

УДК 514.174.2

**ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ПОСТРОЕНИЯ УПАКОВОК
ИЗ РАЗЛИЧНЫХ ШАРОВ В ВЫПУКЛЫЕ КОМПАКТЫ¹****П. Д. Лебедев, А. Л. Казаков, А. А. Лемперт**

Исследуется проблема оптимальной упаковки неравных шаров в выпуклый компакт. Рассматриваются наборы шаров, радиусы которых пропорциональны заданному параметру r . Максимизация последнего выбрана в качестве критерия оптимальности. Наибольшее возможное количество различных типов шаров равно трем. Задача относится к классу NP-трудных и исследуется численно. Предложены алгоритмы, основанные на сегментации заданного компакта на зоны влияния центров элементов упаковки (обобщенные зоны Дирихле). Разбиение строится с использованием оптико-геометрического подхода, развиваемого в последние годы авторами. После получения промежуточного результата выполняется процедура улучшения с помощью разработанного геометрического алгоритма. В качестве его основы использованы методы, базирующиеся на пошаговом сдвиге точек с целью максимизации радиуса текущего шара. Для отыскания направления сдвига строится супердифференциал функции, равной максимальному радиусу элемента упаковки с центром в текущей точке. Выведена формула, позволяющая определить направление максимального роста данной функции. Разработанные алгоритмы реализованы в виде программного комплекса для построения упаковок шаров в компакт. Выполнен численный эксперимент, в ходе которого рассмотрено несколько примеров. Построены упаковки шаров разного радиуса для тел различной формы: куба, шара, цилиндра.

Ключевые слова: упаковка, шар, оптимизация, обобщенная зона Дирихле, производная по направлению, супердифференциал, оптико-геометрический подход.

P. D. Lebedev, A. L. Kazakov, A. A. Lempert. Numerical methods for the construction of packings of different balls into convex compact sets.

The problem of an optimal packing of incongruent balls into a convex compact set is studied. We consider sets of balls whose radii are proportional to a specified parameter r . The aim is to maximize r . The maximum possible number of different types of balls is three. The problem belongs to the class of NP-hard problems and is solved numerically. We propose algorithms based on partitioning the given compact set into zones of influence of the centers of the elements (generalized Dirichlet zones). The partition is constructed using the optical-geometric approach developed by the authors earlier. A preliminary result is obtained and then improved by a geometric algorithm based on a step-by-step shift of points aimed at maximizing the radius of the current ball. To find the shift direction, we construct the superdifferential of the function equal to the maximum radius of a packed ball centered at the current point. We derive a formula for the maximum growth direction of this function. The developed algorithms are implemented as a software complex for the construction of a ball packing of a compact set. A numerical experiment was carried out for several examples. Packings with balls of different radii are constructed for containers of different shapes: a cube, a sphere, and a cylinder.

Keywords: packing, sphere, optimization, generalized Dirichlet zone, directional derivative, superdifferential, optical-geometric approach.

MSC: 52C17, 05B40, 51M16, 52A27**DOI:** 10.21538/0134-4889-2020-26-2-173-187**Введение**

Задача об оптимальной упаковке шаров относится к числу классических и популярных проблем математики. Достаточно сказать, что в научной литературе она рассматривается, по крайней мере, с 1611 года, когда вышел в свет известный трактат И. Кеплера “*Strena, seu de nive sexangula*” (О шестиугольных снежинках). Задача интересна как сама по себе, так и в связи с многочисленными приложениями. Принято считать, что впервые она была предложена

¹Исследование П.Д. Лебедева поддержано грантом РФФ (проект № 19-11-00105), исследование А.Л. Казакова выполнено при поддержке РФФИ (проект № 18-07-00604), исследование А.А. Лемперт — при поддержке РФФИ (проект № 20-010-00724) и Правительства Иркутской области.

елизаветинским адмиралом У. Рэли, который изучал проблему размещения пушечных ядер в корабельном трюме.

Позднее задача упаковки шаров рассматривалась в упаковочной логистике, химии, медицине и др. [1]. Так, в материаловедении она возникает при моделировании процессов поглощения молекул [2], в радиохирургии — при планировании лечения [3], в области безопасности — при осуществлении охраны водного и воздушного периметров и т.п. При этом рассматриваются как равные шары (сферы), так и различные.

О сложности задачи упаковки шаров говорит, в частности, следующий факт: гипотеза Кеплера (1611) о том, что для случая бесконечного пространства плотнейшими упаковками равных шаров являются гранецентрированная кубическая и гексагональная плотная с плотностью $\pi/(3\sqrt{2})$, была окончательно доказана лишь спустя четыре столетия [4]. Для случая ограниченного контейнера проблема остается открытой даже в случаях, когда в качестве контейнеров выступают множества простой формы: сфера, куб, тетраэдр и т. д. и все шары между собой равны [5]. Как правило, задача упаковки шаров в контейнер решается численно. Приведем краткий обзор.

В [6] задачи упаковки заданного количества неравных шаров с целью минимизации размера контейнера решаются с помощью модификации алгоритма JA (jump-algorithm). Алгоритм JA также используется в работе [7] для решения задачи упаковки неравных шаров в сферу минимального размера.

В работе [8] представлен параллельный жадный алгоритм (B1.6_3DSPP) для задачи упаковки шаров разных радиусов в куб и кубоид. Этот алгоритм является улучшенным вариантом алгоритмов B1.0 и B1.5 из [9]. На основе жадных алгоритмов в работе [10] предложены методы широколучевого поиска (width-beam search), и рассмотрены задачи упаковки различных шаров в кубоид минимальной длины при фиксированной ширине и высоте. В статье [11] исследован метод, включающий методы поиска Табу, квази-человеческую (Quasi-human) стратегию и метод BFGS.

Задача упаковки шаров двух разных типов рассматривалась в [12], здесь размер больших шаров во много раз больше размера маленьких. Для получения наибольшей плотности предложена формула вычисления размера больших шаров при заданном размере маленьких.

Авторы ранее изучали в основном задачи упаковки равных кругов в плоские фигуры (см. [13;14]). В работах [15;16] они рассматривали упаковки уже из шаров в тела в трехмерном пространстве. В статье 2018 г. (П.Д. Лебедев, А.Л. Казаков. Итерационные методы построения упаковок из кругов различного радиуса на плоскости // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2018. Т. 24, № 2. С. 141–151) были исследованы упаковки на плоскости, которые содержали различные по размерам элементы. Естественно, возникает вопрос о возможности применения предложенных методов для построения упаковок из шаров различного радиуса в трехмерные компактные множества. В настоящей работе авторы сконцентрировались на варианте, когда радиус каждого шара равен произведению некоего индивидуального положительного коэффициента на общий для всех элементов параметр r .

1. Постановка задачи

Пусть задано выпуклое компактное множество $M \subset \mathbb{R}^3$ ненулевого объема $v(M) > 0$. Рассмотрим шар $B(\mathbf{s}, r) \triangleq \{\mathbf{b}: \|\mathbf{b} - \mathbf{s}\| \leq r\}$ с центром в точке \mathbf{s} , радиуса $r > 0$, здесь $\|\mathbf{b}\|$ означает евклидову норму вектора \mathbf{b} . Набор из $n \in \mathbb{N}$ шаров $B(\mathbf{s}_i, r_i)$ называется *упаковкой* U_n в множество M , если выполняются условия

$$\forall i = \overline{1, n} \quad B(\mathbf{s}_i, r_i) \subseteq M$$

и

$$\forall i = \overline{1, n}, \quad \forall j = \overline{1, n} \quad (i \neq j) \Rightarrow \text{int } B(\mathbf{s}_i, r_i) \cap \text{int } B(\mathbf{s}_j, r_j) = \emptyset,$$

где $\text{int}(\cdot)$ означает объединение внутренних точек множества.

Введем в рассмотрение при заданном n массив $A_n = \{\alpha_i\}_{i=1}^n$ из n положительных чисел. Будем обозначать S_n набор из n точек в трехмерном пространстве.

З а д а ч а 1. Пусть заданы выпуклый компакт M , число n и массив A_n . Требуется найти набор шаров $\{B(\mathbf{s}_i, \alpha_i r)\}_{i=1}^n$, образующих упаковку в множество M , при максимально возможном значении r .

