

УДК 519.85

О.М. Хлуд¹, Т.Е. Романова², П.И. Стецюк³¹ ІПМаш ім. А.М.Підгорного НАН України, м. Харків, Україна, khlud.olga@gmail.com² ІПМаш ім. А.М.Підгорного НАН України, м. Харків, Україна, sherom@kharkov.ua³ Інститут кібернетики ім. В.М.Глушкова НАН України,
м. Київ, Україна, tarom27@yahoo.com

О ДВУХ ЗАДАЧАХ ОПТИМАЛЬНОЙ УПАКОВКИ ГОМОТЕТИЧЕСКИХ ЭЛЛИпсоИДОВ

Рассматриваются две задачи упаковки гомотетичных одинаково ориентированных эллипсоидов: в прямоугольном параллелепипеде минимального объема и в эллипсоиде с минимальным коэффициентом гомотетии. Строятся математические модели в виде задач нелинейного программирования. Предлагается два подхода к поиску эффективных локально оптимальных решений. Первый подход основан на α -алгоритме Шора. Второй подход использует гомотетические преобразования эллипсоидов, и оптимизационную процедуру, позволяющую свести задачу с большим числом неравенств к последовательности задач с меньшим числом неравенств. Предлагается алгоритм доупаковки. Приводятся результаты численных экспериментов.

ГОМОТЕТИЧНІ ЕЛЛІПСОІДИ, УПАКОВКА, Φ -ФУНКЦІЇ, R -АЛГОРИТМ ШОРА, НЕЛІНІЙНА ОПТИМІЗАЦІЯ

Введение

Несмотря на то, что задача упаковки шаров давно является предметом интенсивных теоретических и практических исследований, интерес к исследованию задачи упаковки эллипсоидов возрос лишь в последние несколько лет. Долгое время при моделировании размещаемые эллипсоиды не ограничивали контейнером. Основное внимание уделялось анализу плотности трехмерной упаковки. Оптимизационные процедуры, как правило, не использовались. Класс задач упаковки эллипсоидов имеет широкий спектр научных и практических применений. В частности, при разработке высокопрочных керамических материалов, выращивании кристаллов, моделировании структуры жидкостей, кристаллов и стекла, моделировании движения и прессования сыпучих веществ, в термодинамике при переходе жидкостей в кристаллическую форму, в робототехнике, ядерной физике, а так же в современной биологии при моделировании размещения хромосом в ядрах человеческих клеток.

Многие публикации посвящены решению данного класса задач (см., например, [1–4]).

В данной работе рассматривается оптимизационная задача упаковки заданного набора гомотетичных одинаково ориентированных эллипсоидов в контейнере (прямоугольном параллелепипеде минимального объема или эллипсоиде с минимальным коэффициентом гомотетии). Предлагаются конструктивные средства математического моделирования, учитывающие особенности задачи, и эффективные алгоритмы поиска допустимых и локально-оптимальных решений.

1. Постановка задачи

Имеется набор гомотетичных одинаково ориентированных эллипсоидов E_i , $i \in I_N = \{1, 2, \dots, N\}$, заданных параметрами a_i , b_i , c_i в собственной системе координат O_{ixy} . Полагаем, что начало

собственной системы координат находится в центре его симметрии. Положение E_i в пространстве R^3 определяется переменным вектором трансляции $v_i = (x_i, y_i, z_i) \in R^3$, где R^3 — евклидово пространство.

В качестве контейнера Ω , характеризующегося вектором переменных метрических характеристик p , рассматривается либо прямоугольный параллелепипед P переменной длины $2A$, ширины $2B$ и высоты $2C$, т.е. $p = (A, B, C)$, либо эллипсоид E , заданный параметрами A , B , C в фиксированной системе координат $Oxyz$ с переменным коэффициентом гомотетии λ , т.е. $p = (\lambda)$.

В зависимости от вида контейнера рассматриваются следующие функции цели: $F = A \cdot B \cdot C$, если $\Omega \equiv P$; $F = \lambda$, если $\Omega \equiv E$.

Задача. Упаковать набор одинаково ориентированных гомотетичных эллипсоидов $\{E_i(u_i), i \in I_N\}$, в контейнер Ω так, чтобы функция цели F достигла своего минимального значения.

2. Математическая модель

Основными ограничениями поставленной задачи являются:

— непересечение эллипсоидов, т.е.

$$\text{int } E_i(v_i) \cap \text{int } E_j(v_j) = \emptyset, \quad i < j \in I_N, \quad (1)$$

— включение эллипсоида в область размещения, т.е.

$$E_i(v_i) \subset \Omega \Leftrightarrow \text{int } E_i(v_i) \cap \text{int } \Omega^* = \emptyset, \quad i \in I_N, \quad (2)$$

где $\Omega^* = R^3 \setminus \text{int } \Omega$.

