Univerza v Mariboru
Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

Optimiranje procesov

(Navodila za računalniške vaje)

Zorka Novak Pintarič in Zdravko Kravanja

Maribor, 2008

Naloga 1: Metoda najmanjših kvadratov (str. 12)

A) Ponovite primer "Redlich-Kwongova enačba stanja plinov" (str. 14).

B) Z uporabo eksperimentalnih podatkov ocenite koeficiente Antoinove enačbe za dano komponento. Uporabite metodo najmanjših kvadratov, nelinearno programiranje in program GAMS. Primerjajte izračunane vrednosti koeficientov s podanimi (označene rdeče). Izračunajte temperaturo vrelišča in jo primerjajte z dejansko, ki je podana v zadnjem stolpcu, Tv (označeno rdeče).

Antoinova enačba:

$p = \exp(A - B/(T + C))$

p – parni tlak, mm Hg
T – temperatura, K
A, B in C – koeficienti

Podatki:

Skupina	**Spojina**	***A***	***B***	***C***	T_{min}/K	T_{max}/K	***T*v/K**
1	Argon	15.2330	700.51	-5.84	81.	94.	87.3
Podatki:							
T, K	82	84	85	87	88	90	93
p, mm Hg	415	527	593	735	820	1006	1335

Skupina	**Spojina**	***A***	***B***	***C***	T_{min}/K	T_{max}/K	***T*v/K**
2	Brom	15.8441	2582.32	-51.56	259.	354	331.9
Podatki:							
T, K	260	274	287	302	316	330	351
p, mm Hg	32	72	133	249	444	718	1368

Skupina	**Spojina**	***A***	***B***	***C***	T_{min}/K	T_{max}/K	***T*v/K**
3	Nitrozil klorid	16.9505	2520.70	-23.46	210.	285.	267.7
Podatki:							
T, K	214	223	235	242	256	277	283
p, mm Hg	38	79	150	230	452	1102	1400

Skupina	**Spojina**	***A***	***B***	***C***	T_{min}/K	T_{max}/K	***T*v/K**
4	Klor	15.9610	1978.32	-27.01	172.	264.	238.7
Podatki:							
T, K	178	191	205	220	233	248	261
p, mm Hg	15	50	130	300	572	1104	1822

Skupina	Spojina	*A*	*B*	*C*	T_{min}/K	T_{max}/K	*T*v/K
5	Si-tetraklorid	15.8019	2634.16	-43.15	238.	364.	330.4
Podatki:							
T, K	240	258	274	293	311	330	358
p, mm Hg	10	35	82	195	393	750	1692

Skupina	Spojina	*A*	*B*	*C*	T_{min}/K	T_{max}/K	*T*v/K
6	Deuterij	13.2954	157.89	0.00	19.	25.	23.7
Podatki:							
T, K	19	20	21	22	23	24	25
p, mm Hg	145	222	320	456	623	823	1075

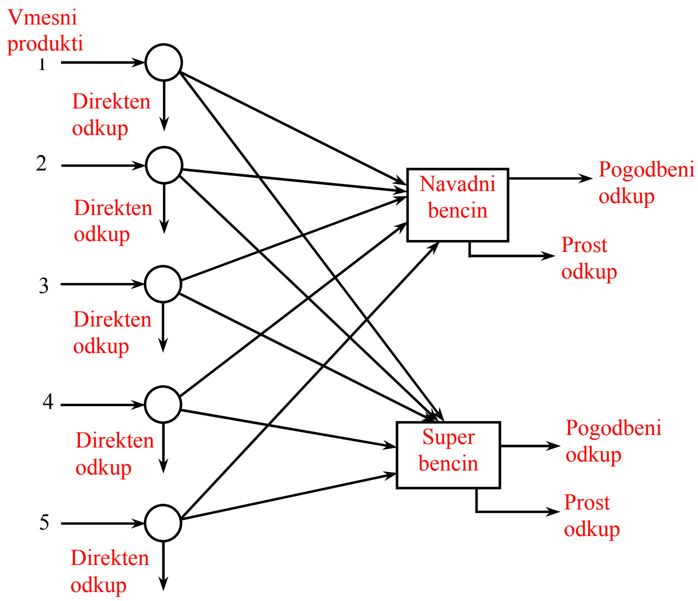
Skupina	Spojina	*A*	*B*	*C*	T_{min}/K	T_{max}/K	*T*v/K
7	Fluor	15.6700	714.10	-6.00	59	91	85.0
Podatki:							
T, K	59	64	69	75	78	86	90
p, mm Hg	9	28	77	205	312	851	1302

Skupina	Spojina	*A*	*B*	*C*	T_{min}/K	T_{max}/K	*T*v/K
8	F3N	15.6107	1155.69	-15.37	103	155	144.1
Podatki:							
T, K	103	112	123	134	142	149	154
p, mm Hg	11	40	129	356	652	1052	1445

Skupina	Spojina	*A*	*B*	*C*	T_{min}/K	T_{max}/K	*T*v/K
9	F4Si	16.5040	1714.25	-14.45	137	200	188.1
Podatki:							
T, K	138	148	156	169	178	192	200
p, mm Hg	14	40	82	225	415	940	1430

Naloga 2: Proizvodnja navadnega in super bencina (str. 11)

A) Optimirajte proizvodni plan s podatki, ki so podani v tabelah:



Slika 1.3: Shema problema planiranja rafinerije.

B) Izvedite občutljivostno analizo, tako da spreminjate izbrani parameter in ugotavljate njegov vpliv na optimalno rešitev. Komentirajte dobljene rezultate.

Podatki za vmesne produkte:

Vmesni produkt, i	Razpoložljiva kapaciteta α_i	Oktansko število β_i	Prodajna cena $c_i^{(3)}$	Nakupna cena $c_i^{(4)}$	Stroški mešanja, $c_i^{(5)}$
1	200 000	70	30.0	24.0	1.00
2	400 000	80	35.0	27.0	1.00
3	400 000	85	36.0	28.5	1.00
4	500 000	90	42.0	34.5	1.00
5	500 000	99	60.0	40.0	1.50

Podatki za končna produkta:

Produkt, j	Minimalna pogodbena proizvodnja, δ_j	Oktansko število, γ_j
Navadni	500 000	85
Super	400 000	95

Podatki o cenah končnih produktov:

Skupina	Pogodbena prodaja		Prosta prodaja	
	Navadni	Super	Navadni	Super
	$c_1^{(1)}$	$c_2^{(1)}$	$c_1^{(2)}$	$c_2^{(2)}$
1	20	35	20	45
2	60	65	40	50
3	70	60	46	60
4	30	45	46	60
5	40	55	36	50
6	40	55	56	70
7	50	65	56	70
8	50	55	56	60
9	60	75	70	85

Naloga 3: Obrat kisika (str. 8)

A) Optimirajte proizvodnjo kisika z naslednjimi podatki:

$N = 19$	$a_1 = 1500$
$D_0 = 0$ kg/h	$a_2 = 300$
$D_1 = 600$ kg/h	$b_1 = 1340$
$t_1 = 30$ h	$b_2 = 1$
$t_2 = 44$ h	$b_3 = 800$
$p_0 = 50$ bar	$b_4 = 1$
$T = 27$ °C	$b_5 = 8.3$
$q_m \leq 600$ kg/h	d=1

B) Ponovite optimiranje tako, da enega po enega spreminjate parametre podane v spodnji tabeli. Po spremembi določenega parametra vrnite njegovo vrednost na izhodiščno in šele nato spremenite naslednji parameter. Komentirajte dobljene rezultate.

