УДК 519.8

О.А. БЕРЕЗОВСКИЙ

О ЗАДАЧЕ УПАКОВКИ ШАРОВ В КУБ

Аннотация. Рассмотрена задача упаковки одинаковых шаров в единичный куб в n-мерном пространстве. Исследована двойственная лагранжева оценка (верхняя оценка радиуса шаров) для классической квадратичной постановки задачи и ряда постановок, полученных путем ее расширения семействами функционально избыточных ограничений. В базовой постановке получено аналитическое выражение для двойственной оценки.

Ключевые слова: плотность упаковки, экстремальная квадратичная задача, двойственная лагранжева оценка, функционально избыточные ограничения, отрицательно определенная матрица.

ВВЕДЕНИЕ

Задача об упаковке шаров (sphere packing problem) относится к NP-трудным задачам в теории сложности вычислений. В общем виде ее суть состоит в размещении непересекающихся шаров в некоторой области евклидова пространства с максимальной плотностью, т.е. такого размещения, при котором шарами покрыта наибольшая часть этой области (возможно наличие дополнительных условий, например специальные требования на расположение центра масс полученного набора шаров). Существует множество разновидностей этой задачи [1–3], которые могут применяться в различных областях, например при оптимальном заполнении контейнеров, для упаковки кабелей (цилиндров) в цилиндрической трубе, при проектировании и компоновке разнообразных технологических объектов и систем, создании резервных копий на съемных носителях, при оптимизации хранения, защиты и транспортировки товаров и т.д. Применение этой задачи важно при исследовании кристаллических структур, в случае использования их модельного описания в виде системы шаров (атомов) в плотной упаковке (согласно принципу плотной упаковки молекул, сформулированному А.И. Китайгородским, молекулы, моделируемые внешним контуром пересекающихся вандерваальсовых сфер атомов, в кристаллах «касаются», т.е. взаимно не проникают и «не висят» в пустоте). Рассматривая прикладное значение задачи об упаковке шаров, необходимо упомянуть также о задаче разработки надежной системы сигналов, которая сводится к геометрической задаче размещения точек внутри некоторой области пространства при дополнительном условии, что они не должны находиться слишком близко один к другому (если требуется, чтобы расстояние между этими точками было, скажем, не меньше $\sqrt{2}$, то задача эквивалентна построению более плотноей упаковки шаров, радиус которых равен половине этого расстояния, т.е. $1/\sqrt{2}$).

Многие задачи упаковки, в том числе и дискретные, представимы в виде квадратичной задачи (экстремальной задачи, целевая функция и все функции ограничений которой квадратичные (quadratically constrained quadratic programming)), вследствие чего целесообразно исследовать возможность применения лагранжевых двойственных оценок [4, 5] при их решении. В настоящей работе рассмотрены некоторые пути реализации этого подхода на примере задачи упаковки одинаковых шаров в единичный куб с максимальной плотностью: в n-мерном евклидовом пространстве необходимо максимизировать радиус r одинаковых непересекающихся m шаров $S(y_i, r) = \{y : \| y - y_i \| \le r\}$, $i = \overline{1, m}$ ($y_i = (y_{i1}, y_{i2}, \ldots, y_{in})^{\mathrm{T}}$, $i = \overline{1, m}$, — неизвестные центры шаров) при условии, что они принадлежат единичному кубу, т.е. $S(y_i, r) \subset [0,1]^n = \{y : 0 \le y \le 1,\ y \in \Re^n\}$, $i = \overline{1, m}$.

КВАДРАТИЧНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Сформулируем задачу упаковки шаров в куб в виде задачи математического программирования

$$\max r, \tag{1}$$

$$\sum_{k=1}^{n} (y_{ik} - y_{jk})^2 \geq 4r^2,\ 1 \leq i < j \leq m, \tag{2}$$

$$r \leq y_{ik} \leq 1 - r,\ i = \overline{1, m},\ k = \overline{1, n}, \tag{3}$$

Здесь ограничение (2) соответствует условию, согласно которому все пары шаров $S(y_i, r)$ и $S(y_j, r)$, $i, j = \overline{1, m}$, $i \neq j$, не пересекаются, а ограничение (3) — условию принадлежности шаров единичному кубу $S(y_i, r) \subset [0,1]^n$, $i = \overline{1, m}$. Рассматриваемая геометрическая задача относится к тем, которые находятся под постоянным вниманием исследователей [3, 6–10], и обычно сводится к эквивалентной задаче о размещении m точек в единичном кубе таким образом, чтобы минимальное расстояние между ними (равное $\sqrt{d}$) было максимальным (point packing problem):

$$d^* = \max d, \tag{4}$$

$$\sum_{k=1}^{n} (x_{ik} - x_{jk})^2 \geq d,\ 1 \leq i < j \leq m, \tag{5}$$

$$0 \leq x_{ik} \leq 1,\ i = \overline{1, m},\ k = \overline{1, n}. \tag{6}$$

Связь между переменными исходной задачи (1)–(3) и задачи (4)–(6) задается следующими соотношениями:

