Otimização em Engenharia Mecânica ^{4ª} Lista de Exercícios

POR ALLAN MOREIRA DE CARVALHO

Prof. Cícero

Exercício 1. Verificar se os seguintes vetores servem como direções conjugadas para minimizar a função

$$f(\mathbf{x}) = 2x_1^2 + 16x_2^2 - 2x_1x_2 - x_1 - 6x_2 - 5$$

- a) $\mathbf{s}_1^T = \{ 15 -1 \} e \mathbf{s}_2^T = \{ 1 \ 1 \}$
- b) $\mathbf{s}_1^T = \{ -1 \ 15 \} \mathbf{e} \ \mathbf{s}_2^T = \{ 1 \ 1 \}$

Solution. A função $f(\mathbf{x})$ escrita na forma matricial é

$$\begin{split} f(\mathbf{x}) &= & \mathbf{B}^T \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \\ &= & \{ -1 \ -6 \ \} \bigg\{ \begin{array}{cc} x_1 \\ x_2 \end{array} \bigg\} + \frac{1}{2} \{ \begin{array}{cc} x_1 \\ x_2 \end{array} \} \bigg[\begin{array}{cc} 4 & -2 \\ -2 & 32 \end{array} \bigg] \bigg\{ \begin{array}{cc} x_1 \\ x_2 \end{array} \bigg\} \end{split}$$

a) A direções $\mathbf{s}_1^T = \{\ 15\ -1\ \}$ e $\mathbf{s}_2^T = \{\ 1\ 1\ \}$ são conjugadas, uma vez que

$$\mathbf{s}_{1}^{T}\mathbf{A}\mathbf{s}_{2} = \left\{ 15 - 1 \right\} \begin{bmatrix} 4 - 2 \\ -2 & 32 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$
$$= \left\{ 62 - 62 \right\} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

b) A direções $\mathbf{s}_1^T = \{\ -1\ \ 15\ \}$ e $\mathbf{s}_2^T = \{\ 1\ \ 1\ \}$ não são conjugadas, uma vez que

$$\mathbf{s}_{1}^{T}\mathbf{A}\mathbf{s}_{2} = \left\{ -1 \ 15 \right\} \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 32 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$
$$= \left\{ -34 \ 482 \right\} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

Exercício 2. Demonstre que as direções de busca usadas no método de Fletcher-Reevs são **A**-conjugadas quando minimizam a seguinte função. Adote como ponte de partida $\mathbf{x}_1^T = \{\ 1\ 1\ \}$

$$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + 4x_2^2$$

Solution. No método de Fletcher-Reevs a primeira direção de busca aponda na direção inversa do gradiente da função f (Steepest Descent)

$$\mathbf{s}_1 = -\nabla f(\mathbf{x}_1)$$

, que nesse caso é

$$\mathbf{s}_1 = -\left\{ \begin{array}{l} 2x_1 \\ 8x_2 \end{array} \right\} \Big|_{\mathbf{x}_1}$$
$$= -\left\{ \begin{array}{l} 2 \\ 8 \end{array} \right\}$$

A segunda direção de busca é determinada como uma combinação linear

$$\mathbf{s}_2 = -\nabla f(\mathbf{x}_2) + \frac{|\nabla f_2|^2}{|\nabla f_1|^2} \mathbf{s}_1$$

1

com

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}_1 + \lambda_1 \mathbf{s}_1)}{\partial \lambda_1} = 0$$

$$\frac{\partial f\left(\left\{\begin{array}{c} 1 - 2\lambda_1 \\ 1 - 8\lambda_1 \end{array}\right\}\right)}{\partial \lambda_1} = 0$$

$$520.0 \lambda_1 - 68.0 = 0$$

$$\lambda_1 = 0.13076923076923078$$

$$\mathbf{x}_{2} = \mathbf{x}_{1} + \lambda_{1}\mathbf{s}_{1}$$

$$= \begin{cases} 0.73846154 \\ -0.04615385 \end{cases}$$

$$\nabla f_{2} = \begin{cases} 1.47692308 \\ -0.36923077 \end{cases}$$

$$\mathbf{s}_{2} = -\nabla f(\mathbf{x}_{2}) + \frac{|\nabla f_{2}|^{2}}{|\nabla f_{1}|^{2}}\mathbf{s}_{1} = -\begin{cases} 1.47692308 \\ -0.36923077 \end{cases} - \frac{\left|\begin{cases} 1.47692308 \\ -0.36923077 \end{cases}\right|^{2}}{\left|\begin{cases} 2 \\ 8 \end{cases}\right|^{2}} \begin{cases} 2 \\ 8 \end{cases}$$

$$= \begin{cases} -1.54508876 \\ 0.09656805 \end{cases}$$

Da função objetivo, temos uma matrix \mathbf{A} , tal que

$$\begin{split} f(\mathbf{x}) &= x_1^2 + 4x_2^2 \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \\ &= \frac{1}{2} \{ \ x_1 \ x_2 \ \} \begin{bmatrix} \ 2 \ \ 0 \\ \ 0 \ \ 8 \end{bmatrix} \left\{ \begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \end{array} \right\} \end{split}$$

