

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОТНОЙ УПАКОВКИ 3D-ОБЪЕКТОВ

**Аннотация.** Представлена концепция Ф-функций и квази Ф-функций как эффективных средств для моделирования трехмерных задач упаковки выпуклых объектов, допускающих непрерывные повороты и трансляции. Формулируется математическая модель задачи плотной упаковки выпуклых объектов и рассматриваются ее основные свойства. Рассмотрен метод решения, который включает следующие этапы: построение начальных точек, вычисление локальных экстремумов и переход из одного локального минимума к другому. Предложенный подход к решению задачи является эффективным для решения оптимизационных задач упаковки. Приведены численные эксперименты.

**Ключевые слова:** упаковка, математическое моделирование, оптимизация, квази Ф-функция, выпуклые трехмерные объекты, трансляция, поворот.

### ВВЕДЕНИЕ

Во многих ситуациях исследователям приходится решать задачи, в которых нерегулярные пространственные структуры могут быть интерпретированы как системы плотноупакованных твердых частиц, имеющих различную форму. На протяжении длительного времени изучается возможность построения моделей и применения вычислительных методов для компьютерного моделирования новых материалов. При этом плотная упаковка несферических частиц используется при моделировании структуры и изучении свойств различных композитных и стеклоподобных материалов, коллоидных растворов, гранулированных и пористых сред, смесевых топлив [1–3]. Например, в работе [4] авторы предложили новый метод моделирования плотных материалов на основе алгоритма упаковки сферополиэдров (объектов, образованных с использованием суммы Минковского шара и параллелепипеда). Предложенный в настоящей статье метод может быть применен для виртуального проектирования плотных материалов, имеющих в составе несферические частицы. В [5] рассматривается оптимизационный подход к имитационному моделированию различных микроструктур. Авторами решены задачи оптимизации функции пористости и поиска оптимальной модели гранулометрического состава исследуемой микроструктуры. Актуальным приложением предложенного подхода является задача 3D-реконструкции микроструктуры зерна.

В работе [6] рассмотрена методика создания плотных случайных упаковок твердых частиц с использованием сфероцилиндров. Описанный метод производит упаковку сфероцилиндров, достаточно хорошо моделирующую структуру анизотропных порошков и коллоидных веществ.

В статье [7] представлена компьютерная модель, предназначенная для определения плотности гранулированных материалов путем упаковки трехмерных эллипсоидов. Предложен специальный подход, предотвращающий блокирование частиц по мере их продвижения вглубь контейнера. Внедрен процесс выборочного обследования для определения средней плотности упаковки или во всем контейнере, или в любой его части. Полученные результаты сравниваются с распределением песчинок в обычном песке.

В [8] приведен обзор работ, посвященных упаковке сфероидов, цилиндров и тел произвольной формы в задачах порошковой металлургии. Описанные в статье подходы основаны на различных аппроксимациях произвольных частиц и использовании эвристических методов.

Решению задачи оптимального размещения грузовых контейнеров различных форм (цилиндры, параллелепипеды и другие нестандартные формы, образованные с использованием параллелепипедов) посвящены работы [9–11].

В статье [12] автор предложил использовать задачу упаковки различных многогранников при создании физических прототипов трехмерных компьютерных моделей, необходимых на ранних стадиях производства новых продуктов. В данном случае целью плотной упаковки объектов служит максимизация площади послойного запекания порошка.

Цель данного исследования — построение адекватной математической модели задачи плотного размещения заданного класса трехмерных геометрических объектов и разработка метода ее решения.

#### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим класс трехмерных геометрических объектов, которые могут быть получены из «универсального» объекта, называемого сфероконусом. Сфероконусом является трехмерный выпуклый геометрический объект, представляющий объединение усеченного конуса высотой  $2h$  с радиусами верхнего и нижнего оснований  $r_1$  и  $r_2$  ( $r_1 \geq r_2$ ) соответственно, верхнего сферического сегмента с высотой и радиусом основания, равными  $w_1$  и  $r_1$  соответственно, и нижнего сферического сегмента, высота и радиус основания которого равны  $w_2$  и  $r_2$  соответственно. Обозначим  $\mu = (r_1, r_2, w_1, w_2, h)$  вектор метрических характеристик сфероконуса. Сфероконус является базовым объектом, изменяя метрические характеристики которого можно получить следующие трехмерные объекты: сфероцилиндр ( $\mu = (r_1, r_2, w_1, w_2, h)$ ,  $r_1 = r_2$ ); усеченный конус ( $\mu = (r_1, r_2, 0, 0, h)$ ); цилиндр ( $\mu = (r_1, r_2, 0, 0, h)$ ,  $r_1 = r_2$ ); конус ( $\mu = (r_1, 0, 0, 0, h)$ ); сферические сегменты ( $\mu = (r_1, 0, w_1, 0, 0)$  или  $\mu = (0, r_2, 0, w_2, 0)$ ); сферический диск ( $\mu = (r_1, r_2, w_1, w_2, 0)$ ,  $r_1 = r_2$ ).

