MES CULTURAL EPS

11 FEBRERO 2025

GRUPO COnCEPT

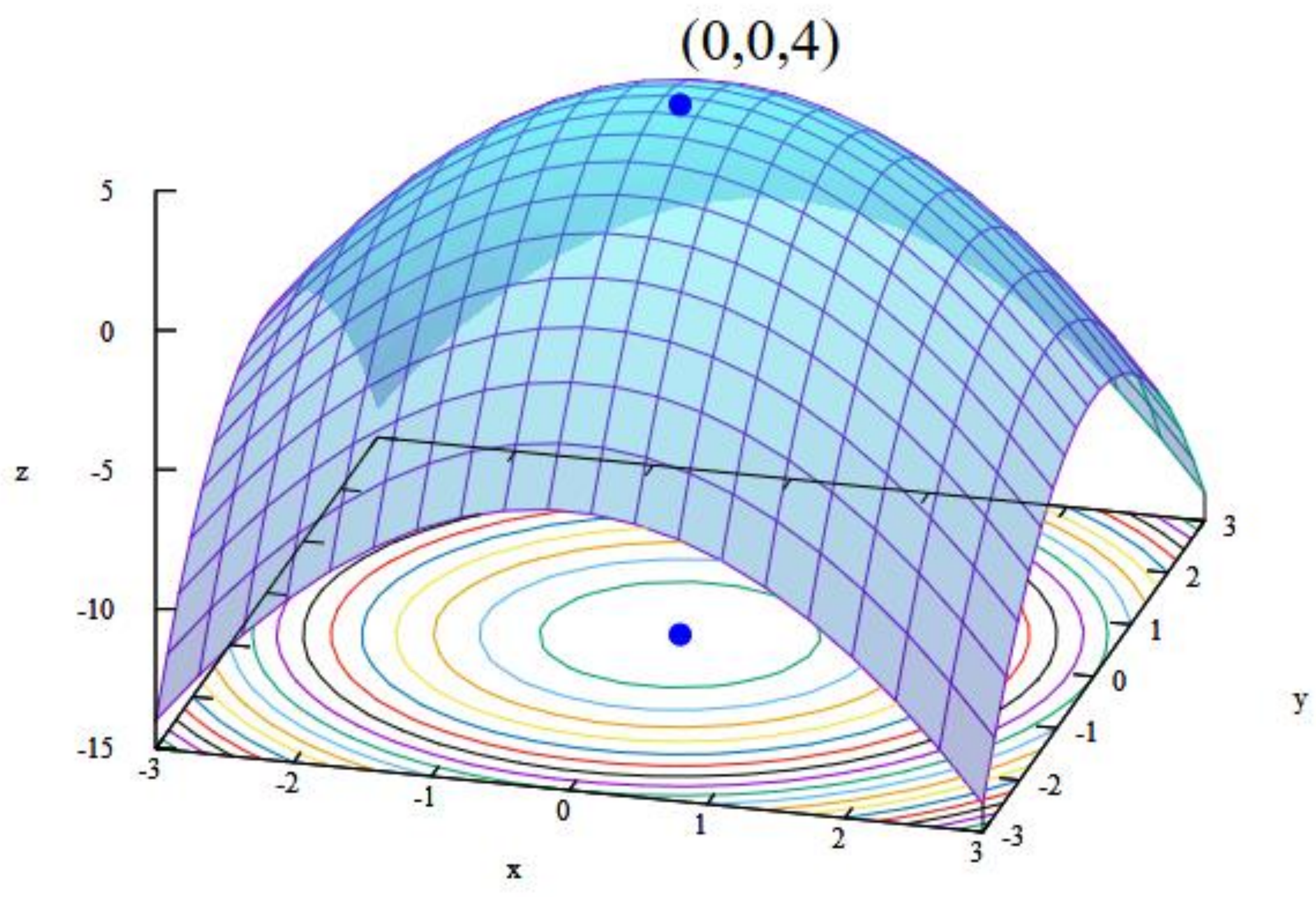
Departamento de Ingeniería Química

Introducción a la programación matemática con PYOMO

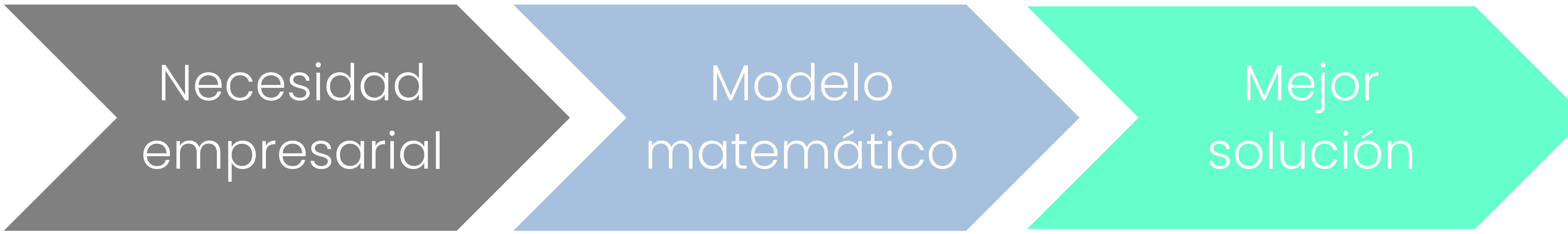
Table of Contents

¿Por qué es importante la optimización?

- ¿Cuál es el programa de producción óptimo para maximizar la utilización de los equipos?
- ¿Cuál es la mezcla óptima cuando se trabaja con ingredientes naturales?
- ¿Cuál es el horario óptimo para planificar la plantilla?
- ¿Cuál es el mejor medio de transporte para entregar los pedidos?
- ....



Programación matemática



$$
\begin{aligned}
\min \quad & f(x) && \longleftarrow \text{Función objetivo} \\
s.a., \quad & h(x) = 0 && \longleftarrow \text{Restricciones de igualdad} \\
& g(x) \leq 0 && \longleftarrow \text{Restricciones de desigualdad} \\
& x^L \leq x \leq x^U && \longleftarrow \text{Límites de las variables}
\end{aligned}
$$