$$y_{ik} = (1 - 2r) x_{ik} + r,\ i = \overline{1, m},\ k = \overline{1, n},$$

$$r = \frac{\sqrt{d}}{2(1 + \sqrt{d})}. \tag{7}$$

Таким образом, исходная геометрическая задача упаковки шаров в куб сформирована в виде многоэкстремальной квадратичной задачи (4)–(6), нахождение глобального максимума которой представляет определенные трудности, и следовательно, становится актуальной оценка глобального оптимума. Из известных подходов к получению оценок оптимального значения целевой функции в таких задачах можно назвать, например сведение квадратичных форм заданной постановки к линейному виду путем введения новых переменных $X = xx^{\mathrm{T}}$ (здесь $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^{\mathrm{T}} \in \Re^n$ — вектор переменных исходной квадратичной постановки) с последующей релаксацией задачи путем замены равенства взаимосвязи старых и новых переменных различными семействами выпуклых ограничений. Это может быть как SDP-релаксация (задача полуопределенного программирования, полученная с помощью ограничения $\begin{pmatrix} 1 & x \\ x^{\mathrm{T}} & X \end{pmatrix} \succ 0$ и игнорирующая требование, чтобы ранг этой матрицы был равен единице) [11], так и линейные релаксации, использующие наличие ограничений специального вида. Например, при наличии ограничений вида $0 \leq x_i \leq 1$, $i = \overline{1, n}$, можно использовать RLT-релаксации ($\forall i, j\ \ X_{ij} \geq 0$, $X_{ij} \geq x_i + x_j - 1$, $X_{ij} \leq x_i$, $X_{ij} \leq x_j$) [12] или различные ограничения для булева квадратичного политопа, например неравенства «треугольников» ($\forall i \neq j \neq k\ \ \ x_i + x_j + x_k \leq X_{ij} + X_{ik} + X_{jk} + 1$, $X_{ij} + X_{ik} \leq x_i + X_{jk}$, $X_{ij} + X_{jk} \leq x_j + X_{ik}$, $X_{ik} + X_{jk} \leq x_k + X_{ij}$) [13]. (Отметим, что наличие ограничений (6) имеет достаточно общий характер, поскольку их можно получить в любой задаче, где возможна локализация глобального экстремума $x \in [lower, upper]^n$, заменой переменных $x = (upper - lower) \otimes \tilde{x} + lower$), $\tilde{x} \in [0,1]^n$, где $\otimes$ — знак операции покомпонентного произведения векторов.)

Техника полуопределенного программирования позволяет включать в исходную задачу дополнительные линейные ограничения (что делает линейные релаксации ее более слабым аналогом). Это приводит к различным SDP-релаксациям и, следовательно, к различным оценкам оптимального значения целевой функции задачи. Близкой к SDP-релаксациям является техника двойственных квадратичных оценок. Развиваясь самостоятельно [4, 5, 14, 15], она фактически приводит к решению задачи, двойственной к SDP-релаксации. В [16] показано, что для одной и той же квадратичной постановки задачи двойственная лагранжева оценка не хуже SDP-оценки, а при выполнении условий регулярности обе оценки совпадают (это дает возможность экстраполировать теоретические результаты одного случая на другой).

ДВОЙСТВЕННАЯ ЛАГРАНЖЕВА ОЦЕНКА

Двойственная оценка ψ^* оптимального значения целевой функции f^* квадратичной задачи общего вида

$$f^* = \sup\{f_0(x) : f_i(x) \le 0,\ i \in I^{LE},\ f_j(x) = 0,$$
$$j \in I^{EQ};\ x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^{\mathrm{T}} \in \Re^n\}, \tag{8}$$

где $f_i(x) = x^{\mathrm{T}} A_i x + b_i^{\mathrm{T}} x + c_i$, $i \in \{0\} \cup I \cup J$, определяется следующим способом:

