la PSE, sino que amplía su alcance al permitir abordar problemas de mayor

dimensión, no linealidad e incertidumbre, constituyendo una pieza clave para el desarrollo de sistemas industriales más resilientes, eficientes y sostenibles.

Palabras clave: Ingeniería de Sistemas de Procesos; Inteligencia Artificial; Modelos híbridos físico-datos; Optimización bajo incertidumbre; Integración con *solvers*.

PROCESS SYSTEMS ENGINEERING AND ARTIFICIAL INTELLIGENCE: WHEN TECHNOLOGY EXPANDS HUMAN INTELLIGENCE

Abstract

This work provides a structured and critical analysis of the convergence between Process Systems Engineering (PSE) and Artificial Intelligence (AI), emphasizing not only applications but their methodological integration within formal frameworks of modeling, optimization, and control. Unlike generic perspectives that treat AI as an isolated tool, the paper demonstrates how its incorporation reshapes classical PSE problem formulations, including process superstructures, multi-objective optimization, surrogate modeling, model predictive control, and uncertainty analysis. Application domains such as energy and decarbonization, chemical and materials industries, circular economy, and digital twins are examined. In each case, the specific AI tools employed (data-driven modeling, hybrid models, active learning, adaptive control) and the engineering decisions they support—such as technology selection, conceptual design, operating condition determination, and predictive maintenance strategies—are explicitly identified. The paper also discusses key challenges for the consolidation of this convergence, including data quality and traceability, model interpretability, extrapolation capability, physical consistency guarantees of AI-based predictions, and effective integration with optimization solvers. A distinction is made between general methodological challenges and those dependent on industrial or academic implementation contexts. It is concluded that AI does not replace the physicochemical foundations of PSE; rather, it extends its scope by enabling the treatment of higher-dimensional, nonlinear, and uncertain problems, positioning this convergence as a central enabler for more resilient, efficient, and sustainable industrial systems.

Keywords: Process Systems Engineering; Artificial Intelligence; Hybrid physics–data models; Optimization under uncertainty; Solver integration.

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

1. Introducción

La humanidad enfrenta hoy algunos de los desafíos más complejos y urgentes de su historia reciente. El cambio climático, impulsado por décadas de uso intensivo de combustibles fósiles, exige una reducción drástica de las emisiones de gases de efecto invernadero. Al mismo tiempo, la transición hacia sistemas energéticos bajos en carbono requiere repensar cómo producimos, transformamos y utilizamos la energía. A estos retos se suman la presión creciente sobre los recursos naturales, la necesidad de garantizar la seguridad alimentaria para una población mundial en aumento y la demanda social de industrias más limpias, seguras, resilientes y responsables con el medio ambiente.

Resolver estos problemas no depende de una sola tecnología ni de soluciones aisladas. Por el contrario, exige una visión integral que permita comprender sistemas complejos, evaluar múltiples alternativas y tomar decisiones informadas considerando simultáneamente criterios técnicos, económicos, ambientales y sociales. En este contexto, la capacidad de integrar conocimiento científico, datos confiables y herramientas computacionales avanzadas se ha convertido en un factor decisivo para avanzar hacia modelos de desarrollo más sostenibles (Arunthavanathan y col, 2024a).

En este escenario, la Ingeniería de Sistemas de Procesos (Process Systems Engineering, PSE) ha desempeñado durante décadas un papel central en el desarrollo industrial. Esta disciplina ha proporcionado metodologías rigurosas para diseñar, analizar, optimizar y operar procesos industriales, permitiendo mejorar la eficiencia, reducir costos y aumentar la seguridad. Su principal fortaleza radica en ofrecer una visión holística de los sistemas, abarcando desde el nivel molecular y termodinámico hasta plantas industriales completas, redes energéticas y cadenas de suministro globales. Gracias a la PSE, ha sido posible entender cómo decisiones locales —por ejemplo, en un reactor o una etapa de separación— impactan el desempeño global de un sistema productivo (Arunthavanathan y col., 2024b).

Sin embargo, los sistemas industriales actuales son cada vez más complejos, interconectados y dinámicos. Incorporan nuevas materias primas, como biomasa o CO_2 capturado, operan bajo condiciones variables y deben cumplir regulaciones ambientales más estrictas. Esta creciente complejidad ha

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

impulsado la incorporación de herramientas digitales avanzadas, entre ellas la Inteligencia Artificial (IA), capaces de manejar grandes volúmenes de datos, identificar patrones complejos y apoyar la toma de decisiones en entornos inciertos.

