

---

INSTITUTO NACIONAL DE MATEMÁTICA PURA E APLICADA  
CURSO MÉTODOS COMPUTACIONAIS DE OTIMIZAÇÃO, AGO-NOV/2007  
ALUNO MARCELO CICONET  
RIO DE JANEIRO, 20 DE NOVEMBRO DE 2007

---

## Sobre a Solução Numérica do Problema de Thomson

Digamos que  $N$  partículas de mesma massa e mesma carga elétrica sejam postas para orbitar livremente sobre a esfera unitária do  $\mathbb{R}^3$ , repelindo-se mutuamente de acordo com uma certa força (a qual, no caso aqui tratado, é inversamente proporcional à distância). O problema de encontrar o estado de equilíbrio que minimiza o potencial correspondente é conhecido como o *Problema de Thomson*, por ter sido proposto por Joseph John Thomson (1856-1940), em 1904, como parte do desenvolvimento de seu modelo atômico (o “modelo do pudim de passas”).

---

### O Problema

No presente relatório comentamos a utilização do software *Algencan*<sup>1</sup> para a solução numérica da seguinte versão do Problema de Thomson:

$$\min \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{\|x^i - x^j\|} \quad \text{sujeito a } \|x^i\| = 1, \quad i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

onde  $x^i = (x_1^i, x_2^i, x_3^i) \in \mathbb{R}^3 \quad \forall i$ . Sendo  $f : D_f \rightarrow \mathbb{R}$  ( $D_f$  é o subconjunto de  $\mathbb{R}^{3N}$  onde o somatório em (1) está definido) tal que  $f(x^1, \dots, x^N) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{\|x^i - x^j\|}$ ,  $h_i : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}$  tal que  $h_i(x^1, \dots, x^N) = \frac{1}{2}\|x^i\|^2 - \frac{1}{2}$ ,

---

<sup>1</sup>O Algencan é parte do projeto TANGO - Trustable Algorithms for Nonlinear General Optimization (<http://www.ime.usp.br/~egbirgin/tango/codes.php>), uma parceria entre a UNICAMP e a USP.

$i = 1, \dots, N$ , e  $x = (x^1, \dots, x^N)$ , o problema (1) pode ser expresso no formato clássico:

$$\min f(x) \text{ sujeito a } x \in D_f, h_i(x) = 0, i = 1, \dots, N. \quad (2)$$

Seja  $D$  o conjunto viável do problema (2), i.e.,  $D = D_f \cap \{x \in \mathbb{R}^{3N} : h_i(x) = 0, i = 1, \dots, N\}$ .  $D$  é um conjunto limitado, portanto uma sequência  $((x^1, \dots, x^N)_k)_{k \in \mathbb{N}}$  é crítica em relação ao conjunto  $D$  se, e somente se,  $(x^1, \dots, x^N)_k$  converge para algum  $(\bar{x}^1, \dots, \bar{x}^N)$  em  $(\mathbb{S}^2)^N$  tal que  $\bar{x}^i = \bar{x}^j$  para algum par  $(i, j)$  com  $i \neq j$ . Mas neste caso  $\frac{1}{\|x^i - x^j\|} \rightarrow +\infty$ , donde também  $f((x^1, \dots, x^N)_k) \rightarrow +\infty$ . Logo  $f$  é coersiva em  $D$ , e como  $f$  é também contínua em  $D$ , concluímos<sup>2</sup> que o problema (2) de fato tem solução.

De posse da informação de que existe pelo menos um minimizador para  $f$  em  $D$ , é imediato concluir que  $f$  tem na verdade *infinitos* minimizadores em  $D$ : qualquer permutação das entradas  $\bar{x}^1, \dots, \bar{x}^N$  de uma solução  $(\bar{x}^1, \dots, \bar{x}^N)$  do problema (2) produz uma nova solução; além disso, se  $T : \mathbb{S}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2$  preserva a norma euclidiana e  $(\bar{x}^1, \dots, \bar{x}^N)$  é solução de (2), então  $T(\bar{x}^1, \dots, \bar{x}^N)$  também é. Apesar da infinidade soluções, em certos casos os pontos  $\bar{x}^1, \dots, \bar{x}^N$  satisfazem alguma relação entre si<sup>3</sup>, a saber: são vértices de algum poliedro regular, como o tetraedro (para  $N = 4$ ) o octaedro (para  $N = 6$ ) e o icosaedro (para  $N = 12$ ).

Como o Algencan implementa um Método de Lagrangianos Aumentados, o mesmo faz uso de informações sobre as primeiras e segundas derivadas tanto da função objetivo quanto das restrições. Assim, Embora o código permita aproximar tais derivadas usando diferenças finitas, há certamente um ganho em tempo e precisão quando se disponibiliza as verdadeiras derivadas.