$$\psi^* = \inf_{u \in D \cap U^-} \psi(u) \ge f^*. \tag{9}$$

Здесь $\psi(u) = \sup\limits_{x \in R^n} L(x, u)$, $L(x, u) = x^{\mathrm{T}} A(u) x + b^{\mathrm{T}}(u) x + c(u)$ — функция Лагранжа для задачи (8), $U^- = \{u : u_i \le 0,\ i \in I^{LE}\}$, D — множество двойственных переменных $u \in \Re^m$ $(m = |I^{LE}| + |I^{EQ}|)$, при которых матрица $A(u)$ отрицательно определена. Нахождение двойственной оценки ψ^* относится к «хорошим» задачам математического программирования, поскольку внутренняя задача нахождения маргинальной функции $\psi(u)$ при $u \in D$ является задачей максимизации вогнутой квадратичной функции, решение которой однозначно определяется из системы уравнений $L'_x(u, x) = 2A(u)x + b(u) = 0$ с помощью выражения $x(u) = -A^{-1}(u) b(u) / 2$, а внешняя задача представляет собой задачу минимизации на выпуклом множестве $D \cap U^+$ выпуклой функции $\psi(u)$. Принимая во внимание неоднозначность постановки квадратичных оптимизационных задач, например при их расширении путем введения дополнительных ограничений, которые не влияют на допустимую область исходной квадратичной задачи (или, как их часто называют, функционально избыточных ограничений (superfluous или redundant constraints)), можно получать различные верхние оценки максимального значения целевой функции. Отметим, что данная ситуация присуща и SDP-релаксациям (в англоязычной литературе это привело к множеству названий SDP-релаксаций, которые отличаются семействами дополнительных ограничений в исходной задаче).

Для дальнейших исследований модифицируем постановки задачи (4)–(6) путем следующих операций:

а) замена переменной $d = z^2$ и линейных ограничений (6) на квадратичные $x_{ik}(x_{ik} - 1) \le 0$, $i = \overline{1, m}$, $k = \overline{1, n}$, для того, чтобы область отрицательной определенности матрицы функции Лагранжа была не пустой;

б) замена переменных $x_{ik} = (\tilde{x}_{ik} + 1)/2$, $i = \overline{1, m}$, $k = \overline{1, n}$, для приведения задачи к однородному виду, т.е. к квадратичной постановке, во всех функциях которой отсутствуют линейные члены (напомним, что значение двойственной оценки при невырожденном линейном преобразовании пространства не меняется [4]).

Тогда задача (4)–(6) примет вид

$$\max z^2, \tag{10}$$

$$4z^2 - \sum_{k=1}^{n} (\tilde{x}_{ik} - \tilde{x}_{jk})^2 \le 0, \; 1 \le i < j \le m, \tag{11}$$

$$\tilde{x}_{ik}^2 - 1 \le 0, \; i = \overline{1, m}, \; k = \overline{1, n}. \tag{12}$$

Обозначим u вектор двойственных переменных для ограничений (11), компонента u_{ij} которого соответствует ограничению вида (11) для i-го и j-го шаров, $j > i$ (размерность этого вектора $m(m-1)/2$), и v — вектор двойственных переменных соответственно для ограничений (12) (его размерность mn). Поскольку задача (10)–(12) имеет вид однородной квадратичной задачи, решение внутренней задачи нахождения маргинальной функции $\psi(u) = \sup_{x \in R^n} L(x, u)$ при $u \in D \cap U^-$ тривиально, а именно $x = 0$. Отсюда нахождение верхней двойственной оценки ψ^* (9) для задачи (10)–(12) сводится к решению задачи выпуклого программирования

$$\psi^* = \min_{u \in R^n} \left(-\sum_{i=1}^{m} \sum_{k=1}^{n} v_{ik} \right), \tag{13}$$

$$\lambda_{\max}(A(u, v)) \le 0, \tag{14}$$

$$u, v \le 0, \tag{15}$$

где матрица $A(u, v)$ функции Лагранжа — блочная диагональная матрица, первый блок которой состоит из одного элемента $1 + 4 \sum_{\substack{i,\, j=1 \\ j>i}}^{m} u_{ij}$ (соответствует переменной z), а остальные n блоков (для каждой k-й координаты) имеют одинаковую структуру

$$\begin{array}{cccc} \tilde{x}_{1k} & \tilde{x}_{2k} & & \tilde{x}_{mk} \end{array}$$

$$\begin{pmatrix} -\sum_{j>1}^{m} u_{1j} + v_{1k} & u_{12} & \dots & u_{1m} \\ u_{12} & -u_{12} - \sum_{j>2}^{m} u_{2j} + v_{2k} & \dots & u_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_{1m} & u_{2m} & \dots & -\sum_{j>1}^{m-1} u_{jm} + v_{mk} \end{pmatrix}. \tag{16}$$

Вследствие специального вида матрицы $A(u)$, обусловленного наличием ограничений (12) в исходной задаче (10)–(12), ограничение (14) можно учесть с помощью точной штрафной функции в виде функции максимума.

Справедливо следующее утверждение.

Утверждение 1. При $N > mn + \psi^*$ точки минимума задачи (13)–(15) и задачи

$$\psi^* = \min_{\substack{u, v \\ u \le 0}} \left(-\sum_{i=1}^{m} \sum_{k=1}^{n} v_{ik} + N \max(0; \lambda_{\max}(A(u, v)); v_{ik},\, i = \overline{1, m},\;\; k = \overline{1, n}) \right) \tag{17}$$

совпадают.

Доказательство этого утверждения аналогично доказательству результатов, полученных в [14, 17], и основано на теореме Пшеничного [18, с. 25].

Таким образом, нахождение двойственной лагранжевой оценки для многоэкстремальной задачи (10)–(12) сведено к решению задачи (17), которая относится к задачам выпуклой негладкой оптимизации.

