



HAL
open science

Formas de energia mínima na representação de sistemas lineares como grafos

Roberto Luo, Michel Tosin, Americo Cunha Jr

► To cite this version:

Roberto Luo, Michel Tosin, Americo Cunha Jr. Formas de energia mínima na representação de sistemas lineares como grafos. 28^a Semana de Iniciação Científica UERJ (SEMIC 2019), Sep 2019, Rio de Janeiro, Brazil. hal-02388515

HAL Id: hal-02388515

<https://hal.science/hal-02388515>

Submitted on 2 Dec 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Copyright

Formas de Energia Mínima na Representação de Sistemas Lineares como Grafos

Roberto Luo Yuan Cai
Michel Antonio Tosin Caldas
Americo Barbosa da Cunha Junior

robertoluoo@gmail.com michel.tosin@uerj.br americoc@ime.uerj.br

NUMERICO – Núcleo de Modelagem e Experimentação Computacional

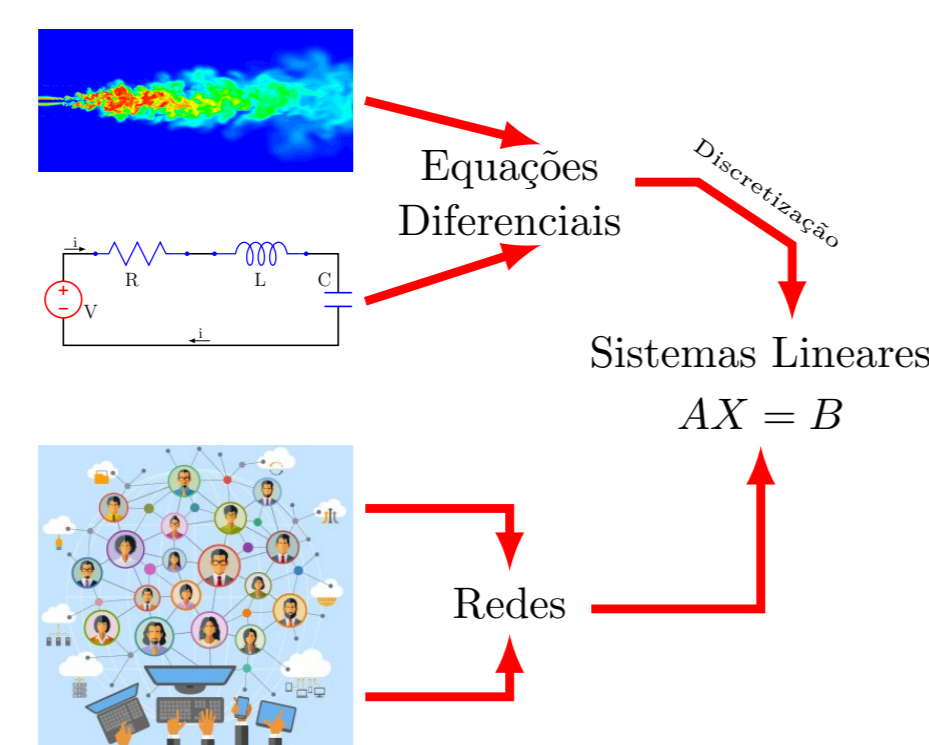


Introdução

- Diversas aplicações podem ser modeladas por equações diferenciais;
- Por meio do método numérico essas equações podem ser discretizadas para obter sistemas lineares.

Exemplo de aplicações:

- Simulações de velocidades de fluidos, como as ondas na Baía de São Francisco;
- Sistema elétrico RLC;
- Sistemas mecânicos;
- Dinâmica estrutural.