, e portanto

$$\mathbf{s}_{1}^{T}\mathbf{A}\mathbf{s}_{2} = -\left\{ 2 \ 8 \right\} \begin{bmatrix} 2 \ 0 \\ 0 \ 8 \end{bmatrix} \begin{cases} -1.54508876 \\ 0.09656805 \end{cases}$$

$$= -\left\{ 4 \ 64 \right\} \begin{cases} -1.54508876 \\ 0.09656805 \end{cases}$$

$$= -1.5999e - 7 \sim 0$$

Apesar do erro numérico, o produto $\mathbf{s}_1^T \mathbf{A} \mathbf{s}_2$ é praticamente zero e portando as direções de busca são \mathbf{A} -conjugadas.

Exercício 3. Dado o seguinte problema de programação linear, onde as variáveis x e y são irrestritas em sina, pede-se:

Maximizar:

$$f(\mathbf{x}) = 19x + 7y$$

Sujeito à:

$$7x + 6y \leqslant 42$$
$$5x + 9y \leqslant 45$$
$$x - y \leqslant 4$$

- a) Resolver o problea usando o método Simplex;
- b) Usar um pacote ou biblioteca de sotware apropriado para conferir a sua resposta;
- c) Incluir o print da tela do computador, mostrando a solução obtida através do software.

Solution. Esse problema é análogo à:

Minimizar:

$$f(\mathbf{x}) = -19x - 7y$$

, usando variáveis auxiliares, $a,b \ {\rm e} \ c$, o prol
ma pode ser reescrito na forma canonica

$$7x + 6y + a = 42$$

$$5x + 9y + b = 45$$

$$x - y + c = 4$$

$$-19x - 7y - f = 0$$

Uma solução viável é que f=0, quando todas as variáveis não-básicas são zero

$$x = y = 0$$

, e as variáveis básicas são

$$a = 42$$
 $b = 45$ $c = 4$

No entendo essa solução não é ótima, pois todos os coeficientes da função objetivo são negativos

$$c_1'' = -19$$
 $c_2'' = -7$

, escolhe-se o menor deles

$$c_s'' = \min(c_i'' < 0)$$
$$= -19$$

A variável não-básica x, será básica na próxima iteração. o novo sistema é obtido selecionando o pivô

$$\begin{split} \frac{b_r''}{a_{\rm rs}''} &= \min_{a_{\rm is}^*>0} \left(\frac{b_i''}{a_{\rm is}''}\right) \\ \frac{b_1''}{a_{11}'} &= \frac{42}{7} = 6 \qquad \qquad \frac{b_2''}{a_{21}'} = \frac{45}{5} = 9 \qquad \qquad \frac{b_3''}{a_{31}'} = \frac{4}{1} = 4 \end{split}$$

, então $a_{31}^{\prime\prime}$ será o pivô, o novo sistema de equação é

$$\frac{13}{7}y + \frac{1}{7}a - c = 2$$

$$\frac{14}{5}y + \frac{1}{5}b - c = 5$$

$$x - y + c = 4$$

$$-\frac{26}{19}y - \frac{1}{19}f + c = 4$$

Com o coeficiente de y é negativo, a solução desse sistema não é ótima. A além disso a variável y será não-básica na próxima iteração Os candidatos à pivô

$$\frac{b_1''}{a_{12}'} = \frac{14}{13} \qquad \quad \frac{b_2''}{a_{22}'} = \frac{25}{14}$$
, fazendo o pivoteamo
ento com $\frac{14}{23}$

$$\begin{aligned} y + \frac{1}{13}a - \frac{7}{13}c &= \frac{14}{13} \\ y + \frac{1}{14}b - \frac{5}{14}c &= \frac{25}{14} \\ x - y + c &= 4 \\ -y - \frac{1}{26}f + \frac{19}{26}c &= \frac{4 \cdot 19}{26} \end{aligned}$$

