Universidade Federal de Uberlândia

Instituto de Ciências Exatas e Naturais do Pontal Curso de Matemática

Trabalho de Conclusão de Curso

Um estudo introdutório sobre o empacotamento de esferas no \mathbb{R}^2 e \mathbb{R}^3

por

Cássio Lopes Donato de Lanna

Bacharelado em Matemática - Ituiutaba - MG

Orientadora: Profa. Dra. Milena Almeida Leite Brandão

Cássio Lopes Donato de Lanna

Um estudo introdutório sobre o empacotamento de esferas no \mathbb{R}^2 e \mathbb{R}^3

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Ciências Exatas e Naturais do Pontal da Universidade Federal de Uberlândia como requisito parcial para obtenção do título de bacharel em Matemática.

Orientadora: Profa. Dra. Milena Almeida Leite Brandão

Uberlândia, Janeiro de 2023

Cássio Lopes Donato de Lanna

Um estudo introdutório sobre o empacotamento de esferas no \mathbb{R}^2 e \mathbb{R}^3

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Ciências Exatas e Naturais do Pontal da Universidade Federal de Uberlândia como requisito parcial para obtenção do título de bacharel em Matemática.

Orientadora: Profa. Dra. Milena Almeida Leite Brandão

BANCA EXAMINADORA:

Profa. Dra. Milena Almeida Leite Brandão

Profa. Dra. Tânia Maria Machado de Carvalho

Prof. Dr. José Laércio Dorício

Uberlândia, Janeiro de 2023

 $A\ todos\ os\ meus\ familiares\ e$ amigos

AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar a todos os meus familiares por me apoiarem e incentivarem nessa trajetória.

À minha orientadora **Profa. Dra. Milena Almeida Leite Brandão** pela disponibilidade, paciência e todo incentivo que me deu.

Aos membros da banca avaliadora José Laércio Dorício e Tânia Maria Machado de Carvalho, pelas contribuições agregadas no trabalho.

A todos os professores pelo conhecimento ofertado e pelo incentivo para o crescimento na carreira acadêmica e na vida.

A todas as amizades que construí durante a graduação, pelo aprendizado e os momentos valiosos compartilhados, entre eles: Jordi Faria Alves, Renê Aparecido Santos, Dayane Alves de Oliveira e Bruna Miranda Martins.

À Universidade Federal de Uberlândia, seu corpo docente, direção e administração, que propiciaram meios de tornar o meu sonho possível.

RESUMO

Nesta pesquisa foi estudado o problema de empacotamento de esferas em determinados contentores, ou seja, o arranjo de esferas não sobrepostas dentro de um espaço que as contém. O estudo sobre o tema é muito importante para áreas como química, física, biologia e matemática, podendo encontrar alguns exemplos no cotidiano da população como por exemplo cabo de fibra óptica e para escolher as direções do raio-X. O objetivo deste trabalho é responder a pergunta: como armazenar bolas idênticas num recipiente de tal modo que caiba o maior número de bolas possível? Será apresentado dois casos particulares da resposta a essa pergunta, o empacotamento de esferas no âmbito bidimensional e o tridimensional. Quanto aos contentores, estes podem ter vários formatos. Aqui, foi estudado a região de contentores nos formatos quadrado, retângulo, círculo, cúbico e cilíndrico. O objetivo no empacotamento de esferas é maximizar a mínima distância entre as esferas sem ocorrer sobreposição entre qualquer uma das esferas e não ultrapassar a fronteira delimitada pelo contentor. Para encontrar a solução desses problemas de otimização são necessários utilizar modelos de programação não linear. Neste estudo, foi apresentado modelagem matemática dos problemas de otimização para cada caso de empacotamento. No entanto, a solução numérica será apresentada em trabalhos futuros. Todos os casos são apresentados ilustrações desenvolvidas no GeoGebra para facilitar a visualização e entendimento tanto bidimensional quanto tridimensional dos objetos em estudo, quanto para compreender de forma mais fácil os modelos matemáticos.

Palavras-chave: Empacotamento de esferas, programação não linear, modelo matemático.

CONTEÚDO

	\mathbf{Agr}	decimentos	 . i
	Res	mo	 . ii
Li	sta d	e Figuras	iii
[n	trod	ção	1
1	$\mathbf{Em}_{\mathbf{j}}$	acotamento de esferas	3
	1.1	Empacotamentos de esferas no plano	 . 5
	1.2	Empacotamentos de esferas em espaços n -dimensionais	 . 8
2	Mo	elos de otimização para empacotamentos de esferas	17
	2.1	Caso bidimensional	 . 18
		2.1.1 Restrições de não sobreposição	 . 18
		2.1.2 Restrições do contentor	 . 19
	2.2	Caso tridimensional	 . 23
		2.2.1 Restrições de não sobreposição	 . 23
		2.2.2 Restrições do contentor	 . 23
	Con	siderações	 . 27
	Ref	rências	 . 28

LISTA DE FIGURAS

1.1	Empilhamento de bolas	3
1.2	CFC	4
1.3	Empacotamento ótimo de círculos em quadrado, com k \leq 5	6
1.4	Empacotamento regular hexagonal	6
1.5	Parte do mosaico hexagonal	7
1.6	Mosaico Hexagonal	8
1.7	Distância interatômica CFC	9
1.8	Distância interatômica HC.	10
1.9	Prisma hexagonal regular e triângulo equilátero contido na área base	10
1.10	Pirâmide triangular contido no prima hexagonal	11
1.11	Construção do CFC e HC	12
1.12	Arranjo HC e CFC respectivamente	13
2.1	Distância Euclidiana	18
2.2	Circunferência na posição ideal, não se interceptando e sofrendo sobre-	
	posição, respectivamente	19
2.3	Restrições no quadrado	20
2.4	Restrições na circunferência	21
2.5	Restrições no retângulo	22
2.6	Restrições no cubo	24
2.7	Restrições no cilindro	25

INTRODUÇÃO

O problema de empacotamento lida com busca de soluções para encontrar a melhor forma de alocar objetos em um contentor, ou seja, dado um contentor deseja-se dispor n outros objetos dentro desse contentor, sem causar a sobreposição entre si, estando os objetos totalmente contidos no limitante.

Há muitas situações do cotidiano que podem ser formuladas por meio de um problema de empacotamento. Por exemplo, empresas podem diminuir custos no transporte de produtos se souberem calcular a quantidade máxima de itens possíveis que podem ser agrupadas em determinada embalagem, ou a quantidade de pacotes/embalagens que cabem dentro de um caminhão, ou ainda, caso a empresa possua um número fixo de itens e deseja encontrar um meio de contê-los sem a necessidade de desperdício de custos.

