

УДК 519.859

Г.Н. Яськов

Институт проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного НАН Украины, Харьков

ПОСТРОЕНИЕ НАЧАЛЬНЫХ ТОЧЕК ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ УПАКОВКИ КОНГРУЭНТНЫХ ШАРОВ В ШАРЕ

В статье рассматривается задача упаковки конгруэнтных шаров заданного радиуса в шаре большего радиуса. Приведена математическая модель задачи, основанная на увеличении количества переменных, и описаны ее основные свойства. Предложены три различных способа построения начальных точек. При большом количестве шаров начальные точки формируются в соответствии с решетчатой упаковкой шаров. Описаны два способа построения начальных точек, в которых используется решетчатая упаковка. Третий способ построения начальных точек основан на случайном выборе и может применяться в случае, когда количество шаров небольшое.

Ключевые слова: упаковка, шар, математическая модель, гексагональная решетка, начальная точка.

Введение

Задача упаковки шаров возникает в различных отраслях человеческой деятельности. Упаковка равных шаров возникает при изучении структуры белка в биологии и структуры таких систем, как гранулированные среды, жидкости, живые клетки, случайные среды в химии и физике [1]. Она также применяется в биологии, разработке антенн, рентгеновской томографии и т.д. [2].

Hales [3] доказал гипотезу Kepler о том, что плотность упаковки шаров не может превышать $\pi\sqrt{18} \approx 0.74$.

Наиболее плотной среди всех возможны упаковок шаров является упаковка на основе гексагональной решетки. Обзор известных методов решения задач упаковки кругов и шаров приведен в работе [8].

Получение хороших результатов упаковки зависит от начального размещения шаров. В этой статье предлагаются способы построения начальных точек для упаковки большого числа конгруэнтных шаров на основе математической модели, в которой радиусы всех шаров являются переменными.

Постановка задачи и математическая модель

Пусть имеется набор конгруэнтных шаров S_i , $i \in I_N = \{1, 2, \dots, N\}$, радиуса $r_i = r$ и шар S радиуса $\rho > r$:

$$S = \{(x, y, z) \in \mathbf{R}^3 : x^2 + y^2 + z^2 - \rho^2 = 0\}.$$

Месторасположение шара S_i в пространстве \mathbf{R}^3 определяется координатами его центра

$\mathbf{u}_i = (x_i, y_i, z_i)$, $i \in I_N$. Следовательно, размещение всех шаров S_i , $i \in I_N$, в \mathbf{R}^3 определяется вектором $\mathbf{u}^N = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_N) \in \mathbf{R}^{3N}$.

Задача. Определить максимальное число $\lambda^* \leq N$ шаров из набора S_i , $i \in I_N$, которые могут быть упакованы в шаре C .

Для того, чтобы для решения задачи применить методы непрерывной оптимизации, предполагаем, что радиусы шаров S_i , $i \in I_N$ являются переменными.

$$M_\lambda = \left\{ \mathbf{X}^\lambda \in \mathbf{R}^{4\lambda} : \Phi_{ij}(r_i, r_j, \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j) \geq 0, i, j \in I_\lambda = \{1, 2, \dots, \lambda\}, i < j, \Phi_i(r_i, \mathbf{u}_i) \geq 0, i \in I_\lambda, r - r_i \geq 0, r_i \geq 0, i \in I_\lambda \right\}, \quad (3)$$

$$\Phi_{ij}(r_i, r_j, \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j) = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 - (r_i + r_j)^2, \quad (4)$$

$$\Phi_i(r_i, \mathbf{u}_i) = (r - r_i)^2 - (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2). \quad (5)$$

Неравенство $\Phi_{ij}(r_i, r_j, \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j) \geq 0$ гарантирует непересечение шаров S_i и S_j , $i, j \in I_N$, а неравенство $\Phi_i(r_i, \mathbf{u}_i) \geq 0$ – принадлежность шара S_i , $i \in I_N$, шару C .

