



**Ingeniería de Sistemas de Procesos: Desarrollo de estrategias y casos de estudio**

Departamento de Procesos y Tecnología (DPT)  
División de Ciencias Naturales e Ingeniería  
Universidad Autónoma Metropolitana - Cuajimalpa

Vo. Bo. Dra. Marcia Morales Ibarría  
Jefe del Departamento de Procesos y Tecnología

Marzo de 2021.

## INGENIERÍA DE SISTEMAS DE PROCESOS: DESARROLLO DE ESTRATEGIAS Y CASOS DE ESTUDIO

---

**Responsable del proyecto:** Dr. Roberto Olivares Hernández (DPT)

**Participantes del proyecto:** Dra. María Teresa López Arenas (DPT)

Dra. Helen Denise Lugo Méndez (DPT)

Dr. José Javier Valencia López (DPT)

Dr. Alfonso Mauricio Sales Cruz (DPT)

**Línea de investigación:** Modelado, Simulación, Optimización, Dinámica y Control de Procesos

**Orientación:** Investigación básica e investigación aplicada

**Fecha de inicio:** Marzo 2021.

**Duración:** 4 años.

## I. PROPUESTA DEL PROYECTO

### A. RESUMEN

La Ingeniería de Sistemas de Procesos es un área de la ingeniería cuya finalidad es la integración de herramientas de simulación y modelado para el diseño y optimización de procesos que transforman materias primas en productos y servicios; esto incluye la generación de energía. En esta propuesta de proyecto se desea promover el uso de herramientas de modelado matemático y computacionales para diseñar, optimizar e innovar en el desarrollo de procesos químicos y biológicos. De esta manera, se desean impulsar dos aspectos por medio de las colaboraciones entre integrantes, el primer aspecto es el desarrollo la investigación básica y aplicada a través del planteamiento y solución de problemas relacionadas a la industria utilizando estrategias de simulación y modelado. El segundo aspecto es el de docencia, organizando eventos que promuevan la educación en ingeniería sistemas de procesos y el desarrollo conjunto de proyectos terminales para los estudiantes de la carrera de ingeniería biológica.

### B. ANTECEDENTES

Actualmente en Ingeniería de Sistemas de Procesos (*PSE, process system engineering*) es bien reconocido el papel central que juega el modelado de procesos y productos químicos o biológicos en las áreas de diseño y simulación de procesos, así como su implicación en otras actividades inherentes tales como son: escalamiento, optimización, intensificación, control, detección de fallas, etc. En particular, en los años recientes se han desarrollado metodologías basadas en el modelado y simulación para ser utilizadas en el diseño de procesos complejos (por ejemplo, separadores de membrana, destiladores moleculares, biorreactores, etc.) o de nuevos productos (por ejemplo, biocombustibles, síntesis de fármacos, pesticidas o insecticidas, etc.). Obteniendo beneficios en la reducción de los costos de experimentación y escalamiento, mejorando la calidad de las decisiones de mercado, reduciendo el consumo de energía, aumentando el rendimiento y producción de producto final, evitando y previniendo fallas en el proceso, etc.

Las metodologías basadas en PSE se han incorporado firmemente en la práctica industrial, con equipos que aplican regularmente estos enfoques y herramientas. Los desafíos intelectuales para el área de PSE son el descubrimiento de conceptos y modelos para la predicción de rendimientos y para la toma de decisiones. Las investigaciones de PSE se esfuerzan por crear representaciones y modelos para generar alternativas razonables, y luego seleccionar entre ellos una solución que cumpla con las restricciones y optimice idealmente un objetivo. Por lo anterior, la Ingeniería de Sistemas de Procesos es una de las actividades fundamentales relacionada con la investigación y el desarrollo de procesos y productos químicos y biológicos, como se muestra en la Tabla 1.

