



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA
MESTRADO PROFISSIONAL EM MATEMÁTICA EM REDE NACIONAL -
PROFMAT**

PAULA RENATA DE MORAIS GOMES FREITAS

**UMA APRESENTAÇÃO DOS MÉTODOS DE PONTOS INTERIORES
NA RADIOTERAPIA E SUA COMPARAÇÃO COM O MÉTODO
SIMPLEX**

**SOROCABA
DEZEMBRO/2017**

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA
MESTRADO PROFISSIONAL EM MATEMÁTICA EM REDE NACIONAL -
PROFMAT

PAULA RENATA DE MORAIS GOMES FREITAS

UMA APRESENTAÇÃO DOS MÉTODOS DE PONTOS INTERIORES
NA RADIOTERAPIA E SUA COMPARAÇÃO COM O MÉTODO
SIMPLEX

Dissertação apresentada ao Programa de Mestrado Profissional em Matemática em Rede Nacional – PROFMAT, do Centro de Ciências Exatas e Tecnologia da Universidade Federal de São Carlos, como exigência parcial para obtenção do título de Mestre em Matemática.

Orientação: Prof.^a Dr.^a Sílvia Maria Simões de Carvalho

SOROCABA
DEZEMBRO/2017

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS**

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Mestrado Profissional em Matemática em Rede Nacional

Folha de Aprovação

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Dissertação de Mestrado da candidata Paula Renata de Moraes Gomes Freitas, realizada em 15/12/2017:

Profa. Dra. Sílvia Maria Simões de Carvalho
UFSCar

Prof. Dr. Mayk Vieira Coelho
UNIFAL

Profa. Dra. Magda da Silva Peixoto
UFSCar

Dedico este trabalho aos meus pais, Sônia e Luiz, ao meu irmão, Felipe, e ao meu esposo, Murilo, pelo incentivo e paciência. Dedico também a Deus, em agradecimento por possibilitar mais uma chance de aprender e conhecer pessoas incríveis.

AGRADECIMENTO

Agradeço a Deus por todas as oportunidades concedidas e, principalmente, por possibilitar conhecer pessoas extremamente dedicadas, de bom caráter e de muito conhecimento.

Às pessoas que conheci no decorrer do curso, por estarem sempre dispostas a ajudar e compartilhar conhecimentos, as quais conseguiram formar, além de um grupo, uma família.

Aos professores da UFSCar – Sorocaba por proporcionarem, além de tanto conhecimento em tão pouco tempo, oportunidades de conhecer e participar de um “mundo” extremamente interessante, contagiante e produtivo.

Aos meus pais, Luiz e Sônia, e meu irmão, Felipe, por toda motivação e apoio que me ofereceram, principalmente quando pensei que não seria capaz de finalizar essa etapa.

Ao meu esposo, Murilo, pelo apoio, paciência e companheirismo. Sou realmente grata por sempre estar ao meu lado, incentivando e acreditando que conseguiria.

Ao meu amigo Roberto, que começou o curso comigo, pela ajuda e oportunidade de tê-lo como amigo, por quem tenho elevada admiração.

Agradeço, em especial, à minha orientadora, professora Dra. Sílvia Maria Simões de Carvalho, pela ajuda, paciência e apoio em todas as divergências, a qual me impressionava e estimulava a cada orientação. Realmente sou grata por tê-la como professora e orientadora.

Deus nos conceda, a cada dia, uma página de vida nova no livro do tempo.

Aquilo que colocamos nela corre por nossa conta.

Chico Xavier

RESUMO

Este trabalho visa apresentar os Métodos de Pontos Interiores e fazer uma comparação com o Método Simplex, quando aplicados na resolução de problemas relacionados à concentração ótima de radiação no tratamento de câncer via radioterapia. A concentração ótima está relacionada à maior intensidade de radiação associada ao menor prejuízo aos órgãos vitais. Esta dissertação foi embasada em trabalhos sobre o tratamento por radioterapia, visando realizar uma comparação entre dois métodos muito utilizados para encontrar uma concentração ótima.

Palavras-chave: Métodos de Pontos Interiores. Radioterapia. Programação Linear. Método Simplex.

ABSTRACT

This work aims to present the Interior Points Methods and to compare the Simplex Method, when applied in the resolution of problems related to the optimal concentration of radiation in the treatment of cancer through radiotherapy. The optimum concentration is related to the higher intensity of radiation associated with less damage to the vital organs. This dissertation was based on works on radiotherapy treatment, aiming to make a comparison between two methods widely used to find an optimal concentration.

Keywords: Interior Points Methods. Radiotherapy. Linear Programming. Simplex Method.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – O vetor a , perpendicular à reta $a_1x_1 + a_2x_2 = b$	25
Figura 2 - As regiões do plano: $a^i x = b_i$, $a^i x \leq b_i$ e $a^i x \geq b_i$	27
Figura 3 - Região factível de restrições do tipo $a^i x \leq b_i$, $i = 1, 2, 3, \dots, m$	28
Figura 4 - Curvas de nível e solução ótima (problema de minimização).....	28
Figura 5 - Múltiplas soluções ótimas (problema de maximização).....	29
Figura 6 - Múltiplas soluções ótimas (problema de maximização).....	30
Figura 7 - Região factível ilimitada e solução ótima única (minimização).....	30
Figura 8 - Região factível ilimitada e infinitas soluções ótimas, conjunto ilimitado de soluções ótimas (minimização).	31
Figura 9 - Região factível ilimitada e não existe solução ótima (solução ótima ilimitada), $c^T x \rightarrow -\infty$ (minimização).....	31
Figura 10 - Não existe solução ótima: $S = \emptyset$	32
Figura 11 - Região definida por $x_1 \geq 0$ e $x_2 \geq 0$	33
Figura 12 - Região definida por $x_1 + x_2 \leq 4$, $x_1 \geq 0$ e $x_2 \geq 0$	34
Figura 13 - Região definida por $x_1 \leq 2$, $x_1 \geq 0$ e $x_2 \geq 0$	34
Figura 14 - Região definida por $x_2 \leq 3$, $x_1 \geq 0$ e $x_2 \geq 0$	35
Figura 15 - Região factível (S).....	35
Figura 16 - Curvas de nível f , f' , f^* e da solução ótima x^*	36
Figura 17 – Resolução gráfica no GeoGebra.....	54
Figura 18 – Comparação do caminho do Simplex e dos Métodos de Pontos Interiores.....	56
Figura 19 - Radiografia da mão de Anna Bertha Ludwig, esposa de Röntgen, tirada em 22 de dezembro de 1895.....	62
Figura 20 - Imagem de tomografia computadorizada com estruturas selecionadas.....	64
Figura 21 - Imagem dividida em pixels.....	65
Figura 22 - Geometria de uma imagem de pixel 2×2 com ângulos $\frac{\pi}{4}$, $\frac{3\pi}{4}$, $\frac{5\pi}{4}$ e $\frac{7\pi}{4}$	66
Figura 23 - Curva de uma função genérica e algumas retas TANGENTES.	86

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Relação entre o programa primal e o dual.....	37
Tabela 2 - Organização do problema no formato Tableau	47
Tabela 3 - Tableau antes do pivoteamento	48
Tabela 4 - Tableau após o pivoteamento	48
Tabela 5 - Exemplo no Tableau.....	52
Tabela 6 - Estrutura da matriz de deposição de dose A.....	68
Tabela 7 - Valores referentes à prescrição de dose	77
Tabela 8 - Resultados numéricos da otimização da função objetivo (6.1).....	77
Tabela 9 - Resultados obtidos pelo método primal – dual	78
Tabela 10 - Comparação entre os resultados dos métodos Simplex e Pontos Interiores.....	79
Tabela 11 - Comparação entre os resultados dos métodos Dual Simplex e Pontos Interiores para um problema com 342 pixels.....	79
Tabela 12 - Comparação entre os resultados dos métodos Dual Simplex e Pontos Interiores para um problema com 747 pixels.....	80
Tabela 13 - Comparação entre os resultados dos métodos Dual Simplex e Pontos Interiores para um problema com 3718 pixels.....	80
Tabela 14 - Problema de grande porte (45000 pixels).....	81

Sumário

INTRODUÇÃO.....	12
1. BREVE HISTÓRICO	14
2. PROGRAMAÇÃO LINEAR.....	17
2.1 Modelos Matemáticos	17
2.2 Formulação do Problema de Programação Linear	19
2.3 Exemplo de um Problema de Programação Linear.....	22
2.4 Resolução Gráfica de Problemas Lineares	25
2.4.1 Região Factível Limitada e única Solução Ótima.....	27
2.4.2 Região Factível Limitada e infinitas Soluções Ótimas	29
2.4.3 Região Factível Ilimitada e Solução Ótima (única ou infinitas).....	30
2.4.4 Sem Região Factível.....	32
2.5 Aplicação.....	32
2.5 Dualidade Linear	37
3. MÉTODO SIMPLEX.....	41
3.1 Pivoteamento	41
3.1.1 Soluções Degeneradas	43
3.1.2 Solução Factível Mínima	43
3.2 Método Simplex no Tableau	46
3.3 Pivoteamento no Tableau	48
3.4 Aplicação do Método Simplex no Tableau	51
4. MÉTODO DE PONTOS INTERIORES.....	55
4.1 Método de Newton	56
4.2 Método de Newton para Funções de várias variáveis	56
4.3 Método Primal – Dual Afim Escala.....	57
4.4 Método Primal – Dual Clássico	60
5. APLICAÇÃO DE PROGRAMAÇÃO LINEAR NA RADIOTERAPIA.....	62
5.1 A Descoberta dos Raios – X	62
5.2 Câncer e o Tratamento por Radioterapia	63
5.3 Elaboração do Modelo Matemático	64
5.4 Modelo de Programação Linear	70
5.5 Propriedades das Restrições Elásticas	73
5.4 Um estudo sobre a aplicação dos Métodos de Pontos Interiores ao Modelo de Tratamento por Radioterapia	73
6. ESTUDO SOBRE OS RESULTADOS COMPUTACIONAIS.....	76
6.1 Método Simplex.....	76
6.2 Métodos de Pontos Interiores	78

6.3 Comparação entre o Simplex e os Métodos de Pontos Interiores	78
CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	82
REFERÊNCIAS	83
APÊNDICE A	86
APÊNDICE B.....	88

INTRODUÇÃO

O processo de otimização está relacionado ao emprego de técnicas que selecionam os melhores caminhos para se alcançar determinados objetivos. Otimizar uma produção, por exemplo, significa usar meios para obter melhor rendimento, considerando algumas variáveis. Normalmente observam-se processos de otimização no cotidiano, pois a todo o momento tomam-se decisões, como, por exemplo, encontrar o melhor caminho para ir ao trabalho, o que nem sempre está relacionado ao menor trajeto.

A pesquisa operacional (PO), “pesquisa sobre operações”, é uma metodologia administrativa relacionada a problemas de condução e coordenação de atividades. Faz uso da Economia, Matemática, Estatística e Informática para o processo de preparação, análise e tomada de decisões.

A programação linear (PL) necessita de um modelo matemático para descrever um problema. A palavra “programação” se refere ao planejamento de atividades para obter um resultado ótimo, ou seja, um melhor objetivo. O termo “linear” refere-se às funções trabalhadas no modelo, as quais são todas lineares.

Durante o século XVIII, o físico e matemático Jean-Baptiste Joseph Fourier trabalhou no desenvolvimento de algoritmos de resolução de sistemas de inequações, dentre os quais se destaca o Método de Eliminação de Fourier-Motzkin. Em 1947 foi desenvolvido o Algoritmo Simplex pelo matemático George Dantzig. Também em 1947, John Von Neumann desenvolveu a Teoria da Dualidade e Leonid Kantorovich foi pioneiro a aplicar a Programação Linear à Economia. Em 1979, Leonid Khachiyan desenvolveu o Algoritmo Elipsoide para resolver problemas de PL, porém era mais lento que o Simplex. Já em 1984, Narendra Karmarkar criou o Algoritmo de Pontos Interiores, de comportamento polinomial, bem mais rápido que o Simplex quando aplicado a problemas muito maiores.

Os algoritmos Simplex e de Pontos Interiores possuem forte aplicação no processo de radioterapia. A radiação tem a função de atacar as células doentes, danificando seu material genético e inibindo sua capacidade de reprodução e divisão. Porém, ao mesmo tempo em que as células cancerígenas são atacadas, as células saudáveis também são. Portanto, torna-se necessário usar um algoritmo para verificar qual a concentração de radiação suficiente para destruir o maior número de células doentes e evitar a maior perda de células adjacentes sadias. As sessões radioterápicas ocorrem ao longo de várias semanas, processo denominado

“fracionamento”, pois possibilita a recuperação das células saudáveis que foram afetadas pela radiação.

Teoricamente, a própria radiação do tratamento pode causar um câncer, denominado câncer primário. Porém, o uso do algoritmo para definir a melhor dosagem e precisão da radiação faz com que este risco caia para menos de 5% em 30 anos após a radioterapia.

No capítulo 1 será realizado um breve histórico sobre a pesquisa operacional (PO) e a programação linear (PL). Os conceitos básicos de Problemas de Programação Linear encontram-se no capítulo 2. O Método Simplex se encontra no capítulo 3 e os de Métodos de Pontos Interiores, no capítulo 4. No capítulo 5, aborda-se a aplicação da Programação Linear na Radioterapia e, no capítulo 6, são apresentados os Métodos de Pontos Interiores aplicados no tratamento por radioterapia. No capítulo 7 estão os resultados computacionais de ambos os métodos e uma comparação entre os Métodos de Pontos Interiores e o Dual Simplex aplicado na Radioterapia, finalizando com a conclusão no capítulo seguinte.

1. BREVE HISTÓRICO

A Revolução Industrial fez com que ocorresse um crescimento, em tamanho e complexidade, das organizações da época. Essa mudança foi necessária devido ao aumento na divisão do trabalho e à fragmentação no gerenciamento das organizações. Um problema atrelado a esta mudança está no fato de diferentes unidades, de uma mesma organização, necessitarem de objetivos diferenciados, pois se tem regiões distintas [1].

A pesquisa operacional, surge em virtude da necessidade de procurar o melhor caminho para solucionar tais divergências. Apesar desta ser associada à tentativa de abordar cientificamente a gestão das organizações no período da Revolução Industrial, seu início é atribuído às ações militares no período da Segunda Guerra Mundial. Seu surgimento está relacionado à criação do radar na Inglaterra em 1934. Dois anos após sua invenção criou-se a Estação de Pesquisa Manor Bawdsey, em Suffolk, responsável pelo estudo da aplicação da tecnologia do radar às práticas de interceptação de aviões inimigos [2].

Nesse período de guerra foi necessário organizar e guardar de forma eficiente os poucos recursos disponíveis para as diferentes operações militares. Envoltos por essa necessidade, os comandos britânico e norte-americano convocaram equipes interdisciplinares de cientistas para resolverem problemas militares de ordem estratégica e tática, tornando-se as primeiras equipes da área de pesquisa operacional. Assim, conseguiram contribuir para a vitória da Batalha Aérea na Grã-Bretanha e para a vitória da Batalha do Atlântico Norte. Situação semelhante ocorreu na Campanha Britânica no Pacífico [1].

Após o final da guerra, houve a evolução rápida da pesquisa operacional na Inglaterra e nos Estados Unidos, com a implantação, em 1947, do projeto SCOOP (Scientific Computation of Optimal Programs) no Pentágono, coordenado pelo economista Marshall Wood e pelo matemático George Dantzig. Neste projeto, Dantzig desenvolveu, formalizou e testou o método Simplex para resolver problemas de programação linear (otimização linear), apoiado em desenvolvimentos anteriores do matemático russo Leonid Kantorovich [2].

A partir da década de 1950, a pesquisa operacional atraiu o interesse de organizações dos setores público e privado, as quais passaram a aplicá-la em uma variedade de problemas que envolviam diversos setores industriais e financeiros, como: mineração, metalúrgico, construção civil e militar, têxtil, farmacêutico, bancário e transportes. Desde então, a pesquisa operacional encontrou espaço nas mais diversas áreas de produção e logística, de indústrias e organizações de serviço, como: agricultura, automóveis, aeronáutica, coleta de lixo, energia,

entre outros [2]. Com o surgimento dos computadores digitais na década de 1950, foi possível desenvolver e utilizar novas metodologias para resolver uma variedade de problemas reais e, conforme a capacidade computacional foi evoluindo, problemas mais complexos puderam ser resolvidos [10].

Em 1952 criou-se a sociedade científica americana de pesquisa operacional (ORSA – Operations Research Society of America) e, em 1953, a sociedade inglesa de pesquisa operacional (ORS – Operational Research Society) e a americana de ciências de Administração (TIMS – The Institute of Management Sciences). Em 1957 foi realizada a primeira conferência internacional de pesquisa operacional em Oxford, na Inglaterra, na qual se notaram duas vertentes de trabalho: os ingleses voltados para os estudos de casos ou problemas específicos e os americanos abordando modelos e métodos matemáticos na teoria de estoques, substituição de equipamentos, teoria de filas de tarefas em máquinas, teoria de jogos, fluxos em redes e otimização linear. Na Engenharia de Produção, a pesquisa operacional possui aplicação nas atividades de produção (como em problemas de planejamento, programação e controle da produção) e na logística (problemas de planejamento e operações logísticas) [2].

Segundo ARENALES (2007), na década de 1960, a pesquisa operacional era estudada apenas em cursos de pós-graduação, porém foi na década de 1970 que se tornou parte dos cursos de graduação. No Brasil, a pesquisa operacional surgiu na década de 1960, sendo que o primeiro simpósio brasileiro de pesquisa operacional ocorreu em 1968 no ITA (Instituto Tecnológico da Aeronáutica), em São José dos Campos. Logo se fundou a SOBRAPO (Sociedade Brasileira de Pesquisa Operacional), responsável por publicar o periódico científico “Pesquisa Operacional” há mais de 30 anos, e, atualmente, *Pesquisa Operacional para o Desenvolvimento*.

Recentemente, a pesquisa operacional tem sido denominada de ciência e tecnologia de decisão, em que a parte científica está relacionada à identificação de um objeto de estudo e posterior investigação de sua natureza e funcionamento. As decisões a serem tomadas ficam apoiadas neste conhecimento adquirido. A tecnologia está associada a ferramentas de software e hardware para coletar e comunicar dados, além de organizá-los para usá-los na geração e otimização de modelos e, assim, reportar os dados [2].

Resumidamente, a pesquisa operacional consiste no desenvolvimento de métodos científicos para analisar sistemas complexos, com o intuito de prever e comparar estratégias ou decisões alternativas, objetivando dar suporte à definição de políticas e determinação de

ações de forma científica. A pesquisa operacional e, em particular, a programação matemática tratam de problemas de decisão e usam modelos matemáticos para representar o problema real. O modelo é resolvido (ou seja, são determinados valores para as incógnitas) e posteriormente validado, ou seja, verifica-se se as soluções obtidas pela resolução do modelo matemático, para diversas situações alternativas, são compatíveis com a realidade. O método Simplex, apesar de ser um algoritmo não-polinomial, apresenta grande aceitação para a resolução desses problemas, devido a sua simplicidade e capacidade em apresentar soluções em tempo aceitável.

Em 1984, Narendra Karmarkar trouxe um novo método, o de Pontos Interiores, causando uma evolução na área. Atualmente há outros algoritmos para a resolução de problemas de programação linear, como o Método do Elipsoide, porém o Método Simplex ainda é o mais usado.

2. PROGRAMAÇÃO LINEAR

Os modelos matemáticos são representações idealizadas, expressos com símbolos e expressões matemáticas, como as Leis da Física. Analogamente, o modelo matemático de um problema de negócios é formado por um sistema de equações que descrevem sua essência. As n decisões quantificáveis relacionadas a serem feitas serão representadas na forma de variáveis de decisão (x_1, x_2, \dots, x_n), cujos valores devem ser determinados.

A medida de desempenho apropriada (como o lucro) é expressa como uma função matemática dessas variáveis de decisão ($P = 3x_1 + 2x_2 + \dots + 5x_n$), denominada função objetivo. Quaisquer restrições nos valores que possam ser atribuídos a essas variáveis de decisão também são expressas de forma matemática, tipicamente por meio de desigualdades ou equações (como $2x_1 + 5x_2 \leq 10$). Essas expressões para limitações são normalmente denominadas de restrições. As constantes nas restrições e na função objetivo são denominadas parâmetros do modelo. No caso, o modelo matemático poderia então nos dizer que o problema é escolher os valores das variáveis de decisão de forma a maximizar ou minimizar a função objetivo sujeita às restrições especificadas [1].

No modelo de programação linear, a função objetivo e as restrições são todas lineares. Logo, o modelo de programação é estabelecido na forma de um sistema organizado (função objetivo e restrições), através do qual se encontra a melhor solução.

O problema para o qual a programação linear proporciona uma solução pode resumir-se a minimizar ou maximizar alguma variável dependente, que é função linear de diversas variáveis independentes, sujeita a várias restrições.