Как известно [5], конструктивным средством математического моделирования ограничений (1), (2) является метод Φ -функций Стояна [6]. В терминах Φ -функций ограничение (1) имеет вид $\Phi_{ij}(v_i, v_j) \geq 0$, где

$$\Phi_{ij}(v_i, v_j) = \frac{(x_j - x_i)^2}{(a_i + a_j)^2} + \frac{(y_j - y_i)^2}{(b_i + b_j)^2} + \frac{(z_j - z_i)^2}{(c_i + c_j)^2} - 1 \quad (3)$$

— Φ -функция для эллипсоидов $E_i(v_i)$ и $E_j(v_j)$, а ограничение (2) описывается неравенством $\Phi_i(v_i) \geq 0$, где $\Phi_i(v_i)$ — Φ -функция для эллипсоида $E_i(v_i)$ и объекта Ω^* . При этом: если $\Omega \equiv P$, то

$$\Phi_i(v_i) = \min_{k=1,\dots,6} \chi_k(v_i), \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} \chi_1(v_i) &= -x_i + A - a_i, & \chi_2(v_i) &= -y_i + B - b_i, \\ \chi_3(v_i) &= -z_i + C - c_i, & \chi_4(v_i) &= x_i + A - a_i, \\ \chi_5(v_i) &= y_i + B - b_i, & \chi_6(v_i) &= z_i + C - c_i; \end{aligned}$$

если $\Omega \equiv E$, то

$$\Phi_i(v_i) = 1 - \frac{(x_i)^2}{(\lambda A - a_i)^2} - \frac{(y_i)^2}{(\lambda B - b_i)^2} - \frac{(z_i)^2}{(\lambda C - c_i)^2}, \quad (5)$$

при условии, что E_i и E гомотетичны.

Математическая модель поставленной задачи может быть представлена так:

$$\min F(u), \text{ s.t. } u \in W, \quad (6)$$

$$W = \{u \in R^\sigma : \Phi_{ij}(v_i, v_j) \geq 0, \Phi_i(v_i) \geq 0, \zeta \geq 0\}, \quad (7)$$

где $u = (p, v_1, \dots, v_N)$ — вектор переменных, $p = (A, B, C)$, если $\Omega \equiv P$, $p = (\lambda)$, если $\Omega \equiv E$, R^σ — арифметическое евклидовое пространство размерности σ , $\zeta \geq 0$ — система дополнительных ограничений на метрические характеристики контейнера Ω .

Задача (6)-(7) является многоэкстремальной задачей нелинейного программирования, где целевая функция линейна или квадратична, а множество допустимых решений задается с использованием квадратичных функций (3), (5) и кусочно-линейных функций (4).

3. Методы поиска локальных экстремумов

Для поиска локальных минимумов задачи (6)-(7) используется два подхода. Первый алгоритм основан на использовании r -алгоритма Шора [7, 8]. В основе второго — метод мултистарта и оптимизационная процедура, включающая поиск допустимых стартовых точек и локальную оптимизацию, которая является развитием алгоритмов, предложенных в статьях [9-10]. В качестве локально-оптимального решения выбирается наилучший из полученных локальных экстремумов. Рассмотрим каждый из алгоритмов подробнее.

Алгоритм 1

Задаче оптимальной упаковки эллипсоидов в прямоугольном параллелепипеде $\Omega \equiv P$ соответствует следующая задача нелинейного программирования:

найти

$$F^* = \min_{A, B, C, x, y, z} A \cdot B \cdot C, \quad (8)$$

при ограничениях

$$\frac{(x_i - x_j)^2}{(a_i + a_j)^2} + \frac{(y_i - y_j)^2}{(b_i + b_j)^2} + \frac{(z_i - z_j)^2}{(c_i + c_j)^2} \geq 1, \quad (9)$$

при $1 \leq i < j \leq N$

$$-A \leq x_i - a_i, \quad x_i + a_i \leq A, \quad -B \leq y_i - b_i, \quad y_i + b_i \leq B,$$

$$-C \leq z_i - c_i, \quad z_i + c_i \leq C, \quad i = 1, \dots, N, \quad (10)$$

где $x = (x_1, \dots, x_N)$, $y = (y_1, \dots, y_N)$, $z = (z_1, \dots, z_N)$, $A > 0$, $B > 0$, $C > 0$.

С помощью негладких штрафов задача (8)-(10) сводится к задаче безусловной минимизации негладкой функции

$$\min_{A, B, C, x, y, z} \{f(A, B, C, x, y, z) = A \cdot B \cdot C + \Phi_p(A, B, C, x, y, z)\}, \quad (11)$$

где штрафная негладкая функция $\Phi_p(A, B, C, x, y, z)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \Phi_p(A, B, C, x, y, z) &= P_1 F_1(x, y, z) \\ &+ P_2 F_2(A, B, C, x, y, z) \end{aligned} \quad (12)$$

Тут P_k — положительные штрафные коэффициенты, $k = 1, 2$, а функции $F_1(x, y, z)$ и $F_2(A, B, C, x, y, z)$ определяются так:

$$\begin{aligned} F_1(x, y, z) &= \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \max\{0, \\ &\quad -\frac{(x_i - x_j)^2}{(a_i + a_j)^2} - \frac{(y_i - y_j)^2}{(b_i + b_j)^2} - \frac{(z_i - z_j)^2}{(c_i + c_j)^2} + 1\} \\ F_2(A, B, C, x, y, z) &= \sum_{i=1}^N \max\{0, -x_i - A + a_i\} \\ &+ \sum_{i=1}^N \max\{0, -y_i - B + b_i\} + \sum_{i=1}^N \max\{0, -z_i - C + c_i\} \\ &+ \sum_{i=1}^N \max\{0, x_i - A + a_i\} + \sum_{i=1}^N \max\{0, y_i - B + b_i\} \\ &+ \sum_{i=1}^N \max\{0, z_i - C + c_i\}. \end{aligned}$$

Использование в (12) штрафных коэффициентов P_k , $k = 1, 2$, позволяет учесть большую точность для выполнения квадратичных ограничений (9) и меньшую точность для выполнения линейных ограничений (10). Это дает возможность рационально управлять нахождением близких к предельным экстремальным точкам из множества допустимых решений в задаче (8)-(10).

