

等球 Packing 问题的序列对称换位算法*

余亮, 黄文奇

(华中科技大学 计算机科学与技术学院, 武汉 430074)

摘要: 为处理等球 Packing 问题, 在基本拟物算法的基础上设计了序列对称换位策略, 形成了一个启发式的序列对称换位算法。在球形容器内装填 1~50 个等球时, 此算法改进了其中 45 项当前记录。特别地, 此算法成功将 68 个半径为 1 的等球装进半径小于 5 的球形容器。此结果证否了一个猜想, 该猜想认为半径为 5 的球形容器至多只能装下 67 个半径为 1 的等球。其结果的质量说明了序列对称换位算法的有效性。

关键词: 等球 Packing 问题; 启发式算法; 拟物算法; 序列对称换位算法

中图分类号: TP301.6 **文献标志码:** A **文章编号:** 1001-3695(2012)05-1695-03

doi:10.3969/j.issn.1001-3695.2012.05.024

Serial symmetrical relocation algorithm for equal sphere Packing problem

YU Liang, HUANG Wen-qi

(School of Computer Science & Technology, Huazhong University of Science & Technology, Wuhan 430074, China)

Abstract: To deal with the equal sphere Packing problem, this paper designed a serial symmetrical relocation strategy based on the basic quasi physical algorithm to form a serial symmetrical relocation algorithm. When packing up to 50 equal spheres in a spherical container, this algorithm improved 45 current records. Especially, it successfully packed 68 equal spheres of radius 1 into a spherical container whose radius is less than 5. This result proves wrong a conjecture which states the spherical container of radius 5 can at most contain 67 spheres of radius 1. The quality of the results justifies the serial symmetrical relocation algorithm.

Key words: equal sphere Packing problem; heuristic algorithm; quasi physical algorithm; serial symmetrical relocation algorithm

如何在特定形状的容器中无嵌入地紧密装填多个半径一样的小球, 这一问题既是开普勒猜想^[1]在有限空间内的延伸, 又是等圆 Packing 问题在三维空间的拓展, 而且, 任何紧凑的等球装填方案都有助于安排伽马刀的治疗计划^[2]。伽马刀是对颅腔肿瘤进行放射性治疗的先进医疗设备, 由多个放射源组成。特定数量的放射源会将其发出的放射线对准空间中的一点, 以这一点为球心形成一个称为 shot 的高放射剂量区域, 此区域可近似看做完美的球体, 伽马刀的治疗计划就是将多个 shot 装填进容器(目标肿瘤)。一个好的治疗计划有三个特点: a) 任两个 shot 间不能重叠, 以免重叠区域形成过高放射剂量; b) 任何 shot 不能超出容器范围, 以免影响容器外健康的组织; c) 在满足前两条的基础上, 多个 shot 在容器中装填得越紧密越好。此三点与等球 Packing 问题的约束条件和目标相吻合。

等球 Packing 问题是 NP 难度问题, 目前不存在现实可行的确定性算法来求解。文献[3]详尽回顾了近年来对圆形和球形 Packing 问题的研究方法和进展。本文在拟物算法基础之上, 设计了一个序列对称换位策略, 得到一个高效的启发式算法来求解此问题。本文选取球形容器中的等球 Packing 问题进行了编程实算, 更新了大量现有记录。

1 问题的形式化描述和基本拟物算法

在球形容器内的等球 Packing 问题可以描述如下:

记球形容器(记为 0 号物体)半径为 r_0 , 将坐标系原点固

定在容器中心; 记等球半径为 r , 将 n 个等球的球心坐标记为一个布局 $X = \{X_1, \dots, X_n\} = \{x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n\}$ 。

用 $|X_i|$ 表示第 i 球球心到容器中心的距离 $\sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2}$, 用 $|X_i - X_j|$ 表示第 i 球球心与第 j 球球心之间的距离 $\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$ 。球形容器内等球 Packing 问题的目标是在半径 r_0 尽可能小的容器中寻找满足如下约束条件的可行布局:

$$|X_i| \leq r_0 - r \quad i = 1, \dots, n \quad (1)$$

$$|X_i - X_j| \geq 2r \quad i, j = 1, \dots, n, j \neq i \quad (2)$$

把等球想象为轻质弹性物体, 容器想象为刚性物体, 即可得到处理等球装填问题的拟物模型。此模型最早在文献[4]中提出, 在文献[5]中加以应用, 此处则将其应用于三维问题。