2.1 Modelos Matemáticos

Um modelo matemático é uma representação substitutiva da realidade. Muitas pessoas utilizam ou já utilizaram algum modelo para explicar algo, como por exemplo, usar equações para representar sólidos. Um modelo não é igual à realidade, mas suficientemente similar para que as conclusões obtidas através de sua análise e/ou operação, possam ser estendidas à realidade [3].

Na pesquisa operacional, os principais modelos são denominados de programação matemática, destacando-se pela sua aplicabilidade em problemas de otimização.

Problemas de programação matemática podem ser divididos de acordo com as técnicas utilizadas para a resolução dos modelos matemáticos. Considere os exemplos de modelos matemáticos [4]:

- Programação Linear (as variáveis são contínuas e apresentam comportamento linear);
- Programação Inteira (se alguma variável está condicionada a assumir valores discretos);
- Programação não linear (quando exhibe qualquer tipo de não linearidade);
- Programação em redes ;

A dificuldade em modelar um problema está em torná-lo adequado à realidade, ou seja, quanto mais um modelo conseguir modelar a realidade, melhor será a sua qualidade. Na sua construção deve-se considerar o grau de generalidade que irá trabalhar, além de saber que nem toda hipótese que simplifica facilitará o tratamento posterior do modelo, tanto da visão teórica como computacional. Os modelos matemáticos podem explicar de forma quantitativa e qualitativa os fenômenos naturais. Uma parte extremamente importante da modelagem é a comparação entre o real e o modelo matemático.

A modelagem e análise de um problema de Programação Linear ocorrem em fases. Em um primeiro momento ocorre a análise do problema e o recolhimento de informações necessárias. Alguns problemas são simples, porém grande parte envolve muitas equações e variáveis, além de restrições para estas variáveis. É nesta primeira fase que ocorre a identificação das restrições e da função objetivo. Conforme o fenômeno a ser modelado sofre várias influências importantes, o problema pode se tornar cada vez mais complexo.

Em um segundo momento realiza-se a identificação do problema, agora através de um modelo matemático. Após encontrar o modelo linear, formado pela função objetivo e pelas restrições, os métodos de programação linear (como SIMPLEX e Métodos de Pontos Interiores) se responsabilizam por encontrar as soluções viáveis (aquelas que satisfazem todas as restrições do problema), mas principalmente, por encontrar a solução ótima (que pode ser única ou não), responsável por maximizar ou minimizar, o que depende do objetivo do problema.

A terceira fase é formada por testes, análise e possível reformulação do modelo, caso haja alguma divergência.

No que relaciona a pesquisa operacional, há vários exemplos clássicos de modelos, como os problemas que envolvem misturas (rações, fertilizantes, concreto, alimentos, poluentes, entre outros). Tais problemas consistem em combinações de materiais (naturais ou não) para gerar novos materiais ou produtos com características desejáveis, como é o caso, por exemplo, das misturas de massas de reboco (cal, areia, cimento e água) ou de concreto (areia, brita, cimento e água), que em proporções diferentes ou com adição de alguma substância adquirem propriedades para um fim específico, como acabamento e fundação, respectivamente [7].

2.2 Formulação do Problema de Programação Linear

Definição 2.1 (*solução factível e região factível*) Uma solução (x_1, x_2, \dots, x_n) é dita factível se satisfazer todas as restrições e as condições de não-negatividade. O conjunto de todas as soluções factíveis é chamado *região factível*.

O *Problema de Programação Linear* [6] é caracterizado por conter a função objetivo e as restrições em sua forma linear. É um problema que consiste em encontrar o valor que otimiza a função objetivo $f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$, ou seja, determina o valor das variáveis $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$, considerando um conjunto definido por m restrições lineares, definido por $g_i(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = b_i$, com $i = 1, 2, \dots, m$. Sua forma padrão é representada abaixo [10]:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Minimizar} & f(x_1, x_2, \dots, x_n) = c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_nx_n \\
 & a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\
 & a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\
 \text{Sujeito a} & \vdots \\
 & a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \\
 & x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \dots, x_n \geq 0.
 \end{array}
 \tag{2.1}$$

onde:

- f é a função objetivo;
- as equações lineares representadas por $g_i(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = b_i$, com $i = 1, 2, \dots, m$ definem as restrições do problema;
- as desigualdades $x_j \geq 0$ mostram a não negatividade das variáveis;

- os números c_j com $j = 1, 2, \dots, n$ são os coeficientes da função objetivo;
- os números a_{ij} para $i = 1, 2, \dots, m$ e $j = 1, 2, \dots, n$ representam os coeficientes das equação relacionadas às restrições do problema;
- os coeficientes b_i , para $i = 1, 2, \dots, m$ são os termos independentes das restrições e representam as limitações dos recursos associados às restrições.

Toda desigualdade pode ser transformada em uma igualdade, desde que seja acrescentada outra variável, denominada variável de desvio ou de folga. A desigualdade $a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{in}x_n \leq b_i$ pode ser representada pela equação abaixo:

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{in}x_n + x_{n+i} = b_i,$$

com

$$x_{n+i} \geq 0.$$

Analogamente, a desigualdade $a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{in}x_n \leq b_i$ pode ser representada por:

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{in}x_n - x_{n+i} = b_i,$$

com

$$x_{n+i} \geq 0.$$

Este problema também pode ser representado em notação matricial, considerando os vetores $c, x \in \mathbb{R}^n$ e $b \in \mathbb{R}^m$ e a matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ definidos a seguir, em que A é chamada matriz dos coeficientes [2]:

$$c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}, x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix} \text{ e } A = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix},$$

então o problema de otimização linear consiste na determinação do vetor $x \in \mathbb{R}^n$, tal que:

$$\text{Minimizar } f(x) = c^T x$$

$$\begin{aligned} \text{Sujeito a } Ax &= b \\ x &\geq 0. \end{aligned}$$

Observe que:

- $c^T = (c_1 \ c_2 \ \dots \ c_n)$ é o vetor de custos;
- $x^T = (x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n)$ é o vetor das variáveis ou incógnitas;
- $b^T = (b_1 \ b_2 \ \dots \ c_m)$ é o vetor dos termos independentes ou de recursos;
- $0^T = (0 \ 0 \ \dots \ 0)$ é o vetor cujos elementos são todos iguais a zero.

Resumidamente, um problema de otimização linear na forma padrão possui as seguintes características:

- A função objetivo deve ser minimizada ou maximizada;
- As restrições do problema são definidas por um sistema de equações lineares;
- As condições de não-negatividade de todas as variáveis de decisão complementam as restrições do problema.

Na forma matricial, pode-se apresentar o problema da seguinte forma:

$$\text{Minimizar } f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{j=1}^n c_j x_j$$

$$\sum_{j=1}^n a_j x_j = b$$

$$x_j \geq 0, j = 1, \dots, n.$$

em que:

$$a_j = \begin{bmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{bmatrix} : j\text{-ésima coluna da matriz } A, \text{ que são os coeficientes que multiplicam } x_j.$$

Observe o exemplo abaixo:

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 3 \\ x_2 + 2x_3 = 4 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}x_1 + \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}x_2 + \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}x_3 = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

2.3 Exemplo de um Problema de Programação Linear

Para iniciar a resolução do problema abaixo será necessário montar um modelo matemático de programação linear. Considere o exemplo:

Uma liga especial constituída de ferro, carvão, silício e níquel pode ser obtida usando as misturas desses minerais puros, além de dois tipos de materiais recuperados.

Material Recuperado 1 – MR 1 – Composição:

Custo por Kg: R\$ 0,20

Ferro – 60%

Carvão – 20%

Silício – 20%

Material Recuperado 2 – MR 2 – Composição:

Custo por Kg: R\$ 0,25

Ferro – 70%

Carvão – 20%

Silício – 5%

Níquel – 5%

A liga deve ter a seguinte composição final:

Matéria-prima	% mínima	% máxima
Ferro	60	65
Carvão	15	20
Silício	15	20
Níquel	5	8

Os custos dos materiais puros são (por Kg): ferro – R\$ 0,30; carvão – R\$ 0,20; silício – R\$ 0,28; níquel – R\$ 0,50. Qual deverá ser a composição da mistura, em termos dos materiais disponíveis, com menor custo por Kg?

Primeiramente serão definidas as variáveis de decisão. Considere que cada variável esteja relacionada à mistura e que x_1 , x_2 , x_3 , x_4 , x_5 e x_6 representem, respectivamente, as quantidades de material recuperado 1, material recuperado 2, ferro, carvão, silício e níquel. Em seguida, identifica-se a função objetivo, a qual será dada por

$$C(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = 0,2x_1 + 0,25x_2 + 0,3x_3 + 0,2x_4 + 0,28x_5 + 0,5x_6 \quad (2.4)$$

em que C indica o custo por quilo da mistura, que deve ser mínimo, e os coeficientes da função indicam o preço por quilo de cada material. Logo, é um problema de minimização.

Posteriormente, encontram-se as restrições do problema, que estão embasadas nas quantidades dos seguintes elementos: ferro, carvão, silício e níquel. Sabe-se que a quantidade de ferro na mistura deve ser igual ou superior a 60% (0,6) e igual ou inferior a 65% (0,65). Na mistura há ferro proveniente dos materiais recuperados 1 e 2, sendo, respectivamente, 60% e 70% da composição, além de ferro puro (100%). Logo:

$$0,6x_1 + 0,7x_2 + x_3 \geq 0,6 \quad (60\% \text{ da mistura}) \quad (2.5)$$

$$0,6x_1 + 0,7x_2 + x_3 \leq 0,65 \quad (65\% \text{ da mistura}) \quad (2.6)$$

Analogamente para os outros componentes, sabe-se que a quantidade de carvão na mistura deve ser igual ou superior a 15% (0,15) e igual ou inferior a 20% (0,2). Na mistura há carvão proveniente dos materiais recuperados 1 e 2, sendo 20% da composição, além de carvão puro (100%). Logo:

$$0,2x_1 + 0,2x_2 + x_4 \geq 0,15 \quad (15\% \text{ da mistura}) \quad (2.7)$$

$$0,2x_1 + 0,2x_2 + x_4 \leq 0,2 \quad (20\% \text{ da mistura}) \quad (2.8)$$

A quantidade de silício na mistura deve ser igual ou superior a 15% (0,15) e igual ou inferior a 20% (0,2). Na mistura há silício presente nos materiais recuperados 1 e 2, sendo, respectivamente, 20% e 5% da composição, além do silício puro (100%).

Assim:

$$0,2x_1 + 0,05x_2 + x_5 \geq 0,15 \quad (15\% \text{ da mistura}) \quad (2.9)$$

$$0,2x_1 + 0,05x_2 + x_5 \leq 0,2 \text{ (20\% da mistura) (2.10)}$$

A quantidade de níquel na mistura deve ser igual ou superior a 5% (0,05) e igual ou inferior a 8% (0,08). Na mistura há silício proveniente do material recuperado 2, sendo 5% da composição, e silício puro (100%).

Então:

$$0,05x_2 + x_6 \geq 0,05 \text{ (5\% da mistura) (2.11)}$$

$$0,05x_2 + x_6 \leq 0,08 \text{ (8\% da mistura) (2.12).}$$

Sabe-se também que a junção de todos os materiais deve corresponder ao total da mistura. Logo:

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 = 1 .$$

Ao acrescentar as variáveis de folga às inequações 2.6, 2.8, 2.10 e 2.12, e subtrair as variáveis de excesso da inequações 2.5, 2.7, 2.9 e 2.11, obtém-se:

$$0,6x_1 + 0,7x_2 + x_3 - x_7 = 0,6$$

$$0,6x_1 + 0,7x_2 + x_3 + x_8 = 0,65$$

$$0,2x_1 + 0,2x_2 + x_4 - x_9 = 0,15$$

$$0,2x_1 + 0,2x_2 + x_4 + x_{10} = 0,2$$

$$0,2x_1 + 0,05x_2 + x_5 - x_{11} = 0,15$$

$$0,2x_1 + 0,05x_2 + x_5 + x_{12} = 0,2$$

$$0,05x_2 + x_6 - x_{13} = 0,05$$

$$0,05x_2 + x_6 + x_{14} = 0,08 .$$

Logo, o problema de programação linear pode ser representado por:

$$\text{Minimizar } C(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = 0,2x_1 + 0,25x_2 + 0,3x_3 + 0,2x_4 + 0,28x_5 + 0,5x_6$$

$$\text{Sujeito a } 0,6x_1 + 0,7x_2 + x_3 - x_7 = 0,6$$

$$0,6x_1 + 0,7x_2 + x_3 + x_8 = 0,65$$

$$0,2x_1 + 0,2x_2 + x_4 - x_9 = 0,15$$

$$0,2x_1 + 0,2x_2 + x_4 + x_{10} = 0,2$$

$$0,2x_1 + 0,05x_2 + x_5 - x_{11} = 0,15$$

$$\begin{aligned}
0,2x_1 + 0,05x_2 + x_5 + x_{12} &= 0,2 \\
0,05x_2 + x_6 - x_{13} &= 0,05 \\
0,05x_2 + x_6 + x_{14} &= 0,08 \\
x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 &= 1 \\
x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \geq 0, x_4 \geq 0, x_5 \geq 0, x_6 \geq 0, x_7 \geq 0, x_8 \geq 0, x_9 \geq 0, x_{10} \geq 0, x_{11} \geq 0, x_{12} \geq 0, x_{13} \geq 0, x_{14} \geq 0.
\end{aligned}$$

Com o problema organizado na forma padrão (restrições na forma de igualdade), escolhe-se um método de resolução (por exemplo, o Simplex, visto que é um problema de pequeno porte). As variáveis de folga representam, necessariamente, as soluções não básicas, ou seja, de valor zero, enquanto x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 e x_6 (variáveis iniciais do problema) podem obter valores nulos ou não.

2.4 Resolução Gráfica de Problemas Lineares

A visualização de soluções gráficas de um problema matemático, quando possível e mesmo que limitada a um desenho esquematizado no plano, pode ser bastante útil para melhorar nossa intuição sobre um estudo, porém é restrita a problemas de até três variáveis.

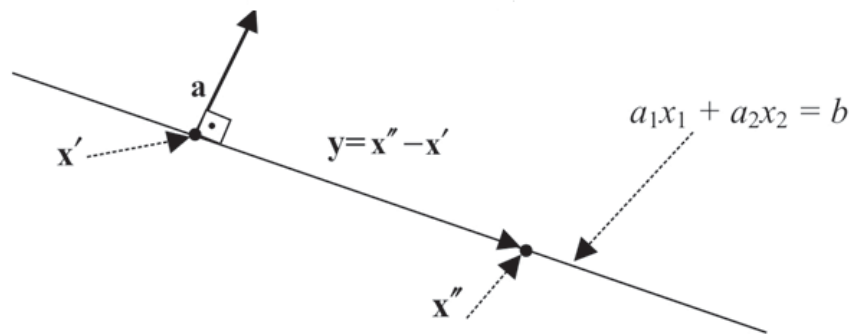
Resolver um problema de otimização linear consiste em encontrar uma solução ótima, ou seja, uma solução factível x^* tal que $f(x^*) \leq f(x)$ (problema de minimização), para todo x factível.

De maneira generalizada, considere uma reta $a_1x_1 + a_2x_2 = b$. Devem ser consideradas duas situações:

1. O vetor formado pelos coeficientes (gradiente) é perpendicular à reta $a_1x_1 + a_2x_2 = b$;
2. O vetor formado pelos coeficientes aponta no sentido de maior crescimento da função.

Para provar que o vetor $a^T = (a_1 \ a_2)$ é perpendicular a essa reta, considere dois pontos sobre a reta, denominados $x' = (x'_1 \ x'_2)$ e $x'' = (x''_1 \ x''_2)$. Considere agora um vetor y , tal que $y = x'' - x'$ e y define a direção da reta, conforme Figura 1.

Figura 1 – O vetor a , perpendicular à reta $a_1x_1 + a_2x_2 = b$.



FONTE: Arenales et al, p.58, adaptado pela autora.

Sabe-se que se o produto escalar entre dois vetores for nulo, então os vetores são perpendiculares entre si. Observe o produto escalar entre os vetores a e y , sendo $y_1 = x_1'' - x_1'$ e $y_2 = x_2'' - x_2'$.

$$\begin{aligned} (a_1 \ a_2) \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} &= a_1(x_1'' - x_1') + a_2(x_2'' - x_2') = (a_1 x_1'' + a_2 x_2'') - (a_1 x_1' + a_2 x_2') = b - b \\ &= 0 \end{aligned}$$

Como o produto escalar gerou um resultado nulo, então o vetor a é perpendicular ao vetor y . A análise acima vale para o \mathbb{R}^2 e qualquer \mathbb{R}^n , porém, no \mathbb{R}^2 o vetor a é perpendicular à reta, no \mathbb{R}^3 perpendicular ao plano e no \mathbb{R}^n perpendicular a um conjunto denominado *hiperplano*.

Agora, para provar que o vetor dos coeficientes aponta no sentido de maior crescimento da função, ou ainda $a^T x > b$, considere um ponto x' , pertence à reta, e observe que, ao adicionar um múltiplo positivo do vetor a , encontram-se todos os pontos pertencentes à região de maior crescimento da função, ou seja, encontram-se os infinitos valores de x , tal que $x = x' + \delta a$, $\delta > 0$. Logo:

$$a^T x = a^T(x' + \delta a) = a^T x' + \delta a^T a > b,$$

pois $\delta > 0$, $a^T a = a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2 > 0$ e $a \neq 0$. Quando $a = 0$, tem-se a equação $0x_1 + 0x_2 = b$. Se $b = 0$, encontra-se uma equação trivial $0 = 0$, e se $b \neq 0$, verifica-se uma equação impossível, com $0 = b$.

Analogamente, para encontrar os pontos que satisfazem $a^T x \leq b$ é preciso traçar a reta $a^T x = b$, desenhar o vetor a e considerar os pontos pertencentes à região de

decréscimo da função (região factível), ou seja, no sentido oposto ao vetor a . Para encontrar a solução ótima, será necessário analisar as curvas de nível associadas e verificar o melhor ponto (quando houver), que será a solução ótima da região factível.

2.4.1 Região Factível Limitada e única Solução Ótima

Considere o problema de otimização linear (minimização) [2]:

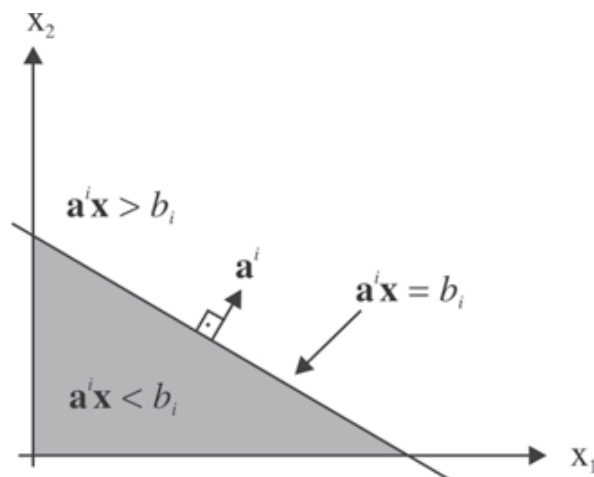
$$\begin{aligned} \text{Minimizar } f(x) &= c^T x \\ Ax &\leq b \\ x &\geq 0, \text{ com } x \in \mathbb{R}^2 \end{aligned}$$

Denota-se a região factível por $S = \{x \in \mathbb{R}^2 \text{ tal que } Ax \leq b \text{ e } x \geq 0\}$. A reta $a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 = b_i$ divide o espaço \mathbb{R}^2 em três partes:

1. $x \in \mathbb{R}^2$ tal que $(a^i)^T x = b_i$;
2. $x \in \mathbb{R}^2$ tal que $(a^i)^T x < b_i$;
3. $x \in \mathbb{R}^2$ tal que $(a^i)^T x > b_i$.

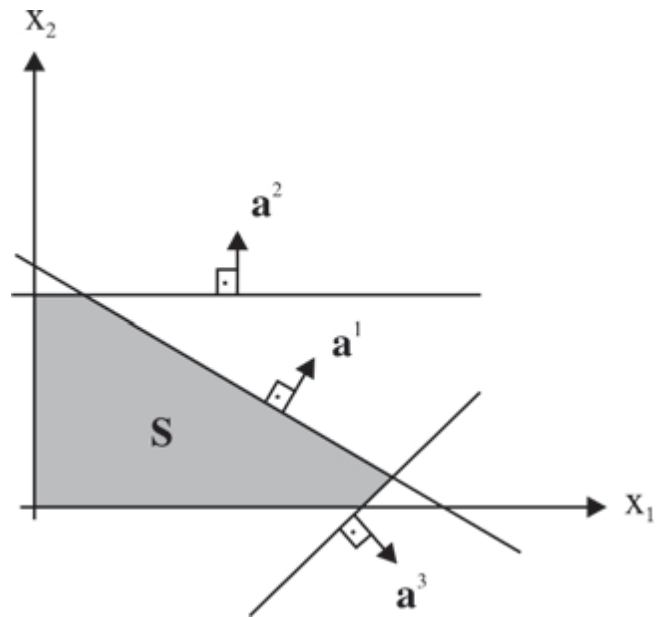
Na Figura 2, observa-se o vetor a_i (gradiente), formado pelos coeficientes da equação da reta e perpendicular a ela, a reta $(a^i)^T x = b_i$ e a região factível definida pela intersecção das restrições do tipo $a^i x \leq b_i$ com o primeiro quadrante.