Легко увидеть, что если $F_{\lambda+1}(\mathbf{X}^{(\lambda+1)*}) < (\lambda + 1)r$ и $F_\lambda(\mathbf{X}^{\lambda*}) = \lambda^* r$, где $\mathbf{X}^{(\lambda+1)*}$ и $\mathbf{X}^{\lambda*}$ являются точками глобальных максимумов следующих задач:

$$F_\lambda(\mathbf{X}^{\lambda*}) = \max_{\mathbf{X}^\lambda \in M_\lambda} F_\lambda(\mathbf{X}^\lambda), \quad (6)$$

$$F_{\lambda+1}(\mathbf{X}^{(\lambda+1)*}) = \max_{\mathbf{X}^{\lambda+1} \in M_{\lambda+1}} F_{\lambda+1}(\mathbf{X}^{\lambda+1}), \quad (7)$$

$$M_{\lambda+1} = \left\{ \mathbf{X}^{\lambda+1} \in \mathbf{R}^{(n+1)(\lambda+1)} : \Phi_{ij}(r_i, r_j, \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j) \geq 0, i, j \in I_{\lambda+1} = \{1, 2, \dots, \lambda + 1\}, i < j; \right.$$

$\Phi_i(r_i, \mathbf{u}_i) \geq 0, i \in I_{\lambda+1}, r - r_i \geq 0, r_i \geq 0, i \in I_{\lambda+1} \left. \right\}$, соответственно, то решение задачи λ из последовательности (1) – (5) определяет размещение λ^* шаров. Действительно, вследствие ограничений $r - r_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, \lambda^*$, имеем $F_\lambda(\mathbf{X}^{\lambda*}) \leq \lambda^* r$. Очевидно, что если $F_\lambda(\mathbf{X}^{\lambda*}) = \lambda^* r$, то $r_i = r, i = 1, 2, \dots, \lambda^*$.

Отметим некоторые свойства задачи (6):

1. Область допустимых решений M_λ определяется линейными и квадратичными неравенствами.
2. Вследствие линейности функции цели $F_\lambda(\mathbf{X}^\lambda)$ локальные максимумы задачи (6) достигаются в крайних точках области M_λ .
3. Задача (6) является NP-трудной.

Построение начальных точек

Одним из самых важных этапов решения задачи является построение перспективных начальных точек. С учетом того, что гексагональная решетчатая

Тогда решение задачи сводится к решению конечной последовательности подзадач с линейной функцией цели:

$$F_\lambda(\mathbf{X}^{\lambda*}) = \max_{\mathbf{X}^\lambda \in M_\lambda} F_\lambda(\mathbf{X}^\lambda), \quad \lambda \in I_\gamma = \{1, 2, \dots, \gamma \leq N\} \subseteq I_N, \quad (1)$$

где

$$F_\lambda(\mathbf{X}^\lambda) = \sum_{i=1}^{\lambda} r_i, \quad \mathbf{X}^\lambda = (\mathbf{v}^\lambda, \mathbf{u}^\lambda), \quad \mathbf{v}^\lambda = (r_1, r_2, \dots, r_\lambda), \quad \mathbf{u}^\lambda = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_\lambda), \quad (2)$$

тая упаковка шаров имеет максимальную плотность, ее целесообразно выбрать в качестве начальной при достаточно большом количестве шаров (при $\frac{\rho}{r} \geq 10$). При небольшом количестве шаров $\frac{\rho}{r} < 10$ использование решетчатой упаковки нецелесообразно вследствие ее сильной деформации в процессе решения. В этом случае координаты центров шаров выбираются случайно.

С учетом того, что в математической модели (1) – (5) радиусы шаров являются переменными, при построении начальных точек для задачи (6) предлагается использовать решетчатую упаковку шаров двумя способами. Рассмотрим сначала первый способ.

