# ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ В ЕКСТРЕМАЛЬНИХ ЗАДАЧАХ, МЕТОДИ НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЙ

УДК 519.85

*П.І. Стецюк, О.А. Березовський, О.П. Лиховид, М.Г. Стецюк*

# МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ТА АЛГОРИТМИ ОПТИМАЛЬНОЇ УПАКОВКИ КУЛЬ ТА КУБІВ У СФЕРИЧНИЙ ТА КУБІЧНИЙ КОНТЕЙНЕРИ

**Стецюк Петро Іванович**

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, м. Київ,
*stetsyukp@gmail.com*

**Березовський Олег Анатолійович**

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, м. Київ,
*o.a.berezovskyi@gmail.com*

**Лиховид Олексій Петрович**

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, м. Київ,
*o.lykhovyd@gmail.com*

**Стецюк Марія Григорівна**

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, м. Київ,
*danilyukm5@gmail.com*

Розглянуто математичні моделі та алгоритми оптимальної збалансованої розрідженої упаковки куль та кубів у сферичний та кубічний контейнери. Збалансованою розрідженою (задаються допустимі відстані між об'єктами) упаковкою об'єктів у зовнішній контейнер є така їх упаковка, коли центр ваги сімейства об'єктів збігається з центром зовнішнього контейнера, а відстані між об'єктами та відстані від них до зовнішнього контейнера були не менші за наперед задані величини. Наведено математичні моделі, послідовні та паралельні алгоритми розв'язання задач знаходження збалансованої розрідженої упаковки куль різних радіусів у сферичний та кубічний контейнери. Наведено математичну модель задачі знаходження збалансованої розрідженої упаковки кубів у куб мінімального об'єму за умови, що сторони всіх кубів паралельні осям координат, та опис негладкої штрафної функції для пошуку локальних мінімумів задачі. Досліджувані задачі відносяться до класу NP-важких задач. Математичні моделі представлені багатоекстремальними задачами нелінійного програмування. Для пошуку найкращого допустимого розв'язку застосовується метод мультистарту у сполученні з *r*-алгоритмом Шора. Для цього задача зводиться до задачі безумовної оптимізації за допомогою штрафних функцій у вигляді функцій максимуму, а для пошуку локальних мінімумів із набору стартових точок застосовуються методи мінімізації негладких функцій, що базуються на використанні програмних реалізацій *r*-алгоритму. Математичні моделі та послідовні і паралельні алгоритми, що розглядаються, можна використати для розробки програмних засобів розв'язування задач знаходження збалансованої розрідженої упаковки сферичних та кубічних об'єктів у сферичні та кубічні контейнери. Матеріал представлено в трьох розділах. У розд. 1 наведено математичну модель та алгоритми розв'язання задачі знаходження збалансованої розрідженої упаковки куль різних радіусів у сферичний контейнер. Описано послідовний та паралельний алгоритми знаходження найкращого допустимого розв'язку задач. У розд. 2 наведено математичну модель та алгоритми розв'язання задачі знаходження збалансованої розрідженої упаковки куль різних радіусів у кубічний контейнер. Описано послідовний та паралельний алгоритми знаходження найкращого допустимого розв'язку задач. У розд. 3 наведено математичну модель задачі знаходження збалансованої розрідженої упаковки кубів у кубічний контейнер. Наведено опис негладкої штрафної функції для пошуку локальних мінімумів задачі.

**Ключові слова:** задачі упаковки, розрідженість упаковки, негладка оптимізація, квадратичні екстремальні задачі, паралельні алгоритми, високопродуктивні обчислення.

## Вступ

Задачі упаковки сфер та кубів у контейнери різноманітних форм нині актуальні [1–4]. Вони мають важливе прикладне значення у космічній інженерії та ракетобудуванні, в адитивному виробництві (3D-друк), при формуванні завадостійких кодів, при дослідженні кристалічних структур, при проєктуванні та компоновці різноманітних технологічних об'єктів і систем, при оптимізації зберігання, захисту та транспортування товарів і т.д. Підвищення конкурентноздатності алгоритмів розв'язання подібних задач пов'язано як з новими теоретичними результатами, так і з використанням нових (суперкомп'ютерних, грід- і хмарних) технологій. Зокрема, в роботі [1] запропоновано загальну методологію розв'язання оптимізаційної задачі упаковки багатовимірних гіперсфер; у роботі [2] запропоновано підхід для розв'язання задачі заповнення прямокутного 3D-об'єму нерівними сферами, яка виникає в адитивному виробництві. Робота [3] присвячена застосуванню технологій паралельних обчислень [5, 6] у системах зі спільною пам'яттю та розподіленою пам'яттю для розв'язання оптимізаційних задач геометричного проєктування. Перша технологія ґрунтується на властивостях максимінних phi-функцій для складених геометричних об'єктів, а в другій технології використано стратегію мультистарту та методи мінімізації негладких функцій [7]. Це дало змогу в декілька разів зменшити витрати часу під час пошуку локально оптимальних розміщень 2D- та 3D-об'єктів та отримати кращі результати за значенням цільової функції.

У даній роботі розглянуто математичні моделі, послідовні та паралельні алгоритми, що базуються на застосуванні методу мультистарту та програмних реалізацій $r$-алгоритмів Шора [8, 9], для задач знаходження збалансованої розрідженої упаковки сферичних об'єктів у сферичний та кубічний контейнери. Також розглянуто математичну модель задачі знаходження збалансованої розрідженої упаковки кубів у куб мінімального об'єму.

## Математична модель та алгоритми знаходження збалансованої розрідженої упаковки куль у сферичний контейнер

Нехай задано сімейство куль $S_i$ з радіусами $r_i$ й вагами $w_i$, $i = 1,\dots,m$. Будемо вважати, що центр ваги кулі $S_i$ знаходиться в її центрі. Збалансованою упаковкою сімейства куль $S_i$, $i = 1,\dots,m$, у кулю $S$ з обмеженнями на відстань назвемо таку їх упаковку, щоб радіус кулі $S$ був мінімальним, центр ваги сімейства куль $S_i$, $i = 1,\dots,m$, збігався з центром зовнішньої кулі $S$, а відстані між кулями $S_i$ та відстані від них до зовнішньої кулі $S$ були не менші за наперед задані величини.

