УДК 519.85

Г. Н. Яськов

Упаковка большого числа конгруэнтных шаров в цилиндре

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины Ю. Г. Стояном)

Розглядається задача пакування максимальної кількості конгруентних куль одиничного радіуса в прямому круговому циліндрі заданих розмірів. Запропоновано математичну модель задачі. Вважається, що радіуси куль є змінними. Глобальний максимум задачі забезпечує пакування всіх куль. Алгоритм побудови початкового пакунку грунтується на гратчастому пакуванні куль. Результати порівнюються з кращими відомими результатами. Наведено чисельні приклади.

Задачи упаковки шаров возникают в различных сферах деятельности человека. Такие задачи актуальны при анализе структуры нефтеносных пород, моделировании пористых сред, структуры гранулированных материалов, полидисперсных слоистых систем, структуры нанопленок, при изучении структуры белка в биологии, жидкостей и газов в химии и физике [1–5]. Среди них наиболее распространенной является задача плотной упаковки большого числа шаров одинакового размера [1], которая возникает, например, при моделировании процессов в активной зоне ядерного реактора.

Предметом исследования данной работы является задача упаковки большого числа конгруэнтных шаров в цилиндрическом контейнере.

При решении задач упаковки большого числа шаров в контейнеры (цилиндр, параллелепипед) используются либо случайные упаковки, полученные методом Монте–Карло (см., например, [4, 5]), либо алгоритмы оптимизации по группам переменных [1].

Ниже предлагается метод упаковки большого числа конгруэнтных шаров (больше 200) на основе оригинальной математической модели задачи. Новизна предложенного метода состоит в том, что радиусы шаров рассматриваются как переменные.

Рассмотрим конгруэнтные шары S_i радиусов $r_i = r$, $i \in I = \{1, 2, \ldots, n\}$, и цилиндр

$$C = \{(x, y, z) \in R^3 \colon x^2 + y^2 - \rho^2 \leqslant 0,\ 0 \leqslant z \leqslant h\}.$$

Местоположение шара S_i в пространстве R^3 определяется координатами его центра $u_i = (x_i, y_i)$, $i \in I$.

Задача. Найти вектор $u = (u_1, u_2, \ldots, u_n) \in R^{3n}$, который обеспечивает упаковку максимального числа λ^* шаров S_i, $i \in I$, в цилиндре C.

Для получения верхней оценки Λ^+ максимального количества шаров используется коэффициент заполнения $\pi/\sqrt{18} \approx 0{,}74$ гексагональной решетчатой упаковки шаров. Тогда

$$\Lambda^+ = \left[\frac{\pi(\rho/r)^2 h}{\sqrt{18}}\right],$$

где $[\bullet]$ — целая часть от $\bullet$. В качестве нижней оценки Λ^- может быть выбрано количество узлов в решетчатой упаковке шаров, попадающих в цилиндр. Таким образом, $\Lambda^- \leqslant \lambda^* \leqslant \Lambda^+$.

Полагаем, что радиусы r_i шаров S_i, $i \in I$, являются переменными. Обозначим $v^n = (r_1, r_2, \ldots, r_n) \in R^n$.

Рассмотрим последовательность задач:

$$F_\lambda(X^{\lambda *}) = \max_{X^\lambda \in D_\lambda} F_\lambda(X^\lambda), \qquad \lambda = \Lambda^-, \Lambda^- + 1, \ldots, \Lambda^* < \Lambda^+, \tag{1}$$

где

$$F_\lambda(X^\lambda) = \sum_{i=1}^{\lambda} r_i, \quad X^\lambda = (v^\lambda, u^\lambda), \quad v^\lambda = (r_1, r_2, \ldots, r_\lambda), \quad u^\lambda = (u_1, u_2, \ldots, u_\lambda), \tag{2}$$

$$D_\lambda = \big\{X^\lambda \in R^{4n} \colon \Phi_{ij}(r_i, r_j, u_i, u_j) \geqslant 0,\ 0 < i < j = 1, 2, \ldots, \lambda, \Phi_i(r_i, u_i) \geqslant 0,$$
$$r - r_i \geqslant 0,\ r_i \geqslant 0,\ i = 1, 2, \ldots, \lambda, \big\}, \tag{3}$$

$$\Phi_{ij}(r_i, r_j, u_i, u_j) = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 - (r_i + r_j)^2, \tag{4}$$

$$\Phi_i(r_i, u_i) = x_i^2 + y_i^2 - (\rho - r_i)^2. \tag{5}$$

Отметим некоторые особенности математической модели (1)–(5):