**Tabla 1. Algunas disciplinas del área de PSE<sup>1</sup> (modificado de Grossmann & Westerberg, 2000).**

<b>Diseño de procesos</b>	<b>Operación de procesos</b>	<b>Control de procesos</b>
Síntesis de procesos de producción	Análisis y optimización de procesos	Monitoreo del proceso
Redes de recuperación de energía	Programación de redes de procesos	Medidas de controlabilidad
Diseño y síntesis de redes de reactores	Planificación de ciclos de producción	Control de modelo predictivo
Diagramas de flujo jerárquicos	Reconciliación de datos	Control no lineal
Optimización de procesos y superestructuras	Optimización en tiempo real	Control estadístico de procesos
Diseñar plantas multiproducto	Diagnóstico de fallas	Control de supervisión del proceso

Por lo cual en este proyecto se pretende dirigir la investigación sobre los siguientes tópicos generales:

- Desarrollo de modelos rigurosos para procesos y su validación teórica o experimental.
- Determinación de parámetros del modelo (cinéticos, de calor, etc.).
- Optimización de condiciones de operación de procesos.
- Sistemas de adquisición de datos, monitoreo y control para procesos.
- Herramientas computacionales de modelado, simulación, optimización y control.

### **C. OBJETIVO GENERAL Y PARTICULARES**

El objetivo general de este proyecto es resolver problemas de ingeniería de sistemas de procesos relacionados a diseño, síntesis, escalamiento, optimización, monitoreo y automatización de procesos químicos y biológicos.

Los objetivos particulares son:

- Generar conocimiento acerca del diseño de productos y procesos.
- Desarrollar, mantener y promover los nuevos modelos de unidades de operación y los nuevos modelos de productos y sus interfaces.
- Obtener modelos matemáticos que contribuyan a la mejor operación de los procesos químicos y biológicos.
- Promover el uso de herramientas computacionales avanzadas para la integración de modelos.
- Implementar las metodologías desarrolladas en casos de estudio de impacto actual.

---

<sup>1</sup> Grossmann, I. E. & Westerberg, A. W., 2000. Research challenges in process systems engineering. *AIChE*, 46(9), 1700-1703.

## **D. DESCRIPCIÓN**

### ***Hipótesis***

Los análisis apoyados en la teoría de PSE pueden contribuir a mejorar o superar los desafíos tecnológicos, ambientales y de mercado que aún presentan algunos procesos químicos y biológicos a diferentes escalas.

### ***Metodología***

#### ***DISEÑO Y EVALUACIÓN DE BIORREFINERÍAS***

En los últimos años se ha realizado considerable I&D en torno al diseño de biorrefinerías de segunda generación (2G). Por ejemplo, el estudio de caso de la producción de bioetanol 2G es una de las biorrefinerías más ampliamente investigadas, que se ha estudiado desde diferentes puntos de vista, por mencionar algunos: análisis de composición y disponibilidad de biomasa 2G para ubicaciones regionales, evaluación y comparación de pretratamientos, novedosos equipos de reacción, evaluación de tecnologías para la recuperación de etanol, integración de calor de proceso, diseño conceptual y evaluación tecnoeconómica, análisis de inventarios y evaluación del ciclo de vida, etc. No obstante, faltan enfoques y herramientas sistemáticos para decidir las soluciones más prometedoras del diseño de las biorrefinerías. Por lo en esta línea de investigación se pretende diseñar una biorrefinería sustentable, evaluando diversos aspectos desde un punto de vista de la ingeniería de procesos, incluyendo modelado de la cinéticas, análisis de su diseño y síntesis, monitoreo y control de las operaciones unitarias y la evaluación del desempeño de las biorrefinerías para la toma de decisiones.

#### ***EXERGOECONOMÍA DE SISTEMAS ENERGÉTICOS Y BIOENERGÉTICOS***

La exergoeconomía es la ciencia de la eficiencia energética y se basada en los análisis exergético económico, para explicar la distribución los recursos externos en el sistema y el proceso de formación de los costos de los productos y residuos, mediante la definición de la estructura productiva y del desarrollo y solución del modelo termoeconómico; y realizar el diagnóstico exergoeconómico de los sistemas energéticos, comparando condición de operación actual y una de referencia (línea base), o dos diferentes configuraciones con una misma producción, para estimar el impacto de ahorro de recursos y descomponerlo en términos de las irreversibilidades internas y externas. Los indicadores exergo económicos, de impacto ambiental y social, así como de mantenimiento, seguridad e higiene laboral, permiten diagnosticar integralmente los sistemas energéticos/bioenergéticos y formular recomendaciones de los mismos (cambio en la filosofía de operación, mantenimiento, reemplazo de equipos, modernización, etc.) para mejorar su desempeño; reducir el impacto ambiental y a la salud de sus residuos.