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ ДВОЙСТВЕННОЙ ОЦЕНКИ ЗАДАЧИ (10)–(12)

Двойственная оценка ψ^* (17), полученная для постановки задачи (10)–(12), численно равна оценке, полученной для SDP-релаксации постановки задачи (4)–(6) [10], поскольку, во-первых, преобразование последней в задачу (10)–(12) (модификации а) и б)) не меняют второй оценки, и, во-вторых, для обеих оценочных задач выполняется условие регулярности Слейтера, что согласно теореме [16] является достаточным условием равенства этих оценок.

В [10] наряду с результатами численных экспериментов сформулировано предположение, что при $n=2$ оценка, полученная SDP-релаксацией постановки задачи (4)–(6), задается аналитически

$$\psi^* = 1 + \frac{1}{m-1}.$$

Докажем это предположение, для чего рассмотрим задачу (17). Пусть имеем точку (u^*, v^*), в которой координаты u_{ij}^*, $1 \le i < j \le m$, отрицательны. Тогда для доказательства того, что (u^*, v^*) является решением задачи (17), достаточно показать, что множество субградиентов минимизируемой функции (17) $\Psi(u, v) = -\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{n} v_{ik} + N \max(0; \lambda_{\max}(A(u, v)); v_{ik}, i=\overline{1, m}, k=\overline{1, n})$ в этой точке содержит нулевой вектор (в случае $u^* < 0$ ограничением можно пренебречь и задачу (17) рассматривать как безусловную задачу минимизации выпуклой недифференцируемой функции). Покажем, что это условие выполняется для точки (u^*, v^*), определенной следующим образом:

— все элементы вектора u^* одинаковы:

$$u_{ij}^* = -\frac{1}{4}\frac{1}{\frac{m(m-1)}{2}} = -\frac{1}{2m(m-1)}, \quad i, j = \overline{1, m}, \quad i < j$$

(для того, чтобы выполнялось равенство $1 + 4\sum_{\substack{i, j=1 \\ j>i}}^{m} u_{ij} = 0$);

— все элементы вектора v^* одинаковы:

$$v_{ik}^* = \sum_{j=1}^{j<i} u_{ji}^* + \sum_{j>i}^{m} u_{ij}^* - \frac{1}{2m(m-1)} = m u_{ij}^* = -\frac{1}{2(m-1)}, \quad i = \overline{1, m}, \quad k = \overline{1, n}.$$

Нетрудно видеть, что при этих значениях двойственных переменных $A(u^*, v^*)$ является отрицательно-полуопределенной матрицей ранга n, в которой ненулевые собственные числа равны $\lambda_k = -\frac{1}{2(m-1)}$, $k = \overline{1, n}$ (по одному для каждого блока (16)), а соответствующие им собственные векторы определяются как $\xi_k = (0_1 \eta_1 \eta_2 \ldots \eta_n)^{\mathrm{T}} \in R^{nm+1}$, где вектор-строки $\eta_l = 0_m \in R^m$ для всех $l \ne k$, $l = \overline{1, n}$, — нулевые, а при $l = k$ вектор-строки $\eta_k = \frac{1}{\sqrt{m}} e_m^{\mathrm{T}} \in R^m$ (0_m и e_m — соответственно нулевая и единичная m-мерная вектор-строка). Для наглядности приведем соответствующий данной точке (u^*, v^*) вид функции Лагранжа постановки задачи (10)–(12)

$$L(z, x, u^*, v^*) = -\frac{1}{2m(m-1)}\sum_{k=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{m} x_{ik}\right)^2 + \frac{mn}{2(m-1)}.$$

Покажем, что в выбранной точке (u^*, v^*) существует нулевой субградиент минимизируемой функции (17), т.е. $0 \in \partial\,\Psi(u^*, v^*) = conv\,\{\Psi'(u^*, v^*)\}$. Координаты субградиентов $\Psi'(u^*, v^*)$ определяются по формулам

$$\Psi'_{u_{ij}}(u^*, v^*) = N\alpha(\lambda_{\max}(A(u^*, v^*)))'_{u_{ij}},$$
$$\Psi'_{v_{ik}}(u^*, v^*) = -1 + N\alpha(\lambda_{\max}(A(u^*, v^*)))'_{v_{ik}},$$

где коэффициент α, $0 \le \alpha \le 1$, введен для учета того, что

$$(\max\{0,; \lambda_{\max}(A(u^*, v^*))\})' \in conv\,\{0, (\lambda_{\max}(A(u^*, v^*)))'\},$$