Не обмежуючи загальності, будемо вважати, що центр кулі $S$ знаходиться на початку системи координат. Нехай $(x_i, y_i, z_i)$ — невідомий центр кулі $S$, $r$ — невідомий радіус кулі $S$. Позначимо відстань між двома кулями: $S_i$ та $S_j$, $i = 1,\ldots, m$, $j = 1,\ldots, m$, $i \neq j$ як $d_{ij}$, а відстані від куль $S_i$, $i = 1,\ldots, m$, до зовнішньої кулі $S$ — як $d_i$. Позначимо відомі величини $\lambda_i = w_i / \sum_{j=1}^{m} w_j$, $i = 1,\ldots, m$, і очевидну нижню границю на шуканий радіус $r_{low} = \max_{i=1,\ldots,m} (r_i + d_i)$. Тоді знаходженню збалансованої упаковки сімейства куль $S_i$, $i = 1,\ldots, m$, із заданими допустимими відстанями між ними відповідає багатоекстремальна задача нелінійного програмування:

$$r^* = \min_{r,x,y,z} r \tag{1}$$

з обмеженнями:

$$x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 \leq (r - r_i - d_i)^2, \; i = 1,\ldots, m, \tag{2}$$

$$(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 \geq (r_i + r_j + d_{ij})^2, \; 1 \leq i < j \leq m, \tag{3}$$

$$\sum_{i=1}^{m} \lambda_i x_i = 0, \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i = 0, \sum_{i=1}^{m} \lambda_i z_i = 0, \tag{4}$$

$$r \geq r_{low}. \tag{5}$$

Цільова функція (1) є лінійною функцією і пов’язана з мінімізацією $r$-радіуса кулі $S$. Квадратичні обмеження (2) означають, що кожна куля $S_i$, $i = 1,\ldots, m$, знаходиться усередині кулі $S$, а відстань між нею і зовнішньою кулею $S$ не менша за наперед задану величину $d_i$. Квадратичні обмеження (3) гарантують, що ніякі дві кулі із сімейства $S_i$, $i = 1,\ldots, m$, не перетинаються (не мають загальних внутрішніх точок), а відстань між ними не менша за наперед задану величину. Лінійні обмеження (4) означають, що центр ваги сімейства куль $S_i$, $i = 1,\ldots, m$, локалізований на початку координат. Обмеження (5) забезпечує додатнє значення параметру $r$, потрібне для коректності обмежень (2).

Два альтернативних формулювання задачі рівноважної упаковки неоднакових куль з обмеженнями на відстань наведені нижче. Вони вільні від обмеження (5), оскільки пов’язані з заміною обмежень (2) на наступні обмеження:

$$\sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2} \leq r - r_i - d_i, \; i = 1,\ldots, m, \tag{6}$$

які автоматично враховують додатність змінної $r$. Перше формулювання є задачею обернено-опуклого програмування. Вона пов’язана з мінімізацією цільової функції (1) при обмеженнях (6), (3) і (4). Друге формулювання пов’язане з мінімізацією негладкої опуклої функції й полягає в знаходженні

$$r^* = \min_{x,y} \max_{i=1,\ldots,m} \{\sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2} + r_i - d_i\} \tag{7}$$

при обмеженнях (3), (4). Тут змінна $r$ не використовується. Її оптимальне значення $r^*$ визначається з мінімального значення негладкої цільової функції.

За допомогою негладких штрафів задача (1)–(5) зводиться до задачі безумовної мінімізації негладкої функції

$$\min_{r,x,y,z} \{ f_1(r, x, y, z) = r + \Phi_P(r, x, y, z)\}, \tag{8}$$

де штрафна функція $\Phi_P(r, x, y, z)$ має вигляд

$$\Phi_P(r, x, y, z) = P_1 F_1(r, x, y, z) + P_2 F_2(x, y, z) + P_3 \max\{0, -r + r_{low}\}. \tag{9}$$

Тут $P = \{P_1, P_2, P_3\}$, де $P_k$, $k = 1, 2, 3,$ — додатні штрафні коефіцієнти, а функції $F_1(r, x, y, z)$ й $F_2(x, y, z)$ визначаються так:

$$F_1(r, x, y, z) = \sum_{i=1}^{m} \max\{0, x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 - (r - r_i - d_i)^2\} +$$

$$+ \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=i+1}^{m} \max\{0, -(x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 - (z_i - z_j)^2 + (r_i + r_j + d_{ij})^2\}, \tag{10}$$

$$F_2(x, y, z) = \max\left\{0, \sum_{i=1}^{m} \lambda_i x_i - \Delta x, -\sum_{i=1}^{m} \lambda_i x_i - \Delta x\right\} +$$

$$+ \max\left\{0, \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i - \Delta y, -\sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i - \Delta y\right\} +$$

$$+ \max\left\{0, \sum_{i=1}^{m} \lambda_i z_i - \Delta z, -\sum_{i=1}^{m} \lambda_i z_i - \Delta z\right\}, \tag{11}$$

де $\Delta x$, $\Delta y$ й $\Delta z$ — задані допуски на відхилення координат центру ваги сімейства куль від початку координат. Це означає, що обмеження (4) задачі замінюються на наступні :

$$-\Delta x \le \sum_{i=1}^{m} \lambda_i x_i \le \Delta x,$$

$$-\Delta y \le \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i \le \Delta y,$$

$$-\Delta z \le \sum_{i=1}^{m} \lambda_i z_i \le \Delta z.$$

Знаходження локального мінімуму задачі (1)–(5) можна замінити на пошук локального мінімуму задачі (8)–(11), яка є задачею безумовної мінімізації багатоекстремальної негладкої функції $f_1(r, x, y, z)$. Якщо при деяких додатніх значеннях штрафних коефіцієнтів $P = \{P_1, P_2, P_3\}$ локальному мінімуму функції $f_1(r, x, y, z)$ відповідає рівне нулю значення штрафної функції $\Phi_P(r, x, y, z)$, то він буде локальним мінімумом задачі (1)–(5). Вибір штрафних коефіцієнтів $P_1$, $P_2$ і $P_3$ дозволяє враховувати точність виконання обмежень (2)–(5). Коефіцієнт $P_1$ відповідає за «сумарне порушення» квадратичних обмежень (2), (3), коефіцієнт $P_2$ — за «сумарне порушення» лінійних обмежень (4), а коефіцієнт $P_3$ — за «порушення» обмеження (5).

