УДК 519.85

П. И. Стецюк, Т. Е. Романова, Г. Шайтхауэр

О глобальном минимуме целевой функции в задаче равновесной упаковки кругов

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

Рассматривается задача равновесной упаковки семейства кругов в круге минимального радиуса в виде многоэкстремальной задачи нелинейного программирования. С помощью негладких штрафов задача сводится к задаче безусловной минимизации негладкой функции. Предлагается алгоритм поиска локальных экстремумов негладкой функции и алгоритм уточнения оценки снизу для значения глобального минимума целевой функции, которые базируются на использовании методов оптимизации негладких функций с применением модификации r-алгоритма Шора. Приводятся результаты тестовых экспериментов.

Задача равновесной упаковки неодинаковых кругов в круг наименьшего радиуса возникает в задачах плотной упаковки параллельных одинаковых по высоте круговых цилиндров в цилиндрический контейнер при ограничениях на динамическое равновесие системы [1, 2]. Динамическое равновесие определяется требованием, чтобы центр тяжести системы круговых цилиндров находился в центре кругового контейнера.

Математическая модель задачи равновесной упаковки неравных кругов может быть сформулирована в виде различных многоэкстремальных задач математического программирования [3]. Одна из этих формулировок является предметом исследования данной работы. Для нее мы опишем алгоритм нахождения локальных экстремумов и алгоритм уточнения оценки снизу для значения глобального минимума целевой функции, которые базируются на использовании методов оптимизации негладких функций.

Математическая модель. Имеется семейство кругов S_i с радиусами r_i и весами w_i, $i = 1, \ldots, m$. Полагаем, что центр тяжести круга S_i находится в его центре. Равновесной упаковкой семейства кругов S_i, $i = 1, \ldots, m$, в круг S назовем такую их упаковку, чтобы радиус круга S был минимальным и центр тяжести семейства кругов S_i, $i = 1, \ldots, m$, совпадал с центром круга S.

Не ограничивая общности будем считать, что центр круга S находится в начале неподвижной системы координат. Пусть (x_i, y_i) — неизвестный центр круга S_i; r — неизвестный радиус круга S. Обозначим известные величины $\lambda_i = w_i / \sum\limits_{i=1}^{m} w_i$, $i = 1, \ldots, m$, и очевидную нижнюю границу на искомый радиус $r_{\text{low}} = \max\limits_{i=1,\ldots,m} r_i$. Тогда равновесной упаковке семейства кругов S_i, $i = 1, \ldots, m$, соответствует многоэкстремальная задача нелинейного программирования

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

при ограничениях

$$x_i^2 + y_i^2 \leqslant (r - r_i)^2, \qquad i = 1, \ldots, m, \tag{2}$$

$$(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 \geqslant (r_i + r_j)^2, \qquad 1 \leqslant i < j \leqslant m, \tag{3}$$

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

$$r \geqslant r_{\text{low}}, \tag{5}$$

где $x = (x_1, \ldots, x_m)$, $y = (y_1, \ldots, y_m)$. Здесь целевая функция (1) является линейной. Ограничения (2) гарантируют, что $S_i \subset S$, а ограничения (3) описывают условие $\operatorname{int} S_i \bigcap \operatorname{int} S_j = \varnothing$, $1 \leqslant i < j \leqslant m$, где $\operatorname{int}(\cdot)$ означает внутренность множества $(\cdot)$. Ограничения (4) означают, что центр тяжести семейства кругов S_i, $i = 1, \ldots, m$, находится в центре круга S. Ограничение (5) обеспечивает то, что значение радиуса круга S не уходит к минус бесконечности, чему формально не препятствует правая часть ограничения (2).

