

PREENCHIMENTO ELIPSOIDAL NA CONFIGURAÇÃO DE MÁQUINAS DE RAIOS GAMA: UMA VERSÃO CONTÍNUA

Roberto Quirino do Nascimento
UFPB

Cidade Universitária – João Pessoa – PB
e-mail: quirino@de.ufpb.br

Nelson Maculan
COPPE – UFRJ

Cidade Universitária-Centro de Tecnologia
e-mail: maculan@cos.ufrj.br

Ana Flávia U. S. Macambira
COPPE-UFRJ

Cidade Universitária-Centro de Tecnologia
e-mail: anauzed@cos.ufrj.br

RESUMO

O problema de preenchimento de elipsoidal consiste em preencher um elipsóide de volume especificado com esferas de volumes pré-determinados, cuja aplicação é na automatização do planejamento para o tratamento de tumores através da radiocirurgia estereotáxica (radiocirurgia “Gamma Knife”). As abordagens existentes para resolver este tipo de problema são baseadas em técnicas de otimização discreta. O objetivo deste trabalho é apresentar uma metodologia de solução usando programação geométrica signomial. Após formulado, o problema é resolvido usando um método de pontos interiores primal dual que resolve uma seqüência de problemas de programação geométrica posinomial cujo limite dessa seqüência é uma solução para o problema estudado. Uma implementação computacional foi realizada e alguns resultados são apresentados.

Palavras-chave: Programação Matemática, Gamma Knife, Recobrimento Elipsoidal.

ABSTRACT

In this problem we want to cover an ellipsoid using spheres that have their volumes already known. This problem takes part on the application of planning a treatment of brain tumor using stereotactic radiation therapy. The approaches existing in literature are based on Combinatorial Optimization. In this work we focus on the solution of a signomial geometric problem by a continuous approach. A primal-dual interior point method that solves a sequence of signomial geometric problems is used. The limit of this sequence is a solution to this problem. The computational study was made and some results are presented.

Keywords: Mathematical Programming, Gamma Knife, Ellipsoidal Covering.

1. Introdução

Este trabalho apresenta uma proposta de solução para o problema de preenchimento elipsoidal através de esferas de raios previamente estabelecidos. O preenchimento elipsoidal consiste em preencher um elipsóide cujas coordenadas do centro são (x_0, y_0, z_0) , os raios são dados por R_x, R_y, R_z com esferas de raios $r \in \{r_0, r_1, r_2, \dots, r_k\}$, $r < \min \{R_x, R_y, R_z\}$. As abordagens existentes para resolver esse tipo de problema são baseadas em técnicas de otimização discreta e para o caso de esferas ao invés de elipsóides Sutou(2002), Liberti(2009). O objetivo deste trabalho é apresentar uma metodologia de solução usando programação geométrica considerando os raios das esferas pertencentes ao intervalo $[r_0, r_k]$, o que chamamos de versão contínua ou relaxação contínua. A versão contínua do problema de preenchimento elipsoidal pode ser modelada como um problema de programação geométrica signomial, ver Duffin & Zener (1967). Tal problema não é convexo podendo ter diversas soluções locais. Várias abordagens para a solução dessa classe de problema foram propostas e dentre elas escolhemos uma técnica chamada condensação. Esta técnica permite aproximar problemas signomiais por problemas de programação geométrica signomial, que por sua vez podem ser resolvidos sequencialmente com técnicas de otimização convexa. Uma implementação computacional foi realizada e alguns resultados são apresentados.

Este problema possui aplicação no tratamento de tumores cerebrais, Liberti(2009). A radiocirurgia estereotáxica é um novo tratamento que “bombardeia” o tumor com raios que chegam até ele com uma forma aproximada de esfera Sutou (2002). Desta maneira, esferas de diferentes raios chegam até o alvo. Portanto, o preenchimento elipsoidal através de esferas de raios previamente estabelecidos é parte do planejamento do tratamento de um tumor cerebral. É parte porque o problema maior ainda requer que se saiba a dosagem de radiação a ser enviada em cada “bombardeio”. Logo, para planejar um tratamento, precisamos determinar a quantidade de esferas, a posição de cada esfera (cada interseção entre esferas significa uma dosagem de radiação em dobro, de forma que deseja-se o mínimo possível de interseções para que o tumor seja “bombardeado” com uma dose idealmente homogênea de radiação), e a dosagem de cada “bombardeio”. Atualmente, o planejamento de um tratamento de tumor cerebral exige tempo, conhecimento e muita prática. Esta é a razão pela qual deseja-se automatizar esse planejamento. Este trabalho está dividido da seguinte forma: na seção 2, modelamos o problema detalhando-se as restrições e a função objetivo. A seção 3 apresenta os fundamentos de programação geométrica Posinomial e Signomial, a técnica de condensação e um método de pontos interiores primal-dual para resolver os problemas de programação geométrica posinomial resultantes da condensação. A seção 4 apresenta o problema de preenchimento elipsoidal como um problema de programação geométrica. A seção 5 traz os testes computacionais. As conclusões são apresentadas na seção 6.

