Empacotamento de elipsoides: um modelo de programação não linear

Ernesto G. Birgin
Universidade de São Paulo
Rua do Matão, 1010, Cidade Universitária, São Paulo, SP
egbirgin@ime.usp.br

Rafael D. Lobato
Universidade de São Paulo
Rua do Matão, 1010, Cidade Universitária, São Paulo, SP
lobato@ime.usp.br

José Mario Martínez
Universidade Estadual de Campinas
Caixa Postal 6065, CEP: 13081-970, Campinas, SP
martinez@ime.unicamp.br

RESUMO

O problema de empacotamento de bolas tem sido alvo de intensa pesquisa teórica e experimental. O problema de empacotamento de elipsoides, por outro lado, começou a receber bastante atenção apenas recentemente e tem aplicações em diversas áreas. Neste trabalho descrevemos um modelo de programação não-linear para o empacotamento de elipsoides.

PALAVRAS CHAVE. Empacotamento de elipsoides, programação não-linear, modelos.

ABSTRACT

Spheres packing problems have been the target of intense theoretical and experimental research. On the other hand, the problem of packing ellipsoids received attention only recently in spite of having a wide range of applications. In this work, a nonlinear programming model for the problem of packing ellipsoids is described.

KEYWORDS. Ellipsoids' packing, nonlinear programming, models.

1. Introdução

O problema de empacotamento de bolas tem sido alvo de intensa pesquisa teórica e experimental. O problema de empacotamento de elipsoides, por sua vez, começou a receber atenção apenas recentemente e tem aplicações em diversas áreas. Esse problema tem aplicações importantes na formação e crescimento de cristais [Cheng et al., 1999; Rintoul e Torquato, 1996], na estrutura de líquidos, cristais e vidros [Bernal, 1959], no fluxo e compressão de materiais granulares e vidros [Jaeger e Nagel, 1992; Jaeger et al., 1996; Edwards, 1994], e na termodinâmica e cinética da transição de líquido para cristal [Alder e Wainwright, 1957; Chaikin, 2000; Pusey, 1991]. O problema de empacotamento de elipsoides também encontra aplicações na organização de cromossomos no núcleo de células humanas [Uhler e Wright, 2013].

Em [Donev et al., 2004] mostra-se experimentalmente que empacotamentos aleatórios de elipsoides tridimensionais idênticos em regiões compactas podem ter densidades próximas da máxima densidade de empacotamentos de bolas no espaço. No caso de elipsoides com formato muito parecido com o de M&M's® (doces produzidos pela Mars, Incorporated), a densidade pode variar entre 0.68 e 0.71. Para elipsoides com outros formatos, a densidade pode se aproximar de 0.74, como é o caso de elipsoides com semi-eixos de comprimentos $a = \alpha^{-1}$, $b = 1$ e $c = \alpha$ com $\alpha \approx 1.3$.

Em [Uhler e Wright, 2013] aborda-se o problema de empacotar elipsoides com sobreposição. O objetivo é arranjar os elipsoides dentro de um contêiner (com o formato de um elipsoide) de maneira a minimizar alguma medida de sobreposição entre os pares de elipsoides. A medida de sobreposição escolhida foi a da soma dos comprimentos dos semi-eixos principais do maior elipsoide que pode ser inscrito na intersecção dos dois elipsoides. Para resolver esse problema, eles propuseram um modelo de programação semidefinida em dois níveis. O problema do nível superior trata do posicionamento e da orientação dos elipsoides dentro do contêiner de modo a minimizar a sobreposição máxima entre os elipsoides. Já o problema do nível inferior é um problema de programação semidefinida, que trata de calcular a medida de sobreposição entre os elipsoides.

Neste trabalho, apresentamos um modelo de programação não-linear para o problema de empacotamento de elipsoides não necessariamente idênticos no espaço n-dimensional. Propostas similares para alguns casos particulares são também apresentadas em [Bezrukov e Stoyan, 2007; Galiev e Lisafina, 2013; Kallrath e Rebennack, 2014; Kallrath, 2016; Pankratov et al., 2015; Stoyan et al., 2016]. Uma comparação entre estas abordagens e a abordagem sugerida no presente trabalho pode ser encontarda em [Lobato, 2015].

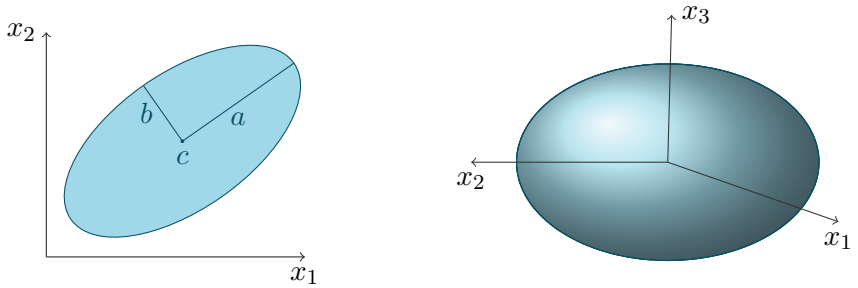
Este texto está organizado da seguinte forma. Na Seção 2, descrevemos o problema que estamos interessados em resolver. Na Seção 3, apresentamos duas transformações sobre elipsoides: uma responsável pela rotação e translação de um elipsoide e outra que transforma um determinado elipsoide em uma bola. Na Seção 4, propomos um modelo não-linear, contínuo e diferenciável para a não sobreposição de elipsoides. Na seção final mencionamos leituras complementares que descrevem de que forma o modelo aqui introduzido pode ser utilizado, quando combinado com algoritmos ad-hoc, para resolver problemas práticos de empacotamento de elipsoides.

