

En Base a los LINEAMIENTOS PARTICULARES PARA LA PRESENTACIÓN Y ANÁLISIS DE LOS PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN ANTE EL CONSEJO DIVISIONAL DE CIENCIAS NATURALES E INGENIERÍA (CNI) DE LA UNIDAD CUAJIMALPA (aprobados por el Consejo Divisional en su sesión No. CUA-DCNI-109-15 del 12 de Marzo de 2015), se presenta la

Propuesta para la renovación del Proyecto Divisional aprobado mediante acuerdo DCNI-10-150-17 de fecha 26 de octubre de 2017

SIMULACIÓN Y DESARROLLO DE PRÁCTICAS VIRTUALES PARA INGENIERÍA DE PROCESOS

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

Participantes del proyecto: Dra. Helen Denise Lugo Méndez (DPT)
Dra. María Teresa López Arenas (DPT)
Dr. José Javier Valencia López (DPT)
Dr. Alfonso Mauricio Sales Cruz (DPT)
Dr. Roberto Olivares Hernández (DPT)

Línea de investigación: Este proyecto es presentado por el Cuerpo Académico Consolidado *Ingeniería de Sistemas de Procesos: Modelado y Simulación*, el cual cultiva 6 LGCA (Líneas de feneración y aplicación innovadora de conocimiento): (1) Modelado y Simulación de Bioprocesos, (2) Modelado y Simulación de Procesos Celulares, (3) Optimización de Procesos Químicos y Biológicos, (4) Estudios de Sistemas Dinámicos y de Control, (5) Desarrollo de Herramientas Computacionales para el Modelado y Simulación, y (6) Análisis Exergoambiental de Sistemas Energéticos y Bioenergéticos.

Orientación: Investigación básica e investigación aplicada

Fecha de inicio: Del 26 de octubre de 2021

Duración: 4 años

I. PROPUESTA DEL PROYECTO

A. RESUMEN

La simulación es una técnica muy poderosa y ampliamente usada en las ciencias para analizar y estudiar sistemas complejos. Las aplicaciones de la simulación parecen no tener límites. Actualmente se simulan desde los comportamientos de las partes más pequeñas de un mecanismo (moléculas o células) hasta la toma de decisiones en plantas industriales. Recientes avances en las metodologías de simulación y la gran disponibilidad de software que existe en el mercado, propician al uso y desarrollo de herramientas computacionales rápidas, confiables y eficientes para en el área de ingeniería de procesos. La propuesta de este proyecto es promover el uso de la simulación de procesos para resolver problemas específicos de procesos químicos y biológicos, tanto en investigación como en docencia. Con la finalidad de impulsar la colaboración de los participantes, generar conocimiento, desarrollar e implementar estrategias de simulación, y promover la educación virtual en la ingeniería de procesos.

B. ANTECEDENTES

Antecedentes del proyecto aprobado

Este proyecto divisional fue aprobado el 26 de octubre de 2017 en la Sesión CUA-DCNI- 150-17 del Consejo Divisional de Ciencias Naturales e Ingeniería, UAM-Cuajimalpa. Actualmente, el avance del proyecto es 100% con base en el cumplimiento de los objetivos y metas planteados. Las metas fueron originalmente establecidas en función de productos esperados (dirección de alumnos de licenciatura y posgrado, publicación de artículos en revistas indizadas, presentaciones en congresos y conferencias impartidas). De acuerdo al desglose de resultados presentados en la Tabla 1, y desglosados en el informe final del proyecto, se lograron obtener los productos planeados, superando la expectativa en algunos casos (como publicaciones y formación de recursos humanos).