а субградиент функции максимального собственного числа матрицы $A(u, v)$ в точке (u^*, v^*) есть $(\lambda_{\max}(A(u^*, v^*)))' \in conv\,(p : p \in \partial\lambda_{\max}(A(u^*, v^*)))$, $p \in R^{nm+m(m-1)/2}$, где компоненты вектора p определяются из равенств

$$p_{u_{ij}} = 4s_z^2 + \sum_{k=1}^{n}(-s_{x_{ik}}^2 + 2s_{x_{ik}}s_{x_{jk}} - s_{x_{jk}}^2), \quad p_{v_{ik}} = s_{x_{ik}}^2. \tag{18}$$

Здесь $s \in \{\xi_l, l = \overline{n+1, mn+1}\} \in R^{nm+1}$ — любой вектор из набора собственных векторов матрицы $A(u^*, v^*)$, соответствующих ее нулевым собственным числам, а $s_{x_{ik}}$ — его координата, соответствующая переменной x_{ik}. Иными словами, с учетом того, что собственное число равно нулю, s представляет произвольный нормированный вектор, принадлежащий ортогональному дополнению к подпространству $conv(\xi_l, l = \overline{1, n})$.

Определим вектор $s^{(i,j)} \in R^{nm+1}$ следующим образом: $(nm+1-2n)$ его компонент равны нулю, и только компоненты, соответствующие $\tilde{x}_{ik}$ и $\tilde{x}_{jk}$, $k = \overline{1, n}$, равны $\frac{1}{\sqrt{2n}}$ и $-\frac{1}{\sqrt{2n}}$ соответственно. Рассмотрим набор векторов, состоящий из m векторов $S = \{s^{(i,j)}, 1 \le i < j \le m\}$ и вектора $s^0 = (1, 0_{nm})^{\mathrm{T}}$ (ненулевая координата соответствует переменной z). Для этого набора легко проверить, что:

— все векторы нормированы ($\|s^0\| = 1$, $\|s^{(i,j)}\| = 1\ \forall s^{(i,j)} \in S$) и принадлежат ортогональному дополнению к $conv(\xi_l, l = \overline{1, n})$ ($(s^{(i,j)}, \xi_l) = 0\ \forall s^{(i,j)} \in S$, $(s^0, \xi_l) = 0$, $l = \overline{1, n}$);

— вектор $p^{(i,j)}$, вычисленный для $s^{(i,j)} \in S$ по формулам (18), имеет все нулевые компоненты, кроме $p_{u_{ij}}^{(i,j)} = \sum_{k=1}^{n}\left(-\frac{2}{n}\right) = -2$, $p_{u_{li}}^{(i,j)} = \sum_{k=1}^{n}\left(-\frac{1}{2n}\right) = -\frac{1}{2}$, $1 \le l < i$, $p_{u_{il}}^{(i,j)} = -\frac{1}{2}$, $i < l \le m$, $l \ne j$, $p_{u_{lj}}^{(i,j)} = -\frac{1}{2}$, $1 \le l < j$, $l \ne i$, $p_{u_{jl}}^{(i,j)} = -\frac{1}{2}$, $j < l \le n$, $p_{v_{ik}}^{(i,j)} = p_{v_{jk}}^{(i,j)} = \frac{1}{2n}$, $k = \overline{1, n}$;

— компоненты вектора p^0, вычисленного для s^0 по формулам (18), равны $p_u^0 = 4e_{m(m-1)/2}$, $p_v^0 = 0_{mn}$.

Рассмотрим линейную комбинацию $p = \beta p^0 + \sum_{p^{(i,j)} \in S} p^{(i,j)}$. Поскольку $\sum_{p^{(i,j)} \in S} p_u^{(i,j)} = -\left(2 + \frac{m-2}{2}\right)e_{m(m-1)/2}$ и $\sum_{p^{(i,j)} \in S} p_v^{(i,j)} = \frac{m-1}{2n}e_{mn}$, то при

$\beta = \frac{1}{4}\left(2 + \frac{m-2}{2}\right)$ справедливо

$$\Psi'_{u_{ij}}(u^*, v^*) = N\alpha p_{u_{ij}} = N\alpha \left(\beta p^0_{u_{ij}} + \sum_{p^{(i,j)} \in S} p^{(i,j)}_{u_{ij}} \right) = 0 \;\; \forall \alpha ,$$

$$\Psi'_{v_{ik}}(u^*, v^*) = -1 + N\alpha p_{v_{ik}} = 0 \;\text{ при }\; \alpha = \left(\frac{m-1}{2n} N \right)^{-1} .$$

Итак, в точке $(u^*, v^*) = \left(-\frac{1}{2m(m-1)} e_{m(m-1)/2},\; -\frac{1}{2(m-1)} e_{mn} \right)$, внутренней точке допустимого множества задачи (17) ($u^* < 0$), справедливо включение $0 \in \partial\Psi(u^*, v^*) = \mathrm{conv}\{\Psi'(u^*, v^*)\}$, т.е. она является точкой минимума выпуклой задачи (17); значение минимизируемой функции $\Psi(u, v)$ в этой точке равно

$$\Psi(u^*, v^*) = -\sum_{i=1}^{m} \sum_{k=1}^{n} v^*_{ik} = \frac{mn}{2(m-1)} .$$

Таким образом, справедливо следующее утверждение.

