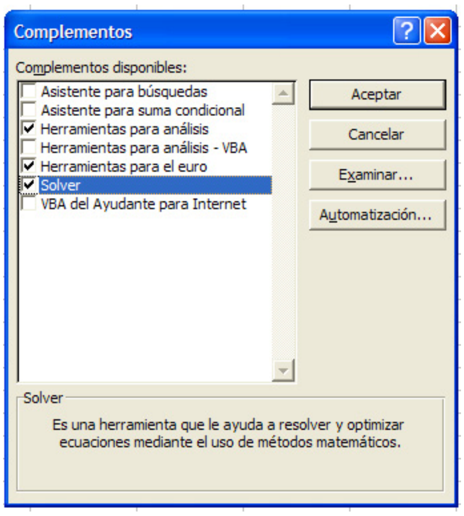
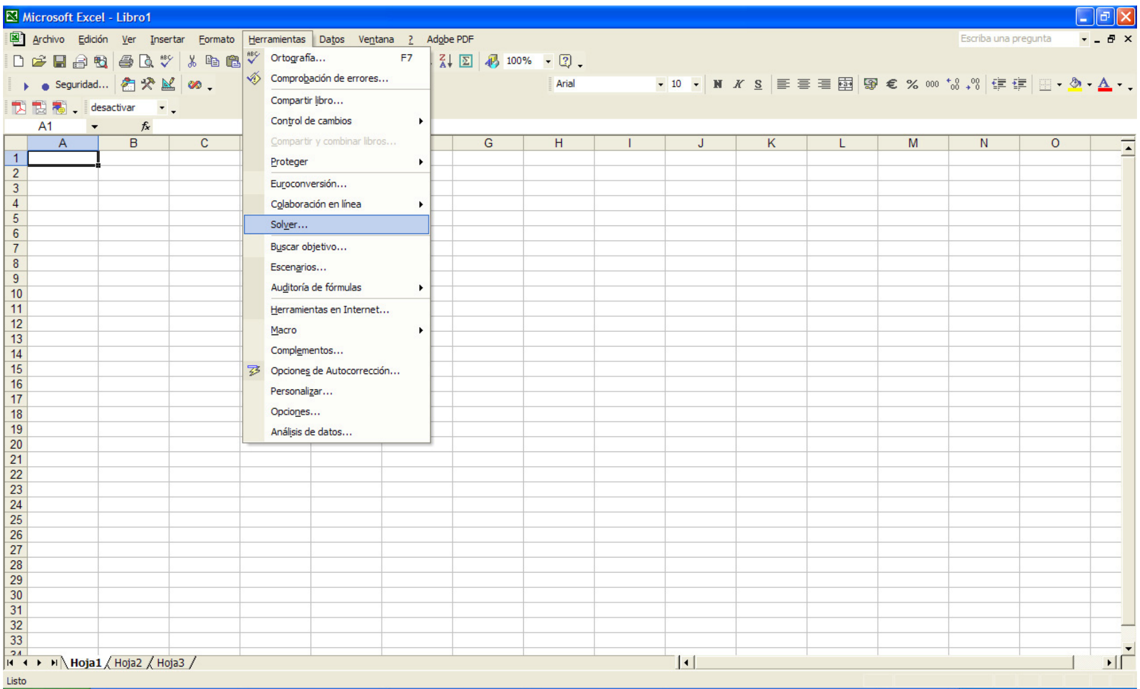
SOLVER PARA WINDOWS

El comando **SOLVER** del EXCEL es una poderosa herramienta de optimización, permitiendo obtener el valor óptimo para una celda, denominada *celda objetivo*, que podrá ser un máximo, un mínimo o un valor determinado. Una de las aplicaciones de este comando consiste en el ajuste de datos experimentales a modelos matemáticos cuyos parámetros están totalmente controlados por el usuario.

