PYOMO

Introducción a la programación matemática

Isabela Fons
Isabela.fons@ua.es
Grupo COnCEPT - Departamento de Ingeniería Química

UA
UNIVERSITAT D'ALACANT
UNIVERSIDAD DE ALICANTE
Escola Politècnica Superior
Escuela Politécnica Superior

Instrucciones

1. Abre Google Colab (https://colab.research.google.com/)
2. File > Open Notebook > GitHub
3. GitHub URL: https://github.com/isfons

   Repositorio: isfons/intro-pyomo
4. Seleccionar un archivo .ipynb para trabajar

¿Por qué Pyomo?

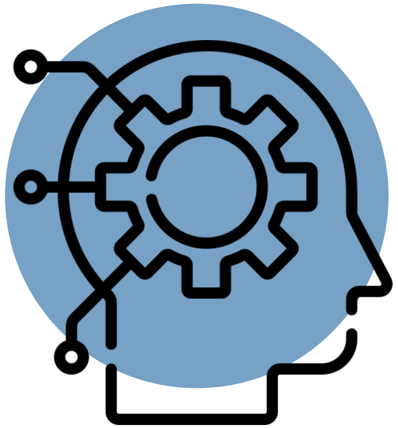
Python

Fácil de usar

Eficiencia

Multiplataforma

Variedad de paquetes



Uso en ML

Soporte

Pyomo

1. Gratuito y bien documentado
2. Fácil instalación
3. Compatible con solvers principales
4. Versatilidad y extensiones

PYOMO DAE

IDAES/**idaes-pse**

The IDAES Process Systems Engineering Framework

OMLT

Pyomo/**mpi-sppy**

MPI-based Stochastic Programming in PYthon

Programación matemática

Conceptos básicos de optimización

Motivación

¿Cómo organizar la producción para maximizar la utilización de los equipos?

¿Cuál es la mezcla óptima cuando se trabaja con ingredientes naturales?

¿Cuál es la mejor ruta para entregar los pedidos?

¿Condiciones de operación que maximizan el beneficio?