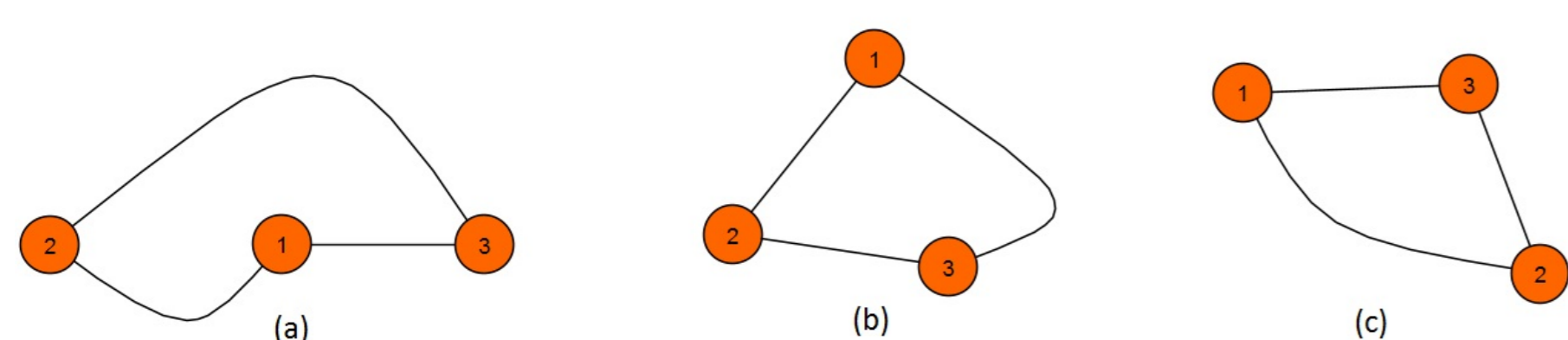
- Sistemas lineares possuem correspondência com matrizes e grafos;

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 = 1 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Existem diversas aplicações para grafos, tais como:

- Fluxograma de rede de transporte;
- Redes sociais;
- Redes elétricas;
- Banco de dados.

- Grafos podem apresentar diversas configurações;



- Cada configuração pode ser associado uma função de energia;

Qual a melhor (mais bela) configuração para um grafo?
A DE MENOR ENERGIA!

Objetivo

Determinar a configuração de menor energia do grafo associado a um sistema linear, otimizado à sua melhor forma por meio do método de Newton-Raphson.

Energia de um grafo

Seja um sistema $n \times n$ simétrico

$$AX = B.$$

Existe uma analogia entre esse sistema e um grafo, de modo que:

- os n vértices indicam as variáveis do sistema linear original;
- A representa a matriz de adjacência do grafo, tal que
 - a diagonal principal reúne as massas m_j dos vértices,
 - os demais elementos caracterizam constantes de rigidez k_{ij} das arestas do grafo.
- Por fim, os valores na matriz B expressam as cargas elétricas q_i de cada vértice.

Dessa analogia resulta um grafo onde atuam forças elásticas, elétricas e gravitacionais. Posicionando o primeiro vértice na posição de origem do sistema, a energia deste grafo é dada pelo somatório das energias atuantes, por meio da função

$$E = \underbrace{\sum_{1 \leq i < j \leq n} \frac{1}{2} k_{ij} r_{ij}^2}_{\text{energia elástica}} + \underbrace{\sum_{1 \leq i < j \leq n} \frac{1}{2} k_e \frac{q_i q_j}{r_{ij}}}_{\text{energia elétrica}} + \underbrace{\sum_{j=2}^n -m_j g r_{1j} \cos \theta_{1j}}_{\text{energia gravitacional}},$$

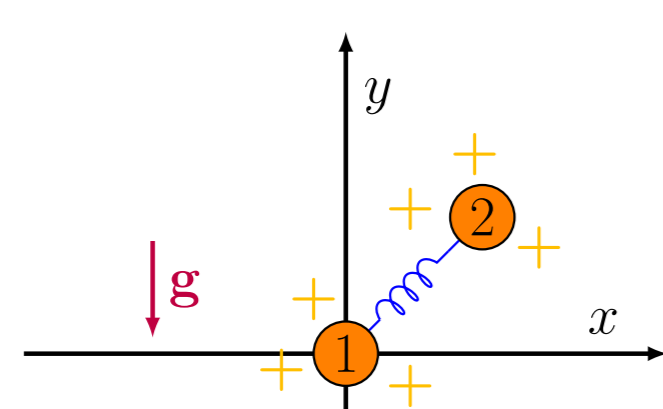
onde k_e é a constante de Coulomb, r_{ij} a distância entre os i -ésimo e j -ésimo vértices e g a aceleração da gravidade. Além disso, a função E está sujeita às seguintes restrições:

$$r_{ij}^2 = (r_{1j} \cos \theta_{1j} - r_{1i} \cos \theta_{1i})^2 + (r_{1j} \sin \theta_{1j} - r_{1i} \sin \theta_{1i})^2, \quad i \neq j.$$

Caso de dois vértices

A função da energia para o caso de dois vértices é dado por

$$E(r_{12}, \theta_{12}) = \frac{1}{2} k_{12} r_{12}^2 + \frac{k_e q_1 q_2}{r_{12}} - m_2 r_{12} g \cos \theta_{12}$$



Modelo físico.