Si es la primera vez que utilizamos SOLVER, este no aparece en el menú por defecto, y tenemos que activarlo[1]: Herramientas > Complementos > SOLVER





[1] Es necesario instalarlo previamente desde el paquete de Microsoft Office.

Así ya aparece la aplicación en Herramientas > SOLVER.

En ocasiones conviene analizar cómo se ajustan los datos experimentales a un modelo matemático. Por ejemplo, en el laboratorio medimos *n* veces una variable $y^{\exp}$ en función de otra variable x, y queremos comprobar la validez de un modelo matemático que nos da una variable y^{calc} frente a la misma variable x. En nuestro caso particular, queremos determinar si los datos experimentales se ajustan a una ecuación no lineal, $y^{\text{calc}} = a - b\ln(1+cx)$. Dicho de otro modo, queremos hallar los parámetros *a*, *b* y *c* tales que $y^{\text{calc}} \approx y^{\exp}$.

E20

	A	B	C	D	E	F
1	Ajuste no lineal			Juan José Serrano & Juan Luis Pascual-Ahuir		Dpto. Química Física//Univ. Valencia
2						
3	X	Yexp		Ycalc	Residuos cuadráticos	
4				$y_{calc} = a - b\cdot\ln(1+c\cdot x)$	$\left(y_i^{calc} - y_i^{exp}\right)^2$	
5	17.3630	21.82				
6	15.8940	22.72				
7	14.5710	23.82				
8	13.1180	25.01				
9	11.5510	26.23				
10	9.8744	27.96				
11	8.0873	30.16				
12	6.1905	32.98				
13	5.2037	35.51				
14	4.1952	37.97				
15	3.1690	42.08				
16	2.1281	47.53				
17	1.0724	55.73				
18	0.0000	72.01				
19						
20				F. OBJETIVO		$\sum_{i=1}^{n}\left(y_i^{calc} - y_i^{exp}\right)^2$
21						
22						
23		a				
24		b				
25		c				
26						

SOLVER

En primer lugar, tenemos que obtener los valores de y^{calc}, para lo cual hemos de definir unos valores iniciales de los parámetros *a*, *b* y *c*. Es preferible que los valores de partida sean realistas para asegurar la convergencia del método matemático que emplearemos. Podemos cambiarles el nombre a las celdas correspondientes (C23, C24, C25) para luego poder referirnos a ellas. Otra opción es usar en las ecuaciones los símbolos $ (C23), que también nos permiten definir una referencia absoluta, ya que de otro modo al arrastrar perderíamos la referencia. Esto se puede hacer manualmente escribiendo sobre la barra de fórmulas o pulsando la tecla F4 tras escribir la identificación de la celda. En nuestro caso simplemente les cambiaremos el nombre:

aa ▾ fx

	A	B	C
4			
5	17.3630	21.82	
6	15.8940	22.72	
7	14.5710	23.82	
8	13.1180	25.01	
9	11.5510	26.23	
10	9.8744	27.96	
11	8.0873	30.16	
12	6.1905	32.98	
13	5.2037	35.51	
14	4.1952	37.97	
15	3.1690	42.08	
16	2.1281	47.53	
17	1.0724	55.73	
18	0.0000	72.01	
19			
20			
21			
22			
23		a	

A continuación escribimos en las celdas correspondientes a los parámetros unos valores de partida, y ya podemos obtener la y^{calc} para cada valor de x:

COEF.DE.CORREL ▾ ✕ ✓ fx =aa-bb*LN(1+cc*A5)

