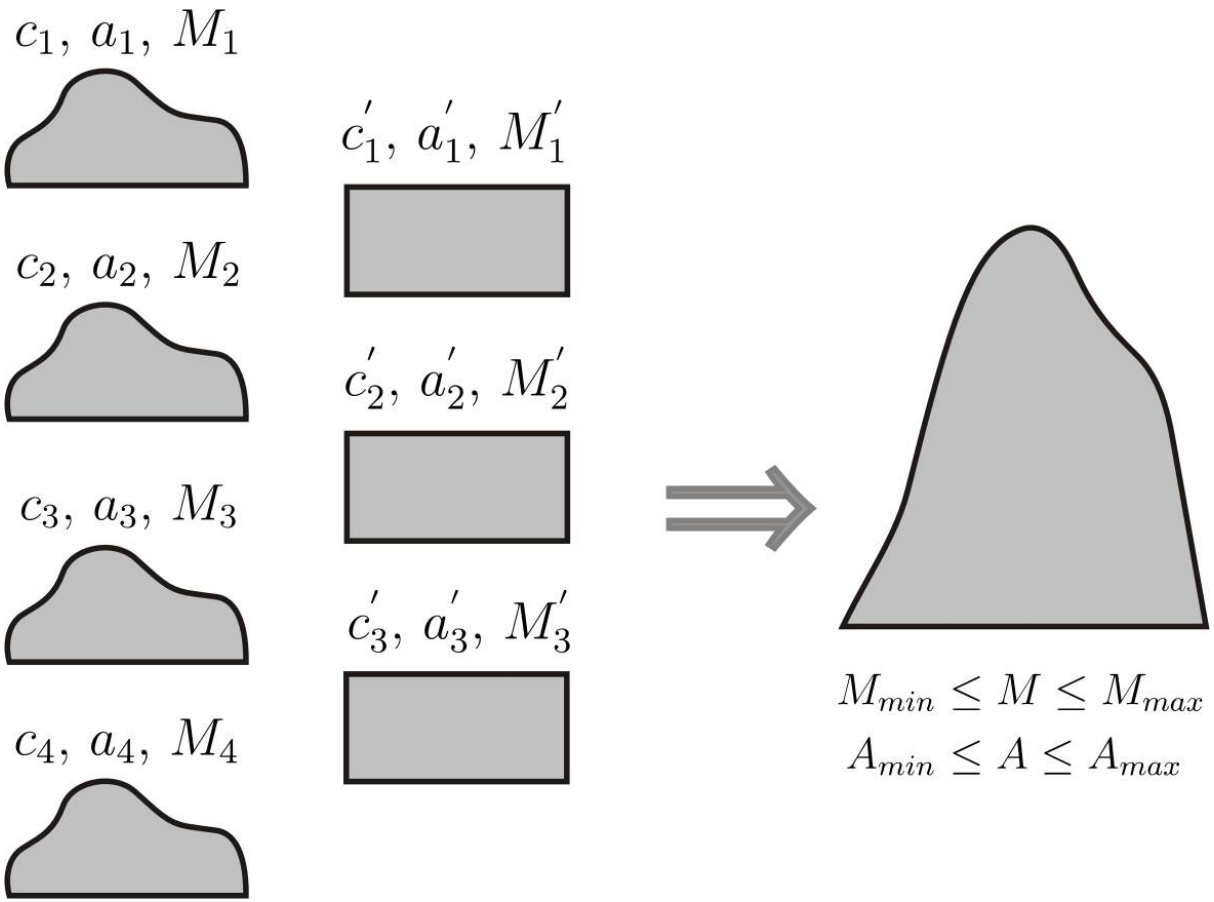
Statische Prozessoptimierung/ Prozessoptimierung 1

Kapitel 3:
Mixed-Integer Lineare Optimierung

Prof. Dr.-Ing. habil. Pu Li

Fachgebiet Prozessoptimierung

Beispiel: Produktionsplanung (Mischung)



Rohstoffe:

$c_i,$	$i = 1, \cdots, 4$	Preis des Stoffes (€/kg)
$a_i,$	$i = 1, \cdots, 4$	Konzentration der Komponente (kg/kg)
$M_i,$	$i = 1, \cdots, 4$	Menge von Rohstoff i (kg), variabel
$c_j^{'},$	$j = 1, \cdots, 3$	Preis (€/Stück)
$a_j^{'},$	$j = 1, \cdots, 3$	Konzentration der Komponente (kg/kg)
$M_j^{'},$	$j = 1, \cdots, 3$	Menge von Rohstoff j (kg), konstant

Produkt:

M	Produktmenge (kg)
A	Inhalt der Komponente im Produkt

Definition: $x_i = M_i, \; i = 1, \cdots, 4$

$$y_j = \begin{cases} 1 & \text{wenn } M_j^{'} \text{ ausgewählt} \\ 0 & \text{wenn } M_j^{'} \textit{ nicht} \text{ ausgewählt} \end{cases} \qquad j = 1, \cdots, 3$$

Ziel: Minimierung der Gesamtkosten unter den Restriktionen der Produktspezifikationen

$$\min_{x_i, y_i} \quad \sum_{i=1}^{4} c_i\, x_i + \sum_{j=1}^{3} c_j^{'}\, y_j$$

mit

$$\sum_{i=1}^{4} x_i + \sum_{j=1}^{3} M_j^{'}\, y_j \geq M_{min}$$

$$\sum_{i=1}^{4} x_i + \sum_{j=1}^{3} M_j^{'}\, y_j \leq M_{max}$$

$$\sum_{i=1}^{4} a_i\, x_i + \sum_{j=1}^{3} a_j^{'}\, M_j^{'}\, y_j \geq A_{min}$$

$$\sum_{i=1}^{4} a_i\, x_i + \sum_{j=1}^{3} a_j^{'}\, M_j^{'}\, y_j \leq A_{max}$$

$$0 \leq x_i \leq M_{i,\,max} \quad i = 1, \cdots, 4$$

$$y_j = \{0, 1\} \quad j = 1, \cdots, 3$$

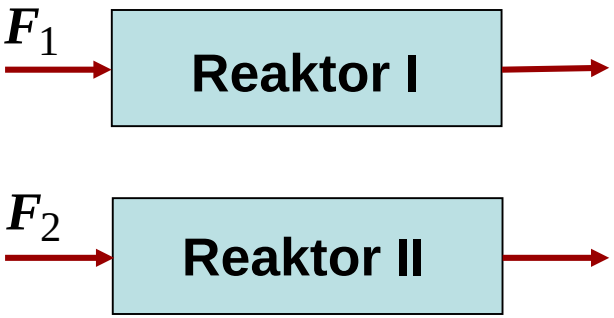
Ein Mixed-Integer (gemischt-ganzzahliges) lineares Programmierungsproblem.

Fachgebiet Prozessoptimierung

Beispiel: Design eines Reaktorsystems

Reaktionsform:	A → B
Ziel des Prozesses:	Produkt B, 10 t/h
Feedkosten:	5 T€/t

Zwei Typen von Reaktoren:



Reaktor I

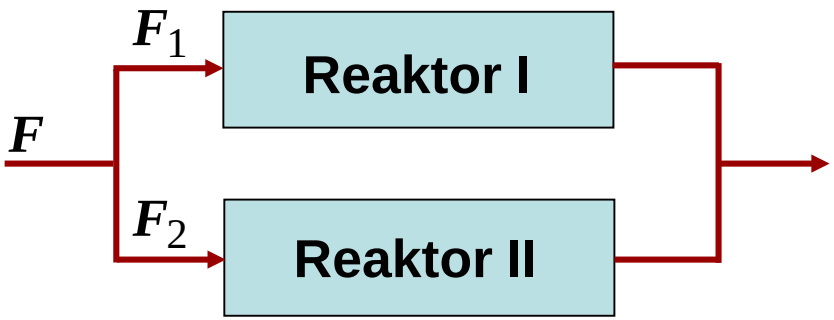
Umsatz des Feedstroms:	80 %
Betriebskosten (abhängig vom Feed):	1,4 T€/t
Einmalige Investition:	7,5 T€/t
Feedbeschränkung:	20 t/h

Reaktor II

Umsatz des Feedstroms:	67 %
Betriebskosten (abhängig vom Feed):	1,0 T€/t
Einmalige Investition:	5,5 T€/t
Feedbeschränkung:	30 t/h

Fragen:
- Reaktor I oder Reaktor II?
- Oder beide?
- Wie groß?