2. Modelagem do problema

Nesta seção, detalhamos o problema e apresentamos a sua modelagem.

São variáveis do problema $w^i = (w_x^i, w_y^i, w_z^i)$ e r_i , respectivamente, o centro e o raio da i -ésima esfera que deve preencher o elipsóide $S = \{w \in R^3; (w - c)^t R^{-2}(w - c) \leq 1\}$, onde c é o centro da elipsóide e R é uma matriz cuja diagonal é composta pelo inverso do quadrado dos raios do elipsóide.

Um segundo fato a ser considerado é que partes de algumas esferas possam exceder os limites do elipsóide até uma medida ε . Este fato gera o que chamamos de Elipsóide de Segurança $S_1 = \{w \in R^3; (w - c)^t R^{-2}(w - c) \leq 1\}$, $S \subset S_1$, onde $\bar{R}_x = R_x + \varepsilon$, $\bar{R}_y = R_y + \varepsilon$, $\bar{R}_z = R_z + \varepsilon$. Outra restrição do modelo diz respeito à interseção entre as esferas, para que não hajam esferas superpostas.

A partir do exposto acima, temos a seguinte formulação:

$$\text{Maximize} \quad \sum_{i=0}^n \frac{4}{3} \pi r_i^3$$

Sujeito a :

$$\frac{(w_x^i - c_x)^2}{(R_x + \varepsilon - r_i)^2} + \frac{(w_y^i - c_y)^2}{(R_y + \varepsilon - r_i)^2} + \frac{(w_z^i - c_z)^2}{(R_z + \varepsilon - r_i)^2} \leq 1 \quad (1)$$

$$i = 0, \dots, n$$

$$(w_x^i - w_x^j)^2 + (w_y^i - w_y^j)^2 + (w_z^i - w_z^j)^2 \geq \gamma(r_i + r_j)^2 \quad (2)$$

$$i, j = 0, \dots, n \quad i \neq j$$

$$r_i \in \{r_0 < r_1 < r_2 < \dots < r_k\} \quad (3)$$

A restrição (1) garante que cada esfera permanecerá dentro do elipsóide de segurança.

A restrição (2) pré-estabelece a interseção entre as esferas.

A restrição (3) configura o problema de preenchimento por esferas como um problema de otimização não linear discreta. No presente trabalho, consideramos a versão contínua, com os raios pertencentes ao intervalo $[r_0, r_k]$.

A quantidade total de esferas será fixada a priori e denominaremos por n .

O volume de cada esfera é dado por:

$$V_i = \frac{4}{3} \pi r_i^3 .$$

3. Programação Geométrica

Nesta seção apresentamos a Programação Geométrica (PG), uma classe de problemas de otimização cujas aplicações são vastas em problemas de engenharia. É denominada desta forma devido ao relacionamento existente entre as médias geométrica e aritmética, as quais são fundamentais na elaboração da teoria de dualidade para este tipo de problema. Desenvolvida inicialmente por Duffin & Zener(1967) na década de 60, foi estudada recentemente por vários autores na tentativa de construir algoritmos de pontos interiores que fossem eficientes ao resolver este tipo de problema, ver Kortanek(1992), Kortanek(1995), Nascimento(2000), Yang(1997). No entanto, o problema que tem despertado grande interesse pelo número crescente de aplicações tem sido o problema de PG signomial que apresentaremos a seguir. Infelizmente a teoria desenvolvida por Duffin & Zener (1967) não se aplica em sua totalidade para resolver estes problemas. Em Beightler(1976) encontramos uma técnica denominada condensação que consiste em aproximar uma soma de posinômios por um único termo posinomial. A maior crítica a esta abordagem é o fato de não estar garantido que uma seqüência de soluções dos problemas posinomiais aproximados convirja para uma solução global do problema original. A experiência computacional com esta técnica é apresentada em Yang(1997) onde são resolvidos vários problemas existentes na literatura. Para tentar determinar uma solução global para o problema de

PG signomial, técnicas de otimização global estão sendo desenvolvidas ultimamente, porém estas técnicas consistem basicamente em planos de corte e linearização.