2. O problema

Um elipsoide no $\mathbb{R}^n$ é um conjunto convexo da forma $\mathcal{E} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x-c)^\top P^{-1}(x-c) \leq 1\}$, onde $P \in \mathbb{R}^{n\times n}$ é uma matriz simétrica e definida positiva. O vetor $c \in \mathbb{R}^n$ é o centro do elipsoide. Os autovetores de P^{-1} determinam as direções principais do elipsoide e os autovalores de $P^{\frac{1}{2}}$ são os comprimentos dos semi-eixos do elipsoide.

Se P for um múltiplo da matriz identidade, então o elipsoide é uma bola. Mais especificamente, se $P = r^2 I_n$ para algum $r > 0$, o elipsoide é uma bola de raio r. Um elipsoide em duas dimensões

também é chamado de elipse. A Figura 2.1(a) exibe uma elipse e a Figura 2.1(b) ilustra um elipsoide em três dimensões.



(a) (b)

Figura 2.1: (a) Uma elipse com centro em c e semi-eixos de comprimentos a e b. (b) Ilustração de um elipsoide em três dimensões.

Seja $\mathcal{E} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x-c)^\top M(x-c) \leq 1\}$, onde $M \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Denotamos por $\partial\mathcal{E}$ a fronteira de $\mathcal{E}$, isto é, $\partial\mathcal{E} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x-c)^\top M(x-c) = 1\}$. Denotamos por $\text{int}(\mathcal{E})$ o interior de $\mathcal{E}$, isto é, $\text{int}(\mathcal{E}) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x-c)^\top M(x-c) < 1\}$. Dizemos que dois elipsoides se sobrepõem se existe um ponto no interior de um dos elipsoides que pertence ao interior do outro elipsoide. Dizemos que dois elipsoides estão em contato se eles não se sobrepõem e se existir um ponto que pertença à fronteira de ambos os elipsoides.

Neste trabalho, abordamos o problema de empacotamento de elipsoides em duas e três dimensões. Podemos enunciar esse problema da seguinte forma. Dados elipsoides $\mathcal{E}_1, \ldots, \mathcal{E}_m$ em $\mathbb{R}^n$ e um conjunto $\mathcal{C} \subset \mathbb{R}^n$, que chamaremos de contêiner, queremos encontrar elipsoides $\bar{\mathcal{E}}_1, \ldots, \bar{\mathcal{E}}_m$ tais que

1. $\bar{\mathcal{E}}_i$ é obtido através de rotação e translação do elipsoide $\mathcal{E}_i$ para todo $i \in \{1, \ldots, m\}$;
2. $\text{int}(\bar{\mathcal{E}}_i) \cap \text{int}(\bar{\mathcal{E}}_j) = \emptyset$ para $i, j \in \{1, \ldots, m\}$ e $i \neq j$;
3. $\bar{\mathcal{E}}_i \subseteq \mathcal{C}$ para todo $i \in \{1, \ldots, m\}$.

A primeira restrição diz que podemos apenas rotacionar e mover os elipsoides fornecidos. A segunda restrição diz que os elipsoides não podem se sobrepor. A terceira restrição exige que cada elipsoide esteja dentro do contêiner. Esse é um problema de viabilidade, cujas variáveis são os centros e os ângulos de rotação de cada elipsoide. Abordamos também o problema de otimização que consiste em empacotar o maior número possível de elipsoides dentro de um determinado contêiner.

É fácil determinar se há uma sobreposição entre duas bolas. Basta verificar se a distância entre os centros das bolas é menor do que a soma dos raios dessas bolas. Em caso positivo, as bolas se sobrepõem. Em caso contrário, não há sobreposição entre as bolas. No entanto, não há uma forma simples para determinar se dois elipsoides se sobrepõem.

