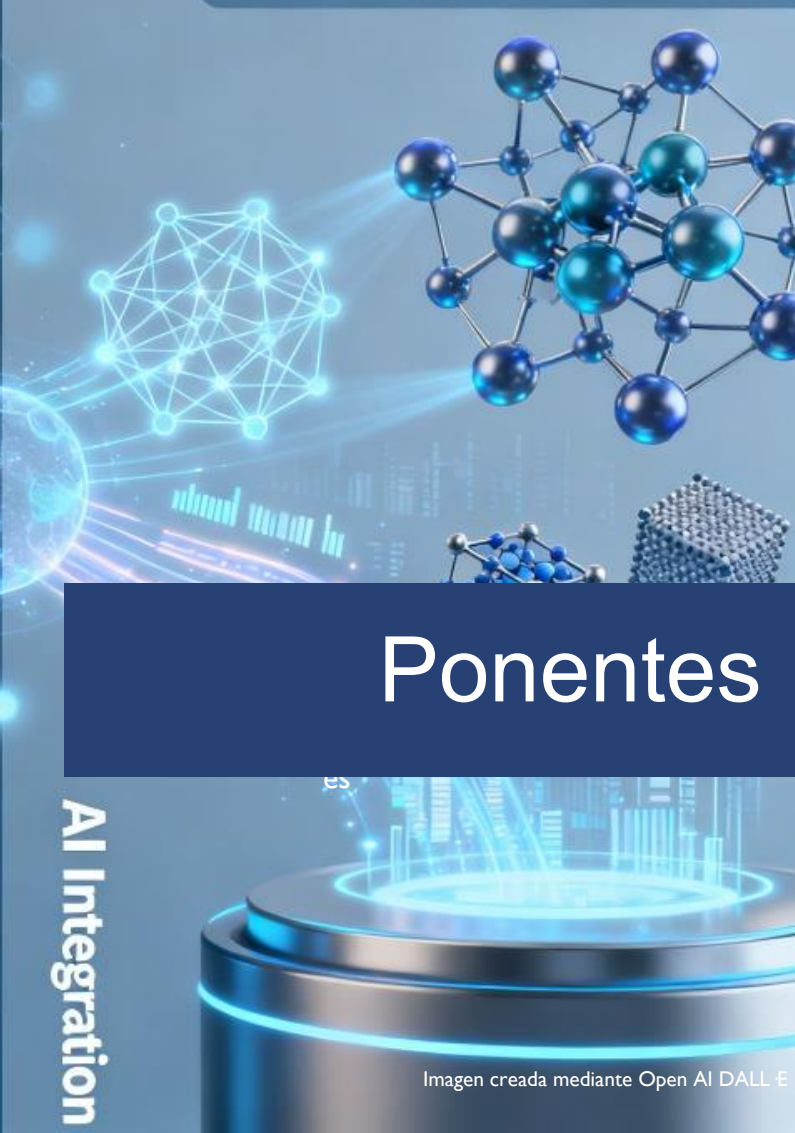


La Inteligencia Artificial como motor de la innovación en la Ciencia de los Materiales y la Ingeniería Química

Chemical Engineering Processes



Advanced Materials Science



Ponentes

AI Integration

Imagen creada mediante Open AI DALL

Organizado por

Universidad de Zaragoza
9-10 junio



Universidad Zaragoza



INMA
INSTITUTO DE NANOCIENCIA Y MATERIALES DE ARAGÓN
CSIC Universidad Zaragoza



EXCELENCIA SEVERO OCHOA
04/2024 - 03/2030
Ayuda CE2023-001286-S financiada por
MINISTERIO DE CIENCIA, INNOVACIÓN Y TURISMO
CONSEJO DE RECTORES



Cátedra ENIA
en Inteligencia Artificial y Sostenibilidad
Universidad Zaragoza



Real Sociedad Española de Química



Cátedra SAMCA
de Nanotecnología
Universidad Zaragoza



LMA I CTS
LABORATORIO DE MICROSCOPIAS AVANZADAS
INFRAESTRUCTURAS CIENTÍFICAS Y TÉCNICAS SINGULARES

Financiado a través de:



Financiado por la Unión Europea
NextGenerationEU



GOBIERNO DE ESPAÑA
MINISTERIO PARA LA TRANSFORMACIÓN DIGITAL Y DE LA FUNCIÓN PÚBLICA
SECRETARÍA DE ESTADO DE DIGITALIZACIÓN E INTELIGENCIA ARTIFICIAL



Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia



España digital



en
Part of Keysight



KEYSIGHT

Primer día – 09 de junio

15:30 - Recepción de participantes, registro y entrega de documentación

16:00 - INAUGURACIÓN

Beatriz Zornoza, Manuel Arruebo y Víctor Sebastián

16:15 – Plenaria 1: Introducción de la IA en la investigación en el campo de la ciencia de los materiales

Modera Dra. Beatriz Zornoza, Universidad de Zaragoza

[Luis Martín-Moreno](#) - Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (IMMA), profesor de investigación – CSIC.

Inteligencia artificial en ciencia de materiales: una perspectiva general con datos tomados en el INMA.

16:45 – Sesión 1: la IA como innovación en la ciencia de los materiales

Modera Dr. Manuel Arruebo, Universidad de Zaragoza

16:45 - [Jesús Carrete Montaña](#) – Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (IMMA), investigador científico – CSIC.

