

УПАКОВКА НЕРАВНЫХ ШАРОВ В РАЗЛИЧНЫЕ КОНТЕЙНЕРЫ

Аннотация. Рассматривается оптимизационная задача упаковки разных шаров в контейнеры типа кубоид, шар, прямой круговой цилиндр, кольцевой цилиндр и сферический слой. Предполагается, что радиусы шаров переменные. Это позволяет предложить новый способ получения начальных точек, принадлежащих области допустимых решений задачи, а также осуществлять перебор локальных экстремумов, используя модификацию алгоритма JA (jump-алгоритм), который реализует плавный переход от одного локального минимума к другому с лучшим значением функции цели. Уменьшение размерности задачи и попарные перестановки шаров позволяют улучшить значение функции цели. Полученные результаты сравниваются с лучшими известными.

Ключевые слова: упаковка, упаковка шаров, невыпуклая задача оптимизации, jump-алгоритм.

ВВЕДЕНИЕ

Задачи упаковки шаров играют важную роль в различных отраслях [1]. Упаковка неравных шаров используется в радиохирургии [2]. Гамма-лучи фокусируются на общий центр, создавая шарообразный объем высокой дозы радиации. Ключевая задача в лечении гамма-ножами — как разместить шары в опухоли произвольной пространственной формы.

В работе [2] Sutoi и Day предлагают подход к глобальной оптимизации упаковки неравных шаров. Оптимизационная задача формулируется как невыпуклая оптимизационная задача с квадратичными ограничениями и линейной функцией цели. В статье [3] предлагается математический метод оптимизации упаковки неравных шаров в кубоид, основанный на методе сужающихся окрестностей и методе локальной оптимизации. Модели для 2D и 3D задач упаковки, использующие дважды дифференцируемые функции, включая упаковку шаров различного радиуса, представлены в [4]. Kubach и др. [5, 6] адаптируют параллельные жадные алгоритмы, предложенные в работе [7], к трехмерному случаю с некоторыми важными усовершенствованиями (метод B1.6_3DSPP) и создают внушительную базу тестовых контрольных задач. Выбирается компромисс между качеством получаемых результатов и временем решения. Hifi и Yousef [8] предлагают улучшение широколучевого поиска, основанного на жадных алгоритмах, с помощью управления нижними границами и применения стратегии хилл-клаймбинг (hill-climbing) и получают при этом хорошие результаты. В статье [9] разрабатывается гибридный алгоритм ELPGD для упаковки неравных кругов и шаров в больший круговой (сферический) контейнер. Этот алгоритм основан на улучшенном методе (energy landscape paving method) с процедурой градиентного спуска. В статье [10] разработан алгоритм упаковки неравных шаров в большем шаре, в котором используется поиск с запретами (tabu search), стратегия quasi-human basin-hopping и метод Брайдена–Флетчера–Гольдфарба–Шанно. В работе [11] Hifi и M’Hallah делают обзор ряда эффективных моделей и методов для упаковки кругов и шаров.

В настоящей статье jump-алгоритм (JA), разработанный для упаковки неравных кругов [12], адаптируется для упаковки неравных шаров. Алгоритм JA позволяет перейти от одной точки локального минимума к другой так, что переменный размер контейнера не возрастает.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим следующую задачу.

Шары

$$S_i(v_i) = \{v = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : (x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2 - \hat{r}_i^2 \leq 0\},$$

$$i \in I = \{1, 2, \dots, n\},$$

где $v_i = (x_i, y_i, z_i)$ — координаты центра шара S_i , необходимо упаковать в контейнер P , который может иметь одну из следующих форм: кубоид $P_B = \{v \in \mathbb{R}^3 : 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, 0 \leq z \leq h\}$, где $a/2 \geq \max\{\hat{r}_i : i \in I\}$, $b/2 \geq \max\{\hat{r}_i : i \in I\}$; шар $P_S = \{v \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 + z^2 - R^2 \leq 0\}$; цилиндр $P_C = \{v \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 - R^2 \leq 0, 0 \leq z \leq h\}$, где $R \geq \max\{\hat{r}_i : i \in I\}$ и $h/2 \geq \max\{\hat{r}_i : i \in I\}$; кольцевой цилиндр $P_{CC} = \{v \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 - R^2 \leq 0, -x^2 - y^2 + \rho^2 \leq 0, R > \rho, 0 \leq z \leq h\}$, где $R - \rho \geq \max\{\hat{r}_i : i \in I\}$, и шаровой слой $P_{SS} = \{v \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 + z^2 - R^2 \leq 0, -x^2 - y^2 - z^2 + \rho^2 \leq 0, R > \rho\}$.

Полагаем, что высота h кубоида P_B и радиус R шара P_S , кольцевого цилиндра P_{CC} и шарового слоя P_{SS} — переменные. Высота h или радиус R являются переменными для P_C . Для удобства считаем, что $h = \mu$ ($R = \mu$).