Podatki za cenovne koeficiente:

Skupina	b_1	b_3	b_5	a_2
1	500	500	5	100
2	500	1500	5	200
3	500	500	5	300
4	500	1500	5	400
5	500	500	5	500
6	2000	1500	13	600
7	2000	500	13	700
8	2000	1500	13	800
9	2000	500	13	900

Naloga 4: Transportni problem

A) Z linearnim programiranjem rešite transportni problem, predstavljen na predavanjih (str. 88). Uporabite progam GAMS. Ker je ponudba večja od povpraševanja, gre za odprt transportni problem. Zato poleg minimalnih prevoznih stroškov ugotovite tudi neizkoriščenost virov.

B) Ponovite optimiranje gornjega transportnega problema s spremenjenimi podatki in/ali z dodatnimi pogoji:

Skupina	**Spremembe podatkov, dodatni pogoji**
1	a_1 =500 t, x_{11} je lahko največ 200 t
2	a_2 =1000 t, x_{11} je lahko največ 500 t
3	a_2 =500 t, penala za primanjkljaj blaga sta $c_1^p = 0$ in c_2^p =20 000 SIT/t
4	a_3 =500 t, penala za primanjkljaj blaga sta $c_1^p = 0$ in c_2^p =20 000 SIT/t
5	a_2 =1000 t, penala za primanjkljaj blaga sta $c_1^p = 0$ in c_2^p =20 000 SIT/t
6	a_2 =500 t, penala za primanjkljaj blaga sta c_1^p = 10 000 in c_2^p =20 000 SIT/t
7	a_2 =1000 t, x_{12} je najmanj 500 t
8	a_2 =1000 t, prepovedana pot: $x_{11} = 0$
9	a_2 =1000 t, x_{31} je najmanj 500 t

Pojasnite spremembe optimalnega rezultata!

Naloga 5: Sinteza omrežij toplotnih prenosnikov

Dani so podatki za dva topla in dva hladna toka ter pogonska sredstva:

	FC_p (MW/K)	T_{in} (K)	T_{out} (K)
H1	2.5	400	320
H2	3.8	370	320
C1	2	300	420
C2	2	300	370

Visokotlačna para:	500 K	80 000 $/(MW·a)
Nizkotlačna para:	380 K	50 000 $/(MW·a)
Hladilna voda:	300 K	20 000 $/(MW·a)

$\Delta_{min}T = 10$ K

A) Sestavite problemsko tabelo (str. 130).

B) Narišite toplotno kaskado (str. 131).

C) Zapišite in rešite LP model za minimiranje porabe pogonskih sredstev (str. 132).
(Ali obstaja več optimalnih rešitev?)

D) Razširite model iz točke C) za minimiranje stroškov pogonskih sredstev (str. 133).

E) Ponovite izračun minimiranja stroškov pogonskih sredstev z že pripravljenim modelom za pogojene stike (str. 134-138).

Prepovejte stike med tokovi ali uvedite omejitev za prenos v nekem stiku, kot je navedeno v spodnji tabeli.

Skupina	
1	Prepovedan stik med H1 in C1 in med C2 in visokotlačno paro
2	Prepovedan stik med H1 in C2 in med C2 in nizkotlačno paro
3	Prepovedan stik med H2 in C1
4	Poraba visokotlačne pare naj bo vsaj 80 MW
5	Tok H2 naj prejme vsaj 50 MW od nizkotlačne pare
6	Poraba nizkotlačne pare mora znašati vsaj 10 MW.
7	Poraba nizkotlačne pare ne sme presegati 1 MW

Naloga 6: Optimiranje procesa s programom ASPEN

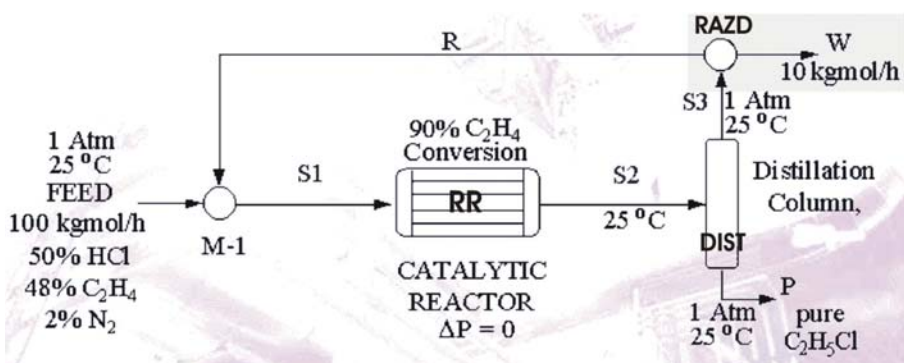
Optimizer v programu Aspen bomo uporabili za izbiro optimalne vrednosti toka W (purge stream) v procesu pridobivanja kloroetana iz etena in HCl:

$$C_2H_4 + HCl \rightarrow C_2H_5Cl$$

Namen optimiranja pretoka toka W je maksimiranje ekonomske namenske funkcije ob dodatnem pogoju:

max (prihodek – stroški surovin – letna naložba)
p.p.
$R \leq 300$ kg/h

Preden se lotimo optimiranja, je potrebno definirati procesno shemo, module za procesne enote in podatke za vtok, podobno kot pripravimo vse potrebno za simulacijo procesne sheme.



6.1. Definiranje procesne sheme, procesnih enot in vtoka

V programu Aspen pripravite osnovno simulacijo procesa brez optimiranja z naslednjimi podatki:

Komponente:
HCl, C_2H_4, N_2, C_2H_5Cl

Termodinamika:
Peng Robinson

Vtok (FEED):
(1 atm, 25 °C, 100 kmol/h, množinski deleži: HCl 50 %, C_2H_4 48 %, N_2 2 %)

Procesne enote:
Mešalnik (M-1)
    Vrsta modela: Mixer (1 atm, temperaturo ocenimo na 25 °C)

Reaktor (RR)
- Vrsta modela: RStoic (1 atm, 25 °C)
- Stehiometrijski koeficienti: HCl: -1, C_2H_4: -1, C_2H_5Cl: 1
- Presnova C_2H_4=90%

Separator (DIST)
- Vrsta modela: Sep2
- Split fractions za tok P: HCl: 0, C_2H_4: 0, N_2:0, C_2H_5Cl: 0,9999

Razdelilnik toka (RAZD)
- Vrsta modela: FSplit
- W Flow 10 kmol/h

Zaženite simulacijo in na osnovi dobljenih rezultatov izračunajte vrednost namenske funkcije po enačbi:

$$\text{Dobiček} = 0,001 \cdot 330 \cdot 24 \cdot \left[2,5 \cdot P - \left(1,5 \cdot WET + WHCL \right) \cdot FEED \right] - 0,1 \cdot \left[500 \cdot \left(\frac{330 \cdot 24 \cdot S2}{1000} \right)^{0,6} \right] \tag{1}$$

kjer so *P*, *FEED* in *S2* masni pretoki ustreznih tokov v kg/h, *WET* in *WHCL* pa masna deleža etena in HCl v vtoku (FEED).

Za dobljeno rešitev zabeležite:
- vrednost dobička,
- masne pretoke vseh tokov v kg/h
- množinski pretok toka W v kmol/h in
- delež tokov R in W glede na tok S3 (v rezultatih bloka RAZD).