Послідовний алгоритм пошуку найкращого розв’язку задачі (1)–(5) базується на методі мультистарту з випадковим вибором стартових точок і модифікації

$r$-алгоритму Шора [8, 9] для пошуку локальних мінімумів функції $f_1(r, x, y, z)$. Алгоритм не вимагає, щоб стартові точки були допустимими для задачі (1)–(5). Його можна використовувати й за відсутності обмежень на центр ваги системи кіл. Для цього досить покласти $P_2 = 0$, що рівносильно тому, що із задачі (1)–(5) виключаються обмеження (4).

Алгоритм полягає в наступному. Нехай *ntest* — кількість стартових точок, які будуть генеруватися за допомогою датчика рівномірного розподілу в кулі радіуса $r_{up}$ (найкраща верхня оцінка радіуса зовнішньої кулі). На початку процесу найкраща верхня оцінка радіуса встановлюється рівною $r_{up} = \sum_{i=1}^{m} (r_i + \rho)$, $\rho = \max\{\max_{i=1,\ldots,m} d_i, \max_{1\le i<j\le m} d_{ij}\}$, й послідовно уточнюється для кожної чергової стартової точки в міру знаходження локального мінімуму з меншим значенням цільової функції. Пошук локального мінімуму функції $f_1(r, x, y, z)$ здійснюється за допомогою модифікації $r$-алгоритму з постійним коефіцієнтом розтягу простору й адаптивним регулюванням кроку [9, с. 384–385]. Найкращий локальний мінімум функції $f_1(r, x, y, z)$, у якому реалізується близьке до нуля значення штрафної функції $\Phi_P(r, x, y, z)$, приймаємо за розв'язок задачі (1)–(5). Йому відповідає найкраще значення радіуса $r_{up}$ і відповідні йому координати центрів куль $(x^{up}, y^{up}, z^{up})$, що розміщуються.

Паралельний алгоритм пошуку найкращого розв'язку задачі (1)–(5) запускає множинний пошук локальних розв'язків за допомогою модифікації $r$-алгоритму. Реалізація паралельного алгоритму використовує процедуру «Master-Slave» на $(k+1)$ процесорах. Один з них вибирається «провідним» (Master), а інші $k$ — «підпорядкованими» (Slave). Ця процедура апробована в [10].

На початку обчислень в Master-процесорі випадковим чином генеруються $k$ стартових точок у кулі з радіусом $r_{up} = \sum_{i=1}^{m} (r_i + \rho)$, $\rho = \max\{\max_{i=1,\ldots,m} d_i, \max_{1\le i<j\le m} d_{ij}\}$, і пересилаються в Slave-процесори. Slave-процесор займається пошуком локального мінімуму функції $f_1(r, x, y, z)$ для отриманої ним стартової точки. Як тільки $r$-алгоритм закінчує роботу на будь-якому Slave-процесорі, результат пошуку передається в Master-процесор. Якщо при цьому знайдено локальний мінімум задачі (1)–(5), то значення радіуса зовнішньої кулі порівнюється з найкращим зі знайдених до цього моменту значенням $r_{up}$. Якщо радіус менше $r_{up}$, то він стає новим значенням $r_{up}$ і далі запам'ятовуються відповідні йому значення координат центрів куль, що розміщуються $(x^{up}, y^{up}, z^{up})$. Потім Master-процесор генерує нову стартову точку, яка передається для чергового пошуку локального мінімуму в той Slave-процесор, для якого $r$-алгоритм закінчив роботу. Процес завершується, якщо перевищено задану кількість стартових точок або замовлений час.

Частковим випадком є програмна реалізація паралельного алгоритму для кругів, виконана мовою програмування C++ у середовищі паралельного програмування MPI. Вона оформлена як програма за назвою «Збалансована упаковка кругів з заданими допустимими відстанями між ними» і докладно описана в [11], де наведено код програми, приклад протоколу її роботи й інтерфейс користувача для роботи з програмою. У якості генератора псевдовипадкових чисел програма використовує стандартну функцію rand з бібліотеки С++. Пошук локальних мінімумів здійснюється модулем ralgb5, який відповідає octave-коду модифікації $r$-алгоритму з [9]. Програма призначена для роботи на кластері із середовищем MPI під керуванням операційної системи Linux. Вона може працювати як на одному процесорі, так і на багатьох паралельних процесорах.

### Математична модель та алгоритми знаходження збалансованої розрідженої упаковки куль у кубічний контейнер

Нехай задано сімейство куль $S_i$ з радіусами $r_i$ й вагами $w_i$, $i=1,\ldots,m.$ Будемо вважати, що центр ваги кулі $S_i$ знаходиться в її центрі. Збалансованою упаковкою сімейства куль $S_i$, $i=1,\ldots,m,$ у куб $C$ з обмеженнями на відстань назвемо таку їх упаковку, щоб довжина сторони куба $C$ була мінімальною, центр ваги сімейства куль $S_i$, $i=1,\ldots,m,$ збігався з центром куба $C,$ а відстані між кулями $S_i$ та відстані від них до зовнішнього куба $C$ були не менші за наперед задані величини.