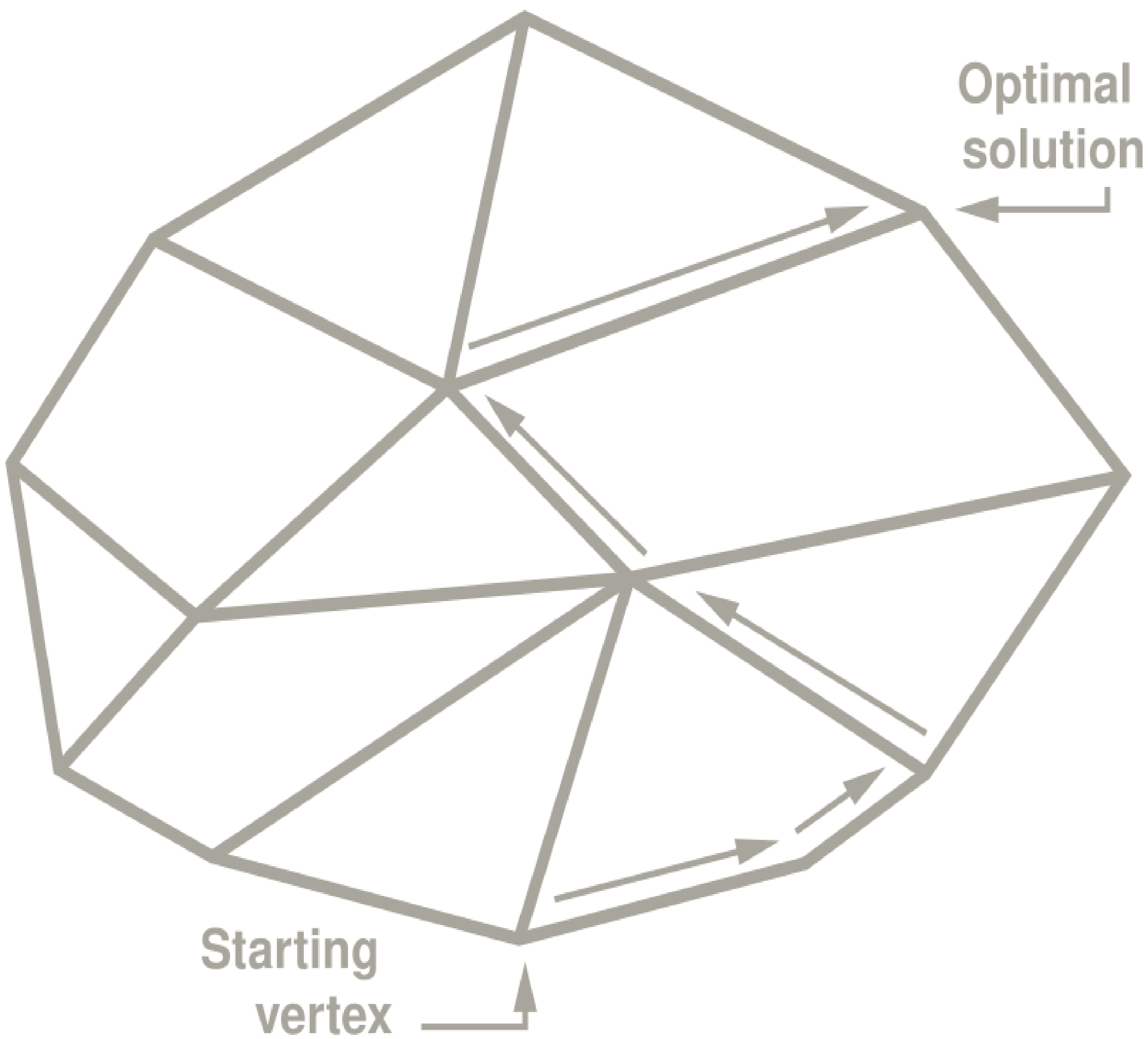
Clasificación

- Restricciones y función objetivo: Lineales / No lineales
- Variables: Contínuas / Discretas / Mixtas

Programación lineal (LP)

$$
\begin{aligned}
\min \quad & c^T x \\
s.a., \quad & Ax = b \\
& x \geq 0 \\
& x \in \mathbb{R}^n
\end{aligned}
$$

Función objetivo y restricciones lineales



Ejemplo

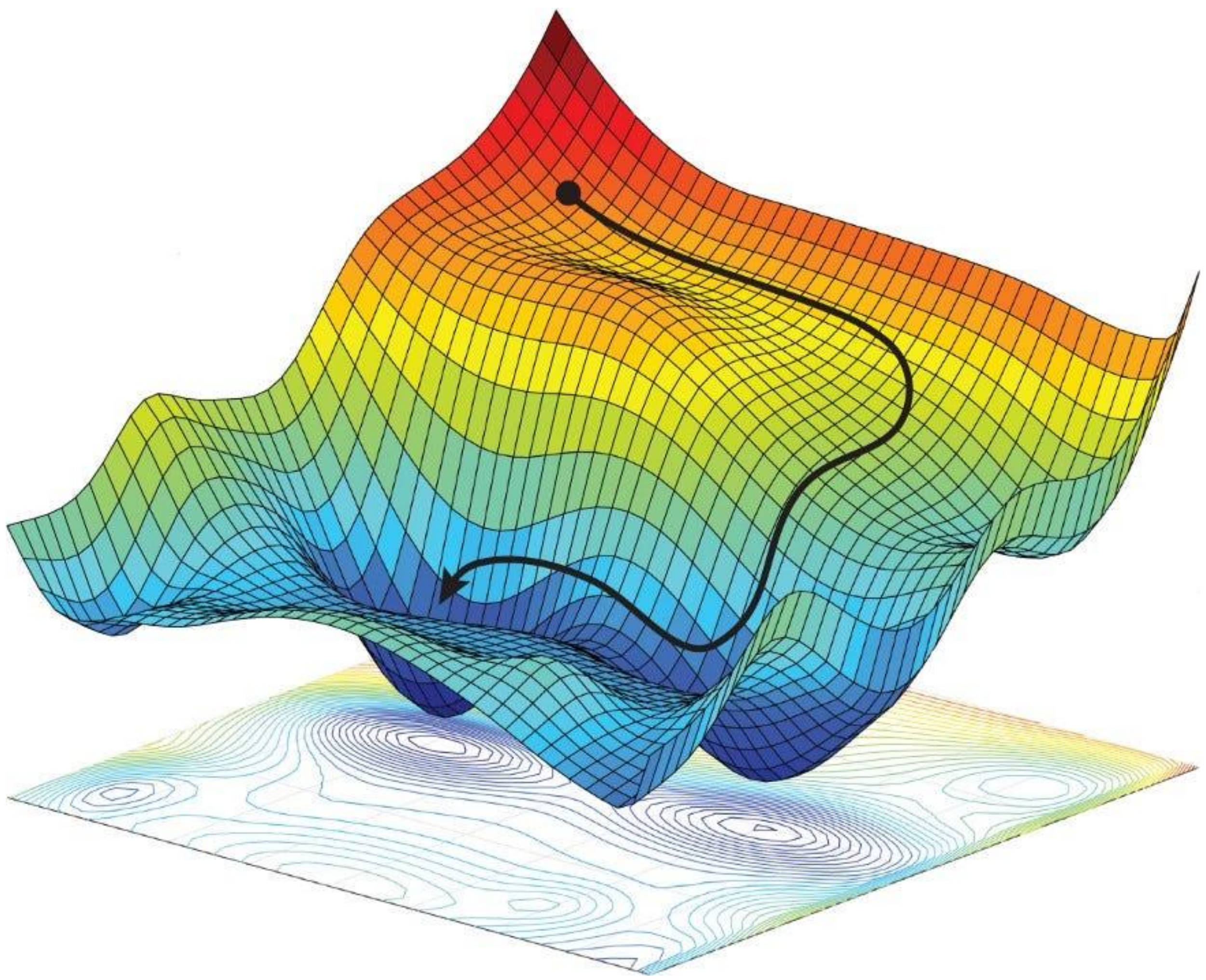
Problema de transporte

Resolución

Algoritmo Simplex

Programación no lineal (NLP)

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ s.a., \quad & h(x) = 0 \\ & g(x) \leq 0 \\ & x^L \leq x \leq x^U \end{aligned}$$



