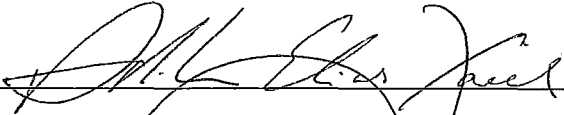


APRIMORAMENTOS NA RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE  
EMPACOTAMENTO UTILIZANDO SUAUIZACÃO HIPERBÓLICA

Lourenço Gonçalves Junior

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS  
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA 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.

Aprovada por:



---

Prof. Adilson Elias Xavier, D.Sc.



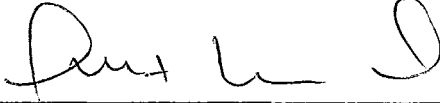
---

Prof. Ricardo Cordeiro de Farias, Ph.D.




---

Prof. Felipe Maia Galvão França, Ph.D.



---

Prof. Luiz Satoru Ochi, D.Sc.



---

Prof. Angel Ramon Sanchez Delgado, Ph. D.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

JUNHO DE 2007

GONÇALVES JUNIOR, LOURENÇO

Aprimoramentos na resolução de problemas de empacotamento utilizando suavização hiperbólica.

[Rio de Janeiro] 2007

X, 83 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, M.Sc., Engenharia de Sistemas e Computação, 2007)

Dissertação - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

1. Empacotamento
2. Suavização Hiperbólica
3. Minimax

I. COPPE/UFRJ II. Título ( série )

## **Dedicatória**

- À minha mãe, Leonice Primilla Gonçalves por minha existência.
- Ao Prof. Adilson Elias Xavier cujas qualidades de um pai e amigo ofereceu apoio incondicional para a realização desta dissertação. Com gigantesca sabedoria, dedicação para trabalho de orientação, doação gratuita e extra de seu tempo e uma dose dupla de disposição, ajudou tornar possível a realização de um ideal.
- À minha querida Bárbara Kushidonti, companheira e cúmplice, paciente e amiga solidária. Meus sinceros agradecimentos pelo apoio sempre presente e pela compreensão por todas as vezes (e foram muitas), que devaneios ou perplexidades, e horas dedicadas a um ideal, me furtaram de si, momentos preciosos de nossas vidas.

## Agradecimentos

- A Deus, pela dádiva da vida e do livre arbítrio.
- Aos amigos, André de Almeida Esteves, Julio César Lucena, Luciano de Oliveira Toledo, Roberto Carlos Antunes Thomé, Wander Demonel de Lima, amigos que todo ser humano gostaria de encontrar; amigos cuja contribuição sempre solidária e desprovida de interesses, transcende. Grandes incentivadores e camaradas nesta ou em outras batalhas, cujo apoio e atitudes positivas estiveram sempre presentes, e fez diferença. A vocês, meus amigos, minha eterna gratidão. À mim, a honra por compartilhar o mesmo tempo e cenário desta vida: Muito Obrigado.
- Aos amigos: Benjamin, Eloy, Eneias, Solange, Leandro, Leonardo, Maria Emília e Vinicius pelo importante apoio, obrigado.
- Aos amigos: Luciano de Oliveira Toledo e Michael de Souza pela contribuição na confecção desta dissertação, meus sinceros agradecimentos.
- Aos funcionários: Adilson Jorge Barros Magalhães, Cláudia Helena Prata, Itamar Xavier Marques, Josenildo Gomes de Moura, Gutierrez da Costa, Solange Coelho de Oliveira, Vera Lucia de Abreu Neves, pelo bom e esmerado atendimento. Dignos cumpridores de seus deveres, além de sempre solidários e fraternos, obrigado.
- Aos Mestres Professores, alicerces e construtores de ensinamentos, que partilharam e direcionaram o caminho dessa conquista, minha eterna gratidão;
- À Universidade Rural, uma mãe, um pai e um lar. Um amigo. Uma eterna namorada. Uma luz e uma perdição. Uma euforia e um alento, e todas as muitas saudades.

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

## APRIMORAMENTOS NA RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE EMPACOTAMENTO UTILIZANDO SUAUVIZAÇÃO HIPERBÓLICA

Lourenço Gonçalves Junior

Junho / 2007

Orientador: Adilson Elias Xavier

Programa: Engenharia de Sistemas e Computação

No presente trabalho, considera-se a resolução do problema de empacotamento de círculos congruentes sem sobreposição no interior de um quadrado unitário. Trata-se de encontrar a posição dos centros dos círculos que enseje a possibilidade de produzir o máximo diâmetro de  $q$  círculos idênticos, não sobrepostos, contidos no interior de um quadrado unitário. Equivalentemente, esse problema corresponde a maximizar a mínima distância entre pares de  $q$  pontos dentro de um quadrado unitário.

O problema considerado apresenta as características de ser não linear, não convexo e não diferenciável e de possuir um número expressivamente grande de mínimos locais. A metodologia desenvolvida basicamente está fundamentada no uso da técnica da suavização hiperbólica articulada ao método da penalização hiperbólica, destinado à resolução do problema de programação não linear com restrições. Nesse enfoque, a solução do problema original é produzida pela resolução de uma seqüência de problemas irrestritos da classe  $C^\infty$ .

Um conjunto de experimentos numéricos é apresentado comparando os resultados obtidos com os da literatura internacional, mostrando cabalmente a eficiência e robustez da metodologia proposta .

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

## IMPROVEMENTS IN THE SOLVING THE PACKING PROBLEM VIA HYPERBOLIC SMOOTHING

Lourenço Gonçalves Junior

June / 2007

Advisor: Adilson Elias Xavier

Department: Systems Engineering and Computer Science

In this work, it is considered the solution of packing of non overlapping equal circles inside an unit square problem. It deals with finding the circle centers which offers the possibility of obtaining the maximum diameter. Equivalently, this problem corresponds to maximize the minimum distance between  $q$  points inside an unit square.

This packing problem presents non-linear, non-convex and non-differentiable characteristics and has a myriad of local minima. The proposed methodology basically makes use of the hyperbolic smoothing approach in connection with the hyperbolic penalty method, intended for the constrained non-linear programming problem solution. In this approach, the original problem solution is obtained for solving a sequence of unconstrained  $C^\infty$  problems.

A set of computational results obtained by using the proposed methodology together results from the literature is presented. It shows both the efficiency and the robustness of the proposal.

<b>ÍNDICE DO TEXTO</b>	
<b>FICHA CATALOGRÁFICA.....</b>	<b>II</b>
<b>DEDICATÓRIA .....</b>	<b>III</b>
<b>AGRADECIMENTOS .....</b>	<b>IV</b>
<b>RESUMO.....</b>	<b>V</b>
<b>ABSTRACT .....</b>	<b>VI</b>
<b>ÍNDICE DO TEXTO.....</b>	<b>VII</b>
<b>ÍNDICE DE FIGURAS .....</b>	<b>IX</b>
<b>ÍNDICE DE TABELAS .....</b>	<b>X</b>
<b>CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO .....</b>	<b>1</b>
1.1 - INTRODUÇÃO .....	1
1.2 – CONJECTURA DE KEPLER .....	4
1.3 – EMPACOTAMENTOS NO PLANO .....	6
1.4 – SEQUÊNCIA DA APRESENTAÇÃO .....	9
<b>CAPÍTULO 2 – PROBLEMAS CORRELATOS.....</b>	<b>10</b>
2.1 – EMPACOTAMENTO DE ESFERAS EM ESPAÇOS N-DIMENSIONAIS .....	11
2.2 – NÚMERO DE TOQUES OU ENTRECHOQUES (“KISSING NUMBER”).....	12
2.3 – FAMÍLIA DE PROBLEMAS DE ARRANJO SOBRE UMA ESFERA .....	13
2.3.1 – <i>Problema Elíptico de Fekete</i> .....	15
2.3.2 – <i>Problema de Fekete</i> .....	16
2.3.3 – <i>Problema Soma de Potência</i> .....	19
2.3.4 – <i>Problema Tammes</i> .....	19
2.4 – PROBLEMAS DE RECOBRIMENTO .....	21
2.4.1 – <i>Recobrimentos no Espaço de 3 Dimensões</i> .....	21
2.4.2 – <i>Recobrimentos no Espaço de 2 Dimensões</i> .....	22
2.5 – EMPACOTAMENTO DE CÍRCULOS EM REGIÕES PLANARES .....	22
2.5.1 – <i>Empacotamento de Círculos Congruentes em um Círculo</i> .....	23
2.5.2 – <i>Empacotamento de Círculos Distintos em um Círculo</i> .....	24
2.6 – EMPACOTAMENTO DE CÍRCULOS EM TRIÂNGULOS .....	26
2.7 – EMPACOTAMENTO DE CÍRCULOS EM RETÂNGULOS .....	27
2.8 – PROBLEMA DE EMPACOTAMENTO DE CÍRCULOS EM QUADRADOS .....	28
2.9 – LIMITES DE DENSIDADE DE EMPACOTAMENTO .....	28
2.10 – POLINÔMIO MÍNIMO GENERALIZADO .....	35

<b>CAPÍTULO 3 – DESCRIÇÃO DO PROBLEMA E METODOLOGIA DE RESOLUÇÃO.....</b>	<b>39</b>
3.1 – DESCRIÇÃO DO PROBLEMA .....	39
3.2 – APROXIMAÇÃO DO PROBLEMA VIA SUAVIZAÇÃO HIPERBÓLICA .....	47
3.3 – A TÉCNICA DA PENALIZAÇÃO HIPERBÓLICA.....	50
3.4 – A ARTICULAÇÃO DA SUAVIZAÇÃO HIPERBÓLICA COM A PENALIZAÇÃO HIPERBÓLICA.....	53
3.5 – ALGORITMO SIMPLIFICADO.....	54
<b>CAPÍTULO 4 – RESULTADOS COMPUTACIONAIS .....</b>	<b>56</b>
<b>CAPÍTULO 5 – CONCLUSÕES .....</b>	<b>74</b>
5.1 - CONSIDERAÇÕES FINAIS E PROPOSTAS PARA FUTUROS TRABALHOS SOBRE O TEMA.....	75
<b>CAPÍTULO 6 – BIBLIOGRAFIA .....</b>	<b>76</b>
ANEXO -1 .....	83



## ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 1 - CABOS ELÉTRICOS. ....	4
FIGURA 2 - EMPILHAMENTO DE BOLAS .....	5
FIGURA 3 - A CONJECTURA DE KEPLER.....	6
FIGURA 4 - EMPACOTAMENTOS ÓTIMOS DE CÍRCULOS EM QUADRADO, PARA $Q \leq 5$ .....	7
FIGURA 5 - EMPACOTAMENTO REGULAR HEXAGONAL, OU "COLMÉIA", EM $R^2$ .....	11
FIGURA 6 - ARRANJO HEXAGONAL ÓTIMO .....	11
FIGURA 7 - KISSING NUMBER EM $R^3$ .....	13
FIGURA 8 - OS 122 PONTOS EM EQUILÍBRIO SOBRE UMA ESFERA .....	18
FIGURA 9 - CADEIA FORMADA PELAS ARESTAS DAS CÉLULAS DE DIRICHLET .....	18
FIGURA 10 - CÍRCULOS SOBRE A ESFERA EM $R^3$ .....	20
FIGURA 11 - ALGUNS EMPACOTAMENTOS DE CÍRCULOS NO CÍRCULO DE RAIOS UNITÁRIO, .....	24
FIGURA 12 - PROBLEMA DE EMPACOTAMENTO DE CÍRCULOS.....	25
FIGURA 13 - EMPACOTAMENTOS DE CÍRCULOS DISTINTOS NUM CÍRCULO.....	26
FIGURA 14 - ALGUNS EMPACOTAMENTOS DE CÍRCULOS NO TRIÂNGULO EQUILÁTERO UNITÁRIO. ....	27
FIGURA 15 - ALGUNS EMPACOTAMENTOS DE CÍRCULOS NO QUADRADO. ....	28
FIGURA 16 - ALGUNS EMPACOTAMENTOS DE CÍRCULOS EM POLÍGONOS REGULARES. ....	31
FIGURA 17 - A CÉLULA DE DIRICHLET DE UM CÍRCULO. (A) PARA UM POSICIONAMENTO CENTRAL; (B) PARA UM POSICIONAMENTO NA FRONTEIRA DE UM QUADRADO. ....	32
FIGURA 18 CONFIGURAÇÃO PARA O EMPACOTAMENTO DE 10 CÍRCULOS .....	36
FIGURA 19 CONFIGURAÇÃO DE CENTROS NO QUADRADO UNITÁRIO $Q=10$ .....	36
FIGURA 20 - RELAÇÃO ENTRE OS RAIOS NOS MODELOS P2 E P3 .....	41
FIGURA 21 - GRÁFICO DA DENSIDADE DO EMPACOTAMENTO, DE 1 A 300 CÍRCULOS. ....	46
FIGURA 22 - PENALIZAÇÃO HIPERBÓLICA .....	51
FIGURA 23 AS NOVAS SOLUÇÕES ÓTIMAS PUTATIVAS PARA 53, 59, 66, 68, 73 E 77 CÍRCULOS. ....	71
FIGURA 24 AS NOVAS SOLUÇÕES ÓTIMAS PUTATIVAS PARA 78, 85, 86, 88, 95 E 98 CÍRCULOS. ....	72
FIGURA 25 AS NOVAS SOLUÇÕES ÓTIMAS PUTATIVAS PARA 100, 101, 104, 105, 106 E 107 CÍRCULOS. ....	73

## ÍNDICE DE TABELAS

TABELA 1 - RESULTADOS DA METODOLOGIA DE LOCATELLI E RABER (2002). .....	45
TABELA 2 – RESULTADOS DE EMPACOTAMENTO PARA $Q = 2$ ATÉ $Q = 59$ CÍRCULOS EM $N = 1000$ . TENTATIVAS OBTIDOS COM SUAUIZAÇÃO HIPERBÓLICA E PENALIZAÇÃO HIPERBÓLICA. ....	62
TABELA 3 – RESULTADOS DE EMPACOTAMENTO PARA $Q = 2$ ATÉ $Q = 100$ CÍRCULOS OBTIDOS COM SUAUIZAÇÃO HIPERBÓLICA E PENALIZAÇÃO HIPERBÓLICA – NÚMERO VARIÁVEL DE TENTATIVAS. ....	64
TABELA 4 - DESEMPENHO DO ALGORITMO COM UM ÚNICO CONJUNTO DE PARÂMETROS – NÚMERO DE TENTATIVAS = 200.....	67

## Capítulo 1

### 1.1 - Introdução

No presente trabalho, considera-se a resolução do problema de empacotamento de círculos congruentes sem sobreposição no interior de um quadrado unitário. Trata-se de encontrar a posição dos centros dos círculos que enseje a possibilidade de produzir o máximo diâmetro de  $q$  círculos idênticos, não sobrepostos, contidos no interior de um quadrado unitário. Equivalentemente, esse problema corresponde a maximizar a mínima distância entre pares de  $q$  pontos dentro de um quadrado unitário.

Esse problema, aparentemente singular, 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 inúmeros mínimos locais. Destarte, a obtenção do mínimo global para esse problema é uma tarefa de grande dificuldade.

No presente trabalho, para a resolução do problema de empacotamento de círculos no interior de um quadrado unitário, basicamente adota-se a abordagem conhecida como suavização hiperbólica.

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 XAVIER (1982).

A suavização hiperbólica tem sido usada para a resolução de diversos problemas de programação matemática não-diferenciável. Primeiramente foi usado para resolução de um problema de calibração automática de modelos hidrológicos, como apresentado em XAVIER *et alli* (1990) e DIB (1994). Logo a seguir, foi adotada para resolver um problema de controle elétrico, conforme apresentado em MOTA *et alli* (1992), e para a minimização de funções definidas por mais de uma cláusula, conforme apresentado em XAVIER (1993).

Devido a esses êxitos iniciais, essa abordagem foi a seguir utilizada para a resolução de um problema de grande importância teórica como prática, o problema min-max. Para um melhor entendimento do aspecto de não-diferenciabilidade associado à modelagem min-max e da teoria aplicada à solução deste problema, deve-se consultar a substancial apresentação sobre os conceitos da técnica de suavização hiperbólica nos trabalhos de CHAVES (1987) e CHAVES e XAVIER (1998).

Uma síntese desse conjunto de aplicações é apresentada em SANTOS (1997). Mais recentemente, essa técnica tem sido utilizada na resolução de problemas de recobrimento, simples e múltiplo, de uma região plana por círculos, conforme apresentado em XAVIER (2000), XAVIER e OLIVEIRA (2002), XAVIER e OLIVEIRA (2003) e BRITO (2004). As aplicações mais recentes dessa abordagem consideram a resolução de problemas de agrupamento (clustering), XAVIER (2005), e de classificação segundo o critério de máquina vetor suporte (SVM), XAVIER et alli (2006).

No presente trabalho, considera-se, em particular, a extensão e o aprimoramento do uso da abordagem da suavização hiperbólica para a resolução do problema de empacotamento de círculos no interior de um quadrado unitário, primeiramente utilizada no trabalho de tese de mestrado de FELDMAN (2005).

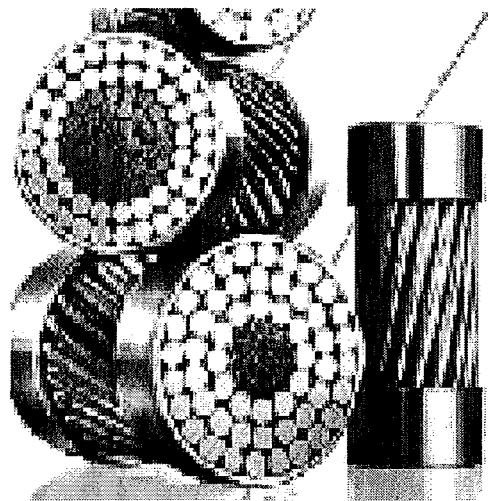
Na técnica de suavização hiperbólica, em todos os problemas acima citados, a solução é obtida através da resolução de uma seqüência infinita de problemas continuamente diferenciáveis, classe  $C^\infty$ , que gradativamente se aproximam do problema original. Registra-se que o desempenho computacional dessa técnica, frente a todos esses problemas, foi plenamente exitoso.

O problema de empacotamento de círculos no interior de um quadrado, conforme extensiva e precisamente apresentado em FELDMAN (2005), encontra diversas aplicações na indústria e no comércio, onde o aumento de unidades empacotadas em um contentor se traduz em transporte e ou armazenamento de maior quantidade de produtos pelo mesmo custo. Com isso, otimiza-se o custo unitário de transporte e de armazenamento. O objetivo usual é maximizar o material utilizado e conseqüentemente minimizar o custo.

É possível encontrar na literatura problemas com a mesma estrutura sob diferentes denominações: problema de empacotamento, carregamento de *containers* ou de plano de corte. Estes problemas estão relacionados de acordo com diversas características, como a dimensão do problema, as variedades das formas dos continentes e dos itens contidos, entre outras. Existem inúmeras tipologias para o problema de alocar itens menores numa região limitada e convexa do  $\mathbb{R}^n$ . Contudo, dependendo da combinação destas propriedades podem-se ter diferenças importantes, de natureza estrutural e conseqüentemente de estratégias de resolução.

Como corretamente FELDMAN (2005) registra: a escolha do empacotamento de círculos em um quadrado tem justificativa pelo fato de esse ser um problema bidimensional análogo ao do empacotamento de círculos em um retângulo. Ademais, é análogo ao problema tridimensional do empacotamento de cilindros idênticos em um paralelepípedo retângulo. A solução de um é a mesma do outro, pois o primeiro é a projeção do segundo num dos planos de base do paralelepípedo retângulo.

FELDMAN (2005) acrescenta que esse problema é muito comum na indústria, onde se tem uma grande quantidade de formas cilíndricas em fabricação: tubos metálicos ou plásticos, bobinas de papel ou de tecido, rebolos de esmeril, cartolinas e acartonados bobinados, tubos de fios para tecelagem, bobinas de fios e cabos elétricos e pacotes de mídia (CD ou DVD) para informática. Tudo isso, para ser transportado com danos mínimos, deve ser acondicionado em continentes adequados, alguns padronizados, na esmagadora maioria em formato de paralelepípedo. Acrescente-se a essa lista anterior de aplicações práticas, a otimização do recorte de peças circulares em chapas retangulares na confecção de arruelas, juntas ou gaxetas.



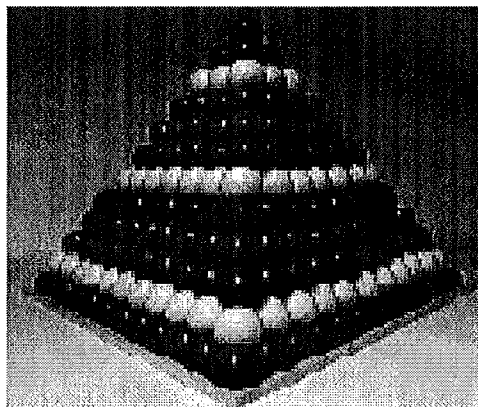
**Figura 1 - Cabos elétricos.**

Como precisamente registrado por FELDMAN (2005), de forma geral, os problemas de empacotamento tem uma natureza não-linear, não-diferenciável, não convexa e, essencialmente, possuem uma miríade de mínimos locais, e qualquer metodologia para a resolução desse tipo de problema vai enfrentar esse quadro de dificuldades teóricas e computacionais extremamente adversas. Destarte, não é razoável esperar que, qualquer que seja a metodologia, essa possa produzir um ponto de mínimo global para todos os casos desse problema.

Deve ser destacado que problemas de empacotamento estão intimamente ligados a um conjunto de problemas como de recobrimento, de número de adjacências, de quantificação e de codificação de canal. A matriz principal de generosa família desses problemas é inquestionavelmente a conjectura de Kepler.

## **1.2 – Conjectura de Kepler**

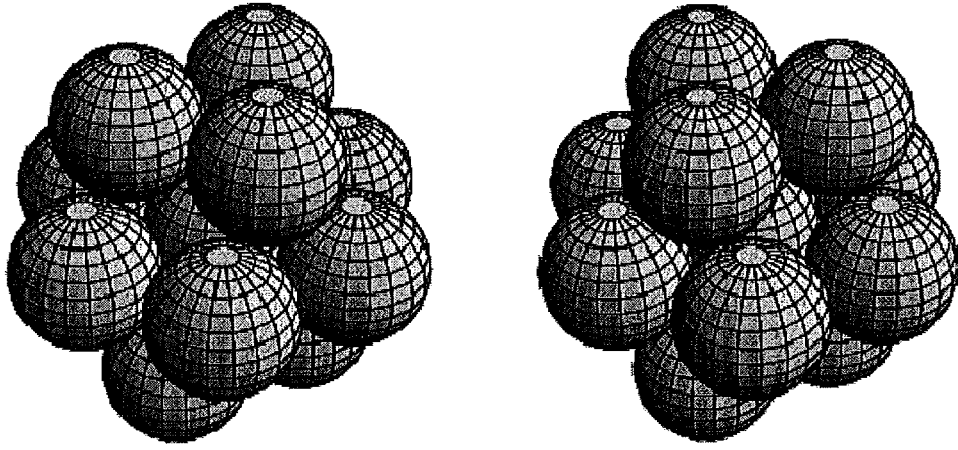
É possível que o problema de empacotamento tenha origem no início do século VII quando Sir Walter Raleigh fez uma pilha com balas de canhão e então questionou o matemático assistente Thomas Harriot sobre uma fórmula geral para determinar o número de balas de canhão nesta pilha.