Формируется набор векторов $(x_a^0, y_b^0, z_c^0) \in \mathbf{R}^3$, $x_a^0 = \frac{ar}{\eta}, y_b^0 = \frac{br}{\eta}, z_c^0 = \frac{cr}{\eta}, a, b, c \in J$. Для удобства переиндексируем векторы $(x_a^0, y_b^0, z_c^0), a, b, c \in J$, следующим образом: $(x_p^0, y_p^0, z_p^0), p \in P = \{0, 1, \dots, \alpha\}$, где $\alpha \leq (\eta + 1)^3 - 1$.

Решетка строится послойно, а в каждом слое – ряд за рядом.

Координаты центров шаров $S_i \subset C, i \in I_\lambda$, радиуса $\tau^p \leq r$, формирующих узлы гексагональных решеток L^p (рис. 1), вычисляются сплгм образом:

$$(\tilde{x}_{1k}^p, \tilde{x}_{2l}^p, \tilde{x}_{3m}^p) = (\pm(k-1)\tau^p + x_p^0, \pm\sqrt{3}(1-l)\tau^p + y_p^0, \pm(m-1)\sqrt{2/3}\tau^p + z_p^0), \quad (8)$$

если нечетные как ряд, так и слой;

$$(\tilde{x}_{1k}^p, \tilde{x}_{2l}^p, \tilde{x}_{3m}^p) = (\pm(k-1)\tau^p + \tau^p + x_p^0, \pm\sqrt{3}(1-l)\tau^p + y_p^0, \pm(m-1)\sqrt{2/3}\tau^p + z_p^0), \quad (9)$$

если ряд четный, а слой нечетный;

$$(\tilde{x}_{1k}^p, \tilde{x}_{2l}^p, \tilde{x}_{3m}^p) = (\pm(k-1)\tau^p + x_p^0, \pm\sqrt{3}(1-l)\tau^p + \tau^p / \sqrt{3} + y_p^0, (m-1)\sqrt{2/3}\tau^p + z_p^0), \quad (10)$$

если четные как ряд, так и слой;

$$(\tilde{x}_{1k}^p, \tilde{x}_{2l}^p, \tilde{x}_{3m}^p) = (\pm(k-1)\tau^p + \tau^p + x_p^0, \pm\sqrt{3}(l-1)\tau^p + \tau^p / \sqrt{3} + y_p^0, (m-1)\sqrt{2/3}\tau^p + z_p^0), \quad (11)$$

если ряд нечетный, а слой четный,

$$k, l, m = 1, 2, \dots,$$

$$(\tilde{x}_{1k}^p)^2 + (\tilde{x}_{2l}^p)^2 + (\tilde{x}_{3m}^p)^2 \leq (\rho - \tau^p)^2, \quad p \in P. \quad (12)$$

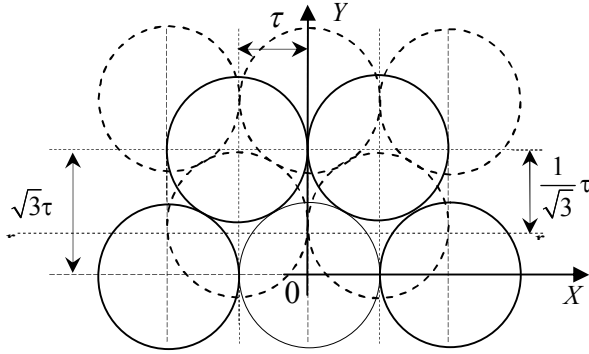


Рис. 1. Гексагональная решетка шаров

Радиус $\tau^p \in [0, r]$ выбирается делением пополам, так что, по крайней мере, λ шаров радиуса τ^p упаковываются в шар C в соответствии с одной из гексагональных решеток L^p , $p \in P$.

