

Praxis der Optimierung

Übung

Matrikelnummer:

Oktober, 2016

Mischungsproblem – HanfordWaste

Blending: Hanford Site im südöstlichen Teil des Bundesstaates Washington hat über 5 Jahrzehnte radioaktiven Abfall angesammelt, welcher in Tanks zwischengelagert worden ist. Diese Abfälle sollen nun verfestigt und endgelagert werden. Neuere Technologien der Abfallbeseitigung sehen eine Verglasung für die Endlagerung vor, wobei die verglaste Masse sowohl Bearbeitungs- als auch Beständigkeitsbedingungen erfüllen. Die Verarbeitbarkeitsbedingungen stellen sicher, dass während der Bearbeitung der Glasschmelze Bedingungen wie Viskosität, elektrische Leitfähigkeit, Liquidustemperatur („Schmelztemperatur“) in Bereichen liegen, die für die Verglasung („Sinterung“) im technisch akzeptablen Bereich liegen. Die Beständigkeitsbedingungen stellen sicher, dass das daraus ergebene Glas bestimmte quantitative Kriterien, die für eine sichere Lagerung in der Endlagerstätte notwendig sind, erfüllt werden. Weiters gibt es noch Beschränkungen für die Anteile gewisser problematischer Bestandteile wie Fluor im Glas.

Im einfachsten Fall wird der Abfall gemischt mit (zusätzlichen) Beigaben von Fritten (engl. Frits, glasformende Materialien wie Siliciumdioxid SiO_2) und dann in einer Schmelzwanne erhitzt, so dass das daraus geformte Glas die oben erwähnten Bedingungen erfüllt. Ziel ist es, die verwendeten Fritten minimal zu halten, sodass die Gesamtmasse die endgelagert werden muss, möglichst gering bleibt. Bei einem einzigen Abfalltyp ist die zu lösende Problemstellung relative einfach. Hanford sieht sich aber 177 Tank (von 50K bis 1M Gallonen Fassungsvermögen, 1 Gallone ungefähr 3,78l) mit radioaktiven Abfall gegenüber stehend. Da der Ursprung der Tankinhalte aus verschiedensten Quellen kommen, differieren die Zusammensetzung der Abfallstoffe in den einzelnen Tanks erheblich. Die best mögliche Lösung ergäbe sich natürlich daraus, alle 177 Tanks auf eine Mischung zu vereinen und diese dann unter minimal notwendiger Frittenzugabe zu verglasen. Aber aufgrund der enormen Masse ist dies aus zeit- und platzlogistischen Gesichtspunkten nicht möglich. Man kann aber durchaus durch geschickte Gruppierung der Tanks (blends) sehr gute Lösungen erhalten. Neben der (kontinuierlichen) Berechnung der minimalen Frittenzugabe für eine vorgegebene Mischung ist es also notwendig simultan ein kombinatorisches Optimierungsproblem der Gruppierung der Tanks zu lösen. Aber dazu später im Semester.

Wollen wir uns zuerst eine einfachere Aufgabenstellung (erinnert euch an Mortimer Middleman ☺) untersuchen. Der erste Teil der Tabelle 1 zeigt die chemische Zusammensetzung der drei Tanks AY-102, AZ-101, AZ-102. Die zehn Bestandteile von Siliciumdioxid bis zu Andere sind anteilmäßig aufgelistet, und in der letzten Zeile sehen Sie die Gesamtmassen der einzelnen Tanks (Abfallmasse etwa 59, 40 bzw. 143 Tonnen). Die drei Tanks sollen auf eine Masse zusammengemischt und verglast werden. Aus der Gesamtmasse und den Anteilen läßt sich die absolute Masse W_i der einzelnen Bestandteile in der Gesamtmasse der Mischung verifizieren

(z.B. etwa 11 Tonnen Siliciumdioxid). Es sei noch erwähnt, dass unter „Andere“ eine Conglomeration der „restlichen Stoffe“ gemeint ist, wo neben vielen nicht genauer definierten Stoffen die Anteile von Chrom(III)-oxid, Fluor, Phosphorpentoxid, Schwefeltrioxid und edle Metalle (wie Rhodium, Palladium ...) enthalten sind. Diese fünf Problemstoffe sind NICHT als zusätzlich anzusehen, sondern sind in „Andere“ enthalten; die Information über diese Stoffe wird aber für gewisse Restriktionen benötigt (siehe Punkt 3 weiter unten).

Neun Entscheidungsvariablen Fritten beschreiben Beigaben (zusätzlich zu dem was schon in der Mischung ist) aus der Gruppe der ersten 9 Bestandteile, also die Beigabe kann z.B. aus Siliciumdioxid und Tonerde sein. Weiters kann, als 10. Entscheidungsvariable kodiert, irgendetwas anderes“ (z.B. Wasser) beigemischt werden; wir nennen diese Entscheidungsvariable „Andere Fritten“ oder kurz auch nur „Andere“.

