



## Sinópsis del libro “Stochastic Process Optimization using Aspen Plus®”

Juan Gabriel Segovia Hernández, Fernando Israel Gómez Castro

Departamento de Ingeniería Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato, Noria Alta S/N Col. Noria Alta, 36050, México.

### Resumen

La optimización de procesos químicos es un área cuya importancia ha aumentado en los últimos años, a la par del desarrollo de tecnología computacional que permite un análisis completo de esquemas complejos de producción. Debido a las características de los modelos que representan los procesos químicos, es necesario contar con herramientas y métodos que permitan alcanzar las mejores soluciones a los problemas de diseño. Es por ello, que se ha editado el libro “Stochastic Process Optimization using Aspen Plus®”, de cuál se presenta una sinópsis. Los autores pretenden que el lector aprenda el manejo de software de optimización estocástica para la solución de problemas de relevancia industrial, tomando en cuenta aspectos económicos, ambientales, operacionales y de seguridad.

*Palabras clave: Optimización estocástica, optimización de procesos, Aspen Plus®.*

### Abstract

Optimization of chemical processes is an area whose importance has been increased on the last years, together with the development of computational technology which allows a complete analysis of complex production schemes. Due to the characteristics of the models representing the chemical processes, it is necessary to have methods and tools which allow reaching the best solutions to design problems. **In this context, the book “Stochastic Process Optimization using Aspen Plus®” has been edited recently and a synopsis is presented. The authors aim is to allow the reader to learn the use of stochastic optimization software to solve problems of industrial relevance, considering economic, environmental, operational and safety aspects.**

*Keywords: Stochastic optimization, process optimization, Aspen Plus®.*



## Introducción

La optimización puede definirse como: elegir la mejor alternativa de entre un conjunto de opciones factibles. Partiendo de esta definición, es posible decir que todos los días optimizamos, incluso sin darnos cuenta. Cada vez que tomamos una decisión de entre varias alternativas, seleccionando la mejor en términos de algún criterio previamente definido, estamos optimizando. La elección de la mejor opción puede hacerse siguiendo distintas estrategias: tomando como base experiencias previas, probando todas las alternativas y escogiendo la mejor, o empleando optimización matemática. Al hacer uso de esta última, es importante contar con modelos confiables que representen de la mejor manera posible el sistema a optimizar. Por tanto, el aprendizaje de técnicas de optimización matemática requiere al menos una formación básica en modelado y matemáticas.

Particularmente en las ingenierías, la optimización tiene un amplio rango de aplicaciones, debido a la constante necesidad de tomar decisiones en dicho ámbito. Esto también ocurre en el caso de la ingeniería química, particularmente en la ingeniería de procesos. En dichas ramas, existen muchos casos en los que es necesario optimizar, tratándose de procesos modelados por ecuaciones no convexas y con varios grados de libertad. Por otra parte, los modelos de ingeniería de procesos suelen involucrar variables tanto discretas como continuas, así como sistemas de ecuaciones algebraicas y diferenciales. Debido a la complejidad de las ecuaciones que representan los procesos químicos, estos requieren métodos robustos de optimización, que permitan obtener los mejores diseños en términos de los objetivos establecidos por el diseñador. Los métodos de optimización estocásticos cumplen con esta característica. Estos métodos implican el análisis del modelo matemático en diversas regiones dentro del espacio de solución, escogiendo las mejores alternativas para conformar un conjunto de soluciones óptimas. A diferencia de los métodos tradicionales de optimización determinística, los métodos estocásticos no requieren del cálculo de derivadas, y pueden analizar espacios discontinuos con mayor facilidad. Así pues, los métodos estocásticos son una buena alternativa para la solución de problemas de optimización de procesos. Por otra parte, el uso de simuladores modulares de procesos como herramientas auxiliares en la optimización facilita la tarea del modelado matemático, puesto que estos simuladores cuentan con una amplia base de datos en cuanto a modelos de equipos comunes, así como en cuanto a propiedades físicas de distintos componentes. Aspen Plus® es el simulador modular más ampliamente usado a nivel industrial debido a su robustez numérica y a su amplia y actualizada base de datos termodinámicos. Aspen Plus® es básicamente un programa de simulación de procesos químicos, en el cual además de simulaciones de diagramas de flujo, se puede realizar: (1) estimación de propiedades de compuestos, (2) análisis de sensibilidad de variables de proceso, (3) obtener especificaciones de diseño de proceso, y, (4) síntesis y análisis de procesos químicos, entre otras tareas del diseño de procesos y equipos.



Así, el uso de simuladores modulares combinados con métodos de optimización estocástica representa una buena alternativa para obtener diseños óptimos de equipo de proceso o incluso de procesos completos. En el libro “Stochastic Process Optimizacion using Aspen Plus®”, se presentan algunos conceptos básicos acerca de optimización, en general, y particularmente optimización estocástica. Asimismo, se muestran técnicas para el diseño y optimización simultáneos de módulos de proceso. Se presentan también ejemplos de aplicación de las técnicas desarrolladas para el diseño óptimo de operaciones unitarias y procesos químicos.