Задачу 1 можно сформулировать как задачу оптимизации многомерной функции, зависящей от набора S_n . Обозначим через $R_M(S_n, A_n)$ максимальный радиус шаров с центрами в точках $\mathbf{s}_i \in S_n$, с радиусами $\alpha_i R_M(S_n, A_n)$, которые образуют упаковку во множество M . При $S_n \subset M$ его можно записать в виде

$$R_M(S_n, A_n) = \min_{i=\overline{1, n}} \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i), \quad (1.1)$$

$$\varphi^{(i)}(\mathbf{x}) = \min_{j=\overline{1, n}} \psi^{(i, j)}(\mathbf{x}), \quad i = \overline{1, n}, \quad (1.2)$$

$$\psi^{(i, j)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} (\alpha_i + \alpha_j)^{-1} \|\mathbf{x} - \mathbf{s}_j\|, & i \neq j, \\ \alpha_i^{-1} \rho(\mathbf{x}, \partial M), & i = j, \end{cases} \quad j = \overline{1, n}, \quad i = \overline{1, n}, \quad (1.3)$$

где $\rho(\mathbf{x}, M) \triangleq \min_{\mathbf{m} \in M} \|\mathbf{x} - \mathbf{m}\|$ — евклидово расстояние от точки \mathbf{x} до замкнутого множества M , ∂M — граница множества M . Задача 1 сводится к отысканию набора $S_n \subset M$, для которого величина $R_M(S_n, A_n)$ максимальна.

2. Методы решения задачи

В общем случае задача 1 может быть решена только численными методами. При этом ее удобно свести к задаче о поэтапной максимизации функций $\varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i)$ за счет изменения координат точек \mathbf{s}_i , $i = \overline{1, n}$. В случае шаров равного радиуса часто пользуются конструкциями глобально оптимальных решеток, например, гранецентрированной или гексагональной плотноупакованной [17, гл. VII, § 2]. Однако при различных размерах элементов упаковки они в явном виде не дают приемлемых результатов. Поэтому авторы разрабатывают различные итерационные схемы.

2.1. Методы разбиения множества на зоны влияния

Разбиение множества M на зоны, в которые вложены круги с центрами в каждой из точек массива S_n , впервые применены авторами в работе [13]. Однако для учета неравенства радиусов шаров в них требуется внести существенные коррективы.

О п р е д е л е н и е 1. Будем называть областью доминирования точки \mathbf{s}_i над \mathbf{s}_j при заданном массиве положительных чисел A_n множество

$$D^{(i, j)}(S_n, A_n) \triangleq \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : \varphi^{(i)}(\mathbf{x}) \leq \varphi^{(j)}(\mathbf{x})\}.$$

Считаем для удобства составления алгоритмов, что $D^{(i, i)}(S_n) = \mathbb{R}^3$.

Предложение 1. Пусть $\mathbf{s}_i \in S_n$ и $\mathbf{s}_j \in S_n$. Если $\mathbf{s}_i \neq \mathbf{s}_j$, то справедливы утверждения
1) если $\alpha_i < \alpha_j$, то $D^{(i, j)}(S_n)$ есть шар

$$D^{(i, j)}(S_n) = B(\mathbf{v}, r^*(\alpha_i, \alpha_j, \mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j)) \quad (2.1)$$

с центром в

$$\mathbf{v} = \mathbf{s}_i + \frac{\alpha_i^2}{\alpha_j^2 - \alpha_i^2} (\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j) \quad (2.2)$$

радиуса

$$r^*(\alpha_i, \alpha_j, \mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j) = \frac{\alpha_i \alpha_j}{|\alpha_j^2 - \alpha_i^2|} \|\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j\|; \quad (2.3)$$

2) если $\alpha_i = \alpha_j$, то $D^{(i,j)}(S_n)$ есть полупространство

$$D^{(i,j)}(S_n) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3: \|\mathbf{x} - \mathbf{s}_i\| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{s}_j\|\};$$

3) если $\alpha_i > \alpha_j$, то $D^{(i,j)}(S_n)$ есть неограниченное множество

$$D^{(i,j)}(S_n) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3: \|\mathbf{x} - \mathbf{w}\| \geq r^*(\alpha_i, \alpha_j, \mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j)\}, \quad (2.4)$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{s}_j + \frac{\alpha_i^2}{\alpha_i^2 - \alpha_j^2} (\mathbf{s}_j - \mathbf{s}_i). \quad (2.5)$$

Доказательство предложения 1 полностью аналогично доказательству теоремы 1 из недавней работы авторов (П.Д. Лебедев, А.Л. Казаков. Построение оптимальных покрытий выпуклых плоских фигур кругами различного радиуса // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2019. Т. 25, № 2. С. 137–148). Заметим, что чем ближе отношение чисел α_i/α_j к 1 при $\alpha_i \neq \alpha_j$, тем больше радиус (2.3) сферы, разграничивающей зоны доминирования точек. И чем меньше отношение α_i/α_j при $\alpha_i < \alpha_j$, тем ближе центр (2.2) этой сферы к \mathbf{s}_i . С другой стороны, чем больше частное α_i/α_j при $\alpha_i > \alpha_j$, тем ближе центр (2.5) этой сферы к \mathbf{s}_j . \square

Определение 2. При заданном массиве A_n и $S_n \subset M$ будем называть

$$D^{(i)}(S_n, A_n, M) \triangleq \{\mathbf{m} \in M: \varphi^{(i)}(\mathbf{m}) = \min_{j=\overline{1,n}} \varphi^{(j)}(\mathbf{m})\} \quad (2.6)$$

обобщенной зоной Дирихле точки \mathbf{s}_i в множестве M .

Из формулы (2.6) следует, что обобщенные зоны Дирихле можно находить как пересечение областей доминирования точки с компактом M

$$D^{(i)}(S_n, A_n, M) = M \cap \bigcap_{j=\overline{1,n}} D^{(i,j)}(S_n, A_n). \quad (2.7)$$

Теорема 1. Пусть заданы компакт M , натуральное число n , массив положительных чисел A_n . Тогда для любого массива точек $S_n \subset M$ можно построить новый массив $\tilde{S}_n = \{\tilde{\mathbf{s}}_i\}_{i=\overline{1,n}}$, в котором каждая точка $\tilde{\mathbf{s}}_i, i = \overline{1,n}$, взята произвольным образом из множества $\Theta(D^{(i)}(S_n, A_n, M))$, где

$$\Theta(M) \triangleq \{\mathbf{m}^* \in M: \rho(\mathbf{m}^*, \partial M) = \max_{\mathbf{m} \in M} \rho(\mathbf{m}, \partial M)\}$$

— подмножество точек из M , на которых достигается максимум функции $\rho(\mathbf{x}, \partial M)$. При этом будет выполняться неравенство

$$R_M(\tilde{S}_n, A_n) \geq R_M(S_n, A_n). \quad (2.8)$$

Доказательство. Допустим, все точки из S_n попарно различны. Из формулы (2.7) для обобщенной зоны Дирихле следует, что шар $B(\mathbf{s}_i, \alpha_i r)$, вложенный в $D^{(i)}(S_n, A_n, M)$, не пересекается ни с одним шаром $B(\mathbf{s}_i, \alpha_j r)$ при $i \neq j$, за исключением, может быть, его граничных точек. В то же время, если $B(\mathbf{s}_i, \alpha_i r) \setminus (D^{(i)}(S_n, A_n, M)) \neq \emptyset$, то либо в шаре $B(\mathbf{s}_i, \alpha_i r)$ есть точки, вложенные в $\text{int } B(\mathbf{s}_i, \alpha_j r)$, где $i \neq j$, либо шар $B(\mathbf{s}_i, \alpha_i r)$ выходит за пределы множества M . Значит, можно записать

$$\varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i) = \alpha_i^{-1} \rho(\mathbf{s}_i, \partial(D^{(i)}(S_n, A_n, M))), \quad i = \overline{1,n}. \quad (2.9)$$

Вместе с тем можно построить n шаров с центрами в точках $\tilde{\mathbf{s}}_i$ радиусами $\rho(\tilde{\mathbf{s}}_i, (D^{(i)}(S_n, A_n, M)))$, $i = \overline{1, n}$, каждый из которых лежит в обобщенной зоне Дирихле $D^{(i)}(S_n, A_n, M)$, $i = \overline{1, n}$, а значит, эти шары не будут пересекаться друг с другом за исключением граничных точек и не выйдут за пределы компакта M . Следовательно, можно записать оценки

$$\tilde{\varphi}^{(i)}(\tilde{\mathbf{s}}_i) \geq \alpha_i^{-1} \rho(\tilde{\mathbf{s}}_i, \partial(D^{(i)}(S_n, A_n, M))) \geq \alpha_i^{-1} \rho(\mathbf{s}_i, \partial(D^{(i)}(S_n, A_n, M))), \quad i = \overline{1, n}, \quad (2.10)$$

где

$$\tilde{\varphi}^{(i)}(\mathbf{x}) = \min_{j=\overline{1, n}} \tilde{\psi}^{(i, j)}(\mathbf{x}), \quad i = \overline{1, n},$$

$$\tilde{\psi}^{(i, j)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} (\alpha_i + \alpha_j)^{-1} \|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{s}}_j\|, & i \neq j, \\ \alpha_i^{-1} \rho(\mathbf{x}, \partial M), & i = j, \end{cases} \quad j = \overline{1, n}, \quad i = \overline{1, n}.$$

При этом (аналогично формуле (1.1))

$$R_M(\tilde{S}_n, A_n) = \min_{i=\overline{1, n}} \tilde{\varphi}^{(i)}(\tilde{\mathbf{s}}_i). \quad (2.11)$$

Из равенств (2.9) и неравенств (2.10) следует $\forall i = \overline{1, n} \quad \tilde{\varphi}^{(i)}(\tilde{\mathbf{s}}_i) \geq \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i)$. Отсюда по формулам (1.1) и (2.11) получаем оценку (2.8).