Para cada $i \in \{1, 2\}$, considere o elipsoide $\mathcal{E}_i = \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x-c_i)^\top P_i^{-1}(x-c_i) \leq 1\}$. Os elipsoides $\mathcal{E}_1$ e $\mathcal{E}_2$ se sobrepõem se e somente se existe $x \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$(x-c_1)^\top P_1^{-1}(x-c_1) < 1 \quad \text{e} \quad (x-c_2)^\top P_2^{-1}(x-c_2) < 1.$$

Para garantir que os elipsoides $\mathcal{E}_1$ e $\mathcal{E}_2$ não se sobreponham, aplicaremos uma transformação linear nesses dois elipsoides que faz com que o primeiro elipsoide transforme-se em uma bola $\mathcal{E}_{11}$ de raio

r e o segundo em outro elipsoide $\mathcal{E}_{12}$. Mostraremos que $\mathcal{E}_1$ e $\mathcal{E}_2$ se sobrepõem se e somente se $\mathcal{E}_{11}$ e $\mathcal{E}_{12}$ se sobrepõem. Para garantir que $\mathcal{E}_{11}$ e $\mathcal{E}_{12}$ não se sobreponham, é preciso que a distância entre o centro c_1' de $\mathcal{E}_{11}$ e o elipsoide $\mathcal{E}_{12}$ seja maior ou igual a r. Contudo, não há uma fórmula conhecida para essa distância e pode ser necessária a resolução de um problema de otimização para encontrá-la. Assim, para calculá-la de forma eficiente, vamos propor uma representação do centro da bola $\mathcal{E}_{11}$ em função do elipsoide $\mathcal{E}_{12}$ de forma que a distância entre c_1' e $\mathcal{E}_{12}$ seja facilmente obtida, sem a necessidade de resolução de um problema de otimização.

3. Transformações sobre elipsoides

Considere o elipsoide $\mathcal{E} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x^\top P^{-1} x \leq 1\}$, onde P é uma matriz simétrica e definida positiva. Considere uma matriz de rotação Q e a transformação $R : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ definida por $R(x) = Qx + c$, onde $c \in \mathbb{R}^n$. Em duas dimensões, podemos representar uma matriz de rotação como

$$Q(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}, \tag{1}$$

que rotaciona um ponto no plano de um ângulo θ em relação à origem no sentido anti-horário. Já em três dimensões, podemos representar uma matriz de rotação como

$$Q(\psi,\theta,\phi) = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\psi & \sin\phi\sin\theta\cos\psi - \cos\phi\sin\psi & \sin\phi\sin\psi + \cos\phi\sin\theta\cos\psi \\ \cos\theta\sin\psi & \cos\phi\cos\psi + \sin\phi\sin\theta\sin\psi & \cos\phi\sin\theta\sin\psi - \sin\phi\cos\psi \\ -\sin\theta & \sin\phi\cos\theta & \cos\phi\cos\theta \end{pmatrix}, \tag{2}$$

que rotaciona um ponto de um ângulo ϕ em torno do eixo x, de um ângulo θ em torno do eixo y e de um ângulo ψ em torno do eixo z. Ao aplicarmos a transformação R nos elementos de $\mathcal{E}$, obtemos o conjunto

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{E}} &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid x = R(z), z \in \mathcal{E}\} \\ &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid x = Qz + c, z \in \mathcal{E}\} \\ &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid z = Q^\top(x - c), z \in \mathcal{E}\} \\ &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x-c)^\top Q P^{-1} Q^\top (x - c) \leq 1\}. \end{aligned}$$

O conjunto $\bar{\mathcal{E}}$ é um elipsoide, já que $QP^{-1}Q^\top$ é simétrica e definida positiva, e está centrado em c. De fato, a transformação R é uma isometria, pois trata-se de uma rotação seguida de uma translação.

Considere agora os elipsoides

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_i &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x - c_i)^\top Q_i P_i^{-1} Q_i^\top (x - c_i) \leq 1\} \text{ e} \\ \mathcal{E}_j &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x - c_j)^\top Q_j P_j^{-1} Q_j^\top (x - c_j) \leq 1\}, \end{aligned}$$

onde P_i e P_j são matrizes diagonais e definidas positivas, e Q_i e Q_j são matrizes de rotação. Considere a transformação linear $T_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ definida por

$$T_i(x) = P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top x. \tag{3}$$

Seja $\mathcal{E}_{ii}$ o conjunto obtido ao aplicarmos a transformação T_i em todos os elementos de $\mathcal{E}_i$, isto é,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{ii} &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid x = T_i(z), z \in \mathcal{E}_i\} \\ &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid x = P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top z, z \in \mathcal{E}_i\} \\ &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid z = Q_i P_i^{\frac{1}{2}} x, z \in \mathcal{E}_i\} \\ &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid (Q_i P_i^{\frac{1}{2}} x - c_i)^\top Q_i P_i^{-1} Q_i^\top (Q_i P_i^{\frac{1}{2}} x - c_i) \leq 1\} \\ &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x - P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_i)^\top (x - P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_i) \leq 1\}. \end{aligned}$$

Note que $\mathcal{E}_{ii}$ é uma bola de raio 1 e com centro em $P_i^{-\frac{1}{2}}Q_i^\top c_i$. Aplicando a transformação T_i aos elementos do conjunto $\mathcal{E}_j$, obtemos o conjunto