Tabla 1. Tabla 1. Productos a lo largo del desarrollo del proyecto (2018-2021)

Producto / año	Total planeados	Total obtenidos
Publicación de artículos en revistas indizadas	4	22
Publicación de capítulos de libro	0	3
Presentación de trabajos en congresos nacionales	12	18
Presentación de trabajos en congresos internacionales	8	5
Dirección de proyectos terminales de licenciatura	3	8
Dirección de tesis de maestría	4	3
Dirección de tesis de doctorado	3	6
Dirección de servicio social	0	4
Conferencias y seminarios	0	7

Actualmente se encuentran 3 tesis de doctorado en proceso y está por iniciarse una tesis doctoral para el desarrollo de sensores virtuales con fines educativos y de investigación. Por lo cual se solicita la renovación de este proyecto de investigación, y poder dar continuidad al trabajo que está en desarrollo.

Antecedentes de la propuesta del proyecto a desarrollarse

B.1 Investigación y Desarrollo

La ingeniería de procesos se ocupa del comportamiento general de un sistema y de cómo deben combinarse las unidades individuales para lograr un rendimiento global óptimo de procesos químicos, físicos y biológicos. Los temas importantes son el modelado, la operación y el control de procesos a gran escala, el diseño y la síntesis, la simulación, la intensificación y la optimización. Esta área abarca una amplia gama de industrias, tales como química, petroquímica, agricultura, procesamiento de minerales, materiales avanzados, alimentos, farmacéutica, desarrollo de software e industrias biotecnológicas.

En los últimos años, la simulación ha llegado a ser una herramienta moderna que se ha hecho indispensable para la solución adecuada de problemas de ingeniería de procesos, desde una escala molecular hasta una escala industrial, tales como:

- Predicción de los efectos de cambios en las condiciones de operación y capacidad de la planta.
- Análisis y optimización ante cambios en las condiciones de operación, las características de los insumos, las variables económicas del mercado, etc.
- Diseño, evaluación y análisis de nuevos procesos para nuevos productos.
- Evaluación de alternativas de proceso para reducir el consumo energético.
- Transformación de un proceso para desarrollar otros productos, como las biorrefinerías.
- Análisis de factibilidad y viabilidad de nuevos procesos.
- Evaluación y optimización del impacto ambiental de un proceso.
- Investigación de la factibilidad de automatización de un proceso.
- Entrenamiento de operadores e ingenieros de proceso.
- Educación virtual para el proceso de enseñanza-aprendizaje en instituciones de formación profesional superior.

Todos estos han sido temas de interés de Investigación y Desarrollo del Cuerpo Académico “Ingeniería de Sistemas de Procesos: Modelado y Simulación” (adscrito al DPT, UAM-C), con diversas aplicaciones como son reactores químicos y biológicos, columnas de destilación reactiva, intercambiadores de calor, biorrefinerías, entre otros. Por lo cual este proyecto divisional pretende impulsar la colaboración de los participantes para generar conocimiento, desarrollar e implementar estrategias de simulación, y promover el uso de herramientas computacionales avanzadas tanto para investigación como para docencia.

Educación Virtual

Recientemente el uso de las tecnologías de la información y la comunicación (TIC) en la educación superior ha sido una constante, que ha permitido ampliar poco a poco la habilitación tecnológica de las universidades y adecuar estas herramientas a los programas educativos. Esto debido a las TIC presentan mayor flexibilidad, accesibilidad y adaptabilidad que los sistemas de educación convencionales. Además es reconocido que las TIC facilitan a los alumnos un aprendizaje significativo a partir de sus aplicaciones en diversas áreas del conocimiento.

En particular, la enseñanza tradicional de experiencias educativas del área de ingeniería de procesos requiere de un elemento adicional: las prácticas experimentales de laboratorio. Éstas permiten al alumno poner en acción todos los conocimientos que va adquiriendo en su formación. Actualmente la organización de las prácticas dentro de los estudios de ingeniería exige horarios rígidos, necesidad de personal, organización del espacio físico y un alto requerimiento de consumibles (cuyo costo se eleva con el aumento del número de alumnos). En muchos casos no es posible una buena organización, lo que suele derivar en la frustración del alumno y en una baja utilización de los equipos de laboratorio. Trasladando este entorno práctico, a un entorno virtual, el elemento necesario para la realización de prácticas es la existencia de un sistema de Laboratorio de Prácticas Virtuales de Ingeniería de Procesos.

