Національна академія наук України
Інститут проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного

Хлуд Ольга Михайлівна

УДК 519.859

ЗАДАЧА ОПТИМАЛЬНОЇ УПАКОВКИ ЕЛІПСОЇДІВ: МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ТА МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ

01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата технічних наук

Харків – 2018

Дисертацією є рукопис.
Робота виконана в Інституті проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного НАН України.

Науковий керівник	доктор технічних наук, професор **Романова Тетяна Євгеніївна,** Інститут проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного НАН України, пров. науковий співробітник
Офіційні опоненти:	доктор технічних наук, професор **Комяк Валентина Михайлівна,** Національний університет цивільного захисту України, професор кафедри фізико-математичних дисциплін
	доктор технічних наук, професор **Жолткевич Григорій Миколайович,** Харківський національний університет ім. В. Н. Каразіна, декан факультету математики і інформатики, професор кафедри теоретичної і прикладної інформатики

Захист відбудеться "28" лютого 2019 р. о 16 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 64.180.01 при Інституті проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного НАН України за адресою:
61046, м. Харків, вул. Пожарського, 2/10.

З дисертацією можна ознайомитися в науково-технічній бібліотеці Інституту проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного НАН України за адресою:
61046, м. Харків, вул. Пожарського, 2/10.

Автореферат розісланий "25" січня 2019 р.
Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 64.180.01
д.т.н., проф. О.О. Стрельнікова

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. На сучасному етапі стрімко зростає інтерес до ефективного розв'язання класу задач оптимальної упаковки тривимірних геометричних об'єктів, що має широкий спектр наукових і практичних застосувань у мінералогії, хімічній промисловості, матеріалознавстві, сучасній біології, нанотехнологіях, робототехніці, машинобудуванні, системах розпізнавання образів та багатьох інших галузях.

Задачі упаковки (*Packing Problems*) належать до класу NP-складних та є предметом досліджень обчислювальної геометрії, в той час як методи їх розв'язання є досить новою галуззю теорії дослідження операцій.

Міжнародна організація *ESICUP* (EURO Special Interest Group on Cutting and Packing) об'єднує провідних учених всього світу, дослідження яких присвячено класу задач упаковки та розкрою, у тому числі слід відмітити Dyckhoff H., Wascher G., Scheithauer G., Bortfeldt A. (Germany), Bennell J., Burke E., Kendall G. (UK), Oliveira J., Gomes M. (Portugal), Daniels K., Pinter J. (USA), Birgin E. (Brasil), Fasano G. (Italy), Alvarez-Valdes R. (Spain), Hifi M. (France), Imahori S. (Japan), Pisinger D. (Denmark).

Задачі упаковки еліпсоїдів виникають під час комп'ютерного моделювання структури рідин, кристалів і скла, руху і пресування сипучих речовин, розробки високоміцних керамічних матеріалів, вирощування кристалів, у термодинаміці для моделювання процесу переходу рідин у кристалічну форму, в сучасній біології під час моделювання розміщення хромосом в ядрах людських клітин, у ядерній медицині для виробництва ліків, в адитивних технологіях (3D printing) з метою оптимізації геометрії промислових виробів, у робототехніці для моделювання руху та взаємодії частин роботів та у багатьох інших галузях науки і техніки.

На сьогодні задачі оптимальної упаковки еліпсоїдів залишаються недостатньо дослідженими, оскільки тривалий час основна увага приділялась аналізу щільності їх упаковки. Тому в процесі моделювання еліпсоїди не обмежували контейнерами, як наслідок, оптимізаційні процедури не застосовувалися. В останні два десятиріччя з'явились публікації, які присвячено оптимізаційним задачам упаковки еліпсоїдів в заданому контейнері. Для розв'язання задач використовуються як евристичні алгоритми, так і нелінійна оптимізація. Однак у публікаціях зазвичай розглядаються контейнери, які мають форму прямокутного паралелепіпеда або кулі, та не враховуються допустимі відстані між еліпсоїдами, що значно звужує клас практичних задач, які можуть бути успішно розв'язані з використанням сучасних комп'ютерних технологій. Крім того, запропоновані оптимізаційні алгоритми мають оцінку, яка є квадратичною по відношенню до кількості еліпсоїдів, що часто призводить до неможливості застосування локальних та глобальних NLP-solvers (програмне забезпечення для розв'язання задач нелінійного програмування).

Отже, створення засобів математичного та комп'ютерного моделювання відношень еліпсоїдів, побудова NLP-моделей, що враховують орієнтацію та особливості метричних характеристик еліпсоїдів, форму контейнера і обмеження на допустимі відстані, та розробка ефективних методів розв'язання задач оптимальної упаковки еліпсоїдів, які дозволять отримувати локально-оптимальні та допустимі розв’язки за прийнятний час із застосуванням сучасних NLP-solvers, є актуальними.

Дисертаційна робота є продовженням досліджень, які проводяться в Інституті проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного НАН України в відділі математичного моделювання та оптимального проектування під керівництвом члена-кореспондента НАН України Ю.Г. Стояна і пов’язані з розробкою засобів, моделей та методів розв’язання задач оптимальної упаковки тривимірних об’єктів.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана в період з 2015 р. по 2018 р. у відділі математичного моделювання і оптимального проектування Інституту проблем машинобудування ім. А.М. Підгорного НАН України відповідно до планів науково-технічних робіт з держбюджетних тем «Створення інтелектуальних інформаційних технологій розв’язання оптимізаційних задач розміщення об'єктів довільних просторових форм» (2012–2016 рр. № ДР 0112U002488), «Розробка математичних моделей та комп'ютерних технологій розв'язання оптимізаційних задач компонування тривимірних об'єктів» (2017–2018 рр. № ДР 0117U000877).

Мета та задачі дослідження. Метою роботи є підвищення ефективності розв'язання задач оптимальної упаковки еліпсоїдів у опуклий контейнер завдяки розробці конструктивних засобів математичного та комп'ютерного моделювання, NLP-моделей, методів пошуку допустимих та локально-оптимальних розв’язків із застосуванням сучасних NLP-solvers.

Для досягнення цієї мети поставлені такі наукові задачі:

1) сформулювати базову задачу оптимальної упаковки еліпсоїдів в довільний опуклий контейнер, границя якого формується сферичними, еліптичними, циліндричними поверхнями і площинами, з урахуванням обмежень на допустимі відстані між еліпсоїдами (надалі 3DBEP – Basic Ellipsoid Packing Problem);

2) розробити засоби математичного моделювання обмежень розміщення (неперетин еліпсоїдів, включення еліпсоїдів у контейнер, мінімально допустимі відстані) у вигляді класів phi-функцій (псевдонормалізованих phi-функцій) та квазі phi-функцій (псевдонормалізованих квазі phi-функцій);

3) побудувати математичну модель задачі 3DBEP та математичні моделі основних її реалізацій у вигляді NLP-моделей залежно від: форми контейнера (зокрема: прямокутний паралелепіпед, круговий циліндр, опуклий багатогранник, куля, еліпсоїд); обмежень на орієнтацію еліпсоїдів (однаково орієнтовані, допускаються неперервні обертання); особливостей метричних характеристик еліпсоїдів (гомотетичні, еліпсоїди обертання, довільні); обмежень на мінімально допустимі відстані між еліпсоїдами;

4) розробити стратегію розв’язання задачі 3DBEP та її основних реалізацій;

5) розробити методи та алгоритми пошуку допустимих і локально-оптимальних розв’язків для задач упаковки: гомотетичних однаково орієнтованих еліпсоїдів у контейнер (прямокутний паралелепіпед, еліпсоїд) мінімальних розмірів; неорієнтованих еліпсоїдів обертання у контейнер (прямокутний паралелепіпед, циліндр) мінімальних розмірів; неорієнтованих еліпсоїдів у довільний опуклий контейнер мінімальних розмірів, границя якого формується сферичними, еліптичними, циліндричними поверхнями та площинами;

6) створити програмне забезпечення для розв’язання основних реалізацій базової задачі оптимальної упаковки еліпсоїдів.

Об’єкт дослідження – процес оптимальної упаковки еліпсоїдів з урахуванням їх безперервних обертань.

Предмет дослідження – засоби математичного моделювання, математичні моделі та методи розв'язання задач оптимальної упаковки еліпсоїдів.

Методи дослідження. У роботі для побудови phi-функцій (псевдонормалізованих phi-функцій), квазі phi-функцій (псевдонормалізованих квазі phi-функцій) використано аналітичну геометрію; для побудови математичних моделей – методи геометричного проектування; для розробки методів пошуку допустимих стартових точок та локально-оптимальних розв’язків – методи геометричного проектування, методи нелінійного програмування і негладкої оптимізації.

Наукова новизна отриманих результатів полягає у такому:

– вперше побудовано засоби математичного моделювання для задач упаковки еліпсоїдів у вигляді нових класів phi-функцій (псевдонормалізованих квазі phi-функцій), квазі phi-функцій (псевдонормалізованих квазі phi-функцій), які дозволяють в аналітичному вигляді описувати відносини неперетину еліпсоїдів, включення еліпсоїдів в контейнер з урахуванням форми контейнера, орієнтації еліпсоїдів, особливостей їх метричних характеристик та обмежень на мінімально допустимі відстані між еліпсоїдами;

– вперше побудовано математичну модель задачі 3DBEP та математичні моделі основних реалізацій базової задачі оптимальної упаковки еліпсоїдів у контейнер (прямокутний паралелепіпед, опуклий багатогранник, куля, еліпсоїд, циліндр) мінімальних розмірів (відповідних метричних характеристик) у вигляді задач нелінійного програмування;

– набули подальшого розвитку методи розв’язання задач геометричного проектування для задачі 3DBEP з використанням методів нелінійного програмування і негладкої оптимізації, які, на відміну від існуючих евристичних підходів, дозволяють отримувати допустимі та локально-оптимальні розв’язки за прийнятний час.

Практичне значення одержаних результатів. Наукові результати дисертаційної роботи є подальшим розвитком математичного моделювання та обчислювальних методів у геометричному проектуванні. Створено нові засоби математичного та комп’ютерного моделювання, математичні моделі, розроблено ефективні методи та алгоритми розв'язання оптимізаційних задач упаковки еліпсоїдів, що дозволяє застосовувати для розв'язання розглянутого класу задач сучасні локальні та глобальні NLP- solvers.

Світовий рівень розроблених засобів математичного моделювання, моделей та методів розв'язання підтверджується публікаціями в міжнародних журналах та фахових виданнях України і апробацією на міжнародних конференціях.

