Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет інформаційно-аналітичних технологій та менеджменту
(повна назва)

Кафедра прикладної математики
(повна назва)

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА
Пояснювальна записка

рівень вищої освіти другий (магістерський)

Пакування сферичних об'єктів у сферичному контейнері з урахуванням умов пропорційності
(тема)

Виконав:
здобувач _2_ року навчання, групи _САУм-23-1
Нарбут О.С.
(прізвище, ініціали)
Спеціальність
124 Системний аналіз
(код і повна назва спеціальності)
Тип програми освітньо-професійна
(освітньо-професійна або освітньо-наукова)
Освітня програма
Системний аналіз і управління
(повна назва освітньої програми)
Керівник проф. Яськов Г.М.
(посада, прізвище, ініціали)

Допускається до захисту

Зав. кафедри ПМ ____________ Сидоров М.В.
(підпис) (прізвище, ініціали)

2025 р.

Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет _інформаційно-аналітичних технологій та менеджменту
Кафедра _прикладної математики
Рівень вищої освіти _другий (магістерський)
Спеціальність _124 Системний аналіз
(код і повна назва)
Тип програми _освітньо-професійна
(освітньо-професійна або освітньо-наукова)
Освітня програма _Системний аналіз і управління
(повна назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ:

Зав. кафедри ПМ ____________
(підпис)
"_25_" _листопада_ 2024 р.

ЗАВДАННЯ
НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

здобувачеві _Нарбуту Олександру Сергійовичу
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи Пакування сферичних об'єктів у сферичному контейнері з урахуванням умов пропорційності

затверджена наказом по університету від 22 листопада 2024 р. № 1228 Ст

2. Термін подання здобувачем роботи до екзаменаційної комісії 6 січня 2025 р.

3. Вихідні дані до роботи математична модель задачі пакування сферичних об'єктів у сферичному контейнері, умови пропорційності

4. Перелік питань, що потрібно опрацювати в роботі
   1. Системний аналіз предметної області
   2. Вибір і обґрунтування методу розв'язання
   3. Програмна реалізація
   4. Результати обчислювального експерименту
   5. Аналіз можливих застосувань

5. Перелік графічного матеріалу із зазначенням креслеників, схем, плакатів, комп’ютерних ілюстрацій ____

1. Актуальність теми роботи
2. Постановка задачі
3. Системний аналіз предметної області
4. Метод чисельного аналізу
5. Результати обчислювального експерименту

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№	Назва етапів роботи	Терміни виконання етапів роботи	Примітка
1	Підбір та вивчення технічної літератури за темою роботи	25 листопада – 1 грудня 2024 р.	виконано
2	Вибір та обґрунтування методу	2 – 8 грудня 2024 р.	виконано
3	Розробка алгоритму і програми	9 – 22 грудня 2024 р.	виконано
4	Проведення аналітичних досліджень та розрахунків	23 – 29 грудня 2024 р.	виконано
5	Робота над текстом пояснювальної записки	30 грудня 2024 р. – 9 січня 2025 р.	виконано
6	Представлення роботи на рецензію в ЕК	10 січня 2025 р.	виконано

Дата видачі завдання _25_ листопада 2024 р.

Студент ___________________________________
(підпис)

Керівник роб оти __________________ _проф. Яськов Г.М.______________
(підпис) (посада, прізвище, ініціали)

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка: 72 с., 2 табл., 8 рис., 1 дод., 26 джерел.

ГЕОМЕТРИЧНЕ ПРОЄКТУВАННЯ, ЗМІШАНА ЗАДАЧА НЕЛІНІЙНОГО ПРОГРАМУВАННЯ, ЗАДАЧА ПАКУВАННЯ, СФЕРИЧНИЙ ОБ'ЄКТ, СФЕРИЧНИЙ КОНТЕЙНЕР, УМОВИ ПРОПОРЦІЙНОСТІ.

Об'єкт дослідження – процес пакування сферичних об'єктів у сферичний контейнер.

Мета роботи – поліпшення ефективності розв'язання оптимізаційної задачі пакування сферичних об'єктів у сферичний контейнер з урахуванням умов пропорційності за допомогою конструктивних засобів математичного та комп'ютерного моделювання.

Методи дослідження – методи аналітичної та обчислювальної геометрії, метод функцій Стояна, теорія геометричного проєктування та методи нелінійного програмування. У цій кваліфікаційній роботі розроблено та реалізовано алгоритм розв'язання задачі упаковки сферичних об'єктів у сферичний контейнер з урахуванням умов пропорційності. Проведено системний аналіз предметної області. Обрано метод розв'язання задачі з відкритою метричною характеристикою. Розроблено алгоритм розв'язання задачі та здійснено його числову реалізацію. Ефективність розробленого алгоритму перевірено на тестових задачах.

Запропонований підхід може бути використаний для розв'язання широкого спектра задач у різних галузях, включаючи логістику, виробництво та матеріалознавство. Робота також демонструє можливість застосування сучасних методів оптимізації та програмних засобів для розв'язання складних математичних задач.

ABSTRACT

Introductory note: 72 pages, 2 tables, 8 figures, 1 appendix, 26 sources.

GEOMETRIC DESIGN, MIXED NONLINEAR INTEGER PROGRAMMING PROBLEM, PACKING PROBLEM, SPHERICAL OBJECT, SPHERICAL CONTAINER, PROPORTIONALITY CONDITIONS.

Object of research – the process of packing spherical objects into a spherical container.

Purpose of work – improving the efficiency of solving the optimization problem of packing spherical objects into a spherical container considering proportionality conditions using constructive means of mathematical and computer modelling.

Methods of research – methods of analytical and computational geometry, Stoyan's -functions method, geometric design theory, and nonlinear programming methods.

In this qualification work, an algorithm for solving the problem of packing spherical objects into a spherical container considering proportionality conditions is designed and implemented. A system analysis of the subject area is conducted. A method for solving the problem with an open metric characteristic is chosen. An algorithm for solving the problem is developed and its numerical implementation is carried out. The efficiency of the developed algorithm is tested on test problems.

The proposed approach can be used to solve a wide range of problems in various fields, including logistics, manufacturing, and materials science. The work also demonstrates the possibility of applying modern optimization methods and software tools to solve complex mathematical problems.

ЗМІСТ

С.

Перелік скорочень, умовних познак, одиниць і термінів 8

Вступ 9

1 Системний аналіз предметної області та постановка задач дослідження 11

1.1 Системний аналіз задачі пакування сферичних об'єктів у сферичному контейнері з урахуванням умов пропорційності 11

1.2 Аналіз сценаріїв вирішення задачі пакування сферичних об'єктів у сферичному контейнері з урахуванням умов пропорційності 15

1.2.1 Моделі та методи пакування сферичних об'єктів 15

1.2.2 Моделі, що враховують умови пропорційності 19

1.3 Змістовна та формальна постановка задачі 21

1.3.1 Поняття Φ-функції 21

1.3.2 Математична модель задачі пакування куль у сферичному контейнері 23

1.4 Постановка задач дослідження 28

2 Вибір та обґрунтування методу розв'язання 29

2.1 Методи розв'язання задач пакування куль в обмежених контейнерах..... 29

2.2 Вибір методу розв'язання задач MINLP 37

2.3 Блочна оптимізація 39

2.4 Перехід від задачі KP до задачі ODP 42

Висновки за розділом 2 45

3 Програмна реалізація 46

3.1 Опис середовища програмування.. 46

3.2 Алгоритм розв'язання задачі пакування сферичних об'єктів у сферичному контейнері з урахуванням умов пропорційності 47

3.2.1 Основна схема алгоритму 47

3.2.2 Формування мінімального блоку куль 48

3.2.3 Послідовне розміщення блоків куль 49

3.2.4 Розміщення додаткових куль 49

3.3 Опис програми 50
Висновки за розділом 3 53
4 Результати обчислювального експерименту та їх аналіз 55
Висновки за розділом 4 59
Висновки 61
Перелік джерел посилання 63
Додаток А Лістинг програми 66

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ, УМОВНИХ ПОЗНАК, ОДИНИЦЬ І ТЕРМІНІВ

IIPP – Identical Item Packing Problem;

ODP – Open Dimension Problem;

KP – Knapsack Problem;

MINLP – Mixed Integer Non-Linear Problem

IPOPT – Interior Point Optimizer;

LSA – Lubachevsky-Stillinger Algorithm.

ВСТУП

Актуальність теми. У багатьох сферах діяльності, таких як виробничі технології, промисловий дизайн та обчислювальна геометрія, ефективна організація простору та раціональне використання ресурсів мають вирішальне значення. Одним із важливих завдань, що виникають у цьому контексті, є оптимальне розміщення нерівних куль у сферичному контейнері з урахуванням пропорційності. Розв'язання цієї задачі сприяє зменшенню матеріальних витрат, оптимізації логістичних процесів та підвищенню продуктивності в різних галузях. Також створення нових підходів до розв'язання таких задач стимулює розвиток обчислювальної геометрії та математичного моделювання.

Сучасні реалії демонструють дедалі більший попит на інноваційні методи та алгоритми для вирішення проблем, пов'язаних із пакуванням об'єктів. Це пояснюється потребою в ефективніших рішеннях, які дозволяють досягти оптимальних результатів у виробничих процесах, складському господарстві та логістиці. Використання передових технологій математичного моделювання та комп'ютерних обчислень надає можливість не лише підвищити швидкість розрахунків, але й забезпечити їх точність, що є особливо важливим для практичного впровадження.

Проблема пакування нерівних куль у сферичний контейнер перебуває в центрі уваги багатьох наукових досліджень. У цій сфері активно працюють провідні дослідницькі інституції та експерти з оптимізації й геометрії. Вони розробляють нові підходи та алгоритми, які дозволяють ефективно визначати локальні розв'язки й знаходити найкращі варіанти розміщення. Попри значний прогрес, що вже досягнуто, існуючі методики все ще потребують подальшого вдосконалення і врахування додаткових умов для підвищення їх універсальності, швидкодії та адаптивності до різних умов.

Мета і завдання кваліфікаційної роботи. Метою кваліфікаційної роботи є поліпшення ефективності розв'язання оптимізаційної пакування сферичних об'єктів в сферичному контейнері з урахуванням умов пропорційності за допомогою конструктивних засобів математичного та комп'ютерного моделювання. Для досягнення поставленої мети необхідно виконати наступні завдання:

– провести огляд і аналіз сучасного стану задачі пакування сферичних об'єктів у сферичному контейнері з урахуванням умов пропорційності;

– дослідити особливості математичної моделі задачі пакування з урахуванням умов пропорційності;

– розробити алгоритм рішення задачі та провести його чисельну реалізацію;

– розробити програмне забезпечення для реалізації та тестування розроблених моделей і алгоритмів.

Об'єктом дослідження є процес пакування сферичних об'єктів у сферичному контейнері.

Предметом дослідження є засоби математичного моделювання, математичні моделі та методи розв'язання задачі пакування сферичних об'єктів у сферичному контейнері з урахуванням умов пропорційності.

Методи дослідження. У роботі використовуються методи аналітичної та обчислювальної геометрії, а також метод Φ-функцій Стояна для побудови засобів математичного моделювання умов сферичних об'єктів. Для побудови математичної моделі застосовуються Методи геометричного проєктування та нелінійне програмування та – для математичного моделювання та розробки алгоритму.

Публікації. Результати, отримані у кваліфікаційній роботі, було представлено на 13-й Міжнародній науково-технічній конференції Інформаційні системи та технології (м. Харків, Харків, 26 – 28 листопада 2024 року) [1].

1 СИСТЕМНИЙ АНАЛІЗ ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ ТА ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ ДОСЛІДЖЕННЯ

1.1 Системний аналіз задачі пакування сферичних об’єктів у сферичному контейнері з урахуванням умов пропорційності

Задача пакування є класичною проблемою в математиці та оптимізації, яка полягає в оптимальному розташуванні об’єктів у заданому просторі [2]. Це включає різні форми, такі як кулі, куби та інші геометричні фігури. Однією з таких задач є пакування сферичних об’єктів у сферичному контейнері, яка має важливе значення в різних галузях, включаючи хімію, біологію та інженерію. Пакування куль у сферичному контейнері є особливою формою цієї задачі, де важливо забезпечити максимальне використання об’єму контейнера, враховуючи пропорційність між розмірами куль та контейнера. Це вимагає складного математичного аналізу та використання алгоритмів оптимізації для знаходження найбільш ефективного розташування куль.

Потреба в типології задач розкрою та пакування виникла через велику різноманітність цих задач і необхідність систематизації підходів до їх розв’язання. Різноманітність та складність завдань вимагала створення чіткої структури для надання більшого порядку та зрозумілості в їх розв’язанні. G. Waescher та ін. [3] започаткували типологію задач розкрою та пакування (Cutting and Packing), яка систематизує ці задачі. Для цього враховують такі критерії: вимірність (dimensionality), вид розміщення (kind of assignment), асортимент розміщуваних об’єктів (assortment of small items), асортимент контейнерів (assortment of large objects), просторова форма розміщуваних об’єктів (shape of small items). Це дозволяє диференціювати підходи до вирішення задач пакування та забезпечує ефективніше застосування математичних моделей і алгоритмів.

Розрізняють одно-, двох-, тривимірні задачі та задачі з більш ніж трьома незалежними параметрами. Виділяють два типи задач упакування: максимізація (output maximisation) та мінімізація (input minimisation) функції цілі.

У разі максимізації набір менших об'єктів (розміщувані об'єкти) розподіляється серед заданого набору більших об'єктів (контейнери). Усі розміщувані об'єкти мають бути використані, і мета полягає в досягненні максимального значення функції цілі. У випадку мінімізації набір контейнерів є достатнім для всіх розміщуваних об'єктів, і задача полягає у виборі підмножини контейнерів із мінімальною функцією цілі.

Функція цілі може включати витрати, доходи, площу, об'єм тощо. У практичних задачах може виникати необхідність вибору як з множини розміщуваних об'єктів, так і з множини контейнерів, що вимагає використання багатокритеріальних методів вибору.

Розміщувані об'єкти можуть бути ідентичними, слабко неоднорідними або сильно неоднорідними. Ідентичні об'єкти мають однакову форму й розмір. Слабко неоднорідні об'єкти можуть бути згруповані в декілька класів, де елементи ідентичні за формою та розміром. Сильно неоднорідні об'єкти мають унікальну форму й розмір.

Контейнери можуть бути одного або декількох типів. Вони можуть мати фіксовані або змінні розміри, бути ідентичними, слабко або сильно неоднорідними, а також мати різні форми: прямокутні, круглі, конічні тощо. Існують задачі з контейнерами нерегулярної форми, які виходять за межі типології [3].

Виділяють такі типи задач пакування [3]: задача пакування рівних об'єктів (Identical Item Packing Problem – IIPP), задача розміщення (Placement Problem), задача про рюкзак (Knapsack Problem – KP), задача із змінними метричними характеристиками контейнера (Open Dimension Problem – ODP), задача розкрою (Cutting Stock Problem), задача про пакування в контейнери (Bin Packing Problem).

При розміщенні сферичних об'єктів актуальними є перші чотири задачі. Задача IIPP визначає максимальну кількість сферичних об'єктів у заданому наборі контейнерів. У класичній задачі розміщення (Placement Problem) набір сферичних об'єктів є слабко неоднорідним, і максимізують функцію цілі або мінімізують відходи.