Алгоритм поиска наилучшего решения задачи (8)-(10) заключается в следующем. Для заданного набора стартовых точек осуществляется поиск локальных минимумов задачи (11) с помощью модификации r -алгоритму [7]. Лучший из локальных минимумов функции $f(A, B, C, x, y, z)$, для которого штрафная функция $\Phi_p(A, B, C, x, y, z)$ близка к нулю, принимается в качестве $(A_r, B_r, C_r, x_r, y_r, z_r)$ — решения задачи (8)-(10). Ему соответствует лучшее (рекордное) значение функции цели $F_r = A_r + B_r + C_r$ — наименьший объем контейнера, который реализуется для его длины A_r , ширины B_r и высоты C_r . Стартовые точки генерируются случайным образом в контейнере с размерами (A_r, B_r, C_r) , которые последовательно уточняются по мере нахождения лучшего локального минимума.

Задаче оптимальной упаковки эллипсоидов в эллипсоиде $\Omega \equiv E$ соответствует следующая задача нелинейного программирования: найти

$$F^* = \min_{\lambda, x, y, z} \lambda, \quad (13)$$

при ограничениях

$$\frac{(x_i - x_j)^2}{(a_i + a_j)^2} + \frac{(y_i - y_j)^2}{(b_i + b_j)^2} + \frac{(z_i - z_j)^2}{(c_i + c_j)^2} - 1 \geq 0, \quad (14)$$

$$1 \leq i < j \leq N,$$

$$1 - \frac{(x_i)^2}{(\lambda A - a_i)^2} - \frac{(y_i)^2}{(\lambda B - b_i)^2} - \frac{(z_i)^2}{(\lambda C - c_i)^2} \geq 0, \quad (15)$$

$$i = 1, \dots, N,$$

где $x = (x_1, \dots, x_N)$, $y = (y_1, \dots, y_N)$, $z = (z_1, \dots, z_N)$, $\lambda \geq 0$, $A, B, C > 0$ — константы.

С помощью негладких штрафов задача (13)-(15) сводится к задаче безусловной минимизации негладкой функции

$$\min_{\lambda, x, y, z} \{f(\lambda, x, y, z) = \lambda + \Phi_P(\lambda, x, y, z)\}, \quad (16)$$

где штрафная негладкая функция $\Phi_P(\lambda, x, y, z)$ имеет вид

$$\Phi_P(\lambda, x, y, z) = P_1 F_1(x, y, z) + P_2 F_2(\lambda, x, y, z) + P_3 F_3(\lambda) \quad (17)$$

Тут P_k — положительные штрафные коэффициенты, $k = 1, 2, 3$ а функции $F_1(x, y, z)$, $F_2(\lambda, x, y, z)$ и $F_3(\lambda)$ определяются так:

$$F_1(x, y, z) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \max\{0, \frac{(x_i - x_j)^2}{(a_i + a_j)^2} + \frac{(y_i - y_j)^2}{(b_i + b_j)^2} + \frac{(z_i - z_j)^2}{(c_i + c_j)^2} - 1\},$$

$$F_2(\lambda, x, y, z) = \sum_{i=1}^N \max\{0, \frac{(x_i)^2}{(\lambda A - a_i)^2} + \frac{(y_i)^2}{(\lambda B - b_i)^2} + \frac{(z_i)^2}{(\lambda C - c_i)^2} - 1\},$$

$$F_3(\lambda) = \max\{0, -\lambda\}.$$

Использование в (17) штрафных коэффициентов P_k , $k = 1, 2, 3$, позволяет учесть большую точность для выполнения квадратичных ограничений (14)-(15). Это дает возможность рационально управлять нахождением близких к предельным экстремальным точкам из множества допустимых решений в задаче (13)-(15).

Алгоритм поиска наилучшего решения задачи (14)-(15) заключается в следующем. Для заданного набора стартовых точек осуществляется поиск локальных минимумов задачи (16) с помощью модификации r -алгоритма. Лучший из локальных минимумов функции $f(\lambda, x, y, z)$, для которого штрафная функция к нулю, принимается в качестве — решения задачи (13)-(15). Ему соответствует лучшее (рекордное) значение функции цели $F_r = \lambda_r$ — наименьший коэффициент гомотетии контейнера.

Стартовые точки генерируются случайным образом в контейнере с размерами $(\lambda_r A, \lambda_r B, \lambda_r C)$, которые последовательно уточняются по мере нахождения лучшего локального минимума.

Программная реализация алгоритма выполнена на некоммерческом языке GNU Octave [8]. Программа либо находит один из локальных минимумов в задачи (14)-(15), либо сообщает о невозможности найти допустимую точку для системы ограничений (15). Ядром программы является octave-функция `ralgb5`, которая реализует r -алгоритм с постоянной величиной коэффициента растяжения пространства и адаптивным регулированием шага в направлении нормированного антисубградиента. Это регулирование направленно на увеличение точности поиска минимума функции по направлению в процессе вычислений. При этом, как правило, гарантируется, что среднее (по итерациям) число шагов не превышает двух-трех. Для минимального объема контейнера алгоритм 1 будет аналогичным.