Denotando  $\partial_{x^i}$  o operador *derivada parcial com respeito à variável*  $x^i = (x_1^i, x_2^i, x_3^i)$ , temos, para  $i, j = 1, \dots, N$ ,

$$\partial_{x^i} f(x) = \sum_{j \neq i} \frac{x^j - x^i}{\|x^i - x^j\|^3},$$

<sup>2</sup>Conforme o Corolário 1.2.3, Otimização - Vol. 1, A. Izmailov e M. Solodov.

<sup>3</sup>Fonte: <http://www.mathpages.com/home/kmath005/kmath005.htm>

$$\partial_{(x^i)^2}^2 f(x) = \sum_{j \neq i} \left( -\frac{1}{\|x^i - x^j\|^3} I_{3 \times 3} + \frac{3}{\|x^i - x^j\|^5} [(x_\alpha^i - x_\alpha^j)(x_\beta^i - x_\beta^j)]_{\alpha\beta, 3 \times 3} \right),$$

e, para  $j \neq i$ ,

$$\partial_{x^i x^j}^2 f(x) = \frac{1}{\|x^i - x^j\|^3} I_{3 \times 3} - \frac{3}{\|x^i - x^j\|^5} [(x_\alpha^i - x_\alpha^j)(x_\beta^i - x_\beta^j)]_{\alpha\beta, 3 \times 3},$$

onde  $I_{3 \times 3}$  é a matriz identidade  $3 \times 3$  e  $[a_\alpha b_\beta]_{\alpha\beta, 3 \times 3}$  denota a matriz  $3 \times 3$  que tem como entrada  $(\alpha, \beta)$  o elemento  $a_\alpha b_\beta$ .

Quanto às restrições, tem-se  $\partial_{x^i} h_i(x) = x^i$ ,  $\partial_{(x^i)^2}^2 h_i(x) = I_{3 \times 3}$  para todo  $i$  e  $\partial_{x^j} h_i(x) = 0_3$ ,  $\partial_{x^i x^j}^2 h_i(x) = 0_{3 \times 3}$  para todo par  $(i, j)$  com  $j \neq i$ , onde  $0_3 = (0, 0, 0)$  e  $0_{3 \times 3}$  denota a matriz  $3 \times 3$  com 0 em todas as entradas.

---

### Outras Formulações

Num certo sentido, (1) e (2) são formulações distintas para o mesmo problema. Mas nos dois casos a função objetivo e o conjunto viável são os mesmos. Em nosso trabalho estudamos duas reformulações para (2), ambas consistindo de uma transformação do conjunto viável e, conseqüentemente, da substituição da função objetivo pela composição desta com a inversa da aplicação que altera o conjunto viável original.

Seja  $\eta^i : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2 \setminus \{(0, 0, 1)\}$  a inversa da projeção estereográfica, i.e.,

$$\eta^i(x_1^i, x_2^i) = \left( \frac{2x_1^i}{1 + (x_1^i)^2 + (x_2^i)^2}, \frac{2x_2^i}{1 + (x_1^i)^2 + (x_2^i)^2}, \frac{-1 + (x_1^i)^2 + (x_2^i)^2}{1 + (x_1^i)^2 + (x_2^i)^2} \right).$$

Sabemos que  $\eta^i$  é uma bijeção. Além disso, para qualquer solução de (2) tal que uma das entradas é o polo norte  $(0, 0, 1)$  existem infinitas soluções equivalentes que não passam por este ponto. Daí, sendo  $\eta : D_\eta \rightarrow (\mathbb{S}^2 \setminus \{(0, 0, 1)\})^N$  tal que  $\eta = (\eta^1, \dots, \eta^N)$ , onde  $D_\eta$  é a coleção dos pontos  $(x_1^1, x_2^1, x_1^2, x_2^2, \dots, x_1^N, x_2^N)$  de  $(\mathbb{R}^2)^N$  tais que  $(x_1^i, x_2^i) \neq (x_1^j, x_2^j)$  para todo para  $(i, j)$  com  $i \neq j$ , resolver (2) é equivalente a resolver

$$\min(f \circ \eta)(x_1^1, x_2^1, \dots, x_1^N, x_2^N) \quad \text{s. a} \quad (x_1^1, x_2^1, \dots, x_1^N, x_2^N) \in D_\eta. \quad (3)$$

Na prática, i.e., quando se trata da implementação computacional, (3) é tratado como um problema irrestrito, pois é improvável que algum elemento da sequência de iterados esteja no complementar de  $D_\eta$ .

Para a formulação (3) não calculamos as derivadas da função objetivo  $f \circ \eta$ . O motivo é o seguinte: apesar da natureza simples das restrições em (3), o Algencan não se adaptou bem a essa abordagem, a não ser para  $N$  pequeno (menor que 10), nos testes que fizemos utilizando aproximações das derivadas por diferenças finitas; então abandonamos essa estratégia. Mais adiante daremos mais detalhes sobre este comportamento do método.

