

## Praxis der Optimierung

### Übung 5

Matrikelnummer:

bis Die 17. November, 2015

- **Hanford Waste NLP**: Bisher haben wir das Mischungsproblem Hanford Waste so gestaltet, dass es als ein LP modelliert wird. Anstelle des Absolutbetrages der einzelnen Bestandteile ( $g_i$ ) modellieren Sie nun die Anteile ( $p_i$ ) der Stoffe  $i=SiO_2 \dots$  „other“ bzw.  $i=Cr_2O_3 \dots$  Metalle als zusätzliche Variablen ( $g_i = p_i G$ ,  $G$  Gesamtmasse der Mischung, ).
  - a. Ändern Sie ihren GAMS Code aus der Hausübung 4 in diese nichtlineare Formulierung (siehe auch Rückseite, wo die Familien der Nebenbedingungen 1. bis 3. in den Variablen  $p_i$  angeführt sind).
  - b. Versuchen Sie die Bedingungen 2. mit Hilfe einer binären Hilfsmatrix als eine Familie von Nebenbedingungen darzustellen (also als eine indizierte Familie von Nebenbedingungen). (Ausnahme zu binär: an einer Stelle steht eine Drei – Plus oder Minus je nach...)
  - c. Lösen Sie nun das Problem als NLP. Das Minimum sollte sich im Vergleich zur LP Formulierung nicht ändern, die Werte eventuell schon, da die Lösung nicht eindeutig ist.
  
- **Hanford Waste NLP vollständig**: Codieren Sie nun das „Hanford Waste Problem“ auf der Rückseite dieses Blattes, also auch mit den nichtlinearen (quadratischen) Nebenbedingungenfamilien Viskosität (4.), elektrische Leitfähigkeit (5.) und Dissolutionsbedingungen (6. bzw. 7.) in GAMS. Die  $\mu$ ,  $k$ ,  $D^{PCT}$ ,  $D^{MCC}$ ,  $D_p$  und  $D_m$  sind Parameter, deren Wertbelegung Sie vorliegen haben (ungenützter Datenteil in der letzten Hausübung). Da bei 4a 4b bzw. 5a 5b die linke Seite jeweils gleich ist, empfehle ich Ihnen je eine Hilfsvariable zu verwenden und die Ungleichungen als Variablentypbedingung festzulegen.

## APPENDIX A

## Details of Glass Property Constraints

## NOTATION

- $C_1$  Bound for Crystal1 – 3.0  
 $C_2$  Bound for Crystal2 – 0.08  
 $C_3$  Bound for Crystal3 – 0.225  
 $C_4$  Bound for Crystal4 – 0.18  
 $C_5$  Bound for Crystal5 – 0.18  
 $k_{min}$  Lower limit for conductivity – 18  
 $k_{max}$  Upper limit for conductivity – 50  
 $\mu_{min}$  Lower limit for viscosity (PaS) – 2.0  
 $\mu_{max}$  Upper limit for viscosity (PaS) – 10.0  
 $D_{PCT}^{max}$  Max release rate (product consistency test) (g per  $m_2$ ) – 10.0  
 $D_{MCC}^{max}$  Max release rate (materials characterization center) (g per  $m_2$ ) – 28.0  
 $\mu_a^i$  Linear coefficients of viscosity model  
 $\mu_b^i$  Cross term coefficients of viscosity model  
 $k_a^i$  Linear coefficients of electrical conductivity model  
 $k_b^i$  Cross term coefficients of electrical conductivity model  
 $Dp_a^i$  Linear coefficients of durability (PCT) model (for Boron)  
 $Dp_b^i$  Cross term coefficients of durability (PCT) model for Boron  
 $Dm_a^i$  Linear coefficients of durability (MCC) model (for Boron)  
 $Dm_b^i$  Cross term coefficients of durability (MCC) model (for Boron)

## 1. Component Bounds:

- a)  $0.42 \leq p^{(SiO_2)} \leq 0.57$   
 b)  $0.05 \leq p^{(B_2O_3)} \leq 0.20$   
 c)  $0.05 \leq p^{(Na_2O)} \leq 0.20$   
 d)  $0.01 \leq p^{(Li_2O)} \leq 0.07$   
 e)  $0.0 \leq p^{(CaO)} \leq 0.10$   
 f)  $0.0 \leq p^{(MgO)} \leq 0.08$

- g)  $0.02 \leq p^{(Fe_2O_3)} \leq 0.15$   
 h)  $0.0 \leq p^{(Al_2O_3)} \leq 0.15$   
 i)  $0.0 \leq p^{(ZrO_2)} \leq 0.13$   
 j)  $0.01 \leq p_{(other)} \leq 0.10$

## 2. Five glass crystallinity constraints:

- a)  $p^{(SiO_2)} > p^{(Al_2O_3)} * C_1$   
 b)  $p^{(MgO)} + p^{(CaO)} < C_2$   
 c)  $p^{(Fe_2O_3)} + p^{(Al_2O_3)} + p^{(ZrO_2)} + p^{(Other)} < C_3$   
 d)  $p^{(Al_2O_3)} + p^{(ZrO_2)} < C_4$   
 d)  $p^{(MgO)} + p^{(CaO)} + p^{(ZrO_2)} < C_5$

## 3. Solubility Constraints:

- a)  $p^{(Cr_2O_3)} < 0.005$   
 b)  $p^{(F)} < 0.017$   
 c)  $p^{(P_2O_5)} < 0.01$   
 d)  $p^{(SO_3)} < 0.005$   
 e)  $p^{(Rh_2O_3+PdO+Ru_2O_3)} < 0.025$

## 4. Viscosity Constraints:

- a)  $\sum_{i=1}^n \mu_a^i * p^{(i)} + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n \mu_b^{ij} * p^{(i)} * p^{(j)} > \log(\mu_{min})$   
 b)  $\sum_{i=1}^n \mu_a^i * p^{(i)} + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n \mu_b^{ij} * p^{(i)} * p^{(j)} < \log(\mu_{max})$

## 5. Conductivity Constraints:

- a)  $\sum_{i=1}^n k_a^i * p^{(i)} + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n k_b^{ij} * p^{(i)} * p^{(j)} > \log(k_{min})$   
 b)  $\sum_{i=1}^n k_a^i * p^{(i)} + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n k_b^{ij} * p^{(i)} * p^{(j)} < \log(k_{max})$

## 6. Dissolution rate for boron by PCT test (DissPCTbor):

$$\sum_{i=1}^n Dp_a^i * p^i + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n Dp_b^{ij} * p^{(i)} * p^{(j)} < \log(D_{PCT}^{max})$$

## 7. Dissolution rate for boron by MCC test (DissMCCbor):

$$\sum_{i=1}^n Dm_a^i * p^i + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n Dm_b^{ij} * p^{(i)} * p^{(j)} < \log(D_{MCC}^{max})$$

## Waste Composition Data

Comp.	Fractional Composition of Wastes						
	AZ-102	AZ-101	AZ-102	SY-102	SY-101	SY-103	B-103
SiO <sub>2</sub>	0.072	0.092	0.022	0.020	0.000	0.019	0.011
B <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.026	0.000	0.006	0.003	0.000	0.000	0.000
Na <sub>2</sub> O	0.105	0.264	0.120	0.154	0.300	0.230	0.100
Li <sub>2</sub> O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
CaO	0.061	0.012	0.010	0.030	0.007	0.006	0.000
MgO	0.040	0.000	0.003	0.012	0.000	0.001	0.000
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.328	0.323	0.392	0.133	0.000	0.039	0.155