Figura 2 - As regiões do plano: $a^i x = b_i$, $a^i x \leq b_i$ e $a^i x \geq b_i$.



FONTE: Arenales et al, p.60.

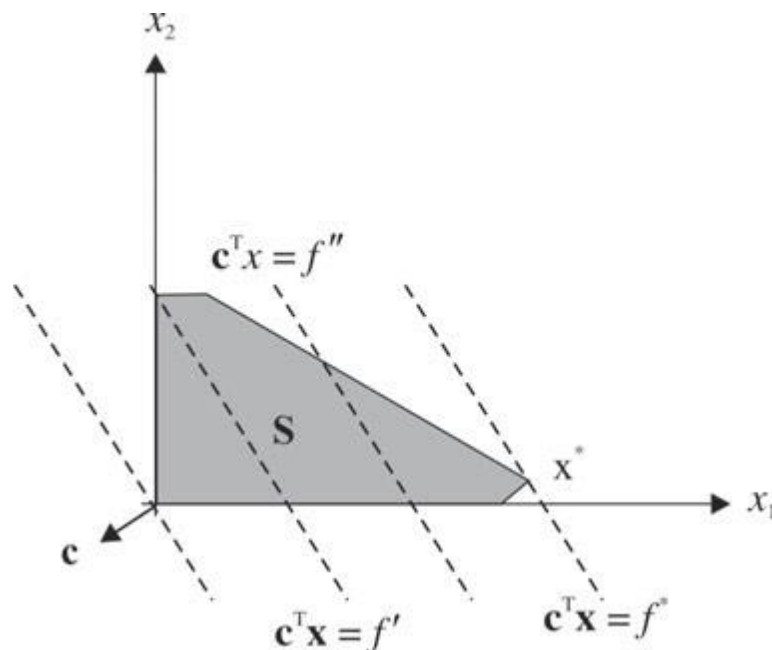
Figura 3 - Região factível de restrições do tipo $a^i x \leq b_i$, $i = 1, 2, 3, \dots, m$.



FONTE: Arenales et al, p.60.

Agora basta encontrar a solução ótima, ou seja, a solução x^* , pertencente à região factível, que minimize a função objetivo $f(x)$. Na Figura 4, verifica-se a curva de nível $c^T x = f^*$, em que $f^* = f(x^*)$, e observa-se que todo o conjunto S está para onde o gradiente aponta. Logo, x^* é a solução ótima, ou seja, o ponto que minimiza a função objetivo.

Figura 4 - Curvas de nível e solução ótima (problema de minimização).



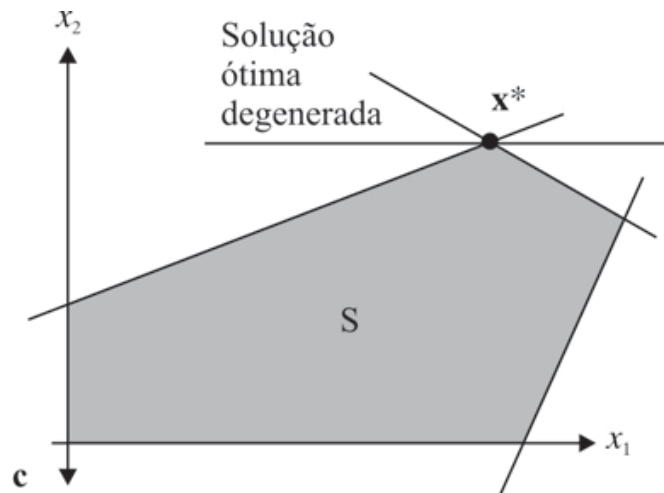
FONTE: Arenales et al, p.61.

Na Figura 4, a solução ótima x^* é uma solução factível denominada vértice ou ponto extremo, porém, a solução ótima nem sempre será um vértice, conforme observações abaixo.

1. Se um problema de otimização linear tem uma solução ótima, então existe um vértice ótimo;
2. Se uma solução for ótima, não necessariamente será um vértice;
3. Se a região factível é limitada, então existe uma solução ótima.

A Figura 5 mostra uma situação em que o mesmo vértice pode ser obtido como intersecção de retas diferentes, ou seja, pelo definido por mais que duas restrições, produzindo um vértice denominado *degenerado*. Em geral, esses vértices introduzem dificuldades nos modelos de soluções.

Figura 5 - Múltiplas soluções ótimas (problema de maximização).

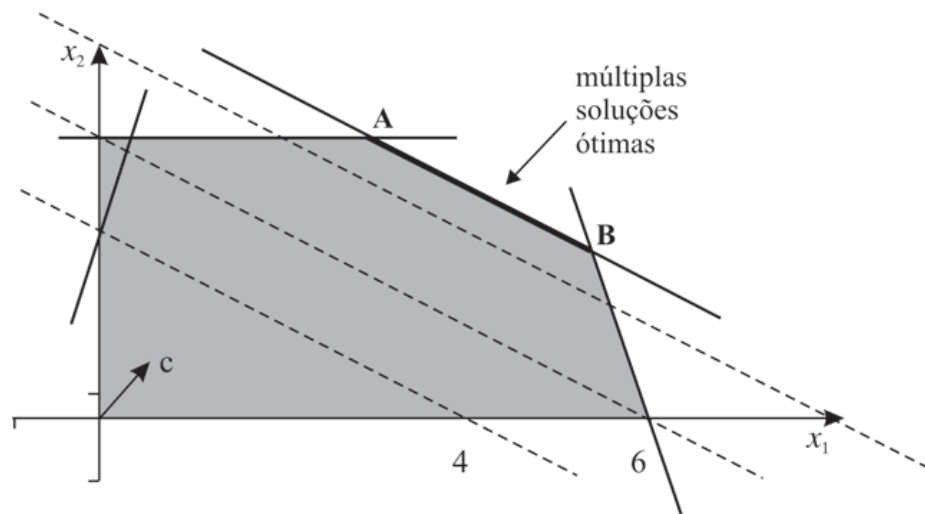


FONTE: Arenales et al, p.65

2.4.2 Região Factível Limitada e infinitas Soluções Ótimas

Quando a região factível é limitada pode haver uma única solução ótima ou infinitas, sendo o caso de solução única analisado no subcapítulo 2.3.1. Em situações em que o problema gera infinitas soluções ótimas usa-se o mesmo processo de resolução anterior. O que se percebe nesses problemas é que o gradiente da função objetivo é um múltiplo do gradiente da reta. Por exemplo, a Figura 6 representa um problema de maximização em que o vetor gradiente da função objetivo, $c = (1, 2)$ é múltiplo do gradiente da reta $x_1 + 2x_2 = 9$. Todos os pontos pertencentes ao segmento que liga os pontos A e B são soluções ótimas.

Figura 6 - Múltiplas soluções ótimas (problema de maximização).

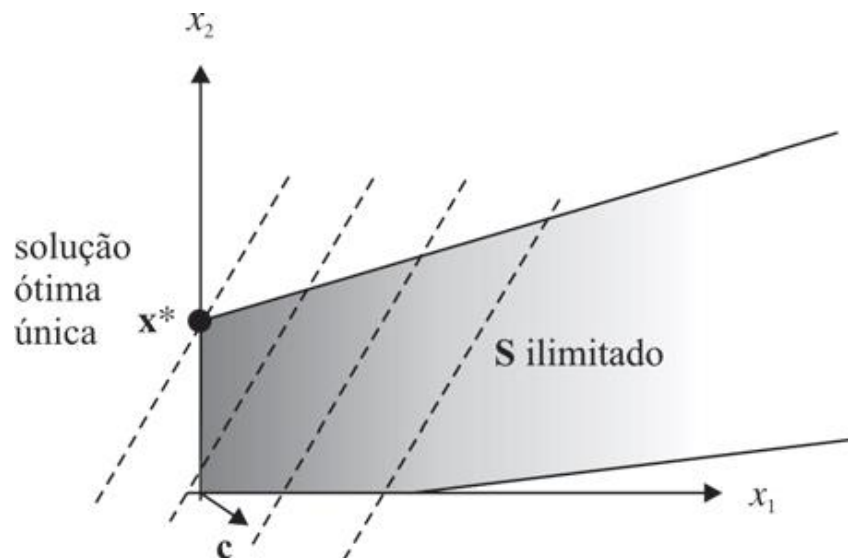


FONTE: Arenales et al, p.64.

2.4.3 Região Factível Ilimitada e Solução Ótima (única ou infinitas)

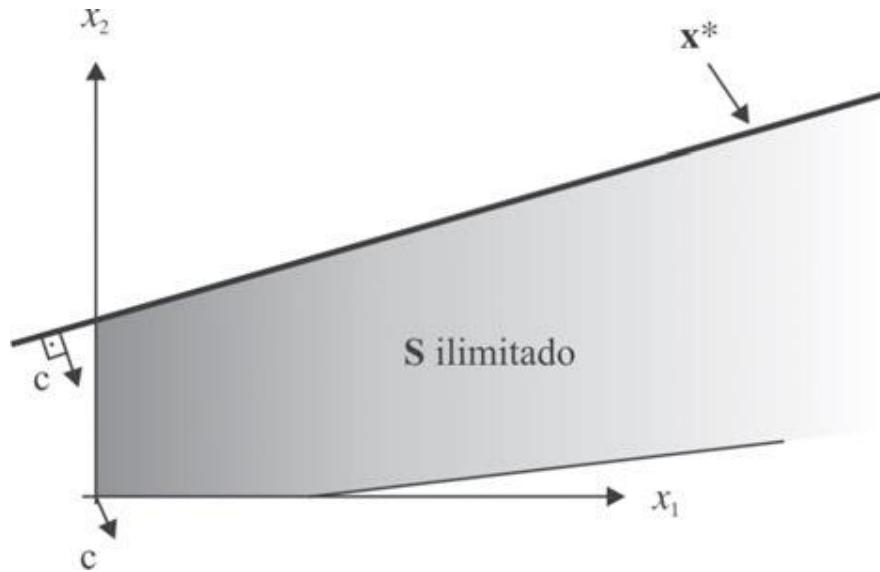
Quando uma região factível é ilimitada, podem aparecer três situações: com única solução ótima, infinitas soluções ótimas (conjunto limitado por um segmento ou ilimitado, representado por uma semirreta) ou nenhuma, conforme se observa nas Figuras 7, 8 e 9.

Figura 7 - Região factível ilimitada e solução ótima única (minimização).



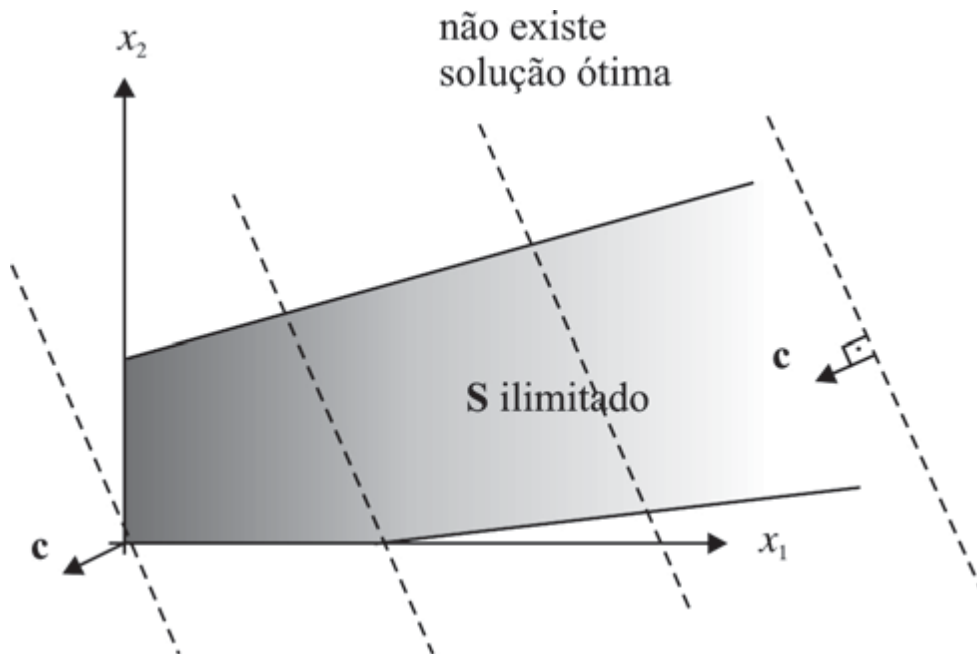
FONTE: Arenales et al, p.63.

Figura 8 - Região factível ilimitada e infinitas soluções ótimas, conjunto ilimitado de soluções ótimas (minimização).



FONTE: Arenales et al, p.64.

Figura 9 - Região factível ilimitada e não existe solução ótima (solução ótima ilimitada), $c^T x \rightarrow -\infty$ (minimização).

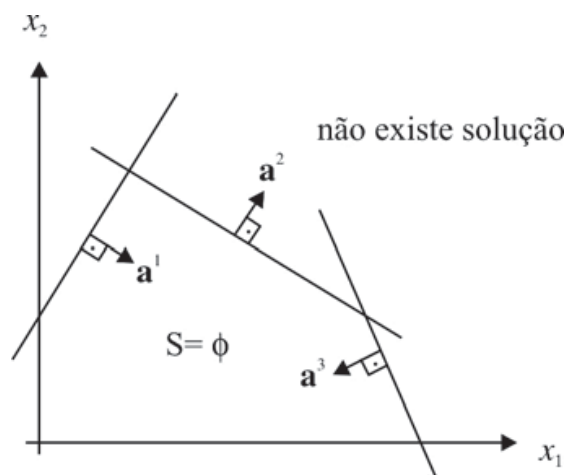


FONTE: Arenales et al, p.65.

2.4.4 Sem Região Factível

A inexistência [2] de solução ótima também pode ocorrer pela inexistência de solução factível, isto é, $S = \emptyset$, fato que ocorre devido às restrições serem conflitantes, conforme se observa na Figura 10.

Figura 10 - Não existe solução ótima: $S = \emptyset$.



FONTE: Arenales et al, p.65.

2.5 Aplicação

Considere um exemplo de problema de otimização linear com duas variáveis. Por conveniência, o problema será trabalhado na forma de desigualdade, ou seja, sem variáveis de folga ou excesso.

$$\text{Maximizar } f(x_1, x_2) = x_1 + 2x_2$$

$$x_1 + x_2 \leq 4$$

$$x_1 \leq 2$$

$$x_2 \leq 3$$

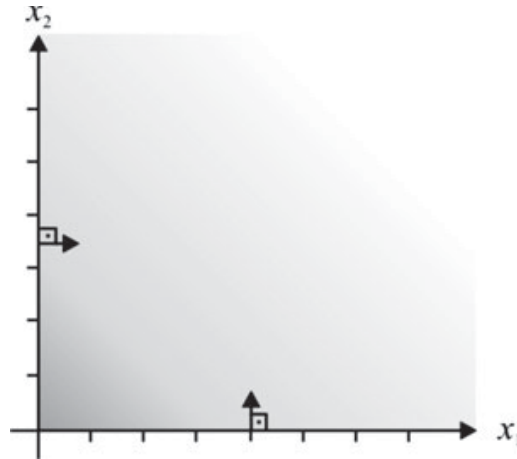
$$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0.$$

Primeiramente, desenha-se a região factível (S), denominada por:

$$S = \{(x_1, x_2) \text{ tal que } x_1 + x_2 \leq 4, x_1 \leq 2, x_2 \leq 3, x_1 \geq 0, x_2 \geq 0\}.$$

Começa-se a representação gráfica desenhando os semiplanos que definem as restrições de não negatividade ($x_1 \geq 0$ e $x_2 \geq 0$), ou seja, o primeiro quadrante do plano, conforme figura abaixo 11.

Figura 11 - Região definida por $x_1 \geq 0$ e $x_2 \geq 0$.



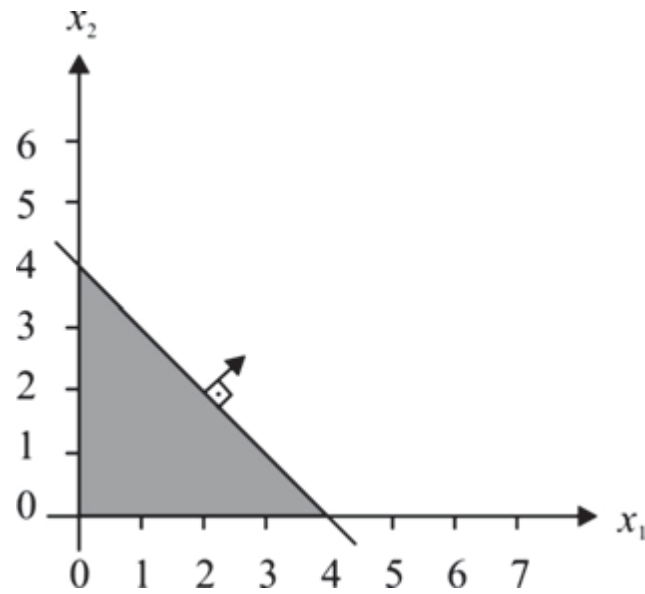
FONTE: Arenales et al, p.55.

Para encontrar os pontos do plano que também satisfazem a restrição $x_1 + x_2 \leq 4$ precisa-se, inicialmente, descobrir os valores que satisfazem a equação $x_1 + x_2 = 4$, ou seja, encontrar a reta correspondente. Sabe-se que para definir uma reta bastam apenas dois pontos distintos. Logo, se atribuir $x_1 = 0$, verifica-se que $x_2 = 4$. Analogamente, se $x_2 = 0$, então $x_1 = 4$. Os pontos $(0, 4)$ e $(4, 0)$ definem onde o gráfico intercepta os eixos. A reta formada divide o plano em duas partes, denominadas semiplanos. Para verificar qual parte irá satisfazer a restrição $x_1 + x_2 \leq 4$, basta escolher um ponto pertencente a um dos semiplanos e substituí-lo na inequação. A sentença verdadeira indicará o semiplano escolhido, ou seja, considere a coordenada $(0, 0)$, ao substituir x_1 e x_2 por zero, observa-se que:

$$\begin{aligned}x_1 + x_2 &\leq 4 \\0 + 0 &\leq 4 \\0 &\leq 4.\end{aligned}$$

Logo, o semiplano que contém o ponto $(0, 0)$ satisfaz a restrição e, como também pode ocorrer soma 4, a reta será contínua, conforme se observa na figura 12 (região hachurada). Outro modo de encontrar a região que satisfaz a restrição é analisar o vetor $(1, 1)^T$, o qual é perpendicular à reta e aponta no sentido de crescimento da função, ou seja, a região que satisfaz a restrição é oposta ao sentido de crescimento.

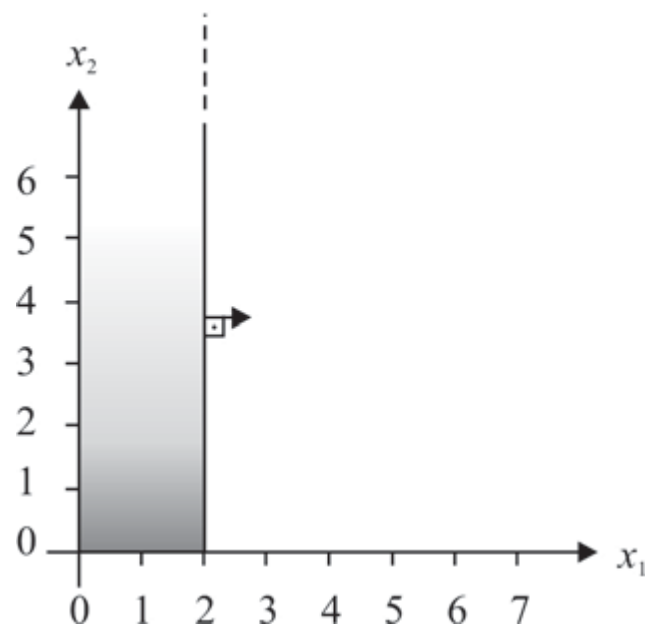
Figura 12 - Região definida por $x_1 + x_2 \leq 4$, $x_1 \geq 0$ e $x_2 \geq 0$.



FONTE: Arenales et al, p.56, adaptado pela autora.

