

УДК 519.85

А.И. Косолап

МЕТОД ТОЧНОЙ КВАДРАТИЧНОЙ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НАИБОЛЕЕ ПЛОТНОЙ УПАКОВКИ ШАРОВ

ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет», г. Днепропетровск

Рассмотрена задача наиболее плотной упаковки шаров в евклидовом пространстве. Такие задачи возникают во многих приложениях: эффективная передача данных, кристаллохимия, проектирование антенн, томография и во многих других областях. Задача наиболее плотной упаковки шаров является многоэкстремальной. Для ее решения предлагается метод точной квадратичной регуляризации. Численные эксперименты подтверждают его эффективность для решения данного класса задач.

Введение

Проблеме наиболее плотной упаковки шаров в евклидовом пространстве посвящены многочисленные исследования [1-2]. Но только для плоскости найдена упаковка максимальной плотности. В трехмерном пространстве оптимальность гранецентрированной кубической упаковки до настоящего времени недоказана. Задачи упаковки пространства шарами возникают во многих прикладных областях. В задачах передачи данных с минимальной энергией, в криптографии, кристаллохимии, томографии, проектировании антенн и многих других прикладных и теоретических исследованиях. Например, опыты показывают, что кристаллы очень многих сложных веществ можно изобразить, как плотные упаковки шаров [3].

Постановка задачи и метод ее решения

Рассмотрим задачу упаковки пространства E^3 m шарами единичного радиуса

$$\{x \mid \|x - x^i\|^2 = (x_1 - x_1^i)^2 + (x_2 - x_2^i)^2 + (x_3 - x_3^i)^2 \leq 1, i=1, \dots, m\}.$$

Будем минимизировать суммарное расстояние от начала координат до центров шаров при условии, что шары не пересекаются (расстояние между центрами шаров не меньше двух радиусов)

$$\min \left\{ \sum_{i=1}^m \|x^i\|^2 \mid \|x^i - x^j\|^2 \geq 4, i, j=1, \dots, m, (i \neq j), x \in E^{3m} \right\}, (1)$$

где x^i — координаты центров шаров, а m — количество шаров. Допустимым множеством задачи

(1) являются координаты центров m шаров, которые попарно не пересекаются. Для решения задачи (1) используем метод точной квадратичной регуляризации [4]. Преобразуем задачу (1) к виду

$$\min \{x_{n+1} \mid \sum_{i=1}^m \|x^i\|^2 \leq x_{n+1}, \|x^i - x^j\|^2 \geq 4, i, j=1, \dots, m, (i \neq j), x \in E^{3m+1}\}, (2)$$

где x_{n+1} — новая переменная. Далее, используем замену $x = Az$, где матрица A порядка $(3m+1) \times (3m+1)$ равна

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ z_1 & z_2 & \dots & z_{3m+1} \end{pmatrix},$$

для преобразования задачи (2) к следующей

$$\min \{ \|z\|^2 \mid \sum_{i=1}^m \|\bar{z}^i\|^2 \leq \|z\|^2, \|\bar{z}^i - \bar{z}^j\|^2 \geq 4, i, j=1, \dots, m, (i \neq j), z \in E^{3m+1} \}, (3)$$

где $\bar{z}^i = x^i, \forall i$. Введем новую переменную $d > 0$ и зададим такое значение параметра $r > 0$, которое преобразует ограничения задачи (3) к выпуклым. Получим задачу

$$\min\{\|z\|^2 \mid \sum_{i=1}^m \|\bar{z}^i\|^2 + (r-1)\|z\|^2 \leq d, -\|\bar{z}^i - \bar{z}^j\|^2 + r\|z\|^2 + 4 \leq d, i, j=1, \dots, m, (i \neq j), z \in E^{3m+1}\},$$

ограничения которой будут выпуклыми. В задаче (4) значение новой переменной d необходимо определить. Пусть (z^0, d_0) – решение соответствующей выпуклой задачи

$$\min\{d \mid \sum_{i=1}^m \|\bar{z}^i\|^2 + (r-1)\|z\|^2 \leq d, -\|\bar{z}^i - \bar{z}^j\|^2 + r\|z\|^2 + 4 \leq d, i, j=1, \dots, m, (i \neq j), r\|z\|^2 \leq d, z \in E^{3m+1}\}. \quad (5)$$

Если условие $r\|z^0\|^2 = d_0$ выполняется, то решение z^0 – определяет оптимальную упаковку шаров в пространстве. Действительно, минимизация d равносильна минимизации $\|z\|^2$, а при выполнении условия $r\|z^0\|^2 = d_0$ ограничения задачи (5) совпадают с ограничениями задачи (1). Покажем, что условие $r\|z^0\|^2 = d_0$ всегда выполняется. Сначала упростим ограничения задачи (5) исключив первое ограничение, так как оно выполняется при условии $r\|z\|^2 \leq d$. Получаем эквивалентную задачу

$$\min\{d \mid -\|\bar{z}^i - \bar{z}^j\|^2 + r\|z\|^2 + 4 \leq d, i, j=1, \dots, m, (i \neq j), r\|z\|^2 \leq d, z \in E^{3m+1}\}. \quad (6)$$

