

Optimización global para cálculos y modelación del equilibrio de fases: retos y perspectivas.

Dr. Adrián Bonilla Petriciolet

Una gran variedad de cálculos termodinámicos asociados a la modelación y predicción del equilibrio de fases pueden ser formulados y resueltos como problemas de optimización global. Este tipo de problemas se caracterizan por ser multivariantes, con la presencia de funciones no convexas y con la presencia de restricciones de igualdad. A la fecha, una gran variedad de herramientas numéricas han sido propuestas para realizar, en forma robusta y eficiente, cálculos de equilibrio de fases en sistemas con y sin reacciones químicas. Los métodos estocásticos de optimización global han demostrado un amplio potencial de aplicación en esta área. Sin embargo, estos métodos todavía presentan diversas limitaciones en términos de sus propiedades de convergencia al óptimo global. En esta plática se analizarán y describirán diferentes aplicaciones de métodos estocásticos de optimización global en cálculos de equilibrio de fases. Se discutirán las áreas de oportunidad para mejorar el desempeño de estas herramientas numéricas con el objeto de consolidar su uso como métodos robustos para la resolución de problemas termodinámicos.