**Figura 2** - Empilhamento de bolas

Harriot calculou sem muita dificuldade, e a partir dessa reflexão originaram dois outros importantes desenvolvimentos de estudo de empacotamentos limitados e da teoria atômica. Esses tópicos se desenvolveram lado a lado.

Kepler tomou conhecimento do problema a partir de correspondências com Harriot, que o aconselhou a adotar uma teoria atômica em seus estudos de ótica. Em 1611, Kepler em um ensaio sobre a constituição da matéria descreveu o empacotamento cúbico de face centrada, conforme Figura 3, e então afirmou que “*o empacotamento seria o mais justo possível, e nenhum outro arranjo teria mais esferas no mesmo contentor*”. Esta afirmação ficou conhecida como a *conjectura de Kepler*. HILBERT (1900) a mencionara em sua lista de problemas em aberto para o século então entrante. Esses acontecimentos deram origem a uma ampla classe de problemas, e em particular, ao problema apresentado nesta dissertação.



**Figura 3 - A conjectura de Kepler.**

O primeiro progresso na análise desse problema foi realizado por Gauss que demonstrou que o empacotamento cúbico de face centrada tem a maior densidade de empacotamento 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, de cálculos.

Tóth imaginou que a partir de cálculos realizados em computadores seria possível resolver a conjectura de Kepler: *“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”* L. Fejes Tóth (1964), Regular Figures.

Recentemente, HALES (1998) seguindo essas idéias de demonstração, fundamentadas na resolução de uma série de problemas de otimização usando computadores, provou a conjectura de Kepler. Esse tipo de prova é questionado, entretanto, por certas correntes de pensamento da comunidade científica.

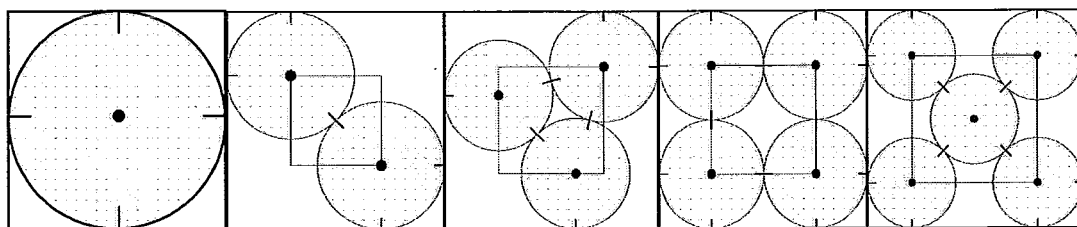
### **1.3 – Empacotamentos no Plano**

O problema de empacotar círculos no interior de diferentes formas geométricas tem recebido atenção desde o trabalho de L. Fejes Tóth. Um dos problemas mais



naturais é o empacotamento de círculos num quadrado. Este problema foi resolvido para até 9 círculos nos anos 1960 por Graham, Meir e Shaer; a prova desses casos é apresentada por MELISSEN (1994), SHAER (1965) e SCHWARTZ (1970). As provas para  $q \leq 5$  são fáceis e podem ser demonstradas analiticamente com argumentos geométricos elementares, enquanto os casos  $6 \leq q \leq 9$  requerem ferramentas matemáticas mais elaboradas.

Considerando a melhor distribuição de pontos no interior de um quadrado, estão ilustrados os casos para  $q \leq 5$  na Figura 4.



**Figura 4** - Empacotamentos ótimos de círculos em quadrado, para  $q \leq 5$

Para  $q \geq 10$ , empacotamentos ótimos foram provados somente para  $q = 14$  e 25, WENGERODT (1987a),  $q = 16$ , WENGERODT (1983) e  $q = 36$ , por KIRCHNER e WENGERODT (1987b). GROOT et alli (1990) usando computadores encontrou bons empacotamentos para  $q \leq 22$ . Esses autores oferecem uma prova computacional dos melhores empacotamentos com até 20 círculos. Para alguns valores de  $q > 27$ , bons empacotamentos foram apresentados por GOLDBERG (1970).

É natural definir o problema como um problema de otimização, onde a solução procurada pode ser um conjunto de  $q$  pontos distribuídos ou  $q$  centros de círculos no interior de quadrado unitário. Neste caso, o máximo raio possível para os círculos não sobrepostos com esses centros contidos no quadrado é calculado considerando-se a distância entre os pontos e entre pontos e a fronteira do quadrado. Este valor é então maximizado, movendo-se os centros dos círculos.

GROOT et alli (1990) resolveram o problema de maximização usando o algoritmo simplex e o método quase-Newton com atualização BFGS, para  $q \leq 20$ . Esses autores

ressaltam que o método falha para encontrar os empacotamentos ótimos para os casos  $q = 14, 15, 17$ .

Usando seu próprio *software* geométrico, denominado *Cabri Géometre*, MOLLARD e PAYAN (1990) encontraram bons empacotamentos para  $q = 11, 13$  e 14 círculos, melhorando os resultados de GOLDBERG (1970).

Modelos de programação linear e programação não-linear são ferramentas eficientes no tratamento de inúmeros problemas do cotidiano. O avanço computacional tem estimulado o desenvolvimento de novas abordagens para a resolução desses modelos, ou ainda, a aplicação de técnicas já existentes em situações até então não investigadas.

Do ponto de vista computacional, entretanto, problemas de empacotamento pertencem à classe dos problemas *NP-completos*, que são problemas em que o tempo computacional necessário para sua resolução cresce exponencialmente em função do tamanho da entrada de dados para todo método conhecido. Esses problemas são então ditos intratáveis.

FELDMAN (2005) registra as precisas colocações de YAN e WENQI (2002): "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, a existência de uma solução ótima não é o principal foco de atenção dos pesquisadores da área. O esforço computacional necessário para encontrar o ótimo é que passa a exercer um papel central no projeto de algoritmos para essa classe de problemas.

Dada a realidade *NP-completa*, vários autores estudaram o problema de empacotar círculos dentro de um retângulo com um enfoque heurístico. ISERMANN (1991), FRASER and GEORGE (1994), DOWSLAND (1991) e GEORGE *et alli* (1995).

Dentro desse referencial de complexidade *NP-completa* dos problemas de empacotamento, a perspectiva deste trabalho, unicamente, 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, resultados produzidos de boa qualidade numérica, vis-à-vis os algoritmos consentâneos na literatura.

#### **1.4 – Seqüência da apresentação**

Este trabalho de dissertação está organizado segundo a seguinte seqüência. No Capítulo 2 é feita uma revisão bibliográfica, de forma resumida, da generosa família de problemas de programação matemática com natureza geométrica similares ao empacotamento objeto da presente dissertação, como problemas de empacotamento de círculos em outras regiões planares, empacotamento em esferas e hiper-esferas em espaços de três e mais dimensões, problemas de recobrimento em espaços de duas e três dimensões e problemas toques ou entrechoques e recobrimentos em esferas e hiper-esferas diversas dimensões, conhecidos na literatura como *kissing number*. No Capítulo 3 é feita uma descrição formal do problema matemático associado ao empacotamento, de suas características e da metodologia proposta para sua resolução. No Capítulo 4 são apresentados os experimentos computacionais desenvolvidos e os correspondentes resultados obtidos pela aplicação da metodologia proposta, com comparações com aqueles registrados na literatura. Finalmente, no Capítulo 5 são apresentadas as conclusões e sugestões para futuros trabalhos.

## Capítulo 2 – Problemas Correlatos

Neste capítulo, será exibido de modo resumido um conjunto de problemas de empacotamento de círculos em regiões planares e problemas correlatos. O objetivo precípua nos problemas de empacotamento é o de colocar um conjunto de objetos em um dado continente com a perspectiva de se ter a maior densidade possível de empacotamento, isto é, maximizar a proporção entre a área dos círculos e área total do continente. Apesar de o interesse principal ser o empacotamento de círculos no interior de um quadrado unitário, será apresentado em paralelo outros problemas de empacotamento e problemas correlatos como o problema de recobrimento, problema dual do problema de empacotamento.

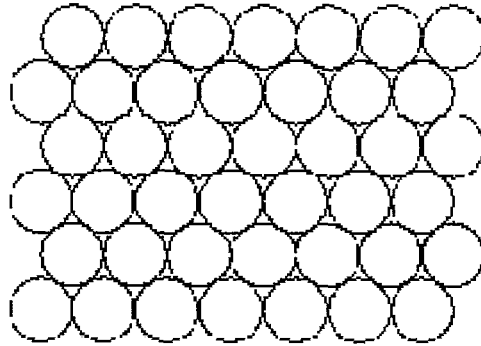
Embora as principais questões relacionadas ao problema de empacotamento não tenham respostas conclusivas, de acordo com HALES (1997), soluções gerais são conhecidas apenas em espaços de dimensão um, dois e três e, embora essas tenham sido conjecturadas por Kepler e Gauss, só foram demonstradas nas décadas de 20 e 90 do século XX. A literatura a cerca do tema é imensa e pode-se ter um apanhado geral, muito amplo e bastante atual, a partir do trabalho enciclopédico de SLOANE e CONWAY (1993).

O problema de empacotamento de esferas, assim como os problemas correlatos de recobrimento, de número de adjacências, de quantificação e de codificação de canal estão intimamente relacionados às questões de teoria de codificação, conforme os trabalhos de GOODMAN e ROURKE (1997), PACH e AGARWAL (1995) e ZONG (1999). Em particular, enquanto o raio do círculo inscrito é o parâmetro a ser maximizado no problema de empacotamento, a probabilidade de erro é o principal parâmetro a ser minimizado no problema de codificação de canal. Além disso, se 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 SLOANE e CONWAY (1988) e MACWILLIAMS e SLOANE (1977).

Dito isto, é possível se ter uma idéia da relevância no tratamento desses problemas, bem como, a importância de determinar melhores soluções. A seguir, será feita uma apresentação sucinta desses problemas correlatos.

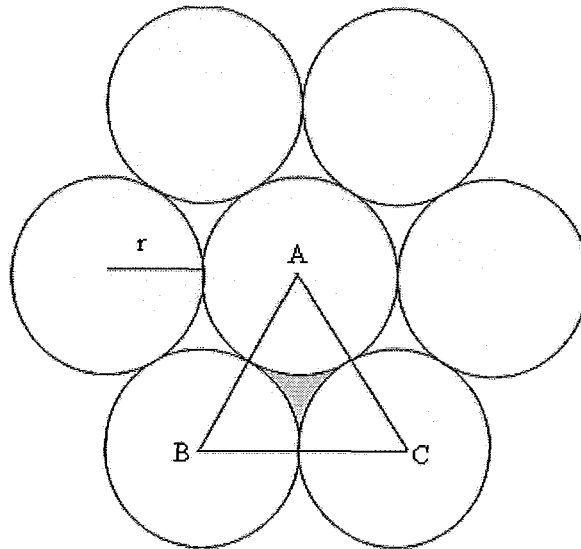
## 2.1 – Empacotamento de Esferas em Espaços n-Dimensionais

Esse problema, ou melhor família de problemas, é uma generalização da conjectura de Kepler, previamente apresentada. Trata-se de determinar a conformação, regular ou não regular, de esferas (ou hiper-esferas) no espaço n-dimensional que enseje a maior densidade possível. Em uma dimensão isso é trivial, pois uma bola unidimensional é um segmento de reta e pode-se obter uma densidade igual a 1, por exemplo, centrando esses segmentos em pontos inteiros de uma reta.



**Figura 5** - Empacotamento regular hexagonal, ou "colméia", em  $\mathbb{R}^2$ .

Para o espaço de duas dimensões, o  $\mathbb{R}^2$ , a maior densidade é dada pelo empacotamento regular hexagonal, ou "colméia",  $\frac{\pi}{\sqrt{12}} = 0,9069\dots$



**Figura 6** - Arranjo Hexagonal Ótimo

Para uma simplória e sucinta verificação dessa maior densidade de empacotamento de círculos congruentes e não sobrepostos em  $\mathbb{R}^2$ , considere a configuração do arranjo hexagonal representado na Figura 6. Defina uma partição do plano em triângulos equiláteros, que são obtidos ligando-se os centros de cada três círculos de raio  $r$  tangentes entre si. Restringindo-se a observação num desses triângulos, isto é, na determinação da maior densidade de empacotamento no interior de um triângulo equilátero. Assim, considere os círculos de centros  $A$ ,  $B$  e  $C$  e o triângulo equilátero  $ABC$  cuja área é  $r^2\sqrt{3}$ . Agora, como a área da região formada entre três círculos tangentes entre si, é igual a diferença entre a área do triângulo  $ABC$  e a área de um semicírculo (que é a soma das áreas de três setores de círculo no interior do triângulo equilátero), segue que a área de um gap entre círculos (hachurado em cor cinza) é dada por  $r^2\sqrt{3} - \pi r^2 = r^2\left(\sqrt{3} - \frac{\pi}{2}\right)$ . Portanto, a densidade de área no triângulo equilátero  $ABC$  pode ser determinada pela razão entre a área de um semicírculo pela área do triângulo equilátero  $ABC$ , ou seja,  $\frac{1}{2}\pi r^2 / r^2\sqrt{3} = \frac{\pi}{\sqrt{12}}$ .

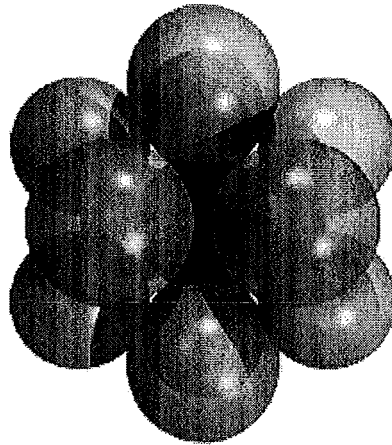
Note que, quando o número  $q$  de círculos cresce sem limites, obtemos uma cobertura do plano por triângulos equiláteros associados aos centros dos círculos com a seguinte relação:  $q + 2$  círculos associando-se a  $q$  triângulos, com  $q$  maior ou igual a um. Desse modo, quando  $q$  tende ao infinito isso implica que  $\frac{q + 2}{q} \rightarrow 1$  e, portanto, podemos concluir que no limite a densidade de área de círculos sobre o plano é exatamente  $\frac{\pi}{\sqrt{12}}$ .

CONWAY e SLOANE (1993) fazem uma extensa e rica discussão dessa família de problemas para espaço de 3 e mais dimensões. FELDMAN (2005) faz uma bela e claríssima síntese dessa discussão.

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

O problema de número de toques ou entrechoques (“kissing number”), conforme FELDMAN (2005), é descrito pela seguinte pergunta: deseja-se saber quantas bolas de

raio unitário podem tocar, simultaneamente, uma bola de raio unitário e centrada na origem, sem interceptarem umas às outras, em espaços de quaisquer dimensões. Na Figura 7 pode-se ver uma representação para o caso de três dimensões.



**Figura 7 - Kissing number em  $\mathbb{R}^3$ .**

Pelo seu grande apelo geométrico, esse problema tem sido estudado em dimensões, as mais diversas.

### **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 quatro problemas sobre esferas descritos em SAFF e KUIJLAARS (1997), e PINTER (2001).

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  $S$  de  $B$  tal que  $X(q)$  otimiza o valor de uma dada função critério específica, onde

$$\begin{aligned} x(q) &= \{x_1, \dots, x_q\}, \\ x_i &= (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}), \quad \text{com} \quad \|\cdot\| = 1 \end{aligned} \quad (1)$$

Onde  $\|\cdot\|$  denota norma Euclidiana.

Denotando por  $d_{ij} = d(x_i, x_j) = \|x_i - x_j\|$  a distância entre os pontos  $x_i$  e  $x_j$ , considere todos os pares de pontos e a respectiva distância  $d_{ij}$ ,  $1 \leq i < j \leq q$ , que definem a qualidade do arranjo de pontos  $x(q)$  por uma formulação apropriada.

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.

Em duas dimensões, esse problema é análogo a distribuição de  $q$  pontos sobre uma circunferência com distância igualmente espaçadas. Logo surge uma questão óbvia: quais conjuntos de pontos sobre a esfera são análogos àqueles dados pela regra das raízes complexas da unidade sobre um círculo unitário?

Uma maneira natural para encontrar essa distribuição de pontos sobre a esfera é a otimização com respeito a um critério de decisão, como a energia total de repulsão. A descoberta de moléculas de *carbono-60* estável, por KROTO et alii (1985), com átomos arranjados numa estrutura esférica, engendrou uma influência considerável sobre a atual atividade científica nesse tema. O estudo deste carbono C-60 gerou um elegante ramo de pesquisa na matemática, revelada por CHUNG et alii (1994). A partir dessas 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.

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.

Certamente, a distribuição uniforme de pontos sobre a esfera tem importantes aplicações para a ciência da computação. De fato, cálculos de áreas dependem de uma



escolha apropriada de uma amostra de pontos numa dada ordem para aproximá-la por uma função integral.

Outro exemplo surge no estudo de complexidade computacional, utilizando o problema de encontrar  $q$  pontos esféricos que maximizam o produto de suas distâncias mútuas.

De maneira geral, as configurações ótimas parecem seguir um padrão: os pontos distribuídos sobre a esfera tendem a se arranjar por si mesmos, em acordo com a estrutura hexagonal, ligeiramente perturbada.

Para um número grande de pontos distribuídos sobre a esfera, SAFF e KUIJLAARS (1997) observaram experimentalmente que todos, exceto exatamente doze das células de Dirichlet para uma configuração ótima são hexagonais. As exceções são células pentagonais.

### 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  $R^3$ , e um inteiro positivo  $q$ , deseja-se encontrar a  $q$ -upla de pontos ou vetores unitários

$$x(q) = \{x_i, i = 1, 2, \dots, q\}, \quad x_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}) \quad (2)$$

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:

$$P_q(x(q)) = \prod_{1 \leq i < j \leq q} \|x_i - x_j\| \quad (3)$$
$$x_i \in S^2,$$

Onde  $\| \cdot \|$  indica a norma Euclidiana.

Segundo PINTÉR (2001), por razões de melhor tratamento numérico, pode-se aplicar a transformação logarítmica. Conseqüentemente, a função objetivo em (3) é substituída pela função potencial logarítmica, e o problema anterior é equivalente ao problema de minimizar o Logaritmo da Energia:

$$E(0, x_q) = \sum_{1 \leq j < k \leq q} \log |x_j - x_k|^{-1} \quad (4)$$

Um conjunto de pontos ou vetores  $x^* = \{x_i^*, i=1, \dots, q\}$  onde  $x_i^* \in S^2$  satisfazendo a relação

$$P_q^* = P_q(x(q)) = \underset{x(q)}{\text{Max}} P_q(x(q)) \quad (5)$$

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

é uma solução ótima desse problema. Tais pontos extremos para esse problema são denominados pontos elípticos de Fekete de ordem  $q$ .

### 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 seguinte função energia:

$$E(1, x_q) = \sum_{1 \leq j < k \leq q} |x_j - x_k|^{-1} \quad (6)$$

onde valores ótimos  $x_1^*, x_2^*, \dots, x_q^*$  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.

Mais geralmente, pode-se considerar pontos que minimizam a *s-energia*:

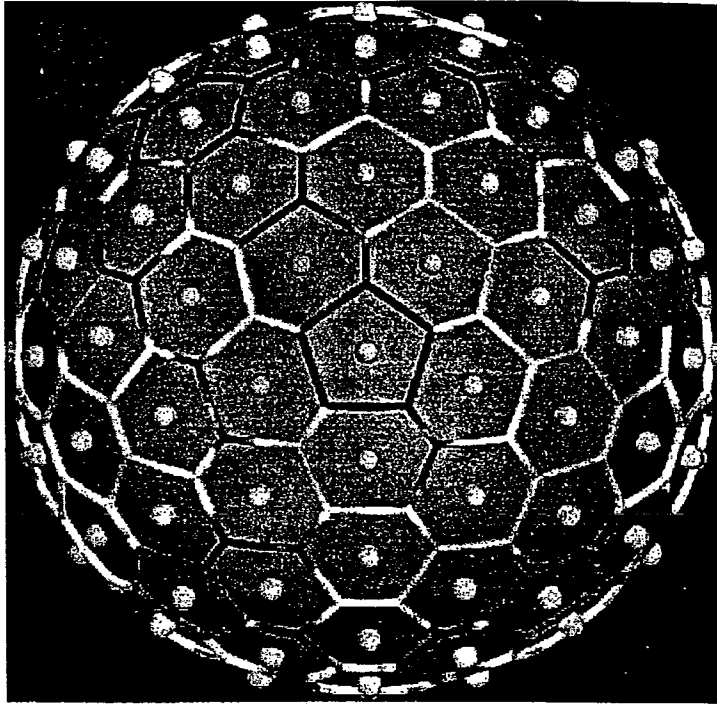
$$E(s, W_q) = \sum_{1 \leq j < k \leq q} |x_j - x_k|^{-s}, s > 0, \quad (7)$$

quando  $s \rightarrow \infty$ , com  $q$  fixado, a  $s$ -energia é crescente e dominada pelo termo envolvendo a menor das distâncias. Neste sentido, o problema conduz para problema de empacotamento ótimo..

Extensos cálculos para obter configurações ótimas e sua energia correspondente tem sido relatados na literatura. Inúmeros trabalhos trataram o caso Coulomb ( $s = 1$ ). Cita-se por exemplo ERBER e HOCKNEY (1991) e GLASSER e EVERY (1992). Outros valores de  $s$  foram considerados nos trabalhos de BERGERSEN *at alli* (1994), MEINYK *at alli* (1977) e RAKHMANOV *at alli* (1995). Em particular, uma relação dos melhores resultados é exposta por HARDIN, SLOANE e SMITH no sítio [www.netlib.att.com](http://www.netlib.att.com). Conforme BECK (1994), para os casos, onde  $q$  assume valores maiores ou igual a 100, longe de serem triviais são algumas vezes utilizados para testes em rotinas de otimização global.

