

## APLICACION DE ONTOLOGIAS EN EL RETROFIT DE PROCESOS QUIMICOS

### THE APPLICATION OF ONTOLOGIES IN THE RETROFIT OF CHEMICAL PROCESSES

I. López-Arévalo<sup>1</sup>, A. Rodríguez-Martínez<sup>2\*</sup>, R. Bañares-Alcántara<sup>3</sup> y A. Aldea<sup>4</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Ingeniería Informática y Matemáticas, Universidad Rovira i Virgili.*

<sup>2</sup> *Departamento de Ingeniería Química, Universidad Rovira i Virgili.  
Av. Païses Catalanes 26. Tarragona, 43007, España.*

<sup>3</sup> *Department of Engineering Science, University of Oxford. Oxford OX1 3PJ, UK.*

<sup>4</sup> *School of Systems Engineering, University of Reading. Reading RG6 6AH, UK*

#### Resumen

Debido al continuo cambio de los mercados y requerimientos técnico/económicos, se hace necesario que en los procesos industriales se realicen tareas de adaptación. El retrofit es una metodología de análisis y evaluación de posibles cambios para mejorar en alguna métrica determinada un proceso existente. Dada la complejidad del retrofit se hace conveniente el empleo y/o desarrollo de sistemas de software para llevarlo a cabo. Estas herramientas se pueden beneficiar de una terminología común (i.e. una ontología) para integrar el conocimiento existente. En el presente artículo presentamos una introducción a las ontologías y su aplicación dentro de Ingeniería Química. En particular presentamos *OnReP (Ontology for the Retrofit of Processes)*, la cual forma parte de una metodología de retrofit. Esta ontología pretende facilitar el manejo de información en un contexto de diseño/retrofit.

*Palabras clave:* ontologías, sistemas basados en conocimiento, retrofit.

#### Abstract

Continuous changes in markets and in technical/economical requirements make necessary to adapt the industrial processes to the new regulations. The retrofit is a methodology of analysis and evaluation of possible changes in a process in order to improve it with respect to some metrics. Due to the complexity of the retrofit of processes, CAPE (Computer Aided Process Engineering) systems must be developed and used. These tools can be improved by employing a common terminology (i.e., ontology) to integrate the existing knowledge. In this paper we present an introduction to the ontologies and its application in Chemical Engineering. In particular we present *OnReP (Ontology for the Retrofit of Processes)*, which is part of a retrofit methodology. This ontology seeks to facilitate the handling of information in a design/retrofit context.

*Keywords:* ontologies, knowledge-base systems, retrofit.

#### 1. Introducción

Los continuos cambios y demandas de los mercados, así como los nuevos requerimientos de las leyes medioambientales hacen necesario que en los procesos industriales se realicen tareas de acondicionamiento con la finalidad de adecuarlos al menor costo posible. Un claro ejemplo de la repercusión de estos cambios es el proyecto de PEMEX-Refinación que trata de la reconfiguración de la refinería “Gral. Lázaro Cárdenas” ubicada en Minatitlán, Veracruz (CANACINTRA).

En este proyecto PEMEX-Refinación tiene como objetivos generales el incremento de la producción y la mejora de la calidad de los productos. Con estos objetivos se persigue elevar el procesamiento de crudo tipo *Maya* y satisfacer el crecimiento previsto de la demanda de productos. Para poder lograr estos objetivos se plantean dos acciones: (a) el incremento de la capacidad de procesamiento de las instalaciones actuales y (b) el aumento de la capacidad nominal de las nuevas instalaciones.

La primera de estas dos actividades se puede resolver mediante *retrofit*.

\*Autor para correspondencia: E-mail [arodri@etseq.urv.es](mailto:arodri@etseq.urv.es)  
Tel. (34) 977559618

El *retrofit* es una metodología de análisis y evaluación de posibles cambios a un proceso existente para mejorarlo en alguna métrica determinada (económica, medioambiental, de seguridad, etc.). En la década de los 80's el *retrofit* de procesos se centró en el ahorro de energía mediante la aplicación de la metodología *pinch* (Tjoe y Linnhoff, 1986; Linnhoff y col., 1988) y el uso de programación matemática (Kocis y Grossmann, 1988; Grossmann y Kravanja, 1995). Actualmente la aplicación del *retrofit* es de alcance más general, y por lo tanto más limitada por el manejo, análisis y evaluación de información.

Mediante el desarrollo de sistemas basados en conocimiento (SBC o Knowledge Based Systems, KBS) que apoyen a las tareas del *retrofit* es posible almacenar, representar, reproducir, centralizar y transferir el conocimiento de un proceso. Un SBC es un programa computacional que tiene conocimiento especializado sobre un área y resuelve una clase específica de problemas utilizando conocimiento (Han y col., 1996). Su estructura básica consiste de tres partes:

- *Base de conocimiento.* Contiene información específica y en profundidad del problema a manejar. El conocimiento puede consistir de hechos, reglas, heurísticas y/o modelos que faciliten la búsqueda de una solución mediante las relaciones causa-efecto en el proceso.
- *Motor de inferencia.* Contiene mecanismos de inferencia para procesar el conocimiento y obtener conclusiones a partir del estado actual del proceso.
- *Interfaz de usuario.* Proporciona comunicación entre el programa y el usuario.

Una de las características principales de los *SBCs* es la representación de conocimiento.

Una representación de conocimiento es un sistema de convenciones sobre cómo

describir dicho conocimiento. Winston sugiere que una buena representación debería (Winston, 1992):

- Describir de forma explícita los conceptos y sus relaciones;
- Exponer las restricciones;
- Integrar los conceptos y sus relaciones,
- Suprimir detalles irrelevantes; y
- Ser transparente, completa, concisa y computable.

En la última década se ha incrementado la importancia del desarrollo de ontologías en la representación de conocimiento. En el área de Inteligencia Artificial se realizaron las primeras contribuciones en el desarrollo de ontologías y en los últimos años se ha extendido al área de Ingeniería Química.

En este artículo presentamos el desarrollo inicial de una ontología que forma parte de un *SBC* para el *retrofit* de procesos químicos. Este *SBC* implementa una metodología de *retrofit* que consiste básicamente de cuatro etapas: (1) Análisis y abstracción del diagrama de flujo de proceso (*Process Flow Diagram, PFD*), (2) Diagnóstico del *PFD*, (3) Generación de alternativas y (4) Evaluación/selección de alternativas.

Esta metodología requiere el “entendimiento” de las relaciones, funciones, equipos y dispositivos que forman un *PFD*, de manera análoga al entendimiento que desarrolla un ingeniero cuando resuelve un problema de *retrofit*. Este “entendimiento” se puede lograr mediante el empleo de una ontología. Pretendemos que esta ontología comprenda la mayoría de los conceptos empleados en el *retrofit* de procesos de manera que su aplicación no se limite a nuestra metodología de *retrofit* y que pueda emplearse en el desarrollo de otras herramientas.