6.2. Priprava za optimiranje

Optimizacijsko orodje v programu Aspen je organizirano v treh sklopih:

Define	za definicije spremenljivk, ki nastopajo v namenski funkcij
Objective & Constraints	za definiranje namenske funkcije in omejitev
Vary	za definiranje kontrolnih spremenljivk in njihovih mej

Definiranje spremenljivk
Definirali bomo spremenljivke, ki bodo nastopale v namenski funkciji:

Masni tok produkta:	P
Masni tok vtoka:	FEED
Masni tok toka S2:	S2
Masni delež etena v vtoku:	WET
Masni delež HCl v vtoku:	WHCL

Datoteko iz naloge 1 shranite pod novim imenom, nato:

Data, Model Analysis Tools, Optimization
Object Manager, New, O-1
Define, New

Ime spremenljivke:	P	FEED	S2
Type:	Stream-Var	Stream-Var	Stream-Var
Stream:	P	FEED	S2
Substream:	Mixed	Mixed	Mixed
Variable:	Mass Flow	Mass Flow	Mass Flow

Ime spremenljivke:	WET	WHCL
Type:	Mass-Frac	Mass-Frac
Stream:	FEED	FEED
Substream:	Mixed	Mixed
Component:	C_2H_4	HCl

Namenska funkcija
Maksimirali bomo dobiček, kot smo ga definirali v enačbi (1):

Objective & Constraints
Max
0.001*330*24*(2.5*P-(1.5*WET+WHCL)*FEED)-0.1*(500*(330*24*S2/1000)**0.6)

Manipulirna (kontrolna) spremenljivka
Manipulirna spremenljivka bo množinski pretok toka W, ki ga bo optimizer spreminjal med 4 in 15 kmol/h z namenom iskanja maksimuma namenske funkcije.

Vary

Variable number:	New → 1	Limits:	
Type:	Block-Var	Lower:	4
Block:	SPLIT	Upper:	15
Variable:	FLOW/FRAC		
Sentence:	FLOW/FRAC		
ID1:	W		

a) Optimiranje brez omejitev

Zaženimo simulacijo z optimiranjem. Optimalno vrednost namenske funkcije najdemo pod Data, Convergence, Convergence, $OLVERXX, Result.

Za dobljeno optimalno rešitev zabeležite:
- vrednost dobička,
- masne pretoke vseh tokov v kg/h in
- množinski pretok toka W v kmol/h.
- delež tokov R in W glede na vtok S3 (v rezultatih bloka RAZD).

b) Optimiranje z dodano omejitvijo

V tej varianti bomo vstavili omejitev, da pretok toka R ne sme preseči 300 kg/h. Shranite datoteko iz naloge 2a pod novim imenom. Ker masni pretok toka R še ni definiran kot spremenljivka, moramo to narediti sedaj:

Data, Model Analysis Tool, Constraint
New, C-1
Define, New

Ime spremenljivke:	R
Type:	Stream-Var
Stream:	R
Substream:	Mixed
Variable:	Mass-Flow

Spec

Specification:	R
Less than or equal to:	300
Tolerance:	0.1

Zdaj vključimo definirano omejitev v optimizacijski blok O-1:

Data, Model Analysis Tool, Optimization
O-1, Input
Objective & Constraint

C1 je med »available constraints«
Označimo C1
Pritisnemo znak: >
C1 se premakne med »selected constraints«

Problem je zdaj v celoti definiran in ga lahko optimiramo s pritiskom gumba »next«.

Za dobljeno optimalno rešitev z dodano omejitvijo zabeležite:

- vrednost dobička,
- masne pretoke vseh tokov v kg/h in
- množinski pretok toka W v kmol/h.
- delež tokov R in W glede na vtok S3 (v rezultatih bloka RAZD).

Primerjajte vrednosti namenske funkcije in preostalih spremenljivk, ki ste si jih zabeležili, za neoptimiran in optimiran proces brez omejitve in z omejitvijo.
Predvsem primerjajte pretok toka W v kmol/h in toka R v kg/h.
Kako vpliva dodana omejitev na dobiček?

6.3. Optimiranje svoje procesne sheme (SEMINARSKA NALOGA 1)

Procesno shemo, ki jo obravnavate pri predmetu Načrtovanje procesov, pripravite za optimiranje izbranih obratovalnih parametrov.
a) Formulirajte namensko funkcijo in izračunajte njeno vrednost za osnovni – neoptimiran proces. Nato poiščite nekaj manipulirnih spremenljivk, s katerimi bi lahko izboljšali vrednost namenske funkcije.
b) Pripravite PPT predstavitev, v kateri boste predstavili osnovno – neoptimirano varianto in nekaj optimiranih variant. Pri tem primerjajte najpomembnejše ekonomske kategorije (npr. prihodek, stroški pogonskih sredstev ipd.) in obratovalne parametre. Podajte diskusije in razlage ob posameznih variantah.

Naloga 7: Projektno planiranje (str. 94)

Projekt bomo izvedli z naslednjimi aktivnostmi:

Skupina 1:

aktivnost	trajanje v tednih	predhodna aktivnost
A	5	-
B	6	A
C	5	A
D	4	B
E	6	B, C
F	7	B
G	2	D, E
H	6	F, G

Skupina 2:

aktivnost	trajanje v dneh	predhodna aktivnost
A	32	-
B	21	-
C	30	-
D	45	A
E	26	A, B
F	28	C
G	20	E, F
H	14	D, G

Skupina 3:

aktivnost	trajanje v tednih	predhodna aktivnost
A	5	-
B	6	-
C	5	A
D	4	C
E	6	C
F	7	A, B
G	2	D
H	6	E, F
I	3	G, H

Skupina 4:

aktivnost	trajanje v tednih	predhodna aktivnost
A	3	-
B	4	A
C	5	A
D	2	B
E	5	B, C
F	3	D, E

Skupina 5:

aktivnost	trajanje v tednih	predhodna aktivnost
A	6	-
B	4	A
C	5	A
D	8	B, C
E	7	B
F	2	D
G	5	E, D
H	6	D
I	4	H
J	7	I, F, G

Skupina 6:

aktivnost	trajanje v tednih	predhodna aktivnost
A	3	-
B	4	A
C	2	A
D	5	B, C
E	7	D
F	3	C, E
G	5	E, F

Naloge:

A) Narišite omrežje aktivnosti in določite kritični pas.

B) Izdelajte tabelo zgodnjih in poznih časov. Izračunajte rezerve za nekritične aktivnosti.

C) Narišite Ganntov diagram.

D) Rešite problem z linearnim progamiranjem (GAMS).

E) Za vsako aktivnost predpostavite optimistični čas, a in pesimistični čas trajanja, b. Časi, ki so podani v zgornji tabeli, naj bodo najverjetnejši časi, m. Po metodi PERT določite kritični pas na osnovi srednjih vrednosti ter izračunajte μ in σ za celoten čas trajanja projekta.

F) posebej vsaka skupina:

Skupina 1:

Kakšna je verjetnost, da bo projekt končan prej kot v 23 tednih? Kaj pa prej kot v 30 tednih? V kakšnem času bomo končali projekt s 95 % verjetnostjo?

Skupina 2:

Kakšna je verjetnost, da bo projekt končan prej kot v 88 dneh? Kaj pa prej kot v 100 dneh? V kakšnem času bomo končali projekt s 95 % verjetnostjo?