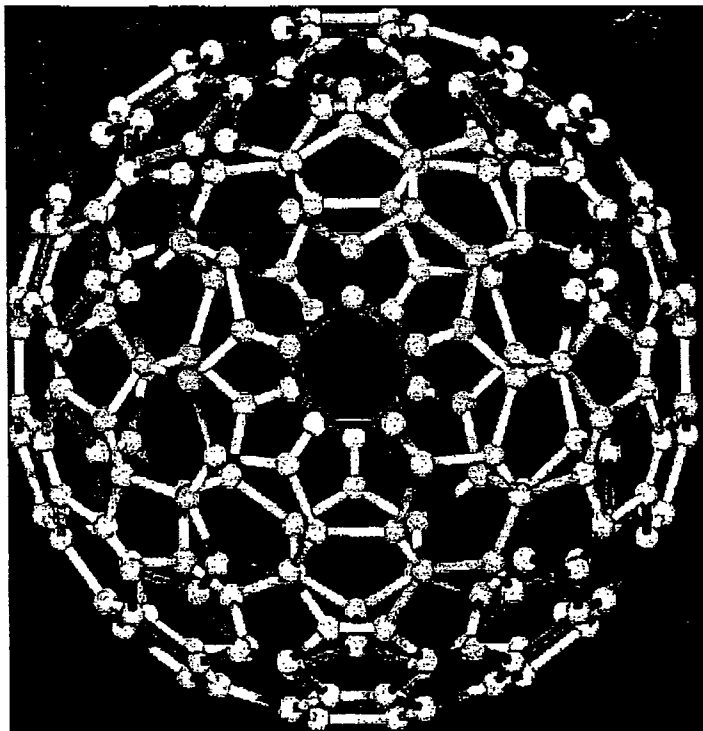
SAFF e KUIJLAARS (1997) registram como grande desafio a existência de inúmeros mínimos locais para o problema  $s$ -energia. Além disso, afirmam que os mínimos locais tem energias muito próxima do mínimo global, apesar da dificuldade de se provar essa aproximação com alguma precisão. De qualquer maneira, de acordo com ERBER e HOCKNEY (1995), estima-se que número de mínimos locais distintos (a menos de movimentos de rotação e de reflexão) cresce exponencialmente com  $q$ .

Por outro lado, segundo os mesmos autores, algumas estruturas de configurações ótimas para valores de  $q$  entre 32 a 200 com  $s = 0$  e  $s = 1$  exibem um padrão hexagonal-pentagonal de células de Dirichlet.



**Figura 8** - Os 122 pontos em equilíbrio sobre uma esfera

Figura 8 mostra  $q = 122$  pontos em equilíbrio sobre uma esfera com suas correspondentes células de Dirichlet, para  $s = 1$  na formulação (7).



**Figura 9** - Cadeia formada pelas arestas das células de Dirichlet

A Figura 9 mostra a cadeia formada pelas arestas das células exibidas na Figura 8. SAFF e KUIJLAARS (1997) aventam a possibilidade de que essa cadeia pode ser uma candidata para uma estrutura esférica para o carbono com 240 moléculas. Para cada aresta que liga dois pontos obtém-se uma molécula. Desse modo, para as doze células pentagonais pode-se formar  $(12*5)/3 = 20$  moléculas, e para as 110 células hexagonais pode-se formar  $(110*6)/3 = 220$  moléculas, totalizando as 240 moléculas correspondentes a essa estrutura esférica

### 2.3.3 – Problema Soma de Potência

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

$$\begin{aligned} \text{Maximizar } P_\alpha(x) &= \sum_{1 \leq j < k \leq q} |x_j - x_k|^\alpha, \quad \alpha > 0 \\ \text{s.a} \quad x_i &\in S^2, \end{aligned} \tag{8}$$

onde  $\alpha$  é o parâmetro do modelo.

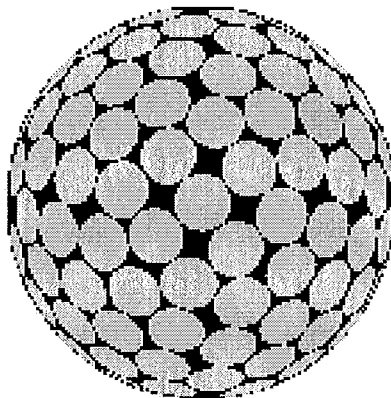
SAFF e KUIJLAARS (1997) observaram que este problema é interessante somente para o caso em que  $\alpha < 2$ . Para  $q$  par e  $\alpha \geq 2$ , configurações ótimas consistem de dois grupos iguais, obtidos pela alocação da metade dos pontos no pólo norte e a outra metade no pólo sul da esfera.

### 2.3.4 – Problema Tammes

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

$$d_q = \underset{x_1, \dots, x_q \in S^2}{\text{maximizar}} \underset{1 \leq i < j \leq q}{\text{minima}} \|x_i - x_j\| \tag{9}$$

O arranjo correspondente é denominado *empacotamento ótimo*.



**Figura 10** - Círculos sobre a Esfera em  $\mathbb{R}^3$ .

Resultados assintóticos foram obtidos pioneiramente por HABICHT e WAERDDEN (1951). Eles provaram que para alguma constante  $C > 0$

$$\left(\frac{8\pi}{\sqrt{3}}\right)^{1/2} q^{-1/2} - Cq^{-2/3} \leq d_q \leq \left(\frac{8\pi}{\sqrt{3}}\right)^{1/2} q^{-1/2} \quad (10)$$

A idéia essencial para o estabelecimento de um limite inferior é a projeção do ladrilhamento hexagonal do plano sobre a superfície da esfera, do qual o termo dominante é

$$\delta_q = \left(\frac{8\pi}{\sqrt{3}}\right)^{1/2} q^{-1/2} \quad (11)$$

que pode ser visto com argumentos heurísticos.

Uma aplicação prática do problema de Tammes está na construção de códigos esféricos. Por exemplo, em transmissão de informações em qualquer meio, podem ocorrer influências de naturezas diversas que provocam perturbações nos valores originalmente emitidos; assim, durante a decodificação no destino é inexorável a ocorrência de erros. Uma forma de minimizar tais erros de transmissão é definir uma codificação com a maior separação possível dos símbolos básicos do alfabeto específico.

CLARE e KEPERT (1986) e KOTTWITZ (1991) estudaram o problema de empacotamento de círculos sobre uma esfera e oferecem soluções a partir de apoio computacional. Eles não consideram a mínima distância entre pares de pontos sobre a esfera, mas minimizaram a energia potencial total de repulsão. Baseando-se nesta abordagem NURMELA (1995) generalizou este método para encontrar códigos esféricos em 8 dimensões.

## **2.4 – Problemas de recobrimento**

Nessa família de problemas o objetivo é recobrir uma dada região de um espaço  $n$ -dimensional com hiper-esferas congruentes, de sorte que o diâmetro das mesmas seja o menor possível. Por recobrir, entende-se que cada ponto dessa região está necessariamente dentro de pelo menos uma das hiper-esferas.

Busca-se, assim, que essas hiper-esferas ofereçam a menor densidade possível. Esse problema é considerado um dual do problema de empacotamento de bolas em espaços  $n$ -dimensionais.

Importantes resultados no estudo dessa família de problemas aparecem em ROGERS (1964), TÓTH (1964), TÓTH (1983), CONWAY and SLOANE (1988) e HALES (1992).

Só para se ter uma leve noção das dificuldades intrínsecas à resolução do problema de recobrimento, vale a pena lembrar que, um problema dessa família de muito pequena dimensão: recobrimento de um quadrado com 6 círculos congruentes foi objeto de um artigo numa revista científica internacional, MELISSEN (1994).

### **2.4.1 – Recobrimentos no Espaço de 3 Dimensões**

Conforme resumido por FELDMAN (2005), no espaço tridimensional ilimitado, o melhor recobrimento conhecido é o arranjo regular cúbico de corpo centrado. Conforme demonstrado por BAMBACH (1954), esse arranjo regular é um recobrimento ótimo em três dimensões. Isto pode parecer, à primeira vista, surpreendente, uma vez que o melhor *empacotamento* em três dimensões, conjectura de Kepler, é um arranjo regular

diferente: o arranjo regular cúbico de face centrada. Mas, na realidade, um arranjo é o dual do outro, corroborando o fato de que recobrimentos são duais dos empacotamentos e vice-versa.

#### **2.4.2 – Recobrimentos no Espaço de 2 Dimensões**

Seja  $S$  uma região finita do  $\mathbb{R}^2$ , como já definido acima. Um conjunto de  $q$  círculos constitui uma recobrimento de ordem 1 de  $S$  se cada ponto  $s \in S$  pertence a pelo menos um círculo. Recobrimentos de mais alta ordem podem ser definidos em maneira similar. Esse problema surge em um grande número de aplicações, tais como: resolução de alguns modelos de cristalografia, colocação de centros de serviços ou localização de centros de telecomunicação, como estações de rádio base (ERB'S) para telefonia celular.

KERSHNER (1939) mostrou que nenhum arranjo de círculos consegue recobrir o plano infinito mais eficientemente que o arranjo regular hexagonal, cuja *densidade* é 1,21 aproximadamente. XAVIER e OLIVEIRA (2005) estudaram a otimização do recobrimento de regiões planas, de formatos quaisquer, por círculos, com a utilização da técnica de suavização hiperbólica. O recobrimento de regiões do plano por um conjunto de elipses foi estudado por GALIYEV (1995).

Vale a pena ressaltar que o problema de recobrimento de região plana por círculos engendra um problema em 3 níveis min-max-min, fortemente não-diferenciável.

#### **2.5 – Empacotamento de Círculos em Regiões Planares**

Problemas de empacotamento de círculos em diferentes formas geométricas no plano mereceram grande atenção dos pesquisadores a partir dos anos 1960. No  $\mathbb{R}^2$ , o problema de empacotamento de círculos é encontrado freqüentemente em algumas indústrias têxteis, de vidro, de madeira, de papel, etc. Consiste em colocar um conjunto de círculos num continente sem sobreposição. O objetivo usual é maximizar o material utilizado e conseqüentemente minimizar o custo.



Existem inúmeras variações no problema, por exemplo, o continente pode ser um círculo, um retângulo ou um polígono qualquer, regular ou não. Em geral, esses problemas são da classe conhecido como *NP-completa*. Ademais, os raios dos círculos contidos podem ser iguais ou distintos. Abaixo, serão apresentados esses dois casos.

### **2.5.1 – Empacotamento de Círculos Congruentes em um Círculo**

GRAHAM et alli (1998) descrevem que KRAVITZ (1967) foi o primeiro a estudar o problema de empacotamento de  $n$  círculos congruentes num círculo. Nesse trabalho referido, Kravitz apresenta empacotamentos com até 19 círculos, sem qualquer prova de otimalidade. GRAHAM (1968) e PIRL (1969), de forma independente um do outro, provaram a otimalidade de empacotamento de 7 e até 10 círculos, respectivamente. Mais recentemente, MELISSEN (1994) provou a otimalidade para o caso  $q = 11$ .

Inúmeros pesquisadores, a cada ano, desenvolvem novas estratégias e apresentam novos resultados para resolução de diferentes casos desse problema.

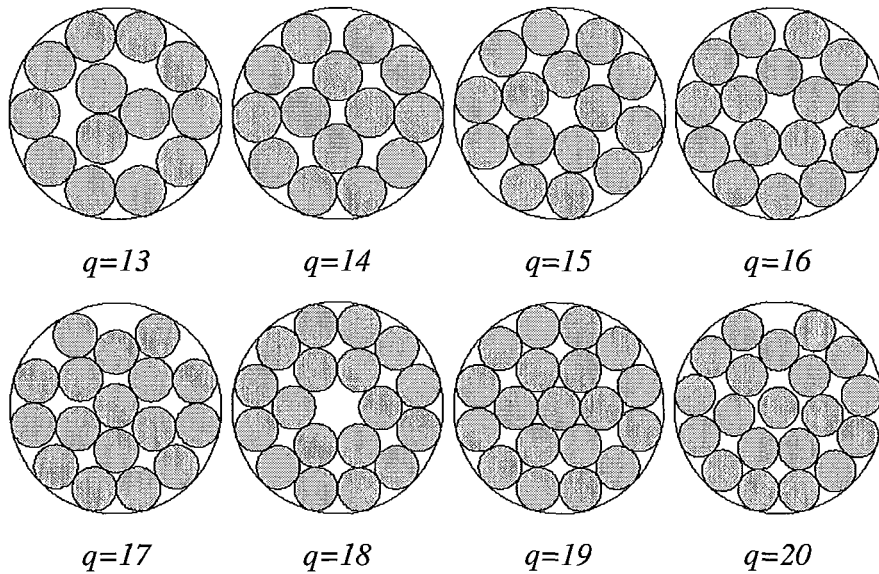
GRAHAM et alli (1998) apresentam dois diferentes métodos, essencialmente estocásticos, para gerar boas soluções para esse problema. Em ambos, tentam maximizar a mínima distância entre os  $q$  pontos entre si distribuídos no círculo unitário.

A dificuldade central ao se aplicar um algoritmo de otimização local é que o problema é fortemente não diferenciável, pois a grande maioria das componentes do gradiente da função são iguais a zero em quase toda a região viável, com variações abruptas com os deslocamentos dos centros dos círculos.

Para superar essas dificuldades, GRAHAM et alli (1998) aproximam o problema original minimizando uma função energia potencial em um contexto artificial de existência de forças de repulsão entre os pontos. Nesse enfoque, todos os pontos dão permanentemente uma contribuição ao gradiente em todo espaço.

Em outro trabalho, os mesmos autores apresentam, ademais, um segundo método emulado no movimento de bolas de bilhar.

A Figura 11 ilustra alguns empacotamentos de círculos no círculo de raio unitário.



**Figura 11** - Alguns empacotamentos de círculos no círculo de raio unitário.

### 2.5.2 – Empacotamento de Círculos Distintos em um Círculo

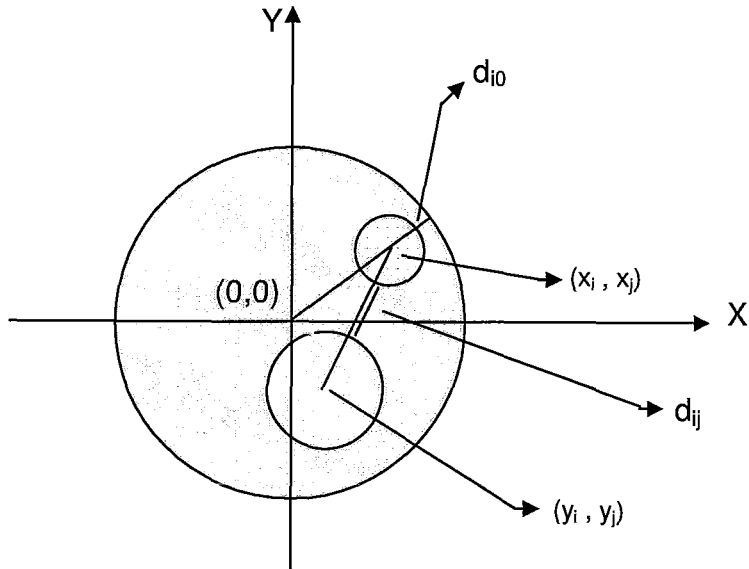
WEN QI HUANG et alli (2006) consideram o seguinte problema de empacotamento: dado um conjunto de círculos não congruentes, encontrar o mínimo raio de um círculo continente tal que todos os círculos podem ser empacotados nesse círculo sem sobreposição. O problema de decisão associado é formalizado como segue:

Dado um continente circular de raio  $r_0$  e um conjunto de  $q$  círculos  $c_1, c_2, \dots, c_q$  de raios  $r_1, r_2, \dots, r_q$ . Em princípio, podem existir vários círculos com o mesmo raio. Seja  $(0, 0)$  as coordenadas do centro do continente e sejam  $(x_i, y_i)$  as coordenadas do centro do círculo  $c_i$ , o problema então, é determinar se existem  $2q$  números reais correspondentes aos pares  $(x_i, y_i), i=1, \dots, q$  tais que:

$$r_0 - r_i - \sqrt{x_i^2 + y_i^2} \geq 0, \quad i \in \{1, 2, \dots, q\}$$

$$\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} - r_i - r_j \geq 0, \quad i \neq j \in \{1, 2, \dots, q\}$$

(12)



**Figura 12** - Problema de empacotamento de círculos

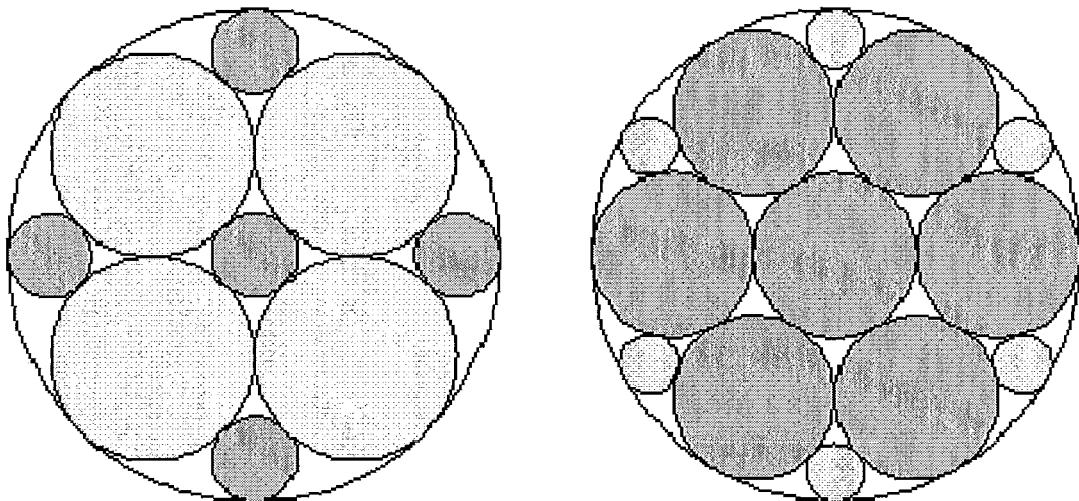
A primeira restrição diz que o círculo  $c_i$  colocado no círculo continente não ultrapassa a sua fronteira, isto é, a distância de  $c_i$  até o contendor, denotado por  $d_{i0}$ , não pode ser negativa:

$$d_{i0} = r_0 - r_i - \sqrt{x_i^2 + y_i^2} \quad (13)$$

A segunda restrição exige que os círculos colocados dentro do continente não podem ser sobrepostos entre si. Para tais dois círculos  $c_i$  e  $c_j$ , a distância entre eles, denotada por  $d_{ij}$ , é não negativa:

$$d_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} - r_i - r_j \quad (14)$$

A Figura 12 ilustra essas restrições. Se houver um algoritmo eficiente para resolver esse problema, pode-se resolver o problema de otimização original usando uma estratégia de busca, por exemplo, a busca dicotômica ou busca binária, para atingir o raio mínimo do continente dentro de uma precisão fixada. WE QI HUANG et alli (2006) propõem dois algoritmos heurísticos para resolver o problema de decisão.



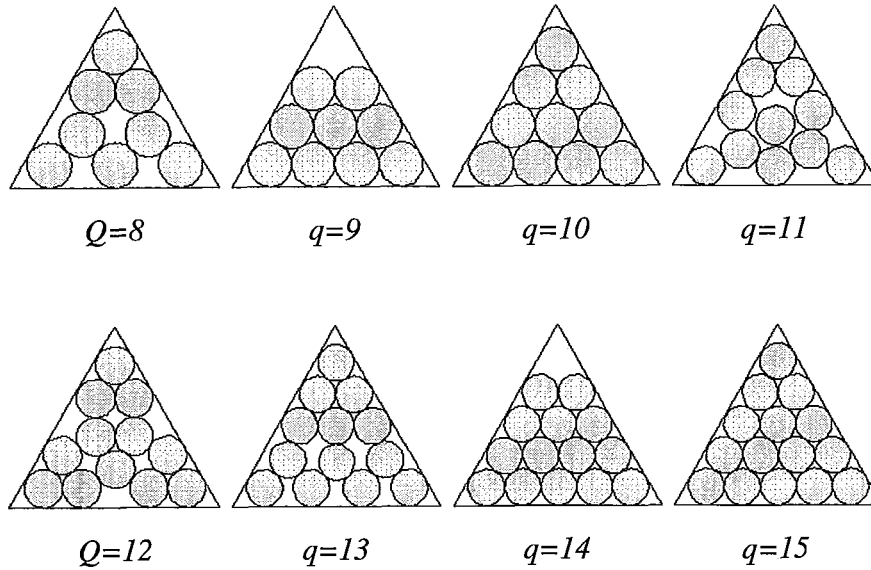
**Figura 13** - Empacotamentos de círculos distintos num círculo

## 2.6 – Empacotamento de Círculos em Triângulos

Para o problema de empacotamento no plano ilimitado, a densidade máxima é igual a  $\pi/\sqrt{12}$ , assim para os casos em que o número de círculos congruentes é dado por  $q = k(k+1)/2$  para algum inteiro  $k$ , temos a solução exata facilmente determinada. Isso pode ser feito através de uma configuração em progressão aritmética de 1 a  $k$ , em  $k$  camadas, que enseja o valor limite máximo de densidade. Para outros valores de  $q$ , esse problema é *NP-completo*.

LUBACHEVSKY e GRAHAM (1995) usaram um algoritmo de simulação para empacotar círculos num triângulo equilátero. Este algoritmo simula um movimento idealizado com bolas de bilhar no interior de uma caixa triangular; as medidas das bolas crescem lentamente até que o movimento é bloqueado.

A Figura 14 ilustra alguns empacotamentos de círculos no triângulo equilátero unitário.



