



COPPE/UFRJ

**RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DE EMPACOTAMENTO DE CIRCUNFERÊNCIAS
NA SUPERFÍCIE DE UMA ESFERA UTILIZANDO SUAVIZAÇÃO HIPERBÓLICA**

Jurair Rosa de Paula Junior

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia de Sistemas e Computação, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia de Sistemas e Computação.

Orientador: Adilson Elias Xavier

Rio de Janeiro

Março de 2010

RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DE EMPACOTAMENTO DE
CIRCUNFERÊNCIAS NA SUPERFÍCIE DE UMA ESFERA UTILIZANDO
SUAVIZAÇÃO HIPERBÓLICA

Jurair Rosa de Paula Junior

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO
ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE
ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE
JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA DE
SISTEMAS E COMPUTAÇÃO.

Examinada por:

Prof. Adilson Elias Xavier, D.Sc.

Prof. Edmundo Albuquerque de Souza e Silva, Ph.D.

Prof. Eduardo Antonio Barros da Silva, Ph.D

Prof. Sergio Barbosa Villas-Boas, Ph.D.

RIO DE JANEIRO – RJ, BRASIL

MARO DE 2010

Paula Junior, Jurair Rosa de

Resolução do Problema de Empacotamento de Circunferências na Superfície de uma Esfera utilizando Suavização Hiperbólica/ Jurair Rosa de Paula Junior. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2010.

XII, 66 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Adilson Elias Xavier

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia de Sistemas e Computação, 2010.

Referencias Bibliográficas: p. 59-66.

1. Empacotamento. 2. Suavização Hiperbólica. 3. Minimax. I. Xavier, Adilson Elias. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia de Sistemas e Computação. III. Título.

À família Lima. Serei eternamente grato por tudo!

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, por ter me dado saúde e perseverança que foram indispensáveis para que eu conseguisse alcançar meus objetivos.

Ao professor Adilson Elias Xavier pelo apoio, amizade, orientação, ensinamentos e, principalmente, por sempre ter acreditado em mim. Obrigado pelo incessante incentivo e paciência para transmitir os ensinamentos necessários para o desenvolvimento dessa dissertação.

Aos meus pais, irmã e sobrinha pelo apoio, confiança e carinho dedicados a mim por todos esses anos.

Aos meus avós Paulo Mageste Vieira *in memoriam* e Maria Auxiliadora Vieira pelos ensinamentos de vida, torcida constante e amor. Obrigado pelos conselhos e apoio nos momentos difíceis.

Aos meus familiares fluminenses pelo apoio. Em especial aos meus tios José de Lima e Maria Rosa por me receberem em sua casa como um filho; pelo carinho e afeto sempre presentes em seus gestos e palavras.

Aos colegas de pós-graduação e amigos de todas as horas: Alberto, Michael, Tiago, Francisco e Jesus, por todos os momentos que passamos juntos. Sem vocês as dificuldades teriam sido muito maiores.

Aos demais familiares e amigos distantes por sempre torceram pelo meu sucesso.

Aos professores Edmundo Albuquerque, Eduardo Antonio, João Lauro e Sergio Villas-Boas, pelo aceite imediato de participação na Banca de Defesa de Tese.

À todos os profissionais do Programa de Engenharia de Sistemas e Computação da COPPE, os quais são fundamentais para o bom funcionamento do programa. Em especial aos funcionários: Adilson, Carolina, Claudia, Itamar, Josefina Solange, Maria Mercedes, Roberto Rodrigues e Sonia.

À todas as outras pessoas que contribuíram de alguma forma, muito obrigado!

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DE EMPACOTAMENTO DE CIRCUNFERÊNCIAS NA SUPERFÍCIE DE UMA ESFERA UTILIZANDO SUAVIZAÇÃO HIPERBÓLICA

Jurair Rosa de Paula Junior

Março/2010

Orientador: Adilson Elias Xavier

Programa: Engenharia de Sistemas e Computação

Um empacotamento de círculos é um arranjo de círculos no interior de uma região limitada de tal forma que não haja superposição e o menor raio seja maximizado. No presente trabalho, consideramos o empacotamento de círculos sobre uma esfera unitária no \mathbb{R}^3 . Este problema apresenta uma série de obstáculos que inviabilizam a obtenção direta de soluções globais. Entre estas dificuldades, destacam-se a não-linearidade, não-convexidade e não-diferenciabilidade. Assim, em geral, o problema de empacotamento possui inúmeros mínimos locais. Para superar estes obstáculos, propomos a adoção da técnica conhecida como suavização hiperbólica, onde a solução final é obtida pela resolução de uma sequência de subproblemas irrestritos e completamente diferenciáveis. Aplicamos também o conceito de conjunto restrições ativas que reduz o esforço computacional e aprimora a qualidade das soluções obtidas. Para comprovar a eficiência e robustez da metodologia adotada, os resultados dos experimentos numéricos são comparados aos encontrados na literatura.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

RESOLUTION OF THE PROBLEM OF PACKING OF CIRCUMFERENCES IN
SURFACE OF A SPHERE VIA HYPERBOLIC SMOOTHING

Jurair Rosa de Paula Junior

March/2010

Advisor: Adilson Elias Xavier

Department: Systems Engineering and Computer Science

A circle packing is an arrangement of circles inside a given boundary such that no two overlap and the minimum radius is maximized. We consider the circle packing over a unit sphere in \mathbb{R}^3 . This problem presents several vicissitudes, which preclude to obtain an optimal solution. It presents the characteristics of nonlinearity, non-convexity and non-differentiability. Thus, generally, the problem has a variety of local minimum. In order to overcome these difficulties, we propose the adoption of the technique known as hyperbolic smoothing. In this approach, the final solution is obtained solving a sequence of completely differentiable unconstrained optimization subproblems. It is also applied the idea of active set of constraints, which minimizes the computational effort and improve the quality of solutions. To show the efficiency and robustness of the adopted methodology, the results of numerical experiments are compared to those found in the literature.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xii
1 Introdução	1
1.1 Conjectura de Kepler	5
1.2 Sequência da apresentação	7
2 Revisão Bibliográfica	8
2.1 Empacotamento de Esferas em Espaços n -Dimensionais	9
2.2 Número de Toques ou Entrechoques (“Kissing Number”)	14
2.3 Família de Problemas de Arranjo sobre uma Esfera	15
2.3.1 Problema Elíptico de Fekete	17
2.3.2 Problema de Fekete	18
2.3.3 Problema Tammes	18
2.3.4 Problema s -Energia Riesz	21
2.3.5 Problema Soma de Potência	23
2.4 Problema de Recobrimento	23
2.5 Empacotamento de esferas em um cubo em \mathbb{R}^3	24
2.6 Empacotamento de esferas em uma esfera em \mathbb{R}^3	25
3 Descrição do Problema e Metodologia de Resolução	26
3.1 Descrição do Problema	26
3.2 Aproximação do Problema via Suavização Hiperbólica	32
3.3 A Técnica da Penalização Hiperbólica	35
3.4 A Articulação da Suavização Hiperbólica com a Penalização Hiperbólica	38

4	Resultados Computacionais	41
5	Conclusões	57
5.1	Proposta para Trabalhos Futuros	58
	Referências Bibliográficas	59

Lista de Figuras

1.1	Empacotamento na esfera.	1
1.2	Grãos de pólen.	2
1.3	Empilhamento de bolas.	5
1.4	A conjectura de Kepler.	6
2.1	Empacotamento regular hexagonal, ou “colméia”, em \mathbb{R}^2	9
2.2	Arranjo regular cúbico de face centrada em \mathbb{R}^3	10
2.3	Cabo de fibra óptica.	13
2.4	Kissing Number em \mathbb{R}^3	14
2.5	Moléculas de carbono-60 estável.	16
2.6	Pontos iniciais gerados para $q = 50$ em \mathbb{R}^3	19
2.7	Solução final para caso mostrado na figura 2.6.	19
2.8	Empacotamento de círculos na superfície da esfera em \mathbb{R}^3	20
2.9	s -Energia Riesz.	21
2.10	Os 122 pontos em equilíbrio sobre uma esfera.	22
2.11	Problema de Recobrimento na esfera unitária em \mathbb{R}^3	24
2.12	Problema de empacotamento de esferas em um cubo.	24
2.13	Problema de empacotamento de esferas em esfera.	25
3.1	Distância entre dois pontos genéricos sobre a esfera em \mathbb{R}^3	27
3.2	Número máximo de vizinhos de um círculo.	28
3.3	Coordenadas esféricas.	29
3.4	Poliedros regulares convexos.	31
3.5	Função ϕ (SH).	33
3.6	Variação do parâmetro τ [1].	34
3.7	Penalização Hiperbólica.	36

3.8	Penalização Interior, Hiperbólica e Exterior.	36
3.9	Decréscimo continuado do parâmetro ξ até zero.	38
4.1	Distribuição do conjunto inicial de pontos uniformemente sobre S^2	42
5.1	Determinando a vizinhança exata do círculo.	58

Lista de Tabelas

4.1	Comparação de resultados entre formulação F_{SPHViz} e F_{SPH} no intervalo: $110 \leq q \leq 130$	46
4.2	Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $4 \leq 25$	48
4.3	Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $26 \leq 47$	49
4.4	Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $48 \leq 69$	50
4.5	Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $70 \leq 91$	51
4.6	Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $92 \leq 113$	52
4.7	Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $114 \leq 130$	53
4.8	Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $131 \leq 150$	55

Capítulo 1

Introdução

Neste trabalho, tem-se como principal objetivo solucionar o problema de empacotamento de circunferências/círculos congruentes sem sobreposição na superfície de uma esfera unitária. Almeja-se encontrar a posição dos centros dos círculos que possibilite produzir o máximo diâmetro de q círculos idênticos, não sobrepostos, dispostos sobre a superfície de uma esfera unitária. Equivalentemente, esse problema corresponde a maximizar a mínima distância entre pares de q pontos sobre a superfície de uma esfera unitária. A figura 1.1 exemplifica a ideia do problema em questão.

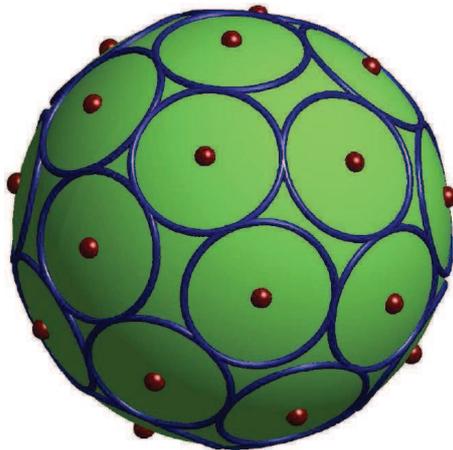


Figura 1.1: Empacotamento na esfera.

Esse problema também é conhecido como Tammes, botânico holandês, devido a suas investigações sobre a distribuição de orifícios no pólen de grãos esféricos, como apresentado em [2]. Tammes observou que a natureza distribuiu esses orifícios de forma homogênea sobre a superfície esférica da semente maximizando a menor

distância entre eles. Esse comportamento equivale perfeitamente ao problema em questão. A figura 1.2 mostra grãos de pólen que apresentam uma distribuição de furos que inspirou a formulação desse problema.

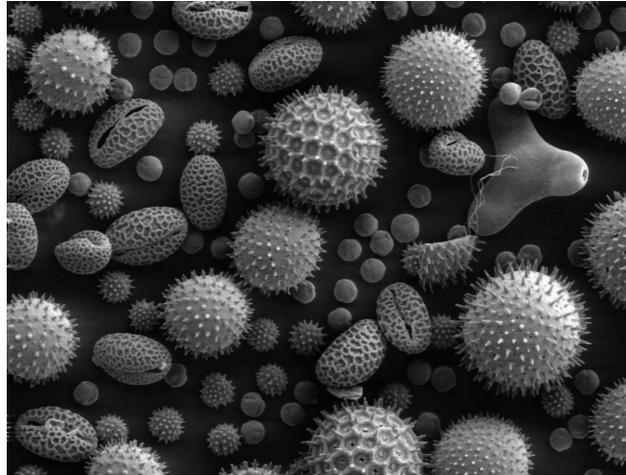


Figura 1.2: Grãos de pólen.

O problema Tammes, aparentemente singelo, está associado a um problema matemático cuja resolução apresenta várias peripécias, as quais dificultam a obtenção de uma solução ótima. Apresenta as características de não-linearidade, não convexidade e não-diferenciabilidade. Para os casos em que $q < 4$ e $q \in \{4, 6, 8, 12, 20\}$ (cujas soluções são dadas pelos vértices dos poliedros regulares convexos) o problema é simples. Já no caso geral, o problema possui uma variedade de mínimos locais. Dessa forma, a obtenção do mínimo global para o mesmo é uma tarefa extremamente difícil.

No presente trabalho, adota-se a abordagem conhecida como suavização hiperbólica para a resolução do problema de empacotamento de círculos na superfície de uma esfera unitária.

A suavização hiperbólica corresponde a um desdobramento direto do método da penalização hiperbólica, destinado à resolução do problema geral de programação não-linear com restrições, originalmente apresentado em [3].

A suavização hiperbólica foi originalmente utilizada na resolução de uma aplicação prática: Calibração Automática de Modelos Hidrológicos, como apresentado em [4] e [5]. Posteriormente, foi utilizada para resolver um problema de controle elétrico, conforme apresentado em [6], e para a minimização de funções definidas por mais de uma cláusula, como apresentado em [7].

Face aos sucessos iniciais, a metodologia foi estendida a uma ampla classe de Problemas de Programação Matemática Não-Diferenciáveis [8], em particular, foi utilizada com amplo êxito na resolução do importante problema teórico e prático conhecido como Minimax. Para um melhor entendimento das peripécias que envolvem um problema Minimax, bem como da teoria aplicada para resolver o mesmo, consultar os trabalhos [9, 10].

Recentemente aplica-se esta técnica à resolução do problema de Recobrimento de Uma Região Plana por Círculos, de aplicabilidade direta à localização ótima de estações de telefonia celular, cuja modelagem engendra um problema Min-Max-Min, conforme apresentado em [11, 12, 13]. Dentre as últimas aplicações dessa abordagem estão: resolução de problemas de agrupamento (clustering), [14], problemas de classificação segundo o critério de máquina vetor suporte (SVM), [15], problema de empacotamento de círculos em um quadrado unitário [16, 17] e o problema de geometria molecular [1].

A solução dos problemas que utilizam a técnica de suavização hiperbólica, como os problemas citados acima, basicamente é obtida através da resolução de uma sequência infinita de problemas continuamente diferenciáveis, classe C^∞ , que se aproximam do problema original gradativamente em função da atualização do parâmetro de suavização. O desempenho computacional dessa técnica obteve pleno êxito, frente a todos os problemas supracitados.

O presente trabalho tem uma forte conexão com o problema de empacotamento de círculos em um quadrado unitário apresentado nas teses de mestrado [18, 16], as quais fazem uso da mesma técnica de suavização hiperbólica aqui apresentada.

Uma das mais importantes aplicações práticas para o problema de empacotamento de círculos na superfície de uma esfera é a construção de códigos esféricos [19]. Em geral, os meios disponíveis para transferência de dados têm ruídos que são provocados por influências de naturezas diversas, os quais eventualmente provocam perturbações nos valores originalmente emitidos. Por isso, durante a decodificação dos dados no destino final é inexorável a ocorrência de erros. Portanto, para minimizar tais erros de transferência, deve-se definir uma codificação com a maior separação possível dos símbolos básicos do alfabeto em questão.

Vale destacar que os problemas de empacotamento estão intimamente ligados à

diversos outros problemas, tais como: recobrimento, número de adjacências, quantização e de codificação de canal.

De forma geral, os problemas de empacotamento têm uma natureza não-linear, não-diferenciável e não convexa, como registrado em [18, 16]. Conseqüentemente possuem uma miríade de mínimos locais. Portanto, qualquer metodologia para solucionar esse tipo de problema enfrentará dificuldades teóricas e computacionais extremamente adversas. Desse modo, não é razoável esperar que exista uma metodologia que possa produzir um ponto de mínimo global para todas as instâncias desse problema.

Os problemas de empacotamento, do ponto de vista computacional, pertencem à classe dos problemas *NP-completos*¹. Esses problemas são ditos intratáveis.

Tal fato é confirmado por Yan e Wenqi [20]: “O empacotamento de círculos é um problema *NP-completo*. A resolução de problemas *NP-completos* é um gargalo para as técnicas computacionais e para a Ciência da Computação. Pesquisas realizadas desde os anos 1970, entretanto, mostram que para os problemas de empacotamento de círculos não existe um algoritmo que seja completo, rigoroso e eficiente, ou seja, não se deve pensar em utilizar métodos matemáticos profusamente axiomáticos e formalistas. O que se busca obter é um algoritmo aproximativo ou um método heurístico para a resolução de problemas *NP-completos*, que não seja absolutamente completo e definitivo, porém, que tenha alta velocidade, confiabilidade e eficiência”.

Nesse enfoque aproximativo ou heurístico, o foco principal, visto aos olhos dos pesquisadores da área, deixa de ser a obtenção do ótimo global e passa a ser a redução do esforço computacional para obtenção de boas soluções.

Dentro desse referencial de complexidade *NP-completo* dos problemas de empacotamento, a perspectiva deste trabalho pode se propor a apresentar uma alternativa metodológica para abordar essa classe de problemas que ofereça os requisitos de eficiência, resultados produzidos com tempos computacionais aceitáveis, e de precisão, produzindo resultados de boa qualidade numérica, em comparação com os algoritmos consentâneos na literatura.

Na literatura se percebe claramente que a matriz principal dessa generosa família

¹problemas em que o tempo computacional necessário para sua resolução cresce exponencialmente em função do tamanho da entrada de dados para todo método conhecido.

de natureza geométrica é a conjectura de Kepler.