Алгоритм 2

Полагаем, что стартовые размеры контейнера Ω_0 достаточно большие и гарантируют размещение эллипсоидов E_i в контейнере. Для контейнера $\Omega \equiv P$ в качестве стартовых параметров выбираем A_0, B_0, C_0 , а для $\Omega \equiv E$ выбираем стартовое значение λ . При этом, не теряя общности, полагаем, что $a_1 \geq a_2 \geq \dots \geq a_{N-1} \geq a_N$.

Пусть коэффициенты гомотетии λ_i эллипсоидов E_i , $i \in I_N$, являются переменными. Тогда $u = (v, \lambda) \in R^\sigma$ — вектор переменных, где $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_N) \in R^N$.

Шаг 1. Выбираем точку $u^{(0)} = (v^0, \lambda^0)$, где $v_i^0 = (x_i^0, y_i^0, z_i^0) \in \Omega_0$ выбирается случайно, $\lambda^0 = (\lambda_1^0, \dots, \lambda_N^0)$, $\lambda_i^0 = 0$, $i \in I_N$.

В качестве стартовой точки для дальнейшей оптимизации выбираем $u^{(0)}$ и переходим к шагу 2.

Шаг 2. Решаем задачу

$$\max_{u \in W' \subset R^\sigma} \sum_{i=1}^N a_i \lambda_i, \quad (18)$$

$$W' = \{u \in R^\sigma : \Phi_{ij}(u) \geq 0, \Phi_i(u) \geq 0,$$

$$0 \leq \lambda_i \leq 1, j > i, i \in I_N\}. \quad (19)$$

В результате решения задачи (18)-(19) получаем точку глобального максимума $u^{(0)} = (v^{(0)}, \lambda^{(0)})$.

В качестве стартовой точки для дальнейшей оптимизации выбираем $u^{(0)}$ и переходим к шагу 3.

Шаг 3. Решаем задачу (6)-(7). В результате решения получаем точку локального минимума $u^{(3)} = (p^{(3)}, v^{(3)})$.

Шаг 4. В качестве стартовой точки для дальнейшей оптимизации выбираем точку $u^{(3)} = (v^{(3)}, \lambda^{(3)})$ при фиксированных размерах контейнера. Решаем вспомогательную задачу вида

$$\max_{u \in W'' \subset R^\sigma} \sum_{i=1}^N (a_i \lambda_i)^2, \quad (20)$$

$$W'' = \{u \in R^\sigma : \Phi_{ij}(u) \geq 0, \Phi_i(u) \geq 0, \\ a^- \leq a_i \lambda_i \leq a^+, i < j = 1, \dots, N\}, \quad (21)$$

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

В результате решения задачи (20)-(21) получаем точку локального максимума $u^{(4)} = (v^{(4)}, \lambda^{(4)})$.

Шаг 5. Ранжируем по убыванию $\tilde{a}_i = \lambda_i^{(4)} a_i$, $i \in I_N$. Формируем последовательность

$$(i_1, i_2, \dots, i_{N-1}, i_N),$$

такую, что $\tilde{a}_{i_1} \geq \tilde{a}_{i_2} \geq \dots \geq \tilde{a}_{i_{N-1}} \geq \tilde{a}_{i_N}$.

Осуществляем сравнение a_i и $\tilde{a}_{i_j}$: если $\lambda_i^{(4)} \geq 1$, то полагаем $\lambda_{i_j}^{(5)} = 1$, если $\lambda_i^{(4)} < 1$, то полагаем $\lambda_{i_j}^{(5)} = \lambda_i^{(4)}$. Формируем точку $u^{(5)} = (v^{(5)}, \lambda^{(5)})$ и переходим к следующему шагу.

Шаг 6. Стартуя из точки $u^{(5)} = (v^{(5)}, \lambda^{(5)})$, решаем задачу (18)-(19). В результате решения получаем точку глобального максимума $u^{(6)} = (v^{(6)}, \theta^{(6)}, \lambda^{(6)})$. В противном случае переходим к шагу 1.

Стартуя из точки $u^{(6)}$, решаем задачу (6)-(7) и получаем точку локального минимума $u^{(6)} = (p^{(6)}, v^{(6)})$.

Шаг 7. Генерируем случайно точку q_1 . Если $q_1 \notin E_i$, $i \in I_N$, $q_1 \in \Omega$, то в качестве параметров размещения дополнительного эллипсоида с полуосями $a_{q_1} = a_1$, $b_{q_1} = b_1$, $A_{q_1} = A$ и коэффициентом гомотетии $\lambda_{q_1} = \varepsilon$ выбираем точку q_1 .

Стартуя из точки $u^{(7)} = (v^{(6)}, v_{q_1}^0, \lambda_{q_1}^0)$ при фиксированных размерах контейнера решаем следующую вспомогательную задачу:

$$\max_{u \in W \subset R^\sigma} a_{q_1} \lambda_{q_1}, \quad (22)$$

$$W_\lambda = \{u \in R^\sigma : \chi(u) \geq 0, 0 \leq \lambda_{q_1} \leq 1\}, \quad (23)$$

где $u = (v, v_{q_1}, \lambda_{q_1}) \in R^\sigma$, $v = (v_1, \dots, v_N)$,

$$\chi(u) = \min\{\Phi_\tau(u), \Phi_l(u), \tau = 1, \dots, m, l \in I_N\},$$

$$m = 0.5 \cdot N \cdot (N + 1).$$

В результате решения задачи (22)-(23) получаем точку локального максимума

$$u^{(7)} = (v^{(7)}, v_{q_1}^{(7)}, \lambda_{q_1}^{(7)}).$$

Осуществляем поиск $a_j \leq \lambda_{q_1} a_{q_1}$, $b_j \leq \lambda_{q_1} b_{q_1}$, $j \in I_N$. Если такой эллипсоид E_j существует, то принимаем $v_j = v_{q_1}$ по аналогии с алгоритмом, предложенным в работе [9].