El estudio acelerado de los materiales a partir de primeros principios mediante métodos de aprendizaje automático.

17: 15 - [Mario Peláez Fernández](#) - Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (IMMA), posdoctoral.

Exprimiendo datos: machine learning para la microscopía electrónica.

17:45 - DESCANSO / COFFEE BREAK

18:30 - [Juan Vicente Alegre Requena](#) - Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH), Científico Titular CSIC.

Inteligencia artificial accesible para el diseño de catalizadores.

19:00 - [Sergio Gutiérrez Rodrigo](#) - Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (IMMA), profesor titular de Física Aplicada, Universidad de Zaragoza.

Redes Neuronales con Restricciones Físicas en ciencia de materiales: optimización, identificación de simetrías y búsqueda de modelos matemáticos.

19:30 – Sesión 2: Experiencias con la IA en el ámbito de la industria química (I)

Modera Dra. Beatriz Zornoza, Universidad de Zaragoza

19:30 - [Javier Sánchez Laínez](#) - Dr. Ingeniero Químico, Grupo Técnico Rivi.

Modelos LLM en la industria de Oil&Gas: uso de prompt engineering avanzado.

20:00 - CIERRE

Segundo día – 10 de junio

09:00 – Plenaria 2: Introducción de la IA en la investigación en el campo de la Ingeniería

Modera Dra. Beatriz Zornoza, Universidad de Zaragoza

Elías Cueto Prendes - Catedrático de Ingeniería Mecánica de la Universidad de Zaragoza y director de la Cátedra ENIA en Inteligencia Artificial y Sostenibilidad.

Una introducción a la Inteligencia Artificial Científica en Ingeniería.

09:30 – Sesión 3: la IA como innovación en ingeniería química

Modera Dr. Víctor Sebastián, Universidad de Zaragoza

09:30 - Mariano Martín Martín - Catedrático de Ingeniería Química, Universidad de Salamanca.

Herramientas de machine learning para el diseño de procesos y productos sostenibles.

10:00 - Clara Casado Coterillo - Profesora Titular de Ingeniería Química, Universidad de Cantabria.

Diseño de membranas mixtas de biopolímeros para la separación de CO₂: construcción sistemática de modelos semiparamétricos.

10:30 – José Ángel Peña - Catedrático de Ingeniería Química, Universidad de Zaragoza.

Modelización de procesos adsorción-reacción mediante algoritmos evolutivos.

11:00 – Simona Renda - Investigadora Juan de la Cierva, Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A), Universidad de Zaragoza.

Gemelos digitales como herramienta para el diseño y la optimización de reactores químicos.

11:30 - DESCANSO / COFFEE BREAK**12:15 – Sesión 4: Experiencias con la IA en el ámbito de la industria química (II)**

Modera Dra. Beatriz Zornoza, Universidad de Zaragoza

12:15 - Ainhoa Bilbao Pardos - Ingeniera Química. Investigación y desarrollo, grupo SAMCA.

Cómo la inteligencia artificial ayuda al I+D en las empresas del sector de la ingeniería química.

12:45 – Sesión 5: Mesa redonda - Perspectivas de la IA/ML en la academia y en la industria

Moderan Dr. Manuel Arruebo/Dr. Víctor Sebastián, Universidad de Zaragoza

Participantes: **Luis Martín Moreno – Elías Cueto – Mariano Martín Martín – Ainhoa Bilbao**

13:30 - CIERRE

Beatriz Zornoza, Manuel Arruebo y Víctor Sebastián

Día 1 – 09 de junio

16:15 – Plenaria 1: Inteligencia artificial en ciencia de materiales: una perspectiva general con datos tomados en el INMA.

Ponente:

Luis Martín-Moreno*Profesor de Investigación. Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (INMA).*

Luis Martín-Moreno, tras haber sido profesor titular de la Universidad de Zaragoza, es actualmente Profesor de Investigación del CSIC en el INMA, donde además ejerce como vicedirector y coordina el proyecto de excelencia Severo Ochoa.

En 2014 fue reconocido como investigador altamente citado por Thomsom Reuters.

Su trayectoria científica se ha centrado en la nanofotónica, la transmisión óptica extraordinaria, la plasmónica, los materiales 2D, el transporte electrónico en sistemas mesoscópicos, la electrodinámica cuántica en guías de onda, los efectos topológicos y, más recientemente, la inteligencia artificial aplicada a la física y la ciencia de materiales.

Resumen de la ponencia:

La inteligencia artificial está transformando la manera en que se abordan problemas complejos en ciencia de materiales, con aplicaciones que abarcan la computación, el diseño y el análisis de datos. Esta charla ofrecerá una breve introducción al aprendizaje automático y presentará una serie de casos de estudio representativos que ilustran cómo estos métodos pueden apoyar tanto la investigación teórica como la experimental.

Entre los ejemplos se incluirán modelos sustitutos que aceleran enormemente las simulaciones numéricas, estrategias de diseño inverso para estructuras nanofotónicas y métodos guiados por datos para la eliminación de ruido en imágenes de microscopía y cubos de datos espectrales.

16:45 – Sesión 1.1.: El estudio acelerado de los materiales a partir de primeros principios mediante métodos de aprendizaje automático.