1.1 Conjectura de Kepler

Segundo os relatos históricos, a conjectura de Kepler surgiu no século XVII através da pergunta feita por Walter Raleigh ao matemático Thomas Harriot, após construir uma pilha com balas de canhão (figura 1.3): “Existe uma fórmula geral para determinar a quantidade de balas de canhão necessárias para criar tal pilha?”.

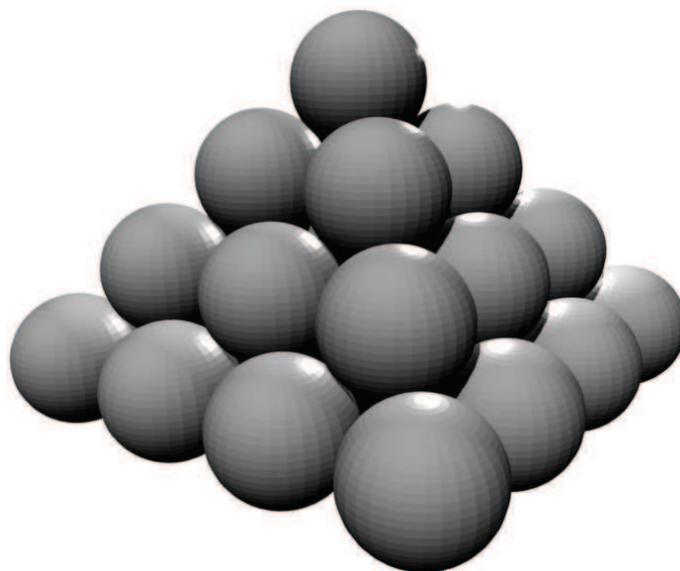


Figura 1.3: Empilhamento de bolas.

Harriot não teve grandes dificuldades para respondê-la. Ele foi além e desenvolveu estudos sobre empacotamentos limitados e teoria atômica [21].

Kepler tomou conhecimento dos estudos elaborados por Harriot, que o aconselhou a utilizar teoria atômica em suas pesquisas sobre ótica [21].

Em 1611, quando realizou um ensaio sobre a constituição da matéria, Kepler descreveu o empacotamento cúbico de face centrada (figura 1.4), e afirmou que “*o empacotamento seria o mais justo possível, e nenhum outro arranjo teria mais esferas no mesmo contentor*”. Tal conclusão ficou conhecida desde então por *Conjectura de Kepler*. Hilbert a mencionara em sua lista de problemas em aberto para o século XX [22]. Esses acontecimentos deram origem a uma ampla classe de problemas, e em particular, ao problema apresentado nesta dissertação.

Gauss, em seus estudos conseguiu demonstrar que o empacotamento cúbico de

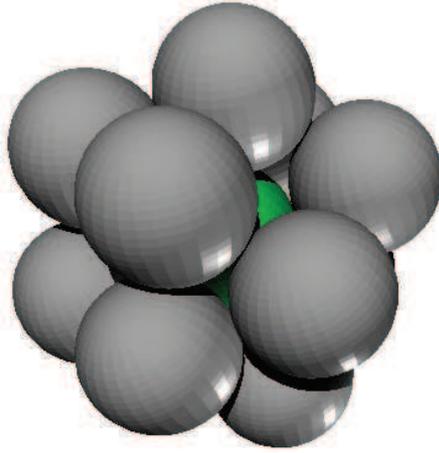


Figura 1.4: A conjectura de Kepler.

face centrada é o arranjo em reticulado regular de maior densidade em três dimensões. Porém, o primeiro avanço significativo somente foi feito com L. Fejes Tóth em 1953. Ele reduziu a conjectura de Kepler para um número finito, mas praticamente impossível humanamente, de cálculos.

Sendo assim, Tóth aventava a possibilidade que os cálculos feitos por computadores resolveriam a conjectura de Kepler, e afirma: *“Parece que o problema pode ser reduzido pela determinação do mínimo da função de um número finito de variáveis, e considerando o rápido desenvolvimento de nossos computadores, é imaginável que esse mínimo possa ser determinado com grande precisão”* [23].

Em 1998 Thomas Hales, utilizando as ideias de demonstração fundamentadas na resolução de uma série de problemas de otimização usando computadores (método de exaustão), anunciou que teve uma prova da conjectura de Kepler. Os Referees disseram que a prova de Hales está “99% certa”. Assim a conjectura de Kepler está agora muito perto de transforma-se em um teorema. Em 2003, T. Hales publicou um artigo detalhado descrevendo a parte não computacional desta prova. Ele trabalha em uma prova formal para remover qualquer resto de incerteza, e estima que tal prova levará cerca de 20 anos de trabalho [24, 25, 26, 27, 28, 29].

1.2 Sequência da apresentação

Este trabalho de dissertação está organizado como segue.

No Capítulo 2 é feita uma revisão bibliográfica, resumidamente, da generosa família de problemas de programação matemática com natureza geométrica similares ao problema de empacotamento na esfera; problemas de toques ou entrechoques, conhecidos na literatura como kissing number; recobrimentos em esferas; e três problemas de arranjo sobre uma esfera.

No Capítulo 3 é descrito formalmente o problema matemático associado ao empacotamento de círculos na superfície de uma esfera unitária, suas características e a metodologia proposta para resolução do mesmo.

No Capítulo 4 são apresentados os experimentos computacionais desenvolvidos e seus respectivos resultados, obtidos pela aplicação da metodologia proposta, os quais são comparados com aqueles registrados na literatura.

Finalmente, no Capítulo 5 são apresentadas as conclusões e sugestões para futuros trabalhos.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Nos problemas de empacotamento o principal objetivo é alocar um conjunto de objetos em um dado contentor com o intuito de se obter a maior densidade de empacotamento possível, ou seja, maximizar a proporção entre o volume dos objetos e o volume total do contentor. Nesse capítulo será apresentado, sucintamente, um conjunto de problemas de empacotamento de círculos em regiões esféricas e problemas correlatos relevantes.

Os casos específicos que se desdobram da ideia básica de empacotamento não são de interesse puramente teórico, pelo contrário, estão ligados a importantes problemas de natureza prática. São relatados como importantes problemas nas áreas: matemática aplicada, física, biologia, química e engenharia [30]. Alguns campos são relatados para a aplicação desses problemas, como por exemplo: complexidade computacional, aproximação numérica, problemas de empacotamento, modelos de energia potencial multi-objetivo, mecânica celeste, eletrostática, cristalografia, modelagem de estrutura molecular e morfologia viral [30]. Trabalhos relacionados aos campos citados podem ser consultados em Conway e Sloan [31], Greengard [32], Pain [33], Dean [34], Pardalos, Shalloway e Xue [35], Neumaier [36, 37], Hartke [38], Wales e Scheraga [39].

Ao observar os trabalhos realizados por [40, 41, 42], pode-se concluir que há uma relação direta entre os problemas de empacotamento e às questões de teoria de codificação. Sendo assim, o parâmetro a ser maximizado na problemática do empacotamento é o raio do círculo, já para os problemas relacionados à codificação de canal, o que se objetiva é a minimização da probabilidade de erros. Além disso,

considerando um canal discreto binário (q -nário), a busca de códigos corretores de erros nada mais é que o estudo de um caso discreto de empacotamento de esferas, como descritos em [31, 43].

Diante das questões apresentadas pode-se perceber que a obtenção de uma boa solução para o problema Tammes será de grande valia tanto no âmbito teórico quanto no prático.

Os estudos referentes ao tema não se cansam, e pode-se ter um apanhado geral, muito amplo e bastante atual, a partir do trabalho enciclopédico de [31]. A seguir, será feita uma apresentação sucinta de um conjunto de problemas correlatos.

2.1 Empacotamento de Esferas em Espaços n -Dimensionais

O empacotamento de esferas em espaços n -dimensionais pode ser considerado como uma generalização da conjectura de Kepler. Essa espécie de empacotamento vislumbra definir a conformação, regular ou não, de esferas ou hiper-esferas no espaço n -dimensional que enseje a maior densidade possível. Em um espaço de uma dimensão isso é trivial, pois uma bola unidimensional é um segmento de reta e pode-se obter uma densidade igual a 1.

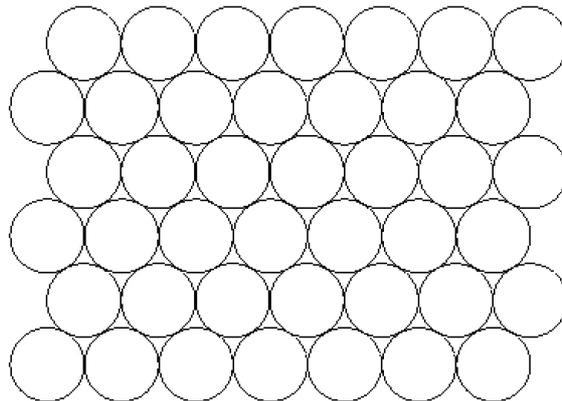


Figura 2.1: Empacotamento regular hexagonal, ou “colméia”, em \mathbb{R}^2 .

A seguir são apresentadas particularidades dos casos \mathbb{R}^2 , \mathbb{R}^3 e \mathbb{R}^4 . Porém, vale ressaltar que nesses problemas o contendor é o espaço todo, ou seja, \mathbb{R}^n .

Para o espaço de duas dimensões, o \mathbb{R}^2 , a maior densidade é dada pelo empaco-

tamento regular hexagonal, ou “colméia”, $\frac{\pi}{2\sqrt{3}} = 0,9069\dots$. A verificação desse fato é dada por [16]. Em três dimensões a resposta ainda é desconhecida. Mas, se forem considerados somente empacotamentos *regulares*, nesse caso a resposta é conhecida. Gauss [44] demonstrou que o *arranjo regular*¹ cúbico de face centrada, esquematizado na figura 2.2, é o mais denso empacotamento regular em três dimensões. As provas desse resultado podem ser encontradas em [45, 46, 47, 48, 49].

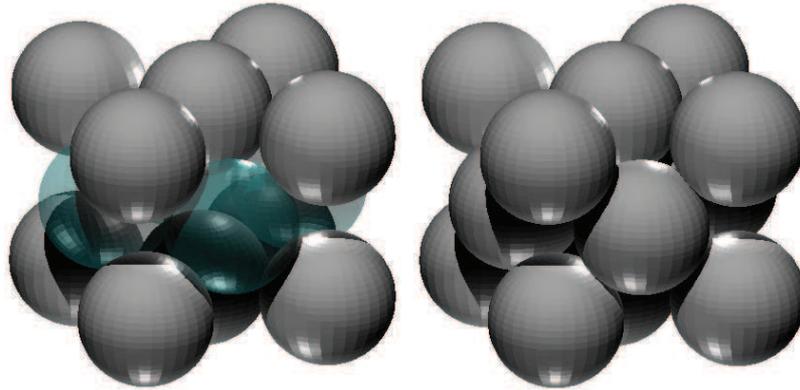


Figura 2.2: Arranjo regular cúbico de face centrada em \mathbb{R}^3 .

Em quatro dimensões, o mais denso empacotamento conhecido é o arranjo regular conhecido por “*tabuleiro de damas*”² D_4 , no qual os centros das bolas estão todos nos pontos (u_1, u_2, u_3, u_4) onde os u_i são inteiros cuja soma é um número par. Assim sendo, $(0, 0, 0, 0)$ é permitido, bem como $(1, 1, 0, 0)$, mas não $(1, 0, 0, 0)$. A bola centrada em $(0, 0, 0, 0)$ tem outras 24 bolas ao seu redor, centradas nos pontos cujas coordenadas tenham qualquer combinação de ordem e sinal dos valores $\{\pm 1, \pm 1, 0, 0\}$. Há 6 opções de posicionamento para os zeros e, daí, 4 outras opções para os 1 e seus sinais, num total de 24 possibilidades. Quaisquer dois centros distintos de D_4 , devem diferir por no mínimo 1 em duas coordenadas, ou por no mínimo 2 em uma coordenada, dado que a distância mínima entre centros é $\sqrt{2} \approx 1,414\dots$.

A partir da definição supracitada temos que D_4 contém os centros $(2, 0, 0, 0)$, $(0, 2, 0, 0)$, ..., $(0, 0, 0, 2)$, $(1, 1, 0, 0)$, $(1, 0, 1, 0)$, ..., $(0, 0, 1, 1)$ e, inversamente, que

¹Em um arranjo regular, há uma periodicidade na disposição dos planos de esferas. Para visualizar o arranjo regular cúbico de face centrada, imagine um cubo e coloque uma esfera em cada vértice desse cubo. Depois, coloque uma esfera no centro de cada face do cubo. Todas as esferas devem ter o mesmo raio.

²*Checkerboard*.

cada centro em D_4 é uma combinação inteira desses vetores. Na verdade, basta usar $(2, 0, 0, 0)$, $(1, 1, 0, 0)$, $(1, 0, 1, 0)$ e $(1, 0, 0, 1)$ para definir a matriz

$$M = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.1)$$

A matriz M é a matriz geradora para D_4 . Ou seja, todos os elementos em D_4 podem ser obtidos por meio de todas as possíveis combinações lineares das linhas de M . Em decorrência da definição em (2.1), D_4 tem determinante $\det D_4 = (\det M)^2 = 4$.

Para calcular a densidade de D_4 , é necessário conhecer o volume de uma bola n -dimensional de raio ρ . Esse valor é igual a $V_n \cdot \rho^n$, ou seja, é proporcional ao raio elevado à potência n ponderado por V_n , que é o volume de uma bola n -dimensional de raio unitário dado por

$$V_n = \frac{\sqrt{\pi^n}}{(n/2)!} \quad (2.2)$$

$$V_n = \frac{2^n \sqrt{\pi^{(n-1)/2}} ((n-1)/2)!}{n!} \quad (2.3)$$

A equação (2.3) é uma forma alternativa utilizada para valores ímpares de n , evitando o uso de $(n/2)!$.

A área da superfície da bola de raio ρ é dada por $n \cdot V_n \cdot \rho^{n-1}$, e a densidade do arranjo regular Λ é expressa por

$$\Delta = \frac{V_n \cdot \rho^n}{\sqrt{\det \Lambda}} \quad (2.4)$$

Quando se toma o valor de ρ igual à metade da menor distância entre dois pontos do arranjo, ρ passa a chamar-se raio de empacotamento de Λ . Para o arranjo regular D_4 , temos que $V_4 = \pi^2/2$, $\rho = 1/\sqrt{2}$, de forma que a densidade é

$$\Delta = \frac{\pi^2}{16} = 0,6169\dots \quad (2.5)$$

Esta é a maior densidade conhecida em quatro dimensões. Korkine e Zolotareff [50] já provaram que esta é a maior densidade possível para um empacotamento em arranjo regular para quatro dimensões.

D_4 pode ser generalizado, de forma óbvia, para um empacotamento em arranjo regular de n dimensões D_n : basta tomar n coordenadas inteiras com somatório par.

Se um arranjo regular puder ser obtido de algum outro por rotação, reflexão e mudança de escala, diz-se que são *equivalentes* ou *similares*, denotando-se por \cong . Duas matrizes geradoras, M e M' , definem arranjos regulares equivalentes se e somente se são relacionadas por $M' = cUMB$, onde c é uma constante não nula, U é uma matriz com elementos inteiros e determinante ± 1 , e B é uma matriz ortogonal real (com $B \cdot B^t = I$). As matrizes de Gram correspondentes se relacionam por $A' = c^2UAU^t$ [31, 18].

Se $\det U = \pm 1$ e $c = 1$, então M e M' são *arranjos regulares congruentes*. Por exemplo, o arranjo regular cúbico de face centrada ocorre em ambas as sequências A_n e D_n , visto que $A_3 \cong D_3$.

Por que tanta pesquisa para achar empacotamentos densos de bolas n -dimensionais? Existem várias razões:

- i) Este é um problema interessante de geometria pura. Em 1900, David Hilbert [22] o mencionou em sua lista de problemas em aberto para o século XX. Além disso, segundo comentam Conway e Sloane [31], os melhores empacotamentos mostram conexões, por vezes inesperadas, com outros ramos da matemática;
- ii) Existem aplicações diretas dos empacotamentos com arranjos regulares na teoria dos números;
- iii) Há aplicações diretas dos empacotamentos com arranjos regulares de bolas para problemas oriundos das comunicações digitais.

Um exemplo disso é uma pergunta típica de projeto de comunicações por rádio móvel em *Spread Spectrum*³: *quantas esferas de raio 0,25 podem ser empacotadas em uma esfera de raio 1, num espaço de 100 dimensões?*

- iv) Empacotamentos em duas e em três dimensões tem várias aplicações. Por exemplo, os círculos em um empacotamento bidimensional dentro de outro círculo podem representar fibras óticas, vistas em um corte transversal de um cabo, conforme ilustrado pela figura 2.3. Empacotamentos tridimensionais tem aplicações em química, física, biologia, projeto de antenas, tomografia por raios-X e na análise estatística em esferas;
- v) Empacotamentos n -dimensionais podem ser utilizados nos cálculos numéricos de integrais, seja na superfície de uma bola em \mathbb{R}^n ou no seu interior. Uma aplicação relacionada, ainda não muito utilizada, é a utilização de tais empacotamentos para a resolução de problemas n -dimensionais de busca ou aproximação;
- vi) Recentes desenvolvimentos no campo da física envolveram os arranjos regulares E_8 , Λ_{24} e os arranjos de Lorentz correlatos nas dimensões 10 e 26.



Figura 2.3: Cabo de fibra óptica.

³É uma técnica de codificação para a transmissão digital de sinais. Consiste em codificar e modificar o sinal de informação executando o seu espalhamento no espectro de frequências. O sinal espalhado ocupa uma banda maior que a informação original, porém possui baixa densidade de potência e, portanto, apresenta uma baixa relação sinal/ruído.