	A	B	C	D	E	F
1	Ajuste no lineal			Juan José Serrano & Juan Luis Pascual-Ahuir		Dpto. Química Física//Univ. Valencia
2						
3	X	Yexp		Ycalc	Residuos cuadráticos	
4				$y_{calc} = a - b \cdot \ln(1 + c \cdot x)$	$\left(y_i^{calc} - y_i^{exp}\right)^2$	
5	17.3630	21.82		=aa-bb*LN(1+cc*A5)		
6	15.8940	22.72				
7	14.5710	23.82				
8	13.1180	25.01				
9	11.5510	26.23				
10	9.8744	27.96				
11	8.0873	30.16				
12	6.1905	32.98				
13	5.2037	35.51				
14	4.1952	37.97				
15	3.1690	42.08				
16	2.1281	47.53				
17	1.0724	55.73				
18	0.0000	72.01				
19						
20				F. OBJETIVO		$\sum_{i=1}^{n}\left(y_i^{calc} - y_i^{exp}\right)^2$
21						
22						
23		a	25.00			
24		b	0.02			
25		c	1.00			

D5 =aa-bb*LN(1+cc*A5)

	A	B	C	D	E	F
1	Ajuste no lineal			Juan José Serrano & Juan Luis Pascual-Ahuir		Dpto. Química Física//Univ. Valencia
2						
3	X	Yexp		Ycalc	Residuos cuadráticos	
4				$y_{calc} = a - b \cdot \ln(1 + c \cdot x)$	$\left(y_i^{calc} - y_i^{exp}\right)^2$	
5	17.3630	21.82		24.94		
6	15.8940	22.72		24.94		
7	14.5710	23.82		24.95		
8	13.1180	25.01		24.95		
9	11.5510	26.23		24.95		
10	9.8744	27.96		24.95		
11	8.0873	30.16		24.96		
12	6.1905	32.98		24.96		
13	5.2037	35.51		24.96		
14	4.1952	37.97		24.97		
15	3.1690	42.08		24.97		
16	2.1281	47.53		24.98		
17	1.0724	55.73		24.99		
18	0.0000	72.01		25.00		
19						
20				F. OBJETIVO		$\sum_{i=1}^{n}\left(y_i^{calc} - y_i^{exp}\right)^2$
21						
22						
23		a	25.00			
24		b	0.02			
25		c	1.00			

SOLVER

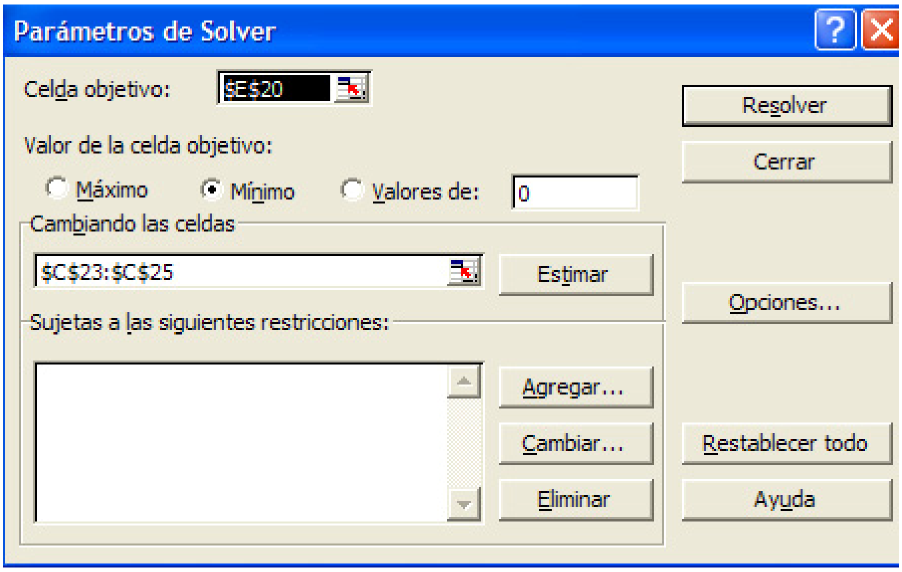
Fijémonos en que los valores teóricos son diferentes a los experimentales. Hemos de cambiar el valor de los parámetros a, b y c para que ambas columnas presenten valores próximos entre sí.