Не обмежуючи загальності, вважатимемо, що центр куба $C$ знаходиться на початку системи координат. Нехай $(x_i, y_i, z_i)$ — невідомий центр кулі $S_i$, $L$ — половина невідомої довжини сторони куба $C$. Позначимо відстань між двома кулями $S_i$ та $S_j$, $i=1,\ldots,m,$ $j=1,\ldots,m,$ $i \neq j,$ як $d_{ij}$, а відстані від куль $S_i$, $j=1,\ldots,m,$ до зовнішнього куба $C$ — як $d_i$. Позначимо відомі величини $\lambda_i = w_i \,/ \sum_{j=1}^{m} w_j$, $i=1,\ldots,m.$ Тоді знаходженню збалансованої упаковки сімейства куль $S_i$, $i=1,\ldots,m,$ із заданими допустимими відстанями між ними відповідає багатоекстремальна задача нелінійного програмування

$$L^* = \min_{L,x,y,z} 2L \tag{12}$$

з обмеженнями

$$(-L + r_i + d_i) \leq x_i \leq (L - r_i - d_i), i=1,\ldots,m, \tag{13}$$

$$(-L + r_i + d_i) \leq y_i \leq (L - r_i - d_i), i=1,\ldots,m, \tag{14}$$

$$(-L + r_i + d_i) \leq z_i \leq (L - r_i - d_i), i=1,\ldots,m, \tag{15}$$

$$(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 \geq (r_i + r_j + d_{ij})^2, 1 \leq i < j \leq m, \tag{16}$$

$$\begin{cases} -\Delta x \leq \sum_{i=1}^{m} \lambda_i x_i \leq \Delta x, \\ -\Delta y \leq \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i \leq \Delta y, \\ -\Delta z \leq \sum_{i=1}^{m} \lambda_i z_i \leq \Delta z, \end{cases} \tag{17}$$

де $\Delta x,$ $\Delta y$ й $\Delta z$ — задані допуски на відхилення координат центру ваги сімейства куль від початку координат.

 ISSN 2786-6491

Цільова функція (12) є лінійною функцією і пов'язана з мінімізацією $L$ — половина довжини сторони куба $C$. Лінійні обмеження (13)–(15) означають, що кожна куля $S_i$, $i=1,\ldots,m$, знаходиться усередині куба $C$, а відстань між нею і зовнішним кубом $C$ не менша за наперед задану величину $d_i$. Квадратичні обмеження (16) гарантують, що ніякі дві кулі із сімейства $S_i$, $i=1,\ldots,m$, не перетинаються (не мають загальних внутрішніх точок), а відстань між ними не менша за наперед задану величину. Лінійні обмеження (17) означають, що центр ваги сімейства куль $S_i$, $i=1,\ldots,m$, локалізований на початку координат.

За допомогою негладких штрафів задача (12)–(17) зводиться до задачі безумовної мінімізації негладкої функції

$$\min_{L,x,y,z} \{f_2(L,x,y,z)=L+\Phi_P(L,x,y,z)\}, \tag{18}$$

де штрафна функція $\Phi_P(L,x,y,z)$ має вигляд

$$\Phi_P(L,x,y,z)=P_1F_1(L,x,y,z)+P_2F_2(x,y,z)+P_3F_3(x,y,z). \tag{19}$$

Тут $P=\{P_1,P_2,P_3\}$, де $P_k$, $k=1,2,3,$ — додатні штрафні коефіцієнти, а функції $F_1(L,x,y,z)$, $F_2(x,y,z)$ й $F_3(x,y,z)$ визначаються так:

$$F_1(L,x,y,z)=\sum_{i=1}^{m}\max\{0,(-L+r_i+d_i)-x_i,x_i-(L-r_i-d_i)\}+$$
$$+\sum_{i=1}^{m}\max\{0,(-L+r_i+d_i)-y_i,y_i-(L-r_i-d_i)\}+$$
$$+\sum_{i=1}^{m}\max\{0,(-L+r_i+d_i)-z_i,z_i-(L-r_i-d_i)\}, \tag{20}$$

$$F_2(x,y,z)=$$
$$=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=i+1}^{m}\max\{0,-(x_i-x_j)^2-(y_i-y_j)^2-(z_i-z_j)^2+(r_i+r_j+d_{ij})^2\}, \tag{21}$$

$$F_3(x,y,z)=\max\left\{0,\sum_{i=1}^{m}\lambda_i x_i-\Delta x,-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i x_i-\Delta x\right\}+$$
$$+\max\left\{0,\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i-\Delta y,-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i-\Delta y\right\}+$$
$$+\max\left\{0,\sum_{i=1}^{m}\lambda_i z_i-\Delta z,-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i z_i-\Delta z\right\}. \tag{22}$$

Знаходження локального мінімуму задачі (12)–(17) можна замінити на пошук локального мінімуму задачі (18)–(22), яка є задачею безумовної мінімізації багатоекстремальної негладкої функції $f_2(L,x,y,z)$. Якщо при деяких додатніх значеннях штрафних коефіцієнтів $P=\{P_1,P_2,P_3\}$ локальному мінімуму функції $f_2(L,x,y,z)$ відповідає рівне нулю значення штрафної функції $\Phi_P(L,x,y,z)$, то він буде локальним мінімумом задачі (12)–(17). Вибір штрафних коефіцієнтів $P_1$,

$P_2$ і $P_3$ дозволяє враховувати точність виконання обмежень (13)–(17). Коефіцієнт $P_1$ відповідає за «сумарне порушення» лінійних обмежень (13)–(15), коефіцієнт $P_2$ — за «сумарне порушення» квадратичних обмежень (16), а коефіцієнт $P_3$ — за «сумарне порушення» лінійних обмежень (17).

Послідовний алгоритм пошуку найкращого розв'язку задачі (12)–(17) базується на методі мультистарту з випадковим вибором стартових точок і модифікації $r$-алгоритму Шора [9] для пошуку локальних мінімумів функції $f_2(L, x, y, z)$. Алгоритм не вимагає, щоб стартові точки були допустимими для задачі (12)–(17). Його можна використовувати й за відсутності обмежень на центр ваги системи кіл. Для цього досить покласти $P_2 = 0,$ що рівносильно тому, що із задачі (12)–(17) виключаються обмеження (17).