1) область допустимых решений D_λ описывается линейными и квадратичными неравенствами;

2) вследствие линейности функции $F_\lambda(X^\lambda)$ локальные максимумы задачи (1)–(5) достигаются в крайних точках области D_λ;

3) задача (1)–(5) является NP-трудной [6];

4) если $F_{\lambda+1}(X^{(\lambda+1)*}) < (\lambda+1)r$ и $F_\lambda(X^{\lambda *}) = \lambda r$, где $X^{\lambda *}$ и $X^{(\lambda+1)*}$ — точки глобальных максимумов, то точке $X^{\lambda *}$ соответствует упаковка $\lambda^* = \lambda$ шаров.

Выбор слишком малого λ^0, близкого к Λ^-, приведет к длительной процедуре решения задач вида (1)–(5) для последовательно возрастающих значений λ. С другой стороны, если сразу выбрать большое значение λ^0, близкое к Λ^+, то придется тратить еще больше времени для решения задач вида (1)–(5) для последовательно убывающих значений λ.

Гексагональная решетка дает хорошую упаковку шаров в случае, если $\rho/r > 10$. По мере уменьшения соотношения ρ/r возрастают так называемые стеновые эффекты [5]. В этом случае плотность упаковки у стенок цилиндра уменьшается. Для уменьшения "стеновых эффектов" можно произвести сдвиг решетки относительно оси цилиндра или использовать в качестве начальной случайную упаковку шаров с радиусом, меньшим r.

Если $\rho/r \leqslant 10$, то полученную методом Монте–Карло [4, 5] упаковку выбираем в качестве начального размещения. Если же $\rho/r > 10$, начальную точку строим на основании решетчатой упаковки шаров. Радиус шаров в решетке подбирается так, чтобы количество размещенных шаров было $\lambda = \lambda^0$.

Координаты центров шаров радиуса, которые образуют гексагональную решетку при упаковке в цилиндр, можно найти по формулам:

$$(x_k^0, y_l^0, z_m^0) = \left(\pm 2(k-1)\tau, \pm\sqrt{3}(2l-2)\tau, \left(1 + 4(m-1)\sqrt{\frac{2}{3}}\right)\tau\right),$$

$$(x_k^0, y_l^0, z_m^0) = \left(\pm 2(k-1)\tau + \tau, \pm\sqrt{3}(2l-1)\tau, \left(1 + 4(m-1)\sqrt{\frac{2}{3}}\right)\tau\right),$$

$$(x_k^0, y_l^0, z_m^0) = \left(\pm 2(k-1)\tau - \tau, \pm\sqrt{3}(2l-2)\tau - \tau\sqrt{3}, \left(1 + 4(m-1)\sqrt{\frac{2}{3}}\right)\tau\right), \tag{6}$$

$$(x_k^0, y_l^0, z_m^0) = \left(\pm 2(k-1)\tau, \pm\sqrt{3}(2l-1)\tau - \tau\sqrt{3}, \left(1 + 4(m-1)\sqrt{\frac{2}{3}}\right)\tau\right),$$

$$k, l, m = 1, 2, \ldots, K,$$

$$(x_k^0)^2 + (y_l^0)^2 \leqslant (\rho - \tau)^2, \qquad \tau \leqslant z_m^0 \leqslant h - \tau.$$

Решетка может быть сформирована последовательным повторением двух слоев, смещенных один относительно другого на τ в направлении оси OX, на $\tau\sqrt{3}$ — в направлении оси OY и на $\sqrt{2/3}\tau$ — в направлении оси OZ. В свою очередь, каждый из этих слоев может быть сформирован последовательным повторением двух рядов шаров, находящихся на одной высоте. Один ряд шаров смещен относительно другого в направлении оси OY на $\sqrt{3}\tau$.