Sejam agora  $\mathbb{S}_0^2 = \mathbb{S}^2 \setminus \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{S}^2 : x_2 = 0, x_1 \geq 0\}$  e  $\psi^i : (0, 2\pi) \times (0, \pi) \rightarrow \mathbb{S}_0^2$  tal que

$$\begin{aligned} \psi^i(\theta_i, \phi_i) &= (\psi_1^i(\theta_i, \phi_i), \psi_2^i(\theta_i, \phi_i), \psi_3^i(\theta_i, \phi_i)) \\ &= (\cos \theta_i \sin \phi_i, \sin \theta_i \sin \phi_i, \cos \phi_i), \end{aligned}$$

i.e.,  $\psi^i$  associa a cada ponto  $(\theta_i, \phi_i)$  de  $(0, 2\pi) \times (0, \pi)$  o (único) ponto de  $\mathbb{S}_0^2$  que tem coordenadas esféricas  $(\theta_i, \phi_i, 1)$ .

Assim como  $\eta^i$ ,  $\psi^i$  é uma bijeção e, novamente, para qualquer solução de (2) que tem uma ou mais entradas em  $\{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{S}^2 : x_2 = 0, x_1 \geq 0\}$  existem infinitas soluções equivalentes que não passam por esse conjunto. Assim, sendo  $D_\psi$  a coleção dos pontos  $(\theta_1, \phi_1, \dots, \theta_N, \phi_N)$  de  $((0, 2\pi) \times (0, \pi))^N$  tais que  $(\theta_i, \phi_i) \neq (\theta_j, \phi_j)$  para todo para  $(i, j)$  com  $i \neq j$  e  $\psi : D_\psi \rightarrow (\mathbb{S}_0^2)^N$  dada por  $\psi = (\psi^1, \dots, \psi^N)$ , concluímos que (2) também é equivalente a

$$\min(f \circ \psi)(\theta_1, \phi_1, \dots, \theta_N, \phi_N) \quad \text{s. a} \quad (\theta_1, \phi_1, \dots, \theta_N, \phi_N) \in D_\psi. \quad (4)$$

Visto que, durante a implementação, podemos considerar que o conjunto viável do problema (4) é simplesmente  $((0, 2\pi) \times (0, \pi))^N$  e considerando que o Algencan trabalha com restrições do tipo *caixa*, esta abordagem rendeu bons resultados nos testes em que substituímos as derivadas exatas da função objetivo por suas aproximações por diferenças finitas. Portanto decidimos calcular as derivadas primeiras de  $f \circ \psi$ , visando comparar melhor o comportamento do algoritmo sobre os problemas (2) e (4).

Pondo  $\xi^i = (\theta_i, \phi_i)$ ,  $\xi = (\xi^1, \dots, \xi^N)$ , levando em consideração a regra da cadeia e fazendo uso das derivadas parciais já calculadas para  $f$ , temos

$$\partial_{\xi^i}(f \circ \psi)(\xi) = \partial_{\xi^i} \psi^i(\xi) \cdot \partial_{x^i} f(\psi(\xi)),$$

onde

$$\partial_{\xi^i} \psi^i(\xi) = \begin{bmatrix} -\sin \phi_i \sin \theta_i & \sin \phi_i \cos \theta_i & 0 \\ \cos \phi_i \cos \theta_i & \cos \phi_i \sin \theta_i & -\sin \theta_i \end{bmatrix}.$$

---

### Breve Descrição do Algencan

De acordo com a documentação que acompanha o software, o Algencan é um Método de Lagrangianos Aumentados desenvolvido para resolver problemas da forma

$$\min f(x) \text{ sujeito a } h(x) = 0, g(x) \leq 0, l \leq x \leq u, \quad (5)$$

onde  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m_g}$ ,  $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m_h}$  são pelo menos continuamente diferenciáveis num aberto suficientemente grande e  $l, u$  são vetores fixos em  $\mathbb{R}^n$ . Sua estrutura geral, conforme [4], consiste de uma iteração externa (*Outer Iteration*) com dois passos principais:

- (a) Minimizar o Lagrangiano Aumentado na *caixa*  $l \leq x \leq u$ ,
- (b) Atualizar os Multiplicadores de Lagrange e os parâmetros de penalidade,

sendo que o problema do passo (a) é resolvido pelo, assim chamado, Gencan <sup>5</sup>, que também é parte do projeto TANGO.

<sup>4</sup>R. Andreani, E. G. Birgin, J. M. Martínez e M. L. Schuverdt, “On Augmented Lagrangian methods with general lower-level constraints”, a ser publicado em SIAM Journal on Optimization.

<sup>5</sup>E. G. Birgin e J. M. Martínez, “Large-scale active-set box-constrained optimization method with spectral projected gradients”, Computational Optimization and Applications 23, pp. 101-125, 2002.

