

Ciencia de datos, aprendizaje automático e inteligencia artificial en Ingeniería Química

Data science, machine learning, and artificial intelligence in Chemical Engineering

Diego Ramírez-Malule¹⁻²   David Gómez-Ríos¹  Howard Ramírez-Malule¹ 

¹Universidad del Valle. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería Química, Cali, Colombia.

² Pontificia Universidad Católica de Chile. Programa de Maestría en Ciencia de Datos. Santiago, Chile.

Estimado editor,

La ciencia de datos, el aprendizaje automático y la inteligencia artificial han permeado todos los campos del conocimiento, y la ingeniería química no es una excepción (1-3). La Figura 1 muestra la evolución de los resultados científicos de esas herramientas a lo largo del tiempo basándose en la información obtenida del índice bibliográfico Scopus. Se encontraron 13.149, 579.813 y 343.007 artículos de investigación sobre ciencia de datos, aprendizaje automático e Inteligencia Artificial, respectivamente, sin criterios de exclusión aplicados en la consulta. Los primeros registros relacionados con la ciencia de datos datan de mediados de los años 80, mientras que los registros de aprendizaje automático e inteligencia artificial datan de finales de los años 50 y principios de los 60. Dado que las publicaciones durante las primeras cuatro décadas fueron bajas en comparación con la tendencia actual, la Figura 1 muestra solo resultados a partir de 2000.

Cuando todas las herramientas mencionadas se unieron mediante el conector booleano "OR", se recuperaron 850.368 registros, de los cuales 37.889 estaban relacionados con la ingeniería química. Estos estudios datan de finales de los años 60. Además, China, Estados Unidos, India, Corea del Sur y Reino Unido son los países líderes en producción científica de estas herramientas relacionadas con la ingeniería química. Además de la ingeniería química, la informática, la ciencia de materiales y la química destacan como las áreas temáticas más destacadas (4)

La evolución de esas herramientas, incluidas sus aplicaciones en la ingeniería química, ha mostrado un claro aumento desde 2017 (Figura 1).

¿Cómo citar?

Ramírez-Malule D, Gómez-Ríos D, Ramírez-Malule H. Ciencia de datos, aprendizaje automático e inteligencia artificial en Ingeniería Química. Ingeniería y Competitividad, 2026, 28(3) e-20416087

<https://doi.org/10.25100/iyv.v28i3.16087>

Recibido: 15/08/26

Revisado: 02/09/26

Aceptado: 15/09/26

Online: 15/09/26

Correspondencia

howard.ramirez@correounivalle.edu.co



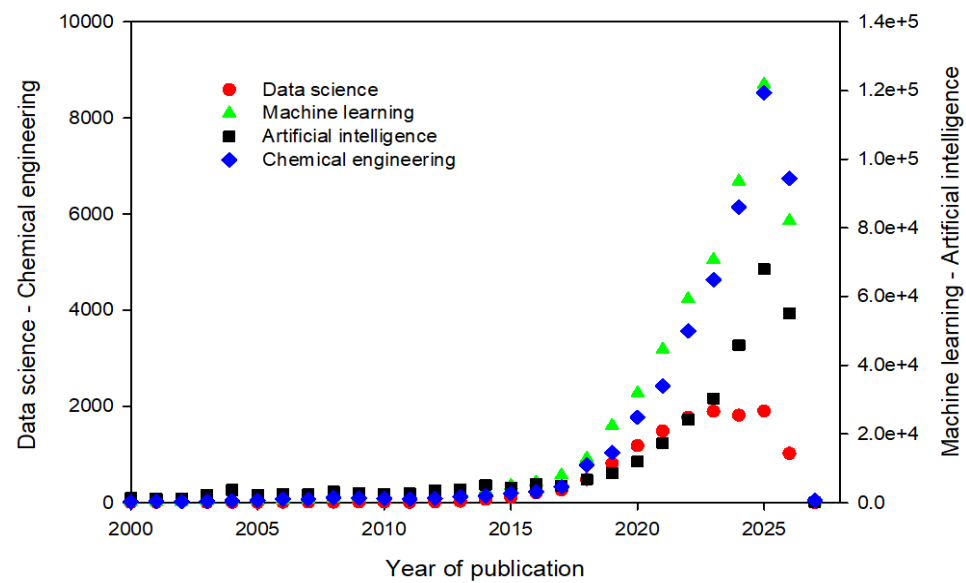


Figura 1. Evolución del número de artículos de investigación relacionados con ciencia de datos, aprendizaje automático e inteligencia artificial, indexados en la base de datos Scopus. Solo se consideraron artículos de investigación.