Задача KP має справу із сильно неоднорідними сферичними об'єктами, коли не обов'язково розміщувати всі об'єкти. У задачі ODP задіяні усі сферичні об'єкти та є один або декілька контейнерів. Одна або декілька метричних характеристик контейнера є змінним і мінімізуються.

У 1998 році Hales [2, 4] довів, що максимально можлива щільність пакування рівних куль не перевищує $\pi / (3\sqrt{2}) \simeq 0.74$. У 1955 році Rankin встановив верхню межу для щільності в 0.827, а згодом роки Rogers уточнив це значення до 0.7797. Щільність випадкового пакування рівних куль дорівнює приблизно 0.64. Зрозуміло, що щільність пакування нерівних куль буде більшою.

Останнім часом з'являється багато досліджень, що розглядають тривимірні задачі пакування куль у контейнери різної форми [5]. Різноманітні практичні застосування такої моделі досліджуються багатьма вченими залежно від використаного матеріалу, форми контейнера, розміру куль тощо. Пакування рівних (монодисперсних) куль допомагають моделювати канали наноструктурованих пористих матриць, заповнених атомами або молекулами речовини. Властивості отриманих речовин сильно залежать від розташування й щільності частинок.

Такий підхід застосовується в хімічних каталітичних реакторах, колонах для дистиляції та абсорбції газу, а також в ядерних реакторах і теплообмінниках. Інші галузі застосування включають хімічну інженерію, матеріальну фізику і прогнозування властивостей транспортування в газорідких системах [5, 6].

Задачі пакування рівних куль виникають при розробці технологій лиття, де зовнішні фактори, такі як гравітація, псевдозрідження, сегрегація, перегрупування, пружна деформація та інші впливають на щільність і структуру пакування частинок.

Пакування нерівних куль знаходить своє застосування в полідисперсних колоїдних системах, що поширені в природі та промисловості, таких як білки, кров, лімфа, вуглеводи, пектини, а також у вугільній, нафтовій та інших промисловостях [7]. Колоїдна хімія важлива для збагачення корисних копалин, дроблення, флотації та мокрого збагачення руд.

Ці задачі мають важливі застосування в медицині, наприклад, в радіохірургії пухлин і лазерній коагуляції сітківки ока [2, 5]. Вивчення тривимірних задач пакування куль охоплює різні параметри, такі як кількість і розміри куль, типи контейнерів, щільність пакування та пористість. Дослідники приділяють увагу як задачам пакування рівних куль, так і задачам пакування нерівних куль.

Задачі пакування куль різних типорозмірів у визначених пропорціях виникають у ряді галузей. Наприклад, в аерокосмічній інженерії необхідно пакувати компоненти з різними розмірами так, щоб мінімізувати простір та максимізувати функціональність систем. У медицині під час лікування пухлин використовують радіохірургічні установки, де різні101 кулькові маркери повинні розташовуватися у чітко визначених пропорціях для ефективного цільового впливу. У деяких виробничих процесах важливо пакувати кульки-каталізатори різного розміру для забезпечення оптимального хімічного процесу. Наприклад, у нафтовій промисловості для очищення нафти використовують різні каталізатори, які мають бути розташовані у певних пропорціях для максимального ефекту.

В архітектурі та будівництві задачі пакування виникають під час моделювання та проєктування будівельних матеріалів [5]. Зокрема, при створенні бетонних сумішей, в які додаються наночастинки та мікрочастинки різних розмірів для забезпечення максимальної міцності та мінімізації пористості. Це дозволяє уникнути корозії та підвищити довговічність конструкцій.

Суміші наночастинок різних розмірів використовуються для створення композитних матеріалів, де їх пропорційне поєднання підвищує міцність, жорсткість і стійкість до пошкоджень. Наприклад, в одному дослідженні було встановлено, що додавання наночастинок різних розмірів до полімерних матриць значно покращує механічні властивості матеріалу.

Суміші наночастинок різних розмірів використовуються для створення захисних покриттів, які забезпечують кращу адгезію та підвищену стійкість до механічних і хімічних впливів. Наприклад, покриття, що містять наночастинки діоксиду кремнію різних розмірів, демонструють підвищену стійкість до стирання та корозії.

У фармацевтиці наночастинки різних розмірів використовуються для створення лікарських препаратів з контрольованим вивільненням [8]. Використання різних пропорцій наночастинок дає змогу досягти необхідного профілю вивільнення активної речовини, що покращує ефективність лікування.

У сонячних елементах та акумуляторах використання сумішей наночастинок різних розмірів дозволяє підвищити їх ефективність та продуктивність [9]. Наприклад, використання різних типів наночастинок у фотоелектричних елементах дозволяє краще поглинати світло та збільшувати вихід енергії.

Ці приклади демонструють, як важливо враховувати пропорції наночастинок різних розмірів для досягнення оптимальних властивостей матеріалу. Кожен з цих підходів має свої специфічні переваги і недоліки, але всі вони спрямовані на поліпшення кінцевих характеристик матеріалу за рахунок пропорційного розподілу наночастинок.

Таким чином, задачі пакування куль різних типорозмірів у визначених пропорціях є важливими у багатьох галузях, від аерокосмічної інженерії до фармацевтики. Врахування пропорцій та розмірів частинок є ключовим фактором для досягнення бажаних результатів у різних сферах застосування.

1.2 Аналіз сценаріїв вирішення задачі пакування сферичних об’єктів у сферичному контейнері з урахуванням умов пропорційності

1.2.1 Моделі та методи пакування сферичних об’єктів

Залежно від підходу до пакування та припущень, задачі пакування рівних куль можна поділити на регулярні та нерегулярні. Для регулярних моделей координати центрів куль обчислюються згідно з гексагональними ґратчастими шаблонами. Нерегулярні моделі передбачають випадкове розміщення куль або визначення їх місця за допомогою оптимізаційних алгоритмів. Методи, що використовуються для цього включають струшування, вібрацію, постукування та інші техніки.

Моделі пакування також можуть бути статичними, динамічними або їх комбінацією. Найпростішим прикладом статичного моделювання є послідовне додавання куль.

Метод послідовного одноразового розміщення був основою методу, розробленого Tingate і Mueller [5] для задач пакування рівних куль у циліндричний контейнер. Цей метод детермінований і не використовує випадкових розміщень. Якщо діаметр циліндра втричі більший за діаметр кулі, кулі додаються до вже розміщених зверху базового шару, займаючи одну з двох позицій: біля стінки контейнера або всередині. Таким чином, кулі контактують або з двома іншими кулями і стінкою контейнера, або з трьома іншими кулями. Розглядаються лише позиції, стабільні під впливом гравітації. Для інших співвідношень діаметрів додатково досліджуються варіанти розміщення куль, що торкаються тільки однієї кулі й стінки контейнера. Mueller [5] використовує безрозмірний параметр для визначення гравітаційно-стабільних положень куль у циліндрі. Експериментальні результати показують, що метод стає менш точним при значному збільшенні діаметра циліндра відносно діаметра куль.

Stillinger і Lubachevsky запропонували алгоритм LSA [5], який використовує методи молекулярної динаміки для чисельного моделювання фізичного процесу взаємодії куль як джерел силового поля. Процес стиску моделюється як потік гранул, що задається послідовністю дискретних подій: зіткнення частинок між собою і твердими стінками контейнера. LSA дозволяє отримувати «застряглі» стани кругів і куль. За допомогою LSA можна моделювати як зовнішнє стискання, так і внутрішнє розширення частинок, що відбуваються одночасно. Стіни контейнера можуть бути рухомими. Baranaua і Tallarek [5] отримали «застряглі» розміщення нерівних куль за допомогою LSA.

Birgin і Sobral [5] запропонували моделі нелінійного програмування для вирішення задач ODP не тільки для кругів, але й для куль. Автори реалізували фізичну модель для системи N-тіл, яка мінімізує перекриття об'єктів. Задача системи N-тіл полягає у визначенні гравітаційної сили між N частинками в 3D-просторі, де кожна частинка впливає на інші. Приклади такої взаємодії можна знайти у багатьох галузях: небесній механіці, плазмовій фізиці, механіці рідин та імітаційному моделюванні напівпровідникових приладів. Використання цієї стратегії дозволяє розміщувати велику кількість куль у контейнерах різних форм.

Було запропоновано модифікацію LSA-алгоритму для пакування нерівних (полідисперсних) куль. В оригінальному алгоритмі відбувається повільне збільшення розмірів рівних куль, поки коефіцієнт заповнення не стане максимальним. У модифікованій версії радіуси куль зростають пропорційно, що дозволяє досягти оптимальної щільності пакування.

Wang [5] розглядає оптимізаційні моделі для задач пакування нерівних куль у обмеженій 3D області, яка виникає в медицині при плануванні радіопроменевої терапії онкологічних пухлин. Він показує, що такі задачі є NP-складними, а наближений алгоритм дозволяє досягти заданого рівня коефіцієнта заповнення області розміщення.

У роботі Sutou та Dai [5] задача автоматичного проектування радіохірургічного лікування моделюється як задача пакування нерівних куль у заданому багатограннику. Для отримання плану лікування розв'язується задача максимізації суми об'ємів пакуваних куль. Задача формулюється як неопукла оптимізація з квадратичними обмеженнями та лінійною функцією цілі. Для поліпшення алгоритмів застосовуються евристичні підходи, хоча глобальний оптимізаційний підхід ефективний лише для невеликих розмірів задачі.

Kubach та ін. [5] запропонували алгоритми для пакування нерівних куль у кубоїд, розглядаючи задачі 3-D SKP та 3-D SODP. Алгоритми базуються на стратегії попереднього перегляду варіантів пакування та паралельних жадібних алгоритмах. Автори дослідили компроміс між якістю рішень та часом, необхідним для обчислення.

Akeb [5] розробив алгоритм для вирішення 3-D SKP, заснований на комбінації двоетапної стратегії попереднього перегляду варіантів та методу Kubach та ін. Аналогічний метод запропоновано для вирішення 3-D SODP.

Розроблено гібридний алгоритм ELPGD [2] для пакування нерівних куль у великому сферичному контейнері, заснований на методі енергетичного ландшафту з градієнтним спуском.

Li та Ji [2] моделюють гранульовані матеріали як пакування куль у циліндрі, використовуючи спеціальний квазі-динамічний метод для отримання щільно розподілених куль. Farr [2] досліджує коефіцієнти заповнення логнормально розподілених пакувань куль для імітаційного моделювання гранульованих систем.

Soontrapa та Chen [2] використовують пакування куль для моделювання атомів вуглецю, розробляючи адаптивну процедуру випадкового пошуку для мінімізації загальної потенційної енергії конфігурації куль.

Hifi та Yousef [2] розробляють кілька методів для вирішення задач 3-D SKP та 3-D SODP, комбінуючи ітеративні методи, такі як дихотомічний пошук та пошук екстремуму. Вони запропонували гібридну стратегію, що поєднує локальний пошук із інтенсифікацією та диверсифікацією для підвищення ефективності алгоритму.

Таким чином, чисельні методи розв'язання задач пакування куль використовують різні підходи. Точні методи, засновані на таких принципах, як розгалуження та обмеження, мають особливе значення для невеликих прикладів задач. Для більших прикладів часто застосовуються комбінації евристичних і детермінованих технік. Деякі підходи використовують нелінійні моделі оптимізації та застосовують точні або апроксимаційні техніки для отримання локальних рішень. Інші методи базуються на теселяції або апроксимації контейнера за допомогою сітки. Відповідно, задача пакування куль апроксимується як задача бінарної оптимізації для вибору вузлів сітки для центрів куль. Багато підходів комбінують кілька технік. Сайт Eckehard Specht [10] надає приклади контрольних задач з відомими розв'язками та їх об'єктивними значеннями.

У багатьох випадках умова, що всі кулі повністю містяться у заданому контейнері, є занадто жорсткою. Для вивчення властивостей середовищ витягується об’ємна проба (кубоїдний або циліндричний контейнер) для подальшого дослідження. Однак у багатьох випадках отримання такої фізичної проби занадто дорого, тому замість цього слід використовувати математичні моделі. Незважаючи на це, витяг реальної проби призводить до обрізання деяких куль, так що лише частини їх залишаються в пробі.

Різні методи вирішення задач пакування нерівних куль, враховуючи такі аспекти, як точність, обчислювальні витрати та застосування в реальних умовах. Кожен метод має свої переваги та недоліки, що дає змогу вибирати оптимальний підхід для конкретного сценарію. Вибір такого підходу залежить від складності задачі та доступних обчислювальних ресурсів. Застосування чисельних методів у реальних умовах дозволяє не лише підвищити ефективність використання простору, але й відкриває нові можливості для аналізу структурованих та випадкових середовищ.

1.2.2. Моделі, які враховують умови пропорційності

Аналіз сценаріїв вирішення задачі пакування сферичних об’єктів у сферичному контейнері з урахуванням умов пропорційності розкриває додаткові складнощі, які виникають при забезпеченні правильного співвідношення між об’єктами різних розмірів.

Умови пропорційності мають важливе значення в різних галузях, таких як логістика, виробництво та матеріалознавство. Наприклад, у логістиці правильне співвідношення між об'єктами різних розмірів може зменшити витрати на транспортування та зберігання. У виробництві це може підвищити ефективність використання матеріалів та зменшити витрати на виробництво.

У задачах пакування частинок важливим аспектом є забезпечення правильного співвідношення частинок різних розмірів для досягнення максимальної щільності пакування та оптимальних властивостей матеріалу. Різні моделі використовуються для визначення оптимальних пропорцій частинок, враховуючи їх розміри, форму та текстуру [11 – 13].

Модель Андреассена використовується для визначення оптимального співвідношення частинок різних розмірів для досягнення максимальної щільності пакування. Основна ідея моделі полягає в тому, що розподіл розмірів частинок повинен відповідати певній функції, яка забезпечує мінімізацію пустот між частинками. Формула для розподілу розмірів частинок виглядає так:

$$P(D) = \left(\frac{D}{D_{\max}} \right)^{q},$$

де $P(D)$ – відсоток частинок з діаметром менше D,

$D_{\max}$ – максимальний діаметр частинок,

q – параметр, який визначає форму кривої розподілу

Модель Фуллера-Томпсона також використовується для пропорціонування бетонних сумішей. Вона базується на ідеї, що суміш частинок різних розмірів може досягти максимальної щільності пакування, якщо розміри частинок відповідають певному розподілу. Формула для розподілу розмірів частинок у цій моделі

$$P(D) = \left(\frac{D}{D_{\max}} \right)^{0.5}.$$

Це означає, що розподіл розмірів частинок повинен відповідати квадратному кореню відносного діаметра

Модель Лоусона враховує вплив форми та текстури частинок на щільність пакування. Вона дозволяє визначити оптимальне співвідношення частинок різних розмірів з урахуванням їх форми та текстури. Ця модель використовує коефіцієнти форми та текстури для коригування розподілу розмірів частинок, що дозволяє досягти більш щільного пакування.

Описані моделі пакування частинок з умовами пропорційності, можуть використовуватися для оптимізації складу композитних матеріалів, таких як полімерні композити, керамічні матеріали та металеві сплави. Вони допомагають досягти високої щільності пакування частинок, що покращує механічні властивості матеріалів.