Рассматриваемая задача плотной упаковки имеет следующую постановку. Пусть задано множество геометрических объектов  $O_i \in R^3$ ,  $i \in I = \{1, \dots, n\}$  (в дальнейшем объекты), каждый из которых может быть параллелепипедом, шаром, сфероконусом, сфероцилиндром, усеченным конусом, цилиндром, конусом, сферическим сегментом, сферическим диском и объектом, представляющим сумму Минковского перечисленных выше объектов с шаром. Объекты  $O_i, i \in I$ , допускают трансляцию на вектор  $v_i = (x_i, y_i, z_i) \in R^3$  и повороты на углы  $\theta_i = (\theta_{x_i}, \theta_{y_i}, \theta_{z_i})$ ,  $i \in I$ . Вектор движения объекта  $O_i, i \in I$ , обозначим  $u_i = (v_i, \theta_i)$ . Тогда вектор  $u = (u_1, \dots, u_n) \in R^{6n}$  определяет положение всех объектов в  $R^3$ .

Контейнер  $\Omega$  задается в виде кубоида:

$$\Omega = \{(x, y, z) \in R^3: l_1 \leq x \leq l_2, w_1 \leq y \leq w_2, h_1 \leq z \leq h_2\},$$

где  $l_1, l_2, w_1, w_2, h_1, h_2$  — переменные. Контейнер  $\Omega$ , размеры которого задаются вектором  $u_\Omega = (l_1, l_2, w_1, w_2, h_1, h_2)$ , обозначим  $\Omega(u_\Omega)$ .

**Задача.** Найти вектор  $u^*$  такой, чтобы объекты  $O_i, i \in I$ , содержались в контейнере  $\Omega(u_\Omega)$  и его объем  $F(u_\Omega) = (l_2 - l_1)(w_2 - w_1)(h_2 - h_1)$  достигал минимума.

#### МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОСТАВЛЕННОЙ ЗАДАЧИ

Для построения математической модели поставленной задачи в статье используется понятие квази-Ф-функции [14], основой которой является разделяющая

плоскость с параметрами  $u_p = (\alpha, \beta, d)$ . Тогда такую математическая модель представим в виде

$$F(u_\Omega^*) = \min F(u_\Omega), X \in W \subset R^\theta, \quad (1)$$

где

$$W = \{X = (u, u_p, u_\Omega) \in R^\theta : \Phi'_{ij}(u_i, u_j, u_{p_{ij}}) \geq 0, i < j \in I, \\ \Phi_i(u_i, u_\Omega) \geq 0, i \in I\}, \quad (2)$$

$\Phi'_{ij}(u_i, u_j, u_{p_{ij}})$  — квази  $\Phi$ -функция геометрических объектов  $O_i(u_i)$  и  $O_j(u_j)$ ,  $i < j \in I$  [15],  $\Phi_i(u_i, u_\Omega)$  —  $\Phi$ -функция геометрических объектов  $O_i(u_i)$  и  $\text{cl}(R^3 \setminus P)$ ,  $i \in I$ ,  $u_p = (u_{p_{11}}, u_{p_{12}}, \dots, u_{p_{(n-1)n}}) \in R^\kappa$  — вектор параметров разделяющих плоскостей для каждой пары размещаемых объектов,  $u_{p_{ij}} = (\alpha_{ij}, \beta_{ij}, d_{ij})$ ,  $\kappa = \frac{3}{2}n(n-1)$ ,  $\theta = 6n + \kappa + 6$  [15].

Отметим некоторые особенности математической модели (1), (2). Поскольку квази  $\Phi$ -функции включают оператор  $\max$ , то область допустимых решений задачи может быть представлена в виде

$$W = \bigcup_{\tau=0}^{\xi} W_\tau, \quad (3)$$

где  $W_\tau$  — допустимая подобласть, задаваемая системой неравенств вида  $Y^\tau(X) = \{\zeta_{t\tau}(\xi_t) \geq 0\}$ ,  $t \in \Gamma = \{1, 2, \dots, \mu\}$ ,  $\xi_l \in \{(u_i, u_j, u_{p_{ij}}), (u_i, u_\Omega)\}$ .

Функции  $\zeta_{t\tau}(\xi_t)$ ,  $t \in \Gamma$ , являются либо гладкими, либо кусочно-гладкими; граница  $\Lambda_\tau$  — овражная поверхность; матрицы систем неравенств типа (3) являются сильно разреженными и имеют блочную структуру.

Задача (1), (2) является NP-трудной.

#### МЕТОД РЕШЕНИЯ

Поскольку математическая модель (1), (2) построена в виде задачи нелинейного программирования, то для ее решения могут быть применены различные модификации методов нелинейной оптимизации (например, метод возможных направлений, метод внутренней точки и др.). Однако для применения численных методов нелинейной оптимизации необходимо иметь допустимую начальную точку.

**Построение допустимой начальной точки.** Среди методов, которые применяются для построения начальных точек, в задачах размещения объектов в основном используются различные модификации «жадных» алгоритмов. Применение жадных алгоритмов в рассматриваемой задаче представляет большую сложность.