La educación virtual tiene beneficios en el proceso de enseñanza-aprendizaje tales como:

- Facilitar el aprendizaje personalizado mediante herramientas multimedia interactivas.
- Incrementar el acceso a distancia y optimizar recursos.
- Mantener la situación esencial de formación en ingeniería.
- Proporcionar simulaciones de los procesos de manera rápida, eficaz y reproducible.
- Permitir hacer modificaciones y ajustes específicos al modelo, estudiar efectos a priori y a posteriori, generar documentación técnica
- Dar servicio a posgrados en modalidad virtual.

Mediante este proyecto divisional se propone integrar un equipo de trabajo para el desarrollo de prácticas virtuales constituido por profesores del área de ingeniería, expertos en programación de ambientes virtuales en internet y pedagogos. Además de propiciar la participación de alumnos que apoyen a capturar y probar los diferentes entornos virtuales desarrollados.

C. OBJETIVOS

El objetivo general es plantear metodologías para desarrollo de prácticas virtuales en el área de modelado, diseño, operación, optimización y el control de (bio)procesos.

Los *objetivos particulares* son:

- Generar estrategias de simulación y análisis para procesos químicos y biológicos en diferentes escalas, empleado herramientas de *Ingeniería de Sistemas de Procesos*.
- Implementar una plataforma para un laboratorio virtual de docencia para ingeniería de procesos, que estimule el proceso de enseñanza-aprendizaje mediante un entorno visual adecuado para simular sistemas físicos.

D. DESCRIPCIÓN

Hipótesis

El desarrollo de metodologías para virtualizar procesos químicos y biológicos usando herramientas de simulación, permitirá resolver problemas complejos de ingeniería de procesos de manera rápida, eficiente, confiable y reproducible; y tendrá un impacto en la simplificación de actividades de investigación, innovación y educación virtual.

Metodología

Desarrollo de herramientas computacionales para ingeniería de procesos: Los modelos de procesos se usan para diferentes objetivos, tales como simulaciones en estado estacionario o dinámicas, optimización de procesos, estimación de parámetros, diseño de experimentos, evaluaciones técnicas-económicas-ambientales, etc. El desarrollo de herramientas computacionales permitirá asegurar la integración de herramientas de modelado y modelos matemáticos existentes (i.e., unidades de proceso/producto, modelos de propiedades físicas, etc.) en un ambiente que soporte la definición, el análisis, la depuración, la evaluación y la validación del modelo, reduciendo el tiempo requerido para estas actividades y consiguiendo el diseño de procesos y productos biológicos de forma exitosa. La metodología consiste principalmente en el desarrollo y uso de modelos matemáticos para el diseño de bioproductos y sus procesos de manufactura, implementándolos en lenguajes de programación, y probando su desempeño.

Optimización de productos y procesos: Las estrategias de optimización se emplean desde procesos celulares hasta plantas industriales, con la finalidad de dirigir de manera sistemática la toma de decisiones, reducir de manera efectiva los costos involucrados, mejorar la calidad de los productos y el rendimiento de los procesos, y más. Por una parte se usará la técnica de Pinch (o punto de pliegue) que es aplicada sistemáticamente para optimizar los recursos energéticos encontrando el mejor diseño de una red de intercambio de calor en una planta, empleando algoritmos de programación lineal. Por otra parte para procesos celulares, el modelado del metabolismo se realiza utilizando algoritmos de programación lineal, de optimización global y evolutivos.

Diseño y análisis de la operación de procesos: A partir de un diseño conceptual del proceso, se establece su modelado matemático mediante balances de materia y energía definiendo mecanismos controlantes (cinéticos, de transferencia, etc.), suposiciones y limitaciones físicas del proceso. Posteriormente mediante herramientas computacionales, es posible evaluar el impacto de las condiciones de operación sobre la productividad, la rentabilidad y la sustentabilidad del proceso. Los análisis numéricos se basan en estudios de estados estacionario y dinámico, incluyendo análisis de sensibilidad paramétrica y operacional, y respuesta ante perturbaciones al sistema.