El concepto de ontología en Ingeniería Química es relativamente nuevo y puede causar confusión. Para evitar esto, en la siguiente sección presentamos una breve

introducción a ontologías y sus aplicaciones. Esto proporcionará al lector un panorama general para entender algunos conceptos empleados posteriormente. En la tercera sección describimos una metodología de apoyo al *retrofit* y presentamos una ontología que actualmente estamos desarrollando. Con esta ontología pretendemos establecer un punto inicial hacia la estandarización de conceptos empleados en el *retrofit* de procesos químicos. Finalmente en la última sección presentamos las conclusiones.

## 2. Ontologías

### 2.1. Definición y estructura

Una ontología puede verse como un “diccionario” acerca de un dominio. Una de sus características principales es que los conceptos que contiene son entendibles tanto por humanos como por computadoras mediante una semántica común. Una de las definiciones más aceptadas en Inteligencia Artificial es la de Gruber: “Una ontología es la especificación formal y explícita de una conceptualización compartida” (Gruber, 1993), en donde *conceptualización* se refiere a un modelo abstracto que identifica los conceptos relevantes de algún fenómeno. Fensel (Fensel, 2001) menciona que una ontología proporciona un entendimiento común y compartido acerca de un dominio y se emplea para la comunicación entre personas y sistemas de software.

El desarrollo de ontologías está muy difundido en varias comunidades de Inteligencia Artificial: Ingeniería de Conocimiento, Procesamiento de Lenguaje Natural, Sistemas de Información Cooperativos, Integración Inteligente de Información y Gestión de Conocimiento. En los últimos años se han realizado esfuerzos por establecer un puente entre las investigaciones teóricas realizadas en estas áreas y aplicaciones prácticas. Existen aplicaciones de ontologías en comercio

electrónico (Fensel, 2001; Bañares-Alcántara, 2003) y se consideran una de las bases para el desarrollo de la Red Semántica (*Semantic Web*) (Fensel, 2001). No menos importantes son las aplicaciones que se desarrollan en Medicina e Ingeniería. En esta última, la aplicación de ontologías se ha realizado mediante *SBCs* para la búsqueda y recuperación de información (McGuinness, 1998; Guarino *et al.*, 1999).

El empleo de ontologías permite (Noy y McGuinness, 2001):

- Compartir opiniones comunes sobre la estructura de información entre personas o programas de software.
- Reusar conocimiento de un dominio.
- Hacer explícitas las suposiciones de un dominio.
- Separar el conocimiento de dominio del conocimiento operativo.
- Analizar conocimiento de un dominio.

Estas características mejoran la comunicación entre personas y la interoperabilidad entre programas de software (Jasper y Uschold, 1999).

Independientemente de su codificación, una ontología clasifica toda la información de un dominio en conceptos y relaciones y sobre ellos establece axiomas. Esta información se puede clasificar como lo haríamos si utilizásemos una visión orientada a objetos. En este caso cada concepto pertenece a una clase (i.e., el tipo de concepto) y tiene atributos (i.e., sus características) que lo hacen diferente a los demás conceptos. Esta visión permite formar jerarquías de conceptos. Por ejemplo (sin entrar en todos los detalles), una clase *Dispositivo* puede tener los campos: nombre, tipo\_dispositivo, ubicación\_en\_planta, conexiones\_entrada y conexiones\_salida, de modo que puede representar a todos los dispositivos de una planta química. Por otro lado, a partir de la clase *Dispositivo* es posible definir la clase *Compresor* con los campos adicionales

cambio\_presión y potencia, para representar a los dispositivos que se utilizan para aumentar la presión; también a partir de la clase *Dispositivo* es posible definir la clase *Calentador* con los campos adicionales cambio\_temperatura y flujo\_calor que describa las características de un cambiador de calor. Posteriormente pueden definirse clases más específicas acerca de la clase *Compresor* y/o *Calentador* que describan determinados tipos de compresores. De esta manera se forma una jerarquía de conceptos mediante relaciones “padre-hijo” como se muestra en la Fig. 1.

De esta manera los conceptos en una ontología se organizan en taxonomías. En estas taxonomías se codifican las siguientes propiedades:

1. *Conceptos*, se definen de lo general a lo específico, e.g. “Dispositivo, Compresor y calentador”.
2. *Relaciones*, cómo un concepto se relaciona con otro, e.g. “dispositivo-A conectado\_a dispositivo-B”.
3. *Funciones*, cómo se puede calcular el valor de algún campo, e.g. “cambio\_temperatura = Flujo\_masa \* Cp / Flujo\_calor”.
4. *Axiomas*, algo que es siempre cierto en el dominio, e.g. “Columna\_Destilación tiene un rehervidor”.
5. *Instancias*, la concepción específica de los elementos físicos o abstractos, e.g. “Compresor (nombre:CPR-314, cambio\_presión: 22 kPa, potencia: 15 hp)”

La codificación de las ontologías puede realizarse mediante diversos lenguajes de representación. Algunos de ellos se basan en paradigmas clásicos de representación de conocimiento (*frames*, *description logic*, etc), por ejemplo: *Knowledge Interchange Format -KIF-* (Genesereth y Fikes, 1992), *Ontolingua* (Gruber, 1993), *CycL* (Lenat y Guha, 1990) y *FLogic* (Kifer y col., 1995). Otros se basan en estándares Web como por

ejemplo: *Resource Description Framework -RDF-* (Lassila y Swick, 1999), *OIL (OIL)*, *DAML+OIL (DAML+OIL)* y *OWL (OWL)*. Existen a su vez numerosas herramientas para editar, consultar y modificar ontologías, algunas son Protégé (Protégé), OntoEdit (Sure y col., 2002), Ontolingua Server (OntolinguaServer), WebODE (WebODE) y OilEd (OilEd).

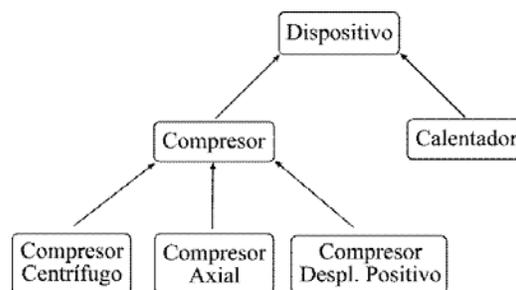


Fig. 1. Estructura jerárquica en una ontología.