Алгоритм полягає в наступному. Нехай ntest — кількість стартових точок, які будуть генеруватися за допомогою датчика рівномірного розподілу в кубі з довжиною сторони $L_{up}$ (найкраща верхня оцінка довжини сторони зовнішньої кулі). На початку процесу найкраща верхня оцінка довжини сторони встановлюється рівною $L_{up} = \sum_{i=1}^{m}(r_i + \rho),$ $\rho = \max\{\max_{i=1,\ldots,m} d_i, \max_{1 \le i < j \le m} d_{ij}\}$ й послідовно уточнюється для кожної чергової стартової точки в міру знаходження локального мінімуму з меншим значенням цільової функції. Пошук локального мінімуму функції $f_2(L, x, y, z)$ здійснюється за допомогою модифікації $r$-алгоритму з постійним коефіцієнтом розтягу простору й адаптивним регулюванням кроку [9]. Найкращий локальний мінімум функції $f_2(L, x, y, z),$ в якому реалізується близьке до нуля значення штрафної функції $\Phi_P(L, x, y, z),$ приймаємо за розв'язок задачі (12)–(17). Йому відповідає найкраще значення довжини сторони $L_{up}$ і відповідні йому координати центрів куль $(x^{up}, y^{up}, z^{up}),$ що розміщуються.

Паралельний алгоритм пошуку найкращого розв'язку задачі (12)–(17) запускає множинний пошук локальних розв'язків за допомогою модифікації $r$-алгоритму. Реалізація паралельного алгоритму використовує процедуру «Master-Slave» на $(k+1)$ процесорах. Один з них вибирається «провідним» (Master), а інші $k$ — «підпорядкованими» (Slave). Ця процедура апробована в [10].

На початку обчислень в Master-процесорі випадковим чином генерується $k$ стартових точок у кубі з довжиною сторони $L_{up} = \sum_{i=1}^{m}(r_i + \rho),$ $\rho = \max\{\max_{i=1,\ldots,m} d_i,$ $\max_{1 \le i < j \le m} d_{ij}\},$ і пересилаються в Slave-процесори. Slave-процесор займається пошуком локального мінімуму функції $f_2(L, x, y, z)$ для отриманої ним стартової точки. Як тільки $r$-алгоритм закінчує роботу на будь-якому Slave-процесорі, то результат пошуку передається в Master-процесор. Якщо при цьому знайдений локальний мінімум задачі (12)–(17), то значення довжини сторони зовнішнього куба порівнюється з найкращим із знайдених до цього моменту значенням $L_{up}$. Якщо довжина сторони зовнішнього куба менша $L_{up},$ то вона стає новим значенням $L_{up},$ і далі запам'ятовуються відповідні їй значення координат центрів куль, що розміщуються $(x^{up}, y^{up}, z^{up}).$ Потім Master-процесор генерує нову

 ISSN 2786-6491

стартову точку, яка передається для чергового пошуку локального мінімуму в той Slave-процесор, для якого $r$-алгоритм закінчив роботу. Процес завершується, якщо перевищено задану кількість стартових точок або замовлений час.

### Математична модель задачі збалансованої розрідженої упаковки кубів у кубічний контейнер

У даному розділі описано математичну модель задачі знаходження оптимальної збалансованої розрідженої упаковки кубів у кубічний контейнер за умови, що сторони всіх кубів паралельні осям координат.

Нехай задано сімейство кубів $C_i$ зі сторонами $a_i$ й вагами $w_i$, $i=1,\ldots,m.$ Будемо вважати, що центр ваги куба $C_i$ знаходиться в його центрі. Збалансованою упаковкою сімейства кубів $C_i$, $i=1,\ldots,m,$ у куб $C_0$ з обмеженнями на відстань назвемо таку їх упаковку, щоб довжина сторони куба $C_0$ була мінімальною, центр ваги сімейства кубів $C_i$, $i=1,\ldots,m,$ збігався з центром куба $C_0$, а відстані між кубами $C_i$ та відстані від них до зовнішнього куба $C_0$ були не менші за наперед задані величини.

Крім цього, вважатимемо, що центр куба $C_0$ знаходиться на початку системи координат. Нехай $(x_i, y_i, z_i)$ — невідомий центр куба $C_i$, $a_0$ — невідома довжина сторони куба $C_0$. Позначимо відстань між двома кубами $S_i$ та $S_j$, $i=1,\ldots,m,$ $j=1,\ldots,m,$ $i\neq j$ як $d_{ij}$, а відстані від кубів $S_i$, $i=1,\ldots,m,$ до зовнішнього куба $C$ — як $d_i$. Позначимо відомі величини $\lambda_i = w_i / \sum_{j=1}^{m} w_j$, $i= \;=1,\ldots,m.$ Тоді знаходженню збалансованої упаковки сімейства кубів $C_i$, $i=1,\ldots,m,$ із заданими допустимими відстанями між ними відповідає багатоекстремальна задача нелінійного програмування:

$$f^* = \min_{a_0,x,y,z,t} a_0, \tag{23}$$

$$\begin{cases} \left(\frac{a_i}{2}-\frac{a_0}{2}+d_i\right) \le x_i \le \left(-\frac{a_i}{2}+\frac{a_0}{2}-d_i\right), \ i=1,\ldots,m, \\ \left(\frac{a_i}{2}-\frac{a_0}{2}+d_i\right) \le y_i \le \left(-\frac{a_i}{2}+\frac{a_0}{2}-d_i\right), \ i=1,\ldots,m, \\ \left(\frac{a_i}{2}-\frac{a_0}{2}+d_i\right) \le z_i \le \left(-\frac{a_i}{2}+\frac{a_0}{2}-d_i\right), \ i=1,\ldots,m; \end{cases} \tag{24}$$