Prova-se em [4] que o Algencan apresenta certas “boas” propriedades de convergência global de um Método de Penalização Externa: (a) se forem sempre encontrados os minimizadores globais dos subproblemas, todo ponto limite é um minimizador global do problema original; (b) o ponto limite da sequência gerada pelo método é viável (ainda que a noção de “viabilidade” seja ligeiramente enfraquecida), e (c) o mesmo satisfaz alguma condição de estacionaridade (ser um ponto de KKT, por exemplo). Além disso o método é projetado para não ser sensível à instabilidade assintótica causada por grandes parâmetros de penalidade.

O Gencan é especialmente desenvolvido para resolver problemas do tipo

$$\min f(x) \text{ sujeito a } l \leq x \leq u . \quad (6)$$

Este algoritmo é da classe dos Métodos de Gradiente Projetado. Em cada iteração uma direção de descida é escolhida com base na minimização da aproximação quadrática da função objetivo no ponto corrente, o que é feito usando um Método de Gradiente Conjugado. Em seguida um tamanho de passo preliminar é escolhido usando uma regra semelhante à de Armijo. O ponto assim obtido é projetado no conjunto viável, produzindo um candidato à próximo iterado. Se este candidato não for devidamente qualificado, o tamanho de passo é alterado, por um processo de *extrapolação* ou de *backtracking*, e um novo candidato é produzido.

O Algencan usa o Gencan como uma espécie de *caixa preta*, tanto que nenhum parâmetro de baixo nível do Gencan pode ser alterado através do arquivo “algencanma.c”<sup>6</sup>, mas é interessante notar que o Gencan abandona o papel de coadjuvante e assume o de ator principal quando o problema (2) é atacado sob a formulação (4). Mais adiante esclareceremos melhor este fato.

Por falar em parâmetros, cabe aqui comentar sobre as modificações feitas em alguns deles durante os experimentos.

O parâmetro GTYPE permite informar ao algoritmo se as primeiras derivadas da função objetivo e das restrições são fornecidas pelo usuário (opção 0) ou devem ser aproximadas pelo algoritmo com base na função objetivo e nas

---

<sup>6</sup>Utilizamos a interface para código C do Algencan. (O algoritmo é originalmente implementado em *Fortran*.)

restrições (opção 1), e o parâmetro HPTYPE está ligado ao tipo de informação de segunda ordem de que o algoritmo faz uso: as Hessianas da função objetivo e das restrições podem ser fornecidas pelo usuário (opção 0), ser calculadas aproximadamente pelo Algencan usando informações de ordem zero (opções 9 ou 2), ou usando informações de ordem um (opção 4); nesta última opção a Hessiana do Lagrangiano Aumentado é aproximada pelo famoso método BFGS. Embora houvesse ainda outras alternativas para o parâmetro HPTYPE, testamos apenas as mencionadas.

Na fase da solução de um problema intermediário em que o Gencan minimiza a aproximação quadrática da função objetivo usando Gradientes Conjugados, existe a opção de pré-condicionar a Hessiana desta aproximação quadrática (o modo como isso é feito é descrito em [7]). Fizemos alguns testes sem tal pré-condicionamento, mas o algoritmo se tornou bem mais lento.

Não foram alterados os parâmetros relacionados à inicialização e atualização dos Multiplicadores de Lagrange, à atualização do fator de aumento do Lagrangiano, aos testes de parada do algoritmo e das subrotinas, entre outros parâmetros de baixo nível não mencionados. Julgamos que os mesmos já foram submetidos a testes suficientes, pelos desenvolvedores do Algencan, para que se possa considerá-los confiáveis.

---

## Resultados

O Algencan oferece muitas informações sobre o problema à medida que o mesmo está sendo resolvido. Faremos menção apenas às seguintes: NIE (número de iterações externas, que corresponde, por exemplo, ao número de atualizações do fator de aumento do Lagrangiano ou às atualizações dos multiplicadores de Lagrange), NII (número de iterações internas, i.e., número de chamadas ao Gencan), NALA (número de avaliações do Lagrangiano Aumentado), NAGLA (número de avaliações do gradiente do Lagrangiano Aumentado), VFO (valor da função ob-

---

<sup>7</sup>E. G. Birgin and J. M. Martínez, “Structured minimal-memory inexact quasi-Newton method and secant preconditioners for Augmented Lagrangian Optimization”, a ser publicado em Computational Optimization and Applications, 2007.

jetivo no ponto limite, o qual será comparado com os encontrados em [8], que representaremos pela sigla VFOb) e, *last but not least*, TE (tempo de execução, em segundos).