La Figura 2 muestra una red de co-ocurrencia de las palabras clave de los autores usando VOSviewer versión 1.6.20 (5). Aquí, el aprendizaje profundo, las redes neuronales artificiales, la optimización, la optimización multiobjetivo, la dinámica molecular, la adsorción, la teoría de la función de la densidad, la ampliación de datos, entre otros, son los temas en los que se centra el campo de la ingeniería química. Además, las interconexiones de alta densidad de los cuarenta y dos nodos entre los seis clústeres indican un panorama de investigación altamente multidisciplinar.

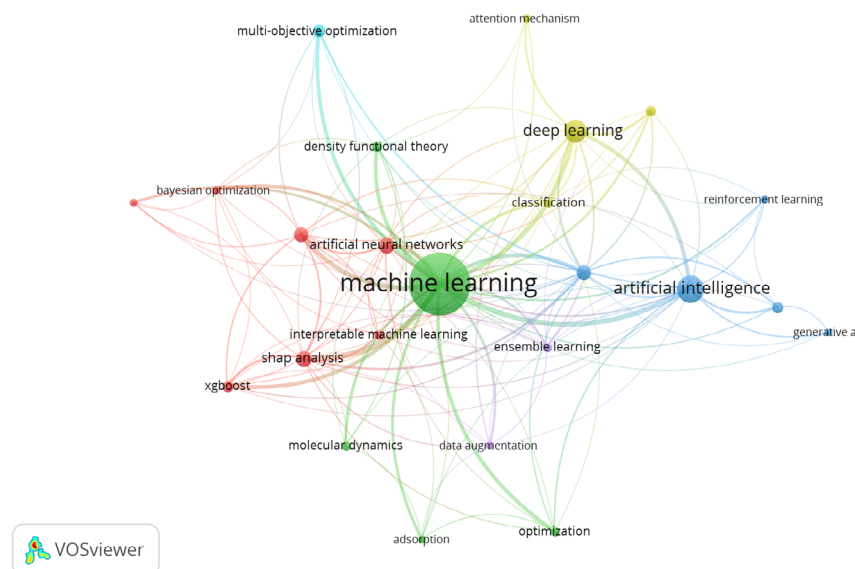


Figura 2. Red de coocurrencia de las palabras clave de los autores. El número de ocurrencias es 28. Se consideraron los 5000 artículos de investigación más recientes.

De hecho, existen varios libros de texto disponibles para enseñar conceptos de ingeniería química utilizando las herramientas mencionadas. Esto demuestra que la ingeniería química está incorporando estas herramientas en la enseñanza actual de química y bioquímica (6-7,1). Los temas tratados en estos textos incluyen: aprendizaje automático en procesos químicos; Aprendizaje automático en gestión de cadena de suministro; Aprendizaje automático en integración energética; Aprendizaje automático en previsión de series temporales; Aprendizaje automático en gestión óptima del agua en la explotación de combustibles fósiles no convencionales; Inteligencia artificial en adquisición e integración de datos en ingeniería química; Modelado predictivo y optimización de procesos en ingeniería química; Inteligencia artificial en ingeniería química y tecnologías de procesos; Inteligencia artificial en ingeniería de reacciones químicas; Inteligencia artificial en cinética química y diseño de reactores; Inteligencia artificial en transferencia de calor y masa en procesos de ingeniería química; Inteligencia artificial en dinámica de fluidos y sistemas de flujo multifásico; Monitorización, control y seguridad; Sistemas de apoyo a la decisión en tiempo real en ingeniería química y de procesos; Inteligencia artificial en control de calidad y desarrollo de productos; Inteligencia artificial en seguridad de procesos y gestión de riesgos; Inteligencia artificial en fabricación sostenible y procesos químicos; Inteligencia artificial en agroquímicos sostenibles e inteligentes; Inteligencia artificial en optimización energética e integración de sistemas de energías renovables; Gestión mejorada de la cadena de suministro con IA en ingeniería química; Inteligencia artificial en la educación en ingeniería química y ciencias aplicadas; Inteligencia artificial para el cumplimiento normativo en industrias de ingeniería química; Colaboración humano-IA en ingeniería química; Cumplimiento normativo y consideraciones éticas en la integración de la inteligencia artificial (8-9). En resumen, abarcan un amplio espectro de la ingeniería química.