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_{ij} &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid x = T_i(z), z \in \mathcal{E}_j\} \\
&= \{x \in \mathbb{R}^n \mid x = P_i^{-\frac{1}{2}}Q_i^\top z, z \in \mathcal{E}_j\} \\
&= \{x \in \mathbb{R}^n \mid (Q_iP_i^{\frac{1}{2}}x - c_j)^\top Q_jP_j^{-1}Q_j^\top(Q_iP_i^{\frac{1}{2}}x - c_j) \leq 1\} \\
&= \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x - P_i^{-\frac{1}{2}}Q_i^\top c_j)^\top S_{ij}(x - P_i^{-\frac{1}{2}}Q_i^\top c_j) \leq 1\},
\end{aligned}$$

onde

$$S_{ij} = P_i^{\frac{1}{2}}Q_i^\top Q_jP_j^{-1}Q_j^\top Q_iP_i^{\frac{1}{2}}. \tag{4}$$

Pelo Lema 3.1, a matriz S_{ij} é definida positiva. Assim, $\mathcal{E}_{ij}$ é um elipsoide.

Lema 3.1 *A matriz S_{ij} estabelecida em (4) é definida positiva.*

Prova: Veja [Lobato, 2015]. □

Ao contrário da transformação R, a transformação T_i não preserva a forma dos elipsoides. Por outro lado, como mostra o Lema 3.2 a seguir, as sobreposições entre os elipsoides são preservadas após a aplicação da transformação T_i. Isto é, há sobreposição entre os elipsoides $\mathcal{E}_i$ e $\mathcal{E}_j$ se e somente se há sobreposição entre os elipsoides $\mathcal{E}_{ii}$ e $\mathcal{E}_{ij}$.

Lema 3.2 *Considere os elipsoides $\mathcal{E}_i, \mathcal{E}_j, \mathcal{E}_{ii}$ e $\mathcal{E}_{ij}$ definidos acima. Então, os elipsoides $\mathcal{E}_i$ e $\mathcal{E}_j$ se sobrepõem se e somente se os elipsoides $\mathcal{E}_{ii}$ e $\mathcal{E}_{ij}$ se sobrepõem.*

Prova: Veja [Lobato, 2015]. □

A Figura 3.1 ilustra essa transformação. Na Figura 3.1(a) são exibidas três elipses, sendo que as elipses $\mathcal{E}_1$ e $\mathcal{E}_2$ se sobrepõem. A Figura 3.1(b) mostra essas elipses após a transformação. Em cada uma das elipses foi aplicada a transformação que faz com que a elipse $\mathcal{E}_1$ torne-se um círculo de raio unitário. Note que na Figura 3.1(b) apenas as elipses $\mathcal{E}_{11}$ e $\mathcal{E}_{12}$ se sobrepõem.

Para encerrar esta seção, apresentamos o lema abaixo, que será usado nas seções posteriores.

Esse lema será aplicado em particular com a transformação T_i definida em (3), que é inversível (a saber, $T_i^{-1}(x) = Q_iP_i^{\frac{1}{2}}x$).

Lema 3.3 *Seja $T : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ uma transformação inversível. Sejam A e B subconjuntos de $\mathbb{R}^n$ e $A' = \{T(x) \mid x \in A\}$ e $B' = \{T(x) \mid x \in B\}$. Então, $A \subseteq B$ se e somente se $A' \subseteq B'$.*

Prova: Veja [Lobato, 2015]. □

4. Modelando a não sobreposição de elipsoides

Considere uma bola $\mathcal{B}$ de raio $r > 0$ e um elipsoide $\mathcal{E}$, ambos em $\mathbb{R}^n$. Sabemos que $\mathcal{B}$ e $\mathcal{E}$ se sobrepõem se e somente se a distância entre o centro da bola $\mathcal{B}$ e o elipsoide $\mathcal{E}$ é estritamente menor do que r. Assim, uma condição necessária e suficiente para que $\mathcal{B}$ e $\mathcal{E}$ não se sobreponham é que a distância entre o centro da bola $\mathcal{B}$ e o elipsoide $\mathcal{E}$ seja maior ou igual a r.

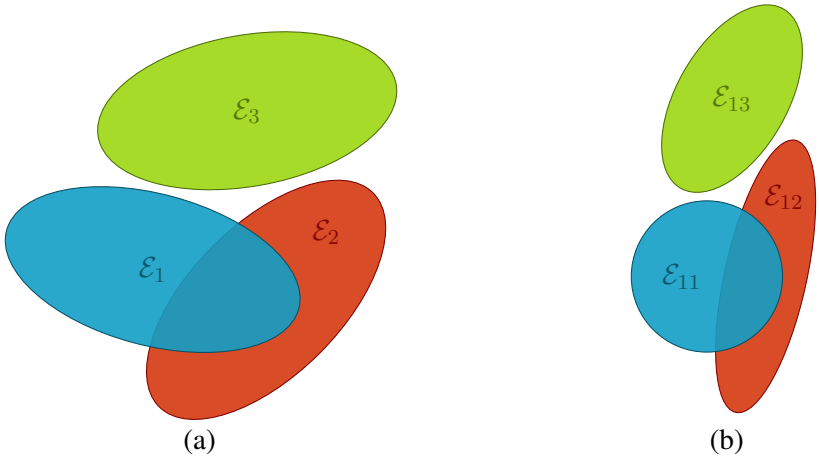


Figura 3.1: (a) Três elipses e uma sobreposição entre as elipses $\mathcal{E}_1$ e $\mathcal{E}_2$. A elipse $\mathcal{E}_3$ não se sobrepõe a nenhuma outra. (b) Cada uma das elipses é submetida à transformação que faz com que a elipse $\mathcal{E}_1$ torne-se um círculo de raio unitário.