Función objetivo y/o restricciones lineales y no lineales

Ejemplo

Diseño RCTA

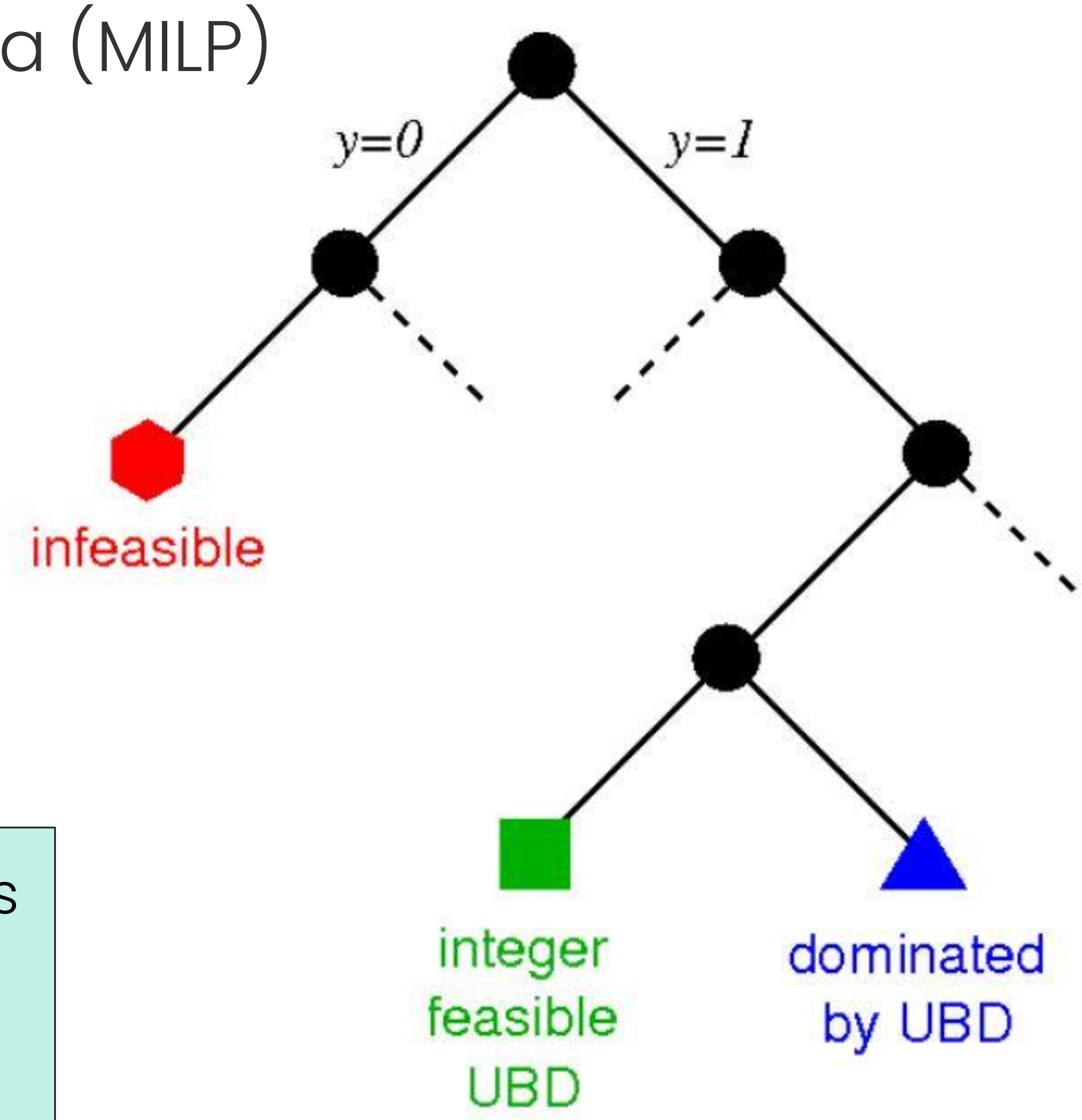
Resolución

Condiciones KKT

Programación lineal entera mixta (MILP)

$$
\begin{aligned}
\min \quad & c^T x + d^T y \\
s.a., \quad & Ax + By \leq b \\
& x \geq 0\,, \quad x \in \mathbb{R}^n \\
& y \in \{0,1\}^m
\end{aligned}
$$

Función objetivo y restricciones lineales + Decisiones lógicas incorporando variables binarias



Ejemplo

Selección equipos

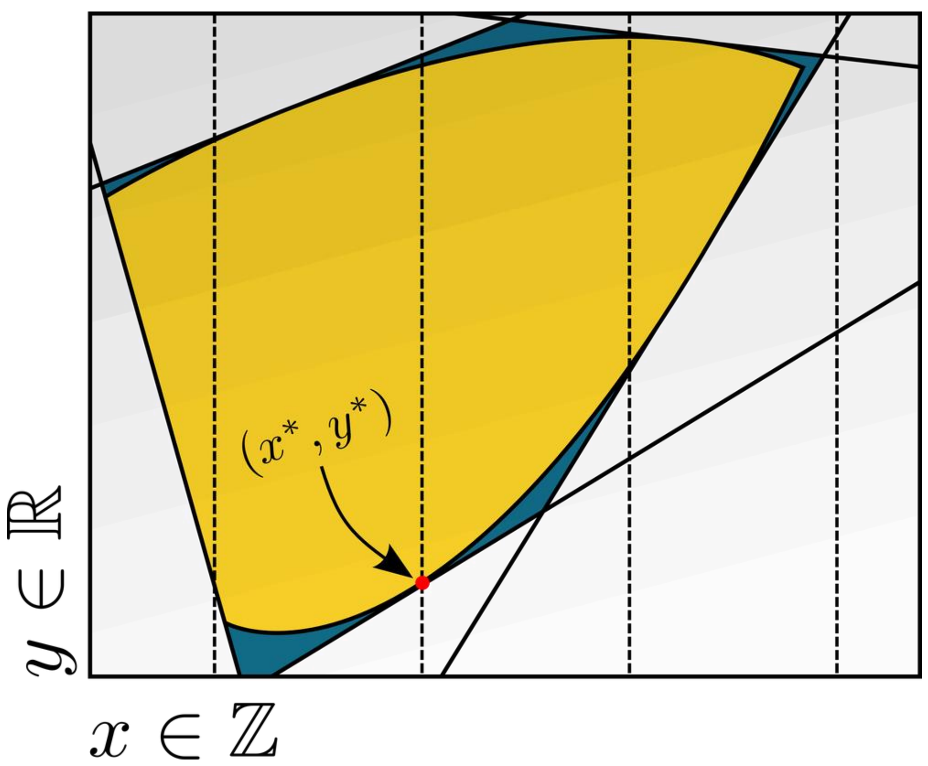
Resolución

Branch and Bound

Programación no lineal entera mixta (MINLP)

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f(x) + d^T y \\
s.a., \quad & h(x) + By = 0 \\
& g(x) + Dy \leq 0 \\
& x \in \mathbb{R}^n \\
& y \in \{0,1\}^m
\end{aligned}
$$

Función objetivo y/o restricciones lineales y no lineales
+ Decisiones lógicas incorporando variables binarias



Ejemplo

Síntesis diagramas flujo

Resolución

Outer Approximation

SOLVER	LP	MILP	NLP	MINLP
ALPHAECP				X
ANTIGONE			X	X
BARON	X	X	X	X
CONOPT4	X		X	
CPLEX	X	X		
DICOPT				X
GUROBI	X	X	X	X
GLPK	X	X		
IPOPT	X		X	
SCIP		X	X	X
CBC		X		X

Programación disyuntiva generalizada (GDP)

$$
\left.\begin{aligned}
\min \quad & z = f(x) \\
s.a., \quad & h(x) = 0 \\
& g(x) \leq 0
\end{aligned}\right\} \text{Función objetivo y restricciones globales}
$$

$$
\left.\begin{aligned}
& \bigvee_{i \in D_k} \begin{bmatrix} Y_{k,j} \\ r_{k,j}(x) \leq 0 \end{bmatrix} \qquad && k \in K \\
& \underline{\bigvee}_{i \in D_k} \; Y_{k,j} && k \in K
\end{aligned}\right\} \text{Disyunciones}
$$

- Restricciones $r(x)$ solo se aplican si $Y_{k,j} = True$

$$
\begin{aligned}
& \Omega(Y) = True \longleftarrow \text{Proposiciones lógicas} \\
& x^L \leq x \leq x^U \\
& x \in \mathbb{R}^n \\
& Y \in \{True, False\} \qquad k \in K, i \in D_k
\end{aligned}
$$

Programación disyuntiva generalizada (GDP)

- Los modelos de GDP suelen reformularse como MILP/MINLP

GDP

$$
\begin{aligned}
\min:\ & z = f(x) \\
s.t.\quad & g(x) \le 0 \\
& h(x) = 0
\end{aligned}
$$

$$
\bigvee_{i \in D_k} \begin{bmatrix} Y_{k,i} \\ r_{i,k}(x) \le 0 \end{bmatrix} \qquad k \in K
$$

$$
\underline{\bigvee}_{i \in D_k} Y_{k,i} \qquad k \in K
$$

$$
\begin{aligned}
& \Omega(Y) = True \\
& x^{lo} \le x \le x^{up}, \qquad x \in \mathbb{R}^n \\
& Y \in \{True,\ False\} \quad k \in K, i \in D_k
\end{aligned}
$$