Die Superstruktur des Systems:



Definition:

$$y_i = \begin{cases} 1 & \text{wenn Reaktor } i \text{ ausgewählt} \\ 0 & \text{wenn Reaktor } i \textit{ nicht} \text{ ausgewählt} \end{cases} \qquad i = 1, 2$$

$$x_i = F_i, \;\; i = 1, 2$$

Feedkosten: $5\,x_1 + 5\,x_2$

Kosten vom Reaktor I: $7,5\,y_1 + 1,4\,x_1$

Kosten vom Reaktor II: $5,5\,y_2 + 1,0\,x_2$

wenn $y_i = 0$, dann $x_i = 0$, für $i = 1, 2$

d. h. $0 \leq x_i \leq F_{i,\,max}\,y_i$

dann $x_i - F_{i,\,max}\,y_i \leq 0$

Produktmenge: $0,8\,x_1 + 0,67\,x_2 = 10$

Logische Restriktion: mindestens ein Reaktor muss ausgewählt werden, d. h. $y_1 + y_2 \geq 1$

Formulierung des Optimierungsproblems:

$$\min_{x_i, y_i} \quad 7,5\, y_1 + 5,5\, y_2 + 6,4\, x_1 + 6,0\, x_2$$

mit

$$0,8\, x_1 + 0,67\, x_2 = 10$$

$$x_1 - 20\, y_1 \leq 0$$

$$x_2 - 30\, y_2 \leq 0$$

$$y_1 + y_2 \geq 1$$

$$x_i \geq 0 \quad y_i = \{0, 1\} \quad i = 1, 2$$

Es gibt 3 Möglichkeiten (Aufzählung, Enumeration):

$y_1 = 1,\ y_2 = 0$ Kosten = 87,5 T€/h

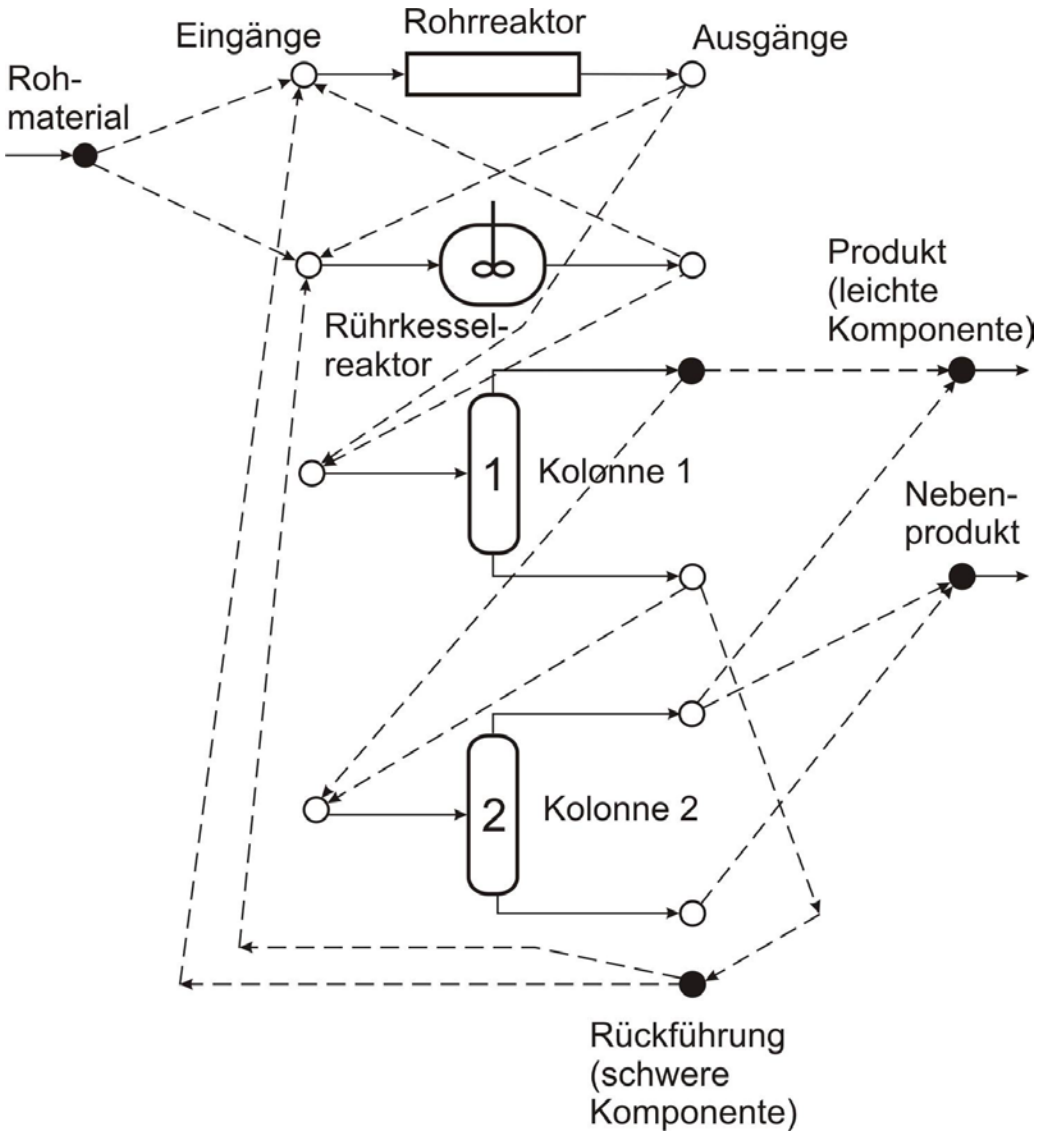
$y_1 = 0,\ y_2 = 1$ Kosten = 95,5 T€/h

$y_1 = 1,\ y_2 = 1$ Kosten = 93,0 T€/h

Die Lösung ist trivial: Reaktor I wird ausgewählt mit

$$F_1 = 12,5 \text{ t/h}$$

Beispiel: Ein Prozess ist zur Produktion eines Haupt- und Nebenprodukts auszulegen. Es gibt einen Rohrreaktor, einen Rührkesselreaktor und zwei Destillationskolonnen. Die Superstruktur ist wie folgt dargestellt:



Die maximale Anzahl der Möglichkeiten:

$$2^{16} = 65536$$

Modellierung

Beziehung zwischen logischer und algebraischer Darstellung für ganzzahlige Variablen

- Konjunktiv „**und**“: $A \wedge B$

  Für das Produkt muss Reaktor A und Reaktor B benutzt werden (beides).

  $$y_A \geq 1, \quad y_B \geq 1$$

- Disjunktiv „**oder**“: $A \vee B$

  Für das Produkt **kann** Reaktor A **oder** Reaktor B benutzt werden (mindestens eins).

  $$y_A + y_B \geq 1$$

- Implikation: $A \Rightarrow B$

  Wenn Reaktor A benutzt wird, **muss** Kolonne B benutzt werden (wenn Reaktor A **nicht** benutzt wird, **kann** Kolonne B benutzt werden), d. h.

  $$\neg A \vee B$$

  dann $1 - y_A + y_B \geq 1$ d. h. $y_B \geq y_A$

- Äquivalenz: $(A \Rightarrow B) \wedge (B \Rightarrow A)$

Wenn Kolonne A benutzt wird, **muss** Kolonne B benutzt werden **und** wenn Kolonne B benutzt wird, **muss** Kolonne A benutzt werden.

$$1 - y_A + y_B \geq 1 \quad \text{d. h.} \quad y_B \geq y_A$$
$$1 - y_B + y_A \geq 1 \quad \text{d. h.} \quad y_A \geq y_B$$

dann $$y_A = y_B$$

- „nur eins“

In Reaktor A und Reaktor B **muss nur eins** benutzt werden.