Lejos de desplazar al ingeniero o sustituir el conocimiento basado en principios físicos, la IA está dando lugar a un nuevo paradigma conocido como inteligencia aumentada. En este enfoque, la experiencia, el juicio crítico y la comprensión fenomenológica del ingeniero se complementan con capacidades algorítmicas orientadas al análisis masivo de datos, el aprendizaje automático y la exploración acelerada de alternativas. Esta interacción estructurada entre conocimiento humano y herramientas inteligentes permite abordar problemas cuya escala y complejidad exceden los enfoques tradicionales (Gaddem y col., 2024).

Este artículo se explora cómo la convergencia entre la Ingeniería de Sistemas de Procesos y la Inteligencia Artificial está transformando la ingeniería de procesos, ampliando sus capacidades tradicionales y abriendo nuevas oportunidades para diseñar industrias más eficientes, seguras y sostenibles, capaces de responder a los grandes desafíos del siglo XXI.

2. ¿Qué es la Ingeniería de Sistemas de Procesos?

El aprovechamiento estratégico de los datos no solo permite describir mejor los procesos existentes, sino que también abre nuevas posibilidades para el diseño de procesos que aún no existen. En lugar de depender exclusivamente de largos ciclos de experimentación y prueba–error, la ingeniería de sistemas de procesos apoyada por la IA permite explorar virtualmente miles de alternativas, identificando rápidamente aquellas con mayor potencial técnico, económico y ambiental. Este cambio resulta especialmente relevante en un contexto donde la rapidez para desarrollar nuevas tecnologías puede marcar la diferencia entre una solución viable y una oportunidad perdida (Ajagekar y col., 2025).

Para comprender la magnitud de esta transformación, es útil contrastar los enfoques tradicionales de la PSE con las prácticas emergentes apoyadas por IA. Históricamente, el diseño y la operación de procesos se han basado en modelos

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

mecanísticos derivados de primeros principios, optimización determinística y estrategias de control ajustadas manualmente o mediante reguladores clásicos. Si bien estos enfoques han demostrado gran solidez y confiabilidad, suelen requerir simplificaciones estructurales y elevados tiempos computacionales cuando se enfrentan a sistemas altamente no lineales o de gran escala. En contraste, los enfoques apoyados por IA incorporan modelos basados en datos, modelos sustitutos que aproximan simulaciones complejas, optimización asistida por aprendizaje automático y esquemas de control adaptativo capaces de actualizarse en función de nueva información operativa. Este tránsito no implica reemplazar la base física de la PSE, sino ampliar su capacidad exploratoria y predictiva (Arunthavanathan y col., 2024b).

Además, los datos no solo describen el estado actual de un proceso, sino que también capturan su historia operativa. El análisis de datos históricos, combinado con modelos de PSE, permite identificar patrones de operación subóptima, condiciones que preceden a fallos y oportunidades para mejorar la estabilidad y la seguridad. Por ejemplo, en plantas químicas complejas, los modelos de aprendizaje automático pueden analizar años de datos de operación para anticipar desviaciones críticas, mientras que los modelos de PSE permiten evaluar el impacto sistémico de dichas desviaciones.

Los modelos constituyen el núcleo del análisis en la Ingeniería de Sistemas de Procesos. A través de ellos, el ingeniero transforma un sistema real en una representación matemática que describe cómo interactúan la materia, la energía y la información. Tradicionalmente, estos modelos se han construido a partir de primeros principios, utilizando balances de masa y energía, ecuaciones termodinámicas y leyes de transporte. Su principal fortaleza es que permiten comprender las causas físicas de los fenómenos observados y ofrecen un alto grado de confianza dentro de su dominio de validez (Gaddem y col., 2024).

No obstante, muchos procesos industriales modernos presentan comportamientos altamente no lineales, fenómenos multiescala y efectos difíciles de describir únicamente con modelos mecanísticos. En estos casos, los modelos basados en datos ofrecen una alternativa poderosa al aprender directamente de la información disponible.