В связи с этим в работе предлагается метод, который позволяет генерировать любые допустимые начальные точки задачи (1), (2). Этот метод включает следующие шаги. Первоначально каждый объект  $O_i$  покрывается шаром  $S_i$  минимального радиуса  $R_i^0$ ,  $i \in I$ . Далее будем полагать, что собственные системы координат объектов  $O_i$  и  $S_i$ ,  $i \in I$ , совпадают, а также что  $R_i$ ,  $i \in I$ , являются переменными и формируют вектор  $R = (R_1, R_2, \dots, R_n)$ . Значения компонент вектора  $u_\Omega = u_\Omega^0$  (размеры кубоида) выбираются таким образом, что все шары  $S_i$ ,  $i \in I$ , гарантированно размещаются в  $\Omega(u_\Omega)$ . Далее компоненты этого вектора считаются постоянными. Положим  $R_i = 0$ ,  $i \in I$ , и случайным образом сгенерируем век-

тор  $v = (v_1, \dots, v_n)$  таким образом, что  $v_i \in \Omega(u_\Omega)$ ,  $i \in I$ . В результате получим вектор  $E^\diamond = (v, R) = (v, 0)$ . Взяв точку  $E^\diamond$  в качестве начальной, решаем задачу нелинейного программирования

$$F_1(\hat{R}) = \max F_1(R) = \sum_{i=1}^n R_i, \quad E = (v, R) \in G \subset R^{4n}, \quad (4)$$

$$G = \{E \in R^{4n}: \Phi_{ij}(v_i, v_j, R_i, R_j) \geq 0, i < j \in I, \\ \Phi_i(v_i, R_i) \geq 0, R_i^0 - R_i \geq 0, R_i \geq 0, i \in I\}, \quad (5)$$

где  $\Phi_{ij}(v_i, v_j, R_i, R_j)$  —  $\Phi$ -функция для  $S_i$  и  $S_j$ ,  $\Phi_i(v_i, R_i)$  —  $\Phi$ -функция для  $S_i$  и  $\Omega^* = \text{cl}(R^3 \setminus \Omega)$  [15]. Пусть  $\hat{E} = (\hat{v}, R^0)$  — глобальный максимум задачи (4), (5), т.е.  $F_1(\hat{R}) = \sum_{i=1}^n R_i^0$ . Взяв точку  $(\hat{v}, u_\Omega^0)$  в качестве начальной, решим следующую задачу:

$$F(\tilde{u}_\Omega) = \min F(u_\Omega), \quad Z \in Q \subset R^{3n+6}, \quad (6)$$

$$Q = \{Z \in R^{3n+6}: \Phi_{ij}(v_i, u_j) \geq 0, i < j \in I, \Phi_i(v_i, u_\Omega) \geq 0, i \in I\}. \quad (7)$$

Пусть  $\tilde{Z} = (\tilde{v}, \tilde{u}_\Omega)$  — локальный минимум задачи (6), (7). Для построения точки  $X^* \in W$  относительно задачи (1), (2) установим  $v^* = \tilde{v}$ , зададим случайно углы  $\theta_{x_i}^*, \theta_{y_i}^*, \theta_{z_i}^* \in [0, 2\pi]$ ,  $i \in I$ , и определим вектор  $u_p^*$ . Для того чтобы определить компоненты  $u_{p_{ij}}^*$  вектора  $u_p^*$ , строятся разделяющие плоскости для каждой пары шаров  $S_i(v_i^*)$  и  $S_j(v_j^*)$ ,  $i < j \in I$ . Первоначально строим уравнения прямых  $L_{ij}$ , проходящих через точки  $v_i^*$  и  $v_j^*$ , в виде  $\frac{x - x_i^*}{x_j^* - x_i^*} = \frac{y - y_i^*}{y_j^* - y_i^*} = \frac{z - z_i^*}{z_j^* - z_i^*}$ . Затем формируем точки  $(N_{ij}^{11}, N_{ij}^{12}, N_{ij}^{13}), (N_{ij}^{21}, N_{ij}^{22}, N_{ij}^{23}), 0 < i < j \in I$ , где

$$N_{ij}^{11} = x_i + R_i^0(x_j^* - x_i^*) / \varsigma_{ij}, \quad N_{ij}^{12} = y_i + R_i^0(y_j^* - y_i^*) / \varsigma_{ij}, \\ N_{ij}^{13} = z_i + R_i^0(z_j^* - z_i^*) / \varsigma_{ij}, \quad N_{ij}^{21} = x_j - R_j^0(x_j^* - x_i^*) / \varsigma_{ij}, \\ N_{ij}^{22} = y_j - R_j^0(y_j^* - y_i^*) / \varsigma_{ij}, \quad N_{ij}^{23} = z_j - R_j^0(z_j^* - z_i^*) / \varsigma_{ij}, \\ \varsigma_{ij} = \sqrt{(x_j^* - x_i^*)^2 + (y_j^* - y_i^*)^2 + (z_j^* - z_i^*)^2}.$$

Далее строим уравнения плоскостей  $N_{ij}$ , проходящих через точки  $((N_{ij}^{11} + N_{ij}^{21})/2, (N_{ij}^{12} + N_{ij}^{22})/2, (N_{ij}^{13} + N_{ij}^{23})/2)$  перпендикулярно прямым  $L_{ij}$ , в виде

$$(x - (N_{ij}^{11} + N_{ij}^{21})/2)(x_j^* - x_i^*) + (y - (N_{ij}^{12} + N_{ij}^{22})/2)(y_j^* - y_i^*) + \\ + (z - (N_{ij}^{13} + N_{ij}^{23})/2)(z_j^* - z_i^*) = 0, \quad 0 < i < j \in I.$$

Очевидно, что  $N_{ij}$  является разделяющей плоскостью для шаров  $S_i(v_i^*)$  и  $S_j(v_j^*)$ . Тогда, приняв

$$a_{ij}^* = (x_j^* - x_i^*) / \zeta_{ij}, \quad b_{ij}^* = (y_j^* - y_i^*) / \zeta_{ij}, \quad c_{ij}^* = (z_j^* - z_i^*) / \zeta_{ij},$$

$$d_{ij}^* = -((N_{ij}^{11} + N_{ij}^{21})(x_j^* - x_i^*) + (N_{ij}^{12} + N_{ij}^{22})(y_j^* - y_i^*) + (N_{ij}^{13} + N_{ij}^{23})(z_j^* - z_i^*)) / 2\zeta_{ij},$$