## 2.2. Ontologías existentes y sus aplicaciones

Existen diversas ontologías, algunas de las más representativas son:

- TOVE (*Toronto Virtual Enterprise*) (EIL) es un conjunto de ontologías integradas y su dominio de aplicación es empresarial; incluye ontologías para el diseño de empresas, proyectos y servicios.
- SENSUS (Knight y col., 1995) es una ontología para el procesamiento de lenguaje natural. Fue desarrollada por el grupo de lenguaje natural ISI (*Information Sciences Institute*) para proveer una estructura de desarrollo para traductores.
- Ontolingua Server (OntolinguaServer) contiene información para el desarrollo de nuevas ontologías a través de su servidor. Uno de los principales beneficios de utilizar Ontolingua Server es el acceso que se tiene a las librerías de las ontologías previamente definidas.

- SUMO (Suggested Upper Merged Ontology) (Niles y Peace, 2001) es una ontología de alto nivel propuesta por Teknowledge Corporation (TeknowledgeCo) y ha sido propuesta como el punto de partida de *The Standard Upper Ontology Working Group* (SUO), un grupo avalado por la IEEE cuyos colaboradores pertenecen a distintos grupos de Ingeniería, Filosofía y Ciencias Computacionales. *SUMO* proporciona definiciones de terminología de propósito general y puede emplearse como una base para el desarrollo de ontologías de dominios específicos. Una ontología de alto nivel involucra meta-conceptos y conceptos abstractos, genéricos o filosóficos que pueden aplicarse en diferentes dominios, pero no incluye conceptos específicos de algún dominio en particular.

En el caso particular del dominio de Ingeniería Química algunos ejemplos del uso de ontologías son:

- CHEMICALS (Fernández y col., 1999) es una ontología que contiene conocimiento dentro del dominio de elementos químicos y estructuras cristalinas. Fue desarrollada en el Laboratorio de Inteligencia Artificial de la Universidad Politécnica de Madrid con ayuda de METHONTOLOGY.
- Batres y Naka (Batres y Naka, 1999) proponen una descripción de ontologías basadas en un formalismo multifuncional que representa de forma explícita aspectos físicos, de comportamiento y operacional de una planta. Este enfoque permite el intercambio de datos, conocimiento y modelos entre herramientas de diseño, simulación, síntesis y control de procesos.
- Kitamura y col., (2002) proponen una ontología basada en conceptos funcionales para resolver problemas de diseño. Su ontología provee un vocabulario sobre la representación de funciones y comportamiento.

- Ceccaroni y col., (Ceccaroni y col., 2002) desarrollan OntoWEDSS, una ontología que ayuda a un *SBC* para toma de decisiones durante el diagnóstico de fallas en plantas de tratamiento de aguas residuales.
- PHASuit (Zhao y col., 2003) es un sistema que maneja varias ontologías para el análisis de seguridad de procesos. Para el manejo de la información utiliza dos tipos de ontologías: a) de operación y b) seguridad. En la primera se utilizan conceptos de procedimientos, condiciones y parámetros de operación y en la segunda de análisis seguridad y presentación de resultados.
- OntoCAPE (Stalker y col., 2003) es una ontología que actualmente se desarrolla en el área del modelado, simulación y diseño de procesos. Su estructura se basa en la categoría de conceptos de un sistema basado en agentes, además del enfoque Función-Comportamiento-Estructura.

### 3. Metodología para el retrofit de procesos

En Rodríguez-Martínez y col (2003 a, b) hemos descrito una metodología para el retrofit de procesos químicos. Como parte de la implementación de esta metodología estamos desarrollando OnReP (*Ontology for Retrofit of Processes*). OnReP es una ontología que inicialmente se empleará en un *SBC* de apoyo al retrofit de procesos químicos. En esta sección se describe brevemente la metodología propuesta, el sistema que la implementa y la ubicación de OnReP.

La metodología de retrofit que se propone deriva directamente del concepto de Modelos Múltiples (Chittaro y col., 1993) e indirectamente de un enfoque conocido como Representación Funcional (Sembugamoorthy y Chandrasekaran, 1986). Ambos se usan en la representación de conocimiento de equipos y dispositivos (*Unidades*) de proceso. Los modelos utilizados son:

- 1) Estructural, i.e., el tipo y topología de las *Unidades*.
- 2) Comportamiento, i.e., cómo trabaja la *Unidad*, en términos de los valores de sus variables de estado.
- 3) Funcional, i.e., el rol que desempeña la *Unidad* dentro del proceso.
- 4) Teleológico, i.e., las metas y objetivos que cumple la *Unidad* dentro del proceso.

Mediante esta representación de conocimiento es posible representar el *PFD* en diversos niveles de abstracción, como se esquematiza en la Fig. 2. Las etapas de la metodología propuesta son, Fig. 3:

1. *Análisis y abstracción del diagrama de flujo*. La descripción inicial del proceso la obtiene el sistema a partir del *PFD*. Esta descripción se abstrae con base en las funciones de los equipos generando así una jerarquía funcional. Este procedimiento es similar a la aplicación en dirección inversa de la metodología de Douglas (Douglas, 1988) y también tiene coincidencias con el enfoque presentado por Turton *et al.* (Turton y col., 1998).
2. *Diagnóstico del diagrama de flujo*. Con base en los nuevos requerimientos y en los criterios del *retrofit* se identifican las partes susceptibles de mejora.
3. *Generación de alternativas*. Con base en la sección o secciones identificadas, los nuevos requerimientos y los criterios de *retrofit* se obtienen partes o secciones similares a la deseada. Estas partes provendrán de otros diagramas de flujo y deben cumplir en lo posible con los requerimientos funcionales y operativos de la parte original. La generación de una parte alternativa involucra su adaptación en el *PFD*.
4. *Evaluación/selección de alternativas*. El diagrama obtenido en el paso anterior debe evaluarse para verificar que cumpla en lo posible con los nuevos

requerimientos, si no es así, deberá obtenerse otro diagrama alternativo a partir del paso anterior. Aquí la experiencia del diseñador juega un papel muy importante.

Actualmente hemos implementado parte de esta metodología mediante dos prototipos de software:

- *HEAD (Hysys Extraction Data)*, se encarga de extraer información del simulador de procesos HYSYS™ y la envía a AHA!
- *AHA! (Automatic Hierarchical Abstraction tool)*, emplea la información obtenida por HEAD para generar una representación jerárquica de los equipos de proceso.

Actualmente estamos implementando *RETRO (Reverse Engineering Tool for Retrofit of Processes)* para la generación de alternativas del proceso.

### 3.1. AHA!. Una herramienta de abstracción automática.

La información que se extrae mediante HEAD del *PFD* comprende la estructura y comportamiento de las unidades del proceso. Con esta información AHA! identifica las funciones de las *Unidades* e infiere el modelo teleológico (metas y objetivos de la *Unidad*). En la identificación de funciones se pueden distinguir dos tipos:

- *Función general*, una función que agrupa a funciones específicas.
- *Función específica*, una función abstracta que representa fenómenos físico-químicos.