Начальное значение радиуса – $\tau_1^p = r$, $p \in P$. Если существует p , такое что число шаров $\lambda_1^p \geq \lambda$, упакованных с помощью гексагональной решеткой L^p для $\tau^p = \tau_1^p$, $p \in P$, тогда задача (6) решена. В противном случае, выбираются $\tau_2^p = \tau_1^p / 2$, $p \in P$, и согласно (8) – (11) вычисляются координаты центров λ_2^p шаров. Если $\lambda_2^p \geq \lambda$, то $\tau_3^p = (\tau_2^p + \tau_1^p) / 2$, иначе $\tau_3^p = \tau_2^p / 2$, $p \in P$. По формулам (8) – (11) вычисляются координаты центров λ_3^p шаров и т.д. Процесс продолжается до тех пор, пока не выполнится неравенство $|\tau_i^p - \tau_{i-1}^p| < \varepsilon > 0$, $p \in P$. Выберем $\tau^p = \min\{\tau_{i-1}^p, \tau_i^p\}$, $p \in P$. И, наконец, расположим радиусы τ^p , $p \in P$, в убывающем порядке $\tau^{p_1} \geq \tau^{p_2} \geq \dots \geq \tau^{p_\alpha}$ и возьмем τ^{p_j} , $j \in J_\xi = \{1, 2, \dots, \xi \leq 100\}$. Точки

$$X^{p_j} = (\tau^{p_j}, \tau^{p_j}, \dots, \tau^{p_j}, \mathbf{u}_1^{p_j}, \mathbf{u}_2^{p_j}, \dots, \mathbf{u}_\lambda^{p_j}) \in M_\lambda, \quad j \in J_\xi,$$

где $\mathbf{u}_1^{p_j}, \mathbf{u}_2^{p_j}, \dots, \mathbf{u}_\lambda^{p_j}$ вычисляются согласно (8) – (11), выбираются для построения начальных точек для задачи (6).

Во втором способе построения координаты центров шаров $S_i \subset C$, $i \in I_\lambda$, вычисляются также по формулам (8) – (11), однако при этом $\tau^p = r$. Для всех (x_p^0, y_p^0, z_p^0) , $p \in P$, определяется максимальное количество шаров $\tilde{\kappa} < \lambda$, координаты центров которых (x_k, y_k, z_k) , $k = 1, 2, \dots, \tilde{\kappa}$, удовлетворяют условиям (12).

Затем вычисляется $\sigma = \lambda - \tilde{\kappa}$ возможных местоположений шаров $S_{\tilde{\kappa}+1}, S_{\tilde{\kappa}+2}, \dots, S_\lambda$ радиусов $r_{\tilde{\kappa}+1}, r_{\tilde{\kappa}+2}, \dots, r_\lambda < r$ соответственно в шаре C . Для этого решается σ задач поиска максимальных радиусов шаров $S_{\tilde{\kappa}+1}, S_{\tilde{\kappa}+2}, \dots, S_\lambda$. Для решения задачи поиска максимального радиуса $r_{\tilde{\kappa}+1}$ шара $S_{\tilde{\kappa}+1}$ вычисляются его координаты центра при условии, что он касается границ четверки шаров вида (S_k, S_l, S_m, S_t) , (C, S_l, S_k, S_m) ,

$k < l < m < t = 1, 2, \dots, \tilde{\kappa}$. Для этого решаются системы следующего вида:

$$\begin{cases} (x_k - x_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (y_k - y_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (z_k - z_{\tilde{\kappa}+1})^2 - (r + r_{\tilde{\kappa}+1})^2 = 0 \\ (x_l - x_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (y_l - y_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (z_l - z_{\tilde{\kappa}+1})^2 - (r + r_{\tilde{\kappa}+1})^2 = 0 \\ (x_m - x_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (y_m - y_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (z_m - z_{\tilde{\kappa}+1})^2 - (r + r_{\tilde{\kappa}+1})^2 = 0 \\ (x_t - x_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (y_t - y_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (z_t - z_{\tilde{\kappa}+1})^2 - (r + r_{\tilde{\kappa}+1})^2 = 0 \end{cases} \quad (13)$$