Diseño de las estrategias de monitoreo y control de procesos: Para el desarrollo de estas estrategias, primero se determinan las mediciones en línea disponibles, las cuales podrán ser mediciones secundarias y no las variables de interés directamente. Los estudios de monitoreo y control estarán basados en la Teoría de Control Geométrica No Lineal, la cual presenta ventajas

en cuanto condiciones de resolubilidad, criterio de convergencia, construcción sistemática, y técnica de sintonización manejable. Esta teoría revela las características estructurales (grados relativos, índices de observabilidad, dinámica cero, dinámica no observable, etc.) y el análisis de robustez asegura que la propagación de error se mantenga en niveles aceptables. La finalidad es lograr diseños de monitoreo y control con estabilidad robusta, empleando procedimientos recursivos.

Validación experimental de estrategias desarrolladas: Algunas de las estrategias de modelado, monitoreo y control serán validadas experimentalmente en un reactor enzimático disponible en el Laboratorio de Instrumentación y Control, UAM-C. Se determinará una estrategia de ajuste de los parámetros del modelo cinético, tipo Michaelis-Menten, que depende de la composición de la alimentación. Además se implementarán los algoritmos desarrollados para monitoreo y control.

Plataforma para un laboratorio virtual de ingeniería de procesos: La plataforma estará basada en algoritmos de ingeniería web, modelos educativos y casos de estudio de ingeniería de procesos. La plataforma se desarrollará empleando técnicas de usabilidad, manteniendo características indispensables como son: seguridad de acceso, entorno intuitivo, acceso flexible a la información, retroalimentación y un portal de administración sencillo. Las funciones y programas ejecutables se desarrollarán mediante la aplicación Matlab Production Server. Esta herramienta proporciona clientes web, los cuales a través de un servidor de procesos y administración permiten a los usuarios ejecutar programas desarrollados en Matlab sin ser necesario contar con una licencia propia. El servidor principal encargado de atender todas las peticiones en línea, es capaz de generar scripts, que serán utilizados en una página web desarrollada en el lenguaje estándar HTML5.

Implementación de prácticas virtuales de ingeniería de procesos: La dinámica del laboratorio virtual contempla la arquitectura de la información de una plataforma educativa que guíe al usuario, en este caso estudiantes de ingeniería de procesos. La finalidad es proporcionar las herramientas necesarias para motivar e involucrar al estudiante en el desarrollo de una práctica en un ambiente cuasi-real (a escala laboratorio, piloto o industrial), y para el docente para mejorar y evaluar el proceso de enseñanza-aprendizaje. El desarrollo de las prácticas virtuales tendrán dos principales componentes: (a) un entorno de aprendizaje constructivista, en el que se busca generar aprendizaje enfocado en el usuario, generar acciones formativas, y creatividad; y (b) casos de estudio específicos de ingeniería de procesos (como tipos de cinéticas, ingeniería de reactores, diseño de procesos, etc.), dirigidos para privilegiar el desarrollo habilidades científicas.

E. FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS

Se espera dirigir proyectos de tesis a nivel licenciatura y posgrado, en las áreas de modelado y simulación de ingeniería de procesos químicos y biológicos. Los alumnos podrán ser procedentes de la UAM o de otras instituciones de estudios superiores.

F. IMPACTO ESPERADO DEL PROYECTO

Desde el punto de vista de ingeniería de procesos, para realizar una implementación exitosa y competitiva de un proceso se requiere resolver varios problemas involucrados en el ciclo de vida del proceso: la síntesis y diseño del (bio)proceso, el escalamiento, la optimización y el control del proceso, entre otros. Todas estas actividades están basadas fundamentalmente en el modelado y la simulación de procesos, las cuales tienen una fuerte implicación en la operación del proceso, la calidad del producto y co-productos finales, la capacidad instalada de producción, y los costos totales de experimentación y producción.