Sobre a escolha do ponto inicial, foi pedido que fizéssemos dois testes, um com pontos escolhidos com distribuição uniforme na esfera, e outro com pontos equidistantemente dispostos sobre a circunferência equatorial. Neste último caso a sequência de iterados sempre convergiu para um ponto da própria circunferência equatorial, ou seja, o problema foi tratado como sendo sobre  $\mathbb{S}^1$ , ao invés de  $\mathbb{S}^2$ . Neste sentido a “solução” obtida não é interessante, portanto estes resultados não serão apresentados.

O algoritmo foi aplicado sobre o problema de Thomson (1) para  $N = 3, \dots, 45$ , sendo usada primeiramente a abordagem (2). Apresentamos, nas tabelas 1 e 2 (as tabelas encontram-se nas páginas 13-16), os resultados obtidos quando optamos pelos parâmetros (GTYPE = 0, HPTYPE = 0) (derivadas e Hessianas exatas) e (GTYPE = 0, HPTYPE = 4) (derivadas exatas e Hessianas BFGS-aproximadas), respectivamente.


A primeira observação é a de que, nas duas tabelas, para quase todos os valores de  $N$  o valor VFO é menor que VFOb. Acreditamos que isso se deve ao fato de que o Algencan é permanentemente atualizado (a versão que usamos, por exemplo, é deste ano), enquanto que o *site* recomendado como referência para os valores VFO não é atualizado desde junho de 1997. É razoável supor que os métodos computacionais disponíveis há dez anos fossem ligeiramente menos eficientes que os atuais.

Em segundo lugar, com poucas exceções (precisamente 3) os valores de FVO coincidem. Isso revela a vantagem da escolha (GTYPE = 0, HPTYPE = 4) sobre a escolha (GTYPE = 0, HPTYPE = 0), visto que para a primeira opção o tempo de execução (TE) é quase sempre (muito) menor que para a segunda. O gráfico a seguir, *número de pontos*  $\times$  *tempo de execução*, revela quão mais custoso é o algoritmo com (GTYPE = 0, HPTYPE = 0) do que com (GTYPE = 0, HPTYPE = 4). (Obs.: Em plol da elegância, omitimos os eixos.)

---

<sup>8</sup><http://www.research.att.com/~njas/electrons/index.html>





A explicação está no maior número de iterações internas do método quando são usadas segundas derivadas exatas, devido ao maior número de avaliações do Lagrangiano Aumentado e de seu gradiente. Isto está de acordo com o que já tínhamos visto teoricamente: que os métodos Quase-Newton requerem menos computação por iteração que o método de Newton puro <sup>9</sup>.

Em seguida testamos a abordagem (3) com a opção (GTYPE = 1, HPTYPE = 2) (derivadas e Hessianas aproximadas por diferenças finitas). A tabela 3 revela alguns valores que obtivemos. Para  $N \leq 10$  o método se comportou bem, mas a partir desta quantidade de pontos os tempos se tornaram muito grandes (aproximadamente 5 minutos para  $N = 11$ , por exemplo). Além disso, usando os mesmos parâmetros e substituindo o problema (3) pelo (2) os tempos correspondentes a este último problema foram sempre menores, para todos os valores de  $N$  que testamos. Uma amostra deste fato é obtida comparando-se as colunas TE das tabelas 3 e 4.

Julgamos que esse fenômeno ocorreu pela seguinte razão: conforme  $N$  cresce, sabemos intuitivamente que uma solução do problema de Thomson deve ter pontos que se aproximam cada vez mais do polo norte da esfera; à medida que isso ocorre a norma da projeção estereográfica de tais pontos tende a  $+\infty$ ; como o Algencan trabalha com restrições de caixa, devemos então utilizar caixas cada vez maiores para que estas contenham a possível solução, o que por sua vez eleva o custo do algoritmo.

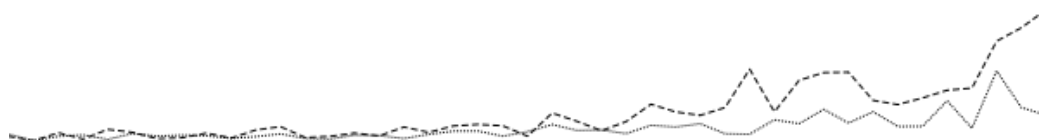
Agora, a versão do problema para a qual o Algencan se adaptou melhor foi sem dúvida a que corresponde à formulação (4). Isso se deve principalmente ao fato, já mencionado, de que, computacionalmente, esse é um problema com restrições de caixa. Aqui devemos abrir um parênteses para comentar um pequeno problema de implementação que enfrentamos. Ocorre que o algoritmo não trabalha corretamente quando lhe informamos que o número de restrições é nulo,

---

<sup>9</sup>D. P. Bertsekas. "Nonlinear Programming". Athena Scientific, 1995. Página 140.