Утверждение 2. Двойственная оценка задачи (10)–(12) равна $\psi^* = \frac{mn}{2(m-1)}$.

Следствие 1. Квадрат расстояния между точками в задаче о размещении m точек в единичном кубе в n-мерном пространстве не превышает $\frac{mn}{2(m-1)}$.

Отсюда, как частный случай, следует справедливость предположения [10], что при $n = 2$ имеем $\psi^* = 1 + \frac{1}{m-1}$.

Следствие 2. Радиус шаров в задаче упаковки m одинаковых шаров в n-мерный единичный куб не превышает

$$r \le \frac{\sqrt{mn}}{2(\sqrt{2(m-1)} + \sqrt{mn})} . \tag{19}$$

Это следствие получается прямой подстановкой оценки $\psi^* = \frac{mn}{2(m-1)} \ge d^*$ в соотношение (7) связи между переменными родственных задач (упаковки шаров в куб и задачи о размещении точек в кубе).

АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННОЙ ДВОЙСТВЕННОЙ ОЦЕНКИ

Обоснованная выше оценка $\psi^* = \frac{mn}{2(m-1)}$ (утверждение 2) при $m \to +\infty$ стремится к $\frac{n}{2}$, и соответственно верхняя оценка для радиуса $r \le \frac{\sqrt{mn}}{2(\sqrt{2(m-1)} + \sqrt{mn})}$ стремится к $\frac{\sqrt{n}}{2(\sqrt{2} + \sqrt{n})}$ (из следствия 2). Этот результат уступает элементарной оценке, которая следует из ограниченности суммы объемов шаров объемом контейнера

$$\sum_{i=1}^{m} V(S(y_i, r)) \le V([0,1]^n) ,$$

что эквивалентно $\sum_{i=1}^{m} C_n r^n \le 1$ ($C_n = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)}$, $\Gamma(x)$ — гамма-функция), откуда

$$r \le \left(\frac{1}{mC_n} \right)^{1/n} . \tag{20}$$

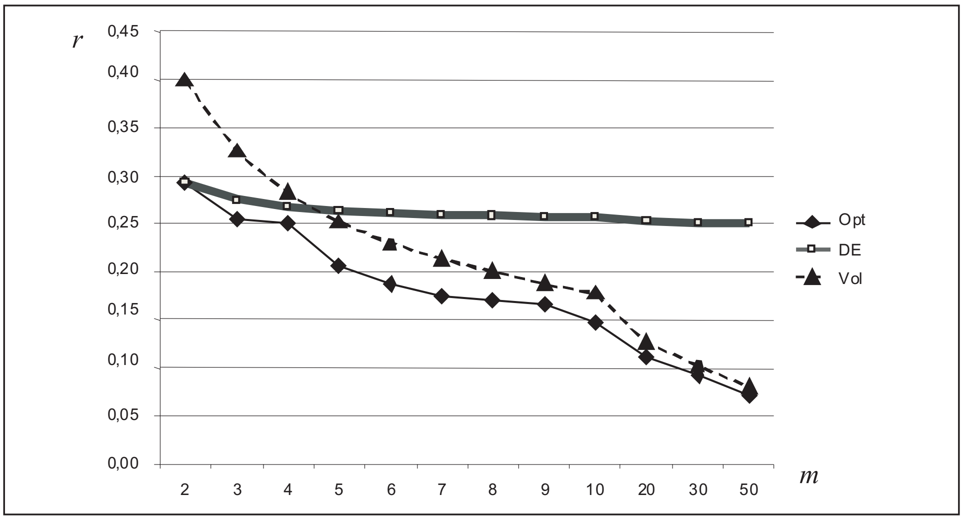

Рис. 1. Графики зависимости верхних оценок радиуса r шаров от их количества m в задаче об упаковке в единичный куб в двухмерном пространстве

Например, для двухмерного пространства из выражения (20) получаем оценку $r \le (m\pi)^{-1/2}$, которая при $m \to +\infty$ стремится к нулю, и уже при $m \ge 5$ лучше оценки (19). Сравнить качество этих оценок можно с помощью рис. 1, где показаны графики зависимости верхних оценок радиуса r шаров от их количества m в задаче об упаковке в единичный куб в двухмерном пространстве. Здесь кривая Opt соответствует известным оптимальным значениям (http://www.packomania.com/); DE — двойственной оценке (19) для задачи (10)–(12); Vol — оценке (20), тождественной условию, что сумма объемов шаров меньше объема контейнера.