Problema de otimização

Dentre as configurações possíveis para o grafo, será buscada a que gera mínima energia. Seja x o vetor que reúne os argumentos da função de energia E . O problema de otimização da energia se define em encontrar o vetor x^* que satisfaz

$$x^* = \arg \min E(x) \Rightarrow \nabla E(x) = 0.$$

Método de Newton-Raphson

- Método iterativo baseado em gradiente;
- É necessário que a função objetivo E seja de classe C^2 ;
- Um critério de parada é estabelecido de acordo com uma tolerância.

A partir de um chute inicial x_0 , a m -ésima iteração do método é da forma

$$x_{m+1} = x_m - H(x_m)^{-1} \nabla E(x_m),$$

onde

$$\nabla E(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial x_1}(x) \\ \frac{\partial E}{\partial x_2}(x) \\ \vdots \\ \frac{\partial E}{\partial x_n}(x) \end{bmatrix}$$

e

$$H(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial x_1^2}(x) & \frac{\partial^2 H}{\partial x_2 \partial x_1}(x) & \dots & \frac{\partial^2 H}{\partial x_n \partial x_1}(x) \\ \frac{\partial^2 H}{\partial x_1 \partial x_2}(x) & \frac{\partial^2 H}{\partial x_2^2}(x) & \dots & \frac{\partial^2 H}{\partial x_n \partial x_2}(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(x) & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(x) \end{bmatrix},$$

são, respectivamente, o vetor gradiente e a matriz hessiana de E , e x_{m+1} é a $m+1$ -ésima aproximação para x^* .

Caso de dois vértices

Substituindo k_{12} , q_1 , q_2 , g e m_2 por 1, a energia a ser minimizada neste caso é dada por

$$E(r_{12}, \theta_{12}) = \frac{1}{2} r_{12}^2 + \frac{1}{r_{12}} - r_{12} \cos \theta_{12}.$$

Vetor gradiente:

$$\nabla E = \begin{bmatrix} r_{12} - \frac{1}{r_{12}} - \cos \theta \\ r_{12} \sin \theta \end{bmatrix},$$

Matriz hessiana:

$$H = \begin{bmatrix} 1 + \frac{2}{r_{12}^3} & \sin \theta \\ \sin \theta & r_{12} \cos \theta \end{bmatrix}.$$

Caso de três vértices

Aplicando $k_{12} = k_{13} = k_{23} = k_e = q_1 = q_2 = q_3 = g = m_2 = m_3 = 1$, a expressão da energia neste caso se torna

$$E(r_{12}, r_{13}, r_{23}, \theta_{12}, \theta_{13}) = \frac{1}{2} r_{12}^2 + \frac{1}{r_{12}} - r_{12} \cos \theta_{12} + \frac{1}{2} r_{13}^2 + \frac{1}{r_{13}} - r_{13} \cos \theta_{13} + \frac{1}{2} r_{23}^2 + \frac{1}{r_{23}}.$$

De forma a respeitar a restrição

$$R = r_{23}^2 - (r_{13} \cos \theta_{13} - r_{12} \cos \theta_{12})^2 + (r_{13} \sin \theta_{13} - r_{12} \sin \theta_{12})^2 = 0,$$

a função objetivo a ser minimizada passa a ser a função lagrangeana definida por,

$$L(r_{12}, r_{13}, r_{23}, \theta_{12}, \theta_{13}, \lambda) = E(r_{12}, r_{13}, r_{23}, \theta_{12}, \theta_{13}) - \lambda R(r_{12}, r_{13}, r_{23}, \theta_{12}, \theta_{13}),$$

onde λ é o multiplicador de Lagrange.

Vetor gradiente:

$$\nabla L = \begin{bmatrix} r_{12} - \cos \theta_{12} + \lambda(2r_{12} - 2\alpha r_{13}) - \frac{1}{r_{12}^2} \\ r_{13} - \cos \theta_{13} + \lambda(2r_{13} - 2\alpha r_{12}) - \frac{1}{r_{13}^2} \\ r_{23} - 2\lambda r_{23} - \frac{1}{r_{23}^2} \\ r_{12} \sin \theta_{12} + 2\beta \lambda r_{12} r_{13} \\ r_{13} \sin \theta_{13} - 2\beta \lambda r_{12} r_{13} \\ r_{12}^2 - 2\alpha r_{12} r_{13} + r_{13}^2 - r_{23}^2 \end{bmatrix},$$