isto é, que o problema é irrestrito. Neste caso, para resolver (4) (e mesmo (3)), foi necessário acrescentar restrições *fantasma*, isto é, restrições que na verdade são satisfeitas em todo ponto do domínio, como por exemplo  $h \equiv 0$ . Fechamos o parênteses e observamos que se então tomarmos  $h \equiv 0$  como restrição, o Lagrangiano Aumentado a ser minimizado na caixa  $((0, 2\pi) \times (0, \pi))^N$  se reduz à função objetivo  $f \circ \psi$ . Isso explica o porquê de todas as entradas da coluna NIE da tabela 5 serem iguais a 1, pois se o Lagrangiano Aumentado é igual à função objetivo e os domínios de minimização coincidem, é claro que basta minimizar um único Lagrangiano Aumentado. E como esta tarefa compete ao Gencan, são devidos à esta subrotina os créditos para a solução do problema (4).

A tabela 5 dispõe dos resultados que obtivemos ao atacar o problema (4) usando os parâmetros  $GTYPE = 0$  e  $HPTYPE = 4$ . As colunas correspondentes ao tempo de execução (TE), ao número de iterações internas (NII), ao número de avaliações do Lagrangiano Aumentado (NALA) e ao número de avaliações do gradiente deste (NAGLA), quando comparadas às respectivas colunas na tabela 2, mostram que a abordagem do problema (4) é computacionalmente mais barata que a abordagem do problema (2). A comparação entre as colunas TE, por exemplo, é mostrada no gráfico que segue.



Já a coluna correspondente ao valor da função objetivo (VFO), quando comparada à coluna de mesmo nome na tabela 2, ou à coluna VFOb, comprova o que é sempre esperado de um método computacional: ganho em rapidêz é pago com perda em eficiência. Ocorre que, em média, a diferença entre um valor VFO da tabela 5 e o respectivo valor VFO na tabela 2 é de aproximadamente 0,12, e a diferença entre um valor VFO e o respectivo valor VFOb na tabela 5 é, em média, de aproximadamente 0,10. Isso indica que, usando como parâmetro de qualificação do método o valor da função objetivo no ponto limite da sequência de iterados gerada, o Algencan sobre (4) se comportou muito bem quando comparado

aos valores encontrados em [10], mas o Algencan sobre (2) foi um pouco melhor.

---

#### Conclusão

A julgar pelos resultados que obtivemos na prática e que foram aqui apresentados e discutidos, podemos afirmar que, se o Algencan for usado para resolver numericamente o problema (1), então a formulação (4) é a mais interessante quando se deseja um método rápido, e deve-se optar pela abordagem (2) se houver interesse maior pela eficiência. Logo, sob o ponto de vista matemático, o Algencan se mostrou melhor ao atacar (2).

---

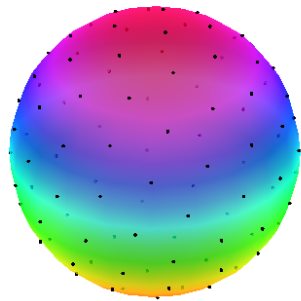
#### Observações Finais

Durante os experimentos numéricos feitos, além de comparar o valor da função objetivo no ponto limite da sequência de iterados com valores já publicados, muitas vezes plotamos a solução encontrada, com o que pudemos constatar, em alguns casos, certas simetrias entre os pontos, e/ou que os mesmos de fato parecem ser vértices de algum poliedro regular. Isso também permitiu verificar que a solução obtida preza pela equidistância entre os pontos e que, pelo menos visualmente, tal solução é viável, i.e., realmente se encontra sobre a esfera unitária. Na verdade também fizemos testes numéricos de viabilidade em muitas das soluções obtidas durante os testes.

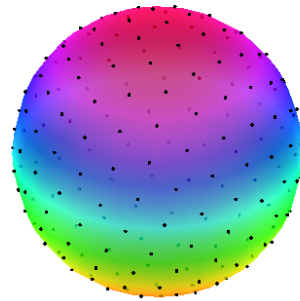
Algumas figuras com as soluções encontradas pelo Algencan (aplicado sobre o problema (2), com  $GTYPE = 0$  e  $HPTYPE = 4$ ), para os valores de  $N$  das respectivas legendas, encontram-se na página a seguir.