Ponente:

Jesús Carrete Montaña

Investigador Científico CSIC. Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (INMA), CSIC-Universidad de Zaragoza.



Investigador Científico en el INMA con una sólida trayectoria internacional en instituciones como el CEA-Grenoble (Francia) y la TU Wien (Austria). Su trabajo ha ayudado a integrar la física de materiales y los métodos de aprendizaje automático para el descubrimiento de compuestos mediante técnicas de alta cadencia. Es desarrollador de paquetes de código abierto como ShengBTE (transporte térmico), NeurallL (redes neuronales) y Clinamen2 (optimización evolutiva). Cuenta con más de 150 artículos, citados más de 11000 veces. Su investigación actual aplica la IA a cálculos "ab-initio" y a la solución de problemas cuánticos.

<https://scholar.google.com/citations?user=6VfkdRwAAAAJ>

<https://inma.unizar-csic.es/investigadores/carrete-montana-jesus/>

Resumen de la ponencia:

La ciencia y la tecnología de materiales modernas se enfrentan al reto de desarrollar nuevas soluciones con propiedades muy específicas para dar respuesta a las necesidades de la sociedad, y la ciencia de materiales computacional está llamada a jugar un papel clave en ese proceso. Históricamente, esta disciplina se ha limitado a arrojar luz sobre resultados ya conocidos experimentalmente mediante cálculos y simulaciones; por el contrario, hoy en día está llamada a explorar vastas y desconocidas regiones del espacio químico y estructural, donde no existen datos experimentales con los que contrastar lo calculado.

Este desafío tiene, por consiguiente, dos vertientes: por una parte, son necesarios métodos de cálculo predictivos, que generen certeza sobre lo que se pueda medir; por otra, es necesario escalar esos métodos a bibliotecas de miles o cientos de miles de candidatos para poder cribarlas. Los cálculos ab-initio (o de primeros principios) se han desarrollado enormemente desde los años 80, permitiendo satisfacer los requisitos de exactitud y precisión en muchas magnitudes medibles; sin embargo, las secuencias de cálculo que conducen a tales predicciones son a menudo prohibitivamente costosas.

En este contexto, los métodos de regresión, clasificación y agrupamiento proporcionados por el aprendizaje automático han supuesto una auténtica revolución, abriendo un mundo de posibilidades para acelerar esos cálculos sin perder justeza, o al menos sacrificándola de manera controlada. Se puede, por ejemplo, entrenar un modelo de regresión para aproximar directamente el resultado de un cálculo a partir de sus entradas, pero a un coste varios órdenes de magnitud menor.

En esta sesión presentaré algunos ejemplos de aceleración de secuencias de cálculos atomísticos basados en primeros principios. El hilo conductor de la mayor parte de ellos será el cálculo predictivo de la conductividad térmica, un problema en ciencia de materiales que conjuga un alto coste computacional con un amplio interés tecnológico. Mostraré, en primer lugar, modelos de alto nivel que evitan el cálculo, conectando propiedades tabuladas con los resultados buscados, y otros que explotan regularidades estructurales o químicas en familias de compuestos. Después pasaré a discutir una de las ideas más fértiles en esta área: los potenciales interatómicos basados en el aprendizaje automático. Se trata de sofisticados modelos de regresión capaces de reproducir la dinámica de un sistema atomístico (en términos de energías y fuerzas) con precisión comparable a la de los cálculos ab-initio directos y un rendimiento muy superior. Explicaré los principios de su diseño, hablaré de algunas implementaciones modernas que hacen uso de los mismos motores de aprendizaje automático de última generación en los que se basan los grandes modelos generativos de lenguaje, y mostraré cómo abren la puerta a cálculos antes imposibles: entre otras, exploraciones globales de hipersuperficies de energía complejas, la dinámica molecular de alta precisión, o la descripción del "scattering" fonónico causado por defectos cristalográficos.

17:15 – Sesión 1.2.: Tratamiento estadístico, Machine Learning y Deep Learning en la caracterización de materiales por microscopía electrónica.

Ponente:

Mario Peláez Fernández

Investigadora postdoctoral. Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (INMA).



Doctora en Física por la Universidad de Zaragoza, con una tesis basada en análisis EELS de nanomateriales 1D y 2D (Premio Mejor Tesis de la Sociedad de Microscopía de España en Desarrollos Tecnológicos). Tras su doctorado, ha desarrollado 6 años de experiencia postdoctoral entre la Universidad de Zaragoza y la Université de Lille, enfocándose mayoritariamente en la creación de nuevos métodos de análisis de datos para microscopía electrónica y espectroscopía EELS, con aplicaciones enfocadas a materiales sensibles a los haces de electrones.

Resumen de la ponencia:

La caracterización de propiedades a nanoescala es un campo de valor incalculable para la investigación en materiales. Dentro de esta caracterización, la microscopía electrónica, junto con otras técnicas de espectroscopía y difracción posibles en un microscopio, ha conseguido auténticos hitos. Además de ser una herramienta empleada ampliamente para la caracterización y el mapeo químico, la microscopía TEM/STEM ha podido realizar mapas cristalográficos, de carga eléctrica, de propiedades optoelectrónicas o de diferentes estados de oxidación dentro de un mismo elemento.

