

Praxis der Optimierung

Übung 6

bis 24.November 2015

- **GAMS Project Environment:** Lagern Sie in Ihrem Hanford Waste NLP GAMS Code die Tabellen Zusammensetzung und andere Zusammensetzung in ein separates GAMS File (Endung „.gms“) aus; laden Sie im GAMS Code mit „\$include“ dieses Datenfile hinzu. Legen Sie am Desktop ein Verzeichnis an, indem Sie beide Files (Ihr GAMS Code und das neue Datenfile) speichern. Im GAMS IDE Editor schließen Sie sämtlich Fenster und legen Sie nun im Reiter „File“, unter „Project“ ein neues Projekt („New Project“) an. Abschließend öffnen Sie im GAMS IDE unter „File“, im Menüpunkt „Open in project directory“ die benötigten Files und führen Sie die Berechnungen neuerlich durch.
- **Hanford Waste NLP plus:** Erweitern Sie Ihren GAMS Code derart, dass (manuell vor dem Optimierungslauf) aus allen 21 Tanks eine Submenge ausgewählt werden kann und für diese Submenge das NLP Mischungsproblem der Verglasung gelöst wird. Setzen Sie diese Auswahl nun bitte nicht via Subsets um, sondern definieren Sie sich ein Parameterfeld „Auswahl“ mit 21 binären Einträgen, einen Wert für jeden Tank, wobei bei den Tanks der gewünschten Submenge eine „1“ und sonst eine „0“ steht. (Eine Änderung der Submenge wird einfach durch Änderung dieser binären Parameter durchgeführt). Vergessen Sie nicht, die Nebenbedingungen entsprechend zu adaptieren, sodass das NLP genau für die gewählte Submenge der Tanks gelöst wird. Wählen Sie nun als Submenge die drei Tanks, die wir in früheren Übungen betrachtet haben, lösen Sie dieses Subproblem und vergleichen Sie mit den früheren Ergebnissen.
- **Hanford Waste NLP plus GAMS Solvers:** Achten Sie darauf, dass Sie mit Version 23.7 arbeiten. Versuchen Sie nun auf Hanford Waste NLP plus (nun **mit allen 21 Tanks aktiv**) folgende Solver CONOPT, COUENNE, IPOPT, MINOS, MOSEK und CPLEX (aber bitte rühren Sie nicht BARON an) anzuwenden und beobachten (vergleichen) Sie. Ändern Sie mittels Menueinstellungen Files/Options und/oder verwenden Sie den Befehl „options“. Checken Sie auch, welcher der Solver als Demo und welcher voll verwendet werden kann. Tragen Sie Ihre Beobachtungen ins Protokollblatt ein und bringen Sie dieses in die VU mit.

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
 μ_{min} Lower limit for viscosity (PaS) – 2.0
 μ_{max} Upper limit for viscosity (PaS) – 10.0
 D_{PCT}^{max} Max release rate (product consistency test) (g per m₂) – 10.0
 D_{MCC}^{max} Max release rate (materials characterization center) (g per m₂) – 28.0
 μ_a^i Linear coefficients of viscosity model
 μ_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) $p^{(Al_2O_3)} + p^{(ZrO_2)} < C_4$
 e) $p^{(MgO)} + p^{(CaO)} + p^{(ZrO_2)} < C_5$

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) $p^{(Rh_2O_3+P_2O_5+Ru_2O_3)} < 0.025$

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 ₂	0.072	0.092	0.022	0.020	0.000	0.019	0.011
B ₂ O ₃	0.026	0.000	0.006	0.003	0.000	0.000	0.000
Na ₂ O	0.105	0.264	0.120	0.154	0.300	0.230	0.100
Li ₂ 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 ₂ O ₃	0.328	0.323	0.392	0.133	0.000	0.039	0.155