La evolución más prometedora es la de los modelos híbridos, que integran fundamentos

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

físicos con técnicas de aprendizaje automático. En este enfoque, el conocimiento mecanístico proporcionado por la PSE actúa como estructura base, mientras que la IA captura comportamientos complejos o parcialmente conocidos. Por ejemplo, en una biorefinería integrada, los balances globales pueden describirse mediante modelos mecanísticos, mientras que un modelo de IA predice el rendimiento de etapas específicas con alta complejidad fenomenológica.

Estos modelos híbridos mejoran la capacidad predictiva, reducen la necesidad de datos puramente empíricos y aumentan la robustez frente a incertidumbres, manteniendo coherencia física en las predicciones.

Una vez formulados los modelos, el siguiente paso clave es la toma de decisiones. En la PSE clásica, esto implica simulación, optimización matemática y análisis de sensibilidad. La incorporación de la IA ha ampliado este repertorio mediante técnicas como modelos sustitutos que aceleran la evaluación de configuraciones de diseño y aprendizaje por refuerzo para el control adaptativo (Figura 1; Arunthavanathan y col., 2024a).

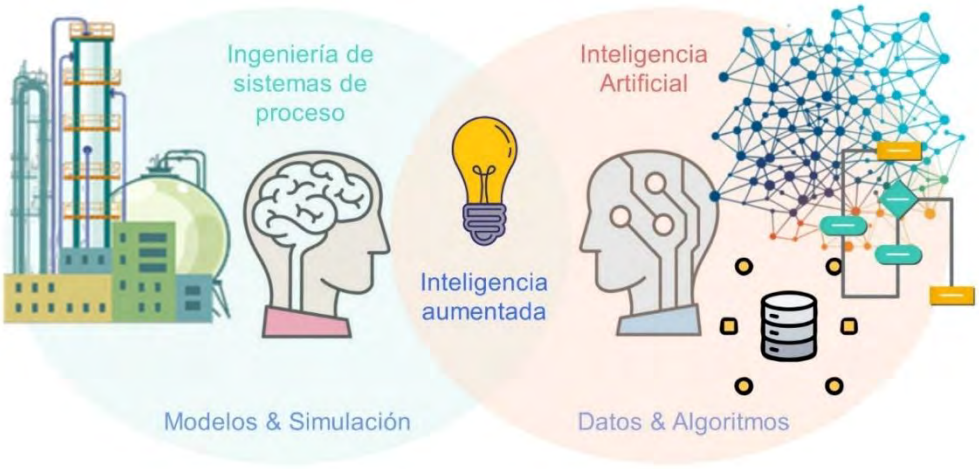


Figura 1. Inteligencia aumentada como interacción entre PSE e IA

3. Modelos: comprender y predecir sistemas complejos

Los modelos son el lenguaje con el que la ingeniería describe la realidad. En PSE, suelen basarse en principios fundamentales como balances de masa y energía, leyes termodinámicas y fenómenos de transporte (Ajagekar y col., 2025). Estos modelos permiten comprender el comportamiento del sistema desde una perspectiva causal.

Sin embargo, muchos procesos reales presentan interacciones no lineales y dinámicas complejas que dificultan su descripción exclusivamente mecanística. En estos casos, los enfoques basados en datos permiten complementar la representación física mediante el aprendizaje de patrones a partir de información histórica (Figura 2).

Como se discutió previamente, los modelos híbridos combinan fundamentos mecanísticos con aprendizaje basado en datos, permitiendo capturar comportamientos complejos sin perder coherencia física. En esta sección se enfatiza su utilidad práctica para mejorar la capacidad predictiva y apoyar decisiones bajo incertidumbre.

Formular un modelo es solo el primer paso. El verdadero valor de la PSE surge cuando se utilizan algoritmos para explorar escenarios, optimizar configuraciones y responder a preguntas del tipo "¿qué pasaría si…?". La IA ha ampliado notablemente el conjunto de herramientas disponibles, incluyendo optimización asistida por modelos sustitutos, aprendizaje por refuerzo para control dinámico y algoritmos generativos para exploración de configuraciones (Gani y col., 2022).

Un caso ilustrativo es el control avanzado de reactores químicos sometidos a variaciones en la calidad de alimentación o en la actividad catalítica. Un controlador basado en aprendizaje por refuerzo puede adaptarse a perturbaciones en tiempo real, manteniendo la operación dentro de límites seguros y eficientes (Rupprecht y col, 2026).