Big M

$$
\begin{aligned}
\min:\ & z = f(x) \\
s.t.\quad & g(x) \le 0 \\
& h(x) = 0
\end{aligned}
$$

$$
r_{ki}(x) \le M^{ki}(1 - y_{ki}) \quad k \in K, i \in D_k
$$

$$
\sum_{i \in D_k} y_{ki} = 1 \qquad k \in K
$$

$$
\begin{aligned}
& Hx \ge h \\
& x^{lo} \le x \le x^{up}, \qquad x \in \mathbb{R}^n \\
& y_{ki} \in \{0,1\} \quad k \in K, i \in D_k
\end{aligned}
$$

Envolvente convexa

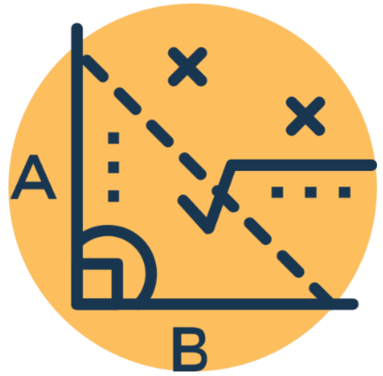
$$
\begin{aligned}
\min:\ & z = f(x) \\
s.t.\quad & g(x) \le 0 \\
& h(x) = 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& x = \sum_{i \in D_k} v^{ki} && k \in K \\
& y_{ki}\, r_{ki}\left(v^{ki} / y_{ki}\right) \le 0 && k \in K, i \in D_k \\
& x^{lo}\, y_{ki} \le v^{ki} \le x^{up}\, y_{ki} && k \in K, i \in D_k \\
& \sum_{i \in D_k} y_{ki} = 1 && k \in K
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& Hx \ge h \\
& x \in \mathbb{R}^n \\
& y_{ki} \in \{0,1\} \quad k \in K, i \in D_k
\end{aligned}
$$

Lenguajes de modelado algebraico (AML)

Objetivos



Forma natural de describir modelos matemáticos

Interfaz con numerosos solucionadores

Separar el modelado y las declaraciones de datos.

Ejemplos

- Lenguajes de modelado específicos
  - **GAMS**, AMPL, AIMMS
- Paquetes de AML para lenguajes de programación genéricos
  - FlopCPP (C++), OptimJ (Java), JuMP (Julia), PuLP (Python), **Pyomo** (Python)

¿Por qué Pyomo?

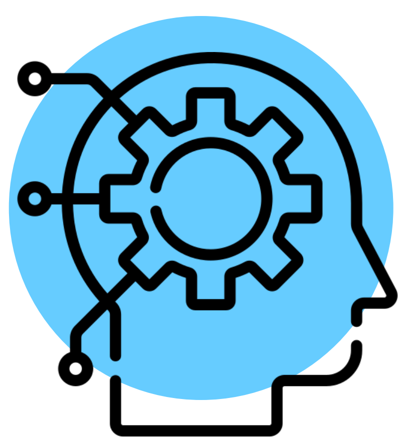
Python

Fácil de usar

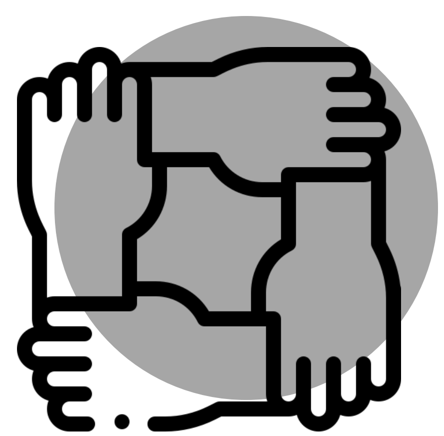
Eficiencia

Multiplataforma

Variedad de paquetes y librerías



Uso en ML y Big Data



Soporte y documentación

II ¿Por qué Pyomo?

Pyomo

1. Gratuito y bien documentado
2. Fácil instalación `pip install pyomo`
3. Comunicación con los principales solvers
4. Adaptabilidad y múltiples extensiones

PYOMO DAE

IDAES/**idaes-pse**

The IDAES Process Systems Engineering Framework

MLT

Pyomo/**mpi-sppy**

MPI-based Stochastic Programming in PYthon

III Fundamentos básicos de Python

1. Creación de un entorno de trabajo e instalación de paquetes
2. Tipos de datos
3. Manipulación de datos
4. Definición de funciones

https://github.com/cursos-COnCEPT/curso-Pyomo

Mezcla de cerveza

- Determinar proporción en la que se mezclan C componentes para satisfacer la demanda y especificaciones
- Minimizar costes de producción

	Coste (€/m³)	APV (%)
Cerveza A	0.32	4.5
Cerveza B	0.25	3.7
Agua	0.05	0.0

$$\min \quad \sum_{c\in C} x_c P_c$$

$$s.a., \quad \sum_{c\in C} x_c = V$$

$$A^* = \frac{\sum_{c\in C} x_c A_c}{\sum_{c\in C} x_c}$$

Mezcla de cerveza

- Sets
- Variables
- Parámetros
- Objetivo
- Restricciones

	Coste (€/m³)	APV (%)
Cerveza A	0.32	4.5
Cerveza B	0.25	3.7
Agua	0.05	0.0

Nomenclatura

C	Set de componentes
x_c	Volumen de componente c (m³)
P_c	Coste del componente c (€/m³)
A_c	Graduación del componente c
V	Demanda del cliente (m³)
A^*	Graduación deseada

$$\min \quad \sum_{c \in C} x_c P_c$$

$$s.a., \quad \sum_{c \in C} x_c = V$$

$$A^* = \frac{\sum_{c \in C} x_c A_c}{\sum_{c \in C} x_c}$$

Mezcla de cerveza

1. Importar librerías que se van a utilizar
2. Crear modelo

Opción 1

```
import pyomo.environ
model = pyomo.environ.ConcreteModel()
```

Indicar a Pyomo qué librerías se van a utilizar

Opción 2

```
from pyomo.environ import *
model = ConcreteModel()
```

Crear una instancia de `Concretemodel`
- Los datos se deben especificar a medida que se construye el modelo

Opción 3

```
import pyomo.environ as pyo
model = pyo.ConcreteModel()
```

Variable local que contendrá toda la información del modelo que vamos a crear

Mezcla de cerveza

1. **Importar librerías que se van a utilizar**
2. **Crear modelo**
3. **Definir los sets (si hay)**

```
m.C= pyo.Set( initialize = [‘A’,’B’,’W’] , doc = “Componentes” )
```

IMPORTANTE:
Distinción entre MAYÚSCULAS y minúsculas

Indicar los elementos del set por medio de un iterable (por ejemplo, una lista)

Descripción (opcional)

Mezcla de cerveza

1. **Importar librerías que se van a utilizar**
2. **Crear modelo**
3. **Definir los sets (si hay)**
4. **Definir las variables**

```
m.x= pyo.Var(m.C, within=pyo.NonNegativeReals, doc = “Volumen m3”)
```

Sets de los cuales depende la variable

Dominio de la variable (opcional) '`within`' y '`domain`' pueden usarse indistintamente

Dominios predefinidos:
- `NonNegativeReals`
- `Binary`
- `Integers`

Descripción (opcional)

Definición alternativa:

```
m.x= pyo.Var(m.C , bounds=(0, None))
```

Mezcla de cerveza

1. **Importar librerías que se van a utilizar**
2. **Crear modelo**
3. **Definir los sets (si hay)**
4. **Definir las variables**
5. **Definir los parámetros**

Sets de los cuales depende el parámetro

```
m.P = pyo.Param(m.C,
                initialize = {'A': 0.32, 'B': 0.25, 'C': 0.05},
                mutable= True ,
                doc = “Coste €/m3”)
```

Python `dict` con los valores correspondientes

Indica que puede que decidas cambiar el valor del parámetro en algún momento

Descripción (opcional)

Mezcla de cerveza

6. Definir la función objetivo

```
m.obj = pyo.Objective( expr= sum(m.x[i]*m.P[i] for i in m.C),
                       sense=pyo.maximize)
```