### **Necesidad del libro**

El uso de métodos estocásticos para la optimización de procesos se ha extendido en años recientes. Por otra parte, el manejo de paquetes especializados para la solución de problemas en ingeniería química se ha convertido en indispensable para las nuevas generaciones de ingenieros químicos. Debido a lo anterior, se desarrolló el libro “Stochastic Process Optimizacion using Aspen Plus®” como una referencia introductoria a la optimización, así como una guía para el aprendizaje en el uso conjunto de dos herramientas computacionales, tales como el simulador de procesos Aspen Plus® y el paquete matemático MATLAB®, para el diseño y optimización simultáneos de equipos individuales y de procesos completos.

### **Descripción de los capítulos**

El libro “Stochastic Process Optimizacion using Aspen Plus®” consta de 10 capítulos. Los primeros tres capítulos son introductorios, presentando al lector los conceptos básicos de optimización. Los capítulos 4 y 5 presentan algunas de las características del simulador de procesos Aspen Plus®, mientras que los capítulos 6 al 10 muestran la aplicación del enlace entre MATLAB® y Aspen Plus® para la optimización de distintos tipos de equipos de proceso y procesos completos. A continuación, se presenta una descripción de cada capítulo.

#### *Capítulo 1. Introduction to optimization (Introducción a la optimización)*

En este capítulo se presentan algunos de los conceptos básicos de optimización, señalando la importancia de esta área tanto en ingeniería química como en otras áreas del conocimiento, e incluso en la vida diaria. Se describe la optimización basada en modelos matemáticos, y se presentan clasificaciones de los problemas de optimización. Se introducen los conceptos de función objetivo y región factible, los cuales son fundamentales en todo problema de optimización basada en modelos matemáticos. Se describe el caso particular de los problemas de optimización multiobjetivo, y se concluye con una discusión sobre la optimización de procesos.



### *Capítulo 2. Deterministic optimization (Optimización determinística)*

En este capítulo se describen las características de la optimización determinística, la cual se considera la contraparte de la optimización estocástica, caracterizándose por su rigurosidad matemática. Se presentan los fundamentos de la optimización determinística, partiendo de los principios del cálculo diferencial. Asimismo, se presenta otro de los conceptos fundamentales en optimización: la convexidad. Se describen los tres sub-tipos de problemas de optimización no lineal por programación matemática, así como los métodos empleados comúnmente para su solución. Finalmente, se describe el software más utilizado en la solución de problemas de optimización por métodos determinísticos.

### *Capítulo 3. Stochastic optimization (Optimización estocástica)*

En este capítulo se presentan las características de la optimización estocástica, así como una descripción general del funcionamiento de este tipo de métodos. Se presenta un análisis de las características de la optimización estocástica y la optimización determinística, y se hace un comparativo de las ventajas y desventajas de cada tipo de método. Se describe el manejo de restricciones en optimización estocástica, debido a que los métodos estocásticos básicos por si solos no son capaces de resolver problemas con restricciones. Posteriormente, se describen algunos de los métodos estocásticos más conocidos, tales como algoritmos genéticos, evolución diferencial, búsqueda tabú, recocido simulado, entre otros. Por otra parte, se mencionan las aplicaciones que han tenido los métodos descritos en la solución de problemas de ingeniería química o áreas afines.

### *Capítulo 4. The simulator Aspen Plus® (El simulador Aspen Plus®)*

En este capítulo se describe la importancia del uso de software especializado para el análisis y diseño de procesos químicos. Asimismo, se presentan las características principales del simulador de procesos Aspen Plus®.

### *Capítulo 5. Direct optimization in Aspen Plus® (Optimización directa en Aspen Plus®)*

En este capítulo se presentan los métodos de optimización empleados en el simulador de procesos Aspen Plus®. Estos métodos forman parte del paquete, estando clasificados como herramientas de análisis de sensibilidad y herramientas de optimización, estas últimas empleando como base el método de programación cuadrática secuencial. El capítulo muestra ejemplos de optimización empleando estas



herramientas para equipos de proceso individuales: un intercambiador de calor, un tanque de vaporización instantánea, y un reactor tubular.

*Capítulo 6. Optimization using Aspen Plus® and stochastic toolbox (Optimización usando Aspen Plus® y la caja de herramientas estocásticas)*

En este capítulo se describe el software empleado para llevar a cabo la optimización estocástica, MATLAB®. Asimismo, se presenta la metodología para realizar el enlace entre MATLAB® y Aspen Plus®. La metodología se ejemplifica por medio de la optimización mono-objetivo y multi-objetivo de una columna de destilación multicomponente.

*Capítulo 7. Using external user-defined block model in Aspen Plus® (Usando bloques de modelo externos definidos por usuario en Aspen Plus®)*

En este capítulo se presenta un método para introducir modelos adicionales a los que incluye la base de datos de Aspen Plus®, esto a través de bloques de modelo definidos por usuario. Esta característica de Aspen Plus® permite modelar y cargar equipos de proceso inexistentes en el simulador. Se describe la metodología para introducir los modelos externos empleando Microsoft Excel y MATLAB®.