Segundo registram Conway e Sloane [31], os melhores empacotamentos conhecidos são: Z , A_2 , A_3 , D_4 , D_5 , E_6 , E_7 , E_8 , K_{12} , Λ_{16} e Λ_{24} . Desses, somente os três primeiros são, comprovadamente, os mais densos possíveis nas respectivas dimensões, com a observação de que A_3 é o *arranjo regular* mais denso possível. Em sendo confirmada a prova de Hales [21], esse arranjo regular passará a ser, comprovadamente, o mais denso empacotamento possível em três dimensões conforme previsto por Kepler [51].

2.2 Número de Toques ou Entrechoques (“Kissing Number”)

O problema de números de toques ou entrechoques, conhecido como “kissing number”, surge com a indagação a respeito de quantas bolas de raio unitário poderiam tocar, ao mesmo tempo, uma outra bola de raio unitário centrada na origem, sem esbarrarem umas nas outras [18]. Na figura 2.4 tem-se o exemplo para o caso tridimensional.

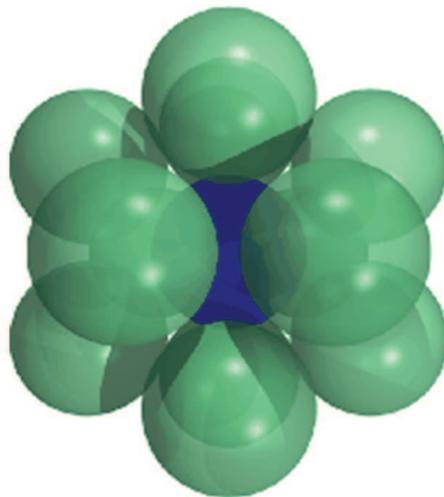


Figura 2.4: Kissing Number em \mathbb{R}^3 .

Pelo seu grande apelo geométrico, esse problema tem sido estudado em diversas dimensões [16].

A seguir serão descritos alguns problemas de empacotamento sobre uma esfera. No entanto, antes disso, faz-se necessário algumas definições.

Definição 2.1: A superfície de uma esfera unitária B , no \mathbb{R}^{n+1} , é denotada por S^n .

Definição 2.2: x_i representa um ponto no \mathbb{R}^3 . Dessa forma, $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})$.

Definição 2.3: $x(q)$ representa um conjunto de pontos no \mathbb{R}^3 , i.e., $x(q) = \{x_i, i = 1, 2, \dots, q\}$.

Definição 2.4: $\|\cdot\|$ denota a norma euclidiana.

Definição 2.5: A distância entre dois pontos genéricos x_i e x_j é denotada por $d_{ij} = d(x_i, x_j) = \|x_i - x_j\|$.

2.3 Família de Problemas de Arranjo sobre uma Esfera

Existem inúmeras formulações de problemas em esferas, no espaço de 3 dimensões, ou em hiper-esferas, em espaços de 4 ou mais dimensões. Abaixo serão apresentados sucintamente alguns problemas sobre esferas descritos em [52, 30].

Segundo Pinter [30], o modelo geral do arranjo ótimo de pontos sobre uma esfera é o seguinte: dado uma esfera unitária B no \mathbb{R}^3 , e um inteiro positivo q , deseja-se encontrar uma q -upla de vetores unitários distribuídos na superfície S^2 de B tal que $x(q)$ otimiza o valor de uma dada função critério $f(x(q))$ específica, onde

$$\|x_i\| = 1, \quad i = 1, 2, \dots, q. \quad (2.6)$$

O problema de distribuição de um número q de pontos sobre a superfície de uma esfera de maneira uniforme, tem inspirado não somente matemáticos, como também, atraído a atenção de pesquisadores da área biológica, química e física em estudos desenvolvidos em morfologia viral, cristalografia, estruturas moleculares e eletrostática [30].

Em duas dimensões, esse problema é análogo à distribuição de q pontos sobre uma circunferência com distância igualmente espaçadas.

A otimização com respeito a um critério de decisão, como a energia total de repulsão, é uma maneira natural para encontrar a distribuição de pontos sobre a esfera. O descobrimento feito por Kroto et al. [53], em 1985, de moléculas de carbono-60 (C_{60}) estável com átomos arranjados numa estrutura esférica, conforme mostra a figura 2.5, influenciou consideravelmente as atividades científicas nesse tema. O estudo do C_{60} gerou um ramo de pesquisa apostado na matemática, revelado por [54]. Consequente às descobertas, a busca passou a ser a de encontrar uma maior estabilidade das moléculas de carbono. Embora não se espere que tais moléculas tenham estruturas regularmente esféricas (devido às restrições de vínculos), a construção de maior estabilidade de configurações de pontos sobre uma esfera caracteriza tal modelagem [16].

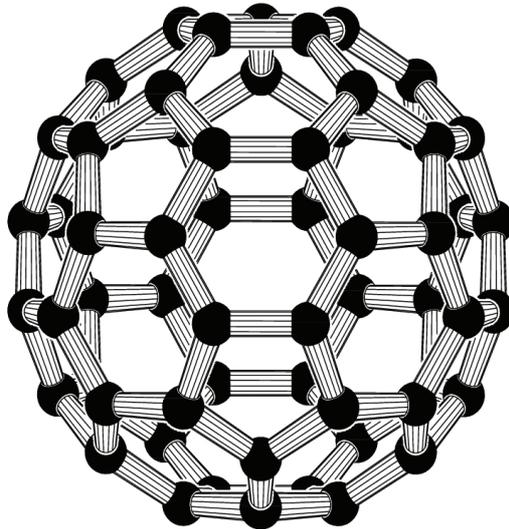


Figura 2.5: Moléculas de carbono-60 estável.

Em eletrostática, a localização de cargas pontuais idênticas sobre a esfera, de tal modo que elas estejam em equilíbrio com respeito à Lei de Coulomb, é um problema desafiador, e algumas vezes referido como o problema dual para o problema de estabilidade de moléculas.

Dentre as diversas aplicações para a distribuição uniforme de pontos sobre a esfera, existe algumas importantes na ciência da computação, como por exemplo: cálculos de áreas, os quais dependem de uma escolha apropriada de uma amostra de pontos numa dada ordem para aproximá-la por uma função integral; estudo de complexidade computacional, onde se utiliza o problema de encontrar q pontos

esféricos que maximizam o produto de suas distâncias mútuas.

Segundo Gonçalves Junior (2007), “as configurações ótimas parecem seguir um padrão: os pontos distribuídos sobre a esfera tendem a se arranjar por si próprios, em acordo com a estrutura hexagonal, ligeiramente perturbada” [16].

Para um número relativamente grande de pontos distribuídos sobre a superfície da esfera, observou-se, a partir de uma pesquisa empírica, que todas células de Dirichlet para uma configuração ótima, exceto exatamente doze, são hexagonais [52]. As exceções são células pentagonais. As figuras 2.5 e 2.10 mostram as células de Dirichlet para o caso específico do carbono-60 estável.

2.3.1 Problema Elíptico de Fekete

O problema Elíptico de Fekete, apresenta a seguinte formulação matemática: dada uma esfera unitária B no espaço Euclidiano \mathbb{R}^3 , e um inteiro positivo q , deseja-se encontrar a q -upla de pontos ou vetores unitários

$$x(q), \tag{2.7}$$

sobre a superfície S^2 de B , que maximiza o produto das distâncias entre todos os possíveis pares $\{x_i, x_j\}$, $1 \leq i < j \leq q$.

Em outras palavras, interessa encontrar o máximo global da função dada por

$$P_q(x(q)) = \prod_{1 \leq i < j \leq q} \|x_i - x_j\| \tag{2.8}$$

$$x_i \in S^2, \quad i = 1, 2, \dots, q.$$

Por razões de melhor tratamento numérico, pode-se aplicar a transformação logarítmica [30]. Conseqüentemente, a função objetivo em (2.8) é substituída pela função potencial logarítmica, e o problema anterior é equivalente ao problema de minimizar o Logaritmo da Energia

$$E_0(x(q)) = \sum_{1 \leq i < j \leq q} \log \|x_i - x_j\|^{-1}. \tag{2.9}$$

2.3.2 Problema de Fekete

O problema de distribuição de q pontos sobre uma esfera ou problema de Fekete pode ser formulado como o da minimização da função energia

$$E_1(x(q)) = \sum_{1 \leq i < j \leq q} \|x_i - x_j\|^{-1}, \quad (2.10)$$

onde valores ótimos $x^*(q) = \{x_i^*, i = 1, 2, \dots, q\}$ são denominados pontos de Fekete.

Fisicamente, isto representa a energia de q partículas carregadas que se repelem mutuamente de acordo com a Lei de Coulomb. Nesse contexto, o problema é conhecido como problema Thompson.

Configurações ótimas para esse problema são conhecidas para $1 \leq q \leq 6$ e $q = 12$, conforme apresentado por [55].

O sítio [56] contém um *Applet*⁴, chamado *Applet Thompson*, que tem por objetivo apresentar as figuras que representam esse problema, dado como entrada um número q de pontos iniciais (contido no intervalo $2 \leq q \leq 5000$), bem como o resultado final do empacotamento. Dentre os algoritmos utilizados nesse *Applet* estão: Relaxação, Monte Carlo, Algoritmo Genético, dentre outros.

As figuras 2.6 e 2.7 representam um caso particular para o problema Thompson. Nas figuras 2.6(a) e 2.7(a) as cores denotam números de partículas: verde: 4; vermelho: 5; azul: 6; amarelo: 7; roxo: 8; preto: outros. Já nas figuras 2.6(b) e 2.7(b) o esquema de cores indicam, vermelho: altas energias; azul: baixas energias.

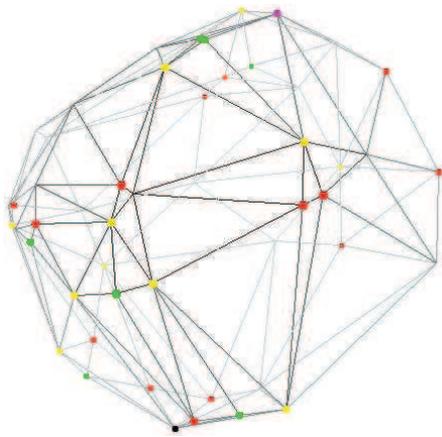
Para gerar a figura 2.6 bem como seu resultado final, figura 2.7, foram utilizados 50 pontos iniciais aleatórios e, para solucionar o problema, o algoritmo de Relaxação. A solução final encontrada foi $E = 1055.18760627$.

2.3.3 Problema Tammes

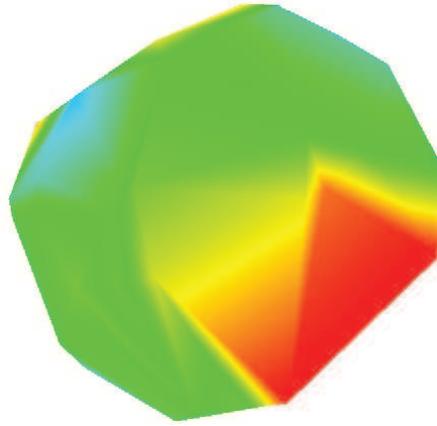
O problema de arranjo de q pontos sobre uma esfera pergunta como maximizar a mínima distância entre esses q pontos. Este problema pode ser descrito como

$$d_q = \max_{x_1, \dots, x_q \in S^2} \min_{1 \leq i < j \leq q} \|x_i - x_j\|. \quad (2.11)$$

⁴software que é executado no contexto de outro programa. O termo foi introduzido pelo AppletScript em 1993.

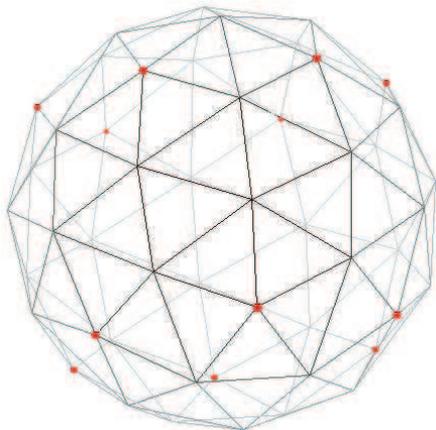


(a) Triangulação Delaunay de $q = 50$ em \mathbb{R}^3 .

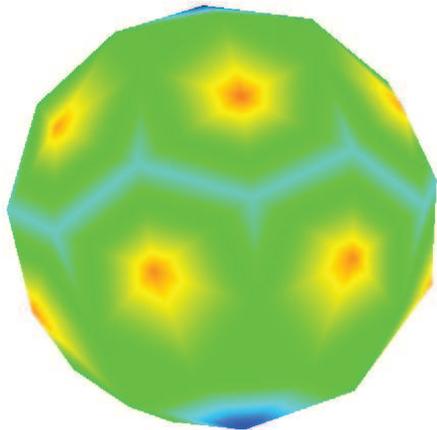


(b) Estirpe parcial da energia de todas as partículas com relação à triangulação Delaunay, para $q = 50$ em \mathbb{R}^3 .

Figura 2.6: Pontos iniciais gerados para $q = 50$ em \mathbb{R}^3 .



(a) Solução final para o caso mostrado na figura 2.6(a).



(b) Solução final para o caso mostrado na figura 2.6(b).

Figura 2.7: Solução final para caso mostrado na figura 2.6.

O arranjo correspondente é denominado *empacotamento ótimo*. A figura 2.8 apresenta o melhor empacotamento conhecido para o caso $q = 150$ círculos sobre a superfície S^2 de uma esfera unitária B em \mathbb{R}^3 .

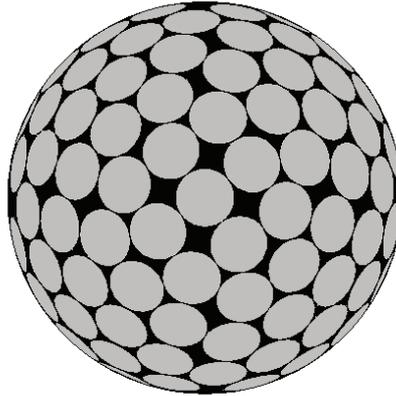


Figura 2.8: Empacotamento de círculos na superfície da esfera em \mathbb{R}^3 .

Soluções ótimas para esse problema são conhecidas para os casos $1 \leq q \leq 12$ e $q = 24$, conforme citado em [55]. No entanto, no sítio [57] pode-se encontrar soluções putativas para \mathbb{R}^3 , intervalo $4 \leq q \leq 130$; \mathbb{R}^4 , intervalo $5 \leq q \leq 130$ e $q = 600$; e para o \mathbb{R}^5 , no intervalo $6 \leq q \leq 130$.

Uma aplicação prática do problema de Tammes, como previamente comentado, está na construção de códigos esféricos. Em geral, os meios disponíveis para transferência de dados têm ruídos que são provocados por influências de naturezas diversas, os quais eventualmente provocam perturbações nos valores originalmente emitidos. Por isso, durante a decodificação dos dados no destino final é inexorável a ocorrência de erros. Portanto, para minimizar tais erros de transferência, deve-se definir uma codificação com a maior separação possível dos símbolos básicos do alfabeto em questão.

Isso deve-se ao fato de que o decodificador escolhe o símbolo básico do alfabeto mais próximo. Portanto, para minimizar as escolhas erradas, os símbolos (ou pontos, representados pelos centros dos círculos) devem estar o mais separado possível uns dos outros.

2.3.4 Problema s -Energia Riesz

Esse problema engendra uma formulação mais geral, pois os casos na esfera vistos anteriormente podem ser definidos como derivações dessa formulação, como descrito a seguir. A formulação desse problema é como segue:

$$E_s(x(q)) = \begin{cases} \sum_{1 \leq i < j \leq q} \frac{1}{\|x_i - x_j\|^s}, & s > 0; \\ \sum_{1 \leq i < j \leq q} \log \frac{1}{\|x_i - x_j\|}, & s = 0, \end{cases} \quad (2.12)$$

onde $x(q)$ denota o conjunto de q pontos distintos em \mathbb{R}^d . Para $\mu \in \mathbb{R}^d$, o problema de minimizar a s -energia de n -pontos sobre μ é definido como:

$$\xi_s(\mu, q) = \min_{x(q) \subset \mu} E_s(x_1, \dots, x_q). \quad (2.13)$$

As imagens contidas na figura 2.9 correspondem à energia referente ao conjunto de 101 pontos com $s = 0.1$, $s = 1$ e $s = 4$ (da esquerda para a direita).

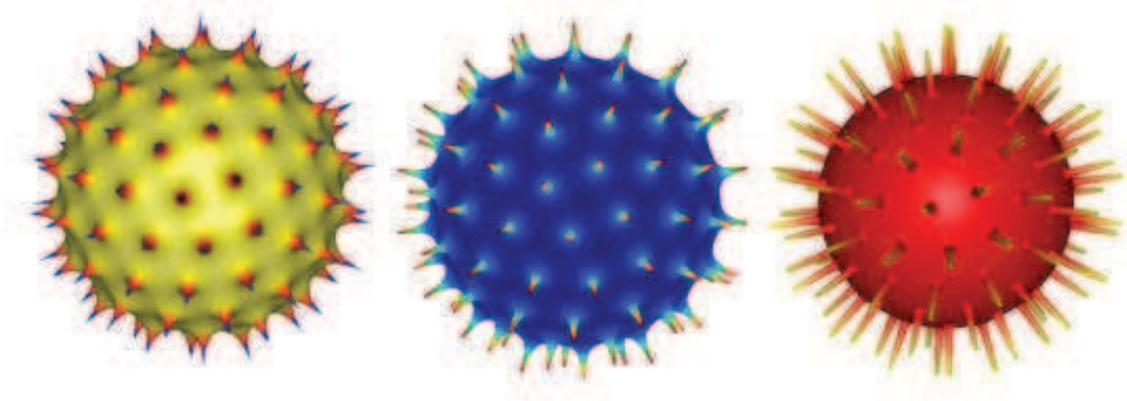


Figura 2.9: s -Energia Riesz.