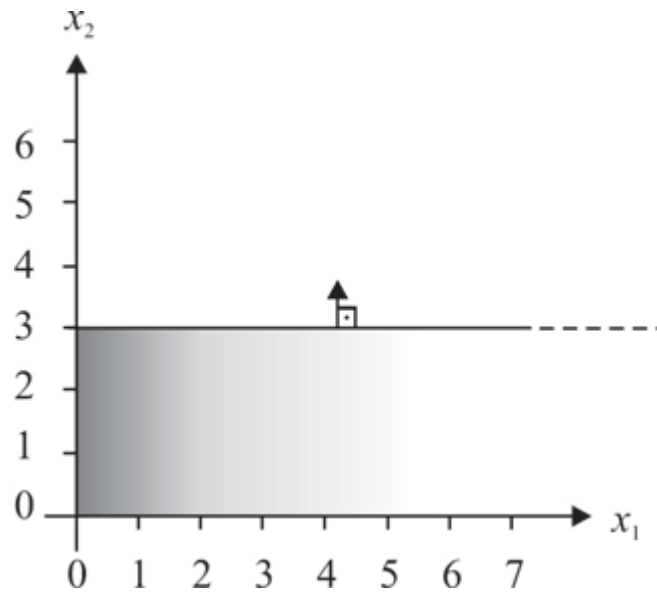
Analogamente, as regiões de pontos que satisfazem as restrições $x_1 \leq 2$ e $x_2 \leq 3$ estão representadas pelas figuras 13 e 14, respectivamente. A reta associada à restrição $x_1 \leq 2$ é vertical, interceptando o eixo x_1 no ponto $(2, 0)$, assim como a reta referente à restrição $x_2 \leq 3$ intercepta o eixo x_2 no ponto $(0, 3)$.

Figura 13 - Região definida por $x_1 \leq 2$, $x_1 \geq 0$ e $x_2 \geq 0$.



FONTE: Arenales et al, p.56

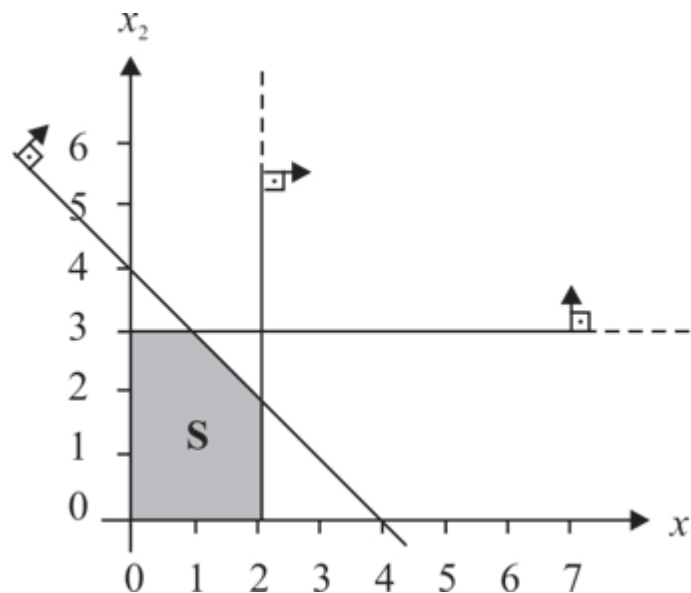
Figura 14 - Região definida por $x_2 \leq 3$, $x_1 \geq 0$ e $x_2 \geq 0$.



FONTE: Arenales et al, p.57

A intersecção de todas as regiões apresentadas pela Figuras 12, 13 e 14 representa a região factível (S), conforme Figura 15.

Figura 15 - Região factível (S)



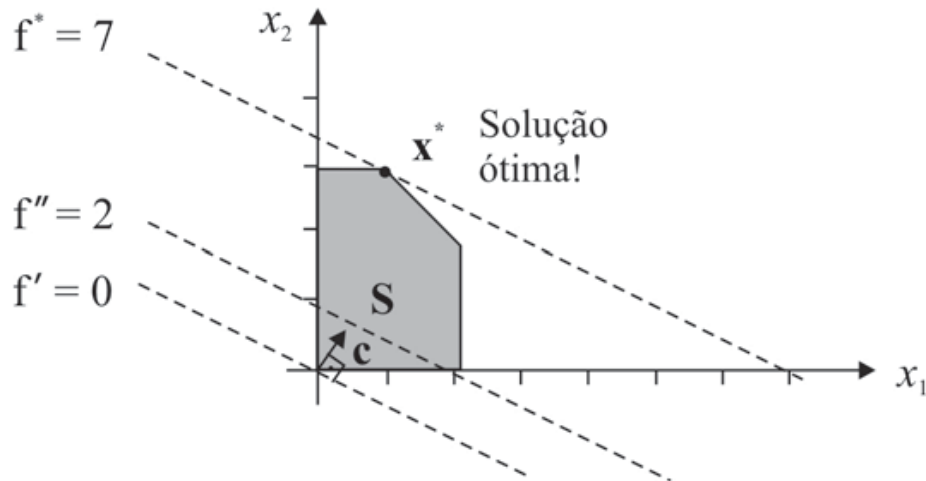
FONTE: Arenales et al, p.57

A função objetivo $f(x_1, x_2) = x_1 + 2x_2$, definida no conjunto S, pode assumir infinitos valores e o conjunto de pontos que atribui o mesmo valor à função objetivo, recebe o nome *curva de nível*. Observe a solução factível $x' = (x'_1, x'_2)^T = (0, 0)^T$, em que a função objetivo vale $f' = f(x') = 0$ e todos os pontos do plano que apresentam o mesmo valor à

função estão na reta $x_1 + 2x_2 = 0$. Sabe-se que, ao definir a região factível, o vetor do coeficientes $(1 \ 2)^T$, denominado *gradiente de f* e denotado por $\nabla f(x_1, x_2)$, é perpendicular à reta $x_1 + 2x_2 = 0$ e aponta no sentido de crescimento da função. Logo, observa-se que a solução factível $(0 \ 0)^T$ não é uma solução ótima, pois a função pode assumir valores maiores que zero.

Considere a solução factível $x'' = (x_1' x_2')^T = (2 \ 0)^T$, a função objetivo $f'' = f''(x'') = 2$ e a curva de nível $x_1 + 2x_2 = 2$. Como o gradiente é o mesmo, então a reta é paralela à anterior. Porém, como pode ser observado na Figura 17, a solução factível $(2 \ 0)^T$ não é uma solução ótima, pois a função pode assumir valores maiores que 2. Analogamente, a solução factível $x^* = (x_1^* x_2^*)^T = (1 \ 3)^T$, para a qual $f^* = f(x^*) = 7$, é solução ótima do problema, pois todos os pontos abaixo da curva de nível $x_1 + 2x_2 = 7$ atribuem valores menores que 7 à função, ou seja, como o vetor gradiente aponta no sentido de crescimento da função, verifica-se que não há valor maior atribuído à função objetivo, conforme observa-se na Figura 16.

Figura 16 - Curvas de nível f' , f'' , f^* e da solução ótima x^* .



FONTE: Arenales et al, p.58

Portanto, a solução $x^* = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}$ que satisfaz todas as restrições simultaneamente e maximiza a função existe e é única.

2.5 Dualidade Linear

Usualmente, chama-se o problema original de Problema *Primal*, e o seu correspondente de Problema *Dual*.

Tabela 1 - Relação entre o programa primal e o dual.

	PRIMAL	DUAL
nº de restrições	m	n
nº de variáveis	n	m
Variáveis e Restrições	variáveis ≥ 0	restrições de \leq
	restrições de igualdade	variáveis sem restrição
Matriz	A	A^T
Coefficientes de custo	c	b
Termos independentes	b	c

Fonte: Júdice et al, p. 28

Observe o problema primal de otimização linear na forma padrão (as restrições são representadas por igualdades) e o seu dual associado:

$$\begin{array}{ll}
 \max & c^t x \\
 \text{s. a.} & Ax \leq b. \\
 & x \geq 0, x \in \mathbb{R}^n
 \end{array}
 \leftrightarrow
 \begin{array}{ll}
 \min & b^t y \\
 \text{s. a.} & A^t y \geq c. \\
 & y \geq 0, y \in \mathbb{R}^m
 \end{array}$$

O dual do problema dual é o próprio primal, conforme descrição abaixo, na qual se usou o problema dual na forma padrão I.

$$\begin{array}{ll}
 \min & -c^t x \\
 \text{s. a.} & -Ax \geq -b. \\
 & x \geq 0
 \end{array}
 \leftrightarrow
 \begin{array}{ll}
 \max & c^t x \\
 \text{s. a.} & Ax \leq b. \\
 & x \geq 0
 \end{array}$$

Através dessas transformações verifica-se que [11]:

- cada variável do primal corresponde a uma restrição;
- cada restrição do primal corresponde a uma variável do dual;

- os coeficientes da função objetivo do primal correspondem aos termos independentes das restrições do dual;
- os termos independentes das restrições do primal correspondem aos coeficientes da função objetivo do dual;
- a transposta da matriz de restrições do primal é a matriz de restrições do dual;
- se o primal for um problema de maximização (minimização) na forma padrão, então o problema dual será um problema de minimização (maximização).

Mesmo com a transformação de primal para dual ou dual para primal, a solução ótima será a mesma.

Lema 2.1 (Dualidade Fraca) Se $K_P = \{x \in \mathcal{R}^n: Ax = b, x \geq 0\}$ e $K_D = \{u \in \mathcal{R}^m: A^T u \leq c\}$ são os conjuntos admissíveis do primal e do dual, respectivamente, então para quaisquer $x \in K_P$ e $u \in K_D$ tem-se que:

$$b^T u \leq c^T x.$$

Demonstração: Se $x \in K_P$ e $u \in K_D$, então,

$$b^T u = (Ax)^T u = x^T A^T u \leq x^T c = c^T x,$$

pois $x \geq 0$ e $A^T u \leq c$ [15].

Corolário 2.1 Se x_0 e u_0 forem viáveis para o problema primal e dual, respectivamente, e se $c^T x_0 = u_0^T b$, então x_0 e u_0 são ótimos para os respectivos problemas.

O corolário mostra que, se um par de vetores viáveis puderem ser encontrados nos problemas primal e dual, com valores objetivos iguais, estes são ambos otimizados. O teorema da dualidade da programação linear indica que o inverso também é verdadeiro [15].

Para exemplificar a Tabela 1, serão analisadas duas situações relacionadas às variáveis e restrições. Na primeira análise, considere um problema primal com uma desigualdade. Como no Dual há desigualdades do tipo \leq , supõe-se que essa desigualdade é da forma \geq . Então, o problema linear assume a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & z = c^T x \\ \text{Sujeito a} \quad & A_1 x \geq b_1 \\ & x \geq 0. \end{aligned}$$

Ao usar a variável de folga x_{n+1} na igualdade, encontra-se o programa equivalente:

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & z = c^T x + 0x_{n+1} \\ \text{Sujeito a} \quad & A_1 x - x_{n+1} = b_1 \\ & x \geq 0, x_{n+1} \geq 0. \end{aligned}$$

O dual desse problema é:

$$\begin{aligned} \text{Maximizar} \quad & w = b_1 u_1 \\ \text{Sujeito a} \quad & A_1^T u_1 \leq c \\ & -u_1 \leq 0. \end{aligned}$$

Portanto, verifica-se que $u_1 \geq 0$, ou seja, a variável dual correspondente a uma restrição de desigualdade \geq do primal possui restrição de sinal.

Agora na segunda análise, considere um programa linear com restrição de igualdade e uma variável sem restrição de sinal [10].

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & z = c^T + c_{n+1}x_{n+1} \\ \text{Sujeito a} \quad & a^T x + a_{n+1}x_{n+1} = b_1 \\ & x \geq 0. \end{aligned}$$

Ao escrever a variável x_{n+1} como uma combinação linear de duas outras variáveis não negativas, ou seja, $x_{n+1} = x'_{n+1} - x''_{n+1}$, encontra-se o problema equivalente:

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & z = c^T + c_{n+1}x'_{n+1} - c_{n+1}x''_{n+1} \\ \text{Sujeito a} \quad & a^T x + a_{n+1}x'_{n+1} - a_{n+1}x''_{n+1} = b_1 \\ & x \geq 0, x'_{n+1} \geq 0, x''_{n+1} \geq 0. \end{aligned}$$

O dual será escrito como:

$$\begin{aligned} \text{Maximizar} \quad & w = u_1 b_1 \\ \text{Sujeito a} \quad & a u_1 \leq c \\ & a_{n+1} u_1 \leq c_{n+1} \\ & - a_{n+1} u_1 \leq - c_{n+1}. \end{aligned}$$

Das duas últimas igualdades, verifica-se que:

$$a_{n+1} u_1 = c_{n+1}$$

Logo, toda variável sem restrição no primal corresponde a uma igualdade no dual.

3. MÉTODO SIMPLEX

O Método Simplex consiste em procurar a solução ótima nos extremos da região factível, ou seja, caminha-se pelos vértices da região factível, até encontrar a melhor solução. Este caminho está relacionado com a direção e o sentido do vetor gradiente, isto é, o sentido do vetor leva a pontos que aumentam o valor da função objetivo e o oposto, a pontos que diminuem este valor.

3.1 Pivoteamento

Observe o sistema de equações lineares (3.1):

$$\begin{array}{rcccc}
 a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n & = & b_1 & & \\
 a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n & = & b_2 & & \\
 \vdots & & \vdots & & \vdots \\
 a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n & = & b_m & , &
 \end{array} \tag{3.1}$$

onde $m > n$. Ao reescrever de forma matricial tem-se:

$$Ax = b.$$

Considere o conjunto de m equações lineares que podem ser solucionadas por um vetor x . Denotando-se por a^i as linhas i da matriz A , encontra-se:

$$\begin{array}{r}
 a^1x = b_1 \\
 a^2x = b_2 \\
 \vdots \\
 a^m x = b_m.
 \end{array} \tag{3.2}$$

Segundo [10], se as equações (3.2) são linearmente independentes, pode-se substituir uma equação dada por qualquer múltiplo não nulo, com qualquer combinação linear de outras equações no sistema. Isto leva ao conhecido sistema de eliminação de Gauss, onde equações múltiplas são adequadamente substituídas por outras para compor uma forma triangular ou

canônica. Assim, se as primeiras m colunas de A são linearmente independentes, então o sistema (3.1) pode, após uma sequência de multiplicações e subtrações, ser convertido na *forma canônica* seguinte:

$$\begin{array}{rcl}
 x_1 & + y_{1,m+1}x_{m+1} + y_{1,m+2}x_{m+2} + \dots + y_{1,n}x_n & = y_{10} \\
 x_2 & + y_{2,m+1}x_{m+1} + y_{2,m+2}x_{m+2} + \dots + y_{2,n}x_n & = y_{20} \\
 & \vdots & \vdots \\
 x_m & + y_{m,m+1}x_{m+1} + y_{m,m+2}x_{m+2} + \dots + y_{m,n}x_n & = y_{m0}
 \end{array} \quad (3.3)$$

As variáveis x_1, x_2, \dots, x_m são denominadas *básicas* e as outras variáveis *não básicas*.

O sistema (3.3) também pode ser representado na forma de matriz ou *tableau*, conforme (3.4):

$$\begin{array}{ccccccc}
 1 & 0 & 0 & y_{1,m+1} & \dots & y_{1n} & y_{10} \\
 0 & 1 & 0 & y_{2,m+1} & \dots & y_{2n} & y_{20} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 0 & 0 & 1 & y_{m,m+1} & \dots & y_{mn} & y_{m0}
 \end{array} \quad (3.4)$$

Uma questão resolvida por pivoteamento tem a seguinte forma: dado um sistema da forma canônica, supondo que uma variável básica seja não básica e uma variável não básica seja básica; qual é a nova forma canônica correspondente ao novo conjunto de variáveis básicas? O procedimento é simples. Seja o sistema (3.3), substituindo a variável básica x_p , $1 \leq p \leq m$ pela variável não básica x_q . Isto pode ser feito se, e somente se, y_{pq} é diferente de zero; isto é possível pela divisão da linha p por y_{pq} obtendo uma unidade como coeficiente de x_q na equação de ordem p , e então subtraindo múltiplos adequados da linha p de cada uma das linhas a fim de conseguir zero como coeficiente de x_q em todas as outras equações. Isto transforma a coluna de ordem q do tableau em valor zero, exceto a variável de ordem p (que é unitária), e não afetando a coluna das outras variáveis básicas [10].

Denominando de y'_{ij} os novos coeficientes da forma canônica, tem-se:

$$\begin{cases} y'_{ij} = y_{ij} - \frac{y_{pj}}{y_{pq}} y_{iq}, & i \neq j \\ y'_{pj} = \frac{y_{pj}}{y_{pq}} \end{cases}$$

As equações pivô que surgem frequentemente na Programação Linear estão representadas acima, sendo y_{pq} denominado *elemento pivô*, situado na intersecção entre as linhas das variáveis de entrada e saída.

Existem condições especiais que devem ser consideradas a fim de que a operação de pivoteamento mantenha a factibilidade [10]. A seguir será apresentada uma aplicação do método Simplex, indicando os passos de resolução, assim como seleccionar os elementos pivôs para transformar uma solução básica factível em outra.

Definição 3.1 (Solução não degenerada) *Cada solução básica factível de $Ax = b$, com $x_B > 0$, é uma solução básica factível não degenerada.*

3.1.1 Soluções Degeneradas

É possível que, no decorrer no processo Simplex, possam aparecer soluções básicas factíveis degeneradas. Muitas vezes, essas soluções podem ser manipuladas como uma solução básica factível não degenerada. No entanto, é possível que depois que uma nova coluna q seja seleccionada para entrar na base, a razão mínima entre $\frac{y_{io}}{y_{iq}}$ seja igual a zero, o que implica que a variável de valor nulo seja a variável a sair da base. Isto significa que a nova variável x_q irá entrar com valor nulo, a função objetivo não irá decrescer, e a nova solução básica factível também será uma solução degenerada. Este processo pode ocorrer por várias etapas até que a solução original degenerada seja obtida novamente. Isto gera um ciclo que pode se repetir indefinidamente. Uma das formas de resolver o problema de solução degenerada é fazer uma perturbação no valor [10].

3.1.2 Solução Factível Mínima

Seja a seguinte solução básica factível:

$$(x_B, 0) (y_{10}, y_{20}, \dots, y_{m0}, 0, 0, \dots, 0),$$

junto com o tableau tem-se uma matriz identidade nas primeiras m colunas como mostradas abaixo.

$$\begin{array}{cccccccc}
 a_1 & a_2 & \dots & a_m & a_{m+1} & \dots & a_n & b \\
 1 & 0 & & 0 & y_{1,m+1} & \dots & y_{1n} & y_{10} \\
 0 & 1 & & 0 & y_{2,m+1} & \dots & y_{2n} & y_{20} \\
 \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 0 & 0 & & 1 & y_{m,m+1} & \dots & y_{mn} & y_{10}
 \end{array} \tag{3.5}$$

Para qualquer valor de x , a função objetivo adquire o valor:

$$z = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_n x_n, \tag{3.6}$$

e o valor correspondente à solução básica é:

$$z_0 = c_B^T x_B, \tag{3.7}$$

onde $c_B^T = [c_1, c_2, \dots, c_m]$.

Embora seja natural usar a solução básica $(x_B, 0)$ quando se tem um tableau (3.5), se valores arbitrários são atribuídos para $x_{m+1}, x_{m+2}, \dots, x_n$, as variáveis restantes podem ser resolvidas como:

$$\begin{array}{l}
 x_1 = y_{10} - \sum_{j=m+1}^n y_{1j} x_j \\
 x_2 = y_{20} - \sum_{j=m+1}^n y_{2j} x_j \\
 \vdots \\
 x_m = y_{m0} - \sum_{j=m+1}^n y_{mj} x_j
 \end{array} \tag{3.8}$$

Usando (3.6) pode-se subtrair x_1, x_2, \dots, x_m da forma geral (3.8). Logo, obtém-se:

$$z = c^T x = z_0 + (c_{m+1} - z_{m+1})x_{m+1} + \dots + (c_n - z_n)x_n, \quad (3.9)$$

onde

$$z_j = y_{1j}c_1 + y_{2j}c_2 + \dots + y_{mj}c_m, \quad m+1 \leq j \leq n, \quad (3.10)$$

que é uma relação fundamental para determinar a coluna pivô [10]. A partir disso, é possível verificar se existe vantagem em trocar a solução básica por outra variável não básica.

Considerando y_i como sendo a i -ésima coluna do tableau, então qualquer solução satisfaz

$$x_1 e_1 + x_2 e_2 + \dots + x_m e_m = y_0 - x_{m+1} y_{m+1} - x_{m+2} y_{m+2} - \dots - x_n y_n.$$

Calculando o produto interno desta equação com o vetor c_B^T , tem-se:

$$\sum_{i=1}^m c_i x_i = c_B^T y_0 - \sum_{j=m+1}^n z_j x_j,$$

onde $z_j = c_B^T y_j$. Logo, adicionando $\sum_{j=m+1}^n c_j x_j$ em ambos os membros, tem-se:

$$c^T x = z_0 + \sum_{j=m+1}^n (c_j - z_j) x_j, \quad (3.11)$$

como anteriormente [10].