$$y_A + y_B = 1$$

- „mindestens eins“ $$y_A + y_B \geq 1$$

- „maximal eins“ $$y_A + y_B \leq 1$$

- „B wenn A“ $$y_A - y_B \leq 0$$

d. h. wenn $y_A = 1$, dann $y_b = 1$

$y_A = 0$, dann kann $y_B = 0$ oder $y_B = 1$

Formulierung logischer Beziehungen mit linearen Gleichungen oder Ungleichungen

(1) logische Form schreiben

(2) zur konjunktiven Form transformieren

(3) lineare Gleichungen oder Ungleichungen formulieren

Ein wichtiger Satz von DeMorgan:

$$\neg(A \vee B) = \neg A \wedge \neg B$$

und

$$\neg(A \wedge B) = \neg A \vee \neg B$$

$$(A \vee B) \wedge C = (A \wedge C) \vee (B \wedge C)$$

$$(A \wedge B) \vee C = (A \vee C) \wedge (B \vee C)$$

Beispiel: Formulierung der folgenden Beziehung mit linearen Ungleichungen:

$$(A \wedge B) \vee C \Rightarrow D \vee E$$

Umformung der Implikation:

$$\neg[(A \wedge B) \vee C] \vee (D \vee E)$$

von DeMorgan

$$[\neg(A \wedge B) \wedge \neg C] \vee (D \vee E)$$

und

$$[(\neg A \vee \neg B) \wedge \neg C] \vee (D \vee E)$$

dann $$[(\neg A \vee \neg B) \vee (D \vee E)] \wedge [\neg C \vee (D \vee E)]$$

d. h. $$Q_1 \wedge Q_2$$

mit
$$Q_1 = (\neg A \vee \neg B) \vee (D \vee E)$$
$$Q_2 = \neg C \vee (D \vee E)$$

Integer-Variablen einführen:

$y_1,\ y_2,\ y_3,\ y_4,\ y_5$ für A, B, C, D, E

bedeutet
$$Q_1 \quad \Leftrightarrow \quad 1 - y_1 + 1 - y_2 + y_4 + y_5 \geq 1$$
oder $$y_1 + y_2 - y_4 - y_5 \leq 1$$

und
$$Q_2 \quad \Leftrightarrow \quad 1 - y_3 + y_4 + y_5 \geq 1$$
oder $$y_3 - y_4 - y_5 \leq 0$$

Weil die originale Darstellung $Q_1 \wedge Q_2$ entspricht, ergeben sich die Ungleichungen:
$$y_1 + y_2 - y_4 - y_5 \leq 1$$
$$y_3 - y_4 - y_5 \leq 0$$

Modellierung von Mixed-Integer-Problemen

(auch für MINLP Probleme)

- Aktivierung bzw. Deaktivierung einer Variablen
  z. B. ein Strom F zu oder nicht zu einem Prozess
  $$F^L y \leq F \leq F^U y$$
- Aktivierung bzw. Relaxation einer Gleichung
  z. B. für eine Gleichung $g(x) = 0$, zwei Schlupfvariablen einführen: s^+, s^-
  damit
  $$\begin{aligned} g(x) + s^+ - s^- &= 0 & s^+ &\in [0, U] \\ s^+ + s^- &\leq U(1-y) & s^- &\in [0, U] \\ s^+ \geq 0, s^- &\geq 0, & s^+ - s^- &\in [-U, U] \end{aligned}$$
  wobei U ein großer Wert ist.
- Aktivierung bzw. Relaxation einer Ungleichung
  z. B. für eine Ungleichung $h(x) \leq 0$, dann
  $$\begin{aligned} h(x) &\leq U\,(1-y) \\ h(x) - U\,(1-y) &\leq 0 \end{aligned}$$
- Entweder-Oder-Restriktion
  z. B. entweder $h_1(x) \leq 0$ oder $h_2(x) \leq 0$, dann $h_1(x) - U\,(1-y) \leq 0$
  $$h_2(x) - U\;y \leq 0$$

- Logische Restriktionen mit Implikation

z. B. wenn $h_1(x) \leq 0$, dann $h_2(x) \geq 0$

$$h_1(x) \leq 0: \quad L_1 y_1 + \varepsilon \leq h_1(x) \leq U_1 (1 - y_1)$$
$$h_2(x) \geq 0: \quad L_2(1 - y_2) \leq h_2(x) \leq U_2 y_2 - \varepsilon$$

wobei

L_1, U_1 : untere bzw. obere Grenze auf $h_1(x)$
L_2, U_2 : untere bzw. obere Grenze auf $h_2(x)$
ε : ein kleiner positiver Wert

d. h. wenn $y_1 = 1$, dann $L_1 + \varepsilon \leq h_1(x) \leq 0$
wenn $y_1 = 0$, dann $\varepsilon \leq h_1(x) \leq U_1$

und wenn $y_2 = 1$, dann $0 \leq h_2(x) \leq U_2 - \varepsilon$
wenn $y_2 = 0$, dann $L_1 \leq h_2(x) \leq -\varepsilon$

Wir definieren:

$$A: \quad h_1(x) \leq 0 \qquad\qquad A \Rightarrow B$$

$$B: \quad h_2(x) \geq 0 \quad \text{das bedeutet} \quad \neg A \vee B$$

dann $\quad 1 - y_1 + y_2 \geq 1 \quad$ d. h. $\quad y_1 - y_2 \leq 0$

zusammenfassend

$$L_1 y_1 + \varepsilon \leq h_1(x) \leq U_1(1 - y_1)$$

$$L_2(1 - y_2) \leq h_2(x) \leq U_2\, y_2 - \varepsilon$$

$$y_1 - y_2 \leq 0$$

Beispiel:

$$\min_{x,y} \quad 2x + y$$

$$\text{mit} \quad x + y = 0$$

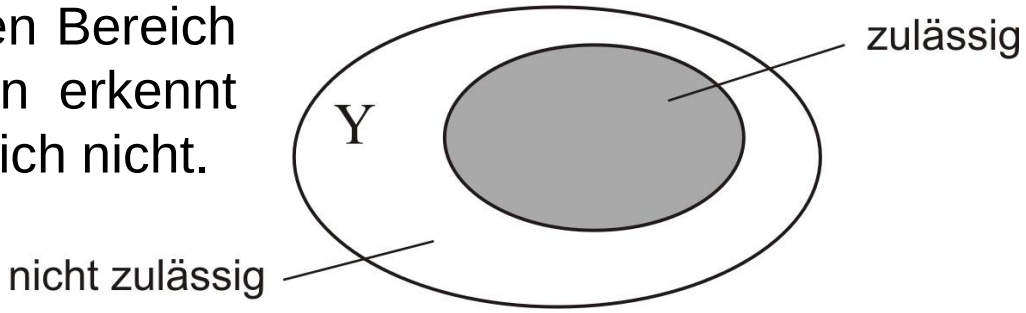
$$x - 2y \geq 0$$

$$-10 \leq x \leq 5$$

$$y = \{0, 1\}$$

- Wenn $y = 0$, dann $x = 0$, gibt es eine zulässige Lösung.
- Wenn $y = 1$, dann $x = -1$, gibt es keine zulässige Lösung.

Dies bedeutet, es gibt vielleicht die Kombinationen der Integer-Variablen, die nicht zulässig sind. Die Lösung soll daher in dem zulässigen Bereich gesucht werden. Aber man erkennt vorher den zulässigen Bereich nicht.



Mixed-Integer-Lineare Optimierung

Problemformulierung:

$$\min_{\mathbf{x},\mathbf{y}} \quad \mathbf{c}^T\mathbf{x} + \mathbf{d}^T\mathbf{y}$$

mit

$$\mathbf{A}\,\mathbf{x} + \mathbf{B}\,\mathbf{y} \leq \mathbf{b}$$

$$\mathbf{x} \geq 0$$

$$\mathbf{y} \in \{0,1\}^q$$

wobei

$\mathbf{x}$	Vektor von n kontinuierlichen Variablen
$\mathbf{y}$	Vektor von q $\{0,1\}$-Variablen
$\mathbf{c}, \mathbf{d}$	Vektor von n und q Parameter
$\mathbf{A}, \mathbf{B}$	Parametermatrix
$\mathbf{b}$	Vektor von m Ungleichungen

Beispiel:

$$\min_{x,\,y_1\,y_2,\,y_3} \quad 2x - 3y_1 - 2y_2 - 3y_3$$

mit

$$x + y_1 + y_2 + y_3 \geq 2$$

$$10\,x + 5\,y_1 + 3\,y_2 + 4\,y_3 \leq 10$$

$$x \geq 0$$

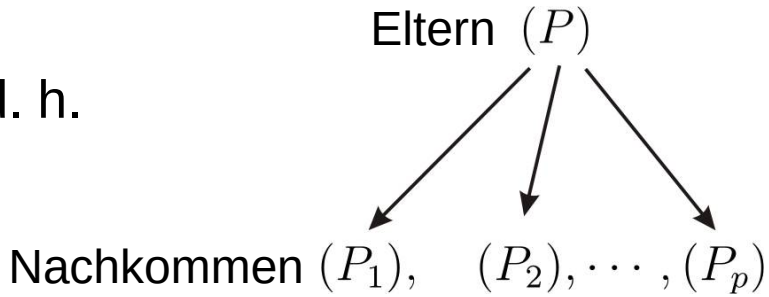
$$y_j \in \{0,1\} \qquad j = 1,2,3$$

Problemzerlegung

Das originale Problem (P) wird zu Subproblemen $(P_1), (P_2), \cdots, (P_p)$ zerlegt unter den Bedingungen:

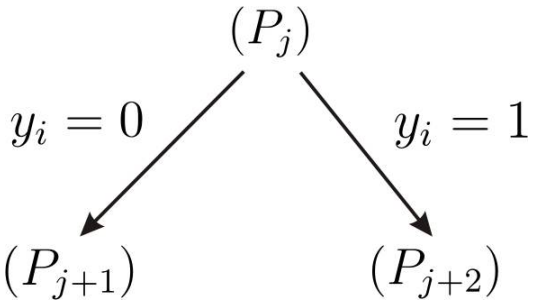
- Jede zulässige Lösung von (P) ist eine zulässige Lösung exakt eines Subproblems.
- Eine zulässige Lösung irgendeines $(P_j),\ j = 1, \cdots, p$ ist eine zulässige Lösung des (P).

d. h.



Die Zerlegungsmethode ist einmal eine Verzweigung einer Integer-Variablen zu 0 und 1.

Nachkommen n-te Generation



Nachkommen (n+1)-te Generation

Beim Beispiel:

$$\min_{x, y_1, y_2, y_3} \quad 2x - 3y_1 - 2y_2 - 3y_3$$

mit

$$x + y_1 + y_2 + y_3 \geq 2$$

$$10\,x + 5\,y_1 + 3\,y_2 + 4\,y_3 \leq 10$$

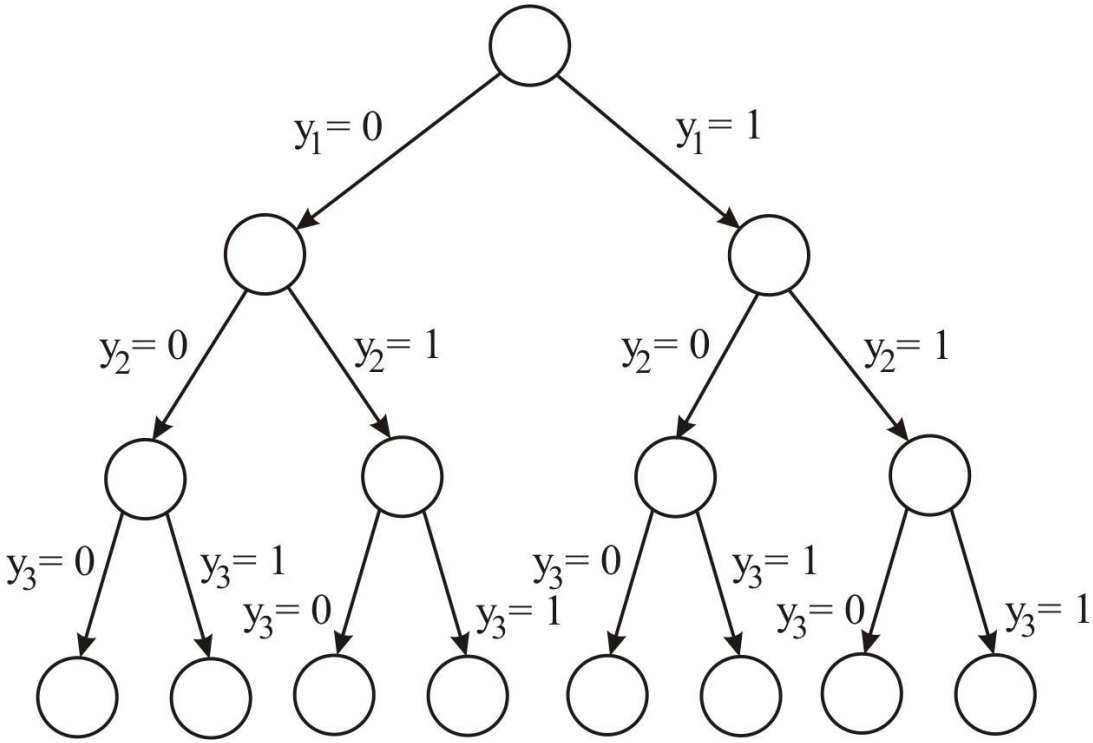
$$x \geq 0$$

$$y_j \in \{0, 1\} \qquad j = 1, 2, 3$$

Die Variablen

$y_j \in \{0, 1\} \quad j = 1, 2, 3$

werden nacheinander verzweigt. Es wird mit einem Familienbaum dargestellt.



Relaxation des Problems

Definition der Relaxation:

Originalproblem (P) $\Leftrightarrow$ relaxiertes Problem (RP)

Es gibt:

Lösungen des (P) $\subseteq$ Lösungen des (RP)

d. h.

- Wenn (RP) keine Lösung hat, hat (P) keine Lösung.
- Die Lösungen der beiden Probleme haben die Beziehung:

$$f^*(RP) \leq f^*(P)$$

  es bedeutet, $f^*(RP)$ ist immer die untere Schranke des $f^*(P)$.
- Wenn an einer Lösung des (RP) die y-Variablen ganzzahlig sind, sind sie eine Lösung des (P).

Die Methode der Relaxation ist der Ersatz der Integer-Variablen durch

$$0 \leq y \leq 1$$

d. h.

Lösung des (P): yVariablen ganzzahlig

Lösung des (RP): yVariablen nicht unbedingt ganzzahlig

$$\min_{x,\,y_1,\,y_2,\,y_3} \quad 2x - 3y_1 - 2y_2 - 3y_3$$

mit

$$x + y_1 + y_2 + y_3 \geq 2$$
$$10\,x + 5\,y_1 + 3\,y_2 + 4\,y_3 \leq 10$$
$$x \geq 0,\ \ 0 \leq y_j \leq 1 \quad j = 1, 2, 3$$

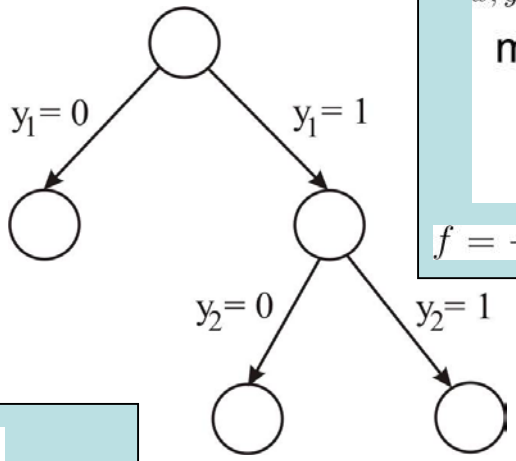
$f = -6.8,\ x = 0,\ y_1 = 0.6,\ y_2 = 1,\ y_3 = 1$

$$\min_{x,\,y_2,\,y_3} \quad 2x - 2y_2 - 3y_3$$

mit

$$x + y_2 + y_3 \geq 2$$
$$10\,x + 3\,y_2 + 4\,y_3 \leq 10$$
$$x \geq 0,\ \ 0 \leq y_j \leq 1 \quad j = 2, 3$$

$f = -5,\ x = 0,\ y_1 = 0,\ y_2 = 1,\ y_3 = 1$



$$\min_{x,\,y_2,\,y_3} \quad 2x - 3 - 2y_2 - 3y_3$$

mit

$$x + y_2 + y_3 \geq 1$$
$$10\,x + 3\,y_2 + 4\,y_3 \leq 5$$
$$x \geq 0,\ \ 0 \leq y_j \leq 1 \quad j = 2, 3$$