Neste trabalho estudamos o empacotamento de círculos em três objetos diferentes: quadrado, círculo e retângulo e também o empacotamento de esferas no cubo e no cilindro. Foi apresentado nessa pesquisa que o problema de empacotamento pode ser formulado como um problema de otimização não linear com variáveis contínuas.

Para formular os modelos matemáticos precisamos encontrar valores para o conjunto de variáveis, no qual desejamos maximizar ou minimizar uma equação, chamada de função objetivo, de modo que os valores da variáveis satisfaçam as restrições. Quando possuímos uma função objetivo linear e suas restrições são equações e inequações lineares, temos um modelo linear. Por outro lado, se não temos isso o modelo é não-linear.

Ao longo da pesquisa foi usado o software GeoGebra para a criação da maioria das figuras. O GeoGebra foi desenvolvido por Markus Hohenwarter em 2001 e contém com-

binações entre geometria, álgebra, tabelas, gráficos, estatística e cálculo.

No capítulo 1 veremos uma breve história do tema desde a primeira vez que foi pensado o assunto, no século XVII, até o século XXI no qual, uma pesquisadora venceu um importante prêmio tendo esse tema em foco. Também veremos um pouco de como funciona o empacotamento no \mathbb{R}^n , sendo comentado brevemente para o \mathbb{R}^4 .

No capítulo 2 veremos modelos de programação não-linear.

CAPÍTULO 1

EMPACOTAMENTO DE ESFERAS

No século XVII, com a Inglaterra tornando-se um império global, a marinha britânica tornou-se cada vez mais necessária para a dominação dos mares. Considerando a falta de espaço dos navios foi primordial a procura de novos métodos para o transporte de armamentos, de forma a usar o menor espaço e maximizar a quantidade. Tendo em vista este problema, o matemático Thomas Harriot ¹ foi procurado para pensar em um modelo que compactasse os corpos, sendo que as balas de canhões eram empilhadas de forma piramidal com base de três ou quatro lados, como na Figura 1.1.

Figura 1.1: Empilhamento de bolas.

Fonte: https://pixabay.com/images/id-1938932/ Acessado 18 out. 2022.

¹Thomas Harriot (1560-1621) foi um matemático, astrônomo e filósofo natural inglês que fez importantes contribuições nos campos da navegação, ótica e álgebra.

Tomando conhecimento sobre a pesquisa de Harriot, o astrônomo, matemático e astrólogo Johannes Kepler, em 1611, conjecturou o empacotamento "Cúbico de Face Centrada" (CFC). Essa conjectura tornou-se conhecida como *Conjectura de Kepler*.

Para vizualisar o CFC imagine um cubo, no qual cada vértice possui uma esfera. Depois, coloque uma esfera centrada em cada face do cubo. Considere que todas as esferas possuem o mesmo raio. A Figura 1.2 ilustra um empacotamento CFC.

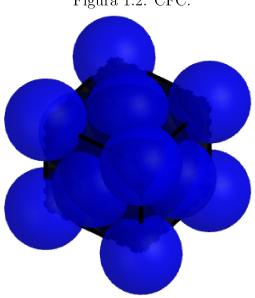


Figura 1.2: CFC.

Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

De acordo com Kepler, "o empacotamento seria o mais justo possível e nenhum arranjo teria mais esferas no mesmo contentor". Gauss demonstrou que o empacotamento cúbico de face centrada possui maior densidade de empacotamento em três dimensões. O primeiro avanço significativo na tentativa de demonstrar a conjectura de Kepler se deu em 1953 por L. Fejes Tóth, de forma que reduziu a conjectura para um número finito, mas impossível de cálculos.

Em 1998 a demonstração se tornou exequível pelo norte americano Thomas Hales, contudo uma demonstração muito grande que impossibilitou a verificação por muitos outros matemáticos. Somente em 2017, com a ajuda computacional, conseguiu-se comprovar a demonstração de Thomas [12].

Em 2017 Maryna Viazovska conseguiu encontrar a solução para o caso de dimensão 8 sendo publicado no artigo "The sphere packing problem in dimension 8"[8] onde ela

escreveu no resumo "In this paper we prove that no packing of unit balls in Euclidean space \mathbb{R}^8 has density greater than that of the E_8 lattice packing." [13], onde garantiu o prêmio da Medalha Fields ³ em 2022. No mesmo ano, em parceria com outros pesquisadores, foi publicado o artigo "The sphere packing problem in dimension 24".

Nas próximas seções abordaremos o assunto empacotamento de esferas no \mathbb{R}^2 e \mathbb{R}^3 .

1.1 Empacotamentos de esferas no plano

Considerando o âmbito n-dimensional percebe-se uma generalização da conjectura de Kepler, objetivando a máxima densidade possível. Em um espaço unidimensional tem-se uma trivialidade, visto que uma bola nesta dimensão é um segmento de reta tornando a densidade 1.

O problema de encontrar o empacotamento em diferentes dimensões ganhou mais atenção com L. Fejes Tóth. Sendo o problema de empacotar circulos em quadrado um dos mais clássicos e populares na literatura. Embora não seja difícil obter um empacotamento quase ótimo para um pequeno espaço n-dimensional, o problema de encontrar o empacotamento mais denso 4 é tido como uma dificuldade maior para a resolução em geral. Em 1960 foi encontrada a resolução para esse problema até 9 círculos (k=9), onde k representa o número de objetos a serem empacotados. Na Figura 1.3 vemos os casos de até cinco circunferências, feitos pelos pesquisadores GRAHAM, MEIER e SCHAER [5]; sendo os resultados apresentados por SCHAER (1965) [9], MELISSEN (1994) [7].

Para os casos $k \ge 10$, Wengerodt e Kirchner resolveram o problema para k=14, 16, 25 e 36, sendo provadas em [15], [16], [17] e [18]. Sendo que Goldberg (1970) conseguiu demonstrar arranjos ótimos para $k \le 27$ e para outros valores de k > 27.

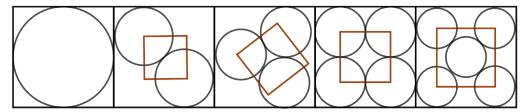
Em 1909, Axel Thue trabalhando na conjectura de Kepler no campo bidimensional, obteve o seguinte resultado: "The hexagonal lattice is the densest of all possible circle

²Tradução livre: Neste artigo provamos que nenhum empacotamentos de esferas unitárias no espaço euclidiano \mathbb{R}^8 possui densidade maior do que o empacotamento em E_8 .

