

USO DE EXCEL:

PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN CON EL SOLVER DE EXCEL

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

OPTIMIZACIÓN:

Introducción:

De manera general un problema de optimización se puede formular:

$$\begin{aligned} \min_{\vec{x}} / \max_{\vec{x}} \quad & f(\vec{x}) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(\vec{x}) > 0 \\ & h_i(\vec{x}) = 0 \end{aligned}$$

donde:

- \vec{x} son las variables de decisión
- $g_i(\vec{x}), h_i(\vec{x})$ son las restricciones.
- f es la función objetivo.

Problema:

Se desea seleccionar la temperatura de entrada a un reactor de mezcla completa adiabático donde tiene lugar la reacción reversible $A \rightleftharpoons B$ para minimizar la relación V/F_{A0} y conseguir una determinada conversión X_A . Suponiendo que las reacciones son elementales el problema de optimización se puede enunciar como:

$$\begin{aligned} \min_{T_o} \quad & \frac{X_A}{(-R_A)} \\ \text{s.t.} \quad & (-R_A) = k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_B \\ & C_A = C_{A0}(1 - X_A) \\ & C_B = C_{B0} + C_{A0}X_A \\ & k_1 = \exp(k_{o1} - E_1/T) \\ & k_2 = \exp(k_{o2} - E_2/T) \\ & T = T_0 + \frac{-\Delta H_R}{C_p} X_A \end{aligned}$$

Donde se conocen los parámetros $C_{A0}, C_{B0}, k_{o1}, k_{o2}, E_1, E_2, C_p$ y ΔH_R .

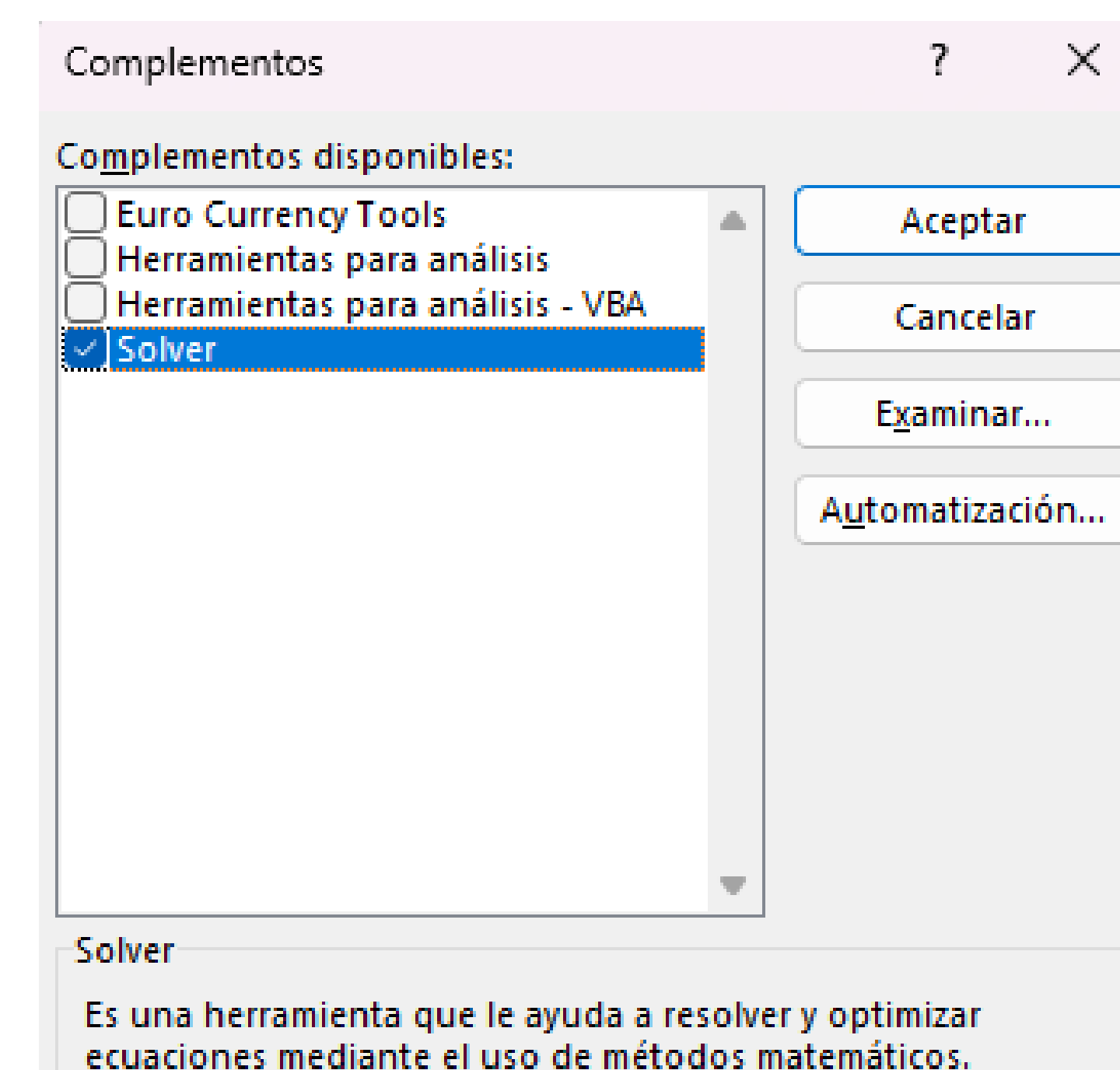
Solución:

La solución del problema es la temperatura de entrada (T_o), que es la variable de decisión y minimiza el valor de V/F_{A0} .

SOLUCIÓN CON EXCEL:

Activación Solver:

Los problemas de optimización no lineal se pueden resolver con la herramienta Solver de Excel. Esta herramienta se activa en la ruta: Archivo > Opciones > Complementos > Complementos de Excel:



Uso Solver:

El uso del SOLVER se compone de tres elementos que corresponden con el planteamiento general de los problemas de optimización:

1. **Función objetivo:** es una celda que contiene una fórmula donde se calcula el valor de la función objetivo.
2. **Variable de decisión:** celda en Excel con un valor en la que después de la optimización será la solución.
3. **Restricciones:** Celdas que contienen fórmulas sujetas a las restricciones del problema, (ej: temperatura, o velocidad de reacción >0).

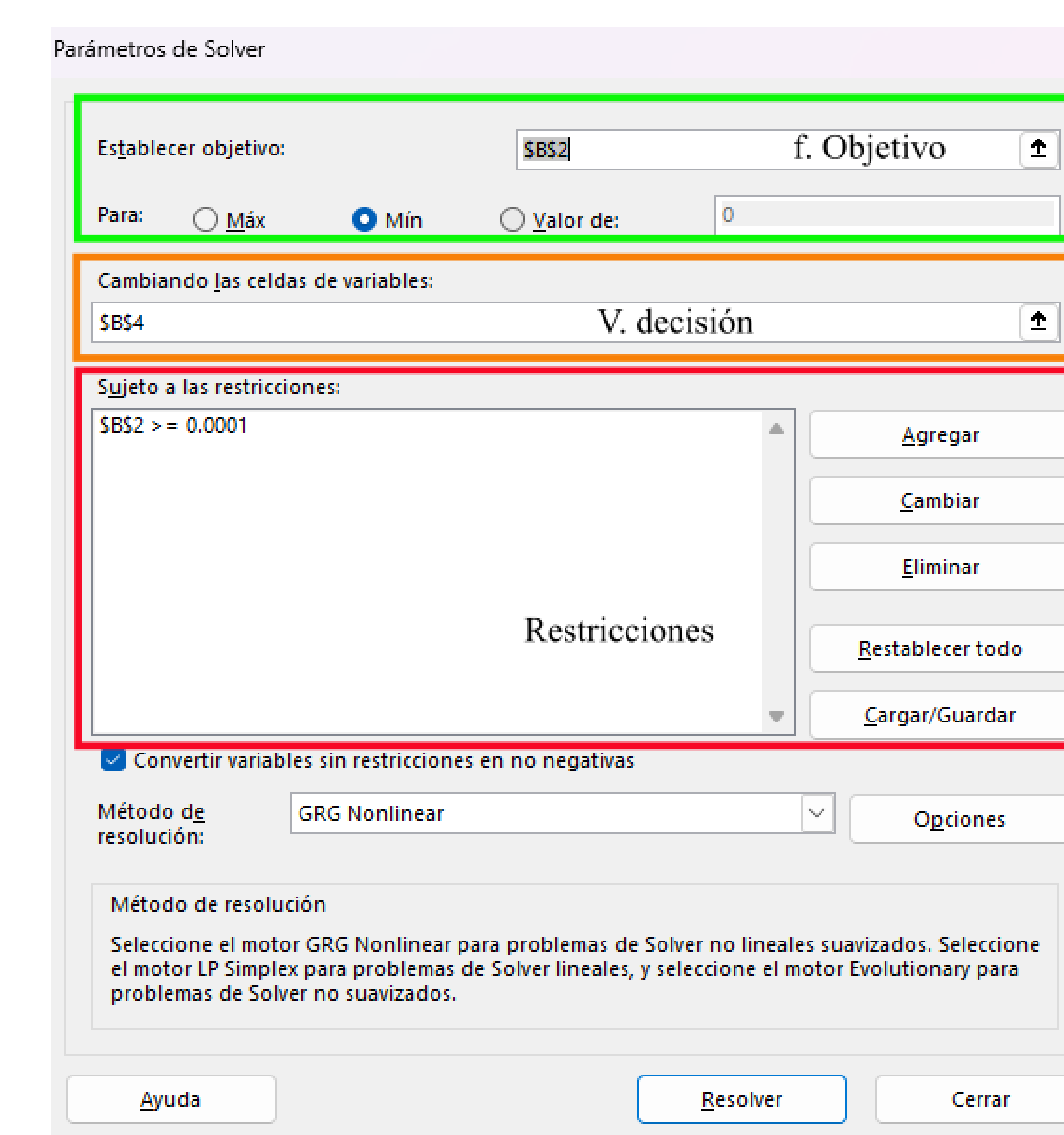
Para iniciar todas las iteraciones es necesario que las variables de decisión tengan unos valores que se conoce como valores iniciales.