Elementos básicos

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

Variables

Fución objetivo

Restricciones de igualdad

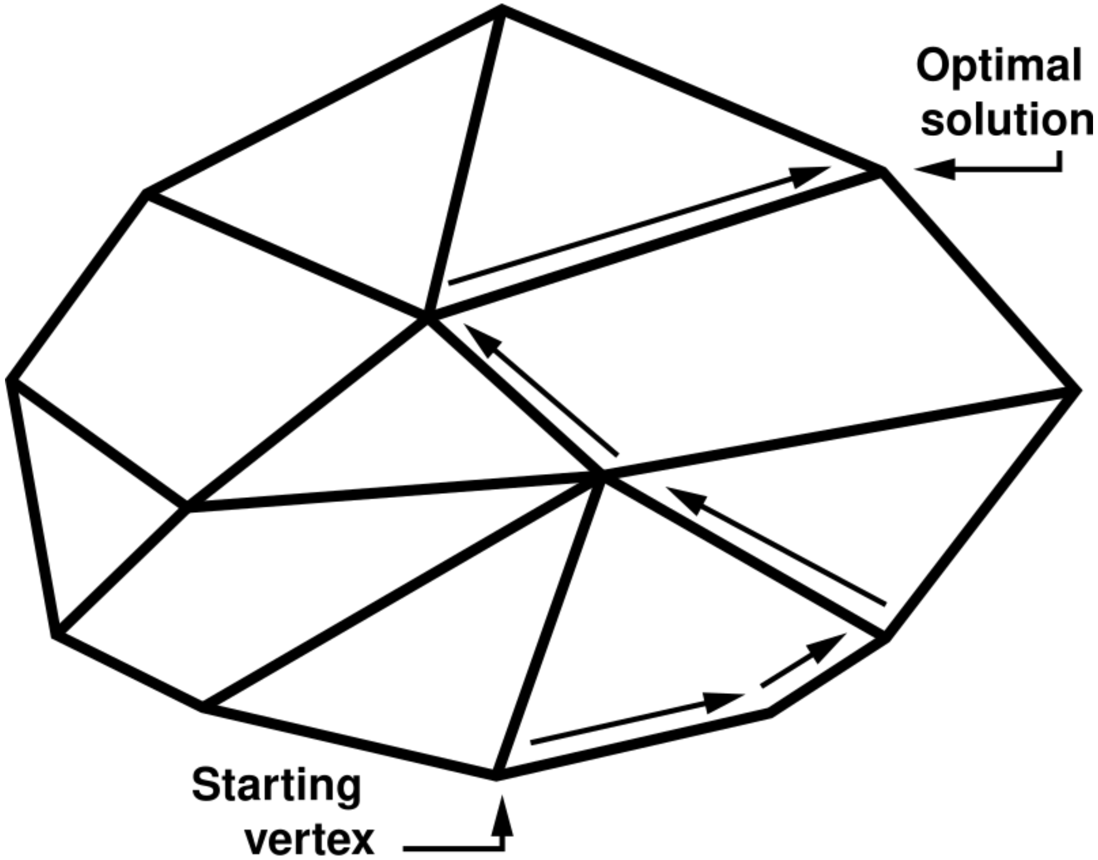
Restricciones de desigualdad

Límites / Dominio

Clasificación

Programación lineal (LP)

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



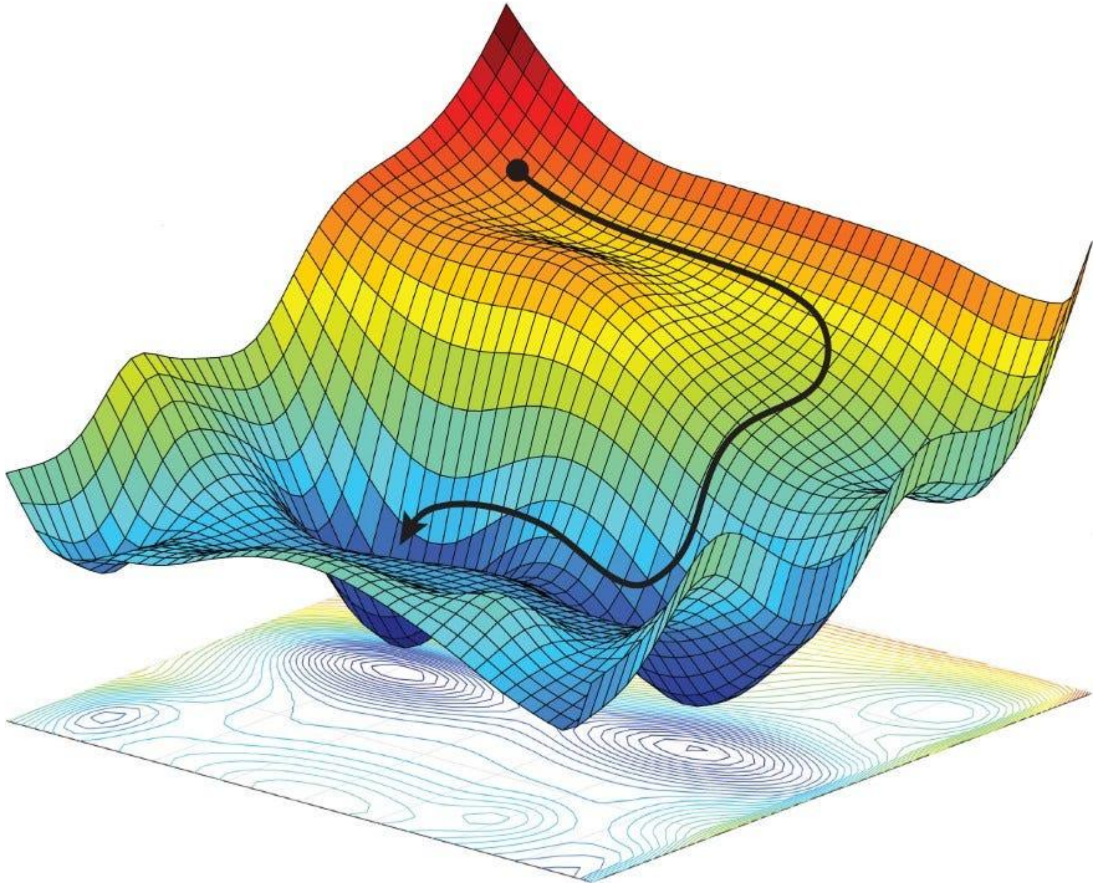
Resolución: Simplex

Ejemplo: Problema de transporte

Clasificación

Programación no lineal (NLP)