*Capítulo 8. Optimization with a user kinetic model (Optimización con un modelo cinético de usuario)*

En este capítulo se describen los tipos de modelos cinéticos que permite emplear Aspen Plus® para representar una reacción química. Asimismo, describe la necesidad de contar con la posibilidad de cargar modelos de usuario distintos a los que tiene por default el simulador. Se presenta la metodología para codificar y cargar dichos modelos de usuarios. Finalmente, se ejemplifica la optimización de un sistema con un modelo cinético de usuario, tomando como caso de estudio una columna de destilación reactiva.

*Capítulo 9. Optimization of a biobutanol production process (Optimización de un proceso de producción de biobutanol).*

En este capítulo se presenta un caso de estudio de un proceso completo, el cual consiste en un proceso para producir n-butanol a partir de biomasa. Se describe inicialmente el proceso, así como la selección del modelo termodinámico, con base en los componentes involucrados, y la selección del modelo cinético. Se describe la



optimización del proceso, empleando métodos estocásticos, y se discuten los resultados obtenidos.

*Capítulo 10. Optimization of a silane production process (Optimización de un proceso de producción de silano).*

En este capítulo se presenta un caso de estudio de un proceso completo, el cual consiste en un proceso para producir silano a partir de triclorosilano. El capítulo inicia con un análisis de la importancia de la producción del silano. Posteriormente, se describe una alternativa de proceso empleando destilación reactiva, señalando su potencial en términos económicos. Se define el modelo termodinámico, con base en los componentes involucrados, y se describe el modelo cinético. Posteriormente, se describe el método de diseño y optimización, y se discuten los resultados obtenidos.

Si el lector está interesado en profundizar los casos de estudio presentados en la obra, puede consultar los trabajos de Sánchez-Ramírez y col. (2015), Quiroz-Ramírez y col. (2017), Alcántara-Ávila y col. (2015, 2016), Ramírez-Márquez et al. (2018).

### **Opiniones**

El libro “Stochastic Process Optimization using Aspen Plus®” fue presentado ante la comunidad de la División de Ciencias Naturales y Exactas el 22 de febrero de 2018, por el Dr. José María Ponce Ortega, respetado profesor-investigador de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, quien ostenta el reconocimiento de nivel II en el Sistema Nacional de Investigadores, desarrollando investigación en el área de optimización de procesos químicos, diseño sustentable y optimización de cadenas de suministro. En palabras del Dr. Ponce Ortega, “de los libros en ingeniería química, pocos son publicados por autores mexicanos, y en idioma español, lo cual no demerita el texto pero si limita la audiencia del mismo, por lo que, al estar publicado en inglés y con la editorial elegida, este libro logrará una mayor difusión”. Asimismo, Rappos (2017) presenta una descripción del libro, mencionando que “a lo largo del libro, los autores presentan una guía clara, muchas capturas de pantalla y códigos de ejemplo para el uso del software Aspen Plus, lo cual hace de este libro una herramienta muy útil para aquellos interesados en usar este software para resolver modelos de optimización, en particular en el dominio de la ingeniería química”.

### **Conclusiones**

El libro “Stochastic Process Optimization using Aspen Plus®” describe conceptos básicos de optimización, tanto determinística como estocástica, así como métodos avanzados de optimización estocástica empleando enlaces entre el simulador de



procesos Aspen Plus® y el software matemático MATLAB®. Así pues, el libro puede ser una herramienta introductoria a la optimización y el uso de software de simulación de procesos, así como una guía para lectores más avanzados que deseen llevar a cabo optimización de procesos complejos.

### Referencias bibliográficas

Sánchez-Ramírez E., Quiroz-Ramírez J.J., Segovia-Hernández J.G., Hernández S., Bonilla-Petriciolet A. (2015) Process alternatives for biobutanol purification: design and optimization, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 54(1), 351-358.

Quiroz-Ramírez J.J., Sánchez-Ramírez E., Hernández-Castro S., Segovia-Hernández J.G., Ponce-Ortega J.M. (2017) Optimal planning of feedstock for butanol production considering economic and environmental aspects, *ACS Sustainable Chem. Eng.*, 5(5), 4018-4030.

Alcántara-Ávila J.R., Sillas-Delgado H.A., Segovia-Hernández J.G., Gómez-Castro F.I., Cervantes-Jauregui J.A. (2015) Optimization of a reactive distillation process with intermediate condensers for silane production, *Comput. Chem. Eng.*, 78, 85-93.

Alcántara-Ávila J.R., Tanaka M., Ramírez Márquez C., Gómez-Castro F.I., Segovia-Hernández J.G., Sotowa K.-I., Horikawa T. (2016) Design of a multitask reactive distillation with intermediate heat exchangers for the production of silane and chlorosilane derivatives, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 55(41), 10968-10977.

Ramírez-Márquez C., Vidal Otero M., Vázquez-Castillo J.A., Martín M., Segovia-Hernández J.G. (2018) Process design and intensification for the production of solar grade silicon, *J. Clean. Prod.*, 170, 1579-1593.

Rappos E. (2017) Stochastic process optimization using Aspen Plus (review), Zentralblatt MATH, 1375.90005, en [zbmath.org](http://zbmath.org).