Используя формулы (6), выбираем начальное количество и начальную упаковку шаров. Для решения задачи (1)–(5) применяем модификацию метода возможных направлений Зойтендейка и концепцию ε-активных неравенств [7–9].

Пусть $\Gamma = \lambda(\lambda-1)/2$, $g_1(X) = \Phi_{12}(X)$, $g_2(X) = \Phi_{13}(X), \ldots, g_{(\lambda-1)}(X) = \Phi_{1,(\lambda-1)}(X)$, $g_\lambda(X) = \Phi_{23}(X), \ldots, g_\Gamma(X) = \Phi_{(\lambda-1),\lambda}(X)$, $g_{\Gamma+1}(X) = \Phi_1(X), \ldots, g_{\Gamma+\lambda}(X) = \Phi_\lambda(X)$, $g_{\Gamma+\lambda+1}(X) = r_1, \ldots, g_{\Gamma+2\lambda}(X) = r_\lambda$, $g_{\Gamma+2\lambda+1}(X) = r - r_1, \ldots, g_{\Gamma+3\lambda}(X) = r - r_\lambda$, $I_1 = \{1, 2, \ldots, \Gamma+\lambda\}$, $I_2 = \{\Gamma+\lambda+1, \Gamma+\lambda+2, \ldots, \Gamma+2\lambda\}$, $I_2 = \{\Gamma+2\lambda+1, \Gamma+2\lambda+2, \ldots, \Gamma+3\lambda\}$, т. е. для удобства переиндексируем все неравенства в (3)–(5) для данного λ.

Решение задачи (1)–(5) вычисляется по итерационной формуле $X^{(l+1)} = X^l + t^l Z^l$, $l = 0, 1, \ldots$, где $X^0 = X^{\lambda 0}$, $t^k > 0$, вектор Z^k является решением следующей задачи линейного программирования:

$$\max_{(\kappa, Z^k) \in G^k \subset R^{3\lambda+1}} \kappa, \tag{7}$$

$$\begin{gathered} G^k = \bigl\{(\kappa, Z^k) \in R^{3\lambda+1} \colon (F_\lambda(X^k), Z^k) \geqslant \kappa,\ (g_i(X^k), Z^k) \geqslant \kappa,\ i \in T_1^k, \\ (g_i(X^k), Z^k) \geqslant 0,\ i \in T_2^k \bigcup T_3^k\bigr\}, \\ T_1^k = \{i \in I_1 \colon g_i(X^k) \geqslant \varepsilon\}, \qquad T_2^k = \{i \in I_2 \colon g_i(X^k) \geqslant \varepsilon\}, \\ T_3^k = \left\{i \in I_3 \colon g_i(X^k) \geqslant \frac{\varepsilon}{10}\right\}. \end{gathered} \tag{8}$$

Для решения задачи линейного программирования (7), (8) используется пакет HOPDM (версия 2.13), реализующий прямодвойственный алгоритм высокого порядка, разработанный J. Gondzio [10]. Процесс локальной оптимизации прекращается, если для некоторого k выполняются условия $F_\lambda(X^k) - F_\lambda(X^{(k-1)}) < 10^{-4}$, $r - r_i^k < 10^{-5}$, $i = 1, 2, \ldots, \lambda$.

Если окажется, что для некоторого λ имеем $F_\lambda(X^{\lambda *}) = \lambda r$, то глобальный максимум задачи

$$F_\lambda(X^{\lambda *}) = \max_{X^\lambda \in D_\lambda} F_\lambda(X^\lambda) \tag{9}$$

достигнут, λ увеличивается на единицу и задача (1)–(5) решается снова.