Результати дисертаційної роботи впроваджені в навчальний процес в Харківському національному університеті радіоелектроніки у курсі «Математичне і комп'ютерне моделювання в системах підтримки прийняття рішень», застосовувались у дипломному проектуванні; використовуються в IT компанії Cloud Works у програмному забезпеченні для розв'язання задач упаковки об'єктів та під час розробки комп'ютерних ігор, де потрібно відстежувати взаємодію об'єктів, що мають форму еліпсоїдів; у дослідницьких програмах Мексиканського національного університету Nuevo Leon State University «Large Scale Optimization Problems in Logistics and Supply Chain Networks» та «National Research Network for Decision Support and Intelligent Optimization in Complex and Large Scale Systems».

Моделі, методи, алгоритми, відповідне програмне забезпечення, запропоновані в дисертаційній роботі, використано в наукових дослідженнях Інституту проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного НАН України під час виконання держбюджетних тем у період з 2015р. по цей час.

Особистий внесок здобувача в роботах, які виконані в співавторстві: [2,5,8,11,13,19,21] – phi-функції для аналітичного опису відношень гомотетичних однаково орієнтованих еліпсоїдів, математична модель та метод розв'язання задачі упаковки гомотетичних однаково орієнтованих еліпсоїдів з використанням методів нелінійного програмування, обчислювальні експерименти; [4] – метод доупаковки для задачі оптимальної упаковки гомотетичних однаково орієнтованих еліпсоїдів, математична модель та методи розв'язання задачі з використанням нелінійного програмування та негладкої оптимізації; [1,9,14,16,17,18,19,22] – квазі phi-функція для аналітичного опису відношень неорієнтованих еліпсоїдів обертання; [1,9, 14,16,17,18,19,22] – NLP-моделі, методи пошуку допустимих стартових точок, метод декомпозиції для пошуку локально-оптимальних розв'язків задачі упаковки неорієнтованих еліпсоїдів обертання у прямокутний паралелепіпед або циліндр; [3,6,7,12] – NLP-моделі для задач упаковки неорієнтованих еліпсоїдів у довільний опуклий контейнер з використанням апроксимації еліпсоїдів опуклими багатогранниками або кулями, алгоритм генерації стартових точок, метод декомпозиції для пошуку допустимих розв'язків, обчислювальні експерименти.

Апробація результатів дисертації. Основні результати роботи доповідалися і отримали схвалення на таких міжнародних конференціях і наукових семінарах: конференції молодих учених і фахівців «Сучасні проблеми машинобудування» ІПМаш НАН України (Харків, Україна, 2015, 2016, 2018рр.); міжнародному молодіжному форумі «Радіоелектроніка і молодь в XXI столітті» (Харків, Україна, 2016-2018рр.); XXI всеукраїнській науковій конференції «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики» (Львів, Україна, 2015р.); XIII міжнародній науково-практичній конференції «Математичне та програмне забезпечення інтелектуальних систем» (Дніпро, Україна, 2015р.); міжнародній науковій конференції «Математичне моделювання, оптимізація і інформаційні технології» (Кишинів, Молдова, 2016, 2018рр.); 5-й міжнародній науково-технічній конференції «Інформаційні системи і технології» (Коблеве, Україна, 2016 р.); 7-й міжнародній конференції «Застосування інформаційних і комунікаційних технологій та статистики в економіці і освіті» (Софія, Болгарія, 2017 р.); XXX міжнародній конференції «Проблеми ухвалення рішень в умовах невизначеності» (Вільнюс, Литва, 2017р.); 14-й міжнародній конференції «ESICUP» (Льєж, Бельгія, 2017р.); семінарі відділу методів негладкої оптимізації Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, (Київ, 2018р.)

Публікації. За темою дисертаційної роботи опубліковано 22 наукові праці, в тому числі: 7 статей у спеціалізованих виданнях, затверджених ДАК МОН України: [1-7], 15 тез доповідей на міжнародних і молодіжних наукових конференціях: [8-22].

Структура та обсяг дисертації. Дисертація містить вступ, шість розділів, висновки по роботі, список використаних джерел зі 103 найменувань на 11 сторінках та 4 додатки на 27 сторінках. Повний обсяг дисертації становить 160 сторінок, з них 122 сторінок основного тексту, включаючи 54 рисунки.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовано актуальність теми дисертації, сформульовано мету і задачі дослідження, вказано об'єкт, предмет і методи досліджень, викладено наукову новизну і практичну важливість отриманих результатів, наведено відомості про публікації за темою дисертаційної роботи та про апробацію результатів дослідження.

Перший розділ дисертації присвячено огляду публікацій за темою роботи і визначенню напрямів дослідження.

Задача упаковки еліпсоїдів стала предметом інтенсивних теоретичних і практичних досліджень порівняно нещодавно, та попри це має багато застосувань у різних галузях науки та техніки.

Щільність тривимірної упаковки еліпсоїдів аналізується, наприклад, у роботах Donev A., Cisse I., Sachs D., Variano E., Stillinger F.H., Connelly R., Torquato S., Chaikin P.M., Lu L.-Z, Pearce C.E.M., Lubachevsky B.D. За результатами досліджень встановлено, що щільність упаковки еліпсоїдів наближається до щільності кристалічної упаковки. Моделюванню відношення неперетину пари еліпсоїдів присвячені публікації Plyushch A., Lamberti P., Spinelli G., Macutkevič J., Kuzhir P. В работах Baule A., Mari R., Bo L., Portal L., Makse H. A., Lind P.G., запропоновано евристичні алгоритми для розв’язання задачі упаковки еліпсоїдів. Учені Uhler C. та Wright S.J. розглядають задачу мінімізації перекриття еліпсоїдів у контейнері заданих розмірів. Дослідження Kallrath J. присвячене задачі упаковки еліпсоїдів у прямокутний контейнер мінімального об’єму. Автор пропонує неопуклу NLP-модель. З використанням глобальних NLP-solvers, що є наявними у GAMS, отримано допустимі розв’язки для упаковки невеликої кількості еліпсоїдів. У роботі Birgin E. G., Lobato R. D., Martinez J. M. наведені неперервні моделі нелінійного програмування для моделювання неперетину еліпсоїдів та алгоритми упаковки еліпсоїдів у n-вимірному просторі. Стратегія мультистарту поєднується з програмою Algencan для пошуку локальних розв'язків задач нелінійного програмування для двох видів контейнерів.

У рамках наукової школи Ю. Г. Стояна розробці математичних моделей та методів розв'язання задач упаковки та розкрою присвячено роботи багатьох його учнів, у тому числі Гіля М. І., Комяк В. М., Яковлева С. Я., Ємця О. О., Новожилової М. В., Гребенніка І. В., Пацука В. М., Яськова Г. М., Чугая А. М. Оптимізаційним задачам упаковки еліпсів та еліпсоїдів присвячено публікації Гіля М. І., Панкратова О. В., Романової Т. Є., Комяк В. М., Пацука В. М., Суботи І. О.

Однак відкритим залишається питання розробки сучасних комп'ютерних технологій для оптимізації упаковки еліпсоїдів у довільних опуклих контейнерах із урахуванням обмежень на орієнтацію та особливості метричних характеристик еліпсоїдів, форми контейнера і обмежень на допустимі відстані.

У зв'язку з цим виникла об'єктивна необхідність у розробці конструктивних засобів математичного і комп'ютерного моделювання відношень еліпсоїдів, побудові NLP-моделей та створенні ефективних методів розв'язання задач оптимальної упаковки еліпсоїдів, що і визначило тему дисертаційної роботи.

У другому розділі дисертації наведено визначення phi-функції (псевдонормалізованої phi-функції), квазі phi-функції (псевдонормалізованої квазі phi-функції) та їх основні властивості. Сформульовано базову задачу оптимальної упаковки еліпсоїдів (3DBEP). Побудовано математичну модель 3DBEP у вигляді задачі нелінійного програмування.

Розглядається задача упаковки еліпсоїдів у такій постановці. Маємо набір еліпсоїдів E_i, $i \in I_N = \{1, 2, ..., N\}$. Кожен еліпсоїд заданий півосями a_i, b_i, c_i. Нехай $E(u_i) = \{u_i \in R^3 : u_i = v_i + M(\Theta_i) \cdot {u_i}^0, \forall {u_i}^0 \in E^0_i\}$, де (v_i, Θ_i), $v_i = (x_i, y_i, z_i)$ – вектор трансляції, $\Theta_i = (\theta_i^3, \theta_i^2, \theta_i^1)$ – кути Ейлера, $M(\Theta_i)$ – матриця повороту. Надалі, якщо допускаються неперервні повороти, то будемо говорити, що еліпсоїди неорієнтовані.

Як контейнер розглядається довільна опукла область Ω, границя якої формується сферичними, циліндричними, еліптичними поверхнями та площинами. Позначимо p вектор змінних метричних характеристик області Ω.

Базова задача оптимальної упаковки еліпсоїдів (3DBEP). Упакувати набір еліпсоїдів $\{E_i(u_i), i \in I_N\}$ в опуклий контейнер $\Omega(p)$ так, щоб цільова функція F (об'єм, коефіцієнт гомотетії або одна з метричних характеристик контейнера) досягала свого мінімального значення.

У рамках даного дослідження розглянуто такі види контейнера: $\Omega \in \{\boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}, \boldsymbol{S}, \boldsymbol{K}, \boldsymbol{E}, \Lambda\}$, де $\boldsymbol{B}$ – прямокутний паралелепіпед змінних розмірів l, w і h, $p = (l, w, h)$; $\boldsymbol{E}$ – еліпсоїд зі розмірами півосей γa, γb, γc, де γ – змінний коефіцієнт гомотетії, p=(γ), за умови початкового розміру контейнера при γ=1; $\boldsymbol{S}$ – куля змінного радіуса r, $p=(r)$; $\mathbf{K}$ – опуклий багатогранник, заданий перетином напівпросторів $\alpha_s \cdot x+\beta_s \cdot y+\delta_s \cdot z+\gamma \cdot \mu_s, s=1,\ldots,n_K$, зі змінним коефіцієнтом гомотетії γ, p=(γ), за умови початкового розміру контейнера при γ=1; C – циліндр з радіусом γr та висотою γh, де γ – змінний коефіцієнт гомотетії, p=(γ), за умови початкового розміру контейнера при γ=1; $\Lambda(p)$ – довільна опукла область, границя якої формується сферичними, циліндричними, еліптичними поверхнями та площинами, p=(γ), за умови початкового розміру контейнера при γ=1.