Como previamente dito, esse problema é mais geral e engendra formulações para outros problemas a medida que o parâmetro s varia. Quando $s = 0$, considera-se o problema Elíptico de Fekete ou, como também é conhecido, problema Whyte [55]; $s = 1$: problema de Fekete ou, no contexto físico, conhecido como problema Thompson; $s \rightarrow +\infty$: problema Tammes.

Na literatura têm sido relatados extensos cálculos para obter configurações ótimas e sua energia correspondente. Inúmeros trabalhos trataram o caso $s = 1$, como por exemplo [58, 59]. Já nos trabalhos [60, 61, 62] foram considerados outros valores de

s. Pode-se encontrar no sítio [63] uma relação dos melhores resultados conhecidos expostos por Hardin, Sloane e Smith. Para os casos $q \geq 100$, longe de serem triviais, são algumas vezes utilizados para testes em rotinas de otimização global [64].

Esse problema é registrado como grande desafio, devido a existência de inúmeros mínimos locais para o mesmo. Além disso, os mínimos locais tem energias muito próximas do mínimo global, apesar da dificuldade de se provar essa aproximação com alguma precisão [52]. De qualquer modo, de acordo com Erber e Hockney [65], estima-se que o número de mínimos locais distintos (a menos de movimentos de rotação e de reflexão) cresce exponencialmente com q .

Em contrapartida, segundo os mesmos autores, algumas estruturas de configurações ótimas para valores $32 \leq q \leq 200$, com $s = 0$ e $s = 1$ exibem um padrão hexagonal-pentagonal de células de Dirichlet.

A figura 2.10 apresenta $q = 122$ pontos em equilíbrio sobre uma esfera com suas correspondentes células de Dirichlet.

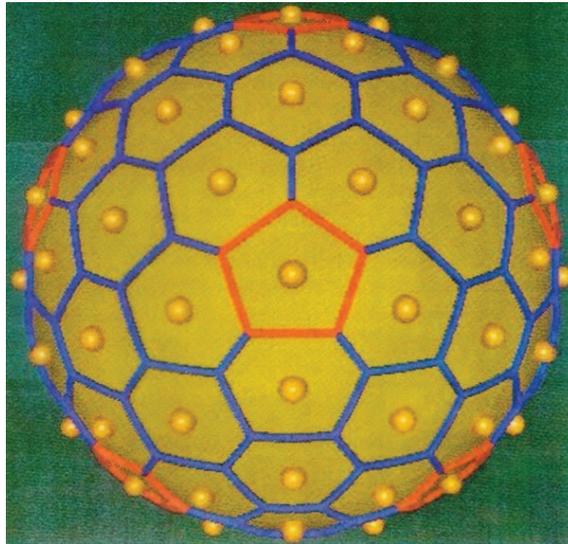


Figura 2.10: Os 122 pontos em equilíbrio sobre uma esfera.

2.3.5 Problema Soma de Potência

Para esse problema, o critério é a maximização da Soma das Potências das Distâncias. Sua formulação é a seguinte:

$$\begin{aligned} \text{Maximizar} \quad P_\alpha(x(q)) &= \sum_{1 \leq i < j \leq q} \|x_i - x_j\|^\alpha, \quad \alpha > 0 & (2.14) \\ \text{Sujeito a:} \quad x_i &\in S^2, \quad i = 1, 2, \dots, q \end{aligned}$$

onde α é o parâmetro do modelo.

Observou-se que este problema é interessante somente para o caso em que $\alpha < 2$. Para q par e $\alpha \geq 2$, configurações ótimas consistem de dois grupos iguais, obtidos pela alocação da metade dos pontos em posições opostas, por exemplo, metade no pólo norte e a outra metade no pólo sul da esfera [52].

2.4 Problema de Recobrimento

Nesse problema, deseja-se recobrir totalmente uma esfera com q círculos idênticos de forma a minimizar o raio dos mesmos. Dessa forma, a distância máxima de qualquer ponto da esfera ao centro do círculo mais próximo tem de ser tão pequena quanto possível. Sejam x_i os centros dos círculos, o problema pode ser descrito como:

$$d_q = \max_{x \in S^2} \min_i \|x - x_i\|. \quad (2.15)$$

Equivalentemente, procura-se o menor raio de q círculos idênticos que recobram a superfície de uma esfera unitária. A figura 2.11 representa a solução para o caso $q = 100$.

Para se ter uma idéia das dificuldades intrínsecas à resolução do problema de recobrimento, vale a pena lembrar que um problema de dimensão muito pequena: recobrimento de um quadrado com 6 círculos congruentes foi objeto de um artigo numa revista científica internacional [66].

Pode-se encontrar no sítio [67] uma relação dos melhores resultados conhecidos, em três dimensões, expostos por Hardin, Sloane e Smith.

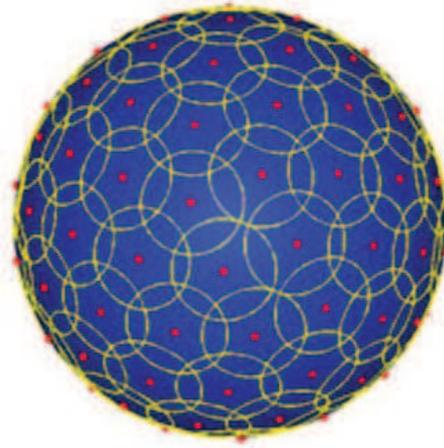


Figura 2.11: Problema de Recobrimento na esfera unitária em \mathbb{R}^3 .

2.5 Empacotamento de esferas em um cubo em \mathbb{R}^3

Seja um cubo $C \in \mathbb{R}^3$ e um número q de esferas em \mathbb{R}^3 , deseja-se alocar as q esferas dentro do cubo, sem sobreposição, maximizando seu raio. Equivalentemente deseja-se maximizar a mínima distância entre pares de q esferas $b_i, i = 1, 2, \dots, q$, dentro do cubo. Esse problema pode ser formulado como:

$$\max_{b_1, \dots, b_q \in C} \min_{1 \leq i < j \leq q} \|x_i - x_j\|, \quad (2.16)$$

onde $\{x_i, i = 1, 2, \dots, q\}$ correspondem aos centros das esferas $b_i \subset C, i = 1, 2, \dots, q$, em \mathbb{R}^3 .

A figura 2.12 representa o problema em questão para o caso particular $q = 20$.

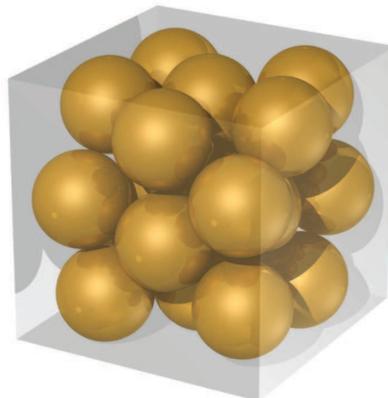


Figura 2.12: Problema de empacotamento de esferas em um cubo.

O sítio [68] contém um *Applet*, escrito por Martin Erren, que tem por objetivo apresentar as figuras que representam esse problema, dado como entrada um número q de esferas iniciais (contido no intervalo $1 \leq q \leq 72$), bem como o resultado final do empacotamento. A figura 2.12 foi gerada usando esse *Applet*.

2.6 Empacotamento de esferas em uma esfera em \mathbb{R}^3

Seja uma esfera $B \in \mathbb{R}^3$ e um número q de esferas em \mathbb{R}^3 , deseja-se alocar as q esferas dentro de B , sem sobreposição, maximizando seu raio. Equivalentemente deseja-se maximizar a mínima distância entre pares de q esferas $b_i, i = 1, 2, \dots, q$, dentro da esfera B . Esse problema pode ser formulado como:

$$\max_{b_1, \dots, b_q \in B} \min_{1 \leq i < j \leq q} \|x_i - x_j\|, \quad (2.17)$$

onde $\{x_i, i = 1, 2, \dots, q\}$ correspondem aos centros das esferas $b_i \subset B$ em \mathbb{R}^3 .

A figura 2.13 representa o problema em questão para o caso particular $q = 20$.

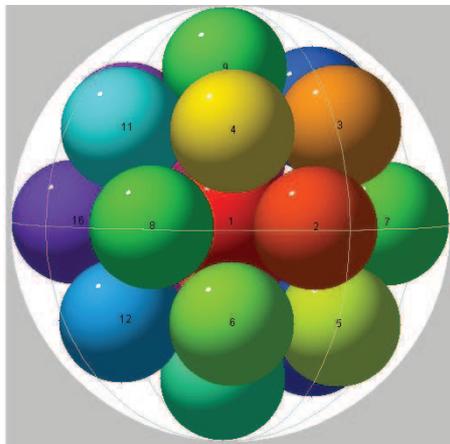


Figura 2.13: Problema de empacotamento de esferas em esfera.

O sítio [69] contém um *Applet*, escrito por Martin Erren, que tem por objetivo apresentar as figuras que representam esse problema, dado como entrada um número q de esferas iniciais (contido no intervalo $1 \leq q \leq 50$), bem como o resultado final do empacotamento. A figura 2.13 foi gerada usando esse *Applet*.

Outros tipos de problemas de empacotamento em esferas, e também em círculos, podem ser encontrados em Birgin e Sobral [70, 71].

Capítulo 3

Descrição do Problema e Metodologia de Resolução

3.1 Descrição do Problema

Como já dito no Capítulo 1, o problema de empacotamento de círculos congruentes, sem sobreposição, sobre a superfície de uma esfera pode ser formulado como um problema de otimização *max-min*, o qual corresponde a maximizar a mínima distância entre todos os pares de q pontos dispostos na superfície S^2 de uma esfera unitária $B \in \mathbb{R}^3$:

$$d_q = \max_{x_1, \dots, x_q \in S^2} \min_{1 \leq i < j \leq q} \|x_i - x_j\|_2. \quad (3.1)$$

No problema (3.1), d_q corresponde à distância ótima entre os centros das q circunferências, limitantes dos círculos, dispostos na superfície da esfera unitária, x_i e x_j correspondem a centros de círculos ou pontos genéricos. As componentes de cada ponto $x_i \in \mathbb{R}^3$ serão representadas na forma $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})$, $i = 1, 2, \dots, q$. A restrição $x_i, \dots, x_q \in S^2$ garante que os centros dos círculos permaneçam sobre a superfície da esfera unitária e pode ser assim representada:

$$\sum_{l=1}^3 (x_{il})^2 = 1. \quad (3.2)$$

Na figura 3.1, $d(x, y)$ representa a distância entre dois pontos genéricos x e y em \mathbb{R}^3 , e θ representa o ângulo de separação entre os mesmos pontos.

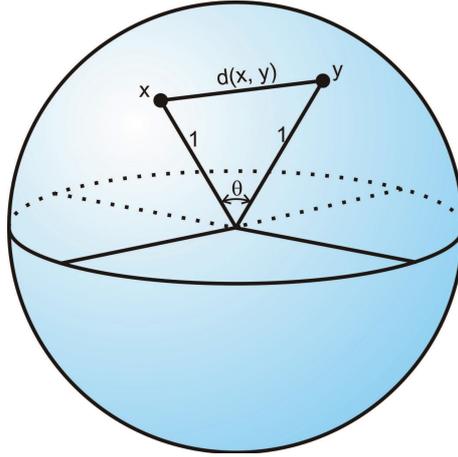


Figura 3.1: Distância entre dois pontos genéricos sobre a esfera em \mathbb{R}^3 .

O problema Tammes, representado por (3.1), pode ser colocado numa forma equivalente, como o problema de programação não-linear

$$\begin{aligned} &\text{Maximizar} && r \\ &\text{Sujeito a:} && \|x_i - x_j\|_2 \geq 2r, \quad i = 1, 2, \dots, q-1; \quad j = i+1, \dots, q \quad (3.3) \\ &&& x_i \in S^2, \quad i = 1, 2, \dots, q; \end{aligned}$$

onde r é o raio dos círculos, os vetores $x_i \in \mathbb{R}^3$, $i = 1, 2, \dots, q$, correspondem aos centros dos círculos dispostos na superfície S^2 da esfera unitária $B \in \mathbb{R}^3$. A restrição de desigualdade implica a não sobreposição dos círculos congruentes, pois a distância entre dois pontos estará limitada inferiormente por $2r$, i. e., a mínima distância entre dois centros de círculos para que os mesmos não se sobreponham. E a última restrição garante que os centros serão dispostos na superfície da esfera unitária.

O problema (3.3) está corretamente especificado. Porém, como veremos a seguir, esse problema pode ser simplificado, reduzindo consideravelmente o esforço computacional.

No processo iterativo é possível ter uma visão dos vizinhos e, por via de consequência, estimar restrições que realmente contribuem na solução do problema, ou seja, restrições ativas.

Com esse referencial definimos o novo problema:

$$\begin{aligned} & \text{Maximizar} && r \\ & \text{Sujeito a:} && \|x_i - x_j\|_2 \geq 2r, \quad i = 1, 2, \dots, q; \quad j \in J_k(i) \\ & && x_i \in S^2, \quad i = 1, 2, \dots, q, \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde $J_k(i)$ representa o conjunto dos k pontos vizinhos mais próximos do ponto i .

A racionalidade do problema (3.4) se dá ao fato de que um círculo, contido no \mathbb{R}^2 ou S^2 por exemplo, pode ter no máximo 6 vizinhos. Esse fato pode ser verificado observando as figuras bidimensionais 2.1 (planar) e 2.8 (esférica).

No processo iterativo de minimização do problema (3.4) é natural se começar com um número maior de vizinhos. Nesse caso optamos por $k = 12$. A razão dessa escolha é que a configuração do conjunto dos q pontos iniciais ainda é precária porque se está no início do processo iterativo. A medida que se avança nesse mesmo processo iterativo, as vizinhanças vão se definindo mais claramente, ou seja, vão se estabilizando. Nesse momento é natural que passemos a considerar um número menor de vizinhos. Dado a figura 3.2, podemos perceber que se ligarmos os pontos dos centros de todos os círculos ao centro do círculo central, irão se formar seis triângulos equiláteros, totalizando um giro de 360° . Desse modo, fica claro que o número máximo de vizinhos é igual a 6, então passamos a considerar essa quantidade de vizinhos.

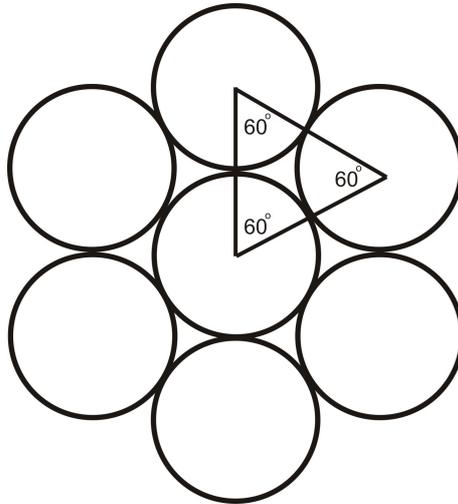


Figura 3.2: Número máximo de vizinhos de um círculo.

Se comparado ao problema (3.3), o problema (3.4) é mais simples e, além disso, mais preciso. Isso ocorre porque o número de restrições é muito menor, o que o torna computacionalmente mais rápido e sobretudo mais preciso, porque não haverá a influência deletéria de cálculos de restrições absolutamente não-ativas, correspondentes a centros muito distantes entre si.

Podemos, entretanto, tornar o problema (3.4) ainda mais simples substituindo as coordenadas cartesianas por esféricas. Dessa forma, é possível fazer com que as restrições de pertinência dos centros dos círculos à superfície da esfera unitária sejam obrigatoriamente obedecidas. Nesse contexto, cada centro do círculo x_i é definido por duas variáveis

$$\alpha_i \in [0, 2\pi] \quad (3.5)$$

$$\beta_i \in [-\pi/2, \pi/2] \quad (3.6)$$

onde α_i representa o ângulo de rotação e β_i o ângulo de elevação, conforme podemos observar na figura 3.3.

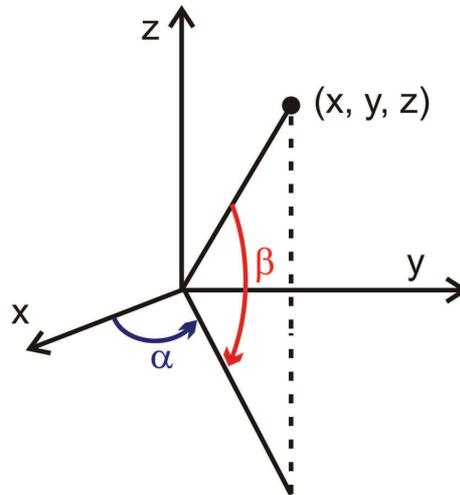


Figura 3.3: Coordenadas esféricas.

A correspondência entre as coordenadas cartesianas e coordenadas esféricas dos pontos situados na superfície da esfera unitária, é dada pelas expressões abaixo:

$$x_{i1} = \cos \alpha_i \cos \beta_i \quad (3.7)$$

$$x_{i2} = \sin \alpha_i \cos \beta_i \quad (3.8)$$

$$x_{i3} = \sin \beta_i \quad (3.9)$$

Através do uso desse esquema, temos na verdade a vinculação $x_i = x_i(\alpha_i, \beta_i)$ e, conseqüentemente, as segundas restrições do problema (3.4) são automaticamente atendidas por construção. Além disso, tem-se a vantagem adicional de se trabalhar num espaço solução de menor dimensão, i.e., passa-se de um espaço de dimensão \mathbb{R}^{3q} para \mathbb{R}^{2q} .

Por simplicidade de notação manteremos, no que se segue, a notação cartesiana simplificada, mas sem esquecer que os centros dos círculos são dados pelas equações 3.7, 3.8 e 3.9, e que as variáveis independentes de fato são os pares (α_i, β_i) .