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



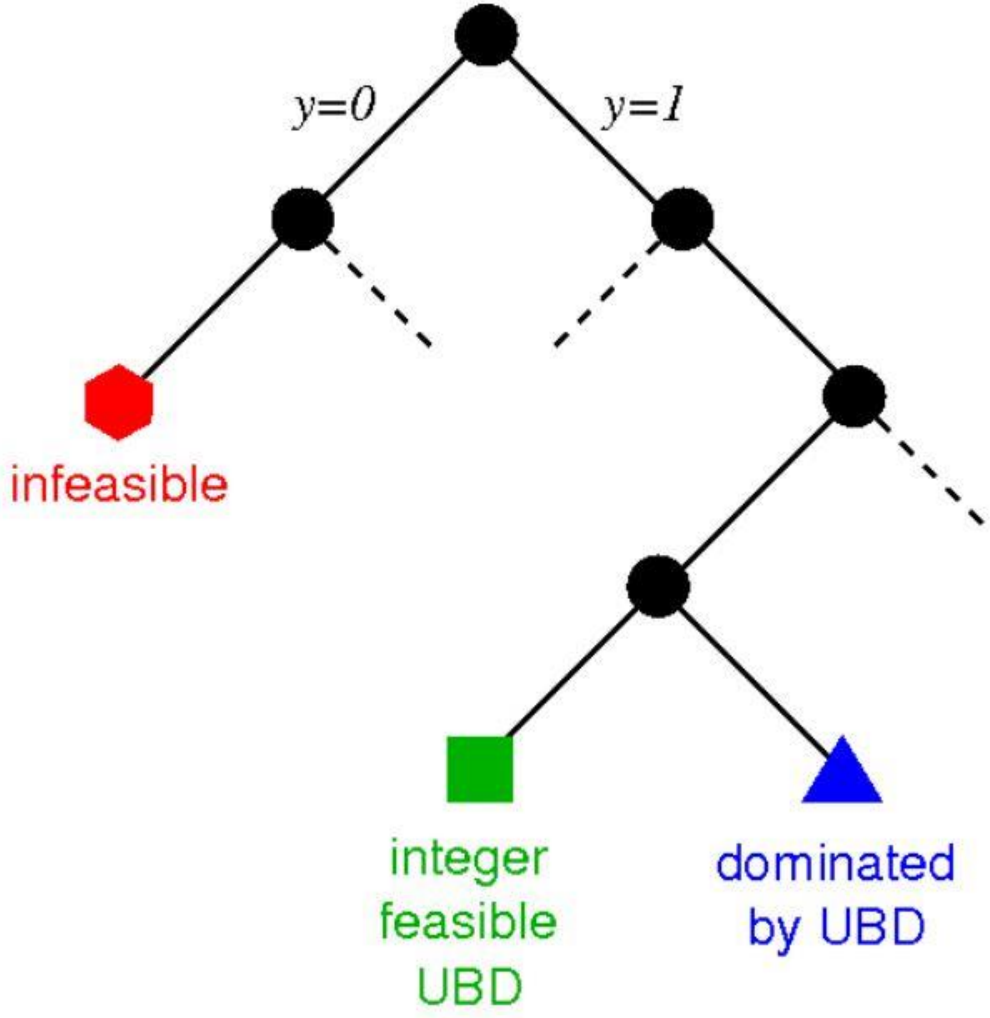
Resolución: Condiciones KKT

Ejemplo: Diseño RCTA

Clasificación

Programación lineal entera mixta (MILP)

$$\begin{array}{ll} \min & c^T x + d^T y \\ s.a., & Ax + By \le b \\ & x \ge 0\,,\ \ x \in \mathbb{R}^n \\ & y \in \{0,1\}^m \end{array}$$