У фармацевтичній промисловості моделі упаковки частинок використовуються для розробки таблеток та інших лікарських форм. Оптимальне пакування частинок активних інгредієнтів та допоміжних речовин забезпечує рівномірний розподіл компонентів та покращує стабільність продукту У порошковій металургії ці моделі допомагають визначити оптимальний склад порошків для виготовлення деталей з високою щільністю та міцністю. Це важливо для виробництва деталей для автомобільної, авіаційної та інших галузей промисловості.

1.3 Змістовна та формальна постановка задачі

1.3.1 Поняття Φ-функції

Нехай задано обмежені замкнені об’єкти $A, B \subset \mathbb{R}^3$. У разі розташування об’єктів A та B один відносно іншого можливі такі ситуації:

а) об’єкти A та B перетинаються, тобто $\operatorname{int} A \cap \operatorname{int} B \neq \varnothing$, де $\operatorname{int} A$ – внутрішність множини A;

б) об’єкти A та B не мають спільних точок, тобто $A \cap B = \varnothing$ й об’єкти знаходяться на деякій відстані один від іншого;

в) об’єкти A та B дотикаються, тобто $\operatorname{fr} A \cap \operatorname{fr} B \neq \varnothing$ та $\operatorname{int} A \cap \operatorname{int} B = \varnothing$, де $\operatorname{fr} A$ – межа множини A.

Для опису цих ситуацій використовують Φ-функцію [14 – 17].

Неперервна, всюди визначена функція $\Phi^{AB}:\mathbb{R}^6 \to \mathbb{R}^1$ називається Φ-функцією об'єктів $A(u_A)$ та $B(u_B)$, де u_A та u_B – параметри розміщення об'єктів A та B відповідно, якщо вона задовольняє такі вимоги:

$$
\begin{aligned}
&\Phi^{AB}(u_A,u_B) < 0, \text{ якщо } \operatorname{int} A(u_A) \cap \operatorname{int} B(u_B) \neq \varnothing,\\
&\Phi^{AB}(u_A,u_B) = 0, \text{ якщо } \operatorname{int} A(u_A) \cap \operatorname{int} B(u_B) = \varnothing\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad \text{та } frA(u_A) \cap frB(u_B) \neq \varnothing,\\
&\Phi^{AB}(u_A,u_B) > 0, \text{ якщо } clA(u_A) \cap clB(u_B) = \varnothing.
\end{aligned}
$$

Для моделювання обмежень на допустимі відстані між геометричними об'єктами використовують поняття нормалізованої Φ-функції [14 – 17].

Φ-функція $\tilde{\Phi}^{AB}(u_A,u_B)$ називається нормалізованою, якщо її значення дорівнюють евклідовим відстаням між об'єктами $A(u_A)$ та $B(u_B)$ за умови

$$(u_A,u_B) \in G = \left\{(u_A,u_B) \in \mathbf{R}^6 : \operatorname{int} A(u_A) \cap \operatorname{int} B(u_B) = \varnothing\right\},$$

$$
\begin{aligned}
&\tilde{\Phi}^{AB}(u_A,u_B) = \operatorname{dist}(A(u_A),B(u_B)), \text{ якщо } \operatorname{int} A(u_A) \cap \operatorname{int} B(u_B) = \varnothing,\\
&\tilde{\Phi}^{AB}(u_A,u_B) < 0, \text{ якщо } \operatorname{int} A(u_A) \cap \operatorname{int} B(u_B) \neq \varnothing,
\end{aligned}
$$

де $\operatorname{dist}(A(u_A),B(u_B)) = \min\limits_{x_A \in A, x_B \in B} \operatorname{dist}(x_A, y_B)$ – евклідова відстань між множинами.

У деяких випадках побудова нормалізованих Φ-функцій є досить складною процедурою. Тому для моделювання обмежень на мінімально допустимі відстані між об'єктами використовують вільні від радикалів псевдонормалізовані Φ-функції [14 – 17].

Неперервна, всюди визначена функція $\widehat{\Phi}^{AB}:\mathbf{R}^6 \to \mathbf{R}^1$ називається псевдонормалізованою Φ-функцією об'єктів $A(u_A)$ та $B(u_B)$, якщо вона задовольняє такі вимоги:

$$\widehat{\Phi}^{AB}(u_A, u_B) > 0, \text{ якщо } \operatorname{dist}(A(u_A), B(u_B)) > \rho,$$
$$\widehat{\Phi}^{AB}(u_A, u_B) = 0, \text{ якщо } \operatorname{dist}(A(u_A), B(u_B)) = \rho,$$
$$\widehat{\Phi}^{AB}(u_A, u_B) < 0, \text{ якщо } \operatorname{dist}(A(u_A), B(u_B)) < \rho.$$

Для формалізації пакування куль у контейнері необхідно побудувати Ф-функції, які описують умови їх взаємного розташування: умови розміщення куль у сферичному контейнері та умови ненакладання куль.

1.3.2 Математична модель задачі пакування куль у сферичному контейнері

Нехай C – контейнер – куля з радіусом R та центром на початку координат. Розглянемо набір куль

$$S_i(u_i) = \{(x, y, z) \in \mathbf{R}^3 : (x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2 \le r_i^2\},\ i \in I = \{1, 2, ..., n\}.$$

Вважаємо, що є K різних радіусів куль та n_k куль типу k $(k = 1, 2, ..., K)$, $n = \sum_{k=1}^{K} n_k$.

Умову розміщення кулі $S_i(u_i)$, $i \in I$ у контейнері (рис. 1.1) можна описати як

$$\Phi_i(u_i) = (R - r_i)^2 - (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2).$$

Якщо $x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 > (R - r_i)^2$, то куля знаходиться або поза контейнером, або частина кулі належить контейнеру, а частина – не належить (рис. 1.1).

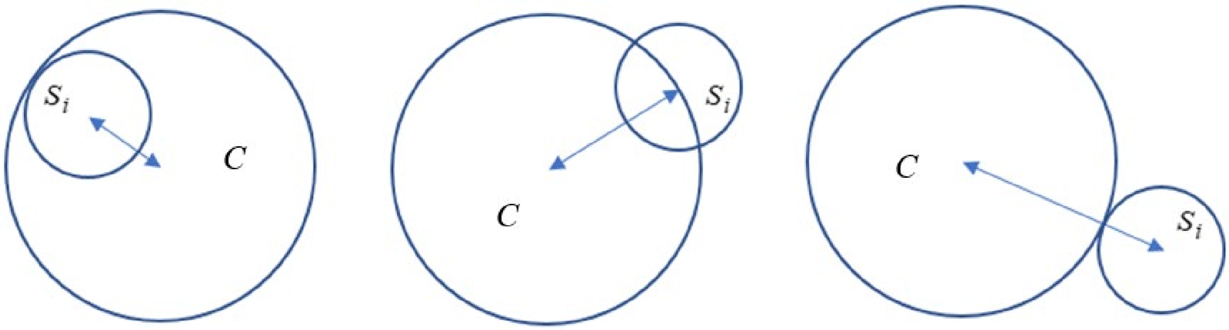

Рисунок 1.1 – Варіанти розміщення кулі та контейнера

Умову ненакладання куль $S_i(u_i)$ та $S_j(u_j)$, $i < j \in I$ (рис. 1.2) записується як

$$\Phi_{ij}(u_i, u_j) = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 - (r_i + r_j)^2 \geq 0.$$

Якщо $\Phi_{ij}(u_i, u_j) = 0$, то кулі торкаються, а якщо $\Phi_{ij}(u_i, u_j) < 0$, то кулі накладаються одна на іншу (рис. 1.2).

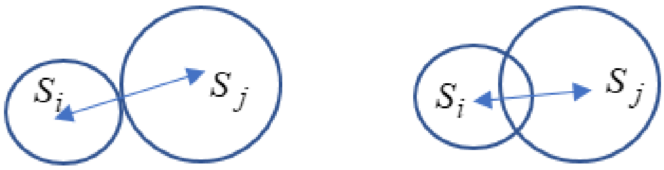

Рисунок 1.2 – Варіанти розміщення куль

Умови пропорційності куль задають кількісні пропорції кожного типу куль до загальної кількості куль заданого набору.

Нехай набір n куль містить n_k куль типу k. Позначимо $I_1 = \{1, 2, ..., n_1\}$, $I_2 = \{n_1 + 1, .n_1 + 2, ..., n_1 + n_2\}$, …, $I_K = \{n - n_K + 1, n - n_K + 2, ..., n\}$. Маємо, що $I = \bigcup_{j=1}^{K} I_j$, $\sum_{k=1}^{K} n_k = n$.

Визначення 1.1.Частку куль типу k називають

$$\tau_k = \frac{n_k}{n},\ k = 1, 2, \ldots, K.$$

Очевидно, що $\sum_{k=1}^{K} \tau_k = 1$.

Умовами пропорційності вважаємо нерівності

$$\tau_k^- \le \tau_k \le \tau_k^+,\ k = 1, 2, \ldots, K,$$

де τ_k^-, $\tau_k^+ \in \mathbf{R}^1$ – граничні значення часток, $0 \le \tau_k^- \le \tau_k^+ \le 1$.

Із визначення 1.1 випливає, що частка – дрібно-раціональне число.

Розглянемо, як визначають частку для ситуацій на рис. 1.3.

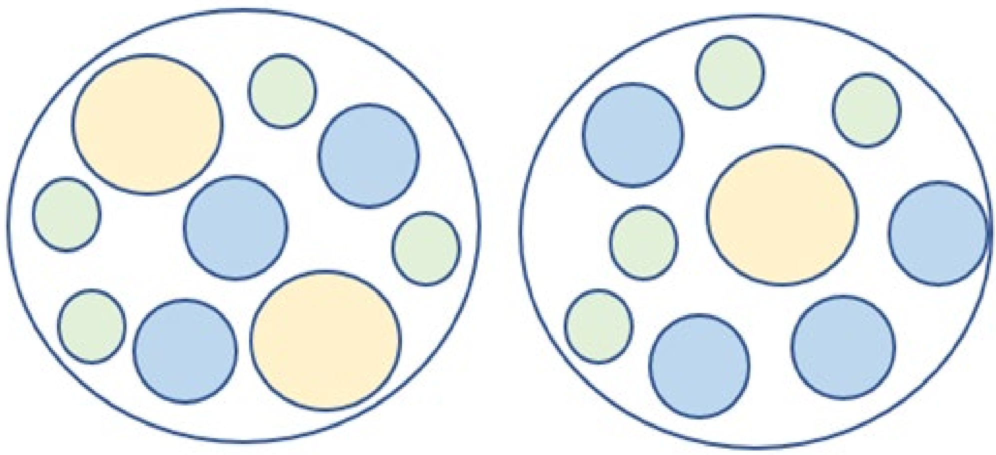

Рисунок 1.3 – Приклади визначення часток куль

На першій картинці маємо частки куль $\tau_1 = 2/9$, $\tau_2 = 3/9$ та $\tau_3 = 4/9$, якщо типи куль розташовані в порядку зменшення їх радіусів ($n = 9$). На другій картинці відповідні значення часток – $\tau_1 = 1/9$, $\tau_2 = 4/9$ та $\tau_3 = 4/9$. Як умови пропорційності для обох ситуацій можна розглядати, наприклад, $0.1 \le \tau_1 \le 0.25$, $0.3 \le \tau_2 \le 0.45$, $0.4 \le \tau_3 \le 0.5$.

Пропорції мають зберігатися й у разі розміщення частини куль з набору.

Нехай вектор $u=(u_1,u_2,...,u_n)\in \mathbf{R}^{3n}$ задає координати центрів куль $S_i(u_i)$, $i\in I$, а вектор $\pi=(\pi_1,\pi_2,...,\pi_n)\in \mathbf{B}^n$, $\pi_i\in\{0,1\}$, задає двійкові змінні, які визначають присутність куль у контейнері. Тут $\pi_i=1$, якщо куля $S_i(u_i)$, $i\in I$, присутня у контейнері та $\pi_i=0$, якщо цю кулю не вибрано з набору. Вектор усіх змінних позначимо як $v=(u,\pi)$.

Математична модель задачі має такий вигляд:

$$\max_{v\in W\subset \mathbf{R}^{3n}\times \mathbf{B}^n} \sum_{i=1}^{n}\pi_i , \tag{1.1}$$

де множина допустимих рішень W описується такою системою нерівностей:

$$\Phi_i(u_i)\pi_i \ge 0,\ i=1,2,...,n, \tag{1.2}$$

$$\Phi_{ij}(u_i,u_j)\pi_i\pi_j \ge 0, \tag{1.3}$$

$$\tau_k^- \le \tau_k \le \tau_k^+,\ k=1,2,...,K, \tag{1.4}$$

$$\tau_k = \sum_{i\in I_k}\pi_i \Big/ \sum_{i=1}^{n}\pi_i,\ k=1,2,...,K. \tag{1.5}$$

Нерівності (1.2) описують умови розміщення куль $S_i(u_i)$, $i\in I$ у контейнері, умови (1.3) забезпечують ненакладання куль. Якщо у формулах (1.2) та (1.3) будь-які двійкові змінні дорівнює нулю, то відповідні кулі не вибрано з набору, а нерівності гарантовано виконуються завдяки нульовим множникам. Функція цілі в (1.1) дорівнює сумі ненульових значень двійкових змінних, тобто дорівнює кількості куль, які вибрано з набору.

Нерівності (1.4) задають умови пропорційності. Тут частки куль (1.5) враховують кількість куль відповідного типу $\sum_{i\in I_k}\pi_i \le n_k$, вибраних з набору. Для максимізації функції цілі необхідно вибрати якомога більше значень $\pi_i=1$ за дотримання умов (1.2) – (1.5).

Зазначимо основні особливості математичної моделі (1.1) – (1.5).

Модель є задачею змішаного цілочислового нелінійного програмування (MINLP [4]). Функція цілі в (1.1) є кусково-лінійною. Загальна кількість змінних дорівнює $4n$, з яких n двійкових та $3n$ неперервних змінних. Множина рішень допустимих рішень W описується $n+0.5n(n-1)$ нелінійними нерівностями в (1.2), (1.3).

У разі рівних куль умови пропорційності (1.4) можна не враховувати й вилучити їх із системи нерівностей. Тоді значення змінних π_i можна релаксувати, не втрачаючи оптимального розв'язку.

Твердження 1.1. Розглянемо задачу (1.1) – (1.3) із релаксацією значень змінних $\pi_i \in \{0,1\}$ до $0 \le \pi_i \le 1$. Тоді оптимальні розв'язки (π^*, u^*) цієї задачі нелінійного програмування мають лише крайні значення $\pi_i^* \in \{0,1\}$.