Залежно від виду цільової функції, форми контейнера, обмежень на орієнтацію еліпсоїдів (однаково орієнтовані, допускаються неперервні обертання) та мінімально допустимі відстані, особливостей метричних характеристик еліпсоїдів (гомотетичні, еліпсоїди обертання, довільні), виділено такі реалізації базової задачі оптимальної упаковки еліпсоїдів: 3DHEP *(Homothetic Ellipsoid Packing)* – упаковка однаково орієнтованих гомотетичних еліпсоїдів у контейнер (прямокутний паралелепіпед, еліпсоїд) мінімальних розмірів; 3DEP *(Ellipsoid Packing)* – упаковка неорієнтованих еліпсоїдів обертання у контейнер (прямокутний паралелепіпед, циліндр) мінімальних розмірів; 3DAEP *(Approximated Ellipsoid Packing)* – упаковка неорієнтованих еліпсоїдів у довільний опуклий контейнер (границя якого формується сферичними, циліндричними, еліптичними поверхнями та площинами) мінімальних розмірів.

Для аналітичного опису основних обмежень розміщення еліпсоїдів використано метод phi-функцій Стояна.

Математична модель базової задачі оптимальної упаковки еліпсоїдів має вигляд

$$\min_{u \in W \subset \mathbb{R}^{\sigma}} F(u), \tag{1}$$

$$W=\{u \in \mathbb{R}^{\sigma} : \Upsilon_{ij}(u_i,u_j,u'_{ij}) \geq 0, i<j \in I_N, \Upsilon_i(p,u_i,u'_i) \geq 0, i \in I_N, \quad \zeta(p,u_1,\ldots,u_N) \geq 0\}, \tag{2}$$

де $u=(p,u_1,\ldots,u_N,\tau)$ – вектор змінних задачі; $u_i=(v_i,\theta_i), v_i=(x_i,y_i,z_i)$; p – вектор змінних метричних характеристик контейнера Ω; τ – вектор додаткових змінних для побудови квазі phi-функцій; $\mathbb{R}^{\sigma}$ – арифметичний евклідів простір розмірності $\sigma=|p|+6N+0.5N(N-1)|\Sigma_1|+N|\Sigma_2|$; $|\Sigma_k|$ – число додаткових змінних; $k=\{1,2\}$; $\Upsilon_{ij}(u_i,u_j,u'_{ij}) \geq 0$ – описує умову $\operatorname{int} E_i \bigcap \operatorname{int} E_j = \varnothing$ або обмеження $dist(E_i,E_j) \geq \rho$, ($dist(E_i,E_j)=\min\limits_{e_i \in E_i, e_j \in E_j} d(e_i,e_j)$, де $d(e_i,e_j)$ – евклідова відстань між точками e_i та e_j); $\Upsilon_{ij}(u_i,u_j,u'_{ij})$ – phi-функція (псевдонормалізована phi-функція, квазі phi-функція, псевдонормалізована квазі phi-функція) для еліпсоїдів E_i і E_j; $i<j \in I_N$; $\Upsilon_i(p,u_i,u'_i) \geq 0$ – описує умову

$E_i \subset \Omega \Leftrightarrow \operatorname{int} E_i \bigcap \Omega^* = \varnothing$, $\Omega^* = \mathbb{R}^3 \setminus \operatorname{int}\Omega$, $i \in I_N$; $\Upsilon_i(u)$ – phi-функція (квазі phi-функція) для еліпсоїда E_i і об'єкта $\Omega^*, i \in I_N$; $\zeta(p, u_1, ..., u_N) \geq 0$ – система обмежень на змінні метричні характеристики p контейнера Ω та додаткові обмеження на змінні параметри розміщення $u_1, ..., u_N$ еліпсоїдів $E_i(u_i), i \in I_N$.

Розмірність σ задачі та вид функцій $\Upsilon_i(\Upsilon_{ij})$ залежать від: виду цільової функції, особливостей метричних характеристик еліпсоїдів, форми контейнера, обмежень на орієнтацію еліпсоїдів та мінімально допустимі відстані.

Запропоновано стратегію розв'язання задачі 3DBEP, яка включає три основних етапи:

1) Генерацію стартових точок з області допустимих розв'язків.
2) Пошук локальних мінімумів задачі 3DBEP для кожної стартової точки, отриманої на першому етапі.
3) Пошук найкращого локального екстремуму з отриманих на другому етапі.

У третьому розділі розглянуто задачу оптимальної упаковки гомотетичних однаково орієнтованих еліпсоїдів. Для аналітичного опису основних обмежень розміщення використано phi-функції. Побудовано математичну модель у вигляді задачі нелінійного програмування. Запропоновано два метода для пошуку локально-оптимальних розв'язків, один з яких використовує нелінійну оптимізацію, а другий – алгоритм Шора.

Маємо набір гомотетичних еліпсоїдів E_i, $i \in I_N = \{1, 2, ..., N\}$, заданих півосями a_i, b_i та c_i. Положення E_i визначається вектором трансляції $v_i = (x_i, y_i, z_i)$, $u_i = (v_i, \theta = const)$. Як контейнер розглянуто $\Omega = \{\boldsymbol{B}, \boldsymbol{E}\}$.

Задача оптимальної упаковки еліпсоїдів 3DHEP. Упакувати набір гомотетичних однаково орієнтованих еліпсоїдів $\{E_i(v_i), i \in I_N\}$ у контейнер $\Omega(p)$ так, щоб цільова функція $F(u)$ досягала свого мінімального значення.

Математична модель (1)–(2) для задачі 3DHEP набуває вигляду

$$\min_{u \in W \subset \mathbb{R}^\sigma} F(u), \tag{3}$$

$$W = \{u \in \mathbb{R}^\sigma : \Phi^{E_i E_j}(v_i, v_j) \geq 0,\ j > i \in I_N, \Phi^{E_i \Omega^*}(v_i, p) \geq 0, i \in I_N, \zeta(p) \geq 0\}, \tag{4}$$

де $u = (p, v_1, ..., v_N)$, $\Phi^{E_i E_j}(v_i, v_j)$ – phi-функція, що описує відношення неперетину еліпсоїдів; $\Phi^{E_i \Omega^*}(v_i, p)$ – phi-функція, що описує відношення включення еліпсоїдів у контейнер $\Omega = \{\boldsymbol{B}, \boldsymbol{E}\}$; $F(u) = l \cdot w \cdot h$, $p = (l, w, h)$, $\sigma = 3N + 3$, якщо $\Omega \equiv \boldsymbol{B}$, $F(u) = \gamma$, $p = (\gamma)$ та $\sigma = 3N + 1$ при $\Omega \equiv \boldsymbol{E}$, $\zeta(p) \geq 0$ – система додаткових обмежень на метричні характеристики контейнера.

Для пошуку розв'язків задачі (3)–(4) запропоновано методи з застосуванням таких алгоритмів.

В основі **алгоритму 1** лежить метод мультистарту та оптимізаційна процедура, що включає пошук допустимих стартових точок і локальну оптимізацію.

Для розв'язання задачі спершу обираються достатньо великі розміри контейнера p_0, які гарантують розміщення в ньому всіх еліпсоїдів. Випадковим чином генерується множина з N точок всередині контейнера, які є центрами мікрокопій еліпсоїдів E_i, $i \in I_N$. Далі розв'язується допоміжна задача нелінійного програмування вигляду

$$\max_{u \in W' \subset \mathbb{R}^{\sigma}} \sum_{i=1}^{N} a_i \lambda_i , \tag{5}$$

$$W' = \{u \in \mathbb{R}^{\sigma} : \Phi^{E_i E_j}(v_i, v_j) \ge 0,\ j > i \in I_N, \Phi^{E_i \Omega^*}(v_i) \ge 0, 0 \le \lambda_i \le 1, i \in I_N\}, \tag{6}$$

де $u = (v_1, \lambda_1, \ldots, v_N, \lambda_N)$, $i \in I_N$, λ_i – змінні коефіцієнти гомотетії еліпсоїдів E_i, $i \in I_N$, $\sigma = 4N$.

Глобальний екстремум задачі (5)–(6) забезпечує розміщення еліпсоїдів E_i у контейнері з розмірами p_0 з урахуванням умови неперетину еліпсоїдів. Стартуючи з точки, отриманої в результаті розв'язання задачі (5)–(6), здійснюється пошук локального екстремуму задачі (3)–(4).

Для покращення результату, використовуючи отриману точку локального мінімуму як стартову, розв'язується допоміжна задача вигляду

$$\max_{u \in W'' \subset \mathbb{R}^{\sigma}} \sum_{i=1}^{N} (a_i \lambda_i)^2 , \tag{7}$$

$$W'' = \{u \in \mathbb{R}^{\sigma} : \Phi^{E_i E_j}(v_i, v_j) \ge 0,\ j > i \in I_N, \Phi^{E_i \Omega^*}(v_i) \ge 0,\ a^- \le a_i \lambda_i \le a^+, i \in I_N\},$$

$$a^- = \min\{a_i, i \in I_N\},\ \ a^+ = \max\{a_i, i \in I_N\}, \tag{8}$$

де $u = (v_1, \lambda_1, \ldots, v_N, \lambda_N,)$, $\sigma = 4N$.

Це дозволяє реалізувати перехід від одного локального екстремуму до іншого.

Стартуючи з точки локального максимуму задачі (7)–(8), розв'язується задача (3)–(4) для отримання точки локального мінімуму.

За розв'язок задачі (3)–(4) приймається найкращий із локально-оптимальних розв'язків, отриманих для різних стартових точок.

Для пошуку локальних мінімумів задачі 3DHEP запропоновано *метод локальної оптимізації* 3DLOFRT, який зводить задачу з кількістю $O(N^2)$ квадратичних нерівностей до послідовності задач з кількістю $O(N)$ квадратичних нерівностей.

Алгоритм 2. З використанням негладких штрафів задача (3)–(4) зводиться до задачі безумовної мінімізації, алгоритм знаходження найкращого розв'язку якої полягає у такому. Для деякої заданої множини стартових точок виконується пошук локальних мінімумів задачі за допомогою модифікації r-алгоритму Шора. Кращий із локальних мінімумів задачі, якому відповідає найкраще значення цільової функції та для якого штрафна функція близька до нуля, приймається як розв'язок задачі.

У даному розділі запропоновано ***метод «доупаковки»***, основна ідея якого полягає в такому.

Нехай отримано локально-оптимальний розв’язок задачі (3)–(4). Відповідні параметри розміщення еліпсоїдів $E_i(u_i^*), i \in I_N$, у контейнері Ω фіксуємо.

Задача «доупаковки». Необхідно заповнити вільний простір $\Omega \setminus \operatorname{int} \bigcup_{i=1}^{N} E_i(u_i^*)$ усередині контейнера орієнтовними еліпсоїдами, які мають задані типорозміри, з метою максимізації коефіцієнта заповнення Ω.