Преобразуем ограничения задачи (1) к одному ограничению

$$q \sum_{i=1}^m \sum_{j=i+1}^m (\|\bar{z}^i - \bar{z}^j\|^2 - 4 \mid -\|\bar{z}^i - \bar{z}^j\| + 4)^2 \leq 0,$$

где выражения в скобках будут равны нулю для допустимых значений переменных и больше нуля – для недопустимых, а $q > 0$. Получаем эквивалентную (6) задачу

$$\min\{d \mid q \sum_{i=1}^m \sum_{j=i+1}^m (\|\bar{z}^i - \bar{z}^j\|^2 - 4 \mid -\|\bar{z}^i - \bar{z}^j\| + 4)^2 + r\|z\|^2 \leq d, r\|z\|^2 \leq d, z \in E^{3m+1}\}, \quad (7)$$

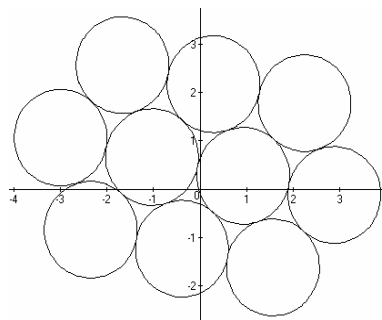
содержащую только два ограничения. При необходимости значение параметра r увеличиваем, чтобы ограничения задачи (7) были выпуклыми. В задаче (7) минимизируется линейная целевая функция, поэтому, по крайней мере, одно из ее ограничений будет активным (в точке минимума будет обращаться в равенство). Покажем, что второе ограничение в задаче (7) в точке минимума

будет активным. Если предположить противное, что активным будет только первое ограничение, то слагаемое

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=i+1}^m (\|\bar{z}^i - \bar{z}^j\|^2 - 4 \mid -\|\bar{z}^i - \bar{z}^j\| + 4)^2$$

первого ограничения должно быть больше нуля (чтобы оно было активным), но это противоречит тому, что решение задачи (7) является допустимой точкой задачи (1) (в допустимой точке первое слагаемое равно нулю – оно будет стремиться к нулю при увеличении параметра q). Таким образом, решение выпуклой задачи (7) совпадает с решением задачи (1). Для решения задачи (7) использовался эффективный прямо-двойственный метод внутренней точки [5].

Наиболее плотная упаковка шаров на плоскости рассмотренным методом совпала с оптимальной, как это показано на рисунке



Упаковка шаров на плоскости

Аналогично, рассмотренный метод точной квадратичной регуляризации может быть использован и для решения задач наиболее плотной упаковки шаров в многомерных пространствах.

Результаты численных экспериментов. Средствами VBA Excel была разработана программа наиболее плотной упаковки шаров, реализующая метод точной квадратичной регуляризации. Приведем пример упаковки трехмерного пространства 18-ю шарами. Найденные координаты центров шаров представлены в таблице.

Численные эксперименты проводились на двухъядерном процессоре Pentium Core i5 с частотой 2,5 ГГц.

Выводы

Использован новый метод точной квадратичной регуляризации для наиболее плотной упаковки шаров в евклидовом пространстве различной размерности. Показано, что задача упаковки сводится к решению выпуклой экстремальной задачи, для которой разработаны эффективные методы. Проведены численные эксперименты, которые свидетельствуют об эффективности данного метода при решении многоэкстремальных задач наиболее плотной упаковки пространств ша-

рами.

Координаты центров шаров

1,070399	-1,56525	0,119855
-2,25054	-1,01304	-1,40623
1,159444	-0,85075	-1,74687
-2,13967	0,196586	0,193286
2,371365	-0,11187	-0,33117
-0,99282	1,318118	-1,17731
-1,06056	-1,68067	0,897681
2,257561	0,588084	1,813117
-0,141	-2,41526	-1,22554
-0,05285	1,510835	2,139469
-0,46731	-0,02338	-2,56488
-0,47005	-0,53417	-0,6312
-1,34479	1,965729	0,682088
0,489259	-0,87982	1,906621
0,709249	0,570601	0,547243
-1,32072	-0,03445	2,003245
0,392305	2,392705	-0,21416
1,87388	0,882387	-1,04851

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Конвей Дж., Слоен Н. Упаковка шаров, решетки и группы. В двух томах. Т.1.: пер. с англ. / С.Н. Лицына, М.А. Цфасмана, Г.Б. Шабата. – М.: Мир, 1990. – 414 с.
2. Brass P., Moser W., Pach J. Research Problems in Discrete Geometry. – Springer Science + Business Media, Inc. – 2005. – 512 p.
3. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. – Изд-во. МГУ, 1987. – 275 с.
4. Косолап А.И. Метод квадратичной регуляризации для решения систем нелинейных уравнений // Журн. обчислювальної та прикладної математики. – 2010. – № 4. – С.44-50.
5. Nocedal J., Wright. S. J. Numerical optimization. – Springer, 2006. – 685 p.

Поступила в редакцию 28.03.2013