'`expr`' es una función

Dirección de la optimización

7. Definir las restricciones

```
m.con_demand = pyo.Constraint(expr = vol == sum(m.x[c] for c in m.C))
```

Mezcla de cerveza

6. **Definir la función objetivo**
7. **Definir las restricciones**
8. **Seleccionar solver y resolver el modelo**
9. **Mostrar los resultados**

Todo el modelo

```
m.pprint()
```

Valor de la función objetivo

```
m.obj()
```

Valor que toman las variables

```
m.x.pprint()
```

Status del solver

```
print(results.solver.status)
print(results.solver.termination_condition)
```

Mezcla de cerveza

```
import pyomo.environ as pyo

m = pyo.ConcreteModel()

m.C = pyo.Set( initialize = ['A','B','C'], doc = 'Components')

m.x= pyo.Var(m.C, within=pyo.NonNegativeReals, doc = 'Volumen m3')

m.P = pyo.Param(m.C, initialize = {'A': 0.32, 'B': 0.25, 'C': 0.05},
                   doc = 'Coste €/m3')
m.apv = pyo.Param( m.C, initialize = {'A': 4.5, 'B': 3.7, 'C': 0.},
                   doc = 'Graduación')
m.V = pyo.Param(initialize = 100, doc = 'Demanda m3')
m.apv_spec = pyo.Param(initialize = 4., doc = 'Graduación deseada')

m.obj = pyo.Objective(expr = sum(m.x[c]*m.P[c]for c in m.C), sense=pyo.minimize)

m.con_demand = pyo.Constraint(expr = m.V == sum(m.x[c] for c in m.C))
m.con_spec = pyo.Constraint(
             expr = 0 == sum(m.x[c]*(m.apv[c] - m.apv_spec) for c in m.C))

opt = pyo.SolverFactory('glpk')
results= opt.solve(m)
```

ConcreteModel
Data first, then model

- 1 paso
  - Todos los datos se deben especificar **antes** de que Pyomo procese el modelo
  - Los objetos se construyen a medida que se declaran

- Más sencillo de escribir
- Similar a la filosofía de GAMS

AbstractModel
Model first, then data

- 2 pasos

  PASO 1: se crea un "**patrón**"

  Ejemplo: se declara una variable x que depende de un set I, sin indicar aún los componentes de ese set.

  PASO 2: se **cargan** los **datos** conocidos para crear una instancia `ConcreteModel`

- Facilita la reutilización del modelo
- Similar a la filosofía de AMPL

Mezcla de cerveza como `AbstractModel`

PASO 1: Definir modelo (sets, variables, parámetros…)

```
import pyomo.environ as pyo

m = pyo.AbstractModel()

m.C = pyo.Set( initialize = ['A','B','C'], doc = 'Components')

m.x= pyo.Var(m.C, within=pyo.NonNegativeReals, doc = 'Volumen m3')

m.P = pyo.Param(m.C, initialize = {'A': 0.32, 'B': 0.25, 'C': 0.05},
                   doc = 'Coste €/m3')
m.apv = pyo.Param( m.C, initialize = {'A': 4.5, 'B': 3.7, 'C': 0.},
                   doc = 'Graduación')
m.V = pyo.Param(initialize = 100, doc = 'Demanda m3')
m.apv_spec = pyo.Param(initialize = 4., doc = 'Graduación deseada')

m.obj = pyo.Objective(expr = sum(m.x[c]*m.P[c]for c in m.C),
sense=pyo.minimize)

m.con_demand = pyo.Constraint(expr = m.V == sum(m.x[c] for c in m.C))
m.con_spec = pyo.Constraint(
             expr = 0 == sum(m.x[c]*(m.apv[c] - m.apv_spec) for c in m.C))
```

Mezcla de cerveza como `AbstractModel`

PASO 2: Cargar datos

- Para cargar los datos se utiliza el método `create_instance`

`m.create_instance()` o bien `m.create_instance( data )`

> **Opcional**
>
> Si no se indica, tomará los valores que se hayan indicado como ‘`initialize=…`’.
>
> Si no, sobreescribe los valores por defecto.

- Pueden utilizarse diferentes formatos para especificar los datos
  - Python `dict`
  - Archivo DAT
  - Importar desde .JSON, .CSV …

Mezcla de cerveza

Python dict

```
data = { None: {
             'C': ['A', 'B', 'W'],
            'vol': {None: 100},
            'grd': {None: 4},
            'P': {'A': 0.32,
                  'B':0.25;
                  'W': 0.05},
            'apv':{'A': 0.045 ,
                   'B':0.037,
                   'W: 0.0 },
      }}
```

Archivo DAT

```
set C := A B W ;

param vol := 100 ;
param grd := 4 ;

param cost apv :=
A      0.32  0.045
B      0.25  0.037
W      0.05  0.0
;
```

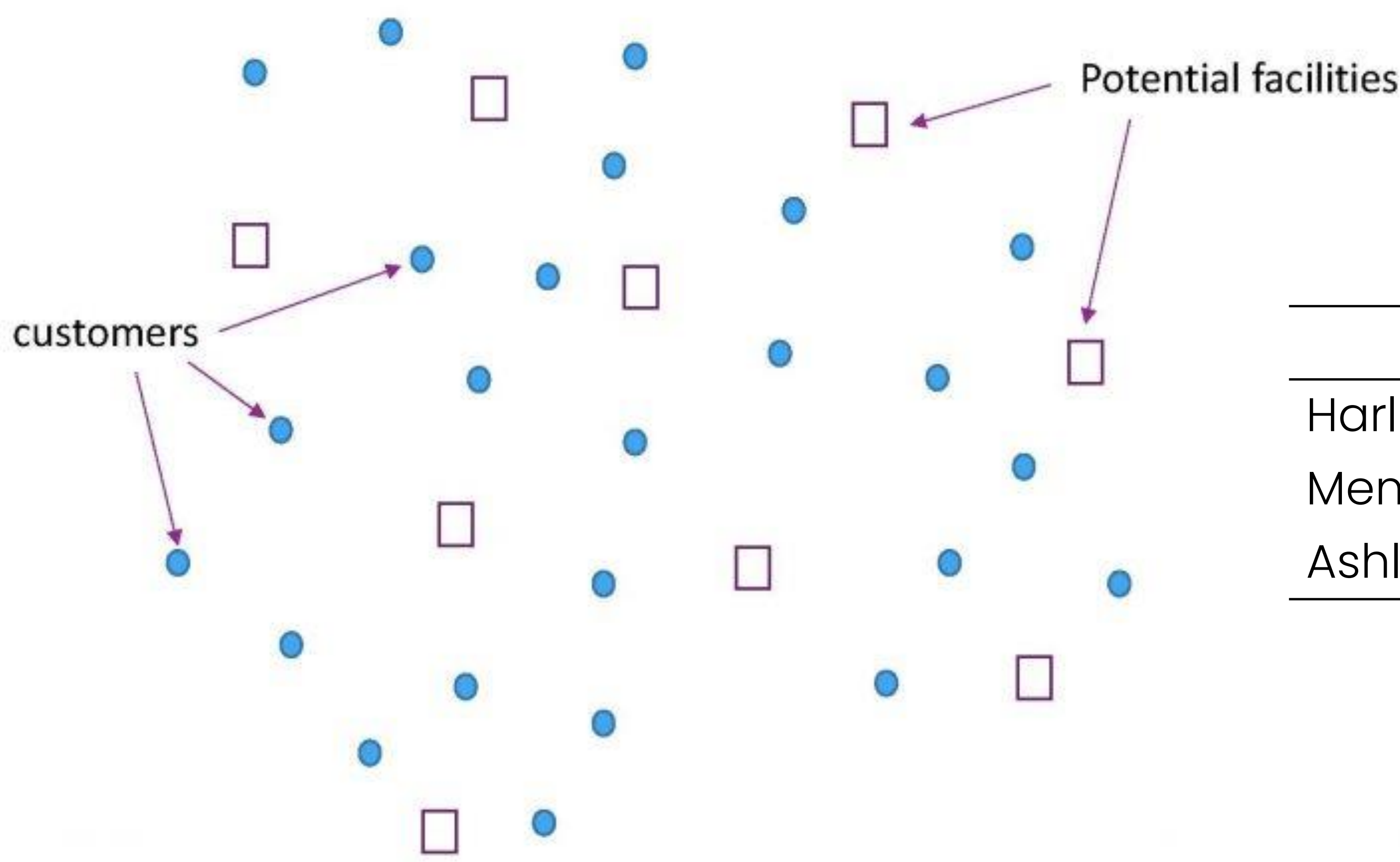
Nombre del archivo
data.dat

```
instance = m.create_instance(data) # Si se usa un dict

instance = m.create_instance(data.dat) # Si se utiliza un archivo .dat

opt = pyo.SolverFactory('glpk')
results= opt.solve(m)
```