En coherencia con el paradigma de inteligencia aumentada introducido en la sección inicial, la integración de algoritmos avanzados en la PSE no sustituye el criterio ingenieril, sino que amplía su capacidad analítica y exploratoria. El valor de esta convergencia radica en combinar consistencia física, experiencia profesional y potencia computacional para enfrentar sistemas industriales de creciente complejidad.

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

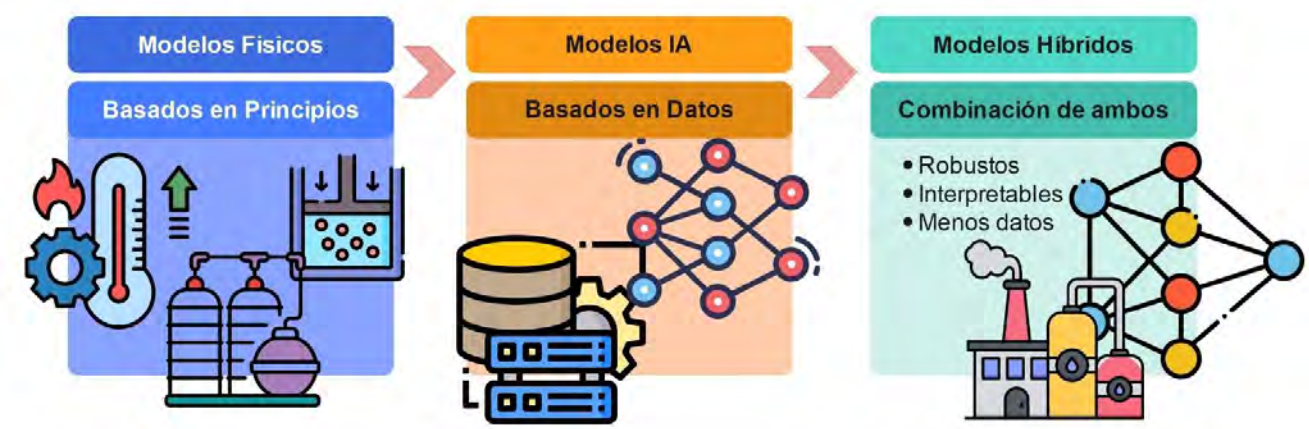


Figura 2. Interacción entre modelos físicos y basados en datos para generar modelos híbridos.

4. Aplicaciones reales y emergentes

La integración de la Ingeniería de Sistemas de Procesos y la Inteligencia Artificial ya está generando impactos tangibles y medibles en diversos sectores industriales y energéticos. Esta convergencia no solo mejora la eficiencia, flexibilidad y sostenibilidad de procesos existentes, sino que también habilita el desarrollo de configuraciones tecnológicas que serían difíciles de concebir mediante enfoques exclusivamente tradicionales (Figura 3). En este contexto, la IA no actúa como un sustituto de la modelación físico-matemática propia de la PSE, sino como una herramienta complementaria que amplía la capacidad de exploración, predicción y toma de decisiones en entornos complejos.

ámbitos donde estos avances son más evidentes, especificando el tipo de herramienta de IA empleada y la naturaleza de la decisión que apoyan (Arunthavanathan y col., 2024b; Gani y col., 2022).

4.1 Energía y descarbonización

Uno de los campos más estratégicos es el de la energía y la descarbonización, donde los problemas se caracterizan por alta complejidad tecnológica, múltiples criterios de desempeño y fuerte incertidumbre económica y regulatoria. En este contexto, la integración PSE–IA no se limita a acelerar cálculos, sino que modifica la forma en que se formulan y resuelven los problemas de diseño y operación.

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato



Figura 3. Del diseño a la operación en aplicaciones industriales

En el diseño de procesos para la producción de hidrógeno verde, la PSE formula típicamente el problema mediante superestructuras de proceso, donde se representan alternativas tecnológicas (tipos de electrólisis, esquemas de compresión, integración térmica). Tradicionalmente, la optimización de estas superestructuras se resuelve mediante programación no lineal o mixta-entera, lo que puede resultar computacionalmente costoso cuando se incorporan modelos detallados.

La IA se integra en este marco a través de (Bao y col, 2023):

- Modelos subrogados (surrogate models) entrenados con simulaciones rigurosas, que reemplazan temporalmente modelos mecanísticos complejos dentro de la optimización.
- Aprendizaje automático para reducción de dimensionalidad, identificando variables dominantes antes de la optimización.
- Optimización asistida por aprendizaje, que guía la exploración del espacio de diseño hacia regiones prometedoras.