Формируем точку: $u^{(7)} = (p^{(6)}, v^{(7)})$. Стартуя из точки $u^{(7)} = (p^{(6)}, v^{(7)})$, решаем задачу (6)-(7). Получаем точку локального минимума $u^{(7)} = (p^{(7)}, v^{(7)})$, причем $u^* = u^{(7)} = (p^*, v^*, \theta^*)$.

С целью минимизации числа нелинейных неравенств, формирующих область допустимых решений в задачах нелинейного программирования вида (6)-(7), предлагается алгоритм, который

позволяет значительно сократить вычислительные ресурсы (время и память).

Алгоритм локальной оптимизации с преобразованием области допустимых решений (LOFRT)

В основе алгоритма лежит оптимизационная процедура LOFRT, предложенная в [10] для задачи оптимального размещения эллипсов и состоит в следующем.

Пусть $u^{(0)} \in W$ — допустимая точка. Около каждого эллипсоида E_i описывается сфера S_i радиуса a_i , $i \in I_N$. Для каждой сферы S_i строится «индивидуальный» кубический контейнер $\Omega_i \supset S_i \supset E_i$, длина стороны которого равна $2 \cdot (a_i + \varepsilon)$, $i \in I_N$. При этом S_i , E_i и Ω_i имеют один и тот же центр (x_i^0, y_i^0, z_i^0) , а стороны Ω_i параллельны соответствующим сторонам Ω (рис. 1). Выбирается $\varepsilon = \sum_{i=1}^N b_i / N$. Далее фиксируется положение каждого индивидуального контейнера Ω_i . Таким образом, эллипсоид E_i может размещаться только внутри индивидуального контейнера Ω_i .

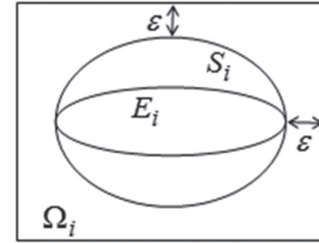


Рис. 1. Формирование индивидуального контейнера

Далее определяется система дополнительных ограничений на вектор трансляции v_i для каждого эллипсоида E_i в виде $\Phi^{S_i, \Omega_i^*} \geq 0$, $i \in I_N$, где

$$\Phi^{S_i, \Omega_i^*} = \min\{-x_i + x_i^0 + \varepsilon, -y_i + y_i^0 + \varepsilon, -z_i + z_i^0 + \varepsilon,$$

$$x_i - x_i^0 + \varepsilon, y_i - y_i^0 + \varepsilon, z_i - z_i^0 + \varepsilon\}$$

$$- \text{phi-функция для } S_i \text{ и } \Omega_i^* = R^3 \setminus \text{int } \Omega_{li}.$$

Заметим, что неравенство $\Phi^{S_i, \Omega_i^*} \geq 0$ эквивалентно системе линейных неравенств $-x_i + x_i^0 + \varepsilon \geq 0$, $-y_i + y_i^0 + \varepsilon \geq 0$, $-z_i + z_i^0 + \varepsilon \geq 0$, $x_i - x_i^0 + \varepsilon \geq 0$, $y_i - y_i^0 + \varepsilon \geq 0$, $z_i - z_i^0 + \varepsilon \geq 0$.

Очевидно, что если контейнеры Ω_i и Ω_j не имеют общих внутренних точек, т.е. $\Phi^{\Omega_i, \Omega_j} \geq 0$, тогда не следует накладывать ограничение на непересечение эллипсоидов E_i и E_j . Например, для эллипсоидов E_1 и E_7 , E_4 и E_8 , E_1 и E_8 (рис. 2).

Далее формируется область допустимых решений

$$W_1 = \{u \in R^\sigma : \Phi_{ij} \geq 0, (i, j) \in \Xi_1, \Phi_i \geq 0, i \in \Xi_2,$$

$$\Phi^{S_i, \Omega_i^*} \geq 0, i \in I_N, l \geq l^0 - \varepsilon, w \geq w^0 - \varepsilon, h \geq h^0 - \varepsilon\},$$

$$\Xi_1 = \{(i, j) : \Phi^{\Omega_i, \Omega_j} < 0\}, \quad \Xi_2 = \{i : \Phi^{\Omega_i, \Omega_i^*} < 0\}.$$

Другими словами, из системы, которая описывает область W , исключаем phi-неравенства для тех пар эллипсоидов, у которых индивидуальные

контейнеры не пересекаются. При этом добавляем вспомогательные неравенства $\Phi^{S_i \Omega_i^*} \geq 0$, описывающие условие включения S_i в соответствующий индивидуальный контейнер Ω_i , $i \in I_N$.