Actualmente hemos implementado parte de esta metodología mediante dos prototipos de software:

Una función general puede lograrse por varias funciones específicas. A su vez, una función específica puede descomponerse en otras menos abstractas. De esta manera se obtiene una jerarquía de funciones.

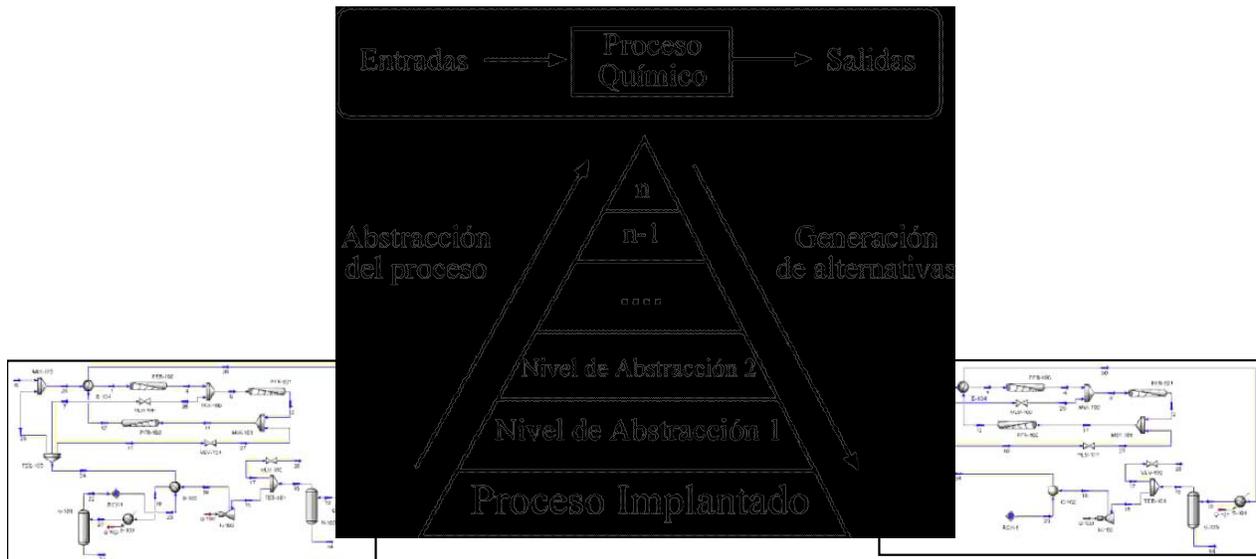


Fig. 2. Enfoque de abstracción de un proceso.

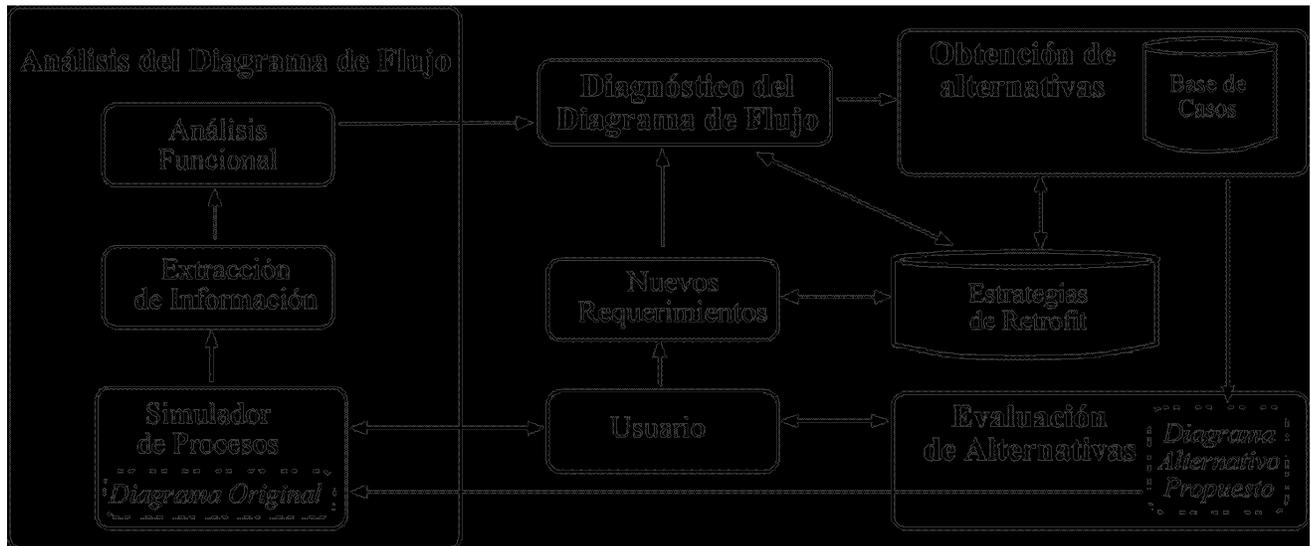


Fig. 3. Metodología de retrofit propuesta.

AHA! genera los diferentes niveles de abstracción de un proceso mediante un mecanismo de inferencia, el cual está implementado como un sistema basado en reglas. Durante el proceso de abstracción se agrupan dos o más *Unidades*, dando lugar a *Metaunidades*. Esta agrupación se basa en:

- La metodología de Douglas.
- La identificación de bloques genéricos del proceso.
- La jerarquía de funciones.

Mediante la generación de *Metaunidades* es posible identificar las secciones funcionales del proceso.

De esta manera un proceso químico se modela en diferentes niveles de abstracción, en donde cada nivel está compuesto por diversas secciones funcionales. Una sección funcional comprende a varios equipos o dispositivos que logran un determinado objetivo dentro del proceso químico real.

En la Fig. 4 se muestra la representación inicial del proceso de producción de amoníaco en AHA!. (este proceso ha sido tomado de la base de casos de HYSYS™). En la Fig. 5 se presenta el segundo nivel de abstracción de dicho proceso. En este nivel de abstracción, es posible identificar tres secciones de proceso: reacción, separación y cambio de temperatura. La identificación completa se realiza en los siguientes niveles de abstracción (no mostrados aquí).

### 3.2. *OnReP* en el contexto de retrofit

La implementación de la metodología de retrofit requiere el empleo de una terminología común (ontología) que proporcione una base para la integración entre las tareas involucradas en la metodología, los prototipos, el simulador y el

usuario (Chandrasekaran, 1990; Chittaro y col., 1993; Pos, 1997).