Шар S_i , транслированный на вектор v_i , и контейнер P с переменным размером μ обозначим $S_i(v_i)$ и $P(\mu)$ соответственно. Вектор $v = (v_1, v_2, \dots, v_n) \in \mathbb{R}^{3n}$ определяет положение шаров S_i , $i \in I$, в \mathbb{R}^3 .

Не теряя общности, полагаем, что

$$\hat{r}_1 \leq \hat{r}_2 \leq \dots \leq \hat{r}_n, \quad \hat{r}_1 < \hat{r}_n. \quad (1)$$

Задача. Найти вектор v , гарантирующий упаковку шаров $S_i(v_i)$, $i \in I$, без взаимных наложений в контейнере P минимального размера μ^* .

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ЕЕ ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА

Представим математическую модель задачи в виде

$$\mu^* = \min \mu, \quad Y = (\mu, v) \in W \subset \mathbb{R}^{3n+1}, \quad (2)$$

$$W = \{Y \in \mathbb{R}^{3n+1} : \Phi_{ij}(v_i, v_j) \geq 0, \quad i < j \in I, \Phi_i(v_i, \mu) \geq 0, \quad i \in I\}. \quad (3)$$

Неравенство $\Phi_{ij}(v_i, v_j) = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 - (\hat{r}_i + \hat{r}_j)^2 \geq 0$ обеспечивает неналожение шаров S_i и S_j , а $\Phi_i(v_i, \mu) \geq 0$ — размещение шара $S_i(v_i)$ в области $P(\mu)$.

Функция $\Phi_i(v_i, \mu)$ зависит от типа контейнера и имеет вид

$$\begin{aligned} \Phi_i(v_i, \mu) = & \\ = & \begin{cases} \min\{x_i - \hat{r}_i, y_i - \hat{r}_i, z_i - \hat{r}_i, a - x_i - \hat{r}_i, b - y_i - \hat{r}_i, h - z_i - \hat{r}_i\}, & \text{если } P = P_B, \\ -x_i^2 - y_i^2 - z_i^2 + (R - \hat{r}_i)^2, & \text{если } P = P_S, \\ \min\{-x_i^2 - y_i^2 + (R - \hat{r}_i)^2, z_i - \hat{r}_i, h - z_i - \hat{r}_i\}, & \text{если } P = P_C, \\ \min\{-x_i^2 - y_i^2 + (R - \hat{r}_i)^2, x_i^2 + y_i^2 - (\rho + \hat{r}_i)^2, z_i - \hat{r}_i, h - z_i - \hat{r}_i\}, & \text{если } P = P_{CC}, \\ \min\{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 - (\rho - \hat{r}_i)^2, -x_i^2 - y_i^2 - z_i^2 + (R - \hat{r}_i)^2\}, & \text{если } P = P_{SS}. \end{cases} \end{aligned}$$

Математическая модель (2), (3) имеет те же свойства, что и математическая модель, рассмотренная в [3], т.е. локальные минимумы достигаются в крайних точках области W , матрица системы неравенств в (3) сильно разрежена, число

неравенств, задающих W , определяется как $\eta \geq n(n-1)/2 + n$ и поставленная задача является NP-трудной. Таким образом, в общем случае глобальный минимум задачи можно получить только теоретически.

Следовательно, для успешного решения задачи (2), (3) необходимо строить допустимые начальные точки, вычислять локальные минимумы и осуществлять эффективный направленный перебор локальных минимумов.

ПОСТРОЕНИЕ НАЧАЛЬНЫХ ТОЧЕК И ПОИСК ЛОКАЛЬНЫХ МИНИМУМОВ

Начальная точка Y^0 может быть задана как детерминированным способом, так и случайно. Любой детерминированный способ (жадные или эвристические алгоритмы, например [5]) не позволяет получить произвольные начальные точки, принадлежащие области допустимых решений. Поэтому более предпочтительно использовать случайный выбор начальных точек.

Полагаем, что радиусы r_i шаров S_i , $i \in I$, являются переменными и формируются вектором $r = (r_1, r_2, \dots, r_n) \in \mathbb{R}^n$. Тогда $X = (v, r) \in \mathbb{R}^{4n}$ — вектор всех переменных. В этом случае неравенства в системе (3) принимают вид

$$\Phi_{ij}(v_i, v_j, r_i, r_j) \geq 0, \quad i < j \in I, \quad \Phi_i(v_i, r_i, \mu) \geq 0, \quad i \in I.$$

Пусть $\mu = \mu^0 > 0$. Задаем случайнм образом точку $X^r = (v^r, 0)$ так, что $v_i^r \in P(\mu^0)$, $i \in I$.