Nesse contexto de coordenadas esféricas, define-se o problema (3.10).

$$\begin{aligned} &\text{Maximizar} && r \\ &\text{Sujeito a:} && \|x_i - x_j\|_2 \geq 2r, \quad i = 1, 2, \dots, q; \quad j \in J_k(i). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Para a formulação (3.10), onde se tem um conjunto de inequações quadráticas côncavas, não existe abordagem geral de bom desempenho para tratá-la [16].

Essa formulação apresenta a característica de não-diferenciabilidade. Além disso, a função objetivo é não-convexa, tendo, em geral, inúmeros mínimos locais. A obtenção do mínimo global para esse problema é uma tarefa de grande dificuldade, como registra as referências consultadas.

Locatelli e Raber [72] classificaram os problemas de empacotamento em duas categorias. De acordo com os autores, a primeira categoria inclui os casos em que foi possível provar a otimalidade do problema de maneira exata, seja explicitamente ou utilizando apoio computacional para alcançar essa meta. A segunda categoria inclui apenas os casos em que a única possibilidade é o aprimoramento dos resultados com respeito às melhores soluções previamente encontradas, que são conhecidas como ótimos putativos.

A resolução de forma exata para esse problema é tão somente possível para alguns valores inteiros de q círculos empacotados. A figura 3.4 apresenta empacotamentos ótimos para $q = 4$, $q = 6$, $q = 8$, $q = 12$ e $q = 20$, que correspondem, respectivamente, aos vértices de um tetraedro regular, octaedro regular, hexaedro regular, dodecaedro regular e icosaedro regular.

Existem 9 poliedros regulares, 5 sólidos platônicos e 4 poliedros de Kepler-Poinsot. Em particular, os poliedros regulares convexos, conhecidos como sólidos

platônicos, ensejam formas ótimas de empacotamento na superfície da esfera, como mostra a figura 3.4.

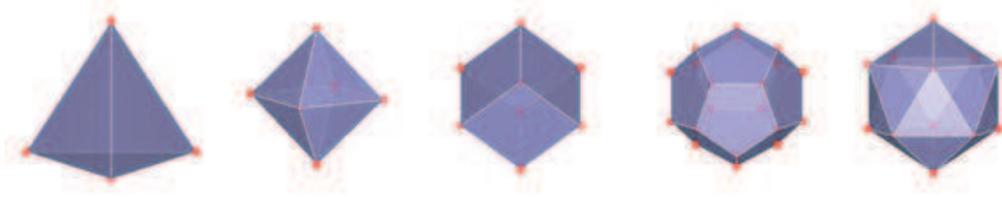


Figura 3.4: Poliedros regulares convexos.

Até o presente momento, a mais atualizada reunião dos melhores resultados putativos de empacotamentos de círculos sobre a esfera unitária foi compilada e publicada na Internet por Sloane [57]. Os valores putativos publicados de separação máxima (ângulo) abrangem desde $q = 4$ até $q = 130$ círculos empacotados no \mathbb{R}^3 , $q = 5$ até $q = 130$ no \mathbb{R}^4 , e $q = 6$ até $q = 130$ no \mathbb{R}^5 , bem como o valor isolado $q = 600$ no \mathbb{R}^4 .

Para $q = 131$ até $q = 150$, os melhores resultados putativos de empacotamentos de círculos sobre a esfera unitária foi compilada e publicada por Teshima e Ogawa [73].

Dentro do referencial de complexidade *NP-completa* dos problemas de empacotamento, a perspectiva deste trabalho é apresentar uma alternativa metodológica para abordar esse problema, oferecendo resultados eficientes com tempos computacionais aceitáveis e de precisão compatível aos melhores registrados na literatura.

Nesse momento surge a articulação das técnicas suavização e penalização hiperbólica. Uma estratégia elegante, eficiente e extremamente simples que permite transformar um problema de natureza fortemente não-diferenciável em uma alternativa diferenciável. Nessa estratégia, a resolução do problema original é obtida pela resolução de uma sequência infinita de problemas completamente diferenciáveis e sem restrições, classe C^∞ , que gradativamente se aproximam do problema original. Primeiramente é feita a suavização das restrições do problema. A seguir, se faz a inclusão dessas restrições diferenciáveis na função objetivo via penalização hiperbólica. A sequência de resolução é feita com a modulação do par de parâmetros da suavização e penalização (τ_k, ξ_k) , fazendo com que a nova função objetivo se aproxime cada vez mais da original, respeitando todas as restrições, com uma tolerância

de aproximação predeterminada.

Esta técnica é um desdobramento do método de penalização hiperbólica originalmente apresentado por Xavier [3], constituindo-se, de certa forma, em uma extensão dos processos apresentados por Santos [8], para problemas não diferenciáveis em geral, e por Chaves [9], para problemas min-max em particular.

3.2 Aproximação do Problema via Suavização Hiperbólica

O problema (3.10), aparentemente singelo, está associado a um modelo matemático cuja resolução apresenta várias peripécias. Primeiramente, apresenta as características de não-linearidade, não convexidade e não-diferenciabilidade. Assim, em geral, o problema possui uma miríade de mínimos locais. Portanto, a obtenção do mínimo global para esse problema é uma tarefa de grande dificuldade.

Para a resolução do problema (3.10), a técnica de suavização hiperbólica o aproxima por uma particular formulação completamente diferenciável, classe C^∞ .

Na abordagem de suavização hiperbólica a função não-diferenciável distância euclidiana entre dois pontos quaisquer no \mathbb{R}^n ,

$$z_{ij}(x) = \|x_i - x_j\|_2 = \sqrt{\sum_{k=1}^n (x_{ik} - x_{jk})^2} \quad (3.11)$$

é aproximada pela função hiperbólica:

$$\phi_{ij}(x, \tau) = \sqrt{\sum_{k=1}^n (x_{ik} - x_{jk})^2 + \tau^2}. \quad (3.12)$$

A função ϕ é apresentada pela figura 3.5. Ela tem as seguintes propriedades:

- i) $\phi_{ij}(x, \tau) > z_{ij}(x)$, $\forall \tau > 0$;
- ii) $\phi_{ij}(x, \tau)$ é uma função estritamente crescente em τ , $\forall \tau > 0$;
- iii) $\lim_{\tau \rightarrow 0} \phi_{ij}(x, \tau) = z_{ij}(x)$;
- iv) ϕ_{ij} é uma função da classe C^∞ .

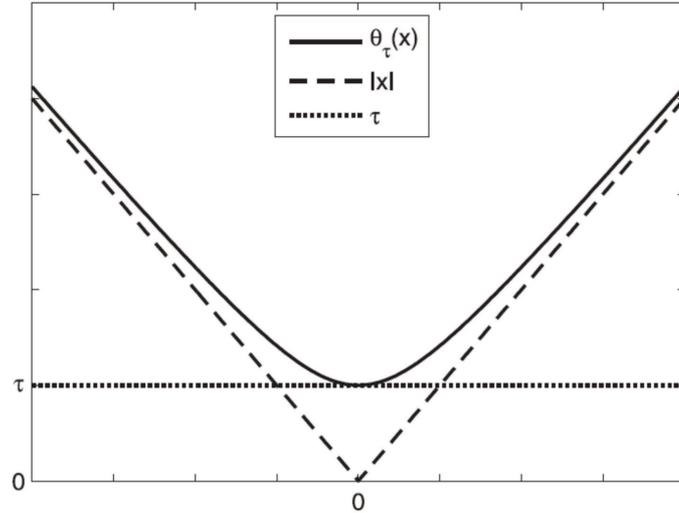


Figura 3.5: Função ϕ (SH).

Substituindo a distância euclidiana original pela função distância suavizada ϕ , obtém-se o problema

$$\begin{aligned} & \text{Maximizar} && r \\ & \text{Sujeito a:} && \phi_{ij}(x, \tau) \geq 2r, \quad i = 1, 2, \dots, q; \quad j \in J(i). \end{aligned} \quad (3.13)$$

A racionalidade dessa substituição está primeiramente na viabilização do uso de métodos de otimização consagradamente mais robustos e mais eficientes, conforme sobejamente registrado na literatura de otimização, em particular, aqueles que se utilizam das informações de derivadas de segunda ordem, tais como, o método de Newton, Quase-Newton ou Gradiente Conjugado [74, 75, 76, 77, 78].

Adicionalmente, a Suavização Hiperbólica tem a propriedade de eliminação de grande parte dos mínimos locais. A figura 3.6 mostra um efeito análogo, porém inverso, dessa propriedade (à medida que aumentamos o valor do parâmetro τ , mais côncava torna-se a função objetivo). Tal propriedade foi inicialmente apresentada por Xavier [79]. Depois por: Brito [13]; Moreno [80]; e finalmente por Souza [1].

Certamente o problema (3.13) é uma versão diferenciável do problema original (3.10), mas não exatamente equivalente. Resolvê-lo não significa resolver o problema original. Para contornar essa dificuldade, a técnica de suavização hiperbólica resolve uma sequência infinita de problemas suavizados, $l = 1, 2, \dots, +\infty$, parametrizados por uma sequência estritamente decrescente de parâmetros τ_l tendendo a zero, ou

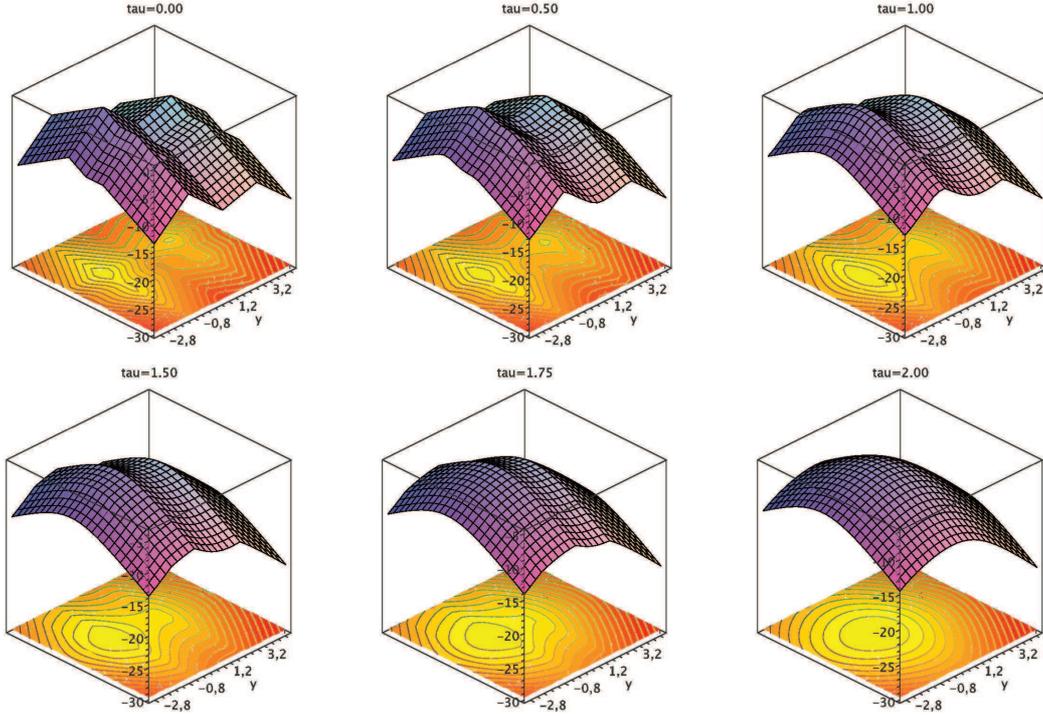


Figura 3.6: Variação do parâmetro τ [1].

seja:

$$\tau_{l+1} < \tau_l \quad (3.14)$$

$$\lim_{l \rightarrow +\infty} \tau_l = 0.$$

Através desse procedimento de redução gradativa do parâmetro τ , força-se que a sequência de problemas suavizados se aproxime assintoticamente do problema original.

O resultado teórico que dá racionalidade a esse enfoque está demonstrado em Santos [8]: “Para qualquer ponto de mínimo local do problema original e para qualquer vizinhança $\delta > 0$ especificada, existe um valor limitante $\bar{\tau}$ tal que, para todo $\tau_l < \bar{\tau}$, existe um ponto de mínimo local do problema suavizado \bar{x}_l situado dentro dessa vizinhança δ desse ponto de mínimo local \bar{x} , ou seja:

$$\|\bar{x}_l - \bar{x}\| < \delta \quad (3.15)$$

para todo $\tau_l < \bar{\tau}$.”

3.3 A Técnica da Penalização Hiperbólica

Deve ser primeira e categoricamente enfatizado que para a resolução do problema de programação não-linear com restrições (3.13), gerado pela suavização, poderia ser usado qualquer um dos métodos para tal fim existentes na literatura clássica de otimização. O uso do método da penalização hiperbólica é simplesmente uma alternativa, mas é uma alternativa extremamente atrativa, pois torna possível um acoplamento natural com a suavização hiperbólica como veremos.

Abaixo, é feita uma breve revisão do método de penalização hiperbólica, que pode ser vista em detalhes em [3, 81]. O método destina-se à resolução do problema geral de programação não-linear sujeito a restrições de desigualdade, que pode ser colocado sob a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & f(x) \\ \text{Sujeito a:} \quad & g_i(x) \geq 0, \quad i = 1, \dots, m, \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e $g_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

Similarmente a outros métodos de penalização, a Penalização Hiperbólica incorpora à função objetivo as restrições do problema gerando uma função objetivo modificada ou penalizada:

$$\text{Minimizar} \quad f(x) + \sum_{i=1}^m P(g_i(x)). \quad (3.17)$$

A denominação Penalização Hiperbólica decorre do método fazer uso da função:

$$P(y, \alpha, \xi) = - \left(\frac{1}{2} \tan \alpha \right) y + \sqrt{\left(\frac{1}{2} \tan \alpha \right)^2 y^2 + \xi^2}, \quad (3.18)$$

onde $\alpha \in [0, \frac{\pi}{2})$ e $\xi \geq 0$, que é uma função hiperbólica com uma assíntota horizontal e uma inclinada, com ângulo α , pertencente à classe de funções C^∞ .

A figura 3.7 mostra o gráfico da Função Penalizada. À medida que y , associado ao valor da restrição contemplada aumenta, o valor da penalidade decresce assintoticamente a zero. À medida que y se torna cada mais negativo, ou seja, aumenta o valor da violação, o valor da penalidade cresce assintoticamente à reta $-y \cdot \tan(\alpha)$. Assim, é uma penalidade que trabalha coerentemente tanto na região viável como na região inviável, conforme representado na figura 3.8.

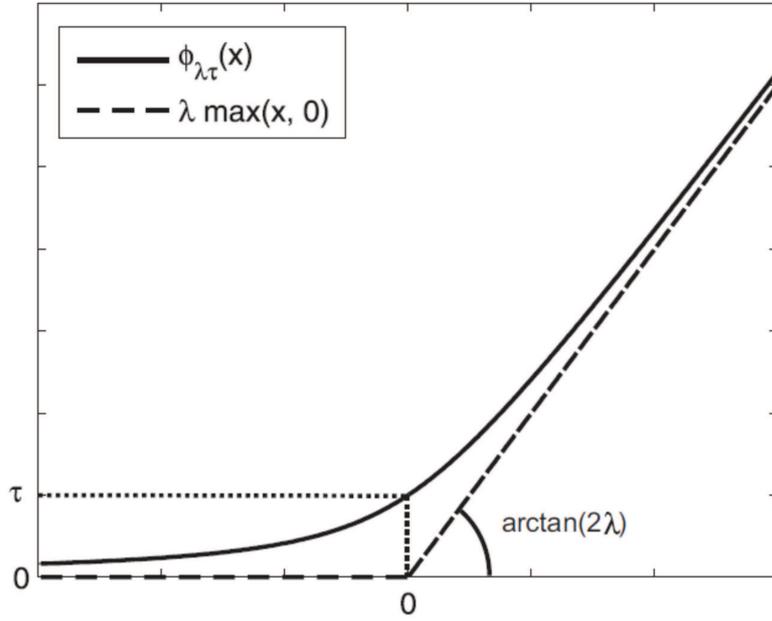


Figura 3.7: Penalização Hiperbólica.

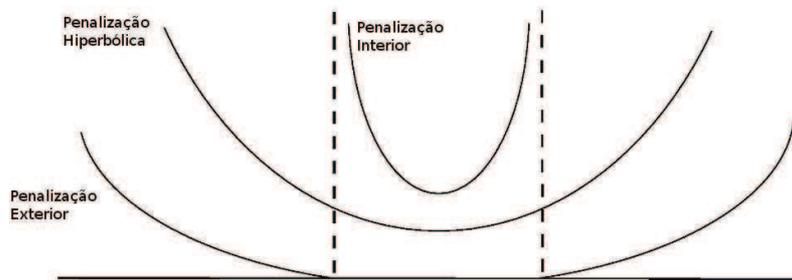


Figura 3.8: Penalização Interior, Hiperbólica e Exterior.

Numa forma mais compacta, fazendo $\lambda = \frac{1}{2} \tan \alpha$, a função de penalidade hiperbólica pode ser escrita de uma forma mais conveniente:

$$P(y, \alpha, \xi) = -\lambda y + \sqrt{\lambda^2 y^2 + \xi^2}, \quad (3.19)$$

que é uma função da classe C^∞ .

Para resolver o problema (3.17) pela técnica de penalização hiperbólica é gerada uma sequência de subproblemas intermediários, $k = 1, 2, \dots$, definido como:

$$\text{Minimizar } F(x, \lambda_k, \xi_k) = f(x) + \sum_{i=1}^m P(g_i(x), \lambda_k, \xi_k). \quad (3.20)$$

Apresentado o método de penalização hiperbólica, agora definiremos então a formulação penalizada do problema suavizado (3.13). O novo problema, chamado de (F_{SPHViz}) , é definido como:

$$\begin{aligned} \text{Minimizar } F(x, \tau_k, \lambda_k, \xi_k) &= -r - \sum_{i=1}^m P(\phi_{ij}(x, \tau_k), \lambda_k, \xi_k); \\ k &= 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Essa é a formulação final para o problema Tammes, a qual é prioritariamente considerada nesta dissertação.