Доведемо твердження від супротивного. Нехай в оптимальному рішенні існує раціональне значення $0 < \pi_i^* < 1$. Оскільки $\pi_i^* > 0$, то відповідно до (1.2) ми маємо $\psi_i(u_i^*) \ge 0$. Отже, значення π_i^* можна збільшити до 1 без порушення обмеження (2.2). Якщо $\pi_j^* > 0$, то відповідно до (1.3) $\varphi_{ij}(u_i^*, u_j^*) \ge 0$ та значення π_i^* можна збільшити до 1 без порушення обмеження (1.3). Для $\pi_j^* = 0$ можна збільшити π_i^* до 1 без порушення обмеження (1.3) за будь-якого знаку $\varphi_{ij}(u_i^*, u_j^*)$. Таким чином, якщо $0 < \pi_i^* < 1$, то можна збільшити значення π_i^* до 1 без порушення обмежень задачі й у такий спосіб збільшити значення функції цілі (1.1). Це суперечить оптимальності π_i^*. Отже, Твердження 1.1 є вірним.

Основною особливістю задачі КР є присутність дискретних і неперервних змінних. Змішана цілочислова нелінійна оптимізація (MINLP) включає комбінацію дискретних та неперервних змінних для розв'язання задачі пакування куль [2].

Для розв'язання задачі, загалом, потрібен, по-перше, вибір оптимального варіанту за дискретними змінними й, по-друге, пошук точки області допустимих розв'язків за неперервними змінними. При розміщенні рівних куль вибір за дискретними змінними зводиться до вибору кількості куль, що розміщуються, тому в цьому випадку необхідно застосовувати спеціальну стратегію. При розміщенні великої кількості куль (рівних і нерівних) доцільно використовувати методологію послідовно-одиночного розміщення й методи оптимізації за групами змінних. Вибір методу побудови початкових точок залежить від співвідношень розмірів куль і контейнера, кількості, інших метричних характеристик куль.

1.4 Постановка задач дослідження

Метою кваліфікаційної роботи є підвищення ефективності розв'язання оптимізаційної задачі пакування нерівних куль у сферичному контейнері з урахуванням умов пропорційності за допомогою конструктивних методів математичного та комп'ютерного моделювання.

Для досягнення цієї мети під час професійної практики необхідно виконати такі завдання:

– провести системний аналіз предметної області;

– вивчити існуючі методи та підходи до задачі пакування нерівних куль;

– описати математичну модель та розробити алгоритми для оптимізації пакування нерівних куль у сферичному контейнері з умовами пропорційності;

– вибрати та адаптувати методи оптимізації для розв'язання задачі для урахування умов пропорційності;

– створити програмне забезпечення для реалізації математичних моделей та алгоритмів.

– провести тестування програмного забезпечення.

2 ВИБІР ТА ОБҐРУНТУВАННЯ МЕТОДУ РОЗВ’ЯЗАННЯ

2.1 Методи розв’язання задачі пакування куль в обмежених контейнерах

Розглянута математична модель задачі пакування куль дає змогу охопити широке коло задач розміщення куль [2, 5]. Задачі є багатоекстремальними, з нелінійними обмеженнями. Методи глобальної оптимізації, загалом, практично застосувати не можна, навіть за невеликої кількості розміщуваних куль ($n \le 10$). В задачах, поставлених як задача про рюкзак, виникає необхідність будувати дерево за цілочисловими змінними. Тому для отримання наближеного розв’язку зазвичай використовують евристичні методи, наприклад, метод спрямованого перебору локальних екстремумів, який ґрунтується на гомотетичних перетвореннях куль.

На вибір стратегії розв’язання впливають такі основні чинники:

– постановка задачі: ODP, KP, IIPP;

– вимірність простору, в якому розміщуються кулі;

– метричні особливості куль (рівні, нерівні, діапазон та розподіл значень радіусів);

– кількість розміщуваних куль;

– просторова форма області розміщення;

– наявність додаткових обмежень (зони заборони, мінімально допустимі відстані, обмеження на метричні характеристики куль);

– часові обмеження.

Основні структурні елементи методології розв’язання задачі наведено на рис. 2.1. Методологія включає аналіз постановки задачі, вихідних даних та обмежень, математичні моделі, які охоплюють клас задач розміщення куль різної вимірності, дослідження їх особливостей і розробку стратегій розв’язання, в яких пропонуються методи побудови допустимих розміщень (початкових точок або наближених розв’язків), методи локальної оптимізації та методи глобальної оптимізації.

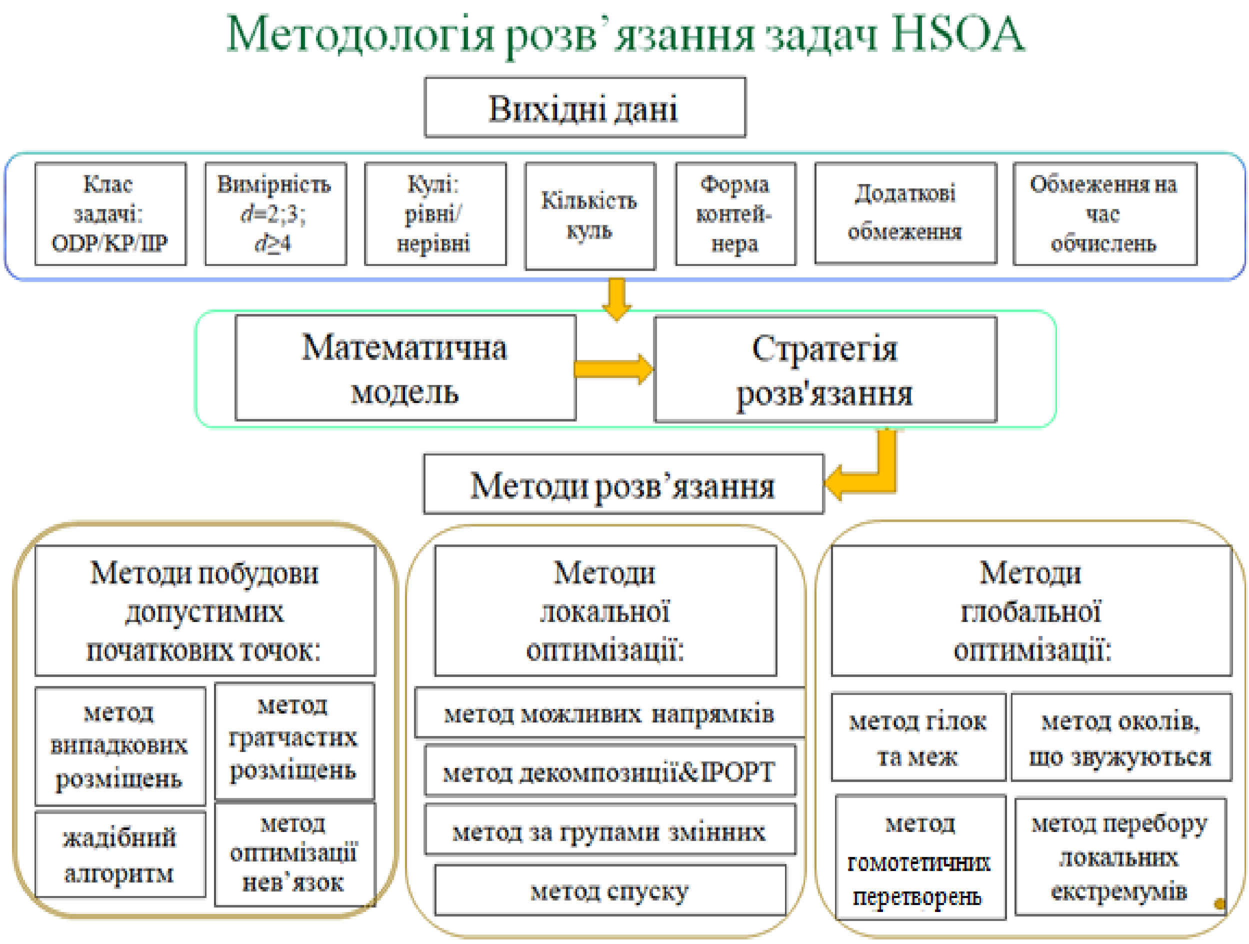

Рисунок 2.1 – Основні структурні елементи методології

Вигляд постановки задачі відповідає міжнародній класифікації задач розкрою та розміщення [3]. Розглядаються дві основні постановки: задача із змінними метричними характеристиками контейнера (Open Dimension Problem – ODP) та задача про рюкзак (Knapsack Problem – KP). Задача розміщення рівних куль (Identical Item Packing – IIPP) є окремим випадком задачі KP. Ці задачі мають однакову функцію цілі та схожі математичні моделі у вигляді задачі MINLP [2].

Формулювання задачі залежить від заданої цільової функції. Якщо передбачається набір куль із відомими радіусами, і необхідно визначити мінімальні метричні параметри контейнера, в який можуть бути розміщені всі ці кулі, то йдеться про задачу ODP. У цьому випадку відбір підмножини куль із заданого набору не проводиться – усі кулі повинні бути розташовані в контейнері.

У кваліфікаційній роботі розглядаються задачі, що характеризуються однією змінною метричною характеристикою контейнера та лінійною функцією цілі. Ця специфіка дозволяє проводити аналіз властивостей екстремальних точок області допустимих розв'язків і розробляти ефективні стратегії для розв'язання таких задач.

У разі, коли задано набір куль із відомими радіусами, а контейнер має фіксовану просторову форму та задані розміри, постає задача розміщення куль із максимальним коефіцієнтом заповнення. У цій ситуації можливий вибір підмножини куль із загального набору, що породжує безліч варіантів розв'язання. Для знаходження оптимального розміщення можна застосувати вичерпний перебір усіх можливих піднаборів куль і їх подальше розташування в контейнері.

Ця задача формулюється як задача KP (Knapsack Problem) і належить до класу змішаних цілочислових нелінійних задач програмування. У ній вибір підмножини куль описується за допомогою двійкових змінних, тоді як параметри їх розміщення визначаються неперервними змінними.

У задачах розміщення нерівних куль збільшення вимірності простору підвищує значення правильного розташування куль із найбільшими радіусами, оскільки саме вони роблять найбільший внесок у загальний об'єм. У випадках, коли кулі мають різні радіуси, співвідношення між радіусами окремих пар або груп куль може суттєво впливати на структуру їх розміщення.

При послідовному розміщенні куль порядок їх розташування має ключове значення, особливо за умови значної варіації у розмірах. Чим більша різниця між радіусами, тим більше варіантів структури розміщення може виникнути. Для рівновеликих куль порядок розміщення не впливає на кінцевий результат. Таким чином, за великої варіативності радіусів найбільш ефективними виявляються методи, що враховують перестановки куль і комбінаторні властивості, наприклад, метод звужуваних околів [2].

Якщо ж радіуси куль незначно відрізняються або плавно змінюються від меншого до більшого, найбільш результативним підходом є метод спрямованого перебору локальних екстремумів. Цей метод забезпечує поступовий перехід між екстремумами завдяки змінним радіусам, що дозволяє досягати оптимальних результатів при мінімальних витратах ресурсів.

Вибір методу початкового розміщення куль у контейнері значною мірою залежить від співвідношення діаметрів куль до розміру контейнера, а також від вимірності простору. Це співвідношення визначає доцільність використання випадкових початкових розміщень або ґратчастих структур як базису.

Кількість куль, які необхідно розмістити, безпосередньо впливає на кількість змінних та обмежень у задачі, що, своєю чергою, визначає стратегію вибору методів розв'язання.

Для невеликої кількості куль (до 5–10) при змінних метричних характеристиках задачі можливий повний перебір вершин дерева рішень. Ці вершини відповідають крайнім точкам області допустимих значень, а також локальним екстремумам. Для таких задач можна застосувати схему методу гілок і меж [2]. Однак, на практиці, через нелінійність обмежень виникають складнощі при розв'язанні систем нелінійних рівнянь, що ускладнює досягнення точного глобального екстремуму. У таких випадках результати мають, скоріше, теоретичний характер, оскільки обчислення глобального екстремуму може виявитися недосяжним через складність задачі.

Для задачі КР розв'язання вимагає додаткового перебору за двійковими змінними, що суттєво збільшує обчислювальну складність. У випадку зростання кількості куль можливий лише частковий перебір дерева рішень, що обмежує кількість розглянутих локальних екстремумів.

Застосування методів локальної оптимізації залежить від кількості змінних і накладених обмежень. Використання стратегії активного набору обмежень [2] дозволяє суттєво знизити обчислювальні витрати, оптимізуючи процес пошуку локального екстремуму.

За дуже великої кількості куль (понад 5000) задача ускладнюється настільки, що стає можливим знайти лише наближені рішення. У цьому випадку доцільно використовувати метод оптимізації за групами змінних. Цей підхід передбачає розбиття задачі на підзадачі шляхом вибору окремих груп змінних для локальної оптимізації, залишаючи інші змінні фіксованими. Такий підхід дозволяє ефективніше управляти обчислювальними ресурсами та досягати прийнятних результатів навіть за великих масштабів задачі.

Просторова конфігурація області розміщення значно впливає на вибір стратегії вирішення задачі. Якщо область має складну форму з наявністю зон заборони, це ускладнює створення функцій, які визначають взаємозв'язок між кулями та областю. У таких випадках область допустимих рішень розглядається як сукупність підобластей, які можна описати за допомогою систем нерівностей. Основна задача розділяється на послідовність підзадач, кожна з яких вирішується окремо в межах відповідної підобласті.

У разі значної кількості зон заборони пошук допустимого розміщення стає ще більш складним. У таких ситуаціях використовується допоміжна задача нелінійного програмування для визначення точки, що задовольняє обмеження. Присутність зон заборони робить недоцільним застосування методів побудови початкових точок, заснованих на регулярних схемах розміщення куль, через їхню низьку ефективність у подібних умовах.

У прикладних задачах, окрім геометричних обмежень, можуть виникати додаткові умови, такі як мінімальні та максимальні допустимі відстані між кулями чи обмеження на кількість куль із різними радіусами. Для розв'язання таких задач оптимізації ефективно застосовуються комбіновані методи, що поєднують декомпозиційні підходи, метод внутрішньої точки (зокрема, розв'язувач IPOPT), модифікації методу можливих напрямків, оптимізацію за групами змінних і спуск на основі аналізу множників Лагранжа.

Для підвищення ефективності локальної оптимізації використовується поєднання методу декомпозиції зі стратегією активного набору обмежень. Це дозволяє розділити задачу з великою кількістю нелінійних обмежень на послідовність підзадач із меншою кількістю обмежень. Такий підхід значно спрощує розв'язання задач.

Метод внутрішньої точки, реалізований у вигляді розв'язувача IPOPT, є прямо-двоїстим підходом, заснованим на бар'єрних функціях, з гарантованою теоретичною збіжністю. Він виявляє високу ефективність у задачах нелінійного програмування, що виникають у процесі оптимального розміщення геометричних об'єктів. Завдяки використанню інформації про другі похідні функції цілі та обмежень, IPOPT демонструє високу швидкість збіжності та забезпечує точність навіть у складних задачах.

Інші підходи, такі як оптимізація за групами змінних і метод спуску на основі множників Лагранжа, використовуються для адаптивного пошуку розв'язків у задачах великої розмірності. Вони дозволяють ефективно працювати з великими наборами змінних і знаходити локальні екстремуми за умов значного числа обмежень. Доведено теоретичну збіжність методу за $O(\sqrt{n}\log(1/\varepsilon))$ ітерацій, де n – кількість змінних, ε – точність.