#### ***INGENIERÍA EN SISTEMAS BIOLÓGICOS***

En las últimas dos décadas se ha generado una gran cantidad de conocimiento sobre las funciones y componentes de los sistemas biológicos; células y microorganismos. Muchos de estos sistemas

biológicos han sido utilizados en la industria para la generación de compuestos, fármacos y biomoléculas de interés industrial, de esta manera se les ha tratado como fábricas celulares y por lo tanto, han sido objeto de aproximaciones de ingeniería, tal como la ingeniería metabólica. Por lo tanto, plantea el uso de herramientas de ingeniería de sistemas de procesos para la diseño y optimización de fábricas celulares y procesos. Estos trabajos de ingeniería hacen sinergia con otras disciplinas, tal como la biología de sistemas, con la cual se lleva a cabo la caracterización de las funciones biológicas y con la biología sintética, la cual es una práctica que abarca diseño y síntesis de nuevas capacidades o funciones en sistemas biológicos.

### ***MODELADO Y SIMULACIÓN MEDIANTE CFD DE BIORREACTORES.***

Los biorreactores agitados ya sea por medios mecánicos o neumáticamente son ampliamente utilizados en muchos procesos industriales. Los biorreactores de tanque agitado se utilizan para mejorar la transferencia de calor y masa. En cuanto, a los sistemas que inducen la mezcla mediante un flujo de gas, encontramos diseños como la columna de burbujeo y reactores airlift, en donde el movimiento del fluido es promovido por las burbujas ascendentes del gas. En la actualidad los detalles del patrón de flujo obtenido por los diferentes diseños de estos sistemas y el grado de mezcla que puede ser alcanzado en ellos es de gran interés en la mayoría de las aplicaciones industriales. Una Ingeniería de Biorreactores exitosa requiere conocimientos de diversos campos como la termodinámica, bioquímica, microbiología, ingeniería de reactores, dinámica de fluidos, mezclado y transferencia de calor y masa. En particular, la Dinámica de Fluidos juega un papel fundamental en el establecimiento de la relación entre la configuración y el rendimiento en un reactor. Para establecer esta relación, es necesario utilizar una variedad de herramientas y modelos de cinética química y/o biológica, las cuales, aunque están bien desarrolladas, sin embargo, en la mayoría de los modelos se hace uso de simplificaciones, asociadas principalmente a la complejidad de la dinámica de fluidos involucrada. Por lo anterior, esta línea de investigación está enfocada al modelado de los fenómenos de transferencia en biorreactores y su simulación mediante herramientas de Dinámica de Fluidos Computacional.

### **E. FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS**

Se espera dirigir proyectos de tesis a nivel licenciatura y posgrado, en las áreas de modelado, simulación, optimización, dinámica y control de procesos químicos y biológicos. Los alumnos podrán proceder de la UAM o de otras instituciones de educación superior.

### **F. IMPACTO ESPERADO DEL PROYECTO**

Desde el punto de vista de investigación, será en la generación del conocimiento y desarrollo de estrategias de modelado, simulación, optimización, dinámica y control a partir de diferentes formalismos, aplicado a diversos sistemas de procesos. Además, que el impacto se verá reflejado

en el fortalecimiento del Cuerpo Académico (Consolidado) “Ingeniería de Sistemas de Bioprocesos: Modelado y Simulación”, adscrito al Departamento de Procesos y Tecnología de la UAM-C.

## II. RECURSOS NECESARIOS PARA EL PROYECTO

### A. FINANCIAMIENTO E INFRAESTRUCTURA FÍSICA Y HUMANA ACTUAL

#### *Financiamiento*

Cada uno de los participantes cuenta con un presupuesto individual asignado por la Jefatura del DPT, del cual una parte será empleada para el desarrollo de este proyecto divisional mediante el pago de adquisiciones y/o renovaciones de software, gastos de asistencias a congresos, y consumibles en general.

Adicionalmente el Dr. Roberto Olivares Hernández cuenta con un proyecto externo “Desarrollo de herramientas computacionales para la caracterización de las capacidades metabólicas de microorganismos involucrados en la producción de compuestos en la industria química” financiado por CONACYT, por un monto total de \$643,305.00 para el periodo 2019-2022.