Teorema 3.1. (Melhor solução básica factível) *Seja z_0 uma solução básica factível não degenerada, supondo para algum j tal que $c_j - z_j < 0$. Então, existe uma solução básica factível com valor $z < z_0$. Se a coluna a_j puder ser substituída por algum vetor na base original que obtenha uma nova solução básica factível, esta nova solução terá $z < z_0$. Se a_j não puder ser substituída, então o conjunto K de soluções factíveis é não limitado e a função objetivo pode se tornar arbitrariamente pequena.*

Prova: Seja $(x_1, x_2, \dots, x_m, 0, 0, \dots, 0)$ a solução básica factível com valor z_0 com $c_{m+1} - z_{m+1} < 0$. Então, nesse caso, tem-se uma nova solução básica factível na forma de $(x'_1, x'_2, \dots, x'_m, 0, 0, \dots, 0)$ com $x'_{m+1} > 0$. Substituindo em (3.9), tem-se

$$z - z_0 = (c_{m+1} - z_{m+1})x'_{m+1} < 0,$$

e, conseqüentemente, $z < z_0$ para qualquer solução. Deseja-se x'_{m+1} maior possível. Como x'_{m+1} é crescente, as outras componentes podem crescer, permanecerem constantes, ou decrescer. Assim, x'_{m+1} pode crescer até $x'_i = 0$, $i \leq m$ onde obterá uma nova solução básica factível, ou se nenhum x'_i for decrescente, x'_{m+1} pode crescer ilimitadamente [15].

Teorema 3.2. (Condição de Otimalidade) *Se para alguma solução básica factível $c_j - z_j \geq 0$, para todo j , então a solução é ótima.*

A prova segue de (3.9), com qualquer solução básica factível tem-se que $x_i \geq 0$ para todo i , e, conseqüentemente, o valor de z na função objetivo satisfará $z - z_0 \geq 0$ [15].

Denota-se $c_j - z_j$ por r_j , que se refere ao *coeficiente de custo relativo* ou *custo médio* e expressa o custo relativo de uma base.

3.2 Método Simplex no Tableau

A cada iteração, o próximo conjunto de sistemas de equações lineares precisa solucionar: $Bx_B = b$, $wB = c_B^T$, e $By_k = a_k$. Nesta seção será apresentado o formato de tableau [13].

Seja uma solução básica inicial factível x com base B . O problema de programação linear pode ser representado por (3.12):

$$\text{Minimizar } z \tag{3.12}$$

$$\text{Sujeito a } z - c_B^T x_B - c_N^T x_N = 0 \tag{3.13}$$

$$Bx_B + Nx_N = b \tag{3.14}$$

$$x_B, x_N \geq 0$$

Multiplicando (3.14) por B^{-1} tem-se:

$$x_B + B^{-1}Nx_N = B^{-1}b \quad (3.15)$$

Multiplicando (3.15) por c_B^T e adicionando na equação (3.13), tem-se:

$$z + 0x_B + (c_B^T B^{-1}N - c_N^T)x_N = c_B^T B^{-1}b, \quad (3.16)$$

Sabe-se que $x_N = 0$ e, das equações (3.15) e (3.16), tem-se $x_B = B^{-1}b$ e $z = c_B^T B^{-1}b$. A partir destas equações também é possível representar, convenientemente, a atual solução básica factível com a base B nos seguintes tableaus. Representa-se z como sendo uma variável (básica) a ser minimizada. A linha objetivo será referenciada como linha 0 e as demais, como linha de 1 a m . A coluna do lado direito indicará os valores das variáveis básicas (incluindo a função objetivo). As variáveis básicas são indicadas na coluna da esquerda, conforme Tabela 2.

Tabela 2 - Organização do problema no formato Tableau

	z	x_B	x_N	
x_B	0	I	$B^{-1}N$	$B^{-1}b$ linhas de 1 a m
z	1	0	$c_B^T B^{-1}N - c_N^T$	$c_B^T B^{-1}b$ linha 0

FONTE: Bazaraa et al, p. 126, adaptada.

O tableau no qual z e x_B serão resolvidos em termos de x_N é chamado de *forma canônica*. Este tableau também fornece todas as informações necessárias para proceder com o Método Simplex. Deseja-se um esquema que [10]:

1. Atualize as variáveis básicas e seus valores;
2. Atualize os valores de $(z_j - c_j)$ das novas variáveis;
3. Atualize a coluna y_j .

3.3 Pivoteamento no Tableau

Segundo SALVADOR (2016), as operações acima podem ser executadas simultaneamente por uma operação de pivoteamento. Se x_k entrar na base e x_{B_T} sair da base, então o pivoteamento pode ser iniciado como a seguir:

1. Divida a linha r por y_{rk} ;
2. Para $i = 1, 2, \dots, m$ e $i \neq r$, atualize a linha i adicionando a ela $-y_{ik}$ vezes a nova linha r ;
3. Atualize a linha 0 adicionando a ela $c_k - z_k$ vezes a linha r . As próximas Tabelas 3 e 4 representam, respectivamente, a situação antes e depois da operação de pivoteamento;

Tabela 3 - Tableau antes do pivoteamento

	x_{B_1}	...	x_{B_r}	...	x_{B_m}	x_j	...	x_k	...	
x_{B_1}	1	...	0	...	0	y_{1j}	...	y_{1k}	...	\bar{b}_1
\vdots	\vdots		\vdots		\vdots	\vdots		\vdots		\vdots
x_{B_r}	0	...	1	...	0	y_{rj}	...	y_{rk}	...	\bar{b}_r
\vdots	\vdots		\vdots		\vdots	\vdots		\vdots		\vdots
x_{B_m}	0	...	0	...	1	y_{mj}	...	y_{mk}	...	\bar{b}_m
z	0	...	0	...	0	$z_j - c_j$...	$z_k - c_k$...	$c_B^T \bar{b}$

FONTE: Bazaraa, et al, p. 127.

Após examinar as operações de pivoteamento:

1. A variável x_k entrou na base e x_{B_T} deixou a base. Isto fica registrado no lado esquerdo do tableau pela troca de x_{B_T} com x_k . Para a próxima iteração, a nova x_{B_T} é agora x_k ;
2. O lado direito do tableau representa agora os valores atualizados das variáveis básicas (lembrando que $x_k = \frac{\bar{b}_k}{y_{rk}}$). As variáveis não básicas possuem valor igual a zero;
3. Supondo que as colunas originais das novas variáveis básicas e não básicas sejam \hat{B} e \hat{N} respectivamente. Através de uma sequência de operações nas linhas elementares (de acordo com as regras de pivoteamento de Gauss, caracterizada por pivoteamento nas iterações intermediárias), o tableau original torna-se um tableau

atualizado onde \hat{B} é substituído pela matriz identidade (I). Assim, este novo pivoteamento resulta em um novo tableau onde a nova $\hat{B}^{-1}\hat{N}$ abaixo das variáveis não básicas e um conjunto de $(z_j - c_j)$ valores atualizados para as novas variáveis não básicas, como também os valores das novas variáveis básicas e da função objetivo.

Tabela 4 – Tableau após o pivoteamento

	x_{B_1}	\dots	x_{B_r}	x_{B_m}	x_j	x_k	
x_{B_1}	1	\dots	$-\frac{y_{1k}}{y_{rk}}$	0	$y_{1j} - \frac{y_{rj}}{y_{rk}}y_{1k}$	0	$\bar{b}_1 - \frac{y_{1k}\bar{b}_r}{y_{rk}}$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
x_{B_r}	0	\dots	$\frac{1}{y_{rk}}$	0	$-\frac{y_{rj}}{y_{rk}}$	1	$\frac{\bar{b}_r}{y_{rk}}$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
x_{B_m}	0	\dots	$-\frac{y_{mk}}{y_{rk}}$	1	$y_{mj} - \frac{y_{rj}}{y_{rk}}y_{mk}$	0	$\bar{b}_m - \frac{y_{mk}\bar{b}_r}{y_{rk}}$
Z	0	\dots	$\frac{c_k - z_k}{y_{rk}}$	0	$z_j - c_j - \frac{y_{rj}}{y_{rk}}(z_k - c_k)$	0	$c_B^T \bar{b} - (z_k - c_k) \frac{\bar{b}_r}{y_{rk}}$

FONTE: Bazaraa et al, p.128.

3.4 Aplicação do Método Simplex no Tableau

Considere o seguinte problema de Programação Linear:

$$\begin{array}{ll} \text{Maximizar} & z = 6x_1 + 5x_2 \\ \text{Sujeito a} & x_1 + x_2 \leq 5 \\ & 3x_1 + 2x_2 \leq 12 \\ & x_1, x_2 \geq 0 \end{array}$$

Na forma padrão, obtém-se:

$$\begin{array}{ll} \text{Maximizar} & z = 6x_1 + 5x_2 \\ \text{Sujeito a} & x_1 + x_2 + x_3 = 5 \\ & 3x_1 + 2x_2 + x_4 = 12 \\ & x_1, x_2, x_3, x_4 \geq 0 \end{array}$$

Tabela 4 - Exemplo no Tableau

	6 x_1	5 x_2	0 x_3	0 x_4	IND	CA	
0 = x_3	1	1	1	0	5	$\frac{5}{1} = 5$	
0 = x_4	3	2	0	1	12	$\frac{12}{3} = 4$	<i>Linha</i> <u>3</u>
$c_j - z_j$	6	5	0	0	0		
0 = x_3	1	1	1	0	5	+	
0 = x_1	1	$\frac{2}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	4	$\cdot (-1)$	
0 = x_3	0	$\frac{1}{3}$	1	$-\frac{1}{3}$	1	$\frac{1}{\frac{1}{3}} = 3$	
6 = x_1	1	$\frac{2}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	4	$\frac{4}{\frac{2}{3}} = 6$	
$c_j - z_j$	0	1	0	-2	24		
5 = x_2	0	1	3	-1	3	$\cdot -\frac{2}{3}$	
6 = x_1	1	$\frac{2}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	4	+	
5 = x_2	0	1	3	-1	3		
6 = x_1	1	0	-2	1	2		
$c_j - z_j$	0	0	-3	-1	27		

FONTE: Elaborada pela autora.

- z_j representa o produto interno entre o vetor formado por x_3 e x_4 e cada vetor correspondente aos coeficientes das variáveis e os termos independentes;
- c_j representa os coeficientes das variáveis e o termo independente;
- Realiza-se a operação $c_j - z_j$;
- Após este primeiro processo, escolhe-se a variável de entrada. Esta deve apresentar o maior valor na linha $c_j - z_j$, que, neste caso, é 6, correspondente à variável x_1 ;

- Agora será preciso verificar a variável de saída. Para tanto, na coluna CA (cálculos auxiliares) realiza-se a divisão do termo independente pelos coeficientes de x_1 . O menor valor indicará a variável de saída (x_4);
- Portanto, x_1 entra no lugar de x_4 e realiza-se a próxima iteração; o pivô está na intersecção da linha da variável de saída com a variável de entrada. Neste caso, o número é 3, porém deve-se obter 1 e, para isso, divide-se a linha toda por 3;
- O passo agora é obter zero na linha da variável x_3 . Para isso, multiplica-se a linha da variável x_1 por -1 e adiciona-se a linha da variável x_3 ;
- Novamente escolhe-se a variável de entrada. Neste caso, é 1, correspondente à variável x_2 (o termo independente não é considerado);
- Para a variável de saída, realiza-se a divisão do termo independente pelos coeficientes de x_2 . O menor valor indicará a variável de saída (x_3);
- Portanto, x_2 entra no lugar de x_3 e realiza-se a próxima iteração; o pivô está na intersecção da linha da variável de saída com a variável de entrada. Neste caso, o número é $\frac{1}{3}$, porém deve-se obter 1 e, para isso, multiplica-se a linha toda por 3;
- O passo agora é obter zero na linha da variável x_1 . Para isso, multiplica-se a linha da variável x_2 por $-\frac{2}{3}$ e adiciona-se a linha da variável x_1 ;
- Realiza-se a operação $c_j - z_j$;
- Neste momento, não aparecem mais valores positivos para x_1 e x_2 , então o problema acabou;

Observa-se que o valor máximo da função objetivo é 27, sendo $x_1 = 2$ e $x_2 = 3$.

Considere um outro problema, agora envolvendo duas variáveis e que será analisado de forma gráfica, sendo que as soluções encontram-se nos extremos da região factível.

$$\text{Maximizar } z = 2x_1 + 3x_2$$

$$\text{Sujeito a } -x_1 + 2x_2 \leq 4$$

$$x_1 + 2x_2 \leq 6$$

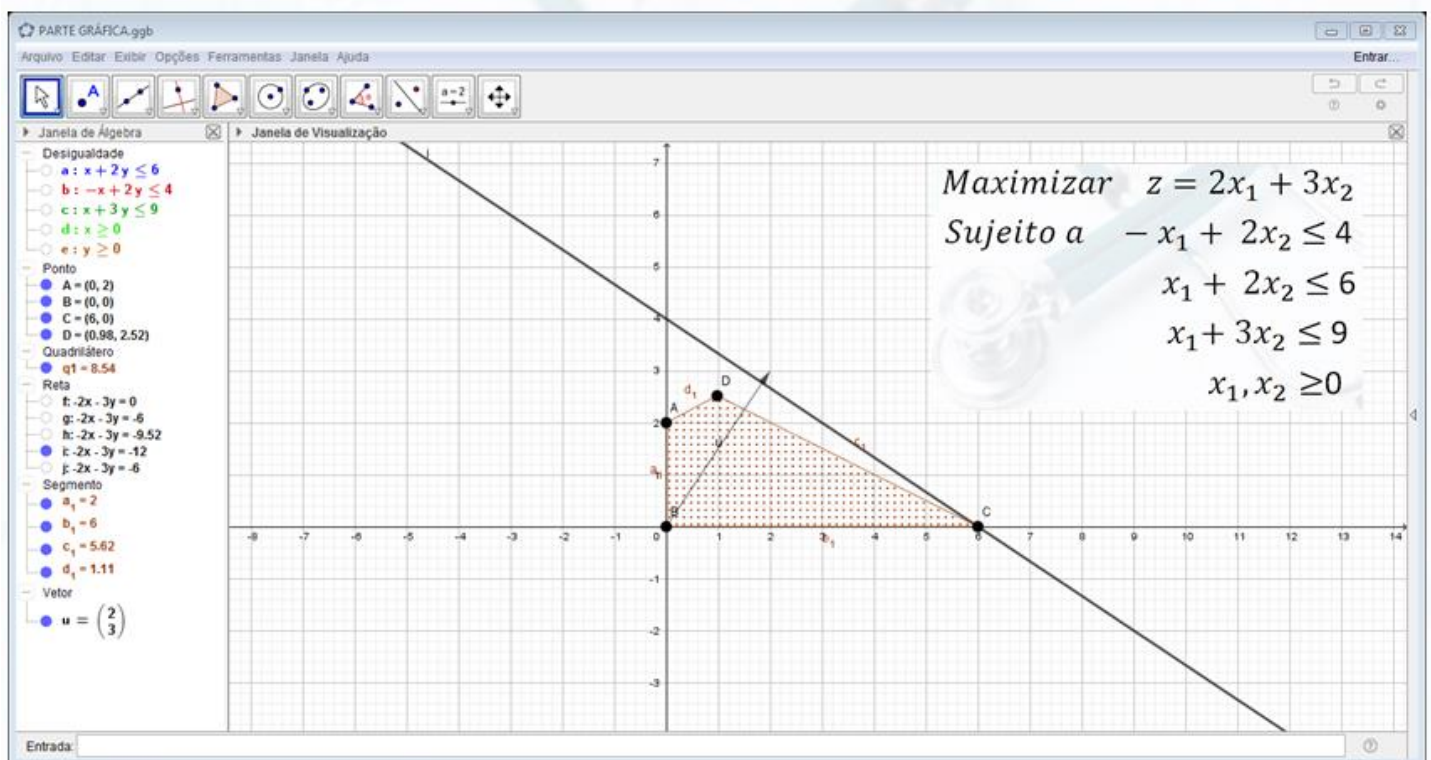
$$x_1 + 3x_2 \leq 9$$

$$x_1, x_2 \geq 0$$

Com este número reduzido de variáveis é possível resolver o problema através da resolução gráfica. Neste exemplo usou-se o software GeoGebra para encontrar a solução ótima do problema.

Inicialmente encontram-se os semiplanos relacionados a cada restrição. A região de intersecção dos semiplanos representa a região factível. O vetor gradiente (formado pelos coeficientes da função objetivo) é responsável por indicar a direção e o sentido de maximização, ou seja, o valor da função objetivo aumenta no sentido adotado pelo vetor gradiente. Encontram-se retas perpendiculares ao vetor gradiente, as quais caminham de modo a encontrar o maior valor da função objetivo. No exemplo dado, este valor se encontra no ponto (6, 0), onde se encontra $z = 12$.

Figura 17 – Resolução gráfica no GeoGebra



FONTE: Elaborada pela autora.

4. MÉTODO DE PONTOS INTERIORES

Desde a introdução do algoritmo proposto por Karmarkar em 1984, os métodos de pontos interiores tornou-se o método mais notável para resolver problemas de programação linear. Os métodos de pontos interiores primais-duais podem ser desenvolvidos por meio da aplicação do método de Newton às condições de otimalidade, partindo de um ponto interior e desconsiderando as desigualdades [11].

Considere o problema de programação linear na forma padrão:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar } c^T x \\ & \text{s. a } Ax = b \\ & \quad x \geq 0, \end{aligned}$$

onde $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e possui posto linha completo.

O dual desse problema é:

$$\begin{aligned} & \text{Maximizar } b^T y \\ & \text{s. a } A^T y \leq c, \end{aligned}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} & \text{Maximizar } c^T x \\ & \text{s. a } A^T y + z = c \\ & \quad z \geq 0. \end{aligned}$$

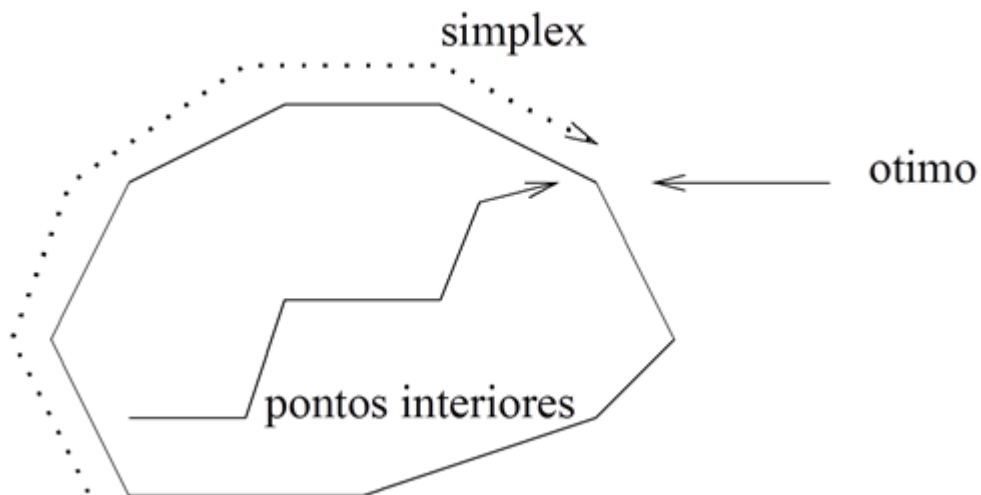
Um ponto interior é factível quando satisfaz todas as restrições, ou seja, $Ax = b$ e sendo as condições de otimalidade primal e dual, respectivamente [8]:

$$\begin{aligned} & b - Ax = b \\ & \quad x \geq 0 \\ & \quad \text{e} \\ & c - A^T y - z = 0 \\ & \quad z \geq 0. \end{aligned}$$

O Método Simplex também é usado na resolução de problemas lineares e é o algoritmo primal mais conhecido, além de ser barato e eficiente para problemas pequenos, porém é lento para problemas de grande porte e pode não convergir devido à aritmética de ponto flutuante quando o problema analisado é muito grande, ou seja, não é possível encontrar uma solução ótima através desse método. O Método de Pontos Interiores tem maior custo computacional que o Simplex, porém apresenta-se eficiente para problemas de grande porte, ou seja, aqueles com elevado número de variáveis e restrições. Uma diferença está no fato de que se caminha pelo interior da região factível.

A não negatividade das variáveis é controlada pelo tamanho do passo. Assim, vamos rever o método de Newton para n – variáveis ($n \geq 2$).

Figura 18 – Comparação do caminho do Simplex e dos Métodos de Pontos Interiores



FONTE: Carvalho, Semana da Física 2017 (UFSCAR).

4.1 Método de Newton

O método de Newton para funções de uma variável busca encontrar as raízes da função, ou seja, sendo $\emptyset(x)$ a função, pretende-se encontrar quando $\emptyset(x) = 0$. O desenvolvimento encontra-se no Apêndice A.

4.2 Método de Newton para Funções de várias variáveis

O Método de Newton é uma poderosa ferramenta para a resolução de equações de uma variável. Esse método, contudo, pode ser utilizado em problemas mais complexos, como na

solução de equações do tipo $Ax = b$, em que x e b são vetores e A é uma matriz. Portanto, é possível generalizar o Método de Newton para a resolução de sistema de equações de várias variáveis, conforme desenvolvimento no Apêndice B.