V Ejemplo programación lineal

Warehouse location

- Determinar dónde construir P almacenes entre W posibles ubicaciones
- Minimizar costes de distribución a todos los consumidores C



Costes de distribución (UM)

	NYC	LA	Chicago	Houston
Harlingen	1956	1606	1410	330
Memphis	1095	1792	531	667
Ashland	485	2322	324	1236

Warehouse location

- Determinar dónde construir P almacenes entre W posibles ubicaciones
- Minimizar costes de distribución a todos los consumidores C

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \sum_{w\in W}\sum_{c\in C} d_{wc}x_{wc} & \\
s.a., \quad & \sum_{w\in W} x_{wc} = 1 & \forall\, c\in C \\
& x_{wc} \le y_W & \forall\, w\in W, c\in C \\
& \sum_{w\in W} y_w = P & \\
& 0 \le x_{wc} \le 1 & \forall\, w\in W, c\in C \\
& y_w \in \{0,1\} & \forall\, w\in W
\end{aligned}
$$

Nomenclatura

d_{wc}	Costes de distribución desde el almacén w al cliente c
P	Número de almacenes que se pretende construir
x_{wc}	fracción de la demanda del cliente c servida desde el almacén w
y_w	1 si se construye un almacén en la ubicación w

¿Diferencia?

$$\min \quad \text{cost} = \sum_{c \in C} x_c P_c$$

$$s.a., \quad \sum_{c \in C} x_c = V$$

$$A^* = \frac{\sum_{c \in C} x_c A_c}{\sum_{c \in C} x_c}$$

$$\min \quad \sum_{w \in W} \sum_{c \in C} d_{wc} x_{wc}$$

$$s.a., \quad \sum_{w \in W} x_{wc} = 1 \qquad \forall\, c \in C$$

$$x_{wc} \le y_W \qquad \forall\, w \in W, c \in C$$

$$\sum_{w \in W} y_w = P$$

$$0 \le x_{wc} \le 1 \qquad \forall\, w \in W, c \in C$$

$$y_w \in \{0,1\} \qquad \forall\, w \in W$$

Mezcla cerveza

Restricciones escalares (una sola ecuación)

Warehouse location

Múltiples ecuaciones definidas de forma indexada

V Ejemplo programación lineal

Warehouse location

```
model = pyo.AbstractModel(name="(WL)")

d = {'Harlingen':{'NYC': 1956, 'LA': 1606, 'Chicago': 1410 , 'Houston': 330},
     'Memphis': {'NYC': 1096,'LA': 1792, 'Chicago': 531, 'Houston': 567},
     'Ashland': {'NYC': 485, 'LA': 2322, 'Chicago': 324, 'Houston': 1236 }
     }


data = {None: {'W': ['Harlingen', 'Memphis', 'Ashland'],
               'C': ['NYC', 'LA', 'Chicago', 'Houston'],
               'P': {None: 2} ,
               'cost': {(w,c):d[w][c] for w in d for c in d[w]}
               }}

model.C = pyo.Set(doc = 'Cities')
model.W = pyo.Set(doc = 'Warehouses')

model.x = pyo.Var(model.W, model.C, bounds=(0,1))
model.y = pyo.Var(model.W, within=pyo.Boolean)

model.cost = pyo.Param(model.W, model.C, doc='Coste')
model.P = pyo.Param(initialize=2, doc='Number of warehouses')
```

V

Ejemplo programación lineal

Warehouse location

```
def obj_rule(m):
    return sum(m.cost[w,c]*m.x[w,c] for w in m.W for c in m.C)
model.obj = pyo.Objective(rule=obj_rule)

def one_per_cust_rule(m, c):
    return sum(m.x[w,c] for w in m.W) == 1
model.one_per_cust = pyo.Constraint(model.C, rule=one_per_cust_rule)

def num_warehouses_rule(m):
    return sum(m.y[w] for w in m.W) <= m.P
model.num_warehouses = pyo.Constraint(rule=num_warehouses_rule)

def warehouse_active_rule(m, w, c):
    return m.x[w,c] <= m.y[w]
model.warehouse_active = pyo.Constraint(model.W, model.C, rule=warehouse_active_rule)

instance = model.create_instance(data)
pyo.SolverFactory('glpk').solve(instance)

instance.y.pprint()
instance.x.pprint()
```

V Ejemplo programación disyuntiva I

Problema de mezclado

- Determinar proporción en la que se mezclan C componentes para satisfacer las especificaciones del producto final
  - Cantidad máxima Vit A = 0.4
  - Cantidad mínima Vit B = 0.2
  - A y B no se pueden mezclar
- Minimizar costes de producción

Comp.	Coste (UM)	Vit A	Vit B
A	2.0	0.5	0.2
B	2.0	0.4	0.1
C	5.0	0.3	0.3

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \sum_{c \in C} x_c P_c \\
s.a., \quad & \sum_{c \in C} x_c = 1 \\
& \sum_{c \in C} x_c VitA_c \leq 0.4 \\
& \sum_{c \in C} x_c VitB_c \geq 0.2 \\
& \begin{bmatrix} Y \\ x_B = 0 \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} \neg Y \\ x_A = 0 \end{bmatrix} \\
& 0 \leq x_c \leq 1 \qquad \forall c \in C
\end{aligned}
$$

Problema de mezclado

Programación disyuntiva

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \sum_{c\in C} x_c P_c \\
s.a., \quad & \sum_{c\in C} x_c = 1 \\
& \sum_{c\in C} x_c VitA_c \le 0.4 \\
& \sum_{c\in C} x_c VitB_c \ge 0.2 \\
& \begin{bmatrix} Y \\ x_B = 0 \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} \neg Y \\ x_A = 0 \end{bmatrix} \\
& 0 \le x_c \le 1 \qquad \forall c \in C
\end{aligned}
$$

Reformulación Big-M

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \sum_{c\in C} x_c P_c \\
s.a., \quad & \sum_{c\in C} x_c = 1 \\
& \sum_{c\in C} x_c VitA_c \le 0.4 \\
& \sum_{c\in C} x_c VitB_c \ge 0.2 \\
& x_A \le My \\
& x_B \le M(1-y) \\
& 0 \le x_c \le 1 \qquad \forall c \in C \\
& y \in \{0,1\}
\end{aligned}
$$

V Ejemplo programación disyuntiva I

Problema de mezclado: Restricciones globales

```
import pyomo.environ as pyo
model  = pyo.AbstractModel()

model.C = pyo.Set(initialize = ['A','B','C'], doc = 'Componentes')
def incompatible_filter(model, i, j):
    return i == 'A' and j == 'B'
model.C_incompat = pyo.Set(initialize=model.C*model.C,
                             filter=incompatible_filter, doc = 'Pares incompatibles’)

model.x = pyo.Var(model.C, bounds = (0.,1.))
model.y = pyo.Var(model.C_incompat, domain=pyo.Boolean)

model.P = pyo.Param(model.C, initialize = d['Coste'], doc='Coste UM')
model.VitA = pyo.Param(model.C, initialize = d['VitA'], doc='Contenido de VitA')
model.VitB = pyo.Param(model.C, initialize = d['VitB'], doc='Contenido de VitB')
model.VitA_UB = pyo.Param(initialize = 0.4, doc='Cantidad máxima de VitA')
model.VitB_LB = pyo.Param(initialize = 0.2, doc='Cantidad mínima de VitB')
model.BigM = pyo.Param(initialize = 10, doc = 'Coeficiente BigM’)

def obj_rule(m):
    return sum(m.P[c]*m.x[c] for c in m.C)
model.obj = pyo.Objective(rule = obj_rule)

model.massfraction = pyo.Constraint(rule = lambda m: sum(m.x[c] for c in m.C) == 1)
model.comp_ub = pyo.Constraint(rule = lambda m: sum(m.VitA[c]*m.x[c] for c in m.C) <= m.VitA_UB )
model.comp_lb = pyo.Constraint(rule = lambda m: sum(m.VitB[c]*m.x[c] for c in m.C) >= m.VitB_LB )
```

Problema de mezclado

Manipulación de sets

Un set se puede definir a partir de otro (subset) de forma programática utilizando filtros.