Метод можливих напрямків застосовується для задач із великою кількістю змінних (понад 3000). У цьому підході нелінійна задача програмування зводиться до послідовності задач лінійного програмування, що значно спрощує процес обчислень. Основна ідея методу полягає у визначенні напрямку руху, який одночасно забезпечує покращення значення цільової функції та дотримання обмежень, що описують область допустимих розв'язків. Для прискорення збіжності використовується стратегія активних обмежень, яка дозволяє ефективніше знаходити рішення.

Цей метод є модифікацією покоординатного спуску та призначений для задач ODP із кількістю змінних, що перевищує 10000. Всі змінні задачі діляться на кілька груп. На кожному етапі обчислень одна група змінних оптимізується, тоді як решта розглядається як сталі. Отриману задачу для вибраної групи змінних можна розв'язувати за допомогою розв'язувача IPOPT або методу можливих напрямків.

Процес повторюється для різних груп змінних, що дозволяє поступово уточнювати рішення. Після проходження всіх груп отримане рішення є наближеним до локального екстремуму. Такий підхід дає змогу працювати з задачами значної розмірності, зменшуючи обчислювальну складність і зберігаючи ефективність у процесі оптимізації.

Метод спуску на основі аналізу множників Лагранжа [2] застосовується для задач із обернено опуклими та лінійними обмеженнями й ґрунтується на аналізі множників Лагранжа. Він застосовується разом із методом оптимізації за групами змінних та стратегією активного набору обмежень. Метод реалізується ітераційною формулою:

$$\kappa(u^{l+1}) = \kappa(u^l) - \Delta\kappa(u^l),\ l = 0,1,2,\ldots.$$

Для вибору напрямку руху обчислюють вектор множників Лагранжа $\lambda^l = (\lambda_1^l, \lambda_2^l, ..., \lambda_m^l)$. Для цього розв'язують систему лінійних рівнянь $\nabla\kappa(u^l) = A(u^l)^T \lambda^l$, де $A(u^l)$ – матриця Якобі.

У процесі оптимізації обмеження, яке відповідає найменшому від'ємному множнику Лагранжа, виключається зі списку активних обмежень. Це дозволяє ослабити відповідне обмеження, створивши напрямок для руху із крайньої точки. Рух здійснюється уздовж межі області допустимих розв'язків у напрямку, що забезпечує зменшення значення цільової функції.

Довжина кроку обирається так, щоб у процесі руху принаймні одне з неактивних обмежень стало активним. Таким чином, відбувається поступова зміна набору активних обмежень, що дозволяє крок за кроком просуватися до екстремуму.

Процес триває доти, доки в черговій крайній точці всі множники Лагранжа не стануть додатними. Це є необхідною та достатньою умовою для досягнення екстремуму, адже на цьому етапі жоден напрямок руху більше не забезпечує покращення значення цільової функції.

Зважаючи на багатоекстремальність задачі розміщення, важливо вибрати найбільш оптимальний варіант розміщення. Проблема полягає в тому, що через NP-складність задач розміщення неможливо здійснити повний перебір усіх можливих варіантів. Тому для ефективного пошуку кращих рішень використовують методи, які передбачають обмеження кількості варіантів розв'язку шляхом відсічення неперспективних підмножин. Це досягається завдяки методам, таким як методи гілок та меж, а також методи околів, що звужуються.

Один з ефективних підходів – метод гомотетичних перетворень. Він дозволяє наблизитись до глобального екстремуму задачі ПРР, завдяки введенню змінних для метричних характеристик. Іншим методом є спрямований перебір локальних екстремумів, який дає змогу плавно переходити від одного локального екстремуму до іншого, забезпечуючи кращі значення функції цілі на кожному кроці.

Метод гілок та меж [2] ґрунтується на розбитті множини допустимих розв'язків на підмножини з меншою вимірністю, що дозволяє зменшити розмір задачі. Ця процедура виконується рекурсивно для кожної підмножини, формуючи дерево розв'язків. Завдяки використанню правил відтинання, неперспективні підмножини, які не можуть призвести до кращих рішень, виключаються з подальшого розгляду. Це значно знижує кількість варіантів порівняно з повним перебором, роблячи метод більш ефективним.

Схема методу гілок та меж застосовується не лише для задач розміщення з неперервними змінними, але й для задачі КР, де потрібно перебирати різні варіанти двійкових змінних. В результаті цей метод дозволяє обробляти складні комбінаторні проблеми, зменшуючи обчислювальну складність завдяки стратегічному відсіченню неперспективних рішень на ранніх етапах пошуку.

Метод околів, що звужуються [2], базується на використанні статистичних властивостей функції цілі, зокрема на перестановках куль або гілках дерева розв'язків. Цей метод дозволяє організувати спрямований пошук шляхом поступового перебору послідовностей куль або шляхів дерева розв'язків. Для його реалізації вводяться спеціальні метрики, що визначають множини перестановок і вершини дерева.

Процес пошуку оптимальних значень функції цілі відбувається в межах околів, які задаються на дискретних множинах. На кожному етапі роботи методу на основі накопиченої статистичної інформації вибираються центр і радіус нового околу. Якщо значення функції цілі не покращується, то радіус околу зменшується, щоб зосередити пошук на більш вузькій області. Цей процес триває до тих пір, поки не буде досягнуто мінімально можливого радіусу, або доки не буде знайдено покращення функції цілі.

Метод околів, що звужуються, показує не меншу ефективність, ніж традиційний метод випадкового пошуку Монте-Карло. Окрім застосування для пошуку оптимальних розв’язків задачі, він також використовується для побудови перспективних початкових точок, що можуть служити стартовими для подальших етапів оптимізації.

Метод гомотетичних перетворень [2] базується на ідеї введення змінних метричних характеристик куль, що дозволяє трансформувати задачу IIPP в послідовність задач нелінійного програмування, де функції цілі є лінійними. Кожна з цих задач передбачає виконання гомотетичних перетворень куль, що змінюють їхні розміри або позиції.

Завдяки лінійності функцій цілі локальні екстремуми задачі досягаються в крайніх точках області допустимих рішень. Таким чином, розв’язок цієї задачі можна вважати апроксимацією до глобального максимуму для задачі IIPP. Це дозволяє отримати ефективні наближення до оптимальних рішень, хоча й не гарантує абсолютної точності глобального оптимуму.

2.2 Вибір методу розв’язання задач MINLP

Існує кілька методів для розв'язання задач MINLP. Ці методи включають як точні алгоритми, так і наближені підходи, що дають змогу знаходити оптимальні або наближені розв'язки. Вибір конкретного методу залежить від складності задачі, вимог до точності та обчислювальних ресурсів.

Метод гілок і меж (Branch and Bound) є одним із найпоширеніших методів для розв'язання задач змішаного цілочислового нелінійного програмування (MINLP). Цей метод розбиває задачу на підзадачі, які вирішуються окремо, і поступово звужує область пошуку оптимального розв'язку. Він використовує дерево рішень, де кожна гілка представляє підзадачу з певними обмеженнями, а межі допомагають відсікати нерелевантні частини простору рішень. У [18] пропонується новий алгоритм, який інтегрує гібридний метод оптимізації з методом гілок і меж для розв'язання задач MINLP з сильно неопуклою природою. Цей підхід дозволяє ефективніше знаходити оптимальні розв'язки для складних задач, де традиційні методи можуть бути менш ефективними.

Іншим методом розв'язання задач змішаного цілочислового нелінійного програмування (MINLP) є зовнішня апроксимація (Outer Approximation). Цей метод чергує розв'язання нелінійних підзадач і лінійних головних задач, поступово наближаючись до оптимального розв'язку. Основна ідея полягає в тому, щоб вирішувати послідовність нелінійних підзадач і розслаблену змішану цілочислову лінійну головну задачу. В [19] представлено новий алгоритм для розв'язання опуклих задач MINLP, який поєднує ідеї зовнішньої апроксимації та методу проксимальних точок для досягнення швидшої та надійнішої збіжності.

Альтернативним ефективним методом для розв'язання MINLP є декомпозиція Бендера (Generalized Benders Decomposition). Цей метод розбиває задачу на дві частини: головну задачу і підзадачу, які вирішуються ітеративно. Основна ідея полягає в тому, щоб розділити складну задачу на більш прості підзадачі, які легше розв'язати окремо. Декомпозиція Бендера дозволяє ефективно обробляти як цілочислові, так і неперервні змінні. Головна задача (master problem) містить цілочислові змінні, тоді як підзадача (subproblem) містить неперервні змінні. На кожній ітерації розв'язується підзадача для фіксованих значень цілочисельних змінних, а результати використовуються для оновлення головної задачі. Як приклад використання цього методу у [20] розглядається прискорення алгоритму декомпозиції Бендера для задач MINLP, зокрема для задач розподілу ресурсів у бездротових мережах.

Метод часткових сурогатних зрізів (Partial Surrogate Cuts) використовується для створення наближених рішень задач MINLP. Він полягає в додаванні зрізів, які спрощують нелінійні обмеження, що дозволяє зменшити складність задачі та прискорити процес її розв'язання. Часткові сурогатні зрізи допомагають зменшити кількість нелінійних обмежень, що розглядаються на кожному кроці алгоритму, що робить його більш ефективним. Стаття [21] описує різні стратегії, включаючи часткові сурогатні зрізи, для поліпшення алгоритмів розв'язання задач MINLP.

Метод центрального зрізу (Center-Cut Method) використовується для поліпшення наближення до оптимального розв'язку задач MINLP. Основна ідея цього методу полягає в тому, щоб використовувати центральні зрізи для створення лінійної апроксимації оригінальної задачі. Це дозволяє швидко знаходити допустимі розв'язки, які задовольняють нелінійні обмеження, і поступово поліпшувати їх до оптимального розв'язку. У [22] описується алгоритм центрального зрізу, який може використовуватися як первинна евристика або як детермінований метод розв'язання задач. Алгоритм обирає пробні розв'язки в центрі поточної лінійної зовнішньої апроксимації нелінійних обмежень, що робить ці розв'язки ймовірнішими для виконання обмежень.

В кваліфікаційній роботі використовується евристичний метод у поєднанні з блочною оптимізацією. Цей підхід дозволяє швидко знаходити допустимі рішення для задач MINLP, враховуючи додаткові умови пропорційності.

2.3 Блочна оптимізація

Блочна оптимізація полягає у формуванні блоків куль, де умови пропорційності виконуються заздалегідь. Це суттєво зменшує складність глобальної задачі, оскільки обмеження пропорційності вже враховано на рівні кожного блоку. Далі оптимізація зводиться до формування груп у межах загального контейнера.

Евристичний метод дає змогу ефективно вирішувати задачі для груп куль, які містять один, два і т.д. блоків куль , використовуючи локальні солвери.

Метод блочної оптимізації, або оптимізації за групами змінних, є модифікацією класичного методу покоординатного спуску, яка дозволяє ефективніше розв’язувати задачі з великою кількістю змінних. У традиційному покоординатному спуску змінні оновлюються одна за одною, тоді як блочна оптимізація працює з групами змінних, об’єднаними в блоки. На кожному кроці методу обирається один блок змінних, який оновлюється, тоді як всі інші блоки залишаються фіксованими. Цей підхід дозволяє розподілити складну задачу на менш складні підзадачі, що значно спрощує їх розв’язання.

Процес починається з розбиття всіх змінних задачі на кілька груп, які можуть бути сформовані на основі логіки проблеми або її структури. Потім для кожного блоку послідовно виконується локальна оптимізація за фіксованих значень змінних інших блоків. Такий підхід дозволяє швидко отримати наближений розв’язок задачі з поступовим вдосконаленням результату на кожному етапі. Це робить метод особливо ефективним для задач із великою кількістю змінних, де одночасне оновлення всіх змінних може бути надто обчислювально затратним.

Однією з ключових переваг методу є зменшення обчислювальних витрат, оскільки обробляється лише частина змінних, а не всі одночасно. Крім того, метод легко адаптується до специфіки задачі, дозволяючи використовувати спеціалізовані підходи для кожного блоку змінних. Це робить його універсальним і придатним для задач із різними типами обмежень або геометричними особливостями.

У задачах геометричної оптимізації, зокрема задачах пакування, метод блочної оптимізації демонструє особливу ефективність завдяки своїй здатності враховувати складну геометрію обмежень і специфіку взаємодії об’єктів. Задачі пакування часто характеризуються великою кількістю змінних, що відповідають положенням об’єктів, і високою залежністю між ними через геометричні чи фізичні обмеження, такі як ненакладання, обмеженість контейнера чи мінімізація порожнього простору. Метод блочної оптимізації дозволяє розбити цю складну задачу на менші підзадачі, кожна з яких охоплює лише невелику групу змінних. Це спрощує процес розв’язання та дозволяє уникнути одночасного опрацювання всієї множини змінних, що вимогало б значних обчислювальних витрат.

Крім того, у задачах пакування важливо не лише знайти будь-яке допустиме розв’язання, а й максимально ефективно використати доступний простір. Метод блочної оптимізації забезпечує гнучкість у виборі критеріїв оптимальності, наприклад, мінімізації висоти пакування чи максимізації кількості об’єктів у контейнері. Завдяки поступовому додаванню об’єктів і локальній оптимізації на кожному етапі, цей підхід дозволяє ефективно враховувати специфіку просторових взаємодій і досягати високої якості пакування навіть у складних випадках.

При використанні блочної оптимізації на першому кроці кулю S_1 з набору S_i, $i \in I_N$ пакують у контейнер C таким чином, щоб функція цілі була оптимальною. Далі, кулю S_2, $i \in I_N$ пакують у контейнер C за умови, що кулю S_1 зафіксовано, тобто відповідні компоненти вектору змінних є сталими, і т.д. [23].

Нехай упаковано $S_1, S_2, ..., S_{k-1}$ га перших $k-1$ кроках. Центри куль формують вектор $v_k^* = \left(x_k^*, y_k^*, z_k^*\right)$, $i = 1,2,...,k-1$. На k-му кроці змінними вважають лише координати центру кулі S_k:

$$v_k^* = \arg \underset{v^k \in G^k \subset \mathbf{R}^3}{\text{extr}} \, \kappa_k\left(v_k\right), \; k = 1,2,...,N, \tag{2.1}$$

де $\kappa_k\left(v_k\right)$;

$$G_k = \{v_k \in \mathbf{R}^3 : \Phi_k\left(v_k\right) \geq 0, \; \Phi_{jk}\left(v_j^*, v_k\right) \geq 0, \; j = 1,2,...,k-1\}. \tag{2.2}$$

Залежно від обчислювальних можливостей шукають або локальний, або глобальний ектремум (2.1), (2.2).

У задачах пакування куль із різними радіусами додаткові умови, такі як умови пропорційності, значно ускладнюють процес оптимізації, оскільки потрібно не лише знаходити допустиме розташування об'єктів, але й забезпечувати дотримання заданих співвідношень кількості куль різних радіусів. Метод блочної оптимізації є ефективним інструментом для вирішення таких задач, проте його базову схему необхідно адаптувати, враховуючи ці специфічні умови.

Класичний підхід, заснований на поступовому додаванні окремих куль, може бути недостатнім для забезпечення пропорційності, оскільки він не враховує взаємозв'язок між групами куль із різними радіусами. У цьому контексті застосовується модифікована схема, де змінними виступають не окремі кулі, а блоки куль, сформовані відповідно до умов пропорційності. Такий підхід дозволяє організувати процес пакування як послідовне додавання блоків куль, кожен із яких задовольняє наперед визначене співвідношення кількостей куль різних радіусів.