$$\begin{cases} x_i - x_j + \frac{a_i}{2}+\frac{a_j}{2}+d_{ij} \le S(1-t_{ij}^x), \ i=1,\ldots,m, \ j=1,\ldots,m, \ i\neq j, \\ y_i - y_j + \frac{a_i}{2}+\frac{a_j}{2}+d_{ij} \le S(1-t_{ij}^y), \ i=1,\ldots,m, \ j=1,\ldots,m, \ i\neq j, \\ z_i - z_j + \frac{a_i}{2}+\frac{a_j}{2}+d_{ij} \le S(1-t_{ij}^z), \ i=1,\ldots,m, \ j=1,\ldots,m, \ i\neq j; \end{cases} \tag{25}$$

$$t_{ij}^x + t_{ij}^y + t_{ij}^z + t_{ji}^x + t_{ji}^y + t_{ji}^z = 1, \ 1 \le i < j \le m; \tag{26}$$

$$\begin{cases} (t_{ij}^x)^2 - t_{ij}^x = 0, i = 1, \dots, m, \ j = 1, \dots, m, i \ne j, \\ (t_{ij}^y)^2 - t_{ij}^y = 0, i = 1, \dots, m, \ j = 1, \dots, m, i \ne j, \\ (t_{ij}^z)^2 - t_{ij}^z = 0, i = 1, \dots, m, \ j = 1, \dots, m, i \ne j; \end{cases} \tag{27}$$

$$\begin{cases} -\Delta x \le \sum_{i=1}^{m} \lambda_i x_i \le \Delta x, \\ -\Delta y \le \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i \le \Delta y, \\ -\Delta z \le \sum_{i=1}^{m} \lambda_i z_i \le \Delta z, \end{cases} \tag{28}$$

де $\Delta x$, $\Delta y$ й $\Delta z$ — задані допуски на відхилення координат центру ваги сімейства кубів від початку координат.

Цільова функція (23) пов'язана з мінімізацією $a_0$ — довжини сторони куба $C_0$. Лінійні обмеження (24) означають, що кожний куб $C_i$, $i = 1, \dots, m$, знаходиться усередині куба $C_0$, а відстань між ним і зовнішнім кубом $C_0$ не менша за наперед задану величину $d_i$. Обмеження (25)–(27) гарантують, що ніякі два куба із сімейства $C_i$, $i = 1, \dots, m$, не перетинаються (не мають загальних внутрішніх точок), а відстань між ними не менша за наперед задану величину. Їхній зміст полягає в наступному. Для кожної пари кубів $(i, j)$ має виконуватися одна з нерівностей:

$$x_i - x_j + \frac{a_i}{2} + \frac{a_j}{2} + d_{ij} \le 0,$$

$$x_j - x_i + \frac{a_i}{2} + \frac{a_j}{2} + d_{ij} \le 0,$$

$$y_i - y_j + \frac{a_i}{2} + \frac{a_j}{2} + d_{ij} \le 0,$$

$$y_j - y_i + \frac{a_i}{2} + \frac{a_j}{2} + d_{ij} \le 0,$$

$$z_i - z_j + \frac{a_i}{2} + \frac{a_j}{2} + d_{ij} \le 0,$$

$$z_j - z_i + \frac{a_i}{2} + \frac{a_j}{2} + d_{ij} \le 0$$

(наприклад, якщо справедлива перша нерівність, то куб $i$ лежить лівіше куба $j$ по координатній осі $x$, а якщо справедлива друга нерівність — правіше). Для врахування умови «або» (тобто, коли достатньо виконання хоча б одно-


ISSN 2786-6491

го з обмежень) до нерівностей додано члени $S(1-t_{ij}^x)$, $S(1-t_{ij}^y)$, $S(1-t_{ij}^z)$, де $S$ — достатньо великий штрафний множник (наприклад, $S=\sum_{i=1}^{m}(a_i+\rho)$, $\rho=$ $=\max\{\max_{i=1,\ldots,m} d_i, \max_{1\le i<j\le m} d_{ij}\}$). Обмеження (26) відповідає за те, щоб хоча б по одній з координат один з будь-яких двох кубів, що розміщуються, лежав лівіше за інший. Лінійні обмеження (28) означають, що центр ваги сімейства кубів $C_i$, $i=1,\ldots,m$, локалізований на початку координат.

За допомогою негладких штрафів задача (23)–(28) зводиться до задачі безумовної мінімізації негладкої функції

$$\min_{a_0,x,y,z,t}\{f_3(a_0,x,y,z,t)=a_0+\Phi_P(a_0,x,y,z,t)\}, \tag{29}$$

де штрафна функція $\Phi_P(a_0,x,y,z,t)$ має вигляд

$$\Phi_P(a_0,x,y,z,t)=$$
$$=P_1F_1(a_0,x,y,z)+P_2F_2(x,y,z,t)+P_3F_3(t)+P_4F_4(t)+P_5F_5(x,y,z). \tag{30}$$

Тут $P=\{P_1,P_2,P_3,P_4,P_5\}$, де $P_k$, $k=1,2,3,4,5,$ — додатні штрафні коефіцієнти, а функції $F_1(a_0,x,y,z)$, $F_2(x,y,z,t)$, $F_3(t)$, $F_4(t)$, $F_5(x,y,z)$ визначаються так:

$$F_1(a_0,x,y,z)=$$
$$=\sum_{i=1}^{m}\max\left\{0,\left(\frac{a_i}{2}-\frac{a_0}{2}+d_i\right)-x_i,\ x_i-\left(-\frac{a_i}{2}+\frac{a_0}{2}-d_i\right)\right\}+$$
$$+\sum_{i=1}^{m}\max\left\{0,\left(\frac{a_i}{2}-\frac{a_0}{2}+d_i\right)-y_i,\ y_i-\left(-\frac{a_i}{2}+\frac{a_0}{2}-d_i\right)\right\}+$$
$$+\sum_{i=1}^{m}\max\left\{0,\left(\frac{a_i}{2}-\frac{a_0}{2}+d_i\right)-z_i,\ z_i-\left(-\frac{a_i}{2}+\frac{a_0}{2}-d_i\right)\right\}, \tag{31}$$