В работе [3] приведены еще две формулировки этой задачи. Первая является задачей обратно-выпуклого программирования, а вторая — задачей минимизации функции максимума из выпуклых функций при ограничениях (3) и (4). Во второй формулировке переменная r не используется и ее оптимальное значение r^* определяется из минимального значения негладкой целевой функции. Обе формулировки свободны от ограничения (5), так как неотрицательность r учитывается за счет формулировки ограничения (2) в виде $\sqrt{x_i^2 + y_i^2} \leqslant r - r_i$, $i = 1, \ldots, m$.

Алгоритм поиска наилучшего решения. С помощью негладких штрафов задача (1)–(5) сводится к задаче безусловной минимизации негладкой функции

$$\min_{r,x,y} \{ f(r, x, y) = r + \Phi_P(r, x, y) \}, \tag{6}$$

где штрафная функция $\Phi_P(r, x, y)$ имеет вид

$$\Phi_P(r, x, y) = P_1 F_1(r, x, y) + P_2 F_2(x, y) + P_3 \max\{0, -r + r_{\text{low}}\} \tag{7}$$

Здесь P_k — положительные штрафные коэффициенты, $k = 1, 2, 3$, а функции $F_1(r, x, y)$ и $F_2(x, y)$ определяются так:

$$F_1(r, x, y) = \sum_{i=1}^{m} \max\{0, x_i^2 + y_i^2 - (r - r_i)^2\} +$$
$$+ \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=i+1}^{m} \max\{0, -(x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 + (r_i + r_j)^2\}, \tag{8}$$

$$F_2(x, y) = \max\left\{0, -\sum_{i=1}^{m} \lambda_i x_i - \Delta x, \sum_{i=1}^{m} \lambda_i x_i - \Delta x\right\} +$$
$$+ \max\left\{0, -\sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i - \Delta y, \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i - \Delta y\right\}, \tag{9}$$

где Δx и Δy — заданные допуски на отклонения координат центра тяжести семейства кругов от начала координат. Использование в (7) штрафных коэффициентов P_k, $k = 1, 2, 3$, позволяет учесть точность выполнения ограничений (2)–(5). Коэффициент P_1, согласно (8), отвечает за ограничения (2), (3), коэффициент P_2, согласно (9), — за ограничения (4), а коэффициент P_3 — за ограничение (5).

Алгоритм поиска наилучшего решения задачи (1)–(5) состоит в следующем. Для заданного набора стартовых точек осуществляется поиск локальных минимумов в задаче (6) с помощью модификации r-алгоритма [4]. Наилучший из локальных минимумов функции $f(r, x, y)$, для которого штрафная функция $\Phi_P(r, x, y)$ близка к нулю, принимается за решение задачи (1)–(5). Ему соответствует значение целевой функции r_{up} — наилучшее значение радиуса r круга S. Стартовые точки генерируются случайным образом в круге заданного радиуса, который последовательно уточняется по мере нахождения лучшего локального минимума. Отметим, что данный алгоритм можно использовать и в случае, когда не требуется учитывать ограничения на центр тяжести. Для этого достаточно положить равным нулю штрафной коэффициент P_2.

Программная реализация алгоритма выполнена на некоммерческом языке GNU Octave [5]. Программа либо находит один из локальных минимумов в задаче (1)–(5), либо сообщает о невозможности найти допустимую точку для системы ограничений (2)–(5). Ядром программы является octave-функция ralgb5, которая реализует r-алгоритм с постоянной величиной коэффициента растяжения пространства и адаптивной регулировкой шага в направлении нормированного антисубградиента. Эта регулировка направлена на увеличение точности поиска минимума функции по направлению в процессе счета и при этом гарантирует, что среднее (по итерациям) число шагов не превышает двух–трех.