eliminando as váriaveis y por pivoteamento

$$\begin{split} y + \frac{1}{13}a - \frac{7}{13}c &= \frac{14}{13} \\ \frac{1}{14}b - \frac{1}{13}a + \left(\frac{7}{13} - \frac{5}{14}\right)c &= \frac{25}{14} - \frac{14}{13} \\ x + \frac{1}{13}a + \frac{6}{13}c &= \frac{4 \cdot 13 + 14}{13} \\ -\frac{1}{26}f + \frac{5}{26}c + \frac{1}{13}a &= \frac{4 \cdot 19 + 2 \cdot 14}{26} \end{split}$$

Que possuiu como solutção básica $a=0,\ c=0$

$$f = -(4 \cdot 19 + 2 \cdot 14)$$

= -104

Nesse caso os coeficientes d função objetivo são possítivos e a solução é ótima

$$y = \frac{14}{13} = 1,0769$$
 $x = 4 + \frac{14}{13} = 5,0769$

O resultado foi validado com uso da biblioteca scipy, o resultado pode ser visto na Figura .

Figura 1. Saída do método simplex da biblioteca scipy.

Exercício 4. Minimizar a função $f(\mathbf{x}) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$, a partir do ponto $\mathbf{x}_0^T = \{-1, 2, 1, 0\}$, usando três iterações

- a) Do método de Fletcher-Reeves;
- b) Do método de Newton;

Usar a função apropriada do Matlab, Octava ou Scilab para conferir sua resposta. Incluir o print da tela do computador, mostrando a solução obtida através do software.

Solution

a) Método Fletcher-Reeves. Nesse método a primeira direção de busca é definida no sentido oposto ao gradiente da função objetivo, calculado no ponto de partida $\mathbf{x}_1^T = \{-1, 2, 1, 0\}$. Portanto

$$\mathbf{s}_{1} \ = \ -\nabla f(\mathbf{x}_{1}) = - \left\{ \begin{array}{rcl} -400.0\,x_{1}\,(-x_{1}^{2} + x_{2}) - 2.0\,(1.0 - x_{1}) \\ 200.0\,(-x_{1}^{2} + x_{2}) \end{array} \right\} = - \left\{ \begin{array}{c} -215.6 \\ -88 \end{array} \right\}$$

O próximo ponto, é determinado avançando um passo λ_1 na direção de \mathbf{s}_1 . Onde o passo ótimo, é obtido resolvendo-se o conjunto de equações determinados por

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}_1 + \lambda_1 \mathbf{s}_1)}{\partial \lambda_1} = 0$$

$$\frac{\partial f\left(\left\{\begin{array}{c} 215.6 \, \lambda_1 - 1.2 \\ 88.0 \, \lambda_1 + 1.0 \end{array}\right\}\right)}{\partial \lambda_1} = 0$$

$$9446 - 4.0 \left(\lambda_1 - 0.005565862\right)$$

 $\begin{array}{lll} 216070275688.96 & (0.00378630116239446-4.0 & (\lambda_1-0.005565862 \backslash \\ 70871985) & 1.0) & (0.00189315058119723 & \lambda_1-(\lambda_1-0.0055658627087 \backslash \\ 1985) & 2.0+2.15130747863321e-5) & 1.0-92966.72 & (0.010204081632 \backslash \\ 6531-\lambda_1) & 1.0 & = 0 \end{array}$

 $\lambda_1 = 0.012248965891443657$

Com esse novo passo, temos

$$\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + \lambda_1 \mathbf{s}_1 \\ = \begin{cases} 1.44087705 \\ 2.077909 \end{cases}$$

A nova direção de busca é determinada usando os gradientes da função objetivo, calculados em $\mathbf{x_1}$ e $\mathbf{x_2}$, e a direção $\mathbf{s_1}$ de modo que

$$\mathbf{s}_{2} = -\nabla f_{2} + \frac{|\nabla f_{2}|^{2}}{|\nabla f_{1}|^{2}} \mathbf{s}_{1}$$

$$= -\left\{ \begin{array}{c} -0.14549683 \\ 0.35646724 \end{array} \right\} + \frac{\left| \left\{ \begin{array}{c} -0.14549683 \\ 0.35646724 \end{array} \right\} \right|^{2}}{\left| \left\{ \begin{array}{c} -215.6 \\ -88 \end{array} \right\} \right|^{2}}$$

$$= \left\{ \begin{array}{c} 0.14608621 \\ -0.35622668 \end{array} \right\}$$

De maneira análoga ao passo iterativo anterior, o próximo ponto determinando usando o passo λ_2 que mais minima a a função objetivo calculada em $\mathbf{x}_2 + \lambda_2 \mathbf{s}_2$