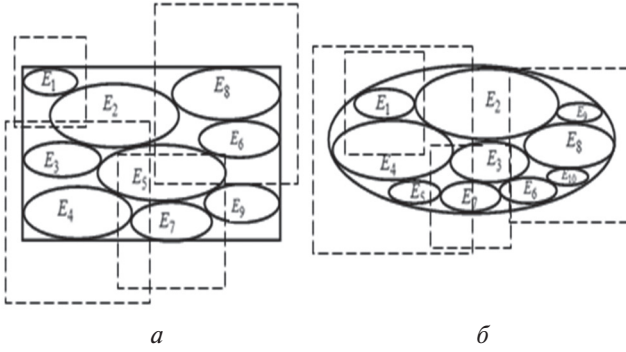


Рис. 2. Размещение эллипсоидов E_i и их индивидуальных контейнеров Ω_i : a — для $\Omega \equiv P$, b — $\Omega \equiv E$

Затем осуществляем поиск точки локального минимума для задачи вида

$$\min_{u_{w_1} \in W_1 \subset R^\sigma} F(u_{w_1}).$$

Точка $u_{w_1}^*$ является стартовой точкой $u^{(1)}$ на второй итерации оптимизационной процедуры. На данном этапе вновь определяются все пары эллипсоидов с непересекающимися индивидуальными контейнерами, формируется соответствующая подобласть W_2 (аналогично W_1) и вычисляется точка локального минимума $u_{w_2}^* \in W_2$, которая используется в качестве стартовой точки $u^{(2)}$ на третьей итерации и т.д.

В общем случае, на k -том шаге, стартуя из точки $u^{(k-1)}$, решается задача вида

$$\min_{u_{w_k} \in W_k \subset R^\sigma} F(u_{w_k}), \quad (24)$$

$$W_k = \{u \in R^\sigma : \Phi_{ij}^k \geq 0, (i, j) \in \Xi_{k1}, \Phi_i^k \geq 0, i \in \Xi_{k2},$$

$$\Phi^{S_i \Omega_i^*} \geq 0, i \in I_N, l \geq l_{w_k}^* - \varepsilon, w \geq w_{w_k}^* - \varepsilon, h \geq h_{w_k}^* - \varepsilon\},$$

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

$$\Xi_{k2} = \{i : \Phi^{\Omega_{ki} \Omega^*} < 0, i \in I_N\}. \quad (25)$$

Итерационная процедура заканчивается, когда $F(u_{w_k}^*) = F(u_{w_{k+1}}^*)$.

Точка $u^* = u^{(k)*} = u_{w_k}^* \in R^\sigma$ является точкой локального минимума задачи (6)-(7), где точка $u_{w_k}^* \in R^\sigma$ является точкой локального минимума на последней итерации.

Таким образом, для $O(n^2)$ пар эллипсоидов в контейнере, LOFRT процедура позволяет осуществлять проверку phi-функций, в общем случае, только для $O(n)$ пар эллипсоидов (это зависит от размеров эллипсоидов и величины ε).

Параметр ε обеспечивает баланс между количеством неравенств в каждой подзадаче нелинейного программирования (24)-(25) и числом подзадач, которые необходимо решить для поиска локально-оптимального решения задачи (6)-(7).

Таким образом, предложенный алгоритм позволяет свести задачу (6)-(7) с количеством неравенств $O(n^2)$ к последовательности задач с количеством неравенств $O(n)$. Это приводит к значительному сокращению вычислительных ресурсов при решении задач нелинейного программирования.

4. Алгоритм задачи доупаковки

Суть задачи доупаковки состоит в следующем. В результате решения оптимизационной задачи упаковки заданного набора $E_i, i \in I_N$, эллипсоидов одним из предложенных выше алгоритмов, получаем локально оптимальное решение с соответствующим размещением эллипсоидов $E_i(u_i^*)$, $i \in I_N$, в контейнере Ω' .

Задача доупаковки. Необходимо заполнить свободное пространство внутри контейнера, $\Omega' \setminus \bigcup_{i=1}^N E_i(u_i^*)$, дополнительным набором непересекающихся гомотетических эллипсоидов заданных размеров. Задача доупаковки может решаться, как с целью разместить заданное число n дополнительных эллипсоидов, так и с целью доупаковать максимально возможное число эллипсоидов из заданного набора.

Алгоритм задачи доупаковки состоит из нескольких этапов.

1) Генерируем множество ζ произвольных точек $r_j = (x_j, y_j, z_j)$, таких что: $r_j \in \Omega'$, $r_j \notin E_i$, $j = 1, \dots, \zeta$, $i \in I_N$.

2) Решаем вспомогательную задачу нелинейной оптимизации, стартуя из каждой точки r_j :

$$\max_{u_r \in W \subset R^\sigma} \lambda_r, \quad (26)$$

$$W_\lambda = \{u_r \in R^\sigma : \Phi_i^E(u_r) \geq 0, \Phi_i^*(u_r) \geq 0,$$

$$\frac{a_i}{a_N} \leq \lambda_r \leq 1, i = 1, \dots, m\} \quad (27)$$

где $u_r = (v_r, \lambda_r)$, $v_r = (x_r, y_r, z_r)$, λ_r — коэффициент гомотетии добавляемого эллипсоида, a_i и a_N — размеры больших полуосей наименьшего и наибольшего из заданных эллипсоидов, $\Phi_i^E(u_r) \geq 0$ — условие непересечения с упакованными эллипсоидами, $\Phi_i^*(u_r) \geq 0$ — условие включения эллипсоида в кон-

тейнер $\Omega' \setminus \bigcup_{i=1}^m E_i(u_i^*)$, m — общее количество упакованных и доупакованных на текущей итерации алгоритма доупаковки эллипсоидов.

В результате решения задачи (26)-(27) получаем множество точек локального максимума u_r^{*j} , $j = 1, \dots, \zeta$.