В основі алгоритму лежить оптимізаційна процедура, кожна r-та ітерація якої включає розміщення додаткового еліпсоїда E_r, що полягає у розв’язанні задачі максимізації коефіцієнта гомотетії еліпсоїда E_r за обмежень включення E_r у контейнер Ω та неперетину з розміщеними еліпсоїдами $\{E_i(u_i^*), i = 1, \ldots, N + r - 1\}$. Оптимізаційна процедура завершується, якщо $\dfrac{a^-}{a^+} > \lambda_r$, де λ_r – коефіцієнт гомотетії еліпсоїда E_r, a^- і a^+ – найменше і найбільше значення великих півосей еліпсоїдів заданого набору. Кількість додаткових еліпсоїдів може бути заданою.

Четвертий розділ присвячено оптимізаційній задачі упаковки неорієнтованих еліпсоїдів обертання (сфероїдів) у прямокутний паралелепіпед або круговий циліндр. Для аналітичного опису основних обмежень розміщення побудовано phi-функції та вільні від радикалів квазі phi-функції. Побудовано математичну модель у вигляді NLP-моделі. Запропоновано ефективні методи та алгоритми для пошуку допустимих стартових точок і локально-оптимальних розв’язків.

Кожен еліпсоїд обертання E_i, $i \in I_N$, заданий розмірами півосей a_i, b_i і c_i, при цьому $c_i = b_i$. Нехай $E(u_i) = \{u_i \in \mathbb{R}^3 : u_i = v_i + M(\theta_i) \cdot u_i, \forall u_i \in E_i\}$, де $v_i = (x_i, y_i, z_i)$, $\theta_i = (\theta_i^1, \theta_i^2)$, θ_i^1, θ_i^2 – кути повороту Ейлера,

$$M(\theta_i) = \begin{pmatrix} \cos\theta_i^1 \cdot \cos\theta_i^2 & -\sin\theta_i^1 & -\cos\theta_i^1 \cdot \sin\theta_i^2 \\ \sin\theta_i^1 \cdot \cos\theta_i^2 & \cos\theta_i^1 & -\sin\theta_i^1 \cdot \sin\theta_i^2 \\ -\sin\theta_i^2 & 0 & \cos\theta_i^2 \end{pmatrix}.$$

Як контейнер у розділі розглянуто $\Omega \in \{\boldsymbol{B}, \mathbf{C}\}$.

Задача оптимальної упаковки еліпсоїдів 3DEP. Упакувати набір еліпсоїдів $\{E_i, i \in I_N\}$, у контейнері $\Omega \in \{\boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}\}$ мінімальних розмірів (відповідних метричних характеристик).

Ефективним засобом математичного моделювання відношень неорієнтованих phi-об'єктів є клас квазі phi-функцій.

Нехай еліпсоїди $E_i(u_i)$ та $E_j(u_j)$ задано у параметричному вигляді: $x_i = a_i \cos t_i$, $y_i = b_i \sin t_i \cos g_i$, $z_i = b_i \sin t_i \cos g_i$, $0 \le t_i \le 2\pi$, $0 \le g_i \le 2\pi$, а $x_j = a_j \cos t_j$, $y_j = b_j \sin t_j \cos g_j$, $z_j = b_j \sin t_j \cos g_j$, $0 \le t_j \le 2\pi$, $0 \le g_j \le 2\pi$.

Твердження 4.1. Квазі phi-функцією для E_i і E_j є функція вигляду

$$\Phi'^{E_i E_j}(u_i, u_j, u'_{ij}) = \min\{\chi(\theta_i, \theta_j, u'_{ij}), {\chi_1}^{+}(u_i, u_j, u'_{ij}), \tag{9}$$

$${\chi_1}^{-}(u_i, u_j, u'_{ij}), {\chi_2}^{+}(u_i, u_j, u'_{ij}), {\chi_2}^{-}(u_i, u_j, u'_{ij})\},$$

$$\chi = -\langle N'_1, N'_2 \rangle = -\alpha'_1\alpha'_2 - \beta'_1\beta'_2 - \gamma'_1\gamma'_2,\ \chi_k^{\pm} = \alpha'_i(x_{jk}^{\pm} - x_i) + \beta'_i(y_{jk}^{\pm} - y_i) +$$

$$+\gamma'_i(z_{jk}^{\pm} - z_i) - 1,\ \alpha_i = \frac{\cos t_i}{a_i}, \beta_i = \frac{\sin t_i \cos g_i}{b_i}, \gamma_i = \frac{\sin t_i \sin g_i}{b_i},$$

$$(\alpha'_i, \beta'_i, \gamma'_i) = M(\theta_i)(\alpha_i, \beta_i, \gamma_i),\ (x'_i, y'_i, z'_i) = v_i + M(\theta_i)\cdot(x_i^t, y_i^t, z_i^t),$$

$$(x_{j2}^{\pm}, y_{j2}^{\pm}, z_{j2}^{\pm}) = v_j + M(\theta_j)(a_j \cos t_j, b_j \sin t_j, \sqrt{2a_j})^T,$$

де $u'_{ij} = (t_i, g_i, t_j, g_j)$, $(x_{jk}^{+}, y_{jk}^{+}, z_{jk}^{+})$ – координати точки g_{jk}^{+}, $(x_{jk}^{-}, y_{jk}^{-}, z_{jk}^{-})$ – координати точки g_{jk}^{-} (рис. 1а).

Нехай $E(u)$ – еліпсоїд обертання зі змінними параметрами $u = (x, y, z, \theta_1, \theta_2)$ і розмірами півосей *a, b, c*=*b*. В роботі побудовано квазі phi-функцію та phi-функції для моделювання обмежень включення для різних видів контейнера Ω. Зокрема, розглянемо phi-функцію для $E(u)$ та $\boldsymbol{B}^* = \mathbb{R}^3 \setminus \operatorname{int} \boldsymbol{B}$ ($\Omega \equiv \boldsymbol{B}$).

Нехай l, w і h – розміри прямокутного паралелепіпеда $\boldsymbol{B}$; E_1 – еліпс розмірів $a_1 = \sqrt{b^2 + (a^2 - b^2)\sin^2(\theta_1)}$, $b_1 = b$, який є проекцією еліпсоїда $E(u)$ на площину Ω_1; E_2 – еліпс розмірів $a_2 = \sqrt{b^2 + (a^2 - b^2)\cos^2(\theta_1)}$, $b_2 = b$, який є проекцією еліпсоїда $E(u)$ на основу Ω_2 контейнера $\boldsymbol{B}$; $(x, y, \theta_1, \theta_2)$ – параметри розміщення еліпса E_2 (рис. 1б).

Твердження 4.2. Функція вигляду

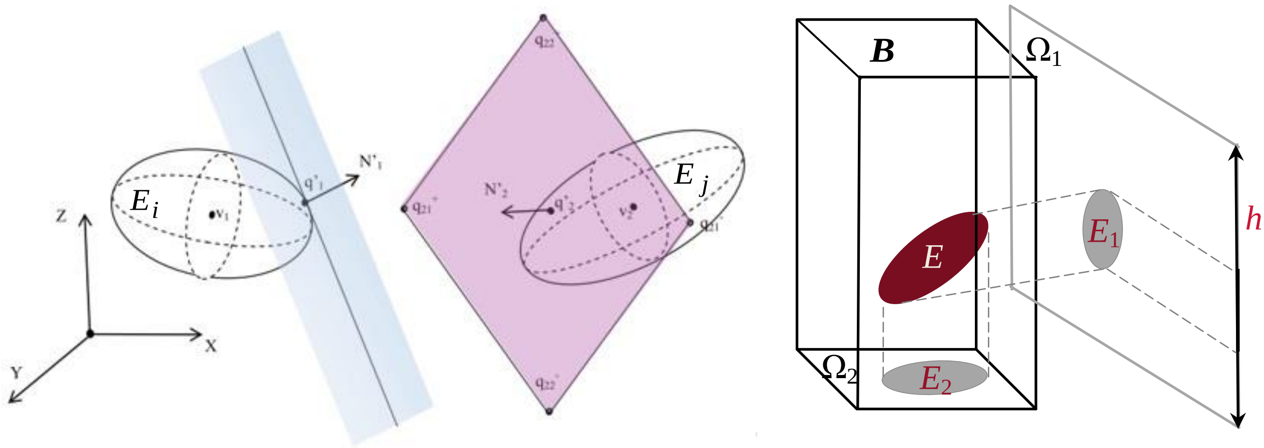
$$\Phi^{EB^*}(u) = \min\{\varphi_1(u), \varphi_2(u)\}, \tag{10}$$

$$\varphi_1(u) = \min\{z - a_1, h - z - a_1\},\ \varphi_2(u) = \min_{k=1,\dots,4} f_k(u),$$

$$f_1(u) = x - a^*,\ f_2(u) = y - b^*,\ f_3(u) = l - x - a^*,\ f_4(u) = w - y - b^*,$$

$$a^* = \sqrt{b_2^2 + (a_2^2 - b_2^2)\cos^2\theta_1},\ b^* = \sqrt{b_2^2 + (a_2^2 - b_2^2)\sin^2\theta_1},$$

є phi-функцією для еліпсоїда обертання $E(u)$ і об’єкта $\boldsymbol{B}^*$, де $\varphi_2(u)$ – phi-функція для еліпса E_2 і об’єкта $\Omega_2^* = \mathbb{R}^2 \setminus \operatorname{int}\Omega_2$.



а) б)

Рис. 1. Засоби аналітичного опису обмежень розміщення:
а) неперетину еліпсоїдів E_i і E_j; б) включення еліпсоїда E у контейнер $\boldsymbol{B}$

Математична модель задачі (1)–(2) для задачі 3DEP набуває вигляду

$$\min_{u \in W \subset \mathbb{R}^\sigma} F(u), \tag{11}$$

$$W = \{u \in \mathbb{R}^\sigma : \Phi'_{ij}(u_i, u_j, u'_{ij}) \geq 0,\ j > i \in I_N, \gamma_i(p, u_i, u'_i) \geq 0, i \in I_N, \zeta(u) \geq 0\}, \tag{12}$$

де $u = (p, u_1, \ldots, u_N, \tau)$, $u_i = (v_i, \theta_i)$, $v_i = (x_i, y_i, z_i)$, p – вектор змінних метричних характеристик контейнера $\Omega \in \{\boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}\}$; $\tau = \{u'_i, u'_{ij}, i < j \in I_N\}$ – вектор додаткових змінних для побудови квазі phi-функцій; $\Phi'_{ij}(u_i, u_j, u'_{ij})$ – квазі phi-функція (9) для еліпсоїдів E_i і E_j; $i < j \in I_N$, $\Upsilon_i(p, u_i, u'_i)$ – phi-функція або квазі phi-функція для опису умови $E_i \subset \Omega$; $F(u) = l \cdot w \cdot h$, $\sigma = 5N + 3 + |\tau|$, $|\tau| = 2N(N-1) + \eta$, $\eta = 0$ за умови, що $\Upsilon_i(p, u_i, u'_i)$ – phi-функція, $\eta = 6N$ за умови, що $\Upsilon_i(p, u_i, u'_i)$ – квазі phi-функція, якщо $\Omega \equiv \boldsymbol{B}$; $F(u) = \lambda$, $\sigma = 2N^2 + 2N + 1$, $|\tau| = 2N(N-1)$, якщо $\Omega \equiv \boldsymbol{C}$.