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}_2 + \lambda_2 \mathbf{s}_2)}{\partial \lambda_2} = 0$$

$$\frac{\partial f\left(\left\{\begin{array}{c} 0.146086205560835 \, \lambda_2 + 1.44087704619525 \\ 2.07790899844704 - 0.35622667838942 \, \lambda_2 \end{array}\right\}\right)}{\partial \lambda_2} = 0$$

$$-0.128812109595067 \, (-0.331353620746538 \, \lambda_2 - 1) \, 1.0 + 431.7705805 \setminus \\ 82719 \, (-0.405200151721146 \, (0.101387003107994 \, \lambda_2 + 1) \, 1.0 - 0.34287 \setminus \\ 0336146243) \, (-0.171435168073121 \, \lambda_2 - 0.999142245307173 \, (0.101387 \setminus \\ 003107994 \, \lambda_2 + 1) \, 2.0 + 1) \, 1.0 \\ 0 \\ \lambda_2 = 0.001226618461930137 + 0.00122661846$$

E com isso temos o ponto

$$\mathbf{x}_3 = \mathbf{x}_2 + \lambda_2 \mathbf{s}_2$$
$$= \left\{ \begin{array}{c} 1.44105624 \\ 2.07747204 \end{array} \right\}$$

Onde a função objetivo vale

```
f(\mathbf{x}_3) = 0.19459932316258796
```

O resultado obtido difere do gabarito proposto devido à aproximações para os passos ótimos λ_i . O método foi implementado em **python** e com 15 passos convergiu para um solução com baiximo erro relativo

```
\mathbf{x}_{15}^{T} = \{ 1.00000629 \ 1.00001262 \}
f(\mathbf{x}_{15}) = 3.9780653892326417e - 11
```

Uma solução que minimizou mais a função objetivo do que o método CG (Conjugate Gradient ou Fletcher Reeves do biblioteca scipy), que levou 25 passos até a seguinte solução

$$\mathbf{x}_{25}^{T} = \{ 0.99944622 \ 0.99881446 \}$$

 $f(\mathbf{x}_{25}) = 9.194084286321785e - 07$

, conforme mostrado no printscreen da Figura 2.

```
from scipy.optimize import minimize
x0=[-1.2,1.0]
def fun(x):
    x1 = x[0]
    x2 = x[1]
    return 100.0*(x2-x1**2.0)**2.0+(1.0-x1)**2.0

minimize(fun, x0, method='CG', options={'maxiter':25})

✓ 0.1s

fun: 9.194084286321785e-07
    jac: array([ 0.0301919 , -0.01565393])
message: 'Maximum number of iterations has been exceeded.'
    nfev: 166
    nit: 25
    njev: 55
    status: 1
success: False
    x: array([0.99944622, 0.99881446])
```

 ${\bf Figura~2.~Sa\'ida~do~m\'etodo~CG~(Conjugate~Gradient-Fletcher~Reeves)}.$

b) Método de Newton. O método de Newton leva em conta a informação das derivadas segundas da função objetivo, na forma de uma matrix Hessiana. A partir do ponto initial \mathbf{x}_1 , cada próximo ponto é determinado por

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i - \mathbf{J}_i^{-1} \nabla f_i$$

No caso do problema proposto, temos

$$\nabla f_1 = \begin{cases} -400.0 x_1 (-x_1^2 + x_2) - 2.0 (1.0 - x_1) \\ 200.0 (-x_1^2 + x_2) \end{cases}$$

$$= \begin{cases} -215.6 \\ -88 \end{cases}$$

$$\mathbf{J}_1 = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_2} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 800.0 x_1^2 - 400.0 (-x_1^2 + x_2) + 2.0 & -400.0 x_1 \\ -400.0 x_1 & 200.00 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1330 & 480 \\ 480 & 200 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{J}_1^{-1} = \begin{bmatrix} 0.00561798 & -0.01348315 \\ -0.01348315 & 0.03735955 \end{bmatrix}$$