Для построения точки $(v, \mu^0) \in W$ с помощью точки (v^r, μ^0) решаем задачу

$$\Psi(\hat{r}) = \max \Psi(r) = \max \sum_{i=1}^n r_i, \quad X = (v, r) \in D \subset \mathbb{R}^{4n}, \quad (4)$$

$$D = \{X \in \mathbb{R}^{4n}, \quad \Phi_{ij}(v_i, v_j, r_i, r_j) \geq 0, \quad i < j \in I, \quad \Phi_i(v_i, r_i, \mu^0) \geq 0, \quad$$

$$\varphi_i(r_i) = \hat{r}_i - r_i \geq 0, \quad r_i \geq 0, \quad i \in I\}. \quad (5)$$

Из построения точки X^r следует, что она принадлежит D . Тогда, задав начальную точку X^r , решаем задачу (4), (5) и получаем точку локального максимума $\hat{X} = (\hat{v}, \hat{r})$. Если

$$\Psi(\hat{r}) = \sum_{i=1}^n \hat{r}_i = \sum_{i=1}^n \hat{r}_i = \beta,$$

то $\hat{r} = \hat{r}$ и шары S_i , $i \in I$, упаковываются в $P(\mu^0)$. Это означает, что \hat{X} — точка глобального максимума задачи (4), (5). Если же \hat{X} — точка глобального максимума задачи (4), (5) и $\Psi(\hat{r}) < \beta$, то шары S_i , $i \in I$, не могут быть упакованы в $P(\mu^0)$. Неравенство $\Psi(\hat{r}) < \beta$ в точке локального максимума \hat{X} не означает, что шары не могут быть упакованы в $P(\mu^0)$.

В зависимости от значения μ^0 возможны два случая упаковки: $\Psi(\hat{r}) = \beta$ и $\Psi(\hat{r}) < \beta$.

Если $\Psi(\hat{r}) = \beta$, то $(\hat{v}, \mu^0) \in W$ (см. (3)). В общем случае (\hat{v}, μ^0) не является точкой локального минимума задачи (2), (3). Поэтому, взяв начальную точку (\hat{v}, μ^0) , вычисляем точку локального минимума $(\bar{v}, \bar{\mu})$ задачи (2), (3).

Если $\Psi(\hat{r}) < \beta$, то либо выбираем $X^r = (v^r, 0)$ снова произвольно и решаем последовательно задачи (4), (5) и (2), (3), либо начинаем выполнять переход из точки \hat{X} в точку $\tilde{\hat{X}}$ так, чтобы выполнялось условие $\Psi(\tilde{\hat{r}}) > \Psi(\hat{r})$.

ПЕРЕХОД ИЗ ОДНОГО ЛОКАЛЬНОГО МАКСИМУМА В ДРУГОЙ

Рассмотрим возможность построения в точке локального максимума задачи (4), (5) вектора, позволяющего получить новую точку локального максимума, в которой значение функции цели $\Psi(r)$ увеличивается. Это исследование является основой алгоритма JA.

Пусть $\hat{X} = (\hat{v}, \hat{r})$ — точка локального максимума задачи (4), (5) и $\Psi(\hat{r}) < \beta$, т.е. по крайней мере одно из неравенств $\hat{r}_i - \hat{r}_j \geq 0$, $i \in I$, активно.

Определим возможность перехода из точки $\hat{X} = (\hat{v}, \hat{r})$ в другую точку, в которой функция цели возрастет. Такой переход может быть осуществлен, если есть резерв объема вокруг хотя бы одного шара. С этой целью сформулируем вспомогательную задачу

$$\max V(r) = \sum_{i=1}^n r_i^3, \quad X \in M \subset \mathbb{R}^{4n}, \quad (6)$$

$$M = \{X \in \mathbb{R}^{4n}, \Phi_{ij}(v_i, v_j, r_i, r_j) \geq 0, i < j \in I, \Phi_i(v_i, r_i, \mu^0) \geq 0,$$

$$\psi_{1i}(r_i) = r_{\max} - r_i \geq 0, \psi_{2i}(r_i) = -r_{\min} + r_i \geq 0, i \in I\}, \quad (7)$$

где $r_{\max} = \hat{r}_n$ и $r_{\min} = \hat{r}_1$. Заметим, что область допустимых решений M отличается от области D в задаче (4), (5), т.е. неравенства $\varphi_i(r_i) = \hat{r}_i - r_i \geq 0$, $r_i \geq 0$, в (5) заменяются неравенствами $\psi_{1i}(r_i) \geq 0$, $\psi_{2i}(r_i) \geq 0$, $i \in I$. Это означает, что радиусы $r_i \geq 0$, $i \in I$, могут принимать любые значения из интервала $[r_{\min}, r_{\max}]$. Следовательно, радиусы могут иметь значения, большие чем начальные \hat{r}_i , $i \in I \setminus \{1\}$.

Далее вычислим вектор наискорейшего подъема Z^0 в точке \hat{X} для вспомогательной задачи (6), (7) и построим точки

$$X^\gamma = \hat{X} + 0.5^\gamma \cdot Z^0, \quad \gamma \in \Gamma = \{0, 1, 2, \dots, q < \infty\}. \quad (8)$$

Если $Z^0 \neq 0$, то существует такое m , что при $\gamma \geq m$ имеем $X^\gamma \in M$. Это справедливо, так как $M \neq \emptyset$ и $\hat{X} = (\hat{v}, \hat{r})$ не является точкой локального максимума.