Komponente	ID	anteilige Zusammensetzung				W%		
		AY-102	AZ-101	AZ-102	W%			
Siliciumdioxid	1	0,072	0,092	0,022	11,18365			
Boroxid	2	0,026	0	0,006	2,416554			
Natriumoxid	3	0,105	0,264	0,12	34,19368			
Lithiumoxid	4	0	0	0	0			
Ätzkalk	5	0,061	0,012	0,01	5,56847			
Magnesia	6	0,04	0	0,003	2,822121			
rotes Eisenoxid	7	0,328	0,323	0,392	89,00615			
Tonerde	8	0,148	0,157	0,212	45,66483			
Zirconia	9	0,002	0,057	0,063	11,47892			
Andere	10	0,217	0,096	0,173	41,71802			
Total		0,999	1,001	1,001	244,0524		Rundungur	
Chrom(III)-oxid	11	0,016	0,007	0,005	1,95795			
Fluor	12	0,006	0,001	0,001	0,542788			
Phosphorpentoxid	13	0,042	0,001	0,021	5,56952			
Schwefeltrioxid	14	0,001	0,018	0,009	2,080857			
Metalle (Rodium-, Pal	15	0	0	0	0			
Abfallmasse (Einheit 1000kg)		59,772	40,409	143,747	243,928	0,124384		
Komponente	ID	untere Gr	obere Gr					
Siliciumdioxid	1	0,42	0,57					
Boroxid	2	0,05	0,2					
Natriumoxid	3	0,05	0,2					
Lithiumoxid	4	0,01	0,07					
Ätzkalk	5	0	0,1					
Magnesia	6	0	0,08					
rotes Eisenoxid	7	0,02	0,15					
Tonerde	8	0	0,15					
Zirconia	9	0	0,13					
Andere	10	0,01	0,1					

Tabelle 1 (Bem: diese Daten stelle ich auch via Datenfiles in TISS zur Verfügung).

- Beschränkungen an die Komponenten:** Der zweite Teil der Tabelle 1 gibt die unteren und oberen Grenzen der Anteile der einzelnen Bestandteile an der zu verglasenden Mischung an

(also nach der Frittengabe). Wenn man sich erinnert, dass Fensterglas zu grossen Teilen aus Siliciumdioxid (SiO_2) besteht, wundert es einem nicht, dass z.B. mindestens 42% der zu verglasenden Masse Siliciumdioxid sein muss. Da der originale Anteil an SiO_2 zw. 2% und 9% schwankt, wird in der optimalen zulässigen Lösung eine massive Frittengabe SiO_2 zu erwarten sein.

2. **Kristallisierungsbedingungen:** Damit das Glas korrekt kristallisiert, werden folgende zusätzliche Nebenbedingungen an die (zu verglasende) Mischung gestellt (also nach der Frittengabe):
 - a. Das Massenverhältnis von Siliciumdioxid zu Tonerde soll nicht kleiner als C_1 ($C_1=3$) sein.
 - b. Der aggregierte Massenanteil von Ätzkalk und Magnesia soll nicht größer als C_2 ($C_2=0,08$) sein. (Also der Massenanteil von Ätzkalk und Magnesia zusammen soll...)
 - c. Der aggregierte Massenanteil von Rotes Eisenoxid, Tonerde, Zirconia und „Andere“ soll nicht mehr als 22,5% sein. (Unter „Andere“ ist hier W_{Andere} plus „Andere Fritten“ gemeint.)
 - d. Der aggregierte Massenanteil von Tonerde und Zirconia soll nicht mehr als 18% sein.
 - e. Der aggregierte Massenanteil von Magnesia, Ätzkalk, und Zirconia soll nicht mehr als 18% sein.

3. **Solubilität (Löslichkeit):** Diese Bedingungen limitieren den größtmöglichen Wert des Massenanteils eines oder einer Gruppe von Bestandteils(en) an der Gesamtmasse:
 - a. Der Anteil von Chrom(III)-oxid darf nicht mehr als 0,005 (5 Promille) sein.
 - b. Der Anteil von Fluor darf nicht mehr als 0,017 (1,7 Prozent) sein.
 - c. Der Massenanteil von Phosphorpentoxid soll nicht größer als ein Prozent sein.
 - d. Der Massenanteil von Schwefeltrioxid soll nicht größer als ein halbes Prozent sein.
 - e. Der Massenanteil an den edlen Metallen soll nicht größer als 2,5 Prozent sein.

Da Chrom(III)-oxid, Fluor etc. nur als Bestandteil von „Andere“ der 3 Tanks in die Mischung reinkommen (Bem: nicht aber durch die Entscheidungsvariable „Andere Fritten“, diese Fritten wählt man natürlich frei von den Problemstoffen), ist deren **Anteil** durch das Mischen der Tanks und Hinzugabe der Fritten festgelegt, und als solches nicht wählbar.

Um diese Aufgabe als LP zu modellieren, müssen Sie zu folgendem Trick greifen. Definieren Sie die Gesamtmasse als eine Hilfsvariable. Die Berechnung des Anteils eines Bestandteils (z.B. Siliciumoxids) wäre als Division der absoluten Masse dieses Bestandteiles durch die Hilfsvariable Gesamtmasse „G“ nichtlinear. Da aber alle Nebenbedingungen von der Form Anteil \leq oder \geq einer Konstante sind, erhält man durch simples Ausmultiplizieren mit G eine lineare Form in den absoluten Werten.

Verwenden Sie MS Excel Solver, um dieses lineare Minimierungsprogramm zu lösen (bitte unbedingt als LP modellieren und mit dem in Excel implementierten Simplex lösen).

I hope I don't frustrate you by the following link (luckily in Austria we don't have such problems):
<http://www.komonews.com/news/local/Tank-leaking-radioactive-waste-at-Hanford-191454201.html>