Considere agora dois elipsoides

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_i &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x - c_i)^\top Q_i P_i^{-1} Q_i^\top (x - c_i) \leq 1\} \text{ e}\\ \mathcal{E}_j &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x - c_j)^\top Q_j P_j^{-1} Q_j^\top (x - c_j) \leq 1\},\end{aligned}$$

onde $c_i, c_j \in \mathbb{R}^n$, $Q_i, Q_j \in \mathbb{R}^{n\times n}$ são matrizes ortogonais, e $P_i, P_j \in \mathbb{R}^{n\times n}$ são matrizes diagonais e definidas positivas. Como vimos na Seção 3, ao aplicarmos a transformação T_i definida em (3) nesses dois elipsoides, obtemos a bola

$$\mathcal{E}_{ii} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x - P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_i)^\top (x - P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_i) \leq 1\}$$

de raio unitário e o elipsoide

$$\mathcal{E}_{ij} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x - P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_j)^\top S_{ij} (x - P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_j) \leq 1\},$$

onde

$$S_{ij} = P_i^{\frac{1}{2}} Q_i^\top Q_j P_j^{-1} Q_j^\top Q_i P_i^{\frac{1}{2}}.$$

Para garantir que $\mathcal{E}_{ii}$ e $\mathcal{E}_{ij}$ não se sobreponham, basta exigir que a distância entre o centro c_i' da bola $\mathcal{E}_{ii}$ e o elipsoide $\mathcal{E}_{ij}$ seja maior ou igual a um. Observe que, de acordo com a discussão presente na Seção 3, essa é uma condição necessária e suficiente para que os elipsoides $\mathcal{E}_i$ e $\mathcal{E}_j$ não se sobreponham. No entanto, não há uma expressão analítica conhecida para essa distância. Assim, para encontrá-la, podemos resolver o problema de se projetar c_i' em $\mathcal{E}_{ij}$, que pode ser formulado como

$$\begin{array}{ll}\text{minimizar} & \left\|x - c_i'\right\|^2\\ \text{sujeito a} & x \in \mathcal{E}_{ij}.\end{array} \tag{5}$$

Esse é um problema de programação quadrática convexa cujo valor da solução é igual ao quadrado da distância entre o centro da bola $\mathcal{E}_{ii}$ e o elipsoide $\mathcal{E}_{ij}$. Para encontrar essa distância mais facilmente, vamos representar o centro da bola $\mathcal{E}_{ii}$ em função do elipsoide $\mathcal{E}_{ij}$ de forma conveniente e detalhada a seguir.

Com uma transformação simples de variáveis, podemos reescrever o problema (5) como o problema de

$$\begin{array}{ll}\text{minimizar} & \left\|x - (c_i' - P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_j)\right\|^2\\ \text{sujeito a} & x^\top S_{ij} x \leq 1.\end{array} \tag{6}$$

Seja $\bar{\mathcal{E}}_{ij}$ o elipsoide determinado pela matriz S_{ij} e centrado na origem, isto é,

$$\bar{\mathcal{E}}_{ij} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x^\top S_{ij} x \leq 1\}.$$

O problema (6) é o problema de se projetar o ponto $c'_i - P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_j$ no elipsoide $\bar{\mathcal{E}}_{ij}$. Suponha que $c'_i \notin \text{int}(\mathcal{E}_{ij})$. Equivalentemente, temos $c'_i - P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_j \notin \text{int}(\bar{\mathcal{E}}_{ij})$. Então, pela Proposição 4.1 abaixo, o problema (6) possui uma solução única $x_{ij} \in \mathbb{R}^n$. Além disso, essa solução está na fronteira do elipsoide $\bar{\mathcal{E}}_{ij}$, ou seja, $x_{ij}^\top S_{ij} x_{ij} = 1$, e existe um único $\mu_{ij} \in \mathbb{R}_+$ tal que

$$c'_i - P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_j = x_{ij} + \mu_{ij} S_{ij} x_{ij}.$$

Assim, desde que $c'_i \notin \text{int}(\mathcal{E}_{ij})$, c'_i é representado de forma única em função de um ponto na fronteira de $\bar{\mathcal{E}}_{ij}$ e de um número não-negativo. Nesse caso, a distância entre o centro c'_i da bola $\mathcal{E}_{ii}$ e o elipsoide $\mathcal{E}_{ij}$ é dada por

$$\left\| x_{ij} - (c'_i - P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_j) \right\| = \mu_{ij} \left\| S_{ij} x_{ij} \right\|.$$

Por outro lado, pela Proposição 4.2 a seguir, qualquer ponto da forma $y = x + \mu S_{ij} x$ com $x^\top S_{ij} x = 1$ e $\mu > 0$ é tal que $y^\top S_{ij} y > 1$, ou seja, é um ponto que não pertence ao elipsoide $\bar{\mathcal{E}}_{ij}$. Se $\mu = 0$, então $y = x$ e, portanto, y é um ponto da fronteira do elipsoide determinado pela matriz S_{ij}. Logo, qualquer ponto da forma $y = x + \mu S_{ij} x$ tal que $x^\top S_{ij} x = 1$ e $\mu \in \mathbb{R}_+$ não pertence ao interior do elipsoide $\bar{\mathcal{E}}_{ij}$.