Así, para ver la desviación respecto al dato experimental, analizaremos los residuos cuadráticos, esto es, $\left(y_i^{calc} - y_i^{exp}\right)^2$. Luego definiremos una función objetivo que será la suma de los residuos: $\sum_{i=1}^{n}\left(y_i^{calc} - y_i^{exp}\right)^2$.

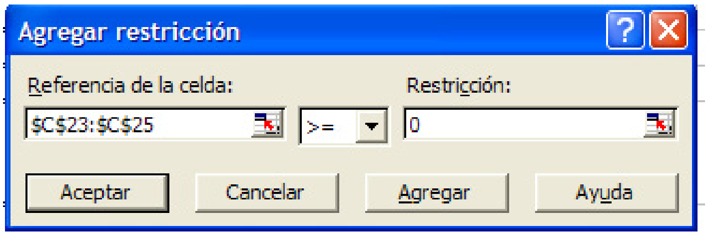
	A	B	C	D	E	F
1	Ajuste no lineal			Juan José Serrano & Juan Luis Pascual-Ahuir		Dpto. Química Física//Univ. Valencia
2						
3	X	Yexp		Ycalc	Residuos cuadráticos	
4				$y_{calc} = a - b \cdot \ln(1 + c \cdot x)$	$\left(y_i^{calc} - y_i^{exp}\right)^2$	
5	17.3630	21.82		24.94	=(D5-B5)^2	
6	15.8940	22.72		24.94		
7	14.5710	23.82		24.95		
8	13.1180	25.01		24.95		
9	11.5510	26.23		24.95		
10	9.8744	27.96		24.95		
11	8.0873	30.16		24.96		
12	6.1905	32.98		24.96		
13	5.2037	35.51		24.96		
14	4.1952	37.97		24.97		
15	3.1690	42.08		24.97		
16	2.1281	47.53		24.98		
17	1.0724	55.73		24.99		
18	0.0000	72.01		25.00		
19						
20				F. OBJETIVO		$\sum_{i=1}^{n}\left(y_i^{calc} - y_i^{exp}\right)^2$
21						
22						
23		a	25.00			
24		b	0.02			
25		c	1.00			

	A	B	C	D	E	F
4				$y_{calc} = a - b \cdot \ln(1 + c \cdot x)$	$\left(y_i^{calc} - y_i^{exp}\right)^2$	
5	17.3630	21.82		24.94	9.75	
6	15.8940	22.72		24.94	4.94	
7	14.5710	23.82		24.95	1.27	
8	13.1180	25.01		24.95	0.00	
9	11.5510	26.23		24.95	1.64	
10	9.8744	27.96		24.95	9.05	
11	8.0873	30.16		24.96	27.08	
12	6.1905	32.98		24.96	64.31	
13	5.2037	35.51		24.96	111.23	
14	4.1952	37.97		24.97	169.08	
15	3.1690	42.08		24.97	292.70	
16	2.1281	47.53		24.98	508.63	
17	1.0724	55.73		24.99	945.23	
18	0.0000	72.01		25.00	2209.94	
19						
20				F. OBJETIVO	=SUMA(E5:E18)	$\sum_{i=1}^{n}\left(y_i^{calc} - y_i^{exp}\right)^2$
21						
22						
23		a	25.00			
24		b	0.02			
25		c	1.00			