Diversamente de outros métodos de penalização que tem um único parâmetro, o método da Penalização Hiperbólica possui dois parâmetros, λ e ξ . O algoritmo 1 essencialmente manipula esses parâmetros.

A racionalidade do algoritmo da penalização hiperbólica é resumidamente explicada por Xavier [3]: *“A sequência de subproblemas é obtida pela variação controlada dos dois parâmetros, λ e ξ , em duas diferentes fases do algoritmo. Inicialmente, se aumenta o parâmetro λ , causando um aumento significativo na penalização fora da região viável e, ao mesmo tempo, uma redução significativa na penalização para os pontos dentro da região viável. Esse processo continua até que se obtenha um ponto viável. Daí em diante, mantém-se λ constante e se diminui o valor de ξ sequencialmente. Dessa maneira, a penalização interna fica cada vez mais irrelevante, mantendo o mesmo nível de proibição na região externa”*.

Algoritmo 1 Penalização Hiperbólica

Requer

$$x^0, \quad \lambda_k, \quad \xi_k.$$

$$x = x^0;$$

Laço

$$x = \operatorname{argmin}_x F(x, \lambda_k, \xi_k)$$

Se ($x ==$ Ponto inviável) **então**

$$\lambda_k = r \cdot \lambda_k, \quad r > 1;$$

Senão

$$\xi_k = b \cdot \xi_k, \quad 0 < b < 1;$$

Fim se**Fim laço**

3.4 A Articulação da Suavização Hiperbólica com a Penalização Hiperbólica

A articulação das técnicas de Suavização Hiperbólica e da Penalização Hiperbólica é muito atrativa e natural, pois ambas consideram a resolução de uma sequência infinita de subproblemas:

No procedimento de Suavização essa sequência é gerada pelo decréscimo contínuo do parâmetro τ até zero.

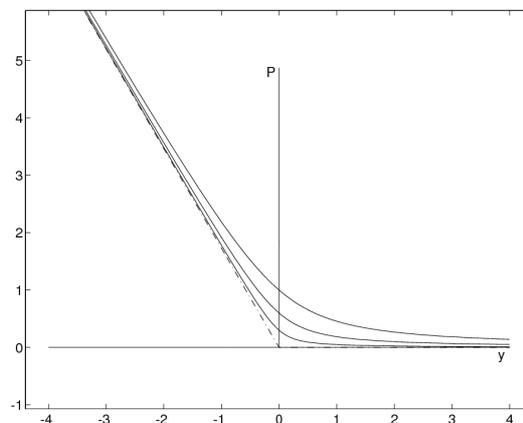


Figura 3.9: Decréscimo contínuo do parâmetro ξ até zero.

No método de Penalização Hiperbólica, essa geração é efetuada, na segunda fase

desse algoritmo, através do decréscimo do parâmetro ξ até zero, conforme descrito na Seção 3.3 e apresentado na figura 3.9.

A articulação consiste na geração de uma única sequência infinita de problemas suavizados penalizados através de um decréscimo simultâneo de ambos parâmetros. Isso pode ser estabelecido com um singelo acoplamento linear do parâmetro de suavização τ com o parâmetro ξ da Penalização.

Dentro desse referencial, foi desenvolvida uma abordagem para tornar eficiente a utilização simultânea de ambos os métodos. O algoritmo 2 combina o uso das duas técnicas dentro de uma única sequência infinita de resolução de problemas suavizados penalizados, através do acoplamento linear do parâmetro de suavização τ com o parâmetro de penalização ξ , decrescendo ambos, simultaneamente, a zero.

Algoritmo 2 SPH para empacotamento de círculos na esfera unitária

Requer

$$x^0, \quad \tau, \quad \xi, \quad \lambda = 1, \quad \rho, \quad 0 < \rho < 1.$$

$$x = x^0;$$

Laço

$$x = \operatorname{argmin}_x F_{SPHViz}(x, \tau, \lambda, \xi)$$

Se ($x ==$ Ponto inviável) **então**

$$\lambda = r \cdot \lambda, \quad r > 1;$$

Senão

$$\tau = \rho \cdot \tau;$$

$$\xi = \rho \cdot \xi;$$

Fim se

Fim laço

Deve ser observado que o método de Penalização Hiperbólica contempla, em sua fase inicial, a manipulação do parâmetro λ , associado ao ângulo de inclinação da assíntota, até a obtenção de um ponto ótimo intermediário viável. Nesse algoritmo simplificado acima, o parâmetro λ é mantido constante no valor 1, por ser esse um valor suficientemente alto para garantir o atendimento a essa exigência de viabilidade.

Na implementação do algoritmo 2 o par de parâmetros (τ, ξ) , respectivamente

de suavização e de penalização, foram acoplados linearmente através de uma constante positiva α adequada, na forma $\xi = \alpha\tau$. Dessa forma, foi garantido o decréscimo simultâneo de ambos os parâmetros, tornando mais eficiente a aplicação combinada de ambos os métodos, conforme se poderá comprovar no Capítulo 4.

Capítulo 4

Resultados Computacionais

No desenvolvimento da presente implementação da proposta metodológica: Suavização Hiperbólica e Penalização Hiperbólica, o principal esforço foi dirigido à harmonização entre os dois efeitos, bem como, na escolha dos demais parâmetros do algoritmo. As atividades pertinentes foram feitas empiricamente através de um processo de experimentos computacionais.

Tendo a perspectiva de se efetuar uma validação geral da metodologia proposta, foram planejados, implementados e processados diversos experimentos computacionais.

A seguir é feita uma discussão sobre cada um dos parâmetros.

O parâmetro τ da Suavização Hiperbólica é por excelência um parâmetro vital da suavização, pois dá diretamente o nível da mesma. A escolha de um valor pequeno implica obviamente num problema muito nervoso ou duro, próximo à natureza não diferenciável dada pela distância euclidiana. A escolha de um valor grande implica suavização excessiva, distanciamento grande do problema original e falta de sensibilidade.

A experimentação mostrou adequada a especificação de um valor inicial moderado para o parâmetro τ , no intervalo $0.01 \leq \tau \leq 0.1$.

O parâmetro ξ da Penalização Hiperbólica está natural e intimamente ligado ao parâmetro τ . Ele está associado à rigidez dos círculos e à fronteira da região viável. Os valores iniciais mais adequados para os parâmetros de penalização foram $\xi = 0.0001$.

Mais importante sobretudo, é a harmonização entre o uso conjunto das técnicas

de Suavização e de Penalização Hiperbólica. Nesse sentido, a experiência empírica demonstrou que a relação ideal entre esses parâmetros deve se situar dentro da faixa $100 < \tau/\xi < 1000$.

A manipulação do parâmetro de redução ρ tem dois compromissos. Um valor excessivo para o parâmetro ρ prejudica a continuidade harmoniosa dos processos aproximativos, que pode ser catastrófica, gerando iterações mais demoradas. Em contrapartida, um valor pequeno aumenta desnecessariamente o número total de iterações. Foi observado que o valor $\rho = 0.1$ foi adequado na conciliação desses dois efeitos indesejados.

A geração dos pontos iniciais é outra questão importante para auxiliar na convergência do problema para uma boa solução, pois se pudermos iniciar o processo iterativo com um conjunto de pontos iniciais distribuídos uniformemente sobre a esfera, certamente isso facilitará na obtenção de uma boa solução final. Diante disso, utilizamos uma regra para gerar o conjunto de pontos iniciais de forma uniforme sobre a esfera unitária, o qual é apresentado a seguir, utilizando como referência a figura 4.1.

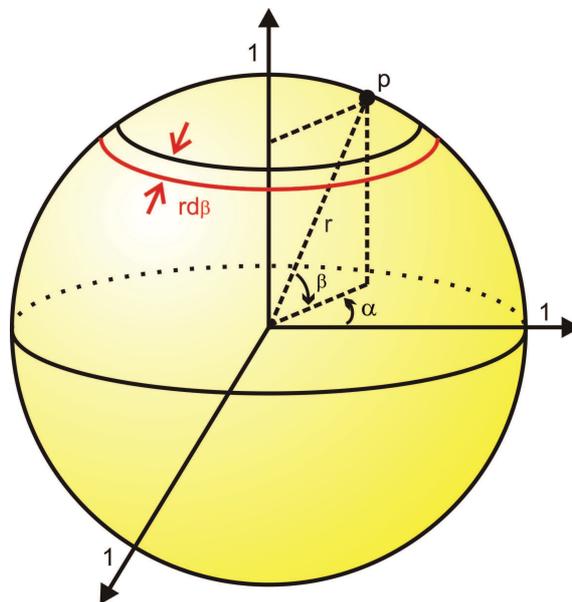


Figura 4.1: Distribuição do conjunto inicial de pontos uniformemente sobre S^2 .

Primeiramente, o valor do ângulo de rotação α é criado aleatoriamente no intervalo de sua definição $[0, 2\pi]$.

Quanto ao valor do ângulo de elevação β tem-se que levar em consideração a

área abrangida para cada valor de β .

Temos que a área representada pelas duas setas vermelhas é dada por

$$dA = 2\pi \cos\beta r d\beta.$$

Em nosso caso a esfera é unitária, $r = 1$. Assim, a área da esfera até um ângulo β é expressa por:

$$A(\beta) = \int_{-\pi/2}^{\beta} 2\pi \cos \beta d\beta ,$$

$$A(\beta) = 2\pi [\sin \beta]_{-\pi/2}^{\beta} ,$$

$$A(\beta) = 2\pi [\sin \beta + 1] .$$

Fixando $\beta = \pi/2$ temos a área total da esfera:

$$A(\text{esfera}) = 2\pi [\sin \pi/2 + 1] ,$$

$$A(\text{esfera}) = 4\pi .$$

Agora devemos associar um número aleatório a , gerado no intervalo $[0, 1]$, a um ângulo β tal que a área correspondente a esse ângulo tenha distribuição uniforme. Dessa forma, devemos fazer por construção:

$$\frac{A(\beta)}{A(\text{esfera})} = a ,$$

$$\frac{2\pi [\sin \beta + 1]}{4\pi} = a ,$$

$$\sin \beta = (2a - 1) .$$

Como o número aleatório a está no intervalo $[0, 1]$, tem-se que $\sin \beta = [-1, +1]$, ou $\beta = [-\pi/2, +\pi/2]$.

Apesar dessa regra ser muito importante, percebeu-se que nem sempre partir da estaca zero é uma boa opção, dado que o processo de minimização anterior pode oferecer excelentes qualidades em sua configuração geral ou em subestruturas ou padrões locais. Daí a racionalidade de se criar um segundo critério para geração dos pontos iniciais.

O segundo critério se fundamenta justamente nos questionamentos e inquietações de que não é razoável jogar tudo fora. Pode-se tentar aproveitar qualidades subjacentes da solução de ótimo local anterior. Assim procede o novo critério, faz

uma pequena perturbação do ponto ótimo anterior. A perturbação produz um novo ponto inicial, enquanto a sua pequenez permite a perduração de sub-configurações com excelentes propriedades de qualidade, eventualmente globalmente ótimas, da última solução.

No novo critério de geração de pontos iniciais, o parâmetro δ associado ao tamanho do deslocamento aleatório em torno da solução ótima obtida na última iteração com o objetivo de produzir o novo ponto inicial tem um papel fundamental no desempenho prático do mesmo. O novo ponto inicial é dado por: $x_{k+1}^0 = x_k^* \cdot \delta + (Rand(0) - 0,5)$, onde $Rand(0) \in [0, 1]$.

O parâmetro perturbação δ tem um efeito determinístico na obtenção de soluções de empacotamento de boa qualidade. Um valor excessivo em δ implica na determinação de ponto inicial predominantemente aleatório, esquecendo as qualidades do ponto ótimo da iteração anterior. Afinal, esse ponto é um ótimo local, e por isso possui configurações de subconjunto de círculos com alto grau de compacidade. Assim, δ alto destrói completamente essas configurações parciais de boa qualidade. De outro lado, δ pequeno implica ficar amarrado no ótimo da iteração anterior, ou seja, o novo ponto ótimo calculado tem a tendência de não sair do lugar. O valor $\delta = 1/7$ mostrou-se uma escolha adequada.

Finalmente, deve-se explicar a escolha dos parâmetros λ da Penalização Hiperbólica. Para isso, deve-se voltar ao problema de programação não-linear (3.16). Sendo λ_i^* , $i = 1, 2, \dots, m$ os multiplicadores ótimos de Lagrange desse problema, Xavier [3] prova que se os valores dos parâmetros λ_i da penalização hiperbólica forem escolhidos de acordo com $\lambda_i = \lambda_i^*$, $i = 1, 2, \dots, m$, o problema (3.16) seria resolvido em uma única iteração desse algoritmo. Ou seja, teríamos uma situação da penalização exata, onde os termos de penalidade contemplariam de uma forma precisa e completa o papel delimitante de suas correspondentes restrições.

Em relação aos parâmetros λ da Penalização Hiperbólica associados a cada uma restrição do segundo conjunto de restrições do problema (3.13), foi adotado o valor $\lambda = 1$, suficientemente alto para garantir viabilidade.

De forma geral, tem que ser explicitado que o desempenho geral da metodologia proposta é afetado profundamente pela escolha dos parâmetros iniciais e de sua variação, e sobretudo, pela harmonia entre os mesmos.

O algoritmo da Penalização Hiperbólica (página 38) contempla a resolução de um problema de programação não-linear irrestrito. Como já enfatizado sobejamente, a técnica de suavização engendra um problema de otimização da classe C^∞ , permitindo o uso de algoritmos de otimização mais robustos e eficientes.

Nos presentes experimentos, foi utilizado o algoritmo Quase-Newton, com atualização da matriz hessiana dada pela forma BFGS, na implementação *VA13C* da *Harwell Library*, biblioteca disponibilizada gratuitamente no sítio [82].

Os programas utilizados foram elaborados em FORTRAN, compilador Intel Fortran para linux versão 11.0.074, tendo sido executados em um computador pessoal portátil Hewlett-Packard (HP), com processador Intel Core 2 Duo, 1.83 GHz, dotado de 3 GBytes de memória RAM e 320 GBytes de disco rígido.

Maranas et al [83] ao analisar o empacotamento de círculos em um quadrado unitário destacam que: “*esses problemas de empacotamento tem uma natureza não-linear, não-diferenciável, não convexa e, essencialmente, possuem uma miríade de mínimos locais*”. Assim, nenhuma metodologia pode garantir que o ótimo global possa ser atingido com uma única tentativa de ponto inicial. Por isso, Maranas et al [83] utilizaram em seus experimentos, para os casos $q = 2$ até $q = 30$, múltiplos pontos iniciais para atingir os resultados publicados. Dentro desse referencial, procedimento análogo foi adotado neste presente trabalho.

A fim de apresentar a superioridade da formulação F_{SPHViz} comparada a formulação que não utiliza apenas a informação da vizinhança, a qual chamaremos de F_{SPH} , na tabela 4.1 é apresentado uma comparação dos resultados obtidos por ambas formulações para as instâncias $q = 110$ a $q = 130$. Na tabela 4.1 as colunas representam respectivamente: número de círculos; valor da função objetivo utilizando a formulação F_{SPHViz} ; tempo computacional médio gasto (em segundos); valor da função objetivo utilizando a formulação F_{SPH} ; tempo computacional médio gasto (em segundos); e finalmente a diferença entre o valor da função objetivo obtido pela formulação F_{SPHViz} com o valor obtido na formulação F_{SPH} .

O tempo computacional para todas as instâncias foi consideravelmente menor, e os resultados obtidos também foram superiores na maioria dos casos. Com a comparação feita na tabela 4.1 fica claro a superioridade da formulação F_{SPHViz} .

Tabela 4.1: Comparação de resultados entre formulação F_{SPHviz} e F_{SPH} no intervalo: $110 \leq q \leq 130$.

q	F_{SPHviz}	CPU	F_{SPH}	CPU	$F_{SPHviz} - F_{SPH}$
110	0,348948360628	2,74	0,348419999170	6,75	5,28E-04
111	0,346756374085	2,87	0,346613381059	6,79	1,43E-04
112	0,345427923954	3,12	0,345066087853	7,19	3,62E-04
113	0,343954505401	2,85	0,343787472599	7,34	1,67E-04
114	0,342912684762	3,05	0,342912684807	6,87	-4,50E-11
115	0,340824019626	3,17	0,340684245604	7,71	1,40E-04
116	0,339551324120	2,96	0,339216984230	7,48	3,34E-04
117	0,338033148911	3,62	0,338033148920	8,03	-8,71E-12
118	0,336795521882	3,11	0,336472608448	7,93	3,23E-04
119	0,335297596343	3,40	0,335297596974	8,18	-6,31E-10
120	0,334651544938	3,22	0,334011629286	8,32	6,40E-04
121	0,332386620002	3,61	0,332281645093	8,68	1,05E-04
122	0,331300490754	3,65	0,330318492477	9,07	9,82E-04
123	0,330205141956	3,71	0,329991654256	9,22	2,13E-04
124	0,329301165891	3,82	0,328381307201	8,68	9,20E-04
125	0,327083506130	4,06	0,326962221811	9,66	1,21E-04
126	0,326334843113	3,45	0,325653498329	9,62	6,81E-04
127	0,324758670043	3,55	0,324493801193	9,89	2,65E-04
128	0,323610909385	3,61	0,322940489705	9,83	6,70E-04
129	0,322575127685	3,86	0,322153904642	10,10	4,21E-04
130	0,321661125399	3,62	0,321083593049	10,48	5,78E-04

q : número de círculos.

F_{SPHviz} : valor da função objetivo obtido pela formulação que utiliza informação apenas da vizinhança.