**Figura 14** - Alguns empacotamentos de círculos no triângulo equilátero unitário.

## 2.7 – Empacotamento de Círculos em Retângulos

Considerando um continente retangular, BIRGIN *et alli* (2002) apresentam uma forma alternativa de se formular o empacotamento como um problema de decisão: dados  $q$  círculos congruentes de raio  $r_q$ , é possível, ou não, colocá-los dentro de um retângulo de lados  $a$  e  $b$ , sem superposição? Para responder essa pergunta, introduz-se um modelo de programação não-linear onde, dados  $q$  e  $r_q$ , o objetivo é determinar os pontos  $p^1, \dots, p^q \in [r_q, a-r_q] \times [r_q, b-r_q]$ :

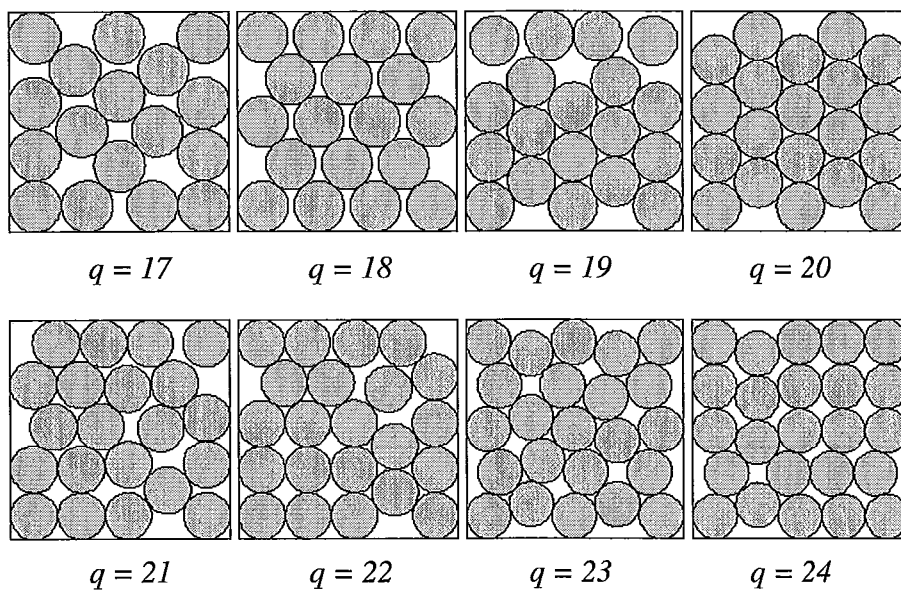
$$\begin{aligned}
 & \min \sum_{i \neq j} \max(0, (2r_q)^2 - \|p^i - p^j\|_2^2)^2 \\
 & \text{sujeito a} \\
 & r_q \leq p_1^i \leq a - r_q, i = 1, \dots, q \\
 & r_q \leq p_2^i \leq b - r_q, i = 1, \dots, q
 \end{aligned} \tag{15}$$

Os pontos  $p^1, \dots, p^q$  são os centros dos círculos desejados, que terão o raio  $r_q$ . O que se busca é o minimizador global desse problema. Se a função objetivo for anulada pelo minimizador global de (P3), a resposta ao problema de decisão é SIM. Caso contrário, a resposta é NÃO.

Outras formas de se definir problemas alternativos de empacotamento de círculos em retângulos é : dados os  $q$  círculos congruentes de raio  $r_q$ , procurar o retângulo continente que tenha o menor perímetro ou o que tenha a menor área. LUBASHEVSKY e GRAHAM (2004) consideram esses dois problemas.

## 2.8 – Problema de Empacotamento de Círculos em Quadrados

Esse é o tema central deste trabalho. No capítulo 3, a seguir, será descrito e abordado em maiores detalhes. Basicamente, especificado um número  $q$  de círculos, deseja-se determinar uma configuração de posições de centros tal que possibilite colocar esses  $n$  círculos, sem sobreposições, dentro de um quadrado unitário com o raio maior possível.



**Figura 15** – Alguns empacotamentos de círculos no quadrado.

## 2.9 – Limites de Densidade de Empacotamento

Deve ser feita uma conceituação inicial. Considerando regiões planares, GASPAR e TARNAI (2000) apresentam as seguintes conceituações associadas a dois problemas diferentes, mas muito semelhantes:

1 - Como determinar o maior diâmetro  $d_q$  de  $q$  círculos congruentes que podem ser empacotados numa região convexa do plano sem sobreposição ou, equivalentemente, como determinar o máximo possível da distância mínima  $d_q$  entre  $q$  pontos que podem ser distribuídos no interior de uma região convexa do plano.

2 - Dado o domínio convexo  $Q$  e o diâmetro dos círculos, como empacotar o número máximo de círculos sem sobreposição.

Nesse trabalho são considerados prioritariamente problemas do primeiro tipo. Assim, a menos que seja feita referência explícita ao contrário, será esse o tipo contemplado.

Se  $A(Q)$  e  $P(Q)$  denotam a área e o perímetro de uma região convexa  $Q$ , TÓTH (1972) mostrou que se nessa região existem  $q \geq 2$  círculos empacotados, então:

$$q\sqrt{12} < A(Q) \quad (16)$$

GROEMER (1990) generalizou a desigualdade de Tóth para  $q$  círculos empacotados na região convexa  $Q$  e provou que

$$q\sqrt{12} \leq A(Q) - \frac{2-\sqrt{3}}{2}P(Q) + \sqrt{12} - \pi(\sqrt{3} - 1) \quad (17)$$

MOLNÁR (1979) e (1980) também provou esta estimativa acima e mostrou os casos onde a igualdade é válida. GASPAR e TARNAI (1999) baseando-se nos resultados de OLER (1961) generalizaram este limite superior para outras regiões poligonais da seguinte forma:

Seja  $\Pi$  uma região fechada e convexa limitada,  $E$  um conjunto finito de pontos,  $q$  o número de pontos de  $E$  tal que os vértices de  $\Pi$  pertencem a  $E$ , o conjunto  $E$  está contida na região fechada  $\Pi$ , e a distância entre dois pontos quaisquer de  $E$  é maior ou igual a 2. Então, segundo OLER (1961), vale:

$$q\sqrt{12} \leq A(\Pi) + \frac{\sqrt{3}}{2}P(\Pi) + \sqrt{12} \quad (18)$$

A densidade de empacotamento de  $q$  círculos congruentes de diâmetro  $d_n$  numa região convexa  $Q$ , denotada por  $D_q$  é definida como a razão da área total dos círculos empacotados pela área  $A(Q)$  da região  $Q$ , ou seja,

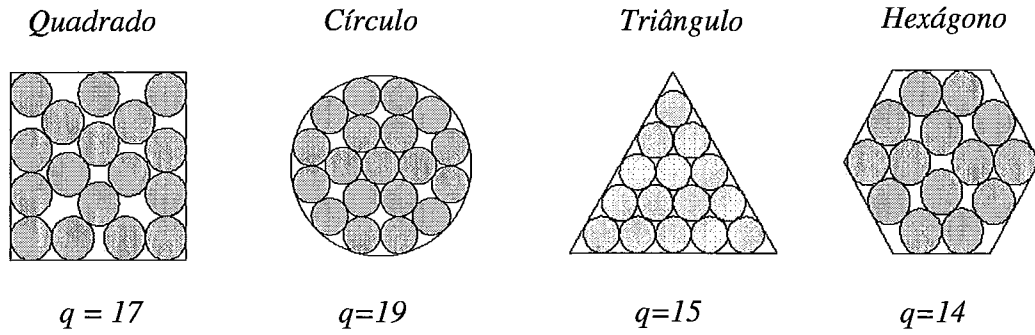
$$D_q = \frac{qd_q^2\pi}{4A(Q)} \quad (19)$$

As desigualdades (17) e (18) apontam que podem ser obtidas estimativas para um quadrado, um triângulo equilátero, um círculo ou qualquer região convexa. De qualquer modo, a diferença entre o limite superior conhecido é relativamente grande para diferentes valores de  $q$ . A pesquisa mundial busca reduzir essas diferenças. A desigualdade (17) é válida para regiões convexas arbitrárias e em (18) é suposto que tem um círculo em cada vértice do polígono, por isso existe a expectativa de melhorar o limite superior usando as características particulares de regiões especiais e a ocorrência de folgas ao longo da fronteira. Vale lembrar que, sob o ponto de vista teórico, novos resultados são rarefeitos a partir dos anos 1960.

O valor exato da máxima densidade de empacotamento, em especial numa região planar (como quadrado, triângulo equilátero, círculo) de arranjos ótimos, são conhecidos apenas para alguns valores de  $q$ . Uma lista de soluções exatas conhecidas foi apresentada por TÓTH (1995). Para outros valores de  $q$  somente limites inferiores e superiores da densidade máxima podem ser dados. Limites inferiores podem ser mais apropriadamente dados pela construção explícita de empacotamentos. Os resultados incluindo também construções de empacotamentos para regiões especiais são observados por CROFT et alli (1991) e por MOSER e PACH (1993).

A Figura 16 ilustra alguns exemplos de empacotamentos de círculos em continentes poligonais regulares, que possuem o atributo de otimalidade.





**Figura 16** - Alguns empacotamentos de círculos em polígonos regulares.

Resultados mais recentes de empacotamentos de círculos em quadrado são apresentados por PEIKERT (1994), MELISSEN (1994), MARANAS et alli (1995) e GASPAR e TARNAI (1999). Assim, para o caso em que a região é um triângulo equilátero, MELISSEN (1993), (1994), MELISSEN e SCHUUR (1995), GRAHAM e LUBACHEVSKY (1995) apresentam novos resultados ótimos e novos limites. Para o caso do círculo, MELISSEN (1994) e GRAHAM *et alli* (1998) aduzem novas análises. Limites superiores para diversos casos convexos podem ser obtidos da desigualdade (16), (17), (18).

### **Limites superiores sobre a densidade de empacotamento num quadrado**

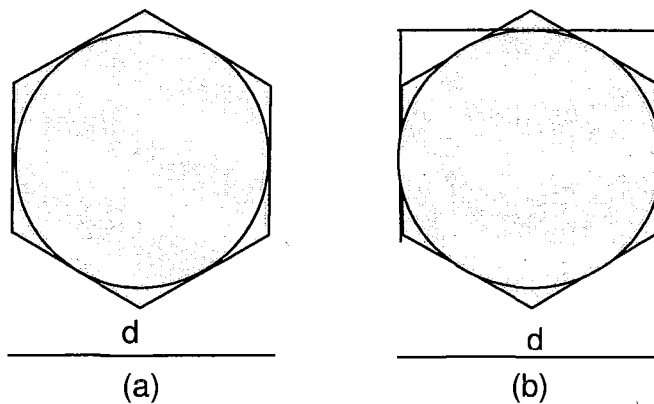
Contemplando o objetivo central deste trabalho, se  $D$  denota máxima densidade de empacotamento de  $n$  círculos congruentes numa região convexa, se  $q \geq 2$ , então a desigualdade de Tóth (16) para o caso de empacotamento de círculos em quadrados resulta no seguinte limite ortodoxo:

$$D < \frac{\pi}{\sqrt{12}} \quad (20)$$

Neste caso a fórmula de Groemer (17) resulta na seguinte estimativa superior da máxima densidade de empacotamento melhor que o limite dado por (20):

$$D \leq \frac{q\pi}{\left[2 - \sqrt{3} + \sqrt{7 - \pi + \sqrt{3}(2q - 6 + \pi)}\right]^2} \quad (21)$$

A desigualdade de Groemer (21), contudo, pode ser estendida a partir de propriedades especiais de empacotamento de círculos em um quadrado, de acordo com GASPAR e TARNAI (2000). Basicamente, esses autores se utilizam do conceito de célula de Dirichlet, que define áreas mínimas necessárias associadas a um círculo de acordo com o seu posicionamento. A Figura 17 apresenta sobejamente esse conceito para dois casos de posicionamento.



**Figura 17** - A célula de Dirichlet de um círculo. (a) para um posicionamento central; (b) para um posicionamento na fronteira de um quadrado.

A partir dessa abordagem, GASPAR e TARNAI (1999) obtêm um novo limite superior para a densidade de empacotamento  $D$ :

$$D \leq \frac{q\pi}{\left[2 - \sqrt{3} + \sqrt{3 + 2\sqrt{3}(q-1)}\right]^2} \quad (22)$$

que é exata para  $q = 1$ , e melhor do que a desigualdade de Groemer (21) para todo  $q$ . Nesse mesmo estudo, usando características mais específicas do empacotamento de círculos em quadrados, em particular daqueles com posicionamento de círculos nos vértices, GASPAR e TARNAI (1999) chegam a um limite superior de densidade mais estreito:

$$D \leq \frac{qd_q^2\pi}{4(1+d_q)^2} \quad (23)$$

SZABÓ (2005) usando o teorema de OLER et alli (1969) estabelece novo limite de densidade. Esse teorema estabelece que: Se  $X$  é um subconjunto compacto e convexo do plano com área  $V(X)$  e perímetro  $S(X)$ , então o número de pontos com distância mútua com valor no mínimo de uma unidade é no máximo  $\frac{2}{\sqrt{3}}V(X) + \frac{1}{2}S(X) + 1$ . Daí, derivam, de uma forma quase direta, um limite para o diâmetro  $d_q$  de um empacotamento de  $q$  círculos:

$$\bar{d}_q \leq \frac{1 + \sqrt{1 + (q-1)\frac{2}{\sqrt{3}}}}{q-1}, \quad (24)$$

Esse limite do diâmetro acima implica imediatamente na limitação da densidade:

$$D \leq \frac{\pi \bar{d}_q^2}{4} q \quad (25)$$

### **Limites superiores na densidade de empacotamento num triângulo equilátero.**

Seja  $D$  a máxima densidade de empacotamento de  $q$  círculos congruentes e não sobrepostos no interior de um triângulo equilátero. Neste caso a fórmula de Groemer (17) resulta na seguinte estimativa superior da máxima densidade de empacotamento, melhor que (20)

$$D \leq \frac{q\pi}{\sqrt{3} \left[ \sqrt{3} - \frac{3}{2} + \sqrt{\frac{13}{4} - 3\sqrt{3} + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}}\right)\pi + 2\pi} \right]^2}, \quad (26)$$

GASPAR e TARNAI (1999) estudando o caso de empacotamento de círculos em triângulos equiláteros apresentam o limite superior para a densidade de empacotamento de círculos no triângulo equilátero:

$$D \leq \frac{q\pi}{\sqrt{3} \left[ \sqrt{3} - \frac{3}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + 2q} \right]^2}, \quad (27)$$

Segundo os autores, esse limite superior é exato para  $q = \frac{k(k+1)}{2}$ , onde  $k$  é inteiro positivo e essa densidade é melhor do que o limite superior (24) para todo valor de  $q$ .

Utilizando uma estratégia de colocar um círculo sobre cada vértice e círculos ao longo da fronteira do triângulo, GASPAR e TARNAI (1999) melhoraram esse limite superior e chegaram a um limite mais estreito para a máxima densidade  $D$ :

$$D \leq \frac{qd_d^2\pi}{\sqrt{3}(1 + \sqrt{3}d_q)^2}, \quad (28)$$

que é exata para  $q = \frac{k(k+1)}{2}$ , onde  $k$  é um inteiro positivo. Os autores enfatizam que esse limite superior (26) não é monótono com  $q$ .

### **Limite superior na densidade de empacotamento num círculo.**

Seja  $D$  a densidade máxima de empacotamento de  $q$  círculos congruentes e não sobrepostos num círculo; neste caso, segundo GASPAR e TARNAI (1999) a fórmula de Groemer (17) resulta na estimativa:

$$D = \frac{q}{\left[ 1 - \frac{\sqrt{3}}{2} + \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{2\sqrt{3}}{\pi}(q-1)} \right]^2}, \quad (29)$$

que é exata para  $q = 1$  e melhor do que a estimativa (20) para  $q \geq 2$ .

Usando uma estratégia de empacotar tantos círculos quanto possível tangenciando a fronteira do círculo contendor, os autores obtiveram um limite superior para a máxima densidade superior  $D$ :

$$D \leq \frac{qd_q^2}{(2 + d_q)^2}, \quad (30)$$

que é exata para  $q = 2, 3, 7$  e é melhor do que (27) para todo  $q \geq 2$ .

## 2.10 – Polinômio Mínimo Generalizado

SZABÓ (2005) trata da questão da determinação analítica do valor do diâmetro dos círculos congruentes de uma dada configuração de empacotamento. Essa determinação é feita através do artifício de polinômio mínimo.

A determinação desse polinômio mínimo é feita a partir de um sistema de equações quadráticas, onde uma equação representa a distância  $d_q$  entre dois centros. Deve-se eliminar todas as variáveis exceto  $d_q$ . Isto pode ser feito, com recurso de computadores, conforme PEIKERT (1992), embora isso possa ser muito difícil.

Para exemplificar essa técnica, considere a determinação do polinômio  $P_{10}(d)$ . As figuras 18 e 19 ilustram uma configuração para o empacotamento de 10 círculos e a configuração de seus centros no quadrado unitário:



Sendo os centros dos círculos representados pelos pares  $(x_i, y_i)$  para todo  $i = 1, \dots, 10$ . O sistema de equações correspondentes é o seguinte:

$$\begin{array}{ll}
 (x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 = m^2 & (x_1 - x_4)^2 + (y_1 - y_4)^2 = m^2 \\
 (x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2 = m^2 & (x_2 - x_5)^2 + (y_2 - y_5)^2 = m^2 \\
 (x_5 - x_6)^2 + (y_5 - y_6)^2 = m^2 & (x_3 - x_6)^2 + (y_3 - y_6)^2 = m^2 \\
 (x_4 - x_7)^2 + (y_4 - y_7)^2 = m^2 & (x_5 - x_7)^2 + (y_5 - y_7)^2 = m^2 \\
 (x_7 - x_9)^2 + (y_7 - y_9)^2 = m^2 & (x_7 - x_{10})^2 + (y_7 - y_{10})^2 = m^2 \\
 (x_8 - x_{10})^2 + (y_8 - y_{10})^2 = m^2 & (x_6 - x_8)^2 + (y_6 - y_8)^2 = m^2
 \end{array}$$

Os pontos  $P_1, P_2, P_3, P_4, P_6, P_8, P_9$  e  $P_{10}$  estão sobre o lado do quadrado. Logo  $x_1 = x_4 = x_9 = y_2 = y_3 = 0$  e  $x_6 = x_8 = y_9 = y_{10} = 1$

É fácil ver que  $y_4 = y_1 + m$ ,  $x_3 = x_2 + m$  e  $y_8 = y_6 + m$

Note que  $P_2P_3P_5P_6$  é um losango, portanto  $x_5 = 1 - m$  e  $y_5 = y_6$ .

Considerando os triângulos isósceles  $P_4P_7P_9$  e  $P_9P_7P_{10}$  pode-se concluir que os pontos  $P_4, P_7$  e  $P_{10}$  estão sobre uma reta, o que leva às igualdades:  $y_7 = (1 + y_1 + m)/2$  e  $x_7 = x_{10} / 2$ .

Usando as observações anteriores, eliminando todas as variáveis com exceção de  $x_2, x_{10}, y_1, y_5$  e  $m$ . O sistema de equações é então reduzido para a forma:

$$\begin{array}{l}
 x_2^2 + y_1^2 = m^2 \\
 x_{10}^2 + (1 - y_1 - m)^2 = (2m)^2 \\
 (1 - x_{10})^2 + (1 - y_5 - m)^2 = m^2 \\
 (1 - x_2 - m)^2 + y_5^2 = (2m)^2 \\
 (2 - 2m - x_{10})^2 + (2y_5 - 1 - y_1 - m)^2 = (2m)^2
 \end{array}$$

Utilizando-se o pacote Groebner do MAPLE-8, obtém-se o seguinte polinômio mínimo para este caso:

$$\begin{aligned}
P(d) = & 1180129d^{18} - 11436428d^{17} + 98015844d^{16} - 462103584d^{15} \\
& + 1145811528d^{14} - 1398966480d^{13} + 227573920d^{12} + 1526909568d^{11} \\
& - 1038261808d^{10} - 2960321792d^9 + 7803109440d^8 - 9722063488d^7 \\
& + 7918461504d^6 - 4564076288d^5 + 1899131648d^4 - 563649536d^3 \\
& 114038784d^2 - 14172160d + 819200
\end{aligned}$$

Deve-se observar que para um caso de pequeno porte  $q=10$ , o polinômio já apresenta um grau elevado 18. Por sua vez, a conseguinte determinação da menor raiz positiva, que corresponde ao valor do diâmetro, apresenta dificuldades numéricas consideráveis, como sobejamente conhecido. Dessa forma, essa metodologia é de utilidade prática questionável.



## Capítulo 3 – Descrição do Problema e Metodologia de Resolução

### 3.1 – Descrição do Problema

Como consignado amplamente na literatura, o problema de empacotamento de círculos congruentes em um quadrado pode ser formulado como um problema de otimização *max-min*, correspondente a se maximizar a mínima distância entre todos os pares de  $q$  pontos (centros dos círculos) contidos no interior de um quadrado unitário:

$$\begin{aligned} & \underbrace{\text{maximizar mínimo}}_{x_i, y_i, (i,j) \in P} s_{ij} \\ & \text{sujeito a} \\ & (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 = s_{ij}, \quad \forall (i, j) \in P \quad (\text{P1}) \\ & 0 \leq x_i \leq 1, \quad i = 1, \dots, q \\ & 0 \leq y_i \leq 1, \quad i = 1, \dots, q \end{aligned}$$

No problema acima,  $P$  corresponde ao conjunto de todos os pares de pontos e pode ser definido como  $P = \{(i,j) \text{ tais que } i < j\}$ . Os valores  $s_{ij}$  correspondem ao quadrado das distâncias entre um ponto genérico  $i$  e um ponto genérico  $j$ . Os termos  $x_i, y_i$  são as coordenadas cartesianas do  $i$ -ésimo ponto. As duas restrições de desigualdade forçam os centros dos círculos a pertencerem ao interior de um quadrado unitário.

O problema de empacotamento de círculos em um quadrado pode ser colocado, numa forma equivalente, como o problema de programação não-linear abaixo:

$$\begin{aligned} & \text{maximizar } d_q \\ & \text{sujeito a} \\ & \|x_i - x_j\|_2 \geq d_q, \quad \forall (i, j) \in P; \\ & 0 \leq x_i^k \leq 1; \quad k = 1, 2; \quad i = 1, \dots, q \end{aligned} \quad (\text{P2})$$

onde o  $d_q$  corresponde ao diâmetro dos círculos congruentes,  $x_i \in \mathcal{R}^2$ ,  $i = 1, \dots, q$ , representam os centros dos círculos e  $k$  referencia as duas componentes dos centros. A primeira restrição implica a não sobreposição entre círculos, pois as distâncias entre

centros são limitadas inferiormente pelo diâmetro. As duas últimas restrições de desigualdade forçam os centros dos círculos pertencerem integralmente ao interior de um quadrado unitário.

A equivalência entre as duas formulações acima é direta. Na primeira, busca-se a mínima das distâncias euclidianas ao quadrado entre pares de centros  $s_{ij}$ . Enquanto, na segunda, busca-se simplesmente a menor distância euclidiana. A justificativa decorre de que a distância ao quadrado é uma função monótona da distância, e vice-versa. Temos, assim, a validade da seguinte relação:  $\min s_{ij} = (d_q)^2$ .

A formulação P2 é a prioritariamente considerada nesta tese. Para essa formulação, onde se tem um conjunto de inequações quadráticas côncavas, não existe abordagem geral de bom desempenho para tratá-la.

Freqüentemente na literatura, o problema de empacotamento de círculos em um quadrado é também colocado na forma alternativa:

$$\begin{aligned}
 &\text{maximizar } 2r_q \\
 &\text{sujeito a} \\
 &\quad \|x_i - x_j\|_2 \geq 2r_q, \quad i = 1, \dots, q-1; \quad j = i+1, \dots, q \quad (\text{P3}) \\
 &\quad r_q \leq x_i^k \leq 1 - r_q; \quad k = 1, 2; \quad i = 1, \dots, q
 \end{aligned}$$

onde  $r_q$  corresponde ao raio dos círculos e os valores  $x$ , como antes, correspondem aos centros dos círculos.