En los últimos años, la proliferación de detectores directos, así como de monocromadores de última generación, han permitido tener una gran resolución tanto espacial como en energía. Esto ha permitido el desarrollo de numerosas aplicaciones de técnicas como el 4D-STEM, el STEM-EDX o el STEM-EELS que han aumentado considerablemente la posibilidad y la calidad de la caracterización de nanomateriales, particularmente en el caso de muestras sensibles al haz de electrones. Esta caracterización se ha podido ampliar también a tres dimensiones gracias a los estudios tomográficos.

Pese a las ventajas que ofrecen estos desarrollos en la microscopía, estas novedosas caracterizaciones también vienen con una serie de retos. Por una parte, los detectores directos de píxeles híbridos (de más nueva generación) ofrecen una cantidad muchísimo mayor de datos a analizar que los detectores convencionales hasta la fecha, al contar cada uno de los electrones recibidos y, en algunos casos, incluso el tiempo de llegada de los mismos. Asimismo, la técnica de 4D-STEM, consistente en el análisis de los patrones de difracción generados al ser atravesada la muestra por el haz píxel a píxel, tiene asociado un coste de análisis de datos muchísimo mayor al tener un datacube en 4 dimensiones (2 espaciales, 2 de difracción). Asimismo, la reconstrucción de esta información tomográfica en 3 dimensiones sigue siendo un reto a nivel analítico.

Es aquí donde las herramientas de análisis con herramientas de inteligencia artificial, ya sea supervisada (como herramientas de denoising como el Singular Value Thresholding, Non-Negative Matrix Factorization) o no supervisada (como Blind Source Separation o Total Variation), así como el desarrollo de arquitecturas de redes neuronales tanto de manera supervisada como no supervisada para varios propósitos se convierte en un punto clave para poder llevar a cabo los análisis de esta nueva generación de experimentos.

En esta ponencia se pretende describir la problemática actual de este tipo de caracterización, una introducción a las diversas herramientas de inteligencia artificial que se pueden emplear para los análisis, así como casos prácticos que se han hecho en el estado del arte de estas técnicas.

18:30 – Sesión 1.3.: Inteligencia artificial accesible para el diseño de catalizadores.

Ponente:

Juan Vicente Alegre Requena -

Científico Titular. Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH), Científico Titular CSIC



Juan Vicente es Doctor en Química Orgánica por la Universidad de Zaragoza (2017), donde desarrolló experimentalmente reacciones organocatalíticas asimétricas. Posteriormente trabajó en la Colorado State University, cambiando de temática a estudios mecanísticos computacionales y aprendizaje automático. Desde 2022, investiga en la Universidad de Zaragoza y actualmente es científico titular en el CSIC, centrado en la inteligencia artificial química, quimioinformática y descubrimiento de catalizadores.

<https://thealegregroup.com>

Resumen de la ponencia:

Los continuos avances en el hardware y en los algoritmos informáticos han permitido que la química digital se aplique al estudio de problemas cada vez más complejos. Sin embargo, llevar a cabo los distintos protocolos computacionales necesarios para la exploración de catalizadores, la optimización molecular y el entrenamiento de modelos de aprendizaje automático (ML) puede resultar tedioso y consumir mucho tiempo. La automatización de estos procesos no solo reduce errores, sino que también mejora la reproducibilidad y facilita el almacenamiento y la reutilización de los datos generados.

En esta charla, presentaremos en primer lugar diversos programas automatizados y fáciles de usar, como AQME¹ y ROBERT². Estas herramientas permiten generar descriptores moleculares y entrenar modelos de ML en cuestión de minutos, haciéndolos accesibles tanto para la comunidad química general mediante formatos de entrada intuitivos, como archivos CSV o ChemDraw.

Además, mostraremos cómo estos programas pueden emplearse como una estrategia de descubrimiento de catalizadores más eficiente que el clásico prueba y error. Finalmente, introduciremos nuestros flujos de trabajo automatizados e iniciativas educativas más recientes, diseñados para democratizar y fomentar el uso del aprendizaje automático dentro de la comunidad química en general.

Referencias:

[1] Alegre-Requena et al. Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci. 2023, 13, e1663.

[2] Dalmau et al. Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci. 2024, 14, e1733.

19:00 – Sesión 1.4.: Redes neuronales con restricciones físicas en ciencia de materiales: optimización, identificación de simetrías y búsqueda de modelos matemáticos.

Ponente:

Sergio Gutiérrez Rodrigo-

Profesor Titular de Universidad de Física Aplicada. Universidad de Zaragoza.



Sergio es Profesor Titular en la Universidad de Zaragoza en el Departamento de Física Aplicada. Su carrera científica recorre un camino que empieza en el área de la nanofotónica clásica y que en los últimos años se ha aproximado a la inteligencia artificial (IA). Formado en varios centros de investigación, como el prestigioso Instituto de Óptica de la Universidad de Rochester (EE. UU.), ha publicado más de 50 artículos en cabeceras de élite como Nature Physics o ACS Nano. Actualmente, trabaja en la aplicación y desarrollo de redes neuronales para resolver problemas de física, impulsando el código abierto y la formación en IA aplicada desde la universidad.