Если же допустить, что среди точек S_n есть две совпадающие, то $R_M(S_n, A_n) = 0$, и, следовательно, неравенство (2.8) выполняется для любого множества точек $\tilde{S}_n \subset M$. \square

Теорема 1 дает возможность разрабатывать *геометрические алгоритмы*, основанные на разбиении тела M на обобщенные зоны Дирихле. Однако их структура может быть очень сложной: участки их границ могут содержать не только части плоскостей, но и сегменты сфер, разделяющих зоны доминирования точек, в случае, если они описаны формулами (2.1) или (2.4). Особенные сложности создает то обстоятельство, что множества $D^{(i)}(S_n, A_n, M)$, $i = \overline{1, n}$, в общем случае не выпуклые и не односвязные, даже если M — выпуклое тело.

В качестве второго способа построения обобщенных зон Дирихле авторы используют *волновой метод*, предложенный в [15] и базирующийся на оптико-геометрической аналогии между распространением света и отысканием кратчайшего расстояния от точки до замкнутого множества. Фактически для нахождения зон Дирихле необходимо из каждой точки $\mathbf{s}_i \in S_n$ инициировать световую волну, движущуюся со скоростью α_i , и отслеживать ее распространение до тех пор, пока она не заполнит множество M . Это означает, что для любой точки $\mathbf{x} \in M$ мы имеем вектор $t(\mathbf{x}) = \{t^1(\mathbf{x}), \dots, t^n(\mathbf{x})\}$ времен достижения \mathbf{x} каждой волной. Если $j^* = \arg \min_{i=\overline{1, \dots, n}} (t^i(\mathbf{x}))$, то \mathbf{x} принадлежит зоне Дирихле, порожденной точкой \mathbf{s}_{j^*} ; если для некоторого k : $|t^{j^*}(\mathbf{x}) - t^k(\mathbf{x})| \leq \varepsilon$, то \mathbf{x} лежит на границе j^* -й и k -й зон.

2.2. Методы оптимального сдвига точек из S_n

Если текущий массив S_n центров элементов упаковки удовлетворяет вложению $S_n \subset M$ и оценке $R_M(S_n, A_n) > 0$, то имеется возможность улучшить его свойства за счет использования дифференциальных свойств функций $\varphi^{(i)}(\cdot)$, $i = \overline{1, n}$, в окрестности точек \mathbf{s}_i , $i = \overline{1, n}$. Похожие методы использовались ранее в работе [16] для упаковок из конгруэнтных шаров.

Заметим, что функция $\varphi^{(i)}(\mathbf{x})$ (в случае, если $\varphi^{(i)}(\mathbf{x}) > 0$) есть согласно (1.2), (1.3) минимум из n супердифференцируемых функций $\psi^{(i, j)}(\cdot)$. Подробнее определение супердифференциала приведено в [18, гл. I, п. 4.1], а свойства супердифференциала функции евклидова расстояния до выпуклого множества — в [19, гл. II, § 8]. Для функции $f(\mathbf{x})$, у которой определен в точке \mathbf{x}^* супердифференциал $D^+ f(\mathbf{x})$, производная

$$\left. \frac{df(\mathbf{x})}{d\mathbf{b}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} \triangleq \lim_{\varepsilon \rightarrow 0, \varepsilon > 0} \frac{f(\mathbf{x}^* + \varepsilon \mathbf{b}) - d(\mathbf{x}^*)}{\varepsilon}$$

по любому направлению $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^3 \setminus \{\mathbf{0}\}$ ($\mathbf{0} \triangleq (0, 0, 0)$) равна

$$\left. \frac{df(\mathbf{x})}{d\mathbf{b}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} = \min_{\mathbf{d} \in D^+u(\mathbf{x}^*)} \langle \mathbf{b}, \mathbf{d} \rangle.$$

Обозначим через $J^{(i)}(\mathbf{x})$ множество вторых номеров j функций $\psi^{(i,j)}(\cdot)$, для которых выполняется равенство $\psi^{(i,j)}(\mathbf{x}) = \varphi^{(i)}(\mathbf{x})$. Введем также $\Omega(\mathbf{x}, M) \triangleq \{\mathbf{m} \in M : \|\mathbf{x} - \mathbf{m}\| = \rho(\mathbf{x}, M)\}$ — множество ближайших к \mathbf{x} в евклидовой метрике точек компакта M .

О п р е д е л е н и е 3. При заданном массиве A_n и $S_n \subset M$ будем называть

$$\Omega^{(i)}(\mathbf{x}) = \{\mathbf{s}_j : j \in J^{(i)}(\mathbf{x}), j \neq i\} \cup M^{(i)}(\mathbf{x}), \quad (2.12)$$

где

$$M^{(i)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \Omega(\mathbf{x}, \partial M), & i \in J^{(i)}(\mathbf{x}), \\ \emptyset, & i \notin J^{(i)}(\mathbf{x}), \end{cases}$$

множеством характеристических точек функции $\varphi^{(i)}(\cdot)$ в \mathbf{x} .

Супердифференциал $D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{x})$ функции $\varphi^{(i)}(\cdot)$ в точке \mathbf{x} совпадает с

$$D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{x}) = \text{co} \left(\bigcup_{j \in J^{(i)}(\mathbf{x})} D^+\psi^{(i,j)}(\mathbf{x}) \right),$$

где $\text{co}(M)$ означает выпуклую оболочку множества M . Его можно записать в виде

$$\begin{aligned} D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{x}) = \text{co} \left(\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{s}_j}{(\alpha_i + \alpha_j)\|\mathbf{x} - \mathbf{s}_j\|} : \mathbf{s}_j \in S_n \cap \Omega^{(i)}(\mathbf{x}) \right) \right. \\ \left. \cup \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{m}}{\alpha_i\|\mathbf{x} - \mathbf{m}\|} : \mathbf{m} \in \partial M \cap \Omega^{(i)}(\mathbf{x}) \right) \right). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Подробнее вывод формулы (2.13) приведен в доказательстве теоремы 1 из вышеуказанной статьи авторов 2018 г. (см. разд. Введение).

О п р е д е л е н и е 4. Пусть функция $f(\mathbf{x})$ определена на множестве $X \subset \mathbb{R}^3$ и имеет в точке $\mathbf{x}^* \in \text{int } X$ производные по всем векторам $\mathbf{b} \in \partial B(\mathbf{0}, 1)$. Назовем направлением экстремального роста вектор $\mathbf{b}^* \in \partial B(\mathbf{0}, 1)$, если для него выполняются условия

$$\left. \frac{df(\mathbf{x})}{d\mathbf{b}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} > 0$$

и

$$\left. \frac{df(\mathbf{x})}{d\mathbf{b}^*} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} = \max_{\mathbf{b} \in \partial B(\mathbf{0}, 1)} \left. \frac{df(\mathbf{x})}{d\mathbf{b}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*}. \quad (2.14)$$

Лемма. Пусть функция $f(\mathbf{x})$ определена на множестве $X \subset \mathbb{R}^3$ и имеет в точке $\mathbf{x}^* \in \text{int } X$ супердифференциал $D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{x}^*)$. Тогда, если

$$\mathbf{0} \notin D^+f(\mathbf{x}^*),$$

то для $f(\mathbf{x})$ существует и единственно направление экстремального роста

$$\mathbf{b}^* = \frac{\mathbf{d}^*}{\|\mathbf{d}^*\|}, \quad (2.15)$$

где вектор \mathbf{d}^* соответствует условию

$$\{\mathbf{d}^*\} = \Omega(\mathbf{0}, D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{x}^*)). \quad (2.16)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Супердифференциал всегда есть выпуклый компакт. Из выпуклого анализа известно, что множество проекций на любое выпуклое замкнутое множество всегда состоит ровно из одной точки [20, лемма 1.9.1]. Поэтому ближайшим элементом к $\mathbf{0}$ может быть только один \mathbf{d}^* (и ему сонаправлен вектор \mathbf{b}^*). При этом из формулы для производных по направлению (2.14) вытекает

$$\forall \mathbf{b} \in \partial B(\mathbf{0}, 1) \setminus \{\mathbf{b}^*\} \quad \left. \frac{df(\mathbf{x})}{d\mathbf{b}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} \leq \langle \mathbf{b}, \mathbf{d}^* \rangle = \|\mathbf{d}^*\| \cos(\angle(\mathbf{b}, \mathbf{d}^*)) = \|\mathbf{d}^*\| \cos(\angle(\mathbf{b}, \mathbf{b}^*)) < \|\mathbf{d}^*\|, \quad (2.17)$$

здесь $\angle(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \in [0, \pi]$ означает угол между векторами \mathbf{a} и \mathbf{b} .