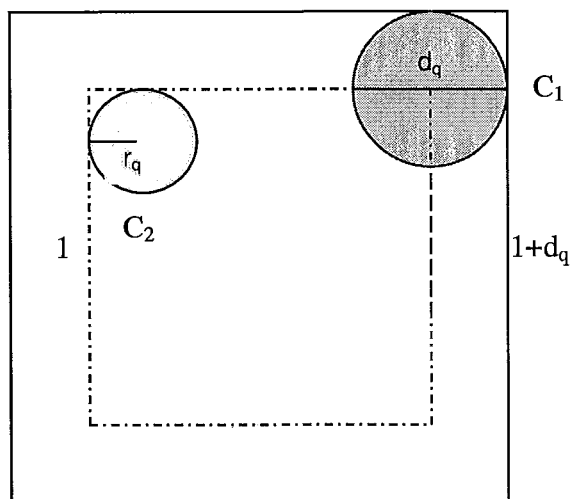
A primeira restrição implica a não sobreposição entre círculos. As duas últimas restrições de desigualdade forçam os círculos a pertencerem integralmente ao interior de um quadrado unitário.

As formulações P2 e P3 são ligeiramente distintas. Na primeira, desde que os centros dos círculos congruentes estejam dentro do quadrado unitário, permite-se que os círculos ultrapassem suas fronteiras. Na segunda, inscrevem-se os círculos

integralmente no quadrado unitário. Assim, o quadrado que contém os círculos empacotados passa a ter lado medindo  $(1 + d_q)$ , onde  $d_q$  é o diâmetro de cada um dos  $q$  círculos empacotados. É fácil ver que, sendo  $r_q$  o raio do empacotamento de  $q$  círculos no quadrado unitário, a relação entre  $d_q$  e  $r_q$  é descrita por:

$$r_q = \frac{d_q}{2(1 + d_q)} \quad (29)$$

A Figura 20 ilustra uma situação como a descrita anteriormente. Note que, o círculo  $C_1$  representa um problema de empacotamento num quadrado unitário modelado por P2. Enquanto o círculo  $C_2$ , representa o empacotamento num quadrado igualmente unitário modelado por P3. Neste último caso, todos os círculos devem estar totalmente contido no interior desse quadrado. O valor do raio  $d_q/2$  é maior do que o raio  $r_q$ . A relação 29, nada mais é, do que uma proporção entre os raios dos círculos empacotados e os lados dos quadrado continentes.



**Figura 20** - Relação entre os raios nos modelos P2 e P3

LOCATELLI e RABER (2002) 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 putativas.

A resolução de forma exata para esse problema é tão somente possível para alguns valores inteiros de  $q$  círculos empacotados. Como anteriormente já mencionado na Introdução, este problema foi resolvido para até 9 círculos nos anos 1960 por Graham, Meir e Shaer. A prova desses casos é apresentada por MELISSEN (1994), SHAER (1965) e SCHWARTZ (1970).

As provas para  $q \leq 5$  são fáceis e podem ser demonstradas analiticamente com argumentos geométricos elementares, enquanto os casos  $6 \leq q \leq 9$  requerem ferramentas matemáticas mais elaboradas.

De acordo com CROFT *et alli* (1991), Graham deduziu os resultados para  $q = 6$ . Nos casos  $q = 7$  e  $q = 8$  foram resolvidos por SCHAER e MEIR (1965) e o caso  $q = 9$  por SCHAER (1965). Para o caso para  $q = 10$  a solução foi sucessivamente melhorada por GOLDBERG (1970) e SCHAER (1971); entretanto, a melhor solução ora conhecida foi primeiramente relatada por SCHLÜTER (1979). GROOT *et alli* (1990), utilizando um algoritmo de eliminação, provaram que a solução pioneiramente dada por SCHLÜTER (1979) era, de fato, a exata.

Para valores de  $q \geq 10$  ótimos empacotamentos foram provados somente para  $q = 14, 16, 25$  e  $36$  por WENGERODT (1987), WENGERODT (1983) e (1987) e KIRCHER (1987). GROOT *et alli* (1990) e R. PEIKERT (1994), usando computador, encontraram bons empacotamentos para  $q \leq 22$  círculos. Valores exatos de  $d_q$  foram determinados para  $q$  até 20 círculos, seja com valor explícito ou como a menor raiz de um particular polinômio. As provas dessas soluções envolvem intenso uso de computador, conforme SCHAER e MEIR (1965). Para valores de  $q \leq 27$  e alguns valores esporádicos maiores que 27, bons empacotamentos foram dados por GODBERG (1970), e posteriormente melhorados por NURMELA e OSTERGARD (1999).

MOLLARD e PAYAN (1990) encontraram bons empacotamentos de 11, 13 e 14 círculos, e melhoraram alguns resultados de Goldberg, usando um programa próprio denominado *Cabri-Geométry*.

MARANAS *et al* (1995) apresentam uma abordagem da otimização max-min ortodoxa, acima já referida. Obtiveram soluções melhores para  $q = 15$ , novas configurações com o mesmo valor do máximo putativo para os casos  $q = 28$  e  $q = 29$ , e resultado idêntico às melhores configurações já relatadas para os demais valores de  $q$  até 30.

NURMELA e OSTERGARD (1997) encontraram boas soluções de empacotamento de até 50 círculos em um quadrado e melhoraram outros resultados relatados na literatura. Os autores registram soluções múltiplas, e igualmente ótimas, para empacotamentos dos casos  $q = 24$  e duas para  $q = 17$ . E registraram algumas propriedades dos empacotamentos estudados, como a sua densidade de empacotamento, números de contato entre círculos, contatos entre círculos e fronteira e a ordem do grupo de simetria observados para algumas configurações. Relataram similaridades entre as estruturas dos melhores empacotamentos encontrados. Por exemplo os empacotamentos para  $q = k^2 - 1$ , com  $k = 3, 4, 5$  e 6; analogamente para o caso  $q = k^2 - 3$ , com  $k = 5, 6$  e 7; para  $q = k^2 + k$  e  $q = (2k^2 + k)/2$  com  $k$  pares, apresentam semelhanças na estrutura de empacotamento.

Uma observação interessante indicada por NURMELA e OSTERGARD (1997), é o fato aparentemente simples de que para as configurações  $q = k^2$  implica  $d_q = 1/(k-1)$ , para  $k = 2, 3, 4, 5$  e 6. De acordo com um novo empacotamento encontrado para  $q = 49$ , esses autores refutaram, entretanto, a conjectura de WENGERODT (1987), que afirmara que os arranjos triviais simétricos da forma  $q = k^2$  seriam ótimos para  $q \leq 49$ . De outro lado, confirmaram que para a configuração  $q = k^2$ ,  $q \leq 36$  o melhor empacotamento tem a estrutura trivial simétrica.

NURMELA e ÖSTERGARD (1997) resolveram o problema de empacotar  $q$  círculos não sobrepostos no interior de um quadrado com até 50 círculos. Eles abordaram o problema com uma formulação baseada na minimização da função energia:

$$E = \sum_{1 \leq i < j \leq n} \left( \frac{\lambda}{d_{ij}^2} \right)^m \quad (30)$$

onde  $d_{ij}$  é a distância entre os pontos  $i$  e  $j$  que representam os centros dos círculos  $i$  e  $j$ . O parâmetro  $\lambda$  é um fator escalar que impede *overflow* numérico e  $m$  é um número inteiro positivo. Os autores transformaram um problema restrito num problema irrestrito usando uma simples mudança de coordenadas. Considerando o fato de que a função energia é duas vezes continuamente diferenciáveis (exceto onde dois pontos coincidentes) os autores usaram um algoritmo híbrido, que consiste numa busca linear aproximada do tipo Goldstein – Armijo articulada a um método Newton Modificado.

Os empacotamentos resultantes dessa otimização foram modelados a partir da construção e da resolução de um sistema de equações não lineares correspondente aos contatos entre os círculos e contatos entre os círculos e fronteira do quadrado. Iniciando com um ponto inicial aleatório, esses autores registram que no empacotamento de 50 círculos obteve-se a solução numérica em aproximadamente 20 minutos de CPU em um computador comum do tipo workstation.

LOCATELLI e RABER (2002) apresentam uma metodologia determinística para determinação de mínimo  $\varepsilon$ -otimal para o problema de empacotamento de círculos em quadrados. Isso significa que os autores não garantem que suas soluções obtidas representem uma prova suportada por computador da otimalidade das mesmas. Garantem, entretanto, que não é possível melhorar as melhores soluções obtidas por mais do que uma dada precisão  $\varepsilon$ . Nos seus experimentos computacionais, o valor ótimo do ‘diâmetro dos círculos ao quadrado’ não excede a tolerância  $\varepsilon=0.00001$ .

Esses autores apresentam resultados computacionais somente na faixa  $q = 10$  a 39 círculos. A Tabela 1, mostra o esforço necessário, para resolver o problema com  $q$  entre 28 e 35 e para  $q = 38$  e  $q = 39$  círculos. O caso  $q = 36$  não foi tratado por ter a sua solução ótima trivialmente conhecida, pois pertence à família  $q = k^2$ ,  $k < 7$ , onde a solução ótima é  $d_q = 1/(k-1)$ . Para o caso  $q = 37$ , não foi possível produzir a solução  $\varepsilon$ -otimal, devido ao tempo excessivamente grande de processamento, que tornou impraticável esse experimento.

**Tabela 1** - Resultados da metodologia de LOCATELLI e RABER (2002).

$q$	<i>CPU (horas)</i>
28	205,44
29	103,33
30	27,71
31	183,23
32	677,69
33	237,72
34	2548,8
35	1157,52
38	906,18
39	170,4

A coluna CPU exibe os tempos de processamento em *horas* obtidos usando um computador *SUN ULTRA 60 workstation*. Salta aos olhos que os tempos de processamento para os casos 32, 33, 34 e 35, respectivamente: 677,61 horas, 237,72 horas, 2548,8 horas e 1157,52 horas, são extremamente altos.

Embora, as máquinas atuais sejam mais velozes, os tempos para esses casos demonstram cabalmente a mais completa impossibilidade prática do uso dessa metodologia na resolução de problemas de maiores dimensões.

Dessa forma, resta unicamente o uso de estratégias que possam produzir mínimos profundos, mínimos locais com valor da função objetivo relativamente baixos. Esse é o referencial da presente proposta.

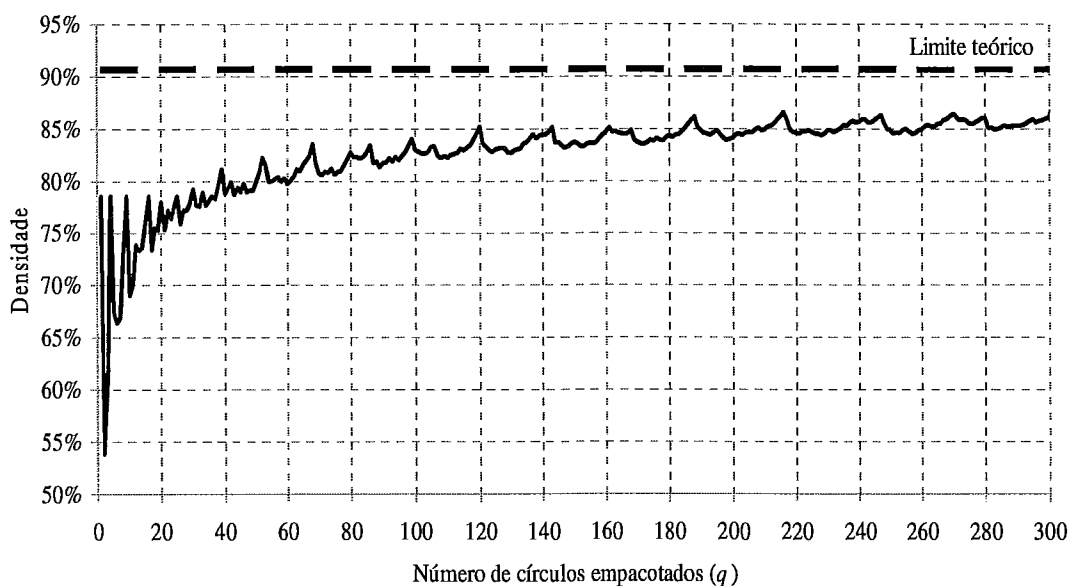
Como já peremptoriamente colocado na Introdução, dentro de um referencial de complexidade *NP-completa* dos problemas de empacotamento, a perspectiva deste trabalho, unicamente, pode se propor a apresentar uma alternativa metodológica para abordar essa classe de problemas que ofereça os requisitos de eficiência, resultados produzidos com tempos computacionais aceitáveis, e de precisão, resultados

produzidos de boa qualidade numérica, *vis-à-vis* os algoritmos consentâneos na literatura.

No âmbito da Internet existem inúmeros sítios dedicados ao tema empacotamento de círculos, em geral, e em quadrados, em particular. Veja relação apresentada no ANEXO 1.

SPECHT (2004) apresenta uma relação muito extensa dos melhores resultados putativos compilados da literatura internacional para empacotamentos de círculos no quadrado de lado unitário ( $l = 1$ ).

Com os valores ótimos putativos de  $q = 1$  até  $q = 300$ , SPECHT (2004) apresenta o gráfico da Figura 21, das densidades dos empacotamentos em função do número de círculos empacotados. Escusado é dizer que a densidade cresce com o aumento da quantidade de círculos empacotados. Pode-se observar que o crescimento é quase assintótico, tendendo para o valor-limite demonstrado  $\pi/\sqrt{12} \cong 0,9069$  – ou 90,69%.



**Figura 21** - Gráfico da densidade do empacotamento, de 1 a 300 círculos.



### 3.2 – Aproximação do Problema Via Suavização Hiperbólica

O problema P3, 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 mínimos locais. Destarte, a obtenção do mínimo global para esse problema é uma tarefa de grande dificuldade.

No presente trabalho, para a resolução do problema de empacotamento de círculos no interior de um quadrado unitário, basicamente adota-se a abordagem conhecida como suavização hiperbólica. Devido a se tratar de uma extensão e um aprimoramento do uso da abordagem dessa técnica para a resolução do mesmo problema no trabalho de tese de mestrado de FELDMAN (2005), os fundamentos e idéias são exatamente iguais.

Como já referido na Introdução, a técnica de suavização hiperbólica tem sido usada para a resolução de diversos problemas de programação matemática não-diferenciável, como: calibração automática de modelos hidrológicos, problema de controle elétrico, minimização de funções definidas por mais de uma cláusula, problemas min-max, recobrimento simples ou múltiplo de uma região plana por círculos, problemas de agrupamento e de classificação segundo o critério de máquina vetor suporte.

Na técnica de suavização hiperbólica, em todos os problemas acima citados, a solução é obtida através da resolução de uma seqüência infinita de problemas continuamente diferenciáveis, classe  $C^\infty$ , que gradativamente se aproximam do problema original.

A natureza diferenciável, classe  $C^\infty$ , dos sub-problemas gerados pela técnica de suavização hiperbólica viabiliza a utilização de métodos de minimização irrestrita reconhecidamente mais robustos e mais eficientes, que se utilizam das informações de derivadas de primeira e segunda ordem, conforme sobejamente registrado na literatura de otimização, vide por exemplo, MARTINEZ e SANTOS (1995) ou MINOUX (1986).

Em essência, como em todas aplicações acima citadas, na abordagem de suavização hiperbólica a função *não-diferenciável* distância euclidiana entre dois pontos quaisquer no  $\mathfrak{R}^n$ ,

$$z_{ij}(x) = \|x_i - x_j\|_2 = \sqrt{\sum_{k=1}^n (x_i^k - x_j^k)^2} \quad (31)$$

é aproximada pela função hiperbólica:

$$\phi_{ij}(x, \tau) = \sqrt{\sum_{k=1}^n (x_i^k - x_j^k)^2 + \tau^2} \quad (32)$$

A função  $\Phi$  tem as seguintes propriedades:

- a)  $\Phi_{ij}(x, \tau) > z_{ij}(x), \quad \forall \tau > 0;$
- b)  $\Phi_{ij}(x, \tau)$  é uma função estritamente crescente em  $\tau$ , para  $\tau > 0;$
- c)  $\lim_{\tau \rightarrow 0} \phi_{ij}(x, \tau) = z_{ij}(x);$
- d)  $\Phi_{ij}$  é uma função da classe  $C^\infty$ .

Usando a função distância suavizada  $\Phi$  no lugar da distância euclidiana original, obtém-se o seguinte problema:

$$\begin{aligned} &\text{maximizar } d \\ &\text{sujeito a} \\ &\phi_{ij}(x, \tau) \geq d, \quad i = 1, \dots, q-1; \quad j = i+1, \dots, q; \quad (\text{P4}) \\ &x_i^k \geq 0; \quad k = 1, 2; \quad i = 1, \dots, q \\ &1 - x_i^k \geq 0; \quad k = 1, 2; \quad i = 1, \dots, q \end{aligned}$$

Obviamente, esse problema é um sucedâneo  $C^\infty$  do problema original P3, não sendo exatamente equivalente ao mesmo. Resolvê-lo não significa resolver o problema original. Para contornar essa dificuldade, a técnica de suavização hiperbólica resolve uma seqüência infinita de problemas suavizados,  $l = 1, 2, \dots, +\infty$ , parametrizados por uma seqüência estritamente decrescente de parâmetros  $\tau^l$  tendendo a zero, ou seja:

$$\tau^{l+1} < \tau^l$$

$$\lim_{l \rightarrow +\infty} \tau^l = 0$$

Através desse procedimento de redução gradativa do parâmetro  $\tau$ , força-se que a seqüência de problemas suavizados se aproxime assintoticamente do problema original.

A fundamentação teórica básica que sustenta a utilização da suavização hiperbólica é dada em SANTOS (1997), quando ainda de suas aplicações precursoras.

*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  $\delta$  desse ponto de mínimo local  $\bar{x}$ , ou seja:*

$$\|\bar{x}^l - \bar{x}\| < \delta$$

*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 P4, gerado pela suavização, poder-se-ia usar 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. Em todas aplicações progressas acima referidas, foi feita o uso conjunto e articulado desses instrumentos.

Abaixo, é feita uma breve e razoável revisão do método de penalização hiperbólica, que pode ser vista em detalhes em XAVIER (1982) e XAVIER (2001). 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:

$$\begin{aligned} & \text{minimizar } f(x) \\ & \text{sujeito a} \quad \quad \quad (P5) \\ & g_i(x) \geq 0, i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

onde  $f: \mathfrak{R}^n \rightarrow \mathfrak{R}$  e  $g_i: \mathfrak{R}^n \rightarrow \mathfrak{R}, i = 1, \dots, m$ .

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

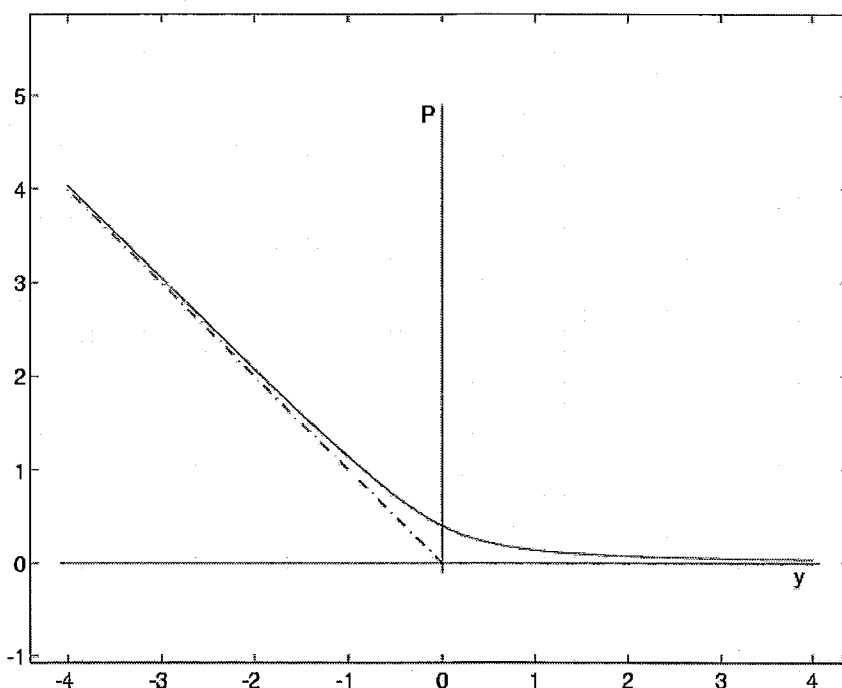
$$\text{minimizar } f(x) + \sum_{i=1}^m \bar{P}(g_i(x)). \quad (P6)$$

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

$$P(y, \alpha, \varepsilon) = -\left(\frac{1}{2} \tan \alpha\right)y + \sqrt{\left(\frac{1}{2} \tan \alpha\right)^2 y^2 + \varepsilon^2}, \quad (33)$$

onde  $\alpha \in [0, \pi/2)$  e  $\varepsilon \geq 0$ , que é uma função hiperbólica com uma assíntota horizontal e uma inclinada com ângulo  $\alpha$ , tendo um intercepto  $\varepsilon$  com o no eixo das ordenadas, pertencente à classe de funções  $C^\infty$ .

A Figura 22 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  $-y \operatorname{tg}(\alpha)$ . Assim, é uma penalidade que trabalha coerentemente tanto na região viável como na região inviável.



**Figura 22** - Penalização Hiperbólica

Numa forma mais compacta, a função de penalidade hiperbólica pode ser escrita de uma forma mais conveniente:

$$P(y, \lambda, \varepsilon) = -\lambda y + \sqrt{\lambda^2 y^2 + \varepsilon^2} \quad , \quad (34)$$

que é uma função da classe  $C^\infty$ .

Para resolver o problema P5 pela técnica de penalização hiperbólica é gerada uma seqüência de subproblemas intermediários,  $k = 1, 2, \dots$ , definida pela minimização da função objetivo modificada

$$F(x, \lambda^k, \varepsilon^k) = f(x) + \sum_{i=1}^m P(g_i(x), \lambda^k, \varepsilon^k) \quad (35)$$

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

### ***Algoritmo Simplificado de Penalização Hiperbólica***

Passo 1: Seja  $k = 0$ . Determine valores iniciais  $x^0, \lambda^1 > 0$  e  $\varepsilon^1 > 0$ .

Passo 2: Seja  $k := k + 1$ . Resolva o problema de minimização sem restrições

$$\text{minimizar}_x F(x, \lambda^k, \varepsilon^k)$$

a partir do ponto inicial  $x^{k-1}$ , obtendo um ponto ótimo intermediário  $x^k$ .

Passo 3: Teste de viabilidade:

Se  $x^k$  é um ponto *inviável*,

então vá ao Passo 4.

Caso contrário,

vá ao Passo 5.

Passo 4: Incremente o parâmetro  $\lambda$ :

$$\lambda_i^{k+1} = r\lambda_i^k, \quad r > 1$$

Vá ao Passo 2

Passo 5: Decremente o parâmetro  $\varepsilon$ :

$$\varepsilon_i^{k+1} = b\varepsilon_i^k, \quad 0 < b < 1$$

Vá ao Passo 2

A racionalidade do algoritmo da penalização hiperbólica pode ser resumidamente explicada da forma consignada na publicação original de XAVIER (1982).