Se c'_i estiver no interior de $\mathcal{E}_{ij}$, então a distância de c'_i ao elipsoide $\mathcal{E}_{ij}$ será zero. Logo, para que os elipsoides $\mathcal{E}_i$ e $\mathcal{E}_j$ não se sobreponham, devemos ter necessariamente c'_i fora do interior de $\mathcal{E}_{ij}$. Portanto, podemos representar o centro da bola $\mathcal{E}_{ii}$ em função de um ponto x_{ij} da fronteira do elipsoide $\bar{\mathcal{E}}_{ij}$ e de um número não-negativo μ_{ij} sem perda de generalidade. Nessa representação, a distância do centro da bola $\mathcal{E}_{ii}$ ao elipsoide $\mathcal{E}_{ij}$ é dada por $\mu_{ij} \left\| S_{ij} x_{ij} \right\|$.

Proposição 4.1 *Seja $\mathcal{E} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x^\top M x \leq 1\}$, onde $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz definida positiva. Então, para todo $y \in \mathbb{R}^n \setminus \text{int}(\mathcal{E})$, existem e são únicos os pontos $x^* \in \mathbb{R}^n$ e $\mu^* \in \mathbb{R}$ tais que $y = x^* + \mu^* M x^*$ e x^* é a projeção de y em $\mathcal{E}$. Além disso, $x^* \in \partial\mathcal{E}$ e $\mu^* \in \mathbb{R}_+$.*

Prova: Veja [Lobato, 2015]. □

Proposição 4.2 *Seja $\mathcal{E} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x^\top M x \leq 1\}$, onde $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz definida positiva. Então, para todo $x \in \partial\mathcal{E}$ e $\mu > 0$, temos $(x + \mu M x)^\top M (x + \mu M x) > 1$.*

Prova: Veja [Lobato, 2015]. □

Com base nessa representação, desenvolveremos um modelo para a não sobreposição de elipsoides no $\mathbb{R}^n$. Seja $I = \{1, \ldots, m\}$ o conjunto de índices dos elipsoides. Para cada $i \in I$, é dada a matriz diagonal $P_i^{\frac{1}{2}} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ cujos autovalores são iguais aos comprimentos dos semi-eixos principais do elipsoide i. Para garantir que os m elipsoides não se sobreponham entre si, basta garantir que os elipsoides i e j não se sobreponham para cada $i, j \in I$ tal que $i < j$.

Para cada $i \in I$, teremos as variáveis de decisão $c_i \in \mathbb{R}^n$, que representará o centro do elipsoide i, e $Q_i \in \mathbb{R}^{n \times n}$, que representará a matriz de rotação do elipsoide i. Para cada $i, j \in I$ tal que

$i < j$, devemos ter a variável de decisão $c_{ij} \in \mathbb{R}^n$, que representará o centro da bola $\mathcal{E}_{ii}$ em função do elipsoide $\mathcal{E}_{ij}$. Mas, como devemos ter $c_{i,i+1} = c_{i,k}$ para cada $k \in \{i+2, \ldots, m\}$, podemos substituir a variável c_{ij} pela variável c_{ii} para cada $j > i$. Além disso, para cada $i, j \in I$ tal que $i < j$, teremos as variáveis de decisão $x_{ij} \in \mathbb{R}^n$, que representará um ponto na fronteira do elipsoide $\bar{\mathcal{E}}_{ij}$, e $\mu_{ij} \in \mathbb{R}$, que será uma variável não-negativa.

Sejam $i, j \in I$ tais que $i < j$. Como x_{ij} será um ponto na fronteira do elipsoide $\bar{\mathcal{E}}_{ij}$, devemos ter $x_{ij}^\top S_{ij} x_{ij} = 1$. Como μ_{ij} deve ser não-negativo, devemos ter a restrição $\mu_{ij} \geq 0$. Além disso, como a distância entre o centro da bola $\mathcal{E}_{ii}$ e o elipsoide $\mathcal{E}_{ij}$ deve ser maior ou igual a um, devemos ter $\mu_{ij}\|S_{ij}x_{ij}\| \geq 1$ ou, equivalentemente, $\mu_{ij}^2\|S_{ij}x_{ij}\|^2 \geq 1$. De acordo com a representação adotada, o centro c_{ii} da bola $\mathcal{E}_{ii}$ em função do elipsoide $\mathcal{E}_{ij}$ deve ser dado por

$$c_{ii} = x_{ij} + \mu_{ij} S_{ij} x_{ij} + P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_j.$$