³Representa o Prêmio Nobel de Matemática. Tem como intuito de reconhecer o trabalho matemático e quanto a promessa de realizações futuras, de forma que é concedido apenas a matemático com menos de 40 anos.

⁴Empacotamento mais denso, em termos gerais, é a maneira mais eficiente de empilhar objetos em um espaço limitado, de forma que ocupem o menor espaço possível.

Figura 1.3: Empacotamento ótimo de círculos em quadrado, com $k \leq 5$.

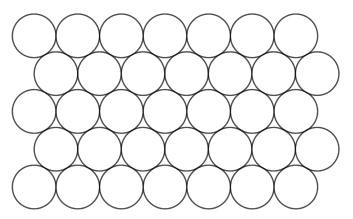


Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

packings. ⁵"[3], Figura 1.4, resultando no seu teorema, no qual a densidade de ocupação, sendo esta a proporção entre o volume dos objetos e o volume do contentor, é dada por:

$$\frac{\pi}{\sqrt{12}} \approx 0.9069.$$

Figura 1.4: Empacotamento regular hexagonal.



Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

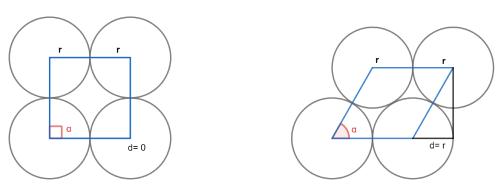
Definição 1.1. Rede é um arranjo de pontos tridimensionais, infinito, sendo uma rede de pontos, onde cada um dos pontos está rodeado de forma idêntica por seus pontos vizinhos.

Para a construção da rede de Thue, considere 4 esferas de mesmo tamanho conforme a Figura 1.5.

Considere d o deslocamento das circunferências causado pelo empacotamento e a reentrância, mudança do ângulo α , denotado por F, sendo dada pela diferença da área do

⁵Tradução livre: A rede hexagonal é a mais densa possível de todas possíveis circunferências empacotadas.

Figura 1.5: Parte do mosaico hexagonal.



Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

paralelogramo com a área da circunferência, em outras palavras temos:

$$F = 2r\sqrt{4r^2 - d^2} - \pi r^2$$

onde $0 \le d \le r$. Seja F uma função linear decrescente em d. Definida por F = f(d). Note que a região não ocupada no mosaico hexagonal, (vide Fig. 1.5), possui uma maior área quando d = 0:

$$F_{\text{máx}} = f(0) = 2r\sqrt{4r^2} - \pi r^2 = r^2(4 - \pi),$$

e uma área menor em d = r

$$F_{\min} = f(r) = 2r\sqrt{4r^2 - r^2} - \pi r^2 = r^2(2\sqrt{3} - \pi).$$

Definição 1.2. O Fator de Empacotamento Atômico (FEA) é uma medida fundamental na caracterização da estrutura cristalina de um material. Ele indica a porcentagem do espaço dentro de uma célula unitária de um cristal que é ocupada pelos átomos que compõem a estrutura cristalina. Em outras palavras, o FEA representa a fração do volume total da célula unitária que é ocupada pelos átomos.

Tomando o Fator de Empacotamento Atômico (FEA), temos dois termos importantes: Célula unitária, que é o agrupamento de esferas distribuídos na rede e Número de Coordenação que representa o número de esferas vizinhas mais próximas. Sendo a fórmula do FEA dada pela seguinte equação:

$$FEA = \frac{V_{\text{NumeroCoordenação}}}{V_{\text{Celula Unitaria}}} = \frac{N_{\text{esfera}} * V_{\text{esfera}}}{V_{\text{Celula unitaria}}}.$$
 (1.1)

Ou seja, o FEA é dado pela razão entre os volumes das esferas e o do contentor, no caso o círculo e a rede, respectivamente. Assim,

$$FEA_{\min} = \frac{\pi r^2}{4r^2} = \frac{\pi}{4} \approx 0.7854,$$

$$FEA_{\text{max}} = \frac{\pi r^2}{2r^2\sqrt{3}} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \approx 0.9069,$$

de forma que resulta no mosaico hexagonal teorizado por Thue, representado na Figura 1.6.

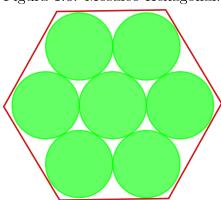


Figura 1.6: Mosaico Hexagonal.

Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

1.2 Empacotamentos de esferas em espaços n-dimensionais

Cogitando o caso tridimensional pensaremos em um sistema ideal cristalino, onde temos esferas ou objetos completamente esféricos e de mesmo raio, alocadas em um objeto cúbico, de forma CFC (cúbico de face centrada), como na Figura 1.7.

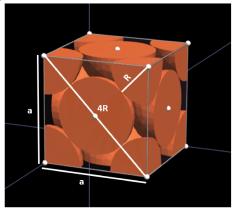


Figura 1.7: Distância interatômica CFC.

Fonte: Elaborado pelo autor com o software CrystalWalk. ⁶

Sejam R o raio da esfera e a a aresta do cubo, como na Figura 1.7. Usando o Teorema de Pitágoras vemos que:

$$a^{2} + a^{2} = (4R)^{2}$$
$$2a^{2} = 16R^{2}$$
$$a^{2} = 8R^{2}$$
$$a = 2R\sqrt{2}.$$

Considerando quatro esferas de mesmo raio totalmente empacotadas em uma célula cúbica, temos que:

$$FEA = \frac{N_{\text{esfera}} * V_{\text{esfera}}}{V_{\text{Celula unitaria}}},$$

$$FEA = \frac{4(\frac{4}{3}\pi R^3)}{(2R\sqrt{2})^3} = \frac{\frac{16}{3}\pi R^3}{16R^3\sqrt{2}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0,7405.$$

Desta forma, encontramos que o CFC tem densidade de ocupação de aproximadamente 74,05%, logo, tem-se um desperdício de espaço de aproximadamente 26% do volume total.

⁶CrystalWalk [1] é um software desenvolvido por Fernando Bardella em sua tese, com intuito de obter Grau de Doutor em Ciências na Área de Tecnologia Nuclear - Materiais. O objetivo do software é de diminuir a dificuldade de síntese e visualização de estruturas cristalinas, incorporar funcionalidades didáticas e contribuir para a democratização do conhecimento.