*“A seqüência de subproblemas é obtida pela variação controlada dos dois parâmetros,  $\lambda$  e  $\varepsilon$ , em duas diferentes fases do algoritmo. Inicialmente, se aumenta o parâmetro  $\lambda$ , 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  $\lambda$  constante e se diminui o valor de  $\varepsilon$  seqüencialmente. Dessa maneira, a penalização interna fica cada vez mais irrelevante, mantendo o mesmo nível de proibição na região externa.”*

### **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 seqüência infinita de subproblemas:

No procedimento de Suavização essa seqüência é gerada pelo decréscimo continuado do parâmetro  $\tau$  até zero;

No método de Penalização Hiperbólica, essa geração é efetuada, na segunda fase desse algoritmo, através do decréscimo do parâmetro  $\varepsilon$  até zero.

A articulação consiste na geração de uma única seqüência 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  $\tau$  com o parâmetro  $\varepsilon$  da Penalização.

### 3.5 – Algoritmo Simplificado

#### Inicialização:

Escolha ponto inicial, parâmetros de suavização e de penalização:  $x^0$ ,  $\tau^1$  e  $\varepsilon^1$ .

Fixe o parâmetro  $\lambda$  da Penalização Hiperbólica:  $\lambda = 1$

Escolha para fator de redução  $\rho$ :  $0 < \rho < 1$ ;

Faça  $k = 1$

#### Passo principal:

Repita indefinidamente o laço:

1º. Resolva o problema completamente diferenciável (P6) com parâmetro de suavização  $\tau = \tau^k$ , usando o método de Penalização Hiperbólica com parâmetros de penalização  $\lambda = 1$  e  $\varepsilon = \varepsilon^k$ ; a partir do ponto inicial  $x^{k-1}$ , obtendo a solução  $x^k$ .

2º. Faça

$$\tau^{k+1} = \rho \cdot \tau^k$$

$$\varepsilon^{k+1} = \rho \cdot \varepsilon^k$$

$$k := k + 1$$

Fim do laço.

A Penalização Hiperbólica prescreve na sua forma original uma manipulação do parâmetro  $\lambda$ , associado à inclinação da assíntota, na primeira fase do algoritmo até a obtenção de um ponto ótimo intermediário viável.

A teoria desenvolvida em XAVIER (1982) entretanto, estabelece que existe um valor  $\bar{\lambda}$ , igual ao maior multiplicador de Lagrange, tal que para todo  $\lambda \geq \bar{\lambda}$  a solução do problema penalizado será viável. No problema contemplado o valor  $\lambda = 1$



é suficientemente alto para produzir essa viabilidade dos pontos de mínimo intermediários.

Finalmente, dentro do arcabouço do método de Penalização Hiperbólica pode-se estabelecer uma especificação de um algoritmo alternativo em que se associa um par de parâmetros  $(\lambda_i, \tau_i), i = 1, \dots, m$  para cada uma das restrições, podendo contemplar, assim, mais especificadamente cada uma delas. No presente trabalho, foi escolhida essa alternativa para tratar de uma forma mais adequada o papel das restrições de distâncias e o das restrições de caixa do problema P4.

## Capítulo 4 – Resultados Computacionais

O problema central de implementação computacional é a harmonização do conjunto de parâmetros. Esse foi o principal trabalho. Em face de ausência teórica, árdua pesquisa empírica.

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

Primeiramente, foram feitos ensaios elementares para se fazer uma validação preliminar do efeito da suavização.

Uma medida do efeito positivo provocado pela Suavização Hiperbólica no problema de empacotamento de círculos num quadrado pode ser vista, inquestionavelmente, na análise de um exemplo de pequena dimensão,  $q = 10$ . Para esse caso foram resolvidos problemas de otimização considerando as distâncias entre pontos calculadas exatamente, distância euclidiana, e pela forma suavizada preconizada. Para a primeira hipótese foram usados 5000 pontos iniciais, sendo que, somente para um deles foi obtida a solução ótima conhecida. Enquanto que, pelo esquema suavizado, em 94 de 500 tentativas foi obtida a solução ótima conhecida. Desse modo, o caso  $q = 10$  mostra cabal e peremptoriamente o desempenho diferenciado da metodologia Suavização Hiperbólica.

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 longo processo de experimentos computacionais.

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

O parâmetro  $\tau$  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. Ou seja um valor muito grande para o parâmetro  $\tau$  torna as distâncias suavizadas entre círculos menos sensíveis às posições dos centros dos círculos. Em contrapartida, um valor pequeno, tornam essas distâncias responderem mais diretamente aos centros.

A experimentação mostrou adequada a especificação de um valor inicial moderado para o parâmetro  $\tau$ , no intervalo  $0.01 \leq \tau \leq 0.1$ , de sorte a diminuir as diferenças entre menores distâncias entre centros, próximas ao diâmetro, permitindo um efeito de natureza elástico no posicionamento conjunto dos círculos.

O parâmetro  $\varepsilon$  da Penalização Hiperbólica está natural e intimamente ligado ao parâmetro  $\tau$  e, está associado à rigidez dos discos ou círculos e à da fronteira da região viável. O acréscimo do valor de  $\varepsilon$  torna esses discos e essas fronteiras mais elásticas. Os valores iniciais mais adequados para os parâmetros de penalização associados, quer às restrições de distância entre os círculos, quer às restrições de caixa, foram  $\varepsilon = 0.0001$ .

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  $100 < \tau/\varepsilon < 1000$ .

A manipulação do parâmetro de redução  $\rho$  tem dois compromissos. Um valor excessivo para o parâmetro  $\rho$  prejudica a continuidade harmoniosa dos processos aproximativos, que pode ser catastrófica, gerando ademais iterações intermediárias mais demoradas. Em contrapartida, um valor pequeno aumenta desnecessariamente o número total de iterações. Foi observado que o valor  $\rho = 10$  foi adequado na conciliação desses dois efeitos indesejados.

No último critério de geração de pontos iniciais, o parâmetro  $\delta$  associado ao tamanho do deslocamento aleatório em torno da solução ótima obtida na última iteração com o objetivo de produção do novo ponto inicial tem um papel fundamental no desempenho prático do mesmo.

O parâmetro perturbação  $\delta$  tem um efeito determinístico na obtenção de soluções de empacotamento de boa qualidade. Um valor excessivo em  $\delta$  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,  $\delta$  alto destrói completamente essas configurações parciais de boa qualidade. De outro lado,  $\delta$  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  $\lambda$  da penalização hiperbólica. Para isso, deve-se voltar ao problema de programação não-linear P5. Sendo  $\lambda_i^*$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$  os multiplicadores ótimos de Lagrange desse problema, é provado em XAVIER (1992) que se os valores dos parâmetros  $\lambda_i$  da penalização hiperbólica forem escolhidos de acordo com  $\lambda_i = \lambda_i^*$ ,  $i = 1, \dots, m$ , o problema P5 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.

Como os parâmetros  $\lambda$  da penalização hiperbólica têm essa vinculação estreita com os multiplicadores de Lagrange, deve-se analisá-los para o problema de empacotamento considerado P4.

Associando os multiplicadores de Lagrange  $\lambda_{ij} \geq 0$  a cada uma restrição do primeiro conjunto de restrições, associadas às distâncias entre círculos, usando as condições de KKT (Karush-Kuhn-Tucker) ao problema suavizado, a última componente dos vetores, associada ao diâmetro  $z$ , obtém-se a relação:

$$1 - \sum_{i=1}^{q-1} \sum_{j=i+1}^q \lambda_{ij} = 0.$$

O número de pontos de contato de cada um dos círculos com os demais é de no máximo 6. Assim, o número total de pontos de contatos entre círculos é de máximo  $3q$ . Usando esta estimativa, a relação acima fornece o seguinte valor médio para os multiplicadores das restrições ativas:

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{3q}.$$

Os valores ótimos dos multiplicadores de Lagrange  $\lambda_{ij}^*$  associados às restrições ativas de distâncias entre centros de círculos não são todos iguais, dependendo basicamente da configuração de seus pontos de contato. De outro lado, observa-se, empiricamente que esses valores não apresentam uma variabilidade muito grande. Assim, a fixação dos parâmetros de penalidade associados ao primeiro conjunto de restrições iguais ao valor médio  $\bar{\lambda}$  apresenta-se como uma escolha com respaldos teórico e prático.

Em relação aos parâmetros  $\lambda$  da penalização hiperbólica associados a cada uma restrição do segundo e do terceiro conjunto de restrições do problema P4, restrições de caixa, foi adotado o valor  $\lambda=1$ , suficientemente alto para evitar que qualquer centro de círculo se posicione fora do quadrado unitário.

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.

Nos primeiros experimentos computacionais de FELDMAN (2005), foram adotados os seguintes critérios para escolha do ponto inicial:

*Critério 1* – Pontos aleatoriamente dispostos no quadrado unitário, com distribuição uniforme nas duas direções.

*Critério 2* – Pontos aleatoriamente dispostos num quadrado de lado muito pequeno ( $l=0,001$ ), centrado no mesmo centro do quadrado unitário e com distribuição uniforme nas duas direções.

*Critério 3* – Pontos aleatoriamente dispostos num quadrado de lado muito grande ( $l=100$ ), centrado no mesmo centro do quadrado unitário e com distribuição uniforme nas duas direções.

*Critério 4* – Pontos aleatoriamente dispostos em retângulos congruentes e igualmente espaçados, com dimensões  $1/q$  de largura por  $1$  de altura, com distribuição uniforme nas duas direções dentro de cada retângulo.

*Critério 5* – Pontos tomados da seguinte maneira: os primeiros  $\lfloor \sqrt{q} \rfloor^2$  pontos dispostos aleatoriamente em quadrados menores, obtidos pelo particionamento do quadrado de lado unitário inicial, e os  $q - \lfloor \sqrt{q} \rfloor^2$  pontos restantes dispostos aleatoriamente pelo quadrado de lado unitário inicial, com distribuição uniforme nas duas direções em todos os quadrados.

Conforme registrado em FELDMAN (2005), bem como observado em inúmeros experimentos computacionais posteriores, não foi possível observar uma dominância definitiva, segundo critérios de robustez e de eficiência, para qualquer desses cinco critérios.

Uma conjectura para essa falta de superioridade entre critérios pode ser creditada a natureza intrinsecamente aleatória dos mesmos. A única diferença decorre nas formas dos receptáculos geométricos dentro dos quais são aleatoriamente gerados os pontos de uma configuração inicial.

O processo de minimização para cada ponto inicial sempre partia da estaca zero. Nenhuma estória era guardada em relação ao processo de minimização anterior, embora esse pudesse oferecer excelentes qualidades em sua configuração geral ou em subestruturas ou padrões locais, eventualmente reproduzindo parcialmente ótimos globais.

A racionalidade do novo critério de ponto inicial ora proposto se fundamenta exatamente nesses questionamentos e inquietações. Não é razoável jogar tudo fora! Pode-se tentar aproveitar qualidades subjacentes a essa solução de ótimo local. 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.

O passo 2 do algoritmo da Penalização Hiperbólica 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  $C^\infty$ , 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 CSE (2005).

Os programas utilizados foram elaborados em FORTRAN, compilador COMPAQ Visual Fortran, Versão 6.1, tendo sido executados em um computador pessoal portátil Toshiba, com processador Intel Celeron, 1.0 GHz, dotado de 512 MBytes de memória RAM e 40 GBytes de disco rígido.

A Tabela 2 mostra o primeiro conjunto de resultados computacionais. Como já sobejamente dito, o problema de empacotamento considerado tem uma natureza não-linear, não-diferenciável, não convexa. Nesse contexto, nenhuma metodologia pode garantir que o ótimo global possa ser atingido com uma única tentativa de ponto inicial.

Com o objetivo de mostrar a eficácia média da metodologia, foram escolhidos os problemas  $q = 2$  até  $q = 59$ , ou seja, problemas de pequeno e médio porte e resolvidos a partir de 1000 pontos iniciais.

**Tabela 2** – Resultados de Empacotamento para  $q = 2$  até  $q = 59$  Círculos em  $N = 1000$ . Tentativas obtidos com Suavização Hiperbólica e Penalização Hiperbólica.

q	F*	Fsh	F*/Fsh	N-Fsh
2	1,414213562373	1,414213562360	0,99999999991	1000
3	1,035276180410	1,035276180396	0,99999999986	1000
4	1,000000000000	0,99999999981	0,99999999981	1000
5	0,707106781187	0,707106781170	0,99999999976	548
6	0,600925212577	0,600925212561	0,99999999973	337
7	0,535898384862	0,535898384846	0,99999999970	233
8	0,517638090205	0,517638090185	0,99999999962	472
9	0,500000000000	0,499999999978	0,99999999956	903
10	0,421279543984	0,421279543967	0,99999999960	381
11	0,398207310237	0,398207310218	0,99999999953	379
12	0,388730126323	0,388730126302	0,99999999947	695
13	0,366096007696	0,366096007680	0,99999999955	310
14	0,348915260374	0,348915260351	0,99999999935	90
15	0,341081377402	0,341081377378	0,99999999929	515
16	0,333333333333	0,333333333308	0,99999999924	588
17	0,306153985300	0,306153985279	0,99999999930	87
18	0,300462606289	0,300462606264	0,99999999918	132
19	0,289541991995	0,289541991972	0,99999999920	321
20	0,286611652352	0,286611652326	0,99999999911	456
21	0,271812255359	0,271812255337	0,99999999918	133
22	0,267958401551	0,267958401529	0,99999999917	150
23	0,258819045103	0,258819045074	0,99999999889	99
24	0,254333095030	0,254333095002	0,99999999888	431
25	0,250000000000	0,249999999970	0,99999999880	579
26	0,238734757241	0,238734757214	0,99999999887	29
27	0,235849528301	0,235849528273	0,99999999882	133
28	0,230535493643	0,230535493620	0,99999999901	107
29	0,226882900744	0,226882900715	0,99999999873	626
30	0,224502964531	0,224502964502	0,99999999870	365
31	0,217547291619	0,217547291594	0,99999999886	61
32	0,213174562590	0,213174562562	0,99999999870	17
33	0,211328384143	0,211328384117	0,99999999878	92
34	0,205604646760	0,205604646727	0,99999999838	300
35	0,202763600863	0,202763600830	0,99999999838	234
36	0,200000000000	0,199999999966	0,99999999829	557
37	0,196429184630	0,196429184601	0,99999999854	1
38	0,195342304127	0,195342304097	0,99999999846	618



q	F*	Fsh	F*/Fsh	N-Fsh
39	0,194365063162	0,194365063128	0,99999999827	304
40	0,188175522018	0,188175521987	0,99999999836	408
41	0,186099511848	0,186099511814	0,99999999817	6
42	0,184277072117	0,184277072084	0,99999999820	291
43	0,180191135457	0,180191135431	0,99999999855	1
44	0,178639245671	0,178639245643	0,99999999845	1
45	0,175716314176	0,175716314143	0,99999999811	2
46	0,174459360872	0,174459360842	0,99999999827	17
47	0,171270563823	0,171268307470	0,999986825796	2
48	0,169405429370	0,168751462258	0,996139633102	1
49	0,167386076868	0,166962709343	0,997470712421	1
50	0,166526577344	0,166526577312	0,99999999808	2
51	0,165618374312	0,165618374285	0,99999999837	59
52	0,165386237970	0,165386237933	0,99999999773	26
53	0,162648066300	0,162648077402	1,000000068258	25
54	0,159139516307	0,159139516272	0,99999999782	73
55	0,157555747530	0,157555747494	0,99999999772	48
56	0,156156500462	0,156156500425	0,99999999763	117
57	0,154747406944	0,154747406913	0,99999999797	28
58	0,152692531391	0,152692531360	0,99999999799	4
59	0,151561918317	0,151063979248	0,996714616216	2

A coluna  $F^*$  refere-se aos valores ótimos putativos de distância máxima entre centros de círculos registrados na literatura, oriundos de SPECHT (2004). A coluna  $Fsh$  refere-se aos melhores valores correspondentes obtidos no experimento. A coluna  $N-Fsh$  mostra a frequência de ocorrência dos melhores valores observada em 1000 tentativas.

Analizando os resultados reproduzidos na Tabela 2, vê-se que, em 1000 tentativas, somente para os problemas  $q=47$ ,  $q=48$ ,  $q=49$  e  $q=59$ , mostrados em negrito, não foi obtido a melhor solução putativa. Ademais, para o problema  $q=53$ , obteve-se um novo mínimo putativo.

A Tabela 3 mostra o segundo conjunto de resultados computacionais. O objetivo é mostrar a eficácia do método em capturar os pontos de mínimos putativos, pretensamente globais. Coteja os resultados dos mínimos putativos registrados na literatura comparados às melhores soluções encontradas pela Suavização Hiperbólica

em processamentos com as mais diversas variações em seus parâmetros, em tentativas igualmente diversas.

**Tabela 3** – Resultados de Empacotamento para  $q = 2$  até  $q = 100$  círculos obtidos com Suavização Hiperbólica e Penalização Hiperbólica – Número variável de tentativas.

q	F*	Fsh	F*/Fsh	NT	N-Fsh
2	1,414213562373	1,414213562360	0,999999999906	1000	1000
3	1,035276180410	1,035276180396	0,999999999864	1000	1000
4	1,000000000000	0,999999999981	0,999999999812	1000	1000
5	0,707106781187	0,707106781170	0,999999999756	1000	548
6	0,600925212577	0,600925212561	0,999999999730	1000	337
7	0,535898384862	0,535898384846	0,999999999695	1000	233
8	0,517638090205	0,517638090185	0,999999999620	1000	472
9	0,500000000000	0,499999999978	0,999999999564	1000	903
10	0,421279543984	0,421279543967	0,999999999604	1000	381
11	0,398207310237	0,398207310218	0,999999999530	1000	379
12	0,388730126323	0,388730126302	0,999999999466	1000	695
13	0,366096007696	0,366096007680	0,999999999549	1000	310
14	0,348915260374	0,348915260351	0,999999999348	1000	90
15	0,341081377402	0,341081377378	0,999999999292	1000	515
16	0,333333333333	0,333333333308	0,999999999238	1000	588
17	0,306153985300	0,306153985279	0,999999999302	1000	87
18	0,300462606289	0,300462606264	0,999999999177	1000	132
19	0,289541991995	0,289541991972	0,999999999201	1000	321
20	0,286611652352	0,286611652326	0,999999999106	1000	456
21	0,271812255359	0,271812255337	0,999999999177	1000	133
22	0,267958401551	0,267958401529	0,999999999169	1000	150
23	0,258819045103	0,258819045074	0,999999998890	1000	99
24	0,254333095030	0,254333095002	0,999999998883	1000	431
25	0,250000000000	0,249999999970	0,999999998802	1000	579
26	0,238734757241	0,238734757214	0,999999998874	1000	29
27	0,235849528301	0,235849528273	0,999999998821	1000	133
28	0,230535493643	0,230535493620	0,999999999011	1000	107
29	0,226882900744	0,226882900715	0,999999998733	1000	626
30	0,224502964531	0,224502964502	0,999999998700	1000	365
31	0,217547291619	0,217547291594	0,999999998856	1000	61
32	0,213174562590	0,213174562562	0,999999998703	1000	17
33	0,211328384143	0,211328384117	0,999999998776	1000	92
34	0,205604646760	0,205604646727	0,999999998383	1000	300
35	0,202763600863	0,202763600830	0,999999998384	1000	234
36	0,200000000000	0,199999999966	0,999999998288	1000	557
37	0,196429184630	0,196429184601	0,999999998540	1000	1
38	0,195342304127	0,195342304097	0,999999998457	1000	618
39	0,194365063162	0,194365063128	0,999999998273	1000	304
40	0,188175522018	0,188175521987	0,999999998364	1000	408

q	F*	Fsh	F*/Fsh	NT	N-Fsh
41	0,186099511848	0,186099511814	0,9999999998167	1000	6
42	0,184277072117	0,184277072084	0,9999999998200	1000	291
43	0,180191135457	0,180191135431	0,9999999998548	1000	1
44	0,178639245671	0,178639245643	0,9999999998451	1000	1
45	0,175716314176	0,175716314143	0,9999999998114	1000	2
46	0,174459360872	0,174459360842	0,9999999998266	1000	17
47	0,171270563823	0,171270563806	0,9999999999036	6000	4
48	0,169405429370	0,169405429359	0,9999999999339	1500	1
49	0,167386076868	0,167386076856	0,9999999999293	1500	1
50	0,166526577344	0,166526577312	0,9999999998081	1000	2
51	0,165618374312	0,165618374312	0,9999999999984	1100	18
52	0,165386237970	0,165386237933	0,9999999997733	1000	26
53	0,162648066300	0,162648077402	1,0000000682579	1000	25
54	0,159139516307	0,159139516272	0,9999999997819	1000	73
55	0,157555747530	0,157555747494	0,9999999997716	1000	48
56	0,156156500462	0,156156500461	0,9999999999935	1100	12
57	0,154747406944	0,154747406913	0,9999999997966	1000	28
58	0,152692531391	0,152692531360	0,9999999997986	1000	4
59	0,151561918317	0,151561919854	1,0000000101413	1500	2
60	0,149505654049	0,149505654038	0,9999999999242	400	2
61	0,148544126695	0,148544126684	0,9999999999278	300	1
62	0,147452679810	0,147452679809	0,9999999999907	2000	1
63	0,146819313688	0,146819313687	0,9999999999916	100	52
64	0,145367754452	0,145367754451	0,9999999999897	100	22
65	0,144699014781	0,144699014780	0,9999999999902	100	2
66	0,143803966048	0,143804230807	1,0000018411122	100	24
67	0,143085575883	0,143085575873	0,9999999999296	200	15
68	0,142909477564	0,142909500559	1,0000001609057	200	1
69	0,139948181881	0,139948181870	0,9999999999184	200	11
70	0,137906776651	0,137906776650	0,9999999999935	100	6
71	0,136612997248	0,136612997236	0,9999999999135	700	4
72	0,135849927909	0,135849927903	0,9999999999572	5000	1
73	0,134709827696	0,134728725864	1,0001402879711	200	1
74	0,133998672690	0,133998672679	0,9999999999168	200	1
75	0,132488813742	0,132346784041	0,9989279872269	4000	5
76	0,131730037632	0,131500766948	0,9982595413430	4000	4
77	0,130841078054	0,130844544209	1,0000264913370	500	1
78	0,130460772641	0,130460772883	1,0000000018586	300	2
79	0,129965202741	0,129965202728	0,9999999998968	300	3
80	0,129613385494	0,129613385479	0,9999999998867	3000	6
81	0,128336855974	0,128336855972	0,9999999999882	100	37
82	0,127426911812	0,127426911811	0,9999999999884	100	46
83	0,126454353161	0,126454353146	0,9999999998788	300	1
84	0,125762702259	0,125733834814	0,9997704610009	2500	7
85	0,125311049576	0,125315448062	1,0000351005420	1000	1

q	F*	Fsh	F*/Fsh	NT	N-Fsh
86	0,125042534041	0,125044156483	1,0000129751239	200	1
87	0,122826583176	0,122826583164	0,9999999999008	200	7
88	0,122098354585	0,122099298184	1,0000077281871	500	2
89	0,120943129628	0,120943129623	0,9999999999547	2200	2
90	0,120448049480	0,120446606335	0,9999880185301	2000	1
91	0,119812602204	0,119812602203	0,9999999999897	2200	8
92	0,119362266621	0,119362266563	0,9999999995131	400	1
93	0,118384170617	0,118384170611	0,9999999999519	2200	4
94	0,118056384766	0,118056384750	0,9999999998674	1200	4
95	0,117119431272	0,117119642112	1,0000018002173	200	1
96	0,116757999100	0,116757999093	0,9999999999370	4500	1
97	0,116357483969	0,116357483963	0,9999999999442	3200	2
98	0,116153513646	0,116153575414	1,0000005317761	100	1
99	0,116018134843	0,116018134828	0,9999999998665	200	8
100	0,114580194561	0,114580194549	0,9999999998988	3600	1

As colunas primeira, segunda, terceira, quarta e sexta significam, respectivamente: número de círculos, valor ótimo putativo do diâmetro, melhor solução obtida com a presente proposta, relação entre esse valor encontrado e o putativo e a correspondente frequência dessas ocorrências, assim, com significados análogos às colunas da Tabela 2. A quinta coluna registra o número total de vezes em que foi processado o problema, com as mais diferentes especificações dos parâmetros.