Finalmente, para cada $i \in I \setminus \{m\}$, o centro da bola $\mathcal{E}_{ii}$ é igual $P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_i$. Logo, o centro do elipsoide i é dado por $c_i = Q_i P_i^{\frac{1}{2}} c_{ii}$. Assim, obtemos o seguinte modelo.

$$\begin{aligned}
x_{ij}^\top S_{ij} x_{ij} &= 1, && \forall i < j && (7)\\
\mu_{ij}^2 \|S_{ij} x_{ij}\|^2 &\geq 1, && \forall i < j && (8)\\
\mu_{ij} &\geq 0, && \forall i < j && (9)\\
c_{ii} &= x_{ij} + \mu_{ij} S_{ij} x_{ij} + P_i^{-\frac{1}{2}} Q_i^\top c_j, && \forall i < j && (10)\\
c_i &= Q_i P_i^{\frac{1}{2}} c_{ii}, && \forall i \in \{1, \ldots, m-1\}. && (11)
\end{aligned}$$

Esse modelo possui $(m-1)(n+2m(n+3))$ restrições. As variáveis desse modelo são $x_{ij} \in \mathbb{R}^n$, $\mu_{ij} \in \mathbb{R}$ para $i, j \in I$ tais que $i < j$, e $Q_i \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $c_{ii} \in \mathbb{R}^n$ e $c_i \in \mathbb{R}^n$ para $i \in I$. Assim, se as matrizes de rotação forem representadas como em (1) e (2), esse modelo possuirá $\frac{3}{2}m(m+3)$ variáveis no caso bidimensional e $m(2m+7)$ variáveis no caso tridimensional.

5. Conclusões

Neste trabalho apresentamos um modelo de programação não-linear, contínuo e diferenciável, para o problema de empacotamento de elipsoides. O problema é um problema difícil, não linear, não convexo e com um número grande de soluções locais não globais, quer dizer, pontos estacionários que não representam uma solução do problema de empacotamento. Desenvolver algoritmos capazes de encontrar soluções de boa qualidade em um tempo razoável é uma tarefa difícil. Em [Lobato, 2015], são desenvolvidas variações do modelo apresentado nas seções anteriores e algoritmos capazes de encontrar soluções como a solução ilustrada na Figura 5.1.

Referências

Alder, B. J. e Wainwright, T. E. (1957). Phase transition for a hard sphere system. *Journal of Chemical Physics*, 27(5):1208–1209.

Bernal, J. D. (1959). Geometrical Approach to the Structure of Liquids. *Nature*, 183(4655):141–147.

Bezrukov, A. e Stoyan, D. (2007). Simulation and statistical analysis of random packings of ellipsoids. *Particle & Particle Systems Characterization*, 23:388–398.