在此模型中, 第 i 球被刚性容器壁挤压造成的形变幅度为 $|X_i| + r - r_0$, 记为 d_{i0} (第 i 球与容器无挤压时 d_{i0} 则为 0); 第 i 球因 d_{i0} 所受到对应的弹性力记为 $\mathbf{d}_{i0}$, 其大小为 d_{i0} , 其方向从第 i 球球心指向容器中心。

第 i 球被第 j 球挤压造成的形变幅度为 $1/2 \times (2r - |X_i - X_j|)$, 记为 d_{ij} (第 i 球与第 j 球无挤压时 d_{ij} 则为 0); 第 i 球因 d_{ij} 所受到对应的弹性力记为 $\mathbf{d}_{ij}$, 其大小为 d_{ij} , 其方向从第 j 球球心指向第 i 球球心。

第 i 个等球因形变而储存的弹性势能为

$$u_i = \sum_j d_{ij}^2 \quad j = 0, \dots, n, j \neq i \quad (3)$$

第 i 个等球受到的弹性合力为

收稿日期: 2011-10-11; 修回日期: 2011-11-28 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61173180)

作者简介: 余亮(1980-), 男, 湖北武汉人, 博士研究生, 主要研究方向为 NP 难度问题的高性能算法(lion1786@163.com); 黄文奇(1938-), 男, 湖北武汉人, 教授, 博导, 主要研究方向为 NP 难度问题的高性能算法。

$$d_i = \sum_{j=0, j \neq i}^n d_{ij} \quad (4)$$

基本拟物算法让每个等球按照其所受弹性合力做阻尼运动,从而局部最小化每个等球的弹性势能,这等于局部最小化每个等球的全部形变。

假如能把全部等球的弹性势能之和局部最小化到零,则意味着全体等球在容器中都没有形变,全体等球当前的球心位置构成一个可行布局。

上述基本拟物算法(basic quasi physical algorithm, BQP)的伪码描述如下:

BQP 算法

/* 给定初始布局 X, 容器半径 r0 和等球半径 r */

while (true)

{

if ($\sum_{i=1}^n u_i = 0$)

break; /* 达到一个可行布局 */

if ($\text{formerU} - \sum_{i=1}^n u_i < \text{formerU} \times 10^{-8}$)

break; /* 全体等球的总势能几乎停止下降, 达到一个局

部最优布局 */

/* 根据每个等球的受力移动等球 */

for i = 1 to n

$X_i \leftarrow X_i - T \times \vec{d}_i$; /* 阻尼系数 T 取 0.8 */

$\text{formerU} \leftarrow \sum_{i=1}^n u_i$; /* 暂存全体等球的总势能 */

} /* 停机时布局 X 是 BQP 局部优化初始布局得到的结果 */

上述 BQP 算法是一个确定型算法,一旦初始布局、容器半径和等球半径给定, BQP 算法的输出布局就确定了。因此 BQP 算法既可以用于判定任一初始布局在给定容器内是否可以发展为可行布局,又可与对分搜索结合,找出任一初始布局的最小可行容器尺寸,使得该初始布局只能在大于等于此尺寸的容器中发展为可行布局。

2 序列对称换位策略和复合算法

BQP 算法需要有利的初始布局才能产生紧凑的可行布局。目前不存在直接生成有利初始布局^[3]的确定型算法,通过随机方法生成有利布局的几率又微乎其微。

为解决此困难,本文设计了一个启发式策略,即序列对称换位策略。此策略从一个局部最优布局出发,生成 $O(n^2)$ 个互不相同的新布局,然后用 BQP 算法局部优化这些新布局。

序列对称换位策略的基本动作是将指定等球(不妨记为第 i 球)的球心坐标由 (x_i, y_i, z_i) 移动到 $(-x_i, -y_i, -z_i)$ 。如将一个局部最优布局中的一部分等球执行对称换位动作而保持其余等球位置不变,会极大地打破原布局,得到一个新布局。

在此引入下列符号以描述序列对称换位策略。

X_{local} 表示一个局部最优布局,是 n 个等球球心坐标的集合。 $\min U(i, A)$ 表示集合 A 中势能最小的 i 个等球; $\max U(i, A)$ 表示集合 A 中势能最大的 i 个等球, A 为 X_{local} 的一个子集。 $\text{reverse}(A, X_{\text{local}})$ 表示在 X_{local} 中将子集 A 中的等球做对称换位动作同时保持其余等球不动而得到的新布局。

序列对称换位策略按照下式产生 $n(n-1)/2$ 个新布局:

$$\text{reverse}(\max U(i, \min U(j, X_{\text{local}})), X_{\text{local}}), 1 \leq j \leq n, 1 \leq i < j \quad (5)$$