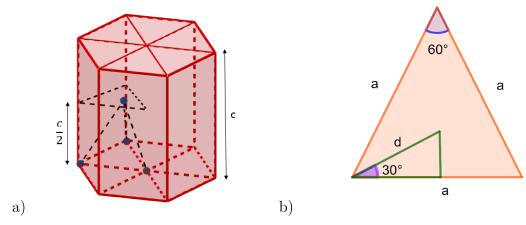
Agora, usando o método denominado "Hexagonal Compacto" (HC) (Figura 1.8), que é um arranjo equivalente ao CFC [14], demonstraremos que ambos possuem o mesmo fator de empacotamento atômico (FEA).

Figura 1.8: Distância interatômica HC.

Fonte: Elaborado pelo autor com o software CrystalWalk.

Para chegar a esse resultado observemos a Figura 1.9.a. A base do prisma hexagonal regular é composto por seis triângulos equiláteros, como na Figura 1.9.b .

Figura 1.9: Prisma hexagonal regular e triângulo equilátero contido na área base.



Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

Considerando o triângulo equilátero dado pela Figura 1.9b e usando a expressão do

cosseno de um ângulo, segue que:

$$cos(30) = \frac{(a/2)}{d}$$

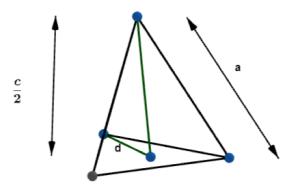
$$\frac{\sqrt{3}}{2} = \frac{a}{2d}$$

$$d\sqrt{3} = 2(\frac{a}{2})$$

$$d = \frac{a}{\sqrt{3}}.$$

Da Figura 1.10, percebe-se a possibilidade do uso do Teorema de Pitágoras para encontrar o valor de c, altura de um prisma:

Figura 1.10: Pirâmide triangular contido no prima hexagonal.



Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

$$\left(\frac{c}{2}\right)^2 + d^2 = a^2$$

$$3c^2 + 4a^2 = 12a^2$$

$$\left(\frac{c}{a}\right)^2 = \frac{8}{3}$$

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$$

logo

$$c = a\sqrt{\frac{8}{3}}.$$

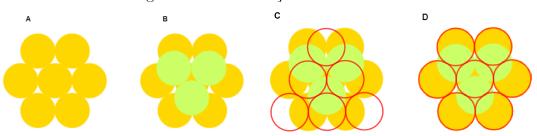
Desta forma, temos que o FEA é:

$$FEA = \frac{6(\frac{4}{3}\pi R^3)}{3a^2c\cos(30)} = \frac{\frac{24}{3}\pi R^3}{3a^2\cdot\frac{\sqrt{3}}{2}\cdot a\sqrt{\frac{8}{3}}} = \frac{24\pi R^3\cdot 2}{9a^3\cdot 1633\cdot 1,732} \approx 0,74.$$

Portanto, observa-se que o fator de empacotamento do CFC e do HC são equivalentes. A fim de construir um arranjo CFC ou HC, é necessário seguir os seguintes passos [10]:

- 1. Em um plano horizontal faz-se uma primeira camada, usando uma esfera como a parte central, cerque-a com outras seis esferas, compactadas ao máximo, formando visualmente um hexagono regular em torno das esferas (vide Figura 1.11.A);
- Na segunda camada usa-se as reentrâncias da primeira camada como a posição para as três novas esferas (como na Figura 1.11.B);
- 3. Para a terceira camada, em vermelho na Figura 1.11B. e C., tem-se duas possibilidades: a primeira resultaria em um CFC e a segunda em um HC. Assim:
 - No primeiro caso as esferas que correspondem à terceira camada são colocadas nos espaços vazios da camada anterior, como na Figura 1.11.C;
 - No segundo caso, as esferas são inseridas perfeitamente de forma alinhada com a primeira camada como na Figura 1.11.D.

Figura 1.11: Construção do CFC e HC.



Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

Na Figura 1.12 podem ser visualizadas as construções do HC e CFC concluídas.

Quando se trata de empacotamento de esferas em quatro dimensões, o problema se torna muito mais complexo e desafiador. O espaço de configurações de esferas em 4

Figura 1.12: Arranjo HC e CFC respectivamente.

Fonte: https://en.wikipedia.org/wiki/File:Close_packing.svg Acessado em 18 out. 2022.

dimensões é muito mais vasto e não é bem compreendido como o espaço tridimensional. Além disso, há um número limitado de resultados conhecidos sobre empacotamento de esferas em 4 dimensões, o que torna o problema ainda mais fascinante e instigante.

Uma abordagem para estudar o empacotamento de esferas em quatro dimensões é através do espaço D_4 , que é o espaço de todas as configurações possíveis de um número finito de esferas rígidas não sobrepostas em 4 dimensões.

O espaço D_4 é construído adicionando pontos ao espaço Euclidiano de 4 dimensões correspondentes aos centros das esferas em uma configuração viável de empacotamento.

Pensando no caso quadrimensional D_4 , encontra-se o empacotamento mais denso conhecido como Checkerboard lattic ⁷, de forma que o centro das esferas estão todos nos pontos (u_1, u_2, u_3, u_4) onde u_i é um valor inteiro com a característica de a soma dos u_i 's resultar em um número par, considerando (0,0,0,0) válido. Observe que (1,1,0,0) é válido, porém (1,0,0,0) é inválido, já que a soma das coordenadas resulta em um número ímpar.

Considerando uma esfera centrada em (0,0,0,0) vê-se, de acordo com [4], outras 24 esferas ao seu redor, centradas nos pontos $(\pm 1,\pm 1,0,0),(0,\pm 1,\pm 1,0),\cdots,(0,0,\pm 1,\pm 1)$, sendo 6 posições para o 0's e 4 posições para 1. Dados dois centros distintos das esferas em D_4 , temos que a distância mínima entre os centros é $\sqrt{2}$.

Tomando as informações supracitadas temos que os centros contidos em D_4 são (1,1,0,0), (1,0,1,0), ..., (0,0,1,1), (0,0,0,2), ..., (0,2,0,0), (2,0,0,0), onde sofrendo uma conversão de

⁷Tradução livre: Tabuleiro de damas.

cada centro distinto de D_4 , tem-se que são uma combinação inteira dos vetores. Para a construção da matriz geradora em D_4 usaremos (2,0,0,0), (1,1,0,0), (1,0,1,0) e (0,0,1,1).

Seja M a matriz geradora do D_4 ,

$$\mathbf{M} = \begin{vmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

isto significa que todas as simetrias em D_4 podem ser obtidas através de combinações lineares das linhas da matriz M. Em outras palavras, qualquer elemento do grupo D_4 pode ser escrito como uma combinação linear das linhas da matriz M.