Mediante la representación de conocimiento en nuestra metodología de retrofit (modelos estructural, de comportamiento, funcional y teleológico) es posible representar jerárquicamente un proceso químico. Los niveles superiores de esta jerarquía son gradualmente más abstractos que los niveles inferiores.

Pretendemos que esta visión jerárquica sea similar al modelo mental que formula un ingeniero químico acerca del proceso. Empleando la representación jerárquica el diseñador puede emplear tanto información detallada como abstracta según la actividad de retrofit que esté realizando. Para ello es necesario conservar la semántica de los conceptos en los diferentes niveles de abstracción. Esta representación semántica puede lograrse mediante una ontología.

Los conceptos que pretendemos formalizar son conceptos que se emplean comúnmente en el área de retrofit. Actualmente hemos identificado 197 conceptos y continuamente identificamos más. A esta ontología le llamamos *OnReP* (*Ontology for Retrofit of Processes*). Ya que la metodología propuesta y el simulador empleado no son los únicos posibles, intentamos incluir en *OnReP* conceptos que sean independientes de las herramientas de software empleadas. Un ingeniero químico no se limita a pensar acerca de un proceso dependiendo del simulador o herramienta de diseño con que cuente. Así, *OnReP* se ubica dentro del contexto de diseño y retrofit de procesos como se muestra en la Fig. 6. Cabe destacar que *OnReP* no involucra conceptos ni relaciones de tiempo. Los procesos químicos considerados son procesos continuos en estado estacionario.

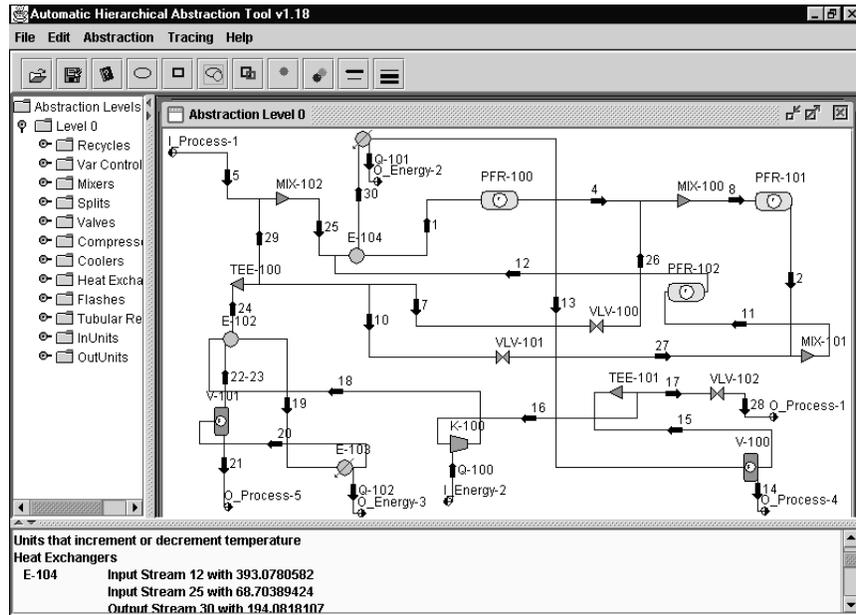


Fig. 4. Representación inicial del proceso de producción de amoniaco en AHA!

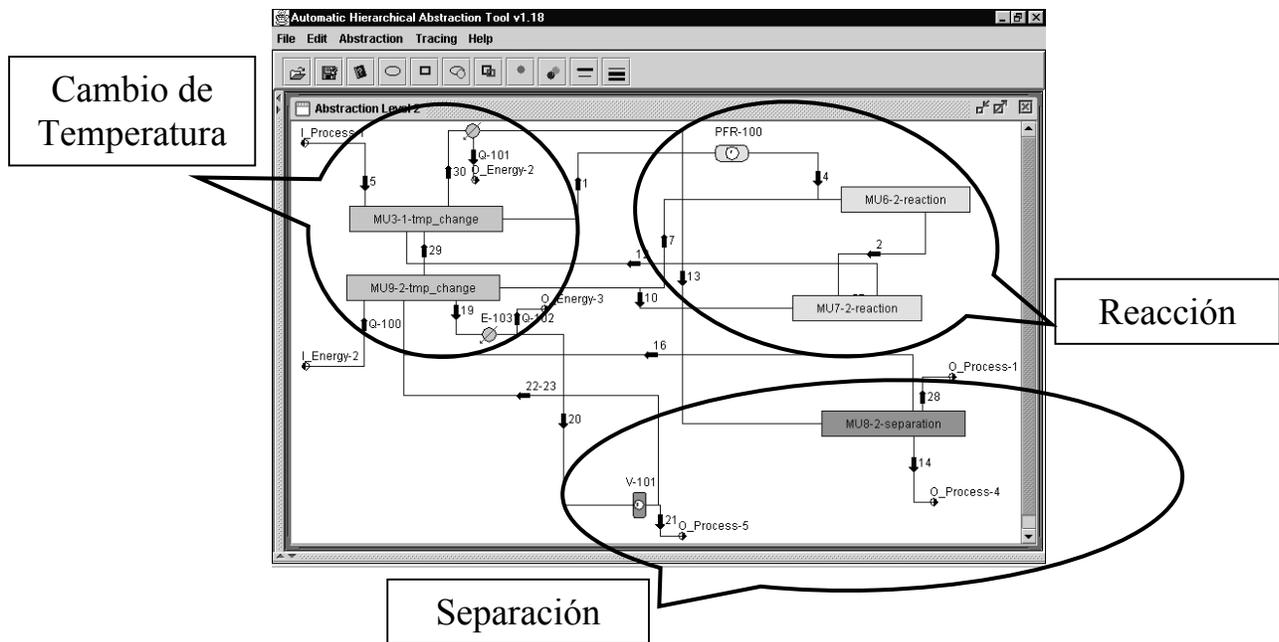


Fig. 5. Identificación de secciones de proceso.