Skupina 3:

Kakšna je verjetnost, da bo projekt končan prej kot v 22 tednih? Kaj pa prej kot v 30 tednih? V kakšnem času bomo končali projekt s 95 % verjetnostjo?

Skupina 4:

Kakšna je verjetnost, da bo projekt končan prej kot v 13 tednih? Kaj pa prej kot v 20 tednih? V kakšnem času bomo končali projekt s 95 % verjetnostjo?

Skupina 5:

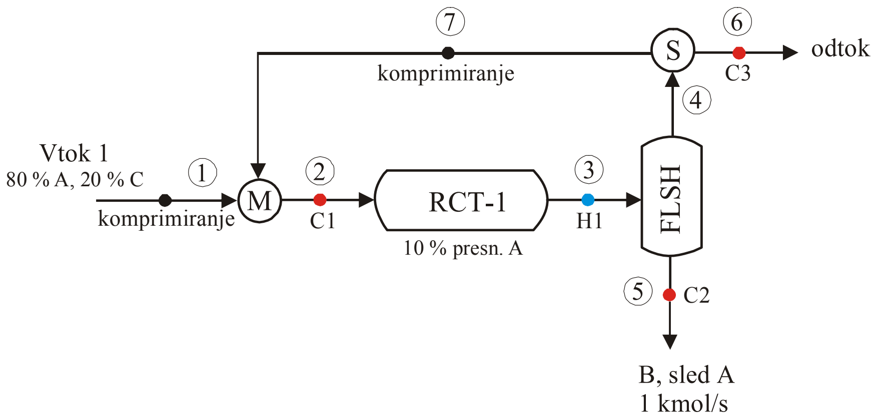
Kakšna je verjetnost, da bo projekt končan prej kot v 34 tednih? Kaj pa prej kot v 37 tednih? V kakšnem času bomo končali projekt s 95 % verjetnostjo?

Skupina 6:

Kakšna je verjetnost, da bo projekt končan prej kot v 25 tednih? Kaj pa prej kot v 30 tednih? V kakšnem času bomo končali projekt s 95 % verjetnostjo?

Naloga 8: NLP optimiranje procesa s simultano toplotno integracijo

Za proces, ki ga prikazuje slika, izvedite NLP optimiranje brez in s toplotno integracijo ter primerjajte rezultate, kot je navedeno na naslednji strani. Podatki so naslednji:



Slika 1: Procesna shema za NLP optimiranje

Podatki:

Komponente:

- A (reaktant)
- B (produkt)
- C (inertna snov)

Vtok 1:

x_A = 80 % A in x_C = 20 %

Reaktor (RCT-1):

A→B

10 % presnova reaktanta A

Razpenjalnik (FLSH):

Prehod v plinasti produkt (tok 4): 99 % A, 5 % B in 100 % C

Topli tokovi H1

Hladni tokovi C1,C2,C3

	T^{in}/K	T^{out}/K
H1	500	340
C1	350	450
C2	340	400
C3	340	500

Razdelilnik (S):

delež odtoka, $PF = F_6/ F_4$;

Drugi podatki:

Minimalna temperaturna razlika (HRAT)	10 K
Cena mrzlega pogonskega sredstva (CWP)	$2{\cdot}10^{-6}$ k$/MJ
Cena vročega pogonskega sredstva (STP)	$8{\cdot}10^{-6}$ k$/MJ
Konstantni pretok produkta (tok 5)	1 kmol/s
Cena produkta (PCOST)	0,004 k$/kmol
Cena surovine (FEED1COST)	0,001 k$/kmol

Namenska funkcija je maksimiranje dobička v k$/a:

Dobiček = prihodek - stroški surovin - stroški komprimiranja - stroški PS – letna naložba reaktorja

prihodek (k$/a) = $F_5 \cdot 0{,}004 \cdot 8500 \cdot 3600$
stroški surovin (k$/a) = $F_1 \cdot 0{,}001 \cdot 8500 \cdot 3600$
stroški komprimiranja (k$/a) = $100 \cdot F_1 + 50 \cdot F_7$
stroški pogonskih sredstev (k$/a) = $(Q_C \cdot 2 \cdot 10^{-6} + Q_H \cdot 8 \cdot 10^{-6}) \cdot 8500 \cdot 3600$
letna naložba reaktorja (k$/a) = $150 + 20 \cdot F_2$

Naloge:

A) Izvedite optimiranje procesa brez toplotne integracije
Za optimiranje brez TI uporabite datoteko ″NLP brez TI.gms″.

B) Izvedite optimiranje s simultano toplotno integracijo z modelom Duran in Grossmann
Za optimiranje s TI uporabite isto datoteko, le da:
   1. izbrišete enačbi QC1 in QH1 ter
   2. na mestu pred stavkom MODEL FLOW /ALL/; vključite datoteko toplotne integracije DURAN.gms

C) Primerjajte obe optimalni rešitvi in sicer dobiček, porabo pogonskih sredstev, stroške pogonskih sredstev, stroške surovin, celotno presnovo reaktanta A, obtok. Rezultate podajte v obliki tabele.

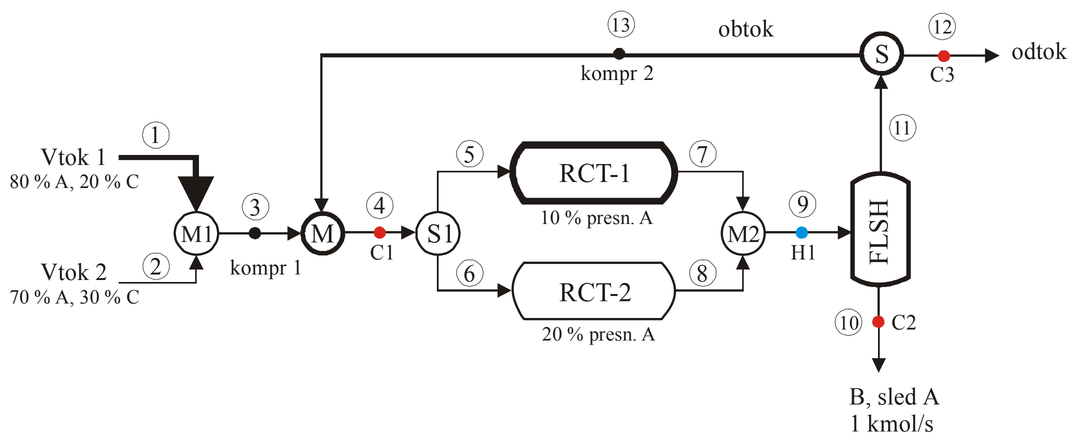
Celotna presnova reaktanta A je definirana kot:

$$\text{Celotna presnova} = \frac{\text{ves A}_{\text{vtok}} - \text{ves A}_{\text{iztok}}}{\text{ves A}_{\text{vtok}}}$$

D) Povečajte ceno vročega pogonskega sredstva in izvedite optimiranje brez in s TI. Rezultate podajte v tabeli enako kot v točki C. Kako vpliva cena vročega PS na rezultate? Komentirajte.