получим нормальное уравнение  $(x - (N_{ij}^{11} + N_{ij}^{21})/2)a_{ij}^* + (y - (N_{ij}^{12} + N_{ij}^{22})/2)b_{ij}^* + (z - (N_{ij}^{13} + N_{ij}^{23})/2)c_{ij}^* + d_{ij}^* = 0$  плоскости  $N_{ij}$ . Поскольку шары  $S_i(v_i^*)$  и  $S_j(v_j^*)$  покрывают объекты  $O_i(v_i^*)$  и  $O_j(v_j^*)$  соответственно, то плоскость  $N_{ij}$  является для них разделяющей. Это дает возможность сформировать вектор  $u_p^* = (u_{p11}^*, u_{p12}^*, \dots, u_{p(n-1)n}^*)$ , где  $u_{p_{ij}}^* = (\alpha_{ij}^*, \beta_{ij}^*, d_{ij}^*)$ ,  $\alpha_{ij}^* = \arcsin a_{ij}^*$ ,  $\beta_{ij}^* = \arcsin(b_{ij}^* / \sqrt{1 - \cos^2 \alpha_{ij}^*})$ .

**Локальная оптимизация.** Поскольку допустимая область  $W$  задается большим количеством неравенств, то непосредственное применение методов нелинейной оптимизации приведет к значительным потерям вычислительного времени. Основываясь на том, что область допустимых решений представляется в виде объединения подобластей (см. (3)), можно существенно уменьшить время поиска локального минимума, сведя его к решению последовательности подзадач, в которых область допустимых решений определяется значительно меньшим количеством неравенств. Рассмотрим предлагаемый подход.

Выделим допустимую подобласть  $W_0$  такую, что  $X^* \in W_0 \subset W$ . Для того чтобы сформировать подобласть  $W_0$ , необходимо подставить точку  $X^*$  в неравенства, формирующие систему (2). Поскольку квази  $\Phi$ -функцию можно представить в виде  $\Phi'_{ij}(u_i, u_j, u_{p_{ij}}) = \max\{\Psi_{ij}^s(u_i, u_j, u_{p_{ij}}), s=1, \dots, \wp_{ij}\}$ , где  $\wp_{ij}$  зависит от типа  $O_i$  и  $O_j$ , то допустимая подобласть  $W_0$  задается системой неравенств, которая формируется за счет выбора в каждой квази  $\Phi$ -функции  $\Phi'_{ij}(u_i, u_j, u_{p_{ij}})$  одной из функций  $\Psi_{ij}^a(u_i, u_j, u_{p_{ij}})$ ,  $a \in \{1, \dots, \wp_{ij}\}$ ,  $i < j \in I$ , такой, что  $\Phi'_{ij}(u_i^*, u_j^*, u_{p_{ij}}^*) = \Psi_{ij}^a(u_i^*, u_j^*, u_{p_{ij}}^*) = \chi_{ij}^*$ . Аналогичным способом выделяют неравенства из  $\Phi_i(u_i, u_\Omega) \geq 0$ ,  $i \in I$ . В результате получаем систему неравенств  $Y^0(X) \geq 0$  (см. (3)), которая описывает подобласть  $W_0$ .

Далее решаем задачу

$$F(u_\Omega^{0*}) = \min F(u_\Omega), \quad X \in W_0 \subset R^\theta \quad (8)$$

и вычисляем точку локального минимума  $X^{0*}$  для стартовой точки  $X^* \in W_0$ . Затем в системе  $Y^0(X^{0*}) \geq 0$  (см. (3)) выделяем активные неравенства  $\zeta_{j0}(\xi_j^{0*}) \geq 0$ ,  $j \in \Gamma_0 = \{1, 2, \dots, \mu_0\} \subset \Gamma = \{1, 2, \dots, \mu\}$ . Пусть выделенные неравенства принадлежат подсистемам неравенств  $\Psi_{ij}^a(u_i, u_j, u_{p_{ij}}) \geq 0$ ,  $i \in I_{0\eta_1} \subset I$ ,  $j \in I_{0\eta_2} \subset I$ . Это позволяет выбрать функции  $\Phi'_{ij}(u_i, u_j, u_{p_{ij}})$ , которые вмещают функции  $\Psi_{ij}^a(u_i, u_j, u_{p_{ij}})$ ,  $i \in I_{0\eta_1}$ ,  $j \in I_{0\eta_2}$ , и вычислить их значения в точке  $X^{0*}$ . Пусть  $\Phi'_{ij}(u_i^{0*}, u_j^{0*}, u_{p_{ij}}^{0*}) = \Psi_{ij}^c(u_i^{0*}, u_j^{0*}, u_{p_{ij}}^{0*}) = \chi_{ij}^0$ ,  $i \in I_{0\eta_1}$ ,  $j \in I_{0\eta_2}$ .