4.3 Método Primal – Dual Afim Escala

O método primal – dual consiste em resolver um sistema trabalhando, simultaneamente, na forma primal e dual, ou seja, ao encontrar uma solução para o dual, encontra-se para o primal. Originalmente [15], o método primal – dual foi desenvolvido para resolver um tipo especial de problema linear, decorrente de problemas de fluxo de rede, e continua a ser o mais eficiente procedimento para esses problemas (para programas lineares gerais, o método dual – Simplex é mais frequentemente usado).

Considere um problema em sua forma primal [16]:

$$\begin{aligned} & \textit{Minimizar} && c^T x \\ & \textit{Sujeito a} && Ax = b \\ & && x \geq 0. \end{aligned}$$

O dual correspondente pode ser escrito na forma:

$$\begin{aligned} & \textit{Maximizar} && b^T y \\ & \textit{Sujeito a} && A^T y + z = c \\ & && z \geq 0. \end{aligned}$$

em que y é o vetor de multiplicadores de Lagrange, $y \in \mathcal{R}^m$ e $z \in \mathcal{R}^n$ é o vetor dual de folga. Assumindo que os problemas primal e dual satisfazem a condição de ponto interior (CPI), ou seja, há um ponto x_0, y_0, z_0 tal que:

$$Ax_0 = b, \quad x_0 > 0, \quad A^T y_0 + z_0 = c, \quad z_0 > 0$$

O Método Primal – Dual Afim Escala busca a solução através de variantes do Método de Newton às condições de otimalidade e modificação do tamanho do passo para manter os pontos interiores.

As condições de otimalidade do problema são:

Factibilidade Primal $Ax = b, x \geq 0$;

Factibilidade Dual $A^T y + z = c, z \geq 0$;

Condições de Complementaridade $XZe = 0$,

onde X é uma matriz diagonal dada pelos componentes do vetor x , isto é, $X = \text{diag}(x)$. O mesmo para a matriz diagonal $Z = \text{diag}(z)$ e $e = (1, \dots, 1, \dots, 1) \in \mathcal{R}^n$ é um vetor unitário.

Resumidamente, as condições de otimalidade são escritas da seguinte forma [9]:

$$f(x, y, z) = \begin{pmatrix} Ax - b \\ A^T y + z - c \\ XZe \end{pmatrix} = 0.$$

Aplicando o Método de Newton a este sistema de equações, encontra-se:

$$(x, y, z) = (x^0, y^0, z^0) - (J(x^0, y^0, z^0))^{-1} f(x^0, y^0, z^0) = (x^0, y^0, z^0) - d^0$$

onde,

$$-f(x, y, z) = - \begin{pmatrix} Ax - b \\ A^T y + z - c \\ XZe \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_p^0 \\ r_d^0 \\ r_a^0 \end{pmatrix} \equiv r^0.$$

A direção do Método de Newton aplicada às equações $f(x, y, z)$ torna-se:

$$J(x^0, y^0, z^0)d^0 = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ Z^0 & 0 & X^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_x^0 \\ d_y^0 \\ d_z^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_p^0 \\ r_d^0 \\ r_a^0 \end{pmatrix},$$

logo,

$$d^0 = \begin{pmatrix} d_x^0 \\ d_y^0 \\ d_z^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ Z^0 & 0 & X^0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} r_p^0 \\ r_d^0 \\ r_a^0 \end{pmatrix}.$$

O Método Primal – Dual Afim Escala pode ser resumido por:

- Dado um ponto interior (x^0, y^0, z^0) , onde $(x^0, z^0) > 0$, tem-se, para $k = 0, 1, \dots, n$.

$$\begin{aligned} r_p^k &= b - Ax^k \\ r_d^k &= c - A^T y^k - z^k \\ r_a^k &= -X^k Z^k e \\ d^k &= J^{-1}(x^k, y^k, z^k) r^k. \end{aligned}$$

O controle de passos serve para garantir que os pontos permaneçam no interior da região factível. Usa-se um escalar α , com $0 < \alpha \leq 1$, para encontrar o tamanho do passo primal (α_p^k) e do passo dual (α_d^k), fazendo o processo até convergir [9].

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k + \alpha_p^k d_x^k \\ y^{k+1} &= y^k + \alpha_d^k d_y^k \\ z^{k+1} &= z^k + \alpha_d^k d_z^k. \end{aligned}$$

O critério de convergência é baseado nas condições de otimalidade:

$$\left| \frac{x^t z}{1 + c^t x + b^t y} \right| \leq \epsilon,$$

$$\frac{\|b - Ax\|}{1 + \|b\|} \leq \epsilon,$$

$$\frac{\|c - A^T y - z\|}{1 + \|c\|} \leq \epsilon,$$

onde ϵ é a tolerância desejada e $x^t z$ uma medida da condição de complementaridade.

O tamanho do passo α_p^k e α_d^k é calculado da seguinte forma:

$$\rho_p^k = \min_{dx_i^k < 0} -\frac{x_i^k}{dx_i^k},$$

$$\rho_d^k = \min_{dz_i^k < 0} -\frac{x_i^k}{dx_i^k}.$$

Os valores de ρ_p^k e ρ_d^k representam o tamanho de passo máximo tal que a primeira variável de x e z se anulem, respectivamente.

Logo, o tamanho do passo será obtido multiplicando ρ por um parâmetro $\tau \in (0, 1)$:

$$\begin{cases} \alpha_p^k = \min(1, \tau\rho_p^k) \\ \alpha_d^k = \min(1, \tau\rho_d^k), \end{cases}$$

o que garante que nenhuma variável de x ou z se anule. Na prática, adota-se $\tau = 0,995$.

Assim, o passo é limitado ao tamanho máximo 1, correspondente a um passo de Newton.

4.4 Método Primal – Dual Clássico

Os Métodos de Pontos Interiores se caracterizam por conter as soluções no interior da região factível, portando, a partir de um ponto escolhido, caminha-se pelo interior da região até encontrar a solução ótima.

No Método Primal – Dual Afim Escala as variáveis (x, z) se aproximam muito rapidamente dos extremos da região factível. Já no Método Primal – Dual Clássico ocorre uma perturbação (μ) nas condições de complementaridade, evitando essa aproximação.

A ideia básica do método de pontos interiores Primal – Dual Clássico é substituir a equação $XZe = 0$ pela equação parametrizada $XZe = \mu e$. Assim, temos as condições de otimalidade perturbadas dadas por:

$$\begin{aligned} Ax &= b, x \geq 0 \\ A^T y + z &= c, z \geq 0 \\ XZe &= \mu e, \end{aligned} \tag{4.3}$$

em que μ é um parâmetro positivo denominado de barreira.

Se a condição é satisfeita, então o sistema (4.3) possui uma única solução para $\mu > 0$. Pode-se observar que, quando μ se aproxima de zero, temos uma solução ótima para os problemas primal e dual.

Aplicando o método de Newton ao sistema (4.3), a partir de um ponto interior dado, temos o seguinte sistema linear de equações:

$$\begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ Z & 0 & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_x \\ d_y \\ d_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_p \\ r_d \\ r_c \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

em que $r_p = b - Ax$; $r_d = c - A^T y - z$; $r_c = \mu e - XZe$, e denominadas de folga primal, folga dual e folga de complementaridade, respectivamente.

O Método Primal – Dual Clássico resolve o seguinte [9] sistema de equações não lineares a cada iteração:

$$\begin{cases} b - Ax^k = 0 \\ c - A^t y^k - z^k = 0 \\ \mu^k e - X^k Z^k e = 0, \end{cases}$$

onde μ^k é um parâmetro que varia a cada iteração $\mu^k \rightarrow 0$ quando $k \rightarrow \infty$. As únicas alterações do método primal – dual clássico em relação ao método afim – escala são a substituição de r_a^k por $r_c^k = \mu^k e - X^k Z^k e$ e o cálculo da perturbação $\mu^k = \sigma^k \frac{\gamma^k}{n}$, onde $\gamma^k = x^t z$, $\sigma \in (0, 1)$. O valor de $\frac{\gamma^k}{n}$ seria uma “medida” da distância média de um ponto a uma solução ótima.

5. APLICAÇÃO DE PROGRAMAÇÃO LINEAR NA RADIOTERAPIA

5.1 A Descoberta dos Raios – X

Wilhelm Conrad Röntgen foi professor de Física na Universidade de Würzburg na Bavária, Alemanha. Em 8 de novembro de 1895, ele descobriu uma nova espécie de radiação produzida pela passagem de uma corrente elétrica por um tubo de vidro sob vácuo, um tubo de Crookes coberto por uma blindagem de papelão preto. Embora invisível a olho nu, chamou a atenção por produzir fluorescência ao incidir sobre um papel impregnado por platino – cianeto de bário, produzindo uma linha preta no papel. Mais impressionante era a capacidade destes raios de atravessar corpos sólidos (madeira, papel, partes do corpo humano), com maior ou menor intensidade, dependendo da natureza do material. Em 28 de dezembro de 1895, seu trabalho “Sobre uma nova espécie de raios” foi submetido para publicação e descreve, de forma sucinta e objetiva, a sua descoberta. No texto, Röntgen afirma ter empregado a letra “X” para, de forma sucinta, dar uma denominação a essa nova forma de radiação [17].

No dia primeiro de janeiro de 1896, Röntgen enviou cerca de 70 cartas para os mais conhecidos físicos da Alemanha, Suíça, Áustria, Holanda, França, Inglaterra e Suécia. Nelas, continham separatas de seu trabalho e a foto da primeira radiografia humana, da mão de sua esposa, conforme Figura 19. Em 1901, em decorrência de sua descoberta, Röntgen recebeu o primeiro Prêmio Nobel em Física.

Figura 19 - Radiografia da mão de Anna Bertha Ludwig, esposa de Röntgen, tirada em 22 de dezembro de 1895.



5.2 Câncer e o Tratamento por Radioterapia

O Câncer é responsável por mais de 12% de todas as causas de óbito no mundo, o que corresponde a mais de 7 milhões de pessoas anualmente. De acordo com estudos, estima-se que no período de 2016 a 2017 haverá cerca de 600 mil casos novos de câncer, sendo, aproximadamente, 180 mil de câncer de pele não melanoma. O perfil epidemiológico observado assemelha-se ao da América Latina e do Caribe, onde os cânceres de próstata (61 mil) em homens e mama (58 mil) em mulheres serão os mais frequentes. Excetuando-se os casos de câncer de pele não melanoma, os tipos mais frequentes em homens serão próstata (28,6%), pulmão (8,1%), intestino (7,8%), estômago (6%) e cavidade oral (5%). Nas mulheres, os cânceres de mama (28,1%), intestino (8,6%), colo do útero (7,9%), pulmão (5,3%) e estômago (3,7%) figurarão entre os principais [18, 19].

O corpo humano é formado por células organizadas em tecidos e órgãos. As células normais se dividem, amadurecem e morrem, renovando-se a cada ciclo. O câncer se inicia através de uma mutação genética no DNA da célula, onde o mecanismo de controle do crescimento normal da célula é alterado, ou seja, há um dano em um ou mais genes de uma única célula. Assim, a célula se divide descontroladamente e produz novas células anormais. Se os sistemas responsáveis por destruir e limitar essas células anormais falham, as novas se tornam cada vez mais anormais, eventualmente produzindo células cancerosas. Estas se dividem bem mais rapidamente e, geralmente, são bem desorganizadas. Com o tempo, podem formar uma massa de tecido chamada tumor, proveniente do empilhamento das células.

O termo “estádio” é usado para descrever a extensão ou a gravidade do câncer. No estágio inicial, a pessoa possui apenas um pequeno tumor maligno. No avançado, o tumor, maior, já pode ter se espalhado para as áreas próximas (linfonodos) ou outras partes do corpo (metástase), formando tumores satélites, distantes do tumor original. Para determinar a chance de cura do câncer (prognóstico), os médicos consideram vários fatores, inclusive o tipo e o estágio do câncer [18].

Essa doença pode ser tratada através de quimioterapia, radioterapia, cirurgia ou até mesmo a junção de mais de um tipo de tratamento. A radioterapia utiliza os raios – X com a finalidade de aliviar os sintomas da doença, erradicar, interromper o crescimento e a reprodução de células tumorais.

Do critério matemático, a radioterapia consiste em aplicar a maior quantidade de radiação possível no local afetado pela doença, de forma a obter maior eficácia na destruição

das células tumorais e, ao mesmo tempo, evitar, ou minimizar, a radiação nas células vizinhas, as quais compõem os chamados tecido críticos e tecidos saudáveis.

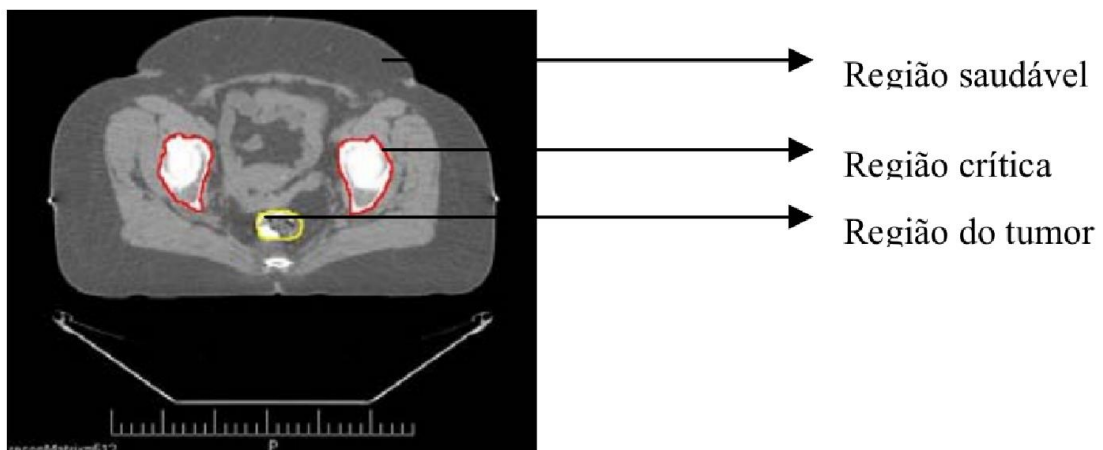
5.3 Elaboração do Modelo Matemático

Quando um paciente diagnosticado com câncer necessita de tratamento por radioterapia, precisa se submeter a uma série de exames a fim de definir o local do tumor, a forma e o volume. São feitos exames de tomografia computadorizada para uma coleta segura de dados e, na Radiocirurgia, há uma associação da tomografia computadorizada e da ressonância magnética [10].

Com base nos dados levantados, o médico radioterapeuta fica responsável por prescrever a dose a ser recebida no tumor e o volume a ser irradiado. Juntamente com um físico, o radioterapeuta pode, através da análise das curvas de isodose, indicar qual o melhor tipo de tratamento e a técnica a ser utilizada.

Com os exames realizados, o médico consegue selecionar as estruturas de interesse, além de prescrever qual a dose mínima que poderá ser aplicada na região do tumor e quais as doses máximas que os tecidos críticos e a região saudável podem receber. Uma dose inferior não promove a morte da célula cancerosa e uma dose alta pode prejudicar os tecidos vizinhos.

Figura 20 - Imagem de tomografia computadorizada com estruturas selecionadas.



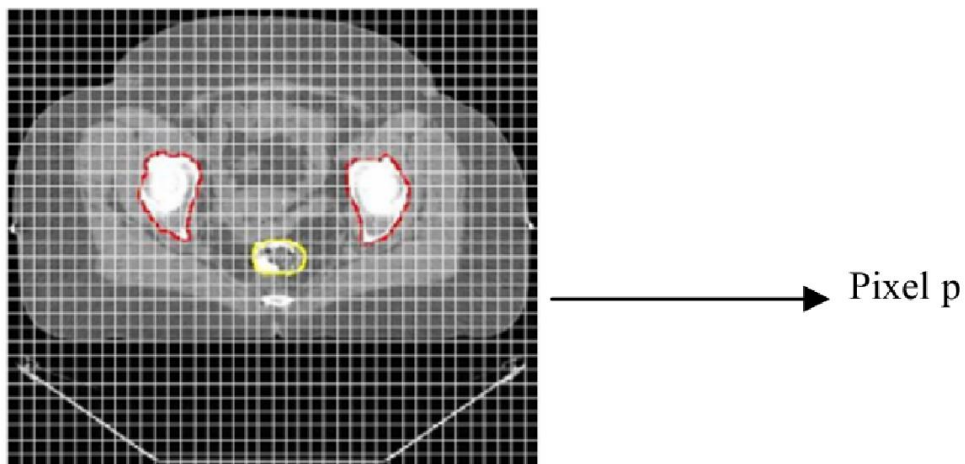
FONTE: Fernandes, p. 53.

Suponha que cada órgão está dividido em pixels, onde cada pixel representará parte do tecido saudável (região saudável e região crítica) ou do tumor em um órgão doente. Seja m_T o número de pixels do tumor, m_C o número de pixels da estrutura crítica e m_G o número de pixels restantes (região saudável) [11]. Considere m o número total de pixels, então:

$$m = m_T + m_C + m_G$$

Cada pixel é relacionado a uma densidade eletrônica e recebe coordenadas específicas (i, j) , as quais serão usadas na criação do planejamento conformacional ou planejamento 3D do tratamento, conforme verifica-se na Figura 21 [10].

Figura 21 - Imagem dividida em pixels.

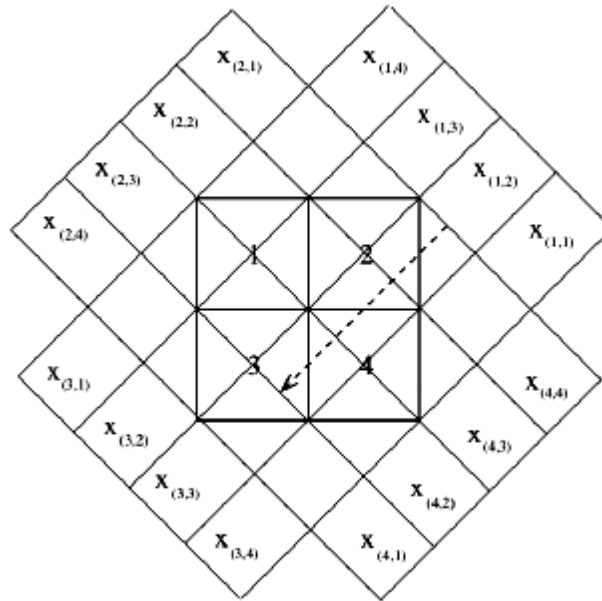


FONTE: Fernandes, p. 54.

Denominando de R o subconjunto de posições onde se encontra tecido crítico (saudável), ou estrutura crítica, e de N o subconjunto de posições onde se encontram os demais tecidos saudáveis, é possível formular um modelo com ponderações em cada região do paciente, privilegiando ou penalizando algumas áreas quanto à quantidade de dosagem a ser recebida.

Suponha uma matriz de pixels de ordem $n \times n$, e que os ângulos avaliados são $(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \dots, \theta_\rho)$. Além disso, supõe-se se que cada ângulo está composto por η sub-raios. Os sistemas de tratamento modernos são capazes de realizar combinações complexas entre estes sub-raios. A geometria de um modelo usando raios elementares, onde $n = 2$, $\rho = 4$ e $\eta = 4$ está indicada na Figura 22. Os intervalos entre os ângulos são $\frac{\pi}{4}$ e o ângulo inicial é (usualmente) zero [9].

Figura 22 - Geometria de uma imagem de pixel 2×2 com ângulos $\frac{\pi}{4}$, $\frac{3\pi}{4}$, $\frac{5\pi}{4}$ e $\frac{7\pi}{4}$.



FONTE: Holder, p. 3.

No planejamento de tratamento, após definidas as coordenadas (i, j) dos pixels, com $1 \leq i \leq \eta_1$ e $1 \leq j \leq \eta_2$, calcula-se a dose total $D_{(i,j)}$ a ser recebida pelo paciente em cada pixel de coordenadas (i, j) . Assim é possível estimar a dose a ser recebida em cada tecido do paciente (crítico, saudável e tumor), na região a ser tratada, com a condição de não exceder a dose suportada pelos tecidos críticos e saudáveis, além de emitir a dose necessária para eliminação do tumor [10].

Uma formulação para programação linear consiste em minimizar a dose total emitida sujeito a um limite inferior da dose na região do tumor [11]. Este modelo pode ser representado por:

$$\begin{aligned} \text{minimizar } f &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m D_{ij} \\ \text{sujeito a } D_{ij} &= \sum_{p=1}^n \omega_p A_{ij}^p \quad \forall (i, j) \\ l &\leq D_{ij} \quad \forall (i, j) \in \Gamma \\ \omega &\geq 0 \end{aligned}$$

onde,

D_{ij} representa a dosagem total recebida pelo paciente na posição (i, j) ;

A_{ij} representa a dosagem nominal emitida pelo raio p na posição (i, j) ;

ω representa a ponderação da dosagem emitida pelos raios;

l representa a dosagem mínima a ser recebida pelo tumor;

Γ representa o subconjunto de posições onde se encontra o tumor;

n representa o número de raios;

m representa o número total de pixels.

Após delimitar as estruturas envolvidas na radioterapia, elabora-se um plano de tratamento de forma a administrar a dose de radiação no tumor, buscando a homogeneidade do plano de tratamento, de acordo com a determinação da prescrição de dose nas regiões de interesse [10].