Поскольку значения r_i , $i \in I$, ограничены отрезком $[r_{\min}, r_{\max}]$ в задаче (6), (7), то в некоторых случаях $r_j = r_j^\gamma \geq \hat{r}_j$, $j \in I_1 \subset I$, а в некоторых $r_i = r_i^\gamma < \hat{r}_i$, $i \in I_2 \subset I$. Таким образом, может оказаться, что часть неравенств $\varphi_i(r_i) = \hat{r}_i - r_i \geq 0$, $i \in I$, в (5) неактивны. Пусть множества индексов I_1 и I_2 состоят из q и p элементов соответственно. Очевидно, что $I_1 \cap I_2 = \emptyset$ и $I_1 \cup I_2 = I$.

Теперь полагаем, что $\gamma = m$, и зададим координаты вектора $\tilde{X}^m = (\tilde{v}_1^m, \tilde{v}_2^m, \dots, \tilde{v}_n^m, \tilde{r}_1^m, \tilde{r}_2^m, \dots, \tilde{r}_n^m)$ на основе точек $\hat{X} = (\hat{v}, \hat{r})$ и X^m следующим образом. Если для $i \in I_2$ и $j \in I_1$ неравенства

$$\hat{r}_j > \hat{r}_i, \hat{r}_j \leq r_i^m, \hat{r}_i < r_j^m \quad (9)$$

верны, то $\tilde{r}_i^m = \min\{\hat{r}_i, r_j^m\}$, $\tilde{v}_i^m = v_j^m$, $\tilde{r}_j^m = \min\{\hat{r}_j, r_i^m\}$, $\tilde{v}_j^m = v_i^m$.

Если для $i \in I_2$ нарушается по крайней мере одно из неравенств (9), то $\tilde{r}_i^m = r_i^m$, $\tilde{v}_i^m = v_i^m$.

Заметим, что точке $\tilde{X}^m \neq X^m$ соответствует допустимая упаковка шаров, полученная из упаковки, соответствующей точке \hat{X} , в которой некоторые из шаров S_j , $j \in I$, поменялись местами.

Может оказаться, что $\tilde{X}^m = X^m$, т.е. существует такое целое число N , когда при $m > N$ имеем $\tilde{X}^m = X^m$. Это означает, что \tilde{X}^m не находится в «зоне притяжения» точки локального максимума \hat{X} , если $m \leq N$.

Пусть $\tilde{\hat{X}}^m$ — точка локального максимума, полученная из начальной точки \tilde{X}^m при решении задачи (4), (5). Справедлива следующая теорема.

Теорема 1. Если $m \leq N$, то $\Psi(\tilde{\hat{X}}^m) > \Psi(\hat{X})$.

Доказательство теоремы аналогично доказательству, приведенному в [12].

СТРАТЕГИЯ РЕШЕНИЯ

Стратегия решения задачи (2), (3) состоит из четырех этапов: 1) формируется начальная точка и вычисляется локальный минимум задачи (2), (3); 2) осуществляется плавный переход из одной точки задачи (4), (5) в другую; 3) уменьшается размерность пространства решений задачи (4), (5) (этот этап реализован на основе алгоритма, описанного в работе [12]); 4) осуществляются перестановки пар шаров, что иногда позволяет улучшить значение функции цели (этап реализован аналогично алгоритму, описанному в статье [13]).

1. Вычисление локального минимума задачи. Для вычисления локального минимума задачи разрабатывается пошаговая процедура, включающая решение задач (2), (3) и (4), (5).

Вначале выбираем значение $\mu = \mu^0$, гарантирующее упаковку шаров S_i радиусов \hat{r}_i , $i \in I$, в контейнере $P(\mu^0)$. Затем случайно выбираем точку $X^r = (v^r, 0)$ так, чтобы $v_i^r \in P(\mu^0)$, $i \in I$, и, используя начальную точку X^r , решаем задачу (4), (5). В результате находим точку локального минимума $\hat{X} = (\bar{v}, \hat{r})$. Вследствие выбора $\mu = \mu^0$ всегда имеем $\Psi(\hat{r}) = \beta$ ($\hat{r} = \hat{r} = (\hat{r}_1, \hat{r}_2, \dots, \hat{r}_n)$). Это означает, что $(\bar{v}, \mu^0) \in W$. Поэтому, взяв начальную точку (\bar{v}, μ^0) , решаем задачу (2), (3) и вычисляем новую точку локального минимума $(\bar{v}^0, \bar{\mu}^0)$.

2. Алгоритм JA. Основой алгоритма JA является теорема 1. Алгоритм позволяет выполнить плавный переход из одной точки локального максимума задачи (4), (5) к другой, в которой значение $\Psi(r)$ возрастает.