3.1 O problema primal de programação geométrica posinomial

O problema primal de programação geométrica posinomial é um problema da forma:

Minimize $g_0(t)$

Sujeito a:

$$g_k(t) \leq 1 \quad k = 1, \dots, p \quad (4)$$

$$t > 0 \quad (5)$$

onde

$$g_k(t) = \sum_{i \in J[k]} c_i \prod_{j=1}^m t_j^{a_{ij}} \quad (6)$$

$J[k] = \{m_k, m_k + 1, m_k + 2, \dots, n_k\}$ $k = 1, \dots, p$ $m_0 = 1, m_1 = n_0 + 1, \dots, m_p = n$, as constantes c_i são positivas e a_{ij} são números reais.

Problemas de programação geométrica em geral não são problemas convexos, pois a função $g(t) = t^{1/2}$ não é uma função convexa. No entanto, como $t > 0$ a substituição de variáveis $t = e^y$ transforma um problema de programação geométrica em um problema convexo.

3.2 O problema dual de programação geométrica posinomial

Associado ao problema primal de programação geométrica temos o seu dual, dado por:

$$\text{Maximize } v(\delta, \lambda) = \prod_{k=1}^p \left\{ \lambda_k^{\lambda_k} \prod_{i \in J[k]} \left(\frac{c_i}{\delta_i} \right)^{\delta_i} \right\} \quad (7)$$

$$\text{Sujeito a: } \lambda_0 = 1 \quad (8)$$

$$\sum_{i=1}^m a_{ij} \delta_i = 0 \quad j = 1, \dots, m \quad (9)$$

$$\delta_i \geq 0 \quad (10)$$

onde $\lambda^k = \sum_{i \in J[k]} \delta_i$.

Um fato importante é que a função dual v não é uma função côncava no entanto a função:

$$f(\delta) = \ln(v(\delta)) = \sum_{i=1}^n \{ \delta_i \ln(c_i) - \delta_i \ln \delta_i \} + \sum_{k=1}^p \left(\sum_{i \in J[k]} \delta_i \right) \ln \left(\sum_{i \in J[k]} \delta_i \right), \quad (11)$$

satisfaz esta propriedade, sendo a mesma duas vezes diferenciável com matriz Hessiana dada por:

$$\nabla^2 f(\delta) = \begin{bmatrix} H_0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & H_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & H_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & H_p \end{bmatrix} \quad (12)$$

onde

$$H_0 = \begin{bmatrix} -\delta_1^{-1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\delta_1^{-1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -\delta_2^{-1} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\delta_{n_0}^{-1} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad H_k = \begin{bmatrix} (\lambda_k^{-1} - \delta_{m_k}^{-1}) & \lambda_k^{-1} & \dots & \lambda_k^{-1} \\ \lambda_k^{-1} & (\lambda_k^{-1} - \delta_{m_k+1}^{-1}) & \dots & \lambda_k^{-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_k^{-1} & \lambda_k^{-1} & \dots & (\lambda_k^{-1} - \delta_{n_k}^{-1}) \end{bmatrix}$$

$$k = 1, \dots, p.$$

O relacionamento entre as variáveis primais e duais de um problema de PG é dado por:

$$\delta_i g_k(t) = \lambda_k c_i \prod_{j=1}^m t_j^{a_{ij}} \quad i \in J[k] \tag{13}$$

Definição 1. Um problema de programação geométrica primal (PPGP) é dito consistente, factível ou viável se existe $t \in R^m$, que satisfaça as equações (4) e (5), se $g_k(t) < 1, k = 1, \dots, p$ então o problema (PPGP) é dito superconsistente ou estritamente viável. Duffin & Zener (1967).

Um problema de programação geométrica dual (PPGD) é dito consistente, factível ou viável se existe $\delta \in R^n, \delta_i \geq 0$ que satisfaça (8), (9) e (10).