De modo mais criterioso, seja $x_{(a,i)}$ a dose ao longo do i -ésimo sub-raio do a -ésimo ângulo ($a = 1, 2, \dots, p$) e $d_{(p,a,i)}$ a distância entre o sub-raio $x_{(a,i)}$ e a imagem do pixel p . Definimos $A_{(p,a,i)}$ como o produto de $e^{-\mu d_{(p,a,i)}}$ e a área geométrica (S) comum a ambos os sub-raios $x_{(a,i)}$ e o pixel p [9].

$$A_{(p,a,i)} = S e^{-\mu d_{(p,a,i)}}$$

Na Figura 20, o raio hachurado correspondente a $x_{(1,2)}$ atinge a metade do pixel 3 e a distância deste pixel a este raio elementar é $\frac{3\sqrt{2}}{2}$ (supondo que cada pixel tenha a mesma largura igual a 1). Conseqüentemente, $A_{(3,1,2)} = \frac{1}{2} e^{-\frac{3\sqrt{2}}{2}\mu}$. Os componentes da matriz de propagação dos raios, denotada por A , são $A_{(p,a,i)}$, onde as linhas de A são indexadas por p e as colunas são indexadas por (a, i) . O fator $e^{-\mu d_{(p,a,i)}}$ mede atenuação da radiação sobre o tecido, e os valores deste *coeficiente de atenuação* (μ) dependem da energia do raio. O coeficiente de atenuação define a característica do tecido, ou seja, relaciona-se à densidade do tecido. Considere, como exemplo, o Raio-X: quanto menor a densidade do tecido menor o coeficiente de atenuação, portanto, queimará mais o filme e, conseqüentemente, este ficará mais escuro; quanto maior a densidade do tecido, menor o coeficiente de atenuação, portanto, queimará menos o filme ficando mais claro.

A estrutura da matriz A de deposição de dose está representada na Tabela 6 e a matriz dose de propagação sem atenuação ($\mu = 0$) referente à Figura 20 está indicada em (5.1).

Tabela 5 - Estrutura da matriz de deposição de dose A

		(a, i)													
		1				2				...	k				
		1	2	...	η	1	2	...	η		1	2	...	η	
p	a	$A_{(p,a,i)}$													
	i														
	1														
	2														
	m														

FONTE: SALVADOR, p. 51

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix} \quad (5.1)$$

Os elementos de x podem ser ordenados da seguinte forma [9]:

$$[x_{(1,1)} \quad x_{(1,2)} \quad \dots \quad x_{(1,r)} \quad x_{(2,1)} \quad \dots \quad x_{(2,r)} \quad \dots \quad x_{(\rho,1)} \quad \dots \quad x_{(\rho,r)}]$$

Assim, a dose de radiação no pixel p é o p – ésimo componente de Ax .

A matriz de propagação da dose permite modelar os limites superior e inferior da radiação para algum pixel na imagem, porém é uma tarefa complexa. Por exemplo, um plano de tratamento pode prescrever que o tumor não receba menos do que 80 Gy e alguma estrutura crítica não receba mais do que 40 Gy, onde Gy é a dose absorvida, usualmente medida em joules por quilograma (J/kg), denominada gray (Gy).

A maioria das pesquisas tem utilizado modelos de otimização com restrições lineares, com uma das duas funções objetivo mais evidente, maximização da dose no tumor ou minimização da dose na estrutura crítica. Uma vez que esta maximização leva geralmente a altas doses, outros trabalhos buscam maximizar a dose mínima do tumor ou minimizar a dose máxima da estrutura crítica [9].

As metas listadas abaixo indicam que este problema tem uma grande quantidade de parâmetros a considerar na decisão do que seria desejável para um plano de tratamento:

- Transmitir uma dose uniformemente letal na região do tumor;
- Transmitir uma radiação tão pequena quanto possível na estrutura crítica;
- Obter uma dose total tão pequena quanto possível;
- Reduzir a frequência de doses altas fora da região do tumor;
- Controlar o número de raios utilizados no plano de tratamento.

O objetivo mais comum adotado na prática consiste em transmitir a maior radiação possível no tumor, porém estes objetivos devem ser evitados. Normalmente, altos níveis de radiação podem conduzir uma grande soma de necrose, e o corpo humano tem dificuldade na eliminação de um grande volume de tecido morto. Além disso, células doentes estão distribuídas entre tecidos saudáveis. Conseqüentemente, uma dose letal uniformemente distribuída na região do tumor é crucial para o sucesso do plano de tratamento, pois, uma dose inferior permite que a célula cancerosa sobreviva, enquanto uma dose superior pode ter efeitos altamente indesejáveis nos tecidos vizinhos [9].

Na busca de doses uniformes, Holder propôs um modelo de otimização linear para auxiliar no planejamento ótimo da Radiocirurgia. No modelo, a matriz de deposição de dose A é dividida em três partes:

$$A = \begin{bmatrix} A_T \\ A_C \\ A_G \end{bmatrix}. \quad (5.2)$$

As linhas da matriz de deposição de dose são reorganizadas de forma que:

- T está relacionado ao conjunto de pixels que compreendem a lesão ou tumor;

- C está relacionado ao conjunto de pixels compreendidos pelo tecido crítico ou órgãos de risco;
- G está relacionado ao conjunto de pixels do tecido saudável.

Como a imagem seccional da Tomografia Computadorizada é convertida em uma matriz de pixels, então, no modelo apresentado, a prescrição da dose é dada em forma de vetor e definida por quatro limites com a seguinte notação:

- u_t representa o vetor de limite superior para radiação no tumor ($u_t \in \mathfrak{R}^{m_T}$);
- l_t representa o vetor de limite inferior para radiação no tumor ($l_t \in \mathfrak{R}^{m_T}$);
- u_c representa o vetor de limite superior para radiação na estrutura crítica ($u_c \in \mathfrak{R}^{m_C}$);
- u_g representa o vetor de limite superior para radiação no restante de tecido saudável ($u_g \in \mathfrak{R}^{m_G}$).

Observa-se que $0 < l_t \leq u_t$, $u_c \geq 0$ e $u_g \geq 0$.

Na análise dos limites inferior e superior é preciso considerar um erro associado, denominado *nível de uniformidade do tumor*. Logo, supondo que t_g represente a meta estabelecida para uma célula, então u_{t_i} e l_{t_i} são, geralmente, $(1 + \varepsilon)t_g$ e $(1 - \varepsilon)t_g$, respectivamente, em que ε representa a porcentagem da variação para a dosagem do tumor, ou seja, o erro associado. Valores usuais de ε vão de 0,02 a 0,15.

As linhas da matriz de deposição de dose [10] são reagrupadas nas linhas que representam as regiões cancerosas, as estruturas críticas e o restante de tecido saudável. Esta reordenação é representada pelas submatrizes A_T , A_C e A_G conforme indicado em (4.2). Os subfeixes que não atingem o tumor são removidos pela eliminação das colunas de A que tem o vetor zero na coluna correspondente da submatriz A_T . Assim, sem perda de generalidade, considera-se que a matriz A_T não possui colunas nulas. Portanto, tem-se $A \in \mathfrak{R}^{m \times n}$, $A_T \in \mathfrak{R}^{m_T \times n}$, $A_C \in \mathfrak{R}^{m_C \times n}$ e $A_G \in \mathfrak{R}^{m_G \times n}$.

5.4 Modelo de Programação Linear

Holder propôs um modelo que admite um conjunto de restrições sobre as limitações de quantidade de dose em cada tipo de tecido. Este modelo incorpora restrições elásticas e,

quando resolvidas pelo método de pontos interiores, produzem planos favoráveis. Representa-se a função objetivo pela soma ponderada de três metas:

- $l^T t$, que mede o quanto falta para que o plano encontrado consiga aplicar a dose mínima na região do tumor;
- $u_c^T c$, que mede a quantidade de radiação acima da prescrita recebida pela região crítica;
- $u_g^T g$, que mede a quantidade de radiação acima da prescrita nos demais tecidos saudáveis.

O escalar positivo w pondera a importância da formulação de um plano que obtenha a dose mínima na região do tumor, isto é, valores grandes de w forçam $l^T t$ a ser tão pequeno quanto possível. Seria desejável que existisse valor para um finito $w > 0$ tal que o valor ótimo da componente $l^T t$ fosse zero, o que garantiria ao tumor receber o nível de radiação necessário para sua eliminação.

O modelo proposto por Holder pode ser representado pela seguinte formulação:

$$\begin{aligned}
 & \text{Minimizar} && w l^T t + u_c^T c + u_g^T g \\
 & \text{Sujeito a} && l_t - L t \leq A_T x \leq u_t \\
 & && A_C x \leq u_c + U_C c \\
 & && A_G x \leq u_g + U_G g \\
 & && 0 \leq L t \leq l_t \\
 & && -u_c \leq U_C c \\
 & && U_G g \geq 0 \\
 & && x \geq 0
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

onde,

- w é um escalar positivo;
- x representa a dose do sub – raio que entra na imagem para alcançar o pixel p , $x \in \mathfrak{R}^n$;
- t : $t \in \mathfrak{R}^{m_T}, t \geq 0$;
- c : $c \in \mathfrak{R}^{m_C}$;
- g : $g \in \mathfrak{R}^{m_G}, g \geq 0$.

As restrições $l_t - Lt \leq A_T x$, $A_C x \leq u_c + U_C c$ e $A_G x \leq u_g + U_G g$ são denominadas *elásticas*, pois seus limites podem variar de acordo com os vetores t, c e g , respectivamente. As matrizes L, U_C e U_G definem como medir a elasticidade, e l, u_c e u_g controlam a penalização ou recompensa com relação à elasticidade.

Valores fixos de L, U_C, U_G, l, u_c e u_g definem um conjunto de *funções elásticas*. E estas são incorporadas pelas seguintes razões:

1. A restrição elástica garante que qualquer conjunto de funções elásticas, **(5.3)** é sempre estritamente factível;
2. A diferença dos limites nas funções elásticas nos permite incorporar diferentes objetivos de tratamento.

Considerando que conjuntos diferentes de funções elásticas determinam diferentes filosofias de tratamento, a interpretação do modelo **(5.3)** depende da escolha deste conjunto.

Em [20] foram propostas as seguintes escolhas: *análise média e análise absoluta*.

Na análise média,

$$l = \frac{1}{m_T} e, \text{ onde } l \in \mathfrak{R}^{m_T}$$

$$u_c = \frac{1}{m_C} e, \text{ onde } u_c \in \mathfrak{R}^{m_C}$$

$$u_g = \frac{1}{m_G} e, \text{ onde } u_g \in \mathfrak{R}^{m_G}$$

$$L = I, \text{ onde } L \in \mathfrak{R}^{m_T \times m_T}$$

$$U_C = I, \text{ onde } U_C \in \mathfrak{R}^{m_C \times m_C}$$

$$U_G = I, \text{ onde } U_G \in \mathfrak{R}^{m_G \times m_G}$$

sendo I a matriz identidade. Esta escolha possui os seguintes objetivos:

- Minimizar a dosagem média recebida pelo tumor dentro do limite prescrito;
- Minimizar a dosagem média da radiação que a estrutura crítica recebe;
- Minimizar a dosagem média que o tecido saudável recebe.

Na análise absoluta,

$$l = e_{m_T}, \text{ onde } l \in \mathfrak{R}^{m_T}$$

$$\begin{aligned}
u_C &= e_{m_C}, \text{ onde } u_C \in \mathfrak{R}^{m_C} \\
u_G &= e_{m_G}, \text{ onde } u_G \in \mathfrak{R}^{m_G} \\
L &= e_{m_T} e_{m_T}^T, \text{ onde } L \in \mathfrak{R}^{m_T} \\
U_C &= e_{m_C} e_{m_C}^T, \text{ onde } U_C \in \mathfrak{R}^{m_C} \\
U_G &= e_{m_G} e_{m_G}^T, \text{ onde } U_G \in \mathfrak{R}^{m_G}
\end{aligned}$$

Esta escolha tem os seguintes objetivos:

- Minimizar a dosagem máxima recebida pelo tumor dentro do limite prescrito;
- Minimizar a dosagem máxima da radiação que a estrutura crítica recebe;
- Minimizar a dosagem máxima recebida pelo tecido saudável.

5.5 Propriedades das Restrições Elásticas

Definição 5.1: A prescrição (u_t, l_t, u_c, u_g) admite a uniformidade do tratamento do tumor se existe um plano, $x \geq 0$, tal que $l_t \leq A_T x \leq u_t$.

Teorema 5.1: Seja $(x^*(w), t^*(w), c^*(w), g^*(w))$ uma solução ótima de (5.3). Para qualquer conjunto de funções elásticas temos que $l^T t^* = O\left(\frac{1}{w}\right)$, desde que a prescrição admita a uniformidade do tratamento do tumor. Demonstração em [20].

Este teorema mostra que se a prescrição do tratamento é viável, o déficit de radiação no tumor é uniformemente limitado pelo inverso de w . Utilizando este resultado é possível, resolvendo apenas um problema de programação linear, interpretar o resultado e concluir se existe um tratamento que atende à prescrição violando ou não os limites u_g e u_c [20].

5.4 Um estudo sobre a aplicação dos Métodos de Pontos Interiores ao Modelo de Tratamento por Radioterapia

Nesta sessão será apresentado um estudo sobre a aplicação dos Métodos de Pontos Interiores Primais – Duais ao modelo de programação linear (5.3). O problema proposto apresenta desigualdades nas restrições. Para resolver um problema de programação linear é necessário deixá-lo na forma padrão, ou seja, contendo apenas restrições de igualdade.

Como a imagem está em pixels, os limites de dose devem ser divididos pela quantidade de pixels dos respectivos órgãos, para garantir a uniformidade das doses [21]. Portanto, os valores de limites de dose na função objetivo serão dados por:

$$\begin{aligned} l &= \frac{1}{m_T} e \\ u_c &= \frac{1}{m_C} e \\ u_g &= \frac{1}{m_G} e \end{aligned}$$

em que $l \in \mathfrak{R}^{m_T}$, $u_c \in \mathfrak{R}^{m_C}$, $u_g \in \mathfrak{R}^{m_G}$ e $e = \text{vetor unitário}$.

Seja $A_T x = a$, substituindo a restrição canalizada por $l_t - t \leq a \leq u_t$, como $L = I, U_c = I$ e $U_g = I$, obtém-se o seguinte problema:

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & w \frac{1}{m_T} e^T t + \frac{1}{m_C} e^T c + \frac{1}{m_G} e^T g \\ \text{Sujeito a} \quad & a + s_u = u_t \\ & a + t - s_l = l_t \\ & A_T x - a = 0 \\ & A_C x - s_c - c = 0 \\ & A_G x - g + s_g = u_g \\ & t + s_t = u_t \\ & (t, c, g, x, s_u, s_l, s_c, s_g, s_t) \geq 0 \end{aligned} \tag{6.1}$$

Desse modo obtém-se a seguinte matriz de restrições:

$$\begin{pmatrix} I & 0 & 0 & 0 & 0 & I & 0 & 0 & 0 & 0 \\ I & 0 & I & 0 & 0 & 0 & -I & 0 & 0 & 0 \\ -I & A_T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_C & 0 & -I & 0 & 0 & 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & A_G & 0 & 0 & -I & 0 & 0 & 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & I \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ x \\ t \\ c \\ g \\ s_u \\ s_l \\ s_c \\ s_g \\ s_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_t \\ l_t \\ 0 \\ 0 \\ u_c \\ 0 \\ u_t \end{pmatrix} \tag{6.2}$$

O sistema a ser estudado está representado abaixo:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 d_a + d_{s_a} = r_1 \\
 d_a + d_t - d_{s_t} = r_2 \\
 -d_a + A_t d_x = r_3 \\
 A_c d_x - d_c + d_{s_c} = r_4 \\
 A_g d_x - d_g + d_{s_g} = r_5 \\
 d_t + d_{s_t} = r_6 \\
 -d_{y_u} + d_{y_l} - d_{y_a} = r_7 \\
 A_t^t d_{y_y} - A_c^t d_{y_c} - A_g^t d_{y_g} + d_{z_x} = r_8 \\
 d_{y_g} - d_{y_t} + d_{z_t} = r_9 \\
 d_{y_c} + d_{w_c} = r_{10} \\
 d_{y_g} + d_{w_g} = r_{11} \\
 Y_u d_{s_u} + S_u d_{y_u} = r_{12} \\
 Y_l d_{s_l} + S_l d_{y_l} = r_{13} \\
 Y_c d_{s_c} + S_c d_{y_c} = r_{14} \\
 Y_g d_{s_g} + S_g d_{y_g} = r_{15} \\
 Y_t d_{s_t} + S_t d_{y_t} = r_{16} \\
 Z_x d_x + X d_{z_x} = r_{17} \\
 Z_t d_t + T d_{z_t} = r_{18} \\
 W_c d_c + C d_{w_c} = r_{19} \\
 W_g d_g + G d_{w_g} = r_{20}.
 \end{array} \right.$$

No próximo capítulo será mostrado um estudo sobre os resultados computacionais dos métodos estudados.

6. ESTUDO SOBRE OS RESULTADOS COMPUTACIONAIS

6.1 Método Simplex

O processo inicial é a indicação, pelo médico, do tratamento de câncer por radioterapia. Em seguida, o paciente faz um exame de tomografia computadorizada e as imagens são analisadas para dimensionar o tumor e localizar a região tumoral, a crítica e a saudável, para possibilitar a determinação da dose a ser administrada no tumor (t_g). A divisão em pixels permite separar as regiões relacionadas e possibilita elaborar a matriz $A = [A_T \ A_C \ A_G]^T$. Para a construção das matrizes de deposição de dose para o tumor, para as estruturas críticas e tecido saudável, utilizou-se a Tabela 6.

$$A_{(p,a,i)} = S e^{-\mu d_{(p,a,i)}}$$

$$[x_{(1,1)} \ x_{(1,2)} \ \dots \ x_{(1,r)} \ x_{(2,1)} \ \dots \ x_{(2,r)} \ \dots \ x_{(\rho,1)} \ \dots \ x_{(\rho,r)}]$$

No trabalho apresentado por [22], analisou-se um paciente hipotético que possui um tumor esférico de 15 mm de diâmetro, cercado por um tecido crítico, exemplificando um tumor da medula espinhal, onde há dificuldade no planejamento devido ao câncer ser completamente cercado por uma crítica estrutura [9].

Segundo [22], foi indicado um tratamento de radioterapia com a seguinte orientação:

- Dose de tumor de 80 Gy (quantidade de energia absorvida de radiação ionizante para a unidade de massa);
- Mudança percentual $\varepsilon = 2\%$;
- Dose máxima na estrutura crítica: 40 Gy;
- Dose máxima no tecido saudável: 60 Gy;
- $w = 0,1$ e $w = 40$ (dois valores para comparação).

Os demais valores utilizados estão na Tabela 7.

Tabela 6 - Valores referentes à prescrição de dose

Valor adotado	Gy
U_t	81,6
L_t	78,4
U_c	40
U_g	60
T_g	80

FONTE: Salvador, p. 58

A lesão considerada contém quatro pixels (2 x 2 pixels) e o tecido crítico ao redor da lesão compreende 16 pixels (4 x 4 pixels). O sistema de planejamento desenvolvido usa uma grade de 16 x 16 pixels, com quatro ângulos de $0, \frac{\pi}{2}, \pi$ e $\frac{3\pi}{2}$ graus, em que cada feixe é composto por 6 sub-feixes. Para melhorar o desempenho computacional, foram restringidas somente as regiões que tendem a formar pixels quentes, que são os pixels que receberão radiação, sendo a estrutura saudável com 36 pixels. Os pixels que não vão receber radiação são chamados de pixels frios [10].

A função objetivo de (6.1) é a soma de três metas: alcançar uma dosagem suficientemente alta para eliminar a lesão e não exceder a dose máxima nos tecidos críticos e saudáveis. A Tabela 8 resume os resultados numéricos obtidos quanto ao valor da função objetivo, número de iterações e tempo de execução em segundos [22].

Tabela 7 - Resultados numéricos da otimização da função objetivo (6.1)

Variáveis	w = 0,1	w = 40
Valor da função objetivo	$2,9553 \times 10^{-6}$	$2,9800 \times 10^{-6}$
Iterações	38	38
Tempo	0,010718 s	0,01147 s
Tolerância	$1,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-6}$
Excesso de dose no tumor	$0,1232 \times 10^{-6}$	$0,1133 \times 10^{-6}$
Excesso de dose no tecido crítico	$0,1142 \times 10^{-6}$	$0,1242 \times 10^{-6}$
Excesso de dose no tecido saudável	$0,0045 \times 10^{-6}$	$0,0045 \times 10^{-6}$

FONTE: Salvador, p. 59. Adaptado pelo autor.

O peso de w decide a importância da uniformidade da dose no tumor, ou seja, o aumento de w aumenta as chances de alcançar um plano de tratamento com dose tumoral uniforme.