$$F_2(x,y,z,t)=$$
$$=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=i+1}^{m}\max\left\{0,\ x_i-x_j+\frac{a_i}{2}+\frac{a_j}{2}+d_{ij}-S(1-t_{ij}^x),\ x_j-x_i+\frac{a_i}{2}+\frac{a_j}{2}+d_{ij}-S(1-t_{ji}^x)\right\}+$$
$$+\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=i+1}^{m}\max\left\{0,\ y_i-y_j+\frac{a_i}{2}+\frac{a_j}{2}+d_{ij}-S(1-t_{ij}^y),\ y_j-y_i+\frac{a_i}{2}+\frac{a_j}{2}+d_{ij}-S(1-t_{ji}^y)\right\}+$$
$$+\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=i+1}^{m}\max\left\{0,\ z_i-z_j+\frac{a_i}{2}+\frac{a_j}{2}+d_{ij}-S(1-t_{ij}^z),\ z_j-z_i+\frac{a_i}{2}+\frac{a_j}{2}+d_{ij}-S(1-t_{ji}^z)\right\}, \tag{32}$$

$$F_3(t)=$$
$$=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=i+1}^{m}\max\{(t_{ij}^x+t_{ij}^y+t_{ij}^z+t_{ji}^x+t_{ji}^y+t_{ij}^z)-1,\ 1-(t_{ij}^x+t_{ij}^y+t_{ij}^z+t_{ji}^x+t_{ji}^y+t_{ji}^z)\}, \tag{33}$$

$$F_4(t)=\sum_{i=1}^{m}\sum_{\substack{j=1\\ i\neq j}}^{m}\max\{(t_{ij}^{x})^2-t_{ij}^{x},-(t_{ij}^{x})^2+t_{ij}^{x}\}+$$

$$+\sum_{i=1}^{m}\sum_{\substack{j=1\\ i\neq j}}^{m}\max\{(t_{ij}^{y})^2-t_{ij}^{y},-(t_{ij}^{y})^2+t_{ij}^{y}\}+\sum_{i=1}^{m}\sum_{\substack{j=1\\ i\neq j}}^{m}\max\{(t_{ij}^{z})^2-t_{ij}^{z},-(t_{ij}^{z})^2+t_{ij}^{z}\}, \qquad (34)$$

$$F_5(x,y,z)=\max\left\{0,\sum_{i=1}^{m}\lambda_i x_i-\Delta x,-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i x_i-\Delta x\right\}+$$

$$+\max\left\{0,\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i-\Delta y,-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i y_i-\Delta y\right\}+$$

$$+\max\left\{0,\sum_{i=1}^{m}\lambda_i z_i-\Delta z,-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i z_i-\Delta z\right\}. \qquad (35)$$

Знаходження локального мінімуму задачі (23)–(28) можна замінити на пошук локального мінімуму задачі (29)–(35), яка є задачею безумовної мінімізації багатоекстремальної негладкої функції $f_3(a_0, x, y, z, t)$. Для пошуку найкращого допустимого розв'язку задачі (23)–(28) можна застосувати, наприклад, метод мультистарту, як описано в розд. 1, 2.

Враховуючи складність задачі, цікаво вивчити можливість отримання нижніх оцінок $f^*$, щоб оцінювати якість локальних мінімумів. Для знаходження таких оцінок у квадратичних оптимізаційних задачах загального вигляду

$$f^*=f_0(x^*)=\inf_{x\in T\subseteq R^n} f_0(x),\ \ T=\{x: f_i(x)\le 0, i\in I^{LQ},\ f_i(x)=0, i\in I^{EQ}\},$$

можна застосувати, зокрема, двоїстий підхід [7]:

$$\psi^*=\sup_{\substack{A(u,v)\succ=0\\ v\ge 0}}(\psi(u,v)=\inf_x L(x,u,v))\le f^*,$$

де $L(x,u,v)=x^{\mathrm{T}}A(u,v)\,x+b^{\mathrm{T}}(u,v)\,x+c(u,v)$ — функція Лагранжа, $u$ — вектор двоїстих змінних, що відповідають обмеженням рівностей, $v$ — вектор двоїстих змінних, що відповідають обмеженням нерівностей; $A\succ=0$ позначає невід'ємно визначену матрицю. Використання теорії лагранжових двоїстих оцінок є перспективним, оскільки наявність лінійних обмежень дозволяє просто будувати функціонально надлишкові обмеження для уточнення цих оцінок без збільшення розмірності вихідної задачі [7]. До того ж результати цих досліджень можна поширити і на інший тип оцінок, отриманих шляхом використання SDP-релаксацій квадратичних оптимізаційних задач.

## Висновок

Розглядаються математичні моделі для знаходження збалансованої розрідженої упаковки куль різних радіусів у сферичний та кубічний контейнери та упаковки кубів у кубічний контейнер. Досліджувані задачі відносяться до класу NP-важких. Для пошуку найкращого допустимого розв'язку пропонується застосувати метод мультистарту. В рамках цього методу задача зводиться до задачі безумовної оптимізації за допомогою штрафних функцій у вигляді функцій максимуму, а для пошуку локальних мінімумів із набору початкових точок пропонується застосовувати $r$-алгоритм [7].

Наведено послідовні та паралельні алгоритми (мультистарт у сполученні з модифікацією $r$-алгоритму [9]) для знаходження найкращого допустимого розв'язку задач упаковки сферичних об'єктів у сферичний та кубічний контейнери. Для задачі упаковки кубів у кубічний контейнер наведено негладку штрафну функцію у вигляді функцій максимуму.