Naloga 9: MINLP optimiranje procesa s simultano toplotno integracijo

Proces, ki smo ga optimirali z NLP metodo v nalogi 8, bomo razširili v sintezni problem. Obstoječemu vtoku bomo dodali še drugi, alternativni vtok (vtok 2), ki je sicer cenejši od vtoka 1, vendar vsebuje manj reaktanta A (70 %) in več inertne snovi C (30 %). Obstoječemu reaktorju bomo dodali dodatni, alternativni reaktor (RCT-2), ki ima večjo presnovo (20 %) od reaktorja 1, vendar je zato tudi dražji.
Superstrukturo tako razširjenega procesa prikazuje slika 2, na kateri so obstoječe procesne enote prikazane z debelejšimi črtami. Naša naloga je, da izberemo tisti vtok in reaktor, ki izkazujeta najboljšo vrednost namenske funkcije, t.j. maksimalni dobiček.



Slika 2: Procesna shema za MINLP optimiranje

Podatki za novi vtok (vtok 2):
x_A = 70 % A in x_C = 30 %
Cena: 0,00075 k$/kmol

Podatki za novi reaktor (RCT-2):
$A \rightarrow B$
20 % presnova reaktanta A
Stalni strošek letne naložbe: 250 k$/a
Variabilni strošek letne naložbe: 30 (k$·s)/(kmol·a)

Mešalnika M1 in M2 sta "single-choice", kar pomeni, da v M1 izberemo samo enega od vtokov 1 in 2, v M2 pa izberemo le enega izmed vtokov 7 in 8.
Podobno velja za **razdelilnik S1**, v katerem izberemo le enega od iztokov 5 ali 6.

Namen naloge je, da najdemo strukturo procesa z največjim dobičkom. To pomeni, da zraven obratovalnih spremenljivk, ki smo jih optimirali v NLP izvedbi vaje, sedaj optimiramo še strukturo procesa, t.j. izbor med dvema alternativnima vtokoma in izbor med dvema alternativnima reaktorjema.
Zato moramo v osnovni NLP model uvesti štiri binarne spremenljivke za oba vtoka in oba reaktorja ter ga preurediti v MINLP model.

Izhodišče predstavlja osnovni model (NLP brez TI.gms), ki ga spremenimo po naslednjih korakih:

1. Spremenite set tokov: SET S /1*13/

2. Preštevilčite vse tokove v enačbah obstoječih procesnih enot in pri fiksirani vrednosti proizvodnje produkta.

3. Dodajte skalarje

Cena za vtok 2:	FEED2COST	0,00075
Fiksni del naložbe reaktorja 2:	RCT2FIX	250
Variabilni del naložbe reaktorja 2:	RCT2VAR	30

4. Vključite binarne spremenljivke

Y1 za vtok 1
Y2 za vtok 2
Y3 za reaktor 1
Y4 za reaktor 2

5. Dodajte enačbe:

Masne bilance komponent v vtoku 2 po analogiji za vtok 1:
FFEED2MBA
FFEED2MBB
FFEED2MBC
FFEED2UP (desno stran pomnožite z Y2)

Masne bilance komponent v reaktorju 2 po analogiji za reaktor 1:
RCT2MBA
RCT2MBB
RCT2MBC
RCT2INUP (desno stran pomnožite z Y4)

Masno bilanco komponent za single-choice mixer M1:
SCM1(COMP).. F('1',COMP)+ F('2',COMP) =E= F('3',COMP);

Masno bilanco komponent za single-choice mixer M2:
SCM2(COMP).. F('7',COMP)+ F('8',COMP) =E= F('9',COMP);

Masno bilanco komponent za single-choice splitter S1:
SCS(COMP).. F('4',COMP) =E= F('5',COMP) + F('6',COMP);

Logično relacijo za izbor enega od vtokov:
LOG1.. Y1 + Y2 =E= 1;

Logično relacijo za izbor enega od reaktorjev:
LOG2.. Y3 + Y4 =E= 1;

Modificirajte enačbi:
FFEED1UP (desno stran pomnožite z Y1)
RCT1INUP (desno stran pomnožite z Y3)

6. Modificirajte namensko funkcijo, tako da:

- dodate člen za vtok 2: –FT('2') *FEED2COST*8500*3600
- dodate člena za reaktor 2: –RCT2FIX *Y4 – RCT2VAR* FT('6')
- člen –RCT1FIX pomnožite z Y3.

Naloge:

A) Izvedite MINLP optimiranje brez TI. Podajte optimalno strukturo procesa in ostale spremenljivke (dobiček, poraba pogonskih sredstev, stroški pogonskih sredstev, stroški surovin, celotna presnova reaktanta A, obtok).

B) Izvedite MINLP optimiranje s simultano toplotno integracijo z modelom Duran in Grossmann na enak način, kot pri NLP optimiranju, t.j.:
   - izbrišete enačbi QC1 in QH1 ter
   - na mestu pred stavkom MODEL FLOW /ALL/; vključite datoteko toplotne integracije DURAN.gms

   Primerjajte rešitvi točk A) in B) glede na strukturo in ostale spremenljivke.

C) Pri varianti MINLP s TI (točka B) izvedite občutljivostno analizo za:
   - ceno vtoka 1 (FEED1COST), tako da ceno povečujete in ugotavljate vpliv na strukturo procesa ter ostale spremenljivke,
   - variabilni del naložbe reaktorja 2 (RCT2VAR), tako da ga povečujete in ugotovite, pri kateri vrednosti reaktor 2 ni več izbran v optimalno rešitev.

Naloga 10: Rešite primer 12.1. iz zapiskov predavanj

$$
\begin{aligned}
\min\ & Z = y_1 + 1.5y_2 + 0.5y_3 + x_1^2 + x_2^2 \\
\text{p.p. } & (x_1 - 2)^2 - x_2 \le 0 \\
& x_1 - 2y_1 \ge 0 \\
& x_1 - x_2 - 4(1 - y_2) \le 0 \\
& x_1 - (1 - y_1) \ge 0 \\
& x_2 - y_2 \ge 0 \\
& x_1 + x_2 \ge 3y_3 \\
& y_1 + y_2 + y_3 \ge 1 \\
& 0 \le x_1 \le 4, 0 \le x_2 \le 4 \\
& y_1, y_2, y_3 = 0,1
\end{aligned}
$$

Startna točka: $y_1 = y_2 = y_3 = 1$

REŠITEV:

1. NLP

Rešite osnovni problem s programom GAMS, tako da ga pretvorite v NLP problem s fiksiranjem vrednosti $y_1 = y_2 = y_3 = 1$:

$$
\begin{aligned}
\min\ & Z = 1 + 1.5 \cdot 1 + 0.5 \cdot 1 + x_1^2 + x_2^2 \\
\text{p.p. } & (x_1 - 2)^2 - x_2 \le 0 \\
& x_1 - 2 \cdot 1 \ge 0 \\
& x_1 - x_2 - 4(1 - 1) \le 0 \\
& x_1 - (1 - 1) \ge 0 \\
& x_2 - 1 \ge 0 \\
& x_1 + x_2 \ge 3 \cdot 1 \\
& 0 \le x_1 \le 4, 0 \le x_2 \le 4
\end{aligned}
$$

Rešitev: $x_1 = 2$, $x_2 = 2$, Z = 11

1. MILP

Linearizacija nelinearne namenske funkcije in prve pogojne neenačbe:

Nelinearni del namenske funkcije: V točki (2, 2):

$f = x_1^2 + x_2^2$ $\qquad \nabla f = [2x_1, 2x_2]$ $\qquad f = 2^2 + 2^2 = \underline{\underline{8}}$ $\qquad \nabla f = [2 \cdot 2,\ 2 \cdot 2] = \underline{\underline{[4,\ 4]}}$