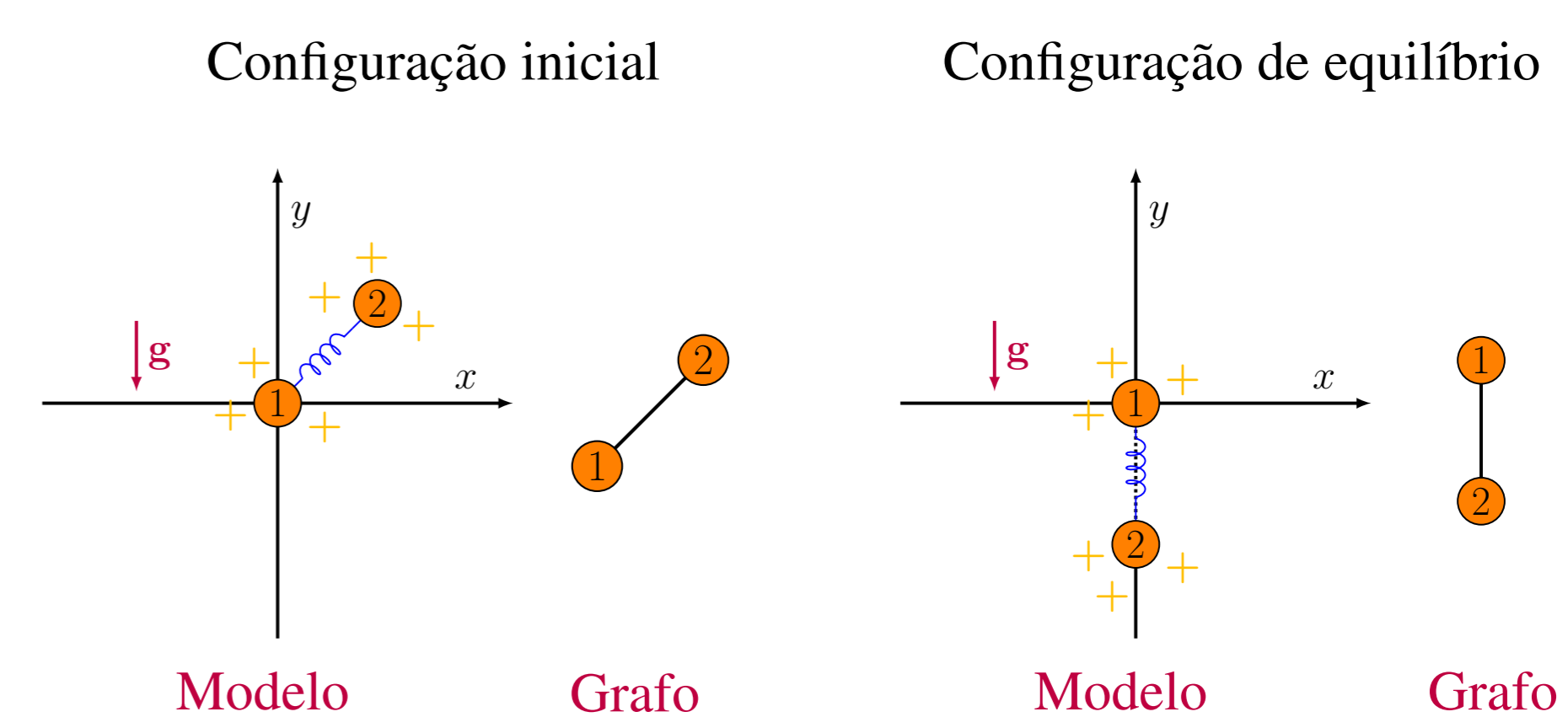
com $\alpha = \cos(\theta_{13} - \theta_{12})$ e $\beta = \sin(\theta_{13} - \theta_{12})$.

Matriz hessiana:

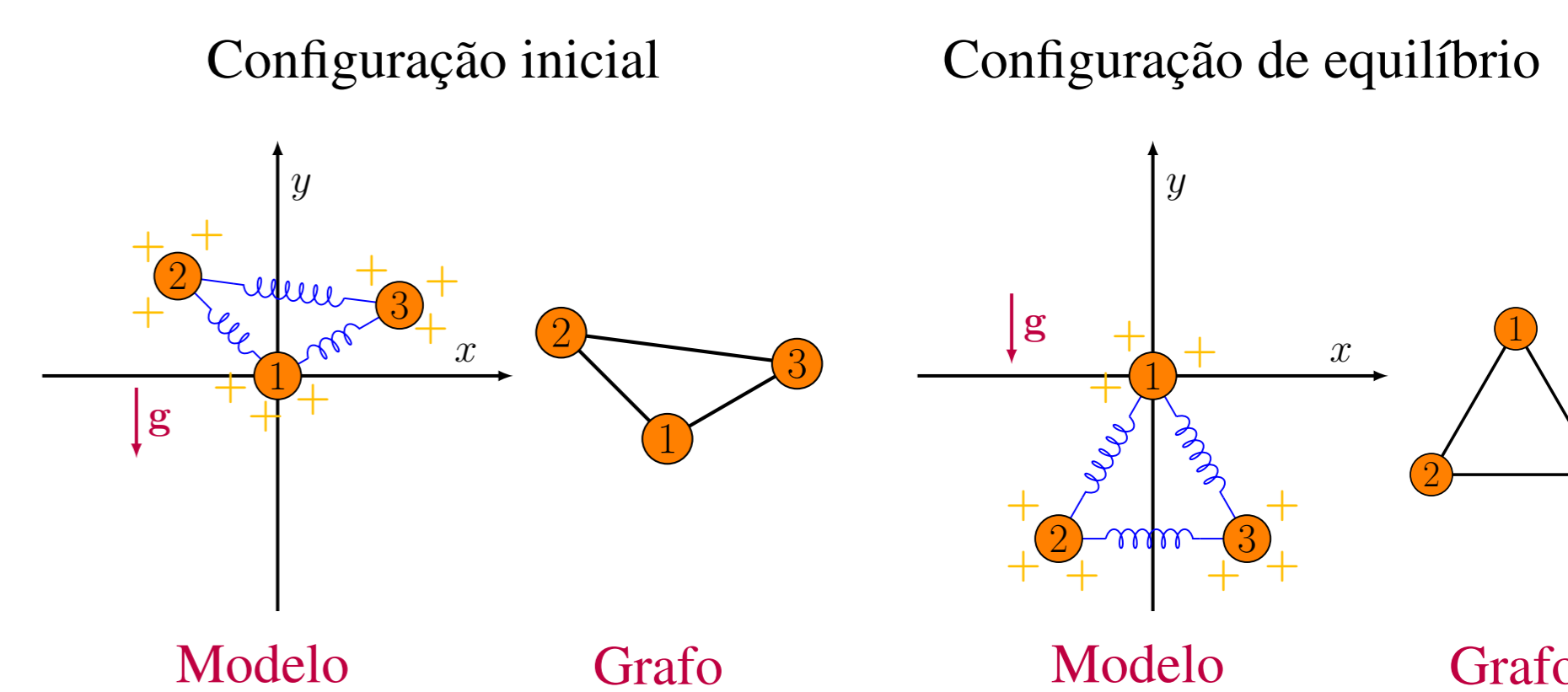
$$H = \begin{bmatrix} 2\lambda + \frac{2}{r_{12}^3} + 1 & -2\alpha\lambda & 0 & \sin \theta_{13} + 2\beta\lambda r_{13} & -2\beta\lambda r_{13} & 2r_{12} - 2\alpha r_{13} \\ -2\alpha\lambda & 2\lambda + \frac{2}{r_{13}^3} + 1 & 0 & 2\beta\lambda r_{12} & \sin \theta_{12} - 2\beta\lambda r_{12} & r_{13} - 2\alpha r_{12} \\ 0 & 0 & \frac{2}{r_{23}^3} - 2\lambda + 1 & 0 & 0 & -2r_{23} \\ \sin \theta_{13} + 2\beta\lambda r_{13} & 2\beta\lambda r_{12} & 0 & r_{12} \cos \theta_{13} + 2\alpha\lambda r_{12} r_{13} & -2\alpha\lambda r_{12} r_{13} & 2\beta r_{12} r_{13} \\ -2\beta\lambda r_{13} & \sin \theta_{12} - 2\beta\lambda r_{12} & 0 & -2\alpha\lambda r_{12} r_{13} & r_{13} \cos \theta_{12} + 2\alpha\lambda r_{12} r_{13} & -2\beta r_{12} r_{13} \\ 2\alpha r_{12} - 2r_{13} & 2\alpha r_{13} - 2r_{12} & -2r_{23} & -2\beta r_{23} & -2\beta r_{23} & 0 \end{bmatrix}$$

