Lista 00

MEC 2403 - Otimização e Algoritmos para Engenhria Mecânica

Pedro Henrique Cardoso Paulo
pedrorjpaulo.phcp@gmail.com

Professor: Ivan Menezes

Departamento de Engenharia Mecânica
PUC-RJ Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro
março de 2023

Lista 00

MEC 2403 - Otimização e Algoritmos para Engenhria Mecânica

Pedro Henrique Cardoso Paulo

março de 2023

1 Introdução

1.1 Objetivos

Esse é o entregável da Lista 00 da disciplina MEC 2403 - Otimização e Algoritmos para Engenhria Mecânica. Esse trabalho tem como objetivos:

1. Fixar os conceitos de gradiente e matriz Hessiana, com um exemplo
2. Fixar o conceito de matriz positiva definida, com um exemplo
3. Trabalhar a ideia de aproximação de uma função por polinômios de Taylor
4. Trabalhar a ideia de parametrização de uma reta por vetor e projeção de funções em seu plano
5. Exercitar o uso de ferramentas computacionais para visualização de funções

1.2 Links úteis

Nesta seção são listados alguns links e referências úteis para se entender o trabalho desempenhado.

1. Apostila de programação matemática da disciplina
2. GitHub usado para essa disciplina
3. Notebook com o código para as figuras desse relatório

2 Questão 01

2.1 Enunciado

Calcular o gradiente e a matriz Hessiana da função $f(x_1, x_2, x_3)$, dada pela equação eq. (1)

$$f(x_1, x_2, x_3) = 3x_1^3 x_2^2 x_3 - 6x_1 x_3^4 \log x_2 + x_1^{-1} x_2^3 - x_1^2 \sqrt{x_2} \tag{1}$$

onde $\log x$ reprersenta o logaritmo neperiano.

2.2 Solução

A expressão para o gradiente (∇f) e para a Hessiana ($\mathbf{H}$) são apresentadas, respectivamente, nas equações eq. (2) e eq. (3)

$$\nabla f = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f}{\partial x_3} \end{bmatrix} \tag{2}$$

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_3} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_3} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_3} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_3} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} \end{bmatrix} \tag{3}$$

Vale ressaltar que a formulação da Hessiana já faz uso do da igualdade matemática de derivadas segundas expressa na equação eq. (4)

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i x_j} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j x_i} \tag{4}$$

Dessa forma, o problema da determinação do gradiente e da hessiana se resume ao problema do cálculo das derivadas de primeira e seunda ordem da função $f(x_1, x_2, x_3)$. Começando pelas derivadas de primeira ordem para determinação do gradiente, estas são expressas pelas equações eqs. (5)–(7)

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 9x_1^2 x_2^2 x_3 - 6x_3^4 \log x_2 - x_1^{-2} x_2^3 - 2x_1\sqrt{x_2} \tag{5}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2} = 6x_1^3 x_2 x_3 - 6x_1 x_2^{-1} x_3^4 + 3x_1^{-1} x_2^2 - \frac{x_1^2}{2\sqrt{x_2}} \tag{6}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_3} = 3x_1^3 x_2^2 - 24x_1 x_3^3 \log x_2 \tag{7}$$

Já as derivadas segundas, necessárias para a determinação da Hessiana, são dadas pelas equações eqs. (8)–(13)

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} = 18x_1 x_2^2 x_3 + 2x_1^{-3} x_2^3 - 2\sqrt{x_2} \tag{8}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} = 6x_1^3 x_3 + 6x_1 x_2^{-2} x_3^4 + 6x_1^{-1} x_2 + \frac{x_1^2}{4x_2\sqrt{x_2}} \tag{9}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_3^2} = -72x_1 x_3^2 \log x_2 \tag{10}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_2} = 18x_1^2 x_2 x_3 - 6x_2^{-1} x_3^4 - 3x_1^{-2} x_2^2 - \frac{x_1}{\sqrt{x_2}} \tag{11}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_3} = 9x_1^2 x_2^2 - 24x_3^3 \log x_2 \tag{12}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_3} = 6x_1^3 x_2 - 24x_1 x_2^{-1} x_3^3 \tag{13}$$

3 Questão 02

3.1 Enunciado

Classificar a matriz abaixo quanto à sua positividade:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -3 \\ 1 & -3 & 2 \end{bmatrix}$$

3.2 Solução

A determinação da positividade da matriz será feita por meio de seus autodeterminantes. Caso os 3 autodeterminantes da matriz sejam positivos, sabe-se que ela será positiva definida (ou semi-definida caso algum seja zero). Caso eles alternem entre valores positivos e negativos, sabe-se que ela será negativa definida. Caso contrário, nada pode-se afirmar. Calculando o primeiro:

$$\begin{vmatrix} 3 \end{vmatrix} = 3$$

Calculando o segundo:

$$\begin{vmatrix} 3 & -2 \\ -2 & 4 \end{vmatrix} = 8$$

Calculando o terceiro:

$$\begin{vmatrix} 3 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -3 \\ 1 & -3 & 2 \end{vmatrix} = -3$$

Como nenhum dos padrões descritos foi respeitado, a matriz não é nem positiva definida e nem negativa definida, ou seja, a matriz apresenta autovalores positivos e negativos.