3) Выбираем такую точку u_r^* из набора u_r^{*j} , которой соответствует $\lambda^* = \max \lambda_r^{*j}$.

4) Из набора эллипсоидов $\{E_i\}$ выбираем «наибольший» эллипсоид E_r , для которого выполняется условие $a_j \geq a_N \lambda^*$ и размещаем эллипсоид E_r с центром в точке v_r^* .

5) Для доупаковки n эллипсоидов повторяем этапы 1)-4) n раз; для доупаковки максимального количества эллипсоидов повторяем этапы 1)-4) до тех пор, пока выполняется условие $\frac{a_1}{a_N} \leq \lambda_r$.

Использование алгоритма доупаковки позволяет повысить коэффициент заполнения контейнера.

5. Численные эксперименты

Чтобы продемонстрировать эффективность предлагаемых методов приведем результаты численных экспериментов. Эксперименты проводились на компьютере Intel(R) Core(TM) i7-3630QM. Для поиска локальных минимумов использовался солвер FindArgMin пакета Wolfram Mathematica 9. Во всех примерах осуществляется поиск 10 локальных минимумов.

В первых двух примерах рассматривается $N=20$ эллипсоидов, имеющих следующие размеры: $(a_1, b_1, c_1) = (30, 10, 10)$, $(a_2, b_2, c_2) = (9, 3, 3)$, $(a_3, b_3, c_3) = (7.5, 2.5, 2.5)$, $\{(a_i, b_i, c_i) = (6, 2, 2), i = 4, \dots, 11\}$, $\{(a_i, b_i, c_i) = (3, 1, 1), i = 12, \dots, 20\}$.

Пример 1. Размещение эллипсоидов $N=20$ в контейнере-параллелепипеде, соответствующее точке локального минимума u^* . Контейнер имеет объем $V^* = 8 \cdot F(u^*)$, $F(u^*) = 3213.92$ при $A^* = 30$, $B^* = 10.713$, $C^* = 10$.

Пример 2. Размещение $N=20$ эллипсоидов в контейнере-эллипсоиде, соответствующее точке локального минимума u^* . Контейнер имеет коэффициент гомотетии $\lambda^* = F(u^*) = 0,32099$ при стартовых размерах контейнера (эллипсоида) $A = 121.5$, $B = 40.5$, $C = 40.5$.

Далее рассматривается упаковка $N=50$ эллипсоидов, имеющих следующие размеры:

$$\begin{aligned} &(a_1, b_1, c_1) = (60, 20, 20), (a_2, b_2, c_2) = (30, 10, 10), \\ &(a_3, b_3, c_3) = (18, 6, 6), \{(a_i, b_i, c_i) = (10.5, 3.5, 3.5), \\ &i = 4, \dots, 8\}, \{(a_i, b_i, c_i) = (9, 3, 3), i = 8, \dots, 13\}, \\ &\{(a_i, b_i, c_i) = (8.25, 2.75, 2.75), i = 14, \dots, 17\}, \\ &\{(a_i, b_i, c_i) = (7.5, 2.5, 2.5), i = 18, \dots, 24\}, \{(a_i, b_i, c_i) = \\ &(6, 2, 2), i = 25, \dots, 40\}, \{(a_i, b_i, c_i) = (3, 1, 1), i = 41, \dots, 50\}. \end{aligned}$$

Пример 3. Размещение $N=50$ эллипсоидов в контейнере $\Omega \equiv P$, соответствующее точке локального минимума u^* . Контейнер имеет объем $V^* = 8 \cdot F(u^*)$, $F(u^*) = 33\,874.5$ при $A^* = 84.686$, $B^* = 20$, $C^* = 20$.

Использование LOFRT процедуры позволило значительно сократить время решения задачи. В частности, для примера 3 время решения без использования алгоритма — 13 часов, с его применением — 5 часов.

Пример 4. Размещение $N=50$ эллипсоидов в контейнере-эллипсоиде, соответствующее точке локального минимума u^* . Коэффициент гомотетии

контейнера имеет значение $\lambda^* = F(u^*) = 0,45775$ при стартовых размерах контейнера (эллипсоида) $A = 160$, $B = 55$, $C = 55$.

Пример 5. Рассматривается упаковка $N=50$ эллипсоидов, имеющих следующие размеры:

$$\begin{aligned} &\{(a_i, b_i, c_i) = (30, 10, 10), i = 1, 2\}, \\ &(a_3, b_3, c_3) = (18, 6, 6), \{(a_i, b_i, c_i) = (10.5, 3.5, 3.5), \\ &i = 4, \dots, 8\}, \{(a_i, b_i, c_i) = (9, 3, 3), i = 8, \dots, 13\}, \\ &\{(a_i, b_i, c_i) = (8.25, 2.75, 2.75), i = 14, \dots, 17\}, \\ &\{(a_i, b_i, c_i) = (7.5, 2.5, 2.5), i = 18, \dots, 24\}, \\ &\{(a_i, b_i, c_i) = (6, 2, 2), i = 25, \dots, 40\}, \\ &\{(a_i, b_i, c_i) = (3, 1, 1), i = 41, \dots, 50\} \end{aligned}$$

Размещение $N=50$ эллипсоидов в $\Omega \equiv P$, соответствующее точке локального минимума u^* . Контейнер имеет объем $V^* = 8 \cdot F(u^*)$, $F(u^*) = 8030.25$ при $A^* = 80.3025$, $B^* = 10$, $C^* = 10$.