$f = -6.67,\ x = 0,\ y_1 = 1,\ y_2 = 0.333,\ y_3 = 1$

$$\min_{x,\,y_3} \quad 2x - 3 - 3y_3$$

mit

$$x + y_3 \geq 1$$
$$10\,x + 4\,y_3 \leq 5$$
$$x \geq 0,\ \ 0 \leq y_3 \leq 1$$

$f = -6,\ x = 0,\ y_1 = 1,\ y_2 = 0,\ y_3 = 1$

$$\min_{x,\,y_3} \quad 2x - 5 - 3y_3$$

mit

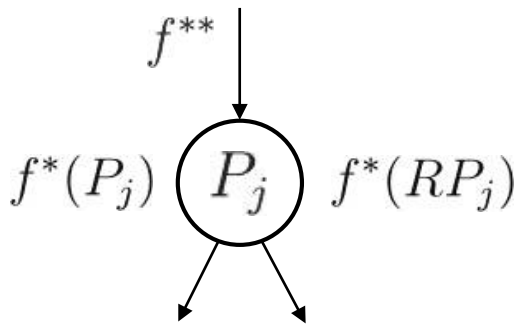
$$x + y_3 \geq 0$$
$$10\,x + 4\,y_3 \leq 2$$
$$x \geq 0,\ \ 0 \leq y_3 \leq 1$$

$f = -6.5,\ x = 0,\ y_1 = 1,\ y_2 = 1,\ y_3 = 0.5$

Ausloten (Fathoming)

Soll der betrachtete Knoten des Subproblems (P_j) deaktiviert (nicht weiter verzweigt) werden?

ein Subproblem
oder ein Knoten



- Wenn klar ist, dass es keine bessere als die bisher beste Lösung (Wert der Zielfunktion f^{**}) gibt.
- Wenn eine optimale Lösung $f^*(P_j)$ im zulässigen Bereich gefunden wurde.

Drei Kriterien zum Ausloten (Deaktivierung):

- Wenn das relaxierte Problem (RP_j) keine zulässige Lösung hat, hat (P_j) keine zulässige Lösung und dann ist (P_j) ausgelotet (deaktiviert).
- Wenn $f^*(RP_j) \geq f^{**}$, wird die Lösung nicht verbessert, dann ist ausgelotet.
- Wenn an der Lösung des (RP_j) die y-Variablen ganzzahlig sind, muss sie eine Lösung des (P_j) sein und dann ist (P_j) ausgelotet.

Algorithmus „Branch-and-Bound“

Step 1: Relaxation des Problems und Lösung mit LP (die untere Schranke)

- Wenn an der Lösung die y-Variablen ganzzahlig sind, STOP.
- Sonst zwei neue Subprobleme durch Branch einer Variablen erzeugen (Verzweigung)

Step 2: Deaktivierung eines Knotens, wenn

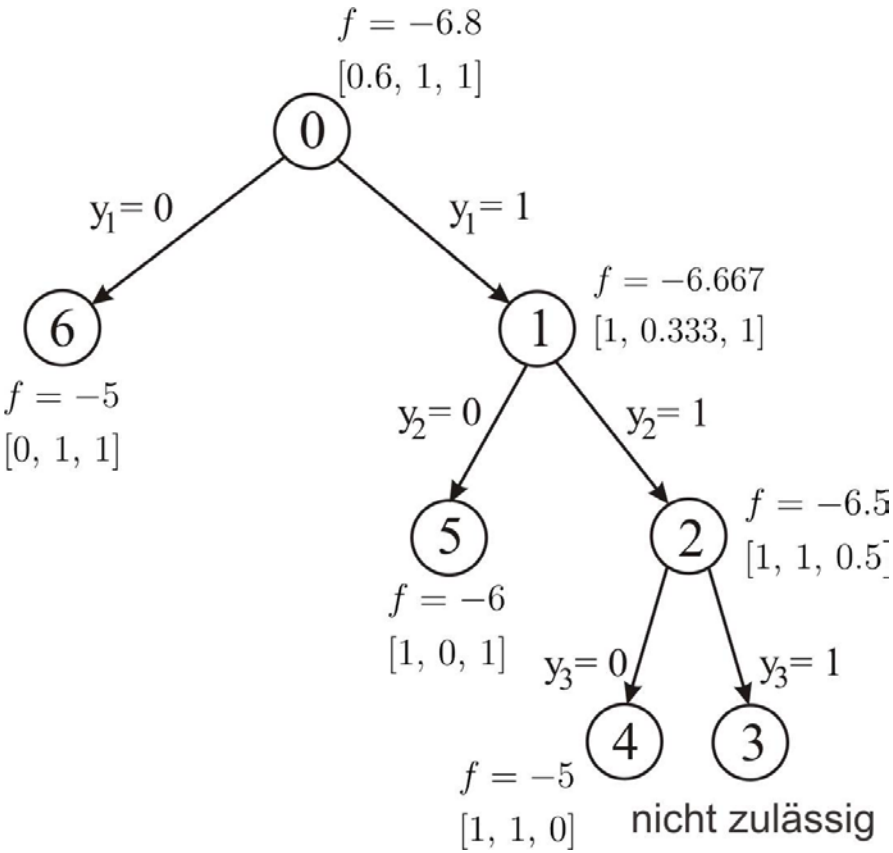
- Alle Variablen sind ganzzahlig .
- Das Subproblem nicht zulässig ist.
- An der Lösung gilt: $f^*(RP_j) \geq f^{**}$

Step 3: Verzweigung eines Subproblems an einem aktiven Knoten

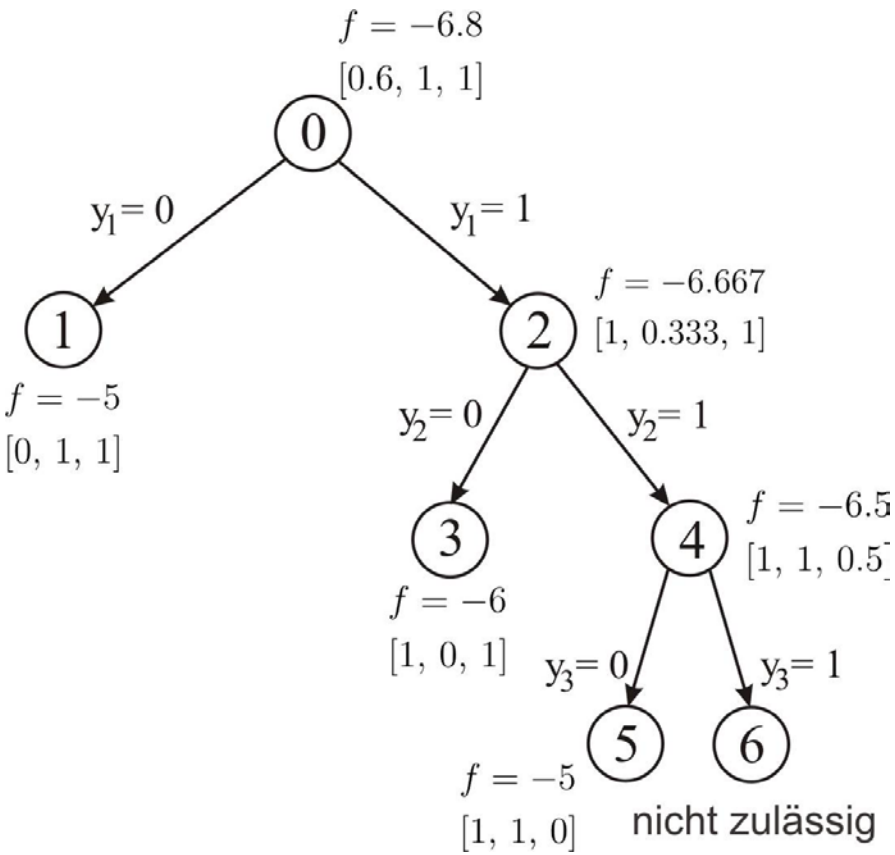
- Tiefensuche (depth-first search)
- Breitensuche (breadth-first search)

Step 4: Traversierung (backtracking), wenn die Nachwuchsknoten deaktiviert sind

Tiefensuche



Breitensuche



Beispiel: Rucksack (Transport-Problem)

Volumen des Rucksacks:	14 m^3
Volumen der Gegenstände:	5, 7, 4, 3 m^3
Wert der Gegenstände:	8, 11, 6, 4 T€

Ziel: Maximaler Wert im Rucksack
Frage: Welche Gegenstände sollen in den Rucksack?