---

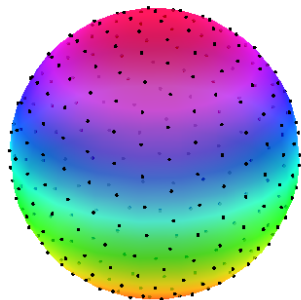
<sup>10</sup><http://www.research.att.com/~njas/electrons/index.html>



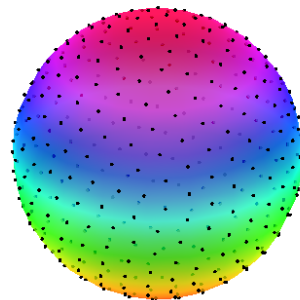
N = 100, Tempo de Execução: 20.134s



N = 200, Tempo de Execução: 1m34.631s



N = 300, Tempo de Execução: 4m42.711s



N = 400, Tempo de Execução: 27m9.184s

Tabela 1: Algenca aplicado a (2), com GTYPE = 0 e HPTYPE = 0

N	NIE	NII	NALA	NAGLA	TE	VFO	VFOb
3	5	49	106	60	0.027	1.7320	1.7321
4	6	64	161	77	0.070	3.6741	3.6742
5	7	108	217	123	0.065	6.4745	6.4747
6	8	109	256	126	0.073	9.9849	9.9853
7	9	488	967	523	0.215	14.452	14.453
8	10	266	584	287	0.245	19.674	19.675
9	11	506	1223	540	0.512	25.759	25.760
10	12	876	2376	904	0.494	32.715	32.717
11	7	913	2128	934	0.670	40.593	40.596
12	7	450	1583	469	0.449	49.164	49.165
13	7	1122	3379	1145	0.839	58.851	58.853
14	7	726	1940	757	0.810	69.302	69.306
15	7	624	1558	656	0.738	80.669	80.670
16	7	654	2185	680	1.259	92.909	92.912
17	7	1658	5399	1703	1.746	106.05	106.05
18	7	2893	10778	2927	3.818	120.08	120.08
19	7	2949	8680	3058	3.988	135.09	135.09
20	7	3377	11017	3684	4.554	150.88	150.88
21	7	5006	17150	5126	8.541	167.64	167.64
22	7	2074	7035	2184	3.505	185.28	185.29
23	7	2058	6903	2159	4.753	203.92	203.93
24	7	495	1762	536	1.566	223.33	223.35
25	7	3411	11708	3675	8.105	243.79	243.81
26	7	3371	11337	3620	7.750	265.11	265.13
27	8	2841	9521	3133	7.700	287.29	287.30
28	8	6132	19493	6922	17.507	310.48	310.49
29	8	6664	20363	6894	19.346	334.62	334.63
30	8	6817	21446	7073	22.601	359.59	359.60
31	8	2894	9303	3224	9.028	385.51	385.53
32	8	2192	6597	2426	7.366	412.23	412.26
33	8	6258	18759	6545	25.061	440.17	440.20
34	8	6936	22142	7375	26.511	468.86	468.90
35	9	7153	22127	7423	28.688	498.55	498.57
36	9	9306	29247	9581	42.307	529.10	529.12
37	9	9032	27768	9658	40.866	560.60	560.62
38	9	4278	13089	4584	20.174	593.02	593.04
39	9	9057	28946	6314	41.874	626.40	626.39
40	9	7138	21223	7952	36.004	660.63	660.68
41	9	3351	9603	3644	18.357	695.86	695.92
42	9	2538	7598	2761	13.575	732.01	732.08
43	10	12500	39535	13047	75.659	769.16	769.19
44	10	7451	23542	7745	53.177	807.14	807.17
45	10	14670	45590	15461	95.484	846.15	846.19

Tabela 2: Algecan aplicado a (2), com GTYPE = 0 e HPTYPE = 4

N	NIE	NII	NALA	NAGLA	TE	VFO	VFOb
3	5	16	27	27	0.117	1.7320	1.7321
4	6	26	48	41	0.026	3.6741	3.6742
5	7	30	53	47	0.193	6.4745	6.4747
6	8	49	89	69	0.060	9.9849	9.9853
7	9	156	360	187	0.264	14.452	14.453
8	10	87	171	117	0.203	19.674	19.675
9	11	105	198	134	0.069	25.759	25.760
10	12	135	246	167	0.087	32.715	32.717
11	7	157	270	180	0.187	40.593	40.596
12	7	88	142	108	0.081	49.164	49.165
13	7	158	277	177	0.252	58.851	58.853
14	7	169	304	197	0.321	69.305	69.306
15	7	147	242	166	0.092	80.669	80.670
16	7	128	230	151	0.118	92.909	92.912
17	7	197	370	218	0.186	106.05	106.05
18	7	144	244	167	0.128	120.08	120.08
19	7	356	662	381	0.314	135.09	135.09
20	7	139	246	161	0.201	150.88	150.88
21	7	383	783	419	0.337	167.64	167.64
22	7	353	685	382	0.369	185.28	185.29
23	7	248	429	273	0.340	203.92	203.93
24	7	79	145	100	0.122	223.33	223.35
25	7	447	887	488	0.608	243.79	243.81
26	7	335	687	361	0.434	265.11	265.13
27	8	185	303	207	0.236	287.30	287.30
28	8	319	636	349	0.429	310.48	310.49
29	8	597	1274	649	0.792	334.62	334.63
30	8	418	915	459	0.632	359.59	359.60
31	8	515	1085	561	0.559	385.51	385.53
32	8	608	1292	665	0.722	412.23	412.26
33	8	1171	3055	1252	1.527	440.17	440.20
34	8	415	937	459	0.632	468.86	468.90
35	9	919	2284	994	1.293	498.55	498.57
36	9	1036	2269	1101	1.456	529.10	529.12
37	9	941	2212	1008	1.464	560.60	560.62
38	9	555	1162	598	0.872	593.02	593.04
39	9	576	1192	629	0.785	626.35	626.39
40	9	522	1069	567	0.924	660.63	660.68
41	9	652	1406	699	1.086	695.86	695.92
42	9	765	1897	821	1.130	732.01	732.08
43	10	962	2215	1032	2.115	769.16	769.19
44	10	1341	3327	1412	2.395	807.14	807.17
45	10	1198	2898	1269	2.774	846.15	846.19