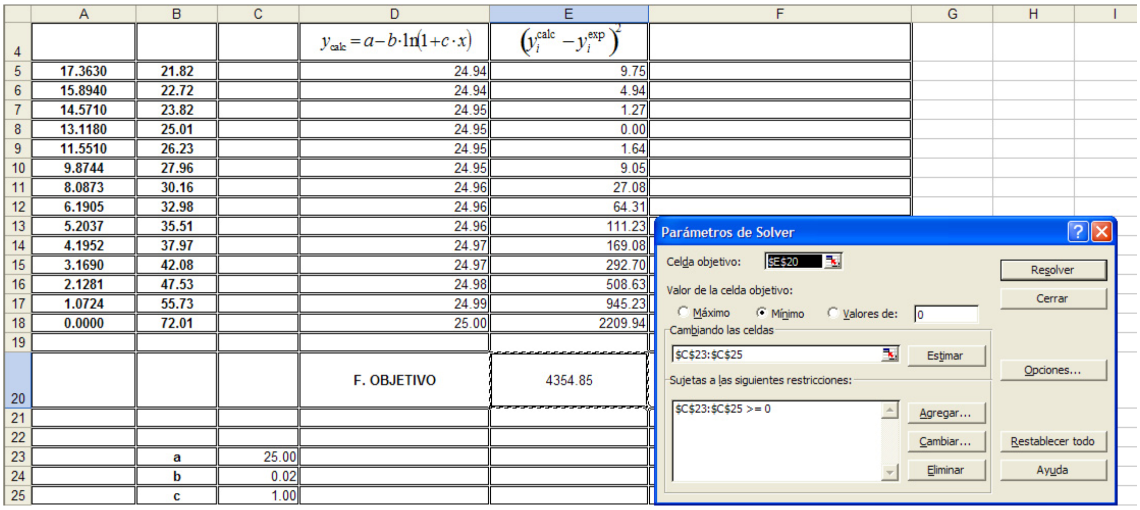
Lo que nos interesa es que la función objetivo, es decir, la suma de los residuos, sea mínima (lo que implica que el modelo se ajusta perfectamente a los datos experimentales), cambiando las celdas de *a*, *b* y *c*. Para ello empleamos la herramienta SOLVER:



Además, podemos agregar restricciones (botón "Agregar..."). Por ejemplo, supongamos que dichos parámetros han de ser mayores o iguales que cero, pues de lo contrario la solución no tendría sentido físico:

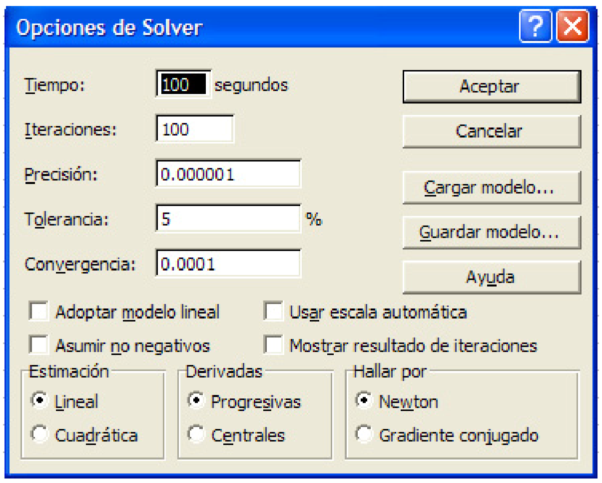


Y nos queda:



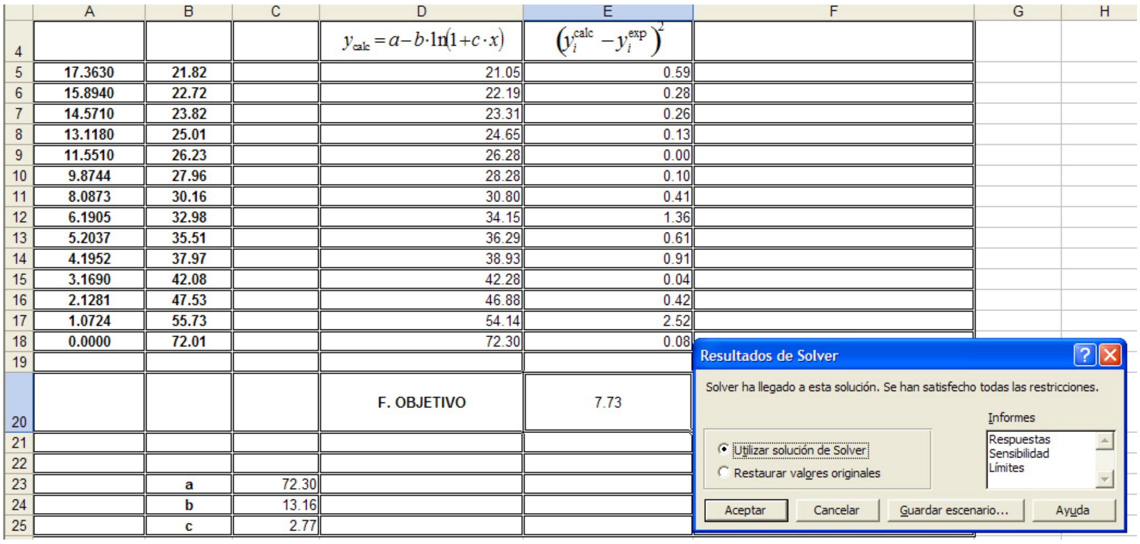
	A	B	C	D	E	F
4				$y_{calc} = a - b \cdot \ln(1 + c \cdot x)$	$\left(y_i^{calc} - y_i^{exp}\right)^2$	
5	17.3630	21.82		24.94	9.75	
6	15.8940	22.72		24.94	4.94	
7	14.5710	23.82		24.95	1.27	
8	13.1180	25.01		24.95	0.00	
9	11.5510	26.23		24.95	1.64	
10	9.8744	27.96		24.95	9.05	
11	8.0873	30.16		24.96	27.08	
12	6.1905	32.98		24.96	64.31	
13	5.2037	35.51		24.96	111.23	
14	4.1952	37.97		24.97	169.08	
15	3.1690	42.08		24.97	292.70	
16	2.1281	47.53		24.98	508.63	
17	1.0724	55.73		24.99	945.23	
18	0.0000	72.01		25.00	2209.94	
19						
20				F. OBJETIVO	4354.85	
21						
22						
23		a	25.00			
24		b	0.02			
25		c	1.00			

Además, el comando SOLVER permite que se fijen diferentes variables importantes (botón "Opciones...") como tiempo de procesamiento, número de iteraciones, precisión, tolerancia, etc... Todas estas variables influyen en el tiempo de procesado y en la precisión del resultado.



A veces es necesario repetir la acción de SOLVER varias veces para ir bajando el valor de la función objetivo. Si el método diverge, puede ser que los valores iniciales no sean lógicos. Aparte de cambiarlos, podemos modificar las opciones de SOLVER.

En nuestro caso, el comando nos proporciona el resultado siguiente:



	A	B	C	D	E
4				$y_{calc}=a-b\cdot\ln(1+c\cdot x)$	$\left(y_i^{calc}-y_i^{exp}\right)^2$
5	17.3630	21.82		21.05	0.59
6	15.8940	22.72		22.19	0.28
7	14.5710	23.82		23.31	0.26
8	13.1180	25.01		24.65	0.13
9	11.5510	26.23		26.28	0.00
10	9.8744	27.96		28.28	0.10
11	8.0873	30.16		30.80	0.41
12	6.1905	32.98		34.15	1.36
13	5.2037	35.51		36.29	0.61
14	4.1952	37.97		38.93	0.91
15	3.1690	42.08		42.28	0.04
16	2.1281	47.53		46.88	0.42
17	1.0724	55.73		54.14	2.52
18	0.0000	72.01		72.30	0.08
19					
20				F. OBJETIVO	7.73
21					
22					
23		a	72.30		
24		b	13.16		
25		c	2.77		

Fijémonos en que los valores de a, b y c han cambiado, que la función objetivo es cercana a cero, y que los valores calculados son más próximos a los experimentales. Repetir la acción de SOLVER no altera el resultado, por lo que podemos concluir que el resultado es:

$$a = 72.30$$
$$b = 13.16$$
$$c = 2.77$$