Плавний перехід до такого методу виправданий тим, що він зберігає основні переваги блочної оптимізації, такі як обчислювальна ефективність і локальне спрощення задачі, водночас адаптуючи її до вимог пропорційності. Це забезпечує гнучкість у вирішенні задач пакування куль у контейнері будь-якої форми та розміру, дозволяючи враховувати специфічні обмеження, що важливі для практичних застосувань.

2.4 Перехід від задачі KP до задачі ODP

У задачах розміщення об’єктів у контейнері важливим кроком є вибір ефективної стратегії оптимізації, яка дозволить об’єднати дискретні властивості задачі (наприклад, умови пропорційності) з її геометричними обмеженнями. Перехід від задачі про рюкзак (KP) до задачі з відкритою метричною характеристикою (ODP) забезпечує зручний математичний апарат для пошуку локальних екстремумів і вирішення завдань розміщення. Цей підхід дозволяє розглядати геометричні аспекти задачі як безперервну оптимізацію, що значно полегшує її розв'язання, особливо за умови наявності наперед заданих обмежень, таких як пропорційність кількості куль різних радіусів.

Методи розв'язання задачі ODP, зокрема спрямований перебір локальних екстремумів (Jump Algorithm), є ефективними інструментами для таких задач. Вони дозволяють знаходити рішення шляхом модифікації метричних характеристик об'єктів (радіусів куль) і поступового зменшення області допустимих рішень. Це забезпечує адаптивність та точність навіть для задач високої складності.

Таким чином, з урахуванням того, що для задачі ODP розроблені ефективні методи розв'язання, наприклад, метод спрямованого перебору локальних екстремумів, є сенс застосовувати ці методи й для задач розміщення, сформульованих як задача KP [2].

Після того, як згідно з деревом розв'язків для задачі KP вибрано підмножину куль, , які задовольняють умови пропорційності, виникає задача розміщення цього набору куль в області C фіксованих розмірів. Для цього вводять множину

$$C(\lambda) = \{\lambda x \in \mathbf{R}^{d+1} : x \in C\},$$

розмір якої залежить від коефіцієнту гомотетії λ.

Задачу можна звести до задачі з відкритою метричною характеристикою, яка відповідає змінному коефіцієнту гомотетії куль (один для всіх куль). Мета – знайти максимальний коефіцієнт гомотетії для розміщуваних куль. Значення коефіцієнту, яке дорівнює 1, відповідає оригінальним розмірам куль і є глобальним максимумом цієї задачі.

Нехай $S_i(u_i)$, $i = 1,2,...,l$, $l \leq n$, – заданий набір куль. Задача пакування куль в контейнері C $(l = 1,2,...,)$ записується як задача нелінійного програмування з лінійною функцією цілі

$$(v^*,\lambda^*) = \arg\max_{v_l \in D_l \subset \mathbf{R}^{3l+1}} \lambda. \quad (2.3)$$

де $v_l = (u_1, u_2, ..., u_l, \lambda)$ – вектор змінних;

множина допустимих рішень D_l описується такою системою нерівностей:

$$\Phi_i(u_i) = (R - \lambda r_i)^2 - (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2) \geq 0, 1 \leq i < j \leq n,\ i = 1,2,...,l\ , \quad (2.4)$$

$$\Phi_{ij}(u_i, u_j, \lambda) = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 - (\lambda r_i + \lambda r_j)^2 \geq 0,\ 1 \leq i < j \leq n, \quad (2.5)$$

$$0 \leq \lambda \leq 1. \quad (2.6)$$

Нерівність (2.4) забезпечує розміщення кулі $S_i(u_i)$ з радіусом λr_i в контейнері C, а нерівність (2.5) описує умову ненакладання куль $S_i(u_i)$ та $S_j(u_j)$, з радіусами λr_i та λr_j відповідно.

Якщо в результаті розв'язання маємо значення функції цілі $\lambda^* = 1$, то отримуємо розміщення куль у контейнері. Якщо $\lambda^* < 1$, то локальний екстремум не відповідає розміщенню куль $S_i(u_i)$ з радіусом r_i. В такому разі вибираємо іншу вихідну точку або робимо висновок, що для заданого набору куль не можна отримати допустиме пакування.

Перехід від задачі KP до задачі ODP дозволяє не лише спростити процес оптимізації, але й підвищити якість кінцевих результатів. Використання змінної метричної характеристики дає змогу краще врахувати геометричні обмеження контейнера та ефективно заповнювати простір, уникаючи перетинів об'єктів. Завдяки цьому підходу можна отримати розв'язки, які наближаються до глобального мінімуму, зберігаючи при цьому високу ефективність у роботі з великими наборами об'єктів.

Незважаючи на те, що розв'язання задачі (2.3) – (2.6) не позбавляє від необхідності повного перегляду двійкових елементів, використання такого підходу значно поліпшує якість результатів завдяки методу спрямованого перебору локальних екстремумів (Jump Algorithm).

Зменшення обчислювальної складності та інтеграція геометричних аспектів у процес оптимізації дозволяють значно знизити витрати часу та ресурсів. Це робить підхід ефективним для вирішення складних задач розміщення, зокрема для задач із умовами пропорційності.

Висновки за розділом 2

У другому розділі було досліджено та обґрунтовано методи розв'язання задач пакування куль у контейнерах, які характеризуються багатоекстремальністю, багатовимірністю та нелінійними обмеженнями. Було враховано широкий спектр чинників, що впливають на вибір методів: постановка задачі, метричні особливості куль, кількість об'єктів, просторові характеристики контейнера та додаткові обмеження.

Особливу увагу приділено комбінованим підходам, які дозволяють поєднувати ефективність локальної оптимізації з можливістю врахування глобальних умов. Зокрема, обрано метод блочної оптимізації, орієнтований на поступове додавання груп куль, сформованих відповідно до наперед заданих умов пропорційності. Цей метод мінімізує обчислювальні витрати, дозволяючи враховувати специфічні особливості кожної групи куль, і забезпечує ефективне заповнення контейнера.

Розглянуто підхід, який передбачає перехід від задачі про рюкзак до задачі з відкритою метричною характеристикою. Використання гомотетичних перетворень дозволяє адаптувати модель до змінних характеристик контейнера, підвищуючи ефективність пошуку допустимих і оптимальних розміщень.

Загалом, задачі пакування куль із різними радіусами та додатковими умовами, такими як пропорційність, можуть бути розв'язані за допомогою комплексних підходів, які поєднують математичне моделювання, блочну оптимізацію та спеціалізовані евристичні методи.

3 ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ

3.1 Опис середовища програмування

Для реалізації математичного та комп'ютерного моделювання задачі оптимізації пакування нерівних кругів у круговому контейнері було вибрано платформу Embarcadero [24]. Ця потужна система надає розробникам зручні інструменти для створення складних алгоритмів та моделювань, що забезпечує високу ефективність при розв'язанні складних оптимізаційних задач.

Embarcadero Technologies пропонує багатофункціональні рішення для розробки додатків та роботи з базами даних, що дозволяють створювати, налаштовувати і керувати програмними системами на різних операційних системах і з використанням різних мов програмування. Основні продукти цієї платформи включають RAD Studio, Delphi, C++Builder, InterBase та RAD Server.

RAD Studio – це інтегроване середовище розробки (IDE), яке об'єднує потужні інструменти, такі як Delphi та C++Builder, для створення багатоплатформних нативних додатків. За допомогою RAD Studio можна розробляти програми для Windows, macOS, iOS, Android та Linux, використовуючи єдину кодову базу, що спрощує процес розробки та підтримки додатків.

Delphi – це сучасне середовище для розробки додатків на мові Object Pascal, яке пропонує глибоку інтеграцію з Windows, потужні можливості візуального дизайну інтерфейсів і значно підвищує продуктивність розробки. За допомогою Delphi можна створювати високопродуктивні, нативні додатки з інтуїтивно зрозумілим користувацьким інтерфейсом.

C++Builder є інструментом для розробки нативних додатків на мові C++, що надає сучасні бібліотеки для візуального дизайну, покращуючи користувацький досвід та скорочуючи час розробки продукту. Завдяки C++Builder розробники можуть швидко створювати додатки, які потребують високої продуктивності та масштабованості.

InterBase – це реляційна SQL база даних, яка забезпечує високий рівень безпеки даних, аварійне відновлення та синхронізацію змін. InterBase дозволяє масштабувати рішення для будь-якої платформи та пристроїв, що робить її ідеальним вибором для створення додатків з вимогами до безпеки та високої надійності.

RAD Server – платформа для розробки та публікації REST API додатків. Вона дозволяє швидко створювати API для баз даних, використовуючи Delphi та C++Builder, і може бути розгорнута як на локальних серверах, так і в хмарі, забезпечуючи зручність і гнучкість для розробників.

Таким чином, Embarcadero пропонує комплексне середовище для розробки високоефективних, багатоплатформних додатків, що ідеально підходить для реалізації складних задач моделювання та оптимізації.

3.2 Алгоритм розв’язання задачі пакування сферичних об’єктів у сферичному контейнері з умовами пропорційності

3.2.1 Основна схема алгоритму ProPortionPack

Нехай індексна множина $\mathbf{I}_{\min}$ позначає мінімальний блок (набір) куль, який задовольняє умови пропорційності (1.4), позначимо $p = \mathrm{card}(\mathbf{I}_{\min})$. Індексна множина $\mathbf{I}_s$ накопичує блоки куль та додаткові кулі, які задовольняють умови пропорційності (1.4); $\{i_k\}$ означає кулю типу k.

Розглянемо основні етапи алгоритму ProPortionPack.

Етап 1. Формування мінімального блоку куль $\mathbf{I}_{\min}$, який задовольняє умови пропорційності (1.4).

Етап 2. Послідовне розміщення однакових блоків куль $\mathbf{I}_{\min}$, які задовольняє умови задачі (1.2) – (1.5). Динамічне оновлення множини $\mathbf{I}_s$ (накопичення $\mathbf{I}_{\min}$ блоків).

Етап 3. Послідовне розміщення додаткових куль(з корекцією множини $\mathbf{I}_s$), які задовольняють умови задачі (1.2) – (1.5).

Розглянемо етапи алгоритму.

3.2.2 Формування мінімального блоку куль

Перш за все обчислюємо кардинальне число множини $\mathbf{I}_{\min}$, яка задовольняє умови пакування та пропорційності (1.2) – (1.5). Нехай

$$q = \mathrm{card}(\mathbf{I}_{\min}) = t\sum_{k=1}^{K}\tau_k \ .$$

Тут використовуємо умову задачі, що τ_k – це дробово-раціональне число. Для зручності будемо використовувати наскрізну нумерація кроків для всіх етапів алгоритму.

Крок 1. Встановлюємо $t := 0$.

Крок 2. Встановлюємо $t := t + 1$.

Крок 3. Якщо $\tau_1 t - \lfloor \tau_1 t \rfloor \neq 0$, тоді переходимо до Кроку 2; в іншому разі переходимо до Кроку 4.

Тут $\lfloor \bullet \rfloor$ є функцією підлоги (повертає найбільше ціле число, яке не перевищує дане число).

Далі будуємо індексну множину $\mathbf{I}_{\min}$.

Крок 4. Встановлюємо $k := 0$, $\mathbf{I}_{\min} := \varnothing$, $q := 0$.

Крок 5. Встановлюємо $k := k + 1$.

Крок 6. Якщо $k = K + 1$, то переходимо до Кроку 8.

Крок 7. Встановлюємо

$$\mathbf{I}_{\min} := \mathbf{I}_{\min} \bigcup_{j=1}^{t\tau_k} \{i_{k_j}\},\ q := q + \tau_k t$$

та переходимо до Кроку 5.

3.2.3 Послідовне розміщення блоків куль

Тепер розглянемо, як відбувається агрегація блоків в множині $\mathbf{I}_s$.

Крок 8. Встановлюємо $\mathbf{I}_s := \varnothing$, $l := 0$.

Крок 9. Встановлюємо $\mathbf{I}_s := \mathbf{I}_s \bigcup \mathbf{I}_{\min}$, $l := l + q$.

Крок 10. Обчислюємо локальний максимум задачі (4.1) – (4.4) для множини $\mathbf{I}_s$.

Для цього використовуємо спеціальну декомпозицію задачі та солвер для задач нелінійного програмування. Декомпозиція, яка використовує геометричні властивості задачі, дає змогу звести задачу великої розмірності до послідовності задач нелінійного програмування значно меншої розмірності. Розглядаються лише кулі, які знаходяться на певній відстані одна від іншої, що враховується в задачі за допомогою додаткових лінійних обмежень. Водночас не враховуються нелінійні обмеження, які не можуть бути порушені за таких лінійних обмежень Детальний опис процедури декомпозиції наведено в роботах [22, 46].

Тепер оновлюємо множину розміщених куль $\mathbf{I}_s := \mathbf{I}_s \setminus \mathbf{I}_{\min}$.

Крок 11. Якщо $\lambda = 1$, то переходимо до Кроку 9; в іншому разу ($\lambda < 1$) встановлюємо $\mathbf{I}_s := \mathbf{I}_s \setminus \mathbf{I}_{\min}$, $l := l - q$ та переходимо до Кроку 12.

Крок 12. Якщо $\tau_k^- = \tau_k^+$, $k = 1,2,...,K$,то встановлюємо $n^* := l$ і зупиняємо алгоритм; в іншому разі переходимо до Кроку 13.

Далі переходимо до послідовного розміщення додаткових куль.

3.2.4 Розміщення додаткових куль

Після того, як було визначено, що немає можливості розміщувати цілі блоки куль $\mathbf{I}_{\min}$, враховуючи те, що умови пропорційності мають деякий запас гнучкості, спробуємо розмістити додаткові кулі, які задовольняють умови пропорційності.

Крок 13. Встановлюємо $k := 0$.

Крок 14. Встановлюємо $k := k + 1$.

Крок 15. Якщо $k < K + 1$, то встановлюємо $l := l + 1$, $\mathbf{I}_s := \mathbf{I}_s \bigcup \{i_k\}$; в іншому разі встановлюємо $n^* := l$ та зупиняємо алгоритм.

Крок 16. Якщо множина $\mathbf{I}_s$ задовольняє умови пропорційності (3.4), то переходимо до Кроку 17; в іншому разі встановлюємо $\mathbf{I}_s := \mathbf{I}_s \setminus \{i_k\}$ та переходимо до Кроку 14.

Крок 17. Обчислюємо локальний максимум задачі (4.1) – (4.4) для набору куль відповідно до множини $\mathbf{I}_s$. Якщо $\lambda = 1$, то переходимо до Кроку 18; в іншому разі встановлюємо $\mathbf{I}_s := \mathbf{I}_s \setminus \{i_k\}$, $n^* := l - 1$ та зупиняємо алгоритм.

Крок 18. Якщо $k > 1$, то встановлюємо $k := 1$. Переходимо до Кроку 15

Блок-схему алгоритму наведено на рис. 3.1.

3.3 Опис програми

Для перевірки роботи побудованого алгоритму було розроблено програмне забезпечення. Коди програм написані мовами Delphi та C++. Розроблені модулі можна використовувати при створенні інформаційної системи підтримки прийняття рішень у геометричному проєктуванні.