Duas constatações merecem destaque. Registra-se que somente em quatro problemas,  $q=75$ ,  $q=76$ ,  $q=84$  e  $q=90$ , a metodologia da suavização hiperbólica não conseguiu alcançar aqueles valores reputados ótimos. Mesmo assim, para esses quatro casos, o erro relativo máximo é da ordem um milésimo. Para os casos em que a diferença se manifesta na décima casa decimal, ou mais, tem-se a justificativa do término precoce do processo iterativo da suavização, limitado em dez iterações.

Registra-se, sobremaneira, o expressivo número de novos mínimos globais putativos encontrados, para os problemas  $q=53$ ,  $q=59$ ,  $q=66$ ,  $q=68$ ,  $q=73$ ,  $q=77$ ,  $q=78$ ,  $q=85$ ,  $q=86$ ,  $q=88$ ,  $q=95$  e  $q=98$ .

A Tabela 4 mostra o terceiro conjunto de resultados computacionais. A tabela 3 exhibe, em princípio, qualidades incontestes da metodologia proposta. Todavia, os

resultados foram produzidos no bojo do processo empírico de definição dos parâmetros iniciais, bem como de sua manipulação no decorrer das iterações. Esse processo, pode-se dizer, teve, até mesmo, uma natureza caótica. A Tabela 4 tem por objetivo fornecer uma idéia mais justa do desempenho do algoritmo a partir de um único conjunto de parâmetros. Esses foram fixados em valores que produziram resultados de qualidade nos experimentos anteriores.

**Tabela 4** - Desempenho do algoritmo com um único conjunto de parâmetros – Número de tentativas = 200.

q	F*	Fsh	F*/Fsh	N-Fsh	Diâmetro médio	CPU
2	1,414213562373	1,414213562373	1,000000000000	200	1,4142135623728	0,002
3	1,035276180410	1,035276180410	1,000000000000	200	1,0352761804097	0,005
4	1,000000000000	1,000000000000	1,000000000000	200	0,9999999999994	0,006
5	0,707106781187	0,707106781186	0,999999999999	144	0,6903080809054	0,009
6	0,600925212577	0,600925212577	1,000000000000	145	0,5972879662424	0,015
7	0,535898384862	0,535898384862	0,999999999999	106	0,5306886028020	0,016
8	0,517638090205	0,517638090204	0,999999999999	37	0,5098408589199	0,023
9	0,500000000000	0,499999999999	0,999999999998	200	0,4999999999991	0,021
10	0,421279543984	0,421279543983	0,999999999998	24	0,4175972341824	0,045
11	0,398207310237	0,398207310236	0,999999999998	22	0,3953847911376	0,057
12	0,388730126323	0,388730126322	0,999999999998	134	0,3837192435024	0,048
13	0,366096007696	0,366096007696	0,999999999999	72	0,3606565326692	0,073
14	0,348915260374	0,348915260373	0,999999999997	26	0,3453112419318	0,096
15	0,341081377402	0,341081377401	0,999999999997	45	0,3376205108983	0,084
16	0,333333333333	0,333333333332	0,999999999997	150	0,3279313233463	0,097
17	0,306153985300	0,306153985299	0,999999999997	14	0,3023694201946	0,142
18	0,300462606289	0,300462606287	0,999999999994	43	0,2941145080457	0,142
19	0,289541991995	0,289541991994	0,999999999995	109	0,2878707222540	0,173
20	0,286611652352	0,286611652350	0,999999999993	114	0,2825567811191	0,162
21	0,271812255359	0,271812255358	0,999999999996	3	0,2692454562223	0,221
22	0,267958401551	0,267958401549	0,999999999994	36	0,2636283290756	0,245
23	0,258819045103	0,258819045101	0,999999999991	14	0,2562944327237	0,256
24	0,254333095030	0,254333095028	0,999999999993	26	0,2513544837462	0,316
25	0,250000000000	0,249999999998	0,999999999992	27	0,2425143566444	0,301
26	0,238734757241	0,238734757239	0,999999999993	39	0,2370225521169	0,367
27	0,235849528301	0,235849528299	0,999999999993	34	0,2323836031269	0,422
28	0,230535493643	0,230535493641	0,999999999992	12	0,2289011140869	0,434
29	0,226882900744	0,226882900742	0,999999999991	59	0,2250823450940	0,520
30	0,224502964531	0,224502964529	0,999999999990	71	0,2216829208614	0,522
31	0,217547291619	0,217547291617	0,999999999992	8	0,2153849895737	0,643
32	0,213174562590	0,213174562588	0,999999999989	2	0,2117812356737	0,668
33	0,211328384143	0,211328384141	0,999999999992	22	0,2077331315975	0,725
34	0,205604646760	0,205604646757	0,999999999984	12	0,2040067896107	0,866
35	0,202763600863	0,202763600860	0,999999999987	10	0,2008632608040	0,821
36	0,200000000000	0,198683601084	0,993418005419	5	0,1971833576426	0,886
37	0,196429184630	0,196238101449	0,999027215934	46	0,1948965239789	1,008
38	0,195342304127	0,195342304124	0,999999999986	51	0,1924768412970	0,972

q	F*	Fsh	F*/Fsh	N-Fsh	Diâmetro médio	CPU
39	0,194365063162	0,194365063159	0,999999999982	51	0,1906893661321	0,993
40	0,188175522018	0,188175522016	0,999999999987	26	0,1873235422550	1,205
41	0,186099511848	0,186099511845	0,999999999983	6	0,1849883065455	1,154
42	0,184277072117	0,184277072114	0,999999999984	60	0,1824469024550	1,317
43	0,180191135457	0,180188749962	0,999986761309	1	0,1791294386922	1,457
44	0,178639245671	0,178639224107	0,999999879290	2	0,1767576318954	1,491
45	0,175716314176	0,175716314172	0,999999999980	2	0,1746708846412	1,673
46	0,174459360872	0,174459360870	0,999999999986	11	0,1722220555276	1,637
47	0,171270563823	0,171268307495	0,999986825946	3	0,1698635022049	1,661
48	0,169405429370	0,169405429366	0,999999999979	1	0,1679141235760	1,759
49	0,167386076868	0,167386076864	0,999999999978	2	0,1665691697859	2,031
50	0,166526577344	0,166526577341	0,999999999979	2	0,1653421638516	2,401
51	0,165618374312	0,165618374310	0,999999999988	33	0,1642442529941	2,496
52	0,165386237970	0,165386237966	0,999999999974	52	0,1632175409592	2,322
53	0,162648066300	0,162648066298	0,999999999991	16	0,1613840317551	2,268
54	0,159139516307	0,159112602699	0,999830880418	3	0,1585335602954	2,661
55	0,157555747530	0,157555747526	0,999999999974	15	0,1570508381960	2,467
56	0,156156500462	0,156156500458	0,999999999975	66	0,1554619660092	2,246
57	0,154747406944	0,154747406941	0,999999999978	3	0,1533923518122	2,988
58	0,152692531391	0,152687138332	0,999964680267	3	0,1517987826226	2,962
59	0,151561918317	0,151561918314	0,999999999980	1	0,1502113273637	3,177
60	0,149505654049	0,149436060525	0,999534509084	2	0,1487806265647	3,391
61	0,148544126695	0,148509251797	0,999765221969	1	0,1476638136658	3,576
62	0,147452679810	0,147403866318	0,999668954864	3	0,1461666408127	3,644
63	0,146819313688	0,146819313683	0,999999999967	61	0,1456591567496	3,916
64	0,145367754452	0,145367754447	0,999999999967	4	0,1443780285781	4,686
65	0,144699014781	0,144699014776	0,999999999967	3	0,1438616588837	4,402
66	0,143803966048	0,143804230807	1,000001841107	7	0,1430783926599	4,350
67	0,143085575883	0,143085575879	0,999999999975	24	0,1426069343804	5,536
68	0,142909477564	0,142906771205	0,999981062421	1	0,1412062187615	4,067
69	0,139948181881	0,139948181877	0,999999999968	26	0,1392450437184	4,099
70	0,137906776651	0,137903893992	0,999979097045	1	0,1373996354097	4,689
71	0,136612997248	0,136612997243	0,999999999967	1	0,1361907261686	4,879
72	0,135849927909	0,135849927903	0,999999999957	1	0,1352213115800	4,939
73	0,134709827696	0,134728725872	1,000140288027	1	0,1339624795221	6,403
74	0,133998672690	0,133998672686	0,999999999971	3	0,1327876555415	6,640
75	0,132488813742	0,132439707698	0,999629357054	1	0,1317693687396	6,299
76	0,131730037632	0,131708405063	0,999835781049	1	0,1309640240788	6,207
77	0,130841078054	0,130841474867	1,000003032787	1	0,1303138337516	6,428
78	0,130460772641	0,130460772891	1,000000001915	13	0,1299199539311	6,478
79	0,129965202741	0,129965202735	0,999999999957	14	0,1292253400207	6,446
80	0,129613385494	0,128887976758	0,994403288419	1	0,1277549910298	6,877
81	0,128336855974	0,127684142419	0,994914059955	3	0,1273517333448	9,187
82	0,127426911812	0,127426911807	0,999999999960	28	0,1268873374817	9,207
83	0,126454353161	0,126454353154	0,999999999945	1	0,1259523480564	9,438
84	0,125762702259	0,125754958592	0,999938426362	1	0,1254070051108	9,516
85	0,125311049576	0,125306077531	0,999960322373	1	0,1247956411159	8,812
86	0,125042534041	0,125042030711	0,999995974733	1	0,1240025036658	8,911
87	0,122826583176	0,122826583171	0,999999999959	5	0,1222554804223	8,804

q	F*	Fsh	F*/Fsh	N-Fsh	Diâmetro médio	CPU
88	0,122098354585	0,122087565842	0,999911638916	1	0,1211340842870	9,540
89	0,120943129628	0,120910523939	0,999730404783	1	0,1203102368367	9,326
90	0,120448049480	0,120147623782	0,997505765353	1	0,1195796519692	9,733
91	0,119812602204	0,119744671507	0,999433025441	2	0,1189342447856	10,072
92	0,119362266621	0,119362266618	0,999999999979	1	0,1181359672126	11,215
93	0,118384170617	0,118384170611	0,999999999952	1	0,1177289383717	12,897
94	0,118056384766	0,118056384758	0,999999999935	4	0,1171891512258	11,092
95	0,117119431272	0,117038088200	0,999305469034	1	0,1166606130422	11,661
96	0,116757999100	0,116750412211	0,999935020389	1	0,1163159581061	11,830
97	0,116357483969	0,116351515240	0,999948703523	9	0,1155933518585	11,688
98	0,116153513646	0,116153490691	0,999999802374	20	0,1152140280713	12,853
99	0,116018134843	0,116018134836	0,999999999935	29	0,1147172896349	13,665
100	0,114580194561	0,114581227416	1,000009014256	1	0,1138281085139	13,513

Essa tabela mostra um desempenho médio do algoritmo mais realístico, pois produzidos com uma única especificação para o conjunto dos parâmetros. A última coluna registra o tempo médio de processamento de cada tentativa, em segundos. Os valores registrados mostram uma incontestável qualidade da metodologia proposta, pois nos noventa e nove problemas, em 200 tentativas, foram obtidas soluções iguais ou superiores aos ótimos putativos para 73 casos. Para cinco problemas, q=66, q=73, q=77, q=78, e q=100 foram produzidos novos ótimos putativos, iguais àqueles apresentados na Tabela 3. Adicionalmente, nesse experimento obteve-se um novo ótimo putativo para o problema q=100. Nos casos em que a solução foi inferior, as diferenças observadas foram de pequena magnitude.

Após o cálculo de uma solução para o caso do problema de empacotamento, surge outro problema: determinar os pontos de contato de círculos entre si e entre círculos e a fronteira do quadrado. Dada à natureza intrínseca da computação em ponto flutuante, essa questão só pode ser respondida através de um critério de tolerância. Assim, foi considerado um ponto de contato entre dois círculos se

$$\|x_i - x_j\| \leq d + \varepsilon,$$

onde  $\varepsilon$  é uma pequena tolerância.

Numa forma análoga, foi considerado ponto de contato entre círculo e a borda do quadrado se

$$x_i^k \leq \varepsilon, \quad k = 1, 2,$$

ou se

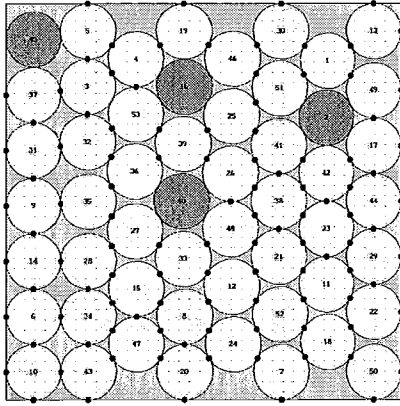
$$1 - x_i^k \leq \varepsilon, \quad k = 1, 2.$$

Com o sentido de efetuar uma especificação adequada da tolerância  $\varepsilon$  foram feitos experimentos variando esse valor e através de um processo de comparação do número de contatos determinados pelos critérios com aqueles registrados na literatura para configurações análogas, foi possível especificar um valor de tolerância  $\varepsilon$  harmônico à precisão inerente à implementação computacional. O valor determinado mais adequado nesse processo foi  $\varepsilon = 10^{-8}$ .

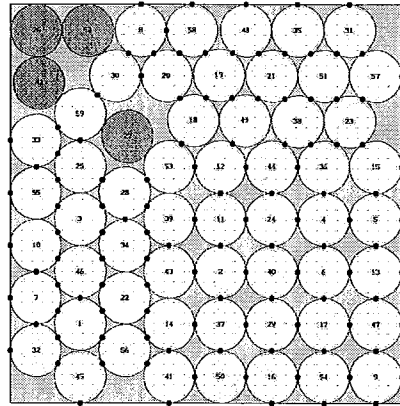
Após a determinação numérica dos pontos de contatos, poder-se-ia, em tese, fazer uma validação do acerto do critério usando uma abordagem apresentada por SZABÓ (2005), conforme descrito no capítulo 2, assim, seria determinado um sistema de equações envolvendo os centros e os diâmetros, e a conseguinte obtenção do polinômio mínimo. Isso de tudo impraticável, como o exemplo do caso  $q=10$ , sobejamente explícito.

Finalizando a apresentação dos resultados computacionais, as Figuras 21 até 23, exibem as configurações espaciais dos empacotamentos de círculos associadas aos novos mínimos putativos registrados na Tabela 3 e 4. Adiciona-se que em experimentos esporádicos foram também obtidos novos valores para ótimos putativos para os problemas  $q=101$ ,  $q=104$ ,  $q=105$ ,  $q=106$  e  $q=107$ , resultados obtidos em 200 tentativas. As configurações espaciais desses cinco empacotamentos adicionais são igualmente exibidas. Em todas as figuras, tem-se a seguinte convenção:  $q$  é o número de círculos,  $c$  o número de contatos,  $s$  o número de círculos livres,  $F^*$  antigo valor ótimo putativo do diâmetro e  $F_{sh}$  novo valor ótimo putativo obtido com a presente proposta.

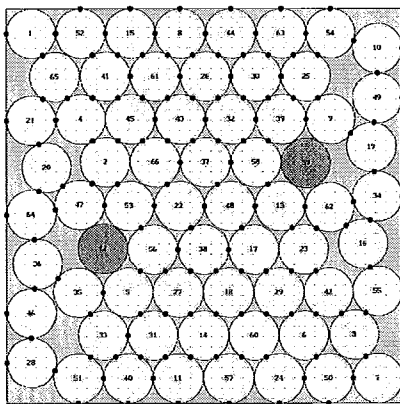




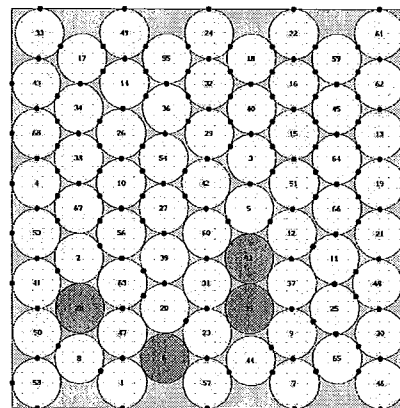
$q=53$     $c=108$     $s=4$   
 $F^*=0,162648066030$   
 $F_{sh}=0,162648077402$



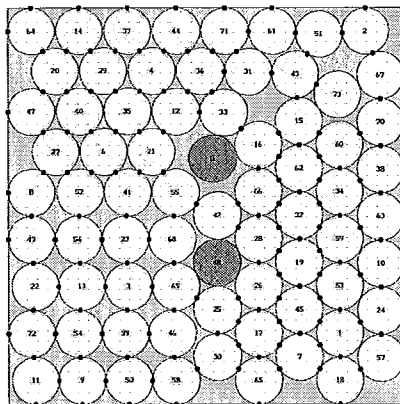
$q=59$     $c=117$     $s=4$   
 $F^*=0,151561918317$   
 $F_{sh}=0,151561919854$



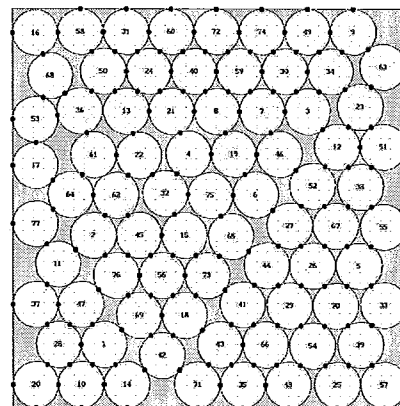
$q=66$     $c=140$     $s=2$   
 $F^*=0,143803966048$   
 $F_{sh}=0,143804230807$



$q=68$     $c=147$     $s=4$   
 $F^*=0,142909477564$   
 $F_{sh}=0,142909500559$

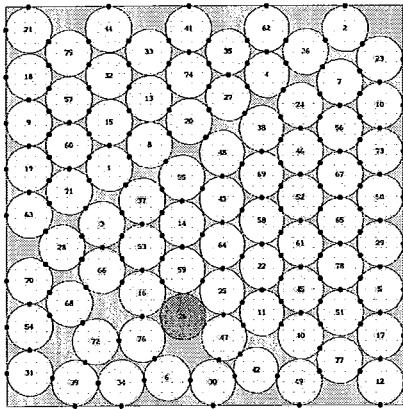


$q=73$     $c=152$     $s=2$   
 $F^*=0,134709827696$   
 $F_{sh}=0,134728725864$

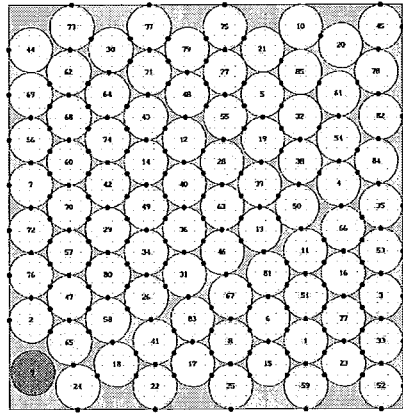


$q=77$     $c=174$     $s=0$   
 $F^*=0,130841078054$   
 $F_{sh}=0,130844544209$

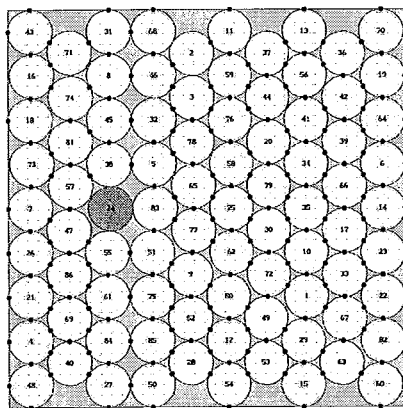
**Figura 23** As novas soluções ótimas putativas para 53, 59, 66, 68, 73 e 77 círculos.