Definição 2. Um problema de programação geométrica é dito canônico se o seu problema dual possuir uma solução viável estritamente positiva, isto é, existe $\delta \in R^n, \delta_i > 0$ que satisfaça as equações: (8) e (9). Duffin & Zener (1967).

Definição 3 Definimos o grau de dificuldade (d) de um problema de programação geométrica como:

$$d = n - (m + 1) \tag{14}$$

3.3 O problema primal de programação geométrica signomial

O problema primal de programação geométrica signomial é uma generalização do problema posinomial e pode ser escrito na seguinte forma:

$$\begin{aligned} & \text{Minimize } g_0(t) \\ & \text{Sujeito à:} \\ & g_k(t) \leq 1 \quad k = 1, \dots, p \\ & t > 0 \end{aligned}$$

onde

$$g_k(t) = \sum_{i \in J[k]} \sigma_i c_i \prod_{j=1}^m t_j^{a_{ij}} \tag{15}$$

$J[k] = \{m_k, m_k + 1, m_k + 2, \dots, n_k\} \quad k = 1, \dots, p \quad m_0 = 1, m_1 = n_0 + 1, \dots, m_p = n$, as constantes c_i são positivas e a_{ij} são números reais e $\sigma_i = \pm 1$.

Devido ao fato da existência de termos negativos, o problema acima não pode ser convertido para um problema convexo usando-se transformações de variáveis. Desta forma os problemas signomiais são problemas não convexos e qualquer ponto estacionário ou que satisfaça as condições de Karush-Kuhn-Tucker pode ser apenas um mínimo local ou apenas um ponto de

sela. Tal fato levou inicialmente os pesquisadores a tentarem resolver este tipo de problema usando programação geométrica seqüencial, que consiste em resolver problemas signomiais através de uma seqüência de problemas de programação geométrica posinomial. Esta metodologia denomina-se condensação. Atualmente outra metodologia que tem sido explorada são as técnicas de otimização globais ver Peiping(2006), Peiping(2005), Peiping(2004), Rijckaert(1978) por exemplo. Neste trabalho utilizamos a condensação, técnica mais tradicional para a resolução de problemas signomiais.

3.3.1 Condensação em programação geométrica signomial

Condensação é uma técnica que consiste em aproximar termos com vários posinomios isto é, termos da forma: $\sum_{i \in J[k]} c_i \prod_{j=1}^m t_j^{a_{ij}}$ por um único termo posinomial da forma $c_i \prod_{j=1}^m t_j^{a_{ij}}$. Para tanto, faz-se uso da seguinte desigualdade:

$$\sum_{i \in J[k]} c_i \prod_{j=1}^m t_j^{a_{ij}} \geq \prod_{i \in J[K]} \left(\frac{c_i \prod_{j=1}^m t_j^{a_{ij}}}{\omega_i} \right)^{\omega_i} \quad \sum_{i \in J[K]} \omega_i = 1 \tag{16}$$

a qual é uma generalização da desigualdade existente entre a média aritmética e a média geométrica, valendo a igualdade se

$$\omega_i = \frac{c_i \prod_{j=1}^m t_j^{a_{ij}}}{\sum_{i \in J[k]} c_i \prod_{j=1}^m t_j^{a_{ij}}} \tag{17}$$

Desigualdades desse tipo são chamadas de desigualdades geométricas e são a base de toda a teoria de programação geométrica. A partir delas, Duffin (1967) construiu a teoria de dualidade para programação geométrica.

Podemos escrever uma restrição signomial da seguinte forma:

$$g_k(t) = P_k(t) - Q_k(t) \tag{18}$$

onde P_k e Q_k são termos posinomiais e usando a desigualdade dada em (16) podemos reescrever a restrição: $g_k(t) \leq 1$ como:

$$\frac{P_k(t)}{1 + Q_k(t)} \leq \frac{P_k(t)}{s_i} \quad \text{onde } s_i = \prod_{i \in J[K]} \left(\frac{u_i(t)}{\omega_i} \right)^{\omega_i} \tag{19}$$

e $\omega_i = \frac{u_i(t')}{1 + Q_k(t')}$ t' é chamado ponto de referência. Sendo s_i um único termo posinomial, temos que a restrição $g_k(t) \leq 1$ com g_k dada na eq. (15) é agora uma restrição posinomial.