CONFIGURACIÓN:

Para resolver el problema de optimización es necesario introducir en un hoja de excel la fórmula de la función a optimizar, el valor de las variables de decisión, el valor de los parámetros y las ecuaciones que definen el problema:

	A	B
1	Función Objetivo	
2	V/Fa0	0.85
3	Variables de decisión	
4	T0	291.16
5	Parámetros	
6	X_A	0.7
7	k1	17.34
8	k2	42.04
9	E1	48900
10	E2	124100
11	DHR	75300
12	Cp	250
13	C_A0	4
14	Ecuaciones	
15	T	341.6
16	k1	1.130
17	k2	0.19
18	C_A	1.2
19	C_B	2.8
20	(-RA)	0.82

Después se ejecuta la herramienta SOLVER en la pestaña Datos, y se configura seleccionando la celda que contiene el valor objetivo, las variables de decisión y los valores de las restricciones, en este ejemplo se requiere que V/F_{A0} sea mayor de 0.



USO DE OTRAS FUNCIONES:

Reactor de flujo Pistón:

En el caso de que el reactor sea un reactor de flujo pistón adiabático la función objetivo es:

$$\min_{T_o} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-R_A)}$$

Integración numérica en excel:

La integración numérica en Excel se puede realizar con la regla de los trapecios:

$$\int_0^x f(x) = \frac{h}{2} \left[f(x_1) + 2 \sum f(x_{n+1} + x_{n-1}) + f(x_n) \right]$$

donde:

- h Es el intervalo elegido para la variable independiente.
- $f(x)$ es la función evaluada en cada punto.

En el caso de que sea necesario integrar numéricamente la celda de la función objetivo es el valor de la integral.

	A	B	C	D
1	h	0.01		
2				
3	V/Q	=(C5+SUMA(C6:C74))*2+C75)*B1/2		
4	Xa	(-RA)	1/(-RA)	
5	0	0.5	2.06	
6	0.01	0.5	1.99	
7	0.02	0.5	1.92	
8	0.03	0.5	1.85	
9	0.04	0.6	1.79	
10	0.05	0.6	1.73	
11	0.06	0.6	1.67	
12	0.07	0.6	1.61	
13	0.08	0.6	1.56	
14	0.09	0.7	1.51	
15	0.1	0.7	1.46	
16	0.11	0.7	1.41	
17	0.12	0.7	1.37	
18	0.13	0.8	1.33	
19	0.14	0.8	1.28	
20	0.15	0.8	1.24	
21	0.16	0.8	1.21	