Resumen de la ponencia:

El aprendizaje automático (Machine Learning, ML) está transformando la forma en que se abordan los problemas en física, con especial énfasis en su impacto en la Ciencia de Materiales. Estas nuevas herramientas permiten abordar desafíos complejos de manera más eficiente, abriendo la puerta a métodos más rápidos, precisos y versátiles tanto en investigación como en aplicaciones tecnológicas.

Uno de los principales beneficios del ML en este contexto es su capacidad para acelerar procesos que tradicionalmente requieren un gran coste computacional. En particular, se destacan los llamados modelos sustitutos o “surrogates”, que pueden reemplazar métodos numéricos clásicos en problemas de optimización. Gracias a ellos, es posible obtener soluciones aproximadas en mucho menos tiempo, lo que resulta especialmente útil cuando se necesitan múltiples simulaciones o iteraciones. Además, el ML también puede mejorar el análisis de datos experimentales, reduciendo el ruido y aumentando la precisión de las predicciones, lo que contribuye a una mejor comprensión de los fenómenos físicos.

La ponencia se centra especialmente en un enfoque innovador conocido como Physics-Informed Neural Networks (PINNs). Estas redes neuronales se diferencian de los modelos tradicionales de ML en que no dependen únicamente de datos, sino que incorporan directamente las leyes físicas que describen el sistema. Estas leyes, generalmente formuladas como ecuaciones diferenciales, se integran en el proceso de entrenamiento de la red. De este modo, el modelo no solo aprende a partir de datos observados, sino que también está guiado por principios físicos fundamentales, lo que permite obtener resultados más coherentes con la realidad.

En el entrenamiento de una PINN, se minimiza una función de error que tiene en cuenta varios factores: por un lado, el cumplimiento de las ecuaciones físicas que gobiernan el sistema; por otro, las condiciones iniciales y de contorno; y, cuando están disponibles, los datos experimentales. Esta combinación de información permite que las PINNs sean especialmente útiles en situaciones donde los datos son escasos o incompletos, ya que el conocimiento físico ayuda a compensar esa falta de información.

Otro aspecto relevante que se aborda en la ponencia es el uso del aprendizaje automático para identificar automáticamente simetrías en sistemas físicos. Se presenta un enfoque basado en una nueva arquitectura de red neuronal capaz de descubrir, a partir de datos o ecuaciones, conjuntos completos de soluciones relacionadas entre sí, así como las transformaciones que las conectan. Esto resulta especialmente útil en problemas donde existen múltiples soluciones equivalentes o degeneradas, ya que permite entender mejor la estructura subyacente del sistema.

Además, este enfoque tiene aplicaciones en el diseño inverso, es decir, en la búsqueda de configuraciones que produzcan un comportamiento deseado. En este contexto, el ML no solo ayuda a analizar sistemas existentes, sino también a diseñar nuevos materiales o estructuras con propiedades específicas.

19:30 – Sesión 2.: Redes neuronales con restricciones físicas en ciencia de materiales: optimización, identificación de simetrías y búsqueda de modelos matemáticos.

Ponente:

Javier Sánchez Laínez -
Project Manager. Grupo Técnico RIVI.



Javier Sánchez Laínez es Project Manager en Grupo Técnico RIVI, donde coordina la ingeniería y fabricación de soluciones técnicas de alta complejidad para el manejo de fluidos en el sector Oil&Gas. Posee un Doctorado en Ingeniería Química con Premio Extraordinario por la Universidad de Zaragoza y la Plataforma Tecnológica Española del CO2 que trata sobre la preparación de membranas poliméricas para separación de mezclas de gases. Además cuenta con una destacada trayectoria previa en I+D liderando proyectos europeos de purificación de biogás y transporte de hidrógeno en Fundación Hidrógeno Aragón.

www.linkedin.com/in/jsanchez-lainez

Resumen de la ponencia:

La fabricación de equipos paquetizados o skids representa uno de los mayores desafíos en la ingeniería de procesos contemporánea. Su complejidad no reside únicamente en la integración física de componentes mecánicos y de control, sino en la estricta convergencia de una densa amalgama de especificaciones técnicas exigidas por los clientes. En sectores de alta regulación, como el energético o el petroquímico, un solo proyecto puede estar sujeto a cientos de documentos normativos que abarcan desde estándares internacionales hasta requisitos particulares de materiales y seguridad, creando un ecosistema de información masivo y fragmentado.

Tradicionalmente, la revisión de estas especificaciones ha recaído sobre ingenieros con alta especialización, quienes deben realizar una lectura exhaustiva para "hilar fino" entre conceptos técnicos transversales. Este proceso manual no solo demanda una inversión de tiempo considerable, sino que conlleva un riesgo crítico: cualquier omisión en la fase de oferta o diseño preliminar puede derivar en desviaciones presupuestarias, retrasos en los plazos de entrega o fallos de conformidad técnica durante la fabricación. La capacidad humana para detectar inconsistencias en volúmenes tan vastos de documentación se ha convertido en un cuello de botella operativo.

En este escenario, los Modelos de Lenguaje de Gran Tamaño (LLM) emergen como una herramienta disruptiva por su avanzada capacidad para procesar, sintetizar y extraer entidades complejas en lenguaje natural. No obstante, la implementación de la inteligencia artificial en entornos de ingeniería de precisión requiere metodologías que garanticen la fiabilidad del dato. Esta comunicación explora cómo el uso de Prompt Engineering avanzado — mediante la asignación de roles de experto, el uso de placeholders para la contextualización de datos y la estructuración de instrucciones de cadena de pensamiento— mejora drásticamente la precisión del output, mitigando el riesgo de alucinaciones y asegurando la integridad técnica de las respuestas.