Из описанного выше следует необходимость улучшения оценки для задачи (4)–(6). Этого можно достичь, например, путем эвристического «уточнения» задачи (фактически, другая задача). Так, в [10] для случая двухмерного пространства предложено сузить область определения задачи, исходя из симметрии, заменив ограничения (6) на

$$0.5 \le x_{i1} \le 1,\ i = \overline{1, m_1},\ m_1 = \lceil m/2 \rceil;\ 0.5 \le x_{i2} \le 1,\ i = \overline{1, m_2},\ m_2 = \lceil m_1/2 \rceil. \quad (21)$$

Подобные изменения постановки задачи, хотя и уточняют двойственную оценку (в [10] предполагается, что для $m \ge 5$ SDP-оценка задачи (4), (5), (21) равна $\frac{1}{4}\left(1 + \frac{1}{\lfloor (m-1)/4 \rfloor}\right)$), качественно ничего не меняют.

Другой путь улучшения оценки для исходной задачи — расширение задачи (4)–(6) различными семействами функционально избыточных ограничений, что может привести к улучшению двойственной оценки полученной квадратичной постановки.

При численных экспериментах для двух- и трехмерного пространства при добавлении квадратичных ограничений, соответствующих как RLT-неравенствам, так и неравенствам «треугольников», лагранжева двойственная оценка не менялась, что согласуется с вычислительными результатами для SDP-релаксации [10, 19]. Отметим, что с точки зрения рассмотренных Н.З. Шором в [4, 5] способов построения функционально избыточных ограничений первые являются результатом попарных произведений линейных ограничений (6) (например, из $(1 - x_i)(x_j - 0) \ge 0$ следует $x_i x_j \le x_j$, из $(1 - x_i)(1 - x_j) \ge 0$ следует $x_i x_j \ge x_i + x_j - 1$), а вторые — результатом сумм тройных произведений указанных линейных ограничений (6) (например, из суммы $(x_i - 0)(x_j - 0)(x_k - 0) \ge 0$ и $(1 - x_i)(1 - x_j)(1 - x_k) \ge 0$ следует $x_i + x_j + x_k \le x_i x_j +$

$+x_i x_k + x_j x_k + 1$, из суммы $(1-x_i)(x_j - 0)(x_k - 0) \geq 0$ и $(x_i - 0)(1-x_j)(1-x_k) \geq 0$ следует $x_i x_j + x_i x_k \leq x_i + x_j x_k$). Последний способ построения не ограничивается неравенствами «треугольников», т.е. понятно, что квадратичные ограничения, соответствующие RLT-неравенствам, также получаются из тройных произведений, так как из них следуют двойные произведения (например, из суммы $(x_i - 0)(1-x_j)(1-x_k) \geq 0$ и $(1-x_i)(1-x_j)(1-x_k) \geq 0$ следует $(1-x_j)(1-x_k) \geq 0$, а значит, и $x_j x_k \geq x_j + x_k - 1$).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе для нахождения верхней оценки радиуса шаров в задаче упаковки одинаковых шаров в куб применен двойственный подход [4, 5] к соответствующей квадратичной постановке задачи. Получено аналитическое выражение (в виде функции от количества шаров m и размерности пространства n (см. утверждение 2)) для двойственной оценки оптимального значения целевой функции многоэкстремальной квадратичной задачи (10)–(12), которое подтверждает сформулированное в [10] предположение для частного случая этой оценки при $n = 2$. Расширение задачи (10)–(12) за счет дополнительных (функционально избыточных) квадратичных ограничений, соответствующих как RLT-неравенствам, так и неравенствам «треугольников», не изменило оценки. Однако многовариантность выбора функционально избыточных ограничений позволяет оптимистично оценивать возможность улучшения двойственной оценки (возможно, даже получения точной). Например, для квадратичной задачи общего вида (8) в качестве дополнительных ограничений можно выбрать ограничения вида $f_i(x) * P(x) = 0$ для любого $i \in I^{EQ}$ и произвольного полинома $P(x)$ или вида $f_i(x) * P(x) \leq 0$ для любого $i \in I^{LE}$ и произвольного полинома $P(x)$, который принимает неотрицательные значения на допустимой области задачи (8). При этом для приведения полиномиальных ограничений к квадратичному виду понадобятся новые переменные $R(\alpha^{(i)}) = R(\alpha^{(j)}) R(\alpha^{(k)})$, $\alpha^{(i)} = \alpha^{(j)} + \alpha^{(k)}$ (неотрицательный целочисленный вектор $\alpha^{(r)} = (\alpha_1^{(r)}, \alpha_2^{(r)}, \ldots, \alpha_n^{(r)})^{\mathrm{T}} \leq \overline{\alpha}$ определяет переменную $R(\alpha^{(r)})$, которой в исходном пространстве $\Re^n$ соответствует моном $R(\alpha^{(r)}) = x_1^{\alpha_1^{(r)}} x_2^{\alpha_2^{(r)}} \ldots x_n^{\alpha_n^{(r)}}$) и связывающие их ограничения $R(\alpha^{(i)}) R(\alpha^{(j)}) - R(\alpha^{(k)}) R(\alpha^{(l)}) = 0$ при $\alpha^{(i)} + \alpha^{(j)} = \alpha^{(k)} + \alpha^{(l)}$ (для учета неоднозначности представления монома $x_1^{\alpha_1^{(r)}} x_2^{\alpha_2^{(r)}} \ldots x_n^{\alpha_n^{(r)}}$, $\alpha^{(r)} = \alpha^{(i)} + \alpha^{(j)} = \alpha^{(k)} + \alpha^{(l)}$ в новом пространстве переменных). В качестве примера возможных дополнительных ограничений приведем ограничения $f_i(x) * f_j(x) = 0$ $(i \in I^{EQ})$, $f_i(x) * f_j(x) \geq 0$ ($i, j \in I^{LE}$), $f_i(x) * f_0(x) = 0$ $(i \in I^{EQ})$, $f_i(x) * f_0(x) \leq 0$ ($i \in I^{LE}$ и $f^* \geq 0$), $f_i^2(x) * f_0(x) = 0$ $(i \in I^{EQ})$, $f_i(x) * f_0^2(x) \leq 0$ $(i \in I^{LE})$, $f_i(x) * f_0'(x) = 0$ $(i \in I^{EQ})$ и многие другие. Отметим, что введение новых «мономных» переменных и связывающих их равенств само по себе является эффективным средством улучшения оценки.