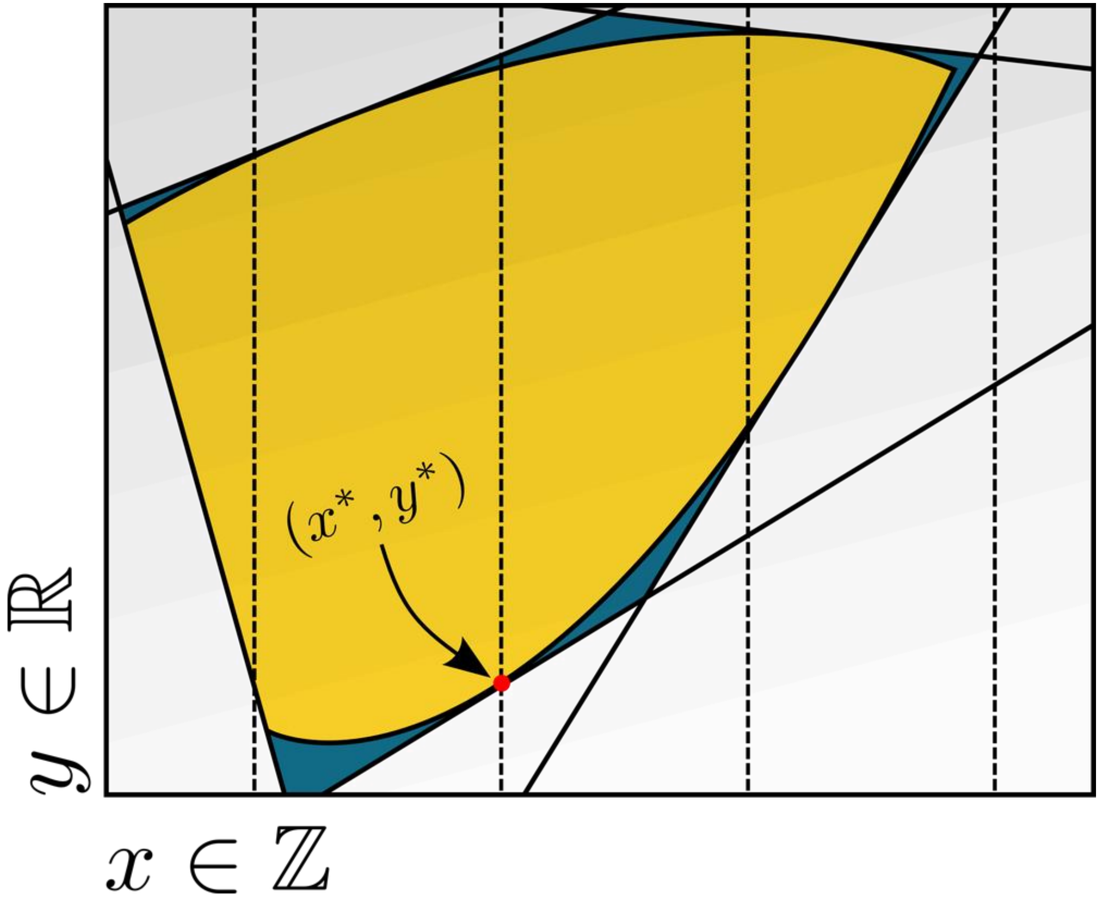
Resolución: Branch and Bound

Ejemplo: Selección de equipos

Clasificación

Programación no lineal entera mixta (MINLP)

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



Resolución: Outer Approximation

Ejemplo: Síntesis diagramas flujo

Clasificación

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

Fundamentos de Pyomo

Ejemplo 1: problema teórico

Workflow

$$\begin{aligned} \min_{x} \quad & x_1^2 + 2x_2^2 - x_3 \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 = 1 \\ & x_1 + 2x_2 - x_3 = 5 \\ & -10 \leq x_1, x_2, x_3 \leq 10 \end{aligned}$$

