



Caracterización numérica de problemas de estabilidad de fases para la evaluación de métodos estocásticos de optimización global

Rosa María Fonseca Pérez¹ y Adrián Bonilla Petriciolet¹

¹ Instituto Tecnológico de Aguascalientes. rm.fonseca0@gmail.com

Los métodos estocásticos de optimización global implican elementos probabilísticos y utilizan números aleatorios en la búsqueda del óptimo global. Cada una de estas técnicas de optimización tiene sus propias fortalezas y desventajas debido a que están basadas en fenómenos o comportamientos específicos¹. El creciente desarrollo y las mejoras en los métodos estocásticos de optimización global han sido aplicados en numerosos aspectos de la Ingeniería Química y han desempeñado un papel importante en cálculos termodinámicos como es el análisis de estabilidad en sistemas multicomponentes. Estos problemas se caracterizan por involucrar cálculos complejos, contar con la presencia de varios óptimos locales, varias variables de decisión en el modelo donde generalmente se presenta un comportamiento no convexo en la función objetivo que puede estar restringido a ciertas condiciones del espacio de búsqueda. Los resultados reportados en la literatura indican que estas técnicas, en ciertos casos, aún requieren mejoras para resolver, de forma robusta y eficiente, problemas de aplicación en termodinámica^{2,3}. Una de las características deseadas de un método de optimización eficaz es la alta tasa de éxito para encontrar la solución global con el menor esfuerzo computacional. Para el caso de cálculos de estabilidad de fases, los métodos estocásticos de optimización global han sido utilizados en un conjunto de problemas termodinámicos que son considerados como problemas de referencia para fines de comparación y evaluación numérica. No obstante, las propiedades y características de estos problemas de referencia no han sido evaluadas y se desconoce si estos problemas realmente corresponden a problemas de optimización global apropiadas para permitir la comparación, evaluación e identificación de las ventajas y limitaciones de los métodos de optimización disponibles. En este trabajo se ha realizado la caracterización de un conjunto de problemas de estabilidad de fases. Se han empleado diferentes métodos estocásticos de optimización global convencionales, Evolución Diferencial, Recocido Simulado, Búsqueda Armónica, Lista Tabú, Enjambre de Partículas y Algoritmo Genético, para determinar y clasificar a este conjunto de problemas de estabilidad de fases. Los resultados obtenidos indican que los problemas de estabilidad de fases que comúnmente son utilizados para evaluar a nuevos métodos de optimización no son problemas de optimización global apropiados para diferenciar las capacidades de dichos métodos.

Referencias¹ H. Zhang, G. P., Rangaiah, "An efficient constraint handling method with integrated differential evolution for numerical and engineering optimization", *Comput. Chem. Eng.*, Vol 37, 10, 2012, pp 74-88.² G. P. Rangaiah, "Stochastic global optimization: techniques and applications in chemical engineering" (World Scientific, Singapore, 2010).³ P. Shelokar, A. Kulkarni, V. K. Jayaraman, P. Siarry, "Metaheuristics in Process Engineering: A Historical Perspective, Applications of Metaheuristics in Process Engineering" (Springer International Publishing, Switzerland, 2014).⁴ J. A. Fernández-Vargas, A. Bonilla-Petriciolet, G.P. Rangaiah, S. E. K. Fateen, "Performance analysis of stopping criteria of population-based metaheuristics for global optimization in phase equilibrium calculations and modeling" *Fluid Phase Equilib.*, Vol. 427, 2016, pp. 104-125.