3.4 Um Método de Pontos Interiores para programação geométrica Posinomial

Com o objetivo de resolver o problema dual de programação geométrica, o qual pode ser visto como um problema de programação convexa com restrições lineares, devemos resolver o seguinte sistema de equações não lineares:

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ \nabla f(x) - A^t y - s &= 0 && \text{KKT} - \mu \\ Xs &= \mu e \end{aligned}$$

onde $X = \text{diag}(x_1, \dots, x_n)$ $x > 0, s > 0, y - \text{livre}$, o parâmetro μ é positivo e $\nabla f(x)$ é o gradiente do logaritmo da função objetivo dual do problema de programação geométrica, a qual é duas vezes diferenciável porém é semidefinida negativa.

O sistema acima é bastante conhecido na literatura (ver Peiping (2005)) como uma perturbação das condições de otimalidade de primeira ordem.

Hipótese: O sistema KKT- μ possui uma única solução para cada $\mu > 0$

O algoritmo aqui desenvolvido é um algoritmo do tipo penalidade/barreira cuja função de mérito será dada por:

$$\begin{aligned} \varphi_\mu(x, y, s) &= x^t s - \ln\left(\frac{\lambda}{\lambda + \|Ax - b\|^2}\right) - \ln\left(\frac{\lambda}{\lambda + \|\nabla f(x) - A^t y - s\|^2}\right) \\ &- \ln\left(\frac{\lambda}{\lambda + \|Xs - \mu_0 e\|^2}\right) - \mu \sum_{i=1}^n \ln(x_i s_i) \end{aligned}$$

onde o parâmetro λ será chamado parâmetro de penalidade e o parâmetro μ será chamado parâmetro de barreira.

Resultado: Se $\mu < 1$ a função φ satisfaz a seguinte desigualdade:

$$\varphi_\mu(x, y, s) \geq n\mu(1 - \ln \mu)$$

O algoritmo consiste em resolver aproximadamente o seguinte problema:

$$\begin{aligned} \text{P1} \quad & \text{Minimize } \varphi_\mu(x, y, s) \\ & x > 0, s > 0, y - \text{livre} \end{aligned}$$

para cada $\mu > 0$, fazendo λ tender a zero teremos uma solução para o problema dual de programação geométrica.

O algoritmo 1 dado a seguir resolve o problema de programação geométrica posinomial:

Algoritmo 1

Dados $x_0 > 0, s_0 > 0, y_0 - \text{livre}$

$$\lambda_0, \mu_0 > 0 \quad 0 < \delta < 1, 0 < \lambda < 1, 0 < \beta < 1, \sigma > 0$$

Enquanto $\max\{x^k s^k, \|Ax^k - b\|, \|\nabla f(x^k) - A^t y^k - s^k\|\} > \varepsilon$

Resolva o seguinte sistema de equações lineares:

$$A\Delta x = -(Ax - b)$$

$$\nabla^2 f(x)\Delta x - A^t \Delta y - \Delta s = -(\nabla f(x) - A^t y - s)$$

$$S\Delta x + X\Delta s = -(Xs - \mu_0 e)$$

Determine α_k tal que $\varphi_{\mu^k}(x^k + \alpha_k \Delta x^k, y^k + \alpha_k \Delta y^k, s^k + \alpha_k \Delta s^k) \leq \beta \varphi_{\mu^k}(x^k, y^k, s^k)$

Faça :

$$\lambda^{k+1} = x^k + \delta \alpha_k \Delta x^k$$

$$y^{k+1} = y^k + \delta \alpha_k \Delta y^k$$

$$s^{k+1} = x^k + \delta \alpha_k \Delta s^k$$

$$\mu^{k+1} = \sigma \frac{x^{k+1} s^{k+1}}{n}$$

$$k = k + 1$$

Fim do enquanto

Proposição 1: Se $\Delta w = (\Delta x, \Delta y, \Delta s)$ é a única solução do sistema:

$$A \Delta x = -(Ax - b)$$

$$\nabla^2 f(x) \Delta x - A^t \Delta y - \Delta s = -(\nabla f(x) - A^t y - s)$$

$$S \Delta x + X \Delta s = -(Xs - \mu_0 e)$$

então

$$\begin{aligned} \nabla \varphi_{\mu_0}(x, y, s)^t \Delta w \leq & -(1 - \sigma) \left(1 - \frac{\mu_0}{x^t s} \right) x^t s - 2 \left(\frac{\mu}{\mu + \|Ax - b\|^2} \right) \|Ax - b\|^2 \\ & - 2 \left(\frac{\mu}{\mu + \|\nabla f(x) - A^t y - s\|^2} \right) \|\nabla f(x) - A^t y - s\|^2 \end{aligned}$$

A proposição 1 nos dá uma direção de descida para a função de mérito isto nos permite utilizar um método de busca linear inexata para resolver aproximadamente o problema P1.