$$\max_{y_1,\cdots,y_4} \quad 8\,y_1 + 11\,y_2 + 6\,y_3 + 4\,y_4$$

$$\text{mit} \quad 5\,y_1 + 7\,y_2 + 4\,y_3 + 3\,y_4 \leq 14$$

$$y_j \in \{0,1\} \qquad j = 1,\cdots,4$$

- **Relaxation des Problems zu einem LP Problem**

  Lösung: $f = 22,\ y_1 = 1,\ y_2 = 1,\ y_3 = 0.5,\ y_4 = 0$

- **Branch** $y_3 = 0$ und $y_3 = 1$

  Lösung: $y_3 = 0:\ f = 21.65,\ y_1 = 1,\ y_2 = 1,\ y_4 = 0.667$

  $y_3 = 1:\ f = 21.85,\ y_1 = 1,\ y_2 = 0.714,\ y_4 = 0$

- **Branch** $y_2 = 0$ und $y_2 = 1$

  Lösung: $y_3 = 1,\ y_2 = 0:\ f = 18,\ y_1 = 1,\ y_4 = 1,$ **Lösung**

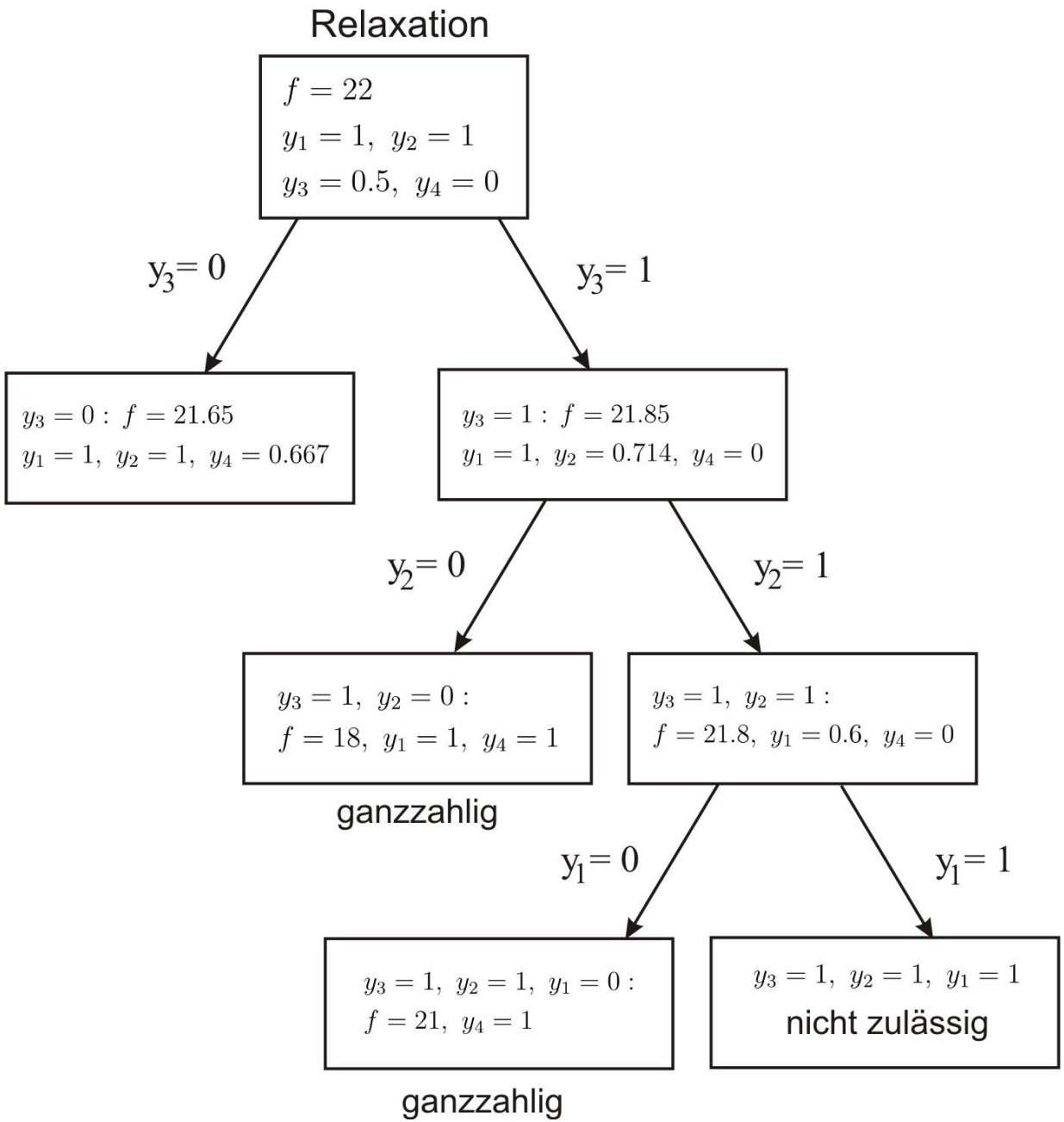
  $y_3 = 1,\ y_2 = 1:\ f = 21.8,\ y_1 = 0.6,\ y_4 = 0$

- **Branch** $y_1 = 0$ und $y_1 = 1$

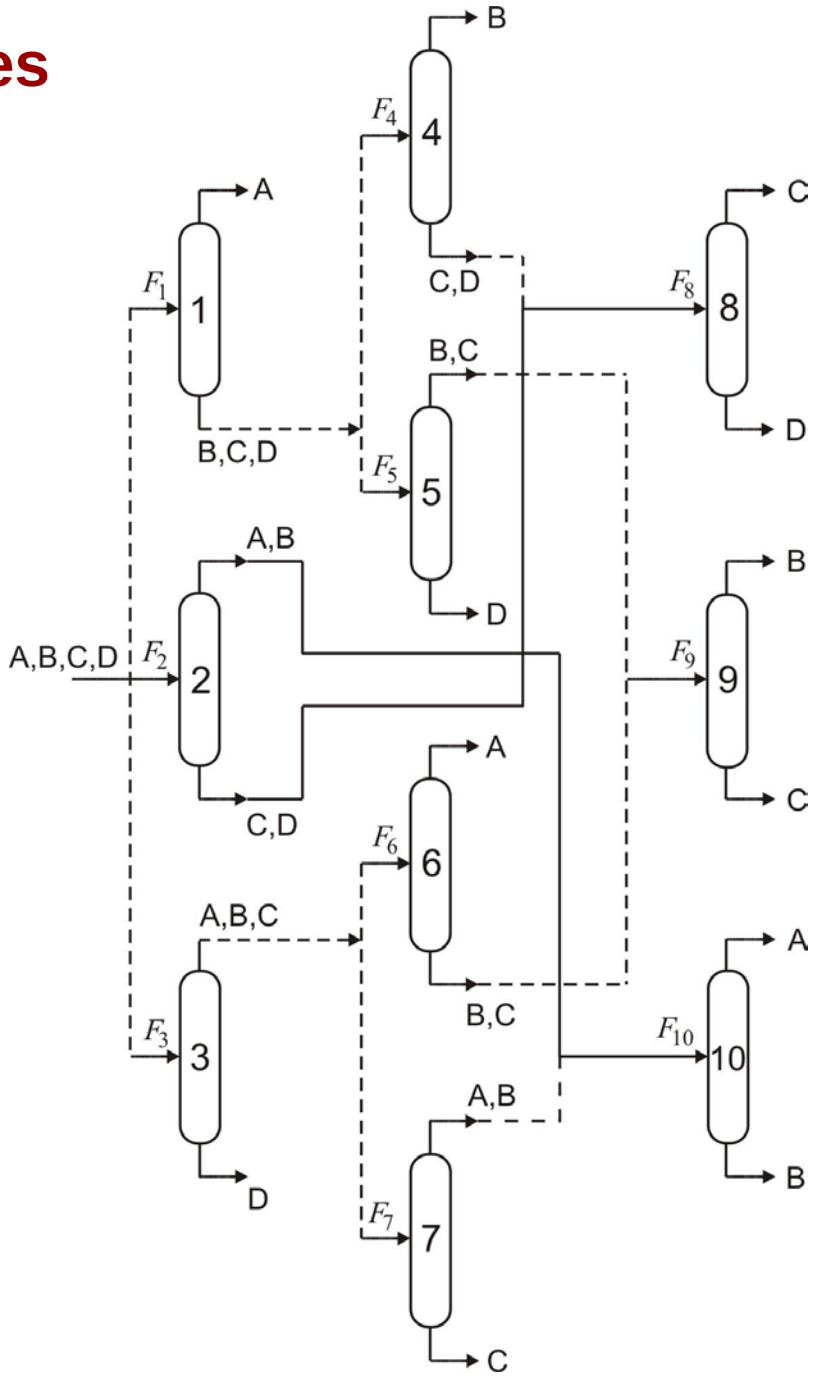
  Lösung: $y_3 = 1,\ y_2 = 1,\ y_1 = 0: f = 21,\ y_4 = 1,$ **Lösung**