Двойственная оценка ψ^*. Эта оценка аппроксимирует снизу минимальное значение целевой функции в квадратичных невыпуклых задачах и ее значение со сколь угодно большой точностью может быть найдено с помощью методов минимизации негладких выпуклых функций [6]. Модель (1)–(5) можно преобразовать к виду квадратичной экстремальной задачи

$$f^* = (r^*)^2 = \min_{r,x,y} r^2, \tag{10}$$

при ограничениях

$$x_i^2 + y_i^2 - r^2 + 2r_i r - r_i^2 \leqslant 0, \qquad i = 1, \ldots, m, \tag{11}$$

$$-x_i^2 + 2x_i x_j - x_j^2 - y_i^2 + 2y_i y_j - y_j^2 + (r_i + r_j)^2 \leqslant 0, \qquad 1 \leqslant i < j \leqslant m, \tag{12}$$

$$\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \lambda_i \lambda_j x_i x_j = 0, \qquad \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \lambda_i \lambda_j y_i y_j = 0, \tag{13}$$

$$r^2 - (r_{low} + r_{up})r + r_{low} r_{up} \leqslant 0. \tag{14}$$

Здесь ограничения (11) и (12) соответствуют другой записи ограничений (2) и (3), два ограничения в (13) являются возведенными в квадрат линейными равенствами из (4). Квадратичное неравенство (14) следует из соотношения $r_{\text{low}} \leqslant r \leqslant r_{\text{up}}$.

Наличие квадратичного неравенства (14) обеспечивает нетривиальную, т. е. не равную $-\infty$ двойственную оценку ψ^*, которая будет оценкой снизу для f^* в задаче (10)–(14). Более того, оно гарантирует, что оценка ψ^* будет всегда не меньше, чем квадрат r_{low}. Поэтому, если алгоритм поиска наилучшего решения позволяет уточнять величину r_{up}, то двойственная оценка ψ^* позволяет уточнять величину r_{low}. На самом деле, из свойства оценки $\psi^* \leqslant f^* \leqslant (r^*)^2$ следует $r^* \geqslant \sqrt{\psi^*} \geqslant r_{\text{low}}$, откуда понятно, что если величина $\sqrt{\psi^*}$ больше, чем r_{low}, то она может быть использована для уточнения нижней оценки r_{low}. Это означает, что для рассматриваемого класса задач вида (1)–(5) оценка ψ^* может использоваться для доказательства того, что найден глобальный минимум.

Рассмотрим тестовый пример: $m = 5$, $r_1 = 0{,}1$, $r_2 = 0{,}2$, $r_3 = 0{,}3$, $r_4 = 0{,}5$, $r_5 = 0{,}8$, $w_1 = 0{,}0785$, $w_2 = 0{,}314$, $w_3 = 0{,}7065$, $w_4 = 1{,}9625$, $w_5 = 5{,}024$. При $P_1 = P_2 = P_3 = 10$ и $\Delta x = \Delta y = 0{,}0001$ алгоритм уже для 4-й стартовой точки находит точку локального минимума $(r_{\text{up}}, x_{\text{up}}, y_{\text{up}})$, где $r_{\text{up}} = 1{,}316108$, $x_{up} = (-0{,}474894, -1{,}115151, 0{,}025054, -0{,}615244, 0{,}314084)$; $y_{\text{up}} = (1{,}119551, 0{,}046204, 1{,}015799, 0{,}536197, -0{,}372840)$.

Значение функции цели не улучшилось для 100 сгенерированных стартовых точек. При генерации стартовых точек использовался датчик случайных чисел с равномерным распределением внутри единичного куба. В точке $(r_{\text{up}}, x_{\text{up}}, y_{\text{up}})$ ограничения (12) выполняются с некоторым запасом до 10^{-7}, а ограничения (11) нарушаются не более чем на величину 10^{-7}. С учетом квадратичности этих ограничений это означает, что условие касания кругов выполнено с точностью до $\sqrt{10^{-7}} = 0{,}0003$, т. е. немного хуже, чем $\Delta x = \Delta y = 0{,}0001$.