Покажем, что выполняется равенство

$$\left. \frac{df(\mathbf{x})}{d\mathbf{b}^*} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} = \langle \mathbf{b}^*, \mathbf{d}^* \rangle. \quad (2.18)$$

Допустим, что (2.18) не выполняется. Тогда найдется точка $\tilde{\mathbf{d}} \in D^+u(\mathbf{x}^*)$, для которой

$$\langle \mathbf{b}^*, \tilde{\mathbf{d}} \rangle < \langle \mathbf{b}^*, \mathbf{d}^* \rangle.$$

Проведем плоскость $\Pi = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3: \langle \mathbf{b}^*, \mathbf{x} \rangle = \|\mathbf{d}^*\|\}$. По построению $\tilde{\mathbf{d}}$ расположена в полупространстве, которое ограничено плоскостью Π и содержит начало координат, и точка $\tilde{\mathbf{d}}$ не находится на самой плоскости Π . Вместе с тем плоскость Π является касательной к сфере $\partial B(\mathbf{0}, \|\mathbf{d}^*\|)$ в точке \mathbf{d}^* . Поскольку множество $\Omega(\mathbf{0}, D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{x}^*))$ состоит ровно из одной точки, то $\tilde{\mathbf{d}} \notin B(\mathbf{0}, \|\mathbf{d}^*\|)$. Значит, отрезок $[\mathbf{d}^*, \tilde{\mathbf{d}}]$ пересекает сферу $\partial B(\mathbf{0}, \|\mathbf{d}^*\|)$ в двух точках, одна из которых $\mathbf{d}^* \neq \tilde{\mathbf{d}}$. В силу выпуклости компакта $D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{x}^*)$ можно получить включение

$$\tilde{\mathbf{d}} \in \text{co}\{\mathbf{d}^*, \tilde{\mathbf{d}}\} \subseteq \text{co} D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{x}^*) = D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{x}^*).$$

Таким образом, супердифференциал содержит две точки, ближайшие к началу координат; противоречие.

Из оценок (2.17) и равенства (2.18) следует, что вектор (2.15) есть направление экстремального роста. \square

З а м е ч а н и е. Если у функции $f(\mathbf{x})$ определен супердифференциал в точке \mathbf{x}^* и он содержит начало координат, то это означает, что производные функции по всем направлениям не положительные. Однако и в этом случае могут существовать векторы $\mathbf{b} \in \partial B(\mathbf{0}, 1)$ такие, что функция $f_{\mathbf{b}}(\varepsilon) \triangleq f(\mathbf{x}^* + \varepsilon\mathbf{b})$ монотонно возрастает на некотором отрезке $[0, \varepsilon_0]$, $\varepsilon_0 > 0$.

Теорема 2. Пусть заданы компакт M , массив точек $S_n \subset M$ и массив положительных чисел A_n . Тогда при любом $i = \overline{1, n}$, если для точки $\mathbf{x}^* \in M$ выполняется

$$\mathbf{x}^* \notin \text{co} \Omega^{(i)}(\mathbf{x}^*), \quad (2.19)$$

то в точке \mathbf{x}^* определены супердифференциал $D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{x}^*)$ и единственное направление $\mathbf{b}^{(i)}$ экстремального роста функции $\varphi^{(i)}(\mathbf{x})$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Заметим, что из (2.19) следует, что $\mathbf{x}^* \notin \Omega^{(i)}(\mathbf{x}^*)$, а значит, $\varphi^{(i)}(\mathbf{x}^*) > 0$. Поэтому супердифференциал $D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{x}^*)$ определен по формуле (2.13).

Покажем, что выполняется условие

$$\mathbf{0} \notin D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{x}^*). \quad (2.20)$$

Допустим, (2.20) неверно. Супердифференциал по формулам (2.12) и (2.13) есть выпуклая оболочка векторов, полученных умножением векторов из множества $\{\mathbf{x}^*\} - \Omega^{(i)}(\mathbf{x}^*)$ на положительные константы. Поэтому, если найдется набор точек $\{\mathbf{d}_j\}_{j=1}^k \subseteq D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{x}^*)$ такой, что $\mathbf{0}$ есть выпуклая комбинация $\{\mathbf{d}_j\}_{j=1}^k$, то найдется и

$$\{\beta_j \mathbf{d}_j\}_{j=1}^k \subseteq (\{\mathbf{x}^*\} - \Omega^{(i)}(\mathbf{x}^*)) \quad \forall j = \overline{1, k} \quad \beta_j > 0.$$

Значит, некоторой выпуклой комбинацией точек $\{\beta_j \mathbf{d}_j\}_{j=1}^k$ также будет являться начало координат (подробнее см. [16, лемма 2.1]). Таким образом, можно записать

$$\sum_{j=1}^k \gamma_j \mathbf{x}^* = \sum_{j=1}^k \gamma_j \mathbf{g}_j,$$

где

$$\sum_{j=1}^k \gamma_j = 1 \quad \forall j = \overline{1, k} \quad \gamma_j \geq 0, \quad \forall j = \overline{1, k} \quad \mathbf{g}_j \in \Omega^{(i)}(\mathbf{x}^*).$$

Отсюда следует, что \mathbf{x}^* может быть представлена как выпуклая комбинация точек $\{\mathbf{g}_j\}_{j=1}^k \subseteq \Omega^{(i)}(\mathbf{x}^*)$, что противоречит условию (2.19).

Согласно лемме, приведенной выше, из условия (2.20) следует, что для функции $\varphi^{(i)}(\mathbf{x})$ существует и единственно направление $\mathbf{b}^{(i)}$ экстремального роста в точке \mathbf{x}^* . Его можно найти по формулам (2.15), (2.16) как вектор из $\partial B(\mathbf{0}, 1)$, сонаправленный с минимальным по норме элементом супердифференциала $D^+ \varphi^{(i)}(\mathbf{x}^*)$. \square

На базе теоремы 2 авторы составили алгоритм поэтапной максимизации значений функций (1.2) в центрах шаров упаковки. Для его работы требуется начальная итерация массива точек $\text{int } S_n$, состоящая из попарно различных элементов. Это гарантирует, что в каждой точке $\mathbf{s}_i, i = \overline{1, n}$, существует супердифференциал $D^+ \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i), i = \overline{1, n}$.

А л г о р и т м 1. Максимизация функции $\varphi^{(i)}(\cdot)$

1. Ввод значений массива точек $S_n \subset \text{int } M$, массива положительных чисел A_n , параметра $l_0 > 0$ для вычисления вектора сдвига и номера i .
2. Вычисление значения $\varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i)$.
3. Вычисление супердифференциала $D^+ \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i)$.
4. Установка значения счетчика k итераций в $k := 0$.
5. Если $\mathbf{0} \in D^+ \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i)$, то установка значения координаты новой точки $\mathbf{s}_i^* := \mathbf{s}_i$ и переход к п. 11.
6. Вычисление элемента \mathbf{d}^* , наименьшего по норме в $D^+ \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i)$.
7. Определение координат новой точки

$$\mathbf{s}_i^* := \mathbf{s}_i + \frac{l_0 \mathbf{d}^*}{2^k \|\mathbf{d}^*\|}. \quad (2.21)$$

8. Увеличение счетчика итераций k на единицу: $k := k + 1$.
9. Если $\mathbf{s}_i^* \notin M$, то переход к п. 7.
10. Если $\varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i^*) < \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i)$, то переход к п. 7.
11. Построение нового массива $\widehat{S}_n = \{\widehat{\mathbf{s}}_j\}_{j=1}^n$ по формуле

$$\widehat{\mathbf{s}}_j = \begin{cases} \mathbf{s}_j, & j \neq i, \\ \mathbf{s}_i^*, & j = i, \end{cases} \quad j = \overline{1, n}. \quad (2.22)$$

Предложение 2. Пусть заданы выпуклый компакт M , массив точек $S_n \subset M$ и массив положительных чисел A_n . Тогда, если $R_M(S_n, A_n) > 0$, то при любом $i = \overline{1, n}$ и любом $l_0 > 0$ для массива точек \widehat{S}_n с помощью алгоритма 1 за конечное число итераций k может быть получен массив \widehat{S}_n . И справедлива оценка

$$R_M(\widehat{S}_n, A_n) \geq R_M(S_n, A_n). \quad (2.23)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Поскольку $R_M(S_n, A_n) > 0$, то в точке \mathbf{s}_i определен супердифференциал $D^+ \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i)$. Если $\mathbf{0} \in D^+ \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i)$, то число итераций равно нулю, и по формуле (2.22) имеет место $\widehat{S}_n = S_n$. Нестрогое неравенство (2.23) тогда превращается в равенство.