3.5 Um Método de pontos Interiores para programação geométrica Signomial baseado em condensação

Abaixo, apresentamos um método de pontos interiores para resolver o problema de programação geométrica signomial.

Algoritmo 2

Dado um ponto $t^0 > 0$ e $k=0$

Enquanto $\|t^k - t^0\| > \varepsilon$

Passo 1 Condense as restrições signomiais usando t_0 como um ponto de referência

Passo 2 Use o **algoritmo 1** e resolva o problema de Prog. Geom. Posinomial encontrado no passo 1, sendo t^k sua solução.

Passo 3 faça $t^0 = t^k$

$k = k + 1$

Fim de enquanto

4. O problema programação geométrica associado ao problema de preenchimento elipsoidal

Seja o seguinte problema de preenchimento elipsoidal:

Minimize $\frac{4}{3}\pi r^{-3}$

Sujeito a:

$$\frac{(w_x - c_x)^2}{(R_x - r_i - \epsilon)^2} + \frac{(w_y - c_y)^2}{(R_y - r_i - \epsilon)^2} + \frac{(w_z - c_z)^2}{(R_z - r_i - \epsilon)^2} \leq 1 \quad (20)$$

$$(w_i - w_j)^2 \geq \gamma(r_i - r_j)^2 \quad (21)$$

$$r_0 \leq r_i \leq r_j \quad (22)$$

Para associarmos a primeira restrição (20) a um problema de programação geométrica, fazemos:

$$\frac{w_x^2}{(R_x - r_i - \epsilon)^2} + \frac{w_y^2}{(R_y - r_i - \epsilon)^2} + \frac{w_z^2}{(R_z - r_i - \epsilon)^2} + \frac{c_x^2}{(R_x - r_i - \epsilon)^2} + \frac{c_y^2}{(R_y - r_i - \epsilon)^2} + \frac{c_z^2}{(R_z - r_i - \epsilon)^2} - \frac{2w_x c_x}{(R_x - r_i - \epsilon)^2} - \frac{2w_y c_y}{(R_y - r_i - \epsilon)^2} - \frac{2w_z c_z}{(R_z - r_i - \epsilon)^2} \leq 1$$

Reescrevendo a segunda restrição (21):

$$(w_x^i)^2 + (w_y^i)^2 + (w_z^i)^2 + (w_x^j)^2 + (w_y^j)^2 + (w_z^j)^2 - 2w_x^i w_x^j - 2w_y^i w_y^j - 2w_z^i w_z^j \geq \gamma(r_i + r_j)$$

temos:

$$\gamma(r_i + r_j) + 2w_x^i w_x^j + 2w_y^i w_y^j + 2w_z^i w_z^j - (w_x^i)^2 - (w_y^i)^2 - (w_z^i)^2 - (w_x^j)^2 - (w_y^j)^2 - (w_z^j)^2 \leq 0$$

Feito isto, apresentamos abaixo o problema de programação geométrica associado ao problema de preenchimento elipsoidal.

Minimize $\frac{4}{3}\pi r^{-3}$

Sujeito a :

$$\frac{(w_x^i)^2}{(R_x - r_i - \epsilon)^2} + \frac{(w_y^i)^2}{(R_y - r_i - \epsilon)^2} + \frac{(w_z^i)^2}{(R_z - r_i - \epsilon)^2} + \frac{c_x^2}{(R_x - r_i - \epsilon)^2} + \frac{c_y^2}{(R_y - r_i - \epsilon)^2} + \frac{c_z^2}{(R_z - r_i - \epsilon)^2} - \frac{2w_x^i c_x}{(R_x - r_i - \epsilon)^2} - \frac{2w_y^i c_y}{(R_y - r_i - \epsilon)^2} - \frac{2w_z^i c_z}{(R_z - r_i - \epsilon)^2} \leq 1 \quad (23)$$