La mejora frente al enfoque tradicional radica en la capacidad de explorar espacios de decisión de mayor dimensión y complejidad sin multiplicar exponencialmente el costo computacional. Esto impacta directamente decisiones como la selección de tecnología de electrólisis, capacidad instalada e integración energética óptima bajo perfiles variables de energía renovable.

En captura, utilización y almacenamiento de CO_2 (CCUS), la PSE estructura redes de separación y conversión mediante modelos rigurosos y análisis de integración energética. La IA se incorpora en (Bao y col, 2023):

- Modelado predictivo de propiedades termodinámicas, reduciendo la necesidad de experimentación exhaustiva en etapas tempranas.
- Optimización multiobjetivo bajo incertidumbre, donde algoritmos evolutivos o aprendizaje activo permiten identificar frentes de Pareto más eficientes que los métodos clásicos cuando el número de variables es elevado.
- Análisis global de sensibilidad, empleando técnicas de aprendizaje para detectar interacciones no lineales difíciles de capturar mediante métodos tradicionales.

En el diseño de e-combustibles, los modelos híbridos integran restricciones termodinámicas con redes neuronales entrenadas para predecir rendimientos o cinéticas complejas. Esta integración mejora la capacidad de extrapolación respecto a modelos puramente empíricos y reduce el sesgo estructural de modelos exclusivamente mecanísticos cuando existen fenómenos poco caracterizados.

4.2 Industria química y de materiales

En la industria química y de materiales, la integración PSE–IA ocurre en dos niveles: descubrimiento de materiales y evaluación sistémica. En la etapa de descubrimiento, la IA se utiliza mediante modelos generativos y aprendizaje supervisado para explorar espacios moleculares extensos. Sin embargo, la diferencia respecto a enfoques clásicos de cribado radica en su integración posterior dentro de marcos de PSE (Chowdhury y col, 2026).

Tradicionalmente, la selección de catalizadores o solventes podía realizarse mediante criterios aislados (actividad o selectividad). Con la integración PSE–IA (Baratsas y col., 2024):

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

- Los candidatos generados por IA se incorporan en modelos de proceso rigurosos.
- Se evalúan dentro de superestructuras de diseño, considerando múltiples configuraciones.
- Se integran en esquemas de optimización simultánea material–proceso, donde las propiedades predichas alimentan directamente balances y ecuaciones de desempeño.

Esto permite pasar de una optimización local del material a una optimización sistémica del proceso completo, mejorando decisiones de escalabilidad y viabilidad económica.

4.3 Economía circular y valorización de residuos

En economía circular, la PSE modela redes complejas de reciclaje mediante balances interconectados y análisis de redes de proceso. La dificultad principal radica en la variabilidad de las corrientes de entrada.

Aquí, la IA se integra en tres niveles metodológicos (Baratsas y col., 2024):

- Clasificación automática de corrientes mediante modelos supervisados, mejorando decisiones de separación previa.
- Modelos predictivos de calidad de producto, incorporados como subrogados dentro de problemas de optimización.
- Optimización robusta bajo incertidumbre, donde técnicas de aprendizaje ayudan a identificar configuraciones menos sensibles a variabilidad en composición.

A diferencia de enfoques clásicos que utilizan supuestos promedio de composición, la integración PSE–IA permite incorporar distribuciones reales de variabilidad, mejorando la robustez del diseño y reduciendo riesgos de operación fuera de especificación (Rupprecht y col, 2026).

4.4 Gemelos digitales y operación inteligente

En operación, la integración metodológica es aún más explícita. Los gemelos digitales combinan (Chowdhury y col, 2026):

Modelos dinámicos basados en primeros principios (PSE clásica).

- Estimadores de estado basados en datos.
- Control predictivo basado en modelo (MPC) complementado con aprendizaje por refuerzo.

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

- Tradicionalmente, el control se apoyaba en modelos linealizados y ajuste manual de parámetros.

La IA permite (Chowdhury y col, 2026):

- Actualización continua de parámetros mediante aprendizaje en línea.
- Identificación automática de dinámicas no modeladas.
- Mejora del desempeño del MPC (model predictive control) en sistemas altamente no lineales.

La mejora no radica únicamente en mayor precisión predictiva, sino en la capacidad de adaptación frente a cambios estructurales del proceso, envejecimiento de equipos o perturbaciones no anticipadas.