Если  $\chi_{ij}^0 > 0, i \in I_{0\eta_1}, j \in I_{0\eta_2}$ , то заменяем подсистемы  $\Psi_{ij}^a(u_i, u_j, u_{p_{ij}}) \geq 0$  на подсистемы  $\Psi_{ij}^c(u_i, u_j, u_{p_{ij}}) \geq 0, i \in I_{0\eta_1}, j \in I_{0\eta_2}$ . В результате получаем новую подсистему неравенств, определяющую новую допустимую подобласть  $W_1 \subset W$ . Очевидно, что  $X^{0*} \in W_1$ . Используя начальную точку  $X^{0*}$ , решаем задачу

$$F(u_\Omega^{1*}) = \min F(u_\Omega), X \in W_1 \subset R^\theta$$

и вычисляем точку локального минимума  $X^{1*}$ .

Вычислительный процесс продолжается  $\rho$  раз до тех пор, пока ни выполнится условие  $\chi_{ij}^\rho = 0, i \in I_{\rho\eta_1}, j \in I_{\rho\eta_2}$ .

Если значение каждой из функций  $\Phi'_{ij}(u_i, u_j, u_{p_{ij}})$  в точке  $X^{\rho*}$  определяется лишь одной функцией  $\Psi_{ij}^a(u_i, u_j, u_{p_{ij}}) \geq 0$ , то  $X^{\rho*}$  является точкой локального минимума относительно всей области  $W$ . Иначе необходимо исследовать все допустимые подобласти  $W_{\rho_i}, t \in \theta$ , содержащие точку  $X^{\rho*}$ , что может привести к существенным временным затратам. Поэтому в этом случае берем точку  $X^{\rho*}$  в качестве приближения к точке локального минимума относительно области  $W$ . Следует отметить, что аналогичная ситуация может быть получена, если решать задачу (1), (2) на всей области  $W$ .

**Уменьшение количества ограничений.** Системы неравенств  $Y^\tau(X) \geq 0$  (см. (3)), задающие подобласти  $W_\tau, \tau \in \{0, \dots, \zeta\}$ , состоят из большого количества неравенств. Очевидно, что чем больше количество размещаемых объектов  $n$ , тем больше число таких неравенств. Для уменьшения количества ограничений применим специальный подход, заключающийся в сведении решения задач вида (8) к решению последовательности оптимизационных подзадач. Преимущество предлагаемого подхода состоит не только в существенном сокращении числа ограничений, задающих допустимые области таких подзадач, но и в значительном уменьшении их размерности. Рассмотрим подробно эту процедуру решения.

Вначале зададим величину  $\sigma > 0$  и среди неравенств  $\Phi'_{ij}(u_i, u_j, u_{p_{ij}}) \geq 0, i < j \in I$ , выделим такие, что

$$\|v_i^{(\tau-1)*} - v_j^{(\tau-1)*}\| - (R_i^0 + R_j^0) \leq \sigma, i \in \Pi_1 \subset I, j \in \Pi_2 \subset I, \quad (9)$$

и среди неравенств  $\Phi_i(u_i, u_\Omega) \geq 0$  выделим такие, чтобы выполнялось хотя бы одно из условий

$$x_i^{(\tau-1)*} - R_i^0 - l_1^{(\tau-1)*} \leq \sigma, y_i^{(\tau-1)*} - R_i^0 - w_1^{(\tau-1)*} \leq \sigma, z_i^{(\tau-1)*} - R_i^0 - h_1^{(\tau-1)*} \leq \sigma,$$

$$l_2^{(\tau-1)*} - x_i^{(\tau-1)*} - R_i^0 \leq \sigma, w_2^{(\tau-1)*} - y_i^{(\tau-1)*} - R_i^0 \leq \sigma,$$

$$h_2^{(\tau-1)*} - z_i^{(\tau-1)*} - R_i^0 \leq \sigma, i \in \Pi_3 \subset I. \quad (10)$$

Выделим из системы  $Y^\tau(X) \geq 0$  (см. (3)) неравенства вида  $\zeta_\tau(\xi_i) \geq 0$ , которые являются частями неравенств  $\Phi'_{ij}(u_i, u_j, u_{p_{ij}}) \geq 0, i \in \Pi_1 \subset I, j \in \Pi_2 \subset I$ , и  $\Phi_i(u_i, u_\Omega) \geq 0, i \in \Pi_3 \subset I$ . Эти неравенства формируют подсистему  $Y^{\tau 0}(X) \geq 0$ , состоящую из  $t_{\mu_0}$  неравенств, и определяют подмножество  $W_{\tau 0} \subset W_\tau$ . Очевидно,  $Y^{\tau 0}(X^{(\tau-1)*}) \geq 0$  и  $t_{\mu_0} < \mu_\tau$ .

Пусть также среди всех пар геометрических объектов  $O_i$  и  $O_j$ , не являющихся одновременно шарами, существует  $q_0$  пар  $O_i$  и  $O_j, i \in \Pi_1 \subset I, j \in \Pi_2 \subset I$ , для которых выполняется условие (9).



Подсистема  $Y^{\tau 0} \geq 0$  описывает подмножество точек  $X^{\tau 0} \in W_{\tau 0} \subset R^{\theta-3q_0}$ .  
Взяв начальную точку  $X^{(\tau-1)0*} \in W_{\tau 0}$ , решим задачу

$$F(u_{\Omega}^{\tau 0*}) = \min F(u_{\Omega}), X^{\tau 0} \in W_{\tau 0} \subset R^{\theta-3q_0}, \quad (11)$$

где

$$W_{\tau 0} = \{X^{\tau 0} \in R^{\theta-3q_0} : Y^{\tau 0}(X^{\tau 0}) \geq 0, \frac{1}{2}\sigma - \|v_i^{(\tau-1)*} - v_i\| \geq 0, \\ i \in I \setminus (\Pi_1 \cup \Pi_2 \cup \Pi_3)\}.$$

Таким образом, в процессе решения данной задачи не строятся разделяющие плоскости объектов (не участвуют компоненты  $u_{p_{ij}}$  вектора  $u_p$ ), расстояние между описанными шарами которых больше, чем  $\sigma$ . Условия  $\frac{1}{2}\sigma - \|v_i^{(\tau-1)*} - v_i\| \geq 0$ ,  $i \in I \setminus (\Pi_1 \cup \Pi_2 \cup \Pi_3)$  гарантируют непересечение объектов  $O_i$ ,  $i \in \Pi_1 \cup \Pi_2 \cup \Pi_3$ , и их размещение в области  $\Omega$ .