$$\gamma(r_i + r_j) + 2w_x^i w_x^j + 2w_y^i w_y^j + 2w_z^i w_z^j - (w_x^i)^2 - (w_y^i)^2 - (w_z^i)^2 - (w_x^j)^2 - (w_y^j)^2 - (w_z^j)^2 \leq 0 \quad (24)$$

$$r_0 \leq r_i \leq r_j$$

5. Experimentos Computacionais

O programa foi feito em Matlab e foram testadas 3 instâncias com um número fixo de esferas. Neste trabalho os centros e os raios das esferas são variáveis do modelo e, além disso, os raios são variáveis contínuas pertencentes ao intervalo $[r_0, r_k]$. Como na resolução do problema posinomial foi utilizado um método primal-dual, a cada iteração temos a informação do valor das funções objetivo primal e dual, portanto ao chegar no ótimo local, temos as duas informações. O gap entre os valores das funções objetivo dos problemas primal e dual nos diz se estamos próximos a um mínimo local (quando o gap é pequeno). Os resultados apresentados são iniciais e caracterizam um teste tanto para o algoritmo quanto para o modelo, no entanto a quantidade de testes ainda é pouca.

Primeiro teste: elipsóide de raios $R_x = 14 R_y = 12 R_z = 10$

Objetivo dual = 0.001371742112494

Objetivo primal = 0.001406289601735

Total de esferas = 7

	Coord x	Coord y	Coord z	Tamanho do raio
1	23.322663465496824	21.920102836950754	18.207690115957575	8.99999999998258
2	16.523172847421019	17.781009723777810	14.136681183443699	6.436902595005517
3	16.447903385429953	17.888238896822951	21.982039621440997	6.188959591946500
4	16.390898863214137	11.609109622974946	18.277600088625892	6.391872015921381
5	14.408307406958976	23.803588569944573	18.233522916095716	6.662730438624815
6	10.091671635108847	16.820640296137640	17.190367795643702	7.657181578094884
7	22.830361044653738	13.624722662126382	16.029494518458886	5.739914126180065

Segundo teste: elipsóide de raios $R_x = 10 R_y = 10 R_z = 10$ (instância extraída de Liberti (2009)).

objetivo_dual = 0.001371742152828

objetivo_primal = 0.001423720557851

Total de esferas: 7

	Coord x	Coord y	Coord z	Tamanho do raio
1	12.611729667320420	15.849369909312992	15.909791594244981	8.999999954928635
2	15.155799113526840	12.777633420953720	9.146210929276080	4.594444139420019
3	16.381049960313192	9.638898356329861	17.328353612085355	3.798645390591259
4	14.748735195598361	8.993768731562730	12.807699846552405	4.521353148861460
5	16.274963921867542	17.471103739313470	9.692610530416518	3.801401825102674
6	10.739813132071728	10.885665413166492	10.548744498772910	4.051298398830273
7	19.164626993270012	13.178493269750104	13.003888688402178	4.160916707793085

Terceiro teste: elipsóide de raios $R_x = 12$ $R_y = 8$ $R_z = 8$

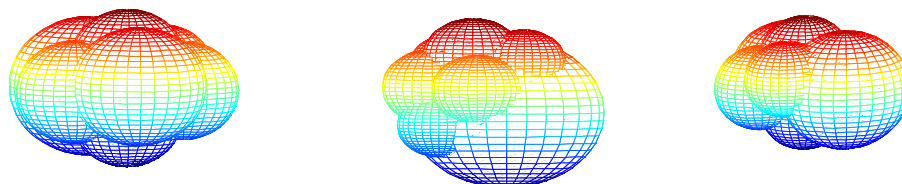
objetivo_dual = 0.001371742109150

objetivo_primal = 0.011183005662844

Total de esferas: 5

	Coord x	Coord y	Coord z	Tamanho do raio
1	20.880759013151856	15.969302678594625	15.955418030606360	9.000000007303843
2	13.622394890445127	16.747331055182620	13.836669416363153	3.959449511917712
3	13.440079026958230	15.676010576357903	18.343771466282703	3.881106406661633
4	14.470103524753574	12.900003705414759	15.384173263244730	3.145899299782407
5	28.564714277556394	15.531353252728541	15.462293309323046	2.710898312628485

As figuras abaixo representam, respectivamente as soluções dos testes 1, 2 e 3.