Для задач, що розглядаються, перспективними є дослідження математичних моделей на основі $L_p$-норм, коли $p \geq 1$. Тоді обмеження, які означають, що кожний об'єкт знаходиться усередині контейнера, можна представити, наприклад, у вигляді

$$(|x_i|^p + |y_i|^p + |z_i|^p)^{1/p} \leq r - r_i, \ i = 1, \dots, m,$$

а обмеження

$$(|x_i - x_j|^p + |y_i - y_j|^p + |z_i - z_j|^p)^{1/p} \geq r_i + r_j, \ 1 \leq i < j \leq m,$$

гарантують, що ніякі два об'єкти не перетинаються. Використовуючи $L_p$-норму, при $p = 2$ можна отримати математичну модель упаковки куль у сферичний контейнер, а при $p = \infty$ — кубів у кубічний контейнер.

Математичні моделі та послідовні і паралельні алгоритми, що розглядаються, можна використати для розробки програмних засобів розв'язування задач знаходження збалансованої розрідженої упаковки сферичних та кубічних об'єктів у сферичні та кубічні контейнери.

*P. Stetsyuk, O. Berezovskyi, O. Lykhovyd, M. Stetsyuk,*

# MATHEMATICAL MODELS AND ALGORITHMS FOR OPTIMAL PACKING OF BALLS AND CUBES INTO SPHERICAL AND CUBIC CONTAINERS

**Petro Stetsyuk**

V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of the NAS of Ukraine, Kyiv,
*stetsyukp@gmail.com*

**Oleg Berezovskyi**

V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of the NAS of Ukraine, Kyiv,
*o.a.berezovskyi@gmail.com*

**Oleksii Lykhovyd**

V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of the NAS of Ukraine, Kyiv,
*o.lykhovyd@gmail.com*

**Mariia Stetsyuk**

V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of the NAS of Ukraine, Kyiv,
*danilyukm5@gmail.com*

The article considers mathematical models and algorithms for optimal balanced sparse packing of spheres and cubes into spherical and cubic containers. A balanced sparse (allowable distances between objects are specified) packing of objects into an outer container is such a packing that the center of gravity of the family of objects coincides with the center of the outer container, and the distances between the objects as well as the distances from them to the outer container are not less than the predetermined values. Mathematical models, sequential and parallel algorithms for solving problems of finding a balanced sparse packing of balls of different radii into spherical and cubic containers are given. A mathematical model of the problem of finding a balanced sparse packing of cubes into a cube of minimum volume, provided that the sides of all cubes are parallel to the coordinate axes, and a description of the non-smooth penalty function for finding local minima of the problem are given. The investigated problems belong to the class of NP-hard problems. Mathematical models are represented by multi-extremal nonlinear programming problems. To find the best feasible solution, the multistart method is used in combination with Shor's r-algorithm. For this, the problem is reduced to the unconditional optimization problem using penalty functions in the form of maximum functions, and non-smooth optimization methods based on the use of software implementations of r-algorithm are used to find local minima from a set of starting points. Mathematical models and sequential and parallel algorithms under consideration can be used to develop software tools for solving problems of finding a balanced sparse packing of spherical and cubic objects into spherical and cubic containers. The material is presented in three sections. The first section presents a mathematical model and algorithms for solving the problem of finding a balanced sparse packing of balls of different radii into a spherical container. The sequential and parallel algorithms for finding the best feasible problem solution are described. Section 2 provides a mathematical model and algorithms for solving the problem of finding a balanced sparse packing of balls of different radii into a cubic container. The sequential and parallel algorithms for finding the best feasible problem solution are described. Section 3 presents a mathematical model of the problem of finding a balanced sparse packing of cubes into a cubic container. A description of the non-smooth penalty function for finding local minima of the problem is given.

**Keywords:** packing problems, packing sparsity, non-smooth optimization, quadratic extremal problems, parallel algorithms, high-performance computing.

1. Stoyan Y., Yaskov G., Romanova T., Litvinchev I., Yakovlev S., Cant J.M.V. Optimized packing multidimensional hyperspheres: a unified approach. *Mathematical Biosciences and Engineering.* 2020. **17**, N 6. P. 6601–6630. http://doi.org/10.3934/mbe.2020344.
2. Duriagina Z., Lemishka I., Litvinchev I., Marmolejo J.A., Pankratov A., Romanova T., Yaskov G. Optimized filling of a given cuboid with spherical powders for additive manufacturing. *Journal of the Operations Research Society of China*. 2020. http://doi.org/10.1007/s40305-020-00314-9.
3. Романова Т.Є., Стецюк П.І., Чугай А.М., Шеховцов С.Б. Технології паралельних обчислень для розв'язання оптимізаційних задач геометричного проектування. *Кибернетика и системный анализ.* 2019. № 6. С. 17–29. http://www.kibernetika.org/volumes/2019/numbers/06/articles/02/ArticleDetailsUA.htm.
4. Стецюк П.И., Романова Т.Е. Равновесная упаковка шаров в шар минимального радиуса. *Международная конференция «Дискретная оптимизация и исследование операций» (DOOR-2013).* (Новосибирск, 24-28 июня 2013 г.).
5. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2002. 608 с.
6. Кластерний комплекс Інституту кібернетики. Кластерний комплекс СКІТ. URL: http://icybcluster.org.ua/.
7. Shor N.Z. Nondifferentiable optimization and polynomial problems. Boston/Dordrecht/London, Kluwer Academic Publishers, 1998. 412 p. https://doi.org/10.1007/978-1-4757-6015-6.
8. Стецюк П.И. Теория и программные реализации *r*-алгоритмов Шора. *Кибернетика и системный анализ.* 2017. **53**, № 5. С. 43–57.
9. Стецюк П.И. Методы эллипсоидов и *r*-алгоритмы. Эврика: Кишинэу, 2014. 488 с.
10. Лиховид А.П. О реализации параллельного алгоритма для решения задач равновесной упаковки. Теорія оптимальних рішень. Київ : Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, 2015. С. 154–159. http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/112413.
11. Лиховид О.П., Стецюк П.І. Комп'ютерна програма «Паралельна програма «Збалансована упаковка кругів з заданими допустимими відстанями між ними». Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 109298. Україна. Національний орган інтелектуальної власності державне підприємство «Український інститут інтелектуальної власності» (Укрпатент). Дата реєстрації 10.11.2021. 40 с.

*Отримано 19.07.2022*