Пусть $(\bar{v}^0, \bar{\mu}^0)$ — точка локального минимума задачи (2), (3). Вычислим $r_i^\lambda = \hat{r}_i - 0.5^{\lambda+2} \cdot \hat{r}_i = \hat{r}_i(1 - 0.5^{\lambda+2})$, $i \in I$, $\lambda = 0, 1, \dots$. Предположим, что радиусы шаров равны r_i^λ , $i \in I$. Вместо задачи (2), (3) решим задачу

$$\bar{\mu} = \min \mu, \quad Y = (v, \mu) \in W^\lambda \subset \mathbb{R}^{3n+1}, \quad (10)$$

$$W^\lambda = \{Y \in \mathbb{R}^{3n+1} : \Phi_{ij}^\lambda(v_i, v_j) = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 - (r_i^\lambda + r_j^\lambda)^2 \geq 0,$$

$$i < j \in I, \quad \Phi_i^\lambda(v_i, \mu) \geq 0, \quad i \in I\},$$

$$\Phi_i^\lambda(v_i, \mu) =$$

$$= \begin{cases} \min\{x_i - r_i^\lambda, y_i - r_i^\lambda, z_i - r_i^\lambda, a - x_i - r_i^\lambda, b - y_i - r_i^\lambda, h - z_i - r_i^\lambda\}, & \text{если } P = P_B, \\ -x_i^2 - y_i^2 - z_i^2 + (R - r_i^\lambda)^2, & \text{если } P = P_S, \\ \min\{-x_i^2 - y_i^2 + (R - r_i^\lambda)^2, z_i - r_i^\lambda, h - z_i - r_i^\lambda\}, & \text{если } P = P_C, \\ \min\{-x_i^2 - y_i^2 + (R - r_i^\lambda)^2, x_i^2 + y_i^2 - (\rho + r_i^\lambda)^2, z_i - r_i^\lambda, h - z_i - r_i^\lambda\}, & \text{если } P = P_{CC}, \\ \min\{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 - (\rho - r_i^\lambda)^2, -x_i^2 - y_i^2 - z_i^2 + (R - r_i^\lambda)^2\}, & \text{если } P = P_{SS}. \end{cases}$$

Поскольку $r_i^\lambda < \hat{r}_i$, $i \in I$, то $(\tilde{v}^0, \tilde{\mu}^0) \in W^\lambda$ и $(\tilde{v}^0, \tilde{\mu}^0)$ не является точкой локального минимума задачи (10). Решаем задачу (10) для начальной точки $(\tilde{v}^0, \tilde{\mu}^0)$. В результате получаем точку локального минимума $(\check{v}^0, \check{\mu}^0)$. Так как $\sum_{i=1}^n r_i^\lambda < \beta$, то, решая задачу (4), (5) для начальной точки $X^0 = (\check{v}^0, r^\lambda) \in D$, вычисляем точку локального максимума $\hat{X}^\lambda = (\hat{v}^\lambda, \hat{r}^\lambda)$. Возможны два случая поведения функции Ψ в точке \hat{r}^λ : $\Psi(\hat{r}^\lambda) = \beta$ и $\Psi(\hat{r}^\lambda) < \beta$.

Если $\Psi(\hat{r}^\lambda) = \beta$, то $\hat{r}_i^\lambda = \hat{r}_i$, $i \in I$, и, следовательно, $(\hat{v}^\lambda, \check{\mu}^0) \in W$ (см. (3)). Взяв начальную точку $(\hat{v}^\lambda, \check{\mu}^0)$, решаем задачу (2), (3). В результате вычисляем новую точку локального минимума — $(\tilde{v}^1, \tilde{\mu}^1)$. В этом случае снова вычисляется точка локального минимума $(\check{v}^1, \check{\mu}^1)$ задачи (10) для начальной точки $(\tilde{v}^1, \tilde{\mu}^1)$. Процесс повторяется до тех пор, пока ни выполнится условие $\Psi(\hat{r}^\lambda) < \beta$, т.е. пока после k итераций ни будем иметь $\sum_{i=1}^n \hat{r}_i^\lambda < \beta$, $\hat{X}^\lambda = (\hat{v}^\lambda, \hat{r}^\lambda)$ и $(\hat{v}^\lambda, \check{\mu}^0) \notin W$.

Если $\Psi(\hat{r}^\lambda) < \beta$, то вычисляем вектор наискорейшего подъема Z^0 в точке \hat{X}^λ для задачи (6), (7), определяем $\gamma = m$ и строим точку $X^m = (v^m, r^m) \in D$ в соответствии с (8) и возрастающей последовательностью (см. (1)) $r_{i_1}^m \leq r_{i_2}^m \leq \dots \leq r_{i_n}^m$. Поскольку может оказаться, что $V(r^m) > V(\hat{r})$, то, используя эту последовательность, вычисляем $r_{i_j}^{m0} = \min\{r_{i_j}^m, \hat{r}_j\}$, $j \in I$. Это гарантирует выполнение неравенства $V(r^{m0}) \leq V(\hat{r})$, где $r^{m0} = (r_1^{m0}, r_2^{m0}, \dots, r_n^{m0})$. На основании указанной последовательности строим две точки: $\tilde{X}^m = (\tilde{v}^m, \tilde{r}^m)$, где $\tilde{v}_j^m = v_{i_j}^m$, $\tilde{r}_j^m = r_{i_j}^{m0}$, и точку $\check{X}^m = (\check{v}^m, \check{r}^m)$, где $\check{v}_j^m = v_{i_j}^m$, $\check{r}_j^m = r_{i_j}^m$, $j \in I$.