6. Conclusões

Este modelo de programação geométrica não proporcionou a eficácia e a eficiência computacional esperadas. O programa apresentou certa lentidão para proporcionar os resultados e podemos observar que no último teste, o gap está um pouco acima do desejado. No entanto, ressaltamos que nos testes 1 e 2 (instância extraída de Liberti (2009)), obtivemos um gap bem reduzido, da ordem de 10^{-4} . Outros aspectos a serem enfatizados são: o modelo apresentado não contém restrições que contemplem a simetria da elipse e os raios das esferas são considerados contínuos quando devem ser discretos. Estas modificações são parte de trabalhos futuros e a chance de que o modelo modificado funcione melhor é bem significativa.

Bibliografia

- Avriel, M. and Williams, A.C. (1970), On the Primal and Dual Constraints Sets in Geometric Programming, *J. Mathematical Analysis*, 3, 684-688.
- Beightler, C.S. and Phillips, D.T., *Applied Geometric Programming*, John Wiley & Sons, New York, (1976).

- Costas D. Maranas and Christodoulos A. Floudas**, (1997), Global optimization in generalized geometric programming, *Computers & Chemical Engineering*, 21, 4, 351-369.
- Dembo, R.S.**, (1978), Dual to Primal conversion in Geometric Programming, *Journal of Optimization Theory and Applications*, 26 (2), 243- 252.
- Duffin, R.J., Peterson, E.L. and Zener, C.**, *Geometric Programming -- Theory and Applications*, John Wiley & Sons, New York, 1967.
- Fang, S.C., Peterson, E.L. and Rajasekara, J.R.**, (1988), Controlled dual perturbations for posinomial Programs, *European Journal of Operation Research* 35, 111--117.
- Gonzaga, C.C.**, (1992), Path Following Methods for Linear Programming, *SIAM Review* 34, 167--224.
- Kojima, M., Megido, N. and Mizuno, S.** (1993), A primal-dual infeasible-interior-point algorithm for linear programming. *Mathematical Programming* 61, 263--280.
- Kortanek, K.O. and No, H.**, (1992), A second order affine scaling Algorithm for geometric programming dual with logarithmic barrier, *Optimization* (23), 303--322.
- Kortanek, K.O., Xu, X. and Ye, Y.**, (1995), An Infeasible Interior Point Method for Solving Primal and Dual Geometric Programs, *Mathematical Programming* 76, 155-181.
- Liberti, L., Maculan, N. and Zhang, Y.**, (2009) Optimal configuration of gamma ray machine radiosurgery units: the sphere covering subproblem, *Optimization Letters*, 3: 109-121.
- Nascimento, R. Q., Oliveira P.R.** , A globally convergente Infeasible Interior Point Method for Linearly Constrained convex programming, *Interior Points On Line* <http://www.mcs.anl.gov/otc/InteriorPoint>, 2000.
- Peiping Shen and Hongwei Jiao**, (2006), A new rectangle branch-and-pruning approach for generalized geometric programming, *Applied Mathematics and Computation*, 183, 2, 1027-1038.
- Peiping Shen and Hongwei Jiao**, (2005), Linearization method of global optimization for generalized geometric programming, *Applied Mathematics and Computation*, 162, 1, 353-370.
- Peiping Shen and Hongwei Jiao**, (2004), Global optimization of signomial geometric programming using linear relaxation, *Applied Mathematics and Computation*, 150, 1, 99-114.
- Rijckaert, M.J. and Martens, X.M.**, (1978), Comparison of generalized geometric programming algorithm, *Journal of Optimization Theory and Applications* 26(2), 205--242.
- Shao-Jian Qu, Ke-Cun Zhang and Ying Ji**, A new global optimization algorithm for signomial geometric programming via Lagrangian relaxation, *Applied Mathematics and Computation*, In Press, Corrected Proof, Available online 2006.
- Sutou, A., Dai, Y.**, (2002), Global Optimization Approach to Unequal Sphere Packing Problems in 3D, *Journal of Optimization Theory and Applications*, 114, 3, 671-694.
- Yang, H. S, Bricker D. L.**(1997) Investigation of Path-Following algorithms for Signomial Geometric Programming Problems, *European Journal of Operations Research*, 103, 230-241.
- Yanjun Wang and Zhian Liang**, (2005), A deterministic global optimization algorithm for generalized geometric programming, *Applied Mathematics and Computation*, 168, 1, 722-737.