Использование алгоритма LOFRT позволило уменьшить время решения задачи для примера 5 на 10 часов (время решения без использования алгоритма — 18 часов, с его применением — 8 часов).

Пример 6. Рассматривается упаковка $N=75$ гомотетичных одинаково ориентированных эллипсоидов, имеющих следующие размеры:

$$\begin{aligned} &\{(a_i, b_i, c_i) = (10.5, 3.5, 3.5), i = 1, \dots, 15\}, \\ &\{(a_i, b_i, c_i) = (9, 3, 3), i = 16, \dots, 30\}, \{(a_i, b_i, c_i) = \\ &(7.5, 2.5, 2.5), i = 31, \dots, 45\}, \{(a_i, b_i, c_i) = (6, 2, 2), \\ &i = 46, \dots, 60\}, \{(a_i, b_i, c_i) = (3, 1, 1), i = 61, \dots, 75\}. \end{aligned}$$

Контейнер имеет объем

$$V^* = 8 \cdot F(u^*), \quad F(u^*) = 4825,16$$

при $A^* = 219.917$, $B^* = 3.5$, $C^* = 6.29$.

Пример 7. Задача доупаковки максимально возможного числа эллипсоидов из заданного набора для Примера 3. Всего удалось доупаковать 590 эллипсоидов. Допустимое размещение эллипсоидов приведено на рис. 3. Значение функции цели, полученное в результате решения задачи совпадает со значением функции цели, полученным в Примере 3.

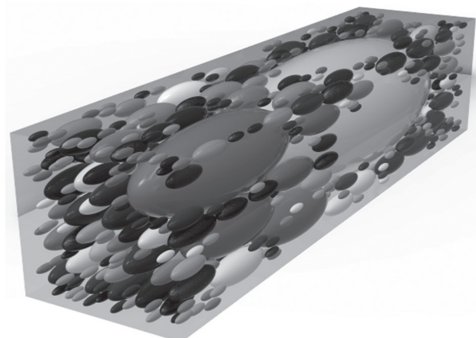


Рис. 3. Допустимое размещение 640 эллипсоидов для Примера 7

Выводы

Рассматриваются две задачи оптимальной упаковки гомотетичных одинаково ориентированных эллипсоидов в виде задач нелинейного программирования. Предложены два метода поиска локально-оптимальных упаковок в прямоугольном параллелепипеде минимального объема и контейнере, имеющем форму эллипсоида, с минимальным коэффициентом гомотетии. Первый метод основан на r -алгоритме Шора. Второй метод использует мултистарт, гомотетические преобразования эллипсоидов и специальную оптимизационную процедуру. Данная процедура сводит задачу нелинейного программирования с большим числом неравенств к последовательности задач нелинейного программирования с меньшим числом неравенств, что значительно сокращает вычислительные ресурсы. Предлагается алгоритм, позволяющий осуществлять «доупаковку» максимально возможного числа эллипсоидов из заданного набора. С использованием предложенных в работе методов можно получить локально-оптимальные и допустимые решения задачи упаковки эллипсоидов в контейнере, имеющем форму прямоугольного параллелепипеда или эллипсоида.

Эффективность предложенных алгоритмов подтверждается результатами численных экспериментов.

Предложенные в работе методы могут быть использованы для построения стартовых точек из области допустимых решений в задаче поиска оптимальных упаковок гомотетичных эллипсоидов, допускающих непрерывные вращения [11].

Список литературы:

1. Uhler C., Wright S. J. Packing Ellipsoids with Overlap // SIAM Review, 55(4):671-706. 2013.
2. Kallrath J. Packing ellipsoids into volume-minimizing rectangular boxes // Journal of Global Optimization. DOI:10.1007/s10898-015-0348-6. 3.
3. Choi Y. K. Continuous collision detection for ellipsoids / Y. K. Choi, J. W. Chang, W. Wang, M. S. Kim, and G. Elber // IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 15(2):311-324, 2009.
4. Lubachevsky B. D., Stillinger F. H. Geometric properties of random disk packings // Journal of Statistical Physics, 60(5-6):561-583. 1990.
5. Bennell J.A., Oliveira J.F. A tutorial in irregular shape packing problem // Journal of the Operational Research Society. 2009. 60:93-105.
6. Chernov N., Stoyan Yu., Romanova T. Mathematical model and efficient algorithms for object packing problem // Computational Geometry: Theory and Applications. 2010. Vol. 43, № 5. P. 533-553.
7. Шор Н.З., Стецюк П.И. Использование модификации r -алгоритма для нахождения глобального минимума полиномиальных функций // Кибернетика и системный анализ. — 1997. — № 4. — С. 28-49.
8. Octave [Электронный ресурс]: <http://www.octave.org>. — Режим доступа: свободный.
9. Стецюк П.И., Романова Т.Є., Субота І.О. NLP-задача упаковки гомотетичних еліпсоїдів у прямокутний контейнер // Теорія оптимальних рішень: зб. наук. пр. — Київ: Ін. кібернетики ім. В. М. Глушкова НАН України. 2014. С. 139-146.
10. Stoyan Y, Pankratov A, Romanova T. Quasi-phi-functions and optimal packing of ellipses. Journal of Global Optimization. 2015. DOI:10.1007/s10898-015-0331-2.
11. Pankratov A., Romanova T., Khud O. Quasi-phi-functions in packing of ellipsoids. Radioelectronics & Informatics, 68:37-42. 2015.

Поступила в редколлегию 7.04.2017