Если $V(\hat{r}) > V(\tilde{r}^m) > V(\hat{r}^\lambda)$, то вычисляется новый вектор наискорейшего подъема Z^0 в точке \tilde{X}^m для задачи (6), (7). Взяв $\hat{X} = \tilde{X}^m$, строим новые точки $X^m = \hat{X} + (1/2)^m Z^0$, $\tilde{X}^m = (\tilde{v}^m, \tilde{r}^m)$ и $\check{X}^m = (\check{v}^m, \check{r}^m)$ и т.д. Итерационный процесс продолжается до тех пор, пока ни выполнится одно из условий: $V(\tilde{r}^m) = V(\hat{r})$ или $V(\tilde{r}^m) \leq V(\hat{r}^\lambda) < V(\hat{r})$.

Если $V(\tilde{r}^m) = V(\hat{r})$, т.е. $\tilde{r}_i^m = \hat{r}_i$, $i \in I$, тогда, задав начальную точку $(\tilde{v}_i^m, \check{\mu}^\lambda)$, решаем задачу (2), (3) и вычисляем новую точку локального минимума $(\check{v}^0, \check{\mu}^0)$. Процесс повторяется до тех пор, пока ни выполнится условие $V(\tilde{r}^m) \leq V(\hat{r}^\lambda) < V(\hat{r})$. В этом случае увеличиваем λ на единицу, и описанная выше процедура повторяется для нового значения λ , пока ни окажется, что $0.5^{\lambda+2} < 10^{-3}$. (Схема алгоритма JA изображена на рис. 1.)

Для получения хорошего приближения к глобальному минимуму задачи (2), (3) повторяем v раз пошаговую процедуру, состоящую из построения начальной точки и поиска локального минимума задачи (2), (3) с помощью алгоритма JA. В результате вычисляются точки локальных минимумов (v^{*t}, μ^{*t}) , $t \in T = \{1, 2, \dots, v \leq 10\}$. Затем выбираем из них точку (v^{*0}, μ^{*0}) , соответствующую значению $\mu^{*0} = \min\{\mu^{*t}, t \in T\}$. Эта точка выбирается в качестве приближения к глобальному минимуму задачи (2), (3).