Естественен вопрос: может ли найденный наилучший локальный минимум претендовать на то, чтобы быть глобальным минимумом? Оказывается, что может и доказать это можно с помощью двойственной оценки ψ^*. Так, например, пусть $r_{\text{low}} = 0{,}8$ (максимальный из пяти радиусов) и $r_{\text{up}} = 1{,}35$ (немного больше, чем 1,316108, поскольку ограничения точно не выполняются). Тогда полученная оценка $\psi^* = 1{,}7309$. Отсюда получаем, что $r^* \geqslant \sqrt{\psi^*} \geqslant 1{,}3156$ и есть больше, чем $1{,}3 = r_4 + r_5$ — граница снизу. Следовательно, улучшить значение целевой функции $f^* = 1{,}316108$ меньше, чем на величину 0,0005, нельзя. А это и есть доказательство того, что найденный локальный минимум является глобальным с наперед заданной точностью.

В заключение отметим, что двойственную оценку ψ^* можно уточнять за счет добавления в задаче (10)–(14) функционально избыточных квадратичных ограничений [6], которые являются нетривиальными следствиями условий задачи. Так, например, подобно ограничению (14) можно построить и ограничения для некоторых переменных из x_i, y_i, $i = 1, \ldots, m$, используя диапазоны их изменения.

Работа поддержана совместным грантом НТЦУ и НАН Украины (проект № 5710).

1. *Коваленко А. А., Панкратов А. В., Романова Т. Е., Стецюк П. И.* Упаковка круговых цилиндров в цилиндрический контейнер с учетом специальных ограничений поведения системы // Журн. обчисл. та прикл. математики. – 2013. – № 1(111). – С. 126–134.
2. *Stoyan Yu., Romanova T.* Mathematical models of placement optimisation: two- and three-dimensional problems and applications // Modeling and Optimization in Space Engineering / G. Fasano, J. D. Pinter, eds. – New York: Springer, 2012. – P. 363–388.
3. *Ненахов Э. И., Романова Т. Е., Стецюк П. И.* Равновесная упаковка кругов в круг минимального радиуса // Теорія оптимальних рішень. – Київ: Ін-т кібернетики ім. В. М. Глушкова НАН України, 2013. – С. 143–153.
4. *Шор Н. З.*, *Стецюк П. И.* Использование модификации r-алгоритма для нахождения глобального минимума полиномиальных функций // Кибернетика и систем. анализ. – 1997. – **4**. – С. 28–49.
5. *Octave* [Электронный ресурс]: http://www.octave.org.
6. *Shor N. Z.* Nondifferentiable optimization and polynomial problems. – Dordrecht: Kluwer, 1998. – 394 p.

Институт кибернетики им. В. М. Глушкова НАН Украины, Киев
Институт проблем машиностроения им. А. Н. Подгорного НАН Украины, Харьков
Институт вычислительной математики Дрезденского технического университета, Германия

Поступило в редакцию 26.12.2013

П. І. Стецюк, Т. Є. Романова, Г. Шайтхауер

Про глобальний мінімум цільової функції в задачі рівноважної упаковки кругів

Розглядається задача рівноважної упаковки сімейства кругів у круг мінімального радіуса у вигляді багатоекстремальної задачі нелінійного програмування. За допомогою негладких штрафів задача зводиться до задачі безумовної мінімізації негладкої функції. Пропонується алгоритм пошуку локальних екстремумів негладкої функції і алгоритм уточнення оцінки знизу для значення глобального мінімуму цільової функції, які базуються на застосуванні методів оптимізації негладких функцій із використанням модифікації r-алгоритму Шора. Наводяться результати тестових експериментів.

P. I. Stetsyuk, T. E. Romanova, G. Schiethauer

On the global minimum ot the objective function in a balanced circular packing problem

The paper considers the balanced packing problem of a given family of circles into a larger circle of the minimal radius as a multiextremal nonlinear programming problem. We reduce the problem to an unconstrained minimization problem of a non-smooth function by means of nonsmooth penalty functions. We propose an efficient algorithm to search for local extrema, as well as an algorithm of improvement of a lower estimate of the global minimum of the objective function. The algorithms use non-differentiable optimization methods based on Shor's r-algorithm. Computational test results are given.