#### *Infraestructura física actual*

Equipo de cómputo:

- Workstation Dell Precisión Tower 7910 CTO (32 GB de memoria RAM, disco duro 2TB, 2 procesadores Intel Xeon con 12 núcleos c/u)
- 10 computadores personales
- Servidor virtual UAM-C

Programas computacionales especializados:

- ANSYS Academic CFD (V 17.1)
- COMSOL Multiphysic (V 5.2)
- MATLAB con toolboxes (R2020a)
- ASPEN Engineering Suite (V 9.1)
- SUPERPRO DESIGNER (V 10.0)
- MATHEMATICA (V 12)

Equipo experimental

- El Laboratorio de Instrumentación y Control (UAM-Cuajimalpa, Piso 8) cuenta con sistemas modulares de adquisición de datos (modelo NI-CompactDAQ) y de control embebido (modelo NI-CompactRIO) para medir y manipular señales de manera rápida y exacta; un reactor de 2 L automatizado con sistema de calentamiento/enfriamiento, y diversos sensores en línea (temperatura, pH, oxígeno disuelto, índice de refracción y densidad).

### ***Infraestructura humana actual***

Adicionalmente a los profesores participantes, se cuenta con 2 alumnos de maestría y 3 alumnos de doctorado desarrollando actividades afines a este proyecto.

## **B. PRESUPUESTO CALENDARIZADO**

Presupuesto	21I	21P	21O	22I	22P	22O	23I	23P	23O	24I	24P	24O
Interno UAM*	\$75,000			\$75,000			\$75,000			\$75,000		

\* De los presupuestos individuales asignados a los profesores participantes del DPT, con base en el histórico.

## **C. FUENTE DE FINANCIAMIENTO EXTERNAS**

Título del proyecto: Desarrollo de herramientas computacionales para la caracterización de las capacidades metabólicas de microorganismos involucrados en la producción de compuestos en la industria química

Patrocinador: CONACYT

Responsable del Proyecto: Dr. Roberto Olivares

Monto: \$643,305.00

Vigencia: Noviembre,2019- octubre,2022.

## **III. CALENDARIO DE ACTIVIDADES EN PERIODOS TRIMESTRALES**

Actividades	21I	21P	21O	22I	22P	22O	23I	23P	23O	24I	24P	24O
Modelado de la cinética de hidrólisis enzimática	X	X	X	X								
Diseño y evaluación de biorrefinerías 2G				X	X	X	X	X				
Estrategias de automatización de biorreactores									X	X	X	X
Modelado de un sistema energético	X	X	X	X								
Análisis energético, exergético, económico, exergoeconómico del sistema energético				X	X	X	X	X				
Diagnóstico exergoeconómico del sistema energético								X	X	X	X	X
Construcción de modelos a escala genómica	X	X	X	X	X							

Aplicación de algoritmos de optimización multiobjetivo para el modelado del metabolismo					X	X	X	X				
Modelado de la regulación del metabolismo celular.							X	X	X	X	X	X
Formulación de un problema de recuperación de calor (ORC)	X	X	X	X								
Análisis termodinámico de un ORC.					X	X	X	X				
Problema de optimización para utilizar energía térmica recuperada									X	X	X	X
Modelado de las ecuaciones de transporte en biorreactores.	X	X	X	X	X	X						
Implementación y simulación en software de CFD de modelos matemáticos de biorreactores de tanque agitado y neumáticos.				X	X	X	X	X	X			
Estimación de propiedades y correlaciones para transferencia de calor y masa en biorreactores.							X	X	X	X	X	X

#### IV. INFORMACIÓN PARA EL SEGUIMIENTO DEL PROYECTO

##### a. *Calendarización de productos esperados a lo largo del proyecto*

Producto	2021	2022	2023	2024
Publicación de artículos en revistas indizadas internacionales	1	1	1	1
Presentación de publicaciones en congresos nacionales	3	3	3	3
Presentación de publicaciones en congresos internacionales	2	2	2	2
Dirección de tesis o proyectos terminales de licenciatura	1	1	1	1
Dirección de tesis de maestría	1	1	1	1
Dirección de tesis de doctorado		1	1	1

##### b. *Resultados esperados*

###### *Metas científicas (entregables)*

- Publicación artículos en revistas internacionales indexadas.
- Presentación de resultados en congresos nacionales e internacionales.

###### *Metas académicas*

- Consolidación de un cuerpo académico “Ingeniería de Sistemas de Bioprocesos: Modelado y Simulación”, del Departamento de Procesos y Tecnología (DPT).
- Fortalecimiento de la docencia a nivel licenciatura y posgrado mediante el desarrollo de prácticas virtuales.
- Formación de alumnos de licenciatura y posgrado en el área de Ingeniería de Sistemas de Procesos.