Таблица 1. Результаты вычислений

n	ρ	h	n_{best}	n_{add}
201	5,5	15,6142	200	1
353	3,96	52,1	339	14
1514	5,6	108,8	1479	35
1692	5,96	106,4	1652	40

Если для некоторого λ имеем $F_\lambda(X^{\lambda *}) < \lambda r$, то достигнут локальный или глобальный максимум задачи (9). λ уменьшается на единицу и задача (1)–(5) решается снова.

Если $F_\lambda(X^{\lambda *}) = \lambda r$ и $F_{\lambda+1}(X^{(\lambda+1)*}) < (\lambda+1)r$, то точка $X^{\lambda *}$ берется в качестве приближения к глобальному максимуму задачи (1)–(5).

Все численные примеры посчитаны с применением процессора AMD Athlon 64 X2 6000+ + (3.1Ghz). Исходные коды программ написаны в Delphi. Во всех примерах $r = 1$.

Результаты вычислений и сравнение с известными результатами приведены в табл. 1. Здесь n — количество шаров; ρ и h — радиус основания и высота цилиндра C соответственно; n_{best} — лучшее, известное на сегодняшний день количество шаров; n_{add} — количество дополнительных шаров, упакованных с помощью алгоритма, предложенного в данной работе.

Предложенный подход дает возможность использовать многопроцессорные компьютеры.

Математическая модель, в которой радиусы всех шаров являются переменными, позволяет значительно улучшить качество получаемых решений.

Этот метод может быть применен для решения задачи упаковки шаров разных радиусов.

1. *Mueller G. E.* Numerically packing spheres in cylinders // Powder Technology. – 2005. – **159**. – P. 105–110.
2. *Birgin E. G., Sobral F. N. C.* Minimizing the object dimensions in circle and sphere packing problems // Computers & Operations Research. – 2008. – **35**. – P. 2357–2375.
3. *Sutou A., Dai Y.* Global optimization approach to unequal sphere packing problems in 3D // J. of Optimization Theory and Applications. – 2002. – **114**, No 3. – P. 671–694.
4. *Abreu C. R. A., Tavares M.* Influence of particle shape on the packing and on the segregation of spherocylinders via Monte Carlo simulations // Powder Technol. – 2003. – **134**. – P. 167–180.
5. *Abreu C. R. A., Macias-Salinas R., Tavares F. W., Castier M.* A Monte-Carlo simulation of the packing and segregation of spheres in cylinders // Braz. J. Chem. Eng. – 1999. – **16**, No 4. – P. 395–405.
6. *Lenstra J. K., Rinnooy Kan A. H. G.* Complexity of packing, covering, and partitioning problems // Packing and Covering in Combinatorics. – Amsterdam: Mathematische Centrum, 1979. – P. 275–291.
7. *Zoutendijk G.* Nonlinear programming, computational methods, integer and nonlinear programming / Ed. J. Abadie. – Amsterdam: North Holland, 1970.
8. *Stoyan Y., Yaskov G.* Packing identical spheres into a rectangular parallelepiped / Eds. A. Bortfeldt, J. Homberger, H. Kopfer, G. Pankratz, R. Strangmeier / Intelligent Decision Support. Current Challenges and Approaches. – Wiesbaden: Betriebswirtschaftlicher Verlag Dr. Th. Gabler / GWV Fachverlage GmbH, 2008. – P. 46–67.
9. *Stoyan Y., Chugay A.* Packing cylinders and rectangular parallelepipeds with distances between them into a given region // European J. of Operational Research. – 2009. – **197**, No 2. – P. 446–455.
10. *Gondzio J.* HOPDM (version 2.12) – A fast LP solver based on a primal-dual interior point method // Ibid. – 1995. – **85**, No 1. – P. 221–225.

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

Поступило в редакцию 01.06.2009

G. N. Yaskov

Packing a large number of congruent spheres into a cylinder

The paper considers the problem of packing a maximal number of congruent spheres of the unit radius into a straight circular cylinder of given sizes. A mathematical model of the problem is suggested. Radii of all spheres are supposed to be variable A global maximum of the problem ensures the packing of all spheres. An algorithm of constructing a starting package is based on a lattice packing of spheres. Results are compared with the best known ones. A number of numerical examples are given.