Для розв’язання задачі 3DEP запропоновано стратегію, що складається з таких етапів.

Етап 1. Генеруємо набір стартових точок з області допустимих розв’язків задачі (12)–(13).

Етап 2. Шукаємо локальний мінімум цільової функції $F(u)$ задачі (11)–(12), стартуючи з точок, отриманих на етапі 1, та застосовуючи метод (3DLOFRT) локальної оптимізації з перетворенням області допустимих розв’язків.

Етап 3. Обираємо кращий локально-оптимальний розв'язок з отриманих на етапі 2 як розв'язок задачі (11)–(12).

Важливою частиною алгоритму локальної оптимізації є процедура 3DLOFRT (Етап 2), яка дозволяє зменшити розмірність задачі й скоротити обчислювальні витрати.

Алгоритм побудови допустимих стартових точок для задачі 3DEP. Для побудови стартової точки $u^0 \in W$ розроблено такий алгоритм. Вважаємо, що коефіцієнти гомотетії $\lambda_i = \lambda$, $i \in I_N$, змінні, при цьому $0 \le \lambda \le 1$.

Алгоритм включає такі кроки:

1. Задаємо початкові розміри контейнера Ω^0 досить великими, щоб гарантувати розміщення всіх еліпсоїдів E_i, $i \in I_N$, в Ω^0.

2. Нехай $\lambda = \lambda^0 = \dfrac{\delta}{\max\limits_i a_i}$, де $\delta = 0.01(\min\limits_i b_i)$.

3. Генеруємо множину N куль радіуса δ, що не перетинаються, із випадково обраним центром $(x_i^0, y_i^0, z_i^0) \in \Omega^0$.

4. Генеруємо множину випадково обраних параметрів обертання $\theta_i^0 \in [0, 2\pi)$, $i \in I_N$.

5. Визначаємо стартові значення вектора додаткових змінних τ^0 для задачі (11)–(12) за фіксованих параметрів $(p^0, u_1^0, \ldots, u_N^0)$, розв'язуючи допоміжну задачу

$$\max \mu,\ s.t. (\mu, \tau) \in W_\mu, \tag{13}$$

$$W_\mu = \{(\mu, \tau) : \Phi'(\mu, \tau) \ge \mu\}, \tag{14}$$

де $\mu \in R^1$.

6. Стартуючи з точки $u^0 = (u_1^0, \ldots, u_N^0, \tau^0)$, де τ^0 отримано на попередньому кроці, за фіксованих значень p^0 розв'язуємо допоміжну задачу

$$\max_{u_\lambda \in W_\lambda} \lambda, \tag{15}$$

$$W_\lambda = \{u_\lambda \in \mathbb{R}^{\sigma - |p| + 1} : \Phi'_{ij}(u_i, u_j, u'_{ij}, \lambda) \ge 0, i < j \in I_N, \Phi_i(p^0, u_i) \ge 0, \\ i \in I_N, 0 \le \lambda \le 1\}, \tag{16}$$

де $u_\lambda = (u, \lambda)$ – вектор змінних, $u = (u_1, u_2, \ldots, u_N, \tau^0)$; λ – змінний коефіцієнт гомотетії еліпсоїдів, σ - розмірність задачі (11)–(12).

7. Генеруємо стартову точку $u^0 \in W$ для пошуку наступного локального мінімуму задачі (11)–(12), використовуючи точку глобального максимуму задачі (15)–(16).

Метод локальної оптимізації 3DLOFRT для задачі 3DEP. Нехай $u^{(0)} \in W$ – одна з стартових точок. Основна ідея методу 3DLOFRT полягає в такому. Навколо кожного еліпсоїда E_i опишемо сферу S_i радіуса a_i, $i \in I_N$. Для кожної сфери S_i будуємо «індивідуальний» кубічний контейнер $\Omega_i \supset S_i \supset E_i$ зі стороною $2(a_i+\varepsilon)$, так що об'єкти S_i, E_i і Ω_i мають центр у точці (x_i^0, y_i^0, z_i^0), а сторони Ω_i паралельні відповідним сторонам Ω.

На k-й ітерації оптимізаційної процедури із системи нерівностей, яка описує W, вилучаємо нерівності з квазі phi-функціями для всіх пар еліпсоїдів, індивідуальні контейнери яких не перетинаються. Водночас додаємо допоміжні нерівності, що описують умову включення куль S_i у відповідний індивідуальний контейнер Ω_i, $i \in I_N$, та отримуємо NLP-задачу вигляду

$$\min_{u_{w_k} \in W_k \subset \mathbb{R}^{\sigma-\sigma_k}} F(u_{w_k}), \tag{17}$$

$$W_k = \{u \in \mathbb{R}^{\sigma} : \Phi'^{k}_{ij}(u_i, u_j, \tau) \geq 0,\ (i, j) \in \Xi_{k1}, \tag{18}$$

$$\Phi_i^k(u_i, p) \geq 0, i \in \Xi_{k2}, \Phi^{S_i\Omega_{ki}^*}(u_i, p) \geq 0\},$$

$$\Xi_{k1} = \{(i, j) : \Phi^{\Omega_{ki}\Omega_{kj}}(u_i, u_j, \tau) < 0,\ j > i \in I_N\},$$

$$\Xi_{k2} = \{i : \Phi^{\Omega_{ki}\Omega^*}(u_i, p) < 0, i \in I_N\},$$

де $\Phi^{\Omega_{ki}\Omega_{kj}}(u_i, u_j, \tau)$ – phi-функція для індивідуальних контейнерів Ω_{ki} та Ω_{kj}, $\Phi^{\Omega_{ki}\Omega^*}(u_i, p)$ – phi-функція для об'єктів Ω_{ki} та Ω^*.

Точка локального мінімуму $u_{w_k}^*$, отримана на k-й ітерації, використовується під час побудови стартової точки $u_{w_{k+1}}$ на $k+1$ ітерації. Ітераційна процедура закінчується тоді, коли $F(u_{w_k}^*) = F(u_{w_{k+1}}^*)$. У роботі доведено, що точка $u^* = u^{(k)*} = (u_{w_k}^*, \tau_k) \in R^{\sigma}$ є точкою локального мінімуму задачі (11)–(12).

Метод 3DLOFRT дозволяє звести задачу (11)–(12) з $O(N^2)$ нерівностями і множиною розв'язків W розмірності $O(N^2)$ до послідовності NLP-задач з $O(N)$ нерівностями і множиною розв'язків W_k розмірності $O(N)$. Це приводить до скорочення обчислювальних ресурсів під час розв'язання задач нелінійного програмування.

У п'ятому розділі розглянуто задачу упаковки еліпсоїдів у довільний опуклий контейнер Λ, границя якого формується сферичними, циліндричними, еліптичними поверхнями та площинами. Між еліпсоїдами можуть бути задані обмеження на мінімально допустимі відстані. Для аналітичного опису основних обмежень розміщення побудовано phi-функції (псевдонормалізовані phi-функції) та квазі phi-функції (псевдонормалізовані квазі phi-функції). Побудовано математичну модель у вигляді NLP-моделі. Запропоновано ефективні методи та алгоритми для пошуку допустимих стартових точок і локально-оптимальних розв'язків.

Нехай $\Lambda = \Lambda(p)$ – опуклий контейнер із змінними метричними характеристиками p, $\Lambda = \{(x, y, z, p) \in R^3 : \Psi(x, y, z, p) \ge 0\}$ заданий у фіксованій системі координат OXYZ, де $\Psi(x, y, z, p) = \min\{\Psi_s(x, y, z, p), s = 1, \dots, n_\Lambda\}$, $\Psi_s(x, y, z, p) = 0$ – описує сферичну, циліндричну, еліптичну поверхню або площину. Зокрема, розглянуто такі типи контейнерів: прямокутний паралелепіпед $\mathbf{B}$, куля $\mathbf{S}$, циліндр $\mathbf{C}$, еліпсоїд $\mathbf{E}$, опуклий багатогранник $\mathbf{K}$.

Кожен еліпсоїд E_i, $i \in I_N$, заданий своїми півосями a_i, b_i, c_i та змінним вектором параметрів розміщення $u_i = (v_i, \theta_i)$ у власній системі координат, де $v_i = (x_i, y_i, z_i)$ – вектор трансляції; $M(\theta)$ – матриця обертання, що має вигляд

$$\begin{pmatrix} \cos\theta^1\cos\theta^3 - \sin\theta^1\cos\theta^2\sin\theta^3 & -\cos\theta^1\sin\theta^3 - \sin\theta^1\cos\theta^2\cos\theta^3 & \sin\theta^1\sin\theta^2 \\ \sin\theta^1\cos\theta^3 + \cos\theta^1\cos\theta^2\sin\theta^3 & -\sin\theta^1\sin\theta^3 + \cos\theta^1\cos\theta^2\cos\theta^3 & -\cos\theta^1\sin\theta^2 \\ \sin\theta^2\sin\theta^3 & \sin\theta^2\cos\theta^3 & \cos\theta^2 \end{pmatrix},$$

а $\theta_i = (\theta_i^1, \theta_i^2, \theta_i^3)$ – вектор параметрів обертання, де $\theta_i^1, \theta_i^2, \theta_i^3$ – кути Ейлера.

Задача оптимальної упаковки еліпсоїдів 3DAEP. Упакувати набір еліпсоїдів $\{E_i, i \in I_N\}$, у контейнері Λ мінімальних розмірів (відповідних метричних характеристик) з урахуванням допустимих відстаней між еліпсоїдами.