En esta presentación podrán verse casos prácticos donde el uso de LLM ha transformado la revisión documental en proyectos reales de ingeniería. Se detallará cómo los resultados obtenidos impactan directamente en la toma de decisiones estratégicas en las fases de ingeniería, diseño, compras y fabricación. Los datos sugieren que la simbiosis entre el juicio experto y el procesamiento automatizado permite optimizar la cadena de suministro y reducir significativamente las no-conformidades, redefiniendo la competitividad en el sector de los equipos paquetizados.

Día 2 – 10 de junio

09:00 – Plenaria 2: Introducción de la IA en la investigación en el campo de la Ingeniería.

Ponente:

Elías Cueto Prendes*Catedrático de Ingeniería Mecánica. Universidad de Zaragoza.*

Elías Cueto es el director de la Cátedra de la Estrategia Nacional en Inteligencia Artificial del Ministerio de Transformación Digital en la Universidad de Zaragoza. Ha trabajado desde el inicio de su carrera académica en temas relacionados con la Mecánica Computacional. Ha sido reconocido con el premio Juan C. Simó de la Sociedad Española de Mecánica e Ingeniería Computacionales (SEMNI), el premio O. C. Zienkiewicz de la European Community on Computational Methods in Applied Sciences (ECCOMAS), el Scientific Prize de la European Scientific Association of Material Forming (ESAFORM) y actualmente es fellow de la European Alliance of Medical and Biological Engineering and Sciences (EAMBES) y de la International Association of Computational MEchanics (IACM).

<https://amb.unizar.es/people/elias-cueto/>

Resumen de la ponencia:

La inteligencia artificial científica está suponiendo una revolución en muchos ámbitos tanto de la ciencia como de la ingeniería y la industria. Sin embargo, como decía Dirac en la década de los 50, ya conocemos todas las ecuaciones de la Química y prácticamente todas las de la Física. Si esto es así, no parece sensato despreciar este conocimiento y entrenar inteligencias artificiales basándonos únicamente en datos.

En nuestro laboratorio hemos desarrollado técnicas que incluyen el conocimiento existente acerca de las ecuaciones que gobiernan el fenómeno en cuestión. Como se verá, se logra así no solo unas predicciones mucho más robustas sino también un gasto mucho más frugal de datos (llegándose incluso a la total ausencia de datos). En la charla hablaremos de todos estos aspectos y de cómo pueden explotarse para lograr una nueva generación de IA mucho más interesante que los actuales LLMs.

09:30 – Sesión 3.1.: Herramientas de machine learning para el diseño de procesos y productos sostenibles.

Ponente:

Mariano Martín Martín

Catedrático de Ingeniería Química. Universidad de Salamanca.



El Prof. Martín es Catedrático de Ingeniería Química de la Universidad de Salamanca y académico correspondiente de la Real academia de Ciencias exactas, físicas y naturales de España. Su tesis recibió el premio extraordinario de doctorado en 2008. Ingresó como ingeniero posdoctoral en P&G donde obtuvo el premio P&G 2008 por su destacada contribución al modelado y simulación. Fue Fulbright Scholar de 2009-2011 en la Universidad Carnegie Mellon con el profesor Ignacio E. Grossmann. El prof. Martín fue nombrado “Next Generation in Chemical Engineering” por el Imperial College de Londres en 2016, y ha sido incluido en la lista del top 1% de investigadores en Ingeniería Química, publicada por la Universidad de Stanford desde su primera edición. Es editor ejecutivo de Chemical Engineering Science, editor asociado de J Cleaner production y Chem. Eng. Res. Des. y está en el comité editorial de Computers & Chemical Engineering.

<https://pse.usal.es/>

<https://www.linkedin.com/in/mariano-martin-1aa07620/>

Resumen de la ponencia:

En esta ponencia se presenta la aplicación de distintas herramientas de inteligencia artificial y machine learning en el campo de la ingeniería química y de procesos. Los ejemplos versan desde el diseño de moléculas, para el cual estas herramientas permiten la predicción de propiedades de cara al diseño de moléculas que satisfagan las necesidades del mercado. El diseño de procesos y productos, puesto que el modelado detallado de los equipos hace difícil una optimización matemática tradicional y el empleo de técnicas de optimización Bayesiana permite incluir dichos modelos en la toma de decisiones. A escala estratégica, el diseño y la operación de plantas que integran las energías renovables supone la discretización horaria llevando a problemas de gran escala donde la identificación de días representativos mediante técnicas de clustering se ha demostrado muy eficiente así como, también en el análisis del aprovechamiento de residuos a escala nacional o continental, el clustering permite optimizar la discretización del terreno de cara a formular problemas que se puedan resolver y desarrollar herramientas para la toma de decisiones estratégicas y guiar el desarrollo de políticas de descarbonización. Finalmente, data management se presenta como una herramienta que permite dar trazabilidad a las corrientes de residuos, guiar el diseño de tecnologías de tratamiento así como identificar patrones de operación permitiendo evaluar el efecto de cambios normativos en la gestión de los residuos.