4 Questão 03

4.1 Enunciado

Determinar a expansão em série de Taylor, em torno do ponto $x = 1$, da função $f(x) = e^{2x}$. Em seguida, usando o MATLAB ou Python, plotar os gráficos da função f e de suas respectivas aproximações (polinômios) de ordens 0, 1, 2 e 3.

4.2 Solução

Para a função em questão, suas derivadas são calculadas de acordo com a regra de derivação da função exponencial. Assim temos que a derivada n-ésima da função $f(x)$ criada é dada pela equação eq. (14)

$$\frac{d^n f}{dx^n} = 2^n e^{2x} \tag{14}$$

Pela definição da série de Taylor, para uma expansão ao redor de $x = 1$, temos que a expansão da função seria a dada pela equação eq. (15)

$$f(x) \cong \sum_{n=0}^{\infty} 2^n e^2 (x-1)^n \tag{15}$$

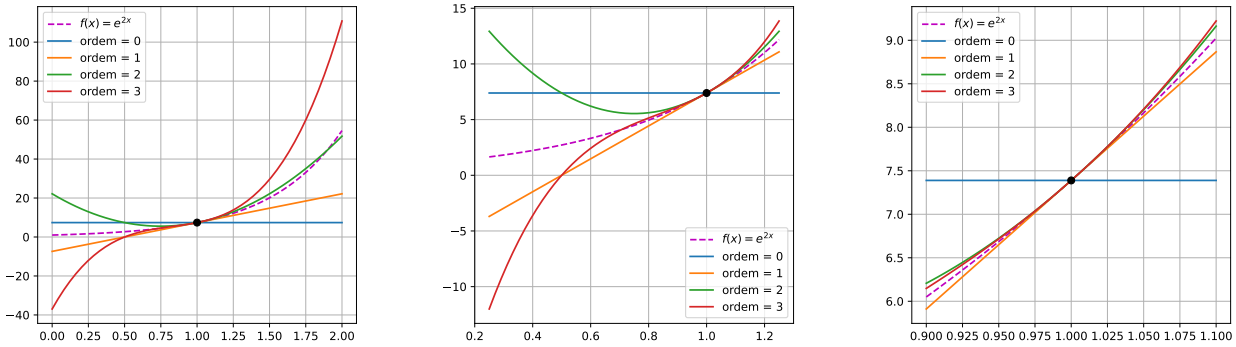
O primeiro passo é implementar em Python as funções `f` e `taylor_f` que representam, respectivamente, a função f definida na questão e seu polinômio de Taylor de ordem arbitrária.

```
def f(x):

return np.exp(2*x)

def taylor_f(x, order):

f_approx = 0
for n in range(order+1):
    f_approx += (x-1)**n * (2**n) * np.exp(2)
return f_approx
```

As funçoes são implementadas com funções do módulo `numpy` de modo a garantir a vetorização. Uma vez tendo as funções implementadas, podemos plotar gráficos das aproximações desejadas parta vizinhanças dos ponto $x = 1$ usando o seguinte código:

```
orders = [0, 1, 2, 3] # Ordens da aproximacao
points = 50 # Pontos de x considerados
x_min = 0 # Minimo x
x_max = 2 # Maximo x
x_values = np.linspace(x_min, x_max, points)
fig, ax = plt.subplots(1,1, figsize=(5, 5))
f_real = f(x_values)
ax.plot(x_values, f_real, 'm--', label='$f(x) = e^{2x}$')
for n in orders:
    f_approx = taylor_f(x_values, n)
    ax.plot(x_values, f_approx, label=f'ordem = {n}')

ax.plot(1, f(1), 'ko')
ax.legend()
ax.grid()
```

A fig. 1 apresenta alguns plots com diferentes intervalos de x para a análise da aporximação dos polinômios de Taylor. É possível ver que, para ordens maiores, a aproximação tente a ficar melhor na vizinhança do ponto expandido, mas isso não necessariamente é verdade conforme nos afastamos dele.



(a) $x \in [0, 2]$ **(b)** $x \in [0.25, 1.25]$ **(c)** $x \in [0.9, 1.1]$

Figura 1: Função $f(x) = e^{2x}$ e seus polinômios de Taylor

5 Questão 04

5.1 Enunciado

Seja a função $f(x_1, x_2)$ dada pela equação eq. (16)

$$f(x_1, x_2) = x_1^3 + 2x_1x_2^2 - x_2^3 - 20x_1 \tag{16}$$

Desenhar o gráfico da curva contida em um plano Cartesiano, cujo eixo das abscissas corresponde à reta que passa pelos pontos $P_1 = (-0.7, 1.6)$ e $P_2 = (3.7, -0.4)$, a origem desse eixo é no ponto P_1 e o eixo das ordenadas corresponde aos valores da função f. Utilizar o MATLAB ou Python e considerar apenas o trecho entre os pontos P_1 e P_2.

