UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA
LA VERDAD NOS HARÁ LIBRES
CIUDAD DE MÉXICO

Optimización

Ing. Martín Rivera Toledo

Problema

Se lleva a cabo una reacción en serie en fase líquida

k1 k2

A* ® *B* ® *C

en un reactor por lotes de 500 dm^3. La concentración inicial de A es de 1.6 mol/dm^3. El producto deseado es B y la separación del producto no deseado C es muy difícil y costosa. Dado que la reacción se efectúa a una temperatura relativamente alta, la reacción se puede extinguir fácilmente.

Información adicional:

Costo del reactivo A puro: $10 / mol A
Precio de venta de B puro: $50 / mol B
Costo de separar A de B: $50 / mol de A
Costo de separar C de B: $30 [exp(0.5Cc)-1]
k1=0.4 h-1
k2 =0.01h-1 a 100°C

Suponiendo que todas las reacciones son irreversibles, escriba y resuelva el modelo para el tiempo de reacción que maximice la ganancia

Modelo

Se desea maximizar la ganancia

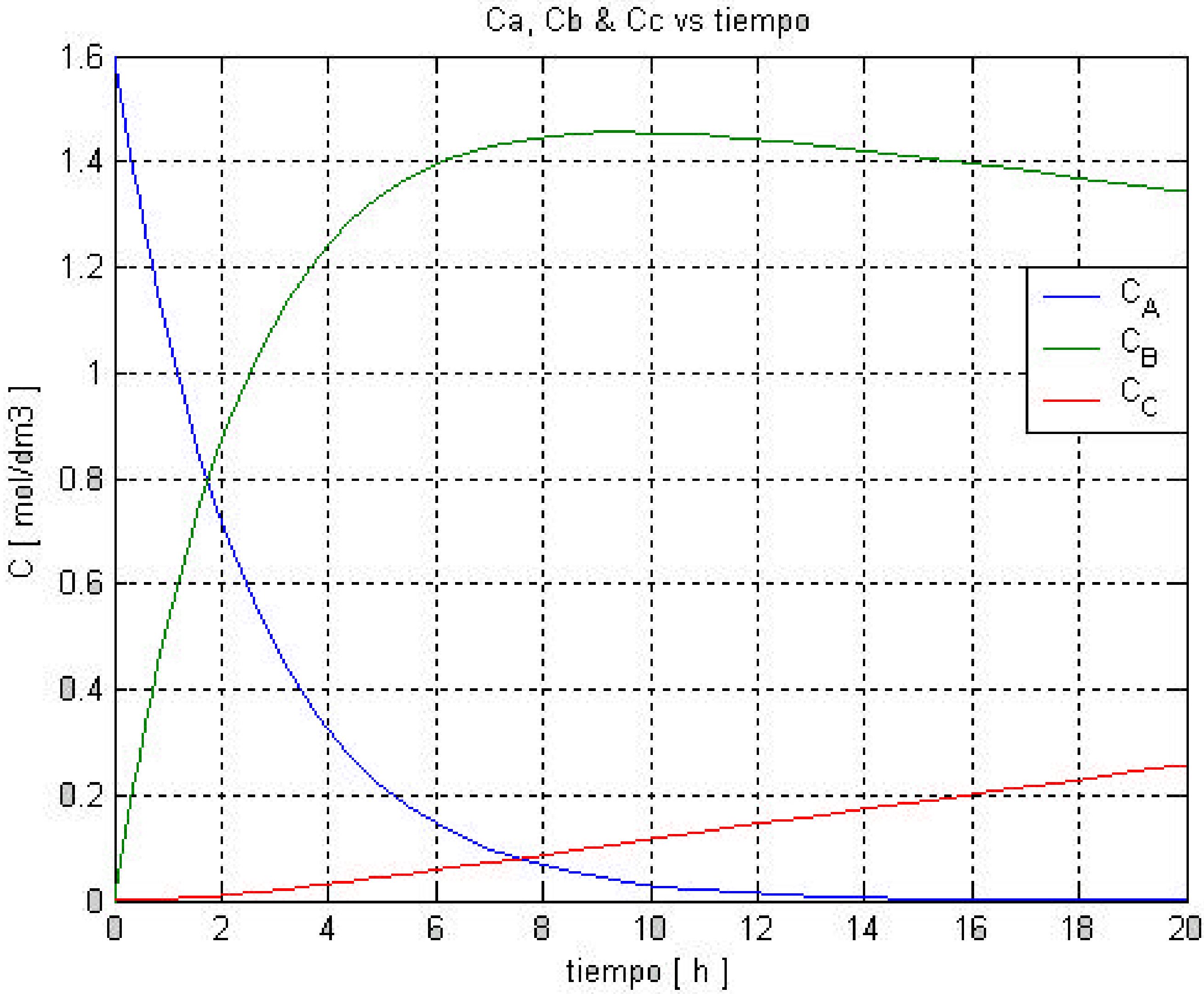
$$G = \text{Ingreso} - \text{Costos}$$

en donde $\text{Ingreso} = 50\ C_b\ V$

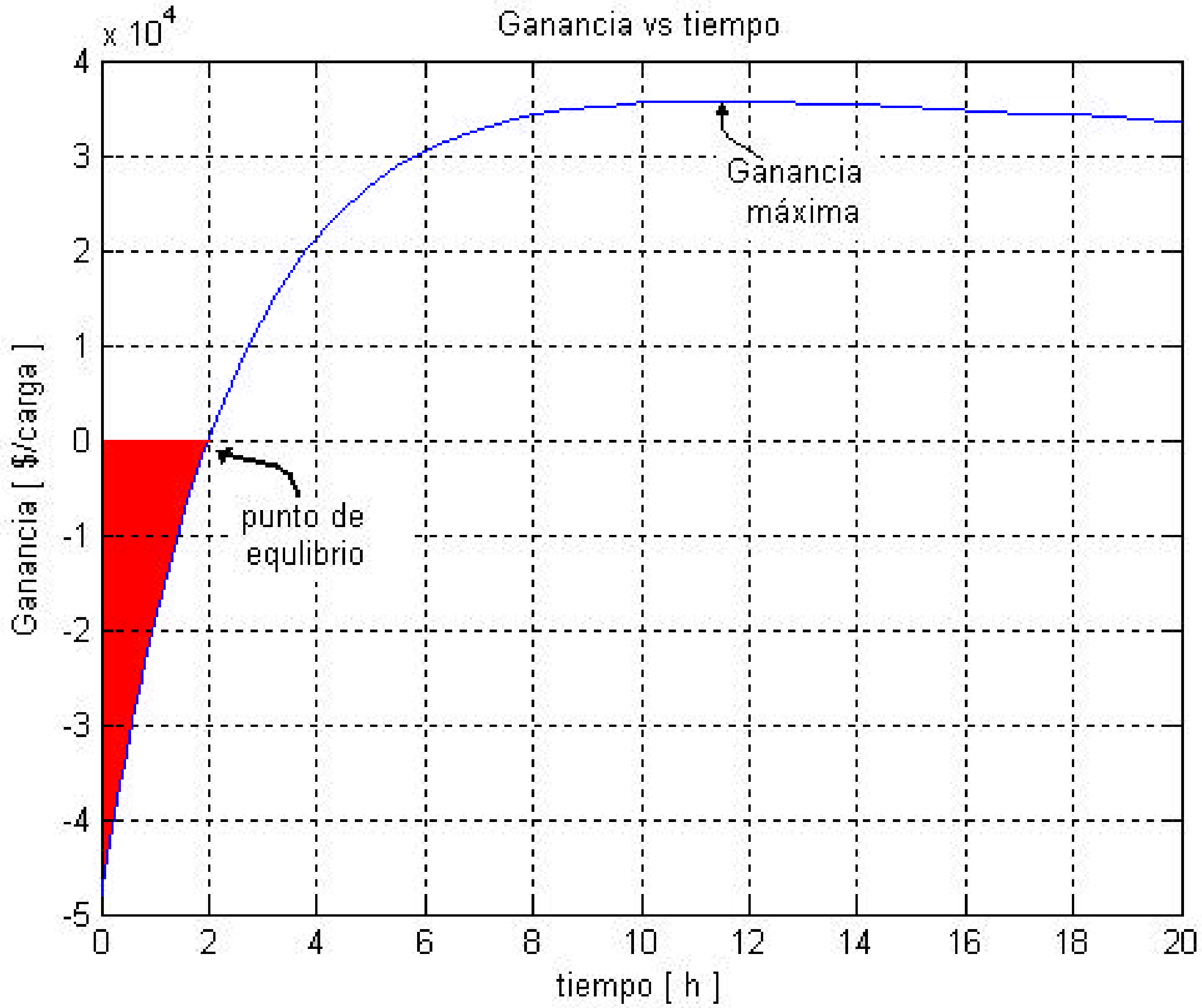
$$\text{Costos} = 50\ C_{a0}\ V + 30\ (e^{0.5\ C_c} - 1)$$