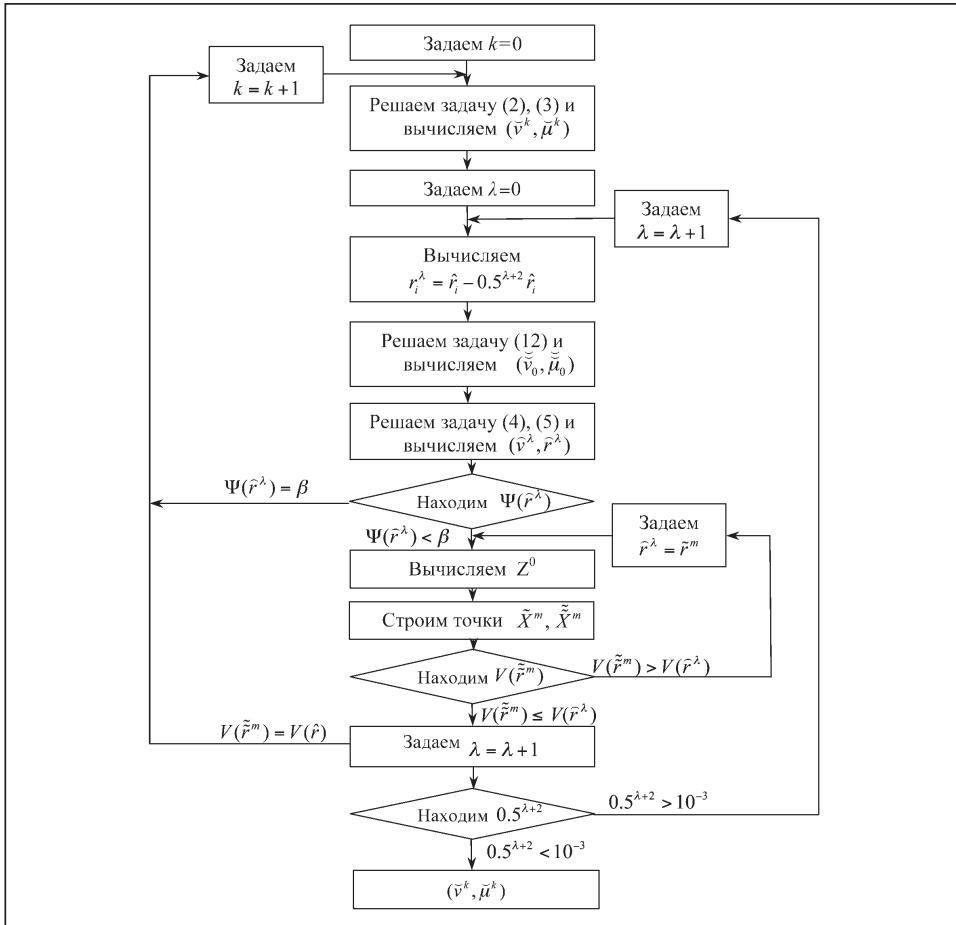


Рис. 1. Схема алгоритма JA

ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Эффективность алгоритма JA была проверена на ряде тестовых примеров упаковки шаров в кубоид [3, 5] и в шар [10]. Кроме того, были решены примеры для каждого типа контейнера. Расчеты проводились на персональном компьютере с процессором AMD Athlon 64 X2 6000+ (3.1Ghz).

Для решения задач (2), (3); (4), (5) и (6), (7) использовались пакет программ Interior Point Optimizer (IPOPT), в котором задается информация о якобианах и гессианах [14], и концепция ϵ -активных неравенств [15].

В табл. 1 приводится сравнительная характеристика алгоритма JA и других алгоритмов [4, 5] для группы примеров упаковки шаров в кубоид (SYS1–SYS6), впервые представленных в [3]. В первой колонке имеем название примеров, а во второй — число шаров. В следующих трех колонках представлены лучшие значения высоты, полученные с помощью других алгоритмов: h_{BS} (алгоритм Birgin и Sobral) [4], h_K (алгоритм Kubach и др.) [5], h_{HY} (алгоритм Hifi и Yousef) [8]. Так как время подсчета с помощью алгоритма JA больше, чем время подсчета указанными алгоритмами, в шестой колонке приводится результат подсчета высоты h^{1*} алгоритмом JA за один час. В следующих трех колонках представлены результат подсчета высоты h^{*0} (для алгоритма JA), лимит времени подсчета и процент улучшения алгоритма JA по сравнению с лучшим значением высоты, полученным другими алгоритмами. Как видно из табл. 1, улучшаются результаты для $n \geq 40$ даже после одного часа вычислений.

Таблица 1. Сравнение результатов для примеров SYS1–SYS6

Название примера	Число шаров, n	Результаты решения примеров с помощью алгоритмов					Время, час	Улучшение, %
		h_{BS}	h_K	h_{HY}	h^{1*}	h^{*0}		
SYS1	25	9.7942	9.2656	9.1796	9.4212	9.1604	4	1,1
SYS2	35	—	8.9301	8.8922	8.9957	8.8195	6	1,2
SYS3	40	9.3090	8.7178	8.6702	8.7137	8.4108	8	3,5
SYS4	45	11.0962	10.4042	10.2012	10.2324	9.9288	8	4,6
SYS5	50	11.6211	10.9865	10.8954	10.6505	10.5905	8	3,6
SYS6	60	12.7215	11.8399	11.7943	11.7588	11.5708	8	2,3

Результаты подсчета других примеров могут быть загружены с веб-страниц: <http://f-bit.ru/uploads/250612.zip> и <http://www.math.tu-dresden.de/~scheith/ABSTRACTS/PREPRINTS/13-spheres.pdf>

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Идея рассматривать радиусы шаров в качестве переменных позволила разработать новый способ решения задачи, благодаря которому улучшены известные результаты. В алгоритме JA выполняется плавный переход из одной точки локального экстремума к другой, в которой улучшается значение функции цели. Алгоритм особенно эффективен, если радиусы шаров в последовательности (1) отличаются незначительно. Уменьшение размерности задачи путем фиксирования значений радиусов шаров позволяет иногда улучшить значения целевой функции задачи (2), (3). Представленные численные результаты показывают, что предложенный подход более эффективен, чем известные вероятностные и эвристические методы.