5.2 Solução

De forma similar ao feito na Questão 03 (seção 4), nossa solução começa por meio da implementação da função Python que representa a equação que desejamos estudar. Essa função receberá um vetor 1D que tem as coordenadas do ponto no plano xy.

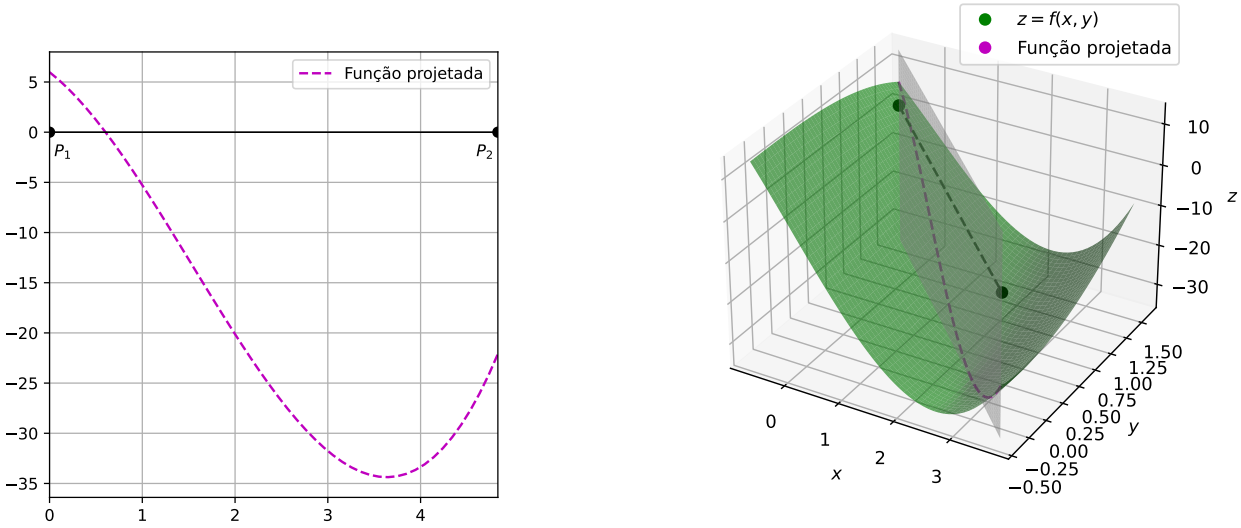
```
def f2(P):
    return P[0]**3 + 2*P[0]*(P[1]**2) - P[1]**3 - 20*P[0]
```

A determinação da equação da reta que passa pelos pontos P_1 e P_2, por sua vez, será feita vetorialmente por meio da equação paramétrica eq. (17)

$$\mathbf{P} = \mathbf{P_1} + \alpha\hat{\mathbf{v}}, \quad \alpha \in [0, ||\mathbf{v}||] \tag{17}$$

onde o vetor $\mathbf{v} = \mathbf{P_2} - \mathbf{P_1}$. É importante notar que, no espaço 3D, essa reta determina, na verdade, um plano paralelo ao eixo vertical, de modo que o objetivo da questão é determinar a interseção entre esse plano e a superfície definida na equação eq. (16). Em Python, o plot dessa interseção pode ser feito por meio do seguinte código:

```
P1 = np.array([-0.7, 1.6])
P2 = np.array([3.7, -0.4])
v = P2 - P1
v_norm = np.linalg.norm(v)
v_hat  = v / v_norm

points = 50
x_values = np.linspace(0, v_norm, points)
y_values = f2(P1.reshape(-1,1) + v_hat.reshape(-1,1)*x_values.reshape(1,-1))
fig, ax = plt.subplots(1,1, figsize=(5, 5))
ax.plot(x_values, y_values, 'm--', label='Funcao projetada')
ax.hlines(0, 0, v_norm, 'k', linewidth=1.0)
ax.set_xlim(0, v_norm)
ax.plot(0, 0, 'ko')
ax.text(0.05, -2.5, '$P_1$')
ax.plot(v_norm, 0, 'ko')
ax.text(4.6, -2.5, '$P_2$')
ax.legend()
ax.grid()
```



(a) Visão 2D

(b) Visão 3D

Figura 2: Plot da projeção da função no plano da reta

A visualização 2D dessa interseção, junto com uma representação 3D do problema é apresentada na fig. 2. Para mais informações sobre o código para a visualização 3D, visite o Notebook referenciado na seção 1.2. A execução deste Notebook permite também a interação com o gráfico, com rotação e mudança do ponto de visualização 3D.