O determinante do grupo D_4 , que é uma medida da relação entre o volume da célula unitária do empacotamento de esferas em D_4 e o volume da célula unitária do empacotamento cúbico centrado no corpo em quatro dimensões, pode ser calculado como o quadrado do determinante da matriz geradora M.

Deste modo, sabendo que M é uma matriz quadrada, temos que D_4 possui o determinante definido como: det $D_4 = (det M)^2 = 2^2 = 4$.

Pensando em calcular a densidade do D_4 é necessário descobrir o volume da esfera de raio ρ , sendo que esse valor é dado por:

$$V_n = K_n \rho^n, \tag{1.2}$$

onde K_n é alguma função numérica de n que ainda deve ser determinada.

De acordo com [4], temos dois casos, se n assumir valor par, tem-se

$$K_n = \frac{\frac{n}{2}}{\left(\frac{n}{2}\right)!},\tag{1.3}$$

e, para o caso ímpar

$$K_n = \frac{2^n \pi^{\frac{n-1}{2}} \left(\frac{n-1}{2}\right)!}{n!}.$$
 (1.4)

Uma particularidade da equação 1.2 é que quando n= 2 temos a equação da área da circunferência unitária e quando n= 3 obtemos o volume da esfera unitária.

Para conseguir chegar nos valores de 1.3 e 1.4, consideremos uma esfera de raio ρ , centrada na origem. O volume dessa esfera pode ser dividido em n camadas de espessura infinitesimal, onde cada camada é uma esfera de n-1 dimensões, deste modo:

$$V_n = K_n \rho^n = 2 \int_0^\rho K_{n-1} (\rho^2 - x^2)^{\frac{n-1}{2}} dx,$$

tomando $x = \rho cos(\theta), dx = -\rho sen(\theta)d\theta$. Então,

$$K_n = 2K_{n-1} \int_0^{\frac{\pi}{2}} sen^n(\theta) = 2K_{n-1} \frac{\Gamma(\frac{n+1}{2})\Gamma(\frac{1}{2})}{2\Gamma(\frac{n}{2}+1)},$$

isto é,

$$K_n = K_{n-1} \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n+2}{2}\right)} \pi^{\frac{1}{2}},$$

como $V_2 = \pi \rho^2$, temos $K_2 = \pi$. Deste modo achamos,

$$K_n = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)}.$$

Portanto,

$$V_n = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}\rho^n}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)}.$$

Quando n for par, assumiremos que n = 2m, deste modo,

$$V_n = \frac{\pi^{2m} \rho^{2m}}{\Gamma(m+1)},$$

sabe-se que $\Gamma(m+1) = m!$, assim,

$$V_{2m} = \frac{\pi^m \rho^{2m}}{m!}. (1.5)$$

Para o caso ímpar, n = 2m + 1, ou seja,

$$V_{2m+1} = \frac{\pi^m m! (2\rho)^{2m+1}}{(2m+1)!}.$$
(1.6)

Desta forma, sabendo que n=2m, se n é par e n=2m+1, se n é impar, substituiremos novamente em 1.5 e 1.6 de modo que $m=\frac{n}{2}$ e $m=\frac{n-1}{2}$. Assim, obtemos:

$$V_n = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}\rho^n}{(\frac{n}{2})!}$$
, se n é par,

$$V_n = \frac{\pi^{\frac{n-1}{2}} 2^n (\frac{n-1}{2})! \rho^n}{n!}$$
, se n é impar.

Seja a proporção do espaço que é ocupado pela esfera dada por:

$$\Delta = \frac{\text{volume de uma esfera}}{\det M}.$$
 (1.7)

Das equações 1.2 e 1.7 percebemos que a densidade de empacotamento será dado por

$$\Delta = \frac{V_n \rho^n}{\det M},\tag{1.8}$$

onde ρ é o raio da metade menor da distância entre os pontos da rede. Para o caso de D_4 , temos $V_4 = \frac{\pi^2}{2}$, $\rho = \frac{1}{\sqrt{2}}$ e det M = 2 então, $V_4 \rho^4 = \frac{\pi^2}{8}$, e consequentemente

$$\Delta = \frac{V_4 \rho^4}{2} = \frac{\pi^2}{16} \approx 0,6169.$$

Esta é a maior densidade conhecida em quarta dimensão. Foi demonstrada em 1872 por Korkine e Zolotareff [6] que essa é a maior densidade para o empacotamento na 4-dimensão.

Apesar de não ser um tema atual, poucos são os que sabem qual a importância de uma pesquisa sobre o empacotamento denso de bolas *n*-dimensionais. Entre algumas razões para o estudo, segundo Conway e Sloane [4], podemos citar:

- 1. É um problema interessante de geometria pura. De modo que os melhores empacotamentos possuem conexões, as vezes completamente surpreendentes, com outras áreas da matemática;
- 2. Possui aplicação direta no empacotamento de arranjos na teoria dos números;
- 3. Tem-se uma importante aplicação teórica e prática em empacotamento de bolas em problemas correlatos na área de comunicação digital;
- 4. Em duas ou três dimensões temos diversas aplicações. Por exemplo, empacotamento de bolas bidimensionais dentro de uma circunferência pode ser uma representação de fibra ótica. E no caso tridimensional encontra-se aplicação na biologia, química e física, além de encontrar em projetos de antenas, tomografias de raio-X e na análise estatística em esferas;
- 5. Em casos *n*-dimensionais pode-se utilizar nos cálculos numéricos das integrais, podendo considerar na superfície da esfera ou no seu interior.

CAPÍTULO 2

MODELOS DE OTIMIZAÇÃO PARA EMPACOTAMENTOS DE ESFERAS

O problema de empacotar objetos dentro de um outro objeto com dimensão fixa pode ser resolvido por meio de um algoritmo de otimização não linear. As soluções de problemas dessa natureza não são triviais e por isso já foram e ainda são criados diversos modelos/algoritmos voltados à busca dessas soluções.

Visto que alguns modelos de resolução não contemplam as restrições, o resultado é um tanto fictício, sendo notado diversas dificuldades na otimização. Por outro lado, os métodos de otimização que trabalham com as restrições conseguem encontrar soluções mais próximas do ideal possível.