Если же $\mathbf{0} \notin D^+\varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i)$, то выполняется как минимум одна итерация с вычислением новой точки по формуле (2.21). Рассмотрим функцию

$$f_{\mathbf{b}}(\varepsilon) = \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i + \varepsilon\mathbf{b}),$$

где $\mathbf{b} = \mathbf{d}^* \cdot \|\mathbf{d}^*\|^{-1}$. Согласно лемме и теореме 2 $f_{\mathbf{b}}(\varepsilon)$ имеет в точке 0 положительную одно-стороннюю производную

$$f'_{\mathbf{b}}(+0) = \|\mathbf{d}^*\|.$$

Поэтому ее можно представить на некотором отрезке $[0, \varepsilon_0]$, $\varepsilon_0 \in (0, \rho(\mathbf{s}_i, \partial M))$, в виде

$$f_{\mathbf{b}}(\varepsilon) = f_{\mathbf{b}}(0) + f'_{\mathbf{b}}(+0)\varepsilon + o(\varepsilon) = \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i) + \|\mathbf{d}^*\|\varepsilon + o(\varepsilon),$$

где $o(\varepsilon)$ — бесконечно малая величина более высокого порядка, чем ε . Значит, найдется такое число ε^* , что при всех $\varepsilon \in (0, \varepsilon^*]$ $|o(\varepsilon)| \leq 0.5\|\mathbf{d}^*\|\varepsilon$, и, следовательно,

$$f_{\mathbf{b}}(\varepsilon) \geq \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i) + \|\mathbf{d}^*\|\varepsilon - 0.5\|\mathbf{d}^*\|\varepsilon \geq \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i) + 0.5\|\mathbf{d}^*\|\varepsilon > \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i).$$

Поэтому при достаточно больших $k \in \mathbb{N}$, удовлетворяющих неравенству $2^{-k} \leq \varepsilon^*/l_0$, справедливо

$$f_{\mathbf{b}}(l_0 2^{-k}) > f_{\mathbf{b}}(0),$$

а значит,

$$\varphi^{(i)}\left(\mathbf{s}_i + \frac{l_0 \mathbf{d}^*}{2^k \|\mathbf{d}^*\|}\right) > \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i).$$

Таким образом, при некотором конечном k строится точка \mathbf{s}_i^* , для которой $\varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i^*) \geq \varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i)$, и затем происходит окончание работы алгоритма.

Покажем, что неравенство (2.23) выполняется в случае, если $\widehat{S}_n \neq S_n$. Обозначим через i^* номер элемента массива, который различается в \widehat{S}_n и S_n . По аналогии с формулами (1.1)–(1.3) можно записать

$$\begin{aligned} R_M(\widehat{S}_n, A_n) &= \min_{i=\overline{1, n}} \widehat{\varphi}^{(i)}(\widehat{\mathbf{s}}_i), \\ \widehat{\varphi}^{(i)}(\mathbf{x}) &= \min_{j=\overline{1, n}} \widehat{\psi}^{(i, j)}(\mathbf{x}), \quad i = \overline{1, n}, \\ \widehat{\psi}^{(i, j)}(\mathbf{x}) &= \begin{cases} (\alpha_i + \alpha_j)^{-1} \|\mathbf{x} - \widehat{\mathbf{s}}_j\|, & i \neq j, \\ \alpha_i^{-1} \rho(\mathbf{x}, \partial M), & i = j, \end{cases} \quad j = \overline{1, n}, \quad i = \overline{1, n}. \end{aligned}$$

Поскольку все точки массивов S_n и \widehat{S}_n кроме i^* , по номеру совпадают, то

$$\forall \mathbf{x} \in M \quad \widehat{\varphi}^{(i^*)}(\mathbf{x}) = \varphi^{(i^*)}(\mathbf{x}).$$

А по условиям окончания работы алгоритма 1 выполняется $\varphi^{(i^*)}(\widehat{\mathbf{s}}_{i^*}) \geq \varphi^{(i^*)}(\mathbf{s}_{i^*})$. Таким образом, справедливо

$$\widehat{\varphi}^{(i^*)}(\widehat{\mathbf{s}}_{i^*}) \geq \varphi^{(i^*)}(\mathbf{s}_{i^*}) \geq R_M(S_n, A_n). \quad (2.24)$$

Обозначим через I^* множество тех значений i , при которых значение выражения $\widehat{\varphi}^{(i)}(\widehat{\mathbf{s}}_i)$ отличается от $\varphi^{(i)}(\mathbf{s}_i)$. При $i \neq i^*$ это возможно только для тех номеров i , при которых $\widehat{\varphi}^{(i)}(\widehat{\mathbf{s}}_i) = \widehat{\psi}^{(i, i^*)}(\widehat{\mathbf{s}}_i)$, потому что все элементы, кроме i^* по номеру, в массивах \widehat{S}_n и S_n совпадают. Но тогда для значений функций $\widehat{\varphi}^{(i)}(\cdot)$ в таких точках выполняется оценка (с учетом (2.24))

$$\widehat{\varphi}^{(i)}(\widehat{\mathbf{s}}_i) = \widehat{\psi}^{(i, i^*)}(\widehat{\mathbf{s}}_i) \geq \widehat{\varphi}^{(i^*)}(\widehat{\mathbf{s}}_{i^*}) \geq \varphi^{(i^*)}(\mathbf{s}_{i^*}) \geq R_M(S_n, A_n). \quad (2.25)$$

Из неравенств (2.24), (2.25) вытекает

$$\forall i = \overline{1, n} \quad \widehat{\varphi}^{(i)}(\widehat{\mathbf{s}}_i) \geq R_M(S_n, A_n),$$

а значит, и (2.23). □

3. Численные эксперименты

В рамках работы над статьей авторами реализован программный комплекс в среде МАТ-ЛАВ, опирающийся на введенные выше конструкции. Его основу составляет многократное применение алгоритма 1 для различных начальных позиций центров упаковки. Предложение 2 гарантирует, что он по крайней мере не уменьшает радиус шаров упаковки. Для поиска наиболее близкого к оптимальному результату в нем предусмотрена многократная генерация начальных положений центров элементов с помощью генератора случайных чисел. Она происходит поэтапно, для каждой новой точки \mathbf{s}_i выполняется проверка на то, чтобы она принадлежала $\text{int } M$ и не совпадала ни с одной из уже сгенерированных.

При этом могут применяться разбиение компакта M на обобщенные зоны Дирихле и нахождение в них множеств точек, максимально удаленных от границы как с помощью геометрического, так и волнового методов. Применение последнего позволяет избегать вырожденных ситуаций, в которых шары упаковки плотно зажаты друг другом и границей M , но расположены явно не оптимальным способом, например, все в ряд.

Косвенным показателем близости упаковки U_n к оптимальной можно считать ее плотность $\sigma(U_n)$ — отношение суммы объемов всех входящих в нее шаров $B(\mathbf{s}_i, \alpha_i r)$, $i = \overline{1, n}$, к объему $v(M)$ множества M . В качестве тел M выбраны куб и шар, поскольку задачи о построении в них упаковок достаточно известны в геометрии и рассматривались, например, в работах [21] (для куба), [22] (для шара) и [23] (для цилиндра). Авторы решили ограничиться изучением наборов элементов упаковки трех различных радиусов. Этого достаточно, чтобы продемонстрировать эффективность работы программного комплекса, а рост числа различных коэффициентов α_i приводит к увеличению затрат машинного времени.