Для розв’язання задач нелінійного програмування використовується солвер IPOPT (Interior Point OPTimizer) [25], який ефективно працює з сильно розрідженими матрицями Якобі та Гесса. IPOPT є потужним інструментом для великомасштабної нелінійної оптимізації, здатним знаходити локальні рішення складних математичних задач. Він використовує метод внутрішніх точок та лінійні пошуки на основі фільтрів, що дозволяє ефективно вирішувати задачі з нелінійними та неопуклими функціями

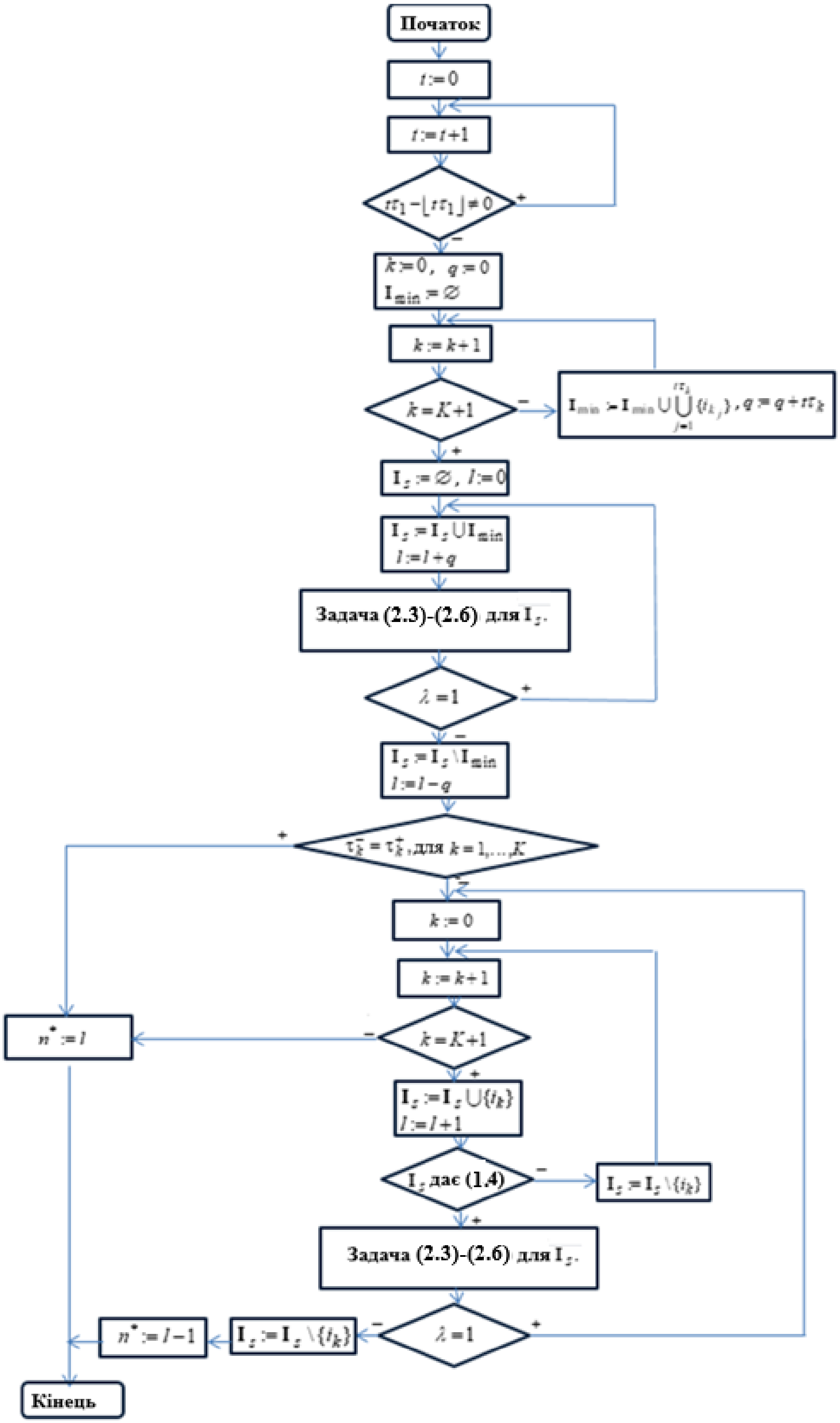

Рисунок 3.1 – Блок-схема алгоритму ProPortionPack

Для графічної ілюстрації було написано спеціальний програмний модуль на C++, що використовує бібліотеку OpenGL [26]. OpenGL (Open Graphics Library) є стандартом для високопродуктивної графіки, що забезпечує кросплатформену підтримку рендерингу 2D та 3D графіки. Завдяки OpenGL, програмне забезпечення візуалізує результати оптимізації у реальному часі, що значно полегшує аналіз та інтерпретацію отриманих результатів.

Для оптимізації пакування куль у сферичному контейнері з умовами пропорційності використовувався алгоритм ProPortionPack (Алгоритм пропорційного пакування куль). Програмне забезпечення, створене на основі цього алгоритму, має модульну архітектуру, що забезпечує ефективне та гнучке розв’язання задачі.

Модуль підготовки даних відповідає за введення та валідацію початкових даних, таких як радіуси куль, розміри контейнера та параметри пропорційності. Він також формує набір вихідних даних, який використовується іншими модулями (Крок 0).

Модуль формування мінімального блоку виконує розрахунок та формування мінімального блоку куль, який відповідає умовам пропорційності. Цей блок виступає базовою одиницею для подальшої агрегації й пакування (Кроки 1 – 7).

Модуль оптимізації забезпечує інтеграцію з оптимізаційним солвером IPOPT. Він використовує метод внутрішніх точок для вирішення задач нелінійного програмування. Завдяки цьому модулю знаходяться локальні оптимальні розв’язки задачі з дотриманням усіх заданих обмежень.

Модуль агрегації блоків виконує комбінування мінімальних блоків куль у більші структури, дотримуючись умов пропорційності та геометричних обмежень. Він поступово додає блоки до контейнера, забезпечуючи максимальну ефективність заповнення (Кроки 8 – 12).

Модуль додаткового пакування додає окремі кулі для заповнення залишкового вільного простору у контейнері. Він враховує геометричні обмеження та умови пропорційності, забезпечуючи ще вищий коефіцієнт заповнення (Кроки 13 – 18).

Модуль візуалізації результатів, розроблений з використанням бібліотеки OpenGL, забезпечує графічне представлення процесу пакування. Це дозволяє оцінити розташування куль у контейнері та перевірити коректність роботи алгоритму.

Модуль контролю умов пропорційності відповідає за перевірку виконання пропорційних обмежень. Він слідкує за відповідністю часток куль заданим інтервалам пропорційності та, за потреби, вносить корективи у процес пакування (Кроки 1 – 12, контроль на всіх етапах).

Модульність програмного забезпечення дозволяє виконати декомпозицію алгоритму, що значно скорочує час розв'язання задачі та підвищує ефективність обчислень. Обчислювальні експерименти проводились на комп'ютері з такими параметрами: процесор Intel Core i5 750 2.5 GHz, оперативна пам'ять 6 GB.

Висновки за розділом 3

У розділі 3 було детально розглянуто програмну реалізацію задачі оптимізації пакування куль у сферичний контейнер з урахуванням умов пропорційності. Для цього було обрано середовище Embarcadero, яке надає потужні інструменти для створення складних алгоритмів і моделювань. Вибір цього середовища обумовлений його багатофункціональністю, що дозволяє розробляти багатоплатформні додатки з використанням різних мов програмування, таких як Delphi та C++Builder, а також підтримує інтеграцію з різними базами даних через InterBase та RAD Server.

Для вирішення задачі оптимізації пакування куль у контейнер з пропорційними умовами було використано солвер IPOPT. Цей інструмент є високоефективним для задач з сильно розрідженими матрицями та дозволяє знаходити локальні екстремуми для задач з нелінійними обмеженнями. Завдяки методу внутрішніх точок та лінійному пошуку, IPOPT забезпечує високу точність і швидкість при оптимізації.

Основним алгоритмом для оптимізації пакування куль став ProPortionPack, що враховує умови пропорційності в розміщенні куль. Алгоритм включає кілька етапів: формування мінімальних блоків куль, послідовне розміщення блоків у контейнері та пакування додаткових куль. Всі етапи алгоритму ґрунтуються на геометричних властивостях задачі, що дозволяє значно знизити складність і покращити ефективність розв'язку.

Програмна архітектура складається з кількох модулів, кожен з яких виконує певну функцію в межах загального процесу. Модулі включають обробку вхідних даних, формування мінімальних блоків куль, інтеграцію з IPOPT, агрегацію блоків, пакування додаткових куль та графічну візуалізацію результатів. Така модульна структура дозволяє зручно і ефективно вирішувати задачу, забезпечуючи високу продуктивність та можливість детального аналізу результатів оптимізації.

Завдяки використанню цих інструментів та алгоритмів, програмне забезпечення забезпечує точне і ефективне розв'язання задачі оптимізації пакування куль у сферичний контейнер, враховуючи всі умови пропорційності.

4 РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ ТА ІХ АНАЛІЗ

Для перевірки роботи алгоритму ProPortionPack було проведено обчислювальні експерименти на прикладах із різними кількостями куль — від 40 до 50, а також для наборів, що містять понад 100 куль. У кожному випадку було проаналізовано різні умови пропорційності, включаючи варіанти з нестрогими нерівностями та точними значеннями пропорцій між типами куль.

Вихідні дані для обчислювальних експериментів зі строгими пропорціями наведено в таблиці 4.1. Тут k – тип кулі, який визначає один з різних типів, що використовуються для пакування; τ_k^- – мінімальне значення частки куль типу k у наборі; τ_k^+ – максимальне значення частки куль типу k у наборі.

Таблиця 4.1 – Вихідні дані для прикладів зі строгими пропорціями.

k	n_k	радіус кулі $\{i_k\}$	τ_k^-	τ_k^+
1	50	2	1/7	1/7
2	100	1,5	2/7	2/7
3	200	1	4/7	4/7

Приклад 4.1. Радіус контейнера – $R = 6.1$, кількість типів куль – $K = 3$. Значення кількості куль різних типів $\{i_k\}$ у наборі n_k, їхні радіуси, та діапазон значень часток $\tau_k \in [\tau_k^-, \tau_k^+]$ наведено у табл. 4.1. Кількість розміщених куль становить $n^* = 42$, серед яких $n_1^* = 6, n_2^* = 12, n_3^* = 24$, що задовольняє задані умови пропорційності. Час роботи алгоритму склав 15 секунд. Значення коефіцієнту заповнення дорівнювало 0,495636. Графічна ілюстрацій розміщених куль показана на рис. 4.1.

Приклад 4.2. Радіус контейнера та кількість типів куль – такі самі, як в Прикладі 4.1. Значення кількості куль різних типів $\{i_k\}$ у наборі n_k, їхні радіуси, та діапазон значень часток $\tau_k \in [\tau_k^-, \tau_k^+]$ наведено у табл. 4.2. Кількість розміщених куль $n^* = 43$, серед яких – $n_1^* = 6$, $n_2^* = 12$, $n_3^* = 25$. Час обчислення склав 27 секунд. Як бачимо, більш гнучкі умови пропорційності дали змогу розмістити одну додаткову кулю. Коефіцієнт заповнення збільшився до 0,500042. Графічна ілюстрацій розміщених куль показана на рис. 4.2.

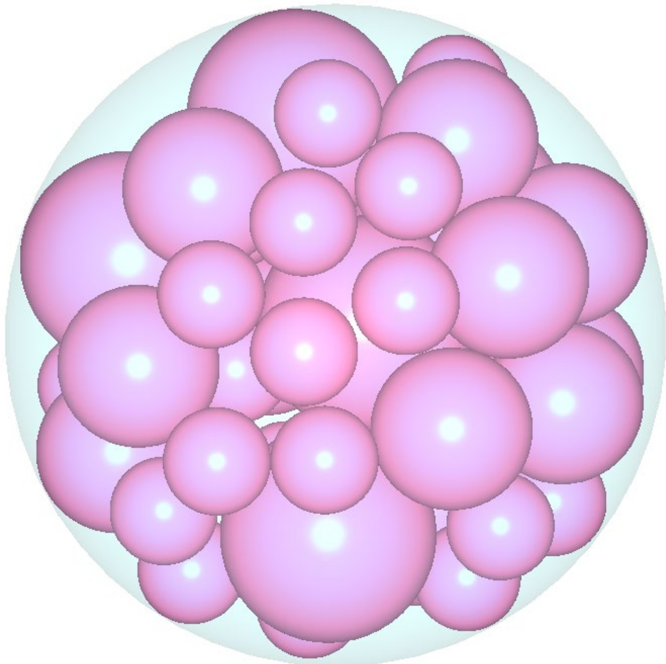

Рисунок 4.1 – Ілюстрація упаковки куль для Прикладу 4.1

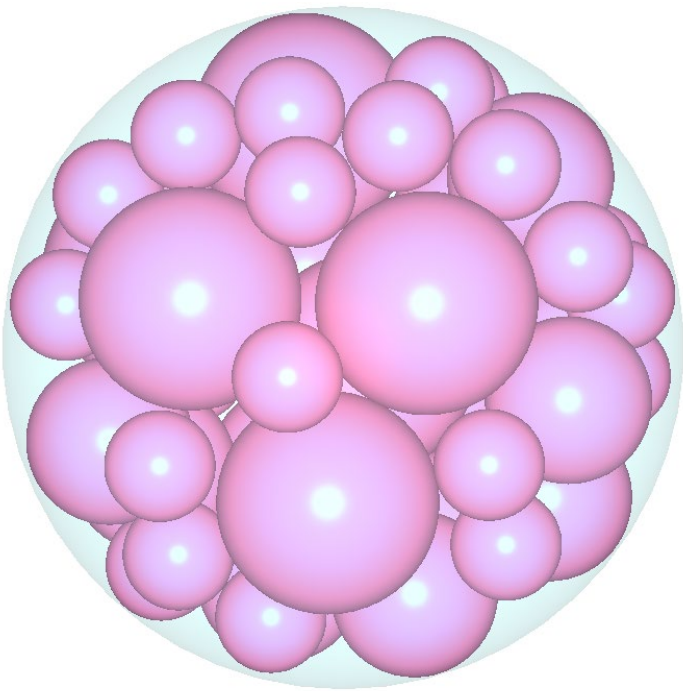

Рисунок 4.2 – Ілюстрація упаковки куль для Прикладу 4.2

Таблиця 4.2 – Вихідні дані для прикладів з нестрогими пропорціями

k	n_k	радіус кулі $\{i_k\}$	τ_k^-	τ_k^+
1	50	2	1/7-0.01	1/7+0.01
2	100	1,5	2/7-0.01	2/7+0.01
3	200	1	4/7-0.01	4/7+0.01

Приклад 4.3. Радіус контейнера – $R=8$, кількість типів куль – $K=3$. Значення кількості куль різних типів $\{i_k\}$ у наборі n_k, їхні радіуси, та діапазон значень часток $\tau_k \in [\tau_k^-, \tau_k^+]$ наведено у табл. 4.1. Кількість розміщених куль становить $n^*=105$, серед яких $n_1^*=15,\ n_2^*=30,\ n_3^*=60$, що задовольняє задані умови. Час обчислення склав 3 хвилини 15 секунд. Коефіцієнт заповнення сягнув 0,553218. Графічна ілюстрація розміщених куль наведена на рис. 4.3.