由式(5),每一新布局都是把起点布局 X_{local} 的某一真子集对称换位而得到,故每一新布局都与起点布局 X_{local} 不同;每一新布局都是把 X_{local} 的不同真子集对称换位而得到,故新布局彼此也不相同。

序列对称换位策略从起点布局 X_{local} 每次按式(5)产生 $n(n-$

1)/2 个新布局并用 BQP 算法优化它们,本文将这一过程称为一轮扫描。将一轮扫描中得到的势能最低的布局称为该轮扫描的结果布局。大量实验表明,从势能较低的起点布局出发的扫描比从势能较高的起点布局出发的扫描更容易找到较好的结果布局。因此笔者将多轮扫描衔接起来,第一轮扫描以随机生成的局部最优布局作为起点,往后每一轮扫描以前一轮扫描的结果布局作为其起点布局。按此做法,可以期待每一轮扫描会持续改进上一轮扫描的结果布局。如找到一个可行布局,则当前计算机,取此可行布局为计算结果;否则,若连续三轮扫描的结果布局的势能彼此接近,则认为当前计算已不能找到更好的布局,此时停机,取此次计算中找到的势能最低的布局作为计算结果。

笔者希望用多轮扫描连续降低布局的势能水平,以期找到尽可能紧凑的布局。要实现这一想法,需要为 n 个等球确定一个大致合理的容器半径。若容器半径设得过大,则随机初始布局可直接被 BQP 算法发展为可行布局而停机,或者在第一轮扫描中就会命中一个可行布局而停机,从而无法进一步找到更紧凑的可行布局;若容器半径过小,实验表明,每一轮扫描的结果布局都会具有相似的势能水平,无法实现多轮扫描持续降低势能水平的目标。

本文以试探法来确定大致合理的容器半径。对一个容器半径值,如果随机生成的布局可在此容器中发展为可行布局,或者如果一轮扫描即可命中可行布局,则此容器半径偏大。适当减小此容器半径后再次试探,直至容器半径缩小到第一轮扫描无法在此容器中命中可行布局为止。取此半径作为装填 n 个等球的大致合理的容器半径。

将上述思想形式化为一个复合算法。此算法以序列对称换位策略(serial symmetrical relocation strategy, SSRS)为核心,故将其记为 SSRS 算法,其描述如下。

SSRS 算法

a) 用试探法对 n 个等球给定一个大致合理的容器半径 r_0 , 在此容器中随机生成 n 个等球的初始布局 X_{random} 。

b) 将 X_{random} 作为 BQP 算法的初始布局,将其发展为局部最优布局,记为 X_{local} 。

c) 从 X_{local} 按式(5)生成 $n(n-1)/2$ 个新布局,用 BQP 算法发展每一个新布局,如果某一新布局被发展为可行布局,将此可行布局记为 X_{find} ,转 d);如果 $n(n-1)/2$ 个新布局全部被发展为相应的局部最优布局,则选取这些局部最优布局中势能最小者为 c) 找的结果布局,将其设为新 X_{local} ,重复 c)。

显见 c) 即为一轮扫描,若出现连续三轮扫描所得结果布局的势能彼此近似相等,则选取目前所找到的所有局部最优布局中势能最小者记为 X_{find} ,转 d)。

d) 在闭区间 $[r_0/2, 2 \times r_0]$ 内,用对分搜索(binary search)和 BQP 算法为 X_{find} 找出其最小可行容器尺寸,以及对应的紧凑可行布局,此紧凑可行布局即为 SSRS 算法的输出结果。至此算法结束。

等球数目 n 较大时, n 个等球可能排列成的布局数量是无限大。然而实验表明, SSRS 算法只搜索 $O(n^2)$ 个布局就能从中找到一个布局,其可以被 BQP 算法优化为一个近似最优的可行布局。

3 计算结果和评论

在 CPU 为 Intel E2220 2.4 GHz,内存为 1 GB DDR2 800 MHz 的个人计算机上,用 C 语言对算法 SSRS 编程,针对大量算例进行了实算。其中最大算例是在球形容器中装填 200 个等球。以下将 SSRS 算法在球形容器中装填 1~50 个等球的最