E portanto o próximo ponto é

$$\mathbf{x}_{2} = \mathbf{x}_{1} - \mathbf{J}_{1}^{-1} \nabla f_{1}$$

$$= \begin{cases} -1.2 \\ 1.0 \end{cases} - \begin{bmatrix} 0.00561798 & -0.01348315 \\ -0.01348315 & 0.03735955 \end{bmatrix} \begin{cases} -215.6 \\ -88 \end{cases}$$

$$= \begin{cases} -1.1752809 \\ 1.38067416 \end{cases}$$

Na iteração seguinte

$$\nabla f_2 = \begin{cases} -400.0 x_1 (-x_1^2 + x_2) - 2.0 (1.0 - x_1) \\ 200.0 (-x_1^2 + x_2) \end{cases}$$

$$= \begin{cases} -4.63781641 \\ -0.12220679 \end{cases}$$

$$\mathbf{J}_2 = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_2} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 800.0 x_1^2 - 400.0 (-x_1^2 + x_2) + 2.0 & -400.0 x_1 \\ -400.0 x_1 & 200.00 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1107.2725666 & 470.11235955 \\ 470.11235955 & 200 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{J}_2^{-1} = \begin{bmatrix} 0.44555068 & -1.04729441 \\ -1.04729441 & 2.46673023 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_{3} = \mathbf{x}_{2} - \mathbf{J}_{2}^{-1} \nabla f_{2}$$

$$= \begin{cases} -1.1752809 \\ 1.38067416 \end{cases} - \begin{bmatrix} 0.44555068 & -1.04729441 \\ -1.04729441 & 2.46673023 \end{bmatrix} \begin{cases} -4.63781641 \\ -0.12220679 \end{cases}$$

$$= \begin{cases} 0.76311487 \\ -3.17503385 \end{cases}$$

Finalmente, para a terceira iteração

$$\nabla f_3 = \begin{cases} -400.0 \, x_1 \, (-x_1^2 + x_2) - 2.0 \, (1.0 - x_1) \\ 200.0 \, (-x_1^2 + x_2) \end{cases}$$

$$= \begin{cases} -4.63781641 \\ -0.12220679 \end{cases}$$

$$\mathbf{J}_3 = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_2} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 800.0 \, x_1^2 - 400.0 \, (-x_1^2 + x_2) + 2.0 & -400.0 \, x_1 \\ -400.0 \, x_1 & 200.00 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1970.82670983 & -305.24594847 \\ -305.24594847 & 200 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{J}_3^{-1} = \begin{bmatrix} 0.00066447 & 0.00101414 \\ 0.00101414 & 0.00654781 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_4 = \mathbf{x}_3 - \mathbf{J}_3^{-1} \nabla f_3$$

$$= \begin{cases} 0.76311487 \\ -3.17503385 \end{cases} - \begin{bmatrix} 0.00066447 & 0.00101414 \\ 0.00101414 & 0.00654781 \end{bmatrix} \begin{cases} -4.63781641 \\ -0.12220679 \end{cases}$$

$$= \begin{cases} 0.76342968 \\ 0.58282478 \end{cases}$$

, nesse ponto a função objetivo vale

$$f(\mathbf{x}_4) = 0.05596551683393781$$

O método foi implementado em python e após 6 iterações temos econtra-se o ponto ótimo

$$\mathbf{x}_6 = \left\{ \begin{array}{l} 0.9999957 \\ 0.99999139 \end{array} \right\}$$

$$f(\mathbf{x}_6) = 1.8527397585949878e - 11$$

Para validação, a biblioteca scipy foi utilizada, e novamente o método implementado pelo scipy foi menos efetivo, levando 83 iterações para obter o seguinte ponto de ótimo

$$\begin{array}{rcl} \mathbf{x}_{83} & = & \left\{ \begin{array}{l} 0.9999957 \\ 0.99999139 \end{array} \right\} \\ f(\mathbf{x}_{83}) & = & 3.3076113268503843e - 07 \end{array}$$

, conforme pode ser visto no printscreen da Figura 3.

```
import numpy as np
  def dfun(x):
     x1=x[0]
      x2=x[1]
      dx1=-400*(x2-x1**2)*x1-2*(1-x1)
     dx2=200*(x2-x1**2)
     return np.array([dx1,dx2])
  minimize(fun, x0, method='Newton-CG', options={'maxiter':83}, jac=dfun)
    fun: 3.3076113268503843e-07
    jac: array([ 0.07002874, -0.03553699])
message: 'Warning: Maximum number of iterations has been exceeded.'
  nfev: 103
  nhev: 0
   nit: 83
  njev: 306
status: 1
success: False
     x: array([0.99942534, 0.99884871])
```

Figura 3. Saída do método Newton-CG da biblioteca scipy.