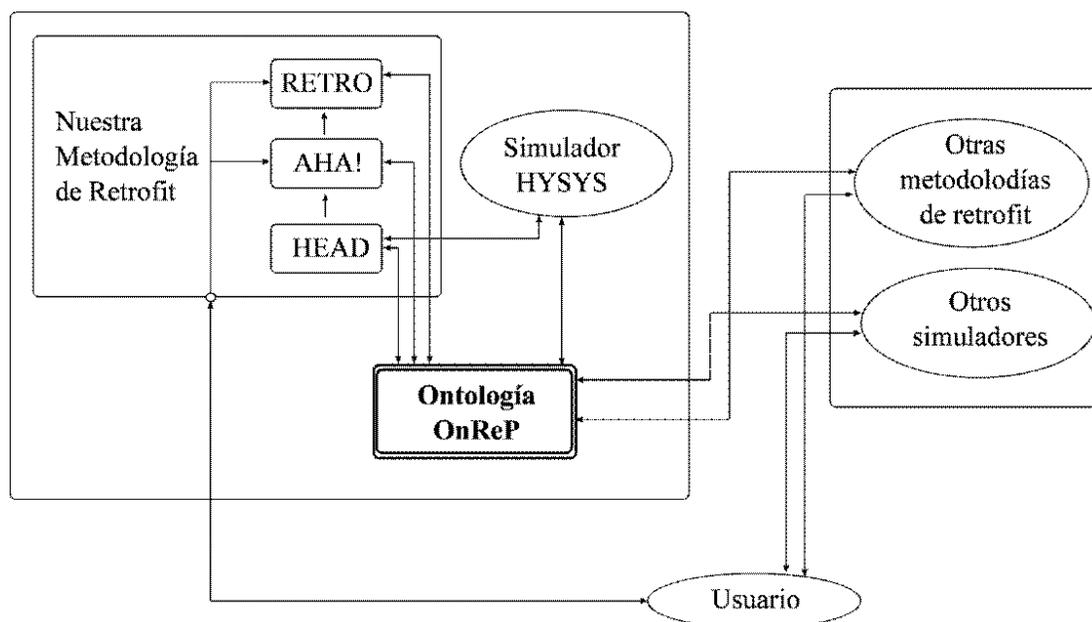


Fig. 6. OnReP en el contexto de diseño/retrofit.

Por el momento no es nuestra intención que el sistema de retrofit que estamos desarrollando intercambie información o se integre con otras herramientas de diseño/retrofit. Pretendemos que los conceptos definidos en nuestra ontología sean compatibles con los conceptos empleados en otras metodologías de retrofit y por lo tanto sirvan como pieza auxiliar en el desarrollo/interacción de herramientas de retrofit y/o simulación.

Uno de nuestros objetivos es que *OnReP* comprenda la mayoría de los conceptos empleados en diseño/retrofit de procesos, para lo cual pretendemos adicionar conceptos del estándar *CAPE-Open* (*Computer Aided Process Engineering*) (*CAPE-Open*). De esta manera su aplicación no se limitará a nuestra metodología de retrofit y podrá emplearse en el desarrollo de otras aplicaciones.

### 3.3. Desarrollo de *OnReP*

Para el desarrollo de *OnReP* hemos identificado la mayoría de los conceptos que lo conformarán. Estos conceptos provienen del simulador de procesos, de terminología en el área de diseño/retrofit de procesos y de razonamiento funcional. Aunque esta ontología se empleará en todas las etapas de la metodología, aún no ha sido definida completamente. Asimismo, no se ha definido con el afán de discutir su unicidad en este dominio, ya que por el momento se ha creado como pieza auxiliar en la metodología de retrofit y continuamente se le adicionan conceptos.

En una revisión de la literatura no hemos encontrado ninguna ontología que pueda emplearse para este enfoque de rediseño, por lo que se ha decidido desarrollar *OnReP* extendiendo y adicionando nuevos conceptos a *SUMO* (*Suggested Upper Merged Ontology*) (Niles y Pease, 2001).

*OnReP* ha extendido conceptos genéricos de *SUMO* tales como procesos, objetos y conceptos mereológicos (i.e. conceptos parte-subparte) y topológicos (i.e. conceptos de estructura). Sobre éstos se han definido conceptos más específicos, tales como procesos físico-químicos, procesos termodinámicos, sustancias (materia y energía), roles (de las especies químicas), dispositivos (equipos y conexiones), unidades de medida, tareas, operaciones y relaciones. De esta manera, se sigue una línea de estandarización de las ontologías. El concepto raíz es *entidad* (*Entity*), el cual comprende a las conceptos *físicos* (*Physical*) y *abstractos* (*Abstract*). Las instancias que pertenecen a la clase de conceptos *físicos* son aquellas que tienen lugar en el espacio y el tiempo. Las instancias que pertenecen a la clase de conceptos *abstractos* son aquellas que pueden existir en el mismo sentido que las entidades matemáticas, conjuntos y ecuaciones, pero que no pueden existir en un espacio y tiempo particular sin una relación física. A su vez, la clase de conceptos *físicos* se divide en los conceptos *objeto* (*Object*) y *proceso* (*Process*). Las instancias de *objeto* se definen como entidades que están presentes en cualquier momento de su existencia, como por ejemplo objetos físicos o regiones geográficas. Por otro lado, las instancias *proceso* son cosas que suceden y tienen partes o etapas temporales.

La mayoría de los conceptos que hemos definido en *OnReP* corresponden a conceptos *físicos*. En la Fig. 7 se presenta un ejemplo de cómo se han instanciado conceptos en esta ontología. Estas instancias corresponden a los conceptos Mixer y Mixing.

Por el momento *OnReP* es una ontología que no puede ni debe compararse aún con otra ontología similar (si es que existe) ya que se ha desarrollado únicamente para emplearla en la metodología de rediseño antes descrita. Uno de los objetivos de su

desarrollo a mediano plazo es hacerla de dominio público.

Con base en la revisión bibliográfica consideramos que las herramientas adecuadas para la formalización de esta ontología son:

- *Protégé* (Protégé), es un editor de ontologías que permite construir, modificar y consultar ontologías. Hemos considerado *Protégé* ya que permite construir una ontología y exportarla al lenguaje DAML-OIL.
- *DAML+OIL* (DAML+OIL), es un lenguaje para codificación de ontologías. Lo hemos considerado ya que adiciona conceptos básicos de modelado, una semántica formal y mecanismos de razonamiento.
- *JESS* (*Java Expert System Shell*) (*JESS*), es un conjunto de librerías que permite implementar sistemas basados en conocimiento que razonen mediante reglas. Lo hemos considerado para razonar con la ontología ya que es gratuito, relativamente fácil de usar y está implementado en Java (esto facilitará su integración con HEAD y AHA!).
- *DAMLJessKB* ( *DAMLJessKB*), es un conjunto de librerías que permite razonar e inferir mediante el lenguaje DAML+OIL. Lo hemos considerado ya que permite traducir la semántica de *DAML+OIL* en reglas que pueden emplearse en aplicaciones desarrolladas con *JESS*.

#### 4. Discusión

Actualmente en el área de retrofit de procesos existen grupos de investigación que abordan y resuelven problemas similares. La mayoría emplea términos e información propia que no está estandarizada. Esto lleva a la generación de soluciones redundantes pues no se aprovecha el reuso de conceptos e información que ha sido empleada previamente por otros grupos.