Neste capítulo temos como objetivo maximizar a distância mínima entre as esferas idênticas tanto no âmbito bidimensional quanto no tridimensional, sem possuir sobreposição entre os itens e não ultrapassando a dimensão do contentor. Para isso, é necessário o uso das seguintes restrições: a primeira é sobre a sobreposição dos objetos e a segunda está vinculada à característica do objeto. Levando isso em consideração, temos que a formulação do problema do empacotamento é dado a seguir:

Maximizar distância mínima

Sujeito à - não sobreposição das esferas;

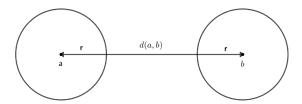
- impedir a sobreposição do objeto com o contentor.

Para obtermos a função objetivo do modelo, usaremos nas próximas seções, a distância Euclidiana entre dois pontos, isto é, considerando os pontos a = (a_1, \dots, a_n) e b = (b_1, \dots, b_n) , então a distância entre a e b é dada por:

$$d(a,b) = \sqrt{(a_1 - b_1)^2 + \dots + (a_n - b_n)^2}.$$

Uma ilustração da distância Euclidiana entre os centros de duas bolas pode ser vista na Figura 2.1.

Figura 2.1: Distância Euclidiana.



Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

2.1 Caso bidimensional

Nesta seção, nos baseando nos modelos criados por BIRGIN(2006) [2], iremos estudar as restrições de sobreposição e os modelos bidimensionais dos contentores que usaremos: quadrado, círculo e retângulo.

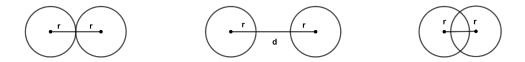
2.1.1 Restrições de não sobreposição

Pensando no âmbito bidimensional temos que considerar, na criação do modelo do método não-linear, a não sobreposição das circunferências de raios idênticos. Desta forma, considere $c_i = (x_i, y_i)$ e r_k , o centro das circunferências e o raio das circunferências, respectivamente, para cada i=1, ..., n.

Sabendo para que duas circunferências não se sobreponham, tem-se que a distância Euclidiana entre os centros das circunferências deve ser maior ou igual que a soma dos raios dessas circunferências. Logo,

$$\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \ge r_i + r_j \quad \forall i, j = 1, \dots, n \quad i \ne j.$$
 (2.1)

Figura 2.2: Circunferência na posição ideal, não se interceptando e sofrendo sobreposição, respectivamente



Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

Caso i = j, temos por consequência que $d(c_i, c_j) = 0$. Na Figura 2.2 vemos como ficará as circunferências ao cumprirem as restrições e, no último caso, quando não obedece a restrição (há sobreposição de circunferências).

Na equação de não sobreposição, dada em 2.1, não se considera a forma do objeto que os contém.

2.1.2 Restrições do contentor

Para as restrições do objeto que limitará os itens no seu interior é necessário considerar a sua forma geométrica, sendo necessário observar cada um deles separadamente.

Objeto quadrado

Considerando que o contentor é quadrado, tome L como sendo a medida do lado.

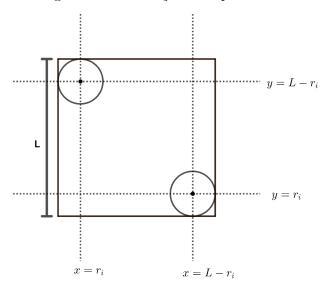
Para que não ocorra sobreposição entre as circunferências contidas no quadrado com o próprio, suponha a existência de quatro retas que interceptam o quadrado nas posições $x = r_i$, $x = L - r_i$, $y = r_i$ e $y = L - r_i$, como na Figura 2.3, de forma que essas retas delimitam a posição máxima que os centros das circunferências podem assumir. Logo,

temos que as restrições para este caso são dadas por:

Maximizar
$$\min \ d(c_i, c_j)$$

Sujeito a $r_i \leq x \leq L - r_i \quad \forall i = 1, \dots, n;$
 $r_i \leq y \leq L - r_i \quad \forall i = 1, \dots, n.$

Figura 2.3: Restrições no quadrado.



Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

Portanto o problema de empacotamento de uma circunferência em um quadrado é dado em 2.2:

Maximizar
$$\min \ d(c_i, c_j)$$
Sujeito a $\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \ge r_i + r_j \quad \forall i, j = 1, \dots, n \ i \ne j;$ (2.2)
$$r_i \le x_i \le L - r_i \quad \forall i = 1, \dots, n;$$

$$r_i < y_i < L - r_i \quad \forall i = 1, \dots, n;$$

Objeto circular

Considere C como o centro do objeto circular que conterá as circunferências menores e R o seu raio. De forma que R suporte n circunferências contidas em seu interior.

Considerando que não ocorre sobreposição entre os itens contidos com o que o contém, é necessário ser satisfeita a condição de que o raio do objeto (R) deve ser superior a distância Euclidiana do centro (C) do item aos centros das circunferências (c_k) com o raio (r_i) , ou seja, $d(C, c_i) + r_i \leq R$ como é visto na Figura 2.4.

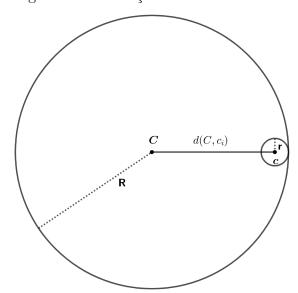


Figura 2.4: Restrições na circunferência.

Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

Deste modo, para se satisfazer isso temos que o modelo é dado por:

Maximizar min
$$d(c_i, c_j)$$

Sujeito a $d(C, c_i) + r_i \le R \ \forall i = 1, \dots, n;$
 $R \ge r_{max}.$

Assim o empacotamento no objeto circular se obtém com as restrições 2.3

Maximizar
$$\min \ d(c_i,c_j)$$
 Sujeito a $\sqrt{(x_i-x_j)^2+(y_i-y_j)^2} \geq r_i+r_j \quad \forall i,j=1,\cdots,n \ i\neq j;$ (2.3)
$$d(C,c_i)+r_i\leq R \ \forall i=1,\cdots,n;$$

$$R\geq r_{max};$$

$$R>0.$$

Objeto retangular

Considere a base como L e a altura H. Para o caso retangular vemos que é parecido com o quadrado, do mesmo modo que o outro, tomaremos quatro retas que intersectam o retângulo com o objetivo de não causar sobreposição entre a bola bidimensional com o objeto, sendo $x = r_i$, $x = L - r_i$, $y = r_i$ e $y = H - r_i$, como na Figura 2.5. Desse modo, obtemos as seguintes restrições:

Maximizar min
$$d(c_i, c_j)$$

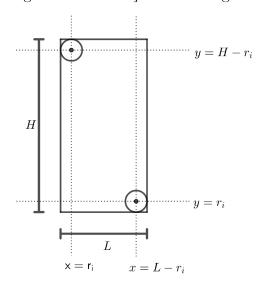
Sujeito a $r_i \le x_i \le L - r_i$ $\forall i = 1, \dots, n;$
 $r_i \le y_i \le H - r_i$ $\forall i = 1, \dots, n.$

Portanto o problema de empacotamento de uma circunferência em um retângulo é dado por 2.4:

Maximizar
$$\min \ d(c_i, c_j)$$
Sujeito a $\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \ge r_i + r_j \quad \forall i, j = 1, \dots, n \ i \ne j;$ (2.4)
$$r_i \le x_i \le L - r_i \quad \forall i = 1, \dots, n;$$

$$r_i \le y_i \le H - r_i \quad \forall i = 1, \dots, n.$$

Figura 2.5: Restrições no retângulo.



Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

2.2 Caso tridimensional

Baseando nos modelos citados por BINGIN(2006) [2], estudaremos nesta seção o critério de não sobreposição e os modelos tridimensionais dos objetos, sendo utilizados: cubo e cilindro.

2.2.1 Restrições de não sobreposição

De modo análogo ao caso \mathbb{R}^2 , precisamos considerar a não sobreposição entre si das esferas de raios idênticos. Deste modo tome $e_i = (x_i, y_i, z_i)$ como o centro das esferas e r_i o raio delas, para cada $i = 1, \dots, n$.

Considerando o encontro de duas esferas sem causar sobreposição, nota-se que a distância Euclidiana entre os centros das mesmas é superior ou igual a soma dos raios. Logo

$$\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2} \ge r_i + r_j \quad \forall i, j = 1, \dots, n$$

Vale lembrar que se i = j temos que $d(e_i, e_j) = 0$.

2.2.2 Restrições do contentor

Objeto cúbico

Considere o cubo de lado L como delimitante do espaço.

Pensando nas restrições, é necessário considerar que o limitante não possa sofrer sobreposição dos itens contidos em si, deste modo tomaremos seis retas que interceptam o cubo, nas posições $x=r_i$, $x=L-r_i$, $y=r_i$, $y=L-r_i$, $z=r_i$ e $z=L-r_i$, como na Figura 2.6, tornando essas retas os limitantes máximos que o centros das esferas possam assumir. Sendo assim as restrições para este caso são:

Maximizar
$$\min \ d(c_i, c_j)$$

Sujeito a $r_i \leq x_i \leq L - r_i \quad \forall i = 1, \dots, n;$
 $r_i \leq y_i \leq L - r_i \quad \forall i = 1, \dots, n;$
 $r_i \leq z_i \leq L - r_i \quad \forall i = 1, \dots, n.$

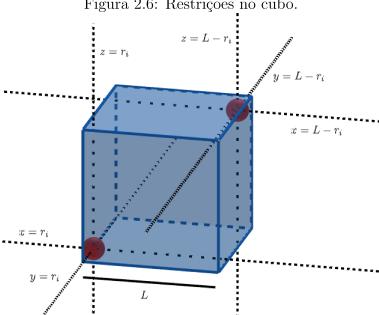


Figura 2.6: Restrições no cubo.

Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

Deste modo, temos que o empacotamento de esferas em um objeto cúbico é dado pelo modelo apresentado em 2.5.

Maximizar
$$\min \ d(c_i, c_j)$$
Sujeito a
$$\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2} \ge r_i + r_j \quad \forall i, j = 1, \dots, n;$$

$$r_i \le c_i^x \le L - r_i \quad \forall i = 1, \dots, n;$$

$$r_i \le c_i^y \le L - r_i \quad \forall i = 1, \dots, n;$$

$$r_i \le c_i^z \le L - r_i \quad \forall i = 1, \dots, n.$$

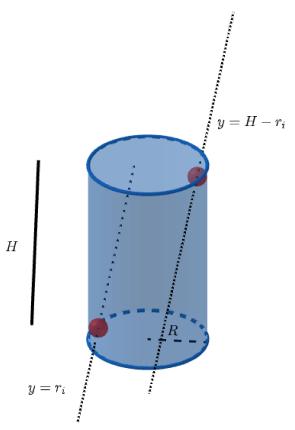
$$(2.5)$$

Objeto cilíndrico

Nesta seção pensaremos de modo parecido com a seção anterior sobre objeto circular. Levando isso em consideração, tome C como o centro da base do cilindro e R o seu raio. De modo análogo temos que o raio (R) do cilindro é maior que a distância Euclidiana do centro (C) com as circunferências de centro (c_i) somado ao raio (r_i) , isto é, $d(C, c_i) + r_i \leq R$.

É necessário ainda considerar duas retas que interceptem o recipiente impedindo a sobreposição entre ele e o que está contido dentro dele. Ou seja, logo, $x=r_i$ e $x=H-r_i$, onde H é a altura do cilindro, como mostrado na Figura 2.7.

Figura 2.7: Restrições no cilindro.



Fonte: Elaborado pelo autor com o software GeoGebra.

Levando essas hipóteses em consideração, o modelo será dado por:

Maximizar
$$\min \ d(c_i,c_j)$$
 Sujeito a
$$\sqrt{(x_i-x_j)^2+(y_i-y_j)^2+(z_i-z_j)^2} \geq r_i+r_j \quad \forall i,j=1,\cdots,n;$$

$$d(C,c_i)+r_i \leq R, \ \forall i=1,\cdots,n;$$

$$r_i \leq y_i \leq H-r_i, \quad \forall i=1,\cdots,n;$$

$$R \geq r_{max};$$

$$r>0.$$

O intuito era fazer a implementação dos modelos dados usando o software/algoritmo ALGENCAN, sendo este um código em Fortran para programação não linear, no qual utiliza o método Lagrangiano Aumentado, onde incorpora uma técnica denominada Newton Truncado e o conceito de gradiente projetado. Sendo parte do Projeto Tango [11] cujo

foi desenvolvido no Departamento de Matemática Aplicada da Universidade Estadual de Campinas e no Departamento de Ciência da Computação da Universidade de São Paulo pelos professores José Mario Martínez e Ernesto Julian Goldberg Birgin.

O empacotamento de esferas é um problema clássico e desafiador que tem sido objeto de estudo de muitos matemáticos ao longo dos anos. Embora o problema de empacotamento de esferas tenha sido resolvido para dimensões baixas, como \mathbb{R}^2 e \mathbb{R}^3 , a pesquisa em empacotamento de esferas nesses âmbitos ainda está em andamento e é incompleta.