В заключение подчеркнем, что использование функционально избыточных ограничений для уточнения двойственных квадратичных оценок является достаточно интересным и перспективным (впрочем, как и для SDP-релаксаций, что подтверждается множеством публикаций). Однако при этом повышается значимость решения следующих вопросов: определение правила генерации функционально избыточных ограничений (с точки зрения оптимальности их выбора), точность получаемой двойственной оценки и т.п.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гильберт Д., Кон-Фоссен С. Наглядная геометрия. — 3-е изд. — М.: Наука, 1981. — 302 с.
2. Слоэн Н.Дж.А. Упаковка шаров // В мире науки. — 1984. — № 3. — С. 72–82.
3. Conway J.H., Sloane N.J.A. Sphere packings, lattices and groups (sec. ed.). — New York: Springer-Verlag, 1993. — 679 p.
4. Шор Н.З., Стеценко С.И. Квадратичные экстремальные задачи и недифференцируемая оптимизация. — Киев: Наук. думка, 1989. — 208 с.
5. Shor N.Z. Nondifferentiable optimization and polynomial problems. — Dordrecht: Kluwer, 1998. — 394 p.
6. Maranas C.D., Floudas C.A., Pardalos P.M. New results in the packing of equal circles in a square // Discrete Math. — 1995. — **142.** — P. 287–293.
7. Locatelli M., Raber U. Packing equal circles in a square: a deterministic global optimization approach // Discrete Appl. Math. — 2002. — **122.** — P. 139–166.
8. Szaro P.G., Markot M.C., Csendes T. Global optimization in geometry — circle packing into the square // Essays and surveys in global optimization / C. Audel, P. Hancen, G. Savard (Eds). — Dordrecht: Kluver, 2005. — P. 233–266.
9. Mhand Hifi and Rym M'Hallah. A literature review on circle and sphere packing problems: Models and methodologies // Adv. Oper. Res. — 2009. — 22 p. (doi:10.1155/2009/150624).
10. Anstreicher K. On convex relaxations for quadratically constrained quadratic programming // Math. Program. — 2012. — N 136. — P. 233–251.
11. Vanderberghe L., Boyd S. Semidefinite programming // SIAM Rev. — 1996. — N 38. — P. 49–95.
12. Sherali H.D., Adams W.P. A reformulation–linearization tecchnique for solving discrete and continuous nonconvex problems. — Dordrecht: Kluwer, 1998. — 516 p.
13. Yajima Y., Fujie T. A polyhedral approach for nonconvex quadratic programming problems with box constraints // J. Global Optim. — 1998. — N 13. — P. 151–170.
14. Березовский О.А., Стецюк П.И. Об одном способе нахождения двойственных квадратичных оценок Шора // Кибернетика и системный анализ. — 2008. — № 2. — С. 89–99.
15. Березовский О.А. О точности двойственных оценок для квадратичных экстремальных задач // Там же. — 2012. — № 1. — С. 33–39.
16. Fujit T., Kojima M. Semidefinite programming relaxation for nonconvex quadratic problems // J. Global Optim. — 1997. — N 10. — P. 367–380.
17. Шор Н.З., Березовский О.А. Новые алгоритмы решения задачи о максимальном взвешенном разрезе графа // Кибернетика и системный анализ. — 1995. — № 2. — С. 100–106.
18. Пшеничный Б.Н. Метод линеаризации. — М.: Наука, 1983. — 136 с.
19. Anstreicher K. Semidefinite programming upsilon ersus the reformulation–linearization technique for nonconvex problems // J. Global Optim. — 2009. — N 43. — P. 471–484.

Поступила 10.09.2013