4.5 Impacto transversal y aportación metodológica

En conjunto, estos ejemplos muestran que la aportación de la IA dentro del marco de la PSE no es meramente instrumental ni cosmética. Su integración modifica (Arunthavanathan y col., 2024b):

- La formulación de superestructuras.
- La resolución de problemas de optimización de gran escala.
- El tratamiento explícito de incertidumbre.
- La estrategia de control dinámico.

Más que sustituir metodologías clásicas, la IA amplía su alcance al permitir tratar problemas de mayor dimensión, mayor no linealidad y mayor variabilidad de datos. El impacto transversal de esta convergencia radica en que las mismas herramientas —modelos subrogados, aprendizaje activo, optimización multiobjetivo asistida y control adaptativo— pueden integrarse coherentemente dentro de marcos formales de PSE en sectores como energía, química, materiales, alimentos y medio ambiente.

5. Retos hacia el futuro

A pesar de su enorme potencial para transformar la industria y contribuir a la sostenibilidad, la convergencia entre la Ingeniería de Sistemas de Procesos (PSE) y la Inteligencia Artificial (IA) enfrenta retos significativos que no pueden ignorarse. Superarlos no es solo un desafío tecnológico, sino también metodológico, organizacional y educativo.

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

La forma en que estos retos se aborden determinará si las herramientas de modelado predictivo, optimización asistida, control adaptativo y análisis avanzado de datos se traducen en decisiones confiables, físicamente consistentes y socialmente aceptadas (Ajagekar y col., 2025; Baratsas y col., 2024). Para clarificar su naturaleza, estos desafíos pueden distinguirse en retos generales del campo y retos dependientes del contexto de implementación.

5.1 Retos generales del campo

Uno de los desafíos más relevantes es garantizar la calidad, transparencia y trazabilidad de los datos, especialmente en aplicaciones de modelado basado en datos y optimización asistida por aprendizaje automático. Las decisiones de diseño de procesos, selección de condiciones operativas o programación de mantenimiento predictivo pueden verse comprometidas si los datos utilizados son incompletos, ruidosos o sesgados. En sistemas industriales complejos, es fundamental conocer el origen de los datos, las condiciones bajo las cuales fueron obtenidos y su dominio de validez. La PSE aporta metodologías para validar coherencia física mediante balances y restricciones termodinámicas; sin embargo, integrar sistemáticamente estos criterios en flujos de trabajo de IA sigue siendo un reto metodológico central.

Un segundo reto general es la interpretabilidad de los modelos, particularmente en aplicaciones de control adaptativo y predicción en tiempo real. Aunque ciertos algoritmos pueden ofrecer alta precisión, su carácter opaco dificulta comprender por qué recomiendan un determinado ajuste operativo o una configuración específica de diseño. En decisiones críticas —como modificar condiciones de reacción, ajustar *setpoints* o anticipar fallos— la falta de explicabilidad puede limitar la confianza de ingenieros y operadores. Por ello, el desarrollo de modelos explicables, junto con enfoques híbridos que incorporen restricciones físicas explícitas (balances, límites termodinámicos, monotonicidad), constituye una línea prioritaria de investigación.

Otro desafío transversal es la robustez y capacidad de extrapolación de los modelos. Muchas herramientas de IA funcionan adecuadamente dentro del rango de datos utilizados para su entrenamiento, pero pueden perder validez ante cambios de escala, nuevas materias primas o condiciones operativas no

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

observadas previamente. En ingeniería de procesos, donde los modelos se utilizan para evaluar escenarios futuros o configuraciones aún no implementadas, la extrapolación confiable es esencial. Esto exige estrategias como entrenamiento con datos representativos ampliados, incorporación de conocimiento físico en la arquitectura del modelo y validación cruzada en escenarios fuera de muestra. Garantizar que las decisiones apoyadas por IA mantengan coherencia física y estabilidad numérica fuera del dominio original es un requisito fundamental para su adopción generalizada.

Relacionado con lo anterior, surge el reto de las garantías físicas de las predicciones. A diferencia de los modelos mecanísticos tradicionales, que satisfacen explícitamente balances de masa y energía, modelos puramente basados en datos pueden generar resultados que violen principios fundamentales si no se imponen restricciones adecuadas. La integración efectiva entre PSE e IA requiere incorporar regularización física, penalizaciones basadas en leyes termodinámicas o estructuras híbridas que aseguren consistencia con principios de conservación. Sin estas garantías, el uso de modelos de IA en optimización o control puede conducir a soluciones matemáticamente óptimas pero físicamente inviables.