Пример 1. Требуется решить задачу 1 при $n = 20$, при множестве M — кубе,

$$M = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : \max\{|x|, |y|, |z|\} \leq 1\}, \quad (3.1)$$

и массиве $A_n = \{\alpha_i\}_{i=1}^n$, состоящем из чисел $\alpha_1 = 2$, $\alpha_2 = 1.5$, $\alpha_i = 1$ при $i = \overline{3, 20}$.

Наилучшее найденное значение $r \approx 0.3049$. Плотность упаковки $\sigma(U_{16}) \approx 0.4360$. Шары упаковки $B(\mathbf{s}_i, \alpha_i r)$, $i = \overline{1, 20}$, и множество M представлены на рис. 1. Массив центров шаров

$$\begin{aligned} S_{20} = \{ & (0.3892, -0.1280, -0.0418), (-0.5044, -0.0368, 0.5408), (-0.2033, 0.1352, -0.6934), \\ & (-0.3219, 0.6930, 0.6930), (0.0732, 0.6934, 0.2235), (-0.4543, -0.6935, -0.3671), \\ & (-0.6936, 0.1105, -0.1863), (-0.0060, -0.6728, 0.6728), (-0.6895, 0.6895, 0.1930), \\ & (0.0654, -0.6930, -0.6930), (-0.6936, -0.2333, -0.6936), (-0.6933, 0.6933, -0.6933), \\ & (0.6951, 0.6951, 0.2144), (0.6945, -0.6945, -0.6945), (0.6814, -0.6814, 0.6814), \\ & (0.1291, 0.6930, -0.6930), (-0.6938, -0.6938, 0.1968), (-0.2825, 0.5596, -0.2578), \\ & (0.6951, 0.3198, 0.6951), (0.6928, 0.4493, -0.6928)\}. \end{aligned}$$

Пример 2. Требуется решить задачу 1 при $n = 20$, при множестве M — шаре, $M = B(\mathbf{01})$, и массиве $A_n = \{\alpha_i\}_{i=1}^n$, состоящем из чисел $\alpha_1 = \alpha_2 = 2$, $\alpha_3 = 1.5$, $\alpha_i = 1$ при $i = \overline{3, 20}$.

Наилучшее найденное значение $r \approx 0.2476$. Плотность упаковки $\sigma(U_{16}) \approx 0.4819$. Шары упаковки $B(\mathbf{s}_i, \alpha_i r)$, $i = \overline{1, 20}$, и множество M представлены на рис. 2. Массив центров шаров

$$\begin{aligned} S_{20} = \{ & (-0.2627, 0.4298, 0.0333), (0.4307, 0.0546, 0.4519), \\ & (-0.3205, -0.5124, -0.1701), (-0.1147, 0.1847, 0.7197), (0.6108, -0.4258, 0.1002), \\ & (-0.0312, 0.3455, -0.6676), (0.3278, 0.0037, -0.6767), (0.1267, -0.4425, -0.5944), \\ & (0.5601, -0.3227, -0.3834), (0.7432, 0.0384, -0.0884), (0.1903, -0.1589, -0.0864), \end{aligned}$$

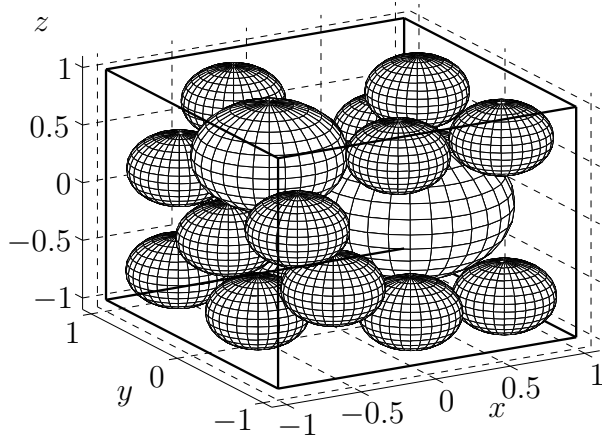


Рис. 1. Аппроксимация U_{20} наилучшей упаковки куба (3.1) 20 шарами в примере 1.

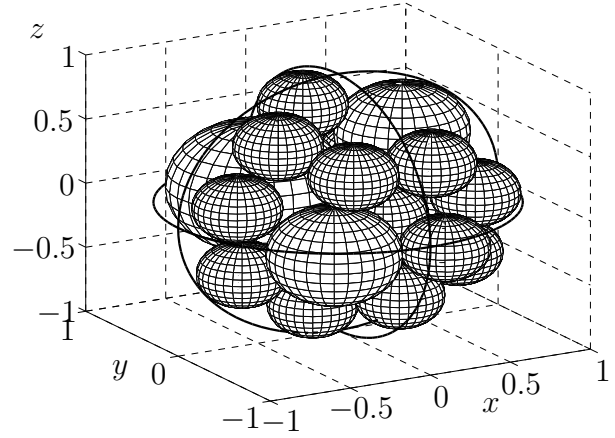


Рис. 2. Аппроксимация U_{20} наилучшей упаковки шара $M = B(\mathbf{0}, 1)$ 20 шарами в примере 2.

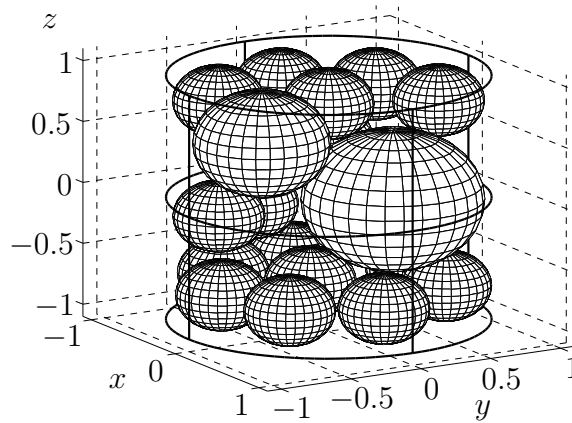


Рис. 3. Аппроксимация U_{20} наилучшей упаковки цилиндра (3.2) 20 шарами в примере 3.

(0.2680, -0.5472, 0.4396), (-0.4589, -0.1442, 0.5771), (-0.2289, -0.5635, 0.4415),
 (-0.6203, -0.0334, -0.4245), (-0.2226, -0.1096, -0.7100), (0.4828, 0.5638, 0.0835),
 (0.5160, 0.3758, -0.3862), (-0.7185, -0.1533, 0.1516), (0.2789, -0.6755, -0.1742)}.

Пример 3. Требуется решить задачу 1 при $n = 20$, при множестве M — цилиндре,

$$M = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3: x^2 + y^2 \leq 1, |z| \leq 1\}, \quad (3.2)$$

и массиве $A_n = \{\alpha_i\}_{i=1}^n$, состоящем из чисел $\alpha_1 = 2$, $\alpha_2 = 1.5$, $\alpha_i = 1$ при $i = \overline{3, 20}$.

Наилучшее найденное значение $r \approx 0.2822$. Плотность упаковки $\sigma(U_{16}) \approx 0.44$. Шары упаковки $B(\mathbf{s}_i, \alpha_i r)$, $i = \overline{1, 20}$, и множество M представлены на рис. 3. Массив центров шаров

$S_{20} = \{(0.3627, 0.2408, 0.0454), (0.1335, -0.5607, 0.5764), (-0.2229, -0.6530, -0.1052),$
 $(-0.3748, -0.1695, 0.2524), (-0.5514, -0.4584, 0.7171), (-0.6972, 0.1615, -0.7156),$
 $(-0.7119, 0.0847, 0.7166), (-0.1064, -0.7043, -0.7123), (0.1355, 0.7044, 0.7174),$
 $(-0.6171, 0.3653, 0.2353), (-0.1427, 0.0807, 0.7152), (-0.5921, -0.3991, -0.7140),$
 $(0.4496, -0.5504, -0.7107), (-0.1756, 0.6954, -0.7171), (-0.4175, 0.5839, 0.7166),$

$$(0.7084, -0.0311, -0.7091), (0.3825, 0.6073, -0.7177), (-0.7014, -0.1262, -0.2189), \\ (-0.5105, 0.5036, -0.3031), (-0.0625, -0.0949, -0.6944)\}.$$

При построении упаковок в общем случае трудной является задача об отыскании проекции текущей точки \mathbf{x} на границу ∂M тела M . Однако в случае, если M — выпуклый многогранник, то достаточно рассмотреть ортогональные проекции \mathbf{x} на все плоскости, проходящие через его грани. Если же M — шар, то проекцией точки \mathbf{x} на ∂M будет точка пересечения прямой, проходящей через \mathbf{x} и центр шара M . Если же M — цилиндр, то в качестве возможных проекций нужно рассмотреть точки двух типов. Один тип — точки пересечения прямой, проходящей через \mathbf{x} параллельно оси симметрии Λ цилиндра, с его плоскими гранями. Второй тип — точка пересечения боковой поверхности цилиндра с прямой, проходящей через \mathbf{x} и Λ , перпендикулярно к Λ .