F_{SPH} : valor da função objetivo obtido pela formulação que não utiliza informação apenas da vizinhança.

CPU : tempo médio gasto (em segundos), i.e., tempo total gasto / 100 tentativas.

As tabelas 4.2, 4.3, 4.4, 4.5, 4.6 e 4.7 mostram os resultados obtidos para o empacotamento de círculos na superfície da esfera unitária no intervalo $4 \leq q \leq 130$. As colunas representam, respectivamente: número de círculos; valores ótimos putativos registradas na literatura, oriundos do sítio [57], pertencente a Sloane; melhores valores correspondentes obtidos no experimento utilizando a formulação F_{SPHViz} ; diferença entre os valores ótimos putativos e os melhores valores encontrados nos experimentos; número de pontos iniciais utilizados; frequência de ocorrência dos melhores valores observada em 100 tentativas; e tempo computacional médio gasto, em segundos, para obter a solução.

Tabela 4.2: Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $4 \leq 25$.

q	F^*	F_{SPHViz}	$F^* - F_{SPHViz}$	NT	NF_{SPHViz}	CPU
4	1,6329932	1,632993161855	3,81E-08	100	100	0,00
5	1,4142136	1,414213562373	3,76E-08	100	100	0,00
6	1,4142136	1,414213562373	3,76E-08	100	100	0,00
7	1,2568705	1,256870468480	3,15E-08	100	100	0,01
8	1,2155625	1,215562524131	-2,41E-08	100	100	0,01
9	1,1547005	1,154700538379	-3,84E-08	100	100	0,01
10	1,0914263	1,091426291403	8,60E-09	100	32	0,02
11	1,0514622	1,051462224238	-2,42E-08	100	100	0,02
12	1,0514622	1,051462224238	-2,42E-08	100	100	0,02
13	0,9564136	0,956413627224	-2,72E-08	100	25	0,04
14	0,9338626	0,933862623344	-2,33E-08	100	71	0,04
15	0,9026562	0,902656188229	1,18E-08	100	21	0,05
16	0,8805741	0,880574112176	-1,22E-08	100	58	0,06
17	0,8624449	0,862444879317	2,07E-08	100	94	0,08
18	0,8382174	0,838217355794	4,42E-08	100	85	0,09
19	0,8085581	0,808558114720	-1,47E-08	100	45	0,13
20	0,8043915	0,804391523912	-2,39E-08	100	98	0,10
21	0,7752439	0,775243921529	-2,15E-08	100	13	0,20
22	0,7611751	0,761175067143	3,29E-08	100	42	0,17
23	0,7445173	0,744517313609	-1,36E-08	100	76	0,14
24	0,7442063	0,744206331156	-3,12E-08	100	99	0,12
25	0,7107762	0,710776155230	4,48E-08	100	7	0,24

q : número de círculos.

F^* : valor ótimo putativo.

F_{SPHViz} : valor da função objetivo obtido pela formulação que utiliza informação apenas da vizinhança.

$F^* - F_{SPHViz}$: diferença entre valor ótimo putativo e melhor valor encontrado.

NT : número de tentativas.

NF_{SPHViz} : frequência da melhor solução encontrada.

CPU : tempo médio gasto (em segundos), i.e., tempo total gasto / 100 tentativas.

Tabela 4.3: Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $26 \leq 47$.

q	F^*	F_{SPHViz}	$F^* - F_{SPHViz}$	NT	NF_{SPHViz}	CPU
26	0,7010304	0,701030417143	-1,71E-08	100	7	0,28
27	0,6951414	0,695141408957	-8,96E-09	100	9	0,25
28	0,6734534	0,673453395065	4,93E-09	100	2	0,34
29	0,6629006	0,662900571807	2,82E-08	100	3	0,37
30	0,6609813	0,660981277957	2,20E-08	100	72	0,28
31	0,6463457	0,646345707344	-7,34E-09	100	2	0,39
32	0,6424693	0,642469275730	2,43E-08	100	43	0,37
33	0,6222578	0,622257802446	-2,45E-09	100	1	0,45
34	0,6148425	0,614842520971	-2,10E-08	100	1	0,48
35	0,6067326	0,606732607497	-7,50E-09	100	2	0,48
36	0,6045690	0,604568961676	3,83E-08	100	13	0,53
37	0,5917897	0,591789691968	8,03E-09	100	3	0,53
38	0,5889257	0,588925700880	-8,80E-10	100	47	0,48
39	0,5762095	0,576209471615	2,84E-08	100	1	0,58
40	0,5706802	0,570680168793	3,12E-08	100	2	0,63
41	0,5634956	0,563495620163	-2,02E-08	100	2	0,58
42	0,5597650	0,559765037067	-3,71E-08	100	4	0,61
43	0,5527950	0,552794961199	3,88E-08	100	1	0,63
44	0,5509966	0,550996591088	8,91E-09	100	7	0,64
45	0,5399084	0,539908373556	2,64E-08	100	4	0,71
46	0,5337899	0,533789908364	-8,36E-09	100	1	0,69
47	0,5308063	0,530806252018	4,80E-08	100	4	0,71

q : número de círculos.

F^* : valor ótimo putativo.

F_{SPHViz} : valor da função objetivo obtido pela formulação que utiliza informação apenas da vizinhança.

$F^* - F_{SPHViz}$: diferença entre valor ótimo putativo e melhor valor encontrado.

NT : número de tentativas.

NF_{SPHViz} : frequência da melhor solução encontrada.

CPU : tempo médio gasto (em segundos), i.e., tempo total gasto / 100 tentativas.

Tabela 4.4: Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $48 \leq 69$.

q	F^*	F_{SPHViz}	$F^* - F_{SPHViz}$	NT	NF_{SPHViz}	CPU
48	0,5304860	0,530486012868	-1,29E-08	100	26	0,71
49	0,5163497	0,516349728288	-2,83E-08	100	1	0,80
50	0,5134721	0,513472084681	1,53E-08	100	2	0,81
51	0,5069825	0,506982514629	-1,46E-08	100	1	0,87
52	0,5040502	0,504050178494	2,15E-08	100	16	0,84
53	0,4976147	0,497614702445	-2,45E-09	100	3	0,84
54	0,4959752	0,495975188174	1,18E-08	100	3	0,87
55	0,4882928	0,488292849580	-4,96E-08	100	2	0,90
56	0,4863505	0,486350535294	-3,53E-08	100	8	0,93
57	0,4809080	0,480908021136	-2,11E-08	100	2	0,95
58	0,4763282	0,476328153285	4,67E-08	100	1	0,98
59	0,4735911	0,473591095466	4,53E-09	100	2	1,00
60	0,4701626	0,470162594026	5,97E-09	100	3	1,01
61	0,4647398	0,464739834139	-3,41E-08	100	2	1,06
62	0,4615261	0,461526054370	4,56E-08	100	1	1,09
63	0,4581786	0,458178609683	-9,68E-09	100	1	1,10
64	0,4538983	0,453898297998	2,00E-09	100	1	1,15
65	0,4510895	0,451089550789	-5,08E-08	100	1	1,14
66	0,4490083	0,449008290607	9,39E-09	100	1	1,24
67	0,4445262	0,444526202243	-2,24E-09	100	1	1,31
68	0,4407790	0,440779034130	-3,41E-08	100	1	1,32
69	0,4385624	0,438559458247	2,94E-06	100	1	1,29

q : número de círculos.

F^* : valor ótimo putativo.

F_{SPHViz} : valor da função objetivo obtido pela formulação que utiliza informação apenas da vizinhança.

$F^* - F_{SPHViz}$: diferença entre valor ótimo putativo e melhor valor encontrado.

NT : número de tentativas.

NF_{SPHViz} : frequência da melhor solução encontrada.

CPU : tempo médio gasto (em segundos), i.e., tempo total gasto / 100 tentativas.

Tabela 4.5: Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $70 \leq 91$.

q	F^*	F_{SPHViz}	$F^* - F_{SPHViz}$	NT	NF_{SPHViz}	CPU
70	0,4357912	0,435791149971	5,00E-08	100	1	1,41
71	0,4326737	0,432673695120	4,88E-09	100	3	1,35
72	0,4316265	0,431626492596	7,40E-09	100	14	1,34
73	0,4252726	0,425272211754	3,88E-07	100	1	1,42
74	0,4230068	0,423006794738	5,26E-09	100	1	1,46
75	0,4209729	0,420972909695	-9,70E-09	100	2	1,48
76	0,4180116	0,418011643177	-4,32E-08	100	1	1,52
77	0,4158453	0,415845280944	1,91E-08	100	1	1,56
78	0,4146458	0,414645779509	2,05E-08	100	2	1,63
79	0,4094020	0,409401979866	2,01E-08	100	1	1,63
80	0,4081902	0,408190247940	-4,79E-08	100	1	1,64
81	0,4046796	0,404679640289	-4,03E-08	100	1	1,69
82	0,4020636	0,402063575564	2,44E-08	100	1	1,73
83	0,4001553	0,400155265476	3,45E-08	100	2	1,76
84	0,3996206	0,399620572821	2,72E-08	100	11	1,77
85	0,3949582	0,394958158778	4,12E-08	100	17	1,81
86	0,3931650	0,393165034566	-3,46E-08	100	2	1,83
87	0,3909793	0,390979290335	9,66E-09	100	1	1,84
88	0,3896308	0,389630818615	-1,86E-08	100	9	1,85
89	0,3870408	0,387040757166	4,28E-08	100	1	1,98
90	0,3842565	0,384224781394	3,17E-05	100	1	1,95
91	0,3825054	0,382505357867	4,21E-08	100	1	1,97

q : número de círculos.

F^* : valor ótimo putativo.

F_{SPHViz} : valor da função objetivo obtido pela formulação que utiliza informação apenas da vizinhança.

$F^* - F_{SPHViz}$: diferença entre valor ótimo putativo e melhor valor encontrado.

NT : número de tentativas.

NF_{SPHViz} : frequência da melhor solução encontrada.

CPU : tempo médio gasto (em segundos), i.e., tempo total gasto / 100 tentativas.

Tabela 4.6: Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $92 \leq 113$.

q	F^*	F_{SPHViz}	$F^* - F_{SPHViz}$	NT	NF_{SPHViz}	CPU
92	0,3820905	0,382090522671	-2,27E-08	100	2	2,16
93	0,3783688	0,378368783272	1,67E-08	100	5	2,18
94	0,3768834	0,376883270813	1,29E-07	100	1	2,41
95	0,3746692	0,374669193217	6,78E-09	100	1	2,22
96	0,3734015	0,373401445654	5,43E-08	100	1	2,33
97	0,3713439	0,371344179058	-2,79E-07	100	1	2,51
98	0,3708369	0,370836915515	-1,55E-08	100	5	2,39
99	0,3668041	0,366804134924	-3,49E-08	100	1	2,41
100	0,3650065	0,365006495920	4,08E-09	100	1	2,37
101	0,3632471	0,363247113879	-1,39E-08	100	1	2,34
102	0,3619942	0,361771617385	2,23E-04	100	1	2,38
103	0,3599785	0,359977605190	8,95E-07	100	1	2,39
104	0,3585767	0,358576683407	1,66E-08	100	1	2,61
105	0,3565544	0,356554350165	4,98E-08	100	1	2,63
106	0,3548464	0,354846404420	-4,42E-09	100	1	2,72
107	0,3535030	0,353503034724	-3,47E-08	100	1	2,80
108	0,3525280	0,352527958541	4,15E-08	100	1	2,69
109	0,3498626	0,349862456641	1,43E-07	100	1	2,65
110	0,3492097	0,348948360628	2,61E-04	100	3	2,74
111	0,3469952	0,346756374085	2,39E-04	100	1	2,87
112	0,3454279	0,345427923954	-2,40E-08	100	6	3,12
113	0,3439545	0,343954505401	-5,40E-09	100	2	2,85

q : número de círculos.

F^* : valor ótimo putativo.

F_{SPHViz} : valor da função objetivo obtido pela formulação que utiliza informação apenas da vizinhança.

$F^* - F_{SPHViz}$: diferença entre valor ótimo putativo e melhor valor encontrado.

NT : número de tentativas.

NF_{SPHViz} : frequência da melhor solução encontrada.

CPU : tempo médio gasto (em segundos), i.e., tempo total gasto / 100 tentativas.

Tabela 4.7: Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $114 \leq 130$.

q	F^*	F_{SPHViz}	$F^* - F_{SPHViz}$	NT	NF_{SPHViz}	CPU
114	0,3429127	0,342912684762	1,52E-08	100	9	3,05
115	0,3408316	0,340824019626	7,58E-06	100	1	3,17
116	0,3395555	0,339551324120	4,18E-06	100	2	2,96
117	0,3380331	0,338033148911	-4,89E-08	100	1	3,62
118	0,3367955	0,336795521882	-2,19E-08	100	1	3,11
119	0,3357013	0,335297596343	4,04E-04	100	1	3,40
120	0,3356715	0,334651544938	1,02E-03	100	1	3,22
121	0,3324314	0,332386620002	4,48E-05	100	1	3,61
122	0,3313008	0,331300490754	3,09E-07	100	1	3,65
123	0,3302052	0,330205141956	5,80E-08	100	1	3,71
124	0,3293018	0,329301165891	6,34E-07	100	1	3,82
125	0,3274236	0,327083506130	3,40E-04	100	1	4,06
126	0,3263348	0,326334843113	-4,31E-08	100	7	3,45
127	0,3247587	0,324758670043	3,00E-08	100	1	3,55
128	0,3238100	0,323610909385	1,99E-04	100	1	3,61
129	0,3225785	0,322575127685	3,37E-06	100	1	3,86
130	0,3216635	0,321661125399	2,37E-06	100	1	3,62

q : número de círculos.

F^* : valor ótimo putativo.

F_{SPHViz} : valor da função objetivo obtido pela formulação que utiliza informação apenas da vizinhança.

$F^* - F_{SPHViz}$: diferença entre valor ótimo putativo e melhor valor encontrado.

NT : número de tentativas.

NF_{SPHViz} : frequência da melhor solução encontrada.

CPU : tempo médio gasto (em segundos), i.e., tempo total gasto / 100 tentativas.

É interessante registrar que o número de pontos iniciais utilizados foi extremamente pequeno se comparado à demais abordagens encontradas na literatura. Além disso, vale ressaltar que o tempo computacional gasto para obter cada solução foi muito pequeno, variando entre 0,00 - 3,62 segundos, para as instâncias no intervalo $4 \leq q \leq 130$.

Apesar do número de pontos iniciais ter sido extremamente pequeno, os resultados obtidos utilizando a formulação S_{SPHViz} foram muito bons. No intervalo $4 \leq q \leq 130$, só não alcançamos o ótimo putativo nas instâncias: $q \in \{69, 90, 102, 110, 111, 116, 119, 120, 121, 125, 128, 129, 130\}$. Ou seja, só não conseguimos chegar ao ótimo putativo para 13, de um total de 127 instâncias.

Os resultados putativos apresentados por Sloane [57] limitarem-se ao intervalo $4 \leq q \leq 130$ círculos, para o \mathbb{R}^3 . Portanto, para o intervalo $131 \leq q \leq 150$ a comparação foi feita através dos valores ótimos putativos apresentados por Teshima e Ogawa. A tabela 4.8 mostra os resultados obtidos para o empacotamento de círculos na superfície da esfera unitária no intervalo $131 \leq q \leq 150$.

As colunas da tabela 4.8 representam, respectivamente: número de círculos; valores ótimos putativos registradas na literatura, oriundos do sítio [73]; melhores valores correspondentes obtidos no experimento utilizando a formulação F_{SPHViz} ; diferença entre os valores ótimos putativos e os melhores valores encontrados nos experimentos; número de pontos iniciais utilizados; frequência de ocorrência dos melhores valores observada em 100 tentativas; e tempo computacional médio gasto, em segundos, para obter a solução.

Tabela 4.8: Resultados computacionais para empacotamento no intervalo: $131 \leq 150$.

q	F^*	F_{SPHViz}	$F^* - F_{SPHViz}$	NT	NF_{SPHViz}	CPU
131	0,3177496	0,319331003890	-1,58E-03	100	1	3,71
132	0,3177496	0,317935156944	-1,86E-04	100	1	3,62
133	0,3148761	0,317021856030	-2,15E-03	100	1	3,70
134	0,3134766	0,315494088649	-2,02E-03	100	1	3,79
135	0,3111370	0,314979325770	-3,84E-03	100	1	3,83
136	0,3111370	0,313955219476	-2,82E-03	100	1	3,89
137	0,3104516	0,312427203292	-1,98E-03	100	1	3,83
138	0,3072094	0,310990967665	-3,78E-03	100	1	3,97
139	0,3065848	0,310015829274	-3,43E-03	100	1	4,04
140	0,3065848	0,309150339525	-2,57E-03	100	1	4,12
141	0,3052789	0,308326196764	-3,05E-03	100	1	4,14
142	0,3028969	0,307213372854	-4,32E-03	100	1	4,21
143	0,3027569	0,306059814691	-3,30E-03	100	1	4,25
144	0,3027569	0,304098187630	-1,34E-03	100	1	4,17
145	0,3018093	0,303598192402	-1,79E-03	100	1	4,26
146	0,3013350	0,302426370502	-1,09E-03	100	1	4,39
147	0,2987279	0,301532529984	-2,80E-03	100	1	4,30
148	0,2963959	0,300813645339	-4,42E-03	100	1	4,46
149	0,2956542	0,299628229303	-3,97E-03	100	1	4,45
150	0,2953150	0,298583167276	-3,27E-03	100	1	4,54

q : número de círculos.

F^* : valor ótimo putativo.

F_{SPHViz} : valor da função objetivo obtido pela formulação que utiliza informação apenas da vizinhança.

$F^* - F_{SPHViz}$: diferença entre valor ótimo putativo e melhor valor encontrado.

NT : número de tentativas.

NF_{SPHViz} : frequência da melhor solução encontrada.