Finalmente, un desafío metodológico clave es la integración efectiva de modelos basados en IA con *solvers* de optimización. En muchos problemas de diseño y operación, los modelos predictivos deben incorporarse dentro de esquemas de programación no lineal o mixta-entera. Sin embargo, algunos modelos de aprendizaje automático no son diferenciables, presentan discontinuidades o carecen de estructura analítica explícita, lo que dificulta su uso en *solvers* tradicionales basados en gradientes. Desarrollar representaciones compatibles, aproximaciones diferenciables o estrategias de descomposición que permitan integrar modelos de IA en marcos formales de optimización es un reto técnico crucial para consolidar su aplicación en PSE.

5.2 Retos dependientes del contexto industrial o académico

Además de los desafíos metodológicos, existen retos asociados al entorno donde se implementan estas herramientas.

Uno de ellos es la integración tecnológica. En la práctica, las decisiones de diseño y operación se apoyan en simuladores de procesos, plataformas de optimización,

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

sistemas de control distribuido y herramientas de análisis de datos desarrolladas de forma independiente. Lograr que estos entornos intercambien información de manera consistente es esencial para que modelos predictivos, algoritmos de optimización y estrategias de control funcionen como un sistema integrado. Sin esta interoperabilidad —incluida la compatibilidad con *solvers* industriales y arquitecturas digitales existentes— el potencial de la convergencia PSE–IA puede fragmentarse (Rupprecht y col, 2026).

Otro reto contextual es el marco regulatorio y organizacional. En sectores como energía, química o alimentos, las decisiones respaldadas por IA —por ejemplo, cambios en condiciones de operación, rediseño de procesos o implementación de mantenimiento predictivo— deben cumplir normativas estrictas de seguridad y calidad. La validación y certificación de modelos basados en datos puede requerir protocolos adicionales que no siempre están claramente definidos, especialmente cuando se trata de modelos adaptativos que evolucionan con el tiempo.

Finalmente, uno de los desafíos más profundos es la formación interdisciplinaria de los ingenieros. El nuevo paradigma exige profesionales con sólidos fundamentos en termodinámica, fenómenos de transporte y diseño de procesos, pero también con competencias en ciencia de datos, programación y aprendizaje automático. No se trata de sustituir la formación clásica, sino de complementarla para que el ingeniero pueda evaluar críticamente cuándo utilizar un modelo mecanístico, cuándo aplicar un modelo basado en datos y cómo combinar ambos de forma coherente dentro de esquemas de optimización, análisis de incertidumbre o control avanzado (Rupprecht y col, 2026).

Superar estos retos será clave para que la convergencia entre PSE e IA no permanezca como una promesa tecnológica, sino que se consolide como una herramienta confiable, físicamente consistente y computacionalmente integrada para apoyar decisiones en todas las etapas del ciclo de vida de un proceso: diseño conceptual, ingeniería de detalle, operación y mejora continua. Solo mediante un enfoque crítico, transparente e interdisciplinario será posible aprovechar plenamente estas herramientas para construir sistemas productivos más eficientes, seguros y sostenibles (Arunthavanathan y col., 2024b).

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

6. Conclusiones

La Ingeniería de Sistemas de Procesos, potenciada por la Inteligencia Artificial, está entrando en una nueva etapa de evolución marcada por el concepto de inteligencia aumentada. Este nuevo paradigma no representa una ruptura con la ingeniería tradicional, sino una expansión natural de sus capacidades, en la que el conocimiento basado en principios físicos, la experiencia del ingeniero y las herramientas digitales avanzadas se integran para enfrentar problemas de una complejidad sin precedentes.

La convergencia entre PSE e IA no solo permite mejorar la eficiencia y competitividad industrial, reduciendo costos, consumo energético y emisiones, sino que también ofrece herramientas fundamentales para diseñar sistemas productivos más sostenibles, flexibles y resilientes. Gracias a modelos híbridos, algoritmos inteligentes y el uso estratégico de datos, es posible evaluar múltiples alternativas de diseño, anticipar fallos, optimizar la operación en tiempo real y tomar decisiones informadas incluso en contextos de alta incertidumbre.