$$\begin{cases} (x_k - x_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (y_k - y_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (z_k - z_{\tilde{\kappa}+1})^2 - (r + r_{\tilde{\kappa}+1})^2 = 0 \\ (x_l - x_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (y_l - y_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (z_l - z_{\tilde{\kappa}+1})^2 - (r + r_{\tilde{\kappa}+1})^2 = 0 \\ (x_m - x_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (y_m - y_{\tilde{\kappa}+1})^2 + (z_m - z_{\tilde{\kappa}+1})^2 - (r + r_{\tilde{\kappa}+1})^2 = 0 \\ x_{\tilde{\kappa}+1}^2 + y_{\tilde{\kappa}+1}^2 + z_{\tilde{\kappa}+1}^2 - (\rho - r_{\tilde{\kappa}+1})^2 = 0 \end{cases} \quad (14)$$

относительно $x_{\tilde{\kappa}+1}, y_{\tilde{\kappa}+1}, z_{\tilde{\kappa}+1}, r_{\tilde{\kappa}+1}$ и выбирается решение той системы, которая соответствует максимальному значению радиуса $r_{\tilde{\kappa}+1}$. Аналогичным образом, определяются координаты центров и радиусы шаров $S_{\tilde{\kappa}+2}, S_{\tilde{\kappa}+3}, \dots, S_\lambda$. При этом учитывается, что они не могут занять место ранее размещенных шаров. Значения координат (x_k, y_k, z_k) , $k = 1, 2, \dots, \tilde{\kappa}$, и решения систем (13) – (14) для всех шаров $S_{\tilde{\kappa}+1}, S_{\tilde{\kappa}+2}, \dots, S_\lambda$ дают начальную точку для задачи (6).

Рассмотрим третий способ формирования начальных точек. Выбор случайных начальных точек $\tilde{X}^j = (\tilde{r}_1^j, \tilde{r}_2^j, \dots, \tilde{r}_\lambda^j, \tilde{\mathbf{u}}_1^j, \tilde{\mathbf{u}}_2^j, \dots, \tilde{\mathbf{u}}_\lambda^j) \in M_\lambda$, $j \in J_\xi = \{1, 2, \dots, \xi \leq 100\}$, осуществляется в соответствии со следующим алгоритмом.

1. Выберем начальные значения радиусов

$r_1 = r_2 = \dots = r_\lambda = r$ шаров.

2. Выберем случайно начальное значение $\mu_1 \in [0, \rho - r]$, $\theta_1 \in [-\pi/2, \pi/2]$ и $\varphi_1 \in [-\pi, \pi]$ в сферической системе координат и вычислим координаты центра шара S_1 по следующим формулам ($i = 1$):

$$\begin{aligned} x_i &= \mu_i \cdot \sin \theta_i \cos \varphi_i, \\ y_i &= \mu_i \cdot \sin \theta_i \sin \varphi_i, \\ z_i &= \mu_i \cdot \cos \theta_i. \end{aligned} \quad (15)$$

3. Положим $t = 0$, $r_2 = 0.9^t r$.

4. Выберем значения $\mu_2 \in [0, \rho - r]$, $\theta_2 \in [-\pi/2, \pi/2]$ и $\varphi_2 \in [-\pi, \pi]$ и вычислим координаты центра шара S_2 ($i = 2$) в соответствии с формулами (15).

5. Если $\Phi_{12}(r, r_2, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) \geq 0$, перейдем к пункту 6. В противном случае, увеличим t на 1, возьмем $r_2 = 0.9^t r$ и возвратимся к пункту 4.

6. Положим $i = 3$.

7. Зададим $t = 0$, $r_i = 0.9^t r$.

8. Обнулیم счетчик попыток $c = 0$.