  $y_3 = 1,\ y_2 = 1,\ y_1 = 1,$ **nicht zulässig**

Baumdarstellung des Branch-and-Bound



Strukturoptimierung eines Trennprozesses



Feedstrom: $F_{TOT} = 1000$ kmol/h

Zusammensetzung (Molfraktion): A 0.15 C 0.35
B 0.3 D 0.2

Ökonomische Daten und Wärmeleistungskoeffizienten:

k	Separator	α_k, fest (10^3 \$/y)	β_k, variabel (10^3 \$h/kmol y)	Wärmeleistungskoeffizienten K_k (10^6 kJ/kmol)
1	A/BCD	145	0.42	0.028
2	AB/CD	52	0.12	0.042
3	ABC/D	76	0.25	0.054
6	A/BC	125	0.78	0.024
7	AB/C	44	0.11	0.039
4	B/CD	38	0.14	0.040
5	BC/D	66	0.21	0.047
10	A/B	112	0.39	0.022
9	B/C	37	0.08	0.036
8	C/D	58	0.19	0.044

Kosten der Hilfsstoffe: Kühlwasser $C_C = 1.3\ (10^3\,\$/10^6\,\text{kJ/y})$

Dampf $C_H = 34\ (10^3\,\$/10^6\,\text{kJ/y})$

Analyse der Gesamtkosten einer Kolonne *k*

- Investitionskosten (T€/a) $\alpha_k\, y_k$
- Betriebskosten (T€/a) $\beta_k\, F_k$
- Kosten der Kühl- und Heizleistung (T€/a)

$$(c_c + c_H)Q_k = (c_c + c_H)K_k F_k$$

wobei c_c, c_H die Preise der Kühl- und Heizmittel (T€/kJ)

Gesamtkosten einer Kolonne:

$$\alpha_k\, y_k + \beta_k\, F_k + (c_c + c_H)K_k F_k$$

Gesamtkosten der Superstruktur:

$$\min_{y_k, F_k} \sum_{k=1}^{10} [\alpha_k\, y_k + \beta_k\, F_k + (c_c + c_H)K_k F_k]$$

Die Optimierungsvariablen: $y_k, F_k \qquad k = 1, \cdots, 10$

$$y_k = \{0, 1\}, \;\; F_k \geq 0$$

Gleichungsnebenbedingungen:

- Totalfeedstrom (kmol/h)

$$F_1 + F_2 + F_3 = 1000$$

- Zwischenstrom (BCD)

$$F_4 + F_5 = \frac{x_B + x_C + x_D}{x_A + x_B + x_C + x_D} F_1$$

- Zwischenstrom (ABC)

$$F_6 + F_7 = \frac{x_A + x_B + x_C}{x_A + x_B + x_C + x_D} F_3$$

- Zwischenstrom (AB)

$$F_{10} = \frac{x_A + x_B}{x_A + x_B + x_C + x_D} F_2 + \frac{x_A + x_B}{x_A + x_B + x_C} F_7$$

- Zwischenstrom (BC)

$$F_9 = \frac{x_B + x_C}{x_B + x_C + x_D} F_5 + \frac{x_B + x_C}{x_A + x_B + x_C} F_6$$

- Zwischenstrom (CD)

$$F_8 = \frac{x_C + x_D}{x_B + x_C + x_D} F_4 + \frac{x_C + x_D}{x_A + x_B + x_C + x_D} F_2$$

- Wärmezufuhr bzw. Wärmeabfuhr

$$Q_k = K_k F_k \qquad k = 1, \cdots, 10$$

Ungleichungsnebenbedingungen:

- Beschränkung der Ströme

$$F_k \leq 1000\, y_k \qquad k = 1, \cdots, 10$$

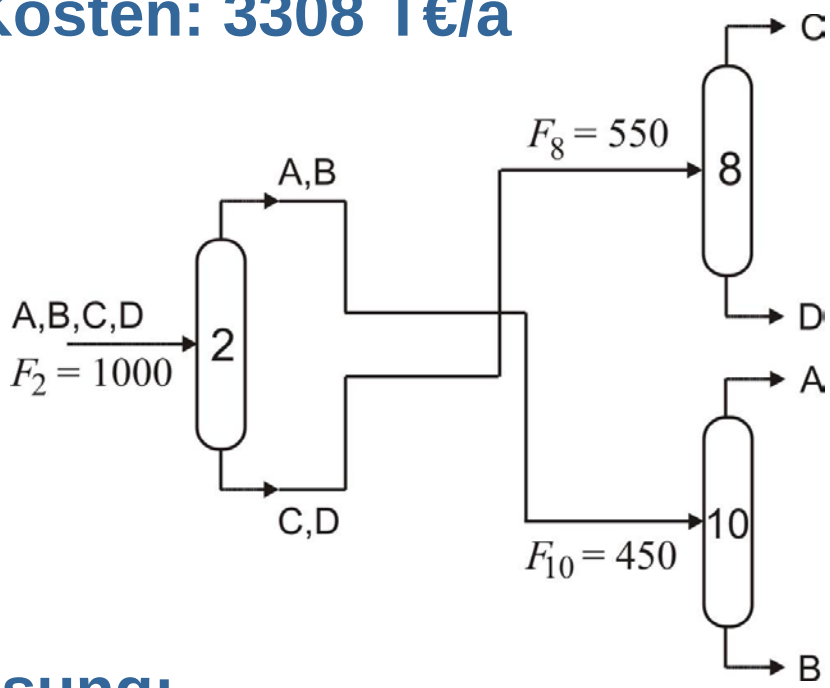
Parameter:

$$\alpha_k,\ \beta_k,\ K_k \qquad k = 1, \cdots, 10$$

$$c_c,\ c_H,\ x_A,\ x_B,\ x_C,\ x_D$$

Die optimale Lösung: Kosten: 3308 T€/a

$$y_2 = y_8 = y_{10} = 1$$



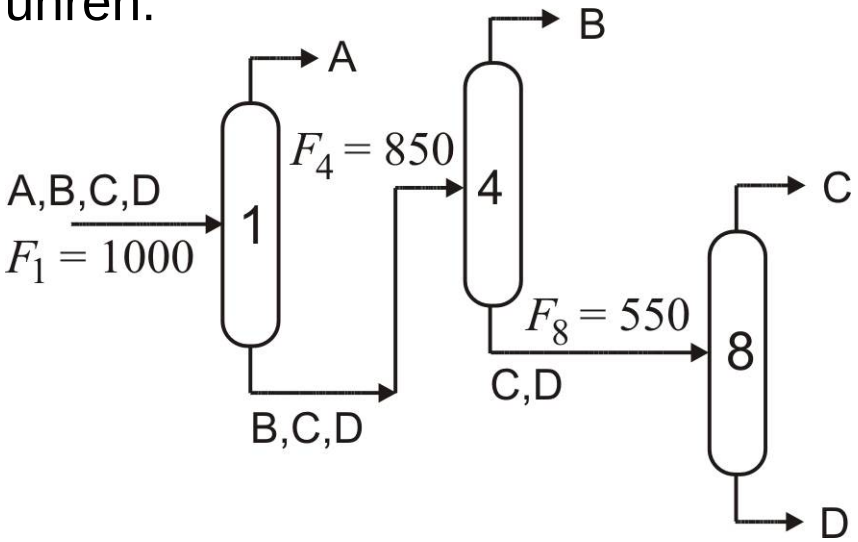
Die zweite optimale Lösung:

Eine weitere Restriktion einführen:

$$y_2 + y_8 + y_{10} \leq 2$$

dann ist die Lösung:
Kosten 3927 T€/a

$$y_1 = y_4 = y_8 = 1$$



Fachgebiet Prozessoptimierung

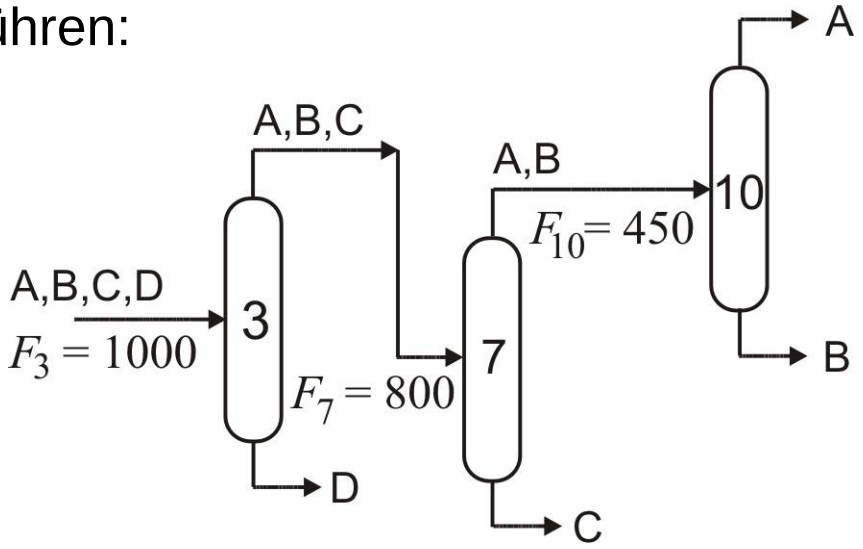
Die dritte optimale Lösung:

Eine weitere Restriktion einführen:

$$y_1 + y_4 + y_8 \leq 2$$

dann ist die Lösung:
Kosten 4102 T€/a

$$y_3 = y_7 = y_{10} = 1$$



Optimal-Molekular-Design für ein Polymer

Gewünschte Eigenschaften:

Wasserinhalt:	W^0= 0,005 (g H_20/g Polymer)
Dichte:	ρ^0 = 1,5 (g/cm^3)
Glasübergangstemperatur:	T_g^0 = 383 (K)

Gruppen von chemischen Elementen:

-CH_2-, -CO-, -COO-, -O-, -CONH-,
-CHOH-, -CHCl-

Gruppenbeitragsmodell von Van Krevelen:

$$W = \frac{\sum_{i=1}^{N} 18 H_i n_i}{\sum_{i=1}^{N} M_i n_i}, \qquad \rho = \frac{\sum_{i=1}^{N} Y_i n_i}{\sum_{i=1}^{N} M_i n_i}, \qquad T_g = \frac{\sum_{i=1}^{N} M_i n_i}{\sum_{i=1}^{N} V_i n_i}$$

Fachgebiet Prozessoptimierung

Parameter in den Korrelationen der Eigenschaften

i	Gruppe	Y_i	V_i	H_i	M_i
1	$-CH_2-$	2700	15,85	$3{,}3\ 10^{-5}$	14
2	-CO-	27700	13,40	0,110	28
3	-COO-	8000	23,00	0,075	44
4	-O-	4000	10,00	0,020	16
5	-CONH-	12000	24,90	0,750	43
6	-CHOH-	13000	19,15	0,750	30
7	-CHCl-	20000	29,35	0,015	48,5

Problemformulierung:

Die maximale relative Abweichung:

$$s = \max_{n_i} \left| \frac{E_j - E_j^0}{E_j^0} \right|, \; j = 1, 2, 3 \qquad \text{wobei} \quad E_j = \frac{\sum_{i=1}^{N} A_{i,j}\, n_i}{\sum_{i=1}^{N} B_{i,j}\, n_i}$$

Ziel der Optimierung (Zielfunktion): $min \;\; s$

Entscheidungsvariablen: $n_i, \quad i = 1, \cdots, N$

Beschränkungen: $n_i \in \{0, 1, 2, 3\}$

$$s_{min} \leq s \leq s_{max}$$

Weil $s \geq \left| \frac{E_j - E_j^0}{E_j^0} \right|$, d. h. $sE_j^0 \geq \left| E_j - E_j^0 \right|$, dann

$-sE_j^0 \leq E_j - E_j^0 \leq sE_j^0$, also

$$-sE_j^0 \leq \frac{\sum_{i=1}^{N} A_{i,j}\, n_i}{\sum_{i=1}^{N} B_{i,j}\, n_i} - E_j^0 \leq sE_j^0$$

Fachgebiet Prozessoptimierung

Es folgt
$$\sum_{i=1}^{N} A_{i,j}\, n_i - E_j^0 \sum_{i=1}^{N} B_{i,j}\, n_i \leq E_j^0 \sum_{i=1}^{N} B_{i,j}\, n_i\, s$$
$$- E_j^0 \sum_{i=1}^{N} B_{i,j}\, n_i\, s \leq \sum_{i=1}^{N} A_{i,j}\, n_i - E_j^0 \sum_{i=1}^{N} B_{i,j}\, n_i$$

Man definiert: $n_i = y_{i,1} + 2\, y_{i,2} \quad i = 1, \cdots, N$

dann $n_i s = y_{i,1}\, s + 2\, y_{i,2}\, s \quad i = 1, \cdots, N$

Zusätzlich $\alpha_i = n_i s, \quad \beta_{i,1} = y_{i,1}\, s, \quad \beta_{i,2} = y_{i,2}\, s$

Also $\alpha_i = \beta_{i,1} + 2\beta_{i,2} \quad i = 1, \cdots, N$

Die Beschränkungen von $y_{i,k}\, s, \quad k = 1, 2$:

$$s - s_{max}(1 - y_{i,k}) \leq y_{i,k}\, s \leq s - s_{min}(1 - y_{i,k})$$
$$s_{min}\, y_{i,k} \leq y_{i,k}\, s \leq s_{max}\, y_{i,k}$$

Wenn $y_{i,k} = 1$, dann muss $s_{min} \leq \beta_{i,k} \leq s_{max}$ und $\beta_{i,k} = s$.

Wenn $y_{i,k} = 0$, gilt $\beta_{i,k} = 0$.

Das Optimierungsproblem:

$$\min_{n_i} \; s$$

mit

$$-E_j^0 \sum_{i=1}^{7} B_{i,j}\alpha_i \leq \sum_{i=1}^{7} A_{i,j}\, n_i - E_j^0 \sum_{i=1}^{7} B_{i,j}\, n_i \qquad j = 1,2,3$$

$$\sum_{i=1}^{7} A_{i,j} n_i - E_j^0 \sum_{i=1}^{7} B_{i,j}\, n_i \leq E_j^0 \sum_{i=1}^{7} B_{i,j}\alpha_i \qquad j = 1,2,3$$

$$n_i = y_{i,1} + 2\, y_{i,2} \qquad i = 1, \cdots, 7$$

$$\alpha_i = \beta_{i,1} + 2\beta_{i,2} \qquad i = 1, \cdots, 7$$

$$s - s_{max}(1 - y_{i,k}) \leq \beta_{i,k} \leq s - s_{min}(1 - y_{i,k}) \qquad i = 1, \cdots, 7 \;\; k = 1,2$$

$$s_{min} y_{i,k} \leq \beta_{i,k} \leq s_{max} y_{i,k} \qquad i = 1, \cdots, 7 \;\; k = 1,2$$

$$s_{min} \leq s \leq s_{max}$$

$$y_{i,k} \in \{0,1\} \qquad i = 1, \cdots, 7 \;\; k = 1,2$$

Die zehn besten Lösungen für optimales Polymerdesign

Nr.	Polymerstruktur	Relative Abweichung	W (gH_2O/g)	T_g (K)	ρ (kg/m^3)
1	$-CH_2\ (CHCl)_2-$	0,0163	0,0049	384,68	1,4889
2	$-CH_2\ (CHCl)_3-$	0,0264	0,0051	393,10	1,5351
3	$-(CH_2)_2\ (CHCl)_3-$	0,0526	0,0047	376,94	1,4489
4	-CHCl-	0,1134	0,0056	412,37	1,6523
5	$-CH_2\ (CHCl)-$	0,1169	0,0044	363,20	1,3827
6	$-(CH_2)_3\ O\ (CHCl)_3-$	0,1674	0,0058	354,30	1,3977
7	$-(CH_2)_2\ O\ (CHCl)_2-$	0,1843	0,0059	336,12	1,3333
8	$-(CH_2)_3\ (CHCl)_2-$	0,1974	0,0061	346,04	1,3082
9	$-(CH_2)_3\ O\ (CHCl)-$	0,2166	0,0040	301,41	1,2255
10	$-(CH_2)_2\ O\ (CHCl)_3-$	0,2474	0,0062	366,23	1,4605