Рассмотренные оптимационные подходы и разработанные алгоритмы могут быть также применены при решении задач упаковки неравных шаров в контейнеры, которые являются многосвязными ограниченными множествами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Conway J.H., Sloane N.J.A. Sphere packings, lattices, and groups. — New York: Springer-Verlag, 1999. — 681 p.
- Sutou A., Day Y. Global optimization approach to unequal sphere packing problems in 3D // Journal of Optimization Theory and Applications. — 2002. — **114**, N 3. — P. 671–694.
- Stoyan Yu., Yaskov G., Scheithauer G. Packing of various solid spheres into a parallelepiped // Central European Journal of Operational Research. — 2003. — 11, N 4. — P. 389–407.
- Birgin E.G., Sobral F.N.C. Minimizing the object dimensions in circle and sphere packing problems // Computers & Operations Research. — 2008. — **35**. — P. 2357–2375.
- Kubach T., Bortfeldt A., Tilli T., Gehring H. Parallel greedy algorithms for packing unequal spheres into a cuboidal strip or a cuboid // Technical Report, Diskussionsbeitrag Nr. 440, Fakultät für Wirtschaftswissenschaft, FernUniversität in Hagen, 2009. — 20 p.
- Kubach T., Bortfeldt A., Tilli T., Gehring H. Greedy algorithms for packing unequal spheres into a cuboidal strip or a cuboid // Asia Pac. J. Oper. Res. — 2011. — **28**, N 6. — P. 739–753.
- Huang W.Q., Li Y., Akeb H., Li C.M. Greedy algorithms for packing unequal circles into a rectangular container // Journal of the Operational Research Society. — 2005. — **56**, N 5. — P. 539–548.
- Hifi M., Yousef L. Width beam and hill-climbing strategies for the three-dimensional sphere packing problem // In Proceedings of the 2014 Federated Conference on Computer Science and Information Systems, ACSIS. — 2014. — **2**. — P. 421–428.
- Liu J., Yao Y., Zheng Yu., Geng H., Zhou G. An effective hybrid algorithm for the circles and spheres packing problems // Combinatorial Optimization and Applications. Lecture Notes in Computer Science. — 2009. — **5573**. — P. 135–144.

10. Zeng Z.Z., Huang W.Q., Xu R.C., Fu Z.H. An algorithm to packing unequal spheres in a larger sphere // Advanced Materials Research. — 2012. — 546–547. — P. 1464–1469.
11. Hifi M., M'Hallah R. A literature review on circle and sphere packing problems: Models and methodologies // Advances in Operations Research. — 2009. — 2009. — 22 p.
12. Stoyan Yu., Yaskov G. Packing unequal circles into a strip of minimal length with a jump algorithm // Optimization Letters. — 2014. — 8, N 3. — P. 949–970.
13. Stoyan Yu.G., Yaskov G.N. A mathematical model and a solution method for the problem of placing various-sized circles into a strip // European Journal of Operational Research. — 2004. — 156. — P. 590–600.
14. Wächter A., Biegler L.T. On the implementation of a primal-dual interior point filter line search algorithm for large-scale nonlinear programming // Mathematical Programming. — 2006. — 106, N 1. — P. 25–57.
15. Stoyan Yu.G., Yaskov G.N. Packing identical spheres into a cylinder // International Transactions in Operational Research. — 2010. — 17, N 1. — P. 51–70.

Надійшла до редакції 30.11.2015

Ю.Г. Стоян, Г. Шайтхауер, Г.М. Яськов ПАКУВАННЯ НЕРІВНИХ КУЛЬ У РІЗНІ КОНТЕЙНЕРИ

Анотація. Розглянуто оптимізаційну задачу пакування різних куль у контейнери типу кубоїд, куля, прямий круговий циліндр, кільцевий циліндр і сферичний шар. Вважається, що радіуси куль змінні. Це дозволяє запропонувати новий спосіб отримання початкових точок, що належать області допустимих розв'язків задачі, а також здійснювати перебір локальних екстремумів, використовуючи модифікацію алгоритму JA (jump-алгоритм), який реалізує плавний перехід від одного локального мінімуму до іншого з кращим значенням функції цілі. Зменшення розмірності задачі та попарні представлення куль дозволяють покращити значення функції цілі. Отримані результати порівнюються з кращими відомими.

Ключові слова: пакування, пакування куль, неопукла задача оптимізації, jump-алгоритм.

Yu.G. Stoyan, G. Scheithauer, G.N. Yaskov

PACKING NON-EQUAL SPHERES INTO CONTAINERS OF DIFFERENT SHAPES

Abstract. The paper considers the optimization problem of packing different solid spheres into containers of types: a cuboid, a sphere, a right circular cylinder, an annular cylinder, and a spherical layer. The radii of spheres are assumed to be variables. This allows us to propose a new technique to derive initial points belonging to the feasible region of the problem, as well as to carry out a non-exhaustive search of local extrema, using a modification of the jump algorithm (JA), which implements a continuous transition from one local minimum to another with a better value of the objective. A reduction of the solution space dimension of the problem and rearrangements of sphere pairs allow improving the objective function value. The results obtained are compared with benchmark ones.

Keywords: packing, sphere packing, non-convex optimization problem, jump algorithm.

Стоян Юрий Григорьевич,

член-корреспондент НАН України, доктор техн. наук, професор, заведуючий отделом Института проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного НАН України, Харків, e-mail: stoyan@ipmach.kharkov.ua.

Шайтхауер Гунтрам,

Dr., assistant professor, Institute of Numerical Mathematics, Dresden University of Technology, Germany, e-mail: Guntram.Scheithauer@tu-dresden.de.

Яськов Георгий Николаевич,

кандидат техн. наук, доцент, старший научный сотрудник Института проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного НАН України, Харків, e-mail: yaskov@ukr.net.