CPU : tempo médio gasto (em segundos), i.e., tempo total gasto / 100 tentativas.

Para essas instâncias deve-se registrar a superioridade do método aqui apresentado, dado que para todas as instâncias apresentadas na tabela 4.8 os valores obtidos utilizando a formulação F_{SPHViz} foi superior aos valores ótimos putativos, inicialmente apresentados por Teshima e Ogawa, e novamente com tempos computacionais expressivamente pequenos. Dessa forma, encontramos novos ótimos putativos para as instâncias $131 \leq q \leq 150$.

Após a apresentação dos resultados, são delineadas as conclusões sobre o trabalho realizado.

Capítulo 5

Conclusões

Como já sobeja e peremptoriamente colocado no corpo deste trabalho, dentro de um referencial de complexidade *NP-completa* do problema de empacotamento de círculos na esfera unitária, a perspectiva deste trabalho, unicamente, poderia se propor a apresentar uma alternativa metodológica para abordar o problema em questão que ofereça os requisitos de eficiência, resultados produzidos com tempos computacionais aceitáveis, e de precisão, resultados produzidos de boa qualidade numérica, vis-à-vis os algoritmos consentâneos na literatura.

Dentro dessa perspectiva, pode-se acreditar que a proposta foi exitosa, pois a articulação das técnicas de Suavização Hiperbólica com a Penalização Hiperbólica e a posterior harmonização do conjunto de seus parâmetros, proporcionaram resultados com as propriedades aprioristicamente idealizadas.

Em suma, por todos os resultados obtidos, pode-se afirmar que a abordagem metodológica foi plenamente exitosa, pois permitiu a obtenção de resultados muito similares aqueles ótimos putativos, apresentados em Sloane [57]. Ademais, produziu vários novos ótimos globais, inicialmente apresentados por Teshima e Ogawa [73], dentro do nível de precisão dado pela máquina e pelos valores finais dos parâmetros τ e ξ , em tempos de computação relativamente pequenos.

Por fim, vale ressaltar que o número de pontos iniciais utilizados nesse trabalho é extremamente pequeno se comparado ao que os algoritmos consentâneos na literatura utilizam.

5.1 Proposta para Trabalhos Futuros

Como uma extensão natural do presente trabalho, pode-se cogitar o emprego da abordagem contemplada na generalização e na resolução desse mesmo problema no espaço n -dimensional. Tal feito já foi atingido por Lovisolo e Da Silva, em 2001 [84].

Definir mais precisamente o conjunto das restrições ativas. Como podemos ver na figura 5.1 nem sempre precisamos considerar 6 vizinhos ativos, pois em alguns casos isso não é necessário. Por exemplo, na primeira imagem (da esquerda para a direita) temos 5 vizinhos ativos. Já na segunda imagem temos apenas 4 vizinhos ativos.

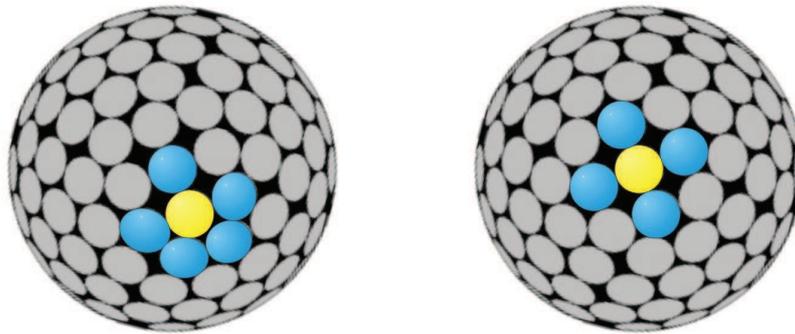


Figura 5.1: Determinando a vizinhança exata do círculo.

E, finalmente, solucionar problemas de empacotamentos de esferas em regiões compactas e convexas do \mathbb{R}^n , como o empacotamento de esferas congruentes no cubo unitário, por exemplo.

Referências Bibliográficas

- [1] SOUZA, M. F., *Suavização e Penalização Hiperbólicas Aplicadas à Otimização de Geometria Molecular*. Tese D.Sc.: COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, Jan. 2010.
- [2] TAMMES, P. M. L., *On the origin of number and arrangement of the places of exit on the surface of pollen grains*. Recueil des Travaux Botaniques Néerlandais, 27, 1-84, 1930.
- [3] XAVIER, A. E., *Penalização Hiperbólica: Um Novo Método para Resolução de Problemas de Otimização*. Dissertação de M.Sc.: COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1982.
- [4] XAVIER, A. E., CANEDO, M. P., SILVA, L. P., *Calibração Automática de Modelos Chuva-Vazão: Um Método Assintótico*. Pesquisa Operacional, v. 10, n. 1, pp. 1-18, 1990.
- [5] DIB, K. R., *Utilização de Função de Penalização Hiperbólica na Suavização e Otimização de um Modelo Chuva-Vazão: Modelo SWMS*. Tese de D.Sc.: COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1994.
- [6] MOTA, F. C., BHAYA, A., KASKUREWICZ, E., *Robust Stabilization of Time-Varying Discrete Interval Systems*. Proceedings of Congress of Decision and Control (CDC-92): Tucson, Arizona, 1992.
- [7] XAVIER, A. E., *Solução de Problemas de Programação Não-Diferenciáveis via Suavização*. Relatório Técnico ES-290/93: COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1993.

- [8] SANTOS, A. B. A., *Problemas de Programação Não-Difereciável: Uma Metodologia de Suavização*. Dissertação de M.Sc.: COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1997.
- [9] CHAVES, A. M. V., *Resolução de Problemas Minimax Via Suavizações*. Dissertação de M.Sc.: COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1987.
- [10] CHAVES, A. M. V., XAVIER, A. E., *Problemas Minimax: Uma Alternativa de Resolução Via Suavização*. Relatório Técnico: COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 1998.
- [11] XAVIER, A. E., *Optimum Covering of Plane Domains by Circles*. 17th International Symposium on Mathematical Programming: Atlanta, USA, 7-11 August, 2000.
- [12] XAVIER, A. E., OLIVEIRA, A. A. F., *Optimum Order p Covering of Plane Domains by Circles Via Hyperbolic Smoothing Method*. International Symposium on Mathematical Programming: Copenhagen, August, 2003.
- [13] BRITO, J. A. M., *Suavização Hiperbólica aplicada no Problema de Localização de Estações de Rádio Base*. Tese D.Sc.: COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2004.
- [14] XAVIER, A. E., *The Hyperbolic Smoothing Clustering Method*. PESC/COPPE/UFRJ: Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2005.
- [15] XAVIER, A. E., SILVA, A. P. A., NETO, R. F., et al., *The Hyperbolic Smoothing Approach for Solving the Support Vector Machine Problem*. 19 th International Symposium on Mathematical Programming, ISMP2006: Rio de Janeiro, 2006.
- [16] GONÇALVES JUNIOR, L., *Aprimoramentos na resolução de problemas de empacotamento utilizando Suavização Hiperbólica*. Dissertação de M.Sc.: COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2007.
- [17] XAVIER, A. E., NEGREIROS, M., JUNIOR, L. G., *A Resolução do Problema de Empacotamentos de Círculos num Quadrado Via o Método da*

Suavização Hiperbólica. XXXIX Simpósio Brasileiro de Pesquisa Operacional, SBPO 2007: Fortaleza, 2007.

- [18] FELDMAN, A., *Resolução de Problemas de Empacotamentos usando Suavização Hiperbólica*. Dissertação de M.Sc.: COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2005.
- [19] LEOPARDI, P., *Distributing points on the sphere: Partitions, separation, quadrature and energy*. Thesis Ph.D. in Mathematics: University of New South Wales, 2006.
- [20] YAN, K., WENQI, H., *A heuristic quasi-physical strategy for solving disks packing problem*. Simulation Modelling Practice and Theory, n. 10, pp. 195-207, 2002.
- [21] HALES, T. C., “An Overview of the Kepler’s Conjecture”, 1998.
- [22] HILBERT, D., *Mathematische Probleme*. 2nd International Congress of Mathematicians: Paris, France, 1900.
- [23] TÓTH, L. F., *Regular Figures*. Pergamon Press: New York, 1964.
- [24] HALES, T. C., “Sphere packings. I”, 1997.
- [25] HALES, T. C., “Sphere packings. II”, 1997.
- [26] HALES, T. C., “A computer verification of the Kepler conjecture”, 2002.
- [27] HALES, T. C., “A proof of the Kepler conjecture”, 2005.
- [28] HALES, T. C., “Sphere packings. III. Extremal cases”, 2006.
- [29] HALES, T. C., “Sphere packings. IV. Detailed bounds”, 2006.
- [30] PINTÉR, J. D., *Globally Optimized Spherical Point Arrangements: Model Variants and Illustrative Results*. Annals of Operations Research, n. 104, pp. 213-230, 2001.
- [31] CONWAY, J. H., SLOANE, N. J. A., *Sphere Packings, Lattices and Groups*. Springer-Verlag: New York, 1993.

- [32] GREENGARD, L., “The Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems”, 1988.
- [33] PAIN, R., *Mechanisms of Protein Folding*. Oxford University Press: Oxford, 1994.
- [34] DEAN, P., *Molecular Similarity in Drug Design*. Chapman and Hall, London, 1995.
- [35] PARDALOS, P., SHALLOWAY, D., XUE, G., *Global Minimization of Non-convex Energy Functions: Molecular Conformation and Protein Folding, DIMACS Series, Vol. 23*. Amer. Math. Soc., Providence: RI, 1996.
- [36] NEUMAIER, A., *Molecular modeling of proteins and mathematical prediction of protein structure*. SIAM Review 39, 407-460, 1997.
- [37] NEUMAIER, A., *Molecular modeling of proteins*. <http://solon.cma.univie.ac.at/~neum/protein.html>, 1999.
- [38] HARTKE, B., “Global cluster geometry optimization by a phenotype algorithm with niches: Location of elusive minima, and low-order scaling with cluster size”, 1999.
- [39] WALES, D., SCHERAGA, H., “Global optimization of clusters, crystals, and biomolecules”, 1999.
- [40] GOODMAN, J. E., ROURKE, J. O., *Handbook of Discrete and Computational Geometry*. CRC Press LLC: New York, 1997.
- [41] PACH, J., AGAWAL, P. K., *Combinatorial Geometry*. John Wiley & Sons, Inc: New York, 1995.
- [42] ZONG, C., *Sphere Packings*. Springer-Verlag: New York, 1999.
- [43] MACWILLIAMS, F. J., SLOANE, N. J., *The theory of error-correcting codes*. Springer-Verlog, 1977.
- [44] GAUSS, C. F., *Untersuchungen uber die Eigenschaften der positiven ternaren quadratischen Formen von Ludwig August Seeger*. Gottingische gelehrte Anzeigen, Juli 9 = Werke, v. II, pp. 188-196, 1831.

- [45] CASSELS, J. W. S., *An introduction to the geometry of numbers*. Springer-Verlag: New York, 1971.
- [46] CONNELLY, R., SLOANE, N. J. A., *Low dimensional lattices*. PRS, v. A, n. 418, pp. 17-41, 1988.
- [47] COXETER, H. S. M., *Introduction to Geometry, 1 ed.* J. Wiley & Sons: New York, 1961.
- [48] DEMPSTER, A. P., *The minimum of a definite ternary quadratic form*. CJM n. 9, pp. 232-234, 1957.
- [49] MORDELL, L. J., *The minimum of a definite ternary quadratic form*. JLMS n. 23, pp. 175-178, 1948.
- [50] KORKINE, A., ZOLOTAREFF, G., *Sur les formes quadratique positive quaternaires*. Math. Ann., v. 5, pp. 581-583, 1872.
- [51] KEPLER, J., *Strena sue de nive sexangula*. 1661.
- [52] SAFF, E. B., KUIJLAARS, A. B. J., *Distributing Many Points on a sphere*. Springer-Verlag, Vol. 19, N. 1: New York, 1997.
- [53] KROTO, H. W., HEATH, J. R., O'BRIEN, S. C., et al., "C60: Buckminsterfullerene", *Nature*, v. 318, n. 6042, pp. 162-163, 1985.
- [54] CHUNG, F. R. K., KOSTANT, B., STEMBERG, S., *Groups and the Buckyball, in Lie Theory and Geometry*. Progress in Mathematics, n. 123, pp. 97-126: Boston: Birkhäuser, 1994.
- [55] DRAGNEV, P. D., LEGG, D., TOWNSEND, D., *DISCRETE LOGARITHMIC ENERGY ON THE SPHERE*. Pacific Journal of Mathematics, Vol. 207, No. 2, 2002.
- [56] *Applet Thomson*. <http://physics.syr.edu/condensedmatter/thomson/thomsonapplet.htm>, 2010.
- [57] SLOANE, N. J. A., *Nice arrangements of points on a sphere in various dimensions*. <http://www.research.att.com/~njas/packings/>, 2010.

- [58] ERBER, T., HOCKNEY, G. M., *Equilibrium configurations of N equal Charges on a Sphere*. J. Phys. A: Math. Gen. n. 24, L1369-L1377, 1991.
- [59] GLASSER, L., EVERY, A. G., *Energies and Spacings of Point Charges on a Sphere*. J. Phys. Math. Gen. 25, pp. 2473-2482, 1992.
- [60] BERGERSEN, D. B., PALFFY-MUHORAY, P., *Equilibrium Configurations of Particles on a Sphere: The case of Logarithmic Interactions*. J. Phys. A: Math. Gen. 27, 2579-2586, 1994.
- [61] MEINYK, T. W., KNOP, O., SMITH, R., *Extremal Arrangements of points and Unit Charges on a Sphere: Equilibrium Configurations Revisited*. Can. J. Chem. 55, 1745-1761, 1977.
- [62] RAKHMANOV, E. A., SAFF, E. B., ZHOU, Y. M., *Electrons on the Sphere, in Computational Methods and Function Theory*. (R. M. Ali, St. Ruscheweyh, and E. B. Saff, Eds.), pp. 111-127: Singapore: World Scientific, 1995.
- [63] HARDIN, R. H., SLOANE, N. J. A., SMITH, W. D., *Minimal Energy Arrangements of Points on a Sphere*. <http://www2.research.att.com/~njas/electrons/>, 1997.
- [64] BECK, J., *Sums of distances between points on a Sphere - An Application of the Theory of Irregularities of distribution to Discrete Geometry*. Matematika, n. 31, pp. 33-41, 1994.
- [65] ERBER, T., HOCKNEY, G. M., *Comment on Method of Constrained Global Optimization*. Phys. Rev. Lett. 74, 1482, 1995.
- [66] MELISSEN, H., *Densest packing of six equal circles in a square*. Elemente der Mathematik, n.49, pp. 27-31, 1994.
- [67] HARDIN, R. H., SLOANE, N. J. A., SMITH, W. D., *A library of putatively optimal coverings of the sphere with n equal caps*. <http://www2.research.att.com/~njas/coverings/>, 1997.

- [68] ERREN, M., *Densest Packing of Spheres in a Cube*. <http://www.randomwalk.de/sphere/incube/spheresincube.html>, 2010.
- [69] ERREN, M., *Densest Packing of Spheres in a Sphere*. <http://www.randomwalk.de/sphere/insphr/spheresinsphr.html>, 2010.
- [70] BIRGIN, E. G., SOBRAL, F. N. C., “Minimizing the object dimensions in circle and sphere packing problems”, *Computers & Operations Research*, v. 35, pp. 2357–2375, 2008.
- [71] BIRGIN, E. G., SOBRAL, F. N. C., “Packing Circles and Spheres”, 2008.
- [72] LOCATELLI, M., RABER, U., *Packing equal circles in a square: a deterministic global optimization approach*. *Discrete Applied Mathematics*, n.122, pp. 139-166, 2002.
- [73] TESHIMA, Y., OGAWA, T., *Dense Packing of Equal Circles on a Sphere by the Minimum-Zenith Method: Symmetrical Arrangement*. *Forma*, 15, p. 347-364, 2000.
- [74] LUENBERGER, D. G., *Linear and Nonlinear Programming*. 1st ed. Addison-Wesley: Massachusetts, 1984.
- [75] MINOUX, M., “*Mathematical programming*”, *Theory and algorithms*. Wiley & Sons: Chichester, 1986.
- [76] SIMMONS, D. M., *Non-Linear Programming for Operations Research*. Prentice-hall ed. Englewood, NJ, 1975.
- [77] LIMA, E. L., *Espaços Métricos*. Projeto Euclides, IMPA – Livros Técnicos e Científicos, 1993.
- [78] MARTINEZ, J. M., SANTOS, S. A., *Métodos Computacionais de Otimização*. 20 Colóquio Brasileiro de Matemática, IMPA: Rio de Janeiro, Brasil, 1995.
- [79] XAVIER, A. E., *Converificação do Problema de Determinação de Estruturas de Proteínas através do Método de Suavização Hiperbólica*. Workshop em Biociências: COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2003.

- [80] MORENO, A. O., *Um novo Algoritmo para Resolução de Problemas de Classificação*. Tese D.Sc.: COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2008.
- [81] XAVIER, A. E., *Hyperbolic Penalty: a new method for nonlinear programming with inequalities*. Intl. Trans. in Op. Res., n. 8, pp. 659-671, 2001.
- [82] SCOTT, J., *HSL Archive*. <http://hsl.rl.ac.uk/archive/hslarchive.html>, 2008.
- [83] MARANAS, C. D., FLOUDAS, C. A., PARDALOS, P. M., “New results in the packing of equal circles in a square”, *Discrete Mathematics*, v. 142, n. 1-3, pp. 287–293, 1995.
- [84] LOVISOLO, L., DA SILVA, E. A. B., *Uniform distribution of points on a hypersphere with applications to vector bit-plane encoding*. IEE Proc-Vis. Image Signal Process., Volume 148, No. 3, June 2001.