10:00 – Sesión 3.2.: Diseño de membranas mixtas de biopolímeros para la separación de CO₂: construcción sistemática de modelos semiparamétricos.

Ponente:

Clara Casado Coterillo

Profesora Titular (I3). Universidad de Cantabria.



Clara Casado Coterillo obtuvo su doctorado europeo en ingeniería química en 2005 por la Universidad de Cantabria, donde regresó como investigadora Ramón y Cajal en 2012, tras diversos periodos de investigación financiados por ayudas competitivas, en instituciones de prestigio en el campo de la síntesis y caracterización de distintos materiales de membrana para diversas aplicaciones (Universidad de Hiroshima, Japón, European Membrane Institute, Universidad de Twente (Países Bajos), Institut Europeen des Membranes (Francia), la Universidad de Zaragoza, y el Instituto de Tecnología Química (UPV-CSIC) en Valencia. La más reciente, la estancia en el centro PROSYS de la Universidad Técnica de Dinamarca, base del trabajo que presenta en estas jornadas, con los investigadores Oscar Andrés Prado Rubio y Jakob K Huusom.

Ha escrito más de 60 publicaciones científicas en revistas indexadas y ha participado en más de 20 proyectos en convocatorias públicas y privadas, 9 de ellas como investigadora principal. Ha dirigido 3 tesis doctorales que a su vez han obtenido mención internacional y la máxima calificación.

<https://www.linkedin.com/in/claracc/?locale=en>

<https://web.unican.es/portal-investigador/personal-investigador/detalle-investigador?i=ODA3F66130COD8BA>

Resumen de la ponencia:

La tecnología de separación de gases con membranas es una alternativa prometedora para mitigar los efectos adversos de los gases de efecto invernadero en el cambio climático. El desarrollo de los procesos de fabricación y separación con membranas necesita optimizar la predicción del comportamiento de los nuevos materiales de membrana desarrollados en los laboratorios con criterios de sostenibilidad en el marco de la economía circular. Es por tanto necesario desarrollar modelos fiables capaces de representar tecnologías sostenibles. En esta contribución, se investiga el desarrollo de un modelo semiparamétrico diseñado para estimar la permeabilidad de una membrana mixta novedosa basada en biopolímeros, con potencial para la separación de corrientes de CO₂/N₂. Como eje central, se propone un modelo modificado de Maxwell, complementado por una red neuronal de

perceptrón multicapa (MLPNN). Los modelos se ajustaron utilizando datos experimentales previos y combinando métodos de optimización estocástica y local. Esta aproximación permitió mejorar sustancialmente la capacidad predictiva del modelo al incorporar de manera sistemática información experimental al modelo paramétrico convencional.

10:30 – Sesión 3.3.: Modelización de procesos adsorción-reacción mediante algoritmos evolutivos.

Ponente:

José Ángel Peña Llorente

Catedrático de Ingeniería Química. Titular. Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A). Escuela de Ingeniería y Arquitectura. Universidad de Zaragoza.



Catedrático de Ingeniería Química en la Escuela de Ingeniería y Arquitectura, e investigador del Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A) de la Universidad de Zaragoza. Su tesis doctoral estuvo vinculada a la desactivación de catalizadores por formación de coque y a su modelado. Durante su etapa posdoctoral se involucró en el estudio de la seguridad de instalaciones de producción, y más concretamente en el modelado de explosiones térmicas (runaway reactions). Desde 2002 su esfuerzo investigador se centra en la producción, almacenamiento y aplicaciones del hidrógeno, y principalmente en la producción de combustibles sintéticos a partir de residuos.

LINKEDIN: <https://www.linkedin.com/in/jos%C3%A9-angel-pe%C3%B1a-ab81705/>

X: @JAPenya

Web: <https://creg.i3a.es/jose-angel-pena/>

Resumen de la ponencia:

Los algoritmos evolutivos (EA) son técnicas de optimización estocásticas y no convencionales, basadas en los principios de la evolución natural. En esencia, consisten en facilitar la supervivencia de los individuos más aptos (evolución de las especies). Aplicados a un proceso de optimización, facilitan que los mejores valores de un conjunto de parámetros sean los que sobrevivan, constituyendo su conjunto de valores óptimo.

En la ingeniería de procesos, este tipo de algoritmos tienen un interés creciente ya que, a diferencia de los métodos tradicionales de optimización (búsqueda de máximos o mínimos), basados en la búsqueda del máximo gradiente (máxima pendiente), tienen una mayor capacidad para evitar quedar atrapados en óptimos locales y ofrecen una mejor perspectiva global en problemas altamente no lineales.

Esta ponencia presenta una breve descripción de este tipo recursos inspirados en la naturaleza, (algoritmos genéticos, templado simulado, y otros), y que son capaces de optimizar el valor de variables operativas de un proceso (temperatura, presión, caudal,...) y topológicas (número de ciclos), maximizando por ejemplo, el rendimiento a un determinado producto, mientras minimiza el consumo energético.

Más concretamente, y a modo de ejemplo, se utilizará un algoritmo genético (GA) para determinar cuál es el mejor modelo y el valor óptimo de sus parámetros de operación, que mejor describen el proceso de producción de gas natural sintético mediante hidrogenación de dióxido de carbono en un reactor de lecho fijo operando en ciclos de adsorción-reacción. Para ello se partirá de datos empíricos obtenidos en un reactor de laboratorio.