Nelinearna neenačba:

$g_1 = (x_1 - 2)^2 - x_2$ $\qquad \nabla g_1 = [2x_1 - 4,\ -1]$ $\qquad g_1 = (2-2)^2 - 2 = \underline{\underline{-2}}$ $\qquad \nabla g_1 = [2 \cdot 2 - 4,\ -1] = \underline{\underline{[0, -1]}}$

$$\min Z = y_1 + 1{,}5y_2 + 0{,}5y_3 + \mu_{\text{OA}}$$
$$\text{za } f: 8 + [4,4]\begin{bmatrix} x_1 - 2 \\ x_2 - 2 \end{bmatrix} - \mu_{\text{OA}} \le 0$$
$$\text{za } g_1: -2 + [0,-1]\begin{bmatrix} x_1 - 2 \\ x_2 - 2 \end{bmatrix} \le 0$$
+ vse ostale linearne neenačbe

$\mu_{\text{OA}} \in R$

$\Rightarrow$

$$\min Z = y_1 + 1{,}5y_2 + 0{,}5y_3 + \mu_{\text{OA}}$$
$$\text{za } f: \quad 8 + 4(x_1 - 2) + 4(x_2 - 2) - \mu_{\text{OA}} \le 0$$
$$\underline{\underline{4x_1 + 4x_2 - 8 - \mu_{\text{OA}} \le 0}}$$
$$\text{za } g_1: -2 + 0(x_1 - 2) - 1(x_2 - 2) \le 0$$
$$\underline{\underline{-x_2 \le 0}}$$
+ vse ostale linearne neenačbe

$\mu_{\text{OA}} \in R$

Tako je končni MASTER problem 1. iteracije, ki ga rešimo s programom GAMS kot MILP problem:

$$\begin{aligned}
\min Z = y_1 + 1{,}5y_2 + 0{,}5y_3 + \mu_{\text{OA}} \\
4x_1 + 4x_2 - 8 - \mu_{\text{OA}} \le 0 \\
-x_2 \le 0 \\
x_1 - 2y_1 \ge 0 \\
x_1 - x_2 - 4(1 - y_2) \le 0 \\
x_1 - (1 - y_1) \ge 0 \\
x_2 - y_2 \ge 0 \\
x_1 + x_2 \ge 3y_3 \\
y_1 + y_2 + y_3 \ge 1 \\
y_1, y_2, y_3 = 0,1, \quad \mu_{\text{OA}} \in R \\
0 \le x_1 \le 4, \; 0 \le x_2 \le 4
\end{aligned}$$

Rešitev: $y_1 = 1$, $y_2 = 0$, $y_3 = 0$, Z = 1, $\mu_{\text{OA}} = 0$

Po enakem vzorcu ponovite še za 2. in 3. iteracijo.

Rešitev:

2. NLP: $x_1 = 2$, $x_2 = 0$, Z = 5
2. MILP: $y_1 = 0$, $y_2 = 1$, $y_3 = 0$, Z = 1,5, $\mu_{\text{OA}} = 0$

3. NLP: $x_1 = 1$, $x_2 = 1$, Z = 3,5
3. MILP: $y_1 = 0$, $y_2 = 1$, $y_3 = 0$, Z = 3,5, $\mu_{\text{OA}} = 2$

Univerza v Mariboru
Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

Optimiranje procesov

(Računske vaje za 1. in 2. kolokvij)

Zorka Novak Pintarič in Zdravko Kravanja

Maribor, 2008

1. KOLOKVIJ

1. naloga

Rešite naslednji primer s kompleksno metodo (2 iteraciji):

Min $3(x_2 - 4)^2 - 2x_1$

p.p.

$x_1^2 + x_2^2 - 10 \le 0$

$x_1^2 + (x_2 - 4)^2 - 9 \le 0$

$0 \le x_1, x_2 \le 4$

Naključna števila za generiranje točk:
0.3040, 0.7105, 0.1191, 0.4891, 0.0914, 0.1473

$\alpha = 1.3$, $\delta = 0.8$

$\varepsilon_1 = 0.2$, $\varepsilon_2 = 0.05$

2. naloga

Rešite grafično.

Max $3x_1 + 2x_2$

p.p.

$x_1 + 3x_2 \le 4$

$x_1 + x_2 \le 2$

$x_1, x_2 \ge 0$

3. naloga

Rešite z metodo simplex in grafično.

Max $x_1 + 3x_2$

p.p. $x_1 + 2x_2 \le 10$

$x_1 \le 5$

$x_2 \le 4$

$x_1, x_2 \ge 0$

4. naloga

Rešite z metodo simplex.

Max $2x_1 + x_2$

p.p. $x_1 - 0{,}5x_2 \ge 1$

$x_1 - x_2 \le 2$

$x_1 + x_2 \le 4$

$x_1, x_2 \ge 0$

5. naloga

Iz treh obratov oskrbujemo štiri tržišča. Razdalje, razpoložljive kapacitete obratov in potrebe posameznih tržišč so podane v tabeli. Drugi podatki so:

- Cena prevoza je 20 SIT/(t·km).
- Kazen za nedobavljeno blago na tržišču T4 je 40 SIT/t.
- Iz obrata 1 na tržišče 3 lahko prepeljemo največ 1000 t.
- Prevoz med obratom 3 in tržiščem 4 je prepovedan.

Zapišite matematični model transportnega problema.

	Razdalje (km)				
	T1	T2	T3	T4	Ponudba obratov (t)
O1	450	170	40	210	2000
O2	80	230	120	85	4000
O3	210	325	360	132	3000
Povpraševanje na tržiščih (t)	3000	2000	3000	2000	

6. naloga
Z metodo Lagrangejevih multiplikatorjev rešite naslednji problem:

$$\begin{aligned} &\min \ Z = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \\ &\text{p.p.} \quad x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 7 \\ &\qquad\ \ 2x_1 + 2x_2 + x_3 = 4,5 \end{aligned}$$

7. naloga
Z metodo Lagrangejevih multiplikatorjev rešite naslednji problem:

$$\begin{aligned} &\max \ Z = x_1 + x_2 \\ &\text{p.p.} \quad x_1^2 + x_2^2 = 1 \end{aligned}$$

8. naloga
Rešite naslednji omejeni nelinearni problem z iterativno strategijo aktivnih množic:

$$\begin{aligned} &\min \ Z = x_1^2 + x_2^2 \\ &\text{p.p.} \quad x_1 + x_2 \geq 1 \\ &\qquad\ \ x_1 + 2x_2 \leq 3 \end{aligned}$$

9. naloga
Rešite naslednji omejeni nelinearni problem z iterativno strategijo aktivnih množic:

$$\begin{aligned} &\min \ Z = 3x_1^2 + x_2^2 \\ &\text{p.p.} \quad 1 - x_1 \leq 0 \\ &\qquad\ \ x_1 - 3 \leq 0 \\ &\qquad\ \ x_2 - 5 \leq 0 \\ &\qquad\ \ 2x_1 - x_2 \leq 0 \end{aligned}$$

10. naloga
Narišite tabelo temperaturnih intervalov in toplotno kaskado ter zapišite pretovorjevalni model za minimalne stroške pogonskih sredstev za naslednje tokove:

	T^{in} /°C	T^{out} /°C	FC/ kW/K
H1	350	120	2
H2	310	100	1,5
C1	150	410	1
C2	90	180	3

Pogonska sredstva:
Hladilna voda: 20 °C – 35 °C, cena 20 \$/(kWa)
Vroče PS: 450 °C, cena 250 \$/(kWa)
$\Delta_{min}T = 10$ K

2. KOLOKVIJ

1. naloga

Določite gradient, Hessovo matriko in stacionarne točke dane funkcije. Klasificirajte stacionarne točke (min, max, prevoj). Ali je funkcija konveksna?

$$f(x) = 4x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 2x_1x_2 - 2x_1x_3 - 2x_1 + 8$$

2. naloga

Z metodo eliminacije področja določite interval, v katerem leži optimum, nato pa poiščite optimum z metodo zlatega reza (x_0=2, Δ=0.5):

$$\min\ f(x) = \left(10x^3 + 3x^2 + x + 5\right)^2$$

3. naloga

Z metodo eliminacije področja določite interval, v katerem leži optimum, nato pa poiščite optimum z metodo zlatega reza (x_0=2, Δ=0.5):

$$\min\ f(x) = x^4 - x^3 + 1$$

4. naloga

Poiščite minimum funkcije s Powel-ovo metodo (x_1=0, Δx=1, ε_1=0.0001):

$$\min\ f(x) = 2(x-3)^2 + e^{0.5x^2}$$

5. naloga

Poiščite minimum funkcije s Powel-ovo metodo (x_1=1, Δx=0,5, ε_1=0.0001):

$$\min\ f(x) = x^4 - x^3 + 1$$

6. naloga

Poiščite dimenzije kvadra s kvadratno osnovno ploskvijo in ploščino plašča 20 enot, tako da bo volumen kvadra največji. Za reševanje uporabite Newton-Rhapsonovo metodo s konvergenčnim kriterijem za odvod $\varepsilon \leq 0{,}001$.

7. naloga

Poiščite minimum funkcije z Newton-Rhapsonovo metodo (x_0 =1, ε = 0.0001):

$$\min\ f(x) = x^4 - x^3 + 1$$

8. naloga

Določite, ali je funkcija konveksna in poiščite njene optimalne rešitve:

$$f(x) = x_1^2 + 6x_1x_2 - 2x_2^3 + 24x_2$$

9. naloga

Preverite konveksnost naslednje funkcije:

$$f(x) = 4x_1^2 + 3x_2^3 + 5x_3 - x_1x_2 + x_1x_3 + 6x_2x_3 - 4$$

10. naloga

Poiščite minimum funkcije s Cauchy-jevo metodo in začetno točko $x^{(0)} = [1, 1]$.

$$f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 + 3)^2$$

11. naloga

Poiščite minimum funkcije s Cauchy-jevo metodo in začetno točko $x^{(0)} = [5, 10]$.

$$f(x) = 2(x_2 - 3x_1)^2 + (4 - x_1)^2$$

12. naloga

Poiščite minimum funkcije s Hooke-Jeveesovo metodo in začetno točko $x^{(0)} = [3, 0]$, $\Delta x = [1, 1]$ in α=2.

$$f(x) = 3(x_1 - 3)^2 + 2x_1x_2 + 4(x_2 - 1)^4$$

13. naloga

Poiščite minimum funkcije s Hooke-Jeveesovo metodo in začetno točko $x^{(0)} = [1, 1]$, $\Delta x = [1, 1]$ in α=2.

$$f(x) = (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2)^2 x_2^2 + (x_2 + 1)^2$$

14. naloga

Z Newton-Rhapsonovo metodo rešite naslednji dvodimenzijski problem:

$$\min\ f(x) = \frac{2}{3}x_1^3 + 3x_2^2 - 6x_1x_2 + 1{,}375x_1$$

z izhodiščno točko (2, 2) in konvergenčnim kriterijem za gradient $\varepsilon \leq 0{,}001$.

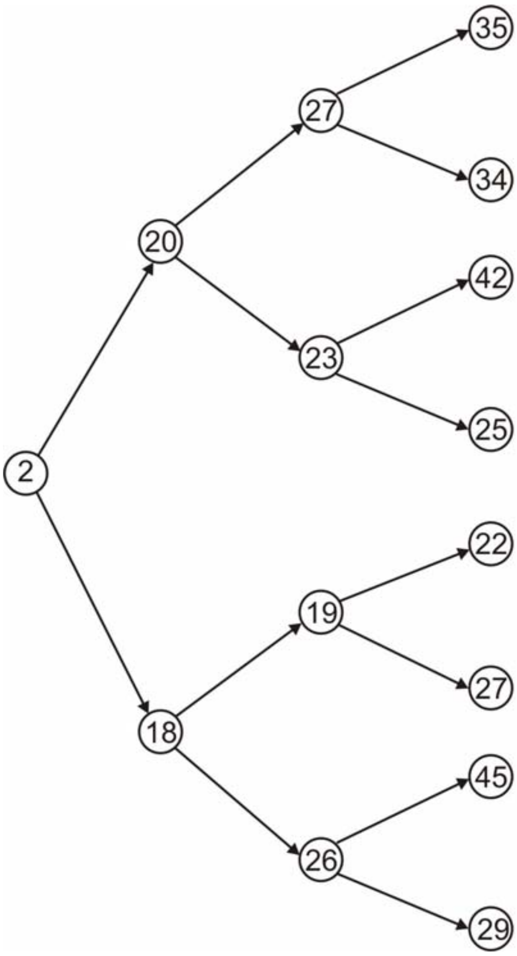
15. naloga

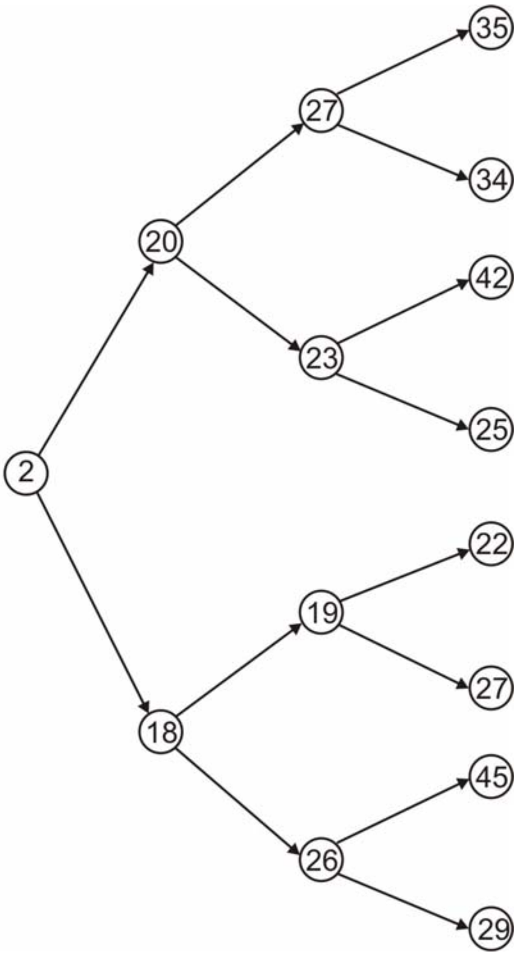
Z metodo kritičnega pasu (aktivnosti v vozliščih) določite minimalni čas za izvedbo projekta. Določite kritično pot in rezerve za nekritične dejavnosti.