9. Выберем значения $\mu_i \in [0, \rho - r]$, $\theta_i \in [-\pi/2, \pi/2]$ и $\varphi_i \in [-\pi, \pi]$ и вычислим координаты центра шара S_i в соответствии с формулами (15).

10. Если $\Phi_{li}(r_i, r_i, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_i) \geq 0$ для всех $l = 1, 2, \dots, i-1$, то перейдем к пункту 13.

11. Увеличим c на 1.

12. Если $c = 10000$, то увеличим t на 1, выберем $r_i = 0.9^t r$ и возвратимся к пункту 8. В противном случае, возвратимся к пункту 9.

13. Если $i = \lambda$, то все круги упакованы. В противном случае, увеличим i на 1 и возвращаемся к пункту 7.

Выводы

Для решения задачи упаковки конгруэнтных шаров в шаре предложено несколько способов построения стартовых точек. Выбор способа зависит от количества шаров. Учитывается, что радиусы шаров являются переменными. Таким образом, с одной стороны, используется наиполнейшая гексагональная решетчатая упаковка шаров, а с другой стороны, предоставляется возможность гибко управлять радиусами, что позволяет получить перспективные стартовые точки для решения задачи.

Эта работа поддержана грантом УНТЦ №5710.

Список литературы

1. Conway J.H. *Sphere Packings, Lattices, and Groups* / J.H. Conway, N.J.A. Sloane. – New York: Springer-Verlag, 1999. – 703 p.
2. Sutou A. *Global Optimization Approach to Unequal Sphere Packing Problems in 3D* / A. Sutou, Y. Day // *Journal of Optimization Theory and Applications*. – 2002. – V. 114(3). – P. 671-694.
3. Hales T.C. *A proof of the Kepler Conjecture* / T.C. Hales // *Ann. Math.* – 2005. – T. 162(1). – P. 065-1185.
4. Hifi M. *A Literature Review on Circle and Sphere Packing Problems: Models and Methodologies* / M. Hifi, R. M'Hallah // *Advances in Operations Research*. – 2009. – V. 2009. – 22 p. (doi:10.1155/2009/150624).

Поступила в редколлегию 30.04.2013

Рецензент: д-р техн. наук, проф. И.В. Гребенник, Харьковский национальный университет радиоэлектроники, Харьков.

ПОБУДОВА ПОЧАТКОВИХ ТОЧОК ДЛЯ ВИРІШЕННЯ ЗАВДАННЯ УПАКОВКИ КОНГРУЕНТНИХ КУЛЬ В КУЛІ

Г.Н. Яськов

У статті розглядається задача упаковки конгруентних куль заданого радіусу в кулі більшого радіусу. Наведено математичну модель задачі, яка ґрунтується на збільшенні кількості змінних, та описано її основні властивості. Запропоновані три різні способи побудови початкових точок. За великої кількості куль початкові точки формуються відповідно до ґратчастої упаковки куль. Описано два способи побудови початкових точок, в яких використовується ґратчаста упаковка. Третій спосіб побудови початкових точок ґрунтується на випадковому виборі та може застосовуватися, коли кількість куль невелика.

Ключові слова: упаковка, куля, математична модель, гексагональні ґрати, початкова точка.

CONSTRUCTION OF INITIAL POINTS FOR DECISION OF TASK OF PACKING OF CONGRUENT BALLS IN BALL

G.N. Yas'kov

The paper considers the problem of packing congruent solid spheres of given radius into a ball of larger radius. A mathematical model of the problem based on increasing the number of variables is given and its basic properties are described. Three different ways to construct the starting points are constructed. With a large number of spheres, starting points are established in accordance with the lattice packing of spheres. Described are two ways of constructing the initial points that use a lattice packing. The third method of constructing the initial points is based on random choice and can be used when a small number of balls is given.

Keywords: packing, ball, mathematical model, hexagonal grate, initial point.