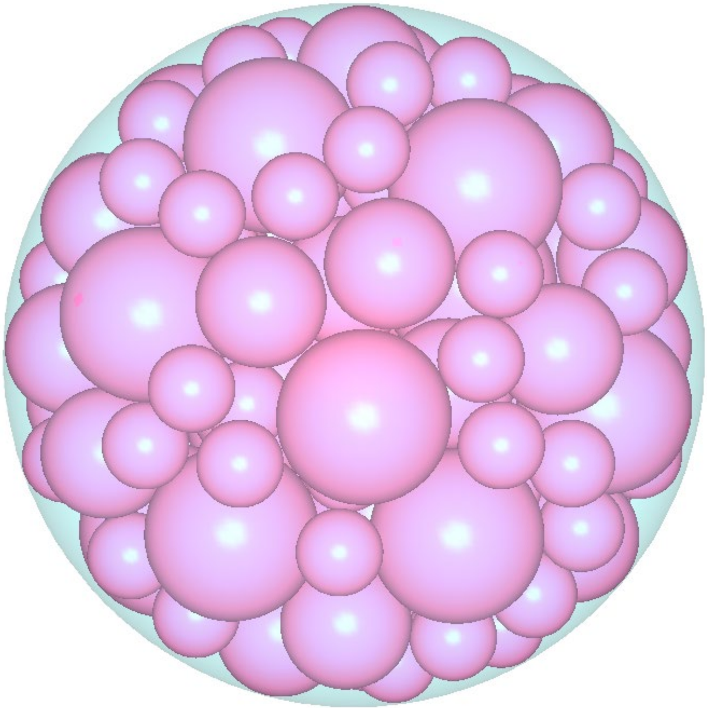

Рисунок 4.3 – Ілюстрація упаковки куль для Прикладу 4.3

Приклад 4.4. Радіус контейнера та кількість типів куль – такі самі, як в Прикладі 5.3. Значення кількості куль різних типів $\{i_k\}$ у наборі n_k, їхні радіуси, та діапазон значень часток $\tau_k \in [\tau_k^-, \tau_k^+]$ наведено у табл. 4.2. Кількість розміщених куль $n^* = 109$, серед яких – $n_1^* = 15,\ n_2^* = 31,\ n_3^* = 63$. Час обчислення склав 10 хвилин 15 секунд. Релаксовані умови пропорційності дали змогу розмістити чотири додаткових кулі. Коефіцієнт заповнення збільшився до 0,561768. Графічна ілюстрацій розміщених куль показана на рис. 4.4.

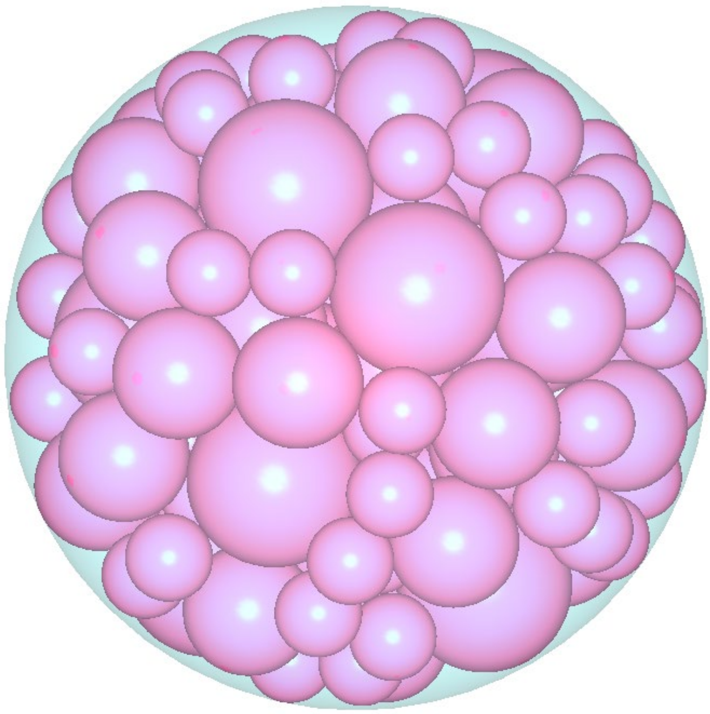

Рисунок 4.4 – Ілюстрація упаковки куль для Прикладу 4.4

Зміни в умовах пропорційності, зокрема, розширення діапазону часток куль, дозволяють поліпшити ефективність упаковки. Така гнучкість у визначенні пропорцій куль веде до збільшення коефіцієнта заповнення, що свідчить про значне підвищення щільності упаковки. Це підкреслює важливість оптимального налаштування пропорцій для досягнення кращих результатів.

Коефіцієнт заповнення поліпшується із збільшенням кількості куль. Це підтверджує, що оптимізація процесу упаковки може бути ефективішною для більших наборів куль, де кожен тип кулі займає своє місце в контейнері з максимальною вигодою. Однак потрібно враховувати, що збільшення кількості куль також потребує більше часу для обчислень, що впливає на загальну ефективність процесу. Для практичного використання алгоритмів упаковки куль необхідно знаходити баланс між кількістю куль та часом, який витрачається на обчислення. У майбутньому можна досліджувати шляхи оптимізації часу обчислень, не втрачаючи в ефективності пакування.

Встановлення жорстких пропорційних обмежень може обмежувати можливість оптимальної упаковки, в той час як більш гнучкіші умови щодо пропорційності дозволяють досягти кращих результатів, збільшуючи можливу кількість куль у контейнері. Це демонструє, що важливим аспектом є адаптивність та можливість коригувати пропорції залежно від конкретних умов задачі.

Висновки за розділом 4

У розділі 4 було розглянуто проведені обчислювальні експерименти для перевірки роботи алгоритму пакування куль з умовами пропорційності. Проведені обчислювальні експерименти продемонстрували високу ефективність розробленого алгоритму пакування куль з умовами пропорційності. Аналіз отриманих результатів показав, що алгоритм здатен ефективно розміщувати кулі в контейнері, забезпечуючи високу щільність пакування, що підтверджується значними значеннями коефіцієнта заповнення. Для різних наборів куль, у тому числі для наборів з понад 100 куль, алгоритм показав добрі результати з точки зору обчислювальної ефективності, що свідчить про можливість застосування його до задач великого масштабу.

Особливо слід відзначити, що поступова релаксація умов пропорційності призводить до значного збільшення коефіцієнта заповнення. Це свідчить про ефективність застосування більш гнучких умов для досягнення кращих результатів пакування, що є важливим для вирішення практичних задач, де ідеальні пропорції можуть бути важко досяжні. Точні значення пропорцій для кожного типу куль дозволяють отримати оптимальні рішення при збереженні заданих обмежень.

Час виконання обчислень був цілком прийнятним для більшості досліджуваних прикладів, навіть при великих наборах куль. Результати підтверджують здатність алгоритму працювати в реальному часі і забезпечувати належну швидкість при обчисленні великих кількостей куль, що робить його придатним для практичних застосувань. Загалом, цей алгоритм демонструє хорошу продуктивність і стабільність при роботі з різними вхідними даними, що робить його універсальним інструментом для задач пакування в геометричних контейнерах з умовами пропорційності.

Зважаючи на результативність алгоритму ProPortionPack та помітне покращення коефіцієнта заповнення при варіативності умов пропорційності, можна стверджувати, що розроблений підхід є ефективним і гнучким, здатним адаптуватися до різних умов і забезпечувати високі результати в задачах пакування.

ВИСНОВКИ

У кваліфікаційній роботі було розглянуто задачу пакування куль у сферичному контейнері з умовами пропорційності кількості куль різного радіусу.

Було проведено детальний аналіз існуючих методів розв'язання задач пакування куль, включаючи задачі з відкритою метричною характеристикою (ODP) та задачі про рюкзак (KP). Визначено, що перехід від задачі KP до задачі ODP дозволяє гнучкіше підходити до оптимізації розміщення куль.

Наведено математичну модель задачі пакування куль з умовами пропорційності, яка включає змішане цілочислове нелінійне програмування (MINLP). Модель враховує всі необхідні обмеження та вимоги задачі, що дозволяє ефективно знаходити оптимальні розв'язки.

Запропоновано евристичний алгоритм для розв'язання задачі пакування куль, який поєднує блочну оптимізацію та методи нелінійного програмування. Алгоритм дозволяє швидко знаходити допустимі рішення, враховуючи умови пропорційності та специфічні обмеження задачі.

Розроблено програмне забезпечення на мовах Delphi та C++, яке включає модулі для введення даних, обчислення Ф-функцій, формування обмежень задачі, розв'язання задачі з відкритою метричною характеристикою, формування мінімального блоку, агрегації множини куль та графічної візуалізації. Використання солвера IPOPT забезпечує ефективне розв'язання задач нелінійного програмування.

Проведені обчислювальні експерименти показали ефективність запропонованого алгоритму для різних наборів куль. Було розглянуто приклади для 40 – 50 куль та понад 100 куль, а також умови пропорційності з нестрогими нерівностями й точними значеннями пропорцій. Ефективність пакування оцінювалась за коефіцієнтом заповнення, який показав високі значення, що свідчить про ефективність алгоритму.

Результати роботи мають практичну значущість для задач геометричного проєктування та оптимізації розміщення об'єктів у обмеженому просторі. Запропонований підхід може бути використаний для розв'язання широкого спектру задач у різних галузях, включаючи логістику, виробництво та матеріалознавство. Робота також демонструє можливість застосування сучасних методів оптимізації та програмних інструментів для вирішення складних математичних задач.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Нарбут О., Яськов Г. Евристичний підхід до пакування неоднорідних куль з умовами пропорційності у сферичному контейнері. *13-та Міжнародна науково-технічна конференція «Інформаційні системи та технології ІСТ-2024»* (26-28 листопада 2024 р.) : матеріали конференції. Харків, ХНУРЕ, 2024. С. 107–108.

2. Пакування сферичних об’єктів: моделі, методи, застосування / Стоян Ю. Г., Яськов Г. М., Романова Т. Є., Яковлев С. В. Київ : Наукова думка, 2021. 279 с.

3. Waescher G., Haussner H., Schumann H. An improved typology of cutting and packing problems. *European Journal of Operational Research*. 2007. Vol. 183. P. 1109–1130.

4. Budrikis Z. Packing finite numbers of spheres efficiently. *Nat Rev Phys*. 2024. Vol. 6, 82.

5. Stoyan Y., Yaskov G., Romanova T. et. al. Optimized packing multidimensional hyperspheres: a unified approach. *Mathematical Biosciences and Engineering*. 2020. Vol. 17(6). P. 6601–6630.

6. Ranade V. V. Engineering reactors for catalytic reactions. *J Chem Sci*. 2014. Vol. 126. P. 341–351.

7. Masoero E., Del Gado E., Pellenq R. J.-M., et.al. Nanostructure and Nanomechanics of Cement: Polydisperse Colloidal Packing. *Physical Review Letters*. 2012. Vol. 109, 155503.

8. Chaturvedi S., Maheshwari D., Chawathe A. et al. Current analytical approaches for characterizing nanoparticle sizes in pharmaceutical research. *J Nanopart Res*. 2024. Vol. 26, 19.

9. Li S., Zhu X., Wang B. et al. Influence of Ag Nanoparticles with Different Sizes and Concentrations Embedded in a TiO2 Compact Layer on the Conversion Efficiency of Perovskite Solar Cells. *Nanoscale Res Lett*. 2018. Vol. 13(210). P. 1–11.

10. URL : http://www.packomania.com (дата звернення 06.01.2024).

11. Mangulkar M., Jamkar S. Review of Particle Packing Theories Used For Concrete Mix Proportioning. *Int. J. Sci. Eng. Res.* 2013. Vol. 4. P. 143-148.

12. Mix design of concrete : Advanced particle packing model by developing and combining multiple frameworks / Kurda R., Salih A., Shakor P., Saleh P., Alyousef R., Ahmed H., Aslani F. *Construction and Building Materials*. 2022. Vol. 320. P.126218.

13. A Ternary Model for Particle Packing Optimization / Abu-Lebdeh T.M.; Damptey R.; Ungureanu L. M.; Petrescu F. I. T. *J. Compos. Sci.* 2022. Vol. 6. P. 1–13.

14. Стоян Ю. Г., Романова Т. Є., Чернов Н. І., Панкратов О. В. Повний клас Ф-функцій для базових об'єктів. Доп. НАН України. 2010. № 12. С. 25–30.

15. Scheithauer G., Stoyan Yu. G., Romanova T. Ye. Mathematical modeling of interactions of primary geometric 3D objects. Cybernetics and Systems Analysis. 2005. Vol. 41. Iss. 3. P. 332–342.

16. Stoyan Y., Romanova T., Pankratov A., Chugay A. Optimized object packings using quasi-phi-functions. *Optimized Packings with Applications*. Fasano G., Pintér J. (Eds). Springer Optimization and Its Applications. Springer, Cham, 2015. Vol 105. P. 265–293.

17. Pankratov A. V., Romanova T. E., Chugay A. M. Optimal packing of convex polytopes using quasi-phi-functions. Проблеми машинобудування. Харків, 2015. Т. 18, № 2. Р. 55–65.

18. A feasible path-based branch and bound algorithm for strongly nonconvex MINLP problems / Liu C., Ma Y., Zhang D., Li. *J. Frontiers in Chemical Engineering*. 2002. Vol. 4. P. 1–20.

19. De Mauri M., Gillis J., Swevers J. et al. A proximal-point outer approximation algorithm. *Comput Optim Appl.* 2020. Vol. 77. P. 755–777.

20. Accelerating Generalized Benders Decomposition for Wireless Resource Allocation / Lee M., Ma N., Yu G., Dai H. *ArXiv*. 2020. 2003.01294. P. 1–14.

21. Su L., Tang L., Grossmann I. E. Computational Strategies for Improved MINLP Algorithms. Journal of Optimization Theory and Applications. 2020. Vol.

184(3). P. 1–20.

22. A center-cut algorithm for quickly obtaining feasible solutions and solving convex MINLP problems / Kronqvist J., Bernal D. E., Lundell A., Westerlund T. *Optimization and Engineering*. 2020. Vol. 22(3). P. 1315–1345.

23. Xu Y., Yin W. A Block Coordinate Descent Method for Regularized Multiconvex Optimization with Applications to Nonnegative Tensor Factorization and Completion. *SIAM Journal on Imaging Sciences*. 2013. Vol. 6(3). P. 1758–1789.

24. Embarcadero Technologies : *Architecture & Modeling Tools*. URL : https://www.embarcadero.com/architecture-modeling-tools (дата звернення 06.01.2024).

25. Wächter A., Biegler L. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Math. Program.* 2006 Vol. 106. P. 25–57.

26. Lehn K., Gotzes M., Klawonn F. The Open Graphics Library (OpenGL). *Introduction to Computer Graphics*. Undergraduate Topics in Computer Science. Cham : Springer, 2023.