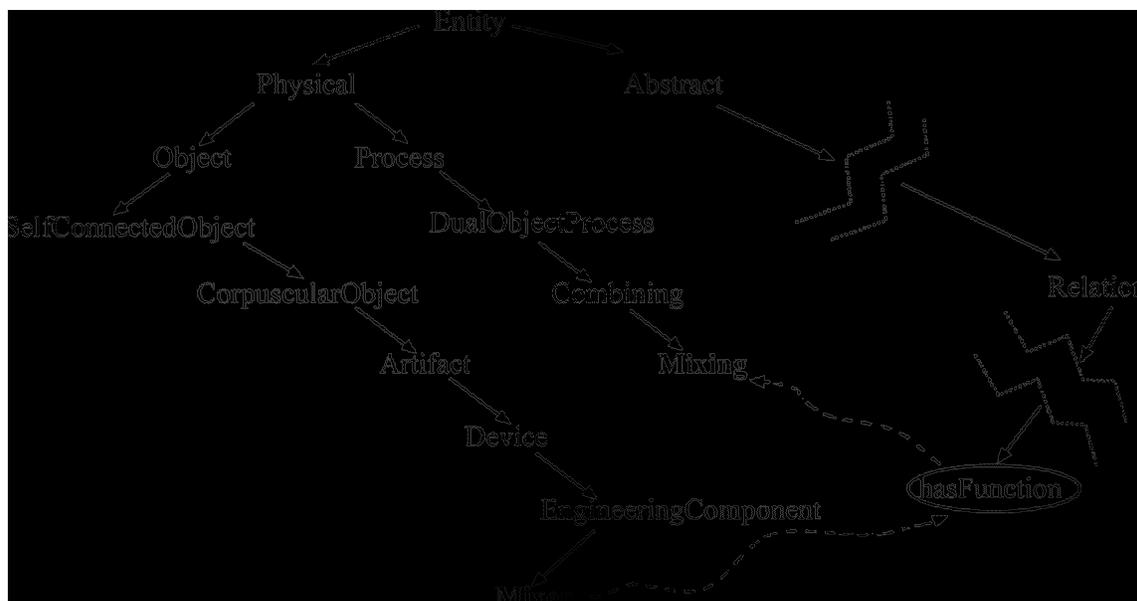


Fig. 7. Instanciación de conceptos en *OnReP*.

Con la formalización de *OnRep* se pretende dar la pauta para establecer un punto de partida para la estandarización y reutilización de una terminología común en el retrofit de procesos. Aunque esta ontología está enmarcada en un sistema basado en conocimiento, su aplicación no se limita a este sistema en particular, sino que podrá emplearse en otras herramientas y trabajos de investigación. El objetivo que se persigue con esta ontología es lograr la representación formal de conceptos comunes en el retrofit de procesos para su aplicación compartida.

Aunque en la literatura no hemos encontrado una ontología similar a *OnReP* en este dominio, no se pretende discutir aquí su unicidad, dado que *OnReP* aún está en desarrollo. Actualmente estamos explorando las herramientas adecuadas para su formalización.

### Conclusiones

El uso de una terminología común (*ontología*) en el *retrofit* de procesos es importante para evitar redundancias e interpretaciones erróneas entre diferentes

aplicaciones computacionales. El empleo de conceptos comunes para la manipulación y generación de conocimiento es ventajoso pues posibilita el uso de conocimiento que ha sido obtenido y/o empleado previamente.

Es deseable contar con sistemas basados en conocimiento para el retrofit de procesos ya que agilizan enormemente las tareas involucradas. Estos sistemas emplean conocimiento de expertos humanos en su funcionamiento, por lo que deben basarse en una terminología que sea común entre diferentes usuarios. Asimismo estos sistemas necesitan también esta terminología para interactuar con otros sistemas.

De esta manera es posible reutilizar y compartir conocimiento que ha sido empleado u obtenido previamente.

En este artículo hemos presentado una introducción general a las ontologías y se ha dejado entrever su aplicación en sistemas basados en conocimiento para el *retrofit* de procesos. En particular se presenta la etapa inicial del desarrollo de una ontología para el *retrofit* de procesos químicos.

## Agradecimientos

Agradecemos a *Hyprotech* (ahora parte de *Aspentech*) por la licencia académica para el uso de HYSYS™. También agradecemos al Departamento de Ingeniería Informática y Matemáticas de la Universidad Rovira i Virgili (España) por la beca doctoral de I. López-Arévalo y a la Universidad Autónoma del Estado de Morelos (México) por la beca doctoral de A. Rodríguez-Martínez.

## Referencias

- Bañares-Alcántara, R. A (2002). Perspective of intelligent systems in process engineering. Paper invited by the Editorial Advisory Board of the *Computers & Chemical Engineering Journal* for its 25th Anniversary Issue, accepted in September 2002. (in press).
- Batres, R. y Naka, Y. (1999). Process plant ontologies based on a multi-dimensional framework. *Proceedings of Foundations of CAPD conference*, Breckenridge, Colorado, EUA.
- CANACINTRA. *Reconfiguración de la refinería "Gral. Lázaro Cárdenas"*, [http://www.canacindra.org.mx/canacindra/pemex/reconfiguracion\\_minatitlan.pdf](http://www.canacindra.org.mx/canacindra/pemex/reconfiguracion_minatitlan.pdf).
- CAPE-Open. Laboratories Network CO-LaN, [http://zann.informatik.rwth-aachen.de:8080/opencms/opencms/COLA\\_Ngamma/StandardSpec/index.html](http://zann.informatik.rwth-aachen.de:8080/opencms/opencms/COLA_Ngamma/StandardSpec/index.html)
- Ceccaroni, L., Cortés U. y Sanchez-Marre M. (2002). OntoWEDSS: an ontology-underpinned decision-support system for wastewater management. *Proceedings of Integrated Assessment and Decision Support* Pp. 432-437.
- Chandrasekaran, B. (1990). Design problem solving: a task analysis. *AI Magazine*, 11, (4), 59-71.
- Chittaro, L., Guida, G., Tasso, C. y Toppano, E. (1993). Functional and teleological knowledge in the multimodeling approach for reasoning about physical systems: A case study in diagnosis. *IEEE Transactions on Systems Management and Cybernetics*, 23, 1718-1751.
- CYCORP. Cycorp Inc., <http://www.cyc.com/>
- DAML. The DARPA Agent Markup Language, <http://www.daml.org/>
- DAML+OIL. DAML+OIL: Reference Description, <http://www.w3.org/TR/daml+oil-reference>
- DAMLJessKB. <http://edge.mcs.drexel.edu/assemblies/software/damljesskb/>
- Douglas, J. (1988). *Conceptual Design of Chemical Process*. Mc Graw Hill, Nueva York, EUA.
- EIL. Enterprise Integration Laboratory, <http://www.eil.utoronto.ca/>
- Fensel, D. (2001). *Ontologies: A silver bullet for Knowledge Management and Electronic Commerce*. Springer-Verlag, Berlín, Alemania.
- Fernández-López, M., Gómez-Pérez A. y Juristo N. (1997). Methontology: from ontological art towards ontological engineering. *Proceedings of AAAI Spring Symposium Series*. Stanford, CA. EUA, Pp 33-40.
- Fernández-López, M., Gómez-Pérez A. y Pazos Sierra J. (1999). Building a chemical ontology using methontology and the ontology design environment. *IEEE Intelligent Systems*, Enero/Febrero, 37-46.
- Genesereth, M. y Fikes, R. (1992). Knowledge Interchange Format v3.0, Reference manual, *Technical Report Logic-92-1*. Computer Science Department. Stanford University.
- Grossmann, I. E. y Kravanja Z. (1995). Mixed-integer nonlinear programming techniques for process systems engineering. *Computational Chemical Engineering 19*, Supplement. S189-S204.
- Gruber, T.R. (1993). A translation approach to portable ontology specifications. *Knowledge Acquisition*, 5, (2), 199-220.
- Guarino, N., Masolo, C. y Vetere, G. (1999). OntoSeek: Using large linguistic ontologies for accessing on-line yellow pages and product catalogs. *IEEE Intelligent Systems*, 14, (3), 70-80.
- Han, C., Stephanopoulos G., y Liu Y. A. (1996). Knowledge-based approaches in process synthesis. *AIChE Symposium Series*. 92, (312), 148-159.