**Tabela 3:** Algencan aplicado a (3), com GTYPE = 1 e HPTYPE = 2

N	NIE	NII	NALA	NAGLA	TE	VFO	VFOb
3	1	145	645	151	0.159	1.7321	1.7321
4	1	239	1388	244	0.086	3.6742	3.6742
5	1	393	2224	400	0.221	6.4747	6.4747
6	1	980	4933	998	0.312	9.9853	9.9853
7	1	2916	23442	2945	2.585	14.453	14.453
8	1	4128	20190	4185	3.542	19.675	19.675
9	3	10307	91024	10372	13.543	25.760	25.760
10	6	26286	261733	26380	55.297	32.717	32.717

**Tabela 4:** Algencan aplicado a (2), com GTYPE = 1 e HPTYPE = 2

N	NIE	NII	NALA	NAGLA	TE	VFO	VFOb
3	5	16	30	27	0.137	1.7320	1.7321
4	6	24	46	37	0.135	3.6741	3.6742
5	7	30	63	45	0.113	6.4745	6.4747
6	8	45	92	62	0.205	9.9849	9.9853
7	9	88	217	107	0.314	14.452	14.453
8	10	129	388	150	0.835	19.674	19.675
9	11	133	430	156	0.877	25.759	25.760
10	12	156	482	181	1.083	32.715	32.717

Tabela 5: Algecan aplicado a (4), com  $GTYPE = 0$  e  $HPTYPE = 4$ 

N	NIE	NII	NALA	NAGLA	TE	VFO	VFOb
3	1	6	15	9	0.159	1.9142	1.7321
4	1	14	19	29	0.027	3.8284	3.6742
5	1	23	43	31	0.118	6.4747	6.4747
6	1	20	40	25	0.147	9.9853	9.9853
7	1	57	123	62	0.054	14.453	14.453
8	1	37	65	44	0.178	19.682	19.675
9	1	42	68	46	0.122	25.760	25.760
10	1	50	88	55	0.144	32.717	32.717
11	1	47	79	51	0.131	40.597	40.596
12	1	45	81	51	0.077	49.165	49.165
13	1	76	159	85	0.113	58.854	58.853
14	1	57	101	64	0.170	69.562	69.306
15	1	148	333	158	0.074	80.671	80.671
16	1	52	87	60	0.062	93.125	92.912
17	1	163	351	176	0.145	106.05	106.05
18	1	91	163	101	0.135	120.15	120.08
19	1	75	141	83	0.072	135.65	135.09
20	1	81	144	87	0.161	151.39	150.88
21	1	278	560	292	0.228	167.64	167.64
22	1	300	591	313	0.229	185.29	185.29
23	1	212	434	226	0.122	203.95	203.93
24	1	174	335	184	0.216	223.35	223.35
25	1	615	1400	649	0.366	243.81	243.81
26	1	245	510	257	0.243	265.16	265.13
27	1	315	611	335	0.253	287.30	287.30
28	1	284	570	300	0.176	310.51	310.49
29	1	423	904	442	0.350	334.63	334.63
30	1	234	496	249	0.315	359.60	359.60
31	1	427	897	450	0.384	385.53	385.53
32	1	154	315	163	0.174	412.26	412.26
33	1	137	263	147	0.163	440.21	440.20
34	1	450	1019	474	0.466	469.04	468.90
35	1	178	385	192	0.385	499.92	498.57
36	1	754	1720	792	0.685	529.12	529.12
37	1	309	617	325	0.397	560.62	560.62
38	1	753	1672	782	0.634	593.05	593.04
39	1	258	567	274	0.326	626.43	626.39
40	1	239	486	252	0.329	660.68	660.67
41	1	622	1366	655	0.865	695.92	695.92
42	1	246	536	263	0.289	732.94	732.08
43	1	678	1502	707	1.493	769.19	769.19
44	1	596	1297	625	0.724	807.17	807.17
45	1	417	861	439	0.563	846.19	846.19