No caso bidimensional, o problema do empacotamento de círculos em um plano foi resolvido completamente. A solução ótima é o arranjo hexagonal compacto, que tem uma densidade máxima de empacotamento de aproximadamente 0,9069. No entanto, ainda há muitas questões abertas relacionadas ao empacotamento de círculos em superfícies curvas ou em espaços tridimensionais, que requerem mais pesquisa para serem resolvidas.

No caso tridimensional, o problema do empacotamento de esferas é significativamente mais difícil do que o empacotamento de círculos em um plano, mas ainda é considerado um problema solucionável. A solução ótima é conhecida como empacotamento cúbico, que tem uma densidade máxima de empacotamento de aproximadamente 0,7405. No entanto, o problema do empacotamento de esferas em espaços de dimensões superiores continua sendo um desafio significativo.

Em conclusão, embora tenham sido feitos avanços significativos na resolução do problema de empacotamento de esferas em dimensões baixas, ainda há muito a ser explorado em termos de empacotamento de esferas em espaços de dimensões mais altas. A pesquisa nessa área continua sendo ativa e importante para muitas aplicações em matemática, física e engenharia.

CONSIDERAÇÕES

Neste trabalho, alguns dos principais objetivos foram estudar e sintetizar informações sobre o empacotamento de esferas em diferentes contentores, além de, expor esses conhecimentos da maneira mais organizada e didática que fosse possível oferecer uma leitura agradável, dinâmica e compreensível até mesmo para leigos.

Posteriormente, iríamos implementar os modelos dos problemas de otimização com intuito de maximizar a distância mínima entre as esferas usando o algoritmo ALGEN-CAN, mas isso requeria conhecimentos do algoritmo e da linguagem de programação, a qual dedicamos o máximo de tempo possível pra aprender, porém, a limitação de tempo impossibilitou essa implementação.

O presente trabalho contribuiu para a formação acadêmica do discente por possibilitar o estudo de empacotamento de esferas, conteúdo esse não ofertado na graduação, e conhecer modelos de otimização não linear.

Durante a escrita e estudo do trabalho, procuramos trazer as notações de uma maneira mais natural para os leitores e que estejam de acordo com as referências utilizadas.

Esperamos que este trabalho seja usado por alunos de graduação como uma referência para estudos voltados para a empacotamentos de esferas, de forma que ao pesquisar sobre o assunto, possa fazer a complementação deste e realizar os cálculos dos modelos dados no algoritmo ALGENCAN.

REFERÊNCIAS

- [1] BARDELLA, Fernando. Crystalwalk: um software didático-interativo para síntese e visualização de estruturas cristalinas. 2016. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.
- [2] BIRGIN, E. G.; SOBRAL, F. N. C. Minimizing the object dimensions in circle and sphere packing problems. Computers & Operations Research, v. 35, n. 7, p. 2357-2375, 2008. https://doi.org/10.1016/j.cor.2006.11.002.
- [3] CHANG, H. C.; WANG, L. C. A simple proof of thue's theorem on circle packing. arXiv preprint arXiv:1009.4322, 2010.
- [4] CONWAY, J. H.; SLOANE, N. J. A. Sphere packings, lattices and groups. Springer Science & Business Media, 2013.
- [5] CROFT, H. T., FALCONER, K. J. and GUY, R. K.: Unsolved Problems in Geometry, Springer Verlag, Berlin, 1991, pp. 107-111. https://doi.org/10.1007/978-1-4612-0963-8_5.
- [6] KORKINE, A.; ZOLOTAREFF, G. Sur les formes quadratiques positives quaternaires. Mathematische Annalen, v. 5, n. 4, p. 581-583, 1872. https://doi.org/10.1007/BF01442912.
- [7] MELISSEN, H. Densest Packing of Six Equal Circles in a Square. Elemente der Mathematik, v. 49, n. 1, p. 27-31, 1994.

- [8] O'CONNOR, J. J., ROBERTSON, E. F and VIAZOVSKA, M. S.. MacTutor History of Mathematics archive. 2019. Disponível em: https://mathshistory.st-andrews.ac.uk/Biographies/Viazovska/. Acesso em: 12 set. 2022.
- [9] SCHAER, J. The densest packing of 9 circles in a square. Canadian Mathematical Bulletin, v. 8, n. 3, p. 273-277, 1965. https://doi.org/10.4153/CMB-1965-018-9.
- [10] SEARA DA CIÊNCIA. **Problemas** Famosos da Matemática: Α conjectura de Kepler. 2019. Disponível em:https://seara.ufc.br/pt/ secoes-especiais-de-ciencia-e-tecnologia/secoes-especiais-matematica/ problemas-famosos-da-matematica/. Acesso em: 23 de novembro de 2022.
- [11] MARTÍNEZ J. M., BIRGIN E. G. **TANGO** (Trustable Algorithms for Non-linear General Optimization. 2005. Disponível em: https://www.ime.usp.br/~egbirgin/tango/. Disponível em: 24 jan. 2023.
- [12] VIANA, M. Viana fala sobre empacotamento de esferas em coluna na Folha. 2022. Disponível em: https://impa.br/noticias/viana-fala-sobre-empacotamento-de-esferas-na-folha/. Acesso em: 29 ago. 2022.
- [13] VIAZOVSKA, M. S. The sphere packing problem in dimension 8. Annals of Mathematics, p. 991-1015, 2017. https://doi.org/10.4007/annals.2017.185.3.
 7.
- [14] VAN VLACK, L. H. **Princípios de ciência dos materiais**. São Paulo: Blucher, 1970. p.51-66.
- [15] WENGERODT, G. Die dichteste Packung von 14 Kreisen in einem Quadrat. Beiträge zur Algebra und Geometrie= Contributions to algebra and geometry, v. 24, p. 25-46, 1987.
- [16] WENGERODT, G. Die dichteste Packung von 16 Kreisen in einem Quadrat. Beiträge zur Algebra und Geometrie= Contributions to algebra and geometry, v. 15, p. 173-190, 1983.

- [17] WENGERODT, G. Die dichteste Packung von 25 Kreisen in einem Quadrat. In: Annales Universitatis Scientiarum Budapestinensis de Rolando E. Nominatae, Sectio Mathematica, v. 30, pp. 3-15. 1958.
- [18] WENGERODT, G.; KIRCHNER, K. Die dichteste Packung von 36 Kreisen in einem Quadrat. Beiträge zur Algebra und Geometrie= Contributions to algebra and geometry, v. 25, p. 147-160, 1987.