У даному розділі для опису обмежень розміщення $E_i(u_i) \subset \Lambda \Leftrightarrow \operatorname{int} E_i(u_i) \bigcap \Lambda^* = \varnothing$, $\Lambda^* = \mathbb{R}^3 \setminus \operatorname{int}\Lambda$, $\operatorname{int} E_i(u_i) \bigcap \operatorname{int} E_j(u_j) = \varnothing$ та $dist(E_i, E_j) \ge \rho$ пропонується підхід, пов'язаний з побудовою phi-функції для об'єкта, що апроксимує еліпсоїд з заданою точністю. Запропоновано два типи зовнішньої апроксимації: апроксимація еліпсоїда E_i опуклим багатогранником $\hat{E}_i(u_i)$, $E_i(u_i) \subset \hat{E}_i(u_i)$, заданим його вершинами p_j^i, $j = 1, \dots, m_i$, у власній системі координат еліпсоїда $E_i(u_i)$; апроксимація еліпсоїда $E_i(u_i)$ заданою кількістю куль $S_{ki}(u_i + u_i^k)$, $\widehat{E}_i(u_i) = \bigcup_{k=1}^{n_i} S_i^k\left(u_i + u_i^k\right)$, $E_i(u_i) \subset \widehat{E}_i(u_i)$. Кожна куля S_{ki} задана вектором трансляції v_{si} та радіусом r_i, значення яких фіксоване у власній системі координат еліпсоїда E_i.

Для аналітичного опису обмеження неперетину еліпсоїдів E_i і E_j у рамках розділу використовується:

– або квазі phi-функція (9) для еліпсоїдів E_i і E_j;

– або phi-функція для об'єктів $\widehat{E}_i$ та $\widehat{E}_j$, що має вигляд

$$\Phi^{\widehat{E}_i \widehat{E}_j}(u_i, u_j) = \min\{\Phi_{ij}^{qs}(u_i, u_j), q = 1, \dots, n_i, s = 1, \dots, n_j, i < j \in I_N\}, \qquad (19)$$

де $\Phi_{ij}^{qs}(u_i, u_j)$ – phi-функція для опису обмежень неперетину куль S_{qi} та S_{sj};

– або квазі phi-функція для об'єктів $\hat{E}_i$ та $\hat{E}_j$ вигляду

$$\Phi'^{\hat{E}_i \hat{E}_j}(u_i, u_j, u'_{ij}) = \min\{\Phi^{\hat{E}_i P}(u_i, u'_{ij}), \Phi^{\hat{E}_j P^*}(u_j, u'_{ij}), i < j \in I_N\}, \qquad (20)$$

де $\Phi^{\hat{E}_i P}(u_i, u'_{ij})$ – phi-функція для об'єктів $\hat{E}_i$ та $P(u'_{ij})$, $\Phi^{\hat{E}_j P^*}(u_j, u'_{ij})$ – phi-функція для об'єктів $\hat{E}_i$ та $P^*(u'_{ij})$, $P^*(u'_{ij}) = \mathbb{R}^3 \setminus \operatorname{int} P(u'_{ij})$, $P(u'_{ij})$ – напівплощина зі змінними метричними характеристиками u'_{ij}.

Для аналітичного опису обмежень $dist(E_i, E_j) \geq \rho$ використовується або псевдонормалізована phi-функція для об'єктів $\widehat{E}_i$ та $\widehat{E}_j$

$$\Phi^{\widehat{E}_i \widehat{E}_j}(u_i, u_j) = \min\{\Phi_{ij}^{k}(u_i, u_j) - \rho, i < j \in I_N\}, \qquad (21)$$

де $\Phi_{ij}^{k}(u_i, u_j)$ – нормалізована phi-функція для S_{qi} та S_{sj};

або псевдонормалізована квазі phi-функція для об'єктів $\hat{E}_i$ та $\hat{E}_j$

$$\widehat{\Phi}'^{\hat{E}_i \hat{E}_j}(u_i, u_j, u'_{ij}) = \Phi'^{\hat{E}_i \hat{E}_j}(u_i, u_j, u'_{ij}) - 0.5\rho, \qquad (22)$$

де $\Phi'^{\hat{E}_i \hat{E}_j}(u_i, u_j, u'_{ij})$ – квазі phi-функція для об'єктів $\hat{E}_i$ та $\hat{E}_j$.

Математична модель задачі (1)-(2) для задачі 3DAEP набуває вигляду:

$$\min_{u \in W \subset \mathbb{R}^{\sigma}} F(u), \qquad (23)$$

$$W = \{u \in \mathbb{R}^{\sigma} : \Upsilon_{ij}(u_i, u_j, u'_{ij}) \geq 0, i < j \in I_N, \Phi_i(p, u_i) \geq 0, i \in I_N, \zeta(u) \geq 0,\}, \quad (24)$$

де $u = (p, u_1, ..., u_N, \tau)$, $u_i = (v_i, \theta_i)$, $v_i = (x_i, y_i, z_i)$, p – вектор змінних метричних характеристик контейнера Λ; $\tau = \{u'_{ij}, i < j \in I_N\}$ – вектор додаткових змінних для побудови квазі phi-функцій; $F(u)$ – об'єм, коефіцієнт гомотетії або одна з метричних характеристик контейнера Λ; $\Upsilon_{ij}(u_i, u_j, u'_{ij})$ – phi-функція або квазі phi-функція, що використовується для забезпечення виконання обмежень неперетину еліпсоїдів E_i та E_j ((9), (19)–(22)); $\Phi_i(p, u_i)$ – phi-функція для еліпсоїда E_i (або об'єкта $\hat{E}_i(\widehat{E}_i)$) і об'єкта Λ^*, яка використовується для моделювання обмежень $E_i \subset \Lambda \Leftrightarrow \operatorname{int} E_i \cap \Lambda = \varnothing$, $i \in I_N$, $\sigma = |p| + 6N + |\tau|$, $|\tau|$ залежить від виду функції $\Upsilon_{ij}(u_i, u_j, u'_{ij})$.

В основі методу розв'язання задачі 3DAEP лежить стратегія мультистарту, яка включає такі етапи:

Етап 1. Генеруємо множину векторів $\varsigma^0 = (p^0, u_1^0, ..., u_N^0)$ допустимих параметрів розміщення $(u_1^0, ..., u_N^0)$ та змінних p^0.

Етап 2. Стартуючи з кожної точки, отриманої на етапі 1, виконуємо пошук локальних екстремумів задачі (23)–(24).

Етап 3. Як розв'язок задачі (20)–(21) обираємо найкращий локальний екстремум з отриманих на етапі 2.

Алгоритм пошуку допустимих стартових точок. Алгоритм складається з таких кроків.

Крок 1. Обираємо достатньо великі стартові розміри контейнера $\Lambda^0 = \Lambda(p^0)$.

Крок 2. Генеруємо у контейнері Λ^0 набір з n випадково обраних центрів (x_i^0, y_i^0, z_i^0) куль S_i.

Крок 3. Збільшуємо кулі S_i радіуса βr_i, $i \in I_N$, починаючи з $\beta = 0$ до повного розміру ($\beta = 1$), центри S_i та коефіцієнт гомотетії β є змінними, $0 \le \beta \le 1$. Щоб здійснити цей крок, зафіксуємо $p = p^0$ та, почавши з точки $v^0 = (x_1^0, y_1^0, z_1^0, \ldots, x_N^0, y_N^0, z_N^0, \beta^0 = 0)$, розв'язуємо таку NLP задачу:

$$\max_{v \in W_\beta} \beta, \tag{25}$$

$$W_\beta = \{v \in \mathbb{R}^{3N+1} : \Phi^{S_i S_j}(v_i, v_j, \beta) \ge 0, \Phi^{S_i \Lambda^*}(v_i, \beta) \ge 0, \, j > i \in I_N, 1 - \beta \ge 0, \beta \ge 0\}, \tag{26}$$

де $v = (x_1, y_1, z_1, \ldots, x_N, y_N, z_N, \beta)$, $\Phi^{S_i \Lambda^*}(v_i, \beta)$ – phi-функція для кулі S_i радіуса βr_i та об'єкта $\Lambda^* = \mathbb{R}^3 \setminus \operatorname{int} \Lambda$. Отримуємо точку глобального максимуму задачі (25)–(26) $v^* = (x_1^*, y_1^*, z_1^*, \ldots, x_N^*, y_N^*, z_N^*, \beta^* = 1)$. Зазначимо, що глобальний розв'язок задачі (25)–(26) завжди може бути знайдений (за умови вибору достатньо великих початкових розмірів p^0 контейнера на першому кроці).

Крок 4. Формуємо вектор допустимих параметрів $\varsigma^0 = (p^0, u_1^0, \ldots, \ldots, u_N^0)$, припускаючи $u_i^0 = (x_i^0, y_i^0, z_i^0, \theta_i^0)$, $(x_i^0, y_i^0, z_i^0) = (x_i^*, y_i^*, z_i^*)$, де θ_i^0 – вектор згенерованих випадково параметрів обертання еліпсоїдів E_i, $i \in I_N$.

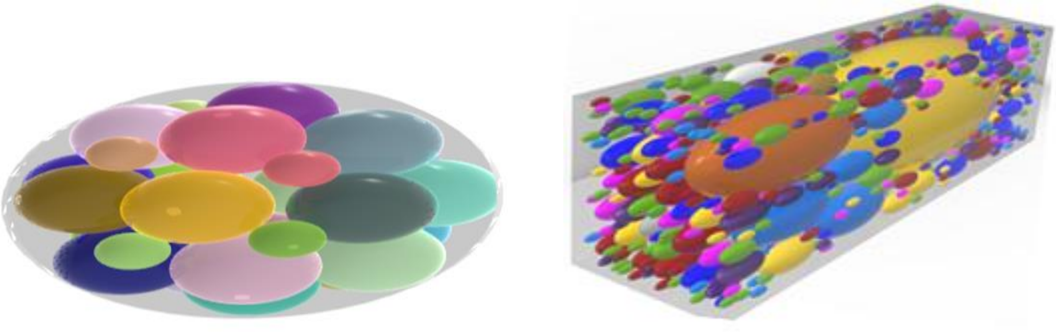
Крок 5. Для пошуку локального мінімуму задачі (23)–(24) будуємо стартову точку $u^0 = (\varsigma^0, \tau^0)$.

Метод 3DLOFRT для задачі 3DAEP дозволяє звести задачу (23)–(24) з великою кількістю нерівностей та розмірністю $O(N^2)$ області допустимих розв'язків W (24), до послідовності підзадач нелінійного програмування, що мають меншу кількість нелінійних нерівностей і меншу розмірність $O(N)$.