En un mundo cada vez más interconectado y dinámico, donde los sistemas energéticos, industriales y ambientales están profundamente entrelazados, la capacidad de pensar en términos de sistemas completos resulta más importante que nunca. La PSE aporta este enfoque integral, mientras que la IA amplía el alcance del análisis, permitiendo explorar escenarios que antes eran computacionalmente inviables. Juntas, estas disciplinas proporcionan un marco poderoso para abordar retos globales como la descarbonización, la transición energética, la economía circular y la seguridad de los recursos.

Más allá de los avances tecnológicos, este cambio implica también una transformación en la forma de ejercer la ingeniería. El ingeniero del futuro no solo deberá dominar herramientas computacionales avanzadas, sino también mantener un fuerte compromiso con el pensamiento crítico, la ética y la responsabilidad social. La inteligencia aumentada no busca reemplazar el juicio humano, sino fortalecerlo, proporcionando mejores bases para la toma de decisiones que afectan a la industria, al medio ambiente y a la sociedad.

En este contexto, la integración de conocimiento humano, modelos físicos y algoritmos inteligentes se perfila como una de

las estrategias más prometedoras para diseñar el futuro de la industria y la energía. Aprovechar plenamente este potencial requerirá colaboración entre academia, industria y tomadores de decisión, así como una formación continua de profesionales capaces de moverse con soltura entre la ingeniería, los datos y la inteligencia artificial. Si este camino se recorre de manera responsable y crítica, la PSE apoyada por la IA puede convertirse en uno de los pilares clave para construir un desarrollo industrial más sostenible y alineado con los desafíos del siglo XXI.

Referencias bibliográficas

Ajagekar, A., Decardi-Nelson, B., Shang, C., y You, F. (2025). Computer-aided molecular design by aligning generative diffusion models: perspectives and challenges. Comput. Chem. Eng., 108989. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2024.108989

Arunthavanathan, R., Sajid, Z., Amin, M T, Tian, Y., Khan, F., y Pistikopoulos, E N. (2024a). Process safety 4.0: Artificial intelligence or intelligence augmentation for safer Process operation? AIChE J. 70 (7), e18475. https://doi.org/10.1002/aic.18475

Arunthavanathan, R., Sajid, Z., Khan, F., y Pistikopoulos, E N. (2024b). Artificial intelligence-Human intelligence conflict and its impact on process system safety. Dig. Chem. Eng. 11, 100151. https://doi.org/10.1016/j.dche.2024.100151

Bao, Z., Bufton, J., Hickman, R.J., Aspuru-Guzik, A., Bannigan, P., y Allen, C. (2023). Revolutionizing drug formulation development: the increasing impact of machine learning. Adv. Drug Deliv. Rev. 202, 115108.

Baratsas, S., Iseri, F., y Pistikopoulos, E N. (2024). A hybrid statistical and machine learning based forecasting framework for the energy sector. Comput. Chem. Eng. 188, 108740. https://doi.org/10.1016/j.addr.2023.115108

Chowdhury, S., Ghosh, A., Acharya, S., Saha, S., Pal, P. K., Roy, S., y Lahiri, S. K. (2026). Transforming chemical process engineering: The role of AI and machine learning in revolutionizing process systems. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 104(2), 699-731. https://doi.org/10.1002/cjce.70032

Gaddem, M R, Kim, J., Matsunami, K., Hayashi, Y., Badr, S., y Sugiyama, H. (2024).

Roles of mechanistic, data-driven, and hybrid modeling approaches for pharmaceutical process design and operation. *Current Opinion In Chemical Engineering*, *44*, 101019. https://doi.org/10.1016/j.coche.2024.101019

Gani, R., Chen, X., Eden, M R, Mansouri, S S, Martin, M., Mujtaba, I M, Padungwatanaroj, O., Roh, K., Ricardez-Sandoval, L., Sugiyama, H., Zhao, J., y Zondervan, E. (2022). Challenges and opportunities for process systems engineering in a changed world. En *Computer-aided chemical engineering/Computer aided chemical engineering* (pp. 7-20). https://doi.org/10.1016/b978-0-323-85159-6.50002-6

Rupprecht, S., Gao, Q., Karia, T., y Schweidtmann, A. M. (2026). Multi-agent systems for chemical engineering: A review and perspective. Current Opinion in Chemical Engineering, 51, 101209. https://doi.org/10.1016/j.coche.2025.101209