Workflow

Importar Pyomo y crear el modelo

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

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

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

Workflow

Definir variables y parámetros

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

- `initizalize:` iterable (`list`) con los elementos que forman el set
- `doc` : descripción (opcional)

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

- `1r argumento:` Sets de los que depende la variable
- `within / domain:` dominio de la variable (NonNegativeReals, Reals, Integer…)

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

- `1r argumento:` Sets de los que depende la variable
- `initialize:` *mapping* (python `dict`) con los valores correspondientes
- `mutable` : `True` si el valor del parámetro se puede modificar después de definirse

Workflow

Definir función objetivo y restricciones

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

- `expr:` función que devuelve un único valor
- `sense` : minimize/maximize

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

```
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)
```

- `1r argumento :` sets de los que depende la restricción
- `expr / rule:` función que devuelve `True/False` si se cumple la restricción o no

Workflow

Resolver

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

# 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
```

$$
\begin{aligned}
\min_{x} \quad & x_1^2 + 2x_2^2 - x_3 \\
\text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 = 1 \\
& x_1 + 2x_2 - x_3 = 5 \\
& -10 \leq x_1, x_2, x_3 \leq 10
\end{aligned}
$$

Ejemplo 1: problema teórico

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

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

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

Ejemplo 2: Mezcla lineal

Tipos de modelos

ConcreteModel

1 paso

Se especifican los datos al mismo tiempo que se construye el modelo (parámetros, sets, restricciones…)

Sencillez

Similar a GAMS

AbstractModel

2 pasos

PASO 1: Crear un “patrón” abstracto

PASO 2: se cargan los datos conocidos para crear una instancia concreta

Permite reutilizar modelos

Similar a AMPL

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

Ejemplo 3: Ubicación de almacenes

Programación disyuntiva

Reformulación M grande y envolvente convexa

Programación disyuntiva generalizada (GDP)

$$
\begin{aligned}
\min \quad & z = f(x) \\
s.a., \quad & h(x) = 0 \\
& g(x) \le 0 \\
& \bigvee_{i \in D_k} \begin{bmatrix} Y_{k,j} \\ r_{k,j}(x) \le 0 \end{bmatrix} \qquad k \in K \\
& \underline{\bigvee}_{i \in D_k} Y_{k,j} \qquad k \in K \\
& \Omega(Y) = True \\
& x^L \le x \le x^U \\
& x \in \mathbb{R}^n \\
& Y \in \{True, False\} \quad k \in K, i \in D_k
\end{aligned}
$$

Función objetivo y restricciones globales

Disyunciones

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

Proposiciones lógicas

Programación disyuntiva generalizada (GDP)

GDP

$$\min: \; z = f(x)$$
$$s.t. \quad g(x) \le 0$$
$$h(x) = 0$$

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

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

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

Big M

$$\min: \; z = f(x)$$
$$s.t. \quad g(x) \le 0$$
$$h(x) = 0$$

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

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

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

Envolvente convexa

$$\min: \; z = f(x)$$
$$s.t. \quad g(x) \le 0$$
$$h(x) = 0$$

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

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

Pyomo GDP

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()
```

Crear un elemento Disjunct() para cada bloque

```
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)
```

Añadir restricciones

```
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])
```

Combinar cada término en forma de `list`

Pyomo GDP

Transformaciones

```
pyo.TransformationFactory(trf_name).apply_to(model)
opt = pyo.SolverFactory('cbc')
results = opt.solve(model)
```

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

Transformaciones disponibles

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

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

Ejemplo 4: Formulación de mezclas

Recursos

- ✓ 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)

Introducción a la programación matemática

Isabela Fons
Isabela.fons@ua.es
Grupo COnCEPT - Departamento de Ingeniería Química

UNIVERSITAT D'ALACANT
UNIVERSIDAD DE ALICANTE
Escola Politècnica Superior
Escuela Politécnica Superior