У шостому розділі наведено результати обчислювальних експериментів, виконаних за допомогою програмного забезпечення, побудованого із застосуванням розроблених у роботі засобів математичного моделювання, моделей, методів та алгоритмів. Експерименти проводилися на комп'ютері Intel

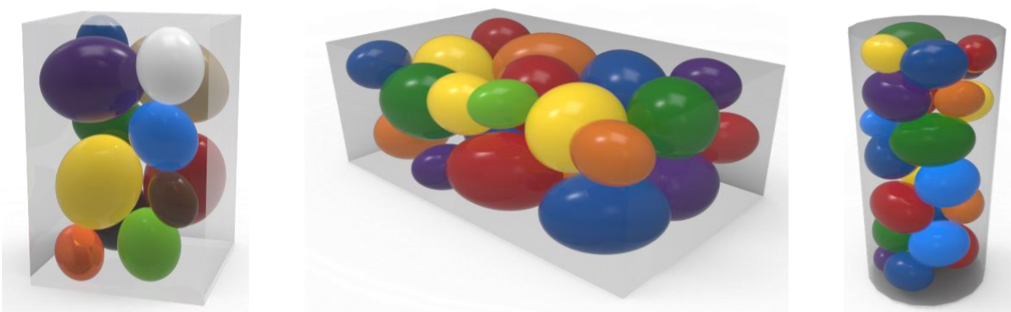
(R) Core (TM) i7-3630QM. Для пошуку локальних мінімумів задачі 3DHEP застосовулась функція FindArgMin пакета Wolfram Mathematica 9. Пошук локальних-оптимальних та допустимих розв’язків задач 3DEP та 3DFEP здійснювався за допомогою IPOPT (https://projects.coin-or.org/Ipopt), що доступний у відкритому некомерційному програмному репозиторії.

Приклади локально-оптимальних розміщень N еліпсоїдів для основних реалізацій базової задачі упаковки у різні контейнери наведені на рисунках 2 – 4.



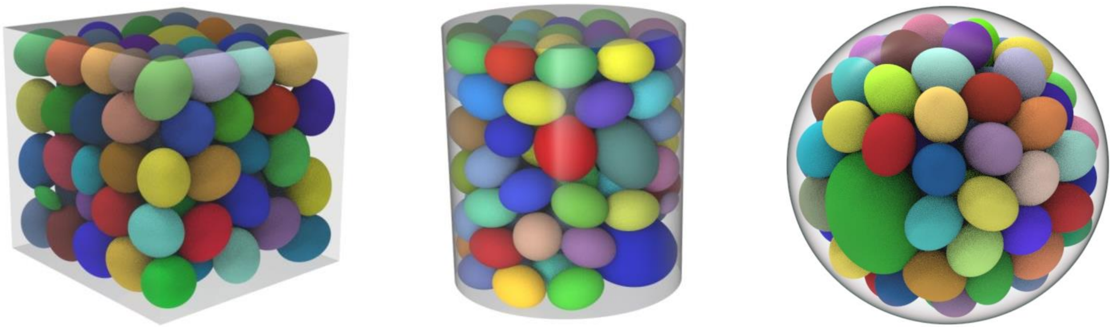
а) б)

Рис. 2. Локально-оптимальне розміщення N еліпсоїдів для задачі 3DHEP:
а) $N=30$ у еліпсоїді з мінімальним коефіцієнтом гомотетії;
б) $N=640$ у прямокутному паралелепіпеді мінімального об’єму



а) б) в)

Рис. 3. Локально-оптимальне розміщення N еліпсоїдів для задачі 3DEP:
а) $N=12$ у прямокутному паралелепіпеді мінімального об’єму; б) $N=20$ у прямокутному паралелепіпеді мінімального об’єму; в) $N=30$ у круговому циліндрі з мінімальним коефіцієнтом гомотетії



а) б) в)

Рис. 4. Локально-оптимальне розміщення 100 еліпсоїдів для задачі 3DAEP:
а) у прямокутному паралелепіпеді мінімального об’єму; б) у круговому циліндрі з мінімальним коефіцієнтом гомотетії; в) у кулі мінімального радіуса

Наведено результати порівнянь часу розв'язання задачі з використанням методу 3DLOFRT і без її використання та часу розв'язання для різних реалізацій базової задачі, що підтверджують ефективність розроблених методів.

Опис програми та вихідні дані (точки локальних екстремумів) для обчислювальних експериментів наведено у додатках.

ВИСНОВКИ

У дисертації досліджено задачу оптимальної упаковки еліпсоїдів, що має багато прикладних та наукових застосувань, на підставі отриманих нових фундаментальних, теоретично обґрунтованих результатів, включаючи створення конструктивних засобів математичного моделювання, побудову нових математичних моделей, розробку ефективних методів розв'язання.

Основні наукові результати дисертації:

1) Розроблено засоби математичного моделювання обмежень розміщення еліпсоїдів:

✓ вперше побудовано засоби математичного моделювання для задач упаковки еліпсоїдів у вигляді нових класів phi-функцій (псевдонормалізованих phi-функцій) та квазі phi-функцій (псевдонормалізованих квазі phi-функцій), які дозволяють у аналітичному вигляді описати відносини неперетину еліпсоїдів, обмежень на мінімально допустимі відстані, включення еліпсоїдів у контейнер, з урахуванням орієнтації еліпсоїдів, особливостей їх метричних характеристик і форми контейнера;

✓ вперше побудовано математичні моделі базової задачі оптимальної упаковки еліпсоїдів (3DBEP) і її основних реалізацій 3DHEP, 3DEP, 3DAEP у вигляді задач нелінійного програмування, залежно від виду контейнера (границя якого формується сферичними, циліндричними, еліптичними поверхнями та площинами, зокрема, прямокутний паралелепіпед, опуклий багатогранник, куля, еліпсоїд, циліндр), особливостей метричних характеристик (гомотетичні, еліпсоїди обертання, довільні) і вимог до орієнтації еліпсоїдів (однаково орієнтовані, допускаються неперервні обертання), обмежень на допустимі відстані між еліпсоїдами;

✓ набули подальшого розвитку методи розв'язання задач геометричного проектування для упаковки еліпсоїдів з використанням нелінійного програмування і негладкої оптимізації, які, на відміну від існуючих евристичних підходів, дозволяють отримувати локально-оптимальні розв'язки для основних реалізацій базової задачі оптимальної упаковки еліпсоїдів, в тому числі: алгоритми генерації стартових точок з області допустимих розв'язків задач 3DHEP, 3DEP, 3DAEP; методи пошуку допустимих і локально-оптимальних розв'язків задач 3DHEP, 3DEP, 3DAEP, які мають оцінку, що є лінійною по відношенню до кількості еліпсоїдів;

✓ створено програмне забезпечення для розв'язання основних реалізацій (3DHEP, 3DEP, 3DAEP) базової задачі оптимальної упаковки еліпсоїдів.

Достовірність результатів, отриманих в дисертаційній роботі, підтверджується коректністю постановки задачі, доведеннями відповідних тверджень, застосуванням конструктивних засобів математичного моделювання, надійних методів нелінійної і негладкої оптимізації та NLP-solvers, а також результатами обчислювальних експериментів для задач 3DHEP, 3DEP та 3DAEP у різних контейнерах.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Pankratov A., Romanova T., Khlud O. Quasi-phi-functions in packing of ellipsoids. *Radioelectronics & Informatics*. 2015. No.1 (68). P. 37–41.

2. Хлуд О. М.,Суббота И. А., Романова Т. Е. Математическая модель и метод решения задачи упаковки гомотетических одинаково ориентированных эллипсоидов. *Радиоэлектроника и информатика*. 2015. № 3. С. 14–20.

3. Pankratov A., Romanova T., Khlud O. Packing of approximated ellipsoids. *Control, navigation and communication systems*. 2016. No.3(39). P. 62–66.

4. Хлуд О. М., Романова Т.Е., Стецюк П. И. О двух задачах оптимальной упаковки гомотетических эллипсоидов. *Бионика интеллекта*. 2017. №1(88). С.29–35.

5. Khlud O. M., Yaskov G. N. Packing homothetic spheroids into a larger spheroid with the jump algorithm. *Control, navigation and communication systems*. 2017. No.6(46). P.131–135.

6. Pankratova Yu. Ye., Khlud O. M., Patsuk V. M. Packing of ellipsoids in a convex container. *Control, navigation and communication systems*. 2018. No. No.1(47). P.80–83.

7. Khlud O., Pankratov O., Romanova T. Development of the mathematical model and the method to solve a problem on the optimization of packing the ellipsoids into a convex container. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2018. No.4(94). P. 51–58.

8. Субота І. О., Яськов Г. М., Хлуд О. М. Задача оптимальної упаковки гомотетичних орієнтованих еліпсоїдів. *Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики*: тези доп. XXI Всеукр. наук. конф. Львів. 2015. С. 302–303.

9. Pankratov A., Romanova T, Khlud O. Quasi-phi-functions of ellipsoids. *Математичне та програмне забезпечення інтелектуальних систем:* тези доп. XIII міжнар. наук.-практ. конф. Дніпро. 2015. С. 164–165.

10. Хлуд О. М. Математическая модель задачи упаковки эллипсоидов с использованием квази-phi-функций. *Современные проблемы машиностроения*: тез. докл. конф. молодых ученых и специалистов. Харьков: Ин-т проблем машиностроения им. А. Н. Подгорного НАН Украины, 2015. С.19.

11. Романова Т. Е., Стецюк П. И., Хлуд О. М. Задача упаковки гомотетичных эллипсоидов. *Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии:* тез. докл. 5-ой междунар. науч. конф. Кишинев, Молдова. 2016. Т.2. С. 373–377.

12. Pankratov A., Romanova T, Khlud O. Packing of approximated ellipsoids

into a cuboid of minimal volume. *Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии*: тез. докл. 5-ой междунар. науч. конф. Кишинев, Молдова. 2016. Т.2. С. 274–278.

13. Хлуд О. М., Старосельский Е. Е. Метод решения задачи оптимальной упаковки гомотетичных одинаково ориентированных эллипсоидов. *Радиоэлектроника и молодежь в XXI веке*: тез. докл. XX юбилейного междунар. молодеж. форума. Харьков: Харьк. нац. ун-т радиоэлектроники, 2016. Т. 7. С. 128–129.

14. Панкратов А. В., Романова Т. Е., Хлуд О. М. Упаковка эллипсоидов и нелинейная оптимизация. *Информационные системы и технологии ИСТ-2016*: тез. докл. 5-ой междунар. науч.-техн. конф. Харьков – Коблево. 2016. Т. 5. С. 128–129.

15. Хлуд О. М. Математические модели и методы решения задачи упаковки эллипсоидов. *Современные проблемы машиностроения*: тез. докл. конф. молодых ученых и специалистов. Харьков: Ин-т проблем машиностроения им. А. Н. Подгорного НАН Украины, 2016. С.34.

16. Хлуд О. М., Омельяненко С. С. Математическое и компьютерное моделирование в задаче оптимальной упаковки эллипсоидов. *Радиоэлектроника и молодежь в XXI веке:* тез. докл. XX юбилейного междунар. молодеж. форума Харьков: Харьк. нац. ун-т радиоэлектроники, 2017. Т. 7. С. 112–113.