Por lo que la principal contribución de este proyecto, desde el punto de vista de investigación, será en la generación del conocimiento y desarrollo de estrategias de modelado y simulación a partir de diferentes formalismos, aplicado a diversos sistemas de procesos. Para docencia, la mayor contribución será la generación de una plataforma para la implementación de prácticas virtuales de ingeniería de procesos. Además que el impacto se verá reflejado en el fortalecimiento del Cuerpo Académico (en consolidación) “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 la Dra. Teresa López cuenta con un proyecto externo “Biocombustibles lignocelulósicos para el sector autotransporte” financiado por el fondo Conacyt-Sener, por un monto total de \$700,000 (originalmente para el período Agosto 2016 - Agosto 2020). Por auditorías, este proyecto fue detenido temporalmente, y se considera un remanente por \$131,500 (para aplicarse en el período 2022-2023).

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 (R2017a)
- ASPEN Engineering Suite (V 9.1)
- SUPERPRO DESIGNER (V 10.0)
- MATHEMATICA (V 11)

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

Además de los investigadores participantes se cuenta actualmente con tres alumnos de doctorado con tesis en desarrollo.

B. PRESUPUESTO CALENDARIZADO

Presupuesto anual	2022	2023	2024	2025
Presupuesto departamental UAM	\$75,000	\$75,000	\$75,000	\$75,000
Externo (proy. Financiado)	\$83,500	\$48,000	Por definir	Por definir

C. FUENTE DE FINANCIAMIENTO EXTERNAS

Título: Clúster Cemie-Bio “Biocombustibles lignocelulósicos para el sector autotransporte”.
 Patrocinador: Conacyt-Sener-Sustentabilidad Energética (mediante Convenio firmado con el Cinvestav, Guadalajara).
 Líder del Proyecto: Dr. Arturo Sánchez Carmona (Cinvestav, Guadalajara).
 Líder de la Línea de Investigación 9 (LI9) “Producción de bioetanol lignocelulósico 2G”: Dra. Teresa López Arenas (UAM-C).
 Monto total y vigencia: \$700,000 (originalmente para el período Agosto 2016 - Agosto 2020).
 Por auditorías, este proyecto fue detenido temporalmente, y se considera un remanente por \$131,500 (para aplicarse en el período 2022-2023).

III. CALENDARIO DE ACTIVIDADES EN PERIODOS TRIMESTRALES

Actividades	Participantes	2022			2023			2024			2025		
Desarrollo de metodologías para plataformas virtuales	MTLA, AMSC, HDLM	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Desarrollo de herramientas computacionales para bioprocesos	ROH, MTLA, MSC	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Desarrollo de algoritmos de optimización para bioprocesos	ROH, AMSC, MTLA	X	X	X	X	X	X						
Pruebas computacionales mediante CFD (Dinámica de Fluidos Computacional)	JJVL, AMSC				X	X	X	X	X	X			
Recuperación de Energía a partir de fuentes de baja temperatura	HDLM, JJVL, AMSC	X	X	X	X	X	X	X	X	X			
Desarrollo de sensores y prácticas virtuales para ingeniería de procesos.	MTLA, JJVL, HDML, AMSC	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X

+ Las principales aplicaciones serán: metabolismos, fluidización, reactores, intercambiadores de calor y biorrefinerías.

IV. INFORMACIÓN PARA EL SEGUIMIENTO DEL PROYECTO

a. Calendarización de productos esperados a lo largo del proyecto

Producto	2022	2023	2024	2025
Publicación de artículos en revistas indizadas internacionales	1	1	1	1
Presentación de publicaciones en congresos nacionales	2	2	2	2
Presentación de publicaciones en congresos internacionales	1	1	1	1
Dirección de proyectos terminales o servicios sociales	1	1	1	1
Dirección de tesis de posgrado	1	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.