El papel más productivo de estas herramientas puede no ser sustituir el conocimiento mecanicista de ingeniería química, sino combinarlo con el aprendizaje basado en datos. Los modelos híbridos o fenomenológicos pueden incorporar leyes de conservación y conocimientos de procesos mientras aprovechan datos experimentales y de plantas, mejorando así la extrapolación, la interpretabilidad y la confianza en comparación con enfoques puramente basados en datos. Esta integración requiere que los ingenieros químicos tengan una base sólida para construir y comprender modelos fenomenológicos además de la evaluación y validación de la calidad de los datos, ya que esas competencias son necesarias para interactuar críticamente con sistemas basados en IA en lugar de usarlos como cajas negras (1-3).

Según la información previa, la enseñanza de la ingeniería química y los procesos en los que se aplica cambiarán sin duda a corto y medio plazo (6,7,1). El diseño de procesos y productos, la seguridad, la sostenibilidad y la rentabilidad, entre otros, se abordarán utilizando métodos tradicionales junto con estas herramientas (1-3). Pero a medio plazo, los (bio)procesos se abordarán más a través de estas herramientas y, aunque los métodos tradicionales no desaparecerán, su uso irá disminuyendo gradualmente. No obstante, los desafíos éticos y preocupaciones asociados a la ciencia de datos, el aprendizaje automático y la inteligencia artificial en ingeniería química deben considerarse como factores clave para su implementación (1-3).

Declaración de conflicto de intereses

Ninguna.

Fuentes de financiación

Ninguna.

Referencias

1. Chew JW, Andersson R, Bierweiler T, Ryttestal P, Wik T. IA en ingeniería química: de la promesa a la práctica. *AIChE J.* 2026; 72(7). <https://doi.org/10.1002/aic.70358>
2. Chiang LH, Braun B, Wang Z, Castillo I. Hacia la inteligencia artificial a gran escala en la industria química. *AIChE J.* 2022; 68(6). <https://doi.org/10.1002/aic.17644>
3. Schweidtmann AM, Esche E, Fischer A, Kloft M, Repke J, Sager S, Mitsos A. Aprendizaje automático en ingeniería química: una perspectiva. *Chem Ing Tech.* 2021; 93(12):2029-2039. <https://doi.org/10.1002/cite.202100083>
4. Ramírez Malule HD, Ascencio-Galván ML, Gómez Ríos DA. Análisis bibliométrico: una herramienta poderosa para apoyar la investigación en ingeniería. *Ingeniería y Competitividad.* 2023; 25(1). <https://doi.org/10.25100/iyc.v25i1.12437>
5. Van Eck NJ, Waltman L. Encuesta de software: VOSviewer, un programa informático para mapeo bibliométrico. *Scientometría.* 2010; 84(2):523-538. <https://doi.org/10.1007/s11192-009-0146-3>
6. Caccavale F, Gargalo CL, Gernaey KV, Krühne U. Hacia la Educación 4.0: el papel de los grandes modelos de lenguaje como tutores virtuales en ingeniería química. *Educ Chem Eng.* 2024;49:1-11. <https://doi.org/10.1016/j.ece.2024.07.002>
7. Keith M, Keiller E, Windows-Yule C, Kings I, Robbins P. Aprovechando la IA generativa en la educación en ingeniería química: implementación y evaluación del modelo de lenguaje grande ChatGPT v3.5. *Educ Chem Eng.* 2025; 51:20-33. <https://doi.org/10.1016/j.ece.2025.01.002>
8. López-Flores FJ, et al. Herramientas de aprendizaje automático para ingeniería química. 1ª ed. Elsevier; 2025.
9. Sher F, et al. Inteligencia artificial en ingeniería química. Sher F, editor. Elsevier; 2026. <https://doi.org/10.1016/C2024-0-01393-8>