Для решения примеров 1–3 выполнено в среднем по $15 \div 20$ запусков программного комплекса на каждый из них. Время работы комплекса составляло $4 \div 6$ минут, включая вычисление плотности найденной упаковки.

Отметим, что в ходе вычислительного эксперимента установлено, что применение геометрического метода дает несколько худшие результаты с точки зрения максимизации плотности упаковки по сравнению с волновым. Вместе с тем время работы волнового метода существенно больше, чем геометрического. Комбинация же методов позволяет существенно сократить время вычислений по сравнению с волновым методом и дает выигрыш в точности не только по сравнению с геометрическим, но и с волновым. При этом первым запускается волновой метод, а затем геометрический. Применение методов в обратном порядке к улучшению результатов не приводит.

Заключение

Подводя итог проделанной работе, отметим, что нами продолжены исследования проблемы упаковки шаров в выпуклые компакты M в трехмерном евклидовом пространстве. Ранее был рассмотрен случай, когда все шары являются равными, а на плоскости — когда круги могут иметь два различных радиуса, связанных между собой определенным соотношением. В настоящей статье постановка была еще усложнена. Разработан вычислительный алгоритм, который позволяет решать указанную задачу в случае, когда шары могут иметь до трех различных типов. При этом перенос ранее предложенных подходов на более сложную постановку оказался весьма затратным с точки зрения вычислительных ресурсов, и потребовалось разработать комбинированный алгоритм, который основан на последовательном применении волнового и геометрического методов. Первый развивается авторами [13; 24] уже несколько лет и основан на последовательном многократном пуске волн, скорости движения которых различны и пропорциональны радиусам упаковываемых шаров. Основным элементом второго метода является поэтапная максимизация функций, определяющих наибольший радиус шара с центром в текущей точке, который не выходит за рамки множества M и не пересекается с другими шарами из упаковки (кроме, возможно, граничных точек). Доказано предложение о корректности работы алгоритма.

Разработанные алгоритмы реализованы в виде программного комплекса построения упаковок шаров в тела различной геометрии. Выполнен вычислительный эксперимент, который показал, что наиболее эффективные результаты дает последовательное применение двух подходов: волнового и геометрического. При этом результаты работы первого алгоритма используются в качестве начального приближения для второго.

В дальнейшем предложенный подход авторы планируют распространить на задачу упаковки шаров, все радиусы которых различны.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Castillo I., Kampas F.J., Pinter J.D.** Solving circle packing problems by global optimization: Numerical results and industrial applications // *European J. Operat. Research*. 2008. Vol. 191, no. 3. P. 786–802. doi: 10.1016/j.ejor.2007.01.054.
2. **Harary F., Randolph W., Mezey P.G.** A study of maximum unit-circle caterpillars – tools for the study of the shape of adsorption patterns // *Discrete Appl. Math.* 1996. Vol. 67, no. 1–3. P. 127–135. doi: 10.1016/0166-218X(95)00014-I.
3. **Wang J.** Packing of unequal spheres and automated radiosurgical treatment planning // *J. Combinator. Optim.* 1999. Vol. 3, no. 4. P. 453–463. doi: 10.1023/A:1009831621621.
4. **Hales T.** Cannonballs and honeycombs // *Notices of the American Math. Soc.* 2000. Vol. 47. P. 440–449.
5. **Chernov N., Stoyan Yu., Romanova T.** Mathematical model and efficient algorithms for object packing problem // *Computational Geometry*. 2010. Vol. 43, no. 5. P. 535–553. doi: 10.1016/j.comgeo.2009.12.003.
6. **Stoyan Y.G., Scheithauer G., Yaskov G.N.** Packing Unequal Spheres into Various Containers // *Cybernetics Syst. Anal.* 2016. Vol. 52, no. 3. P. 419–426. doi: 10.1007/s10559-016-9842-1.
7. **Khlud O.M., Yaskov G.N.** Packing homothetic spheroids into a larger spheroid with the jump algorithm // *Control, Navigation and Communication Systems*. 2017. Vol. 6, no. 46. P. 131–135.
8. **Kubach T., Bortfeldt A., Tilli T., Gehring H.** Greedy algorithms for packing unequal spheres into a cuboidal strip or a cuboid // *Asia Pacific J. Operat. Research*. 2011. Vol. 28. P. 739–753. doi: 10.1142/S0217595911003326.
9. **Huang W.Q., Li Y., Akeb H., Li C.M.** Greedy algorithms for packing unequal circles into a rectangular container // *J. Operat. Research Soc.* 2005. Vol. 56, no. 5. P. 539–548. doi: 10.1057/palgrave.jors.2601836.
10. **Hifi M., Yousef L.** Width beam and hill-climbing strategies for the three-dimensional sphere packing problem // *Annals of Computer Science and Information Systems*, vol. 2: Proc. Federated Conf. on Computer Science and Information Systems. Warsaw, 2014. P. 421–428. (Ser. Polish Information Processing Society). doi: 10.15439/2014F284.
11. **Zeng Z.Z., Huang W.Q., Xu R.C., Fu Z.H.** An algorithm to packing unequal spheres in a larger sphere // *Advanced Materials Research*. 2012. Vol. 546–547. P. 1464–1469. doi: 10.4028/www.scientific.net/AMR.546-547.1464.
12. **Yamada S., Kanno J., Miyauchi M.** Multi-sized sphere packing in containers: Optimization formula for obtaining the highest density with two different sized spheres // *IPJSJ Online Transactions*. 2011. Vol. 4. P. 126–133. doi: 10.2197/ipsjtrans.4.126.
13. **Казаков А.Л., Лебедев П.Д.** Алгоритмы построения оптимальных упаковок для компактных множеств на плоскости // *Вычисл. методы и программирование*. Т. 16, вып. 3. 2015. С. 307–317.
14. **Ушаков В.Н., Лебедев П.Д., Лавров Н.Г.** Алгоритмы построения оптимальных упаковок в эллипсы // *Вест. ЮУрГУ. Сер. Мат. моделирование и программирование*. 2017. Т. 10, no. 3. С. 67–79. doi: 10.14529/mmp170306.
15. **Kazakov A.L., Lempert A.A., Ta T.T.** The sphere packing problem into bounded containers in three-dimension non-euclidean space // *IFAC PAPERSONLINE*. 2018. Vol. 51, no. 32. P. 782–787. doi: 10.1016/j.ifacol.2018.11.450.
16. **Лебедев П.Д., Лавров Н.Г.** Алгоритмы построения оптимальных упаковок в эллипсоиды // *Изв. Ин-та математики и информатики УдГУ*. 2018. Т. 52. С. 59–74. doi: 10.20537/2226-3594-2018-52-05
17. **Тот Л.Ф.** Расположения на плоскости, на сфере и в пространстве. Москва: Физматлит, 1958. 365 с.
18. **Субботин А.И.** Обобщенные решения уравнений в частных производных первого порядка. Перспективы динамической оптимизации. Москва; Ижевск: Ин-т компьютерных технологий, 2003. 336 с.
19. **Демьянов В.Ф., Васильев Л.В.** Недифференцируемая оптимизация. Москва: Наука, 1981. 384 с.
20. **Половинкин Е.С., Балашов М.В.** Элементы выпуклого и сильно выпуклого анализа. Москва: Физматлит, 2004. 416 с. ISBN: 5-9221-0499-3.
21. **Tatarevic M.** On limits of dense packing of equal spheres in a cube: [e-resource]. arXiv:1503.07933 [cs.CG]. 2015. 9 p.
22. **Stoyan Y.G., Yaskov, G.** Packing congruent hyperspheres into a hypersphere // *J. Global Optim.* 2012. Vol. 52, no. 4. P. 855–868. doi: 10.1007/s10898-011-9716-z.

23. **Stoyan Yu.G., Yaskov, G.** Packing identical spheres into a cylinder // Intern. Trans. Oper. Research. 2010. Vol. 17, no. 1. P. 51–70. doi: 10.1111/j.1475-3995.2009.00733.x.
24. **Бухаров Д.С., Казаков А.Л.** Программная система “Виголт” для решения задач оптимизации, возникающих в транспортной логистике // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. 2012. Т. 13, № 2. С. 65–74.