好结果与文献[6]的最好结果对比,如表1所示。

表1 SSRS 算法的结果与文献[6]的最好结果的对比

n	SSRS	ELPGD ^[6]	n	SSRS	ELPGD ^[6]
1	1.000000000	1.000000000	26	3.7473219519	3.7473586567
2	2.000000000	1.9998940883	27	3.8133321089	3.8145940303
3	2.1546166087	2.1546165626	28	3.8415563620	3.8416035568
4	2.2246708852	2.2246704553	29	3.8770052907	3.8770538650
5	2.4141299259	2.4141434461	30	3.9164077790	3.9164538155
6	2.4141299259	2.4141528586	31	3.9506706336	3.9507563096
7	2.5911699220	2.5911971994	32	3.9873565193	3.9702324601
8	2.6452450895	2.6452760696	33	4.0198177295	4.0198752917
9	2.7319669105	2.7320010011	34	4.0476361924	4.0476803403
10	2.8323806448	2.8324155271	35	4.0843218813	4.0843770262
11	2.9020291737	2.9020669595	36	4.1129054128	4.1129581736
12	2.9020291737	2.9020701316	37	4.1546973951	4.1547394748
13	2.9999161200	2.9999584685	38	4.1575854699	4.1576309390
14	3.0910615804	3.0911029100	39	4.2238659398	4.2240217725
15	3.1415587543	3.1416009201	40	4.2552490919	4.2560544411
16	3.2155991698	3.2156405899	41	4.2962612237	4.2965039826
17	3.2711616364	3.2712061726	42	4.3080584754	4.3081096226
18	3.3189048846	3.3189502735	43	4.3527961593	4.3544440787
19	3.3859321326	3.3859769392	44	4.3827471880	4.3836854803
20	3.4734550312	3.4734992521	45	4.4069195219	4.4069816085
21	3.4862675091	3.4863133845	46	4.4410408517	4.4446947586
22	3.5797492528	3.5797933967	47	4.4740480005	4.4743812346
23	3.6274325851	3.6274796316	48	4.4961989903	4.4964415130
24	3.6853114779	3.6853547056	49	4.5191146177	4.5193084739
25	3.6873428553	3.6873952701	50	4.5503704607	4.5513369118

在球形容器内装填1~50个等球的算例中,除了第1、2、3、4和32号算例外,其他算例的结果均优于文献[6]的结果。特别值得一提的是,SSRS算法对68个等球的算例找到了极为紧凑的可行布局,证否了载于网页 oeis.org/A084828 的猜想。此猜想认为在容器半径为5的球形容器内最多能装填67个半径为1的等球。此前其他研究者的大量数值实验均未突破这一限制,而SSRS算法将68个半径为1的等球无嵌入地装入了半径为4.999 944 500 6的球形容器。这一结果已被更新于 oeis.org/A084828 上。

图1展示了SSRS算法找到的六个可行布局。

由于SSRS算法从随机布局开始计算,其每次运算的计算时间并不十分规律,然而实验表明其计算时间是可接受的。例

如,对表1中最大算例50球,SSRS算法的计算时间一般不超过1 h。对笔者尝试过的最大算例200球,其计算时间一般在8~10 h之间。

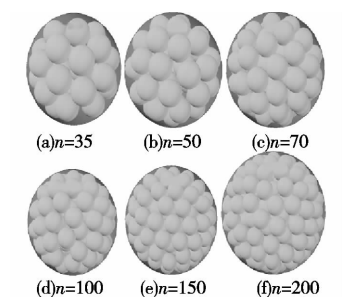


图1 SSRS算法找到的六个可行布局

4 结束语

SSRS算法的主要特点是仅检查 $O(n^2)$ 个布局即可命中紧凑可行布局。SSRS算法调整后可用于在任何中心对称的2D容器中装填等圆或不等圆,在任何中心对称的3D容器中装填等球或不等球。由于在非中心对称容器中,SSRS算法可能会使物体移出容器之外,故笔者将继续改进此算法,希望能将其应用在任意凸多面体或凸多边形容器中。

参考文献:

- [1] BEZDEK K. Sphere packings revisited[J]. *European Journal of Combinatorics*, 2006, 27(6): 864-883.
- [2] WANG Jie. Packing of unequal spheres and automated radiosurgical treatment planning[J]. *Journal of Combinatorial Optimization*, 1999, 3(4): 453-463.
- [3] HIFI M, M'HALLAH R. A literature review on circle and sphere packing problems: models and methodologies[M]// *Advances in Operations Research*. [S.l.]: Hindawi Publishing Corporation, 2009.
- [4] 黄文奇, 詹叔浩. 求解 Packing 问题的拟物方法[J]. *应用数学学报*, 1979, 2(2): 176-180.
- [5] WANG Huai-qing, HUANG Wen-qi, ZHANG Quan, et al. An improved algorithm for the packing of unequal circles within a larger containing circle[J]. *European Journal of Operational Research*, 2002, 141(2): 440-453.
- [6] 刘景发, 周国城, 潘锦基. 基于禁忌搜索的启发式算法求解球体 Packing 问题[J]. *计算机应用研究*, 2011, 28(3): 892-894.