- Jasper, R. y Uschold, M. (1999). A framework for understanding and classifying ontology applications. *Proceedings 12th Workshop on Knowledge Acquisition, Modeling and Management*, Alberta, Canada.
- JESS. Java Expert System Shell <http://herzberg.ca.sandia.gov/jess/>
- Kifer, M., Lausen, G. y Wu, J. (1995). Logical foundations of object-oriented and frame-based languages, *Journal of the Association for Computing Machinery*. 42, 741-843.
- Kitamura, Y., Sano T., Namba K. y Mizoguchi R. (2002). A functional concept ontology and its application to automatic identification of functional structures. *Advanced Engineering Informatics* 16, 145-163.
- Knight, K., Chancer, I., Haines, M., Hatzivassiloglou, V., Hovy, E.H., Iida, M., Luk, S.K., Whitney, R.A. y Yamada, K. (1995). Filling knowledge gaps in a broad-coverage MT system. *Proceedings of the 14<sup>th</sup> IJCAI*, 1390-1397.
- Kocis, G. R. y Grossmann I. E. (1998). Global optimum of nonconvex mixed integer non-linear programming (MINLP) problems in process synthesis. *Industrial Engineering Chemical Research* 27, 1407-1421.
- Lassila, O. y Swick, R. (1999). Resource description framework (RDF), *W3C Proposed Recommendation*, <http://www.w3.org/TR/PR-rdf-syntax/>
- Lenat, D. y Guha, R. (1990). *Building Large Knowledge-based Systems, Representation and Inference in the Cyc Project*. Addison-Wesley. EUA.
- Linnhoff, B., Polley G. T. y Sahdev V. (1998). General process improvements through pinch technology. *Chemical Engineering Progress* 84, 51-58.
- McGuinness, D. (1998). Ontological issues for knowledge-enhanced search. En: *Proceedings of Formal Ontology in Information Systems*. Trento, Italia. Pp. 302-316.
- Niles, I. y Pease, A. (2001). Towards a standard upper ontology. *Proceedings 2nd International Conference on Formal Ontology in Information Systems*. Maine, EUA. Pp 2-9.
- Noy, N. F. y McGuinness, D. L. (2001). Ontology development 101: A guide to creating your first ontology. Stanford Knowledge Systems Laboratory *Technical Report KSL-01-05* and Stanford Medical Informatics *Technical Report SMI-2001-0880*.
- OIL. Ontology Inference Layer (OIL). <http://www.ontoknowledge.org/oil/>
- OilEd. University of Manchester, <http://oiled.man.ac.uk/index.shtml>
- OntolinguaServer. Knowledge Systems Laboratory, Stanford University, <http://www.ksl.stanford.edu/software/ontolingua/>
- OWL. Web Ontology Language (OWL). <http://www.w3.org/TR/2003/WD-owl-ref-20030221/>
- Pos, A. (1997). Problem solving for redesign, *Proceedings 10th European Knowledge Workshop on Knowledge Acquisition, Modeling, and Management* 205-220. Sant Feliu de Guíxols, España.
- Protégé. The Protégé Project, <http://protege.stanford.edu/>
- Rodríguez-Martínez, A., López-Arévalo, I., Bañares-Alcántara, R. y Aldea, A. (2003a) A multi-modelling approach for the retrofit of processes. *Proceedings of ESCAPE-13*. Ed. Elsevier. Pp 269-274.
- Rodríguez-Martínez, A., López-Arévalo, I., Bañares-Alcántara, R. y Aldea, A; (2003b), Automatic hierarchical abstraction tool for the retrofit of processes, *4th European Congress in Chemical Engineerin*. Granada, España. 21-25.
- Sembugamoorthy, V. y Chandrasekaran, B. (1986). Functional representation of devices and compilation of diagnostic problem-solving systems. En: *Experience, Memory and Reasoning*. Lawrence Erlbaum, Hillsdale, N. J. EUA. Pp. 47-73.
- SUO. The standard upper ontology working group, <http://suo.ieee.org/>
- SUO-KIF. SUO Knowledge interchange format, <http://suo.ieee.org/suo-kif.html>
- Sure, Y., Staab, S. y Angele, J. (2002). OntoEdit: Guiding ontology development by methodology and inferencing. *Proceedings of the Confederated International Conferences CoopIS, DOA and ODBASE 2002*, Irvine, EUA. Pp. 1205-1222.

- TeknowledgeCo. Teknowledge Corporation.  
<http://www.teknowledge.com/>
- Turton, R., Bailie, R. Whiting, W. y Shaeiwitz, J. (1998). *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Process*. Prentice Hall, New Jersey. EUA.
- Tjoe, T. N. y Linnhoff, B. (1986). Using pinch technology for process retrofit. *Chemical Engineering* 93, 47-60.
- WebODE. Ontology engineering platform,  
<http://delicias.dia.fi.upm.es/webODE/>
- Winston, P. H. (1992). *Artificial Intelligence*. Addison-Wesley, Reading, MA. EUA.
- Zhao, C., Bhushan M., y Venkatasubramanian V. (2003). Roles of ontology in automated process safety analysis. *Proceedings of ESCAPE-13*, (A. Kraslawski and I. Turunen, edis.), Elsevier, Pp. 341-346.