Поступила 26.03.2020

После доработки 7.05.2020

Принята к публикации 18.05.2020

Лебедев Павел Дмитриевич

канд. физ.-мат. наук, старший науч. сотрудник

Институт математики и механики им. Н. Н. Красовского УрО РАН;

Уральский федеральный университет

г. Екатеринбург

e-mail: pleb@yandex.ru

Казаков Александр Леонидович

д-р физ.-мат. наук, главный науч. сотрудник

Институт динамики систем и теории управления имени В. М. Матросова СО РАН

г. Иркутск

e-mail: kazakov@icc.ru

Лемперт Анна Ананьевна

канд. физ.-мат. наук, ведущий науч. сотрудник

Институт динамики систем и теории управления имени В. М. Матросова СО РАН

г. Иркутск

e-mail: lempert@icc.ru

REFERENCES

- Castillo I., Kampas F.J., Pinter J.D. Solving circle packing problems by global optimization: Numerical results and industrial applications. *European J. Operat. Research*, 2008, vol. 191, no. 3, pp. 786–802. doi: 10.1016/j.ejor.2007.01.054.
- Harary F., Randolph W., Mezey P.G. A study of maximum unit-circle caterpillars – tools for the study of the shape of adsorption patterns. *Discrete Appl. Math.*, 1996, vol. 67, no. 1–3, pp. 127–135. doi: 10.1016/0166-218X(95)00014-I.
- Wang J. Packing of Unequal Spheres and Automated Radiosurgical Treatment Planning. *J. Combin. Optim.*, 1999, vol. 3, no. 4, pp. 453–463. doi: 10.1023/A:1009831621621.
- Hales T. Cannonballs and Honeycombs. *Notices of the American Mathematical Society*, 2000, vol. 47, pp. 440–449.
- Chernov N., Stoyan Yu., Romanova T. Mathematical model and efficient algorithms for object packing problem. *Computational Geometry*, 2010, vol. 43, no. 5, pp. 535–553. doi: 10.1016/j.comgeo.2009.12.003.
- Stoyan Yu.G., Scheithauer G., Yaskov G.N. Packing Unequal Spheres into Various Containers. *Cybernetics Syst. Anal.*, 2016, vol. 52, no. 3, pp. 419–426. doi: 10.1007/s10559-016-9842-1.
- Khlud O.M., Yaskov G.N. Packing homothetic spheroids into a larger spheroid with the jump algorithm. *Control, Navigation and Communication Systems*, 2017, vol. 6, no. 46, pp. 131–135.
- Kubach T., Bortfeldt A., Tilli T., Gehring H. Greedy algorithms for packing unequal spheres into a cuboidal strip or a cuboid. *Asia Pacific Journal of Operational Research*, 2011, vol. 28, no. 6, pp. 739–753. doi: 10.1142/S0217595911003326.
- Huang W.Q., Li Y., Akeb H., Li C.M. Greedy algorithms for packing unequal circles. *J. Operat. Research Soc.*, 2005, vol. 56, no. 5, pp. 539–548. doi: 10.1057/palgrave.jors.2601836.
- Hifi M., Yousef L. Width beam and hill-climbing strategies for the three-dimensional sphere packing problem. In: *Annals of Computer Science and Information Systems*, vol. 2, Proc. Federated Conference on Computer Science and Information Systems, Warsaw, 2014, pp. 421–428. doi: 10.15439/2014F284.
- Zeng Z.Z., Huang W.Q., Xu R.C., Fu Z.H. An algorithm to packing unequal spheres in a larger sphere. *Advanced Materials Research*, 2012, vol. 546–547, pp. 1464–1469. doi: 10.4028/www.scientific.net/AMR.546-547.1464.

12. Yamada S., Kanno J., Miyauchi M. Multi-sized sphere packing in containers: Optimization formula for obtaining the highest density with two different sized spheres. *IPSSJ Online Transactions*, 2011, vol. 4, pp. 126–133. doi: 10.2197/ipsjtrans.4.126.
13. Kazakov A.L., Lebedev P.D. Algorithms of optimal packing construction for planar compact sets. *Vychisl. Metody Programm.*, 2015, vol. 16, no. 2, pp. 307–317 (in Russian).
14. Ushakov V.N., Lebedev P.D., Lavrov N.G. Algorithms of Optimal Packing Construction in Ellipse. *Vestnik YuUrGU. Ser. Mat. Model. Progr.*, 2017, vol. 10, no. 3, pp. 67–79 (in Russian). doi: 10.14529/mmp170306.
15. Kazakov A.L. Lempert A.A. Ta T.T. The sphere packing problem into bounded containers in three-dimension non-euclidean space. *IFAC PAPERSONLINE*, 2018, vol. 51, no. 32, pp. 782–787. doi: 10.1016/j.ifacol.2018.11.450.
16. Lebedev P.D., Lavrov N.G. Algorithms of optimal ball packing into ellipsoids. *Izv. IMI UdGU*, 2018, vol. 52, pp. 59–74 (in Russian). doi: 10.20537/2226-3594-2018-52-05.
17. Toth L.F. *Regular figures*. N Y: A Pergamon Press Book The Macmillan Co., 1964, 339 p. ISBN: 9780080100586. Translated to Russian under the title *Raspolozheniya na ploskosti, na sfere i v prostranstve*. Moscow: Fizmatlit Publ., 1958, 365 p.
18. Subbotin A.I. *Generalized solutions of first-order PDEs. The dynamical optimization perspective*. Basel: Birkhäuser, 1995, 314 p. doi: 10.1007/978-1-4612-0847-1. Translated to Russian under the title *Obobshchennye resheniya uravnenii v chastnykh proizvodnykh pervogo poriyadka: Perspektivy dinamicheskoi optimizatsii*. Moscow; Izhevsk: Inst. Komp'yuter. Issled., 2003, 336 p.
19. Dem'yanov V.F., Vasil'ev L.V. *Nondifferentiable optimization*. N Y: Springer-Verlag, 1985, 452 p. ISBN: 978-0-387-90951-6. Original Russian text published in Dem'yanov V.F. Vasil'ev L.V. *Nedifferentsiruemaya optimizatsiya*. Moscow: Nauka Publ., 1981, 384 p.
20. Polovinkin E.S., Balashov M.V. *Elementy vypuklogo i sil'no vypuklogo analiza* [Elements of convex and strongly convex analysis]. Moscow: Fizmatlit Publ., 2004, 416 p. ISBN: 5-9221-0499-3.
21. Tatarevic M. On limits of dense packing of equal spheres in a cube. *arXiv:1503.07933 [cs.CG]*, 2015, 9 p.
22. Stoyan Y.G., Yaskov, G. Packing congruent hyperspheres into a hypersphere. *J. Global Optim.*, 2012, vol. 52, no. 4, pp. 855–868. doi: 10.1007/s10898-011-9716-z.
23. Stoyan Yu.G., Yaskov G. Packing identical spheres into a cylinder. *Intern. Trans. Oper. Research*, 2010, vol. 17, no. 1, pp. 51–70. doi: 10.1111/j.1475-3995.2009.00733.x.
24. Bukharov D.S., Kazakov A.L. VIGOLT system for solving transport logistics optimization problems. *Vychisl. Metody Programm.*, 2012, vol. 13, no. 3, pp. 65–74 (in Russian).

Received March 6, 2020

Revised May 7, 2020

Accepted May 18, 2020

Funding Agency: P.D. Lebedev's research is supported by the Russian Science Foundation (project no. 19-11-00105), A.L. Kazakov's research is supported by the Russian Foundation for Basic Research (project no. 18-07-00604), and A.A. Lempert's research is supported by the Russian Foundation for Basic Research (project no. 20-010-00724).

Pavel Dmitrievich Lebedev. Cand. Phys.-Math. Sci., Krasovskii Institute of Mathematics and Mechanics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, 620108 Russia, Ural Federal University, 620083 Russia, e-mail: pleb@yandex.ru.

Alexander Leonidovich Kazakov. Dr. Phys.-Math. Sci., Matrosov Institute for System Dynamics and Control Theory, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Irkutsk, 664033 Russia, e-mail: kazakov@icc.ru.

Anna Ananievna Lempert. Cand. Phys.-Math. Sci., Matrosov Institute for System Dynamics and Control Theory, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Irkutsk, 664033 Russia, e-mail: lempert@icc.ru.

Cite this article as: P. D. Lebedev, A. L. Kazakov, A. A. Lempert. Numerical methods for the construction of packings of different balls into convex compact sets. *Trudy Instituta Matematiki i Mekhaniki URO RAN*, 2020, vol. 26, no. 2, p p. 173–187.