Пусть  $X^{\tau 0*}$  — точка локального минимума данной задачи. Поскольку вектор  $u_p^{\tau 0*}$  не содержит всех координат вектора  $u_p$ , то отсутствующие координаты необходимо определить так, как это делается при построении начальной точки. Оставшиеся координаты вектора  $u_p$  приравниваются к соответствующим координатам вектора  $u_p^{\tau 0*}$ . Для точки  $X^{\tau 0*}$  формируем новую систему неравенств  $Y^{\tau 1}(X) \geq 0$ . На основании точки  $X^{\tau 0*}$  сформируем точку  $X^{\tau 1} \in W_{\tau 1}$  и, взяв ее в качестве начальной, решим задачу

$$F(u_{\Omega}^{\tau 1*}) = \min F(u_{\Omega}), X^{\tau 1} \in W_{\tau 1} \subset R^{\theta-3q_1}.$$

Таким образом, решается последовательность подзадач

$$F(u_{\Omega}^{\tau k*}) = \min F(u_{\Omega}), X^{\tau k} \in W_{\tau k} \subset R^{\theta-3q_k}, k = 1, 2, 3, \dots,$$

до тех пор, пока не будет выполнено условие  $F(u_{\Omega}^{\tau(k-1)*}) = F(u_{\Omega}^{\tau k*})$ .

Легко видеть, что чем меньше величина  $\sigma$ , тем меньше количество неравенств, задающих  $W_{\tau k}$ , и тем большее число  $k$  подзадач типа (11) необходимо решить, чтобы найти точку локального минимума задачи. Однако чем больше  $\sigma$ , тем больше неравенств содержится в системе, задающей  $W_{\tau k}$ , и требуется затратить больше времени для решения подзадач типа (11). Как показали численные эксперименты, значение величины  $\sigma$  выбирается равным среднему радиусу шаров, покрывающих объекты.

**Переход к лучшему локальному минимуму.** Ключевая идея метода перехода к лучшему локальному минимуму заключается в следующем. Для упаковки объектов, соответствующей текущему локальному минимуму, определяются две группы объектов: 1) объекты, в окрестности которых существует свободное пространство, а значит, эти объекты можно заменить такими объектами, которые имеют больший объем; 2) объекты, окрестности которых плотно заполнены, и это не позволяет уменьшить объем.

Для выявления таких объектов положим, что объекты  $O_i$  допускают гомотетические преобразования с коэффициентами гомотетии  $h_i$ ,  $i \in I$ , т.е. что  $h_i$ ,  $i \in I$ , являются переменными и формируют вектор  $h = (h_1, h_2, \dots, h_n) \in R^n$ . Объекты  $O_i$  с векторами движения  $u_i$  и коэффициентами гомотетии  $h_i$  обозначим  $O_i(u_i, h_i)$ ,  $i \in I$ . Очевидно, что квази-Ф-функции для  $O_i(u_i, h_i)$  и  $O_j(u_j, h_j)$  зави-

сят от  $h_i$  и  $h_j$ ,  $0 < i < j \in I$ , и  $\Phi$ -функции для  $O_i(u_i, h_i)$  и  $\text{cl}(R^3 \setminus \Omega(u_\Omega))$  зависят от  $h_i$ , т.е. эти функции принимают вид  $\Phi'_{ij}(u_i, u_j, u_{p_{ij}}, h_i, h_j)$ ,  $0 < i < j \in I$ , и  $\Phi_i(u_i, h_i, u_\Omega)$ ,  $i \in I$ , соответственно. Так, если  $h_i = 0$ , то  $O_i(u_i, 0)$  вырождается в точку  $v_i$ . Если  $h_i = 1$ , то  $O_i(u_i, 1)$  конгруэнтен исходному объекту  $O_i$ . Заметим, что для любого  $h_i \in (0, \infty)$  геометрические объекты  $O_i(u_i, h_i)$ ,  $i \in I$ , гомотетичны. Это означает, что квази  $\Phi$ -функции  $\Phi'_{ij}(u_i, u_j, u_{p_{ij}}, h_i, h_j)$ ,  $0 < i < j \in I$ , и  $\Phi$ -функции  $\Phi_i(u_i, h_i, u_\Omega)$ ,  $i \in I$ , имеют один и тот же вид для любого  $h_i \in (0, \infty)$ . Следовательно, появляется возможность увеличения или уменьшения размеров геометрических объектов, изменяя коэффициенты гомотетии  $h_i$ ,  $i \in I$ .