17. Pankratov A., Romanova T., Khlud O. Optimal packing of ellipsoids. *Problem of decision making under uncertainties:* тез. докл. XXX международной конференции, Вильнюс, Литва. 2017. С. 71.

18. Romanova T., Pankratov A., Khlud O. Optimal packing of ellipses and ellipsoids. *The 14th ESICUP Meeting*: тез. докл. 14-ой международной конференции, Льеж, Бельгия. 2017. С. 24.

19. Gil N., Pankratov A., Romanova T., Khlud O., Patsuk V. The optimization problem of packing ellipsoids into a convex container. *7th international conference on application of information and communication technology and statistics in economy and education (ICAICTSEE 2017):* тез. докл. 7-ой международной конференции. – София, Болгария. 2017. С. 23.

20. Хлуд О. М. Математические модели и методы решения задачи оптимальной упаковки эллипсоидов. *Современные проблемы машиностроения*: Тез. докл. конф. молодых ученых и специалистов. Харьков: Ин-т проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного НАН Украины, 2018. С.19.

21. Хлуд О. М., Старосельский Є. Є. Математична модель та метод розв’язання задачі оптимальної упаковки гомотетичних еліпсоїдів. *Радиоэлектроника и молодежь в XXI веке*: тез. докл. XXII междунар. молодеж. форума. Харьков Харьк. нац. ун-т радиоэлектроники, 2018. Т. 7. С. 102–103.

22. Pankratov A., Romanova T., Khlud O. Packing of ellipsoids in a cylindrical container of minimum volume. *Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии:* 6.-я междунар. науч. конф. Кишинев, Молдова. 2018. С.161–163.

АНОТАЦІЯ

Хлуд О. М. Задача оптимальної упаковки еліпсоїдів: математичні моделі та методи розв'язання. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи. – Інститут проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного Національної академії наук України, м. Харків, 2018.

У роботі досліджено задачу оптимальної упаковки заданого набору еліпсоїдів у опуклому контейнері мінімальних розмірів (відповідних метричних характеристик). Еліпсоїди допускають неперервні трансляції та обертання. Як контейнер розглянуто довільну опуклу область, границя якої формується сферичними, циліндричними, еліптичними поверхнями та площинами.

Сформульовано базову задачу оптимальної упаковки еліпсоїдів (3DBEP). Залежно від виду цільової функції (об'єм, коефіцієнт гомотетії, одна з метричних характеристик контейнера), форми контейнера (прямокутний паралелепіпед, циліндр, куля, еліпсоїд або опуклий багатогранник), особливостей метричних характеристик еліпсоїдів (гомотетичні, еліпсоїд обертання, довільні), обмежень на орієнтацію еліпсоїдів (однаково орієнтовані, допускаються неперервні обертання) та мінімально допустимі відстані, виділено три реалізації базової задачі оптимальної упаковки еліпсоїдів: *3DHEP (Homothetic Ellipsoid Packing)* – упаковка однаково орієнтованих гомотетичних еліпсоїдів в контейнер (прямокутний паралелепіпед, еліпсоїд); *3DEP (Ellipsoid Packing)* – упаковка неорієнтованих еліпсоїдів обертання (сфероїдів) в контейнер (прямокутний паралелепіпед, циліндр); *3DAEP (Approximated Ellipsoid Packing)* – упаковка неорієнтованих еліпсоїдів у довільний опуклий контейнер із урахуванням мінімально допустимих відстаней. Для аналітичного опису відношень неперетину, включення та мінімально допустимих відстаней побудовано phi-функції, квазі phi-функції, псевдонормалізовані phi-функції та псевдонормалізовані квазі phi-функції. Використовуючи відповідні засоби моделювання, побудовано математичні моделі базової задачі та її реалізацій у вигляді задач нелінійного програмування.

Розроблено стратегію розв'язання базової задачі *3DBEP* та її основних реалізацій, в основі якої лежить метод мультистарту. Для кожної реалізації запропоновано методи побудови стартових точок з області допустимих розв'язків та методи пошуку локальних екстремумів, які зводять задачу великої розмірності з великою кількістю нелінійних нерівностей до послідовності підзадач нелінійного програмування з меншою розмірністю та меншою кількістю нелінійних нерівностей.

Наведено результати обчислювальних експериментів для основних реалізацій базової задачі упаковки еліпсоїдів у різних контейнерах. Проведено аналіз результатів, що підтверджує ефективність розроблених методів та алгоритмів.

Отримані результати можуть бути застосовані при комп'ютерному моделюванні структури рідин, кристалів і скла, руху і пресування сипучих

речовин, у термодинаміці, в сучасній біології, у ядерній медицині, в адитивних технологіях (3D printing), у робототехніці.

Ключові слова: упаковка, еліпсоїди, опуклий контейнер, метод phi-функцій, математична модель, нелінійна оптимізація.

АННОТАЦИЯ

Хлуд О. М. Задача оптимальной упаковки эллипсоидов: математические модели и методы решения. – На правах рукописи.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 01.05.02 – математическое моделирование и вычислительные методы. – Институт проблем машиностроения им. А. Н. Подгорного Национальной академии наук Украины, г. Харьков, 2018.

В работе исследуется задача оптимальной упаковки заданного набора эллипсоидов в выпуклый контейнер минимальных размеров (соответствующих метрических характеристик). Эллипсоиды допускают непрерывные вращения и трансляции. В качестве контейнера рассматривается произвольная выпуклая область, граница которой формируется сферическими, цилиндрическими, эллиптическими поверхностями и плоскостями.

Сформулирована базовая задача оптимальной упаковки эллипсоидов (3DBEP). В зависимости от вида функции цели (объем, коэффициент гомотетии, одна из метрических характеристик контейнера), формы контейнера (прямоугольный параллелепипед, цилиндр, шар, эллипсоид или выпуклый многогранник), особенностей метрических характеристик эллипсоидов (гомотетичные, эллипсоиды вращения, произвольные), ограничений на ориентацию эллипсоидов (одинаково ориентированные, допускают непрерывные вращения) и минимально допустимые расстояния, выделено три реализации базовой задачи упаковки эллипсоидов: 3DHEP (Homothetic Ellipsoid Packing) – упаковка одинаково ориентированных гомотетичных эллипсоидов в контейнер (прямоугольный параллелепипед, эллипсоид); 3DEP (Ellipsoid Packing) – упаковка неориентированных эллипсоидов вращения (сфероидов) в контейнер (прямоугольный параллелепипед, цилиндр); 3DAEP (Approximated Ellipsoid Packing) – упаковка неориентированных эллипсоидов в произвольный выпуклый контейнер с учетом минимально допустимых расстояний. Для аналитического описания отношений непересечения, включения и минимально допустимых расстояний построены квази phi-функции, phi-функции и псевдонормализованные phi-функции и псевдонормализованные квази phi-функции. Используя разработанные средства моделирования, построены математические модели базовой задачи и ее основных реализаций в виде задач нелинейного программирования.

Разработана стратегия решения задачи 3DBEP, основанная на методе мультистарта. Для каждой реализации задачи 3DBEP предложены методы построения стартовых точек из области допустимых решений и методы поиска локальных экстремумов, которые сводят задачу большой размерности с большим числом нелинейных неравенств к последовательности подзадач

нелинейного программирования меньшей размерности с меньшим числом нелинейных неравенств.

Приведены результаты численных экспериментов для основных реализаций базовой задачи упаковки эллипсоида в разных контейнерах. Проведен анализ результатов, подтверждающий эффективность предложенных методов и алгоритмов.

Полученные результаты могут быть использованы при компьютерном моделировании структуры жидкостей, кристаллов и стекла, движения и прессования сыпучих веществ, в термодинамике, с современной биологии, в ядерной медицине, в аддитивных технологиях (3D printing), в робототехнике.

Ключевые слова: упаковка, эллипсоиды, выпуклый контейнер, метод phi-функций, математическая модель, нелинейная оптимизация.

ABSTRACT

Khlud O.M. Optimal ellipsoid packing problem: mathematical models and solution methods. – On the rights of the manuscript.

A Thesis for a Candidate of Technical Sciences degree in the speciality 01.05.02 – mathematical modeling and computational methods. – A. M. Pidgorny Institute for Mechanical Engineering Problems of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkiv, 2018.

The thesis considers the problem of optimal packing of the predefined set of ellipsoids into a convex container of minimum sizes (appropriate metrical characteristic). The ellipsoids can be free rotated and translated. The container can be an arbitrary convex domain, which frontier is formed by cylindrical, elliptical, spherical surfaces and planes.

The basic ellipsoid packing problem (3DBEP) is stated. Three realizations of the basic ellipsoid packing problem are formulated depending on the objective function type (a volume, coefficient of homothety, one of the metrical characteristics of a container), the container shape (a cuboid, cylinder, sphere, ellipsoid or convex polytope), the features of metrical characteristics of ellipsoids (homothetic, spheroids, arbitrary), the restrictions on the orientation of ellipsoids (equally oriented, continuously rotated), minimum allowable distances: 3DHEP (Homothetic Ellipsoid Packing) – packing of equally oriented homotetic ellipsoids into a container (a cuboid, ellipsoid); 3DEP (Ellipsoid Packing) – packing of ellipsoids of revolution (spheroids) into a container (a cuboid, cylinder); 3DAEP (Approximated Ellipsoid Packing) – packing of ellipsoids into an arbitrary container taking into account the minimum allowable distances. For analytical description of the non-overlapping and containment constraints taking into account minimum allowable distances quasi phi-functions, phi-functions, adjusted phi-functions and adjusted quasi phi-functions are constructed. Mathematical models of the basic ellipsoid packing problem and it`s realizations are provided in the form of NLP-problems, using the developed geometric tools.

Based on the multistart method, a solution strategy for the basic ellipsoid packing problem is developed. The methods for generating feasible starting points and searching for local minima are introduced for each realization of the problem 3DBEP. The local optimization method reduces NLP-problem of a large dimension with a large

number of nonlinear inequalities to a sequence of nonlinear programming sub-problems of a smaller dimension with a fewer non-linear inequalities.

The numerical experiments for the realizations of the basic ellipsoid packing problem in different container are given. The analysis of the results shows the effectiveness of the developed methods and algorithms.

The results can be used in the computer simulation of the structure of liquids, crystals, the flow and compression of granular materials, in the thermodynamics, biological sciences, nuclear medicine, free support additive technologies (3D printing), as well as, in a robotic problem.

Keywords: packing, ellipsoids, convex container, phi-function technique, mathematical model, nonlinear optimization.

Надруковано у копі-центрі «МОДЕЛІСТ»
(ФО-П Миронов М.В.,Свідоцтво ВО4№022953)
М. Харків, вул. Мистецтв, 3 літер Б-1
Тел. 7-170-354
www.modelist.in.ua