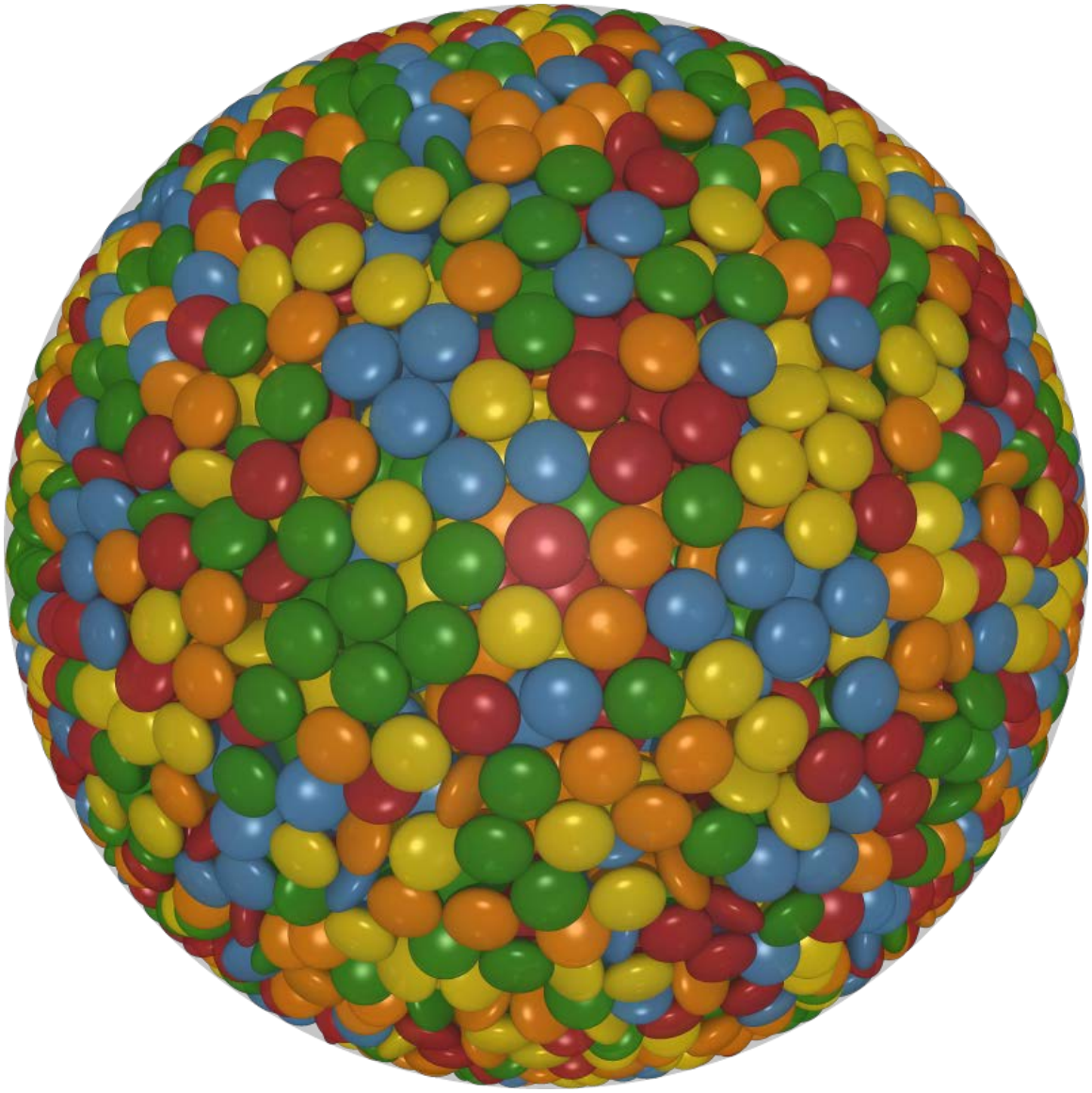


Figura 5.1: Empacotamento de 7649 elipsoides de tamanho $(0.67, 0.67, 0.3465)$ em uma esfera de raio 12.75 usando restrições de isolamento formadas por um cilindro de raio $4a$ e um plano de altura $h - 4a$.

Chaikin, P. (2000). Thermodynamics and hydrodynamics of hard spheres: the role of gravity. In M. E. Cates and M. R. Evans, editor, *Soft and Fragile Matter: Nonequilibrium Dynamics, Metastability and Flow*, volume 53, p. 315–348, Bristol, UK. Institute of Physics Publishing.

Cheng, Z. D., Russell, W. B., e Chaikin, P. M. (1999). Controlled growth of hard-sphere colloidal crystals. *Nature*, 401(6756):893–895.

Donev, A., Cisse, I., Sachs, D., Variano, E., Stillinger, F. H., Connelly, R., Torquato, S., e Chaikin, P. M. (2004). Improving the density of jammed disordered packings using ellipsoids. *Science*, 303(5660):990–993. ISSN 0036-8075.

Edwards, S. F. (1994). The Role of Entropy in the Specification of a Powder. In A. Mehta, editor, *Granular Matter: An Interdisciplinary Approach*, p. 121–140, New York. Springer–Verlag.

Galiev, S. I. e Lisafina, M. S. (2013). Numerical optimization methods for packing equal orthogonally oriented ellipses in a rectangular domain. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 53(11):1748–1762.

Jaeger, H. M. e Nagel, S. R. (1992). Physics of the granular state. *Science*, 255(5051):1523–1531.

Jaeger, H. M., Nagel, S. R., e Behringer, R. P. (1996). Granular solids, liquids, and gases. *Reviews of Modern Physics*, 68(4):1259–1273.

Kallrath, J. (2016). Packing ellipsoids into volume-minimizing rectangular boxes. *Journal of Global Optimization*. doi:10.1007/s10898-015-0348-6.

Kallrath, J. e Rebennack, S. (2014). Cutting ellipses from area-minimizing rectangles. *Journal of Global Optimization*, 59(2-3):405–437.

Lobato, R. D. (2015). *Empacotamento de elipsoides*. PhD thesis, Universidade de São Paulo.

Pankratov, A., Romanova, T., e Khlud, O. (2015). Quasi-phi-functions in packing of ellipsoids. *Radioelectronics & Informatics*, 68:37–42.

Pusey, P. N. (1991). Colloidal Suspensions. In J. P. Hansen and D. Levesque and J. Zinnjustin, editor, *Liquids, Freezing and Glass Transition, PT 2*, volume 51 of *Les Houches Summer School Session*, p. 763–942, Amsterdam. Elsevier Science Publishers B. V.

Rintoul, M. D. e Torquato, S. (1996). Metastability and crystallization in hard-sphere systems. *Physical Review Letters*, 77(20):4198–4201.

Stoyan, Y. G., Pankratov, A., e Romanova, T. (2016). Quasi-phi-functions and optimal packing of ellipses. *Journal of Global Optimization*. doi:10.1007/s10898-015-0331-2.

Uhler, C. e Wright, S. J. (2013). Packing Ellipsoids with Overlap. *SIAM Review*, 55(4):671–706.