6.2 Métodos de Pontos Interiores

O processo inicial do tratamento por radioterapia é o mesmo utilizado no subcapítulo (6.1), em que o paciente precisa fazer uma tomografia computadorizada e as imagens devem ser analisadas para, posteriormente, ser dividida em pixels para resolver o problema. Adotou-se o trabalho realizado por [9] para apresentar os resultados computacionais provenientes de um tratamento por radioterapia em que se usou o método de pontos interiores.

Nos experimentos apresentados pela autora foram utilizados dois problemas. O primeiro é um exemplo teste pequeno de 16 pixels e o segundo, com 4096 pixels, baseado em um problema real obtido na página www.trinity.edu/aholder/research/oncology/.

A Tabelas 9 contém os resultados obtidos quanto ao número de iterações e tempo de execução em segundos, respectivamente, para o método primal – dual com e sem Cholesky. Vale lembrar que será possível usar Cholesky somente em matrizes simétricas definidas positivas.

Tabela 8 - Resultados obtidos pelo método primal – dual

Método	Matriz	Iterações	Tempo (segundos)
Primal – dual com Cholesky	16 pixels	12	0,05
	4096 pixels	14	75,3
Primal – dual sem Cholesky	16 pixels	12	0,05
	4096 pixels	14	76,3

Fonte: CID, p. 56 e 57. Adaptado pelo autor.

6.3 Comparação entre o Simplex e os Métodos de Pontos Interiores

Foram analisados dois trabalhos envolvendo o planejamento ótimo da radioterapia, um embasado no método dual-simplex e outro, nos métodos de pontos interiores (primal – dual). O problema foi resolvido em um Microcomputador Macbook – pro, processador 2,5 GHz, i5, 4 GB de memória, 1600 MHz, DDR3, implementado em Matlab 14.

As Tabelas 10, 11, 12 e 13 apresentam uma comparação entre dois métodos.

Tabela 9 - Comparação entre os resultados dos métodos Simplex e Pontos Interiores

Método	Matriz	Iterações	Tempo (segundos)
Primal – dual com Cholesky	16 pixels	12	0,05
	4096 pixels	14	75,3
Primal – dual sem Cholesky	16 pixels	12	0,05
	4096 pixels	14	76,3
Método Simplex	156 pixels	38	0,01

FONTE: CID, p. 56 e 57. Adaptado pelo autor.

Tabela 10 - Comparação entre os resultados dos métodos Dual Simplex e Pontos Interiores para um problema com 342 pixels

Método	Dual Simplex	IPM
Iteração	12	12
Tempo	4.535522×10^{-1} s	2.307250 s
Objetivo de função	3.042952×10^{-9}	3.042952×10^{-9}
Excesso de dose no tumor	4.153469×10^{-5}	4.153469×10^{-5}
Excesso de dose de tecido crítico	7.304035×10^{-6}	7.304035×10^{-6}
Excesso de dose em tecido saudável	9.863899×10^{-8}	9.863899×10^{-8}

FONTE: Salvador, et al.

Tabela 11 - Comparação entre os resultados dos métodos Dual Simplex e Pontos Interiores para um problema com 747 pixels

Método	Dual Simplex	IPM
Iteração	13	13
Tempo	7.352247×10^{-1}	9.160095×10^{-1}
Objetivo de função	3.000177×10^{-9}	3.000177×10^{-9}
Excesso de dose no tumor	3.809950×10^{-5}	3.809950×10^{-5}
Excesso de dose de tecido crítico	6.134144×10^{-6}	6.134144×10^{-6}
Excesso de dose em tecido saudável	7.212216×10^{-6}	7.212216×10^{-6}

FONTE: Salvador, et al.

Tabela 12 - Comparação entre os resultados dos métodos Dual Simplex e Pontos Interiores para um problema com 3718 pixels

Método	Dual Simplex	IPM
Iteração	24	24
Tempo	2.754705 s	2.738810 s
Objetivo de função	1.258780×10^{-9}	1.258780×10^{-9}
Excesso de dose no tumor	3.318770×10^{-5}	3.318770×10^{-5}
Excesso de dose de tecido crítico	2.010262×10^{-6}	2.010262×10^{-6}
Excesso de dose em tecido saudável	$4,522237 \times 10^{-7}$	$4,522237 \times 10^{-7}$

FONTE: Salvador, et al.

Observa-se que ambos os métodos apresentados na Tabela 10 conseguiram minimizar a função objetivo, pois todos convergiram. Porém, o tempo do Simplex foi menor quando comparado ao método aplicado a matrizes menores, ou seja, com menor número de pixels.

O número de iterações bem mais elevado no Simplex pode ser explicado pelo fato que ele procura apenas por soluções básicas (soluções não nulas), que resulta em iterações mais baratas, o que não ocorre nos Pontos Interiores, em que as soluções não precisam ser básicas [10].

Nas Tabelas 11 e 12 o tempo computacional do Dual Simplex foi um pouco melhor que o de Pontos Interiores. Isso ocorreu devido à dimensão do problema trabalho, ou seja, o Simplex é recomendado para problemas de pequeno e médio porte, enquanto o método de Pontos Interiores é direcionado para problemas maiores, isto é, com mais variáveis a serem analisadas. Na Tabela 13 é possível observar que o Método de Pontos Interiores apresentou uma leve melhora no tempo computacional, em decorrência do aumento da dimensão do problema (3718 pixels).

Situações em que o tumor se encontra muito próximo a estruturas críticas necessita-se aumentar o número de pixels no lugar analisado para conseguir um melhor resultado do ponto de vista radioterápico, ou seja, a dimensão precisa ser maior para direcionar melhor a radiação. Nesses casos usa-se o método de pontos interiores, conforme se observa na Tabela 14.

Tabela 13 - Problema de grande porte (45000 pixels)

Métodos	Iterações	Tempo (s)
Primal Dual com Cholesky	27	25,3
Primal Dual sem Cholesky	29	32,1
Simplex	–	–

FONTE: CARVALHO, SMS de. (2017). Adaptado pelo autor.

O caso apresentado na Tabela 14 se refere a um problema de grande porte e apresenta convergência quando se utilizam os métodos Primal Dual com e sem Cholesky, porém não converge quando aplicado o Método Simplex. Portanto, observa-se que o método Simplex pode apresentar problemas de convergência para problemas de grande porte.

A solução de um problema de grande porte exige muito esforço computacional e, ao utilizar a aritmética do ponto flutuante, problemas numéricos podem surgir. Nos métodos tipo simplex, as fontes de imprecisão são, principalmente, as operações feitas com a inversa da matriz básica ou formas equivalentes. Em tais operações, os erros de arredondamento ocorrem e são acumulados, propagando-se de uma iteração para outra. As consequências podem ser uma solução numericamente inexata, uma base ótima errada, ou mesmo conclusões equivocadas, como por exemplo, problema factível declarado como infactível, problema ilimitado com solução ótima, ou vice-versa. Além disso, os cálculos podem se degenerar em qualquer momento se um elemento muito pequeno for erroneamente escolhido como pivô.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foi realizada uma breve apresentação da Pesquisa Operacional e dos conceitos básicos da Programação Linear, em que se define a palavra *programação* como um planejamento para encontrar uma solução ótima para um problema que, neste caso, é linear, ou seja, formado por equações lineares.

Foi apresentada uma comparação entre os métodos Simplex e o métodos de Pontos Interiores Primal-Dual, a fim de verificar qual apresenta melhores resultados para problemas específicos quando utilizados no tratamento de câncer por radioterapia. Os dois se baseiam em imagens de tomografia computadorizada divididas em pixels para poder encontrar um ponto ótimo, ou seja, a solução que melhor satisfaz o problema.

Observou-se que o método Simplex e o Dual Simplex, são mais satisfatórios em problemas de pequeno e médio porte, sendo que, em problemas de grande porte, podem não convergir ou apresentarem resultados pouco confiáveis. Por serem métodos de custo computacional baixo, torna-se viável a aplicação em problemas menores. Já o método de Pontos Interiores apresenta custo computacional alto, sendo viável sua utilização apenas em problemas que apresentem um elevado número de variáveis. Este pode ser aplicado em problemas de pequeno e médio porte, porém é um gasto desnecessário já que o Simplex e o Dual Simplex suprem essa necessidade e apresentam tempo computacional menor nesses casos.

Além da comparação entre os métodos, foi possível observar que a análise do profissional da área é de extrema importância, pois os métodos são utilizados após uma investigação e coleta de dados realizadas pelos integrantes da equipe, verificando o tipo de tumor, sua localização, o peso adotado para análise da homogeneidade da radiação, o ângulo adequado, entre outros. Deve-se ressaltar que, dependendo da localização do tumor, o peso irá variar, pois há casos em que a região crítica e o tumor são os mesmos, sendo necessário aplicar um peso maior, garantindo maior uniformidade da dose.

REFERÊNCIAS

- [1] HILLIER Frederick S. and LIEBERMAN, Gerald J. *Introdução à pesquisa operacional*. São Paulo: McGraw – Hill, 2006.
- [2] ARENALES, M.; ARMENTANO, V. A.; MORABITO, R.; YANASSE, H. H. *Pesquisa Operacional: para cursos de engenharia*. Rio de Janeiro: Campus/Elsevier, 2007.
- [3] GOLDBARG, M. C.; LUNA, H. P. L. *Otimização combinatória e programação linear*. Rio de Janeiro: Campus, 2000.
- [4] BALDO, Tamara Angélica. *Apostila para auxiliar os estudos da disciplina Pesquisa Operacional I*.
- [5] *Raízes de funções de grau 2: Newton - Raphson*. Disponível em: < <http://www.condicao inicial.com/2010/02/raizes-de-funcoes-2-newton-raphson.html> >. Acesso em Dez. 2017.
- [6] JÚDICE, J. et al. *Programação Linear*. Departamento de Matemática, Universidade de Coimbra, Coimbra, 2006.
- [7] CANTAO, Luiza Amalia Pinto; STARK, Felipe Sanches. *Programação Linear–PL*. Material didático s/d. Disponível em: < <http://www2.sorocaba.unesp.br/professor/luiza/PL/apostila.pdf> > UNESP. Sorocaba.
- [8] WRIGHT, S. J. *Primal – Dual Interior – Point Methods*. SIAM Publications, SIAM, Philadelphia, PA, USA, 1996.
- [9] CID, C. B. B. *Planejamento do tratamento por radioterapia através de métodos de pontos interiores*. 2003. Dissertação (Mestrado em Ciência da Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2003. doi: 10.11606/D.55.2003.tde-22052003-203905. Acesso em 2016-10-28.

- [10] SALVADOR, T. R. *Um estudo do método simplex e sua aplicação na radioterapia*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de São Carlos, 2016.
- [11] SILVA, Maelson do Nascimento. *Métodos de pontos interiores e o planejamento de tratamento de câncer por radioterapia*. 2003. 28 p. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) – Instituto de Biociências, Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Botucatu, 2003.
- [12] FERNANDES, D. M. *Método de pontos interiores no planejamento ótimo do tratamento de câncer por radioterapia*. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual Paulista (UNESP), 2009.
- [13] BAZARAA Mokhtar S. John J Jarvis, Hanif D. Sherali. *Linear Programming and Network Flows*. Wiley, fourth edition, 2010.
- [14] *Método de Newton*. Disponível em: www.mat.ufrgs.br/~fabio/newton.pdf>. Acesso em Set. 2017.
- [15] LUENBERGER, D. G.; YE, Y. *Linear and nonlinear programming*, volume 2. Springer, 2008.
- [16] GUARDIA Luiz Ernesto Torres and Ricardo Felício de Souza. *Problema de distribuição dinâmico*. Encontro Nacional de Engenharia de Produção – ENEGEP, 2009.
- [17] MARTINS Roberto de Andrade. *A Descoberta dos Raios X: O Primeiro Comunicado de Röntgen*. Revista Brasileira de Ensino de Física, vol 20(4):373, 1998.
- [18] *A situação do câncer no Brasil*. Disponível em: bvsms.saude.gov.br/bvs/publicacoes/situacao_cancer_brasil.pdf>. Acesso em Set. 2017.
- [19] *Incidência de câncer no Brasil*. Disponível em: <http://www.inca.gov.br/estimativa/2016/index.asp?ID=2>>. Acesso em Set. 2017.

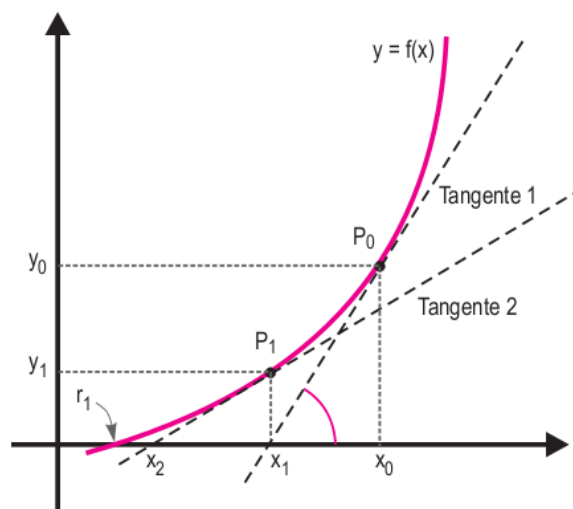
- [20] HOLDER, A. *Designing radiotherapy plans with elastic constraints and interior point methods*. **Health care management science**, v. 6, n.1, p. 5-16, 2003.
- [21] JOHNS, H. E.; CUNNINGHAM, J. R. *Physics of radiology*. Thomas, 1974.
- [22] SALVADOR, T. R.; CARVALHO, S. M. S.; COELHO, M. V. Application of Simplex Method in the Radiotherapy Treatment. *Applied Mathematics*, v. 07, p. 2229-2240, 2016.

APÊNDICE A

MÉTODO DE NEWTON PARA FUNÇÕES DE UMA VARIÁVEL

O método de Newton para uma variável busca encontrar as raízes de uma função, ou seja, sendo $\varnothing(x)$ a função, pretende-se encontrar quando $\varnothing(x) = 0$. Para a demonstração desse método, considere a Figura 23.

Figura 23 - Curva de uma função genérica e algumas retas TANGENTES.



FONTE: <http://www.condicao inicial.com/2010/02/raizes-de-funcoes-2-newton-raphson.html>.

A Figura 23 mostra uma curva e as seguintes características:

- r_1 representa a raiz da função, ou seja, onde $f(x) = 0$;
- P_0 e P_1 são os pontos de tangência das retas com a curva, sendo $P_0(x_0, y_0)$ e $P_1(x_1, y_1)$;
- x_1 e x_2 são as raízes das funções de 1º grau representadas pelas retas *Tangente 1* e *Tangente 2*, respectivamente.

Para encontrar r_1 escolhe-se um ponto aleatório da curva (P_0) e traça-se a reta *Tangente 1*. A raiz x_1 ainda não representa a raiz da função, porém está mais próxima que x_0 . Analogamente, seleciona-se outro ponto da curva (P_1), porém agora com valor definido para x . O ponto escolhido deve possuir a raiz *Tangente 1*. Verifica-se que a raiz x_2 também não é a raiz da função, porém está mais próxima que x_1 . Esse processo se repete várias vezes

até encontrar r_1 . Para representar de forma algébrica, considere a equação fundamental da reta:

$$y - y_0 = m(x - x_0)$$

- x_0 e y_0 representam os valores do ponto de tangência;
- (x, y) representam o ponto que será analisado, que no caso, será a $(x_1, 0)$;
- $y_0 = f(x_0)$;
- m indica o coeficiente angular da reta tangente, que pode ser representado pela derivada da função $f(x)$ no ponto (x_0, y_0) , ou seja, $f'(x_0)$, com $f' \neq 0$.

Trabalhando com a *Tangente 1*, tem-se que:

$$\begin{aligned} 0 - f(x_0) &= f'(x_0)(x_1 - x_0) \\ -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)} &= x_1 - x_0 \\ x_1 &= x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \end{aligned}$$

Denotando-se $f(x)$ por $\emptyset(x)$, observa-se:

$$x_1 = x_0 - \frac{\emptyset(x_0)}{\emptyset'(x_0)}$$

Por processo iterativo, encontra-se:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\emptyset(x_k)}{\emptyset'(x_k)}$$

onde, $d_k = -\frac{\emptyset(x_k)}{\emptyset'(x_k)}$ é a direção de Newton.

Este processo pode ser repetido até que uma tolerância estabelecida seja satisfeita [9].

APÊNDICE B

MÉTODO DE NEWTON PARA FUNÇÕES DE VÁRIAS VARIÁVEIS

Antes de iniciar este estudo, considere a seguinte notação:

- Usa-se subíndice para indicar o elemento de um vetor e superíndice para indicar o passo da iteração. Assim, $x^{(n)}$ se refere à iteração n e $x_i^{(n)}$ se refere à componente i no vetor $x^{(n)}$.

Para generalizar o método de Newton, considere um problema de várias equações e várias incógnitas. As seguintes equações devem ser satisfeitas [14]:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0. \end{aligned}$$

Este problema pode ser escrito na forma vetorial, definindo o vetor

$$x = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T \text{ e a função vetorial } F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{bmatrix}.$$

Considere o problema na forma $F(x) = 0$ e observe que $F(x) - F(x^{(0)})$ pode ser escrito como:

$$F(x) - F(x^{(0)}) = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) - f_1(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) - f_2(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) - f_n(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) \end{bmatrix}.$$

Usando a regra da cadeia

$$df_i = \frac{\partial f_i}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial f_i}{\partial x_2} dx_2 + \dots + \frac{\partial f_i}{\partial x_n} dx_n = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} dx_j$$

e aproximando as diferenças por derivadas parciais:

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) - f_i(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) \approx \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} (x_j - x_j^{(0)}).$$

Portanto,

$$F(x) - F(x^{(0)}) \approx \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - x_1^{(0)} \\ x_2 - x_2^{(0)} \\ \vdots \\ x_n - x_n^{(0)} \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

Logo, a matriz Jacobiana é dada por:

$$J_F = \frac{\partial(f_1, f_2, \dots, f_n)}{\partial(x_1, x_2, \dots, x_n)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}.$$

A matriz Jacobiana de uma função ou, simplesmente, o Jacobiano de uma função $F(x)$ é a matriz formada pelas suas derivadas parciais:

$$(J_F)_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}.$$

Logo, (4.1) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} F(x) - F(x^{(0)}) &\approx J_F(x^{(0)})(x - x^{(0)}) \\ F(x) &\approx F(x^{(0)}) + J_F(x^{(0)})(x - x^{(0)}) \quad (4.2) \end{aligned}$$

Tal expressão representa a linearização de $F(x)$ no ponto $x^{(0)}$ e generaliza a linearização em uma dimensão, ou seja:

$$f(x) \approx f(x^{(0)}) + f'(x^{(0)})(x - x^{(0)}).$$

Para generalizar o método de Newton para sistemas, considere que a função $F(x)$ é diferenciável e há um ponto x^* , tal que $F(x^*) = 0$. Sendo $x^{(n)}$ uma aproximação para x^* ,

pretende-se construir uma nova aproximação $x^{(n+1)}$ através da linearização de $F(x)$ no ponto $x^{(n)}$. De forma análoga à expressão 4.2 e considerando $F(x) = 0$, tem-se:

$$\begin{aligned} F(x) &= F(x^{(n)}) + J_F(x^{(n)})(x^{(n+1)} - x^{(n)}). \\ F(x^{(n)}) + J_F(x^{(n)})(x^{(n+1)} - x^{(n)}) &= 0. \end{aligned}$$

Considerando que a matriz Jacobiana seja inversível no ponto $x^{(n)}$, verifica-se:

$$\begin{aligned} J_F(x^{(n)})(x^{(n+1)} - x^{(n)}) &= -F(x^{(n)}) \\ x^{(n+1)} - x^{(n)} &= -\frac{F(x^{(n)})}{J_F(x^{(n)})} \\ x^{(n+1)} - x^{(n)} &= -J_F^{-1}(x^{(n)})F(x^{(n)}) \\ x^{(n+1)} &= x^{(n)} - J_F^{-1}(x^{(n)})F(x^{(n)}). \end{aligned}$$

Logo, o método iterativo para encontrar as raízes de $F(x) = 0$ é dado por:

- $x^{(n+1)} = x^{(n)} - J_F^{-1}(x^{(n)})F(x^{(n)})$;
- $x^{(0)} = \text{dado inicial}$;
- $n = 0, 1, 2, \dots$;
- *Cálculo da direção*: $d^n = -J_F^{-1}(x^{(n)})F(x^{(n)})$;
- *Cálculo do novo ponto*: $x^{n+1} = x^n + d^n$;
- *O processo é repetido até convergir, considerando um critério de convergência* $\frac{\|f(x^{n+1})\|}{\|f(x^n)\|}$, menor que uma dada tolerância.

Para não precisar calcular a inversa da matriz Jacobiana, é mais vantajoso considerar a expressão na forma:

$$J_F(x^{(n)})(x^{(n+1)} - x^{(n)}) = -F(x^{(n)}),$$

sendo que $x^{(n+1)} - x^{(n)}$ pode ser representada por $\Delta^{(n)}$ e a expressão se torna:

$$J_F(x^{(n)}) \Delta^{(n)} = -F(x^{(n)})$$