Aktivnost	Trajanje (dnevi)	Neposredni predhodniki
A	5	-
B	7	A
C	3	A
D	16	C
E	4	C
F	10	B
G	12	F, D
H	8	G, E

16. naloga

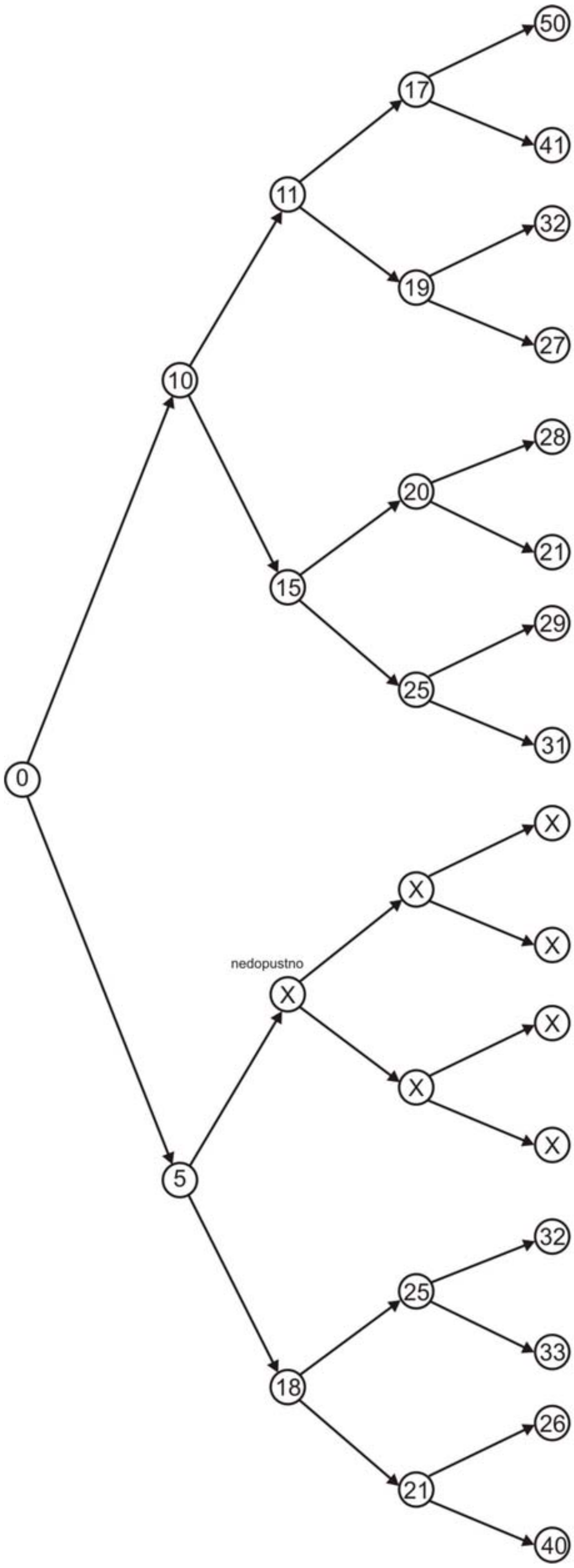
Z metodo vejanja in omejevanja v binarnem drevesu določi optimalno rešitev z uporabo pristopa »najprej v globino« in »najprej v širino«.

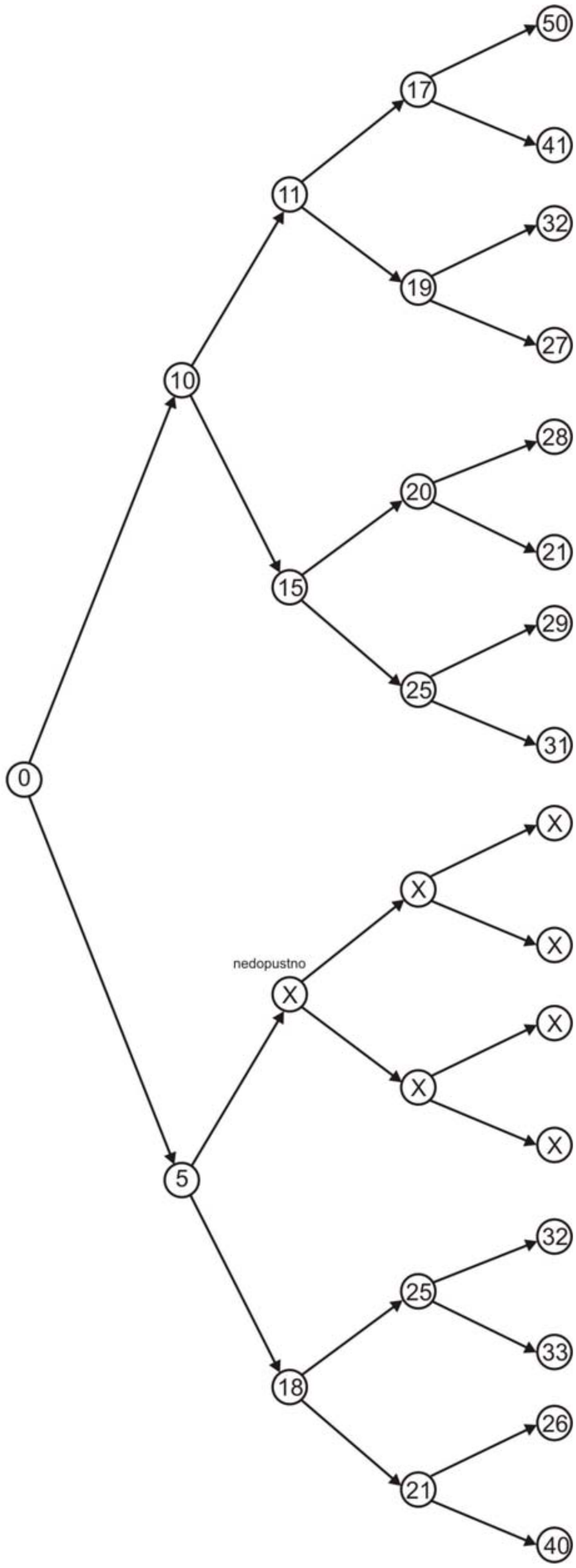




17. naloga

Z metodo vejanja in omejevanja v binarnem drevesu določi optimalno rešitev z uporabo pristopa »najprej v globino« in »najprej v širino«.





18. naloga
Zapiši MILP model za stroškovni model fiksne obremenitve (fixed charge cost model) za konkavno cenovno funkcijo:

$$C = 200 \cdot S^{0,65}$$

kjer je C cena v d.e. in S velikostna spremenljivka z mejami $50 \leq S \leq 100$.

19. naloga

Z metodo vejanja in omejevanja (branch & bound) smo rešili naslednji MILP problem:

$$\begin{aligned}
\min\ & Z = 2x_1 + 3x_2 + 2y_1 + 4y_2 - 3y_3 \\
\text{p.p.}\ & -x_1 - 2x_2 + y_1 + 3y_2 + 2y_3 \le 0 \\
& -5y_1 - 4y_2 - 3y_3 + x_1 \le -8 \\
& x_1, x_2 \ge 0,\ \ y_1, y_2, y_3 \in \{0,1\}
\end{aligned}$$

Za dano drevo kombinacij določi vrstni red izračunov po metodi ″v širino″ in po metodi ″v globino″.