ITERATION	FUNC-COUNT	F(X)	STEP-SIZE	DIRECTIONAL DERIVATIVE
1	1	-25557.8	0.483174	-1.06e+005
2	6	-25557.8	4.83174e-009	-1.06e+005
3	8	-25557.8	2.41587e-009	-1.06e+005
4	13	-25557.8	1.50072e-005	-229
5	18	-25598.6	0.0133002	-3.06e+003
6	23	-25598.6	2e-008	-9.51e+004
7	28	-26998.8	0.857323	-1.48e+003
8	33	-26998.8	2e-008	-8.66e+003
9	35	-26998.8	7.89505e-006	-8.66e+003
10	40	-27551.7	0.180211	-2.41e+003
11	45	-27762.1	0.404113	-17.6
12	50	-27762.2	0.687588	-1.37e-005

tiempo optimo: 11.1953 horas
ganancia: 27762.15 \$/carga
primera derivada: 0.000364 \$/(carga-h)
segunda derivada: 143.136857\$/(carga-h^2)



Ca, Cb & Cc vs tiempo
1.6
1.4
1.2
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
C [mol/dm3]
0
2
4
6
8
10
12
14
16
18
20
tiempo [h]
C_A
C_B
C_C


Ganancia vs tiempo
x 10^4
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
Ganancia [$/carga]
0
2
4
6
8
10
12
14
16
18
20
tiempo [h]
Ganancia
máxima
punto de
equlibrio

```
% inicio del archivo maxfit.m
% problema de optimizacion para maximizar la ganancia
% en el proceso de produccion para el quimico B
% en la reaccion consecutiva  A -> B -> C
clc; clear all; format compact;
t0=20;% h
options=optimset('LargeScale','off','Display','iter');
[t,Gmax,flag,output,dGdt,d2dt2]=fminunc('ganancia',t0,options);
fprintf('Resultados \n')
fprintf('tiempo optimo: %10.4f horas \n',t)
fprintf('ganancia: %f $/carga \n',-Gmax)
fprintf('primera derivada: %f $/(carga-h) \n',dGdt)
fprintf('segunda derivada: %f $/(carga -h^2) \n',d2dt2)
if flag==1
   fprintf('** si convergio a la solucion ** \n')
else
   fprintf('** No convergio a la solucion modifique el problema** \n')
end
% fin del archivo maxfit.m

% inicio del archivo ganancia.m
function G=ganancia(tf)
V=500;%dm3
tr=[0, tf];
Ca0=1.6; Cb0=0; Cc0=0; % mol/dm3

C0=[Ca0 Cb0 Cc0];
[t,C]=ode15s('batchabc',tr,C0);
Ca=C(end,1); Cb=C(end,2); Cc=C(end,3);
Ingreso = 50*Cb*V;
Costo_total = 10*Ca0*V+50*Ca*V+30*(exp(0.5*Cc)-1);
G =-( Ingreso-Costo_total);
% fin del archivo ganancia.m

% inicio del archivo batchabc.m
function dCdt = batchabc(t,C)
Ca =C(1); Cb =C(2); Cc =C(3);
% parametros
k1=0.4; k2=0.01; % h^-1
ra=-k1*Ca;
rb=k1*Ca-k2*Cb;
rc=k2*Cb;
%
dCadt=ra;
dCbdt=rb;
dCcdt=rc;
%
dCdt=[dCadt dCbdt dCcdt]';
% fin del archivo batchabc.m
```

También pudo haberse resuelto utilizando las expresiones para las concentraciones del modelo diferencial y en combinación con la función objetivo se tenia que resolver el problema siguiente

$$\max G = 50C_B V - \left[10\mathrm{C}_{\mathrm{A0}}\mathrm{V} + 50\mathrm{C}_{\mathrm{A}}\mathrm{V} + 30(\mathrm{e}^{0.5\mathrm{C}_{\mathrm{C}}} - 1)\right]$$

sujeta a las restricciones

$$C_A = C_{A0} e^{-k_1 t}$$

$$C_B = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1}\left[e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}\right]$$

$$C_C = C_{A0}\left[1 - \frac{k_2 e^{-k_1 t} - k_1 e^{-k_2 t}}{k_2 - k_1}\right]$$