Resultados

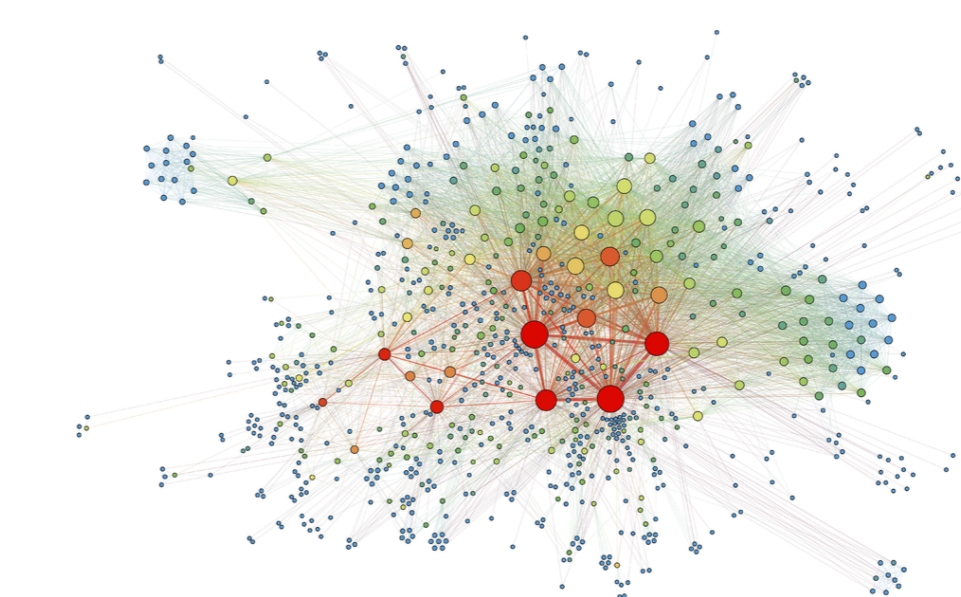
Caso de dois vértices



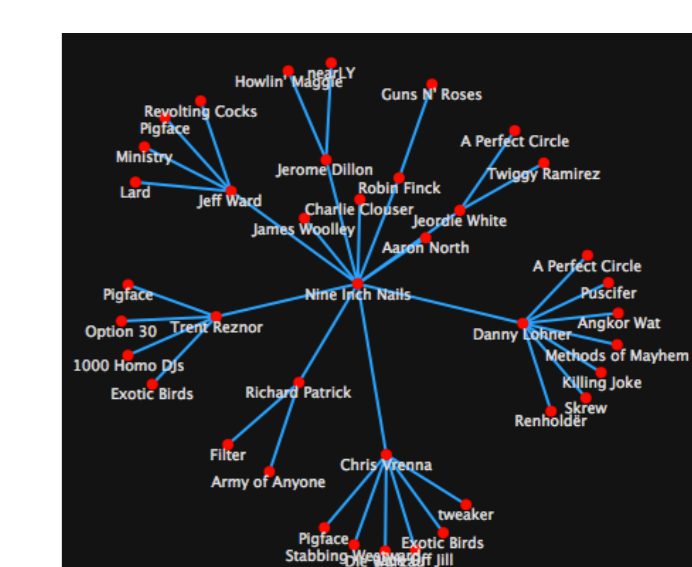
Caso de três vértices



Resultados da literatura



Fonte: [5].



Fonte: [6].

Considerações finais

- Um algoritmo para calcular configurações de energia mínima em grafos foi estudado e implementado;
- Esse algoritmo é baseado no método de Newton-Raphson, sendo muito eficiente do ponto de vista computacional;
- Por ser um método de busca de extremos que usa apenas informações locais, o algoritmo é fortemente dependente do chute inicial.

Agradecimentos



Referências

- J. L. Szwarcfiter. *Grafos e Algoritmos Computacionais*, 2. ed. Rio de Janeiro: Campus, 1986.
- U. M. Ascher, C. Greif. *A First Course in Numerical Methods*, SIAM, 2011.
- G. Strang. *Linear Algebra and Its Applications*, 4th ed., Brooks Cole, 2005.
- P. Eades. *A Heuristic for Graph Drawing*, Congressus Numerantium, 42 (11): 149—160, 1984.
- M. Granjean. *Introduction à la visualisation de données: l'analyse de réseau en histoire*, Geschichte und Informatik, 18/19 (11): 109—128, 2015.
- N. G. Belmonte. *Force Directed Layouts*, JavaScript InfoVis Toolkit project, 2010. <http://phillogb.github.io/blog/2009/09/30/force-directed-layouts/>