1. Definir el conjunto principal

```
model.C = pyo.Set(initialize = ['A','B','C'], doc = 'Componentes’)
```

2. Crear un filtro

```
def incompatible_filter(model, i, j):
    return i == 'A' and j == 'B’
```

Función que devuelve `True` si el elemento pertenece al subset

2. Definir el subconjunto

```
model.C_incompat = pyo.Set(initialize=model.C*model.C,
                           filter=incompatible_filter,
                           doc = 'Pares incompatibles')
```

Operador *****: producto cartesiano

Problema de mezclado: Reformulación Big M

Reformulación Big M

```
model.ref_BigM = pyo.ConstraintList()
for pair in model.C_incompat:
    a, b = pair
    model.ref_BigM.add(model.x[a] <= model.BigM*model.y[pair])
    model.ref_BigM.add(model.x[b] <= model.BigM*(1-model.y[pair]))
```

Ejemplo programación disyuntiva I

Problema de mezclado: Disyunciones

$$\begin{bmatrix} Y_1 \\ \exp(x_2) - 1 = x_1 \\ x_3 = x_4 = 0 \end{bmatrix} \veebar \begin{bmatrix} Y_2 \\ \exp(2x_4) - 1 = x_3 \\ x_1 = x_2 = 0 \end{bmatrix}$$

```
m.term1 = pyo.Disjunct()

m.term1.cons1 = pyo.Constraint(expr=exp(m.x[2]) - 1 == m.x[1])
m.term1.cons2 = pyo.Constraint(expr= m.x[3] == 0)
m.term1.cons3 = pyo.Constraint(expr= m.x[4] == 0)

m.term2 = pyo.Disjunct()
m.term2.cons1 = pyo.Constraint(expr=exp(2*m.x[4]) - 1 == m.x[3])
m.term2.cons2 = pyo.Constraint(expr= m.x[2] == 0)
m.term2.cons3 = pyo.Constraint(expr= m.x[1] == 0)

m.logicOR = pyo.Disjunction(expr = [m.term1, m.term2])
```

Crear un elemento `Disjunct`() para cada bloque 1

Añadir restricciones 2

Combinar cada término en forma de lista 3

Por defecto, Pyomo aplica una disyunción exclusiva $\veebar$

V Ejemplo programación disyuntiva I

Problema de mezclado: Reformulación Big M

Reformulación Big M

```
model.ref_BigM = pyo.ConstraintList()
for pair in model.C_incompat:
    a, b = pair
    model.ref_BigM.add(model.x[a] <= model.BigM*model.y[pair])
    model.ref_BigM.add(model.x[b] <= model.BigM*(1-model.y[pair]))
```

Disyunciones

```
# Importar funciones necesarias
from pyomo.gdp import Disjunct, Disjunction

# Término que se cumple si Y = True
model.term1 = Disjunct()
model.term1.consA = pyo.Constraint(expr= model.x['A'] == 0)
# Término que se cumple si Y = False
model.term2 = Disjunct()
model.term2.consB = pyo.Constraint(expr= model.x['B'] == 0)
# Añadir restricción en forma de disyunción
model.disyuncion = Disjunction(expr = [model.term1, model.term2])
```

Disjunct y Disjunction son comandos propios de la extensión de GDP para Pyomo

Problema de mezclado: Resolución

Activar/Desactivar restricciones

`model.cons_name.deactivate()` // `model.cons_name.activate()`

- Las restricciones indexadas pueden desactivarse por completo o individualmente

`model.cons_name[idx].deactivate()` // `model.cons_name[idx].activate()`

- Las restricciones desactivadas **no se envían** al *solver* a la hora de resolver el modelo.

Aplicar transformaciones

`pyo.TransformationFactory(trf_name).apply_to(model)`

- Transformaciones disponibles

Reformulación	trf_name
Big M (BM)	`gdp.bigm`
Envolvente convexa (HR)	`gdp.hull`
Híbrido BM/HR	`gdp.cuttingplane`

Problema de mezclado: Resolución

Reformulación Big M (a mano)

```
# Desactivar restricciones
model.term1.deactivate()
model.term2.deactivate()
model.disyuncion.deactivate()

# Llamada al solver
opt = pyo.SolverFactory('cbc')
results = opt.solve(model)
```

Extensión Pyomo GDP

```
# Acivar/desactivar restricciones
model.ref_BigM.deactivate()

# Aplicar tranformación
pyo.TransformationFactory('gdp.hull').apply_to(model)

# Llamada al solver
opt = pyo.SolverFactory('cbc')
results = opt.solve(model)
```