11:00 – Sesión 3.4.: Gemelos digitales como herramienta para el diseño y la optimización de reactores químicos.

Ponente:

Simona Renda

Investigadora Juan de la Cierva. Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A). Universidad de Zaragoza.



Simona Renda es investigadora Juan de la Cierva en la Universidad de Zaragoza y miembro del grupo consolidado CREG desde 2023. Ingeniera química con doctorado por la Universidad de Salerno (Italia), centra su trabajo en catálisis y reactores para aplicaciones ambientales. Su actividad combina experimentación y modelización, en el marco de colaboraciones con el sector industrial, así como en docencia y supervisión académica. Ha participado en más de 15 proyectos, nacionales, europeos y privados, y mantiene una consolidada red de colaboraciones internacionales. Desde 2025 está acreditada como Profesora Titular en Italia.

<https://www.linkedin.com/in/simonarenda/>

Resumen de la ponencia:

En un contexto donde la inteligencia artificial está redefiniendo la ingeniería de procesos, los gemelos digitales se están consolidando como herramientas clave para entender, diseñar y optimizar sistemas químicos complejos.

Los gemelos digitales de reactores químicos permiten reproducir el funcionamiento real del sistema a partir de modelos matemáticos, capturando fenómenos de transporte y reacción y proporcionando una representación coherente y utilizable del proceso. Aplicados a configuraciones como lechos fijos, reactores estructurados o sistemas fluidizados, estos modelos permiten explorar condiciones de operación, anticipar comportamientos del sistema y reducir la necesidad de experimentación directa, especialmente en etapas de diseño y optimización.

Más allá de su capacidad descriptiva, su valor reside en su carácter predictivo y en su capacidad para apoyar la toma de decisiones en entornos donde la experimentación es costosa o limitada.

En este marco, la inteligencia artificial se configura como una herramienta complementaria que puede ampliar el alcance de estos modelos, especialmente en tareas como el tratamiento de datos, la estimación de parámetros o la aceleración de simulaciones. Lejos de sustituir el conocimiento físico, su integración permite reforzar la capacidad predictiva y la aplicabilidad de los gemelos digitales.

Este enfoque pone de manifiesto el papel de los gemelos digitales como una de las bases de la evolución digital en la ingeniería química, combinando rigor físico y nuevas herramientas computacionales para abordar sistemas cada vez más complejos.

12:15 – Sesión 4.: Cómo la inteligencia artificial ayuda al I+D en las empresas del sector de la ingeniería química.

Ponente:

Ainhoa Bilbao Pardos

Ingeniera química. Investigación y desarrollo. Grupo SAMCA.



Ingeniera química por la Universidad de Zaragoza con 20 años de experiencia en I+D+i en entornos industriales como Procter & Gamble y Grupo SAMCA. Autora de 3 patentes y con formación ejecutiva mediante un MBA y un programa de liderazgo en la London School of Economics, ambos becados por Banco Santander. Complementa su perfil técnico como formadora independiente en inteligencia artificial aplicada, donde ayuda a equipos de distintos sectores a integrar estas herramientas para mejorar la eficiencia, automatizar procesos y tomar decisiones.

<https://www.linkedin.com/in/ainhoa-bilbao-7323ab7/>

Resumen de la ponencia:

Esta ponencia presenta un enfoque práctico sobre cómo integrar la inteligencia artificial en el trabajo diario dentro de la ingeniería química, con especial foco en el entorno empresarial.

El objetivo es claro. Entender la IA como una herramienta de apoyo, no como una amenaza. La IA no sustituye el criterio técnico. Lo amplifica. Permite delegar tareas repetitivas, acelerar procesos y mejorar la toma de decisiones, siempre bajo supervisión experta.

Se abordarán las bases necesarias para empezar.

- Qué es la inteligencia artificial en términos operativos.
- Qué tipos de herramientas existen hoy.
- Cómo interactuar con ellas de forma eficaz.

El foco no está en la teoría, sino en el uso real. La clave está en identificar tareas delegables.

Ejemplos concretos dentro de empresas químicas:

- Análisis y síntesis de literatura científica.
- Reducción de horas de revisión a minutos.
- Generación de borradores de informes técnicos o propuestas de proyecto.
- Automatización de tareas administrativas y de documentación.

Estos usos liberan tiempo. Tiempo que el ingeniero puede dedicar a interpretar resultados, validar hipótesis y tomar decisiones críticas.

También se abordará un punto crítico. La calidad del uso. La IA no es fiable por defecto. Requiere criterio, validación y conocimiento del dominio. Un mal uso genera errores. Un buen uso genera ventaja competitiva.

Se presentarán ejemplos reales de aplicación en entornos de I+D. Casos donde la IA mejora la eficiencia sin comprometer la calidad técnica.

El objetivo es que el asistente vea aplicaciones directas que pueda trasladar a su contexto. La ponencia busca un cambio de mentalidad. Pasar de rechazo o miedo a uso estratégico. El ingeniero químico tiene una posición privilegiada. Conoce el proceso, los datos y el contexto. La IA no reemplaza esa experiencia.