Вычислим  $V_i$  — объемы геометрических объектов  $O_i(u_i, h_i)$ ,  $i \in I$ , и сформулируем следующую вспомогательную задачу:

$$F(u_\Omega^*) = \min F(u_\Omega), \quad Y \in G \subset R^{\theta+n}, \quad (12)$$

где

$$G = \left\{ Y = (X, h) \in R^{\theta+n}: \Phi'_{ij}(u_i, u_j, u_{p_{ij}}, h_i, h_j) \geq 0, \quad i < j \in I, \quad \Phi_i(u_i, u_\Omega, h_i) \geq 0, \right. \\ \left. h_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^n V_i h_i^3 - \sum_{i=1}^n V_i \geq 0, \quad i \in I \right\}. \quad (13)$$

Пусть  $X^*$  — точка локального минимума задачи (1), (2). Сформируем точку  $Y^* = (X^*, 1)$ , вычислим вектор наискорейшего спуска  $Z^0$  в точке  $Y^*$  для задачи (12), (13) и построим точку

$$Y^k = Y^* + 0.5^k Z^0, \quad k \in \{0, 1, 2, \dots\}.$$

Пусть также  $V_i(h_i) > V_i$  (см. (1)),  $i \in J_1 \subset I$ , и  $V_i(h_i) < V_i$  (см. (1)),  $i \in J_2 \subset I$ . Это означает, что вокруг геометрических объектов  $O_i$ , для которых  $i \in J_1$ , существует запас свободного пространства. Однако если  $i \in J_2$ , то размеры соответствующих геометрических объектов уменьшаются и вокруг них нет запаса свободного пространства.

Если  $Z_0 \neq 0$ , то очевидно, что существует окрестность  $N$  точки  $Y^*$ , в которой  $F(u_\Omega^k) < F(u_\Omega^*)$  для любого  $k$ , и в общем случае  $Y^k \in G$ . Это позволяет определить такое  $m$ , что если  $k \geq m$ , то  $F(u_\Omega^k) < F(u_\Omega^*)$  и  $Y^k \in G$ . Положим  $k = m$  и построим точку  $Y^{m0}$ , где  $h_i^{m0} = 1$ , если  $i \in I \setminus J_2$ , а также  $h_i^{m0} < 1$ , если  $i \in J_2$ . Отсюда следует, что  $\sum_{i=1}^n V_i (h_i^{m0})^3 - \sum_{i=1}^n V_i < 0$ , если  $J_2 \neq \emptyset$ . При этом  $F(u_\Omega^m) < F(u_\Omega^*)$ .

Поскольку в точке  $Y^{m0}$  вектор  $h^{m0} \neq 1$ , то точка  $X^{m0}$  не может быть взята в качестве начальной для решения задачи (1), (2). В целях определения такой начальной точки необходимо найти глобальный максимум следующей вспомогательной задачи:

$$H(h^*) = \max H(h) = \sum_{i=1}^n h_i, \quad Y \in D \subset R^{\theta+n}, \quad (14)$$

где

$$D = \{Y \in R^{\theta+n}: \Phi'_{ij}(u_i, u_j, u_{p_{ij}}, h_i, h_j) \geq 0, \quad i < j \in I, \quad \Phi_i(u_i, u_\Omega, h_i) \geq 0, \\ 1 - h_i \geq 0, \quad h_i \geq 0, \quad i \in I\}. \quad (15)$$



Если в точке глобального максимума задачи (14), (15)  $H(h^*) = n$ , то объекты  $O_i, i \in I$ , достигают исходных размеров и размещаются в области  $\Omega(u_\Omega^*)$ .

Для решения задачи (14), (15) строится серия «хороших» стартовых точек, которые назовем «перспективными». Для этого на основании полученной точки  $Y^{m0}$  определенным образом выполняется перестановка объектов  $O_i(u_i^m, h_i^{0m}), i \in J_1$ , с объектами  $O_i(u_i^m, h_i^{0m}), i \in J_2$ . Осуществляемая перестановка объектов позволяет получать точки  $X^{*p}, p \in P$ , которые не попадают в «зону притяжения» локального минимума  $X^*$  задачи (1), (2).

Если результатом решения задачи (14), (15) будет точка  $Y^{*p} = (X^{*p}, 1)$ , то точка  $X^{*p}, p \in P$ , принимается в качестве начальной точки для поиска нового локального минимума задачи (1), (2). Если из серии построенных перспективных точек не удалось получить объекты исходных размеров, то принимаем последний найденный локальный минимум в качестве приближения к решению задачи.

### ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Для оценки эффективности предложенного подхода было разработано программное обеспечение, реализующее рассмотренный в статье подход. Для поиска локальных экстремумов задач нелинейного программирования в разработанном программном обеспечении использовалась библиотека IPOPT [15], реализующая метод внутренней точки второго порядка.

Было решено множество различных численных примеров с числом размещаемых объектов до 300 штук. На рис. 1 представлены некоторые примеры из полученных упаковок. В связи с тем, что авторам не удалось найти численные результаты решения поставленной задачи, полученные нами результаты могут быть использованы в качестве тестовых. Исходные данные и численные результаты к примерам можно найти по адресу <http://www.datafilehost.com/d/7cc54f33>.