V Ejemplo programación disyuntiva II

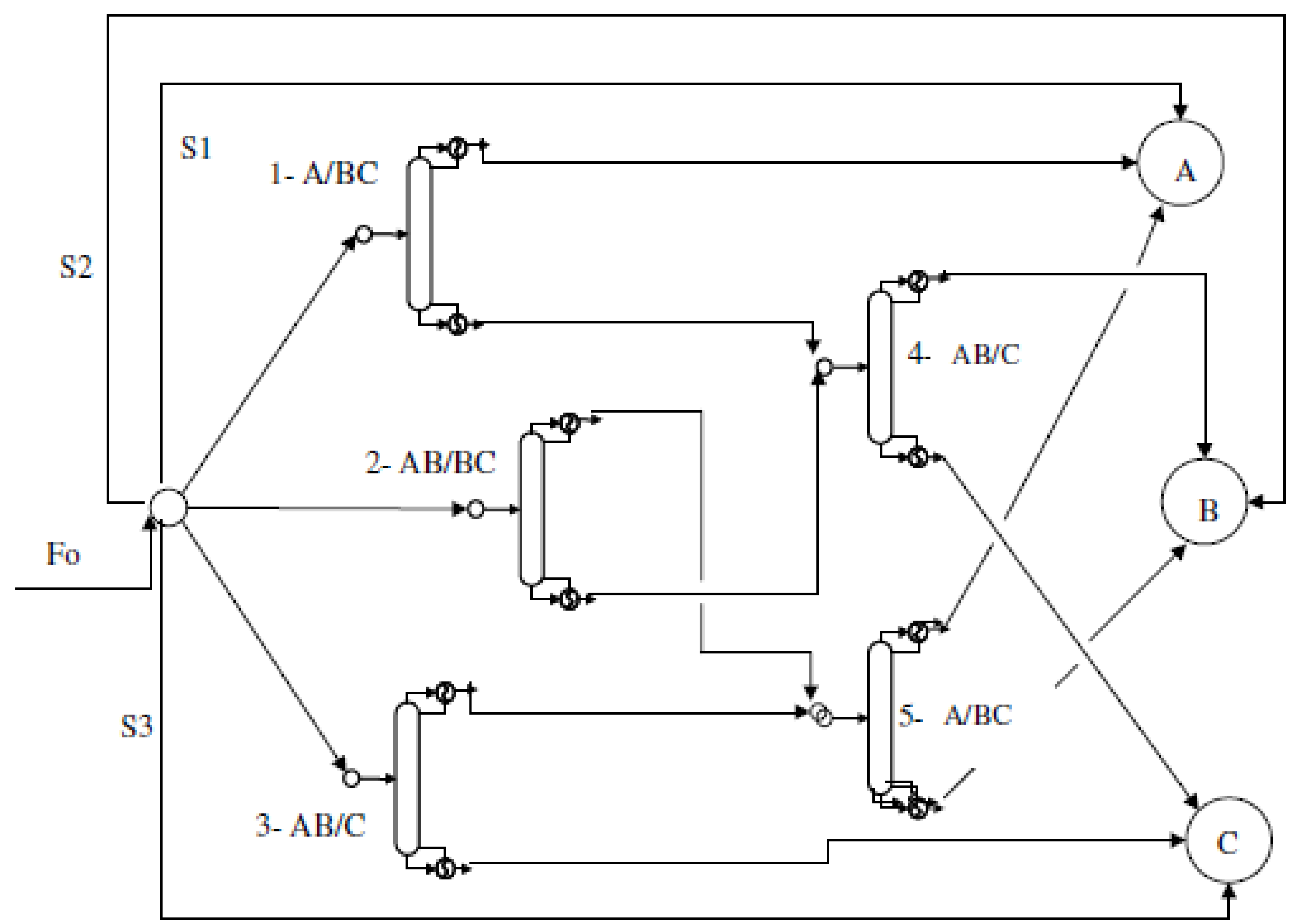
Separación no total

- Determinar la ruta que permita producir los productos ProdA, ProdB y ProdC
  - Con el mínimo coste
  - Cumpliendo las especificaciones requeridas

✓ Al nodo final A debe llegar como mínimo el 85% del A alimentado, no más del 10% del B alimentado y no más del 5% del C alimentado.

✓ Al nodo final B debe llegar como mínimo el 80% del B alimentado, no más del 10% del A alimentado y no más del 10 % del C alimentado.

✓ Al nodo final C debe llegar como mínimo el 80% del C alimentado, no más del 10% del B alimentado y no más del 5% del A alimentado.



V Ejemplo programación disyuntiva II

Separación no total

$$\min \sum_{c \in C} Cost_c$$

$$s.a.\ \ F_{0i} = S1_i + S2_i + S3_i + F_{c1,i} + F_{c2,i} + F_{c3,i} \quad \forall i \in I$$
$$F_{c4,i} = B_{c1,i} + B_{c2,i} \quad \forall i \in I$$
$$F_{c5,i} = D_{c2,i} + D_{c3,i} \quad \forall i \in I$$
$$ProdA_i = S1_i + D_{c1,i} + D_{c5,i} \quad \forall i \in I$$
$$ProdB_i = S2_i + D_{c4,i} + B_{c5,i} \quad \forall i \in I$$
$$ProdC_i = S3_i + B_{c3,i} + B_{c4,i} \quad \forall i \in I$$
$$\sum_{i \in I} SX_i\, F_{0i} = \sum_{i \in I} F_{0i}\, SX_i \quad \forall i \in I,\, SX = \{S1, S2, S3\}$$
$$\sum_{i \in I} F_{c,i}\, F_{0i} = \sum_{i \in I} F_{0i}\, F_{c,i} \quad \forall i \in I,\, c = \{c1, c2, c3\}$$
$$F_{c,i} = D_{c,i} + B_{c,i} \quad \forall c \in C,\, i \in I$$
$$D_{c,i} = F_{c,i}\, x_{c,i} \quad \forall c \in C,\, i \in I$$
$$ProdA_A \geq 0.85 F_{0A} \quad ProdA_B \leq 0.1 F_{0B} \quad ProdA_C \leq 0.1 F_{0C}$$
$$ProdB_A \leq 0.1 F_{0A} \quad ProdB_B \geq 0.8 F_{0B} \quad ProdB_C \leq 0.1 F_{0C}$$
$$ProdC_A \leq 0.05 F_{0A} \quad ProdC_B \leq 0.1 F_{0B} \quad ProdC_C \geq 0.8 F_{0C}$$

Función objetivo

Restricciones globales

V

Ejemplo programación disyuntiva II

Separación no total

$$\begin{bmatrix} Y_c \\ Cost_c = FC_c + FV_c \sum_{i \in I} D_{c,i} \\ F_{c,i} \le F_{0i} \quad \forall i \in I \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} \neg Y_c \\ Cost_c = 0 \\ F_{c,i} = 0 \quad \forall i \in I \end{bmatrix} \quad \forall c \in C$$

$$Y_1 \vee Y_2 \vee Y_3$$

$$Y_1 \Rightarrow Y_4$$

$$Y_1 \Rightarrow \neg Y_5$$

$$Y_2 \Rightarrow Y_4$$

$$Y_2 \Rightarrow Y_5$$

$$Y_3 \Rightarrow Y_5$$

$$F_{ci}, D_{ci}, D_{c,i}, S1_i, S2_i, S3_i, ProdA_i, ProdB_i, ProdC_i, Cost_c \in \mathbb{R}$$

$$Y_{i,j} \in \{ True, False \}$$

Disyunciones

Restricciones lógicas

V Ejemplo programación disyuntiva II

Separación no total

$$\text{Cost}_c = FC_c y_c + VC_c \sum_{i \in I} D_{ci}$$

$$F_{ci} \leq F0_i y_c$$

$$y_1 + y_2 + y_3 = 1$$

$$y_1 - y_4 \leq 0$$

$$y_1 + y_5 \leq 1$$

$$y_2 - y_4 \leq 0$$

$$y_2 - y_5 \leq 0$$

$$y_3 - y_5 \leq 0$$

$$F_{ci}, D_{ci}, D_{c,i}, S1_i, S2_i, S3_i, ProdA_i, ProdB_i, ProdC_i, Cost_c \in \mathbb{R}$$

$$y_c \in \; 0,1$$

Disyunciones (Envolvente convexa)

Restricciones lógicas

VI Recursos de aprendizaje

- Pyomo documentation

  https://pyomo.readthedocs.io/en/stable/

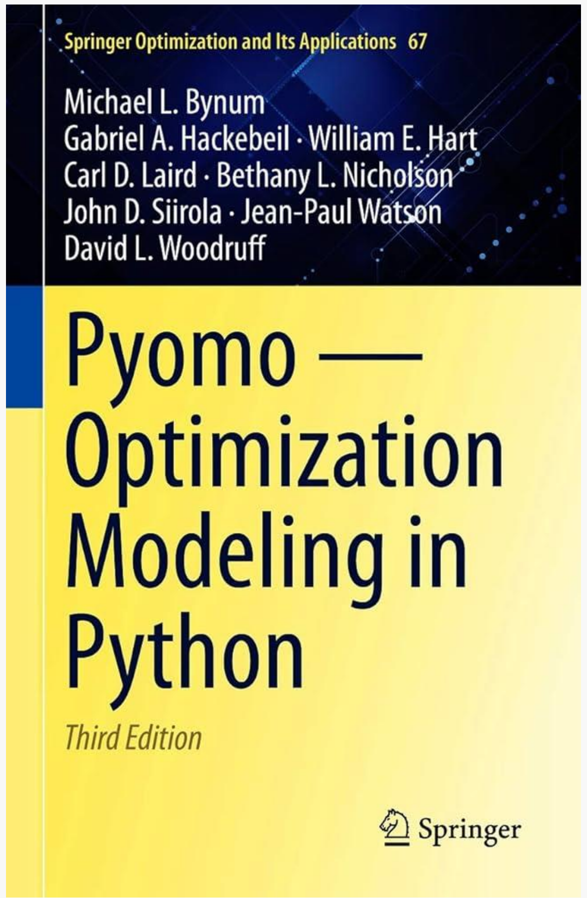
- ND Pyomo Cookbook

  https://jckantor.github.io/ND-Pyomo-Cookbook/README.html

- Materiales Cacheme

  https://github.com/CAChemE

- Foros
  - StackOverflow ("pyomo" tag)
  - Pyomo Forum (pyomoforum@googlegroups.com)



MES CULTURAL EPS

11 FEBRERO 2025

GRUPO COnCEPT

Departamento de Ingeniería Química

Introducción a la programación matemática con

PYOMO