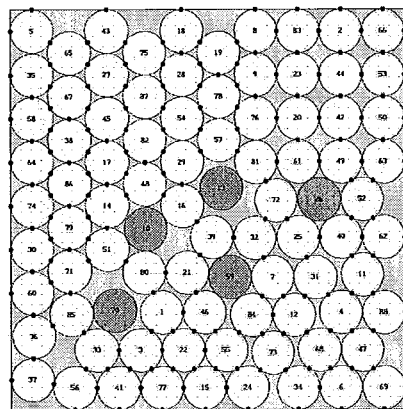
q=78 c=183 s=1  
 $F^*=0,130460772641$   
 $F_{sh}=0,130460772883$



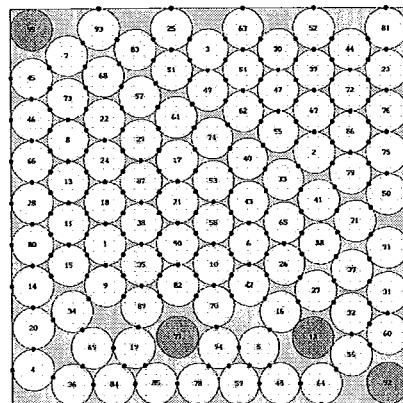
q=85 c=208 s=1  
 $F^*=0,125311049576$   
 $F_{sh}=0,125315448061$



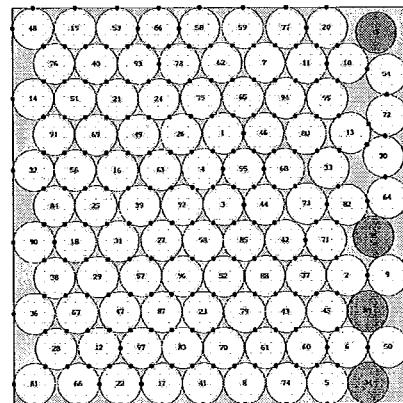
q=86 c=210 s=1  
 $F^*=0,125042534041$   
 $F_{sh}=0,125044156483$



q=88 c=187 s=5  
 $F^*=0,122098354585$   
 $F_{sh}=0,122099298183$

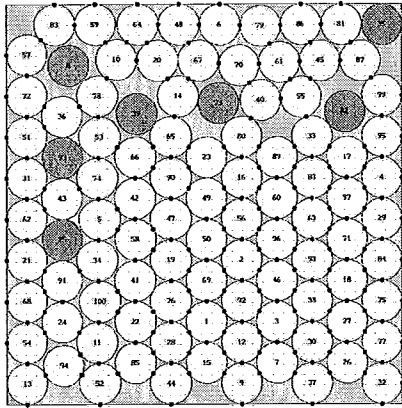


q=95 c=222 s=4  
 $F^*=0,117119431272$   
 $F_{sh}=0,117119642112$

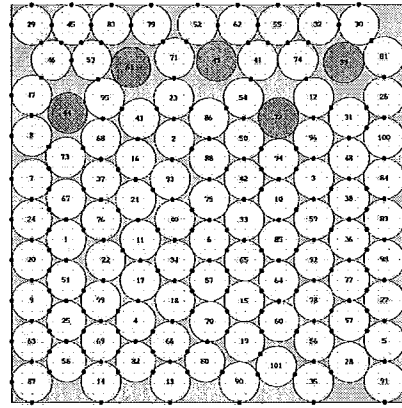


q=98 c=198 s=4  
 $F^*=0,116153513646$   
 $F_{sh}=0,116153575413$

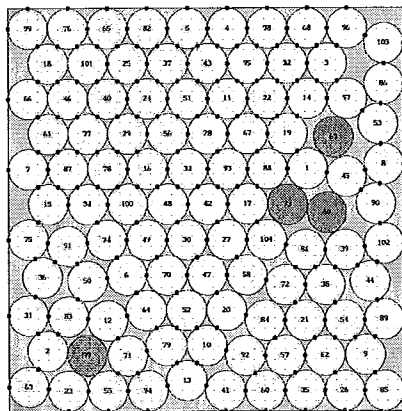
**Figura 24** As novas soluções ótimas putativas para 78, 85, 86, 88, 95 e 98 círculos.



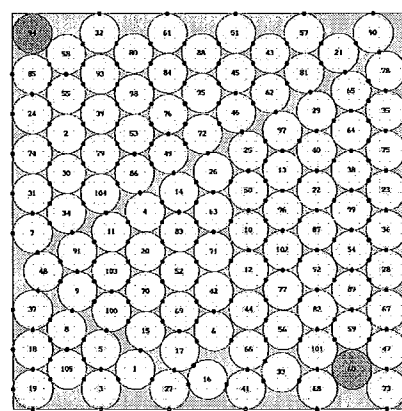
$q=100$   $c=217$   $s=7$   
 $F^*=0,114580194561$   
 $F_{sh}=0,114581227416$



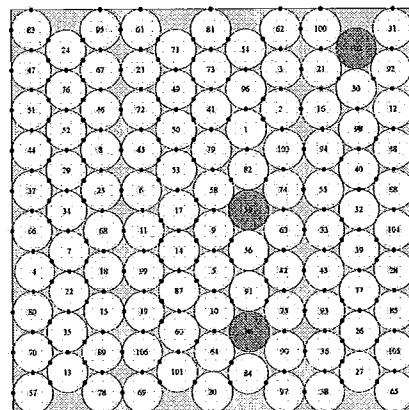
$q=101$   $c=206$   $s=5$   
 $F^*=0,113767809618$   
 $F_{sh}=0,113777310038$



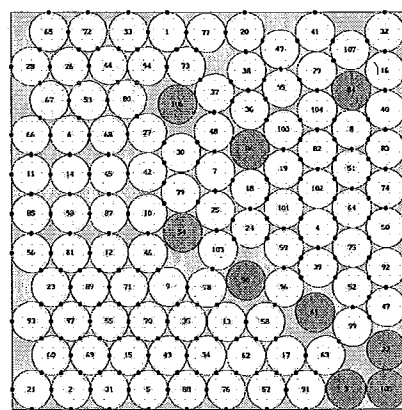
$q=104$   $c=221$   $s=4$   
 $F^*=0,111955228322$   
 $F_{sh}=0,111967724895$



$q=105$   $c=229$   $s=2$   
 $F^*=0,111711303537$   
 $F_{sh}=0,111711307649$



$q=106$   $c=233$   $s=3$   
 $F^*=0,111147997944$   
 $F_{sh}=0,111148207229$



$q=107$   $c=218$   $s=9$   
 $F^*=0,109892682265$   
 $F_{sh}=0,109892688733$

**Figura 25** As novas soluções ótimas putativas para 100, 101, 104, 105, 106 e 107 círculos.

## 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 num quadrado, a perspectiva deste trabalho, unicamente, poderia 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, 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.

Não somente os requisitos de robustez e eficiência foram alcançados, praticamente independente da forma de escolha dos pontos de partida, com uma benesse adicional: em alguns problemas, novos mínimos putativos foram produzidos.

O problema específico contemplado foi o do empacotamento de círculos em quadrado, mas é válido acreditar que a presente abordagem possa também ser empregada de uma forma exitosa para outros formatos de continentes planares.

Para superar as dificuldades de resolução do problema de empacotamento geradas pelas variações abruptas do gradiente com os deslocamentos dos centros dos círculos, GRAHAM et alli (1998) aproximam o problema original minimizando uma função energia potencial no contexto da existência de forças de repulsão entre os pontos. Nesse enfoque, todos os pontos dão permanentemente uma contribuição ao gradiente em todo espaço. Na presente abordagem são obtidos os mesmos efeitos concebidos por GRAHAM et alli (1998) sem profundas violações, além da controlada suavização, à modelagem original do problema e com resultados substancialmente superiores.

Em suma, por todos os resultados obtidos, pode-se afirmar que a abordagem metodológica foi plenamente exitosa, pois permitiu a obtenção do ótimo global putativo, dentro do nível de precisão dado pela máquina e pelos valores finais dos parâmetros  $\tau$  e  $\varepsilon$ , em tempos de computação pequenos.

### **5.1 - Considerações Finais e Propostas para Futuros Trabalhos Sobre o Tema**

Como uma extensão natural do presente trabalho, pode-se cogitar o emprego da abordagem contemplada na modelagem e na resolução de problemas de empacotamento em outras superfícies, como em esferas e no plano hiperbólico; empacotamentos de esfera em regiões compactas e convexas do  $\mathbb{R}^n$ , como o empacotamento de esferas congruentes no cubo unitário.

## Capítulo 6 – Bibliografia

BAMBAH, R. P., 1954, “*On lattice covering by spheres*”, *Proc. Nat. Inst. Sci. India*, n. 20, pp. 25-52.

BERGERSEN, D. B., PALFFY-MUHORAY, P., 1994, “*Equilibrium Configurations of Particles on a Sphere: The case of Logarithmic Interactions*”, *J. Phys. A: Math. Gen.* 27, 2579-2586.

BECK, J., 1994, “*Sums of distances between points on a Sphere – An Application of the Theory of Irregularities of distribution to Discrete Geometry*”, *Mathematika*, n. 31, pp. 33-41.

BIRGIN, E.G., MARTINEZ, J.M., RONCONI, D.P., 2002, “*Optimizing the Packing of Cylinders into a Rectangular Container: A Nonlinear Approach*”, *VI Oficina de Problemas de Corte e Empacotamento*, Campinas, SP, 9-10 Dez.

BRITO, J.A.M., 2004, “*Suavização Hiperbólica aplicada no Problema de Localização de Estações de Rádio Base*”, Tese D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

CHAVES, A.M.V., 1987, “*Resolução de Problemas Minimax Via Suavizações*”, Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

CHAVES, A.M.V., XAVIER, A.E., 1998, “*Problemas Minimax: Uma Alternativa de Resolução Via Suavização*”, Relatório Técnico, COPPE/UFRJ.

CHUNG, F. R. K., Kostant, B., Stemberg, S., 1994, “*Groups and the Buckyball, in Lie Theory and Geometry*”, *Progress in Mathematics*, Boston: Birkhäuser, n. 123, pp. 97-126.

CONWAY, J.H., SLOANE, N.J.A., 1993, “*Sphere packings, lattices and groups*”, 2 ed. New York, Springer-Verlag.

CROFT, H.T., FALCONER, K.J., GUY, R.K., 1991, “*Unsolved Problems in Geometry*”, In: *Problem Books in Mathematics*, v. II, Berlin New York, Springer-Verlag.

T. Croft, K.J. Falconer, R.K. Guy, 1991, “*Unsolved Problem in Geometry*”, Springer Verlag, New York.

CSE, 2005, <http://hsl.rl.ac.uk/archive/hslarchive.html>.

DE GROOT, C., PEIKERT, R., WÜRTZ, D., 1990, “*The optimal packing of ten equal circles in a square*”, IPS Research Report No. 90-12, ETH-Zentrum CH-8092, Zurich.

DE GROOT, Monagan, M., PEIKERT, R., WÜRTZ, D., 1992, “*Packing circles in a review and new results*”, in P. Kall (ed.), *Sistem Modelling and optimization* (Proc. 15 th IFIP Conf. Zurich, 1991), pp. 45-54, Lecture notes in control e information Sciences, Vol. 180, Springer-Verlag, Berlin.

DIB, K.R., 1994, “*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.

DOWSLAND, K.A., 1991, “*Palletisation of cylinders in cases*”, *OR Spektrum*, n. 13, pp. 171–172.

ERBER, T., HOCKNEY, G. M., 1991, “*Equilibrium configurations of  $N$  equal Charges on a Sphere*”, *J. Phys. A: Math. Gen.* n. 24, L1369-L1377.

ERBER, T., HOCKNEY, G. M., 1995, “*Comment on Method of Constrained Global Optimization*”, *Phys. Rev. Lett.* 74, 1482.

FRASER, H.J., GEORGE, J.A., 1994, “*Integrated container loading software for pulp and paper industry*”, *European Journal of Operational Research*, v. 3, n. 77, pp. 466–474.

FELDMAN, A., 2005, “*Resolução de Problemas de Empacotamentos usando Suavização Hiperbólica*”, Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

GLASSER, L., EVERY, A. G., 1992, “*Energies and Spacings of Point Charges on a Sphere*”, *J. Phys. Math. Gen.* 25, pp. 2473-2482.

GOODMAN, J. E., and ROUKE, J. O., 1997, *Handbook of Discrete and Computational Geometry*, CRC Press LLC, New York.

GOODMAN, J. E., and AGAWAL, K., 1997, *Combinatorial Geometry*, CRC Press LLC, New York.

GALIYEV, 1995, “*Computational algorithms for the optimum covering of plane domains by a prescribed number of ellipses*”, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, v. 5, n. 35, pp. 609-617.

GEORGE, J., GEORGE, J., LAMAR, B., 1995, “Packing different-sized circles into a rectangular container”, *European Journal of Operational Research*, n. 84, pp. 693–712.

GOLDBERG, M., 1970, “The packing of equal circles in a square”, *Math. Mag.*, n. 43, pp. 24-30.

GRAHAM, R.L., 1968, “Sets of points with given minimum separation (Solution to Problem E192 )”, *Amer. Math. Monthly* 75 192-193.

R.L. GRAHAM, B.D. LUBACHEVSKY, 1996, “Repeated patterns of dense packings of equal disks in a square”, *The Electronic Journal of Combinatorics* 3, 1–16.

HABICHT, W., WAERDDEN, V. D., 1951, “Lagerung von Punketen auf der Kugel”, *Math. Ann.* n. 123, pp. 223-234.

HALES, T.C. 1992, “the sphere packing problem”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 44, 41-76.

HALES, T.C. 1992, “Sphere packing II”, *Discrete Comp. Geom.*, Vol. 18, pp. 135-149.

HALES, T.C. 1998, *An Overview of the Kepler’s Conjecture*,  
<http://www.math.pitt.edu/~thales/kepler98>.

HILBERT, D., 1900, “Mathematische Probleme”, In: *2<sup>nd</sup> International Congress of Mathematicians*, Paris, France.

ISERMANN, H., 1991, “Heuristiken zur Lösung, des zweidimensionalen Packproblems für Rundgefäße”, *OR Spektrum*, n. 13, pp. 213–223.

KEPLER, J., 1611, *Strena sue de nive sexangula*.

KERSHNER, R., 1939, “The number of circles covering a set”, *AJM*, n. 61, pp. 665-671.

Kravitz, S., 1967, “Packing cylinders into cylindrical containers”, *Math. Mag.* 40 65-71.

LOCATELLI, M., RABER, U., 2002, “Packing equal circles in a square: a deterministic global optimization approach”, *Discrete Applied Mathematics*, n.122, pp. 139-166.



- LUBACHEVSKY, B.D., GRAHAM, R.L., 1995, “*Dense Packings of Equal Disks in an Equilateral Triangle: From 22 to 34 and Beyond*”, *Electron. J. Combin.*, v. 2, #A1.
- LUBACHEVSKY, B.D., GRAHAM, R.L., 2004, “*Minimum Perimeter Rectangles That Enclose Congruent Non-Overlapping Circles*”,  
<http://www.math.ucsd.edu/~fan/ron/papers/papers.html>
- MARTINEZ, J.M., SANTOS, S.A., 1995, “*Métodos Computacionais de Otimização*”, 20° Colóquio Brasileiro de Matemática, IMPA, Rio de Janeiro, Brasil.
- MACWILLIAMS, F. J., SLOANE, N. J., 1977, “*The theory of error-correcting codes*”, Springer-Verlog.
- MEINYK, T. W., KNOP, O., SMITH, R., 1977, “*Extremal Arrangements of points and Unit Changes on a Sphere: Equilibrium Configurations Revisited*”, *Can. J. Chem.* 55, 1745-1761.
- MELISSEN, H., 1994, “*Densest packing of six equal circles in a square*”, *Elemente der Mathematik*, n.49, pp. 27–31.
- MELISSEN, J.B.M., 1994, “*Densest packing of eleven congruent disks in a disk*”, *Geometriae Dedicata* 50 (1994) 15-25.
- MELISSEN, , J.B.M., 1994, “*Optimal packings of eleven equal circles in an equilateral triangle*”, *Acta Mathematica Hungarica* 65 , 389–393.
- MELISSEN, J.B.M., P.C. SCHUUR, 1995, “*Packing 16, 17 or 18 circles in an equilateral triangle*”, *Discrete Mathematics* 145, 333–342.
- MELISSEN, , H., 1993, “*Densest packings for congruent circles in an equilateral triangle*”, *American Mathematical Monthly* 100 , 916–925.
- MOTA, F.C., BHAYA, A., KASKUREWICZ, E., 1992, “*Robust Stabilization of Time-Varying Discrete Interval Systems*”, *Proceedings of Congress of Decision and Control (CDC-92)*, Tucson, Arizona.
- NURMELA, K. J., OSTERGARD, P. R. J., 1997, “*Packing up to 50 equal circles in a square*”, *Discete Comput. Geom.*, n. 18, pp. 111-120.
- PACH, J. , AGAWAL, P. K., 1995, *Combinatorial Geometry*, John Wiley & Sons, Inc, New York.

- PARDALOS, P.M., MARANAS, C.D., FLOUDAS, C.A., 1995, “*New results in the packing of equal circles in a square*”, *Discrete Mathematics*, n. 142, pp. 287-293.
- PINTÉR, J. D., 2001, “*Globally Optimized Spherical Point Arrangements: Model Variants and Illustrative Results*”, *Annals of Operations Research*, n. 104, pp. 213-230.
- PEIKERT, R., 1994 “*Dichteste packungen von gleichen kreisen in einem quadrat*”, *Elem. Math.*, n. 49, pp. 16-26.
- Pirl, U., 1969, “*Der Mindestabstand von  $n$  in der Einheitskreisscheibe gelegenen Punkten,*” *Math. Nachr.* 40,111-124.
- RAKHMANOV, E. A., SAFF, E. B., ZHOU, Y. M., 1995, “*Electrons on the Sphere, in Computational Methods and Function Theory*”, (R. M. Ali, St. Ruscheweyh, and E. B. Saff, Eds.), Singapore: World Scientific, pp. 111-127.
- ROGERS, C. A., 1964, “*Packing and Covering*”, Cambridge University Press.
- SAFF, E. B., KUIJLAARS, A. B. J., (1997), “*Distributing Many Points on a sphere*”, Springer-Verlag, New York, Vol. 19, N. 1.
- SANTOS, A.B.A., 1997, “*Problemas de Programação Não-Diferenciável: Uma Metodologia de Suavização*”, Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- SCHAER, J., 1965, “*The densest packing of 9 circles in a square*”, *Canad. Math. Bull.*, n. 8, pp. 273-277.
- SCHAER, J., 1971, “*On the packing of ten equal circles in a square*”, *Math. Mag.*, n. 44, pp. 139-140.
- SCHAER, J., MEIR, A., 1965, “*On a geometric extremum problem*”, *Canad. Math. Bull.*, n. 8, pp. 21-27.
- SCHLÜTER, K. 1979, “*Kreispackung in quadraten*”, *Elem. Math.*, n. 34, pp. 12-14.
- B. L. SCHWARTZ, 1970, “*Separating points in a square*”, *J. Recreational Math.*, n.3, pp. 195-204.
- SOUZA, L. C. F. “*Desempenho Computacional do Método de Agrupamento Via Suavização Hiperbólica*”, Tese M.Sc., COPPE/UFRJ (2005), Rio de Janeiro, RJ.

- TÓTH, L.F., 1972, “*Lagerungen in der Ebene auf der Kugel und im Raum*”, 2 ed. Berlin New York, Springer-Verlag.
- TÓTH, L. F., 1983, “*New Results in the Theory of Packing and Covering*”, In: *Convexity and its applications*, 312-359.
- TÓTH, L. F., 1964, “*Regular Figures*”, Pergamon Press, New York.
- WENGERODT, 1987a, “*Die dichteste Packung von 14 Kreisen in einem Quadrat*”, *Beitrage Algebra Geom.*, n. 25, pp. 25-46.
- WENGERODT, 1987b, “*Die dichteste Packung von 25 Kreisen in einem Quadrat*”, In: *Ann. Univ. Sci. Budapest, E&V&Sect. Math.*, v. 30, pp. 3-15.
- WENGERODT, G., 1983, “*Die dichteste Packung von 16 Kreisen in einem Quadrat*”, *Beitrage Algebra Geom.*, n. 16, pp. 173-190.
- WENGERODT, G., KIRCHNER, K., 1987, “*Die dichteste Packung von 36 Kreisen in einem Quadrat*”, *Beitrage Algebra Geom.*, n. 25, pp.147-159.
- WEN QI HUANG, YU LI, CHU MIN LI, RU CHU XU.-2006”, “*New Heuristics for Packing Unequal Circles into a Circular Container*”, *Computers & Operations Reserch*, 33, 2125-2142.
- XAVIER, A. E., CANEDO, M. P., SILVA, L. P., 1990, “*Calibração Automática de Modelos Chuva-Vazão: Um Método Assintótico*”, *Pesquisa Operacional*, v. 10, n. 1, pp. 1-18.
- XAVIER, A.E., 1982, “*Penalização Hiperbólica: Um Novo Método para Resolução de Problemas de Otimização*”, Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- XAVIER, A.E., 1993, “*Solução de Problemas de Programação Não-Diferenciáveis via Suavização*”, Relatório Técnico ES-290/93, PESC/COPPE/UFRJ.
- XAVIER, A.E., 2000, “*Optimum Covering of Plane Domains by Circles*”, *17th International Symposium on Mathematical Programming*, Atlanta, USA, 7-11 August.
- XAVIER, A.E., 2001, “*Hyperbolic Penalty: a new method for nonlinear programming with inequalities*”, *Intl. Trans. in Op. Res.*, n. 8, pp. 659-671.
- XAVIER, A.E., 2005, “*The Hyperbolic Smoothing Clustering Method*”, Relatório Técnico 674/05, PESC/COPPE/UFRJ.

XAVIER, A.E., OLIVEIRA, A.A.F., 2003, “*Optimum Order  $p$  Covering of Plane Domains by Circles Via Hyperbolic Smoothing Method*”, *International Symposium on Mathematical Programming*, Copenhagen, August.

XAVIER, A.E., OLIVEIRA, A.A.F., 2005, “*Optimum Covering of Plane Domains by Circles via Hyperbolic Smoothing Method*”, *Journal of Global Optimization*, v. 31, n. 3, pp. 493-504, March.

ZONG, C., 1999, “*sphere Packings*”, Springer-Verlag, New York.

YAN, K., WENQI, H., 2002, “*A heuristic quasi-physical strategy for solving disks packing problem*”, *Simulation Modelling Practice and Theory*, n. 10, pp. 195–207.

## Anexo -1

### Sítios na Internet Sobre Empacotamento e Problemas Correlatos

<http://www.netlib.att.com/~Hardin>, Sloane and Smith

<http://home.att.net/~donovanhse/Packing/> - J. Donovan, "Packing Circles in Squares and Circles Page."

<http://mathworld.wolfram.com/CirclePacking.html> - Circle Packing

<http://mathworld.wolfram.com/KissingNumber.html> - Eric Weisstein

<http://members.tripod.com/vismath5/lub/index.html> - "Spontaneous Patterns in Disk Packings"

<http://www.ams.org/new-in-math/cover/cass1.html> - Bill Casselman

<http://www.daveboll.com/packing.html> - "Optimal Packing Of Circles And Spheres"

<http://www.frii.com/~dboll/packing.html> - D. Boll, "Packing Results."

<http://www.ics.uci.edu/~eppstein/junkyard/cover.html> - D. Epstein, "Covering and Packing."

<http://www.ics.uci.edu/~eppstein/junkyard/spherepack.html> - "Sphere Packing and Kissing Numbers"

[http://www.inf.u-szeged.hu/~pszabo/Packing\\_circles.html](http://www.inf.u-szeged.hu/~pszabo/Packing_circles.html) - L.G. Casado and P.G. Szabó, "Equal Circle Packing in a Square."

<http://www.math.utk.edu/~kens/> - Ken Stephenson – "Professor of Mathematics"

<http://www.pmmms.cam.ac.uk/~gjm11/cpacking/info.html> - Gareth McCaughan

SPECHT, E., 2004, <http://www.packomania.com>

<http://www.stetson.edu/~efriedma/packing.html> - E. Friedman, "Erich's Packing Center"