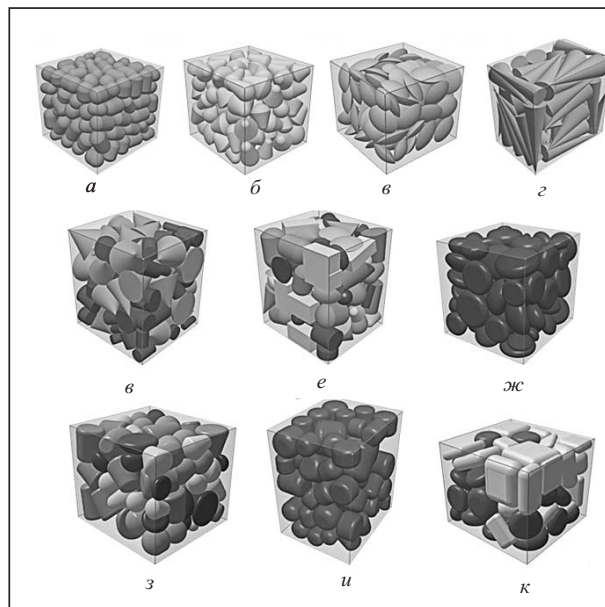


Рис.1. Примеры полученных упаковок с размещенными объектами: 150 сфероцилиндров (а); 100 сфероконусов (б); 100 сферических дисков (в); 50 конусов (г); 50 цилиндров и 50 конусов (д); 100 различных объектов (е); 80 эквидистантных поверхностей сегментов (ж); 80 эквидистантных объектов (з); 60 эквидистантных цилиндров (и); 30 выпуклых оболочек тора и 30 сферопрямоугольников (к)

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье на основании Ф-функций и квази Ф-функций построена математическая модель оптимизации упаковки выпуклых трехмерных геометрических объектов, которые допускают в процессе решения непрерывные повороты. Предлагаемый подход может быть использован для создания квази Ф-функции для любых огра-

нических выпуклых геометрических объектов с кусочно-гладкими границами, что позволяет значительно расширить класс геометрических объектов, для которых могут быть построены математические модели задач упаковки.

Ф-функции и квази Ф-функции позволяют использовать современные методы нелинейной оптимизации на всех этапах решения задачи (1), (2), включая построение начальных точек, поиск локальных экстремумов и поиск приближений к глобальному экстремуму.

Разработанный подход может быть использован для решения других оптимизационных задач упаковки, в частности для решения задач упаковки невыпуклых геометрических объектов, которые являются конечными объединениями выпуклых геометрических объектов. Предположение о том, что геометрические объекты допускают гомотетичные преобразования, позволило разработать новый способ получения начальных точек, который значительно упрощает процесс решения и повышает качество полученных результатов. Численные результаты показали эффективность предложенного подхода к решению задачи.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hifi M., M'Hallah R. A literature review on circle and sphere packing problems: Models and methodologies. *Advances in operations research*, 2009. — doi:10.1155/2009/150624.
2. Sriramya P., Varthini P.B. A state-of-the-art review of bin packing techniques *European Journal of Scientific Research*. — 2012. — N 86(3). — P. 360–364.
3. Sutou A. Global optimization approach to unequal sphere packing problems in 3D / A. Sutou, Y. Dai // *Journal of optimization theory and applications*. — 2002. — **114**, N 3. — P. 671–694.
4. Мизгулин В.В., Кадушников Р.М., Алиевский Д.М., Алиевский В.М. Моделирование плотных материалов методом упаковки сферополлиэдров // *Компьютерные исследования и моделирование*. — 2012. — **4**, № 4. — С. 757–766.
5. Мизгулин В.В., Косульников В.В., Кадушников Р.М. Оптимизационный подход к имитационному моделированию микроструктур // *Компьютерные исследования и моделирование*. — 2013. — **5**, № 4. — С. 597–606.
6. Williams S.R., Philipse A.P. Random packing of spheres and spherocylinders simulated by mechanical contraction // *Physics Review E*. — 2003. — **67**, Article ID 051301. — P. 051301-1–051301-9.
7. Lee Y., Yang C., Chien C.S. A 3D ellipsoid-based model for packing of granular particles // *International Journal of Computer Applications in Technology*. — 2003. — **17**, Issue 3. — P. 148–155.
8. Gan M., Gopinathan N., Jia X., Williams R.A. Predicting packing characteristics of particles of arbitrary shapes // *KONA*. — 2004. — N 22. — P. 82–93.
9. Birgin E.G., Martinez J.M., Ronconi D.P. Optimizing the packing of cylinders into a rectangular container // *European Journal on Operations Research*. — 2005. — **160**, Issue 1. — P. 19–33.
10. Egeblad J., Garavelli C., Lisi S., Pisinger D. Heuristics for container loading of furniture // *European Journal of Operational Research*. — 2010. — **200**, Issue 3. — P. 881–892.
11. Fasano G. MIP-based heuristic for non-standard 3D-packing problems // *4OR: Quarterly Journal of the Belgian, French and Italian Operations Research Societies*. — 2008. — **6**, Issue 3. — P. 291–310.
12. Egelbad J., Nielsen B.K., Brazil M. Translational packing of arbitrary polytopes // *Computational Geometry*. — 2009. — **42**, Issue 4. — P. 269–288.
13. Стоян Ю.Г., Панкратов А.В., Романова Т.Е., Чернов Н.И. Квази-phi-функции для математического моделирования отношений геометрических объектов // *Доповіді Національної академії наук України*. — 2014. — № 9. — С. 53–57.
14. Сёмкин В.В., Чугай А.М., Панкратов А.В. Квази Ф-функция для сфероконусов с поворотами // *Радиоэлектроника и информатика*. — 2014. — № 1. — С. 30–33.
15. Wachter A., Biegler L.T. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming // *Math. Program.* — 2006. — N 106 (1). — P. 25–57.

*Поступила 22.06.2015*